

**Weiterentwicklung  
des Systemrechen-  
programms ATHLET  
für Anwendungen in  
der Reaktorsicherheit**



## Weiterentwicklung des Systemrechen- programms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit

Philipp Schöffel  
Sabin Ceuca  
Helmuth Deitenbeck  
Martina Kloos  
Antoine Langenfeld  
Georg Lerchl  
Joerg Peschke  
Josef Scheuer  
Tomasz Skorek  
Daniel von der Cron  
Fabian Weyermann

September 2015

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben RS1507 wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH ausgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

**Deskriptoren**

ATHLET, System Code, Thermohydraulik, Unsicherheitsanalysen

## Kurzfassung

Das thermohydraulische Systemrechenprogramm ATHLET wird von der GRS zur Simulation kerntechnischer Anlagen bei Betriebsbedingungen, Transienten, Auslegungstörfällen sowie auslegungsüberschreitenden Ereignissen ohne Kernschäden entwickelt. Mit dem vom BMWi finanzierten Vorhaben RS1507 zur *Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit* wurden diese langjährigen Arbeiten konsistent fortgesetzt. Das Projekt ist in vier technisch-wissenschaftliche Arbeitspakete untergliedert:

- AP1: Weiterentwicklung der ATHLET Modellierung insbesondere für Leichtwasserreaktoren
- AP2: Entwicklung eines ATHLET internen 3D Modells
- AP3: OECD Benchmark PREMIUM: Überprüfung der Methodologie zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten anhand Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchungen für ausgewählte Quench-Versuche
- AP4: Querschnittaufgaben

Die übergeordnete Zielsetzung des Projekts bestand in der Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET gemäß der nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik abgeleiteten Anforderungen an Sicherheitsanalysen für kerntechnische Einrichtungen.

Für die Simulation sicherheitsrelevanter Ereignisse insbesondere in Leichtwasserreaktoren wurden in ATHLET zahlreiche Modelle neu entwickelt oder verbessert. Für die Untersuchung von Kühlmittelverluststörfällen wurde das ATHLET Modell zur Berechnung der kritischen Leckströmraten grundlegend überarbeitet und der Gültigkeits- und Anwendungsbereich erweitert. Die detaillierte Berücksichtigung der spezifischen Geometrie eines Lecks und der damit verbundenen Reibungsdruckverluste ermöglicht es, realistische Ausströmraten auch für Lecks zu berechnen, die z. B. die Form eines Risses aufweisen. Zusätzlich wurden vor allem für die Beschreibung der nach Kühlmittelverluststörfällen im Reaktorkühlkreislauf auftretenden zweiphasigen Strömungszustände weitere Modelle verbessert:

- Das Gemischspiegelmodell, das das Fluidverhalten im Bereich einer horizontalen Phasengrenze detailliert mechanistisch beschreibt, wurde für schnelle Gemischspiegeländerungen optimiert.
- Das Multikomponentenmodell wurde um eine strömungsbildabhängige Modellierung der Lösung und des Freisetzens nicht-kondensierender Gase in Wasser erweitert.
- Die Transportgleichung für die Zwischenphasenflächendichte wurde zur Untersuchung kondensationsinduzierter Wasserschläge, die z. B. infolge einer Notkühlmitteleinspeisung auftreten können, mit dem Kondensationsmodell verknüpft.

Insbesondere für die detaillierte Simulation des Reaktorkerns unter Störfallbedingungen wurde die Modellierung der Wärmeleitung in Strukturen, der Wärmestrahlung sowie des Wärmeübergangs an das Fluid im Brennelementbündel verbessert. Zusätzlich wurde in ATHLET ein Modell implementiert, das den Transport und die im Reaktorkern erfolgende Ablagerung von Zinkborat beschreibt. Zinkborat bildet sich nach einem Kühlmittelverluststörfall durch chemische Reaktion des borhaltigen Kühlmittels mit verzinkten Bauteilen im Sicherheitsbehälter (z. B. Trittgitterrosten) und kann bei Ablagerung im Kern die Kühlung der Brennelemente beeinträchtigen.

Weitere Neuentwicklungen betreffen die Simulation innovativer Sicherheitssysteme und fortschrittlicher Reaktorkonzepte. Neue Wärmeübergangskorrelationen wurden zur Beschreibung des zweiphasigen Wärmeübergangs in und an horizontalen Wärmetauscherrohrbündeln implementiert, die z. B. für den Notkondensator des SWR-Designs KERENA von AREVA Verwendung finden. Darüber hinaus wurde das Turbinenmodell verbessert, um ein vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart vorgeschlagenes innovatives, autarkes Nachwärmeabfuhrsystem abbilden zu können. Die Implementierung der Stoffwerte für Argon kommt der Simulation von Versuchsanlagen für Generation IV Reaktoren zugute, die häufig Argon als Puffergas nutzen.

Ein weiterer Projektschwerpunkt bestand in der Entwicklung eines ATHLET internen 3D-Modells zur Beschreibung mehrdimensionaler, ein- und zweiphasiger Strömungsvorgänge. Anwendungsgebiete des Modells bestehen vor allem in der detaillierteren Beschreibung makroskopischer Strömungsvorgänge in großen Behältern wie dem Reaktordruckbehälter, die sich im Zuge von Transienten und Störfällen einstellen. Für die

Implementierung der zweiphasigen und dreidimensionalen Erhaltungsgleichungen wurde das in ATHLET vorhandene eindimensionale Zweifluidmodell erweitert. Dieser Ansatz bietet als Vorteile neben der unmittelbaren Wiederverwendbarkeit der vorhandenen ATHLET-Modellierung in Verbindung mit den mehrdimensionalen Gleichungen eine hohe numerische Stabilität und Effizienz. Die simultane Zeitintegration eindimensionaler und dreidimensionaler Modellgleichungen innerhalb eines gemeinsamen Gleichungssystems vermeidet numerische Schwierigkeiten, die häufig bei der Kopplung eigenständiger Programme auftreten.

Für die Quantifizierung der Unsicherheit der mit deterministischen Programmen wie ATHLET erzielten Rechenergebnisse hat die GRS in der Vergangenheit ein statistisches Verfahren entwickelt, das international weit verbreitet eingesetzt wird, u. a. in einigen Ländern im Rahmen des Genehmigungs- und Aufsichtsverfahrens. Die Methode ist auch in der GRS Software SUSA umgesetzt. Für die Anwendung der Methode ist die Quantifizierung der Unsicherheitsintervalle und -verteilungen nicht exakt bekannter Analyseeingangsparameter erforderlich. Frühere Untersuchungen unter Beteiligung der GRS, die im Rahmen der OECD/NEA/CSNI Projekte SM2A (**S**afety **M**argin **A**pplication and **A**ssessment) und BEMUSE (**B**est-**E**stimate **M**ethods, **U**ncertainty and **S**ensitivity **E**valuation) durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass i. d. R. die Unsicherheiten der Eingangsparameter der physikalischen Modellierung den größten Einfluss auf die Aussageicherheit der Simulationsergebnisse haben. Die für deren Quantifizierung international eingesetzten Methoden wurden nun innerhalb des vom OECD/NEA/CSNI initiierten PREMIUM (**P**ost **B**EMUSE **R**eflood **M**odels **I**nput **U**ncertainty **M**ethods) Benchmarks überprüft. Hierzu wurden im Rahmen von RS1507 teils blinde Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zu ATHLET-Nachrechnungen von Quench-Experimenten durchgeführt, die in den Versuchsanlagen FEBA und PERICLES erfolgt waren.

Um das Einsatzspektrum von ATHLET zu erweitern, wurde das Programm innerhalb des vorliegenden Vorhabens mit verschiedenen externen Modellen verknüpft. Hierzu zählen neben der Kopplung mit der GRS Software MCDET für umfassende Unsicherheitsanalysen auch die Verknüpfung mit dem Open Source Sparse-Matrix Paket PETSc (Argonne National Laboratory). PETSc ermöglicht die numerisch effiziente Gleichungslösung für umfangreiche und stark vermaschte Thermofluidnetzwerke, für die das ATHLET eigene Lösungsverfahren FTRIX nicht optimiert ist. Zusätzlich wurde in ATHLET ein Konzept für neue Schnittstellen auf Basis der Skriptsprache PYTHON umgesetzt, das insbesondere externen Programmanwendern die Anbindung eigener Modelle erleichtert. Weitere Projekthinhalte umfassten die Zusammenarbeit mit nationa-

len und internationalen ATHLET Anwendern sowie die Qualitätssicherung und Dokumentation der Programmentwicklung. Im Rahmen von RS1507 wurde die aktuelle Programmversion Mod. 3.0 Cycle A freigegeben und zahlreichen Nutzern zur Verfügung gestellt.

## Abstract

The thermal hydraulic system code ATHLET is being developed by GRS for the analysis of nuclear facilities under operational and transient conditions as well as for design basis accidents and off-design basis accidents without core damage. The research project RS1507, which is financed by the German federal ministry for economic affairs and energy, is related to the *further development of the system code ATHLET for reactor safety applications* and consistently pursues long-term developmental work based on results and achievements from earlier projects. The objectives are subdivided into four scientific work packages:

- WP1: Further development of ATHLET's modeling basis with emphasis placed on light water reactor applications
- WP2: Development of a code internal thermal hydraulic 3D model
- WP3: OECD Benchmark PREMIUM: Verification of the methodology for the quantification of model input uncertainties on basis of uncertainty and sensitivity analyses for selected quench experiments
- WP4: Cross-sectional tasks

The basic objective of the project was the continuation of development of the system analysis code ATHLET considering the state-of-the-art of science and technology and aiming to fulfil current and future demands on reactor safety analyses.

Particularly for the simulation of light water reactors, numerous models were newly developed or improved for the detailed simulation of postulated incidents with significant safety relevance. In order to accurately investigate loss-of-coolant accidents the method for the calculation of critical discharge mass flow rates was widely revised. The modifications made enable the calculation of realistic leak mass flow rates for an extended range of validity up to supercritical flow states optionally taking into account the leak shape and according form losses, which is of particular importance for non-circular, e.g. crack-like leaks. In addition, the modeling of two-phase flow processes typically established in the course of loss-of-coolant accidents was improved:

- The mixture level model, which provides a detailed mechanistic description of fluid behavior for a horizontal phase boundary, was optimized with respect to fast mixture level movements.

- The multicomponent flow model was extended to simulate the flow pattern-dependent release and absorption of non-condensable gases in water.
- In order to capture the formation of condensation induced water hammers in horizontal pipes the transport equation for the interfacial area was combined with the condensation model.

The accurate simulation of the reactor core behavior under accidental conditions is improved by extended modeling of heat conduction in structures, of heat radiation as well as of heat transfer to fluid for rod bundle geometries. Regarding the investigation of core cooling impairment caused by zinc borate, ATHLET was extended by a new method for the consideration of transport and deposition of zinc borate, taking into account its decreased solubility at elevated temperatures. In case of a loss-of-coolant accident zinc borate results from chemical reaction of borated coolant and zinc coated ferritic steel installations in the containment and is recirculated from the reactor sump to the primary circuit by emergency cooling pumps as part of the emergency-core-cooling-system.

Further developmental progress is related to the simulation of innovative safety systems particularly employed in advanced nuclear reactors. New two-phase heat transfer correlations were implemented e. g. applicable to horizontal heat exchanger pipe bundles, which are used for the emergency condenser of the boiling water reactor KERENA developed by AREVA. Moreover, the turbine model was improved to meet the demands of an autarkic residual decay heat removal system designed by the University of Stuttgart (IKE). The code validation for Generation IV reactors benefits from the implementation of the non-condensable gas Argon, which is often employed in corresponding test facilities.

Another essential objective of the present project was the development of a code internal 3D thermal hydraulic model aiming at the accurate representation of multidimensional, single- and two-phase flow processes. The model's scope of applicability comprises macroscopic flow processes in huge vessels such as the reactor pressure vessel, which typically occur in the course of anticipated transients and accidents. The multidimensional model equations are based on the implemented one-dimensional Two-Fluid model. Basic features of the 3D model are on the one hand ATHLET's comprehensive and validated modeling available for multidimensional simulations, e.g. multiple working fluid properties as well as enhanced single- and two-phase flow and heat

transfer correlations. On the other hand the preserved implicit numerical coupling of the multidimensional equations with the one-dimensional fluid dynamic equations still to be applied to coolant piping networks ensures high numerical efficiency and stability.

Regarding the uncertainty of deterministic computer code results GRS proposed a statistical method that is based on the propagation of input uncertainties through the code in question to obtain the uncertainty of the output variables. The method is widely applied by internationally acting organizations and implemented in the GRS software SUSAS. As demonstrated by former investigations in the frame of the OECD/NEA/CSNI projects SM2A (**S**afety **M**argin **A**pplication and **A**ssessment) und BEMUSE (**B**est-**E**stimate **M**ethods, **U**ncertainty and **S**ensitivity **E**valuation), the significance of an uncertainty analysis is essentially influenced by the selection of the uncertain model input parameters and the quantification of their uncertainty intervals. Therefore GRS participates in the OECD/NEA/CSNI benchmark PREMIUM (**P**ost BEMUSE **R**eflood **M**odels **I**nput **U**ncertainty **M**ethods) that aims at the investigation and assessment of the proposed methods for the quantification of model input parameter uncertainties. In the course of the benchmark both best estimate calculations as well as uncertainty and sensitivity analyses have been performed for several quench experiments that were carried out in the test facilities FEBA and PERICLES.

In order to increase the code's scope of applicability, ATHLET was coupled to several external models or methods, including the GRS software MCDET for integral uncertainty analyses as well as the open source sparse-matrix solver suite PETSc provided by Argonne National Laboratory. PETSc supports the numerically efficient solution of large differential equation systems e. g. resulting from very complex or multidimensional fluidic network configurations, a use case the ATHLET solution method FTRIX is primary not optimized for. In addition, a concept for multiple new interfaces based on the scripting language PYTHON was realized in ATHLET. The interfaces facilitate the usage of external or newly developed models, which is of particular interest to code users from research institutions outside GRS, who do not have access to the source code.

Further subjects of the present project were related to the co-operation with national and international program users and to the quality assurance and documentation of the proceeding code development. In this context the current program version ATHLET Mod. 3.0 Cycle A was released and internationally distributed to numerous institutions.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Vervollständigung der ATHLET Modellierung für die Simulation von Leichtwasserreaktoren.....</b>	<b>7</b>
2.1	Berechnung kritischer Leckströmraten.....	7
2.1.1	Umstellung des zugrunde liegenden Gleichungssystems .....	7
2.1.2	Berücksichtigung eines fluiddynamischen Nichtgleichgewichts.....	11
2.1.3	Neue Arbeitsmedien .....	12
2.1.4	Vergrößerter Gültigkeitsbereich .....	13
2.1.5	Überkritischer Druck .....	14
2.1.6	Erhöhte Benutzerfreundlichkeit.....	16
2.1.7	Berechnung der Ausströmraten aus Rissen.....	16
2.1.8	Zusammenfassung .....	19
2.2	Verbesserung des Gemischspiegelmodells für schnelle und dynamische Vorgänge .....	19
2.2.1	Verbesserung der Impulsgleichung.....	21
2.2.2	Verbesserung der Berechnung des sprungfreien KV-Drucks der Programmausgabe .....	23
2.2.3	Verbesserung der Druckberechnung beim Migrieren des MLs.....	25
2.2.4	Simulationsfälle .....	26
2.2.5	Zusammenfassung .....	33
2.3	Transport und Ablagerung von Zinkborat.....	33
2.4	Transportgleichung für die Zwischenphasenfläche – Massen- und Wärmeübergang bei kondensationsinduzierten Wasserschlägen .....	34
2.5	Freisetzung und Absorption von Stickstoff in Wasser .....	40
2.5.1	Erweiterung des Modells zur Berechnung der maximalen Löslichkeit .....	41
2.5.2	Kinetik der Freisetzung von gelöstem Gas.....	45
2.5.3	Plötzliche Freisetzung: Klassische Theorie der Keimbildung .....	45
2.5.4	Langsame Freisetzung und Absorption: 2-Film-Theorie.....	48
2.5.5	Zusammenfassung und mögliche Weiterentwicklung.....	54

2.6	Wärmeübergang an Außen- und Innenseite horizontaler Wärmetauscherrohrbündel von passiven Sicherheitssystemen .....	55
2.6.1	Gesättigtes und unterkühltes konvektives Blasensieden an der Rohraußenseite .....	57
2.6.1.1	Unterdrückungsfaktor .....	57
2.6.1.2	Thom-Korrelation .....	58
2.6.2	Kondensation an der Rohrinneinnenseite .....	59
2.6.3	Validierung.....	63
2.7	Wärmeübergang in Brennstabbündeln.....	64
2.8	2D Wärmeleitung in Strukturen .....	66
2.9	Weiterentwicklung des Wärmestrahlungsmodells .....	69
2.10	Simulation elektrischer Heizleiter .....	74
2.11	Erweiterung des Turbinenmodells.....	75
2.11.1	Ausgangssituation .....	75
2.11.2	Durchgeführte Arbeiten.....	76
2.11.3	Erzielte Ergebnisse.....	77
2.11.4	Fazit.....	79
2.12	Verbesserung und Optimierung weiterer Modelle .....	79
<b>3</b>	<b>Entwicklung eines ATHLET internen 2D/3D Modells.....</b>	<b>85</b>
3.1	Die mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen .....	86
3.1.1	Die Massenerhaltungsgleichung .....	86
3.1.2	Die dreidimensionale Impulsbilanz in ATHLET .....	87
3.1.2.1	Finite-Volumen Methode für versetzte Gitter.....	87
3.1.2.2	Semi-konservative Formulierung der Impulserhaltungsgleichung .....	89
3.1.3	Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in kartesischen Koordinaten .....	90
3.1.4	Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten .....	96
3.2	Integration des 3D-Modells in ATHLET .....	97
3.2.1	2D/3D Gittergenerierung.....	97
3.2.2	Spezifikation zylindrischer Gitter .....	100
3.2.3	Erweiterte Anwenderunterstützung .....	101
3.2.3.1	Automatisiertes BRANCH2M .....	101

3.2.3.2	Detaillierte Objektgeometrie für zylindrische Gitter.....	102
3.2.3.3	Bereitstellung generischer Datensätze.....	103
3.2.4	Druckrückgewinn in zylindrischen Gittern .....	103
3.3	Validierungsergebnisse.....	106
3.3.1	UPTF-TRAM C1 .....	107
3.3.1.1	Versuchsbeschreibung .....	108
3.3.1.2	Beschreibung der Nodalisierung .....	109
3.3.1.3	Ergebnisse Run 3b1 .....	110
3.3.1.4	Zusammenfassung und Bewertung.....	113
3.3.2	TALL Test T01 .....	114
3.3.2.1	Ergebnisse der Voraussrechnung.....	116
3.3.2.2	Bewertung .....	120
3.4	Reibungsbehaftete Modellgleichungen .....	121
3.4.1	Erhaltungsgleichungen und Turbulenzmodell .....	121
3.4.1.1	Viskose Scherkräfte.....	121
3.4.1.2	Turbulenzmodell .....	123
3.4.2	Anwendungsbeispiele .....	125
3.4.2.1	2D-Kanalströmung.....	125
3.4.2.2	2D- und 3D-Rohrströmung.....	130
3.5	Zusammenfassung und Ausblick .....	132
<b>4</b>	<b>Methodenqualifizierung für Unsicherheitsanalysen mit ATHLET ....</b>	<b>135</b>
4.1	Phase 1: Vorbereitung des Benchmarks.....	137
4.2	Phase 2: Identifizierung wichtiger Modellunsicherheiten .....	139
4.2.1	ATHLET Modell der FEBA-Anlage.....	139
4.2.2	Auswahl der wichtigen unsicheren Eingangsparameter .....	141
4.3	Phase 3: Quantifizierung der Modellunsicherheiten .....	143
4.3.1	Beschreibung der Quantifizierungsmethode .....	144
4.3.2	Experimentelle Datenbasis .....	146
4.3.3	Quantifizierung der unsicheren Modellparameter.....	147
4.4	Phase 4: Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten .....	157
4.4.1	Unsicherheitsanalysen zu FEBA Versuchen .....	157

4.4.2	Unsicherheitsanalysen zu PERICLES Versuchen.....	161
4.4.2.1	ATHLET-Modell der PERICLES Versuchsanlage .....	161
4.4.2.2	Eingabeparameter der Unsicherheitsanalysen zum PERICLES Experiment .....	164
4.4.2.3	Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen .....	167
4.5	Schlussfolgerungen .....	173
<b>5</b>	<b>Querschnittsaufgaben.....</b>	<b>175</b>
5.1	Effiziente Kopplung von ATHLET mit MCDET für umfassende Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen .....	175
5.1.1	Konzept zur Kopplung von MCDET mit einem Rechenprogramm.....	176
5.1.1.1	MCDET-Module und ihre Aufgaben .....	176
5.1.1.2	Ablauf einer MCDET Analyse .....	178
5.1.1.3	Anforderung an das Rechenprogramm.....	179
5.1.1.4	Datenverwaltung.....	180
5.1.2	Programmerweiterungen in ATHLET und MCDET zur effizienten Kopplung beider Programme .....	181
5.1.2.1	Programmerweiterungen in MCDET Modulen.....	183
5.1.2.2	ATHLET-Treiber .....	184
5.1.2.3	Programmerweiterungen in ATHLET .....	184
5.1.3	Grafische Aufbereitung der mit ATHLET und MCDET gewonnenen Ergebnisse.....	186
5.1.3.1	Ergebnisstruktur von MCDET-Simulationen.....	186
5.1.3.2	Grafische Darstellung von Zeitverläufen von Prozessgrößen.....	189
5.1.4	Demonstrationsbeispiele der grafischen Darstellung zeitlicher Verläufe von Prozessgrößen.....	193
5.1.5	Zusammenfassung und Ausblick .....	196
5.2	Neue Sparse-Matrix Lösungsverfahren.....	198
5.2.1	Startrechnung .....	198
5.2.1.1	Gleichungslöser .....	198
5.2.1.2	Implementierung in ATHLET .....	198
5.2.1.3	Ergebnisse.....	199
5.2.1.4	Fazit.....	200

5.2.2	PETSc für transiente Rechnungen.....	200
5.3	Anwenderunterstützung.....	203
5.3.1	Entwicklung eines Werkzeugs zur Unterstützung der Eingabedatenerzeugung und -kontrolle .....	204
5.3.2	3D Visualisierung von ATHLET Rechenergebnissen .....	205
5.3.3	Visualisierung der CDR1D-Ergebnisse .....	206
5.3.4	Verwendung von Parametern im Eingabedatensatz .....	208
5.3.5	PYTHON Schnittstelle .....	209
5.3.6	Zusammenarbeit mit externen Partnern.....	214
5.4	Qualitätssicherung und Versionsmanagement.....	216
5.5	Freigabe der Programmversion ATHLET 3.0A.....	217
5.6	Einfrieren der ATHLET-Version 3.0 B .....	219
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Bewertung .....</b>	<b>221</b>
6.1	Weiterentwicklung der ATHLET Modellbasis .....	221
6.2	Entwicklung eines ATHLET internen 3D Modells .....	224
6.3	OECD Benchmark PREMIUM.....	225
6.4	Querschnittaufgaben .....	226
6.5	Fazit.....	226
	<b>Literatur.....</b>	<b>231</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>243</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>251</b>



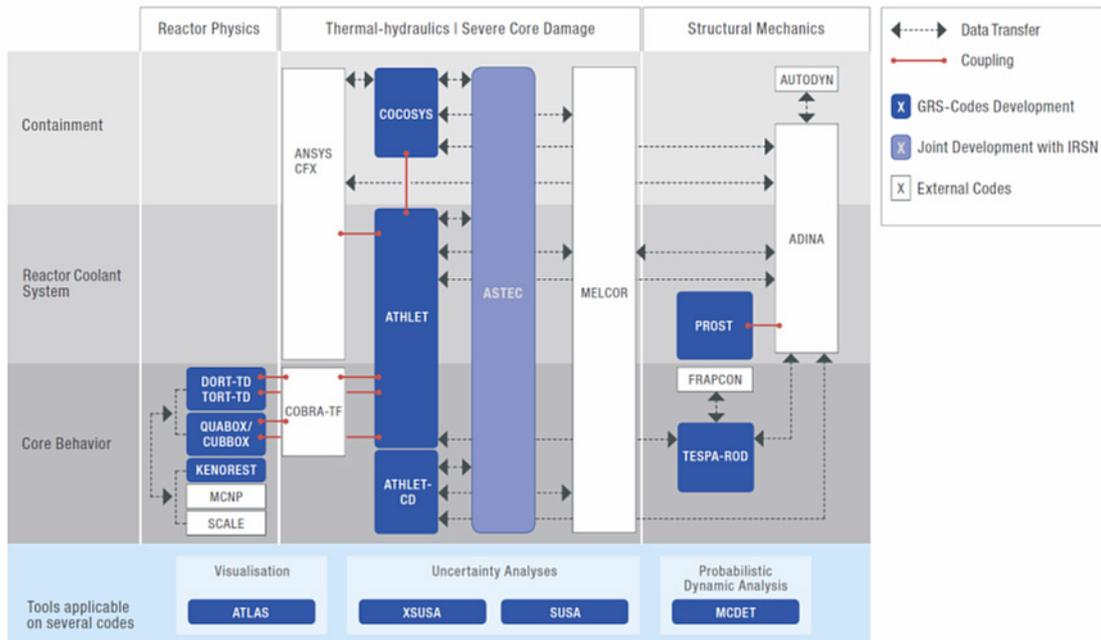
# 1 Einleitung

Für den Nachweis der Beherrschbarkeit von Transienten, Stör- und Unfällen in Kernkraftwerken dienen international Rechenprogramme, die nach Stand von Wissenschaft und Technik möglichst realistische, sog. *Best-Estimate* Ergebnisse liefern. Das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) fördert die Entwicklung und Validierung derartiger Programme im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung. Das Spektrum an Programmanforderungen umfasst hierbei sowohl Auslegungsstörfälle als auch auslegungsüberschreitende Ereignisse und Unfälle mit schweren Kernschäden und Verlagerung des zerstörten Kerns.

Zur Simulation des Anlagenverhaltens bei betrieblichen Bedingungen, Transienten, Auslegungsstörfällen und auslegungsüberschreitenden Ereignissen ohne Kernschäden wird das Systemrechenprogramm ATHLET (**A**nalyse der **T**hermohydraulik von **L**ecks und **T**ransienten) von der GRS entwickelt. Das Programm bietet zuverlässige Modelle und Verfahren zur Simulation von Leichtwasserreaktoren westlicher und russischer Bauart, von innovativen Reaktordesigns mit vertiefter Sicherheitstechnik der Generationen III, III+ und IV wie auch von SMR-Konzepten. ATHLET wird von der GRS in Zusammenarbeit mit externen Organisationen systematisch validiert. Die Auswahl der Experimente orientiert sich an der OECD-CSNI Validierungsmatrix /CSN87/ sowie deren Fortschreibungen für Integralexperimente /ANN96/ und Einzeleffektversuche /AKS94/. Der vorliegende Bericht dokumentiert die im Rahmen des BMWi-Projekts RS1507 zur *Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit* durchgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten.

Um alle beim Betrieb von Kernkraftwerken wesentlichen multiphysikalischen Vorgänge und Phänomene simulieren zu können, ist ATHLET aus grundlegenden Modulen zur Beschreibung der Thermofluiddynamik, der Wärmeleitung und des Wärmeübergangs, der Neutronenkinetik sowie der Reaktorregelung aufgebaut. Für weiterführende Multiphysik- und Multiskalenanalysen existieren Kopplungen zu unterschiedlichen, sowohl von der GRS entwickelten als auch proprietären Rechenprogrammen (Abb. 1.1). Zur detaillierten Simulation fluiddynamischer Vorgänge ist ATHLET mit den CFD-Programmen ANSYS-CFD und OpenFOAM gekoppelt. Es existieren Kopplungen mit den 3D-Neutronenkinetik-Codes QUABOX/CUBBOX und TORT-TD. Zusätzlich wurden Kopplungen zu BIPR, DYN3D, KIKO3D und PARCS realisiert. Die ATHLET-Erweiterung ATHLET-CD bietet die Möglichkeit, nach Ergänzung eines ATHLET-Standardeingabedatensatzes auch schwere Störfälle mit Kernschädigung zu simulie-

ren. Es existiert außerdem eine Kopplung mit dem Containment-Code COCOSYS. Darüber hinaus wurden zahlreiche Programmkopplungen auf Basis reinen Datenaustauschs realisiert, z. B. zur Beschreibung der Fluid-Struktur-Interaktion mit dem Strukturdynamikcode ADINA.



**Abb. 1.1** Von der GRS eingesetzte Rechenprogramme mit wichtigen ATHLET Codekopplungen

Für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Bewertung der Aussagesicherheit von ATHLET Rechenergebnissen ist das Programm eng mit der GRS Software SUSA (**S**oftware für **U**nsicherheits- und **S**ensitivitäts **A**nalysen) verzahnt. Um zukünftig auch umfassende Unsicherheitsanalysen, sogenannte integrierte deterministisch-probabilistische Unsicherheitsanalysen, mit ATHLET durchführen zu können, wird aktuell an der Kopplung von ATHLET mit MCDET gearbeitet. Die interaktive Programmsteuerung und die Visualisierung der Rechenergebnisse wird durch den GRS Analysesimulator ATLAS ermöglicht.

Der fortlaufenden Entwicklung der Kernkraftwerkstechnologie und den wachsenden Anforderungen an Sicherheitsanalysen wird mit der kontinuierlichen Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET Rechnung getragen. Zentrales Ziel des vorliegenden Projekts ist, den zahlreichen im Umgang mit ATHLET geschulten Anwendern für aktuelle und zukünftige Fragestellungen das nötige Werkzeug bereitzustellen, um Sicherheitsanalysen für kerntechnische Einrichtungen nach dem Stand von Wissenschaft und Technik durchführen zu können. Erforderliche Entwicklungsarbeiten erge-

ben sich aus Anforderungen, die die realistische Modellierung aktueller und neuer Reaktordesigns sowie geänderter Sicherheitstechniken auf Basis innovativer Sicherheitssysteme an das Simulationsprogramm stellen. Entwicklungsbedarf resultiert auch aus dem fortgeschriebenen Regelwerk zur Durchführung von Sicherheitsanalysen ebenso wie aus steigenden Anforderungen an Rechengenauigkeit, Rechengeschwindigkeit und Anwenderfreundlichkeit.

Wesentliche Module bzw. physikalische Modelle des Analysewerkzeugs ATHLET wurden bereits in zurückliegenden, vom BMWi finanzierten Projekten entwickelt. Die Auswertung der Simulationsergebnisse zu neuen thermohydraulischen Experimenten sowie von Reaktorsimulationen im Rahmen der ATHLET-Anwendung zeigt regelmäßig Potential für Verbesserungen auf, was zu einem kontinuierlichen Prozess der Ertüchtigung und Vervollständigung der ATHLET Modellbasis führt. Dies hat im vorliegenden Vorhaben zu zahlreiche Modellerweiterungen und –neuentwicklungen geführt, die eine detaillierte Simulation sicherheitsrelevanter Vorgänge für Transienten oder Störfälle in Reaktoren ermöglichen. Beispiele hierfür sind z. B. die Berechnung der kritischen Leckströmraten oder des Wärmeübertrags im Brennelementbündel.

In neuen Reaktordesigns werden zunehmend passive Sicherheitssysteme eingesetzt, die weitgehend von physikalischen Effekten wie beispielsweise der Schwerkraft ange-regt werden. Anders als bei aktiven Systemen wirken nur kleine treibende Kräfte, häufig auch bei vom Reaktorbetrieb deutlich abweichenden Betriebspunkten. Beispiele sind passive Systeme zum Druckabbau oder zur Wärmeabfuhr aus dem Primärkreis, wie sie der Notkondensator des innovativen SWR-Designs KERENA (AREVA NP) ermöglicht. Hierbei wird mittels eines Wärmetauschers Wärme aus dem RDB an eine große Wasservorlage übertragen. Zur Simulation dieses und vergleichbarer Systeme muss die vorhandene ATHLET Modellierung unter Berücksichtigung des jeweils systemspezifischen Aufbaus und der vorherrschenden Betriebsbedingungen adaptiert werden.

Ein wichtiges, im Rahmen von RS1507 verfolgtes Ziel stellt die Implementierung eines 2D/3D-Modells in ATHLET dar, um makroskopische, mehrdimensionale Strömungsphänomene, die insbesondere in großen Behältern wie dem Reaktordruckbehälter (RDB) auftreten, detailliert beschreiben zu können. Die bisher verfügbare pseudo-mehrdimensionale sog. Parallelkanaltechnik konnte derartige Vorgänge nur mit eingeschränkter Genauigkeit darstellen. Die Implementierung eines 3D-Modells ist auch vor dem Hintergrund der langfristigen Konkurrenzfähigkeit von ATHLET wichtig, da nahezu

alle international eingesetzten thermohydraulischen Systemrechenprogramme wie z. B. CATHARE, TRACE oder RELAP über vergleichbare Modelle verfügen.

In den vergangenen Jahren wurden bereits häufiger hochauflösende ATHLET Rechenmodelle mit bis zu mehreren Zehntausend Kontrollvolumen eingesetzt. Dieser Trend hin zu feiner diskretisierten Rechengittern wird sich auch durch die Verfügbarkeit des neuen 3D-Modells verstärken, so dass die Bereitstellung effizienter numerischer Lösungsverfahren von zentraler Bedeutung ist. Das in ATHLET enthaltene Lösungsverfahren FTRIX, das für eher kleine und eindimensionale Netzwerke optimiert ist, sollte daher durch alternative Verfahren ergänzt werden, z. B. durch die Verknüpfung von ATHLET mit dem quelloffenen Paket PETSc, das zahlreiche direkte und iterative Sparse-Matrix-Verfahren zur Verfügung stellt.

Die international wachsende Bedeutung von Unsicherheitsanalysen, die sich auch in den Anforderungen des deutschen Regelwerks an die Nachweisführung für Kernreaktoren /BMU12/ widerspiegelt, erfordert die Entwicklung und Bereitstellung entsprechender Methoden für ATHLET. In den bisher mit SUSANA und ATHLET durchgeführten Analysen werden insbesondere die sog. epistemischen Unsicherheiten berücksichtigt, die u. a. hinsichtlich der Abbildung der Anlagengeometrie, der Anfangs- und Randbedingungen sowie der in ATHLET implementierten Modelle und Verfahren bestehen. Wie frühere internationale Projekte unter Beteiligung der GRS gezeigt haben, wird hierbei das Ergebnis und die Aussagekraft einer Unsicherheitsanalyse wesentlich von der Güte der Quantifizierung der unsicheren Parameter der physikalischen Modelle bestimmt /NEA11/, /WIC98/. Um die verschiedenen international angewandten Methoden zur Quantifizierung dieser Eingangsparameter zu bewerten, beteiligt sich die GRS innerhalb von RS1507 am OECD/NEA/CSNI Benchmark PREMIUM.

Darüber hinaus besteht ein weiteres Projektziel in der Kopplung von ATHLET mit der GRS Software MCDET, um zukünftig auch umfassende Unsicherheitsanalysen zu ermöglichen, die neben den epistemischen Unsicherheiten zusätzliche sog. aleatorische Unsicherheiten einbeziehen, die bisher i. d. R. als konservative Annahmen in deterministische Analysen Eingang gefunden haben. Da MCDET im internationalen Vergleich einen Entwicklungsvorsprung gegenüber alternativen Ansätzen besitzt, ist die Kopplung für ATHLET auch von strategischer Bedeutung.

Die in diesem Vorhaben durchgeführten Entwicklungsarbeiten, begleitet von Maßnahmen zur Qualitätssicherung und zur Anwenderunterstützung, sind inhaltlich in vier technisch-wissenschaftliche Arbeitspakete gegliedert:

- AP1: Weiterentwicklung der ATHLET Modellierung insbesondere für Leichtwasserreaktoren
- AP2: Entwicklung eines ATHLET internen 3D Modells
- AP3: OECD Benchmark PREMIUM: Überprüfung der Methodologie zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten anhand Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchungen für ausgewählte Quench-Versuche
- AP4: Querschnittsaufgaben

Die in den vier Arbeitspaketen durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse sind in den nachfolgenden Kapiteln dargestellt. Ergänzt wurden und werden diese Arbeiten insbesondere durch Entwicklungen im Rahmen folgender vom BMWi finanzierter Projekte:

- RS1191 und RS1515 zur Rechenmethodenentwicklung für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren, überkritische Leichtwasserreaktoren und schnelle Systeme
- RS1195 und RS1519 zur Validierung von Rechenprogrammen zur Simulation von Störfällen
- RS1198 zur Entwicklung fortschrittlicher Methoden und Werkzeuge für Probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA)
- RS1199 – GRAMOVIS (Grafische Modellierung und Visualisierung)



## 2 Vervollständigung der ATHLET Modellierung für die Simulation von Leichtwasserreaktoren

### 2.1 Berechnung kritischer Leckströmraten

ATHLET verwendet für die Simulation von postulierten Kühlmittelverluststörfällen das Modell CDR1D zur Berechnung der kritischen Ausströmraten. Die korrekte Bestimmung der Ausströmraten ist einerseits wesentlich für die realistische Abbildung des Störfallablaufs, andererseits aber ausgesprochen anspruchsvoll, da das Leckgebiet und der Bereich unmittelbar stromaufwärts des Lecks von sehr großen Gradienten der thermohydraulischen Eigenschaften des Fluids sowie thermischem Ungleichgewicht zwischen den Phasen geprägt ist. Das CDR1D-Modell wurde im Rahmen dieses Vorhabens weitreichend überarbeitet und somit der Anwendungs- und Gültigkeitsbereich erheblich erweitert.

#### 2.1.1 Umstellung des zugrunde liegenden Gleichungssystems

ATHLET verwendet zur Berechnung von kritischen Leckmassenströmen das Unterprogramm CDR1D. Dieses bestimmt den kritischen Massenstrom durch Lösen der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie für eine eindimensionale Zweiphasenströmung:

$$\frac{d}{dt}(\rho_l(1-\alpha)A) + \frac{d}{ds}(\rho_l(1-\alpha)wA) = -\psi A \quad (2.1)$$

$$\frac{d}{dt}(\rho_v\alpha A) + \frac{d}{ds}(\rho_v\alpha wA) = \psi A \quad (2.2)$$

$$\frac{d}{dt}(\rho wA) + \frac{d}{ds}((p + \rho w^2)A) - p \frac{dA}{ds} = -R^*A - g\rho A \frac{dz}{ds} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt}\left(\left(\rho h + \frac{\rho}{2}w^2 - p\right)A\right) + p \frac{dA}{dt} \\ & + \frac{d}{ds}\left(\left(p h w + \frac{\rho}{2}w^3\right)A\right) \\ & = q^*A - g\rho wA \frac{dz}{ds} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dieses Vier-Gleichungsmodell enthält für beide Phasen eine separate Massenerhaltungsgleichung (Gleichungen (2.1), (2.2)) und je eine gemeinsame Impuls und Energiegleichung (Gleichungen (2.3), (2.4)). Es wird angenommen, dass beide Phasen die gleiche Geschwindigkeit besitzen (mechanisches Gleichgewicht). Allerdings war bisher in CDR1D nicht direkt die dargestellte Form der Erhaltungsgleichungen implementiert,

sondern die Dichte  $\rho$  wurde als Funktion von Druck und Enthalpie ausgedrückt ( $\rho = \rho(p, h)$ ) und die Gleichungen entsprechend umformuliert. Dadurch erhält man als Lösungsvariablen Druck, Enthalpie, Geschwindigkeit und Dampfvolumenteil ( $p, h, w, \alpha$ ), wohingegen ATHLET bei der Lösung des thermohydraulischen Modellgleichungssystems statt der Enthalpie die Temperatur als Lösungsvariable verwendet. Der Nachteil daran ist, dass für das bisherige CDR1D-Modell alle Stoffwerte (wie Dichte, Sättigungstemperatur, Dampfdruck, ...) in Abhängigkeit von Druck und Enthalpie berechnet werden müssen und daher nicht die ATHLET Stoffwertroutrinen verwendet werden können, sondern ein separates Stoffwertepaket benötigt wird. Da das bestehende CDR1D Stoffwertepaket zum einen veraltet war und zum anderen auch nur die Stoffwerte von (unterkritischem) Wasser berechnen konnte, wurde es mit dem ATHLET-Stoffwertepaket ersetzt. Dazu war es allerdings notwendig, das in CDR1D implementierte Gleichungssystem zu modifizieren.

Um das neue Gleichungssystem mit dem Lösungsvektor  $\vec{x} = (p, T, w, \alpha)^T$  zu bestimmen, wird in den Erhaltungsgleichungen (2.1) – (2.4) zunächst die Dichte  $\rho$  als Funktion von Druck und Temperatur ausgedrückt:  $\rho = \rho(p, T)$ . Das System wird dann in die Form

$$A \cdot \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} + B \cdot \frac{\partial \vec{x}}{\partial s} = \vec{r} \quad (2.5)$$

mit den Koeffizienten-Matrizen A und B gebracht. Zur Ermittlung der kritischen Ausströmbedingungen werden analog zu /WOL79/ die Eigenwerte  $\sigma$  des Differentialgleichungssystems (Gleichung (2.5)) durch die Lösung der charakteristischen Gleichung

$$\det(B - \sigma A) = 0 \quad (2.6)$$

bestimmt. Dafür wurde das Computeralgebrasystem MAXIMA verwendet. Als Eigenwerte wurden gefunden:

$$\sigma_1 = w + \sqrt{\frac{\frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l^2 \rho_v}{\rho \Gamma}} \quad (2.7)$$

$$\sigma_2 = w - \sqrt{\frac{\frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l^2 \rho_v}{\rho \Gamma}} \quad (2.8)$$

$$\sigma_{3/4} = w \quad (2.9)$$

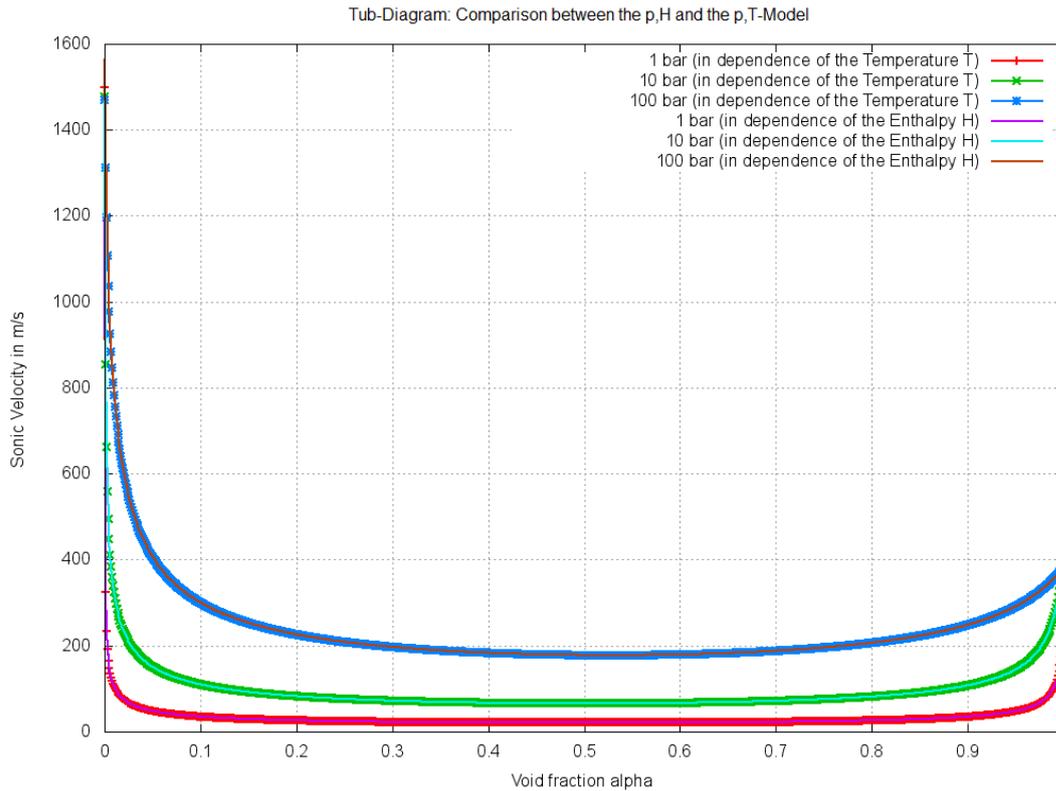
mit

$$\Gamma = \alpha \left( \frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l^2 \frac{\partial \rho_v}{\partial T} - \frac{\partial h_v}{\partial T} \frac{\partial \rho_l}{\partial T} \rho_v^2 \right) \frac{\partial T_{sat}}{\partial p} + \alpha \frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l^2 \frac{\partial \rho_v}{\partial p} - \alpha \frac{\partial h_v}{\partial p} \rho_v^2 \frac{\partial \rho_l}{\partial T} + \left( \left( (\alpha - 1) \frac{\partial h_l}{\partial p} \rho_l + 1 \right) \frac{\partial \rho_l}{\partial T} + (1 - \alpha) \frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l \frac{\partial \rho_l}{\partial p} \right) \rho_v \quad (2.10)$$

Da für die gesuchte kritische Geschwindigkeit  $\sigma_i = 0$  und  $\sigma_j > 0, \forall i \neq j$  gelten muss, ergibt sich

$$w_{krit} = \sqrt{\frac{\frac{\partial h_l}{\partial T} \rho_l^2 \rho_v}{\rho \Gamma}} \quad (2.11)$$

Einen Vergleich der neu hergeleiteten kritische Geschwindigkeit  $w_{krit}$  mit dem alten Wert für verschiedene Drücke in Abhängigkeit vom Dampfgehalt  $\alpha$  zeigt Abb. 2.1. Beide Ergebnisse stimmen erwartungsgemäß fast perfekt überein. Für sehr kleine und sehr große  $\alpha$  steigt die kritische Geschwindigkeit stark an, es ergibt sich die bekannte „Badewannenkurve“ der kritischen Geschwindigkeit für eine Zwei-Phasenströmung.



**Abb. 2.1** Vergleich der kritischen Geschwindigkeit berechnet mit dem alten und dem neuen Gleichungssystem /SIN13/

Nimmt man in Gleichung (2.5) an, dass eine stationäre Strömung vorliegt, also die Zeitableitung zu null wird, vereinfacht sich (2.5) zu

$$B \cdot \frac{\partial \vec{x}}{\partial s} = \vec{r} \quad (2.12)$$

was sich durch Invertieren der Matrix B in ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung umformen lässt:

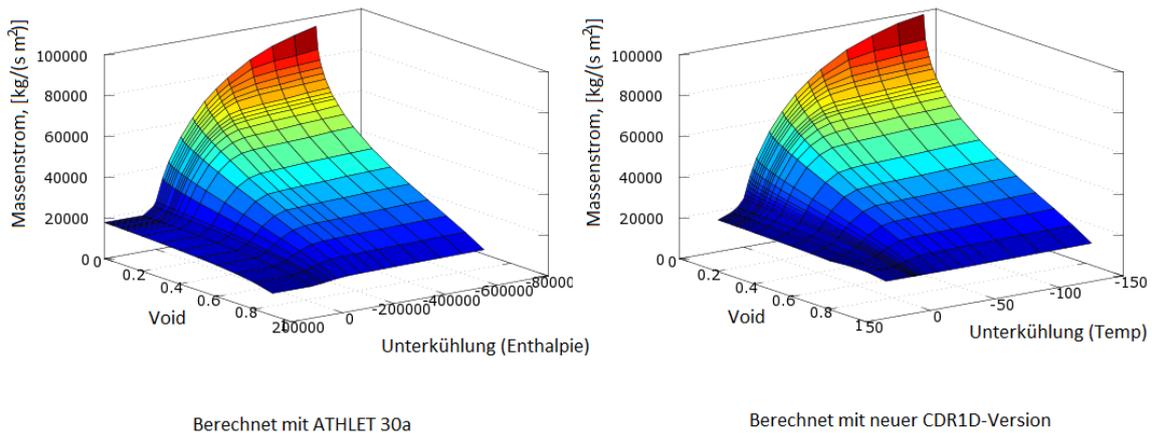
$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial s} = B^{-1} \vec{r} \quad (2.13)$$

Dieses Gleichungssystem wurde im CDR1D-Programm neu implementiert. Es ist mathematisch gleichwertig zu dem bisher implementierten Gleichungssystem, hat aber den großen Vorteil, dass anstatt der Enthalpie nun die Temperatur als Lösungsvariable vorliegt und dadurch die ATHLET Stoffwertroutrinen unmittelbar genutzt werden können. Die sich dadurch ergebenden Verbesserungen werden im Weiteren dargestellt.

Im Eingabedatensatz ergibt sich durch die Neuerung, dass bei Verwendung des CDR1D-Modells anstelle der Enthalpiestützstellen nun Temperaturstützstellen vorge-

geben werden müssen. Da die meisten Anwender sich leichter tun, Unterkühlungen oder Überhitzungen in Form einer Temperatur in Kelvin anstatt als Enthalpiedifferenz anzugeben, ist dies als deutliche Vereinfachung in der Datensatzerstellung zu werten.

Ein Vergleich der mit der neuen und der alten CDR1D-Version berechneten Ausströmfelder in Abhängigkeit der jeweiligen Lösungsvariablen ist in Abb. 2.2 zu sehen.



**Abb. 2.2** Berücksichtigung eines fluiddynamischen Nichtgleichgewichts

Das in CDR1D implementierte Gleichungssystem (2.1) – (2.4) nimmt ein fluiddynamisches Gleichgewicht an, d. h. dass die Geschwindigkeiten der Wasser- und Dampfphase gleich sind, die Strömung also mechanisch homogen ist. Damit wird vorausgesetzt, dass zwischen beiden Phasen eine ausgeprägte mechanische Kopplung besteht, die eine Relativbewegung verhindert. Inwieweit diese Annahme zutrifft, ist von der Strömungsform abhängig. Modelle, die unterschiedliche Strömungsgeschwindigkeiten berücksichtigen, werden als Schlupfmodelle bezeichnet. Um sowohl den Aufwand der Implementierung eines Schlupfmodells in CDR1D zu prüfen als auch den Einfluss in Bezug auf typische ATHLET-Anwendungen zu bewerten, sollte in einem ersten Schritt das System (2.1) – (2.4) unter Annahme unterschiedlicher Phasengeschwindigkeiten formuliert werden. Zwar konnte das zugehörige Gleichungssystem erfolgreich abgeleitet werden, aufgrund seiner Komplexität war es jedoch nicht möglich, die Eigenwerte des Systems durch Lösen der charakteristischen Gleichung (analog zu Gleichung (2.6)) mit Hilfe des Algebrasystems MAXIMA zu bestimmen, so dass hierfür ein alternatives Vorgehen gefunden werden muss.

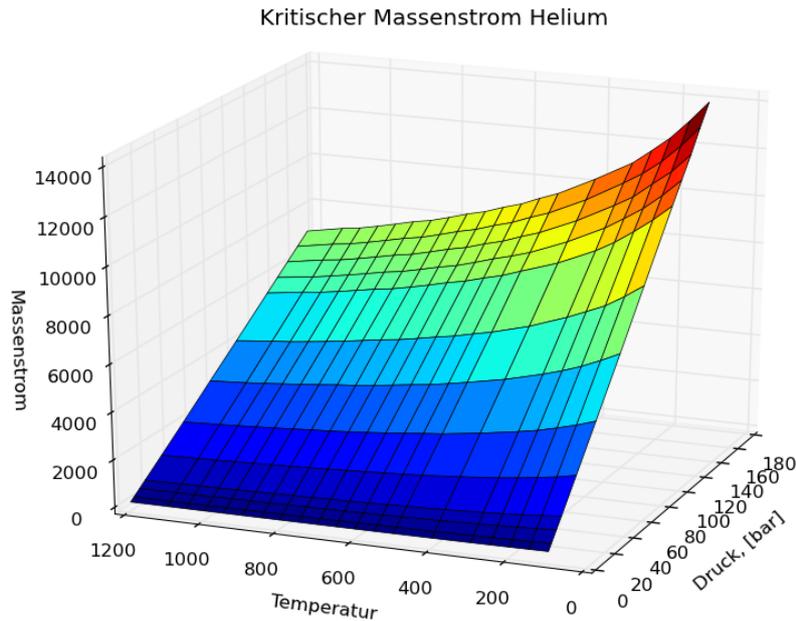
### 2.1.2 Neue Arbeitsmedien

Durch die Umstellung des zugrunde liegenden Gleichungssystems des CDR1D-Modells auf die abhängigen Variablen  $(p, T, w, \alpha)$  ist es möglich, die bisherig zur Stoffwertberechnung verwendeten Routinen durch die ATHLET-Stoffwert Routinen zu ersetzen. Diese können neben den Stoffwerten für normales Wasser unter anderem auch die Stoffwerte für schweres Wasser und Helium liefern. Dadurch ist es möglich, auch die Ausströmraten für diese beiden Arbeitsmedien zu berechnen und damit das Anwendungsfeld von ATHLET zu vergrößern. Für schweres Wasser mussten nur wenige Änderungen im CDR1D Quellcode gemacht werden. Einzig das zusätzliche Einlesen des gewünschten Arbeitsmediums aus dem Eingabedatensatz musste ergänzt und beim Aufruf des Stoffwertepakets mit übergeben werden.

Für die Ertüchtigung von CDR1D für einphasiges Helium waren einige Erweiterungen erforderlich. Das betraf hauptsächlich das Einlesen der Eingabedaten, wie auch die Ausgabe der Ergebnisse. Hauptunterschied ist, dass die Ausströmrates von Helium als einphasiges Gas nicht wie Wasser/Dampf für verschiedene Dampfgehalte  $\alpha$  berechnet werden muss und daher die von CDR1D erzeugten Ergebnistabellen kürzer sind als die von Wasser.

Im Eingabedatensatz wurde ein neues Schlüsselwort KW TIHELIUM geschaffen, mit dem zusätzlich Temperaturstützstellen für Helium vorgegeben werden können. Diese müssen als absolute Temperatur in °C angegeben werden und nicht wie bei den „normalen“ Temperaturstützstellen als Differenz von der Sättigungstemperatur. Falls keine zusätzlichen Stützstellen eingegeben werden, verwendet ATHLET Standardwerte, die in der später ausgegebenen CDR-Tabelle aufgelistet werden.

In Abb. 2.3 ist beispielhaft das Ergebnis einer CDR1D Rechnung für Helium dargestellt. Zu sehen ist die kritische Heliummassenstromdichte in Abhängigkeit von Druck und Temperatur. Im Gegensatz zu einer Wasser/Dampf-Zweiphasenströmung, die im Bereich des Sättigungsdrucks starke Gradienten aufweist, zeigt das dargestellte Heliumfeld über den ganzen Bereich ein fast lineares Verhalten.



**Abb. 2.3** Kritische Heliummassenstromdichte [ $kg/m^2s$ ] in Abhängigkeit von Temperatur und Druck

### 2.1.3 Vergrößerter Gültigkeitsbereich

Die alte CDR1D-Version konnte Ausströmraten bis zu einem Eintrittsdruck von 18 MPa bestimmen. Begrenzender Faktor war die Stoffwertroutine, die nur bis zu diesem Druck Stoffwerte berechnen konnte. Für herkömmliche Druckwasserreaktoren, die in Deutschland bei einem mittleren Druck von 15,7 MPa betrieben werden, war dieser Druckbereich ausreichend. Bei neuen Anlagenkonzepten wie dem superkritischen Leichtwasserreaktor werden Drücke von 25 MPa und mehr erreicht.

Die nun von CDR1D genutzte ATHLET Stoffwertroutine besitzt einen Gültigkeitsbereich für Drücke bis 100 MPa, wodurch sich der Gültigkeitsbereich des erweiterten CDR1D-Programms entsprechend vergrößert. Da allerdings im Bereich und oberhalb des kritischen Drucks von Wasser bei 22,1 MPa einige Stoffwerte extrem starke Gradienten aufweisen, ist die Simulation von Strömungsvorgängen in diesem Bereich sehr anspruchsvoll. Ohne weitere Anpassungen zeigte sich aber, dass die neue CDR1D-Version bis 20,5 MPa numerisch stabil rechnet.

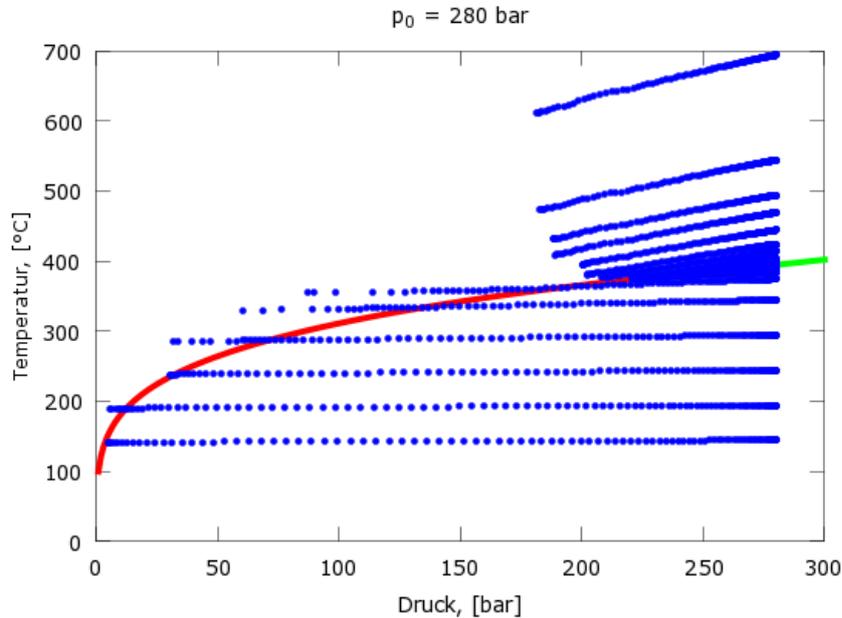
## 2.1.4 Überkritischer Druck

Bei Drücken von oberhalb 22,1 MPa findet beim Erhitzen von Wasser kein Phasenübergang mehr statt, sondern das Wasser geht kontinuierlich in Dampf über. Allerdings ändern sich dabei im Bereich der pseudokritischen Temperatur die Dichte und auch die spezifische Wärmekapazität sehr stark. Im kritischen Punkt bei 22,1 MPa und 374,12 °C (647 K) wird die isobare Wärmekapazität sogar unendlich groß. Diese starken Gradienten in den Stoffwerten führen dazu, dass die Simulation von Ausströmvorgängen bei Drücken im Bereich oder oberhalb des kritischen Punktes numerische Schwierigkeiten aufwerfen.

Mit den neuen Stoffwertroutrinen ist CDR1D im Prinzip in der Lage, die Ausströmung aus Systemen mit überkritischem Drücken zu berechnen. Einige Anpassungen und Erweiterungen waren dennoch notwendig, um ein stabiles Verhalten und einen stetigen Ergebnisverlauf zu erreichen.

CDR1D modelliert den Ausströmvorgang unterschiedlich je nach vorliegendem Dampfvolumenteil. Ist der Dampfvolumenteil kleiner als 0,9, wird die Strömung als wasserdominant angenommen, bei höherem Dampfvolumenteil als dampfdominant. Unterschied bei beiden ist, dass jeweils entweder die Dampf- oder die Wasserphase von der Sättigungstemperatur abweichen kann, wohingegen die jeweils andere Phase immer Sättigungstemperatur aufweist. Bei überkritischem Druck existiert der Begriff Dampfvolumenteil nicht mehr, da kein unstetiger Phasenübergang mehr stattfindet und nur eine Phase vorliegt. Von daher betrachtet macht es keinen Unterschied, welches Gleichungssystem benutzt wird. Allerdings kann man den Ausströmvorgang je nach Ausgangstemperatur in zwei Gruppen einteilen: Wenn die Ausgangstemperatur deutlich über der pseudokritischen Temperatur liegt, geht das überkritische Wasser bei der Entspannung direkt in überhitzten Dampf über. Bei diesen Eintrittsbedingungen am Beginn des Ausflussbereichs muss das dampfdominante Gleichungssystem verwendet werden, da sich überhitzter Dampf bildet. Liegt die Ausgangstemperatur deutlich unterhalb der pseudokritischen Temperatur, dann entspannt das überkritische Wasser zunächst zu unterkühltem Wasser (unterkritischer Druck) und dann weiter zu Sattwasser mit anschließender Verdampfung, wobei das Wasser wegen des schnellen Druckabfalls zuvor überhitzt. Es muss also mit dem wasserdominanten System gerechnet werden. In Abb. 2.4 sind die auf diese Weise mit CDR1D simulierten Ausströmvorgänge für einen Eintrittsdruck von 28 MPa für verschiedene Eintrittstemperaturen als blaue Punktlinien dargestellt. Jeder Punkt entspricht einem Zeitschritt bei der Lösung des

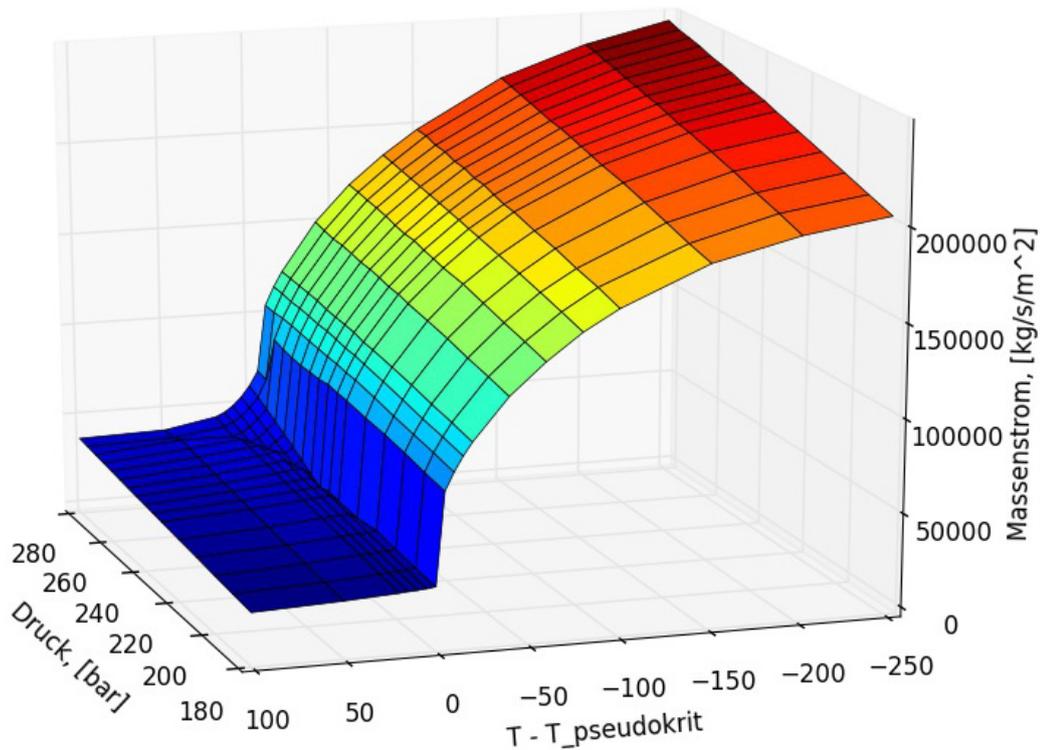
Differentialgleichungssystem. Die rote Linie ist die Sättigungslinie, die grüne die pseudokritische Linie. Deutlich sieht man den unterschiedlichen Verlauf für die oben beschriebenen beiden Gruppen.



**Abb. 2.4** Entspannungsvorgang bei superkritischem Druck für verschiedene Temperaturen

Allerdings ist noch ein anderer Verlauf des Ausströmvorgangs im Bild zu beobachten. Liegt die Ausgangstemperatur nahe an der pseudokritischen Linie, so läuft die blaue Linie in die pseudokritische Linie hinein. Durch die starken Änderungen der Stoffwerte in diesem Bereich versagt der Gleichungslöser und bricht Ergebnislos ab. Um auch in dieser Situation zu einer Lösung zu gelangen, wurde ein Interpolationsverfahren in CDR1D implementiert. CDR1D vergrößert und verkleinert schrittweise die Eintrittstemperatur, bis jeweils wieder eine Lösung gefunden werden kann. Aus diesen beiden Werten wird dann auf die gesuchte Eintrittstemperatur interpoliert. Auf diese Weise wird es möglich, im Überkritischen für einen vorgegebenen Temperatur- und Druckbereich ein kontinuierliches Massenstromfeld zu berechnen. Ein Beispiel dafür ist in Abb. 2.5 gezeigt. Hier ist der berechnete Austrittsmassenstrom über den Druck und die Differenz zur pseudokritischen Temperatur am Eintritt aufgetragen. Als Geometrie wurde eine Düse von den LOBI-Düseneichversuchen verwendet /RIN83/. Deutlich zu sehen ist der starke Abfall entlang der pseudokritischen Linie, also entlang der Null-Kelvin-Linie.

## Supercritical Discharge



**Abb. 2.5** Kritische Massenstromdichte bei überkritischem Eintrittsdruck

### 2.1.5 Erhöhte Benutzerfreundlichkeit

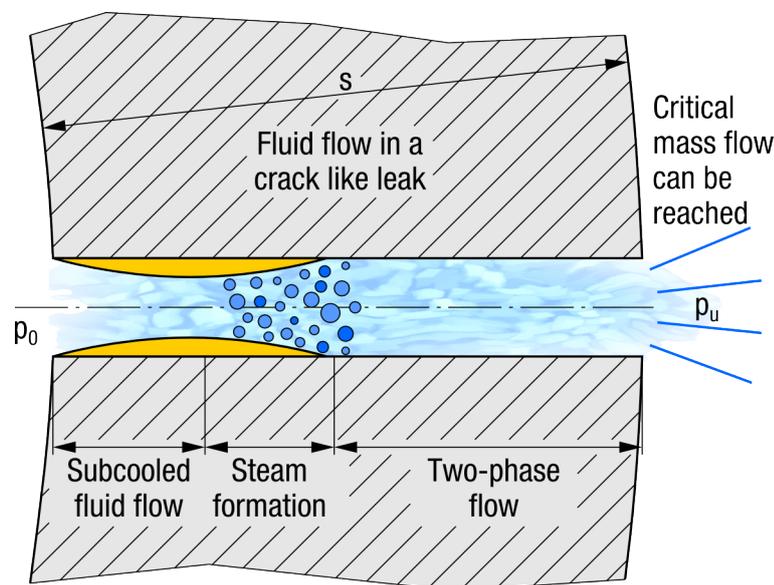
Die bisher notwendige Eingabe der Anzahl der Stützstellen und der Anzahl der Geometrien (NP, NA, NH, NCEO) unter dem Kontrollwort CDR1DIN im Eingabedatensatz ist nicht mehr notwendig. Beim Einlesen der Stützstellen werden diese jetzt automatisch gezählt und anschließend die Felder entsprechend allokiert. Neben der bereits oben beschriebenen Vorgabe von Temperatur- statt Enthalpiestützstellen trägt auch dies zu einer Erhöhung der Anwenderfreundlichkeit des neuen CDR1D-Modells bei.

### 2.1.6 Berechnung der Ausströmraten aus Rissen

Im Rahmen von Untersuchungen zum Leck-vor-Bruch-Postulat wurden mit ATHLET Rechnungen zum Kühlmittelverluststörfall mit Leck in der Volumenausgleichsleitung eines DWR vom Typ KONVOI durchgeführt. Ziel der Untersuchungen war nicht – wie sonst bei Leckstörfällen üblich – die maximale sondern die minimale Leckrate bei ge-

gebener Leckgeometrie zu bestimmen, um Aussagen über die Zuverlässigkeit von Leckdetektionssystemen zu gewinnen. Als Leck wurde ein Riss von wenigen Millimetern Breite auf 180° des Leitungsumfangs angenommen /SIE13/. Die von ATHLET ermittelten Ausströmraten waren deutlich höher als die mit anderen Modellen berechneten (z. B. Pana /PAN78/), was im Kontext der Untersuchungen ein nicht konservatives Ergebnis erbrachte. Als Ursache für die signifikanten Abweichungen wurde eine Eigenschaft des in ATHLET verwendeten Modells CDR1D zur Berechnung kritischer Ausströmraten identifiziert. Dieses Modell berücksichtigt zwar die vorliegende Strömungsfläche des Lecks sowie die Länge in Strömungsrichtung (Abb. 2.6), leitet aber aus der vorgegebenen Strömungsfläche den hydraulischen Durchmesser unter der Annahme einer kreisrunden Leckgeometrie ab, so dass dieser insbesondere bei schmaler Rissgeometrie deutlich zu groß bestimmt wird. Tatsächlich ist dieser bei hinreichend langem Riss gleich der doppelten Rissbreite (Abb. 2.7). Damit wird eine zu niedrige Wandreibung und demzufolge eine zu hohe Leckrate berechnet.

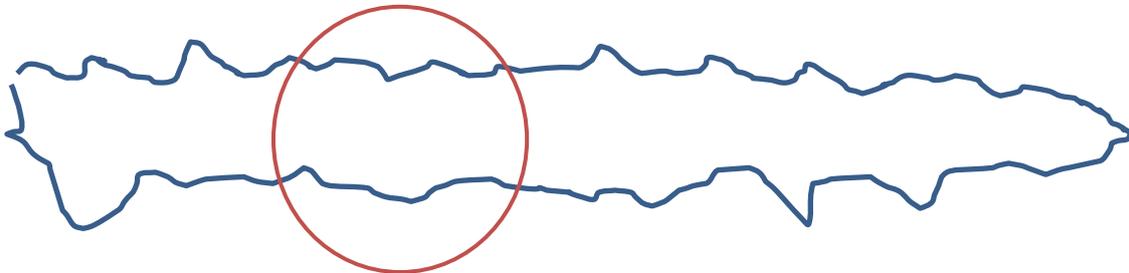
Zusätzlich zur Wandreibung im Riss kommt es am Risseintritt zum sog. Formverlust, der von der Form des Risseintritts (scharfkantig oder gerundet) abhängt und die Leckrate weiter reduzieren kann.



**Abb. 2.6** Riss in der Rohrwand einer Kühlmittleitung /SIE13/

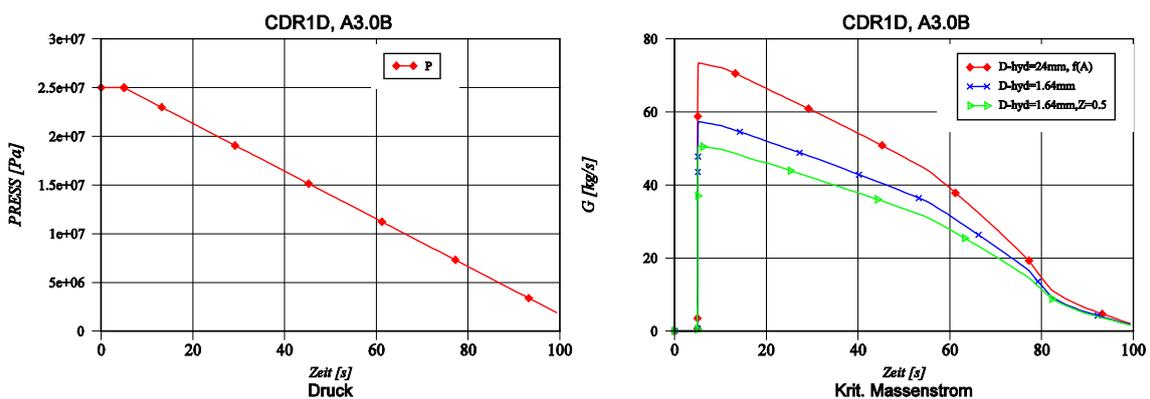
Das CDR1D-Modell wurde dahingehend erweitert, dass im kritischen Leckquerschnitt optional ein von kreisrunder Geometrie abweichender hydraulischer Durchmesser verwendet werden kann, den der ATHLET Anwender frei vorgeben kann. Kleine hydraulische

sche Durchmesser führen zu erhöhten Wandreibungsverlusten und somit zu kleineren Ausströmraten. Des Weiteren wurde die Möglichkeit geschaffen, einen Formverlustbeiwert am Eintritt in den Riss vorzugeben, mit dem die hier zu erwartenden erhöhten Strömungsverluste erfasst werden können.



**Abb. 2.7** Darstellung eines Risses und dessen hydraulischem Durchmesser

Abb. 2.8 zeigt den Verlauf des kritischen Massenstroms als Funktion des Eintrittsdrucks (linkes Bild) und der gewählten Modelloptionen. Für alle drei Rechnungen wurde eine Leckfläche von  $4.5 \text{ cm}^2$  und eine Risslänge (= Wandstärke) von  $4 \text{ cm}$  angenommen. Bei kreisrunder Geometrie hat das Leck einen Durchmesser von  $2,4 \text{ cm}$ . Wenn nicht anders vorgegeben, wird dieser als hydraulischer Durchmesser für die Berechnung der Wandreibungsverluste verwendet. Die damit ermittelte Leckrate ist mit der roten Kurve in Abb. 2.8 rechts dargestellt. Wird der hydraulische Durchmesser mit  $0,164 \text{ cm}$  vorgegeben, sinkt die Leckrate deutlich ab (blaue Kurve). Gibt man am Risseintritt einen dimensionslosen Formverlustbeiwert von  $0,5$  vor, verringert sich die Leckrate weiter (grüne Kurve).



**Abb. 2.8** Kritische Leckraten als Funktion des Kühlmitteldrucks am Leckeintritt

Die beschriebenen Erweiterungen des CDR1D-Modells ermöglichen die realistischere Simulation kritischer Ausströmraten für von einer kreisrunden Form abweichende Leckquerschnitte. Die Anwendung des Modells auf einen postulierten Riss in der Vo-

lumenausgleichsleitung eines DWR ergab im Vergleich zu anderen für die Leckratenberechnung eingesetzten Rechenprogrammen konsistente Ergebnisse /SIE13/.

### **2.1.7 Zusammenfassung**

Das in ATHLET verwendete Modell zur Berechnung kritischer Ausströmraten CDR1D wurde verbessert. Durch die vorgenommenen Modellerweiterungen können in Ergänzung zu leichtem Wasser nun auch kritische Leckströmraten für schweres und überkritisches Wasser wie auch für Helium berechnet werden. Außerdem wurde der Anwendungsbereich des CDR1D-Modells hinsichtlich der zu simulierenden Leckgeometrie erweitert, so dass realistische Leckraten z. B. für Risse berechnet werden können. Zusätzlich wird durch die durchgeführten Entwicklungsarbeiten die Handhabung des Modells erleichtert und die zukünftige Wartbarkeit durch die konsistente Verwendung eines gemeinsamen Stoffwertpakets in ATHLET und CDR1D verbessert.

### **2.2 Verbesserung des Gemischspiegelmodells für schnelle und dynamische Vorgänge**

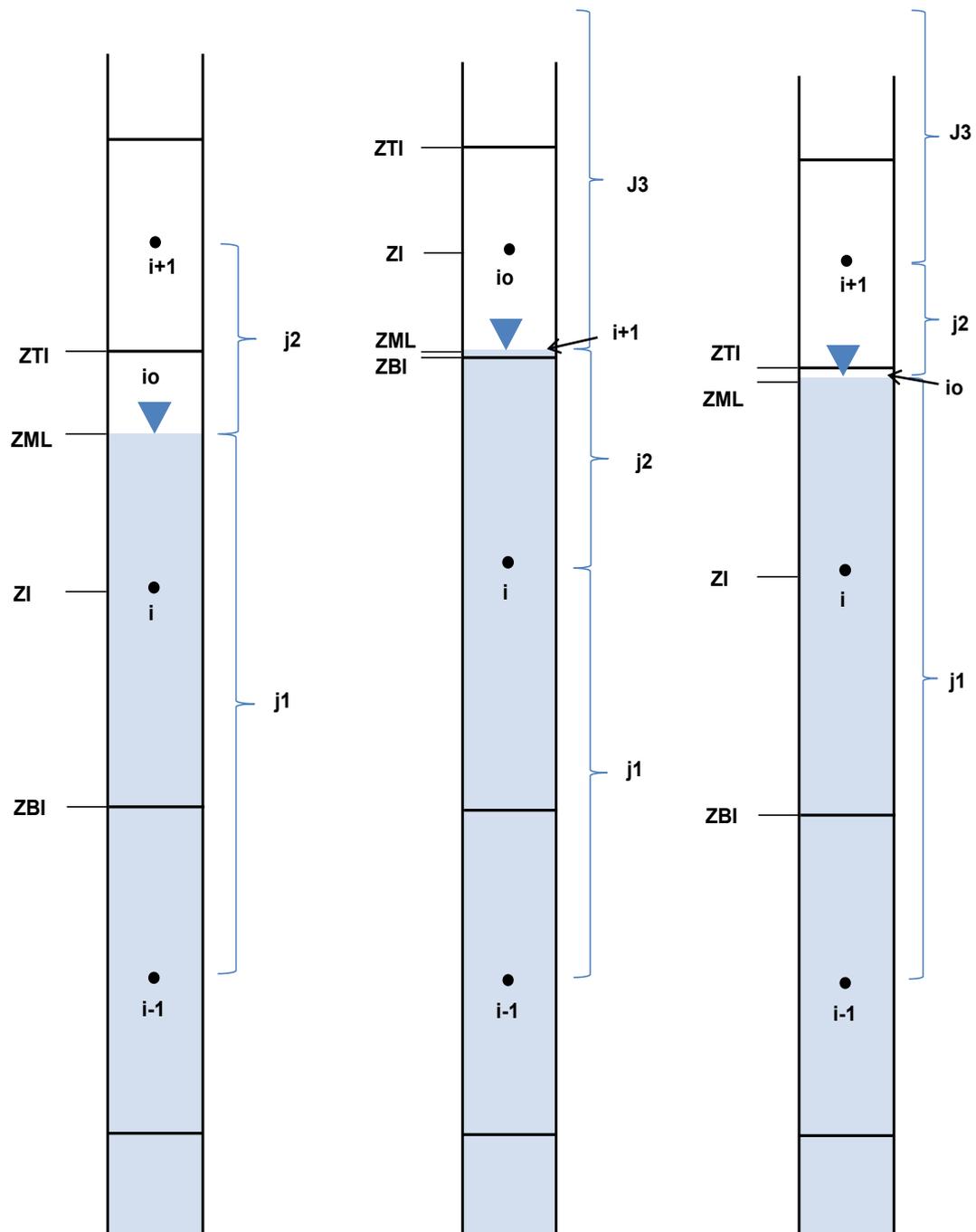
Bei Verwendung des 5-Gleichungsmodells mit einer gemeinsamen Impulsbilanz für Liquid und Dampf bietet ATHLET optional ein Gemischspiegelmodell, das für vertikale Komponenten (z. B. Druckhalter, Pools, etc.) die Simulation einer scharfen Phasengrenze zwischen Flüssigkeits- und Dampfphase erlaubt. Das Gemischspiegelmodell wurde verbessert, um beim Wandern des Gemischspiegels innerhalb eines Kontrollvolumens oder zwischen zwei Kontrollvolumen (Migration) sowohl bei schnellen Gemischspiegelbewegungen mit relevanten Reibungsdruckverlusten als auch bei beschleunigter Strömung einen glatteren Verlauf der Ergebnisse zu erreichen. Anlass waren Simulationen von Entleerungsvorgängen in der mit flüssigem Natrium gefüllten Versuchsanlage KASOLA /HER13/. Anders als erwartet traten dabei deutliche Störungen des eigentlich glatten Druckverlaufs auf. Grund hierfür waren Vernachlässigungen in den Impulsgleichungen der Strömungsleitungen nahe am Gemischspiegel. Durch detailliertere Berücksichtigung der Lage des Gemischspiegels für die Impulsgleichungen im ortsdiskretisierten Simulationsmodell konnten die Simulationsergebnisse deutlich verbessert werden /LER14/.

Jedes Kontrollvolumen (KV), in dem sich ein Gemischspiegel (ML) befindet, wird in zwei Teilvolumen aufgeteilt, für die die Massen- und die Energiebilanzen getrennt ge-

löst werden. Das Teil-KV unterhalb des MLs (Ausdehnung von *ZBI* bis *ZML*) behält seinen KV-Index, während das Teil-KV oberhalb (Ausdehnung von *ZML* bis *ZTI*) den Index *io* erhält (Abb. 2.9, links). Um den ML über weitere Strecken verfolgen zu können, werden sog. Gemischspiegelpfade (ML Tracks) definiert, die innerhalb eines Thermofluidobjektes (TFO) aus normalen (homogenen) KVs und maximal einem ML-KV bestehen. Innerhalb eines Gemischspiegelpfades kann der Gemischspiegel von einem KV in das darunter oder darüber liegende KV wandern. Auch an den TFO-Rändern ist ein Übersetzen des MLs in das darüber oder darunter liegende Nachbar-TFO möglich.

Anders als beim homogenen KV wird der Druck im ML-KV auf Höhe der Gemischspiegeloberfläche (*ZML*) und nicht im KV-Schwerpunkt (*ZI*) bestimmt. Der Geltungsbereich der beiden am ML-KV oben und unten anschließenden Leitungen erstreckt sich damit vom ML bis zum Mittelpunkt der Nachbarzone. Die Längen der Leitungen ändern sich demzufolge mit der Bewegung des MLs. Dadurch ist eine Anpassung folgender Terme der Impulsgleichung erforderlich: hydrostatischer Druck, Reibungsverluste, Trägheitsterm. Da Gemischspiegel bisher vor allem in großen Behältern mit nur geringen Reibungsverlusten sowie bei mäßiger Dynamik der Strömung simuliert worden sind, wurde bislang lediglich die hydrostatische Druckdifferenz der angrenzenden Leitungen der aktuellen Höhenlage des MLs angepasst.

Um in der Programmausgabe (Print- und Plot-Daten) Druckverläufe zu erhalten, die auch beim Migrieren des MLs zwischen zwei KVs stetig bleiben, muss der auszugehende Druck aus dem Druck am ML in den Druck im KV-Mittelpunkt umgerechnet werden. Auch hier wurde bislang nur hinsichtlich des hydrostatischen Drucks korrigiert.



**Abb. 2.9** Gemischspiegelpfad in ATHLET

### 2.2.1 Verbesserung der Impulsgleichung

Die Massenstrom-Zeitableitung im ATHLET 5-Gleichungsmodell wird berechnet durch

$$\frac{dG}{dt} = \frac{1}{DSA_j} (p_{i1} - p_{i2} + DPFR_j + DPGEO + \dots)$$

Dabei ist

$p$  Druck in den benachbarten KV's  $i_1$  und  $i_2$  (Pa)

$DSAJ$  Trägheitsterm der gesamten Leitung  $\int \frac{ds}{A}$  (1/m)

$DPFRJ$  Reibungsdruckverlust der gesamten Leitung (Pa)

$DPGEO$  geodätische Druckdifferenz entlang der gesamten Leitung (Pa)

Sowohl der Trägheitsterm als auch der Reibungsverlustkoeffizient werden in ATHLET getrennt für die beiden Halbleitungen bestimmt. Die Halbleitungen erstrecken sich vom linken KV-Mittelpunkt bis zur Leitungsmitte, und von der Leitungsmitte bis zum rechten KV-Mittelpunkt, sind also unabhängig von der aktuellen Position des MLs.  $FSALJ$  und  $FZLJ$  geben den Anteil der linken Halbleitung am gesamten Trägheits- bzw. Reibungsdruckverlustterm an.

### Anpassung des Trägheitsterms

Für die links in Abb. 2.9 dargestellte Situation werden die Trägheitsterme der Leitungen  $j1$  und  $j2$  nun unter Berücksichtigung der aktuellen ML-Höhe berechnet:

Leitung  $j1$ ; Korrektur der rechten Halbleitung:

$$DSAJ^* = DSAJ \left( FSALJ + (1 - FSALJ) \cdot \frac{ZML - ZBI}{ZI - ZBI} \right)$$

Leitung  $j2$ ; Korrektur der linken Halbleitung:

$$DSAJ^* = DSAJ \left( FSALJ \cdot \frac{ZTI - ZML}{ZTI - ZI} + (1 - FSALJ) \right)$$

Die Trägheitsterme gelten für den Gesamtmassenstrom, also für die gesamte Leitung zwischen linkem KV und Position des MLs.

### Anpassung des Reibungsdruckverlustkoeffizienten

Im Gegensatz zum Trägheitsterm wird der Reibungsdruckverlust einer Leitung zunächst separat für die beiden Halbleitungen bestimmt, wobei die Fluidzustände des linken bzw. rechten KV's herangezogen werden. Deren Summe bildet dann den gesamten Reibungsdruckverlust. Man muss also die Reibungsdruckverlustkoeffizienten der beiden Halbleitungen in Abhängigkeit von der ML-Lage bestimmen.

Für die links in Abb. 2.9 dargestellte Situation werden die Reibungsdruckverlustkoeffizienten und die Reibungsdruckverluste der Leitungen j1 und j2 wie folgt berechnet:

Leitung j1, linke Halbleitung:

$$RLDF2_{j1,l} = FZLJ \cdot RLDF2$$

$$DPFRJ_{j1,l} = f(RLDF2_{j1,l}, Fluid_{i-1})$$

Leitung j1, rechte Halbleitung:

$$RLDF2_{j1,r} = (1 - FZLJ) RLDF2 \left( \frac{ZML - ZBI}{ZI - ZBI} \right)$$

$$DPFRJ_{j1,r} = f(RLDF2_{j1,r}, Fluid_i)$$

Leitung j1, gesamter Reibungsdruckverlust:

$$DPFRJ_{j1} = DPFRJ_{j1,l} + DPFRJ_{j1,r}$$

Leitung j2, linke Halbleitung:

$$RLDF2_{j2,l} = FZLJ \cdot RLDF2 \left( \frac{ZTI - ZML}{ZTI - ZI} \right)$$

$$DPFRJ_{j2,l} = f(RLDF2_{j2,l}, Fluid_{i0})$$

Leitung j2, rechte Halbleitung:

$$RLDF2_{j2,r} = (1 - FZLJ) RLDF2$$

$$DPFRJ_{j2,r} = f(RLDF2_{j2,r}, Fluid_{i+1})$$

Leitung j2, gesamter Reibungsdruckverlust:

$$DPFRJ_{j2} = DPFRJ_{j2,l} + DPFRJ_{j2,r}$$

### 2.2.2 Verbesserung der Berechnung des sprungfreien KV-Drucks der Programmausgabe

Wie schon erwähnt, wird im ML-KV die Lösungsvariable KV-Druck nicht im KV-Mittelpunkt sondern am ML berechnet. Um Sprünge im Druckverlauf beim Umsetzen des MLs in der Programmausgabe zu vermeiden, wird unmittelbar vor der Ausgabe der Druck am ML auf den KV-Mittelpunkt umgerechnet. Bisher wurde dazu nur eine Höhenkorrektur durchgeführt, um den hydrostatischen Druck zwischen ML und KV-Mittelpunkt zu berücksichtigen.

Diese Korrektur wurde nun um die Beiträge aus dem Trägheitsterm und dem Reibungsdruckverlust ergänzt. Herangezogen wird dazu nur die Leitung, in deren Gültigkeitsbereich die Strecke zwischen ML und KV-Mittelpunkt liegt. In Abb. 2.9 ist das im linken Bild die Leitung j1, im mittleren Bild die Leitung j3.

### Berücksichtigung des Trägheitsterms

Im Unterprogramm, das die Massenstrom-Zeit ableitung für das 5-Gleichungsmodell berechnet, wird die ML-bedingte Veränderung des Trägheitsterms in dem globalen Array DSAMLJ für jede Leitung abgelegt. Damit wird damit für beschleunigte Strömung ein Beitrag zur Druckkorrektur bestimmt:

$$DSAML = DSAJ^* - DSAJ$$

$$DPACC = DSAMLJ \frac{dG}{dt}$$

### Berücksichtigung des Reibungsverlustes

Die Berücksichtigung der Reibungsverluste ist etwas komplizierter, da diese getrennt für die beiden Halbleitungen mit unterschiedlichen Fluidzuständen berechnet werden. Es wird der für die Druckkorrektur relevante Anteil des gesamten Reibungsdruckverlustes rekonstruiert. Die Vorgehensweise wird im Folgenden für das in Abb. 2.9 links dargestellte Szenario beschrieben. Es geht dabei darum, den Reibungsdruckverlust zwischen ZI um ZML zu ermitteln.

ZML > ZI:

Der gesamte, zum Zeitpunkt der Druckkorrektur bekannte Reibungsdruckverlust der Leitung j1 ist:

$$DPFRJ = DPFR_{i-1 \rightarrow i} + (1 - FZLJ) \cdot DPFR_{i-1 \rightarrow i} \frac{ZML - ZI}{ZTI - ZI}$$

Der zwischen i-1 und i auftretende Reibungsdruckverlust ergibt sich somit zu

$$DPFR_{i-1 \rightarrow i} = \frac{DPFRJ}{1 + (1 - FZLJ) \frac{ZML - ZI}{ZTI - ZI}}$$

und der Beitrag zur Druckkorrektur zu

$$DPFRIC = DPFRJ - DPFR_{i-1 \rightarrow i}$$

Der Druck im KV-Mittelpunkt ist dann:

$$p_{KV} = p_{ML} + DP_{GEO} + DP_{FRIC} - DP_{ACC}$$

mit  $DP_{GEO} = EB \cdot ROF_i(ZML - ZI)$  (bisher schon berücksichtigt).

EB Erdbeschleunigung ( $m/s^2$ )

ROF Kühlmitteldichte ( $kg/m^3$ )

$ZML < ZI$ :

Der gesamte, zum Zeitpunkt der Druckkorrektur bekannte Reibungsdruckverlust der Leitung j2 ist:

$$DP_{FRJ} = DP_{FR_{i-1 \rightarrow i}} + FZLJ \cdot DP_{FR_{i \rightarrow i+1}} \frac{ZML - ZI}{ZTI - ZI}$$

Der zwischen i und i+1 auftretende Reibungsdruckverlust ergibt sich somit zu

$$DP_{FR_{i \rightarrow i+1}} = \frac{DP_{FRJ}}{1 + FZLJ \frac{ZML - ZI}{ZTI - ZI}}$$

und der Beitrag zur Druckkorrektur zu

$$DP_{FRIC} = DP_{FRJ} - DP_{FR_{i1 \rightarrow i+1}}$$

Der Druck im KV-Mittelpunkt ist dann:

$$p_{KV} = p_{ML} + DP_{GEO} + DP_{FRIC} - DP_{ACC}$$

mit  $DP_{GEO} = EB \cdot ROF_{i0}(ZML - ZI)$  (bisher schon berücksichtigt).

### 2.2.3 Verbesserung der Druckberechnung beim Migrieren des MLs

Beim Umsetzen des MLs müssen die Drücke der davon betroffenen KVs korrigiert werden. Für das KV, das der ML verlässt – entweder beim Migrieren des MLs oder beim Verschwinden des MLs am oberen oder unteren Ende eines ML-Tracks – muss aus dem bisherigen Druck am ML der Druck im KV-Mittelpunkt berechnet werden. Dies geschieht nach der im Kapitel 2.2.2 beschriebenen Methode, also nun auch mit Berücksichtigung des Trägheitsterms und der Reibungsverluste.

Für das KV, in das der ML eintritt – entweder beim Migrieren des MLs oder beim Start eines neuen MLs am oberen oder unteren Ende eines ML-Tracks – muss aus dem bisherigen Druck im KV-Mittelpunkt der Druck am ML berechnet werden. Dies geschieht in umgekehrter Weise zu der im Kapitel 2.2.2 beschriebenen Methode.

#### 2.2.4 Simulationsfälle

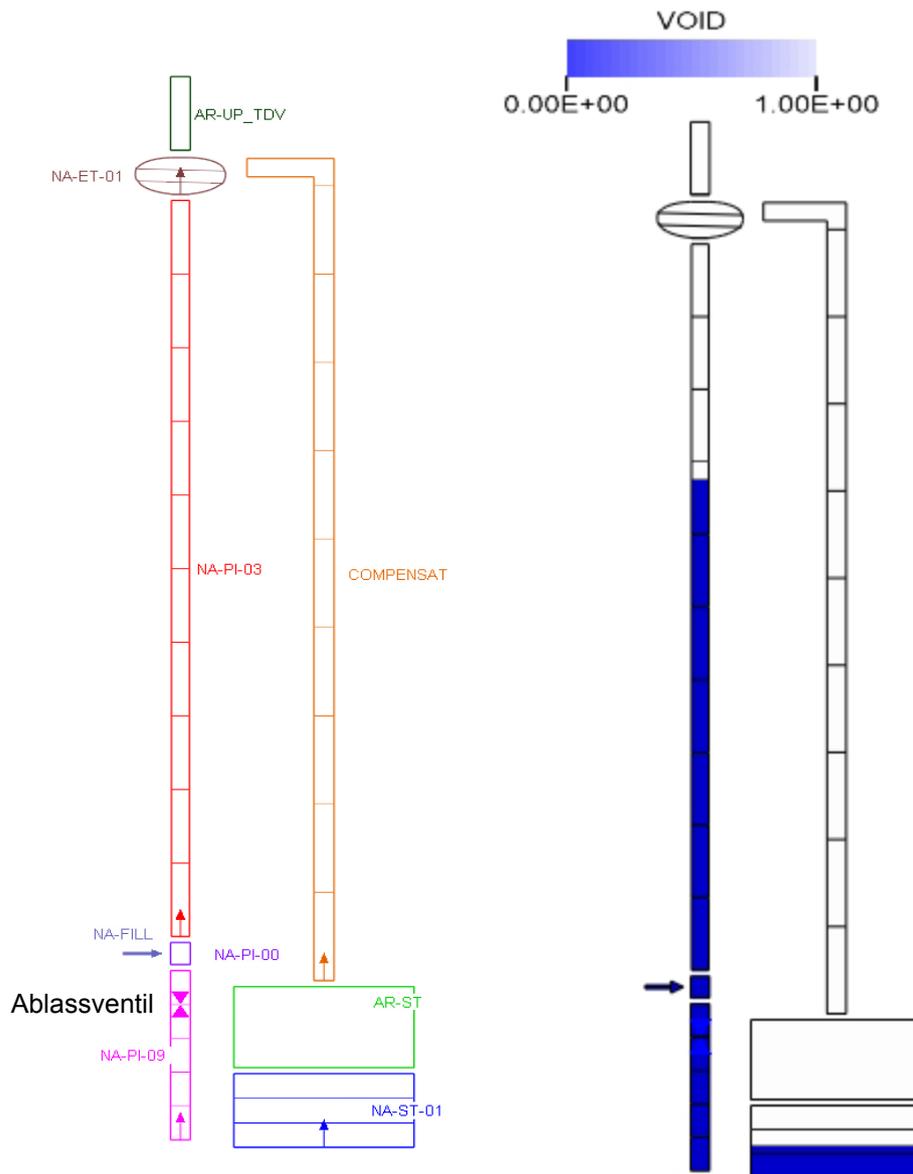
Das Simulationsbeispiel ist in Abb. 2.10 dargestellt. Es werden zwei Vorgänge simuliert:

- das Entleeren der weitgehend mit flüssigem Natrium gefüllten Anlage, sowie
- das Befüllen der weitgehend leeren (mit Stickstoff gefüllten) Anlage.

Beim Entleeren sind die TFO NA-PI-09, -00 und -03 vollständig, der Ausgleichsbehälter NA-ET-01 sowie der Auffangbehälter NA-ST-01 teilweise mit flüssigem Natrium gefüllt. Die übrigen Teile der Anlage sind mit gasförmigem Stickstoff bei etwa 2 bar gefüllt. Über das Pipe COMPENSAT findet beim Entleeren der Druckausgleich zwischen Auffang- und Ausgleichsbehälter statt, AR-UP\_TDV prägt als *time dependent volume* den Druck auf. Zum Entleeren wird das Ablassventil geöffnet, so dass das Natrium schwerkraftgetrieben in den Auffangbehälter abströmt.

Das Befüllen der zunächst leeren Anlage erfolgt über das Fill NA-FILL bei geschlossenem Ablassventil. (Die in der rechten Hälfte von Abb. 2.10 dargestellten TFO sind also bedeutungslos.)

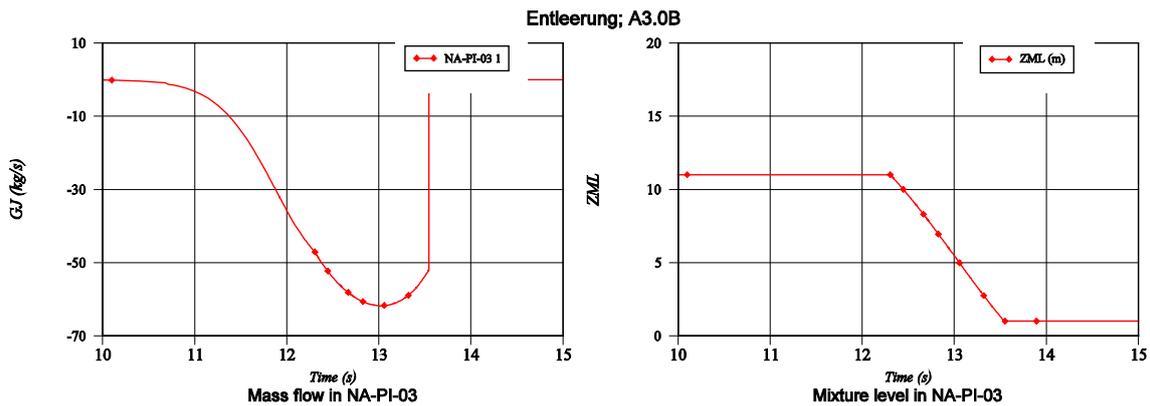
In den TFO NA-PI-03, NA-ET-01 und NA-ST-01 wird das ML-Modell eingesetzt. Untersucht wird im Folgenden das Verhalten des MLs im Pipe NA-PI-03. Dieses ist 10 m lang und besteht aus 10 KV und 11 Leitungen. Die in den Legenden der nachfolgenden Plots verwendeten Indizes sind Pipe-intern in positiver Strömungsrichtung von links nach rechts durchnummeriert (Pfeile in den Pipes von Abb. 2.10 weisen von links nach rechts); #1 ist das erste Netzwerkelement (KV bzw. Leitung) am linken (unteren Rand) des Pipes.



**Abb. 2.10** ATHLET-Nodalisierung zum Testen der Verbesserungen des Gemischspiegelmodells

### Entleeren der Anlage

Zu Beginn der Rechnung war der Ausgleichsbehälter etwa halb mit flüssigem Natrium gefüllt. Nach dem Öffnen des Ablassventils bei 10 s strömt das Natrium schwerkraftgetrieben nach unten in den Auffangbehälter. Bei etwa 12,3 s ist der Ausgleichsbehälter leer und der Füllstand in NA-PI-03 sinkt sehr schnell ab (Abb. 2.11).

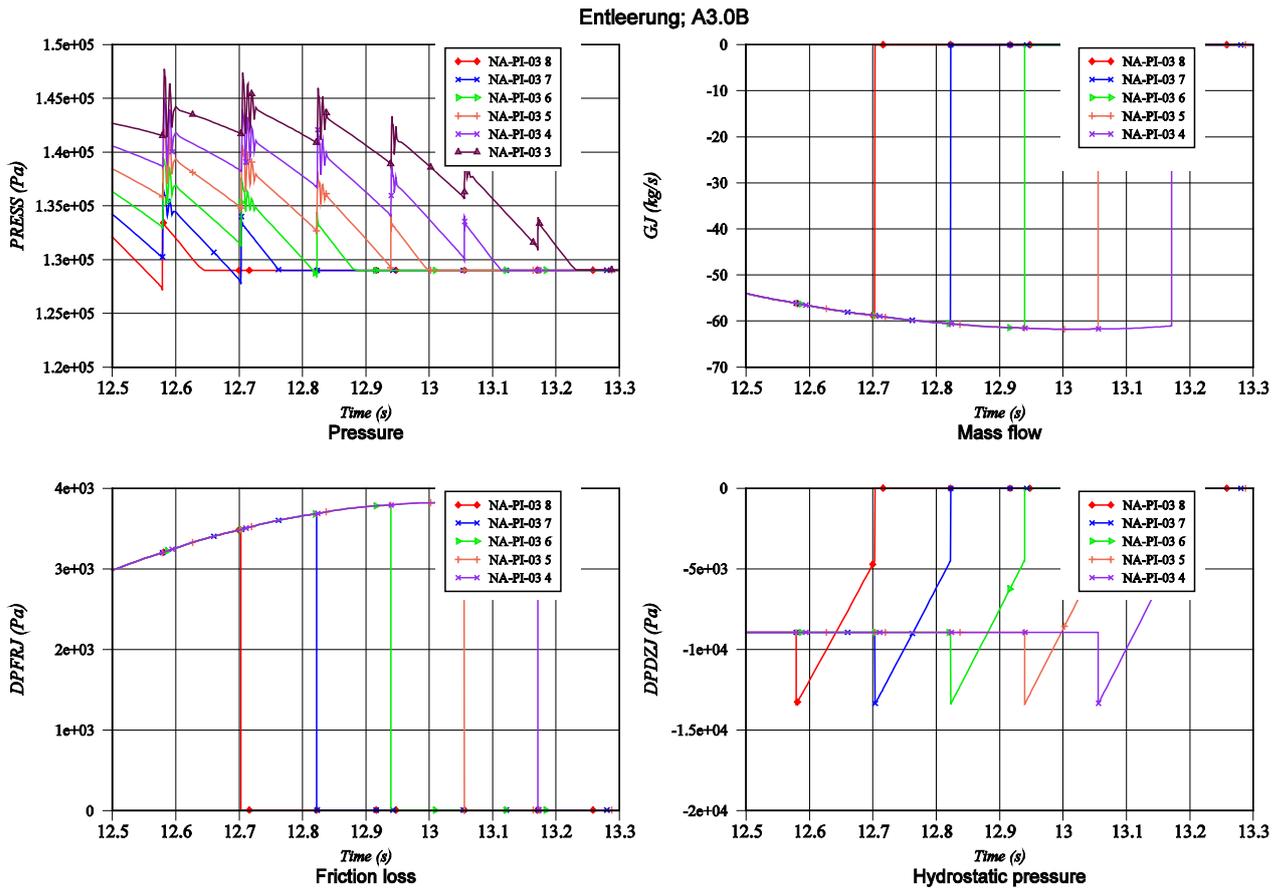


**Abb. 2.11** Massenstrom und Füllstand beim Entleeren

Die folgenden Plots (Abb. 2.12) zeigen die Ergebnisse vor den hier beschriebenen Modellverbesserungen. Die Druckverläufe in den KV unterhalb des MLs weisen Sprünge und Oszillationen auf, die vom Umsetzen des MLs hervorgerufen werden. Oben rechts werden Massenströme dargestellt, die modellkonform starke Sprünge aufweisen, da beim Freilegen einer Leitung durch den ML schlagartig von Wasser- zur Dampfströmung übergegangen wird. Die hydrostatischen Druckdifferenzen der Leitungen (unten rechts), die ja bereits korrekt modelliert werden, tragen dem Umstand Rechnung, dass der Geltungsbereich einer Leitung sich mit der Bewegung des MLs ändert. Beim Umsetzen des MLs – z. B. bei 12,7 s – „verliert“ eine Leitung den halben Term (rote Kurve); er wird zeitgleich von der darunter liegende Leitung „übernommen“ (blaue Kurve). Beide Leitungen ergänzen sich somit hinsichtlich der hydrostatischen Druckdifferenzen.

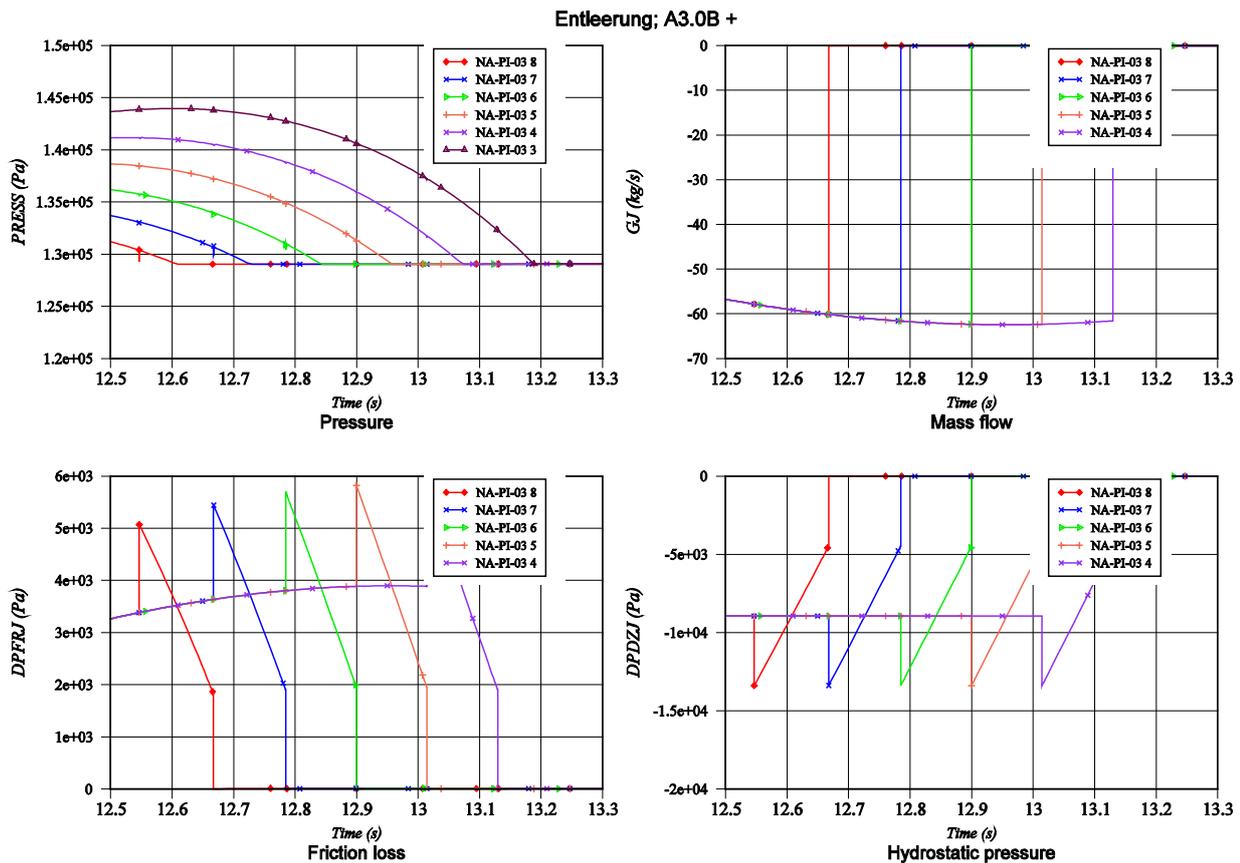
Die Reibungsverluste (unten links) verhalten sich jedoch anders. Hier wird der Einfluss des MLs nicht erfasst, so dass es zu einer schlagartigen Verringerung der (gesamten) Reibungsverluste kommt, wenn von Wasser- auf Gasströmung gewechselt wird.

Aus dem Massenstrom (oben rechts) ist auch ersichtlich, dass sich die Strömung bei 12,7 s noch stark beschleunigt, was ebenso zum unstetigen Verlauf der Drücke beiträgt.



**Abb. 2.12** Rechenergebnisse zum Entleeren vor der Modellverbesserung

Nach den Modellverbesserungen weisen die Drücke einen nahezu ungestörten Verlauf auf (Abb. 2.13). Der oben für die hydrostatischen Drücke beschriebene Mechanismus zur Erfassung des ML-Einflusses ist nun auch für die Reibungsdruckverlusten realisiert und im Plot unten links zu beobachten.



**Abb. 2.13** Rechenergebnisse zum Entleeren nach der Modellverbesserung

### Befüllen der Anlage

Zur Überprüfung der Modellverbesserungen bei steigendem ML wurden auch Rechnungen zum Befüllen der Anlage durchgeführt. Bei geschlossenem Ablassventil wird bei 10 s das Fill NA-FILL hochgefahren. Das nahezu leere (mit Gas gefüllte) Pipe NA-PI-03 wird aufgefüllt (Abb. 2.14). Der Fill-Massenstrom wird über eine GCSM-Tabelle vorgegeben.

Überraschenderweise zeigten die Druckverläufe wieder deutliche Störungen (Abb. 2.15, o. I.). Die Befürchtung, dass die Modellverbesserungen für einen ansteigenden ML zumindest unzureichend wären, bewahrheitete sich jedoch nicht. Bei genauerer Betrachtung der Ergebnisse zeigte sich, dass die Störungen genau an den Eckpunkten des Polygons auftraten, das den Verlauf des Fill-Massenstroms bestimmt. Als Grund wurde vermutet, dass die in ATHLET verwendete lineare Interpolation zwar zu einem stetigen Verlauf des Fill-Massenstroms führt, dieser aber nicht stetig differenzierbar ist und damit bei diesem an sich glatten Verlauf des hydraulischen Prozesses numerische Störungen auslöst.

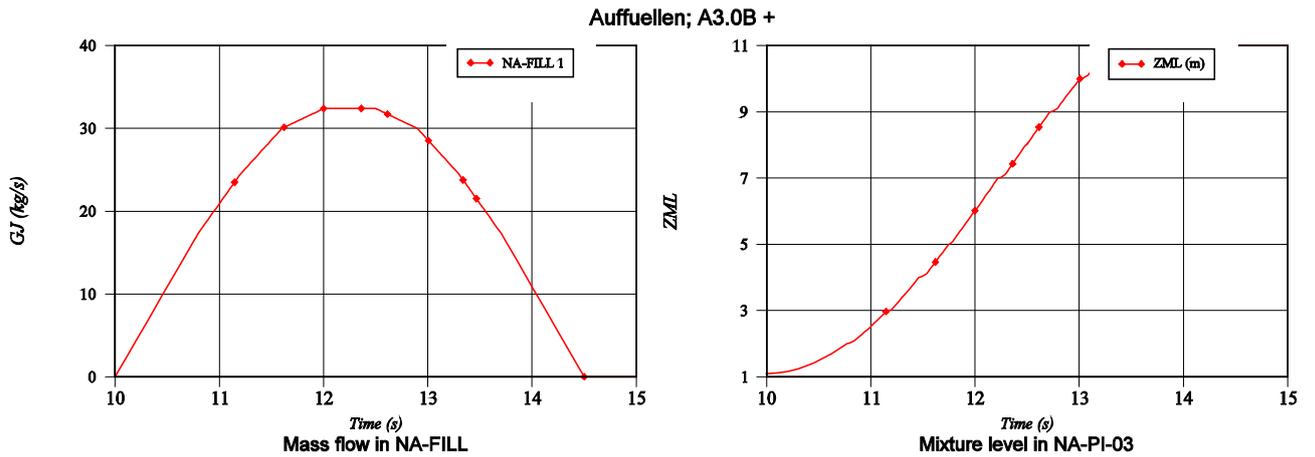


Abb. 2.14 Massenstrom und Füllstand beim Befüllen

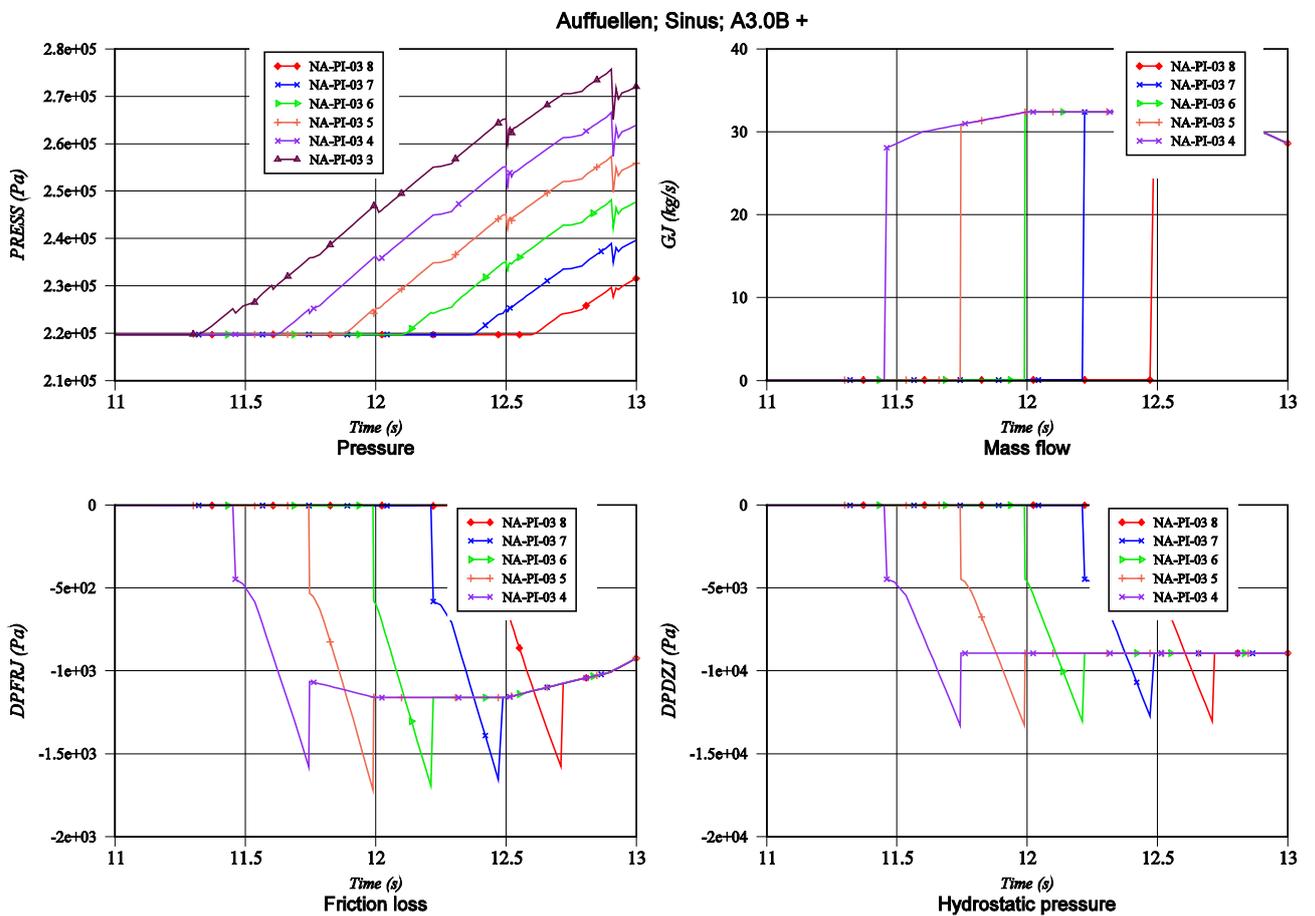


Abb. 2.15 Rechenergebnisse zum Befüllen nach der Modellverbesserung (Fill als Tabelle)

Deshalb wurde in einer weiteren Rechnung ein ähnlicher Fill-Massenstrom mit Hilfe des GCSM Sinus-Generators erzeugt, der stetige *und* stetig differenzierbare Werte liefert (Abb. 2.16). Die damit berechneten Druckverläufe haben einen nahezu glatten

Verlauf (Abb. 2.17). Zum Vergleich ist in Abb. 2.18 die gleiche Rechnung mit der nicht modifizierten ATHLET Version dargestellt.

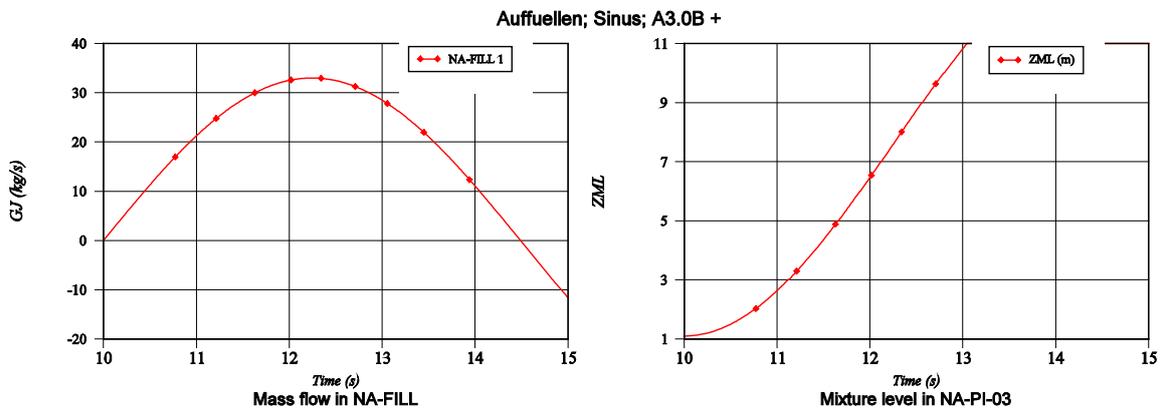


Abb. 2.16 Massenstrom (Sinus) und Füllstand beim Befüllen

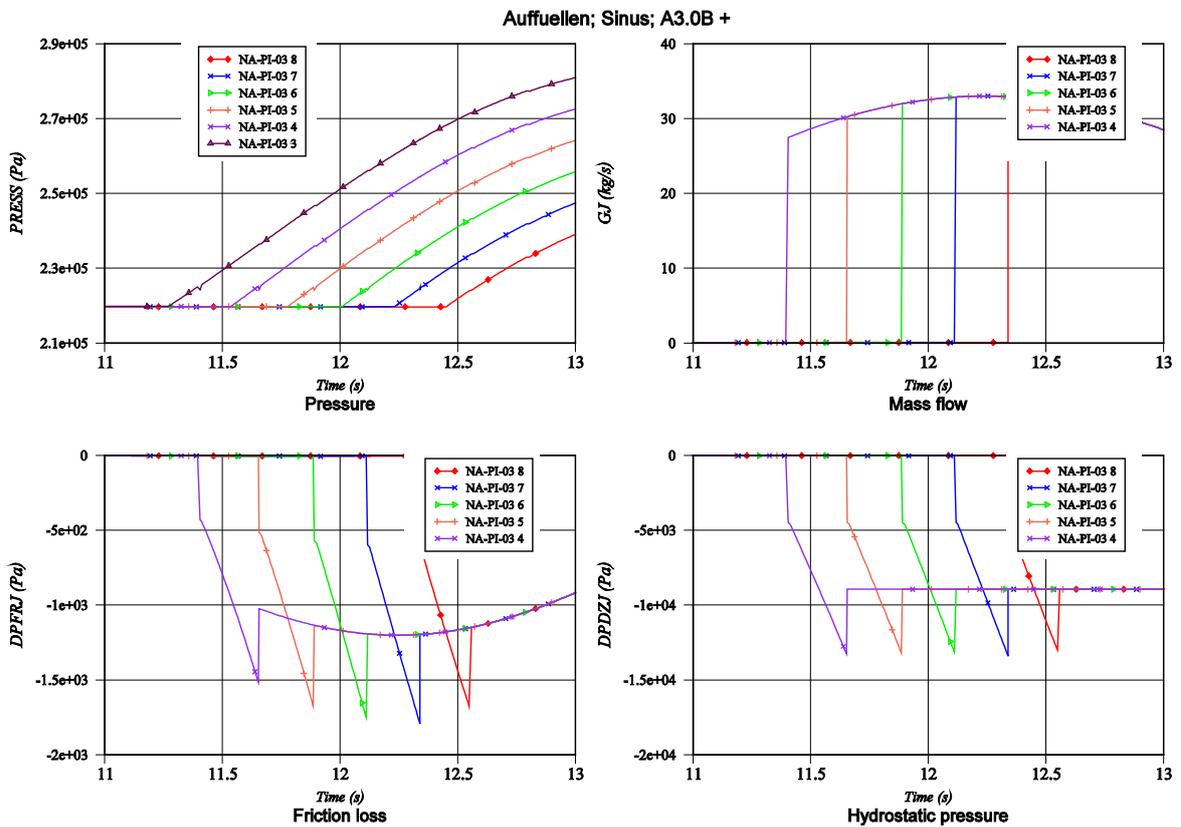
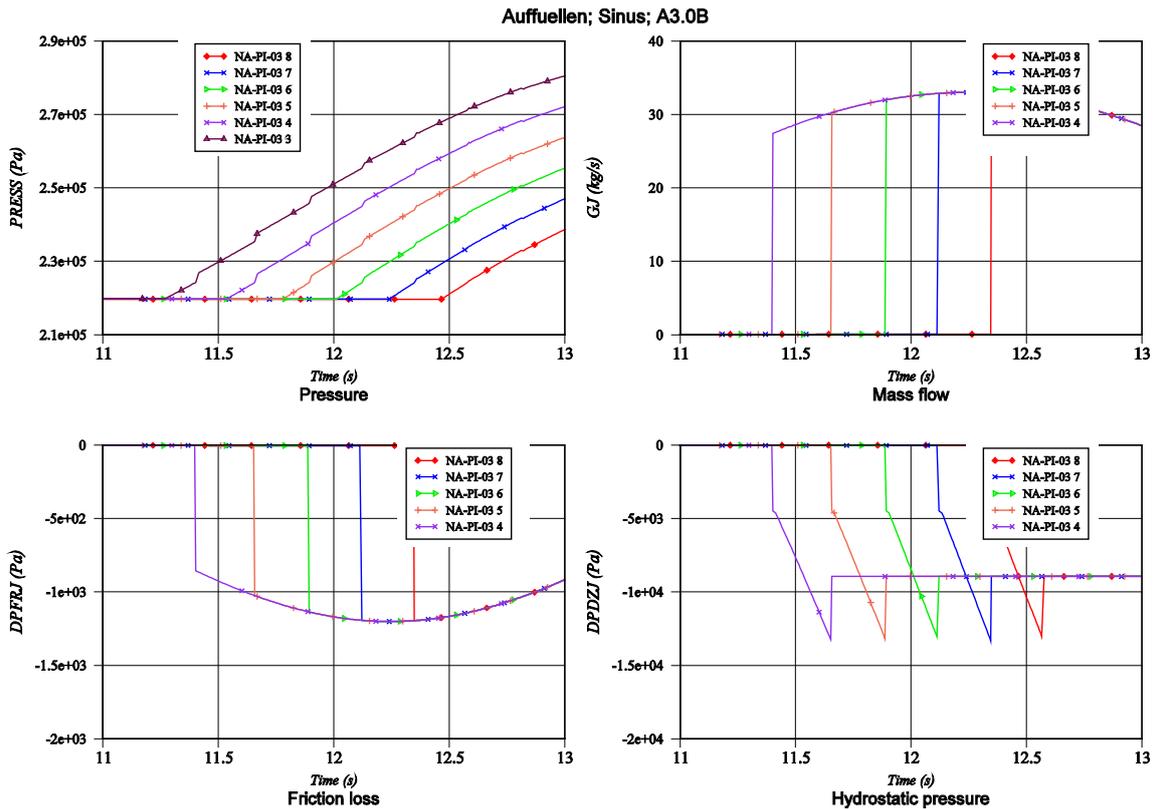


Abb. 2.17 Rechenergebnisse zum Befüllen nach der Modellverbesserung (Fill als Sinus)



**Abb. 2.18** Rechenergebnisse zum Befüllen vor der Modellverbesserung (Fill als Tabelle)

## 2.2.5 Zusammenfassung

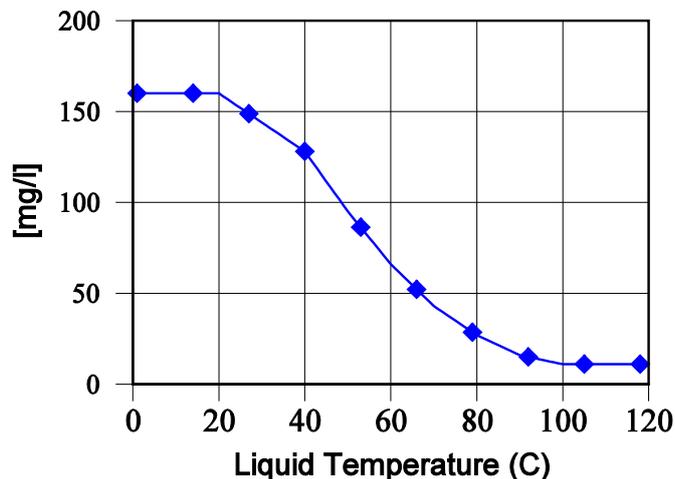
Das ATHLET Gemischspiegelmodell war bisher bereits in der Lage, die Gemischspiegelbewegung bei geringer Wandreibung und moderater Dynamik der Strömung physikalisch und mit der erforderlichen numerischen Stabilität zu beschreiben. Die hier durchgeführten Modelländerungen verbessern die Simulation insbesondere bei höherer Wandreibung und ausgeprägter Dynamik. Hinsichtlich der bisher üblichen Anwendungen des Gemischspiegelmodells z. B. für große Behälter wird ihr Einfluss i. d. R. gering sein.

## 2.3 Transport und Ablagerung von Zinkborat

Bei einem Kühlmittelverluststörfall wird im Sumpfbetrieb Kühlmittel aus dem Sicherheitsbehälter zurück in den Primärkreis gepumpt, um den Kühlmittelverlust zu kompensieren und die Kühlung des Reaktorkerns aufrecht zu erhalten. Das aus dem Leck ausgeströmte borhaltige Wasser kann aus verzinkten Anlagenteilen im Sicherheitsbehälter Zink lösen, wodurch im Kühlmittel gelöstes Zinkborat entsteht, das dann in den

Primärkreis gelangt. Auf Grund der mit steigender Kühlmitteltemperatur abnehmenden Löslichkeit im Wasser (Abb. 2.19) kann es im Reaktorkern beim Aufheizen des Wassers zu Ablagerungen an den Brennstäben kommen, wodurch möglicherweise die Kühlmittelströmung beeinträchtigt wird /ZIT14/.

Um den Transport und die Ablagerung von Zinkborat mit ATHLET simulieren zu können, wurde das Bortransportmodell erweitert. Der ATHLET-Anwender kann nun über die Programmeingabe bestimmen, ob Bor *oder* Zinkborat modelliert werden soll. Die maximale Löslichkeit von Zinkborat in Wasser /ZIT14/ wurde im Programm tabellarisch als Funktion der Wassertemperatur bereitgestellt (Abb. 2.19). Die abgelagerte Zinkboratmasse wurde in die Liste der GCSM Prozesssignale aufgenommen. Mit Hilfe des Clogging-Modells kann dann der erhöhte Strömungswiderstand in der Kernmodellierung berücksichtigt werden.



**Abb. 2.19** Maximale Löslichkeit von Zinkborat in Wasser

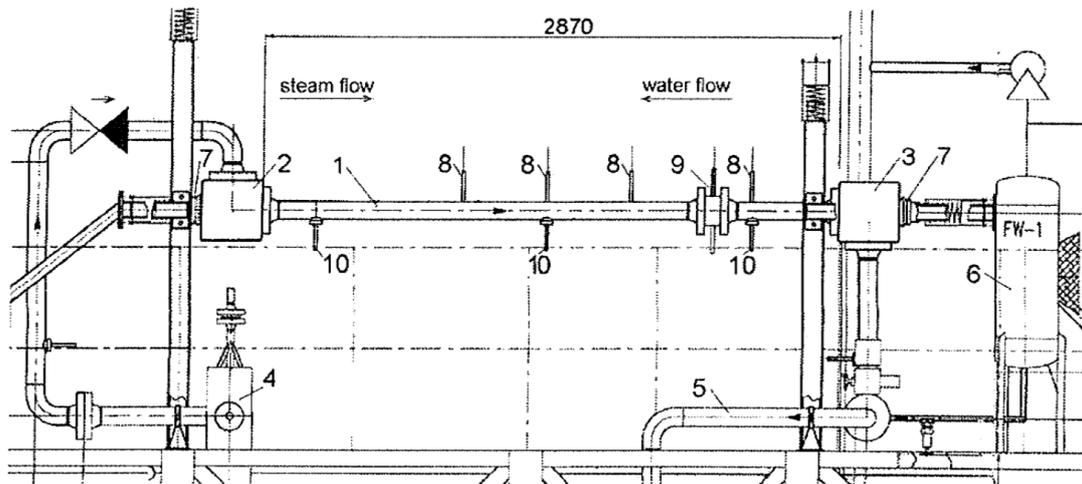
#### **2.4 Transportgleichung für die Zwischenphasenfläche – Massen- und Wärmeübergang bei kondensationsinduzierten Wasserschlägen**

In ATHLET ist eine Transportgleichung für die Simulation der Zwischenphasenflächenkonzentration (IACTE aus dem Englischen **I**nterfacial **A**rea **C**oncentration **T**ransport **E**quation) implementiert. Das Modell wurde bisher überwiegend anhand vertikaler, disperser Zweiphasenströmungen validiert. Die dynamische Verfolgung der Zwischenphasenflächenkonzentration durch das IACTE-Modell ermöglicht die mechanistische Modellierung von Strömungsbildern. Die Zwischenphasenflächenkonzentration wird hierbei auf Basis dynamischer und turbulenter Größen ermittelt. Dadurch ist ATHLET in

der Lage, sich von der Verwendung statischer Strömungskarten, die typischerweise in Systemcodes Anwendung finden, zu lösen und hochdynamische Vorgänge realitätsnah zu beschreiben. Im Rahmen der aktuellen Entwicklungsarbeiten wurde das Modell für den Einsatz für horizontale Zweiphasenströmungen mit Kontaktkondensation erweitert.

Das IACTE-Modell eignet sich zusammen mit einem neuen, an der Technischen Universität München entwickelten Wärmeübergangmodell besonders für die Nachrechnung von horizontalen Zweiphasenströmungen mit Kontaktkondensation /CEU14/. Unter bestimmten Bedingungen kann die Kontaktkondensation bei horizontalen Zweiphasenströmungen als treibende Kraft für kondensationsinduzierte Druckstöße (*Condensation Induced Water Hammer*, CIWH) dienen. Durch die mechanistische Modellierung des IACTE-Modells gelingt es nun, die dem Druckstoß vorangehenden hochtransienten Vorgänge und charakteristischen Strömungsbilder realistisch abzubilden. Hierbei liefert das IACTE-Modell die vom Kontaktkondensationsmodell benötigte Zwischenphasenfläche, um somit letztlich die Quell- und Senkenterme der gelösten Erhaltungsgleichungen für Masse und Energie geeignet berechnen zu können.

Das nachfolgend exemplarisch beschriebene Experiment wurde an der PMK2-Integralversuchsanlage durchgeführt. Die Anlage wurde am KFKI Institut in Budapest, Ungarn zur Untersuchung komplexer horizontaler Zweiphasenströmungen errichtet. An der Versuchsanlage wurden im Laufe der Jahre mehrere grundsätzliche Änderungen durchgeführt. Abb. 2.20 zeigt die schematische Darstellung der Versuchsanlage zum Zeitpunkt der Durchführung der Kondensationsschlagversuchsserie. Die Versuche zu kondensationsinduzierten Wasserschlägen erfolgten im Rahmen des WAHALoads Projekts. Dabei wurden insgesamt 35 Versuche durchgeführt, wobei es in 26 zu einem kondensationsinduzierten Druckstoß kam /PRA04/.



**Abb. 2.20** Schematische Darstellung der PMK2-Integralversuchsanlage /PRA08/

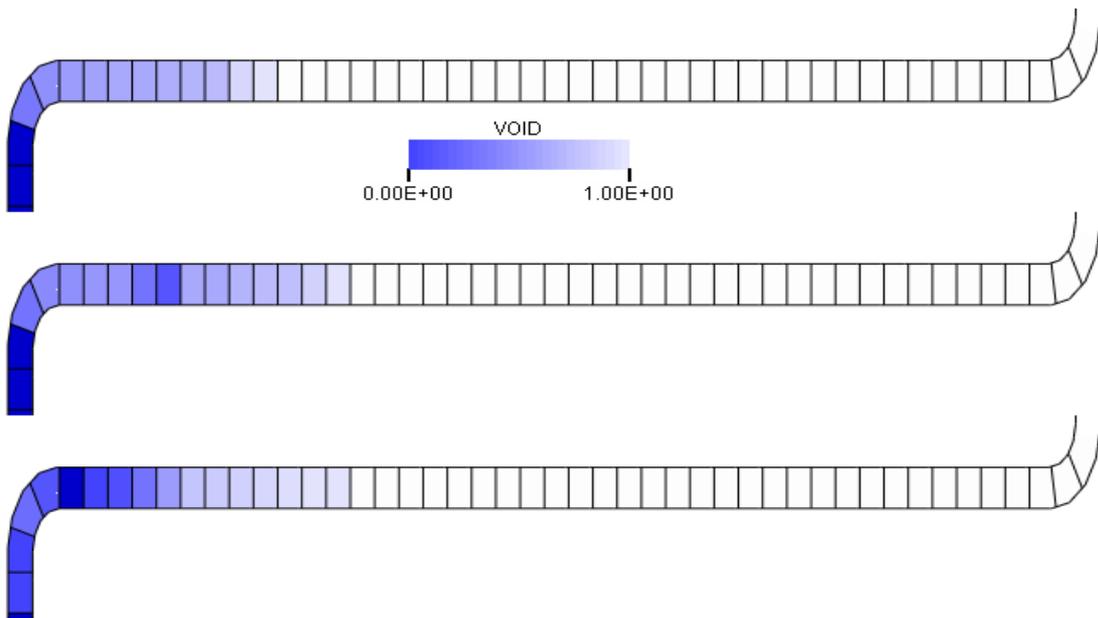
Die Versuchsanlage wurde mit dem Ziel erbaut, Messdaten mit genügend hoher Auflösung zur CFD-Code Validierung zu liefern. Dementsprechend enthält die messtechnische Ausstattung der horizontalen Testsektion folgende Sensortypen: vier Sensoren, die gleichzeitig den Gasgehalt und die Temperatur (VT) erfassen (Nummer 8 in Abb. 2.20), drei Druckmesssensoren (Nummer 10 in Abb. 2.20) und ein Gittersensor (Nummer 9 in Abb. 2.20). Die Messsensoren sind in Strömungsrichtung des eingespeisten Wassers nummeriert. In Abb. 2.20 folgt die Nummerierung der Richtung von rechts nach links. Die Messdaten beinhalten lokale Größen wie Gasgehalt, Temperatur oder Druck und den querschnittgemittelten Gasgehalt an der Position Nummer 9. Der Gittersensor liefert zusätzlich wichtige Informationen über die Strömungsform, auch wenn die Messtechnik invasiver Natur ist und somit die Strömung beeinflusst.

Die horizontale Testsektion hat einen Innendurchmesser von 73 mm. Der Rohrbogen auf der linken Seite der Testsektion, in Abb. 2.20 als Nummer 2 gekennzeichnet, verbindet den Dampferzeuger mit der Testsektion. Der Versuchsablauf ist für die gesamte Serie gleich: unterkühltes Wasser wird aus dem Behälter Nummer 6 durch das Öffnen eines Ventils in die mit Satttdampf gefüllte Testsektion über den Rohrbogen 3 eingeleitet. Der Einspeisebehälter wird mit Hilfe eines Stickstoffpolsters unter Druck gehalten.

Der Versuch 05 wurde exemplarisch hinsichtlich der Verifikation ausgewählt. Die Anfangs- und Randbedingungen können wie folgt zusammengefasst werden: der Anfangssystemdruck der satttdampfgefüllten Testsektion beträgt 1,45 MPa, die Wassertemperatur beträgt 290K und der Wassermassenstrom 1,01 kg/s. Die Nachrechnungen wurde auf einem Rechengitter durchgeführt, das dem empfohlenen Formfaktor, gebil-

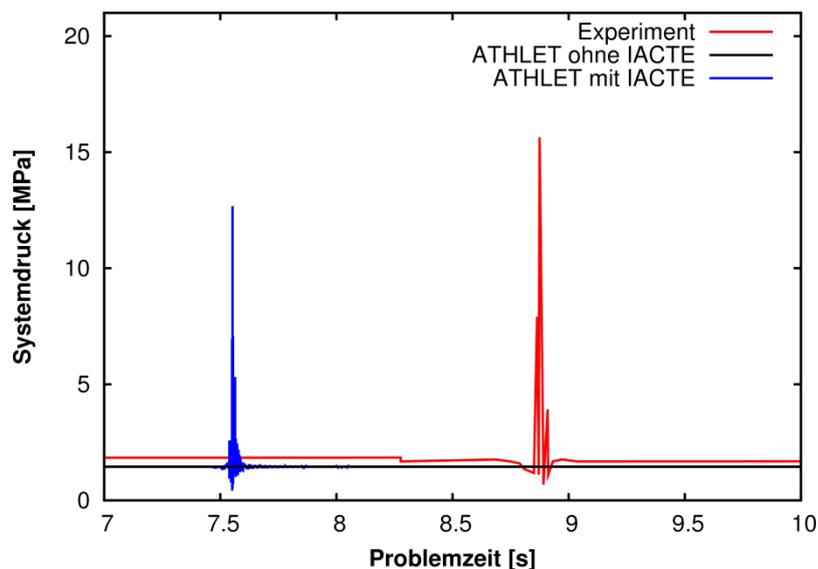
det als Verhältnis von Zellenlänge zu hydraulischen Durchmesser, von 1 entspricht /ATH12/. Der Einspeisemassenstrom wurde mit Hilfe einer FILL-Komponente modelliert. Die Verbindung zum Dampferzeuger wurde als TDV abgebildet. Im Rahmen der Versuchsdurchführung des Experiments 05 wurde ein Kondensationsschlag zum ungefähren Zeitpunkt 9s in der Größenordnung von 16 MPa gemessen. Der Kondensationsschlag entspricht somit einem zehnfachen lokalen Druckanstieg bezogen auf dem Anfangsdruck.

Die in der ATHLET-Nachrechnung mittels des IACTE-Modells simulierten Strömungsformen unmittelbar vor Bildung des Kondensationsschlags sind in Abb. 2.21 dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass die Strömung bis zum Zeitpunkt  $\sim 7,5$  s geschichtet in der Testsektion verläuft. Anschließend bildet sich eine Welle aus, die zu einem Schwall heranwächst. Abb. 2.21, Mitte, spiegelt den Schwall durch ein KV im linken horizontalen Rohrbereich wider, dessen Dampfvolumenanteil nahezu Null ist. Der Schwall schließt auf der linken Seite des Rohres eine große Dampfblase ein. Anschließend kommt es zu einer Strömungsumkehr, bei der dieser Schwall aufgrund der Kondensation der Dampfblase in Richtung des Einspeiseortes beschleunigt wird. Im späteren Strömungsverlauf kommt es immer wieder zum lokalen Übergang von einer geschichteten Strömung zu einer Schwallströmung und somit zu Einschlüssen großer Dampfblasen. Dieser Vorgang wiederholt sich, bis die Testsektion vollständig mit Wasser gefüllt ist. Ein wichtiges Merkmal des beschriebenen Strömungsverlaufs ist, dass die lokale Kondensationsrate für diese Strömungsformänderungen zuständig ist. Das heißt, dass für die erfolgreiche Nachrechnung eines solchen Experiments mechanistische Modelle für die Berechnung von Zwischenphasenfläche und Kondensationsrate zum Einsatz kommen müssen. Die eingesetzten Modelle müssen in der Lage sein, hochdynamische Strömungsformen abbilden zu können. Die dargestellten Rechnungen wurden auf Basis der ATHLET-Version 2.2A durchgeführt. Es ist beabsichtigt, die vorgenommenen Modellmodifikationen im Rahmen eines Folgevorhabens in die aktuelle ATHLET-Version zu übernehmen.



**Abb. 2.21** Repräsentative Strömungsformen im Bereich der Testsektion bei Einsatz des dynamischen IACTE-Modells in ATHLET. PMK2 Exp 05 zu den Zeitpunkten 7,0 s; 7,51 s; 7,55 s (weiß: Dampf, blau: Wasser) /CEU14/

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit dem gemessenen Druck erfolgt in Abb. 2.22. Die Messdaten sind in rot dargestellt, die Ergebnisse der ATHLET-Standardversion (ohne das IACTE-Modell) schwarz und die Ergebnisse der Nachrechnung unter Berücksichtigung der mechanistischen Modellierung der Strömungsbilder blau.



**Abb. 2.22** Systemdruckverlauf in den Simulationen und im Experiment, im Versuch PMK2 Exp05 /CEU14/

Der Druckverlauf bei der Nachrechnung ohne Berücksichtigung der dynamischen Strömungsbilder weist einen fast konstanten Wert auf. Falls das IACTE-Modell jedoch aktiviert ist, wird die für die prompte Kondensation benötigte Zwischenphasenfläche realistischer von ATHLET berechnet. Somit kommt es in dieser Simulation zu der Beschleunigung des Wasserschwalls in Richtung des Einspeiseorts (mittlere Darstellung in Abb. 2.21). Dabei wird das gesamte Wasserinventar aus der Testsektion in Richtung des Einspeiseorts gesaugt. Der Kondensationsschlag entsteht, wenn der beschleunigte Wasserschwall auf die vertikale Wassersäule in der Nähe des Rohrbogens aufschlägt und dabei schlagartig abgebremst wird (untere Darstellung in Abb. 2.21). Der direkte Vergleich der berechneten mit der gemessenen Druckamplitude zeigt, dass der berechnete Wert bei ungefähr 12 MPa liegt, wohingegen im Experiment ungefähr 16 MPa gemessen wurden (Abb. 2.22). Der Zeitpunkt des Druckstoßereignisses in der Nachrechnung liegt bei ca. 7,5 s der Problemzeit und damit ungefähr 2 s früher als im Versuch. Dass die Druckstoßamplitude in der Simulation niedrigerer ausfällt ist eine logische Konsequenz der Tatsache, dass das Ereignis in der Simulation früher als im Experiment eintritt. In der Simulation fließt dadurch eine kleinere Menge unterkühltes Wasser in die Testsektion ein, die dementsprechend eine kleinere Dampfblase einschließen kann. Dadurch wird der Wasserschwall auch weniger als im Experiment beschleunigt, was letztendlich zum niedrigeren Druckstoß führt.

Die bereits in ATHLET vorhandene Implementierung des IACTE-Modells wurde somit für die Simulation horizontaler Zweiphasenströmungen erfolgreich angewendet. Ursprünglich wurde die mechanistische Modellierung der Strömungsbilder für die Nachrechnung disperser Blasenströmungen in vertikalen Rohren geprüft /AUS05/. Durch die Nachrechnung des Experiments 05 der PMK2-Versuchsanlage wurde die Notwendigkeit der dynamischen Beschreibung der Zwischenphasenflächenkonzentration für die adäquate Berechnung der Direktkontaktkondensation vor dem Hintergrund von Druckstößen unterstrichen. Diese Simulationen zeigen, dass das verwendete mechanistische Modell zur Berechnung der Zwischenphasenflächenkonzentration in der Lage ist, für horizontale Zweiphasenströmungen die Effekte des Einschlusses der Blasenfelder im hinteren und vorderen Teil eines Wasserschwalls realistisch zu berücksichtigen. Dieser Effekt kann mit statischen Strömungskarten nicht modelliert werden. Die hier dargestellte Anwendung des IACTE-Modells muss durch weitere Versuchsnachrechnungen insbesondere für Kondensationsschläge ergänzt werden, um ATHLET für dieses Phänomen zu validieren. Dabei sollte ein breiteres Spektrum an Anlagen und Anfangs- und Randbedingungen betrachtet werden.

## 2.5 Freisetzung und Absorption von Stickstoff in Wasser

Im Fall eines Bruchs oder einer schweren Leckage im Reaktorkühlkreislauf liefern die Notakkumulatoren die Einspeisung von Kühlwasser bei hohem Druck zum Ersatz des ausfließenden Kühlmittels. Beim DWR wird der hohe Druck von etwa 26 bar im Akkumulator durch den Einsatz von Stickstoff (N<sub>2</sub>) als Polstergas erzeugt. Da das N<sub>2</sub>-Gas im eingespeisten Notkühlwasser gelöst ist, kann es während eines Störfalls zur Freisetzung und zum Wiederlösen des Stickstoffs kommen. ATHLET verfügte bisher über ein Modell zur Simulation von gelöstem Stickstoff, dem folgende Annahmen zugrunde liegen:

- Das gelöste Gas hat keinen Einfluss auf die thermohydraulischen Eigenschaften der Liquid-Phase
- Das gelöste Gas wird transportiert und kann **ausschließlich** aus dem Wasser freigesetzt, jedoch nicht wieder gelöst werden

Zwei maximale Löslichkeitswerte von Stickstoff in Wasser werden mittels einer Interpolation experimenteller Daten von Linke und Seidell /SEI41/ ermittelt:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{G,max1} = f(P_{tot} - P_{part,V}|_{T_L}, T_L) \\ C_{G,max2} = f(P_{part,G}|_{T_L}, T_L) \end{array} \right. \quad \left[ \frac{kg_{N_2}}{kg_{H_2O}} \right] \quad (2.14)$$

Die statischen Faktoren  $F_1$  und  $F_2$  werden verwendet, um die Kinetik der Freisetzung zu modellieren, so dass der freigesetzte Massenstrom als die Summe von folgenden Massenströmen geliefert wird:

$$\left\{ \begin{array}{l} G_{G,rls1} = F_1(1 - \alpha)(C_{Gsol} - C_{G,max1})Vol \quad [kg \cdot s^{-1}] \quad \text{wenn } C_{Gsol} > C_{G,max,1} \\ G_{G,rls2} = F_2\alpha(1 - \alpha)(C_{Gsol} - C_{G,max2})Vol \quad [kg \cdot s^{-1}] \quad \text{wenn } C_{Gsol} > C_{G,max,2} \end{array} \right. \quad (2.15)$$

Es sind  $\alpha$  der Gas/Dampf-Volumenanteil,  $Vol_{KV}$  das Volumen des Kontrollvolumens und  $C_{Gsol}$  die Konzentration an gelöstem Gas im Liquid.

Im Gegensatz zur Liquid-Phase ist die Energiezufuhr zur Gas-Phase berücksichtigt und wird berechnet als

$$Gh_{G,rls} = G_{G,rls} \cdot h_G|_{P_{part},T_L} \quad [J \cdot kg \cdot s^{-1}] \quad (2.16)$$

wobei  $h_G|_{P_{part},T_L}$  die Enthalpie des Gases für  $T_L$ ,  $P_{part}$  bezeichnet.

Im Rahmen des vorliegenden Projekts wurde dieses Modell nun um folgende Aspekte erweitert:

- Neues Modell zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit mit erweitertem Gültigkeitsbereich
- Plötzliche Freisetzung, verursacht durch ein rasches Absinken des Drucks
- Langsame Freisetzung sowie Wiederlösen von Stickstoff in Wasser durch Diffusion

Die Erweiterungen des Modells werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

### 2.5.1 Erweiterung des Modells zur Berechnung der maximalen Löslichkeit

Zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit werden zurzeit die experimentellen Daten von Linke und Seidell /SEI41/ linear interpoliert, um den Bunsen-Löslichkeitskoeffizient  $\beta$  für  $0^\circ\text{C}$  und  $1.013\text{kPa}$  zu berechnen. Die maximale Löslichkeit ist gegeben durch:

$$C_{Gmax\ 1,2} = \beta \left( \frac{P_{G0}}{R_{N_2} \cdot T_{G0}} \right) \quad (2.17)$$

Mit  $P_{G0} = 101.3\text{ kPa}$  ,  $R_{N_2} = 296.8$  ,  $T_{G0} = 273.15\text{K}$

Dabei ist das Modell gültig für einen Bereich von  $0^\circ\text{C}$  bis  $240^\circ\text{C}$  und von 0 bis 200 Bar. Diese Gleichung ist nur für den Partialdruck des Gases anwendbar und wird zur Bestimmung von  $C_{Gmax1}$  und  $C_{Gmax2}$  in (2-15) benutzt.

Der Einsatz einer linearen Interpolation ist zwar effizient, beschreibt aber die Löslichkeitskurve, die bei hohen und kleinen Drücke einen nicht-linearen Verlauf aufweist, nur ungenau. Aus diesem Grund wurde ein neues Modell zur Berechnung der maximalen Löslichkeit von Stickstoff in Wasser auf der Basis des Modells von Duan entwickelt. In /DUA01/ liefert Duan eine prädiktive Gleichung zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit von  $\text{N}_2$  in  $\text{H}_2\text{O}$  in Abhängigkeit von dem Druck und der Temperatur. Dafür benutzt das Modell das chemische Potential von  $\text{N}_2$  in der Flüssigkeitsphase im chemischen Gleichgewicht, den Aktivitätskoeffizienten  $\gamma_{N_2}$  und die Fugazität  $\phi_{N_2}$  des Gases. Die Gleichung für pures Wasser lautet somit:

$$\ln \left( \frac{\gamma_{N_2} \cdot P_{tot}}{m_{N_2}} \right) = \frac{\mu_{N_2}^{l(0)}}{RT} - \ln(\phi_{N_2}) \quad (2.18)$$

Hierbei sind  $m_{N_2}$  die Molarität von Stickstoff ( $m_{N_2} = \text{mol}_{N_2} / \text{kg}_{\text{Wasser}}$ ),  $T$  die absolute Temperatur,  $P_{tot}$  der Totaldruck im Kontrollvolumen,  $R$  die ideale Gaskonstante,  $M_{N_2}$  die molare Masse von Stickstoff und  $\mu_{N_2}^{l(0)}$  die chemische Potentialdifferenz.

Nach Bearbeitung der Formel erhalten wir die maximale Löslichkeit als:

$$C_{Gmax} = M_{N_2} \cdot \frac{\exp\left(\frac{\mu_{N_2}^{l(0)}}{RT} - \ln(\phi_{N_2} \cdot \gamma_{N_2})\right)}{P_{tot}} \left[ \frac{\text{kg}_{N_2}}{\text{kg}_{H_2O}} \right] \quad (2.19)$$

Der Autor approximiert das chemischen Potential  $\mu$  nach Pitzer /PIT73/. Das Potential wird dann wie folgt berechnet (Die Werte der Konstanten sind Tab. 2.1 zu entnehmen):

$$\begin{aligned} \mu_{N_2}^{l(0)} = & c_1 + c_2 T + \frac{c_3}{T} + c_4 T^2 + \frac{c_5}{680 - T} + c_6 P_{tot} + c_7 \cdot P_{tot} \cdot \ln(T) \\ & + \frac{c_8 P_{tot}}{T} + \frac{c_9 P_{tot}}{680 - T} + \frac{c_{10} P_{tot}^2}{T} \end{aligned} \quad (2.20)$$

**Tab. 2.1** Koeffizienten der Polynome zur Approximation des chemischen Potentials von Stickstoff

c1	4.07064E+01	c6	-4.30780E-02
c2	-5.24951E-02	c7	6.47412E-03
c3	-4.66591E+03	c8	2.35461E+00
c4	2.30125E-05	c9	-8.09187E-02

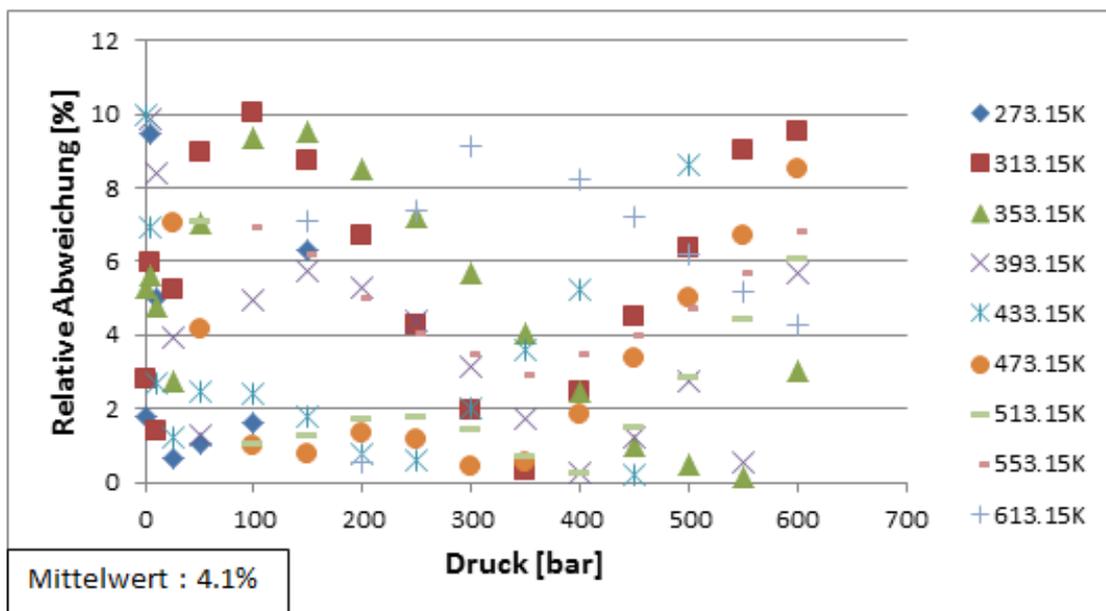
Die Virial-Gleichung der *Gibbs-Excess-Energy* ermöglicht die Bestimmung des Aktivitätskoeffizienten  $\gamma_{N_2}$  zur Modellierung der Abweichung zwischen nicht-idealem und idealem Liquid. Hier wird dieser Koeffizient gleich 1.0 gesetzt, da mit reinem und idealem Wasser gearbeitet wird. Die Fugazität  $\phi_{N_2}$  erfasst das abweichende Verhalten eines realen Gases von einem idealen Gas, um das chemische Potential des realen Gases zu bestimmen. Sie kann laut /DUA01/ mittels einer Zustandsgleichung bestimmt werden. Der Einbau der Zustandsgleichung wurde durch folgende Approximation realisiert:

$$\begin{cases} \ln(\phi_{N_2}) = a(T) \cdot \ln(P_{tot} + b(T)) + c(T) \\ x(t) = x_1 T^5 + x_2 T^4 + x_3 T^3 + x_4 T^2 + x_5 T^1 + x_6, \quad x = a, b, c \end{cases} \quad (2.21)$$

$a(T)$ ,  $b(T)$  und  $c(T)$  sind Polynome, die die Ergebnisse der Tabelle III in /DUA01/ approximieren. Zur Erhöhung der Genauigkeit wurde das Polynom  $b(T)$  in drei Temperaturbereiche unterteilt. Dabei wurde sichergestellt, dass die drei Polynome eine kontinuierliche Kurve bilden. Die Koeffizienten der Polynome sind in Tab. 2.2 enthalten und die resultierende Abweichung der Approximation zu den Ergebnissen von Duan ist in Abb. 2.23 dargestellt.

**Tab. 2.2** Koeffizienten der Polynome zur Approximation der Fugazität von Stickstoff

	$T^5$	$T^4$	$T^3$	$T^2$	$T^1$	$T$	Gültigkeit [K]
a(T)	-3.58845E-13	6.77620E-10	-4.81192E-07	1.61676E-04	-2.54698E-02	-4.26205E-01	0-613.15
b1(T)	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	-8.75000E-05	5.05513E-02	-7.41962E+00	0-353.15
b2(T)	0.00000E+00	0.00000E+00	-5.91146E-06	6.32227E-03	-2.27209E+00	2.73788E+02	353.15-473.15
b3(T)	0.00000E+00	0.00000E+00	-3.27902E-05	4.74945E-02	-2.33310E+01	3.86767E+03	473.15-613.15
c(T)	3.38003E-12	-7.73926E-09	7.02866E-06	-3.23939E-03	7.57363E-01	-6.38723E+01	0-613.15



**Abb. 2.23** Relative Abweichung der Approximation des Duan-Modells zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit von  $N_2$  in  $H_2O$  zum ursprünglichen Modell

Zur Validierung der Approximation muss man betrachten, dass die in /DUA01/ gelisteten experimentellen Daten voneinander um 7-10 % abweichen. Auf diesem Grund wurde die Approximation, mit globaler Abweichung unter 10 % und niedrigem Mittelwert, als eine ausreichende Darstellung der Stickstoff-Fugazität eingeschätzt. Der Bedarf nach dem Einbau einer Zustandsgleichung wird aber möglicherweise kommen, falls weitere Gase als gelöste Gase simuliert werden müssen.

Das neue Modell verfügt über einen erweiterten Gültigkeitsbereich von 0 – 340 °C und von 0 – 600 bar. Die Verwendung des totalen Drucks im KV anstelle des Partialdrucks von  $N_2$  bedeutet eine bessere Abbildung der Realität, wo andere Gase oder Dampf die

maximale Löslichkeit beeinflussen können. Außerdem wird das nicht-lineare Verhalten bei hohen und kleinen Drücke erfasst.

In /DUA01/ werden die Löslichkeitswerte mit einer Sammlung von Referenzen verglichen und zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Ausgewählte experimentellen Daten von Linke und Seidell und die mit Gleichung (2.19) gelieferten Werte werden in Tab. 2.3 mit Annahme eines 100 % Stickstoffgehalts in der Gas/Dampfphase dargestellt.

**Tab. 2.3** Vergleich der maximalen Löslichkeit: Approximation des Duan-Modells (links) und experimentelle Werte von Linke und Seidell (rechts)

Ap-prox.	25	100	200	240	Seidell	25	100	200	240
P (bar)	298.15	373.15	473.15	513.15	P (bar)	298.15	373.15	473.15	513.15
25	4.27E-04	2.85E-04	2.49E-04	3.15E-05	25	4.35E-04	3.32E-04	5.41E-04	6.25E-04
100	1.47E-03	1.07E-03	2.17E-03	2.73E-03	100	1.58E-03	1.23E-03	2.18E-03	2.53E-03
200	2.71E-03	2.05E-03	4.07E-03	5.83E-03	200	2.82E-03	2.28E-03	4.25E-03	5.47E-03

Hinsichtlich der Ergebnisse und den von Duan durchgeführten Vergleichen ist zu bemerken, dass das neue Modell präziser im niedrigen Druckbereich ist. Eine gute Übereinstimmung erfolgt zwischen beiden Modelle für hohe Drücke. Sowohl das neue als das alte Modell können dank wenige Implementierungsänderungen zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit für die plötzliche Freisetzung  $C_{G,max1}$  aufgerufen werden. Da die „maximale“ Löslichkeit  $C_{G,max2}$  die langsame Freisetzung darstellen sollte, die eigentlich durch einen Ungleichgewicht der Gaskonzentration im Liquid und seines partiellen Drucks in der Gas/Dampf-Phase verursacht wird, wird  $C_{G,max2}$  als  $C_{G,eq}$  in der Entwicklungsversion genannt. Das Gleichgewicht zwischen den Phasen, bei welchem so viele Moleküle vom Gas nach Liquid diffundieren wie vom Liquid zum Gas, ist mit der Henry-Konstante  $k_H$  definiert, die bei geringeren gelösten Gasmengen gültig ist:

$$C_{G,eq} = \frac{k_{H,Pc}}{P_{G,partial}} \quad (2.22)$$

Es gilt deswegen immer  $C_{G,eq} \leq C_{G,max1}$ , da  $P_{G,partial} \leq P_{tot}$ . Zur Bestimmung der Konstante im Code, siehe 2.5.4.

## 2.5.2 Kinetik der Freisetzung von gelöstem Gas

Wie erwähnt, können hinsichtlich der Kinetik der Gasfreisetzung zwei Prozesse unterschieden werden:

- Die vom Druckabfall verursachte plötzliche Freisetzung als Folge der sinkenden maximalen Löslichkeit
- Die langsame Freisetzung durch Diffusion als Folge des Ungleichgewichts zwischen der Konzentration des gelösten Gases und dem Partialdruck des Gases

Der erste Prozess setzt eine große Menge des Gases frei und verläuft wesentlich schneller als die Diffusion. Allerdings kann die Diffusion nicht vernachlässigt werden, da ein Massenaustausch auch ohne Druckabfall stattfinden kann. Zurzeit werden zwei statische Faktoren zur Modellierung der Kinetik verwendet:

$$\begin{cases} F_1 = 100 \frac{kg}{m^3.s} & \text{für plötzliche Freisetzung} \\ F_2 = 1 \frac{kg}{m^3.s} & \text{für langsame Freisetzung} \end{cases} \quad (2.23)$$

Diese Faktoren wurden im Rahmen der Entwicklung durch dynamische Faktoren  $F_{1D}$  und  $F_{2D}$  ersetzt.

## 2.5.3 Plötzliche Freisetzung: Klassische Theorie der Keimbildung

Zur Bestimmung des dynamischen Faktors  $F_{1D}$  wird die klassische Keimbildungstheorie (KKT) für eine homogene Keimverteilung angewendet. Die Theorie beschreibt, wie schnell die Blasen beim Druckabfall entstehen. Das nachfolgend vorgestellte Modell versucht, die KKT für ATHLET anzupassen. Sehr detaillierte Beschreibungen der KKT sind in /FAR27/, /BEC35/, /FRE39/, /ZEL43/, /KAS00/ und /KAL12/ zu finden.

Die treibende Kraft der plötzlichen Freisetzung ist die mit dem thermohydraulischen Differentialgleichungssystem berechnete Druckänderung im KV:

$$P_n - P_{n-1} = \Delta P \quad (2.24)$$

Als Annahme gilt eine quasi-stationäre Freisetzung während des Zeitschritts. Falls  $\Delta P$  positiv ist, wird das Modell nicht aufgerufen und  $F_{1D} = 0$ . Ansonsten wird die folgende Gleichung für die homogene und quasi-stationäre KKT benutzt:

$$F_{1D} = Q_{liq} \left( Z \cdot \varphi \cdot V^* \cdot C \cdot e^{-\frac{\Delta G^*}{k_B T}} \right) \quad [kg/m^3 s] \quad (2.25)$$

Die Bestimmung der sogenannten kinetischen Prefaktoren  $Z \cdot \varphi \cdot V^* \cdot C$  sowie der kritischen freien Gibbs-Energie  $\Delta G^*$  werden im Folgenden beschrieben.

Die kritische freie Gibbs-Energie  $\Delta G^*$  stellt hierbei eine Energiebarriere dar, die die Freisetzung eines Gases behindert. Das bedeutet, es muss dem gelösten Gasmolekül Energie zugeführt werden, um diese Energiebarriere zu überschreiten. Ein Stickstoff-Molekül im Wasser ist von Wasser-Molekülen umhüllt und weist daher ein niedrigeres Energieniveau als im gasförmigen Zustand auf.

/KAS00/ kann die breitverwendete Gleichung für die Gibbs-Energie entnommen werden:

$$\Delta G^* = \frac{16\pi \cdot \sigma^3 \cdot V_m^2}{3\Delta\mu} \quad [J] \quad (2.26)$$

Die Bestimmung der Oberflächenspannung  $\sigma$  erfolgt mittels der in /VAR83/ beschriebenen Interpolation:

$$\sigma = 2358 \cdot 10^{-4} \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1.256} \left[ 1 - 0.625 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right) \right] \quad [N \cdot m^{-1}] \quad (2.27)$$

Mit  $T_c$  : kritische Temperatur von Wasser

Die chemische Potentialdifferenz  $\Delta\mu$  ist laut /KWA83/ nach der Gibbs-Duheim Gleichung gegeben. Dabei wird der Druckabfall als isothermer Prozess betrachtet:

$$\Delta\mu = V_m \Delta P \quad [J] \quad (2.28)$$

Der Effektiv-Durchmesser  $r_m$ , den ein Molekül in Lösung einnimmt, hängt von der Temperatur und der Zusammensetzung des Gases ab. Es wird in /KWA83/ auf Basis des Lennard-Jones Parameters  $\sigma_{LJ}$  bestimmt. Mit diesem Wert für  $r_m$  erhält man das Effektiv-Volumen  $V_m$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{LJ} = \frac{r_m}{2^{1/6}} \quad [N \cdot m] \quad \text{mit } r_{m,N_2} = 3.698 \text{ \AA} \\ V_m = \frac{\sqrt{2}}{6} \sigma_{LJ}^3 \quad [m^3] \end{array} \right. \quad (2.29)$$

Der erste Prefaktor Z ist nach /ZEL43/ zu berechnen und modelliert die kritische Größe des Molekül-Clusters, so dass dieser weiter wachsen kann:

$$Z = \left( \frac{\Delta G^*}{3\pi \cdot k_B \cdot T_K \cdot n^{*2}} \right)^{1/2} \quad [-] \quad (2.30)$$

Mit  $k_B$  : Boltzmann-Konstante

Die kritische Anzahl der Moleküle  $n^*$  im Cluster wird aus der Gibbs-Thomson Gleichung der homogenen KKT gewonnen:

$$n^* = \frac{32\pi \cdot V_m^2 \cdot \sigma}{3(\Delta\mu)^3} \quad [-] \quad (2.31)$$

Das gebildete Volumen  $V^*$  teilt sich zwischen dem Clusterformfaktor und der Anzahl seiner Moleküle:

$$V^* = (36\pi \cdot V_m^2)^{1/3} \cdot n^{*2/3} \quad [m^3] \quad (2.32)$$

Die Keimstellenkonzentration C ist definiert als:

$$\begin{cases} C = \frac{Frac}{Vol_{liq}} \quad [m^{-3}] \\ Frac = \frac{Anzahl_{Keimstelle}}{Anzahl_{tot}} \end{cases} \quad (2.33)$$

Da hier eine homogene Keimbildung vorausgesetzt wird, sind alle Stellen, an denen ein Gas-Molekül von Wasser-Molekülen umhüllt ist, zur Clusterbildung geeignet. Im Fall einer heterogenen Keimbildungsannahme könnte dieser Faktor angepasst den. C wird dann mit dem Monomer-Volumen berechnet, das hier durch das Effektiv-Volumen annähert wird:

$$C = \frac{Vol_{liq}}{V_m} = \frac{1}{V_m} \quad [m^{-3}] \quad (2.34)$$

Der letzte Prefaktor  $\varphi$  wurde von Becker und Döring /BEC35/ als die Zuwachsrates der Cluster definiert. Mangels einer geeigneten Korrelation zur Bestimmung von  $\varphi$  kann dieser Faktor als Kalibrierungsfaktor des Modells genutzt werden. Unter Annahme massiver Keimbildung gemäß /KWA83/ und Berücksichtigung der entsprechenden experimentellen Ergebnisse von /HEM76/ folgt mit Gleichung (2.35):

$$\varphi = \frac{F_{1D}}{q_{liq} \left( Z \cdot \varphi \cdot V^* \cdot C \cdot e^{-\frac{\Delta G^*}{k_B T}} \right)} \quad [s^{-1}] \quad (2.35)$$

/KWA83/ und /HEM76/ liefern die Grenzwerte für  $F_{1D}$  und  $\Delta P$  zur massiven Keimbildung als:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{F_{1D Grenz}}{\varrho_{liq}} \Big|_{298K} = 1 \quad \left[ \frac{Blasen}{m^3 \cdot s} \right] \\ \Delta P_{Grenz} = 160 [atm] \end{array} \right. \quad (2.36)$$

Daraus ergibt sich:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi = 58.79145 \quad [s^{-1}] \\ F_{1D} \Big|_{298K, \Delta P = 1bar} = 78.34 \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \end{array} \right. \quad (2.37)$$

Die Größenordnung des Faktors  $F_1$  des bisherigen ATHLET-Modells nach Gleichung (2.23) kann mit (2.37) verglichen werden und beweist damit eine gute ursprüngliche Einschätzung des Kinetik-Faktors.

#### 2.5.4 Langsame Freisetzung und Absorption: 2-Film-Theorie

Neben der plötzlichen Freisetzung muss die langsame Freisetzung durch Diffusion berücksichtigt werden. Bisher wurde die Kinetik dieses langsamen Prozesses mittels des statischen Faktors  $F_2$  nach Gleichung (2.23) modelliert. Da ATHLET nicht in der Lage ist, chemische Reaktionen zu simulieren, und das Gas-Modell außerhalb der thermohydraulischen Differentialgleichungssysteme aufgerufen wird, wurde im Rahmen des Projekts die 2-Film-Theorie (2FT) implementiert. Nach dem 1-Film-Modell von /NER04/ wurde diese einfache Beschreibung des Massenaustauschs durch die Gas-Dampf/Liquid Zwischenphasengrenzfläche von /WHI24/ formuliert. Dabei werden zwei stagnierende Grenzschichtfilme an der Zwischenphasengrenzfläche für das Gas und für das Liquid definiert, ohne Kenntnis über deren Dicke zu haben (siehe Abb. 2.24). Außerdem soll ein thermodynamisches und chemisches Gleichgewicht an der Zwischenphasengrenze bestehen. Das folgende Modell ersetzt die statische Gleichung für langsame Freisetzung in (2.15) durch (2.42).

Laut /NER04/ sind die Massenströme in beiden Richtungen definiert als:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_g = A \cdot k_g (C_{gi} - C_g) \quad [kg \cdot s^{-1}] \\ J_l = A \cdot k_l (C_l - C_{li}) \quad [kg \cdot s^{-1}] \end{array} \right. \quad (2.38)$$

Hierin bezeichnen  $k_{g,l}$  den lokalen Massenübertragungskoeffizienten,  $C_{g,i,l,i}$  die Konzentration an der Oberfläche,  $C_{g,l}$  die Konzentration im Bulk,  $A$  die zur Diffusion vorhandene Fläche und  $K_{g,l}$  den Gesamtmassenübertragungskoeffizienten.

Da quasi-stationäre Bedingungen während jedes Zeitschrittes unterstellt werden, liefert

$$J_g = J_l:$$

$$\frac{k_l}{k_g} = \frac{(C_{gi} - C_g)}{(C_l - C_{li})} \quad (2.39)$$

Da gelöste Konzentrationen oder partielle Gasdrücke an der Phasengrenze nur schwer zu bestimmen sind, verwendet die 2FT ausschließlich Bulk-Konzentrationen (bzw. Partialdrücke im Bulk). Dafür werden Gesamtmassenübertragungskoeffizienten ( $K_l, K_g$ ) und virtuelle Konzentrationen/Gasdrücke ( $C_l^*, P_g^*$ ) definiert. Hierbei entspricht die virtuelle Konzentration  $C_l^*$  derjenigen Gaskonzentration der Lösung, die mit dem partiellen Gasdruck in der Gas-Dampf-Phase im Gleichgewicht wäre.

$$\left\{ \begin{array}{l} J = K_l \cdot A \cdot (C_l - C_l^*) \\ C_l^* = \frac{C_g}{k_{h,pc}}, C_{li} = \frac{C_{gi}}{k_{h,pc}} \quad [kg \cdot m^{-3}] \end{array} \right. \quad (2.40)$$

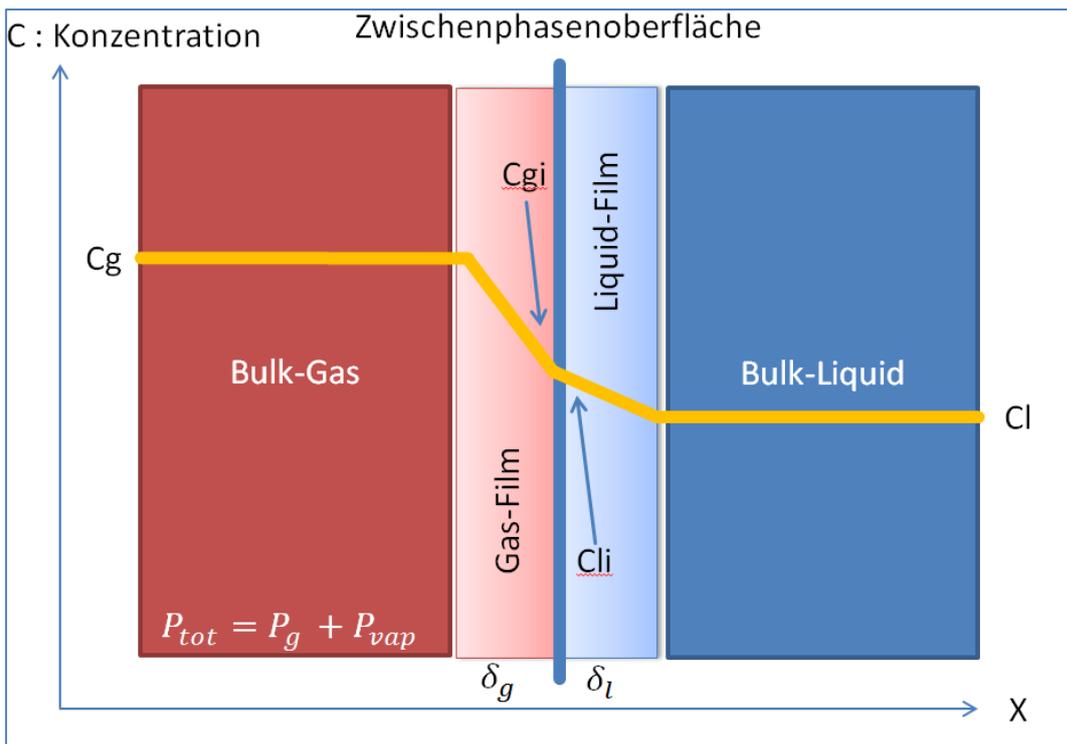
Der resultierende Gesamtmassenübertragungskoeffizient lautet:

$$K_l = \left( \frac{1}{k_l} + \frac{1}{k_{h,pc} \cdot k_g} \right)^{-1} \quad (2.41)$$

Die Gleichungen (2.38) bis (2.41) liefern den Massenstrom vom Gas zum Liquid:

$$G_{G,rls2} = J_{gas \rightarrow liq} = K_l \cdot A \cdot (C_l^* - C_l) \quad [kg \cdot s^{-1}] \quad (2.42)$$

Die lokalen Massenübertragungskoeffizienten  $k_l$  und  $k_g$  wie auch die Zwischenphasengrenzfläche  $A$  müssen geeignet modelliert werden.



**Abb. 2.24** Schematische Darstellung der 2-Film-Theorie

### Bestimmung der Henry-Konstante

Die Henry-Konstante beschreibt das Gleichgewicht zwischen der Konzentration eines gelösten Gases im Liquid und seinem Partialdruck in der Gas/Dampf-Phase in Abhängigkeit von der Temperatur und der betrachteten Stoffe. Für die Henry-Konstante wird die Approximation aus /HAR 3/ verwendet:

$$\text{Harvey} : k_{H,px} = F_{cor} \cdot P_{liq}^* \cdot \exp \left[ \frac{A}{T_r} + \frac{B \cdot \tau^{0.355}}{T_r} + C \cdot T_r^{-0.41} \exp(\tau) \right] \quad (2.43)$$

$$T_r = T / T_c, \tau = 1 - T_r$$

wobei  $P_{liq}^*$  den Sättigungsdruck von Wasser und  $F_{cor}$  einen Korrekturfaktor bezeichnen. Die ursprüngliche Gültigkeit dieser Approximation bis 278,15 K wurde bis 273,15 K extrapoliert, da die Henry-Werte in diesem Bereich eine gute Übereinstimmung mit den Werte der Approximation von /YAW03/ aufweisen, deren Gültigkeitsbereich bis 273,15 K angegeben ist.

$$\text{Yaws} : k_{H,px} = 1.01325 \cdot 10^{\left( A + \frac{B}{T} + C \log(T) + DT \right)} \quad (2.44)$$

Die Koeffizienten der Gleichungen (2.43) und (2.44) sind der Tab. 2.4 zu entnehmen. Außerdem sei angemerkt, dass absolute Fehler bei der Approximation der Henry-

Konstante  $k_{H,Px}$  bis zur Größenordnung  $10^3$  bar einem eher niedrigen relativen Fehler entsprechen und daher eine insgesamt vernachlässigbare Auswirkung auf das Modell haben.

**Tab. 2.4** Koeffizienten zur Approximation der Henry-Konstante gemäß der Modelle von Harvey und Yaws mit Gültigkeitsbereich

	A	B	C	D	$T_{\min}$ [K]	$T_{\max}$ [K]
Harvey	-9.67578E+00	4.72162E+00	1.17059E+01	0.0E+00	278.12	636.0
Yaws	-7.88622E+01	-3.74498E+03	-2.47981E+01	0.0E+00	273.15	350.15

Der Sättigungsdruck des Wassers  $P_{liq}^*$  wird vom aktuellen ATHLET-Stoffwertpaket geliefert, allerdings wurde ein Korrekturfaktor  $F_{cor}$  eingesetzt, damit

$$k_{H,Px}|_{298K} = 9.077 \cdot 10^4 \text{ atm}, \text{ nach /KAV80/} \quad (2.45)$$

Der Zusammenhang zwischen  $k_{H,Px}$  und  $k_{H,Pc}$  ist definiert als:

$$k_{H,Pc} [kg \cdot bar^{-1} \cdot m^{-3}] = \frac{k_{H,Px} [bar] \cdot M_{liq}}{\rho_{liq}} \quad (2.46)$$

### Bestimmung der lokalen Massenübertragungskoeffizienten (MTC)

Die Bestimmung der MTC erfolgt auf Basis des Film-Penetration-Modells /TOO58/ unter Rückgriff auf das Direkt-Kondensationsmodell von ATHLET /HOB92/.

Im Rahmen des Film-Penetration-Modells wird  $k_l$  verwendet und in einen Anteil MTC-Film und einen Anteil MTC-Penetration unterteilt. Die Penetrationstheorie wurde ursprünglich von /HIG35/ geliefert und später von /DAN51/ weiterentwickelt. Grundprinzip ist, dass Turbulenzen in der 2-Phasenströmung die Grenzschicht im Bereich der Zwischenphasenfläche mit nicht gesättigtem Liquid versorgen. Dabei bleibt das „frische“ Liquid während einer bestimmten Verweilzeit an der Phasengrenze und kann Energie und Masse mit dem Gasphase austauschen. Laut /HOB92/ und /HUG91/ kann die Verweilzeit mit der Kolmogorov Zeitskala approximiert werden. Allerdings zeigte Kolev in /KOL07/, dass Mikro- und Makrostromwirbel mit unterschiedlichen Verweilzeiten betrachten werden müssen. Dies wird bei der Berechnung der Verweilzeit  $\tau$  berücksichtigt:

$$\tau = \left\{ \frac{\varepsilon_k}{\nu_k} \right\}^{1/4} \quad \text{für } Re_{turb} \geq 2500 \text{ /HUG91/} \quad (2.47)$$

$$\tau = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\nu_k^{1/4} \varepsilon_k^{5/4}} \quad \text{für } Re_{turb} < 2500 \text{ /SHE00/}$$

Hierbei ist  $Re_{turb} = \frac{k^2}{\varepsilon_k \nu_k}$  die turbulente Reynoldszahl, deren Grenzwert für den Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung mit 2500 in Übereinstimmung mit dem ATHLET Kondensationsmodell gewählt wurde. Werte für die Dissipationsrate  $\varepsilon_k$  und die turbulente kinetische Energie  $k$  werden ebenfalls von dem Kondensationsmodell geliefert. Die Korrelationen behalten für die Bestimmung der lokalen MTC ihre Gültigkeit, da die zugrunde liegende Theorie nach Higbie, Toor und Marchello ursprünglich für Massenübertragung entwickelt worden war.

Unter Berücksichtigung des in /TOO58/ definierten Parameters  $Z_k = \frac{\sqrt{\pi D_{AB,l} \tau}}{2\delta_L}$  wird  $k_l$  bestimmt:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_l = \sqrt{\frac{4 \cdot D_{AB,l}}{\pi \cdot \tau}} \cdot \left[ 1 + 2\sqrt{\pi} \cdot \text{ierfc} \left( \frac{\delta_L}{\sqrt{D_{AB,l} \tau}} \right) \right] \quad \text{falls } Z_k \leq 1 \\ k_l = \left( \frac{D_{AB,l}}{\delta_L} \right) \left[ 1 + \frac{1}{3} \frac{\delta_L^2}{D_{AB,l} \tau} \right] \quad \text{falls } Z_k > 1 \end{array} \right. \quad (2.48)$$

Außerdem ist  $k_G = \left( \frac{D_{AB,g}}{\delta_G} \right)$ . Es sind  $D_{AB,l/g}$  die binären Diffusionskoeffizienten,  $\delta_{L/g}$  die Grenzschichtdicken,  $\text{ierfc}$  die sog. *Error-Function* und  $\tau$  die Verweilzeit.

Die Filmdicke  $\delta_L$ , die in Form einer Wärmeeindringtiefe ( $\delta_{L,thermal}$ ) /CLA71/ iterativ im Kondensationsmodell bestimmt wird, wurde hierbei nur abgeschätzt. Als erste Näherung wurden Werte  $\delta_{L0}$ ,  $\delta_{G0}$  gewählt, die eine dünne Filmdicke darstellen. Für die stagnierende Grenzschicht in der Gasphase wurde das Film-Modell von Nernst angewendet. Allerdings gilt im Liquid eine Abhängigkeit der Schichtdicke von der Reynoldszahl  $Re$ , /LUM70/ und /SHE00/, so dass:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_G = \delta_{G0} = 0.1 \text{ [mm]} \\ \delta_L = \frac{\delta_{L0}}{Re^\alpha} = \frac{1}{Re^{1/2}} \text{ [mm]}, \alpha = 0.5 \end{array} \right. \quad (2.49)$$

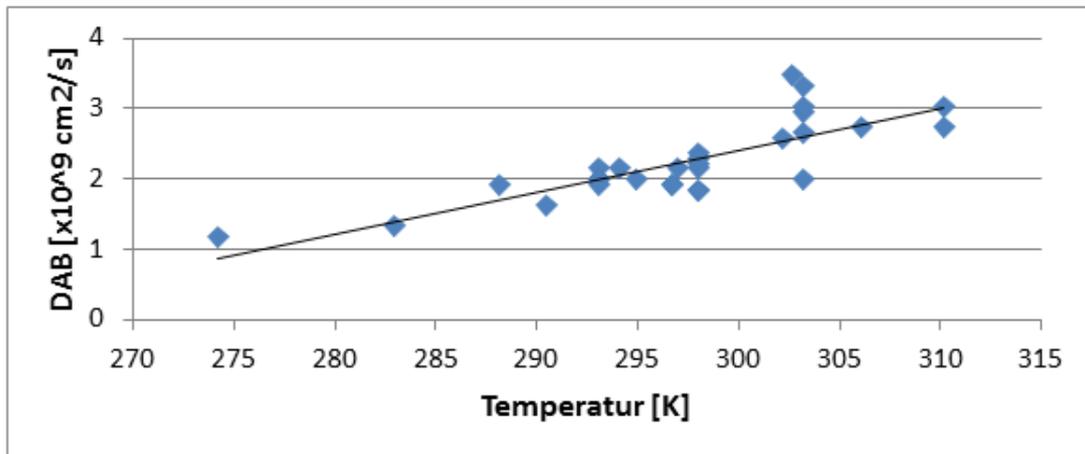
### Bestimmung der binären Diffusionskoeffizienten

Die benötigten binären Diffusionskoeffizienten für die Gas- und Liquid-Phase  $D_{AB,g}$  und  $D_{AB,l}$  werden in Abhängigkeit von der Temperatur, dem Druck und den betrachteten Stoffen ermittelt:

- Für  $D_{AB,g}$  wurden alle in /WIN07/ gesammelten Daten über die Diffusion von Stickstoff in Wasser unter Annahme einer linearen Abhängigkeit von der Temperatur interpoliert (Abb. 2.25):

$$D_{N_2 \rightarrow H_2O,g} = 0.0595 \cdot T - 15.45 \text{ [cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}] \quad (2.50)$$

Eine Abhängigkeit vom Druck in der Gasphase konnte nicht festgestellt werden.



**Abb. 2.25** Lineare Interpolation der in /WIN07/ gesammelten Daten zum binären Diffusionskoeffizienten von Stickstoff in Wasser

- Für  $D_{AB,l}$  wurde die prädiktive Methode von /FÜL66/ benutzt, die auch von /PRA00/ empfohlen wird. Diese Methode zieht die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten vom Druck in Betracht.

$$D_{N_2 \rightarrow H_2O,g} = \frac{0.00143T^{1.75}}{P \cdot M_{AB}^{1/2} \cdot \left[ (\sum v_{N_2})^{1/3} + (\sum v_{H_2O})^{1/3} \right]^2} \text{ [cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}] \quad (2.51)$$

$$\text{Mit } \sum v_{N_2} = 18.5 ; \sum v_{H_2O} = 13.1 ; M_{AB} = \frac{2}{\frac{1}{M_{N_2}} + \frac{1}{M_{H_2O}}}$$

Weitere prädiktiven Methode sind in /PRA00/ genannt und könnten ohne großen Aufwand zur Simulation anderer Gase in ATHLET eingebaut werden.

### Bestimmung der Zwischenphasenoberfläche

Die Zwischenphasengrenzfläche  $A$  wird in ATHLET als eine Konzentration  $A_c$  mit der Dimension einer Fläche pro Volumeneinheit dargestellt.

$$A = A_c \cdot \text{Volumen}_{KV} \text{ [m}^2\text{]}$$

Zwischen Freisetzung und Absorption von Gas wird bei der Bestimmung der Zwischenphasenflächendichte  $A_c$  unterschieden:

- Beim langsamen Diffundieren von Gas in (bzw. aus dem) Wasser wird  $A_c$  entweder mit dem statischen Modell der Direktkondensation berechnet oder mit dem neu entwickelten dynamischen Modell /AUS05/, das auf der Arbeit von Ishii, Kim und Hibiki zur *Interfacial Area Transport Equation* basiert. Beide Modelle berücksichtigen die Abhängigkeit der Zwischenphasengrenzfläche von der Strömungsform (Stratifizierung, Pfropfenströmung, etc.). Eine Studie zum Einfluss der jeweiligen Modellauswahl ist für die Zukunft geplant.
- Bei einer langsamen Freisetzung von gelöstem Gas wird  $A_c = 0$  gesetzt, falls  $\alpha$  null ist, da keine Diffusion zwischen Gas- und Liquidphase stattfinden kann.

Das Lösen von Stickstoff in Wasser wurde auf Basis der langsamen Diffusion implementiert. Dieser Prozess erfolgt, falls der Partialdruck in der Gas/Dampf-Phase über dem mit der Henry-Konstante definierten Gleichgewichtswert liegt. Dabei wird eine zur Freisetzung analoge Berechnung des Kinetik-Faktors  $F_{2D}$  durchgeführt, wobei beim Lösen der Konzentrationsgradient  $(C_l^* - C_l)$  negativ wird. Das Modell erfordert die genaue Bestimmung der Zwischenphasengrenzfläche in Abhängigkeit von der Strömungsform (wie oben beschrieben), da das Gas über diese Fläche in das Wasser „eindringt“. Trotz des für die Liquid-Phase vernachlässigten Energiezugewinns, muss Energie von der Gas/Dampf-Phase entnommen werden. Dies erfolgt analog zu Gleichung (2-16), allerdings mit der Gas-Temperatur als Basis für die Bestimmung der Enthalpie:

$$Gh_{G,rls} = G_{G,rls} \cdot h_G|_{P_{part},T_V} \quad [kg \cdot s^{-1}], G_{G,rls} < 0 \quad (2.52)$$

### 2.5.5 Zusammenfassung und mögliche Weiterentwicklung

Das vorgestellte Modell ermöglicht die Bestimmung dynamischer, kinetischer Faktoren zur Berechnung sowohl der plötzlichen Freisetzung als auch der langsamen Freisetzung und Absorption von Stickstoff in Wasser unter Berücksichtigung der Strömungsform. Durch zukünftige Weiterentwicklungen könnten zusätzlich folgende Phänomene mit dem Modell berücksichtigt werden:

- Diffusion des gelösten Gases zwischen KV des ATHLET Thermofluidnetzwerks: Im Fall eines ruhenden Fluids kann es zur Sättigung der Liquid-Phase mit Gas kom-

men. Dies kann ATHLET für das KV berechnen, das die Zwischenphasengrenze enthält. Das gelöste Gas sollte nun in das Innere des Liquid-Bulks, z. B. in ein anderes KV, diffundieren können. ATHLET verfügt bereits über ein einfaches Modell für Gas-Diffusion innerhalb der Gas/Dampf-Phase zwischen zwei benachbarten KV. Dieses könnte unter geeigneter Berücksichtigung der binären Diffusionskoeffizienten auch für gelöstes Gas erweitert werden.

- Einfluss der Kondensation/Verdampfung auf die Absorption/Freisetzung des Gases in Wasser: In der Realität finden Gasabsorption/Gasfreisetzung sowie Kondensation/Verdampfung gleichzeitig statt, so dass beide Prozesse einen nicht vernachlässigbaren Einfluss aufeinander haben.

## **2.6 Wärmeübergang an Außen- und Innenseite horizontaler Wärmetauscherrohrbündel von passiven Sicherheitssystemen**

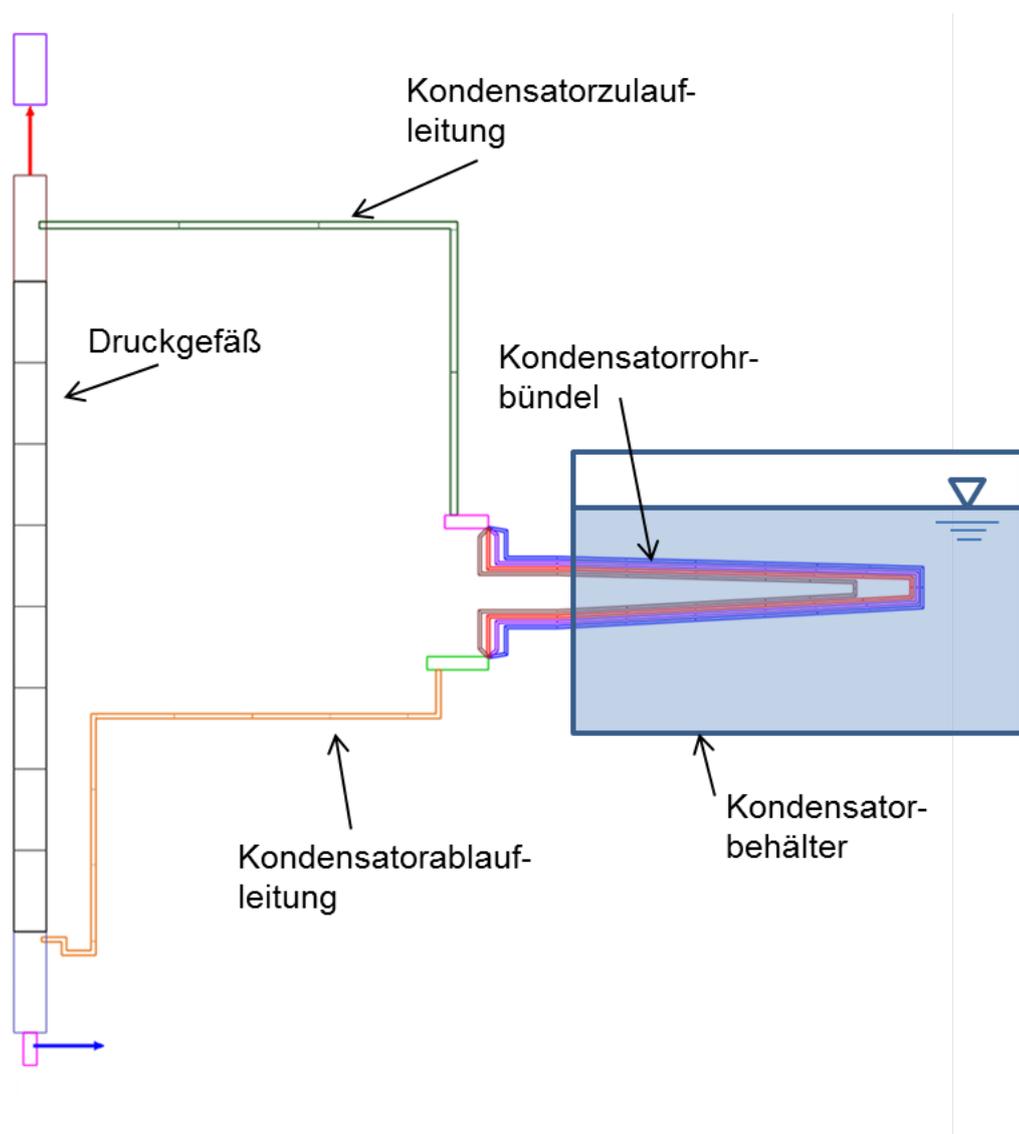
Insbesondere fortschrittliche Reaktordesigns verfügen über passive Sicherheitssysteme, deren korrekte Abbildung in ATHLET die Entwicklung neuer Modelle und die Adaption bestehender Modelle entsprechend den jeweils vorherrschenden Betriebsbedingungen erforderlich macht. Die Funktionsweise von passiven Systemen beruht unmittelbar auf physikalischen Gesetzmäßigkeiten wie z. B. Gravitation, Kondensation oder Verdampfung, wodurch sich ihr Verhalten unter Stör- und Unfallbedingungen von dem aktiver Systeme unterscheidet. Am Beispiel des Notkondensators des SWR Designs KERENA (AREVA) wurde ATHLET nun geprüft und weiterentwickelt. Der Notkondensator dient zur Wärmeabfuhr aus dem Reaktordruckbehälter (RDB) unter Störfallbedingungen und umfasst eine große Wasservorlage, die bei Unverfügbarkeit einer aktiven Kühlung die Kondensation des im Kern durch die Nachzerfallswärme erzeugten Dampfes mittels Wärmetauscher bewirkt.

Für die Simulation des Notkondensators und der horizontalen Wärmetauscherrohrbündel ist die Berücksichtigung einer Reihe physikalischer Einzelphänomene von herausragender Bedeutung. So wird die Leistung eines Notkondensators maßgeblich durch folgende drei Phänomene bestimmt:

- Wärmeübergang bei Kondensation auf der Rohrinneinnenseite
- Wärmeübergang mit und ohne Verdampfung auf der Rohraußenseite hin zu einer Wasservorlage

- Freie Konvektion in einer Wasservorlage

Zu den beiden erstgenannten Punkten wurden mit ATHLET Validierungsrechnungen von stationären Einzelkomponentenversuchen in der Jülicher NOKO-Anlage durchgeführt. Die Versuche wurden im Jahr 1996 durchgeführt und hatten die Ermittlung der vom Notkondensator übertragenen Wärmeleistung in Abhängigkeit von verschiedenen thermohydraulischen Parametern (wie Primär- und Sekundärtemperatur, Füllstand im Druckgefäß etc.) zum Gegenstand; sie sind in /SCA96/ beschrieben. Abb. 2.26 zeigt eine ATHLET-Nodalisierung des Versuchsstandes, wobei der Kondensatorbehälter nur schematisch abgebildet ist.



**Abb. 2.26** Nodalisierung der NOKO-Versuchsanlage in ATHLET (Kondensatorbehälter nur schematisch)

Die zunächst mit der ATHLET-Version 3.0 A erzielten Simulationsergebnisse wichen deutlich von den Experimentaldaten ab. Die übertragene Notkondensatorleistung wurde erheblich unterschätzt, weshalb die bestehenden Wärmeübergangsmodelle für unterkühltes und gesättigtes Blasensieden sowie für Kondensation in waagerechten Rohren in ATHLET modifiziert wurden. Bei den Weiterentwicklungen wurde versucht, möglichst an bestehende ATHLET-Modelle anzuknüpfen bzw. diese zu erweitern. Die folgenden Kapitel beschreiben die durchgeführten Modifikationen.

## 2.6.1 Gesättigtes und unterkühltes konvektives Blasensieden an der Rohraußenseite

Den Wärmeübergang an der Rohraußenseite betreffend wurden zwei Änderungen hinsichtlich des Unterdrückungsfaktors sowie der Thom-Korrelation vorgenommen.

### 2.6.1.1 Unterdrückungsfaktor

Der Wärmeübergang an der Kondensatoraußenseite wird durch Blasensieden (unterkühlt und gesättigt) und durch Konvektion bestimmt. Sieden und Konvektion beeinflussen sich dabei gegenseitig. Die meisten verwendeten Korrelationen zur Beschreibung des Wärmeüberganges beim sog. konvektiven Blasensieden entsprechen folgender Form:

$$ht_{c_{NB}} = [(S \cdot ht_{c_{PB}})^n + (F \cdot ht_{c_{FC}})^n]^{\frac{1}{n}} \quad (2.53)$$

Dabei bedeuten:

- $ht_{c_{NB}}$  – Wärmeübergangskoeffizient für das konvektive Blasensieden
- $ht_{c_{PB}}$  – Wärmeübergangskoeffizient für reines Blasensieden ohne Konvektion (das sog. *pool boiling*)
- $ht_{c_{FC}}$  – Wärmeübergangskoeffizient für reine Konvektion
- $S$  – Unterdrückungsfaktor (*suppression factor*). Durch die konvektive Kühlung wird die Dicke der Temperaturgrenzschicht verringert und das Blasensieden dadurch teilweise unterdrückt (vgl. /COL72/). Es ist  $0 \leq S \leq 1$ .
- $F$  – Verstärkungsfaktor. Die Bewegung der Dampfblasen führt zu einer verbesserten konvektiven Kühlung. Es ist  $F \geq 1$ .

- $n$  – Exponent, der die Art der Überlagerung der beiden Phänomene Blasensieden und Konvektion beschreibt. Z. B. beschreibt  $n = 1$  eine lineare Superposition und  $n > 1$  einen asymptotischen Verlauf von  $htc_{NB}$ .

In ATHLET wird standardmäßig die Chen-Korrelation zur Beschreibung des konvektiven Siedens verwendet. Hierbei ist der Exponent  $n = 1$ , der Wärmeübergang für das reine Blasensieden wird nach Forster-Zuber bestimmt und der Wärmeübergang durch Konvektion nach Dittus-Boelter /ATH12/.  $S$  und  $F$  sind Funktionen des Enthalpiedampfgehaltes  $x_h$ :

$$htc_{NB} = S \cdot htc_{Forster-Zuber} + F \cdot htc_{Dittus-Boelter} \quad (2.54)$$

Die Chen-Korrelation (2.54) wurde für das konvektive Sieden in Rohren entwickelt und lässt sich daher nicht unverändert auf das konvektive Sieden an der Außenseite von Rohrbündeln übertragen. Für horizontale Rohrbündel, wie sie beim Notkondensator vorliegen, findet sich in der Literatur häufig der Hinweis, dass keine Unterdrückung des *pool boiling* durch die Konvektion stattfindet /REL05/, /ROO11/ und der Unterdrückungsfaktor damit auf  $S = 1$  gesetzt werden muss. Dies wurde in die neue ATHLET-Version übernommen. Um einen stetigen Übergang zwischen den Fällen eines längs durchströmten, vertikalen Rohrbündels (Unterdrückungsfaktor voll wirksam) und eines horizontalen, quer angeströmten Bündels ( $S = 1$ ) zu schaffen, wurde eine Cosinus-Interpolation als Funktion des Neigungswinkels implementiert.

### 2.6.1.2 Thom-Korrelation

Ein weiterer wichtiger Punkt, welcher bereits in /SCA96/ angesprochen wurde, ist die Gültigkeit der Gleichung von Thom. Mit Hilfe der Gleichung von Thom wurde in ATHLET bisher die Differenz zwischen Rohrwand- und Sättigungstemperatur des Wassers abgeschätzt, welche in den Wärmeübertragungskoeffizienten  $htc_{pB}$  nach Forster-Zuber eingeht /ATH12/. Die Abschätzung wurde verwendet, um eine iterative Berechnung der Temperaturdifferenz und  $htc_{pB}$  zu vermeiden.

In /SCA96/ wurde bemerkt, dass der Gültigkeitsbereich der Gleichung von Thom (50 – 140 bar) nicht mit dem Gültigkeitsbereich der Korrelation von Forster-Zuber übereinstimmt. Im Rahmen der aktuellen Untersuchungen zum konvektiven Blasensieden konnte ferner gezeigt werden, dass die Gleichung von Thom die realen Temperaturdifferenzen für unterkühltes Blasensieden im Heißkanal eines DWR sehr gut annähert,

während sie die Temperaturdifferenzen für das Sieden an der Außenseite der NOKO-Rohre stark unterschätzt, wodurch der Wärmeübergangskoeffizient letztlich etwa um den Faktor 2 zu niedrig berechnet wird. Grund sind die niedrigen Drücke, welche an der Notkondensatoraußenseite vorliegen und sich weit außerhalb des Gültigkeitsbereichs der Thom-Gleichung befinden (1 – 10 bar).

Eine Modellverbesserung ohne Iterationen wurde erreicht, indem die Differenz aus Rohrwand- und Sättigungstemperatur anstatt auf Basis der Thom-Korrelation nun aus den Werten des jeweils vorausgegangenen Zeitschrittes berechnet wird. Die so berechneten Temperaturdifferenzen sind für alle Druckbereiche ausreichend genau. Numerische Instabilitäten konnten in den bisherigen Rechnungen nicht beobachtet werden. Sollten sie in der Zukunft auftreten, könnten sie über ein Zeitglied geglättet werden.

Anmerkung: Neben dem Gültigkeitsbereich der Thom-Gleichung hinsichtlich des Druckes scheint es auch eine Einschränkung hinsichtlich der Heizflächenbelastung zu geben. Denn bei den Nachrechnungen der in Kapitel 2.7 beschriebenen Brennstabündelversuchen des Kurchatov Instituts mit sehr hohen Flächenleistungen (aber üblich hohen Primärkreisdrücken) konnten durch das Ersetzen der Thom-Gleichung ebenfalls deutlich bessere Simulationsergebnisse erzielt werden.

### **2.6.2 Kondensation an der Rohrinne**

Für den Wärmeübergang auf der Kondensatorrohrinnenseite ist die dort vorliegende Strömungsform von großer Bedeutung. Detaillierte Modelle wie das Modell von El Hajal, Thome und Cavallini /THO10/ oder KONWAR /SCA96/ identifizieren zunächst die in einem Rohrabschnitt vorliegende Strömungsform anhand einer Strömungskarte und wählen anschließend ein passendes Wärmeübergangsgesetz aus.

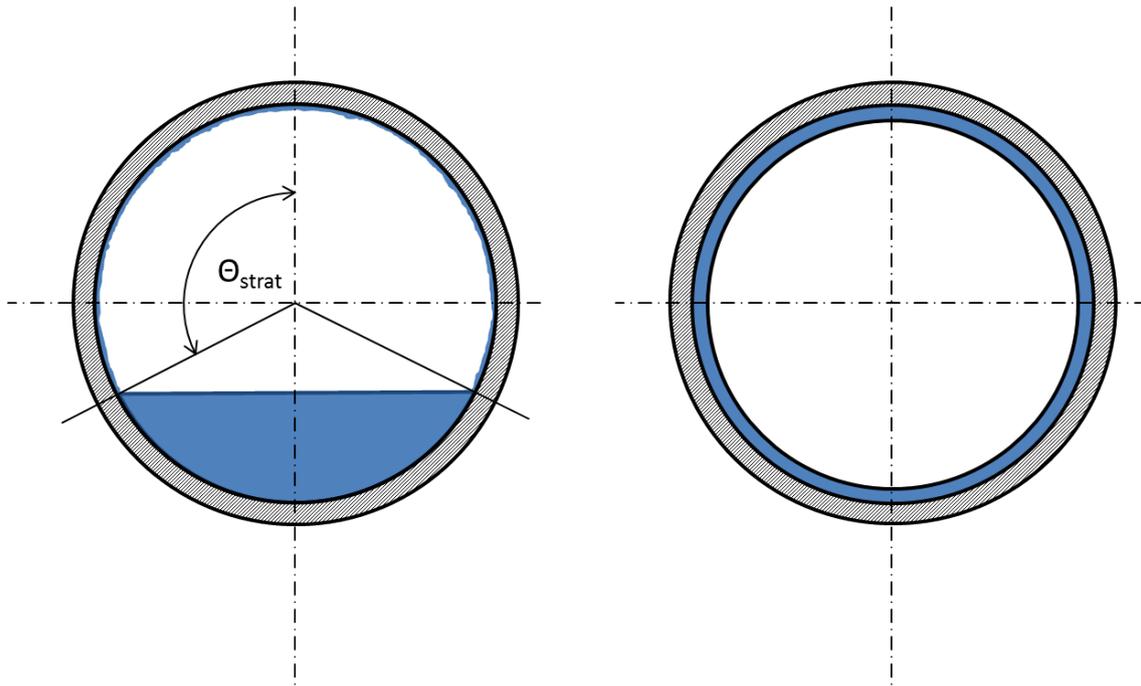
In ATHLET wurde bisher für laminare Filmkondensation das Modell von Nußelt bzw. speziell für horizontale Rohre das Modell von Chato (1962) verwendet und für turbulente Filmkondensation das Modell von Carpenter und Colburn für alle Rohrgeometrien. Allerdings vernachlässigt das Modell von Carpenter und Colburn laut /SCA96/ den Einfluss der Schwerkraft, d. h. es nimmt immer das Vorliegen einer symmetrischen turbulenten Ringströmung an. Unter dieser Voraussetzung lässt sich zwar die Kondensation in senkrechten Rohren modellieren, die Kondensation in waagerechten Rohren wird

jedoch fehlerhaft berechnet, da es die verschiedenen Strömungsformen, welche bei der Kondensation in horizontalen Rohren auftreten, nicht berücksichtigt.

Dobson und Chato haben 1998 das ursprüngliche Modell von Chato (1962) für lamina-re Kondensation für den turbulenten Fall erweitert und an verschiedene Strömungsformen angepasst. Da das ursprüngliche Chato-Modell in ATHLET bereits enthalten war, wurde die Erweiterung von Dobson und Chato implementiert, welche ab der ATHLET-Version 3.0 B anstelle der Korrelation von Carpenter und Colburn zur Berechnung der turbulenten Kondensation in horizontalen Rohren standardmäßig verwendet wird. In /VER07/ wurde das Modell von Dobson und Chato zusammen mit anderen Modellen (u. a. dem oben genannten strömungskartenbasierten Modell von Hajal, Thome und Cavallini) mit Experimentaldaten verglichen; dabei konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Experimenten und Rechnungen nachgewiesen werden.

Die folgende Beschreibung des Modells basiert auf den Angaben in /THO10/ und /VER07/ ergänzt durch wenige kleinere Modifikationen, die den Zweck verfolgen, den Übergang zwischen den Strömungsformen möglichst glatt zu gestalten.

Dobson und Chato unterteilen die Strömungsformen in zwei wesentliche Arten – schwerkraftdominiert und viskositätsdominiert. Bei niedrigen Dampfgeschwindigkeiten überwiegt der Schwerkräfteinfluss und das im Rohr gebildete Kondensat fließt in den unteren Rohrbereich ab, vgl. Abb. 2.27. Es liegt eine geschichtete Zweiphasenströmung vor. Bei hohen Dampfgeschwindigkeiten tritt der Schwerkräfteinfluss gegenüber den Viskositätseffekten in den Hintergrund und es liegt eine Ringströmung vor.



**Abb. 2.27** Geschichtete Strömung mit Stratifizierungswinkel (links) und Ringströmung (rechts). Dampf ist weiß und Kondensat blau dargestellt

Als Wärmeübergangskorrelation für die Ringströmung wird angegeben:

$$Nu_{Ring} = 0,023 \cdot Re_l^{0,8} \cdot Pr_l^{0,4} \left[ 1 + \frac{2,22}{X_{tt}^{0,89}} \right] \quad (2.55)$$

mit

$$Re_l = \frac{\dot{m}'' \cdot d_{Rohr,innen} \cdot (1 - x_m)}{\eta_l} \quad (2.56)$$

und der Prandtl-Zahl für die Flüssigkeit  $Pr_l$ .  $X_{tt}$  ist der Martinelli-Parameter, welcher in ATHLET bereits zur Berechnung des Verstärkungsfaktors  $F$  (siehe Kapitel 2.6.1.1) verwendet wird:

$$X_{tt} = \left( \frac{1 - x_m}{x_m} \right)^{0,9} \left( \frac{\rho_v}{\rho_l} \right)^{0,5} \left( \frac{\eta_l}{\eta_v} \right)^{0,1} \quad (2.57)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient für die geschichtete bzw. geschichtet-wellige Strömung ist definiert über:

$$Nu_{geschichtet} = \frac{0,23 \cdot Re_{vo}^{0,12}}{1 + 1,11 \cdot X_{tt}^{0,58}} \left[ \frac{Ga_l \cdot Pr_l}{Ja_l} \right]^{0,25} + \left( 1 - \frac{\theta_{strat}}{\pi} \right) \cdot Nu_{FC} \quad (2.58)$$

Der erste Summand beschreibt dabei den Einfluss der Filmkondensation im oberen Rohrbereich, der zweite Summand die konvektive Kühlung im unteren Rohrbereich.  $\theta_{strat}$  bezeichnet den Winkel von der Rohroberseite bis zur Wasseroberfläche der ge-

schichteten Strömung (vgl. ), er wird in Abhängigkeit vom Volumendampfgehalt bestimmt:

$$1 - \frac{\theta_{strat}}{\pi} \cong \frac{\arccos(2 \cdot \alpha_v - 1)}{\pi} \quad (2.59)$$

wobei der Volumendampfgehalt nach der Zivi-Gleichung ermittelt wird:

$$\alpha_v = \frac{1}{1 + [(1 - x_m)/x_m](\rho_v/\rho_l)^{2/3}} \quad (2.60)$$

Die Nußelt-Zahl für die konvektive Kühlung im unteren Rohrbereich ist eine Funktion des Martinelli-Parameters und geht für  $x_m \rightarrow 0$  in die Dittus-Boelter-Gleichung über:

$$Nu_{FC} = 0,0195 \cdot Re_l^{0,8} Pr_l^{0,4} \left( 1,376 + \frac{c_1}{X_{tt}^{c_2}} \right)^{1/2} \quad (2.61)$$

mit den empirischen Konstanten  $c_1$  und  $c_2$ :

$$c_1 = \begin{cases} \min(7,242; 4,172 + 5,48 \cdot Fr_l - 1,564 \cdot Fr_l^2) & \text{für } Fr_l < 1 \\ 7,242 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.62)$$

$$c_2 = \max(1,655; 1,773 - 0,169 \cdot Fr_l) \quad (2.63)$$

$Fr_l$  ist die Froude-Zahl der flüssigen Phase

$$Fr_l = \frac{\dot{m}''}{\rho_l^2 \cdot g \cdot d_{Rohr,innen}} \quad (2.64)$$

$Ga_l$  ist die Galileo-Zahl der flüssigen Phase

$$Ga_l = \frac{g \cdot \rho_l (\rho_l - \rho_g) d_{Rohr,innen}^3}{\eta_l^2} \quad (2.65)$$

$Ja_l$  ist die Jakob-Zahl der flüssigen Phase

$$Ja_l = \frac{c_{p,l} (T_{sat} - T_{Wand})}{\Delta h_v} \quad (2.66)$$

$Re_{vo}$  ist die vapour-only Reynolds-Zahl

$$Re_{vo} = \frac{\dot{m}'' \cdot d_{Rohr,innen}}{\eta_g} \quad (2.67)$$

Das Kriterium für den Übergang von der Ring- in die geschichtete Strömung ist neben der Massenstromdichte  $\dot{m}''$  die Froude-Zahl nach Soliman:

$$Fr_{So} = \min(0,025 \cdot Re_l^{1,59}; 1,26 \cdot Re_l^{1,04}) \cdot \left( \frac{1 + 1,09 \cdot X_{tt}^{0,039}}{X_{tt}} \right)^{1,5} \frac{1}{Ga_l^{0,5}} \quad (2.68)$$

Der Übergang ist in ATHLET folgendermaßen implementiert:

- Für Massenflüsse  $\dot{m}'' < 495 \frac{kg}{m^2s}$  und  $Fr_{So} < 7$  wird die Nußelt-Korrelation für geschichtete Strömungen verwendet
- Für Massenflüsse  $\dot{m}'' > 505 \frac{kg}{m^2s}$  oder  $Fr_{So} > 20$  wird die Nußelt-Korrelation für Ringströmungen verwendet
- In den Übergangsbereichen von  $\dot{m}''$  und  $Fr_{So}$  wird zwischen beiden Nußelt-Korrelationen linear interpoliert

Für horizontale Rohre wird ab ATHLET 3.0 B das oben beschriebene Modell nach Dobson und Chato (1998) anstelle des Modells von Carpenter und Colburn verwendet. Für die laminare Filmkondensation in waagerechten Rohren wird weiterhin das Modell von Chato (1962) benutzt, allerdings mit einer leichten Modifizierung gegenüber dem bisher implementierten Modell:

Statt

$$htC_{lam.Film} = 0,296 \left[ \frac{\rho_l(\rho_l - \rho_v)g \cdot \Delta h_v \cdot \lambda_l^3}{\eta_l \cdot d_{Rohr,innen} \cdot (T_{Sat} - T_{Wand})} \right] \quad (2.69)$$

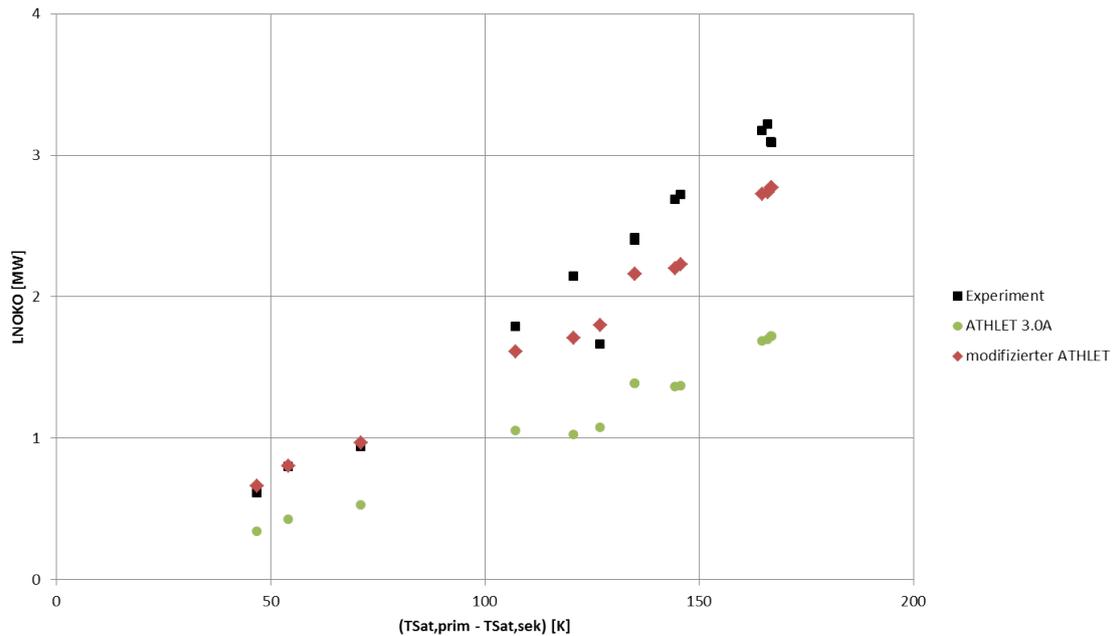
wird nun

$$htC_{lam.Film} = 0,728 \cdot \alpha_v \left[ \frac{\rho_l(\rho_l - \rho_v)g \cdot \Delta h_v \cdot \lambda_l^3}{\eta_l \cdot d_{Rohr,innen} \cdot (T_{Sat} - T_{Wand})} \right] \quad (2.70)$$

verwendet. Der Dampfvolumentgehalt wird dabei nach der weiter oben erwähnte Zivi-Gleichung (2.60) bestimmt.

### 2.6.3 Validierung

Die neuen Modelle wurden anhand der in /SCA96/ beschriebenen Versuche validiert. Im Vergleich zu den Rechnungen mit der ursprünglichen ATHLET-Version ohne Modifikationen haben sich die Simulationsergebnisse hinsichtlich der berechneten Notkondensatorleistung deutlich verbessert. Ein Beispiel ist in Abb. 2.28 gezeigt.



**Abb. 2.28** NOKO-Leistung in Abhängigkeit von der Differenz zwischen primär- und sekundärseitiger Wassertemperatur (auf beiden Seiten liegt Sättigungszustand vor). Schwarz: Experiment; Grün: ursprüngliche ATHLET-Version; Rot: modifizierte ATHLET-Version

Trotz der in Abb. 2.28 erkennbaren signifikanten Verbesserung der Simulationsergebnisse stellt man für höhere Temperaturdifferenzen zwischen Primär- und Sekundärseite Abweichungen zwischen Experiment und Rechnung von über 10 % fest. Weitere Validierungsrechnungen zu den Notkondensatorversuchen in der TOPFLOW-Anlage des HZDR /LAN14/ sowie zum INKA-Versuchsstand von AREVA /BUC14/ haben dieses Ergebnisverhalten bestätigt.

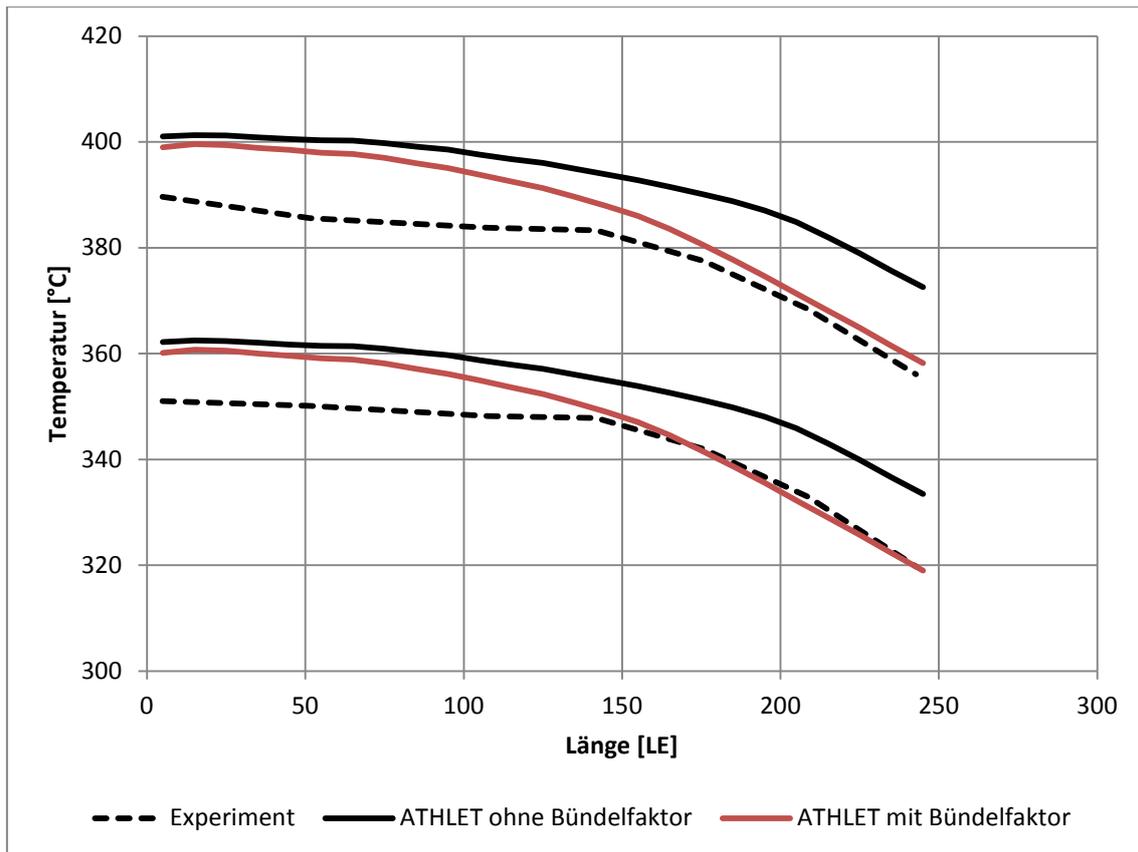
## 2.7 Wärmeübergang in Brennstabbüdneln

Der Wärmeübergang von einer Wand an ein Fluid oder auch umgekehrt ist bei längs durchströmten Brennstabbüdneln (Parallelströmung) größer als bei einem innen durchströmten Rohr. Die in ATHLET enthaltenen Wärmeübergangskorrelationen sind allerdings i. d. R. auf Basis von Experimenten mit einem innen durchströmten Rohr entwickelt und validiert worden und berücksichtigen diesen Effekt daher nicht. Hinsichtlich des berechneten Wärmeübergangs im Reaktorkern ist dieser Ansatz konservativ. Im Sinne eines *best-estimate* Verfahrens wurde die Implementierung nun überarbeitet und um einen Bündelfaktor ergänzt. Der Bündelfaktor  $\psi$  berücksichtigt gemäß der Formulierung von Inayatov /INA75/ für quadratisch angeordnete Brennstab- oder Rohrbündel den Pitch sowie den Außendurchmesser der Brennstäbe bzw. Rohre:

$$\psi = \frac{Pitch}{\varnothing_{da\ddot{u}ßen}} \quad (2.71)$$

Der Faktor ist immer größer oder gleich 1,0 und wird im Code auf den Maximalwert 1,5 begrenzt, da die in /INA75/ beschriebenen empirischen Untersuchungen nur Pitch-zu-Durchmesser-Verhältnisse bis maximal 1,6 beinhalten und die Bündel im Reaktorprimärkreislauf (d. h. vor allem in Reaktorkern und Dampferzeuger) i. d. R. Werte unterhalb von 1,5 aufweisen. Der Bündelfaktor wird in ATHLET der Dittus-Boelter-Gleichung und davon abgeleiteten Korrelationen (z. B. dem makroskopischen Anteil der Chen-Gleichung (2.54)) zugeschlagen.

Nachrechnungen von Brennstabbündelversuchen des Kurchatov-Instituts in Russland haben gezeigt, dass die Berücksichtigung des Bündelfaktors zu deutlich besseren Ergebnissen hinsichtlich des Wärmetransports an das unterkühlte Wasser führt als die Verwendung der Wärmeübergangskorrelationen ohne Bündelfaktor /VON14/. Exemplarisch ist das Ergebnis einer Simulation in Abb. 2.29 gezeigt. Die Kurven zeigen die experimentell ermittelten und berechneten Oberflächentemperaturen eines Brennstabs. Da die im Experiment verwendeten elektrisch beheizten Brennstäbe Hohlzylinder waren, sind jeweils zwei Kurven zu sehen – eine für die Brennstabinnenseite (das sind die höheren Temperaturen) und eine für die Außenseite. Die Brennstäbe wurden von außen mit Wasser konvektiv gekühlt. Das Kühlmittel strömte entgegen der Orientierung der Längsachse von 245 LE in Richtung 0 LE, weshalb die Temperaturen auch in diese Richtung ansteigen. Im hier betrachteten Versuch setzte ungefähr bei der Längeneinheit LE = 150 Blasensieden ein, was den abgeknickten Verlauf insbesondere der Experimentalkurve erklärt. Da das Kühlmittel entgegen der Längsbezeichnung strömte, bedeutet das, dass im Bereich 245 bis 150 LE erzwungene Konvektion und im Bereich 150 bis 5 LE konvektives Blasensieden vorlag. Für den Bereich der erzwungenen Konvektion (Wärmeübergang nach Dittus-Boelter) sieht man deutlich den Einfluss des Bündelfaktors. Auch beim konvektiven Blasensieden (Gleichung (2.54)) ist ein Einfluss sichtbar, wenn auch wesentlich geringer, da nur der zweite Summand in Gleichung (2.54) mit dem Bündelfaktor beaufschlagt wird.



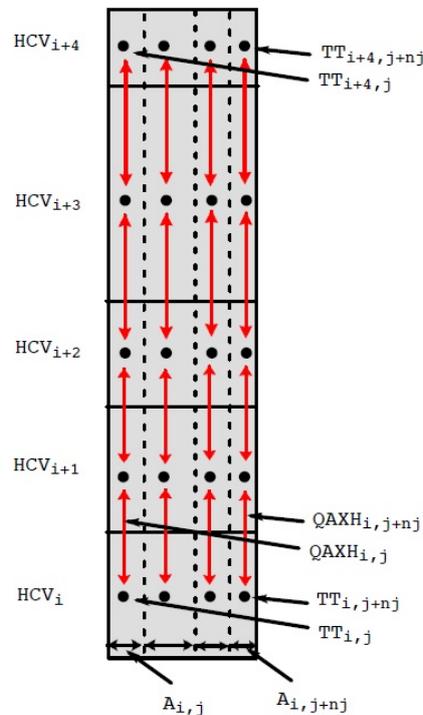
**Abb. 2.29** Vergleich experimentell ermittelter Brennstabtemperaturen mit berechneten Werten (mit und ohne Bündelfaktor) entlang der Brennstablänge (LE  $\triangleq$  Längeneinheiten)

In Kapitel 2.6.1.2 wurde erwähnt, dass die Simulationsergebnisse der hier beschriebenen Brennstabbündelnachrechnungen durch das Ersetzen der Thom-Gleichung durch die reale Temperaturdifferenz des vorangehenden Zeitschrittes deutlich verbessert werden konnten. Der Einfluss dieser Maßnahme auf die Ergebnisse war ähnlich signifikant wie der Einfluss der Einführung des Bündelfaktors. Alle Kurven Abb. 2.29 wurden mit ATHLET-Versionen berechnet, in welchen die Thom-Gleichung bereits ersetzt worden war.

## 2.8 2D Wärmeleitung in Strukturen

Die axiale Wärmeleitung in Strukturen wie z. B. Wänden oder Brennstäben kann normalerweise vernachlässigt werden, da die radialen Wärmeströme zum Kühlmittel in der Regel deutlich größer sind. Beim prismatischen Hochtemperaturreaktor hingegen gibt es Graphitblöcke, die von den umliegenden leistungserzeugenden Strukturen aufgeheizt werden und keinen Kontakt zum Kühlmittel haben (Abb. 2.30). Das dabei aufgeprägte axiale Temperaturprofil führt zu axialen Wärmeströmen, deren Berücksichtigung

den Temperaturverlauf deutlich beeinflussen kann. Deshalb wurde das ATHLET Wärmeleitmodul HECU um ein Modell zur Berechnung der axialen Wärmeströme erweitert. Da die dabei für jede Materialschicht berechneten Wärmequellterme mit der bisherigen Verwendung (z. B. im Brennstabmodell) kollidierten, mussten strukturelle Änderungen des Programms vorgenommen werden.



**Abb. 2.30** Schematische Darstellung der axiale Wärmeleitung

Das Modell für axiale Wärmeleitung berechnet separat für alle modellierten Temperaturschichten  $j$  der Wärmeleitelemente (WLE)  $i$  eines Wärmeleitobjekts den Wärmestrom in axialer Richtung. Dazu wird zunächst der Wärmeleitwiderstand  $R$  zwischen den Mittelpunkten axial benachbarter Temperaturschichten als Funktion der Distanz, der Materialquerschnittsfläche und des temperaturabhängigen spezifischen Wärmeleitwiderstandes berechnet (Gleichung (2.72)). Der Wärmestrom ergibt sich dann nach Gleichung (2.73). Zwischen benachbarten Wärmeleitobjekten wird kein Wärmestrom berechnet.

$$R_{i,j} = 0.5 \left( \frac{L_i}{A_{i,j} \lambda_{i,j}} + \frac{L_{i+1}}{A_{i+1,j} \lambda_{i+1,j}} \right) \quad (2.72)$$

$$QAX_{i,j} = \frac{TT_{i,j} - TT_{i+1,j}}{R_{i,j}} \quad (2.73)$$

$R_{i,j}$  Wärmeleitwiderstand der Temperaturschicht j zwischen den WLE i und i+1

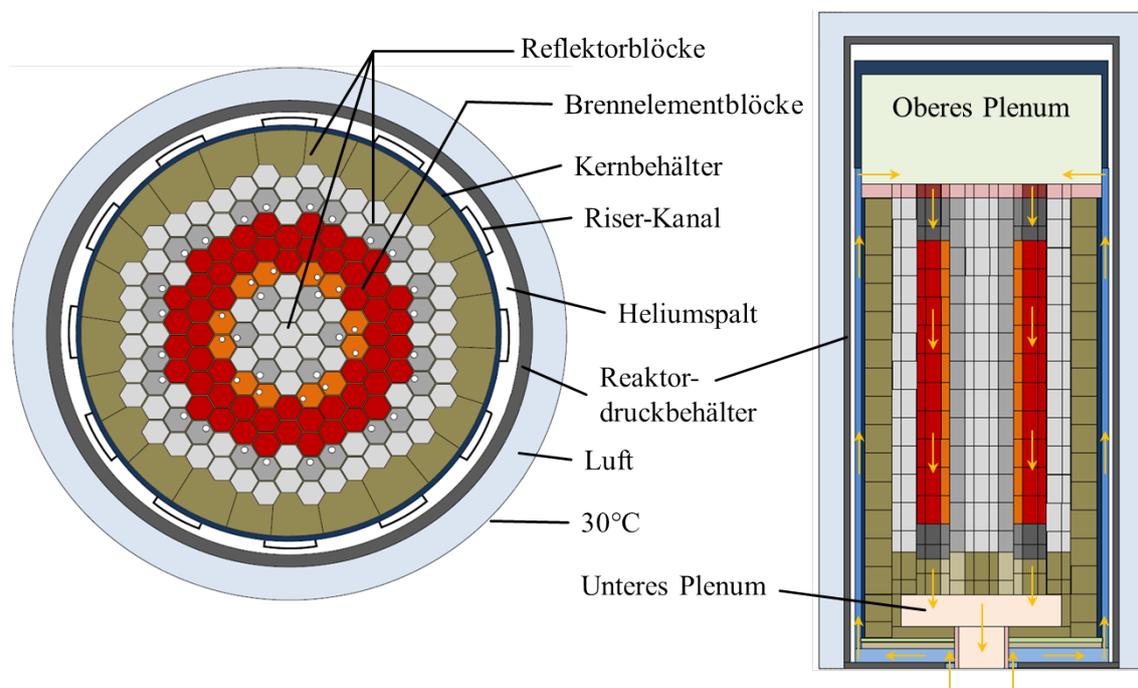
$QAX_{i,j}$  axialer Wärmestrom in der Temperaturschicht j zwischen den WLE i und i+1

$A_{i,j}$  Querschnittsfläche der Temperaturschicht j im WLE i

$L_i$  Länge des WLE i

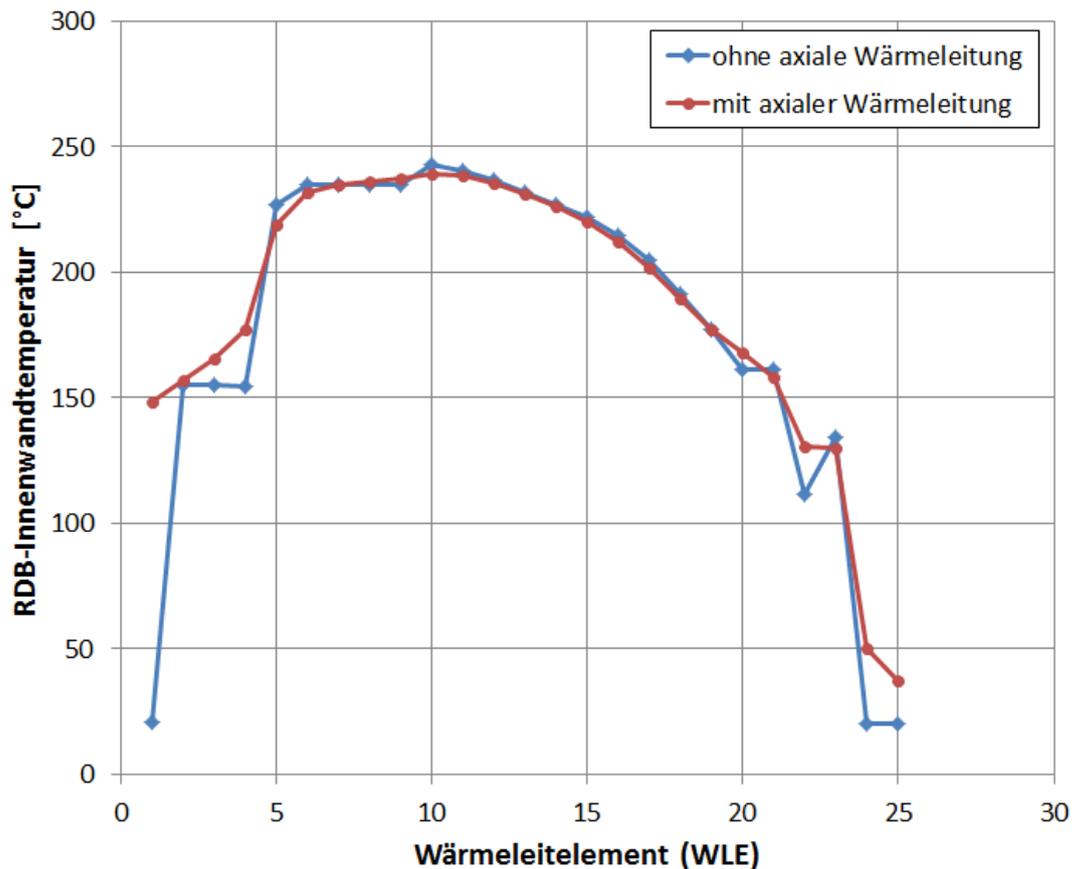
$\lambda_{i,j}$  spez. Wärmeleitwiderstand in der Temperaturschicht j im WLE i

Das Modell für axiale Wärmeleitung wurde bei der Simulation eines MHTGR350 Reaktors (gasgekühlter Hochtemperaturreaktor mit prismatischen Brennelementblöcken) im Rahmen eines OECD Benchmarks /ORJ13/ eingesetzt. In Abb. 2.31 ist das Reaktorlayout abgebildet; die im rechten Bild in orange dargestellten Pfeile verdeutlichen die Strömungsrichtung des Kühlmittels.



**Abb. 2.31** Radiale und axiale Ansicht des MHTGR-350 (entnommen aus /ORJ13/ und modifiziert)

In Abb. 2.32 ist die von ATHLET berechnete Innenwandtemperatur des Reaktordruckbehälters in axialer Richtung (von unten nach oben) dargestellt. Bei den Simulationen wurde sowohl ohne (blaue Kurve) als auch mit (rote Kurve) dem Modell für axiale Wärmeleitung gerechnet. Man sieht deutlich, wie die Temperaturkurve durch den Einsatz des Modells geglättet wird. Der Verlauf der roten Kurve wird gegenüber der blauen als realistischer eingeschätzt.



**Abb. 2.32** Axialer Verlauf der RDB-Innenwandtemperatur. Blau: Ohne Modell für axiale Wärmeleitung. Rot: Mit Modell für axiale Wärmeleitung

## 2.9 Weiterentwicklung des Wärmestrahlungsmodells

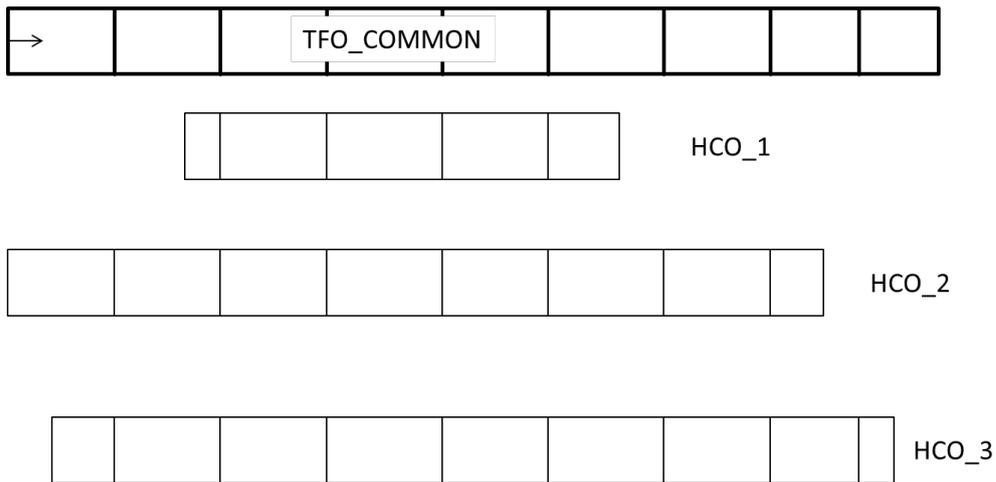
ATHLET verfügt über ein Wärmestrahlungsmodell, um die Übertragung von Strahlungswärme zwischen Strukturen, die in ATHLET als Wärmeleitobjekte (**H**eat **C**onduction **O**bject, HCO) modelliert werden, abzubilden. Die vorgenommenen Modellmodifikationen verfolgten das Ziel, die Handhabung des Wärmestrahlungsmodells zu erleichtern sowie bestehende Limitierungen bei gleichzeitiger Verwendung des neuen Modells zur axialen Wärmeleitung (siehe Kapitel 2.8) abzubauen. Hintergrund der Än-

derung war die Anforderung, das Strahlungsmodell wie auch das Modell für axiale Wärmeleitung bei der Simulation des Hochtemperaturreaktors MHTGR-350 einzusetzen.

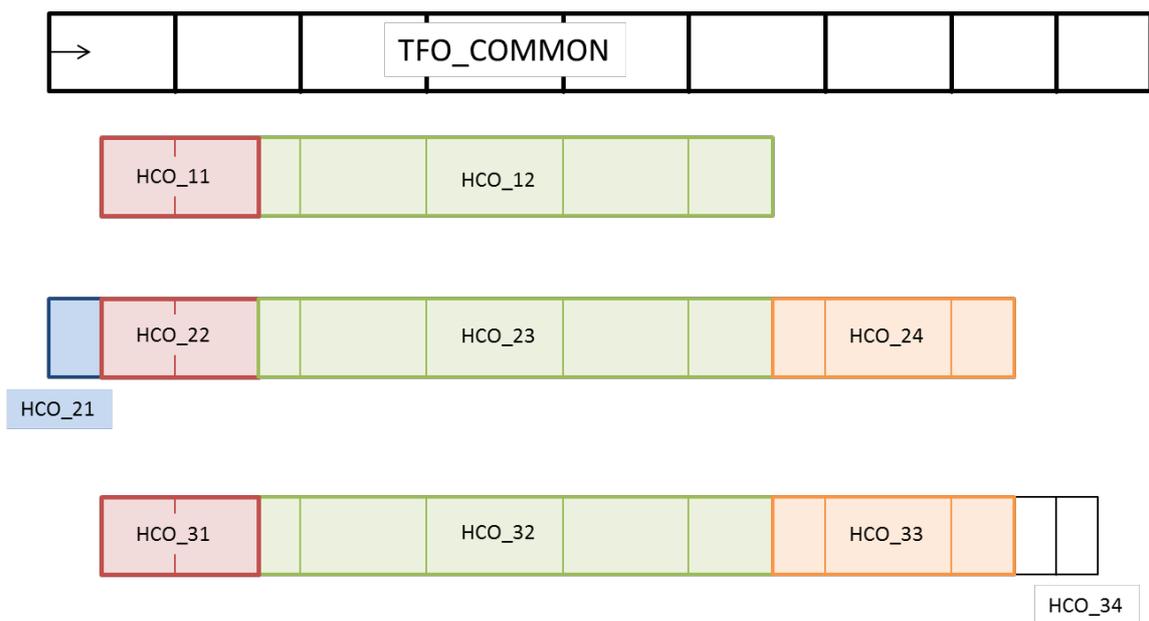
Bisher wurden für die Anwendung des Strahlungsmodells folgende Anforderungen an die Wärmeleitobjekte einer Strahlungsgruppe gestellt:

- Alle HCO müssen gleich lang sein
- Alle HCO müssen gleich nodalisiert sein
- Alle HCO müssen in die gleiche Richtung definiert sein (die Richtung des TFO, welches für die Strahlungsgruppe namensgebend ist)

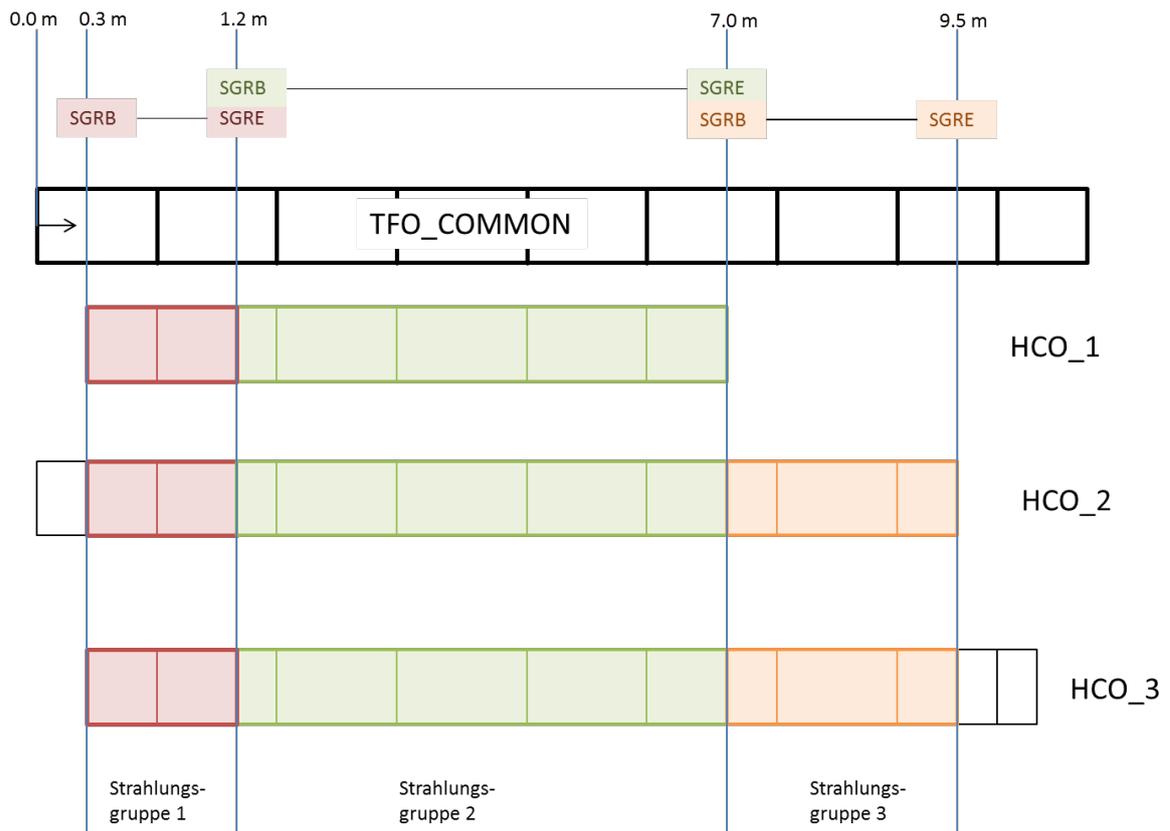
Das Modell wurde nun derart modifiziert, dass die ersten beiden Einschränkungen wegfallen. Dies wird im Folgenden anhand eines Beispiels illustriert. Gegeben sei ein TFO „TFO\_COMMON“ mit drei angrenzenden HCO (HCO\_1, HCO\_2, HCO\_3), vgl. Abb. 2.33. Soll zwischen den HCO Strahlungswärmeaustausch stattfinden, muss man sie bei Verwendung des bisherigen Modells aufgrund der o. g. drei Punkte splitten wie in Abb. 2.34 gezeigt. Möchte man nun zusätzlich mit axialer Wärmeleitung rechnen, ergibt sich das Problem, dass diese nur innerhalb eines HCO, nicht aber über HCO-Grenzen hinweg berechnet werden kann; es könnte also z. B. keine Wärmefluss von HCO\_23 zu HCO\_24 simuliert werden. Verwendet man das erweiterte Strahlungsmodell, müssen die HCO nicht aufgeteilt werden (Abb. 2.35). Das hat den Vorteil, dass axiale Wärmeleitung auf der ganzen Länge berechnet werden kann. Allerdings muss der Anwender zwei zusätzliche Eingaben pro Strahlungsgruppe im Datensatz spezifizieren: SGRB und SGRE (Koordinaten von Strahlungsgruppenbeginn und -ende). Diese Koordinaten sind auf den TFO-Ursprung zu beziehen. In Abb. 2.36 ist ein Beispiel-Input für Strahlungsgruppe 2 gegeben.



**Abb. 2.33** Drei HCO grenzen an ein gemeinsames TFO



**Abb. 2.34** Aufteilung der ursprünglich drei HCO in zehn HCO bei Verwendung des alten Wärmestrahlungsmodells



**Abb. 2.35** HCO ohne Aufteilung bei Verwendung des erweiterten Wärmestrahlungsmodells

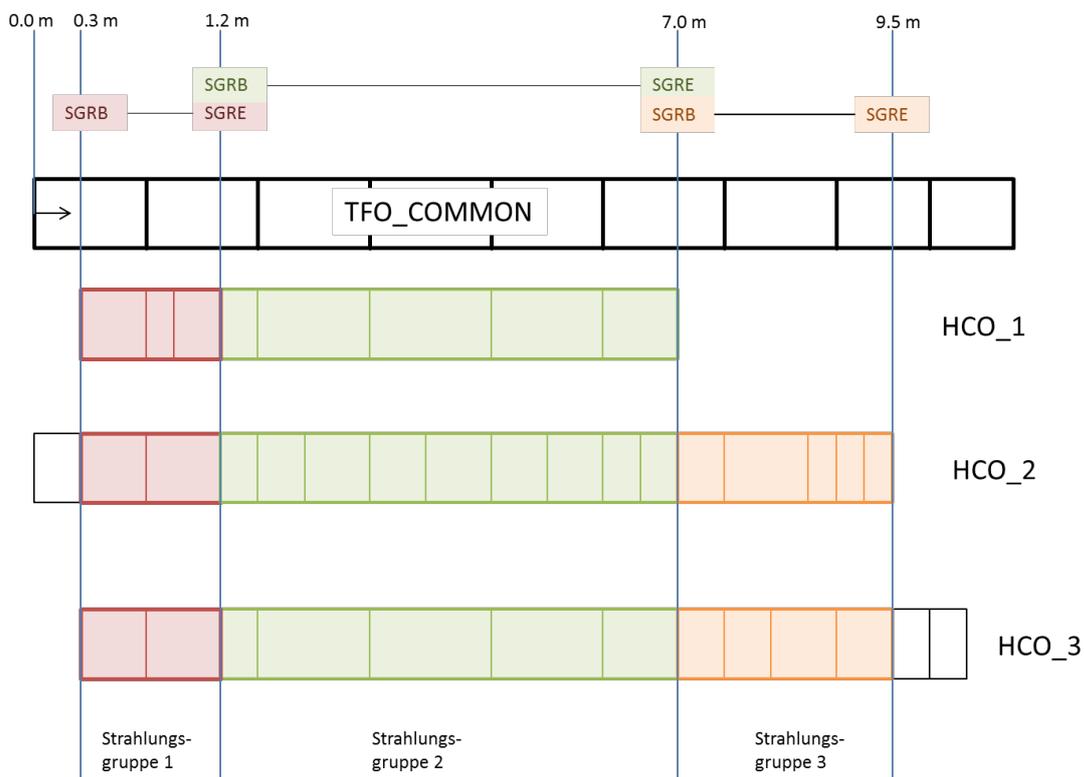
```

@-----
----- TFO_COMMON
@ IRDGeo  NBOD
0        3
@ VOID    TWALL
0.1      10.0
@ SGRB    SGRE
1.2      7.0
@ ANAMRD          EPSRAD
HCO_1        0.85
HCO_2        0.85
HCO_3        0.85
@ VIEW_11  VIEW_12  VIEW_13  VIEW_14  VIEW_15  VIEW_16  VIEW_17
0.2        0.4      0.4      0.0      0.0      0.0      0.0
@ VIEW_21  VIEW_22  VIEW_23  VIEW_24  VIEW_25  VIEW_26  VIEW_27
0.5        0.2      0.3      0.0      0.0      0.0      0.0
@ VIEW_31  VIEW_32  VIEW_33  VIEW_34  VIEW_35  VIEW_36  VIEW_37
0.1        0.3      0.6      0.0      0.0      0.0      0.0
@
@-----

```

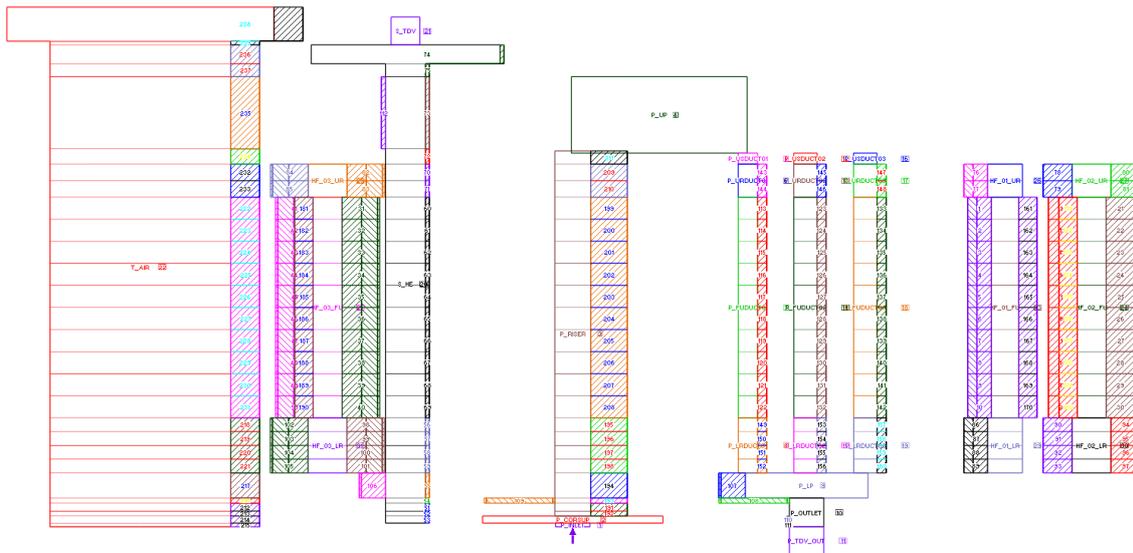
**Abb. 2.36** Beispiel-Eingabe für die grüne Strahlungsgruppe in Abb. 2.35 Man beachte die neue Zeile mit SGRB und SGRE

Um das Modell flexibel einsetzen zu können, sind auch zum TFO negativ-orientierte Gruppen oder Gruppen mit unregelmäßiger Nodalisierung wie in Abb. 2.37 möglich. Eine solche Nodalisierung kann daher rühren, dass die HCO nicht nur an TFO\_COMMON, sondern auch an andere TFO mit verschiedener Nodalisierung gekoppelt sind. Falls HCO in negativer Laufrichtung zum TFO definiert sind (z. B. TFO von unten nach oben, aber die HCO von oben nach unten), ist zu beachten, dass SGRB und SGRE in Richtung der TFO-Definition vorzugeben sind; es muss immer gelten  $SGRB < SGRE$ .

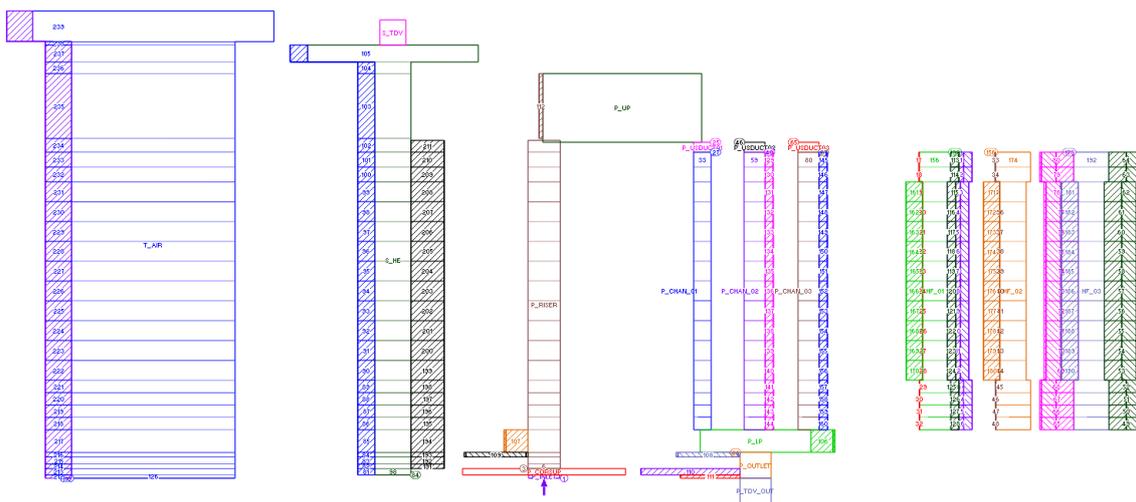


**Abb. 2.37** Unregelmäßige Nodalisierung

In Abb. 2.38 und Abb. 2.39 sind zwei mit dem alten bzw. mit dem erweiterten Wärmestrahlungsmodell verwendete Geometriemodelle des MHTGR-350 gezeigt. Dargestellt sind sowohl TFO als auch HCO, letztere schraffiert. Beide Modelle liefern gleiche Simulationsergebnisse. Es ist zu erkennen, dass bei Verwendung des neuen Modells die Anzahl an HCO, die vom Anwender spezifiziert werden müssen, deutlich (ca. um den Faktor 3) reduziert werden konnte.



**Abb. 2.38** MHTGR-Modell mit altem Strahlungsmodell



**Abb. 2.39** MHTGR-Modell mit erweitertem Strahlungsmodell

## 2.10 Simulation elektrischer Heizleiter

In den meisten Versuchsanlagen werden die Brennstäbe elektrisch beheizt. Ändert sich der elektrische Widerstand des die Wärme erzeugenden Heizkörpers mit dessen Temperatur, so ändert sich bei vorgegebener Stromstärke sowohl die Gesamtleistung als auch die axiale Leistungsverteilung der einzelnen Brennstäbe. Da der elektrische Widerstand metallischer Leiter einen positiven Temperaturkoeffizienten aufweist, steigt bei lokaler Aufheizung in einem Brennstab an diesem Ort auch die Wärmeerzeugung, was die Aufheizung noch verstärkt. Im in ATHLET üblicherweise eingesetzten Brenn-

stabmodell bleibt hingegen die axiale Leistungsverteilung während der gesamten Rechnung konstant auf dem eingelesenen Wert. Im ATHLET-Modell zur Simulation von elektrischen Heizleitern hingegen wird sowohl die stationäre Leistungsverteilung berechnet als auch die Änderung des elektrischen Widerstands bei der Wärmeerzeugung berücksichtigt. Dieses Modell stammt noch vom Vorgängerprogramm DRUFAN und wurde in ATHLET nie angewendet. Durchgeführte Tests zeigten, dass es nicht ablauffähig war. Es konnte auch nicht in Kombination mit anderen Brennstabmodellen (GCSM-gesteuert, Punktkinetik) angewendet werden. Das Modell wurde umfassend überarbeitet und besser in die ATHLET-Struktur eingepasst. Es kann nun flexibel für jede Art von elektrischer Heizung eingesetzt werden, auch in Kombination mit den anderen in ATHLET verfügbaren Brennstabmodellen. Damit ist es bspw. möglich, neben einer Punktkinetik-Simulation für den Kern noch einen elektrischen Heizleiter im Thermofluidnetzwerk zu simulieren.

## **2.11 Erweiterung des Turbinenmodells**

### **2.11.1 Ausgangssituation**

Das Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart untersucht ein neuartiges System zur passiven Nachwärmeabfuhr in Kernkraftwerken. Dabei wird die Nachwärme mittels eines Joule-Brayton-Prozesses an die Umgebung abgeführt. Als Arbeitsmedium wird superkritisches Kohlendioxid verwendet. Das System besteht aus mehreren getrennten Kompressor-Turbinen-Einheiten, die je nach abzuführender Nachwärme zu- oder weggeschaltet werden /VEN14/.

Das in ATHLET bereits vorhandene Turbinenmodell ist prinzipiell für die Simulation dieses neuen Nachwärmeabfuhrsystems geeignet. Allerdings wurde es für die Simulation des Dampfturbinen-Generator-Systems eines Kernkraftwerks entwickelt und weist folgende Einschränkungen auf: Da im Kraftwerk alle Dampfturbinen auf einer Welle sitzen und damit alle die gleiche Drehzahl aufweisen, kann ATHLET auch nur das dynamische Drehzahlverhalten einer einzigen Turbinen-Generator-Einheit berechnen. Weiter kann das ATHLET-Turbinenmodell das Turbinenverhalten nur in einem gewissen Bereich um den Auslegungspunkt wiedergeben. „Extreme“ Betriebspunkte wie z. B. Stillstand können nicht berechnet werden. Bisher war das auch nicht notwendig, da das Anfahren der Dampfturbine für den Reaktor selbst keine besondere sicherheitstechnische Relevanz aufweist.

## 2.11.2 Durchgeführte Arbeiten

Um das Verhalten einer Gesamtanlage mit dem neuen Nachwärmeabfuhrsystem mit ATHLET simulieren zu können, muss das dynamische Drehzahlverhalten von mehreren Kompressor-Turbinen-Einheiten simuliert werden können. ATHLET wurde derart erweitert, dass eine beliebige Anzahl von sogenannten Turbo-Sets definiert werden kann. Jedes Turbo-Set kann aus einer beliebigen Anzahl Turbinen bestehen, die auf einer gemeinsamen Welle sitzen und wahlweise mit einem Generator verbunden sind. Der ATHLET-Input wurde entsprechend geändert und zahlreiche Fehlerkontrollen für die vom Anwender übergebenen Daten eingebaut.

Eine wichtige Fragestellung bei der Simulation der Gesamtanlage ist vor allem das Anlagenverhalten beim Anlaufen des neuen Nachwärmeabfuhrsystems. Dieses Anlaufverhalten konnte von ATHLET bisher nicht simuliert werden, da die Grundlage des Turbinenmodells in ATHLET das Kegel-Gesetz nach Stodola bildet, das das Turbinenverhalten nur in einem gewissen Bereich um den Auslegungspunkt wiedergeben kann:

$$\Delta p(\dot{m}, p_a) = p_a - \sqrt{p_a^2 - p_a \frac{p_{a0} \left(1 - \left(\frac{p_{b0}}{p_{a0}}\right)^2\right)}{\left(\frac{\dot{m}_0}{\dot{m}}\right)^2 \sqrt{\frac{p_{a0}}{\rho_a}}}} \quad (2.74)$$

Der Index "0" steht hierbei für den entsprechenden Wert im Auslegungszustand, "a" für den Zustand am Turbineneintritt und „b“ für den am Austritt. Der Turbinenbetrieb bei sehr niedrigen Drehzahlen oder sogar Stillstand kann mit dem Stodola-Gesetz grundsätzlich nicht berechnet werden. Daher wurde bisher bei jedem ATHLET-Rechenlauf vorausgesetzt, dass eine Turbine zu Beginn der Rechnung im Auslegungspunkt arbeitet. Da normalerweise eine Störfallsimulation mit dem Vollast-Zustand beginnt, stellte das bisher keine Einschränkung dar.

Um im Rechenlauf eine Turbine aus dem Stillstand heraus starten zu können, ist es notwendig, den Drehzahlbereich zwischen null und der Minimaldrehzahl, für die das Stodola-Gesetz anwendbar ist, geeignet zu modellieren.

Hierfür wurde der folgende Ansatz gewählt:

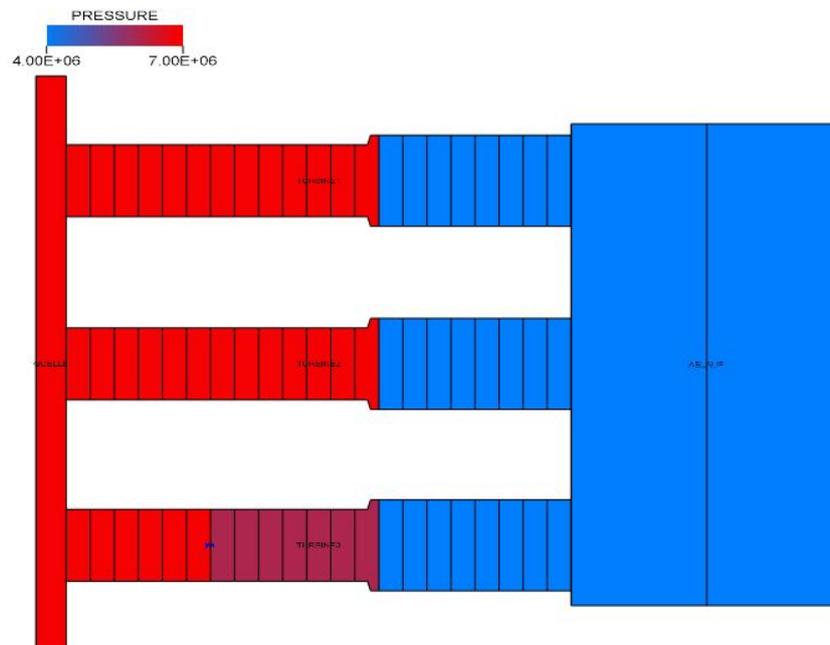
$$\Delta p(\dot{m}, \omega) = \Delta p_0 \cdot \frac{\omega}{\omega_0} \frac{\dot{m}}{\dot{m}_0} + \zeta_{Tu} \frac{\rho}{2} v^2 \quad (2.75)$$

Diese Gleichung ergibt für die Drehzahl  $\omega = 0$  den reinen Strömungsdruckverlust über die Turbine mit Formverlustfaktor  $\zeta_{Tu}$  und für Drehzahlen und Massenströme größer Null zusätzlich den relativen Anteil der Druckdifferenz im Auslegungspunkt.

### 2.11.3 Erzielte Ergebnisse

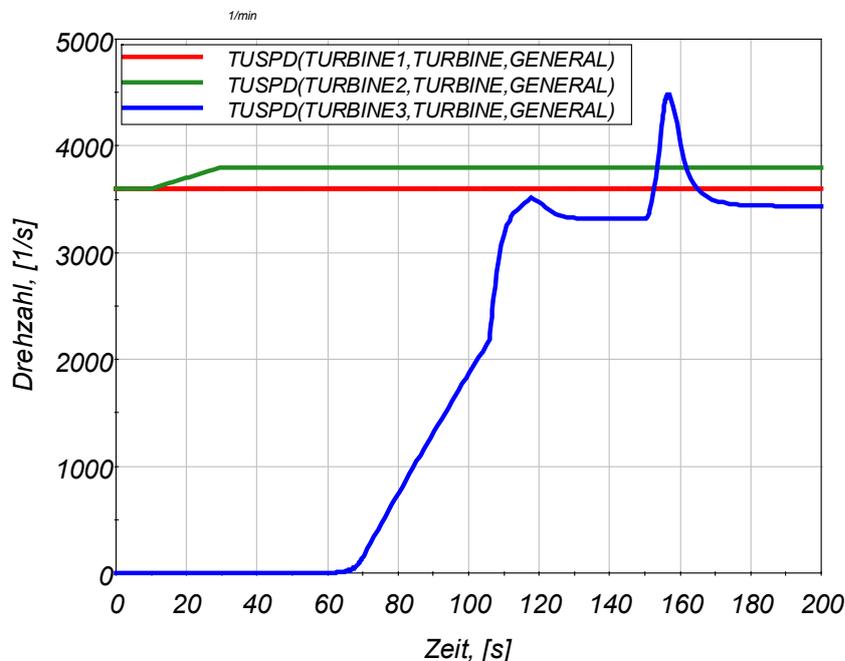
Das ATHLET-Turbinenmodell konnte derart verbessert und erweitert werden, dass es jetzt eine beliebige Anzahl von Turbinen-Generator-Einheiten voll dynamisch simulieren kann. Weiter ist es jetzt möglich, dass die Turbinen zu Beginn einer Rechnung stehen und erst während der Transiente hochfahren.

In Abb. 2.40 ist die ATHLET-Nodalisierung eines Testfalls zu sehen, bei dem drei unabhängige Turbinen in parallelen Strömungspfaden angeordnet sind. Auf der linken Seite stromaufwärts der Turbinen herrscht als Randbedingung ein konstanter Druck von 69 Bar, auf der rechten Seite wird mittels eines Fills ein definierter Massenstrom entnommen. Als Arbeitsmedium wurde Helium verwendet.



**Abb. 2.40** Nodalisierung des Testbeispiels von drei getrennten Turbinen

In Abb. 2.40 ist der Druck farbcodiert dargestellt. Deutlich zu sehen ist, wie er über die Turbinen von 69 bar (rot) auf etwa 40 bar (blau) abfällt. Vor der dritten Turbine (im Bild unten) ist zusätzlich ein Ventil modelliert, weshalb der Druck etwa in der Mitte der Zuleitung schon leicht sinkt. Zu Beginn der Rechnung laufen die beiden oberen Turbinen (Turbinen 1 und 2) mit der gleichen Drehzahl von 3600 U/min, die dritte Turbine steht (siehe Abb. 2.41). Die Drehzahlen von Turbine eins und zwei werden durch GCSM-Signale vorgegeben, wohingegen die Drehzahl von Turbine drei frei ist und dynamisch berechnet wird. Zum Zeitpunkt 10 s wird die Drehzahl von Turbine 2 langsam angehoben bis auf 3800 U/min. Das Ventil vor Turbine 3 beginnt sich bei 60 s zu öffnen, so dass die Turbine beginnt, sich zu drehen und zu beschleunigen. Die Drehzahl steigt zunächst linear an, da das Verhalten in diesem niedrigen Drehzahlbereich von dem neu implementierten Modell (Gleichung (2.75)) bestimmt wird. Nach 106 s ist die Drehzahl soweit angestiegen, dass das reguläre Turbinen-Modell angewendet werden kann, die Drehzahl weist ab hier kein lineares Verhalten mehr auf. Um ein weiteres Beschleunigen der Turbine zu verhindern, wird nach 118 s eine simulierte Last auf die Turbine zugeschaltet, wodurch sich die Drehzahl bei 3320 U/min stabilisiert. Das Ventil, das den Zustrom zu Turbine 3 regelt, wird bei 150 s weiter geöffnet, was sich sofort in einem starken Anstieg der Drehzahl zeigt. Durch eine Erhöhung der Turbinenlast wird der Drehzahlanstieg abgefangen und wieder ein stationärer Wert erreicht.



**Abb. 2.41** Drehzahlverlauf für die drei Turbinen des Testbeispiels

#### **2.11.4 Fazit**

Die vorgestellte Testrechnung illustriert, dass es durch die Erweiterungen von ATHLET jetzt möglich ist, mehrere unabhängige Turbinen mit unterschiedlichem Drehzahlverhalten zu simulieren. Weiterhin kann auch der Anfahrvorgang der Turbine vom Stillstand bis zur Normaldrehzahl gerechnet werden. Allerdings ist das für extrem niedrige Drehzahlen verwendete Modell vergleichsweise einfach, so dass die Eignung des Modells im Rahmen von Validierungsrechnungen noch geprüft werden muss.

#### **2.12 Verbesserung und Optimierung weiterer Modelle**

Neben den oben detaillierter beschriebenen Modellerweiterungen wurden im Rahmen dieses Projektes zahlreiche weitere Verbesserungen der thermohydraulischen Modelle durchgeführt, die nachfolgend kurz beschrieben werden. Darunter waren auch Entwicklungsarbeiten, die in der Projektplanung nicht explizit vorgesehen waren, sondern sich aus dem Erfahrungsrückfluss aus der Programmanwendung als vorteilhaft oder gar notwendig erwiesen haben. Die Modelländerungen sind nachfolgend beschrieben.

##### **Nichtkondensierende Gase**

Als weiteres nichtkondensierendes Gas wurde das Edelgas Argon in ATHLET implementiert. Zur Approximation der Wärmeleitfähigkeit und der dynamischen Viskosität wurden geeignete Polynome entwickelt. Argon wird häufig als Polstergas bzw. Schutzgas bei flüssigmetallgekühlten Reaktoren eingesetzt (z. B. Natrium).

In der ATHLET-Startrechnung werden nichtkondensierende Gase als Wasserdampf behandelt, da das hierfür verwendete 4-Gleichungsmodell die Gase nicht modellieren kann. Die Gase werden erst zu Beginn der transienten Rechnung initialisiert. Für die bisherigen Anwendungen war diese Vorgehensweise ausreichend, da im stationären Ausgangszustand nur in wenigen Anlagenteilen Gase vorhanden sind (z. B. das Polstergas in den Druckspeichern). Da in den stationär nichtdurchströmten Teilen von GEN-IV Reaktoren und deren dedizierten Versuchsanlagen Gase in größerem Umfang eingesetzt werden, wird nun bereits in der Startrechnung für die Berechnung des hydrostatischen Drucks nicht mehr die Wasserdampfdichte sondern die Gasdichte verwendet. Damit verbessert sich die Berechnung der stationären Druckverteilung erheblich.

### **Time dependent volume**

Im *time dependent volume*, das zur Simulation einer Druck-Enthalpie-Randbedingung dient, können auch Inertgase algebraisch vorgegeben werden. Das Modell wurde verbessert, so dass nun nicht mehr nur maximal drei sondern beliebig viele Gase simuliert werden können.

### **Startrechnung**

Im Rahmen einer Masterarbeit /EIS13/ wurde ein ATHLET-Simulationsmodell des von der Kraftwerks-Simulator-Gesellschaft (KSG) in Essen betriebenen Glasmodells erstellt. Charakteristische Merkmale dieses Modells sind die geringe Leistungsdichte und der sehr niedrige Druck. Der sekundärseitige Druck beträgt stationär weniger als 1 bar, die Geschwindigkeit der flüssigen Phase auf der Dampferzeugersekundärseite deutlich weniger als 1 mm/s. Diese ungewöhnlichen Bedingungen ließen die ATHLET-Startrechnung scheitern. Die Analyse dieser Simulationsrechnungen durch die ATHLET-Entwickler ergab, dass das Iterationsverfahren zur Ermittlung des stationären Dampfgehaltes mit dem verwendeten Schlupfmodell bei dem hohen Dichteverhältnis zwischen Wasser und Dampf von etwa 2000 nicht konvergierte. Diese Programmschwäche konnte beseitigt werden.

Bei Dampf-Gas-Gemischen konnte die Berechnung der stationären Gemischspiegelhöhe falsch sein; der Fehler wurde behoben.

### **Druckhalterabblasen**

Bei der Simulation von Transienten mit Druckhalterabblasen wurden Rechnungen wegen sehr hoher Wassertemperaturen im Druckhalterabblasebehälter abgebrochen. Die Analyse der Rechnungen ergab, dass schon vorher abgeblasen worden war und die Druckhalterabblaseleitung deshalb vollständig mit heißem Wasser unter hohem Druck gefüllt war. Beim erneuten Öffnen des Abblaseventils strömte dieses heiße Wasser in den Abblasebehälter, in dem ein Druck von etwa 1 bar herrschte, und überschritt die in diesem Kontrollvolumen maximal erlaubte Flüssigkeitstemperatur erheblich (generisches Problem eines Finite-Volumen-Modells). Es wurde eine Methode entwickelt, die für solche Fälle genau so viel heißes Wassers schon beim Einströmen in ein Kontrollvolumen verdampft und dadurch die Flüssigkeit abkühlt, so dass die Grenzen der Stoffwertapproximation nicht mehr überschritten werden.

## Wärmeübergang

Bei ATHLET-Simulationen des Glasmodells der KSG /EIS13/ kam es immer wieder zu Zeitschrittweiten, die deutlich kleiner waren als für die jeweilige Rechenphase angemessenen. Die Analyse der Rechenergebnisse ergab, dass es in einem Wärmeleitobjekt, das die ungedämmte Außenwand der Dampferzeugersekundärseite und die dort auftretenden Wärmeverluste modelliert, zu starken Schwankungen der Oberflächentemperatur kam. Da die Oberflächentemperatur unterhalb der Sättigungstemperatur lag und das Fluid im Dampferzeuger an dieser Stelle zweiphasig war, kam es zur Filmkondensation. Damit verbunden ist die starke Abhängigkeit des Wärmeübergangs (WÜ) von der Wandtemperatur, genauer gesagt, von der Unterkühlung der Wand im Vergleich zur Sättigungstemperatur. Eine starke Unterkühlung erhöht den WÜ-Koeffizienten, wodurch die Wandtemperatur ansteigt und damit der WÜ-Koeffizient wiederum abnimmt. Es kommt also zu einem zickzack-förmigen Verlauf der WÜ-Koeffizienten und damit auch der mit dem Fluid ausgetauschten Wärmeströme (s. Abb. 2.42).

Dieses Problem war bereits früher aufgetreten und wurde dadurch gelöst, dass die Oberflächentemperatur mit Hilfe eines Zeitglieds gedämpft wird, wobei die Zeitkonstante unter Berücksichtigung der Ortsdiskretisierung und der Materialeigenschaften des Wandmaterials (Dichte, Wärmeleitfähigkeit, spezifische Wärmekapazität) bestimmt wird. Allerdings wurde diese Methode bisher nur für „homogene“ Wärmeleitelemente angewendet und nicht für solche, die im Bereich unmittelbar unterhalb eines Gemischspiegels liegen, da hier in der Regel Filmkondensation keine signifikante Rolle spielt. Im hier betrachteten Glasmodell kam es aber genau hier zu den numerischen Problemen, wohl auch, weil die Wand thermisch nicht isoliert ist (Glasmodell!), und der Druck unter 1 bar liegt und damit der Dichteunterschied zwischen Wasser und Dampf besonders groß ist. Nach der Anpassung der Dämpfungsmethode auch für Wärmeleitelemente im Bereich eines Gemischspiegels lief die Simulation numerisch stabil (s. Abb. 2.43).

Die in den Abbildungen dargestellten Größen sind:

- TTL: Fluidtemperatur links (im DE)
- TLS: Sättigungstemperatur links
- TSL: Oberflächentemperatur links
- TSL: Oberflächentemperatur rechts (außen)
- TT/1: Temperatur in Wandmitte

QHL: Wärmestrom vom Gemisch zur Wand, links

QHVL: Wärmestrom vom Dampf zur Wand, links

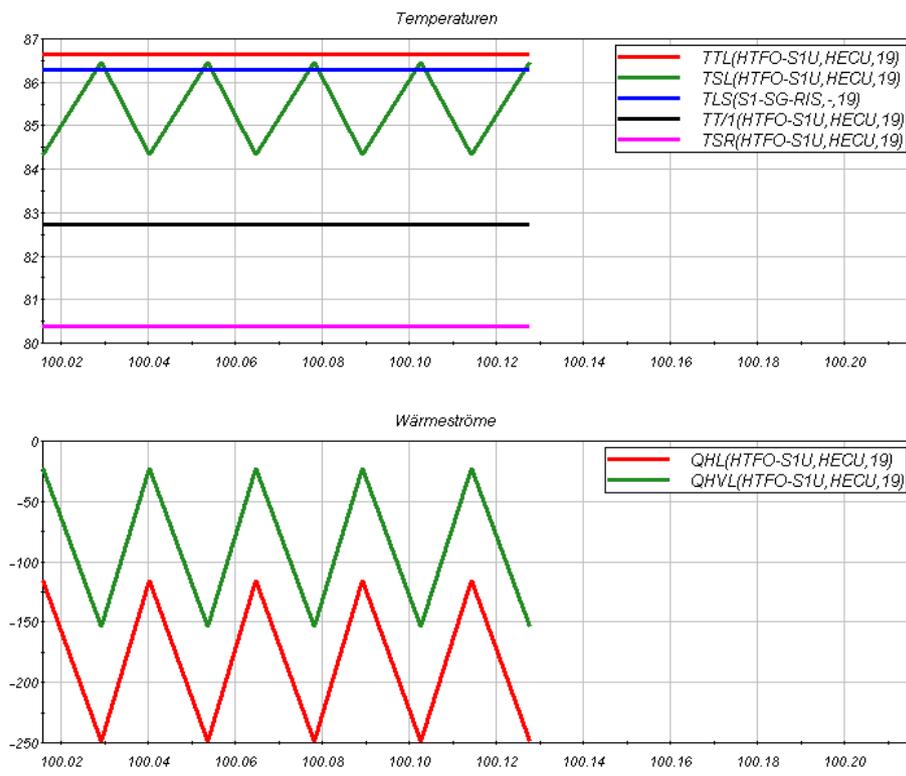
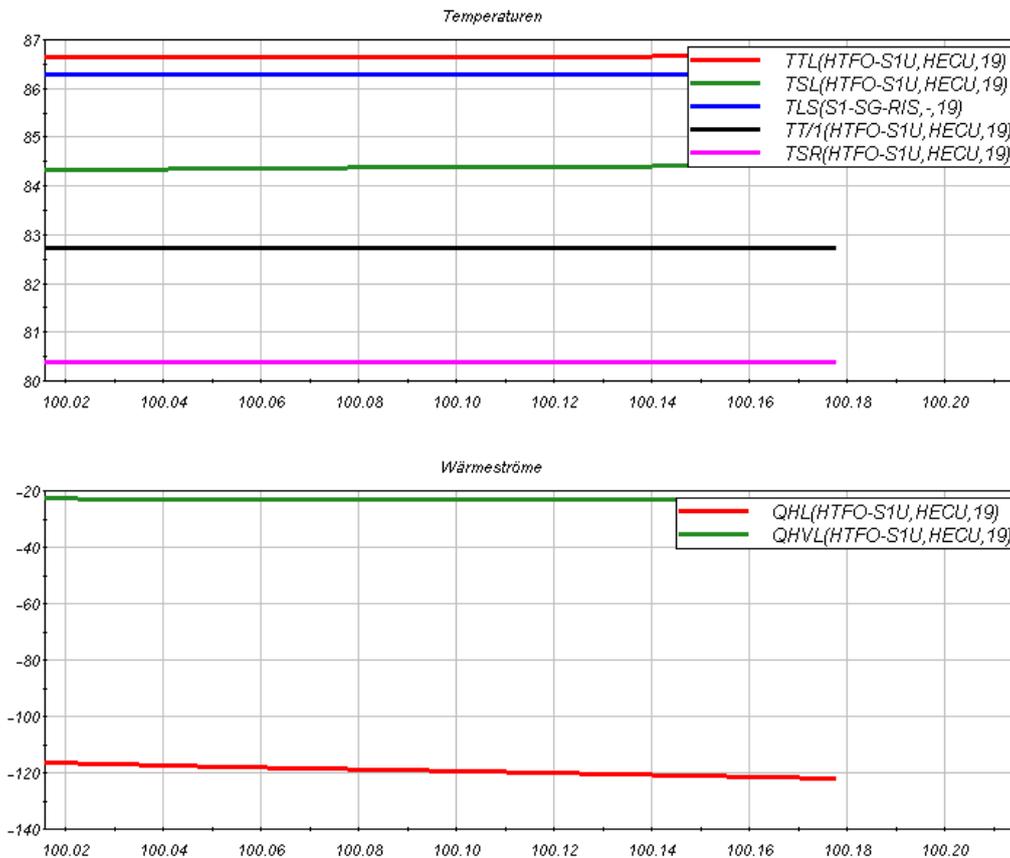


Abb. 2.42 Temperaturen (oben) und Wärmeströme (unten) vor der Modelländerung



**Abb. 2.43** Temperaturen (oben) und Wärmeströme (unten) nach der Modelländerung

### Rückschlagventil

ATHLET bietet prinzipiell zwei verschiedene Ventiltypen an, das sogenannte Standard-Ventil, bei dem die jeweils aktuelle Ventilfläche durch ein GCSM-Signal vorgegeben werden muss, und ein einfaches Rückschlagventil, das je nach Druck- und Strömungsverhältnissen in der Leitung entweder komplett offen oder geschlossen ist. Der eigentliche Öffnungs- und Schließvorgang wird hierbei nicht simuliert. Bei Strömungen, die durch aktive Systeme wie Pumpen erzwungen werden, ist i. d. R. die Druckdifferenz über das geschlossene Ventil so groß, dass das Rückschlagventil schnell aufgedrückt wird und die sich einstellende Strömung das Ventil zuverlässig offen hält. Daher ist die bisherige einfache Modellierung des Rückschlagventils in ATHLET in diesem Fall ausreichend. Bei neueren Reaktorkonzepten werden allerdings vermehrt passive Systeme eingesetzt, die z. B. nur aufgrund der Schwerkraft einspeisen und bei denen deshalb nur geringe Druckdifferenzen und Massenströme auftreten. Ein Rückschlagventil wird in diesem Fall nur langsam und eventuell nicht komplett aufgedrückt und auf geringe Änderungen des Drucks auf der Stromabwärtsseite kann das Ventil bereits reagieren.

Daher ist es in einem solchen Fall notwendig, die Bewegung der Rückschlagklappe detailliert dynamisch zu simulieren.

Als Basis für das neu implementierte Rückschlagventil diente eine Modellierung, die im Rahmen eines Studentenprojektes außerhalb des ATHLET Quellcodes in PYTHON programmiert wurde, um eine ebenfalls in diesem Studentenprojekt entwickelte Schnittstelle zwischen ATHLET und PYTHON zu überprüfen (siehe Kapitel 5.3.5). Die PYTHON-Implementierung wurde neu in FORTRAN implementiert, wobei zahlreiche Korrekturen und Verbesserungen durchgeführt wurden. Weiter wurden mehrere Schnittstellen-Routinen in ATHLET erweitert, damit die neuen Routinen korrekt aufgerufen werden. Außerdem mussten in ATHLET die Routinen zum Einlesen des Datensatzes geändert werden, damit das neue dynamische Rückschlagventilmodell vom Nutzer aufgerufen werden kann und alle für das Modell notwendigen Ventilparameter eingelesen werden.

Damit steht dem Anwender in ATHLET ein voll dynamisches Rückschlagventil zur Verfügung, dass unter dem Control Word *Valve* durch Setzen von ITYPV aufgerufen wird. Weitere Größen, die der Anwender angeben muss, sind die Länge der sich bewegendes Klappe sowie deren Gewicht und Trägheitsmoment. In ersten Testrechnungen konnte die Neuimplementierung erfolgreich verifiziert werden.

### **3 Entwicklung eines ATHLET internen 2D/3D Modells**

Mit der Entwicklung eines programminternen 3D-Modells soll in ATHLET die Möglichkeit geschaffen werden, makroskopische mehrdimensionale Strömungen, wie sie insbesondere in großen Behältern wie beispielsweise dem Reaktordruckbehälter (RDB) auftreten, vollständig mehrdimensional zu simulieren. Dies ist für ein Spektrum von Ereignissen erforderlich, die wesentlich von mehrdimensionalen Phänomenen dominiert werden, wie etwa Deborierungsereignisse oder Kühlmittelverluststörfälle. Als weiteres Anwendungsgebiet sind große Wasserpools geplant, die in innovativen Reaktordesigns als Wärmesenke passiver Sicherheitssysteme Verwendung finden. Die bisher in ATHLET für die Simulation großer Behälter eingesetzte Parallelkanaltechnik ermöglicht lediglich eine pseudo-3D Darstellung, die auf der Lösung unvollständiger Erhaltungsgleichungen basiert und daher in ihrer Aussagekraft eingeschränkt ist. Die damit verbundene Ergebnisunsicherheit wird durch die Implementierung der vollständigen mehrdimensionalen Gleichungen in ATHLET beseitigt.

Für Anlagensimulationen ist vorgesehen, die mehrdimensionalen Gleichungen nur für ausgewählte Bereiche mit ausgeprägtem, mehrdimensionalem Strömungsverhalten einzusetzen, wohingegen die Rohrleitungsnetzwerke weiterhin durch die bewährten eindimensionalen Gleichungen beschrieben werden. Um sowohl rechtwinklige als auch zylindrische Behälter simulieren zu können, umfasst das 3D-Modell die Erhaltungsgleichungen in kartesischen und zylindrischen Koordinaten. Es sind jeweils sowohl die 2D als auch die 3D Gleichungen implementiert. Dies ist z. B. für den Spezialfall des RDB von Interesse, für dessen Simulation der Ringraum durch 2D Gleichungen beschrieben wird, während für den Kern und die Plena die 3D Gleichungen Anwendung finden.

Die Implementierung der mehrdimensionalen Gleichungen erfolgt als Erweiterung des bestehenden 1D 2-Fluid-Modells, das im Thermohydraulikmodul von ATHLET enthalten ist. Der Ansatz der Integration bisher fehlender 3D Terme in dieses Modul bietet hierbei im Gegensatz zur Entwicklung und Kopplung eines unabhängigen Moduls mehrere Vorteile. So ist zum einen die gesamte in ATHLET vorhandene und validierte Modellierung unmittelbar in Zusammenhang mit den mehrdimensionalen Gleichungen nutzbar. Hierzu zählen z. B. die Ein- und Zweiphasenmodelle, unterschiedliche Arbeitsmedien und Stoffwerte, aber auch die Kopplung zu anderen Programmmodulen wie z. B. zum Modul HECU zur Simulation des Wärmeübergangs an Strukturen. Außerdem bietet dieser Ansatz die Möglichkeit, die mehrdimensionalen Gleichungen zusammen mit den 1D-Gleichungen in einem gemeinsamen Gleichungssystem mit einer

gemeinsamen Systemmatrix zu lösen. Dies gewährleistet die gleichermaßen robuste wie auch effiziente numerische Lösung mehrdimensionaler Phänomene mit großen Zeitschrittweiten und für Anlagensimulationen vertretbaren CPU-Zeiten.

### 3.1 Die mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen

Ausgangspunkt für die Implementierung der mehrdimensionalen Bilanzgleichungen in ATHLET sind die Erhaltungsgleichungen für Masse (3.1) und Impuls (3.3) in ihrer differentiellen und konservativen Form /FER02/ /HIR88/. Konservativ bedeutet hierbei, dass alle Terme mit partiellen, räumlichen Ableitungen die Form einer Divergenz eines Vektors oder Tensors besitzen.

#### 3.1.1 Die Massenerhaltungsgleichung

Die Massenbilanzgleichung lässt sich schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_\nu \rho_\nu + \nabla(\alpha_\nu \rho_\nu \mathbf{w}_\nu) = \psi_\nu' \quad (3.1)$$

wobei der Index  $\nu$  die Phase, Flüssigkeit oder Dampf, kennzeichnet und  $\psi_\nu'$  weitere Quellterme, z. B. als Folge eines Phasenwechsels, beinhaltet.

In ATHLET sind die Erhaltungsgleichungen als integrale Gleichungen in einer Finite-Volumen Formulierung berücksichtigt /ATH12/. Nach Integration und Anwendung des Gauß'schen Satzes lässt sich die Massenbilanz (3.1) in Finite-Volumen Schreibweise für das Kontrollvolumen (KV)  $i_1$  ausdrücken als:

$$\int_{i_1} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_\nu \rho_\nu dV = \frac{\partial}{\partial t} M_\nu^L = - \sum_{j \in i_1} \left( (\alpha_\nu \rho_\nu)^* \cdot \mathbf{w}_\nu^j \cdot \mathbf{A}^j \right) + \psi_\nu^{i_1} \quad (3.2)$$

Hierbei wird auf der rechten Seite über alle mit dem KV  $i_1$  verbundenen Leitungen summiert und die in ATHLET übliche Upwind-Diskretisierung verwendet. Es gilt:

- Gesternte Größen (\*) sind stromaufwärts der jeweiligen Leitung  $j$  zu nehmen
- $\mathbf{A}^j$  ist die äußere Flächennormale der zu einer Leitung  $j$  gehörigen Zellfläche.
- $\mathbf{w}_\nu^j$  ist die Phasengeschwindigkeit in der jeweiligen Leitung.  $\mathbf{w}_\nu^j \cdot \mathbf{A}^j$  entspricht betragsmäßig der ATHLET Lösungsvariablen WLAJ (bzw. WVAJ für Dampf).

$$- \psi_v^i = \int_{i_i} \psi_v' dV$$

Ein Vergleich von Gleichung (3.2) mit der bisherigen ATHLET Implementierung /ATH12/ zeigt, dass die mehrdimensionale Massenbilanz bereits von der 1D Formulierung von ATHLET korrekt wiedergegeben wird. Eine Erweiterung der Massenbilanz für das 3D-Modell ist daher nicht erforderlich.

### 3.1.2 Die dreidimensionale Impulsbilanz in ATHLET

Die konservative Form der vektoriellen Impulserhaltungsgleichung lautet

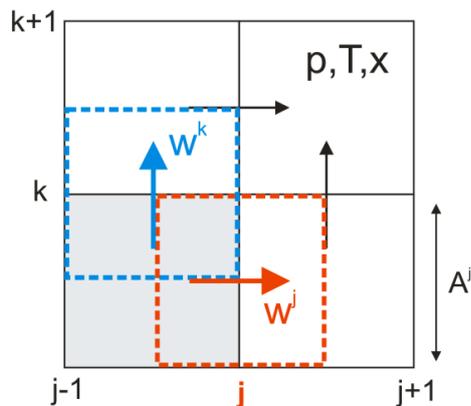
$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v) = -\nabla(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \otimes \mathbf{w}_v) - \alpha_v \cdot \text{grad}(p) + \mathbf{f} \quad (3.3)$$

$\mathbf{f}$  bezeichnet hierbei weitere Quellterme /LER98/. Wie in /SCH11/ gezeigt, ist die Berücksichtigung des mehrdimensionalen Charakters des konvektiven Anteils von (3.3), dem sog. Momentum-Flux (MF) Term, von entscheidender Bedeutung für die korrekte Abbildung mehrdimensionaler Strömungsvorgänge. Zielsetzung ist daher, eine mit der ATHLET 1D-Impulsbilanz konsistente dreidimensionale Formulierung der Impulserhaltungsgleichung unter besonderer Berücksichtigung des MF Terms zu finden. Hierfür wird nachfolgend zunächst die dreidimensionale Impulserhaltungsgleichung anhand eines Finite-Volumen Ansatzes auf die ATHLET Lösungsvariable  $(\mathbf{w}_v \cdot \mathbf{A})^j$  umgeschrieben. Anschließend erfolgt die Diskretisierung der Gleichung unter Verwendung des in ATHLET üblichen Upwind Verfahrens.

#### 3.1.2.1 Finite-Volumen Methode für versetzte Gitter

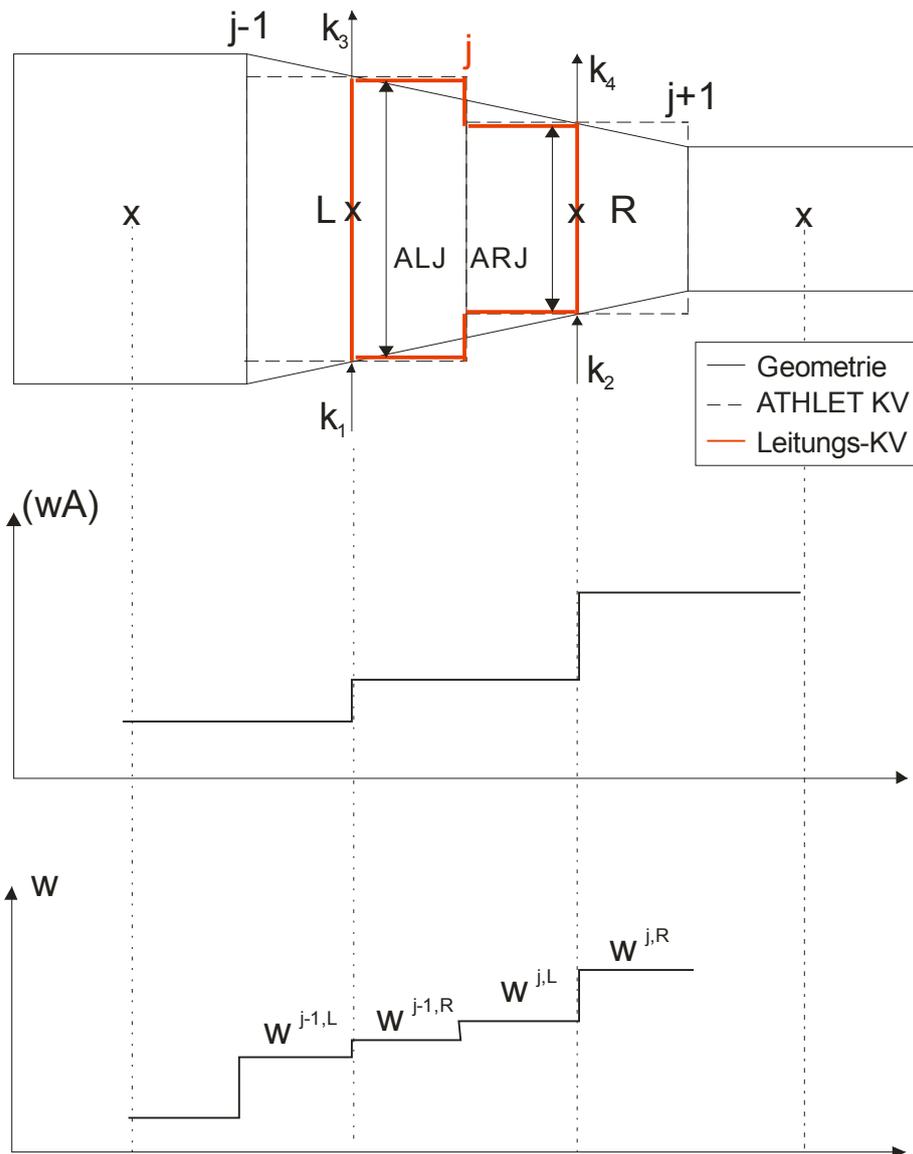
ATHLET verwendet für die Diskretisierung der thermohydraulischen Gleichungen versetzte numerische Gitter mit sogenannten Kontrollvolumenvariablen und Leitungsvariablen. In den KV werden die aus Massen- und Energieerhaltung abgeleiteten Bilanzgleichungen gelöst, deren Lösungsvariablen der Druck, die Phasentemperaturen und die Dampfqualität sind. Die Leitungsvariablen sind die Lösungsvariablen der phasen-separierten Impulsgleichung. Diese sind auf der Grenze zwischen zwei Kontrollvolumen definiert. ATHLET berechnet hier skalare, gitterorientierte Geschwindigkeiten bezüglich eines lokalen, gitterabhängigen Koordinatensystems. Wie Abb. 3.1

veranschaulicht, besitzt für ein rechtwinkliges numerisches Gitter jede Komponente der vektoriellen Impulsgleichung ein eigenes, versetztes Gitter.



**Abb. 3.1** Versetzte numerische Gitter für Kontrollvolumen- und Leitungsvariablen

Das Leitungskontrollvolumen, das einer Leitung zugeordnet werden kann, setzt sich aus zwei halben Kontrollvolumen des zugrunde liegenden numerischen Gitters zusammen (Abb. 3.1). Innerhalb des Leitungskontrollvolumens wird die Lösungsvariable der Impulsgleichung  $(w_v \cdot A)^j$  – dies ist die skalare Phasengeschwindigkeit multipliziert mit dem Strömungsquerschnitt der Leitung – als konstant angenommen. Das in ATHLET verwendete Diskretisierungsverfahren ist damit räumlich von erster Genauigkeitsordnung, d. h. der Abbruchfehler ist von der Ordnung  $(\Delta x)^1$ . Das Diskretisierungsverfahren berücksichtigt, dass der Strömungsquerschnitt entlang einer Leitung veränderlich sein kann. Dies ist insbesondere für die weiter unten betrachteten zylindrischen Gitter von Bedeutung und in Abb. 3.2 oben schematisch dargestellt. Die Leitung  $j$ , die die beiden KV  $L$  und  $R$  verbindet, besitzt zwei unterschiedliche Strömungsquerschnitte  $ALJ$  und  $ARJ$ . Formal ergeben sich damit für die linke und rechte Leitungshälfte unterschiedliche Geschwindigkeiten  $w^j$  (Abb. 3.2 unten).



**Abb. 3.2** Oben: Beispielgeometrie; Mitte: ATHLET Lösungsvariable; Unten: Geschwindigkeiten in der linken und rechten Halbleitung

### 3.1.2.2 Semi-konservative Formulierung der Impulserhaltungsgleichung

Ausgangspunkt der implementierten ATHLET Impulsbilanz sind die differentiellen konservativen Formen der Massenerhaltungsgleichung (3.1) und der Impulserhaltungsgleichung (3.3). Durch Einsetzen der Massenbilanz in die Impulsbilanz folgt eine sog. primitive Form der Impulserhaltungsgleichung bezüglich der Variable Geschwindigkeit:

$$\alpha_v \rho_v \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w}_v) = \underbrace{-\nabla(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \otimes \mathbf{w}_v) + \mathbf{w}_v \nabla(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v)}_{-\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \nabla(\mathbf{w}_v)} - \mathbf{w}_v \psi - \alpha_v \cdot \text{grad}(p) + \mathbf{f} \quad (3.4)$$

oder

$$\alpha_v \rho_v \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{w}_v) = -\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \nabla(\mathbf{w}_v) - \alpha_v \cdot \text{grad}(p) - \mathbf{w}_v \psi + \mathbf{f} \quad (3.5)$$

Von einem mathematischen Standpunkt aus betrachtet sind die Gleichungen (3.4) und (3.5) äquivalent. Beide Gleichungen führen aber nicht notwendigerweise zu numerisch identischen Ergebnissen. In ATHLET ist nicht die reduzierte Darstellung der Gleichung (3.5) implementiert, die auch in manchen CFD Programmen Verwendung findet. Stattdessen ist die Gleichung (3.4) programmiert, die zwei wesentliche Vorteile bietet. Zum einen geht diese Gleichung für stationäre oder quasistationäre Strömungssituationen in die konservative Form der Impulsgleichung (3.3) über, da sich der zweite und dritte Term auf der rechten Seite von (3.4) wegen der verschwindenden Zeitableitung in (3.1) zu Null addieren. Damit wird für derartige Strömungssituationen näherungsweise die konservative Impulsgleichung gelöst, was grundsätzlich von Vorteil ist, da streng genommen nur diese Form der Erhaltungsgleichung die konservative Erhaltungsgröße, also hier den Impuls, auch numerisch erhält. Zum anderen kann Gleichung (3.4) vergleichsweise einfach in einem Finite-Volumen Ansatz verarbeitet werden, indem nach Integration der Gauß'sche Satz für die beiden Terme mit Divergenz-Operatoren angewendet wird.

### 3.1.3 Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in kartesischen Koordinaten

Die Diskretisierung der  $j$ -Komponente der Vektorgleichung (3.4) erfolgt im Folgenden in vier Schritten, die sich an der Implementierung der 1D Impulsbilanz in ATHLET orientieren:

1. Division durch die Leitungsfläche  $A^j$  und Einführung der Lösungsvariable  $(w_v \cdot A)^j = w_v^j \cdot A^j$
2. Division durch den Dampfvolumenteil  $\alpha_v$
3. Integration über das zu einer Leitung  $j$  gehörende Kontrollvolumen
4. Upwind-Diskretisierung 1. Ordnung für konvektiv transportierte Impulse

**Schritt 1:** Division durch die Leitungsfläche  $A^j$  und Einführung der Lösungsvariable  $(w_v \cdot A)^j$

Die 1D-Impulsbilanz in ATHLET ist als Wegintegral entlang einer Leitung formuliert und implementiert. Da die Diskretisierung der 3D-Gleichung konsistent zur vorhandenen 1D-Implementierung erfolgen soll, muss, um gleiche physikalische Einheiten zu erhal-

ten, bei Integration über ein Leitungskontrollvolumen durch die Querschnittsfläche der jeweiligen Leitung geteilt werden. Für die Komponente  $j$  der vektoriellen Impulsgleichung folgt:

$$\frac{\alpha_v \rho_v}{A^j} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{w_v^j A^j}{A^j} \right) = -\frac{1}{A^j} [\nabla(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \otimes \mathbf{w}_v)]^j + \frac{1}{A^j} w_v^j \nabla(\alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v) - \frac{w_v^j \psi}{A^j} - \frac{\alpha_v}{A^j} \cdot [\text{grad}(p)]^j + \frac{1}{A^j} f^j$$

Weitere Umformungen ergeben als Differentialgleichung für die Lösungsvariable

$(w_v \cdot A)^j$ :

$$\frac{\alpha_v \rho_v}{(A^j)^2} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^j A^j) = -\nabla \left( \frac{1}{A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v \right) + w_v^j \nabla \left( \frac{1}{A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \right) - \frac{w_v^j \psi}{A^j} - \frac{\alpha_v}{A^j} \cdot [\text{grad}(p)]^j + \frac{1}{A^j} f^j \quad (3.6)$$

**Schritt 2: Division durch den Dampfvolumenanteil  $\alpha_v$**

$$\frac{\rho_v}{(A^j)^2} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^j A^j) = -\nabla \left( \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v \right) + w_v^j \nabla \left( \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \right) - \frac{w_v^j \psi}{\alpha_v A^j} - \frac{1}{A^j} \cdot [\text{grad}(p)]^j + \frac{1}{\alpha_v A^j} f^j$$

**Schritt 3: Integration über das zu einer Leitung  $j$  gehörende Kontrollvolumen**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^j A^j) \int \frac{\rho_v}{(A^j)^2} dV = \\ -\frac{1}{\alpha_v^j} \int \nabla \left( \frac{1}{A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v \right) dV + \frac{1}{\alpha_v^j} \int w_v^j \nabla \left( \frac{1}{A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v \right) dV \\ + \int -\frac{w_v^j \psi}{\alpha_v A^j} - \frac{1}{A^j} \cdot [\text{grad}(p)]^j + \frac{1}{\alpha_v A^j} f^j dV \end{aligned}$$

Die Anwendung des Gauß'schen Satzes liefert

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left( w_v^j A^j \right) \int_L^R \frac{\rho_v}{A^j} dx^j &= - \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v d\mathbf{A} \\
 &+ \overline{w_v^j} \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v d\mathbf{A} \\
 &- \int_L^R \frac{w_v^j A^j \psi}{\alpha_v A^j} dx^j - \Delta p_{LR} + \int_L^R \frac{f^j}{\alpha_v} dx^j
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Es ist  $\Delta p_{LR} = p_R - p_L = \int_L^j \left( \frac{1}{ALJ} \frac{\partial p}{\partial x^j} ALJ \right) ds + \int_j^R \left( \frac{1}{ARJ} \frac{\partial p}{\partial x^j} ARJ \right) ds$  die Druckdifferenz

zwischen den beiden KV-Zentren  $L$  und  $R$ , die von Leitung  $j$  verbunden werden (Abb. 3.2).

#### **Schritt 4:** Upwind-Diskretisierung 1. Ordnung für konvektiv transportierte Impulse

Der erste Term (Momentum Flux) und der zweite Term (konvektiver Beitrag aus eingesetzter Massenbilanz) der rechten Seite von (3.7) werden nun weiter umgeformt, indem die Oberflächenintegrale als Summen über die Teiloberflächen des Leitungskontrollvolumens geschrieben werden. Die resultierenden Summanden können als 1D Terme (direkter Impulstransport in Strömungsrichtung) und 3D Terme (Impulsquertransport senkrecht zur Strömungsrichtung) interpretiert werden. Bei der anschließenden Diskretisierung kommt ein Upwind-Verfahren zum Einsatz.

$$\begin{aligned}
& - \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v d\mathbf{A} + \overline{w_v^j} \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v d\mathbf{A} = \\
& - \frac{1}{\alpha_v^j A^{j-\frac{1}{2}}} (\alpha_v \rho_v w_v^j)^{j-\frac{1}{2}*} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{w}_v^{j-1} + \mathbf{w}_v^j) \mathbf{A}^{j-\frac{1}{2}} \\
& - \frac{1}{\alpha_v^j A^{j+\frac{1}{2}}} (\alpha_v \rho_v w_v^j)^{j+\frac{1}{2}*} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{w}_v^j + \mathbf{w}_v^{j+1}) \mathbf{A}^{j+\frac{1}{2}} \\
& - \sum_k \left( \frac{\alpha_v \rho_v w_v^j}{\alpha_v^j A^j} \right)^{k,*} \cdot \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k \\
& + \overline{w_v^j} \frac{1}{\alpha_v^j A^{j-\frac{1}{2}}} (\alpha_v \rho_v)^{j-\frac{1}{2}*} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{w}_v^{j-1} + \mathbf{w}_v^j) \mathbf{A}^{j-\frac{1}{2}} \\
& + \overline{w_v^j} \frac{1}{\alpha_v^j A^{j+\frac{1}{2}}} (\alpha_v \rho_v)^{j+\frac{1}{2}*} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{w}_v^j + \mathbf{w}_v^{j+1}) \mathbf{A}^{j+\frac{1}{2}} \\
& + \overline{w_v^j} \sum_k \left( \frac{\alpha_v \rho_v}{\alpha_v^j A^j} \right)^{k,*} \cdot \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k
\end{aligned}$$

„Gesternte“ Terme  $(\cdot)^{p,*}$  bezeichnen wieder Upwind-Größen stromaufwärts der Position  $p$ . Upwind-Dichte und Upwind-Dampfvolumen werden aus dem nächsten in Upwind-Richtung liegenden Kontrollvolumen genommen. Dies ist insbesondere in Einklang mit der Massenbilanz in ATHLET. Des Weiteren sind:

- $\mathbf{A}^{j-\frac{1}{2}}$  die äußere gerichtete Flächennormale bezüglich des Leitungskontrollvolumens  $j$  zwischen Leitung  $j-1$  und Leitung  $j$  (analog  $\mathbf{A}^{j+\frac{1}{2}}$ ) (siehe Abb. 3.3)
- $\mathbf{w}_v^j$  die gerichtete Geschwindigkeit in Leitung  $j$
- $\frac{1}{2}(\mathbf{w}_v^{j-1} + \mathbf{w}_v^j)$  die Geschwindigkeit für den direkten Impulstransport auf der Fläche  $\mathbf{A}^{j-\frac{1}{2}}$ , die aus den beiden benachbarten Leitungsgeschwindigkeiten interpoliert wird.
- $\mathbf{w}_v^k$  und  $\mathbf{A}^k$  bezeichnen Phasengeschwindigkeit und Strömungsquerschnitt in einer Leitung  $k$  senkrecht zur Strömungsrichtung der Leitung  $j$ .

Bei Verwendung der Geschwindigkeiten in der linken und rechten Halbleitung eines Leitungskontrollvolumens entsprechend Abb. 3.2 folgt:

$$\begin{aligned}
& - \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v w_v^j \mathbf{w}_v d\mathbf{A} + \overline{w_v^j} \oint \frac{1}{\alpha_v^j A^j} \alpha_v \rho_v \mathbf{w}_v d\mathbf{A} = \\
& \quad + \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_v^j} \left[ (\alpha_v \rho_v)^{j-1,*} (w_v^{j-1,R})^2 \max(\text{sgn}(w_v^{j-1,R} + w_v^{j,L}), 0) \right. \\
& \quad \quad \quad \left. + (\alpha_v \rho_v)^{j,*} (w_v^{j,L})^2 \max(\text{sgn}(-(w_v^{j-1,R} + w_v^{j,L})), 0) \right] \\
& \quad \quad \quad \text{ATHLET 1D-MF links} \\
& \quad - \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_v^j} \left[ (\alpha_v \rho_v)^{j,*} (w_v^{j,R})^2 \max(\text{sgn}(w_v^{j,R} + w_v^{j+1,L}), 0) \right. \\
& \quad \quad \quad \left. + (\alpha_v \rho_v)^{j+1,*} (w_v^{j+1,L})^2 \max(\text{sgn}(-(w_v^{j,R} + w_v^{j+1,L})), 0) \right] \\
& \quad \quad \quad \text{ATHLET 1D-MF rechts} \\
& \quad + \underbrace{\sum_k \frac{1}{\alpha_v^j} \left( \frac{\alpha_v \rho_v}{A^j} \right)^{k,*} \left( \overline{w_v^j} - (w_v^j)^{k,*} \right) \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k}_{\text{3D Cross-MF}}
\end{aligned}$$

Der gesamte konvektive Anteil der semikonservativen Formulierung der Impulsbilanz zerfällt somit in drei Anteile, die den direkten Impulstransport durch die linke und rechte Leitungsfläche (1D MF) sowie den Querimpulstransport durch die übrigen Flächen des Leitungskontrollvolumens (3D Cross-MF) beschreiben. Dies wird in Abb. 3.3 veranschaulicht. Ein Vergleich mit der in ATHLET implementierten 1D Impulsgleichung zeigt, dass für eine vollständige 3D Implementierung der 3D Querimpulstransport

$$\sum_k \frac{1}{\alpha_v^j} \left( \frac{\alpha_v \rho_v}{A^j} \right)^{k,*} \left( \overline{w_v^j} - (w_v^j)^{k,*} \right) \cdot \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k$$

ergänzt werden muss. Hierbei wird über die zwei (für 2D) bzw. vier (für 3D) Leitungskontrollvolumenoberflächen summiert, deren Flächenvektoren senkrecht zur Strömungsrichtung der Leitung  $j$  verlaufen (Abb. 3.3). Der orthogonal zu  $j$  transportierende Volumenstrom  $\mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k$  setzt sich aus den beiden Anteilen der linken und rechten Hälfte des Leitungskontrollvolumens zusammen:

$$\sum_k \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k = \frac{1}{2} \left( \sum_k (\mathbf{w}_v^k)^{j,L} (\mathbf{A}^k)^{j,L} + \sum_k (\mathbf{w}_v^k)^{j,R} (\mathbf{A}^k)^{j,R} \right)$$

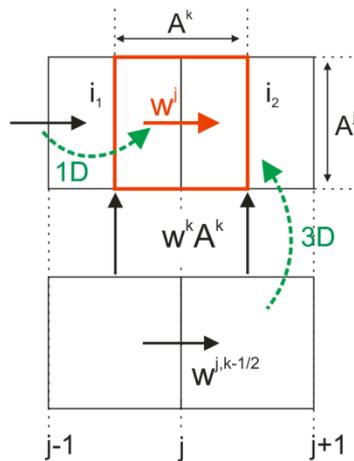
Für den Querimpulstransport ist die Fläche  $A^j$  mit in den Upwind-Anteil einbezogen. Die Berechnung der Fläche als

$$\left(\frac{1}{A^j}\right)^{k,*} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{A^j} + \frac{1}{(A^j)^{k,*}} \right)$$

gewährleistet einen konservativen Impulsaustausch zwischen benachbarten Zellen.

Als vollständige Diskretisierung der 3D-Impulsbilanz folgt letztendlich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( w_v^j A^j \right) \int_L^R \frac{\rho_v}{A^j} dx^j = & \\ \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_v^j} \left[ (\alpha_v \rho_v)^{j-1,*} (w_v^{j-1,R})^2 \max(\text{sgn}(w_v^{j-1,R} + w_v^{j,L}), 0) \right. & \\ & \left. + (\alpha_v \rho_v)^{j,*} (w_v^{j,L})^2 \max(\text{sgn}(-(w_v^{j-1,R} + w_v^{j,L})), 0) \right] & \\ - \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_v^j} \left[ (\alpha_v \rho_v)^{j,*} (w_v^{j,R})^2 \max(\text{sgn}(w_v^{j,R} + w_v^{j+1,L}), 0) \right. & \\ & \left. + (\alpha_v \rho_v)^{j+1,*} (w_v^{j+1,L})^2 \max(\text{sgn}(-(w_v^{j,R} + w_v^{j+1,L})), 0) \right] & \\ + \sum_k \frac{1}{\alpha_v^j} \left( \frac{\alpha_v \rho_v}{A^j} \right)^{k,*} \left( \overline{w_v^j} - (w_v^j)^{k,*} \right) \cdot \mathbf{w}_v^k \mathbf{A}^k & \\ - w_v^j A^j \int_L^R \frac{\psi}{\alpha_v A^j} dx^j - \Delta p_{LR} + \int_L^R \frac{f^j}{\alpha_v} dx^j & \end{aligned} \quad (3.8)$$



**Abb. 3.3** Konvektive Beiträge zur integralen Impulsbilanz

### 3.1.4 Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten

Mit der Implementierung der dreidimensionalen Erhaltungsgleichungen in ATHLET wird das Ziel verfolgt, umfangreiche Geometrien wie bspw. den Reaktordruckbehälter mehrdimensional zu simulieren. Da die zu simulierenden Behälter in der Regel zylindrisch sind, werden im Rahmen der Entwicklung des ATHLET 2D/3D-Modells die Erhaltungsgleichungen auch in Zylinderkoordinaten implementiert.

Die 3D-Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten ist in /SCH11/ abgeleitet. Komponentenweise formuliert lautet sie für die  $r$ -,  $\phi$ - und  $z$ -Komponente

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^r A^r) = & \frac{1}{\int \frac{\rho_v}{A^r} dr} \cdot \int \left[ \frac{RS^r}{\alpha_v} - \frac{w_v^r \cdot \psi_v}{\alpha_v} \right. \\ & \left. - \rho_v \left( \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} (w_v^r)^2 + \frac{w_v^\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} w_v^r + w_v^z \frac{\partial}{\partial z} w_v^r - \frac{(w_v^\phi)^2}{r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} p \right] dr \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^\phi A^\phi) = & \frac{1}{\int \frac{\rho_v r}{A^\phi} d\phi} \cdot \int \left[ \frac{RS^\phi}{\alpha_v} - \frac{w_v^\phi \cdot \psi_v}{\alpha_v} \right. \\ & \left. - \rho_v \left( w_v^r \frac{\partial}{\partial r} w_v^\phi + \frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial \phi} (w_v^\phi)^2 + w_v^z \frac{\partial}{\partial z} w_v^\phi + \frac{w_v^r w_v^\phi}{r} \right) \right. \\ & \left. - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} p \right] r \cdot d\phi \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (w_v^z A^z) = & \frac{1}{\int \frac{\rho_v}{A^z} dz} \cdot \int \left[ \frac{RS^z}{\alpha_v} - \frac{w_v^z \cdot \psi_v}{\alpha_v} \right. \\ & \left. - \rho_v \left( w_v^r \frac{\partial}{\partial r} w_v^z + \frac{w_v^\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} w_v^z + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (w_v^z)^2 \right) - \frac{\partial}{\partial z} p \right] dz \end{aligned} \quad (3.11)$$

In den Gleichungen für die  $r$ - und die  $\phi$ -Komponente ergeben sich infolge der Koordinatentransformation des Divergenzoperators des konvektiven Anteils neben den der kartesischen Formulierung ähnlichen Ableitungstermen zusätzliche Beiträge /FER02/. Diese Terme tragen den in krummlinigen Koordinatensystemen beobachtbaren Scheinkräften Rechnung und sind in ATHLET implementiert.

## 3.2 Integration des 3D-Modells in ATHLET

### 3.2.1 2D/3D Gittergenerierung

Die Implementierung der mehrdimensionalen Gleichungen sowohl in kartesischen Koordinaten wie auch in Zylinderkoordinaten bietet die Möglichkeit der Strömungsberechnung auf geradlinig-rechtwinkligen und zylindrischen Gittern. Entsprechende Gitter müssen vom Anwender spezifiziert werden. In ATHLET werden die mehrdimensionalen Gitter aus 1D TFO zusammengesetzt, also z. B. durch parallele Pipe-Objekte, die durch CCO verbunden sind. Die Vorteile dieses Vorgehens sind u. a. folgende:

- Zur Gittergenerierung muss kein weiteres Softwaretool bereitgestellt und vom Anwender erlernt werden.
- Soweit vorhandene Eingabedatensätze auf der Parallelkanalnodalisierung beruhen, können sie mit vertretbarem Aufwand für mehrdimensionale Simulationen erweitert werden.
- Vorhandene 2D Visualisierungswerkzeuge wie ATLAS oder die ATHLET Input Grafik können auch für mehrdimensionale Gitter eingesetzt werden, da diese auf 1D Strömungspfaden beruhen.
- Viele ATHLET-Module können unmittelbar in Verbindung mit mehrdimensionalen Gittern eingesetzt werden. Dies gilt z. B. für die ATHLET-Startrechnung zur Erzeugung eines konsistenten Anfangszustandes für das Gesamtsystem. Die Startrechnung erfordert die Vorgabe von aus 1D TFO aufgebauten Iterationspfaden, den sog. Prioritätsketten. Diese 1D Pfade können weiterhin auch innerhalb eines mehrdimensionalen Gitterbereichs spezifiziert werden.

Das in ATHLET implementierte 3D-Modell verwendet strukturierte Multiblock-Gitter. Abb. 3.4 zeigt beispielhaft einen Ausschnitt eines Multiblockgitters zur Simulation des RDB. Der Ringraum wird hierbei durch ein topologisch 2D-zylindrisches Gitter mit einer Zone in radialer Richtung abgebildet, wohingegen das untere Plenum durch ein 3D zylindrisches Gitter geometrisch angenähert wird.

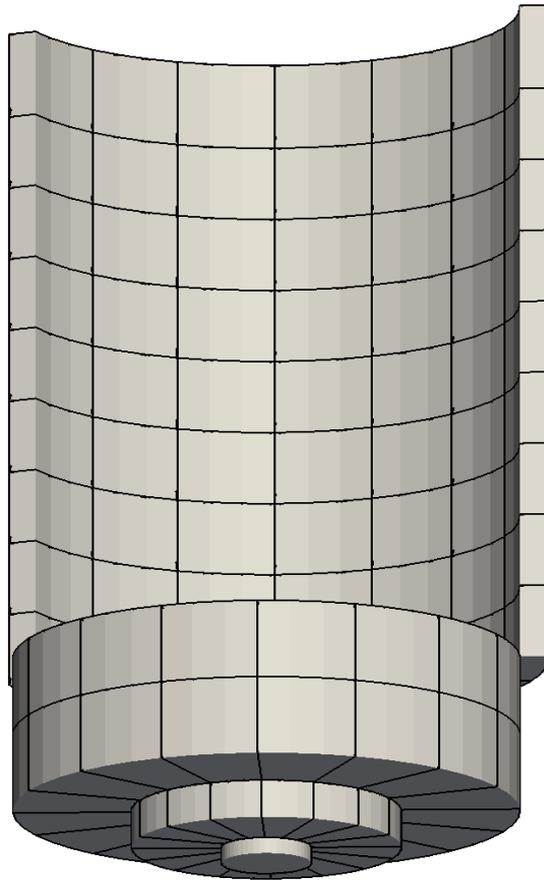
Für die Spezifikation eines mehrdimensionalen Gitters ist es erforderlich, sowohl die Geometrie als auch die Topologie, also die Anordnung und Verknüpfung, der einzelnen Gitterknoten zu beschreiben. In ATHLET entsprechen diese Knoten den KV und Leitungen, die wiederum Bestandteil der 1D Thermofluidobjekte sind. Ihre geometrische

Beschreibung erfolgt durch die Spezifikation der entsprechenden Objekte einschließlich ihrer Nodalisierung und Geometrie unter den entsprechenden Pseudoschlüsselworten (*NETWORK* und *GEOMETRY*) im Eingabedatensatz.

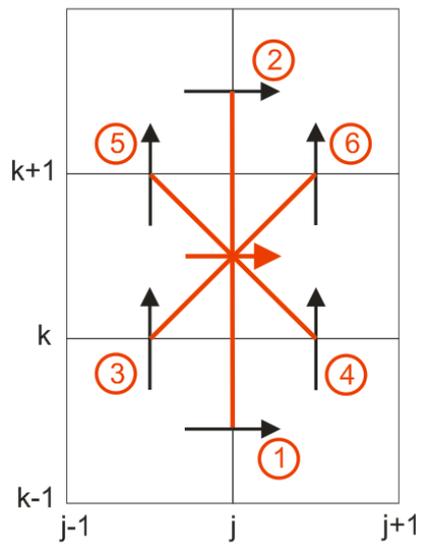
Zur Festlegung der Topologie wurde der Eingabedatensatz um das Kontrollwort *3D-MODULE* erweitert, das es dem Anwender anhand nur weniger zusätzlicher Angaben erlaubt, mehrdimensionale Gitterblöcke aus 1D Thermofluidobjekten zu generieren. Hierbei kommen Regeln für die Namen der TFO (Variable *ANAMO*) zum Einsatz, die insbesondere eine bestimmte Nummerierung als Bestandteil der Objektnamen erforderlich machen /ATH12/. In Abb. 3.6 ist beispielhaft eine mögliche Nummerierung für die Zonen eines Zylindergitters mit acht Segmenten und drei Ringen dargestellt.

Die Interpretation der Eingabedaten unter dem Kontrollwort *3D-MODULE* sowie die Erzeugung der entsprechenden Gitterblöcke leistet der ATHLET interne 3D-Präprozessor /SCH12a/. Der 3D-Präprozessor ist neben den implementierten 3D Erhaltungsgleichungen ein Kernbaustein des 3D-Modells. Auf Basis eines zweistufigen Verfahrens leitet er anhand der eingelesenen Daten zunächst eine Objekttopologie aller TFO des 3D-Gebiets ab und generiert hierauf aufbauend die Leitungstopologie. Diese enthält die Nachbarschaftsbeziehungen der Leitungen, die zur Laufzeit für die Berechnung der diskretisierten mehrdimensionalen Terme der Impulsgleichung (3.8) bereitgestellt werden müssen. Für jede Leitung des mehrdimensionalen Simulationsgebiets werden hierfür sechs (2D) bzw. zwölf (3D) benachbarte Leitungen ermittelt (Abb. 3.5).

Eine zusätzliche Flexibilität hinsichtlich der Gittergenerierung wird dem Anwender dadurch geboten, dass nicht alle Gitterzonen und/oder Leitungen zwingend definiert werden müssen. Dies geschieht durch sog. fiktive TFO. Dadurch ist es möglich, rechtwinklige oder zylindrische Gitter mit „Lücken“ zu simulieren, um z. B. Einbauten zu berücksichtigen. Außerdem wird ermöglicht, keilförmige Zylindergittersegmente zu simulieren, bspw. um die Achsensymmetrie eines Problems auszunutzen.



**Abb. 3.4** Multiblock-Gitter für Ringraum (2D) und unteres Plenum (3D)

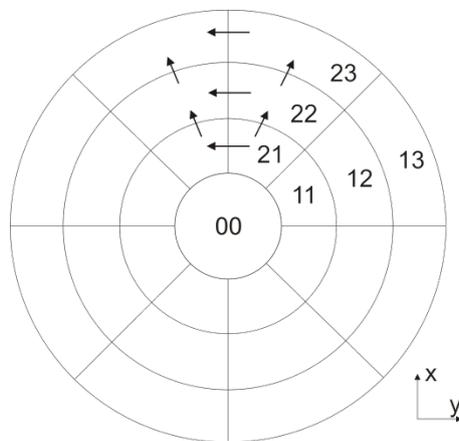


**Abb. 3.5** 2-D Operatorstern für die MF Diskretisierung

### 3.2.2 Spezifikation zylindrischer Gitter

Das ATHLET 3D-Modell bietet die Möglichkeit, sowohl Hohlzylinder- als auch Vollzylindergitter zu simulieren. Beispiele für beides zeigt Abb. 3.4 wobei Hohlzylindergitter grundsätzlich auch mehrere Zonen über den Zylinderradius besitzen dürfen. Vollzylinder sind für eine 3D-Simulation immer mit einem sog. Zentralkanal zu definieren. Das bedeutet, dass das Gitter im Bereich der Zylinderachse nicht in Segmente unterteilt werden darf (Abb. 3.6). Die einzelnen Zylindersegmente wie auch der Zentralkanal sind in ATHLET durch axial orientierte Pipe oder Branch-Objekte abzubilden. Diese formen parallel verlaufende Kanäle, die in radialer und azimuthaler Richtung mittels Cross-Connection- oder Single-Junction-Pipe Objekten verbunden werden, um ein mehrdimensionales Netzwerk zu bilden.

Für die Lösung der diskretisierten Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten (Gleichungen (3.9) bis (3.11)) ist es erforderlich, den Radius der einzelnen Leitungen innerhalb des Zylindergitters zu kennen. Hierfür sind die Innen- bzw. Außenradien der einzelnen Ringe des Gitters vom Anwender unter dem Kontrollwort *3D-MODULE* im Eingabedatensatz zu spezifizieren. Für das Gitter in Abb. 3.6 mit Zentralkanal und drei Ringen müssen z. B. vier Radien angegeben werden.



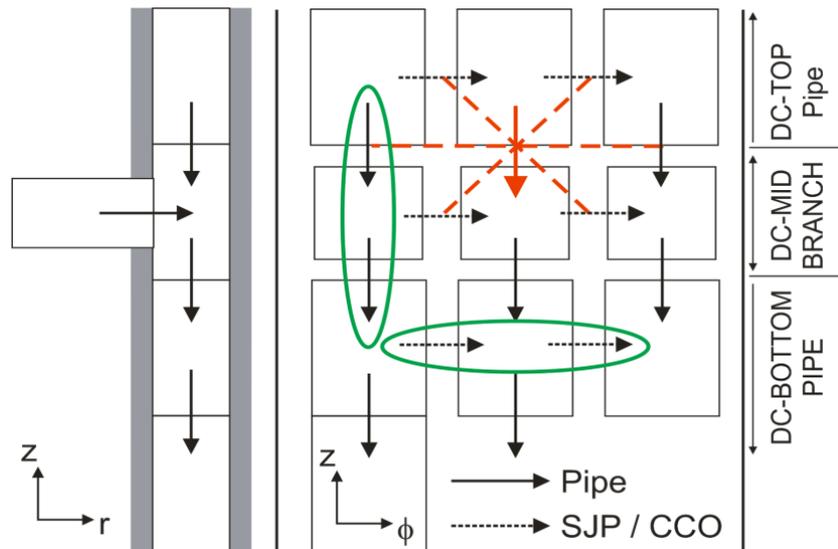
**Abb. 3.6** TFO eines Vollzylindergitters

### 3.2.3 Erweiterte Anwenderunterstützung

#### 3.2.3.1 Automatisiertes BRANCH2M

Mit dem Eingabeschlüsselwort BRANCH2M wird die Berechnung des Impulstransports über Thermofluid-Objektgrenzen hinweg gesteuert. Bei einer Kopplung von zwei Leitungsobjekten (z. B. zwei aufeinanderfolgende Cross-Connection Objekte) wird für beide Strömungsrichtungen der direkte 1D Impulstransport von der stromaufwärts gelegenen Leitung berücksichtigt, so dass bei Strömung kein vollständiger Beschleunigungsdruckverlust berechnet wird. Abb. 3.7 illustriert am Beispiel eines typischen 2D-Thermofluidnetzwerk für den Ringraum die erforderlichen BRANCH2M Verknüpfungen (in grün). Zum Vergleich ist auch der Operatorstern für die Berechnung den 2D/3D Impulstransports dargestellt.

Da im mehrdimensionalen Simulationsgebiet der 1D Impulstransport entsprechend Gleichung (3.8) konsistent mit dem 3D Impulstransport zu erfolgen hat, ist eine Vorgabe des BRANCH2M Parameters im Eingabedatensatz für alle Objekte des 3D Gebiets zwingend erforderlich. Auch für eine reine 1D Simulation mit Anwendung der Parallelkanaltechnik ist dies empfohlen. Allerdings ist die Vorgabe der BRANCH2M Kopplung im Eingabedatensatz für Netzwerke mit zahlreichen Parallelkanälen aufwändig, da das entsprechende Schlüsselwort nicht von einem Objekt zum nächsten mittels COPY-Direktive kopiert werden kann. Um diesbezüglich ATHLET und die Verwendung des 3D-Modells anwenderfreundlicher zu machen, wird nun zu Beginn einer Simulation für alle Objekte des mehrdimensionalen Gebiets automatisiert die BRANCH2M Kopplung auf Basis der bestehenden 3D Topologie abgeleitet und festgelegt. Vom Anwender im Datensatz vorgenommene zusätzliche BRANCH2M Eingaben werden außerdem beibehalten. Damit ist es z. B. möglich, das 1D Leitungsnetzwerk mit dem 3D-Gebiet zu koppeln, sodass der Impulstransport zwischen beiden Gebieten physikalisch sinnvoll berücksichtigt wird.



**Abb. 3.7** In grün: BRANCH2M-Kopplung (1D-MF); In rot: 3D- MF Operatorstern

### 3.2.3.2 Detaillierte Objektgeometrie für zylindrische Gitter

Die Geometrie jedes TFO muss vom Anwender innerhalb der Objektspezifikation zwingend bereitgestellt werden. Hierbei bestanden in ATHLET bisher Einschränkungen, die eine geometrisch exakte Beschreibung radial verlaufender Objekte in zylindrischen Gittern nicht erlaubten. Radiale Leitungen in zylindrischen Gittern zeichnen sich durch einen stetig veränderlichen Strömungsquerschnitt aus. Somit besitzen linke und rechte Halbleitung in Abhängigkeit von den in den 3D-Eingabedaten vorgegebenen Ringradien unterschiedlich Strömungsquerschnitte (siehe auch Abb. 3.2). In einem zylindrischen Gitter werden radiale Leitungen immer durch CCO oder SJP-Objekte repräsentiert. Für beide Objekttypen erlaubt ATHLET standardmäßig nur gleich lange linke und rechte Leitungshälften, und im Fall eines CCO nur einen entlang der Leitung konstanten Strömungsquerschnitt. Beides entspricht i. d. R. nicht der vom Anwender definierten Geometrie des Zylindergitters.

Mit dem 3D-Modell werden nun für Leitungen radial orientierter TFO des 3D-Gebiets sowohl der linke Strömungsquerschnitt *ALJ* als auch der rechte Strömungsquerschnitt *ARJ* unter Berücksichtigung der vom Anwender vorgegebenen 3D Eingabedaten festgelegt. Außerdem wird die Länge der Leitungshälften (Variable *SLLJ*, *SLRJ* und *SLJJ*) entsprechend der Geometrie des zu simulierenden Zylindergitters geeignet angepasst. Die adaptierten Geometriedaten werden anschließend zur Berechnung sowohl des 3D

Momentum Flux als auch anderer geometrieabhängiger Modellgrößen (z. B. Wandreibung) verwendet.

Um den Anwender bei der Datensatzerzeugung zusätzlich zu unterstützen, besteht optional die Möglichkeit, verschiedene Geometriegrößen für alle TFO eines Zylindergitters (axiale, radiale wie auch azimutale Objektorientierung) gemäß der unter dem Kontrollwort *3D-MODULE* bereitgestellten Gittergeometrie von ATHLET automatisiert berechnen zu lassen. Dies umfasst bisher folgende Geometriegrößen:

- Für Pipe, SJP und BRANCH: *A0*, *V0*
- Für CCO: *CIRC0*, *SCROS0*

### **3.2.3.3 Bereitstellung generischer Datensätze**

Bereits im Rahmen des Vorhabens RS1184 /GLA12/ wurde ein generischer Datensatz erstellt, der den RDB in 8 Sektoren unterteilt und ein neuartiges Konzept für die Diskretisierung des unteren Plenums beinhaltet. Anders als frühere Datensätze wird das untere Plenum hier nicht mehr durch eine Anordnung von einzelnen KV (Branch-Objekte) und Leitungen (SJP-Objekte) abgebildet, sondern durch ein zylindrisches Gitter ähnlich Abb. 3.4 angenähert. Abb. 3.11 veranschaulicht dieses Vorgehen für den RDB der UPTF Anlage anhand einer Diskretisierung mit 16 Zylindersektoren.

Der aus /GLA12/ verfügbare Datensatz wurde entsprechend den Anforderungen des 3D-Modells adaptiert und um die 3D-Geometrieingabedaten erweitert. Anschließend wurde er den ATHLET Samples hinzugefügt, die mit jeder neuen ATHLET Version an alle Anwender verteilt werden, um die Programmanwendung zu illustrieren und somit die Nutzer zu unterstützen.

Des Weiteren wurde für die ROCOM Anlage ein 16-Sektor Datensatz erstellt, der ein parametrisiertes und modular aufgebautes 3D-Modell für das untere Plenum beinhaltet. Das Modell ist derart konzipiert, dass es bei Beibehaltung der Gittertopologie mit geringem Aufwand für die Simulation anderer Anlagen wiederverwendet werden kann.

### **3.2.4 Druckrückgewinn in zylindrischen Gittern**

Das von ATHLET gelöste Gleichungssystem basiert auf den reibungsfreien Eulergleichungen, die zur Abbildung von Wandreibung und turbulenter Reibung zusätzliche

Quellterme besitzen. Der konvektive Anteil der Eulergleichung liefert für 1D Strömungen entlang eines Strömungswegs mit wachsender Strömungsquerschnittsfläche einen Druckrückgewinn. Dieser lässt sich nach Bernoulli berechnen als:

$$P + \frac{\rho}{2} v^2 = \text{const.}$$

Für ein 2D zylindrisches Gitter und eine achsensymmetrische, radial vom Zylinderzentrum nach außen verlaufende Strömung ergibt sich hieraus in ebenen Polarkoordinaten der Druck in Abhängigkeit des Radius  $r$  bei gegebenem Drucks  $P_\infty$  für den Radius  $R_\infty$  zu

$$P(r) = P_\infty + \frac{\rho}{2} (w_r A_r)^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \left( \frac{1}{R_\infty^2} - \frac{1}{r^2} \right)$$

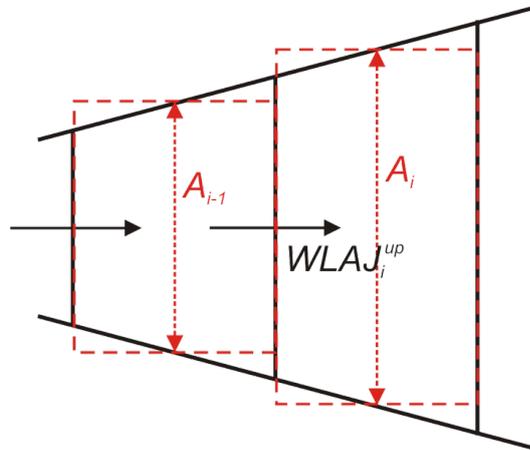
Dieser Druckanstieg entlang eines Strömungswegs mit wachsendem Strömungsquerschnitt wird in ATHLET standardmäßig unterdrückt, indem durch eine Zeta-Wert-Anpassung ein entsprechend großer Formverlust automatisch eingeführt wird. Dies ist dadurch begründet, dass für Strömungen in 1D Strömungswegen – außer für einen Diffusor – turbulente Verluste, die sich z. B. aufgrund einer Strömungsablösung von der Wand ergeben, den rechnerisch möglichen Druckrückgewinn überwiegen.

Für wandferne Zonen im Innern eines mehrdimensionalen Gitters lässt sich diese Argumentation jedoch nicht aufrechterhalten. Daher wird für radiale Leitungen in mehrdimensionalen zylindrischen Gittern ein Druckrückgewinn zugelassen. Betrachtet man nun das in Abb. 3.8 dargestellte Segment eines zylindrischen Gitters und unterstellt eine achsensymmetrische, radial nach außen verlaufende Strömung, so liefert die für den konvektiven Anteil der Impulsgleichung verwendete Upwind Diskretisierung (siehe Kapitel 3.1.3) folgenden Zusammenhang für die Drücke in benachbarten Zonenmittelpunkten:

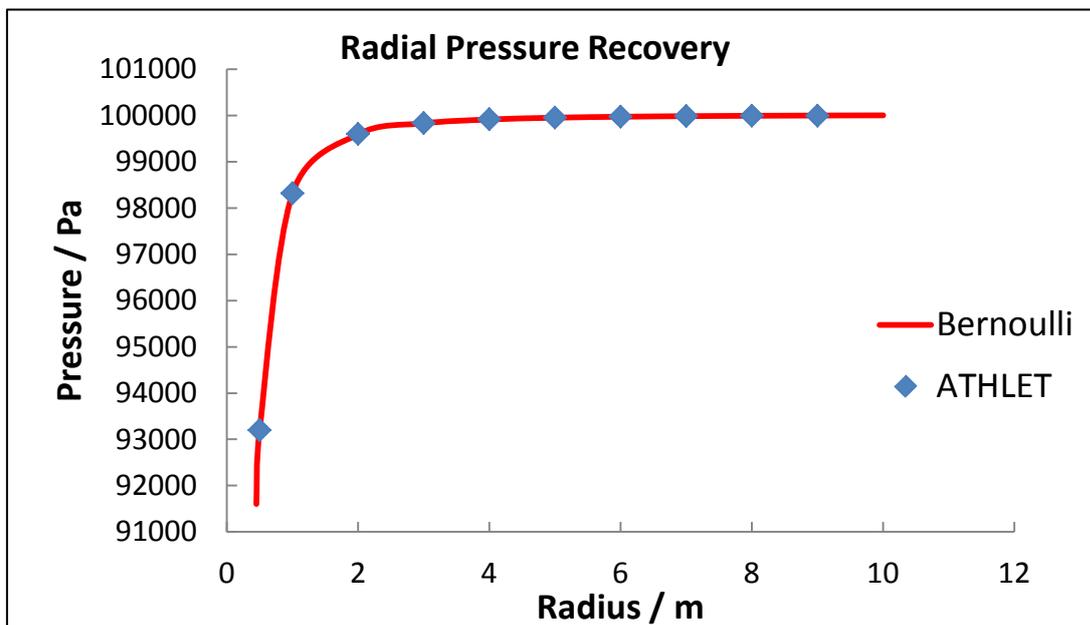
$$P_i = P_{i-1} + \underbrace{\frac{\rho}{2} \left( (w^{j-1,R})^2 - (w^{j,R})^2 \right)}_{1D-MF} = P_{i-1} + \frac{\rho}{2} \cdot WLAJ_i^{up2} \cdot \left( \frac{1}{A_{i-1}^2} - \frac{1}{A_i^2} \right) \quad (3.12)$$

Hierin sind  $A_{i-1}$  und  $A_i$  die Strömungsquerschnitte in den beiden benachbarten ATHLET-KV. Wie in Kapitel 3.2.3.2 beschrieben, werden diese KV-Querschnitte für radiale TFO, also in der Regel Cross-Connection Objekte, vom 3D-Modell korrekt im

Sinne der vom Anwender vorgegebenen zylindrischen Gittergeometrie ermittelt. Gleichung (3.12) ist in Einklang mit der Bernoulli Gleichung. Dies verdeutlicht Abb. 3.9 für eine radial nach außen verlaufende Strömung in einem Zylinder (Zylinderdurchmesser 10 m, Druck am Außenrand 1 bar).



**Abb. 3.8** Diskretisierung in zylindrischen Gittern: Zylindergittersegment in schwarz, abgeleitete ATHLET-Zonen in rot



**Abb. 3.9** Druckrückgewinn für eine reibungsfreie, axialsymmetrisch nach außen gerichtete Strömung

### 3.3 Validierungsergebnisse

Begleitend zur Entwicklung des 3D-Modells wurden erste Anwendungsrechnungen durchgeführt. Eine umfangreiche Modellvalidierung erfolgt derzeit im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS1519 zur Codevalidierung.

Die bisherige Modellvalidierung lässt sich in drei Bereiche untergliedern: a) Verifikationsrechnungen zu einfachen Beispielen, für die analytische Lösungen existieren. b) Nachrechnung von Versuchen im Labormaßstab. c) Nachrechnung realistischer Anwendungen im Anlagenmaßstab. Tab. 3.1 gibt einen Überblick über die bisherige Anwendung des 3D-Modells. Die ausgewählten Testfälle berücksichtigen 2D und 3D Strömungen, kartesische und zylindrische Gitter sowie einphasige und zweiphasige Phänomene. Einige Validierungsergebnisse werden in den nachfolgenden Kapiteln dargestellt. Weitere Ergebnisse sind in technischen Berichten dokumentiert:

- ROCOM Test 1.1, 1.2 /SCH14/ /HRI12a/
- ROCOM Test 1.3 /HRI12b/
- ROCOM Test 2.1 und 2.2 /CEU15/
- NOKO TOPFLOW /LAN14/
- Kalinin-3 Benchmark /NIK12/
- UPTF-7 /HRI13/

**Tab. 3.1** Validierung des 2D/3D-Modells

<b>Geometrie / Anlagenkomponente</b>	<b>Szenario</b>	<b>Physikalischer Prozess</b>	<b>Referenz</b>
<b>Verifikation</b>			
Kartesisch	Radialsymmetrische Quellströmung (2D/3D)	Gemischte MF Beiträge (2D und 3D)	Analytische Lösung
	Rayleigh-Benard (2D)	Naturkonvektion	Analytische Lösung
Zylinder	Achsensymmetrische Quellströmung (2D)	Druckrückgewinn	Bernoulli
<b>Prozessvalidierung</b>			
Ringraum	Rekritikalität, PTS	Kühlmittelvermischung (2D)	ROCOM Test 1.1, 1.2, 1.3
Unteres Plenum	Rekritikalität	Kühlmittelvermischung (3D)	ROCOM Test 2.1, 2.2
Flutbecken	Nachzerfallswärmeabfuhr	Naturkonvektion Pool, freie Wasseroberfläche	NOKO TOPFLOW
Zylindrischer Behälter	Übergang Zwangskonvektion-Naturkonvektion, Flüssigmetall	1D-3D-Kopplung, Vermischung, Naturumlauf (2D/3D)	CFD, TALL
<b>Anwendungsrechnungen</b>			
Ringraum	PTS	Kühlmittelvermischung (eiphasig), Naturumlauf	UPTF-TRAM C1
Ringraum, Unteres Plenum	HKMP-Ausfall	Zwangskonvektion, asymmetrisches Strömungsverhalten	Kalinin-3 Benchmark
Ringraum	LB-LOCA: CCFL, ECC-Bypass	Zweiphasige Strömung	UPTF-7

### 3.3.1 UPTF-TRAM C1

Die Nachrechnung von Versuchen der Reihe UPTF-TRAM C1 hatte das Ziel, die neu implementierten zweidimensionalen Erhaltungsgleichungen für die Simulation des Ringraums zu validieren. Die Versuchsreihe untersucht die Kühlmittelvermischung im kalten Strang, Ringraum und unteren Plenum bei Notkühlmitteleinspeisung nach einem

kleinen Leck. Dies ist vor dem Hintergrund der Pressurized-Thermal-Shock Problematik von besonderem Interesse.

Die Versuchsreihe war bereits früher Gegenstand einer ATHLET-Nachrechnung /LER02/. Auf Basis des damals erstellten ATHLET-Datensatzes wurden zwei neue Datensätze erzeugt, die über eine erweiterte Nodalisierung mit acht bzw. 16 Parallelkanälen im Ringraum und unteren Plenum verfügen. Diese Datensätze wurden zur Validierung der 2D Gleichungen des neuen ATHLET 2D/3D-Modells herangezogen. Die hierbei erzielten Ergebnisse wurden zusätzlich mit 1D-Simulationen verglichen, für die ebenfalls die neuen Datensätze verwendet wurden.

### 3.3.1.1 Versuchsbeschreibung

In der Versuchsserie C1 des UPTF-TRAM Versuchsprogramms wurde das thermische Mischen im Kaltstrang und Ringraum während der kaltseitigen Notkühleinspeisung untersucht /SIE96/. Dazu wurde der mit heißem Wasser vollständig gefüllten Versuchsanlage in einem Strang kaltes Notkühlwasser zugeführt und durch Temperatur- und Geschwindigkeitsmessungen die schwerkraftgetriebenen Strömungs- und Mischvorgänge erfasst. In den hier untersuchten Versuchen erfolgte die Einspeisung in den kalten Strang des Loops 2, entsprechende Massenströme wurden heißseitig abgezogen. Nachgerechnet wurden die Versuchsläufe Run 1a1, 2a1, 3b1 und 4a1 /SCH12/, die sich vor allem in den realisierten Einspeiseraten unterscheiden. Tab. 3.2 zeigt Randbedingungen für das eingespeiste Kühlmittel und die Fluidtemperatur im Ringraum für Versuch Run 3b1.

**Tab. 3.2** Anfangs- und Randbedingungen der UPTF-TRAM C1 Versuche

Run	$G_{ECC}$ (kg/s)	$T_{ECC}$ (°C)	$T_{heiß}$ (°C)
3b1	70	32	186

Schwerpunkt der Analysen war der Vergleich der gemessenen und berechneten Wassertemperaturen und Strömungsgeschwindigkeiten im Ringraum. Die Instrumentierung des Ringraums ist in Abb. 3.10 dargestellt. Die Messstellenbezeichnung enthält die Höhe, den Winkel, sowie die genaue radiale Position. Für das Thermoelement 1A21TF073 bedeutet „21“ die Level ID und „07“ die Angle ID. Die letzte Ziffer, hier „3“ gibt Auskunft über die radiale Position innerhalb des Ringraums. Thermoelemente be-

fanden sich sowohl an der Innenwand des Ringraums (Ziffer „7“), in der Mitte des Ringspalts („5“) als auch an der RDB-Außenwand („3“).

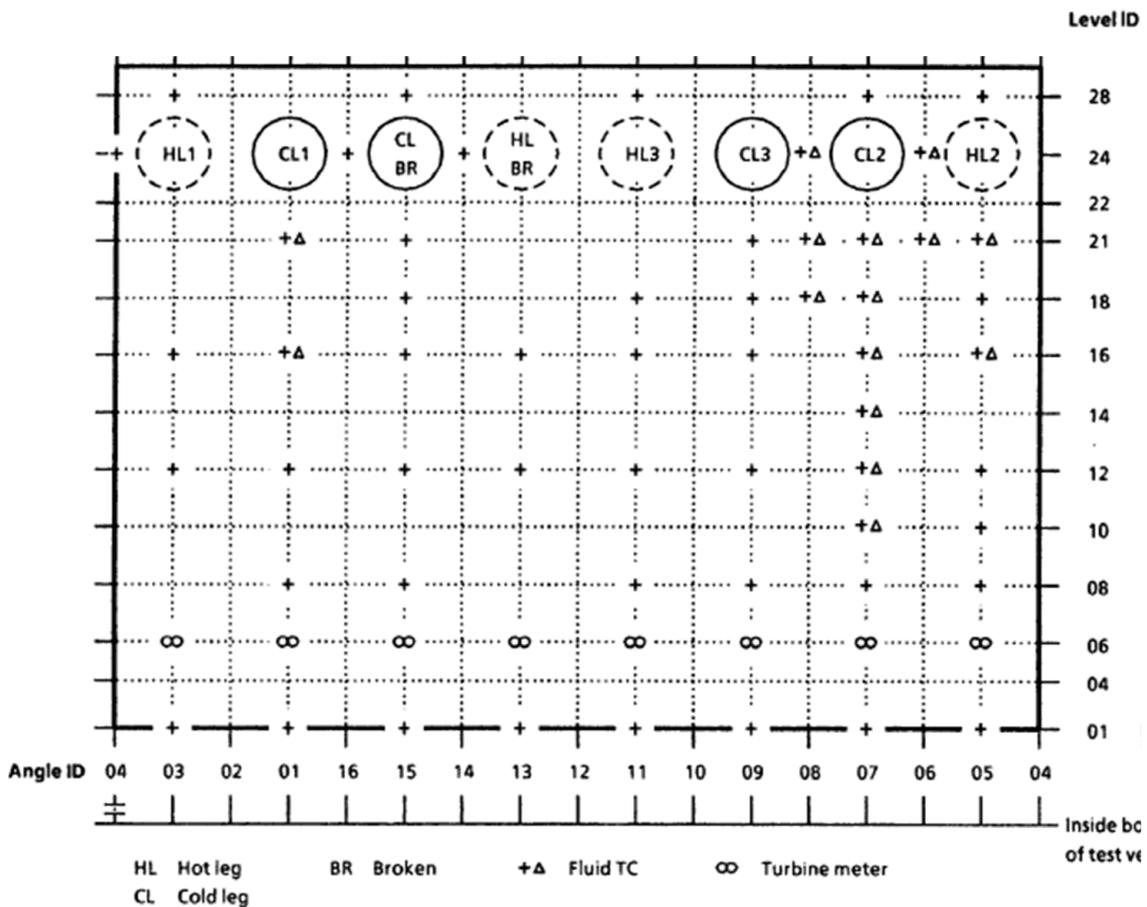
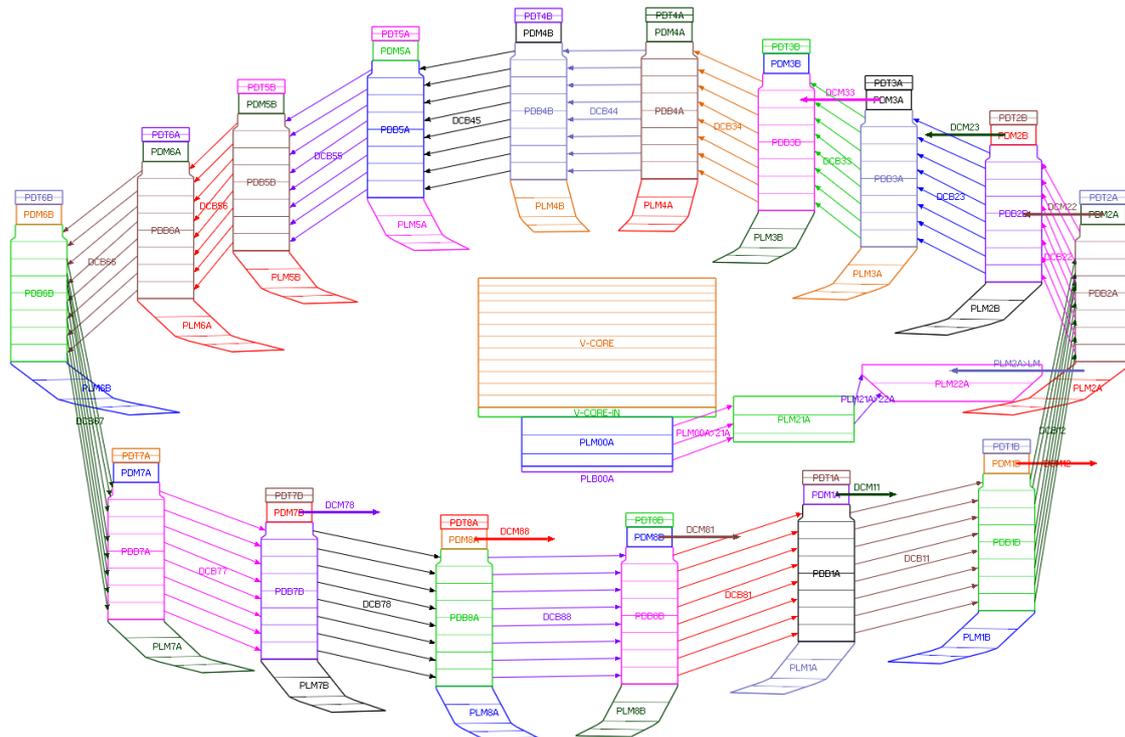


Abb. 3.10 Instrumentierung im Ringraum /SIE96/

### 3.3.1.2 Beschreibung der Nodalisierung

Die verwendeten Datensätze bauen auf dem bereits früher erstellten Datensatz mit acht Parallelkanälen für den Ringraum auf /LER02/. Wesentliche Erweiterung ist eine detaillierte Nodalisierung des unteren Plenums. Dieses war ursprünglich nur durch drei Kanäle repräsentiert. Für das untere Plenum wurde eine 8-Kanal Darstellung realisiert, die aus einem Zentralkanal, zwei Ringen mit inneren Kanälen und einem äußeren Ring mit fortgeführten Ringraumkanälen besteht. Um den Einfluss der Gitterauflösung bewerten zu können, wurde zusätzlich eine Nodalisierung mit 16 Kanälen im Ringraum bzw. 16 Zylindersegmenten im unteren Plenum erzeugt. Diese Nodalisierung veranschaulicht Abb. 3.11. Dargestellt sind die Ringraumkanäle mit den Querverbindungen im mittleren Bereich. Der Ringraumkanal PDM2A / PDB2A ist mit dem kalten Strang

verbunden, in den das unterkühlte Notkühlmittel eingespeist wird. Außerdem zu erkennen sind der Zentralkanal sowie ein Segment der inneren Kanäle des unteren Plenums. Feinere Gitter mit z. B. 32 Zylindersegmenten wurden nicht untersucht. Hierfür wären umfangreiche Eingriffe in den Datensatz erforderlich, da sich u. a. die Netzwerktopologie im Bereich der Stützen verändern würde. Hier müssten jeweils zwei Ringraumkanäle mit einem kalten Strang verknüpft werden.



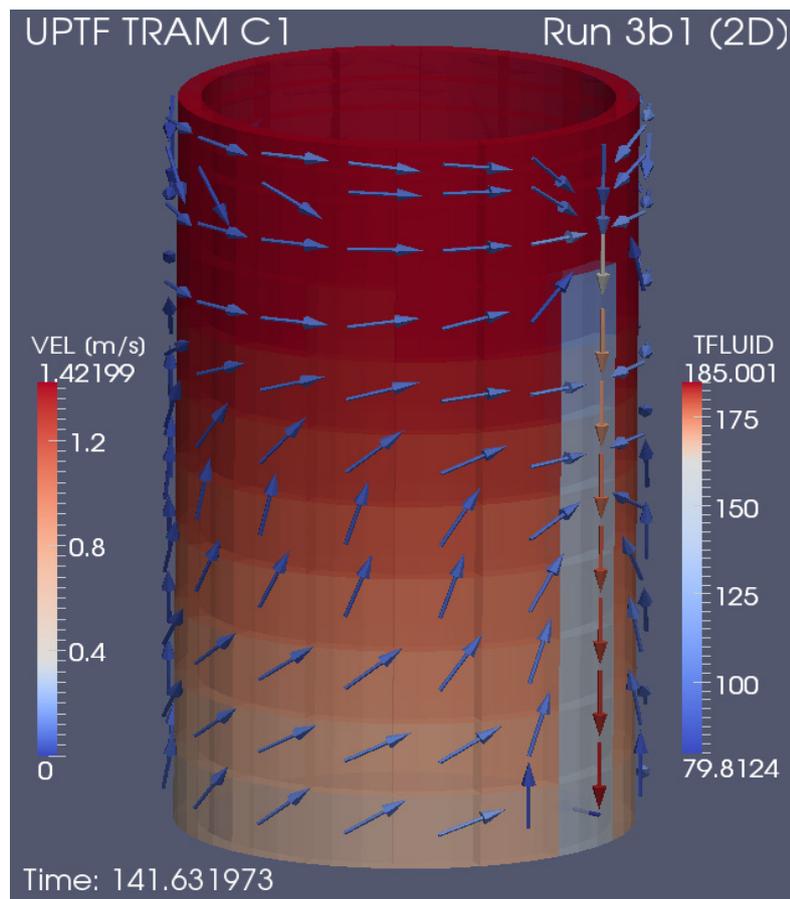
**Abb. 3.11** Nodalisierung des Ringraums und des unteren Plenums mit 16 Parallelkanälen

### 3.3.1.3 Ergebnisse Run 3b1

Nachfolgend werden für den Versuchslauf Run 3b1 ausgewählte Ergebnisse dargestellt, die mit der 16-Kanal-Nodalisierung und ATHLET Version 3.0 A erzielt wurden. 1D- und 2D-Simulationen werden mit dem Experiment verglichen. Eine detaillierte Beschreibung aller Ergebnisse und Versuchsläufe jeweils separat für die 8- bzw. 16-Kanal-Nodalisierung findet sich in /SCH12/.

Abb. 3.12 veranschaulicht qualitativ das mit dem 2D-Modell mit 16 Parallelkanälen berechnete Strömungsverhalten im Ringraum (RR) während der quasi-stationären Versuchsphase nach Beginn der Einspeisung. Zu erkennen ist die Temperaturschichtung

im Ringraum mit heißem Kühlmittel im oberen Bereich sowie die Kaltwassersträhne unterhalb der Einspeisestelle von Strang 2. Die Pfeile visualisieren die Strömungsrichtung und verdeutlichen die makroskopische Zirkulationsströmung, die den Ringraum langsam mit kälterem Kühlmittel aus dem unteren Plenum auffüllt. Die Visualisierung in Abb. 3.12 zeigt den Ringraum vereinfacht als Hohlzylinder. Geometrische Details, die in der Simulation berücksichtigt wurden, sind nicht dargestellt.

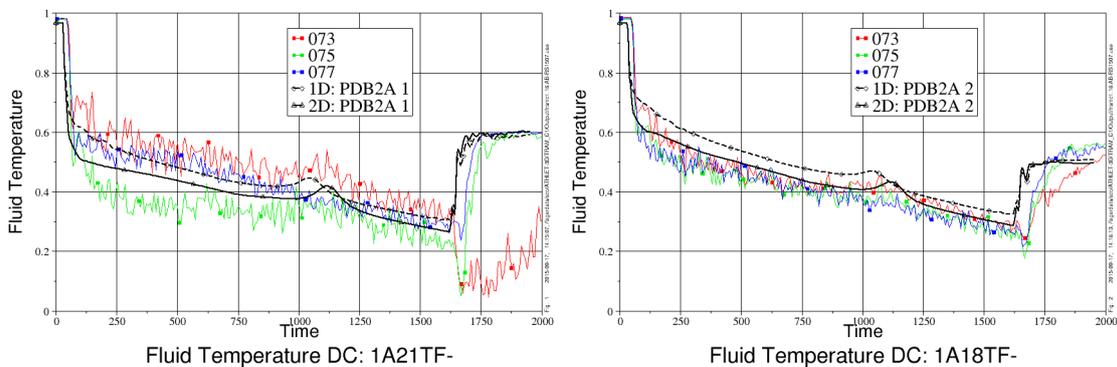


**Abb. 3.12** Strömungs- und Temperaturverteilung im Ringraum

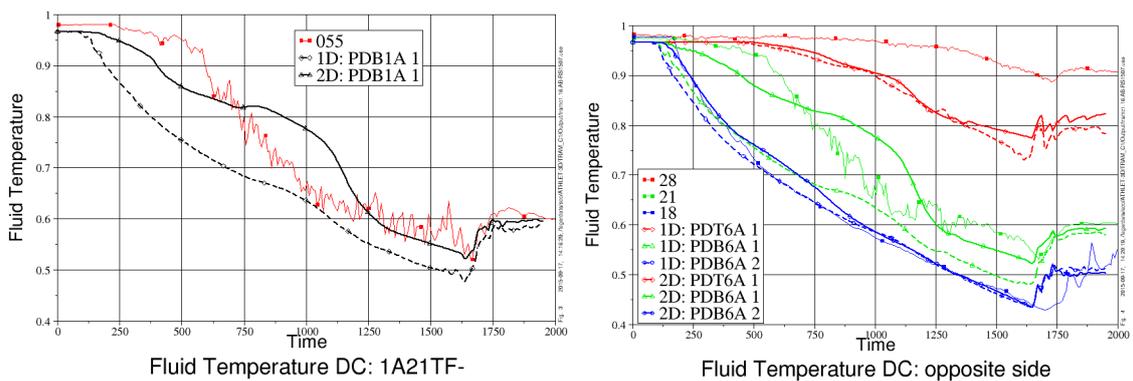
Der zeitliche Verlauf der Fluidtemperaturen unterhalb der Einspeisestelle in den Ringraum kann Abb. 3.13 entnommen werden. Aufgrund einer geringeren Vermischung liefern die 2D-Simulationen etwas niedrigere Temperaturen. Für die 2D-Simulation mit 16 Kanälen führt dies zu einer sehr guten Übereinstimmung mit dem Experiment im oberen Bereich des Kanals PDB2A. Die Temperaturstratifizierung im Ringraum kann von den Simulationen mit acht Ringraumkanälen nur ansatzweise reproduziert werden. Auch die 1D-Simulation mit 16 Kanälen liefert diesbezüglich nur geringfügig verbesserte Ergebnisse (Abb. 3.14). Dagegen kann die 2D-Simulation mit 16 Kanälen die Stratifizierung ähnlich dem Experiment oberhalb der Messposition 21 nachbilden. Dies zeigt

sich besonders gut für die der Einspeisestelle gegenüberliegende Ringraumseite in Abb. 3.14 rechts, wo für die Ringraum-Höhe 18 bereits kurz nach Beginn der Einspeisung ein schneller Temperaturabfall zu beobachten ist, wohingegen die Position 21 erst zeitlich verzögert einen deutlich langsameren Temperaturabfall zeigt.

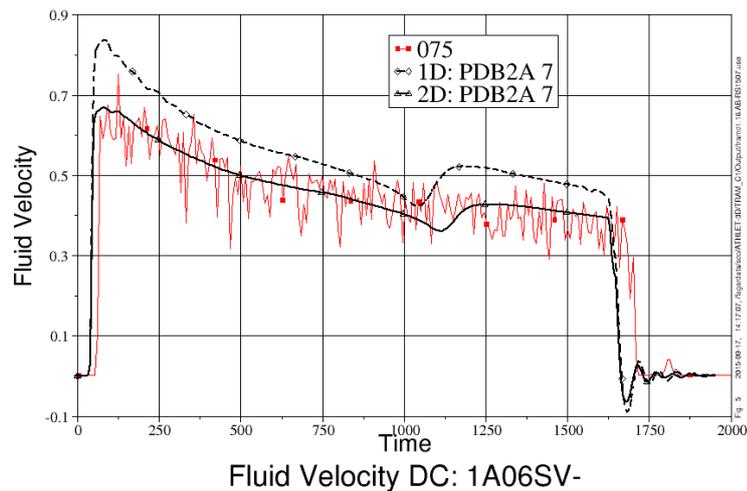
Die Geschwindigkeiten im unteren Ringraum, insbesondere die Fallgeschwindigkeit der Kaltwassersträhne, können nur von der 2D-Simulation mit 16 RR-Kanälen gut nachgebildet werden (Abb. 3.15). Die leichten Schwingungen zum Zeitpunkt 1100 s sind auf das Herunterfahren der in ATHLET mittels ECCMIX modellierten Einspeiseraten zurückzuführen.



**Abb. 3.13** Fluidtemperatur unterhalb des bespeisten kalten Strangs (DC16)



**Abb. 3.14** Fluidtemperatur benachbart (links) und gegenüber (rechts) zur Einspeiseposition



**Abb. 3.15** Vertikale Fluidgeschwindigkeit im unteren Ringraum

### 3.3.1.4 Zusammenfassung und Bewertung

Zur Validierung und Bewertung der neu implementierten 2D Modellgleichungen wurden vier Experimente der Versuchsreihe UPTF-TRAM C1 mit ATHLET nachgerechnet. Neben dem Versuch Run 3b1 waren dies Run 1a1, Run 2a1 und Run 4a1. Es wurden zwei unterschiedliche Nodalisierungen mit 8 bzw. 16 Parallelkanälen für den RR und das untere Plenum verwendet. Für die Nachrechnungen der vier Versuche insgesamt können anhand eines Vergleichs der einerseits mit den 1D und andererseits mit den 2D Modellgleichungen erzielten Ergebnisse folgende Schlussfolgerungen gezogen werden:

- Die mit den zweidimensionalen Modellgleichungen erzielten Resultate für die Temperaturverteilung im Ringraum geben die Versuche besser wieder als die 1D-Simulationen. Dies gilt sowohl für die Vermischungstemperatur unterhalb der Einspeisestelle in den Ringraum als auch für die Temperaturschichtung im oberen RR-Bereich. Die Unterschiede zwischen 1D- und 2D-Simulationen sind hierbei für die 8-Kanal-Nodalisierung kleiner als für die feinere 16-Kanal-Nodalisierung.
- Die Fallgeschwindigkeit der Kaltwassersträhne im Ringraum unterhalb der Einspeisestelle wird bei nur acht RR-Kanälen systematisch unterschätzt. Grund hierfür ist eine nodalisierungsbedingt zu große Heißwasserbeimischung im RR, bedingt durch Verwendung zu grober Gitterzellen. Die grobe 8-Kanal-Nodalisierung ist somit nicht in der Lage, die den Versuchsverlauf bestimmenden physikalischen Vorgänge im Ringraum räumlich aufzulösen.

Dem gegenüber kann die 2D-Modellierung in Verbindung mit einer 16-Kanal-Nodalisierung die Fallgeschwindigkeit der Kaltwassersträhne für alle vier Versuche sehr gut reproduzieren. Die Kanalbreite scheint also vergleichbar der tatsächlichen Strähnenausdehnung zu sein. Die 1D-Modellierung in Verbindung mit einer 16-Kanal-Nodalisierung überschätzt allerdings die Fallgeschwindigkeit der Kaltwassersträhne. Hier wird insgesamt eine zu starke Zirkulationsströmung im Ringraum berechnet.

- Während sich bei Einsatz der 1D-Modellgleichungen die Ergebnisse durch Verwendung eines feineren Gitters nur geringfügig verbessern, profitieren die 2D-Gleichungen stärker von der feineren Nodalisierung mit 16 Parallelkanälen. Dies kann als Indiz für eine nur begrenzte Einsetzbarkeit der 1D-Modelle auf hochauflösenden, mehrdimensionalen Gittern gedeutet werden.

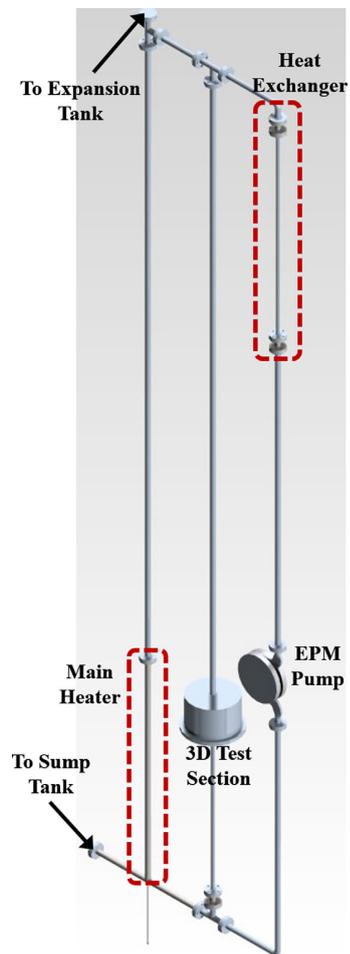
Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die in ATHLET implementierten zweidimensionalen Erhaltungsgleichungen bei einer 16-Kanal-Nodalisierung des Ringraums alle wesentlichen Ergebnisse der vier nachgerechneten UPTF-TRAM C1 Versuche zufriedenstellend reproduzieren.

### **3.3.2 TALL Test T01**

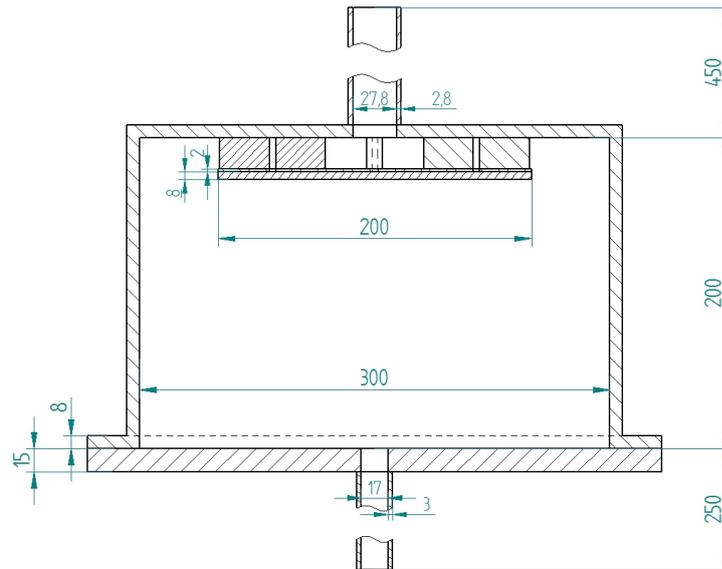
Die TALL Versuchsanlage wird von der KTH Stockholm betrieben und dient im Rahmen des EU Projekts THINS (Thermal-Hydraulics of Innovative Nuclear Systems, 7. EU Forschungsrahmenprogramm) zur Validierung von CFD Codes für Generation IV Reaktoren. Hierfür verfügt die Anlage innerhalb des Primärkreises über eine umfangreich instrumentierte, zylindrische 3D Testsektion. Als Kühlmittel wird LBE (Lead-Bismuth Eutectic) verwendet.

Der Primärkreis der Anlage ist etwa 6.55 m hoch und besteht aus drei parallelen vertikalen Strängen (Abb. 3.16). Der Hauptstrang und die 3D-Testsektion sind mit Heizelementen ausgestattet. Eine Pumpe und ein geodätisch hochgelegener Wärmetauscher befinden sich im dritten Strang. Der zylindrische Testbehälter (Abb. 3.17) wird nur im oberen Bereich der Außenwand beheizt. Eine konzentrische Prallplatte im Innern unterdrückt die ungehinderte Durchströmung. Während transienter und naturumlaufnaher Versuchsphasen kommt es im Behälter zu komplexen 3D Vermischungs- und Stratifizierungsvorgängen, die eine Rückwirkung auf das thermohydraulische Verhalten der Gesamtanlage haben. Diese Vorgänge werden mit dem Test T01 untersucht, bei dem

es nach Abschalten der Hauptumwälzpumpe im Primärkreis bei weiterhin aktiven Heizungen zum transienten Übergang von Zwangskonvektion zu Naturumlauf kommt.



**Abb. 3.16** Primärkreis der TALL Anlage /PAP14/

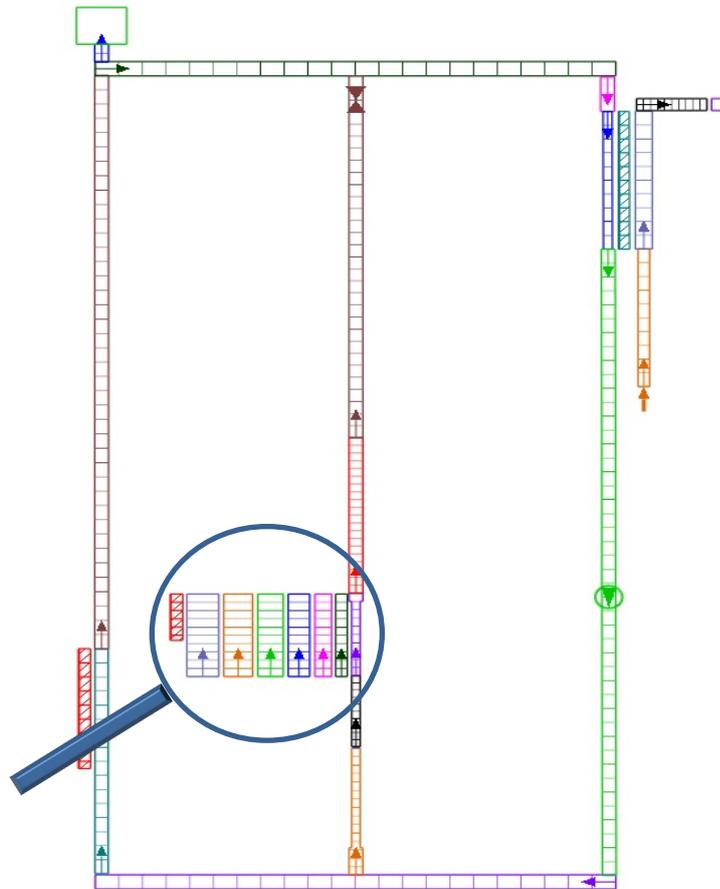


**Abb. 3.17** Querschnitt der zylindrischen Testsektion der TALL Anlage /GEF14/

### 3.3.2.1 Ergebnisse der Vorausrechnung

Für den Test T01 wurde unter Verwendung des 3D-Modells zur Simulation der Strömung im Testbehälter eine Vorausrechnung mit ATHLET durchgeführt. Hierfür wurde ein Datensatz, der im Rahmen des THINS Projekts als Basis für eine gekoppelte Vorausrechnung mit ATHLET – ANSYS CFD erstellt worden war, adaptiert. Das Modell umfasst die Leitungsnetzwerke des Primär- und Sekundärkreises, die beiden Heizelemente, Wärmetauscher, Pumpe und Ausgleichsbehälter (Abb. 3.18). Der Testbehälter wird durch ein zylindrisches Gitter abgebildet, das im Fall der unten dargestellten Ergebnisse aus einem zentralen Kanal und zwölf konzentrischen Ringen bestand. In axialer Richtung ist der Behälter mit 20 KV diskretisiert, wobei sich zwei Zonen oberhalb der Prallplatte befinden. Die thermischen Eigenschaften der Prallplatte wurden in der Simulation vernachlässigt. Die Heizung im oberen Bereich der Behälteraußenwand wird mittels eines Wärmeleitobjekts abgebildet, das mit dem äußeren Ring des Fluidgitters verknüpft ist (Abb. 3.18).

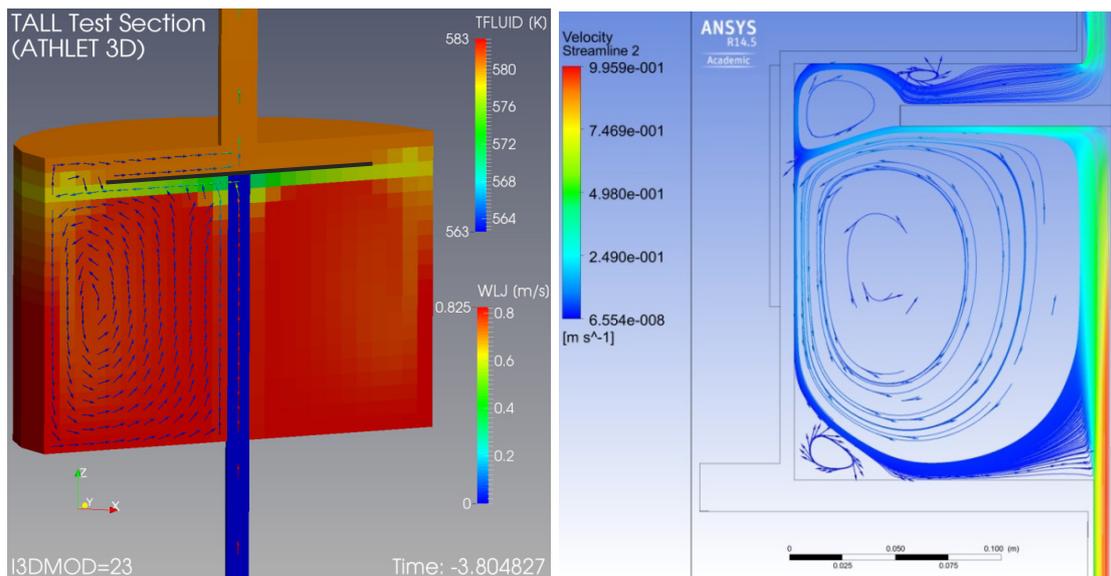
Für die Vorausrechnung wurde als stationärer Anfangszustand ein Gesamtmassenstrom von 4,77 kg/s spezifiziert, wobei davon 1,93 kg/s den Teststrang durchströmen. Die Heizungen werden mit jeweils 5 kW Leistung versorgt. Die Umwälzpumpe wird nach 120 s abgeschaltet.



**Abb. 3.18** Nodalisierungsschema der TALL Anlage

### **Stationärer Strömungszustand 1: Zwangskonvektion**

Abb. 3.19 links veranschaulicht das mit dem ATHLET 3D-Modell berechnete, achsensymmetrische Geschwindigkeitsfeld innerhalb des zylindrischen Testbehälters und den angeschlossenen Leitungen bei laufender Umwälzpumpe vor Beginn der Transiente. Der Behälter wird von unten nach oben durchströmt. Zu erkennen ist ein großer Wirbel, der nahezu den gesamten Bereich unterhalb der Prallplatte ausfüllt, außerdem ein kleinerer Wirbel im Bereich seitlich der Prallplatte. Der qualitative Vergleich zu denen im Rahmen der gekoppelten Rechnung mit ANSYS CFD erzielten Ergebnissen /PAP14/ in Abb. 3.19 rechts zeigt eine gute Übereinstimmung, auch wenn der kleine Wirbel im unteren äußeren Behälterbereich von ATHLET nicht vorausgesagt werden kann. Die mit ANSYS CFD berechnete Strömungsablösung oberhalb der Prallplatte kann von dem groben ATHLET-Gitter nicht aufgelöst werden. Allerdings deuten die Geschwindigkeitspfeile in dieser Region den mit CFD beobachteten Effekt an.



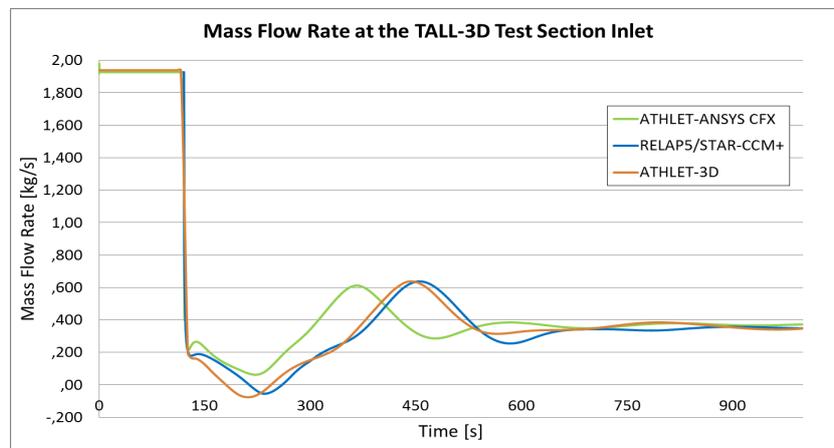
**Abb. 3.19** Links: Strömungs- und Temperaturverteilung bei Zwangskonvektion mit ATHLET; Rechts: Geschwindigkeitsfeld mit ANSYS CFD

### Transienter Übergang von Zwangs- zu Naturkonvektion

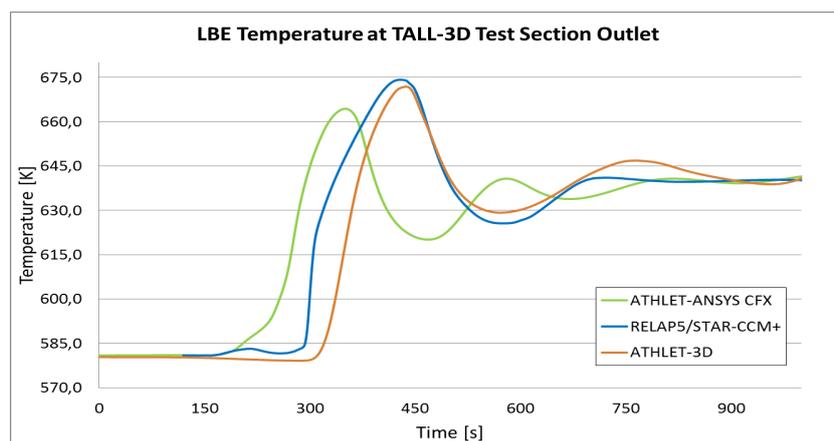
Nach dem Abschalten der Pumpe kommt es zu komplexen thermohydraulischen Wechselwirkungen zwischen den beiden beheizten Strängen. Die unterschiedliche Temperatur- und Dichteverteilung entlang der parallelen Stränge aufgrund unterschiedlicher geodätischer Heizelementhöhen und Strangvolumina ergibt verschiedene Auftriebskräfte und führt in der ATHLET-Simulation vorübergehend zu einer Strömungsumkehr im Strang mit dem Testbehälter (Abb. 3.20). Dieses Verhalten wird von einer weiteren, von der KTH Stockholm mit dem gekoppelten Programmsystem RELAP5 – STAR-CCM durchgeführten Vorausrechnung bestätigt /PAP14/. Die Vorausrechnung mit ANSYS CFD ergab demgegenüber keine Strömungsumkehr, was sich zwischenzeitlich als eine Folge der vereinfachten Abbildung der Behälterwände herausgestellt hat, die in der Vorausrechnung lediglich in Form einer konstanten Wärmestromrandbedingung berücksichtigt wurden. Im weiteren Verlauf der Transiente stellt sich in allen Rechnungen ein stabiler Naturumlauf durch die Testsektion ein (Abb. 3.20).

Abb. 3.21 zeigt die berechnete Fluidtemperatur in der Leitung oberhalb des Behälters. Auch hierfür ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen der ATHLET Simulation und dem gekoppelten Programm RELAP5 – STAR-CCM. Das ausgeprägte Temperaturmaximum resultiert aus der vorübergehenden Strömungstagnation mit Strömungsumkehr und erscheint nach Einsetzen des Naturumlaufs durch den Teststrang. Die im weiteren Verlauf simulierten Temperaturosillationen sind eine Folge des schwanken-

den Massenstroms durch den Teststrang in Verbindung mit der inhomogenen Temperaturverteilung innerhalb des Testbehälters.



**Abb. 3.20** Massenstrom durch den Anlagenstrang mit Testbehälter

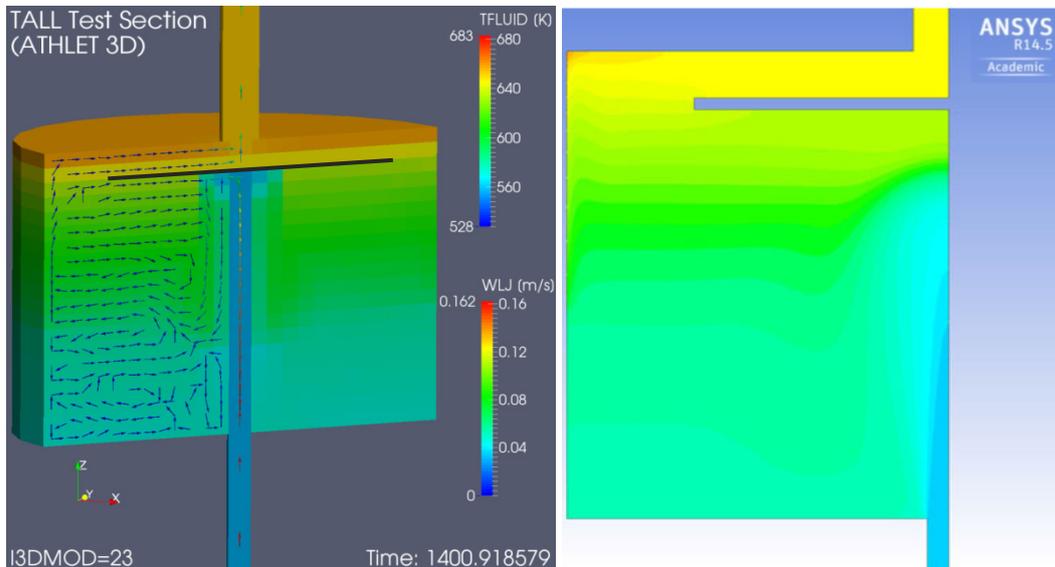


**Abb. 3.21** Fluidtemperatur am Testbehälteraustritt

### Stationärer Strömungszustand 2: Naturkonvektion

Etwa 1000 s nach Abschalten der Pumpe stellt sich in der Anlage ein stabiler Zustand mit Naturkonvektion ein. Der Testbehälter wird zu diesem Zeitpunkt wiederum von unten nach oben durchströmt. Im Zentrum des Behälters bildet sich eine Art Flüssigkeitsstrahl, der sowohl von ATHLET als auch von ANSYS CFD in Abb. 3.22 wiedergegeben wird. Anders als mit CFD berechnet reicht dieser Strahl in ATHLET bis in Höhe der Prallplatte, was eine Folge der in der ATHLET Impulsgleichung nicht korrekt berücksichtigten viskosen und turbulenten Scherspannungen sein könnte. Abseits des Jets bildet sich infolge der Heizung im oberen Behälterbereich eine Temperaturschichtung aus, die von beiden Programmen vergleichbar berechnet wird. Der heißeste Fluidbe-

reich befindet sich erwartungsgemäß an der Behälteraußenwand oben. Die Aufheizspannen über den Behälter unterscheiden sich in den beiden Rechnungen zu diesem Versuchszeitpunkt. Dies ist eine Folge der etwas unterschiedlich simulierten Massenströme durch den Teststrang, die aufgrund verschiedener Druckverluste, z. B. durch Reibung, resultieren.



**Abb. 3.22** Links: Strömungs- und Temperaturverteilung bei Naturkonvektion mit ATHLET; Rechts: Temperaturfeld mit ANSYS CFD

### 3.3.2.2 Bewertung

Durch die Vorausrechnung des Versuchs TALL Test 01 konnten die mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen des ATHLET 3D-Modells für ein zylindrisches Gitter in Verbindung mit dem Arbeitsmedium LBE überprüft werden. Die erzielten Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit CFD Simulationen und erscheinen auch im Hinblick auf den erwarteten Versuchsverlauf plausibel. Insbesondere konnten für den Testbehälter wesentliche 3D Strömungsvorgänge simuliert werden, z. B. die fast vollständige Temperaturvermischung bei Zwangsumlauf, die Strömungsumkehr nach Abschalten der Pumpe sowie die Temperaturschichtung bei Naturumlaufbedingungen. Insgesamt hat sich der Einsatz des 3D-Modells für den Testbehälter der TALL Anlage somit bewährt. Für die Zukunft ist ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messdaten geplant, die kürzlich freigegeben wurden.

### 3.4 Reibungsbehaftete Modellgleichungen

In Ergänzung zu der in Kapitel 3.1 beschriebenen Entwicklung des 3D-Modells wurden die mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen durch die Implementierung der molekularen und turbulenten Scherspannungen vervollständigt. Die Herleitung der reibungsbehafteten Modellgleichungen ist detailliert in /VON13/ beschrieben. Im Folgenden sind die wichtigsten Ergebnisse zusammengefasst.

#### 3.4.1 Erhaltungsgleichungen und Turbulenzmodell

Durch Einführung der Viskositäts- und Turbulenzterme können die Erhaltungsgleichungen für Impuls und Energie genauer formuliert werden. Da der Einfluss von Viskosität und Turbulenz auf die Impulsbilanz als bedeutsamer einzuschätzen ist als auf die Energiebilanz, wurden bisher ausschließlich Änderungen der Impulsbilanz vorgenommen. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass folgende Terme in der Energiebilanz berücksichtigt werden müssten:

- Arbeit aufgrund der (viskosen und turbulenten) Scherkräfte zwischen benachbarten Fluidzellen
- viskose und turbulente Dissipation
- turbulenter Wärmetransport durch Geschwindigkeits- und Temperaturfluktuationen

##### 3.4.1.1 Viskose Scherkräfte

Für ein ortsfestes KV lautet die Impulsbilanz in Integralform

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{(V)} \rho \vec{v} dV \right) + \oint_{(O)} \rho \vec{v} \otimes \vec{v} dO = \oint_{(O)} \vec{\sigma} dO + \vec{F}_{Rest} \quad (3.13)$$

bzw. nach Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes in differentieller Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot (-p \cdot \bar{\bar{I}} + \bar{\tau}) + \vec{f}_{Rest} \quad (3.14)$$

mit der Einheitsmatrix  $\bar{\bar{I}}$  und dem viskosen Spannungstensor  $\bar{\tau}$ . Gleichung (3.14) entspricht genau Gleichung (3.3) mit dem Unterschied, dass der Vektor  $\mathbf{f}$  in Gleichung (3.3) hier zerlegt wurde in einen Teil, welcher die viskosen Scherkräfte repräsentiert

$(\vec{\nabla} \cdot \bar{\tau})$ , und einen Rest ( $\vec{f}_{Rest}$ ). Außerdem ist Gleichung (3.14) der Einfachheit halber für ein einphasiges Fluid aufgestellt und Vektorgrößen sind mit einem Pfeil gekennzeichnet und nicht fett gedruckt. Diese Vektorschreibweise gilt im gesamten Kapitel 3.4.

Der viskose Spannungstensor ist symmetrisch und kann nach einigen vereinfachenden Annahmen (Newton'sches Fluid, inkompressible Strömung; vgl. /VON13/) formuliert werden als

$$\bar{\tau} = 2\mu \cdot \bar{D} \quad (3.15)$$

wobei  $\mu$  die dynamische Viskosität ( $[\mu] = 1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ) und  $\bar{D}$  den Tensor der Deformationsrate bezeichnet:

$$\bar{D} = \frac{1}{2} [\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T] \quad (3.16)$$

In kartesischen Koordinaten formuliert erhält man für den Tensor  $\bar{D}$

$$\bar{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

mit den Ortskoordinaten  $x, y, z$  und den zugehörigen Geschwindigkeitskomponenten  $u, v, w$ . Eine knappere Formulierung der Tensorkomponenten in kartesischen Koordinaten ist

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.18)$$

mit  $i, j = 1, 2, 3$ .

Bei Verwendung von Zylinderkoordinaten erhält man für den Tensor der Deformationsrate:

$$\bar{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right) & \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{u}{r} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

$u, v$  und  $w$  sind dabei die Geschwindigkeitskoordinaten in  $r$ -,  $\varphi$ - und  $z$ -Richtung:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = u \cdot \vec{e}_r + v \cdot \vec{e}_\varphi + w \cdot \vec{e}_z \quad (3.20)$$

Gegenüber der Beschreibung in kartesischen Koordinaten müssen bei der Formulierung in Zylinderkoordinaten zusätzlich die Terme  $-1/2 \cdot v/r$  und  $u/r$  in den Matrixelementen  $D_{12} = D_{21}$  und  $D_{22}$  berücksichtigt werden. Die Terme mit  $\frac{1}{r} \frac{\partial(\dots)}{\partial \varphi}$ , wie beispielsweise in Matrixelement  $D_{23}$ , müssen nicht gesondert berücksichtigt werden, da sie die Geschwindigkeitsänderung entlang einer Strecke in  $\varphi$  – Richtung bezeichnen ( $ds = r \cdot d\varphi$  ist ein infinitesimal kleiner Kreisbogen) und diese Strecken in Form der Variablen SLJJ, SLLJ und SLRJ, die die Länge einer Leitung beschreiben, in ATHLET bekannt sind.

Die Formulierung der Spannungsterme in ATHLET-spezifischen Variablen und ihre Umformung in Wegintegrale für die ATHLET-Impulsbilanz ist in /VON13/ näher beschrieben.

### 3.4.1.2 Turbulenzmodell

Da das 3D-Modell von ATHLET auf eher grob auflösenden Gittern eingesetzt wird – wie beispielhaft mit den Anwendungen in Kapitel 3.3 dargestellt – kommen für die Berücksichtigung turbulenter Effekte vor allem einfache Nullgleichungsturbulenzmodelle infrage. In ATHLET implementiert wurde ein algebraisches Mischungswegmodell nach Prandtl. Hiermit werden die turbulenten Scherkräfte (analog den molekularen Scherkräften) bei der Berechnung freier Scherschichten berücksichtigt. Die Wandreibung wird wie in ATHLET üblich durch Druckverlustkorrelationen modelliert.

Das implementierte Mischungswegmodell berücksichtigt turbulente Scherkräfte auf Basis eines Wirbelviskositätsansatzes. Die Schubspannung auf ein Leitungskontrollvolumen setzt sich dabei additiv aus der molekularen und der turbulenten Schubspannung zusammen:

$$\bar{\tau} = 2 \cdot (\mu + \mu_t) \cdot \bar{D} \quad (3.21)$$

$\bar{D}$  ist der Tensor der Deformationsrate aus Gleichung (3.16). Die Wirbelviskosität wird als strömungsspezifische Größe berechnet gemäß

$$\mu_t = \rho \cdot l_m^2 \cdot \sqrt{2 \cdot (\bar{D} : \bar{D})} \quad (3.22)$$

$l_m$  bezeichnet den Mischungsweg, welcher momentan als

$$l_m = 0.5 \cdot d_{hyd}(jp) \quad (3.23)$$

implementiert ist.

$\bar{D} : \bar{D}$  bezeichnet das doppelte Skalarprodukt (engl.: *double dot product*) des Deformationsratentensors:

$$\begin{aligned} \bar{D} : \bar{D} &= \sum_i \sum_j D_{ij} \cdot D_{ij} \\ &= \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Bei der Verwendung von Zylinderkoordinaten müssen auch hier zusätzliche Terme berücksichtigt werden. Gleichung (3.24) wird zu

$$\begin{aligned} \bar{D} : \bar{D} &= \left( \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{r \partial \varphi} + \frac{u}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left[ \left( \frac{\partial u}{r \partial \varphi} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{r \partial \varphi} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die Implementierung erfolgte ähnlich wie für die molekularen Schubspannungen und ist für das kartesische Gitter in /VON13/ beschrieben.

Um den Einfluss des Turbulenzmodells bei der Simulation einer laminaren Strömung zu unterdrücken, wird die Wirbelviskosität mit einem Faktor  $f$  multipliziert, der Werte von 0 bis 1 annehmen kann:

$$\mu_{ges} = \mu + f \cdot \mu_t \quad (3.26)$$

$$\text{mit } f(Re) = \begin{cases} 0, & Re \leq 2000 \\ 1, & Re \geq 2400 \end{cases}$$

Liegt die Reynoldszahl zwischen 2000 und 2400 wird linear zwischen 0 und 1 interpoliert. Die Grenzen für die Reynoldszahl können gegebenenfalls angepasst werden.

Aktuell orientieren sie sich an dem häufig in der Literatur zu findenden Wert für die kritische Reynoldszahl einer Rohrströmung von  $Re_{krit} = 2300$ .

### 3.4.2 Anwendungsbeispiele

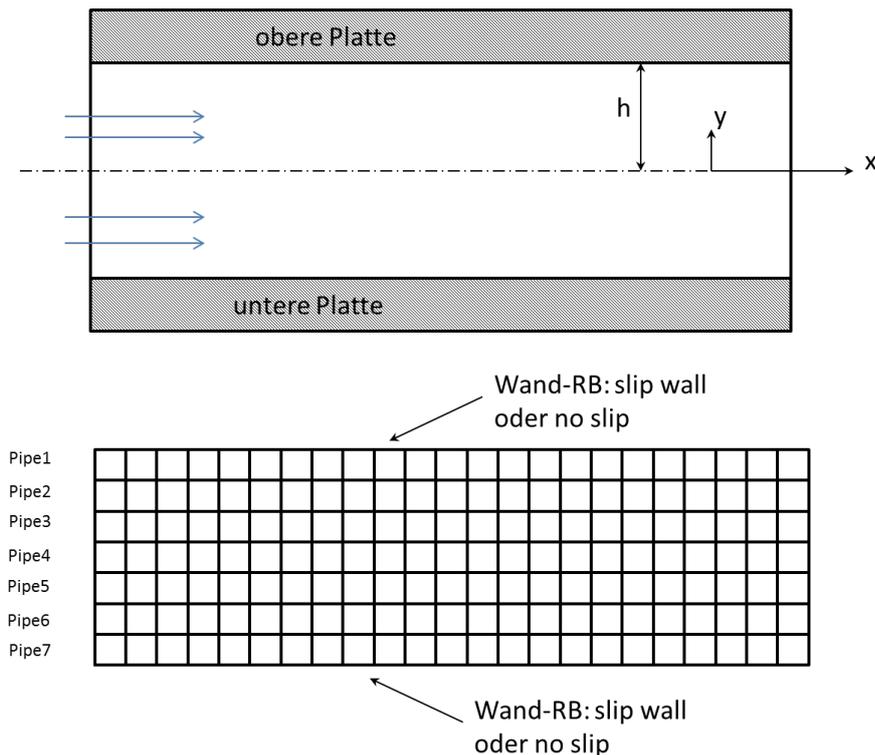
Nachfolgend werden einige Anwendungsbeispiele des 2D/3D-Modells bei Berücksichtigung der Viskosität des Fluids gezeigt. Weitere Simulationen finden sich in /VON13/.

#### 3.4.2.1 2D-Kanalströmung

Das Geschwindigkeitsprofil der ausgebildeten laminaren Strömung in einem 2D-Kanal mit dem Plattenabstand  $2 \cdot h$  kann analytisch bestimmt werden und weist eine parabolische Form auf:

$$u(y) = \frac{1}{2\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \cdot (y^2 - h^2) \quad (3.27)$$

Ein zweidimensionaler Kanal kann in ATHLET durch mehrere parallele Pipes nachgebildet werden, welche durch Cross-Connection-Objekte querverbunden sind, vgl. Abb. 3.11 und Abb. 3.12.

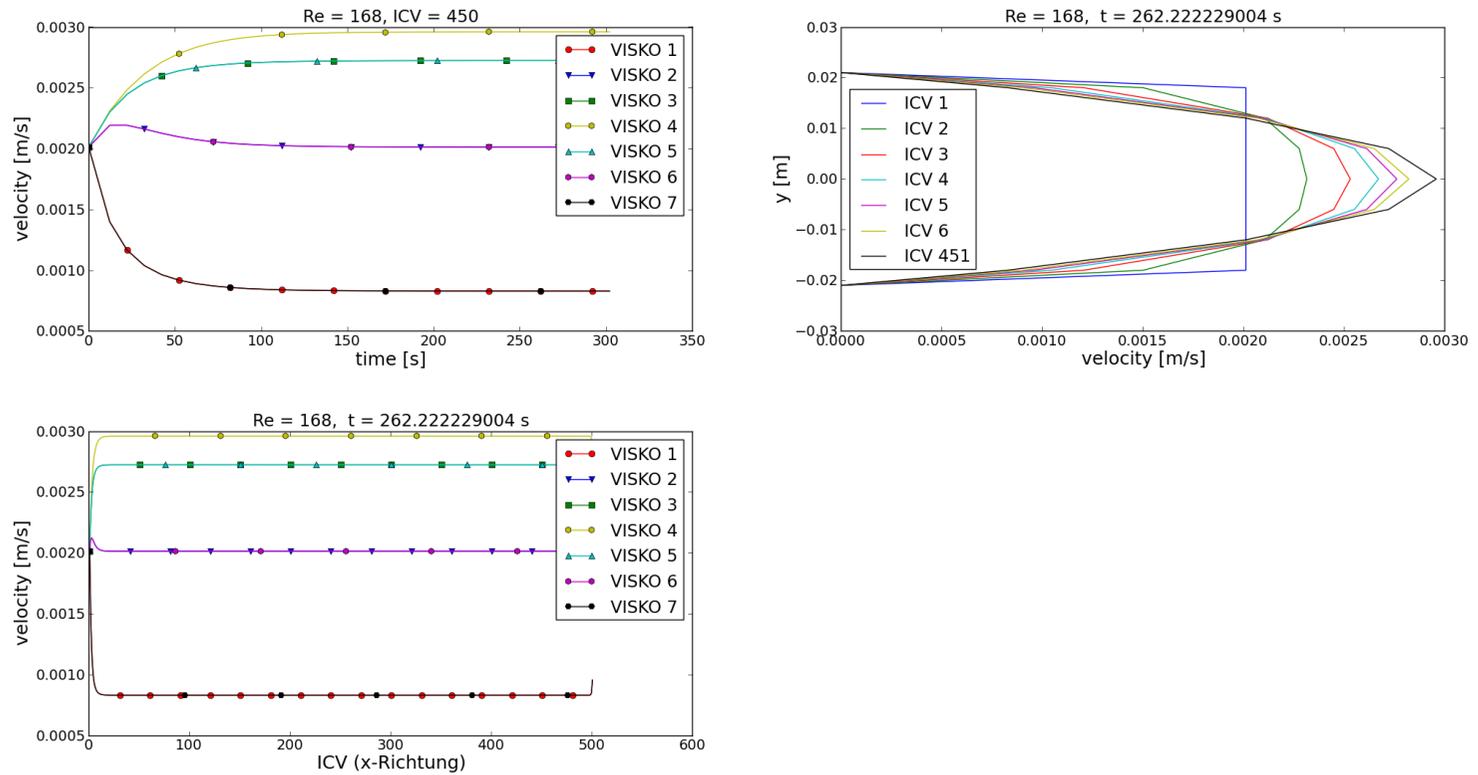


**Abb. 3.23** Schematische Darstellung eines zweidimensionalen Kanals (oben) und Nodalisierungsschema in ATHLET

Der betrachtete Kanal wird durch sieben parallele Pipes („VISKO1“ bis „VISKO7“), unterteilt in jeweils 500 axiale Kontrollvolumina, modelliert. Die Kanalbreite beträgt 4,2 cm, die Länge 12,6 m; ein Kontrollvolumen ist damit 2.52 cm lang. Jedes der parallelen Pipes wird jeweils mit einem Fill bespeist (alle Fills haben den gleichen Massenstrom), so dass am Kanaleintritt ein flaches Geschwindigkeitsprofil vorgegeben wird, d. h.  $\partial u / \partial y = 0$ . Die Strömungsgeschwindigkeiten in den Fills sind derart vorgegeben, dass die Reynoldszahl der Kanalströmung etwa 168 beträgt, die Strömung also rein laminar ist.

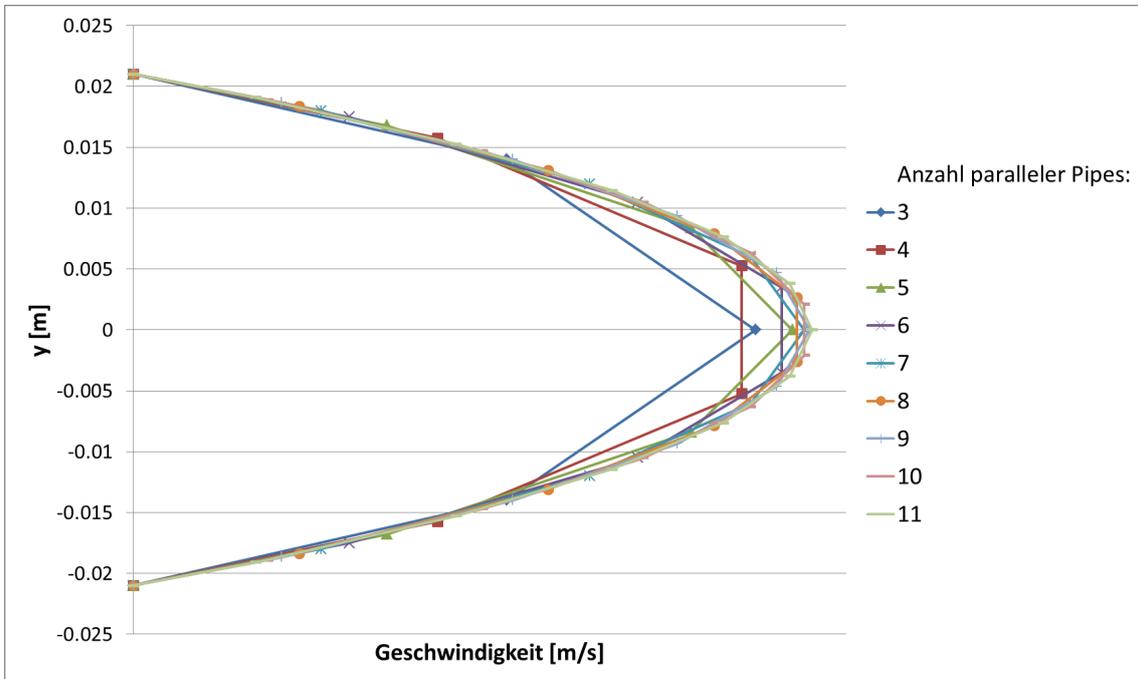
Um die Geschwindigkeit im wandnahen Bereich zu berechnen, kann der Anwender zwischen einer *slip wall* und einer *no slip* Randbedingung wählen. Für die Berücksichtigung des Geschwindigkeitsprofils einer rein laminaren Strömung im Wandbereich bietet sich die *no slip* Randbedingung an, die den Abfall der zur Wand tangentialen Geschwindigkeitskomponente mit einem konstanten Gradienten und Geschwindigkeit Null auf der Wand modelliert. Für das betrachtete Beispiel wurde die *no-slip*-Randbedingung aktiviert.

Abb. 3.24 zeigt Simulationsergebnisse einer Kanalströmung. Das linke obere Bild in Abb. 3.24 zeigt den zeitlichen Verlauf der axialen Strömungsgeschwindigkeiten in den Pipes in Kontrollvolumen 450. Man sieht, dass nach ca. 150 s ein stationärer Zustand eingetreten ist. Im linken unteren Bild sind zum Zeitpunkt 262 s (also bei stationärer Strömung) die axialen Strömungsgeschwindigkeiten über die Kanallänge aufgetragen. Ausgehend von einer Geschwindigkeit von ca. 0,002 m/s am Kanaleintritt wird das Wasser insbesondere in den wandnahen Pipes VISKO1 und VISKO7 entlang der sogenannten Einlaufstrecke abgebremst, während es im Zentrum (VISKO4) am stärksten beschleunigt wird. Ab dem 14. Kontrollvolumen (ICV = 14) ändern sich die Geschwindigkeiten nicht mehr – die Strömung ist ausgebildet. Im rechten oberen Bild sind die Geschwindigkeitsprofile  $u(y)$  für verschiedene Kontrollvolumina im stationären Zustand eingetragen. Im ersten Kontrollvolumen ist das Profil flach, in den folgenden Kontrollvolumina bildet sich das Profil aus; die schwarze Kurve zeigt das voll ausgebildete Profil.



**Abb. 3.24** Ergebnisse der Simulation einer ebenen Kanalströmung ( $Re = 168$ )  
 Oben links: Zeitlicher Geschwindigkeitsverlauf in Kontrollvolumen 450  
 Unten links: Örtlicher Geschwindigkeitsverlauf zur Zeit  $t \approx 262$  s  
 Oben rechts: Geschwindigkeitsprofil über den Kanalquerschnitt bei  $t \approx 262$  s

In Abb. 3.25 ist dargestellt, wie sich das Geschwindigkeitsprofil mit zunehmender Anzahl paralleler Pipes und dementsprechend feiner werdender Diskretisierung einer Parabel annähert. Der Vergleich mit dem analytisch berechneten Profil (Gleichung (3.27)) zeigt eine hervorragende Übereinstimmung.



**Abb. 3.25** Geschwindigkeitsprofile einer ebenen Kanalströmung für verschieden feine Nodalierungen

Ähnlich verhält es sich mit dem Druckverlust, vgl. Abb. 3.26. Die rote Linie markiert die analytische Lösung für den Reibungsdruckverlust in einer 2D-Kanalströmung, berechnet durch:

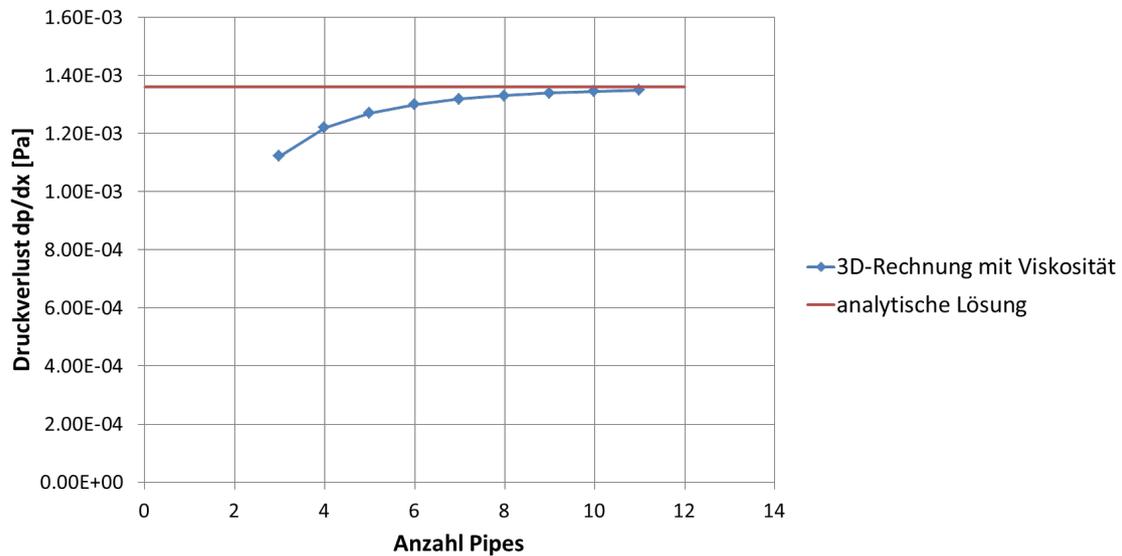
$$\frac{\partial p}{\partial x} = \bar{u} \cdot 3 \cdot \frac{\mu}{h^2} \quad (3.28)$$

mit der mittleren Geschwindigkeit  $\bar{u}$ :

$$\bar{u} = \frac{1}{2h} \cdot \int_{-h}^h u(y) dy \quad (3.29)$$

Die blaue Kurve zeigt die mit ATHLET berechneten Druckverluste für verschieden feine Nodalierungen. Mit Erhöhung der Gitterauflösung konvergiert der Druckverlust erwartungsgemäß gegen die analytische Lösung. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, dass die 3D-Rechnungen ohne Wandreibungmodell auskommen und sich die Druck-

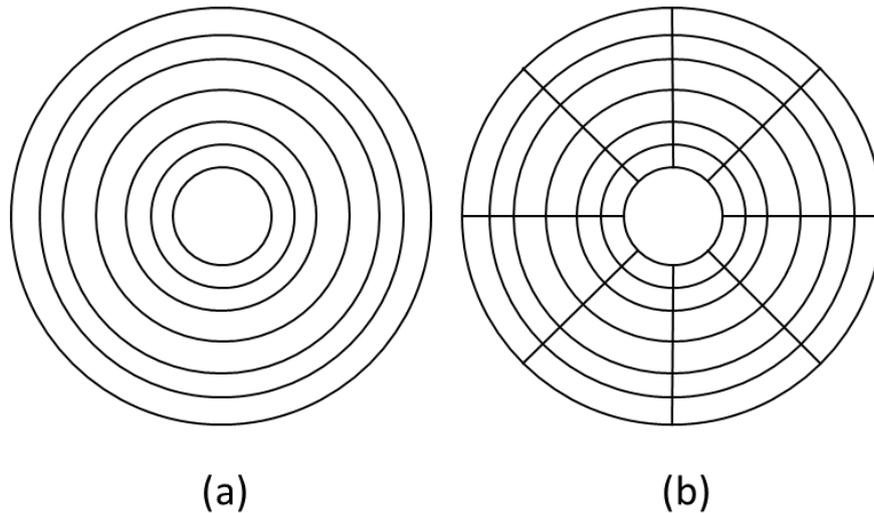
verluste alleine aus der no-slip-Randbedingung und den Scherkräften zwischen den Pipes ergeben.



**Abb. 3.26** Druckverluste einer ebenen Kanalströmung für verschieden feine Nodalisierungen

### 3.4.2.2 2D- und 3D-Rohrströmung

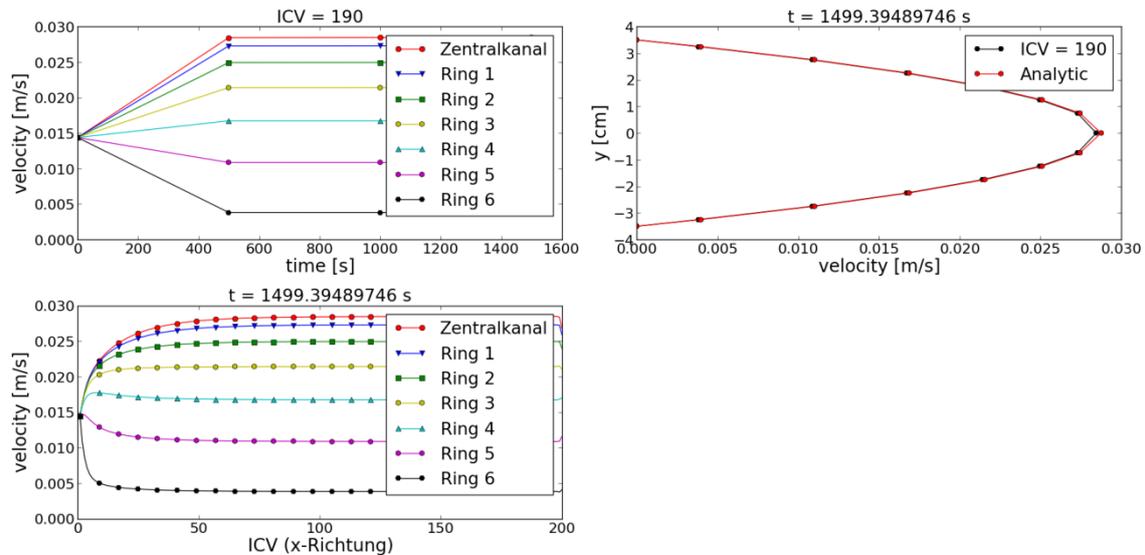
Zum Testen der reibungsbehafteten Modellgleichungen in Zylinderkoordinaten wurden ein 2D- sowie ein 3D-ATHLET-Modell eines einfachen, laminar durchströmten Rohres erstellt. Das 2D-Modell besteht aus 6 konzentrischen Ringen plus Zentralkanal (vgl. Abb. 3.27 (a)) und einer axialen Unterteilung in 200 Segmente. Das 3D-Modell ist zusätzlich in 8 azimutale Segmente unterteilt, vgl. Abb. 3.27 (b). Alle Kanäle sind mit Cross-Connection-Objekten querverbunden.



**Abb. 3.27** Querschnitte des 2D- und 3D-Rohrmodells

In beiden Simulationen werden alle Kanäle derart mit Fills bespeist, dass am Kanaleintritt ein flaches Geschwindigkeitsprofil vorliegt und sich der typische parabolische Verlauf stromabwärts nach einer gewissen Einlaufstrecke selbst einstellen muss. Erwartungsgemäß gibt es keine nennenswerten Unterschiede zwischen den Ergebnissen der 2D- und der 3D-Simulation. Die in Abb. 3.28 gezeigten Kurven entstammen der 2D-Simulation, entsprechen aber denjenigen der 3D-Simulation.

Im Abb. 3.28 oben rechts erkennt man eine gute Übereinstimmung zwischen dem mit ATHLET berechneten Geschwindigkeitsprofil und der analytischen Lösung für die laminare Rohrströmung. Wie im vorigen Kapitel zur 2D-Kanalströmung wurde an der Wand eine no-slip-Randbedingung vorgegeben und das Geschwindigkeitsprofil stellt sich aufgrund der Viskosität von selbst ein.



**Abb. 3.28** Ergebnisse der Simulation einer laminaren Rohrströmung  
 Oben links: Zeitlicher Geschwindigkeitsverlauf für KV 190  
 Unten links: Örtlicher Geschwindigkeitsverlauf zur Zeit 1500 s  
 Oben rechts: Geschwindigkeitsprofil über den Kanalquerschnitt bei 1500 s

### 3.5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Bilanzgleichungen des ATHLET 1D 2-Fluid-Modells wurden auf zwei bzw. drei Dimensionen erweitert, um mehrdimensionale ein- und zweiphasige Strömungsvorgänge zuverlässig abbilden zu können. Da die Erhaltungsgleichungen sowohl in kartesischen wie auch in zylindrischen Koordinaten implementiert sind, ist eine flexible Einsetzbarkeit des 3D-Modells für unterschiedlich geformte Behälter und Anlagenbereiche gewährleistet. Optional können in den Modellgleichungen molekulare und turbulente Scherspannungen explizit berücksichtigt werden.

Das 3D-Modell wurde u. a. anhand einzelner Versuchsnachrechnungen verifiziert. Hauptaugenmerk lag hierbei auf der Abbildung einer mehrdimensionalen Kühlmittelvermischung und -stratifizierung in Behältern. Im Vergleich zu 1D ATHLET-Rechnungen ergaben sich bei Verwendung des 3D-Modells deutlich verbesserte Ergebnisse. Hierbei kamen moderat verfeinerte numerische Gitter zum Einsatz, z. B. mit 16 azimuthalen Segmenten für die Simulation des RDB der UPTF-Anlage. Die mehrdimensionalen numerischen Gitter werden aus 1D Thermofluidobjekten zusammengesetzt. Für die anwenderfreundliche Erzeugung sehr feiner Gitter mit zahlreichen Thermofluidobjekten wäre ein Inputgenerator von Vorteil, der zumindest Teile des Datensatzes anhand weniger Benutzereingaben automatisiert erzeugt. Mit dieser Ent-

wicklung wurde im Rahmen des Projekts RS1199 begonnen. Die weitere Validierung des 3D-Modells ist Bestandteil des Validierungsprojekts RS1519. Die Weiterentwicklung der Zweiphasenmodelle für die 2D und 3D Simulation ist im Rahmen des Nachfolgevorhabens zu RS1507 geplant.



## **4 Methodenqualifizierung für Unsicherheitsanalysen mit ATHLET**

Um die Aussagesicherheit der mit ATHLET erzielten Rechenergebnisse zu quantifizieren, werden Unsicherheitsanalysen durchgeführt, die Unsicherheiten der Modellierung aufgrund eines unvollständigen Kenntnisstandes berücksichtigen. Diese ermöglichen eine realistische Simulation des Transienten- und Störfallablaufs unter Einbeziehung von epistemischen Unsicherheiten aus verschiedenen Quellen, z. B. aus den physikalischen Modellen von ATHLET oder hinsichtlich der Anfangs- und Randbedingungen. Die Berücksichtigung unsicherer Eingangsparameter und deren wechselseitiger Abhängigkeiten liefert eine Ergebnisbandbreite, anhand derer quantitative Aussagen zur Ergebnissicherheit getroffen und Angaben zu Abständen von Sicherheitsgrenzen gemacht werden können. Für Reaktoren werden z. B. Unsicherheitsangaben zum zeitlichen Verlauf der errechneten Hüllrohrtemperatur und des Drucks im Kernbereich oder zum Erreichen kritischer Siedezustände während eines angenommenen Auslegungsstörfalls geliefert.

Hierzu hat die GRS eine statistische Methode vorgeschlagen, die international weite Verbreitung gefunden hat und in einigen Ländern im Rahmen des Genehmigungsverfahrens eingesetzt wird. Im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS 708 /HOF93/ ist von der GRS das Programmpaket SUSA (System für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen) /KLO99/ zur Durchführung von probabilistischen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zu Ergebnissen umfangreicher Rechenmodelle erstellt worden. Bei der Entwicklung der methodischen und programmtechnischen Grundlagen wurde insbesondere berücksichtigt:

- Einsetzbarkeit für beliebige Rechenmodelle und Anwendungsgebiete
- Unabhängigkeit der durchzuführenden Rechenläufe von der Anzahl der unsicheren Parameter
- Modellierung wechselseitiger Abhängigkeiten der unsicheren Parameter
- Benutzerfreundlichkeit durch Führung des Anwenders durch die einzelnen Schritte einer Unsicherheitsanalyse
- Bereitstellung geeigneter Methoden zur Ableitung quantitativer Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen

Das GRS-Programmpaket SUSAS hat sich in den bisherigen Anwendungen als effizientes und nützliches Werkzeug zur Ermittlung der Ergebnisunsicherheit und der Rangfolge der berücksichtigten Einzelbeiträge zur Gesamtunsicherheit der Ergebnisse erwiesen. Weiterhin lieferte es einen Beitrag zur Qualitätssicherung der eingesetzten deterministischen Rechenprogramme und seiner Anwendungen.

Insgesamt haben die Verfahren zur Bestimmung der Ergebnisbandbreite infolge vorhandener Eingabeunsicherheiten einen fortgeschrittenen Entwicklungsstand erreicht. Das Ergebnis einer Unsicherheitsanalyse hängt jedoch wesentlich von den Unsicherheitsbereichen und –verteilungen der Eingangsparameter ab, deren Festlegung durch den Anwender zu erfolgen hat und einen großen Teil des Aufwands der Gesamtmethode darstellt. Die Ergebnisse des OECD/NEA/CSNI-Programms BEMUSE /CRE08/, /PER11/ haben gezeigt, dass der Quantifizierung von Modelleingangsunsicherheiten eine herausragende Bedeutung für BEPU (Best Estimate Plus Uncertainty) Analysen zukommt.

Wesentlich für die Aussagekraft einer Unsicherheitsanalyse sind die Auswahl der unsicheren Modellparameter sowie die Festlegung der zugehörigen Wertebereiche und Häufigkeitsverteilungen, da diese die Bandbreite des Rechenergebnisses mitbestimmen. Die wichtigste Basis für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten bilden Einzeleffektexperimente. Zusätzlich können Erfahrungen aus der Programmentwicklung und -validierung, Informationen aus der Literatur, Befragung von Experten oder auch physikalische Begrenzungen herangezogen werden. Es ist allgemein akzeptiert, dass der beste Weg für die zuverlässige Quantifizierung von Modellunsicherheiten ein Vergleich von experimentellen Messungen mit erzielten Simulationsergebnissen ist. Bevorzugt werden Einzeleffektexperimente herangezogen, die die isolierte Analyse eines einzelnen Modells ermöglichen. Es gibt jedoch Vorgänge, für die keine Einzeleffektexperimente existieren, wie zum Beispiel die Wiederbenetzung von heißen Brennstäben. Diese Vorgänge können jedoch im Rahmen von sogenannten *intermediate* Experimenten untersucht werden, für die eine begrenzte, noch überschaubare Zahl von Phänomenen von Bedeutung sind. Für die Quantifizierung der Unsicherheiten der zugehörigen Modelle auf der Basis derartiger *intermediate* Experimente gibt es jedoch keine allgemein anerkannte Methode. In der Vergangenheit wurden einige Methoden wie das CIRCE-Verfahren (Calcul des Incertitudes Relatives aux Corrélations Élémentaires /CRE01/ /CRE04/), die FFTBM (Fast Fourier Transform Based Method /AUR11/) oder die KIT-Methode /CAC10/ /PET10/ entwickelt, die aber noch nicht qualifiziert sind.

Vor diesem Hintergrund wurde von dem OECD/NEA/CSNI unter Beteiligung der GRS der internationale Benchmark PREMIUM (Post BEMUSE Reflood Models Input Uncertainty Methods) initiiert, der die Qualifizierung der Verfahren zur Bestimmung der Modelleingangsunsicherheiten zum Ziel hat. In diesem Rahmen sind die von den Teilnehmern vorgeschlagenen Verfahren exemplarisch anhand eines konkreten Anwendungsbeispiels, der Wiederbenetzung während des Wiederauffüllens des Reaktor-druckbehälters nach einem Kühlmittelverluststörfall, analysiert worden. Die GRS hat hierfür mit ATHLET blinde und offene *Best-Estimate* Rechnungen sowie Unsicherheitsanalysen zu verschiedenen Quench-Experimenten durchgeführt. Die numerischen Simulationen wurden mit der ATHLET Version 2.2 B durchgeführt. Neben der Absicherung der eingesetzten Verfahren wurden hierbei auch Unsicherheitsintervalle und -verteilungen der relevanten Modellparameter erarbeitet, die bei zukünftigen Analysen berücksichtigt werden können.

Das PREMIUM Projekt ist in fünf Benchmark-Abschnitte unterteilt:

- Phase 1: Vorbereitende Phase: Übersicht über eingesetzte Methoden. Kritische Analyse von experimentellen Daten hinsichtlich Eignung zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten und Validierung der Methoden
- Phase 2: Identifizierung der wichtigen Modelleingangsunsicherheiten
- Phase 3: Quantifizierung der Modellunsicherheiten anhand ausgewählter Flutexperimente
- Phase 4: Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten
- Phase 5: Zusammenfassung des Projekts: Qualifizierung der verwendeten Methoden, Empfehlungen für die Verwendung der Verfahren zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten (Best Practice Guide) und eventuelle Weiterentwicklung

#### **4.1 Phase 1: Vorbereitung des Benchmarks**

In Rahmen der Vorbereitung wurden Quench-Experimente festgelegt, die für die Quantifizierung und Validierung der Modellunsicherheiten in den Benchmark-Phasen 3 und 4 verwendet werden sollten.

Für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten wurden Quench-Versuche aus dem FEBA/SEFLEX Programm ausgewählt /IHL84a/, /IHL84b/, /IHL86a/, /IHL86b/. Die Ex-

perimente aus dem FEBA Programm zur Untersuchung thermohydraulischer Einzeleffekte in DWR-Brennelementen wurden anhand eines 5x5-Stabbündels mit elektrisch beheizten Stäben voller Länge durchgeführt, deren axiale Leistung durch sieben Stufen einer Cosinus-Verteilung angenähert war. Das Programm bestand aus acht Testserien. Systemdruck und Massenstrom beim Zwangsfluten wurden als Idealisierung der Flutbedingungen in einem Reaktor konstant gehalten. Weitere Einflüsse des Reaktorkühlsystems wurden nicht betrachtet. Die maßgeblichen experimentellen Ergebnisse sind Hüllrohrtemperaturen entlang der beheizten Stäbe, das davon abgeleitete Voranschreiten der Quench-Front, sowie Differentialdrücke entlang des beheizten Bündels.

Für die Validierung der quantifizierten unsicheren Eingabeparameter auf der Basis von blinden *Best-Estimate* Rechnungen mit Unsicherheitsanalysen wurden Quench-Versuche aus dem PERICLES Programm /DER85/ ausgewählt. Die Versuchsergebnisse waren zuvor nicht veröffentlichtes Eigentum von EdF und CEA und wurden erst für das PREMIUM Projekt freigegeben, so dass sie für eine blinde Rechnung geeignet waren.

Die Teststrecke des PERICLES Experiments besteht aus drei 7x17 elektrisch beheizten Brennstabssimulatoren typischer DWR-Brennstäbe. In dem Experiment wurde der Einfluss der Anfangs- und Randbedingungen (Druck, Temperatur, Leistungsniveau) sowie 2D-Effekte der radialen Leistungsverteilung auf den Flutvorgang untersucht. Die PERICLES-Versuchsanlage ist für die Validierung besonders geeignet, da die Teststrecke eine große Anzahl Brennstäbe simuliert und damit Extrapolationseffekte von der kleineren FEBA-Anlage auf eine größere Anlage widerspiegelt, wie sie üblicherweise auch bei Unsicherheitsanalysen von Reaktoranlagen auftreten.

Den Teilnehmern des PREMIUM-Programms war es freigestellt, die Festlegung der Eingabeunsicherheiten auf Basis der bisher verwendeten Methoden vorzunehmen oder eine der von den Teilnehmern zur Verfügung gestellten Methoden einzusetzen. Hierfür wurden zwei Methoden für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten im Rahmen des Projekts angeboten. CEA stellte den Teilnehmern die Software CIRCE zur Verfügung /CRE01/. FFTBM wurde von der der Universität Pisa (San Piero a Grado Nuclear Research Group) bereitgestellt /AUR11/. Die GRS hat ein eigenes Verfahren auf Basis des *Inverted Uncertainty* Ansatzes mit iterativer Anpassung der Eingabeparameter zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten verwendet. Das Verfahren ist in Kapitel 4.3.1 beschrieben.

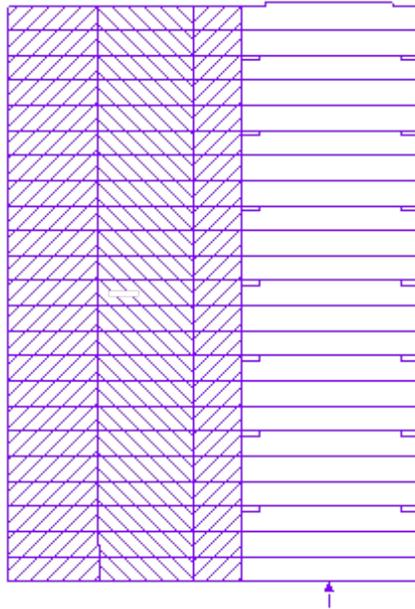
## **4.2 Phase 2: Identifizierung wichtiger Modellunsicherheiten**

In dieser Phase des Benchmarks sollen zunächst die physikalischen Modelle und die damit verbundenen unsicheren Modelleingangsparameter, die für die Simulation der wesentlichen Phänomene von Wiederauffüllprozessen potentiell wichtig sind, identifiziert werden. Anschließend werden die Wertebereiche der unsicheren Parameter vorläufig quantifiziert. Hierfür werden von den Benchmark-Teilnehmern unterschiedliche Verfahren genutzt, wie z. B. der Vergleich mit Einzeleffektexperimenten, die Nutzung von Informationen aus der Modellentwicklung, das Expertenurteil auf Basis von vorangegangenen Rechnungen zur Codevalidierung oder andere bisherige Erfahrungen.

Mit den vorläufig quantifizierten unsicheren ATHLET-Eingabeparametern werden Sensitivitätsrechnungen für einen ausgewählten Test aus der Serie I des FEBA Programms durchgeführt. Für die Sensitivitätsrechnungen wurde der Test Nr. 216 ausgewählt, da er den Versuchen des PERICLES Experiments am meisten ähnelt.

### **4.2.1 ATHLET Modell der FEBA-Anlage**

Der thermohydraulische Teil der FEBA-Teststrecke wird als 1D-Thermofluidobjekt (einem sog. Pipe in ATHLET-Nomenklatur) mit 23 axialen Kontrollvolumina modelliert (siehe Abb. 4.1). Die Länge des Kanals beträgt 4,191 m. Der modellierte Kanal startet unterhalb der experimentellen Druckmessstelle für Druckverlustmessungen und endet an der oberen Kernplatte. Die Randbedingungen am Einlauf des Kanals werden als FILL (Massenstrom-Enthalpie-Randbedingung) und am Auslauf als TDV (Time Dependent Volume; Druck-Enthalpie-Randbedingung) modelliert. Für den FEBA Test Nr. 216 beträgt der Systemdruck in der Teststrecke 4,12 bar und der Massenstrom 0,147 kg/s. Sowohl Systemdruck als auch Einlaufmassenstrom bleiben während des gesamten Tests konstant. Die Einlauftemperatur wurde gemessen und wird entsprechend der Messungen als Randbedingung vorgegeben.



**Abb. 4.1** Nodalisierung des thermohydraulischen Kanals und der Heizstäbe (schraffiert)

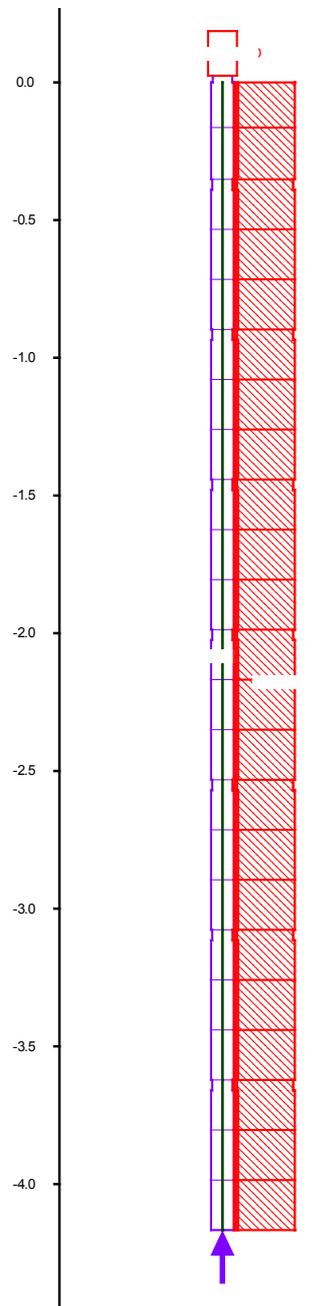
Die Heizelemente werden als Wärmeleitobjekte mit elektrischer Heizung nachgebildet. Entsprechend der Nodalisierung des Fluidkanals werden die Heizelemente in 23 axiale Wärmeleitelemente unterteilt. Die beheizte Länge beträgt 3,9 m. Das entspricht der Länge typischer Brennstäbe eines DWR. Die erste Zone des Bündelmodells ist nicht beheizt. Das letzte Wärmeleitelement ist nur auf einem Teil seiner Länge beheizt.

Um die Heizstäbe zu simulieren, bestehen die Wärmeleitelemente aus drei radialen Schichten (Abb. 4.1):

- Innere-Schicht: MgO-Füllung
- Mittlere Schicht (beheizt): MgO-Isolator mit Heizdraht
- Hüllrohre: NiCr

Im Kanal sind die Abstandshalter geometrisch modelliert. Das bedeutet, dass sich auf der Höhe der Abstandshalter der Strömungsquerschnitt des Kanals verringert, von  $0,003893 \text{ m}^2$  auf  $0,003115 \text{ m}^2$ . Der hydraulische Durchmesser des Kanals ist  $13,47 \text{ mm}$ . Auf Höhe der Abstandshalter ist der hydraulische Durchmesser  $9,64 \text{ mm}$ . Die obere Kernplatte besteht aus einer Stahlplatte mit Öffnungen von  $10 \text{ mm}$  Durchmesser. Das Bündel ist in einem Gehäuse aus rostfreiem Stahl untergebracht. Um die Wärmeverluste an die Umgebung zu minimieren, ist das Gehäuse von einer dicken

Schicht Isoliermaterial umgeben. Das Gehäuse ist entsprechend der Nodalisierung des thermohydraulischen Kanals ebenfalls in 23 axiale Wärmeleitelemente untergeteilt (siehe Abb. 4.2).



**Abb. 4.2** FEBA Teststrecke mit Gehäuse und Isolierung

#### 4.2.2 Auswahl der wichtigen unsicheren Eingangsparameter

Die potentiell wichtigen Modellunsicherheiten werden auf der Basis von Sensitivitätsrechnungen zum FEBA Test Nr. 216 identifiziert. Zunächst wird hierfür eine Referenz-

rechnung unter Verwendung der Nominalwerte der unsicheren Parameter durchgeführt. Für die anschließenden Parametervariationen werden jeweils die Maxima und Minima der vorläufig quantifizierten Wertebereiche der unsicheren Eingabeparameter verwendet. Als Kriterium für die Bewertung des Einflusses einzelner Parameter wird die Differenz der Quench-Front-Position 300 s nach dem Start des Wiederauffüllens im Vergleich zur Referenzrechnung ausgewählt. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse sind in Tab. 4.1 dargestellt.

Diejenigen Parameter, deren Variation zu den größten Änderungen hinsichtlich der Position der Quench-Front für den Test Nr. 216 führte, werden als die potentiell wichtigsten Eingabeunsicherheiten angesehen. Die endgültige Auswahl der wichtigen unsicheren Eingangsparameter, die im Rahmen der späteren Unsicherheitsanalysen Berücksichtigung finden, erfolgte erst nach Durchführung von Referenzrechnungen für weitere Tests des FEBA Experiments.

**Tab. 4.1** Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse

Parameter				Variationsbereich		Abweichung Quench-Front, mm
Nr.	Beschreibung	Name	Ref.	Min	Max	
1	Driftgeschwindigkeit im Bündel – Faktor	ODBUN	1.0	0.3	1.0	-1016
2	Wärmeübergangskoeffizient an der Quench-Front	CQHTB	$10^5$ W/m <sup>2</sup> K	$10^5$	$10^6$	-200
3	Wassermittress – Faktor	OENBUN	1.0	0.5	2.0	-278
4	Einphasige Konvektion an Dampf – Faktor	OHVFC	1.0	0.85	1.25	-123
5	Dampf-Tropfen Kühlung – Faktor	OHWFB	1.0	0.65	1.3	-81
6	Einlauftemperatur	TINL	660°C	660°C	710°C	48
7	Bündel Quench-Front – Modellierung		Ja	Nein	Ja	950
8	Wärmeübergangskoeffizient MgO – Hüllrohre Interface		$10^5$ 1/m <sup>2</sup> K	$10^4$	$10^5$	7
9	Geometrie der Abstandshalter		Yes	Nein	Ja	-69
10	Wandreibung	LAMBDA	0.015	0.015	0.02	~0
11	Wärmeübergangskoeffizient Gehäuse-Isolierung Interface		100 1/m <sup>2</sup> K	10	1000	57
12	Zweiphasenmultiplikator – Wandreibung	OFI2V	1.0	0.2	1.0	1
13	Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell	ZT	$10^9$ 1/m <sup>3</sup>	$10^9$	$10^{10}$	-90
14	Gehäuse Quench-Front – Modellierung		Ja	Nein	Ja	-22
15	Wärmeübergangskoeffizient Blasensieden – Faktor	OHWNB	1.0	0.8	1.2	-32

### 4.3 Phase 3: Quantifizierung der Modellunsicherheiten

Die bisher vorläufig quantifizierten Unsicherheitsbereiche der identifizierten potentiell wichtigen Modelleingangsparameter sollen anhand eines Vergleichs von numerischen Analysen und experimentellen Ergebnissen aus dem FEBA/SEFLEX Programm überprüft und wenn nötig neu definiert werden. Für die im Rahmen des PREMIUM-Programms durchzuführenden Analysen wurden Quench-Versuche der Testserien I und II ausgewählt, die das Fluten ohne Bündelblockaden untersuchten. Von den Benchmark-Teilnehmern sollen nach Bedarf für einen oder mehrere Versuche Unsicherheitsanalysen durchgeführt werden. Wenn die Unsicherheitsbänder die wichtigen

Messergebnisse enthalten, kann angenommen werden, dass die Quantifizierung der unsicheren Eingabeparameter korrekt erfolgt ist. Andernfalls soll versucht werden, eine Korrektur der quantifizierten unsicheren Eingabeparameter vorzunehmen. Dies kann anhand einer einfachen Methode (*trial and error*) oder auch mit Hilfe von formalisierten statistischen Methoden erreicht werden.

#### **4.3.1 Beschreibung der Quantifizierungsmethode**

Die von der GRS verwendete Methode zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten kann in folgende Schritte gegliedert werden:

- Auswahl der wichtigen Eingabeunsicherheiten, die bei der Quantifizierung berücksichtigt werden müssen
- Vorläufige Quantifizierung der identifizierten unsicheren Eingabeparameter
- Klassifizierung der ausgewählten Modellunsicherheiten bezüglich Quantifizierungsmöglichkeiten:
  - Modellunsicherheiten, die bereits ausreichend quantifiziert worden sind, oder auf der Basis von Einzeleffektexperimenten quantifiziert werden können
  - Modellunsicherheiten, die auf Grund von Einzelmessungen oder Spezialeffekten quantifiziert werden können
  - Modellunsicherheiten (üblicherweise die restlichen Modelle), die globale Phänomene beschreiben und für deren Quantifizierung mehrere Modelle gleichzeitig berücksichtigt werden müssen
- Quantifizierung der Modellunsicherheiten:
  - Quantifizierung von Modellunsicherheiten auf Basis von Einzeleffektexperimenten
  - Quantifizierung von Modellunsicherheiten in Anlehnung an spezielle Effekte und/oder Einzelmessungen aus dem Experiment
  - Quantifizierung der übrigen Modellunsicherheiten:
    - Unsicherheitsanalyse der experimentellen Tests unter Berücksichtigung aller identifizierten wichtigen unsicheren Eingabeparameter. Für die Pa-

parameter, die noch nicht in vorherigen Schritten quantifiziert werden konnten, werden die vorläufigen Bereiche/Verteilungen verwendet

- Bewertung der Unsicherheitsintervalle durch Vergleich mit den experimentellen Daten
  - Experimentelle Daten liegen innerhalb der Toleranzintervalle – die vorläufige Quantifizierung kann als endgültige übernommen werden
  - Experimentelle Daten liegen nicht vollständig innerhalb der Unsicherheitsintervalle – eine weitere Anpassung (Iterationsschritt) ist notwendig
- Anpassung der quantifizierten Modellunsicherheiten – Iterationsschritt
  - Identifizierung der Modelle, die dafür verantwortlich sind, dass die experimentellen Daten nicht durch das Unsicherheitsband eingeschlossen werden
  - Identifizierung einer Rechnung, die ab einer kritischen Stelle, ab der die experimentellen Daten außerhalb des gerechneten Unsicherheitsbandes liegen, als eine *envelope calculation* (umhüllende Rechnung) fungieren könnte – falls eine solche Rechnung identifiziert werden kann
    - Es werden Rechnungen mit variierten unsicheren Modellparametern der potentiell umhüllenden Rechnung durchgeführt mit dem Ziel, dass die experimentellen Daten eingeschlossen werden.
  - Wenn eine derart umhüllende Rechnung nicht identifiziert werden kann, erfolgt eine neue Unsicherheitsanalyse unter Berücksichtigung aller unsicheren Modellparameter. Für die Modellparameter, die als verantwortlich für die Diskrepanz zwischen Unsicherheitsband und Experiment identifiziert worden sind, werden die Unsicherheitsintervalle derart variiert, dass die experimentellen Daten innerhalb der neu berechneten Unsicherheitsbänder liegen.
  - Auf der Basis weiterer Parametervariationen (umhüllende Rechnung) oder einer neuen Unsicherheitsanalyse wird eine Optimierung der Unsicherheitsintervalle durchgeführt, um eine minimale Breite der unsicheren Modellparameter zu finden, so dass eine Überdeckung der Messda-

ten durch die Toleranzgrenzen erfolgt. Die somit gefundenen Modellunsicherheiten werden übernommen und der Quantifizierungsprozess abgeschlossen.

#### 4.3.2 Experimentelle Datenbasis

Es wurden alle sechs Tests der Serie I berücksichtigt (Tab. 4.2). Während der transienten Versuchsphase betrug die Bündelleistung jeweils 120% der Nachzerfallsleistung gemäß der Spezifikation der *American Nuclear Society* (ANS). Für die Quantifizierung wurden die folgenden Messwerte verwendet:

- Hüllrohrtemperaturverläufe auf der Höhe 3315 mm (unterer Bündelbereich), 2225 mm (Mitte des Bündels) und 1125 mm (oberer Bündelbereich)
- Druckverlustverläufe entlang der gesamten Teststrecke und in der Mitte des Kanals
- Wasseraustrag aus dem Kanal
- Quench-Front Progression

**Tab. 4.2** FEBA Serie I: Tests mit intakter Bündelgeometrie und sieben Abstandshaltern

Test Nr.	Einlaufgeschwindigkeit, cm/s	Systemdruck, bar	Einlauftemp., °C		Bündelleistung, kW	
			0-30 s	End	0 s	Transiente
223	3.8	2.2	44	36	200	120% ANS
216	3.8	4.1	48	37	200	120% ANS
220	3.8	6.2	49	37	200	120% ANS
218	5.8	2.1	42	37	200	120% ANS
214	5.8	4.1	45	37	200	120% ANS
222	5.8	6.2	43	36	200	120% ANS

Bei der Quantifizierung wurde den Tests Nr. 216 und Nr. 223 besondere Aufmerksamkeit gewidmet, da bei diesen Tests die Abweichung der Referenzrechnungen vom Experiment am größten war.

### 4.3.3 Quantifizierung der unsicheren Modellparameter

Die im Folgenden dargestellte Prozedur zur endgültigen Quantifizierung der Modellunsicherheiten orientiert sich an den Schritten der in Kapitel 4.3.1 beschriebenen Quantifizierungsmethode.

#### **Vorläufige Quantifizierung der wichtigen unsicheren Eingabeparameter**

Die Sensitivitätsanalyse der Modellunsicherheiten wurde bereits in Phase 2 des Projekts durchgeführt. Nach zusätzlichen Rechnungen zu weiteren Tests aus der Serie I des FEBA Experiments (Tab. 4.2) sind die folgenden wichtigen Modellunsicherheiten vorläufig quantifiziert worden:

- Driftgeschwindigkeit in der Bündelgeometrie – Multiplikationsfaktor
- Wassermittelschicht – Multiplikationsfaktor
- Wärmeübergangskoeffizient an der Quench-Front im Quench-Front Modell – absoluter Wert
- Wärmeübergangskoeffizient für Konvektion an Dampf – Multiplikationsfaktor
- Wärmeübergangskoeffizient für Dampf-Tropfen Kühlung – Multiplikationsfaktor
- Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell – absoluter Wert

Einige Eingabeunsicherheiten, die bei der Sensitivitätsstudie als potenziell wichtig für die Ergebnisse der Simulation identifiziert worden sind, sind als konstante Werte bei der Quantifizierung berücksichtigt worden:

- Quench-Front Modell für Bündel – simuliert
- Quench-Front Modell für Gehäuse – simuliert
- Berücksichtigung der Abstandshaltergeometrie – simuliert

Die Liste der wichtigen Eingangsparameter und die vorläufig quantifizierten Modellunsicherheiten sind in Tab. 4.3 zusammengestellt. In der Tabelle farblich hervorgehoben sind Verbesserungen der zunächst vorläufigen Quantifizierung, die im Rahmen der folgenden Schritte der Quantifizierungsprozedur erzielt wurden.

**Tab. 4.3** Wichtige Eingangsparameter und quantifizierte Unsicherheiten

Parameter	Parameter Beschreibung	Vorläufige Quantifizierung	Optimierte Quantifizierung		Ref.	Verteilung	Quantifizierung
<b>Auf Basis von Einzeleffektexperimenten quantifizierte Parameter</b>							
OHWFB	Dampf-Tropfen Kühlung- Faktor	0.65 – 1.3	0.65	1.3	1.0	Uniform	KWU Tests in 25-rods Bundle /VOJ78/
OHVFC	Konvektion in Dampf - Faktor	0.85 – 1.25	0.85	1.25	1.0	Uniform	Literatur /GOT85/ und Experten Beurteilung
<b>Auf Basis von FEBA Experimenten quantifizierte Parameter</b>							
ODBUN	Drift-Geschwindigkeit in Bundle - Faktor	0.3 – 1.5	0.75 0.65	1.75 1.65	1.0	Uniform	Druckverlustmessungen, Anpassung an Hüllrohrtemperaturen
OENBU	Wassermittress – Faktor	1.0 – 3.0	0.6	1.5	1.0	Uniform	Druckverlustmessung, Wasseraustrag
CQHTB	Wärmeübergangskoeffizient am Quench Front	$10^5 - 10^6$	$10^5$	$10^6$	$10^5$	Uniform	Verlauf Hüllrohrtemperatur
ZT	Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell	$10^8 - 10^{10}$	$10^9$	$10^{10}$	$10^9$	Uniform	Anpassung an PCT

### Quantifizierung von Modellunsicherheiten auf Basis von Einzeleffektexperimenten

Die GRS nutzte für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten neben dem *intermediate* Experiment FEBA auch Einzeleffektexperimente. Einzeleffektexperimente wurden für die Quantifizierung der Wärmeübergangskorrelationen für post-dry-out Konditionen verwendet. Die Unsicherheit der Korrelation für Dampf-Tropfenkühlung wurde auf der Basis von KWU-Experimenten mit einem 25-Stab Bündel /VOJ78/ quantifiziert. Für die

Quantifizierung der Korrelation für einphasige Konvektion an Dampf wurden Vergleiche aus der Literatur herangezogen /GOT85/.

### **Quantifizierung von Modellunsicherheiten auf Basis von *intermediate* Experimenten**

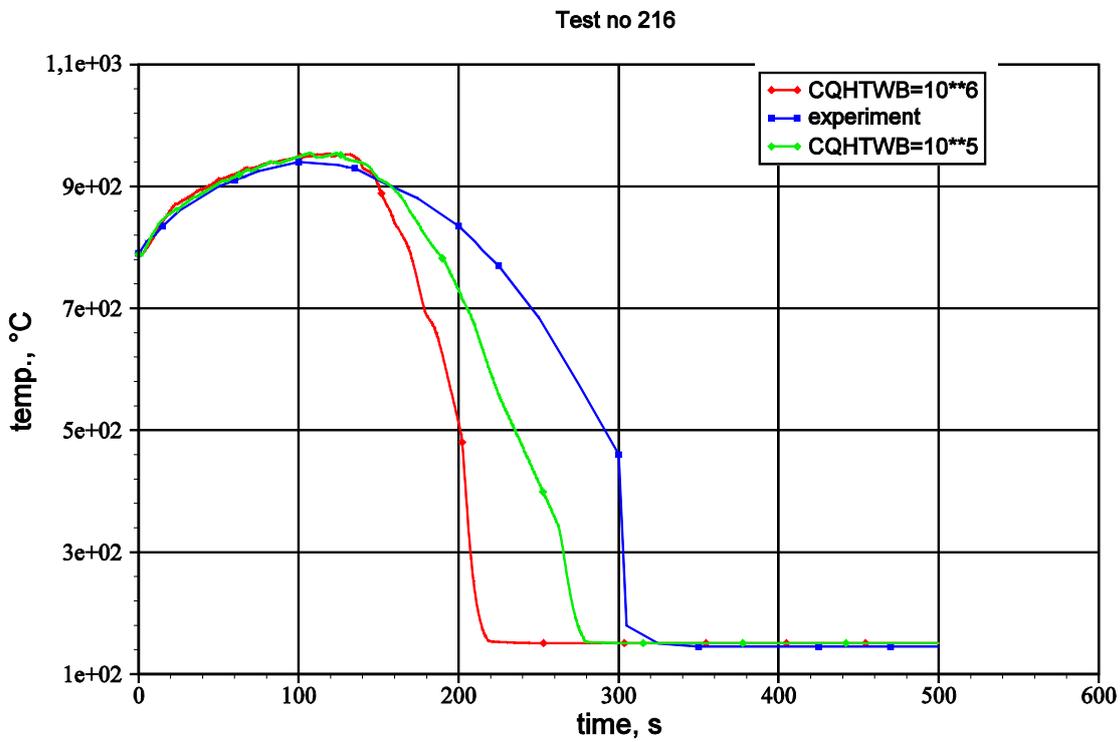
Bei der Quantifizierung von Modellunsicherheiten sollten nach der von der GRS verwendeten Methode für *intermediate* Tests möglichst wenige Parameter gleichzeitig variiert werden. Das wird erreicht, indem einzelne unsichere Eingabeparameter wie beschrieben mit Hilfe von Einzeleffektexperimenten quantifiziert werden. Eine bessere Genauigkeit kann für diese durch Verwendung von *intermediate* Experimenten nicht erreicht werden.

Bei der weiteren Quantifizierungsprozedur wurden alle sechs Tests aus der Serie I des FEBA Experiments verwendet. Folgende Parameter werden auf der Basis des FEBA Experiments weitergehend quantifiziert:

- Driftgeschwindigkeit im Bündel – Druckverlustmessungen im Bündel unter dem „Swell Level“
- Wassermittels – Druckverlustmessungen im Bereich über dem „Swell Level“
- Wärmeübergangskoeffizient an der Quench-Front – „Knick“ bei der Hüllrohrtemperatur zu Beginn der rapiden Temperaturabsenkung
- Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell – beeinflusst durch mehrere Phänomene; wesentlich: maximale Hüllrohrtemperatur

Die Quantifizierung der Parameter „Driftgeschwindigkeit im Bündel“, „Wassermittels“ und „Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell“ erfolgte durch Parameterrechnungen, wobei die genannten Parameter derart variiert wurden, dass eine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erreicht wurde. Für die Quantifizierung der Unsicherheiten des Quench-Front-Modells wird der Verlauf der Hüllrohrtemperatur bei der Wiederbenetzung ausgenutzt (Abb. 4.3). Die Wiederbenetzungszeit kann von mehreren Faktoren beeinflusst sein. Dagegen ist der charakteristische „Knick“ der Hüllrohrtemperatur nur von dem Wärmeübergangskoeffizienten an der Quench-Front (CQHTB) abhängig. Das ermöglicht eine Abschätzung des Wertes CQHTB als  $10^6$ . Die Wiederbenetzungszeit kann durch entsprechende Festlegung von anderen quantifizierten Parametern korrigiert werden.

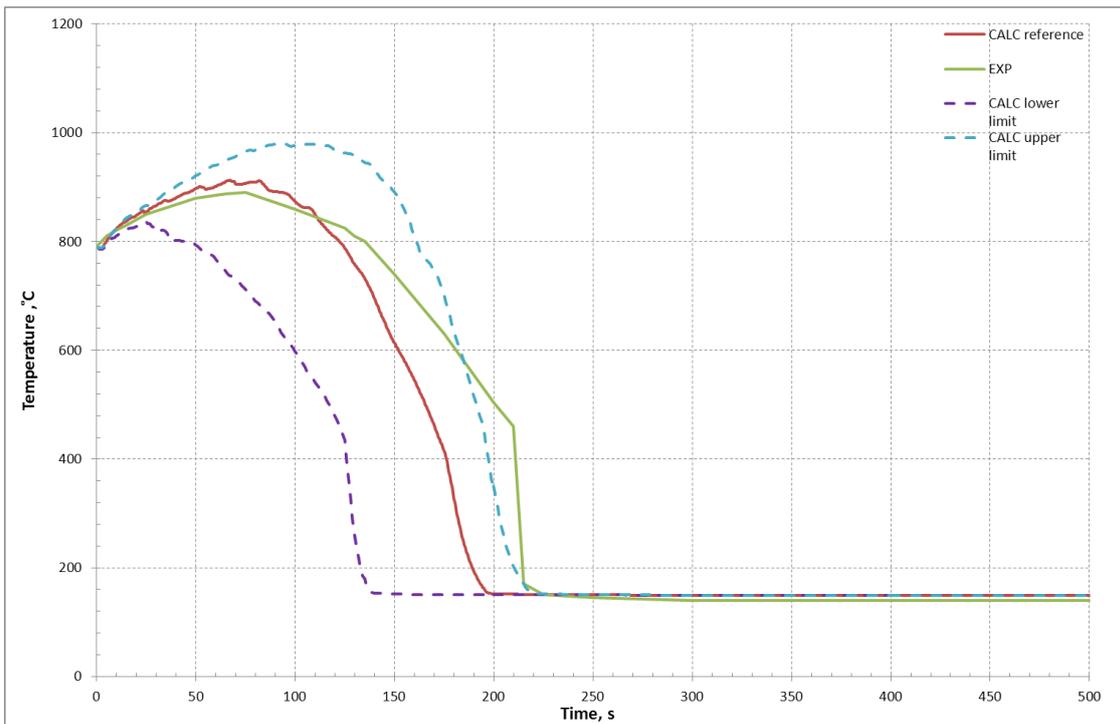
Die Quantifizierung der wichtigen Modellunsicherheiten nach dem vorgestellten Schema führt zur Korrektur der vorläufigen Quantifizierung. Auf diese Weise modifizierte Unsicherheitsbereiche sind in der Tab. 4.3 in grün dargestellt.



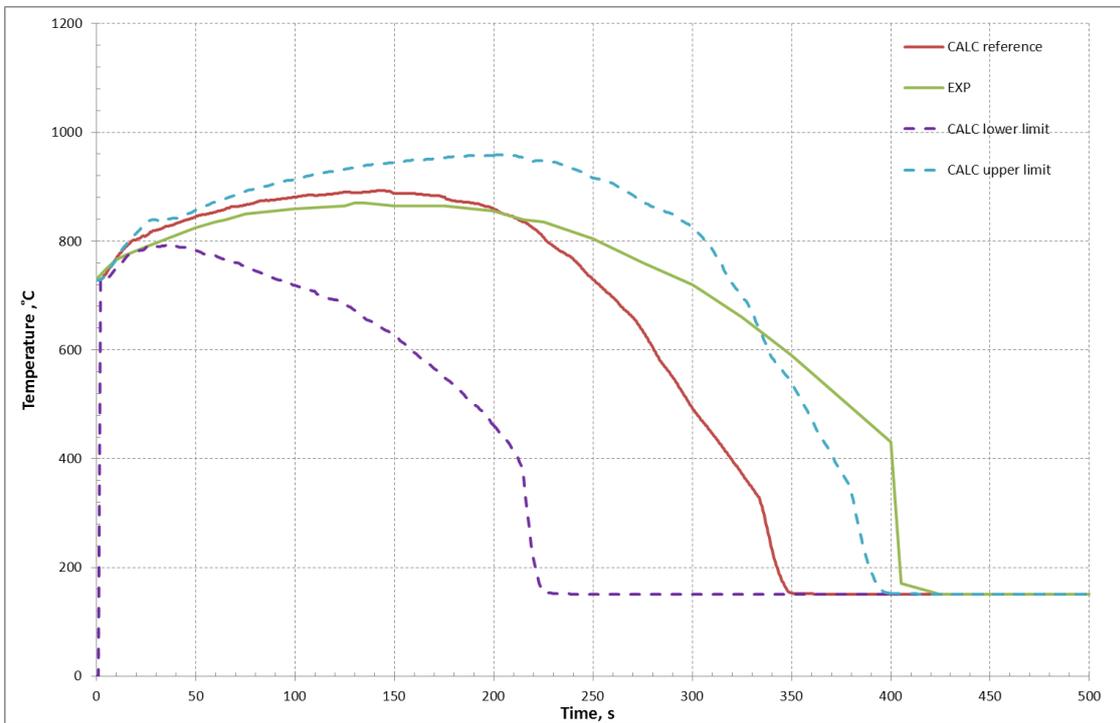
**Abb. 4.3** Gemessene und berechnete Hüllrohrtemperaturen in der Höhe 1680 mm

#### Unsicherheitsanalyse zu FEBA Test Nr. 216

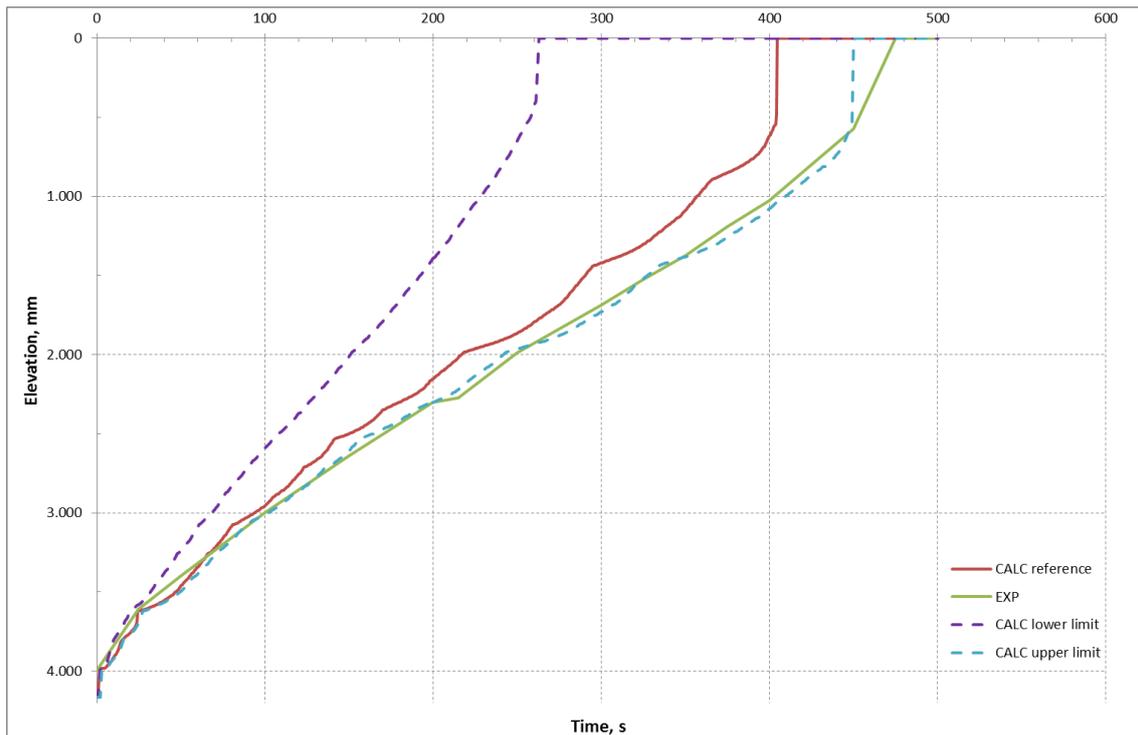
Auf Basis der quantifizierten Modellunsicherheiten wurde eine Unsicherheitsanalyse für den Test Nr. 216 vorgenommen. Die wichtigsten Ergebnisse sind in den Abb. 4.4 bis Abb. 4.6 dargestellt. Der Vergleich zeigt, dass die Definition der Unsicherheitsbereiche nicht zufriedenstellend ist. Die gemessenen Hüllrohrtemperaturen sind außerhalb des Unsicherheitsintervalls. Als Ursache kann der generell zu schnelle Aufstieg der Quench-Front vermutet werden. Angesichts dieser Diskrepanz war eine weitere Korrektur der Unsicherheitsbereiche notwendig.



**Abb. 4.4** Hüllrohrtemperatur in Höhe 2225 mm – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung



**Abb. 4.5** Hüllrohrtemperatur in Höhe 1135 mm – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung



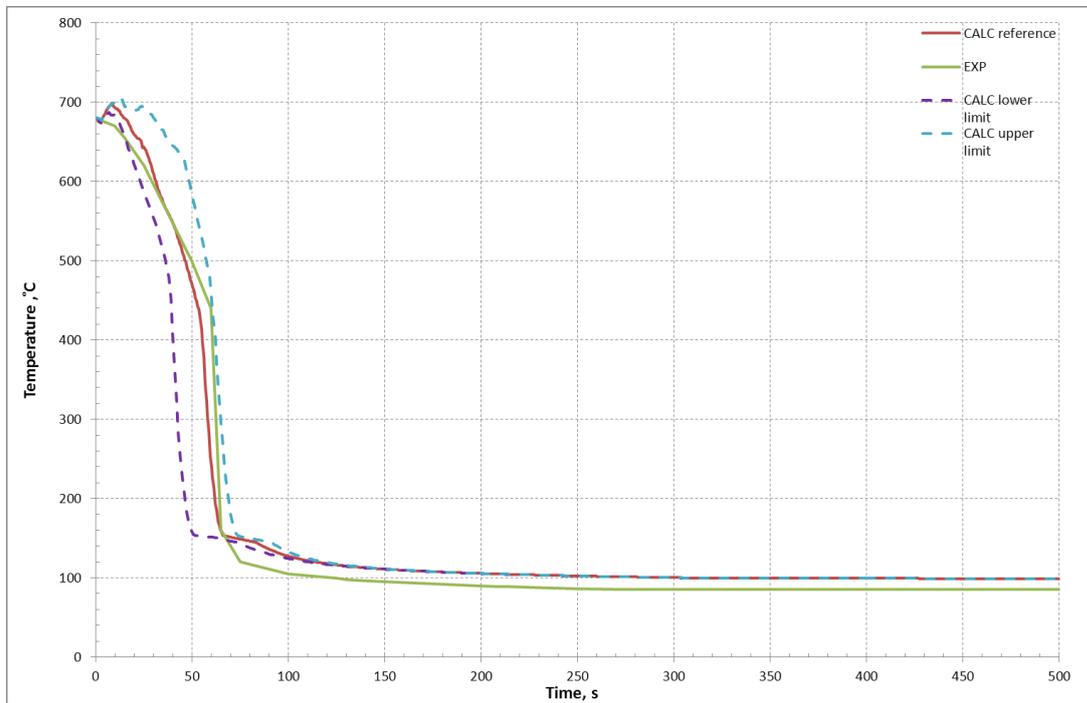
**Abb. 4.6** Quench-Front Progression – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung

#### **Anpassung der Quantifizierung auf Basis einer Unsicherheitsanalyse zu FEBA Test Nr. 216 – Iterationsschritt**

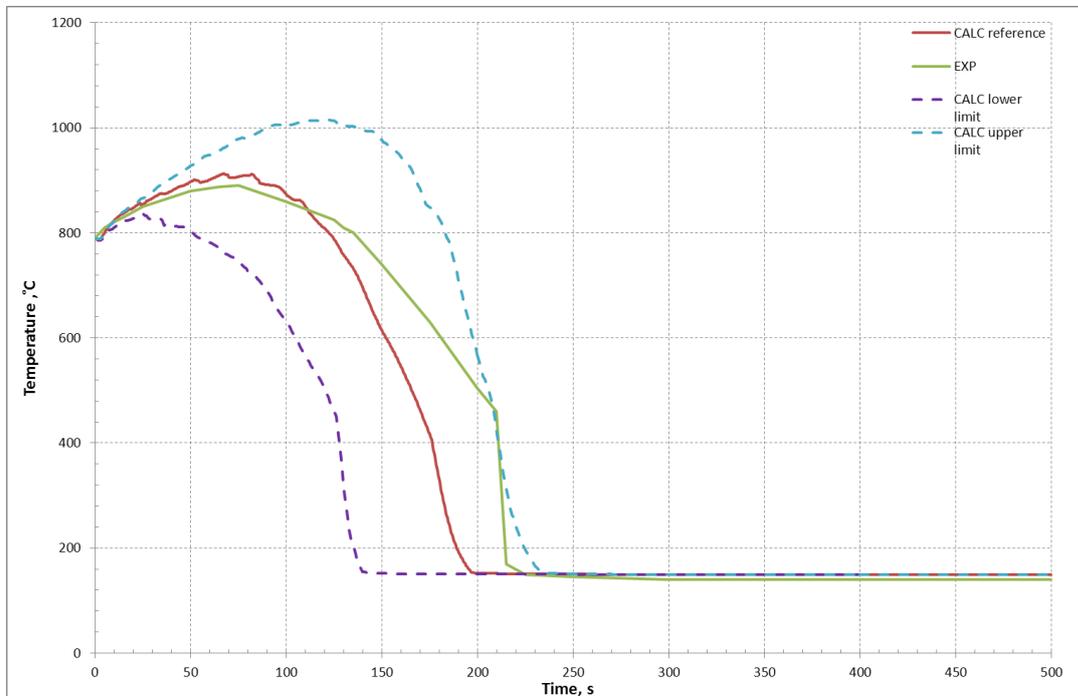
In diesem Schritt wurde eine Korrektur der quantifizierten Eingabeparameter vorgenommen. Weil sowohl Quench-Front Bewegung als auch Hüllrohrtemperaturen von mehreren Modellen abhängig sind, mussten mehrere Parameter bei der Anpassung berücksichtigt werden. Während der Analyse ist es gelungen, eine einhüllende Rechnung für den Bereich der Quench-Front Passage zu identifizieren. Die Untersuchungen haben ergeben, dass das Multiplikationsfaktor für den Drift im vertikalen Bündel (ODBUN) für die einhüllende Rechnung mit Abstand der wichtigste Parameter ist. Eine Verbesserung der Variationsbereiches des Parameters ODBUN führte zur Einhüllung der Messdaten durch die obere Toleranzgrenze. Der neue Variationsbereich ist in der Tab. 4.3 in rot aufgeführt.

Für den modifizierten Variationsbereich des Parameters ODBUN wurde ein neuer Vektor der „random selected values“ ausgespielt. Aus dem neuen Vektor für Parameter ODBUN und den ausgespielten Werten für die anderen Parameter, die bei der Quantifizierung und vorherigen Unsicherheitsanalyse verwendet worden sind, wurde ein neues Sample zusammengestellt und eine neue Unsicherheitsanalyse für den Test Nr. 216 des FEBA Experiments vorgenommen. Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse wer-

den mit den experimentellen Daten verglichen und sind in Abb. 4.7 bis Abb. 4.13 dargestellt.



**Abb. 4.7** Hüllrohrtemperatur auf Höhe 3315 mm



**Abb. 4.8** Hüllrohrtemperatur auf Höhe 2225 mm

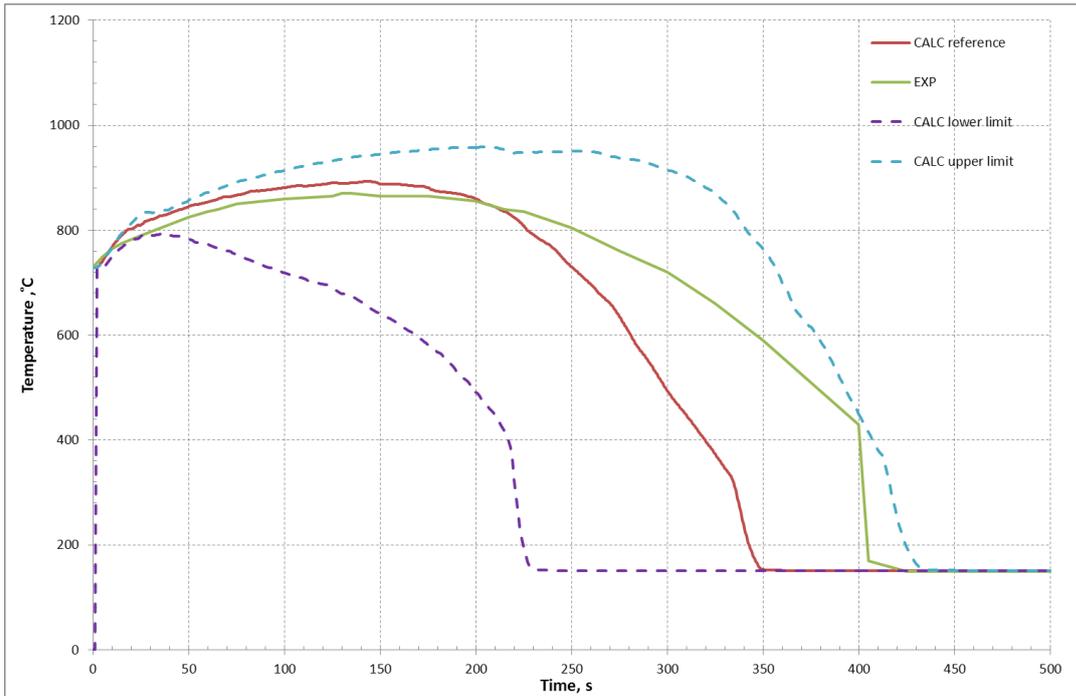


Abb. 4.9 Hüllrohrtemperatur auf Höhe 1135 mm

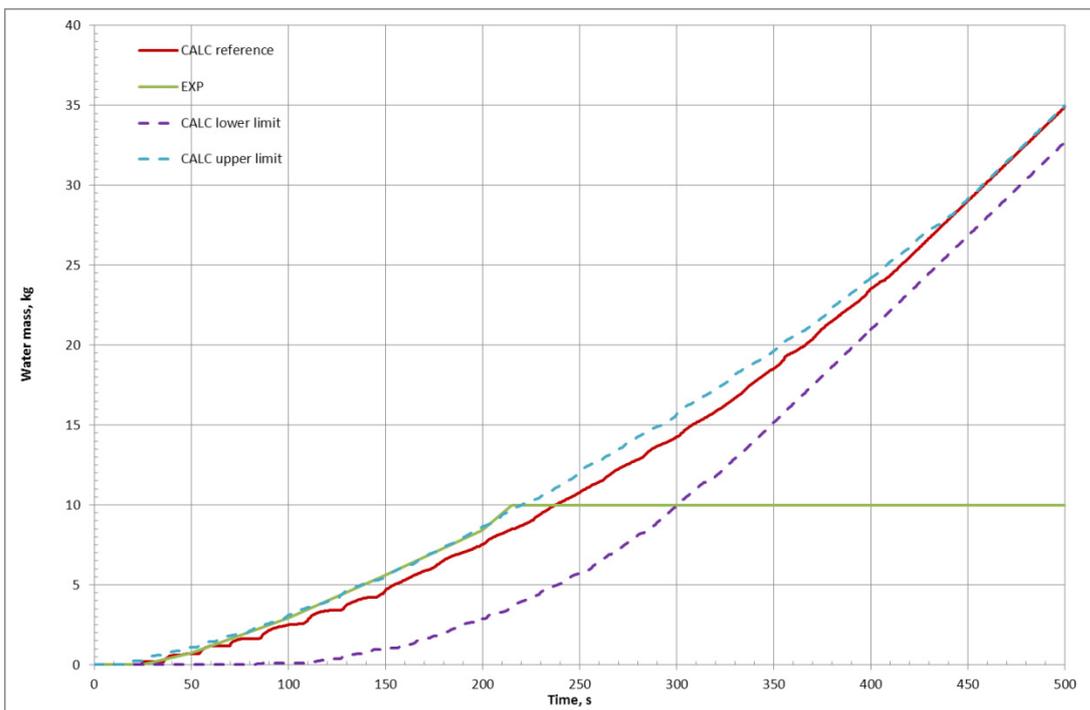
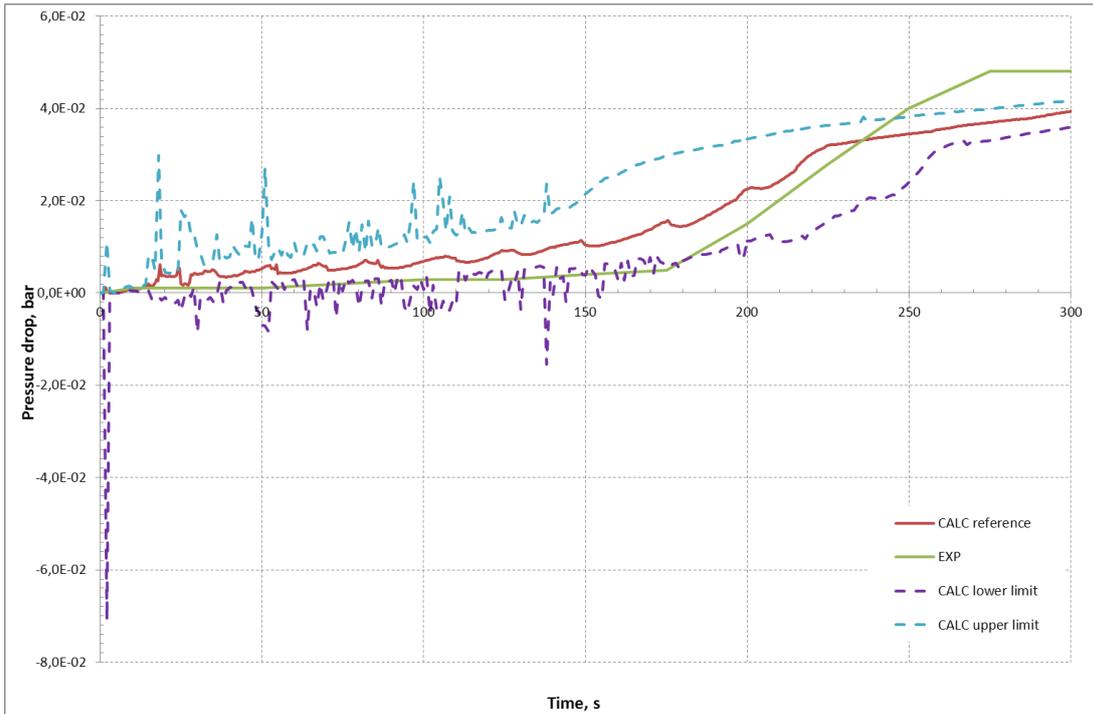
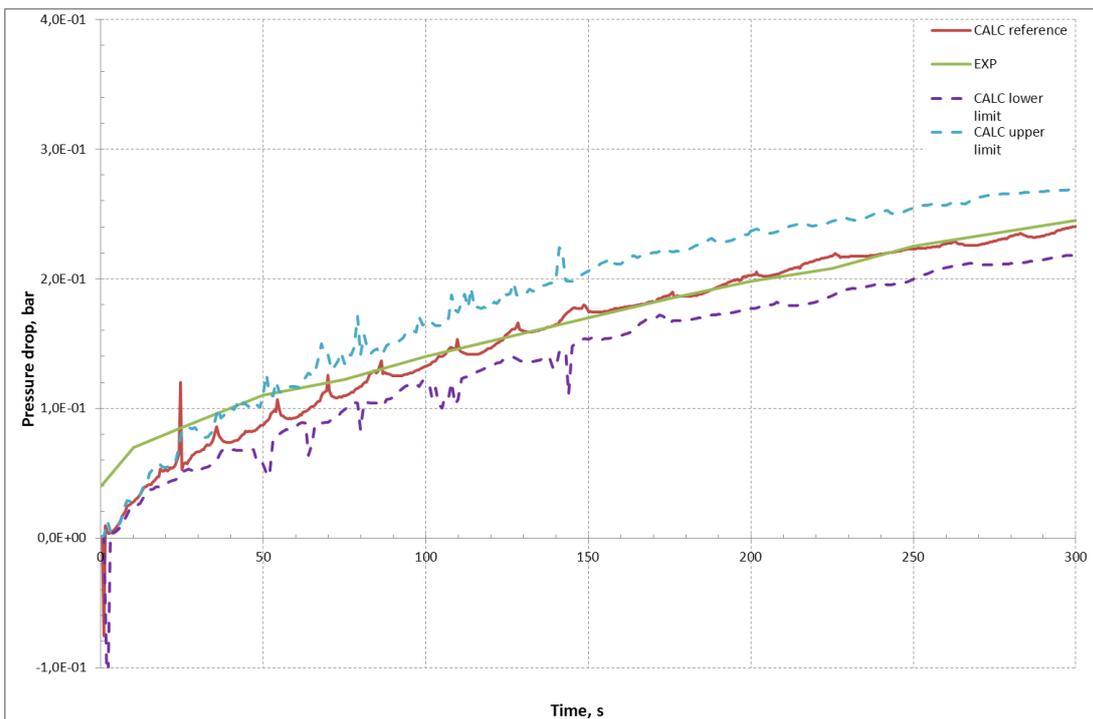


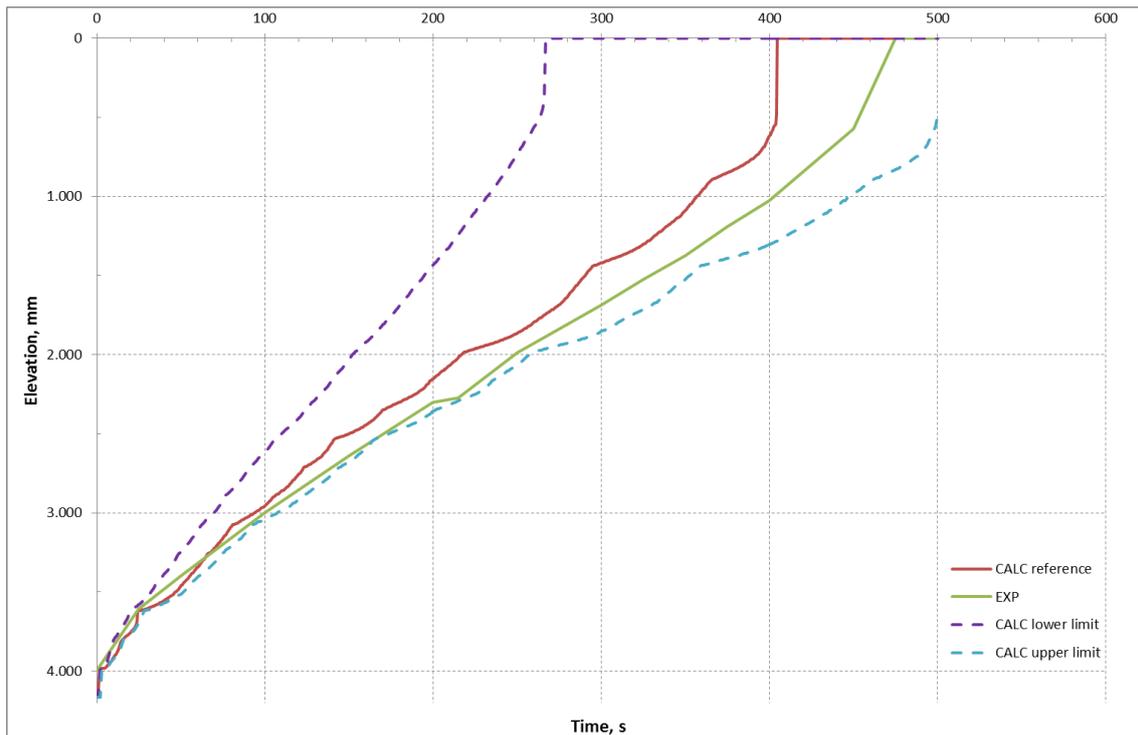
Abb. 4.10 Wasseraustrag aus der Teststrecke



**Abb. 4.11** Druckverlust in der Mitte der Teststrecke



**Abb. 4.12** Druckverlust entlang der gesamten Teststrecke



**Abb. 4.13** Quench-Front Progression

Der Vergleich zeigt, dass die experimentellen Daten – bis auf wenige Ausnahmen – von den Toleranzgrenzen eingeschlossen werden. Nach den Analysen der Testläufe und der Modellrechnungen konnte festgestellt werden, dass die Ursache für die vorhandenen Abweichungen ihren Ursprung im Experiment hat. Der Verlauf der experimentellen Werte zum Wasseraustrag aus der Teststrecke (Abb. 4.10), die bei 10 kg konstant bleiben, ist durch Beschränkungen der Messeinrichtung verursacht. Der in der Abb. 4.12 ersichtliche Druckverlust zum Zeitpunkt 0 s kann nur als Messfehler erklärt werden. Für die zu diesem Zeitpunkt mit reinem Dampf gefüllte Teststrecke gibt es keinen physikalischen Grund für einen Druckverlust von 0,05 bar. Die kleine Abweichung in dem Druckverlust in der Mitte der Teststrecke in der letzten Phase des Wiederauffüllens und die Abweichung zwischen der gemessenen und der berechneten Hüllrohrtemperatur nach der Wiederbenetzung hängen zusammen. Eine plausible Erklärung hierfür ist ein im Experiment asymmetrisches Leistungsprofil mit Topverschiebung. Die Druckverlustmessung entspricht einer näherungsweise einphasigen Wassersäule, wohingegen die Nachrechnung eine zweiphasige Strömung zeigt. Eine Topverschiebung des Leistungsprofils würde das erklären. Mit der Topverschiebung lässt sich auch die Diskrepanz für die Hüllrohrtemperaturen erklären. In dem unteren Teil der Teststrecke sind die Hüllrohrtemperaturen durch die kleinere Leistung niedriger. In dem oberen Teil der Teststrecke ist die Leistung höher, was bei gleicher Ge-

samtleistung die niedrigere Leistung im unteren Bündelbereich kompensiert, und somit zu einer Übereinstimmung der Temperaturen bei 1135 mm Höhe nach Passieren der Quench-Front zum Zeitpunkt 420 s führt (siehe Abb. 4.9). Die Topverschiebung des experimentellen Leistungsprofils ist eine Folge der im Zuge der Quench-Front-Progression lokal unterschiedlichen Kühlung der elektrisch geheizten Brennstabsimulatoren, die wiederum einen Einfluss auf die lokale Wärmeerzeugung hat.

Der erreichte Grad an Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten und den numerischen Analysen lässt annehmen, dass die Quantifizierung der Eingabeparameter erfolgreich vorgenommen wurde.

#### **4.4 Phase 4: Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten**

In dieser Benchmark-Phase war die Validierung der Quantifizierung der unsicheren Eingabeparameter vorgesehen, die auf Basis von blinden *Best Estimate* Rechnungen mit Unsicherheitsanalysen für ausgewählte Quench-Versuche durchgeführt werden sollte. Hierfür wurden sechs Versuche aus dem PERICLES Programm ausgewählt. Die Versuchsergebnisse waren bisher unveröffentlichtes Eigentum von EdF und CEA und wurden erst für das PREMIUM Projekt freigegeben, so dass sie für eine blinde Rechnung geeignet sind.

Die Analyse der in der Phase 3 des PREMIUM Projekts erzielten Ergebnisse zeigte sehr große Abweichungen zwischen den Teilnehmern. Dies gilt auch für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten bei Teilnehmern, die dasselbe thermohydraulische Simulationsprogramm verwendet haben. Die Ergebnisse der Parameterquantifizierung scheinen somit stärker von der Quantifizierungsmethode abhängig zu sein als vom verwendeten Simulationsprogramm. Dies führte dazu, dass in das Projekt ein zusätzlicher Verifizierungsschritt eingeführt wurde. Die Verifizierung der Methoden sollte auf der Basis von Unsicherheitsanalysen der FEBA Experiments erfolgen. Für die Verifizierung wurden die sechs Tests aus der Serie I, die von den meisten Teilnehmern bereits für die Quantifizierung genutzt wurden, ausgewählt.

##### **4.4.1 Unsicherheitsanalysen zu FEBA Versuchen**

Die Unsicherheitsanalysen der Tests aus dem FEBA Experiment, die der Verifizierung der quantifizierten Modellunsicherheiten dienten, wurden auf der Basis eines 200-

Element Sample durchgeführt. Für die Generierung des Samples wurden uniforme Verteilungen für die in Kapitel 4.3.3 quantifizierten Parameterbereiche verwendet. Die für die Unsicherheitsanalysen der FEBA Experimente verwendeten Eingabeunsicherheiten sind in Tab. 4.4 zusammengestellt.

**Tab. 4.4** Eingabeunsicherheiten für FEBA Unsicherheitsanalysen

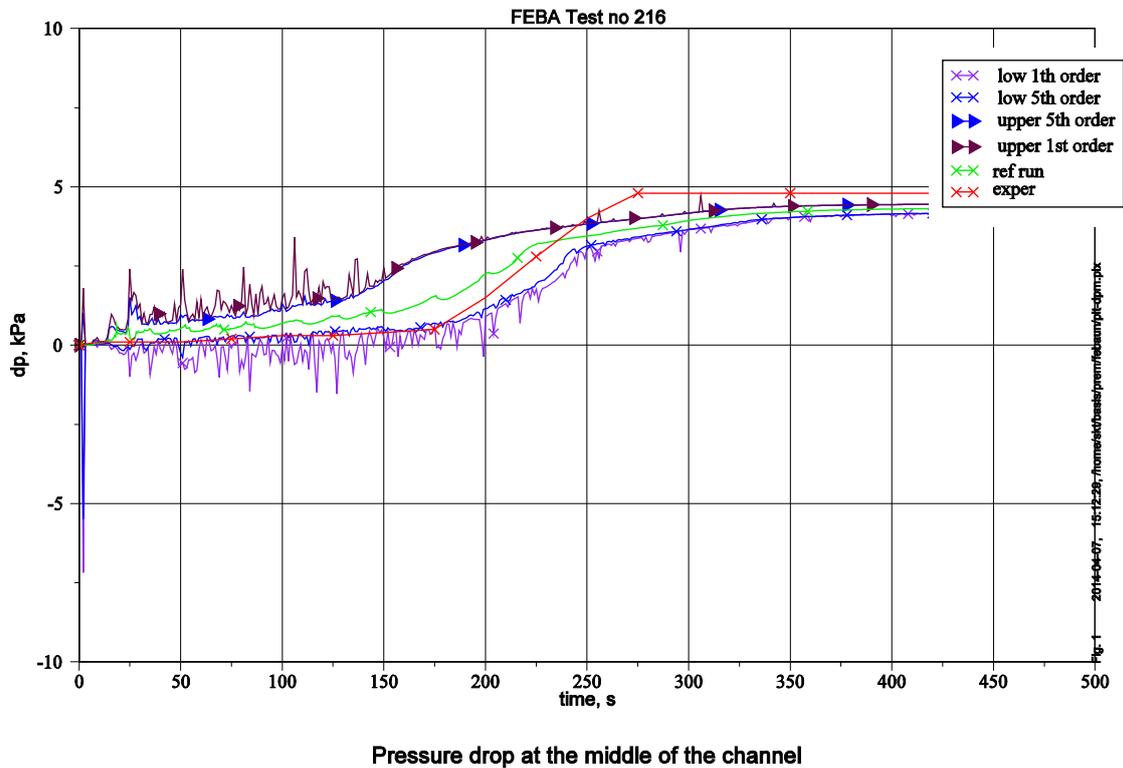
Parameter	Parameter Beschreibung	Bereich		Ref.	Verteilung	Quantifizierung
		Min	Max			
OHWFB	Dampf-Tropfen Kühlung - Faktor	0.65	1.3	1.0	Uniform	KWU Tests in 25-Stab-bündel
OHVFC	Konvektion an Dampf – Faktor	0.85	1.25	1.0	Uniform	Literatur und Expertenbefragung
ODBUN	Driftgeschwindigkeit in Bundle – Faktor	0.65	1.65	1.0	Uniform	Druckverlust Messungen, Anpassung an Hüllrohrtemp.
OENBU	Wassermittiss – Faktor	0.6	1.5	1.0	Uniform	Druckverlust Messungen, Wasserausstrag
CQHTB	Wärmeübergangskoeffizient am Quench Front	$10^5$	$10^6$	$10^5$	Uniform	Verlauf der Hüllrohr-Temperatur
ZT	Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell	$10^9$	$10^{10}$	$10^9$	Uniform	Anpassung an PCT

Bei den Unsicherheitsanalysen wurde das gleiche Sample für alle sechs FEBA Tests verwendet. Alle 200 Rechnungen für jeden der Tests wurden erfolgreich beendet. Für den Vergleich mit dem Experiment wurden zwei Hüllrohrtemperaturen und eine Messung des Druckverlusts ausgewählt:

- Hüllrohrtemperaturverläufe auf Höhe 2225 mm und 1125 mm
- Druckverlustverlauf in der Mitte des Kanals

Der Vergleich der Messdaten mit den Unsicherheitsgrenzen für den Druckverlust zeigt die zu erwartenden Ergebnisse. Die Messdaten liegen generell innerhalb der Toleran-

zintervalle. Nur für zwei Tests liegen die Messdaten für den stationären Bereich nach Passieren der Quench-Front oberhalb der oberen Unsicherheitsgrenze. Das ist der Fall für den Test Nr. 216 (siehe Abb. 4.14) und den Test Nr. 223. Für beide Tests wird die in dem vorangegangenen Kapitel hervorgehobene Topverschiebung des Leistungsprofils als Ursache vermutet.



**Abb. 4.14** Druckverlust in der Mitte der Teststrecke

Der Vergleich der Hüllrohrtemperaturen ist dagegen überraschend. Die gemessenen Verläufe der Hüllrohrtemperaturen liegen generell, einschließlich des Tests Nr. 216 (siehe Abb. 4.15), für die Phase der Wiederbenetzung außerhalb der Unsicherheitsintervalle, obwohl bei der Überprüfung der Quantifizierung in Phase 3 des Projekts die Messergebnisse innerhalb der Unsicherheitsgrenzen lagen. Als Ursache wurde zunächst die unterschiedliche Ordnung der beiden Analysen vermutet: die erste Ordnung bei der Quantifizierung und die fünfte Ordnung bei der Verifizierung. Ein Vergleich der Unsicherheitslimits für die beiden Ordnungen zeigt aber, dass dies die Diskrepanz nur zum Teil erklären kann (siehe Abb. 4.15 und Abb. 4.16). Weitere Untersuchungen haben ergeben, dass der Hauptgrund ein Sample-Effekt ist. Es ist offenbar in dem für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten verwendeten Sample eine Kombination der Parameter aufgetreten, die zur Simulation einer extrem langsamen Wiederbenetzung

fürte. Eine ähnliche Parameterkombination ist in dem Sample der Verifizierungsphase nicht vorgekommen.

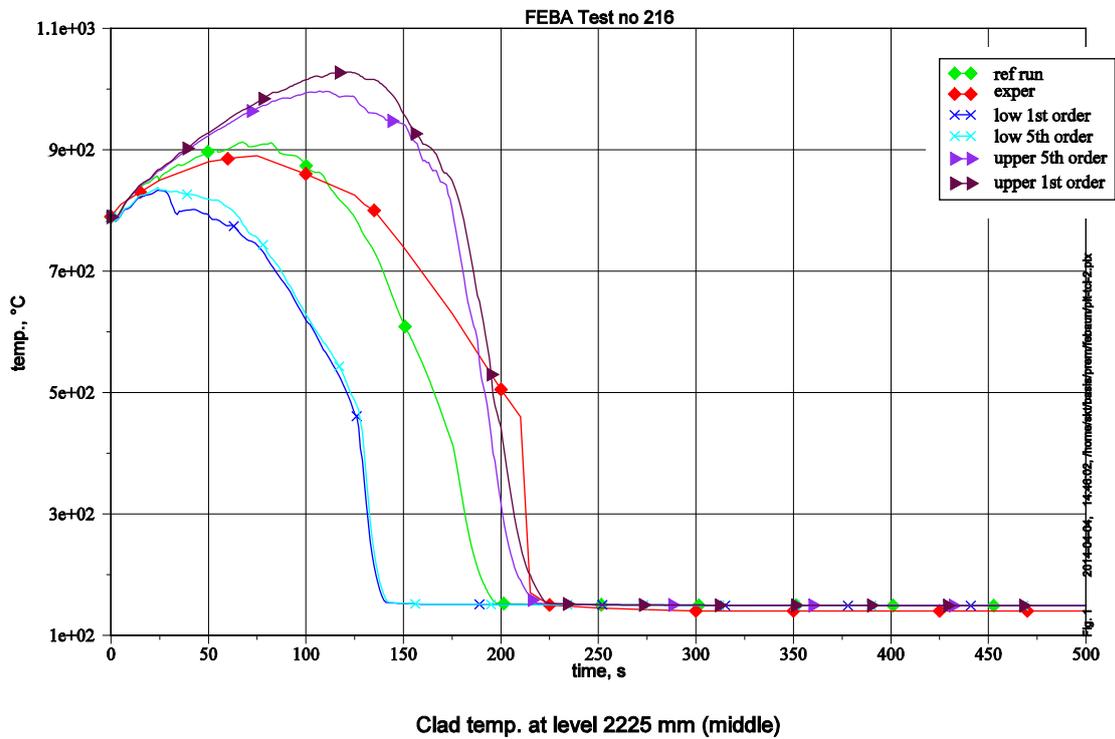


Abb. 4.15 Hüllrohrtemperatur auf Höhe 2225 mm

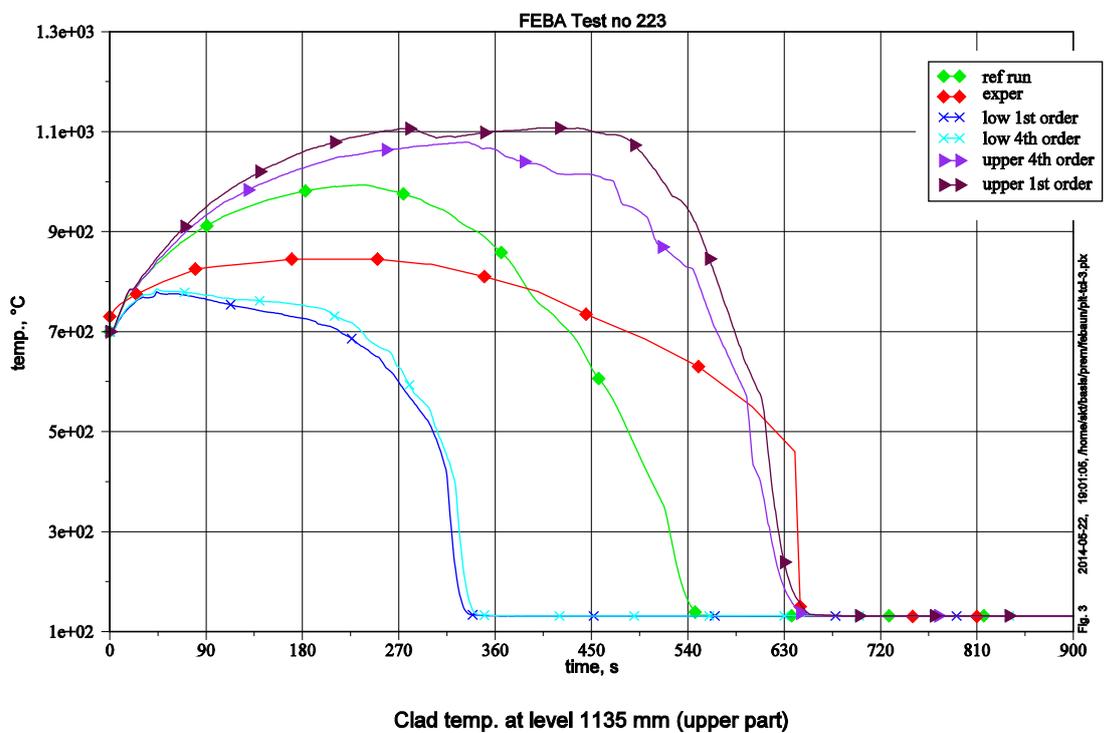


Abb. 4.16 Hüllrohrtemperatur auf Höhe 1135 mm

#### 4.4.2 Unsicherheitsanalysen zu PERICLES Versuchen

Für die Validierung der vorgenommenen Quantifizierung der Modellunsicherheiten wurden im Rahmen des PREMIUM Projekts sechs Tests aus dem PERICLES Experiment freigegeben. Die Teststrecke des PERICLES Experiments besteht aus drei 7x17 elektrisch geheizten Brennstabsimulatoren von typischen DWR Brennstäben. In dem Experiment wurde der Einfluss der Anfangs- und Randbedingungen (Druck, Temperatur, Leistungsniveau) sowie 2D-Effekte der radialen Leistungsverteilung auf den Flutvorgang untersucht. Eine Beschreibung der Testanlage und der durchgeführten Experimente ist in der Literatur zu finden /DER85/. Eine genauere Beschreibung der Experimente, die für die Validierung ausgewählt worden sind, wurde an die Teilnehmer des PREMIUM Projekts verteilt.

Die wichtigsten Parameter der sechs ausgewählten Tests sind in der Tab. 4.5 zusammengestellt. Hierbei bedeuten HA: Heißes Bündel, CA: Kaltes Bündel, G: Massenstromdichte,  $T_{wi}$ : Hüllrohrtemperatur, DT: Unterkühlung am Einlauf,  $F_{xy}$ : radiales Leistungsprofil,  $F_{nom}$  Wärmestrom.

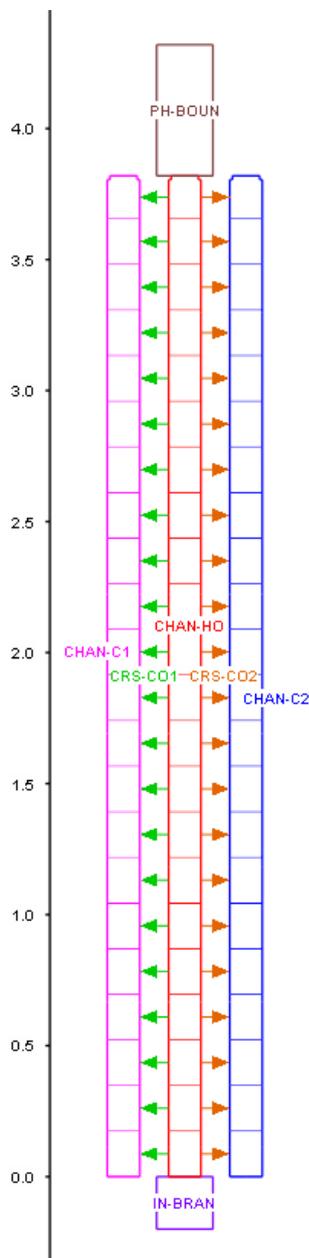
**Tab. 4.5** Randbedingungen der PERICLES Versuche

Test Nr.	$F_{nom}$ (HA) W/cm <sup>2</sup>	$F_{nom}$ (CA) W/cm <sup>2</sup>	$F_{xy}$	G (HA) g/cm <sup>2</sup> s	G (CA) g/cm <sup>2</sup> s	$T_{wi}$ (HA) °C	$T_{wi}$ (CA) °C	DT, °C	P, bar
RE0062	2.93	2.93	1	3.6	3.6	600	600	60	3
RE0064	4.2	2.93	1.435	3.6	3.6	600	475	60	3
RE0069	2.93	2.93	1	3.6	3.6	475	475	60	3
RE0079	4.2	2.93	1.435	3.6	3.6	600	475	90	3
RE0080	4.2	2.93	1.435	5	5	600	475	60	3
RE0086	4.2	2.93	1.435	3.6	3.6	600	475	60	4

##### 4.4.2.1 AHTLET-Modell der PERICLES Versuchsanlage

Für die Abbildung der Teststrecke wird eine Parallelkanal-Darstellung mit drei parallelen Pipe-Objekten verwendet. Die Teststrecke besteht aus dem zentralen Heißkanal und zwei kalten, geometrisch identischen, seitlichen Kanälen. Die seitlichen Kanäle sind durch Cross-Connection-Objekte mit dem Zentralkanal verbunden (siehe

Abb. 4.17). Diese geometrische Darstellung ermöglicht eine quasi 2-D Simulation und Berücksichtigung von radialen Effekten.



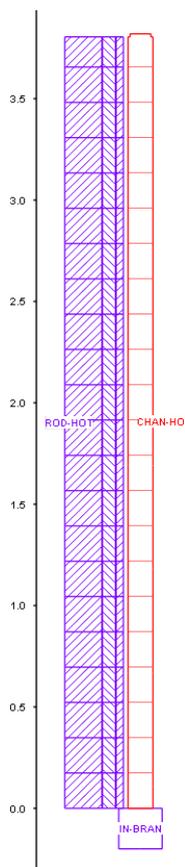
**Abb. 4.17** ATHLET Parallelkanalmodell der PERICLES Teststrecke

Die Teststrecke ist axial in 22 Kontrollvolumina unterteilt. Die Abstandshalter sind geometrisch als Verengung des Thermohydraulischen Kanals modelliert. Das untere und obere Plenum sind durch Branch-Objekte modelliert. Die Randbedingungen am Einlauf in die Teststrecke sind Massenstrom und Enthalpie (FILL) und am Auslauf Druck und Enthalpie (Time Dependent Volume).

Die elektrisch geheizten Brennstäbe sind entsprechend der Diskretisierung des Thermohydraulischen Kanals in 22 Nodes unterteilt (siehe Abb. 4.18). Die Heizstäbe werden mit drei radialen Zonen modelliert:

- Innere Zone (geheizt): Bornitrid
- Äußere Zone (nicht geheizt): Bornitrid
- Hüllrohre: rostfreier Stahl

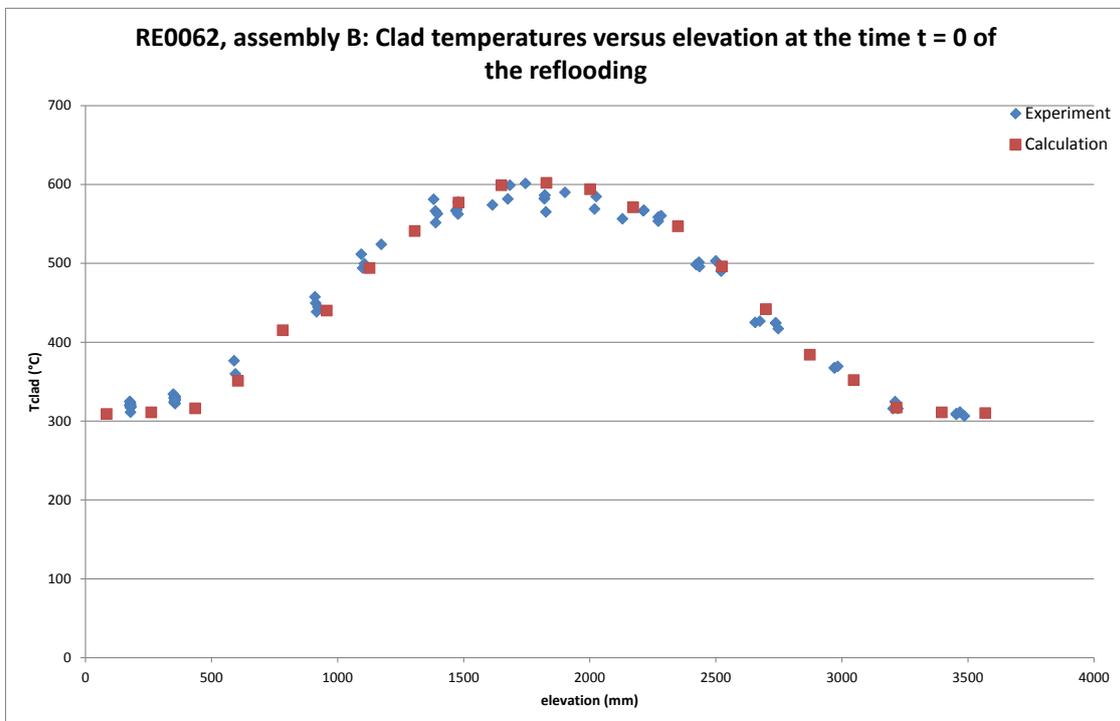
Die Modellierung des Brennstabes ist im Vergleich zu dem realen Stab vereinfacht. Das Heizelement, das sich zwischen innerer und äußerer Zone befindet, wird nicht modelliert, da ATHLET nur drei radial aufeinanderfolgende Materialzonen zulässt. Die Heizleistung wurde in der inneren Zone realisiert. Die axiale Variation der Stoffwerte von Bornitrid, wie in der Experimentbeschreibung angegeben, wird nicht berücksichtigt. Stattdessen werden für die gesamte axiale Länge die Standard-Stoffwerte für Bornitrid aus dem ATHLET verwendet.



**Abb. 4.18** Räumliche Diskretisierung des thermohydraulischen Kanals und der Heizstäbe

Das Gehäuse um die Teststrecke wird pro Kanal durch je ein Wärmeleitelement modelliert. Die Randbedingungen auf der Außenseite des Gehäuses werden durch einen konstanten Wärmeübergangskoeffizienten und Sättigungstemperatur gemäß dem Druck in der Teststrecke modelliert. Damit wird die in der Anlage installierte elektrische Heizung der Isolierungsschicht simuliert, die im Experiment die Wärmeverluste zur Umgebung minimieren sollte.

Die Vorheizung der Teststrecke wird gemäß der experimentellen Prozedur simuliert. Die Vorheizung dauerte so lange bis die gewünschte maximale Hüllrohrtemperatur erreicht wurde. Die errechnete axiale Hüllrohrtemperaturverteilung entspricht der anfänglichen gemessenen Temperaturverteilung (siehe Abb. 4.19).



**Abb. 4.19** Anfängliche axiale Hüllrohrtemperaturverteilung

#### 4.4.2.2 Eingabeparameter der Unsicherheitsanalysen zum PERICLES Experiment

Bei der Unsicherheitsanalyse des PERICLES Experiments sind zusätzlich zu den sechs Modellunsicherheiten, die bereits bei den Analysen des FEBA Experiments betrachtet wurden, zwei neue Modelleingangsparameter berücksichtigt. Alle verwendeten Eingabeparameter sind in der Tab. 4.6 aufgelistet. Der zusätzlich definierte Multiplikati-

onsfaktor für die Driftgeschwindigkeit in den Cross-Connection-Objekten steht in Zusammenhang mit der gewählten Parallelkanal-Darstellung. Da in dem FEBA Experiment keine radialen Effekte beobachtet wurden, konnte eine Quantifizierung dieses Parameters nicht vorgenommen werden. Ein weiterer Parameter berücksichtigt als experimentelle Unsicherheit mögliche Abweichungen von der Nominalleistung der Bündel. Im Rahmen von Parameterstudien erwiesen sich Simulationen der PERICLES-Versuche aufgrund der Parallelkanal-Darstellung in Bezug auf Leistungsvariationen als sensitiver im Vergleich zur Einkanal-Darstellung der FEBA-Anlage. Die Unsicherheit der Bundle-Leistung wurde entsprechend der Angabe in der Experimentbeschreibung definiert. Die Driftgeschwindigkeit in Cross-connections wurde auf der Basis von Erfahrungen aus ATHLET Validierung festgelegt.

**Tab. 4.6** Eingangunsicherheiten der PERICLES Unsicherheitsanalysen

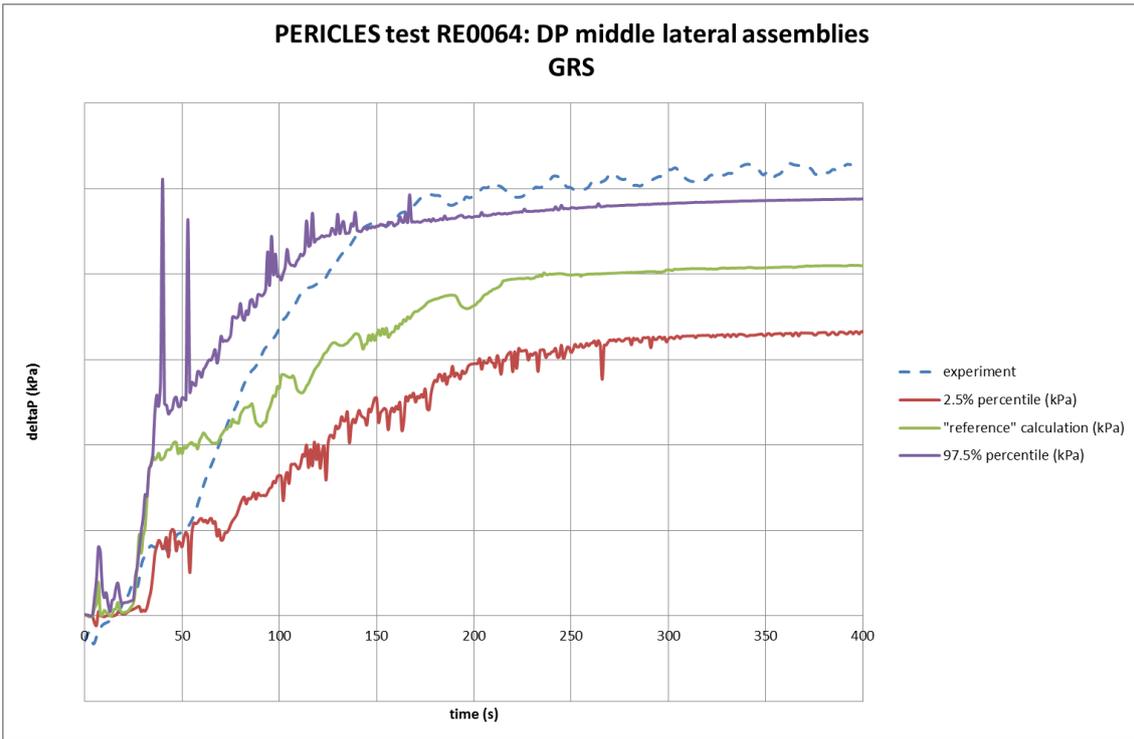
Parameter	Parameter Beschreibung	Bereich		Ref.	Verteilung	Quantifizierungsbasis
		min	max			
Ursprünglich (für FEBA Analysen) berücksichtigte Modelleingangsparameter						
OHWFB	Dampf-Tropfen Kühlung – Faktor	0.65	1.3	1.0	Uniform	KWU Tests mit 25-Stabbündel
OHVFC	Konvektion an Dampf – Faktor	0.85	1.25	1.0	Uniform	Literatur und Expertenbefragung
ODBUN	Driftgeschwindigkeit im Bündel – Faktor	0.65	1.65	1.0	Uniform	Druckverlustmessungen und Anpassung an Hüllrohrtemperatur
OENBU	Wassermitriss – Faktor	0.6	1.5	1.0	Uniform	Druckverlustmessungen und Wasser Austrag
CQHTB	Wärmeübergangskoeffizient an der Quench Front	$10^5$	$10^6$	$10^5$	Uniform	Verlauf der Hüllrohr-Temperatur
ZT	Zahl der Tropfen im Verdampfungsmodell	$10^9$	$10^{10}$	$10^9$	Uniform	Anpassung an PCT
Zusätzlich berücksichtigte Modelleingangsparameter für PERICLES Analysen						
ODHCC	Driftgeschwindigkeit in Cross-Connections - Faktor	0.2	1.0	1.0	Uniform	Codevalidierung
P	Bündelleistung – Faktor	0.985	1.015	1.0	Uniform	Experiment

#### 4.4.2.3 Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen

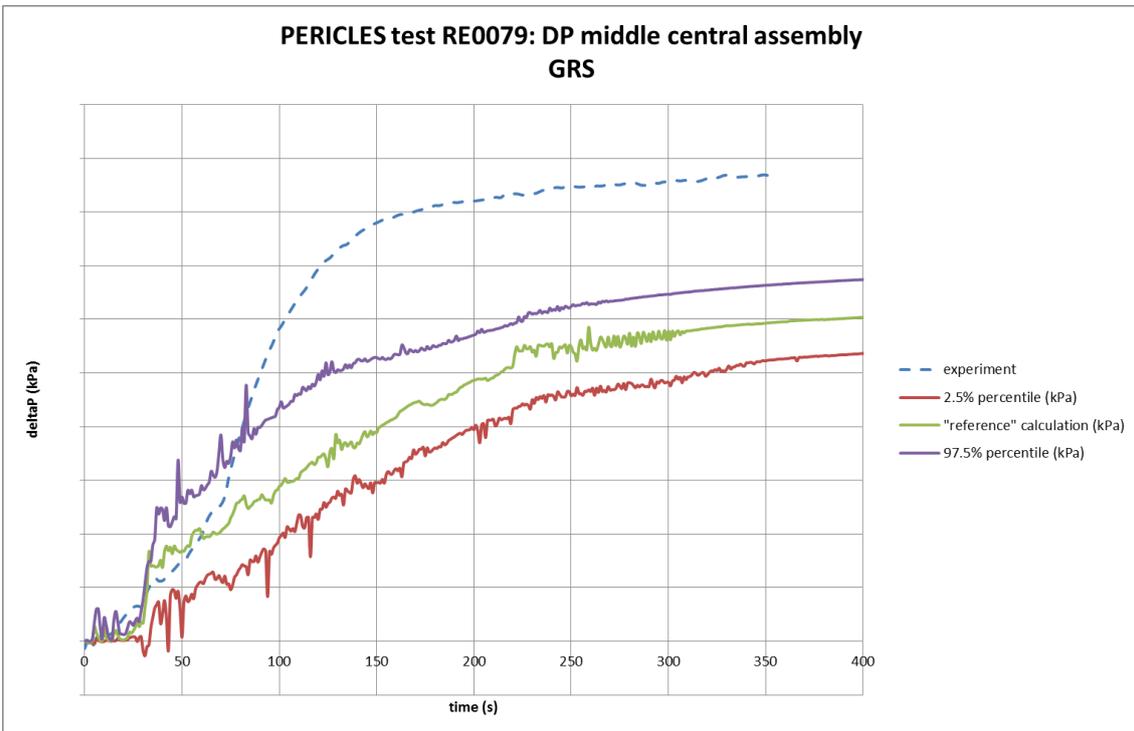
Für die Unsicherheitsanalysen zum PERICLES Experiment wurde das gleiche Sample wie für die Unsicherheitsanalysen des FEBA Experiments verwendet. Bereits für die FEBA Analysen war das komplette Sample der acht Parameter ausgespielt worden, wobei die beiden zusätzlichen Parameter (Driftgeschwindigkeit und Bündelleistung) ignoriert wurden. Alle 200 Rechnungen für jeden der ausgewählten Tests wurden erfolgreich abgeschlossen. Die Analysen wurden, wie vorgesehen, blind durchgeführt. Für den Vergleich von Messdaten und Simulation werden vier Temperaturen und zwei Druckverlustmessungen ausgewählt:

- Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm im zentralen Bündel
- Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm im seitlichen Bündel
- Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm im zentralen Bündel
- Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm im seitlichen Bündel
- Druckdifferenz in der Mitte des zentralen Kanals
- Druckdifferenz in der Mitte des seitlichen Kanals

Der Vergleich mit dem Experiment zeigt in vielen Fällen deutliche Diskrepanzen. Die gemessene Druckdifferenz übersteigt meistens die obere Toleranzgrenze der Unsicherheitsanalysen. Für manche Tests wie z. B. für Test Nr. RE0064 liegt die Messung nahe der Toleranzgrenze (Abb. 4.20). Bei anderen Tests wie z. B. dem Test Nr. RE00079 ist die Abweichung deutlich größer (Abb. 4.21).



**Abb. 4.20** Druckverlust in der Mitte des Kanals – Test Nr. RE0064



**Abb. 4.21** Druckverlust in der Mitte des Kanals – Test Nr. RE0079

Hinsichtlich des Vergleichs der gemessenen und berechneten Hüllrohrtemperaturen gibt es einen deutlichen Unterschied zwischen Temperaturen auf mittlerer Höhe und

Temperaturen im oberen Bereich der Bündel. In der Mitte der Bündel liegen die gemessenen Temperaturen innerhalb des Toleranzintervalls. Insbesondere für den Zentralkanal ist die Übereinstimmung gut (Abb. 4.22). Für die seitlichen Kanäle sind die Unterschiede größer (siehe Abb. 4.23). Für beide Kanäle ist im Vergleich zum Experiment ein deutlich verlangsamer Quench-Vorgang in der numerischen Simulation zu erkennen.

Für die Hüllrohrtemperaturen im oberen Teil der Bündel ist vor allem zu Beginn der Transiente für alle 6 Test eine Abweichung der berechneten von den gemessenen Werten zu beobachten. Dies gilt sowohl für das zentrale Bündel (siehe Abb. 4.24) als auch für die seitlichen Bündel (Abb. 4.25). In dem oberen Teil der Bündel ist das in der Simulation zu langsame Voranschreiten der Quench-Front noch ausgeprägter sichtbar als auf mittlerer Bündelhöhe. Besonders überraschend erscheint allerdings die Diskrepanz innerhalb der ersten 30 bis 40 s der Transiente (siehe Abb. 4.24 und Abb. 4.25), währenddessen im oberen Teil des Kanals noch eine einphasige Strömung vorliegt. Nachträgliche Analysen haben ergeben, dass folgende zwei Punkte für diese Diskrepanz ursächlich sind:

- Die axiale Nodalisierung des Heizstabes
- Die verwendeten Stoffwerte für Bornitrid

Bei der verwendeten Nodalisierung liegt die betrachtete Temperaturmessstelle nur 38 mm oberhalb der Unterkante des entsprechenden Kontrollvolumens. Für den Vergleich ist das eine äußerst ungünstige Position, da die thermohydraulischen Parameter am besten für die Mitte eines Fluidkontrollvolumens und bei beheizten Wärmeleitobjekten für den oberen Teil des Wärmeleitelements vergleichbar sind. Bezüglich der Stoffwerte für Bornitrid hat sich gezeigt, dass sich die in ATHLET hinterlegten Standard-Stoffwerte stark von den Stoffwerten des in der PERICLES-Anlage verwendeten Bornitrids unterscheiden.

Im weiteren Verlauf der Transiente kamen weitere Ursachen für die zu niedrig berechneten Hüllrohrtemperaturen hinzu:

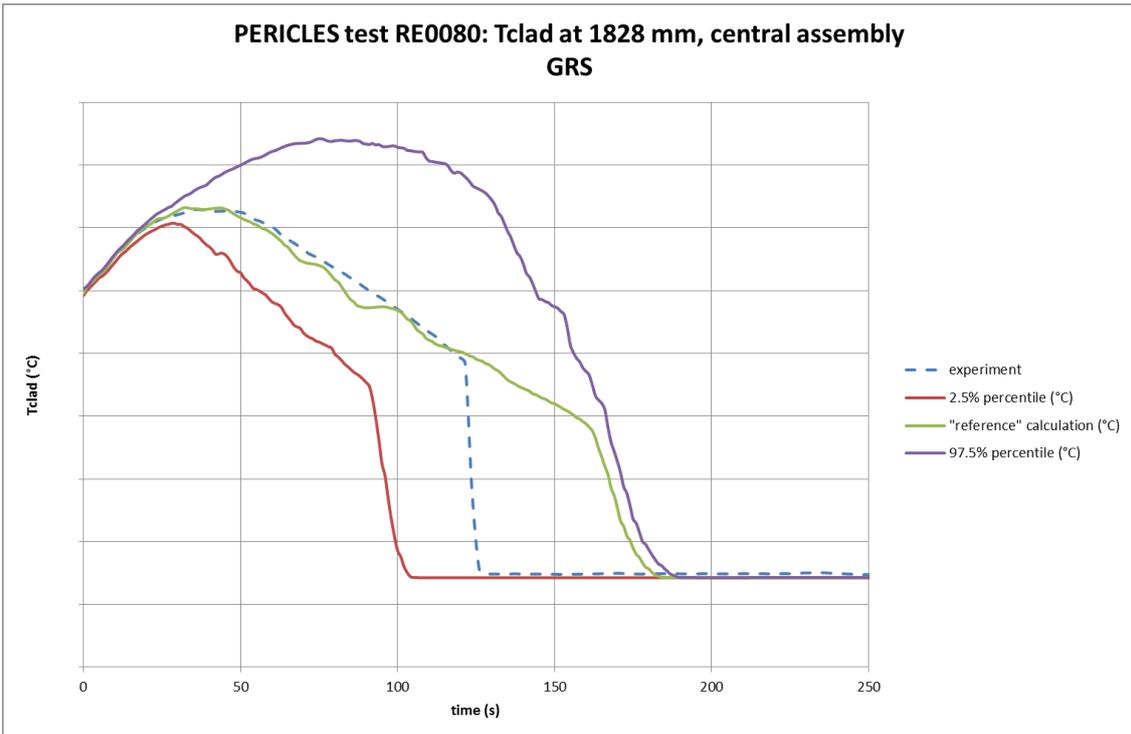
- Berechnung der Driftgeschwindigkeit im Bereich der Tropfenströmung
- Überschätzung des Wassermittresses

Die Überschätzung des Wassermittresses ist auch für das viel zu späte Wiederbenetzen der Brennstabsimulatoren verantwortlich. In der numerischen Simulation wird ein sehr großer Teil des Wassers aus der Teststrecke ausgetragen, was einen Wassermangel im Kanal zur Folge hat. Zum Beispiel beträgt in der Nachrechnung des Tests Nr. RE0062 zum Zeitpunkt 300 s nach Start der Transiente das Wasserinventar im Kanal 62 kg und der Wasseraustrag 177 kg. Im Experiment konnte demgegenüber kein nennenswerter Wasseraustrag beobachtet werden.

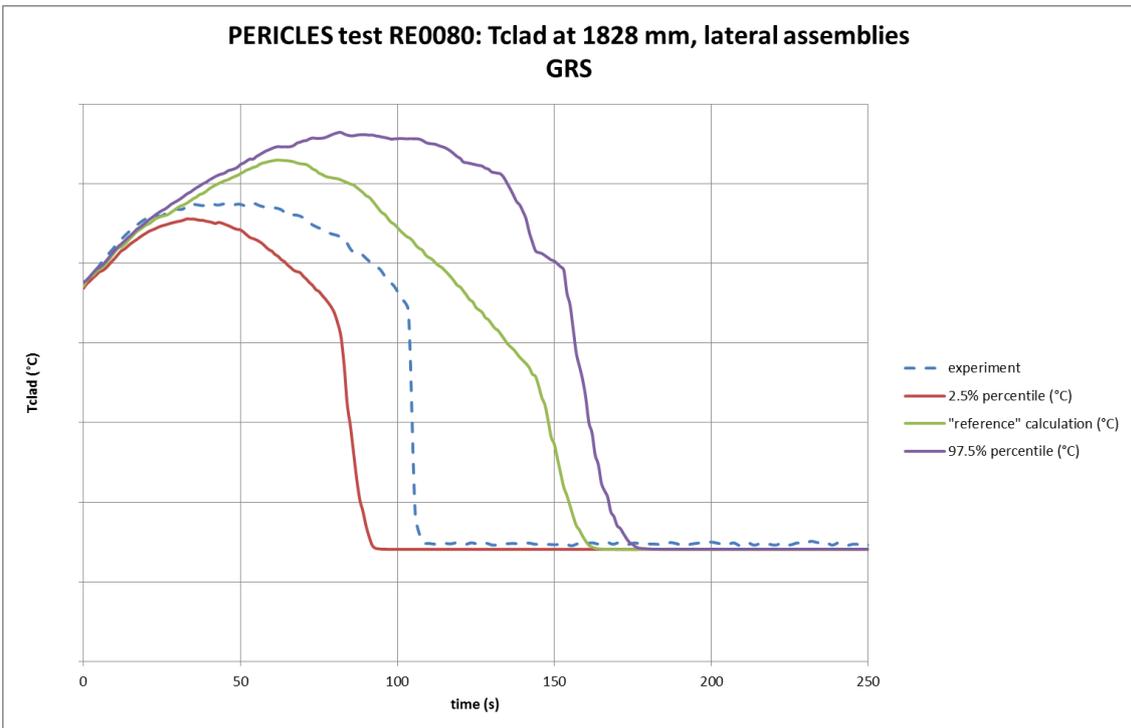
Post-Test Nachrechnungen haben gezeigt, dass die Ursachen für diese Diskrepanzen hauptsächlich auf die Referenzrechnung zurückzuführen sind. Eine Modifizierung der Referenzrechnung durch folgende Änderungen hat eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit dem Experiment zur Folge (siehe (Abb. 4.26)):

- Axiale Nodalisierung mit 23 Kontrollvolumina, so dass sich die Temperaturmessstelle in Höhe von 1828 mm im oberen Teil eines Kontrollvolumens befindet
- Verwendung von Bornitrid-Stoffwerten entsprechend der Testanlagenbeschreibung
- 6-Gleichungsmodell – Die Berechnung der Zwischenphasenreibung für Tropfenströmung im 6-Gleichungsmodell basiert auf anderen Ansätzen als die Berechnung im 5- Gleichungsmodell

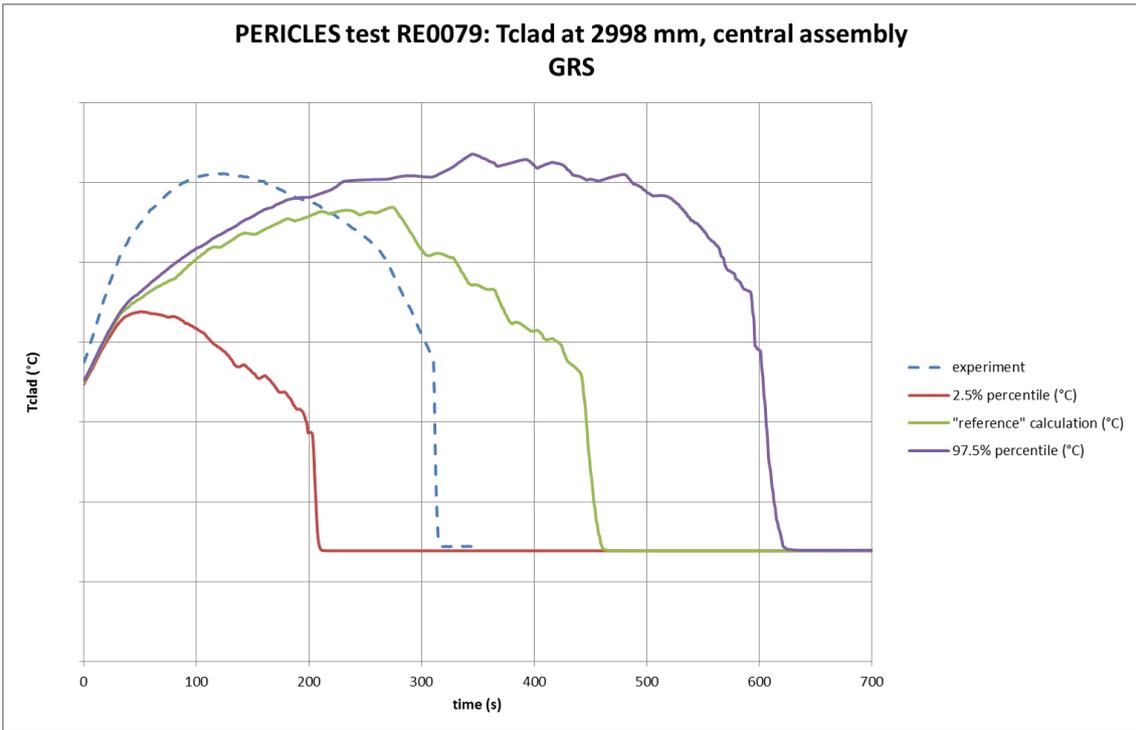
Die Quantifizierung der Unsicherheiten der Wassermittress-Modellierung hat sich für die PERICLES Analysen ebenfalls als unzureichend herausgestellt. Eine bessere Quantifizierung auf Basis der FEBA Versuche scheint jedoch nicht möglich zu sein, da hier der berechnete Wassermittress gut mit dem Experiment übereinstimmt.



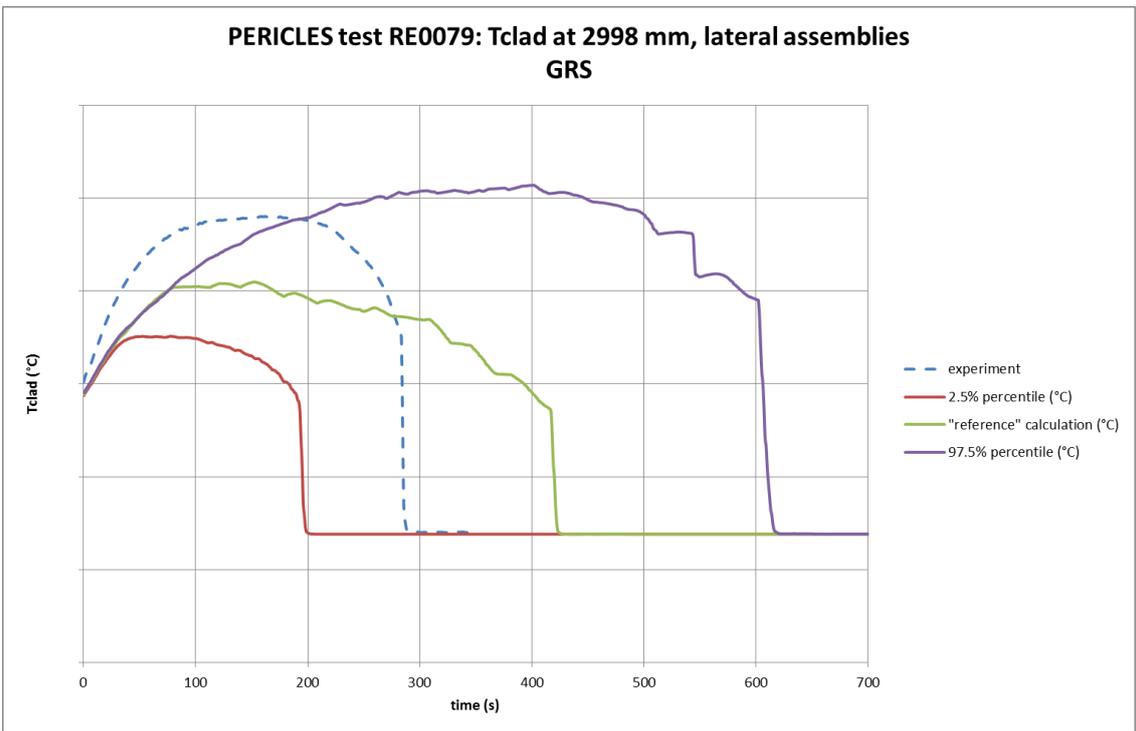
**Abb. 4.22** Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm – zentrales Bündel



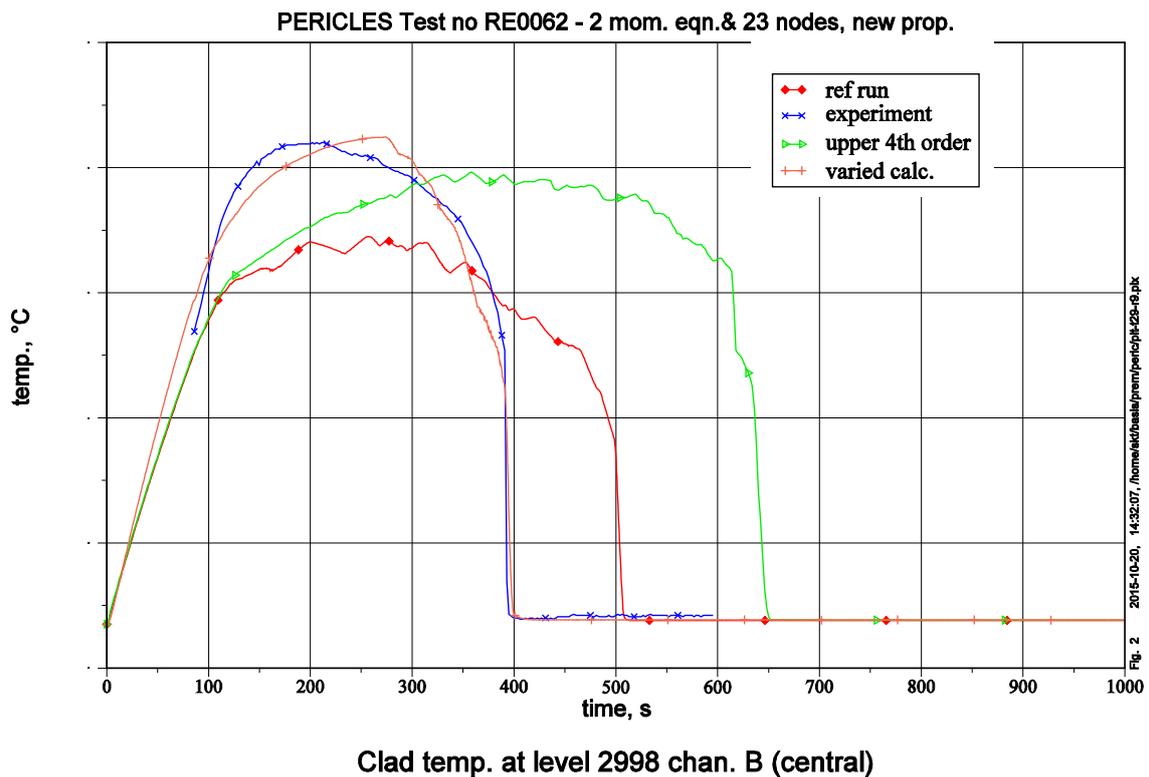
**Abb. 4.23** Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm – seitliches Bündel



**Abb. 4.24** Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm – zentrales Bündel



**Abb. 4.25** Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm – seitliches Bündel



**Abb. 4.26** Ursprüngliche „blinde“ Referenzrechnung (rot) mit oberer Toleranzgrenze (grün) und modifizierte Post-Test Referenzrechnung (orange) für den PERICLES-Versuch Nr. RE0062

#### 4.5 Schlussfolgerungen

Die durchgeführten Analysen zur Verifizierung und Validierung der ermittelten Modelleingangsunsicherheiten hat gezeigt, dass die Quantifizierung der unsicherer Eingangsparameter auf der Basis von *intermediate* Experimenten anspruchsvoll und zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht zufriedenstellend ist. Die experimentellen Daten lagen häufig außerhalb der berechneten Toleranzgrenzen. Dies war sowohl für die „blinden“ Analysen der Validierungsphase zum PERICLES Experiment wie auch für die Untersuchungen zur Verifizierung der Eingangsunsicherheiten anhand von FEBA-Versuchen zu beobachten.

Hinsichtlich der FEBA-Versuche konnte als Ursache für die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation ein Sample Effekt identifiziert werden. Ein relativ kleines Sample und die Anwendung von Toleranzgrenzen erster Ordnung haben diesen Effekt begünstigt. Für die PERICLES Analysen ist die beobachtete Diskrepanz auf die Qualität der Referenzrechnung sowie die Quantifizierung der Modellunsicherheiten auf der

Basis der FEBA-Versuche zurückzuführen. Das FEBA Experiment hat sich als nicht ausreichend repräsentativ für die PERICLES Anlage erwiesen.

Es hat sich gezeigt, dass die numerische Simulation die Wiederbenetzung der Stäbe für die FEBA-Versuche zu schnell und für die PERICLES-Versuche zu langsam abbildet. Dies könnte auf einem Skalierungseffekt beruhen. Das FEBA Experiment ist ein kleinskaliges Experiment mit nur 25 Stäben, wohingegen die Bündel der PERICLES-Anlage 357 Stäbe zählen. Möglicherweise haben auch andere Parametern, insbesondere die in den FEBA-Versuchen um 200 °C höheren Hüllrohrtemperaturen, einen Einfluss. Das unterschiedliche Modellverhalten hinsichtlich der Simulation der Wiederbenetzung für die FEBA-Versuche einerseits und die PERICLES-Versuche andererseits beeinflusste die Ergebnisse der Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten entscheidend. Ob das beobachtete Verhalten auf weitere ATHLET Simulationen oder andere Versuchsanlagen übertragen werden kann, muss noch geklärt werden.

Abschließend kann festgestellt werden, dass sowohl die Auswahl der experimentellen Datenbasis wie auch die Qualität der Referenzrechnung für die „blinden“ PERICLES-Analysen nicht ausreichend waren, um auf Basis der vorgeschlagenen Methodik für *intermediate* Tests die Modellunsicherheiten erfolgreich zu quantifizieren. Weitere Analysen und Entwicklungen erscheinen notwendig und sind für die Zukunft beabsichtigt. Die vorläufigen Ergebnisse der anderen Teilnehmer des PREMIUM Projekts lassen ähnliche Probleme bei der Quantifizierung der Modellunsicherheiten erkennen. Hierbei scheinen die Ergebnisse d HA: Heißes Bündel, CA: Kaltes Bündel, GO: Massenströmdichte, Twi: Wand Hüllrohrtemperatur, DT: Wasser Unterkühlung am Einlauf, Fxy: radiales Leistungsprofil, F Wärmestrom er Quantifizierung mehr von den Quantifizierungsmethoden als von den verwendeten thermohydraulischen Rechenprogrammen abhängig zu sein. Die Zusammenfassung der Ergebnisse aller Teilnehmer wird noch im Rahmen eines Abschlussberichts zum PREMIUM Projekt erfolgen.

## 5 Querschnittsaufgaben

### 5.1 Effiziente Kopplung von ATHLET mit MCDET für umfassende Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Mit MCDET verfügt die GRS über ein fortschrittliches Analysewerkzeug zur Bewertung des Einflusses sowohl epistemischer (aufgrund ungenauen Kenntnisstands) als auch aleatorischer Unsicherheiten (aufgrund zufälliger Ereignisse) auf die Ergebnisse von Stör- und Unfallablaufanalysen. Die implementierten Methoden sind die Monte Carlo (MC) Simulation, die dynamische Ereignisbaum (Dynamic Event Tree, DET) Methode sowie eine Kombination aus beiden. Mit der Kombination aus MC Simulation und der DET-Methode wird pro ausgespieltem Wertesatz für ausgewählte unsichere Parameter ein dynamischer Ereignisbaum mit einer Vielzahl unterschiedlicher Stör- bzw. Unfallabläufe erzeugt /HOF01/.

MCDET kann prinzipiell in Verbindung mit jedem deterministischen Rechenprogramm zur Simulation eines dynamischen Ablaufs eingesetzt werden. In Reaktorsicherheitsanalysen soll MCDET z. B. mit den Rechenprogrammen ATHLET und ATHLET-CD angewendet werden, um Stör- und Unfallabläufe realistischer unter Berücksichtigung sowohl epistemischer als auch aleatorischer Unsicherheiten berechnen und bewerten zu können. Wichtige epistemische Unsicherheiten bei der Anwendung von ATHLET beziehen sich beispielsweise auf Modellparameter sowie Eingabeparameter zur Auswahl unterschiedlicher Korrelationen. Die aleatorischen Unsicherheiten betreffen in erster Linie mögliche Ausfälle technischer Komponenten und Systeme sowie die Zeitpunkte dieser Ausfälle. Auch Lage und Größe von Brüchen sowie Schwankungen in der Kapazität von Sicherheitskomponenten und -systemen (z. B. Einspeiseraten von Pumpen) können als aleatorische Unsicherheiten berücksichtigt werden.

MCDET in Verbindung mit ATHLET ermöglicht eine realitätsnahe Abbildung der Wechselwirkungen zwischen den Unsicherheiten und dem Prozessverlauf. So kann einerseits der Einfluss der Unsicherheiten auf den Prozessverlauf (z. B. höhere Temperatur, wenn Druckspeicher nicht verfügbar) und andererseits der Einfluss des Prozessablaufs auf die Unsicherheiten (z. B. höhere Ausfallrate eines Druckentlastungsventils bei höherer Temperatur) berücksichtigt werden. Der wesentliche Vorteil einer MCDET Analyse in der Reaktorsicherheit besteht darin, dass die Vielfalt möglicher Verläufe sicher-

heitstechnisch wichtiger Prozesse unter realistischen Annahmen repräsentiert, analysiert und angemessen bewertet werden kann.

Um probabilistische Dynamikanalysen mit MCDET und ATHLET für den Anwender einfacher und damit praktikabler zu gestalten, sollten in diesem Arbeitspunkt Entwicklungsarbeiten im Hinblick auf eine effiziente Kopplung der beiden Programme durchgeführt werden. Außerdem sollte ein geeignetes Konzept und entsprechende Programme zur grafischen Aufbereitung der mit MCDET und ATHLET gewonnenen Ergebnisse entwickelt werden. Wichtige Entwicklungsarbeiten zu MCDET fanden bereits im Rahmen der Vorhaben RS1111 /HOF01/ und RS1198 /KLO14/ statt. Weitere Entwicklungsarbeiten zu MCDET werden derzeit im Vorhaben RS1529 *Methodische Weiterentwicklungen und Anwendungen zur probabilistischen Dynamikanalyse* durchgeführt.

Im Rahmen des Vorhabens RS1198 wurde ein neues Konzept für einen effizienten Ablauf der Berechnungen von MCDET in Verbindung mit einem beliebigen deterministischen Rechenprogramm entwickelt. Da die Arbeiten zum Arbeitspunkt 5.1 (Vorhaben RS1507) auf diesem Konzept aufbauen, soll zunächst ein Überblick über dieses Konzept gegeben werden. Danach werden die im vorliegenden Vorhaben durchgeführten Arbeiten beschrieben.

### **5.1.1 Konzept zur Kopplung von MCDET mit einem Rechenprogramm**

Das Konzept für die Kopplung von MCDET mit einem beliebigen Rechenprogramm zur Simulation dynamischer Abläufe wurde im Rahmen des Vorhabens RS1198 neu entwickelt /KLO14/ und wird im Folgenden kurz zusammengefasst. Zunächst erfolgt eine kurze Beschreibung der für diesen Ablauf benötigten MCDET-Module und ihrer Aufgaben. Danach wird ein Überblick über die Analyseschritte gegeben. Anschließend werden die allgemeinen Anforderungen an ein Rechenprogramm genannt, damit es mit MCDET gekoppelt werden kann, und schließlich wird auf die mit dem Ablauf einer MCDET-Analyse verbundene Datenverwaltung eingegangen.

#### **5.1.1.1 MCDET-Module und ihre Aufgaben**

Im Folgenden werden die Module des Analysewerkzeugs MCDET aufgeführt und ihre Aufgaben beschrieben.

- Steuerungsmodul (Scheduler): Das Steuerungsmodul startet und taktet alle Simulationen, kontrolliert den Datenaustausch und synchronisiert alle Rechenläufe mit dem Probabilistik-Modul.
- Probabilistik-Modul: Das im Probabilistik-Modul implementierte Verfahren beurteilt nach jedem Zeitschritt den Zustand eines Rechenlaufs, entscheidet über den weiteren Verlauf, d. h. ob und wenn ja welche Aktionen zur Generierung eines dynamischen Ereignisbaums durchgeführt werden sollen.
- Treiber-Modul: Das Treiber-Modul abstrahiert durch eine generische Kommando-Schnittstelle von den konkret eingesetzten Rechenprogrammen und vereinfacht das Steuerungsmodul durch eine einheitliche Ansteuerung der Simulationsprozesse des jeweiligen Rechenprogramms.

Abb. 5.1 gibt einen Überblick über die MCDET Module und ihre Aufgaben.

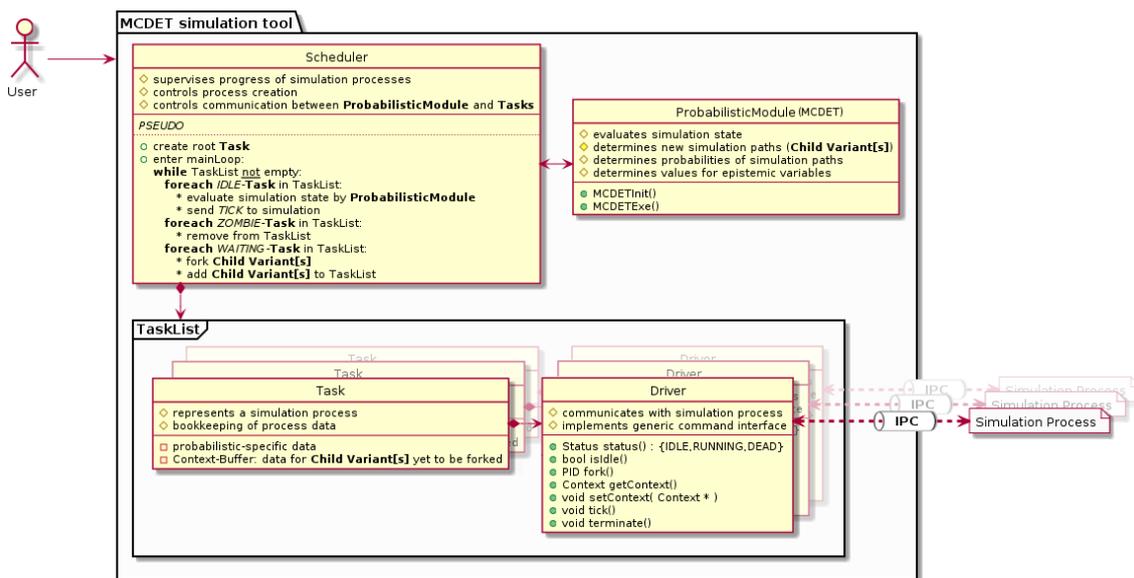


Abb. 5.1 MCDET Module für die Kopplung mit einem deterministischen Rechenprogramm und deren Zusammenspiel

### 5.1.1.2 Ablauf einer MCDET Analyse

Bei einer MCDET-Analyse in Verbindung mit einem Rechenprogramm zur Simulation dynamischer Abläufe können mehrere Sequenzen gleichzeitig von parallel durchgeführten Simulationsprozessen berechnet werden. Diese Prozesse können auf verfügbare Recheneinheiten verteilt werden, um die Rechenkapazität von Mehrkern-Systemen zu nutzen und so die Gesamtrechenzeit erheblich zu reduzieren.

Der Ablauf einer MCDET Analyse lässt sich durch folgende Schritte beschreiben:

1. Der Benutzer erstellt die für die Simulationen notwendigen Eingabedateien von MCDET und dem Rechenprogramm und startet das Steuerungsmodul.
2. Das Steuerungsmodul startet die Berechnung einer Sequenz durch die Erstellung eines neuen Simulationsprozesses, der als Task verwaltet und anschließend der Taskliste hinzugefügt wird. Die Berechnung wird vom Rechenprogramm durch Zeitschritte (ticks) diskretisiert. In einem weiteren Schritt lädt und initialisiert das Steuerungsmodul das Probabilistik-Modul. Anschließend tritt das Steuerungsmodul in die Hauptschleife ein, die solange durchlaufen wird, bis alle Tasks abgearbeitet sind und die Taskliste leer ist.
3. Die Abarbeitung der Hauptschleife beginnt mit dem Durchsuchen der Taskliste nach Tasks, die bereit (ready-Zustand) sind, einen Zeitschritt zu rechnen. Wird keine entsprechende Task gefunden, z. B. weil alle zugehörigen Simulationsprozesse mit der Berechnung eines Zeitschrittes beschäftigt sind, wartet die Hauptschleife solange, bis eine Task diesen Zustand erreicht.
4. Die ausgewählte und rechenbereite Task wird durch einen Befehl dazu aufgefordert, ihren Zustand mitzuteilen. Dieser Zustand enthält alle von MCDET benötigten Prozess- und Systemgrößen (z. B. in Form von Signalen des sogenannten *General Control Simulation Moduls*, GCSM) und wird direkt an das Probabilistik-Modul zur Auswertung weitergeleitet.
5. Das Probabilistik-Modul wertet den aktuellen Zustand der benötigten Prozess- und Systemgrößen und anderer MCDET spezifischer Größen aus und teilt dem Steuerungsmodul mit, wie mit der zugehörigen Task weiter verfahren werden soll: Terminierung (z. B. wegen Ende der Problemzeit), Fortsetzung (d. h. keine Veränderung und Ausführen des nächsten Zeitschritts) oder Verzweigung (d. h. Erzeugung einer oder mehrerer alternativer Sequenzen).

6. Das Steuerungsmodul setzt die vom Probabilistik-Modul erhaltene Auswertung der Task um:
- Terminierung: Die Task wird zum Beenden der Simulation aufgefordert und anschließend aus der Taskliste entfernt.
  - Fortsetzung: Die Task wird zum Berechnen des nächsten Zeitschritts aufgefordert. Der zugehörige Simulationsprozess setzt daraufhin die asynchrone Berechnung der Simulation fort und wartet nach Beendigung des Zeitschritts wiederum auf einen neuen Befehl.
  - Verzweigung: Für jede alternative Sequenz teilt das Probabilistik-Modul dem Steuerungsmodul die zu verändernden Größen an einem Verzweigungspunkt mit. Alle alternativen Sequenzen werden durch eigenständige Simulationsprozesse berechnet. Sie werden durch Klonen der ursprünglichen Simulation erzeugt. Hierzu fordert das Steuerungsmodul die Task jeweils zum Duplizieren ihres Simulationsprozesses auf, teilt der neu erstellten Task die zu verändernden Größen mit und fügt sie zur Taskliste hinzu.

Die Ausführung des Steuerungsmoduls wird am Beginn der Hauptschleife fortgesetzt.

### **5.1.1.3 Anforderung an das Rechenprogramm**

Um den oben beschriebenen Ablauf zu ermöglichen, muss ein Rechenprogramm für die Kopplung mit MCDET folgende Voraussetzungen erfüllen:

- Taktsteuerung: Das Rechenprogramm teilt die simulierte Zeit in diskrete Schritte ein und berechnet die einzelnen Zeitschritte entsprechend eines von außen vorgegebenen Takts (tick-Befehl).
- Statusangabe: Der Status eines Simulationslaufs mit dem Rechenprogramm kann von außen abgefragt werden. Dieser gibt Auskunft darüber, ob das Rechenprogramm gerade einen Zeitschritt berechnet (busy) oder auf einen neuen Befehl wartet (idle / ready).
- Datenzugriff: Das Rechenprogramm stellt den Zustand eines Simulationslaufs, d. h. sämtliche für die Kopplung notwendigen Signale und Größen, bereit und erlaubt auch, diese für die weiteren Berechnungen zu verändern.

- Klonfähigkeit: Das Rechenprogramm bietet für die Behandlung von Verzweigungspunkten eine Möglichkeit, eine laufende Simulation zu duplizieren (fork). Eine Methode hierfür ist die Speicherung des aktuellen Systemzustandes (Restartpunkt) und die Erstellung eines neuen Simulationsprozesses, der die Berechnung an diesem Punkt fortführt.
- Terminierung: Das Rechenprogramm bietet für den Fall, dass die Eintrittswahrscheinlichkeit einer Ereignissequenz unter einen vom Benutzer definierten Schwellenwert fällt, die Möglichkeit, eine laufende Simulation explizit zu beenden. Diese Möglichkeit der Terminierung kann vom Benutzer optional eingesetzt werden.

#### **5.1.1.4 Datenverwaltung**

Bei einer MCDET-Analyse in Verbindung mit einem Rechenprogramm zur Simulation dynamischer Abläufe werden i. A. mehrere Sequenzen gleichzeitig von parallel durchgeführten Simulationsprozessen berechnet. Das Probabilistik-Modul von MCDET kennt weder die Anzahl der während der Laufzeit entstehenden Simulationsprozesse noch deren Reihenfolge, in der es deren Zustände zu bewerten hat. Während der Abarbeitung darf es trotzdem nicht zu einer Vermischung von Daten der einzelnen Simulationsprozesse kommen. Daher ist es sehr wichtig, dass das Probabilistik-Modul keine dieser Daten intern zwischenspeichert sondern Werte mit eindeutigem Bezug zu einem Simulationsprozess geeignet ablegen kann. Eine ähnliche Problemstellung ergibt sich für das Steuerungsmodul: Dieses muss für eine Zustandsbewertung durch das Probabilistik-Modul eine aktuelle Momentaufnahme aller Prozess- und Systemgrößen auf einmal zur Verfügung stellen. Da die Anzahl dieser Größen für realistische Simulationen sehr groß werden kann, ist es erforderlich, die Daten in einer geeignet organisierten Indexstruktur bereitzustellen. Diese Indexstruktur wurde als sogenannte Hashtabelle realisiert /KLO14/.

Hashtabellen sind besonders geeignet, um große Datenmengen zu verwalten, und zeichnen sich durch eine normalerweise konstante Zugriffszeit aus. Dadurch ist der Zeitaufwand, um Werte zu lesen oder zu schreiben, praktisch unabhängig von der Anzahl der verwalteten Elemente. Weitere Details zu Hashtabellen findet man in /OTT02/.

## **5.1.2      Programmerweiterungen in ATHLET und MCDET zur effizienten Kopplung beider Programme**

Um ein Rechenprogramm anzu steuern und effizient koppeln zu können, muss es die im Abschnitt 5.1.1.3 beschriebenen Voraussetzungen erfüllen. Für ein Rechenprogramm, das im Bewusstsein dieser Anforderungen entwickelt wurde, stellt deren Erfüllung kein großes Problem dar. Viel schwieriger ist es, einen seit vielen Jahren entwickelten Bestandscode wie ATHLET mit der entsprechenden Funktionalität nachzurüsten, da hierfür auch Codeteile überarbeitet werden müssen, die hinsichtlich Programmverhalten und numerischer Stabilität sensibel auf Änderungen reagieren.

Es wurde daher ein Konzept erarbeitet, das die Eingriffe in den bestehenden Rechencode so gering wie möglich hält und trotzdem alle notwendigen Erweiterungen einfach, kompakt und möglichst modular umfasst. Eine zu diesem Zweck neu entwickelte Kommunikationsbibliothek kapselt dabei alle für Steuerung und Datenzugriff notwendigen Datenstrukturen und stellt diese dem Rechencode in einem einfach zu handhabenden Interface zur Verfügung. Dadurch können bereits die Forderungen nach Modularität und einfacher Verwendung erfüllt werden. Für die Implementierung dieser Bibliothek mussten allerdings einige Grundsatzentscheidungen getroffen werden. Eine der wichtigsten war die Wahl der Sprache, in der die Kernfunktionalität realisiert werden sollte. Da, wie im Fall von ATHLET, der nachzurüstende Rechencode ausschließlich in Fortran implementiert ist, war die zentrale Anforderung, die benötigten Datenstrukturen möglichst einfach und direkt von Fortran aus verwenden zu können.

Als Programmiersprache ist Fortran zum Lösen numerischer Probleme optimiert, bietet darüber hinaus aber keinerlei Unterstützung zur Datenorganisation durch erweiterte Datenstrukturen. Natürlich besteht an dieser Stelle die Möglichkeit, den Kern der Bibliothek in C++ zu implementieren und so auf eine Fülle von optimierten Datenstrukturen zurückgreifen zu können. Der Zugriff aus Fortran könnte dann durch ein entsprechendes Interface ermöglicht werden. Gerade die Verwaltung von Zeichenketten variabler Länge und Datenelementen unbekannter Anzahl würde durch die interne Verwendung dynamischer C++-Datencontainer, wie Listen und Hashtabellen, sehr vereinfacht.

Die Probleme dieses Ansatzes zeigen sich allerdings bei genauerer Betrachtung: Bedingt durch die unkonventionelle Art, in der Fortran Pointer- und dynamisch

reservierbare (allocatable) Array-Typen im Speicher ablegt, kann sich ein geeignetes Fortran-Interface nicht auf eine reine Umsetzung von Funktionsaufrufen beschränken sondern muss zusätzlich eine ganze Reihe von Konvertierungen übernehmen. Zum Beispiel speichern Fortran-Pointer nicht nur Adressen sondern auch Informationen über Rang und Dimensionierung der Zielobjekte. Dadurch ist der Speicherbedarf eines Pointers von der Dimensionierung seines Ziels abhängig und kann unter Umständen mehrere hundert Bytes betragen! Für die Speicherung eines Fortran-Pointers in einer C++-Datenstruktur muss die gesamte Information mitabgelegt werden, um ihn bei einem Lookup vollständig wiederherstellen zu können. Fortran bietet bislang keine generische Möglichkeit diese Information verlässlich portabel abzufragen. Deshalb bleibt für die Realisierung nur die Bereitstellung der entsprechenden Funktionen für alle im Simulationscode verwendeten Datentypen (Überladung), was den Rahmen eines reinen Zugriffs-Interfaces bei weitem sprengt. Zu den Schwierigkeiten in Handhabung und Pflege einer zweisprachig<sup>1</sup> implementierten Bibliothek kommt auch, dass vorkompilierte Fortran-Interfaces im Allgemeinen nicht von alternativen Compilern verwendet werden können.

Vor dem Hintergrund dieser Probleme schien es einfacher und für die Zukunft weitaus wartungsfreundlicher, die benötigten Datenstrukturen komplett in Fortran zu realisieren und die dafür erstellte Modulschnittstelle direkt im Rechenprogramm einzubinden. Bei der Implementierung als dynamisch gelinkte Bibliothek wurde im Fortran-Code großer Wert auf die Einhaltung der Kompatibilität zur Programmiersprache C gelegt. Da deren Mechanismen als Grundlage in praktisch allen zurzeit relevanten Sprachen vorkommen, ist die in der Bibliothek enthaltene Funktionalität von fast jeder beliebigen Sprache aus verwendbar. Dadurch wird ein Datenzugriff von außen effektiv vom Fortran-Code, z. B. von ATHLET, entkoppelt und kann in der am besten für eine bestimmte Problemstellung geeigneten Programmiersprache umgesetzt werden. Mit Hilfe dieser Technik war es möglich das MCDDET-Steuerungsmodul in Python, einer höheren und sehr viel flexibleren Programmiersprache zu entwerfen.

---

<sup>1</sup> Genau genommen kommen zu den C++- und Fortran-Teilen noch das zum portablen Linken notwendige C-Interface hinzu.

### 5.1.2.1 Programmiererweiterungen in MCDET Modulen

Die Implementierung eines Steuerungsmoduls (Scheduler) erfordert die Nutzung diverser Techniken zur Prozessverwaltung und synchronisierten Kommunikation. Hieraus resultierte die Entscheidung, Python als Programmiersprache für die Realisierung des gesamten Steuerungsmoduls zu verwenden. Als universell einsetzbare Sprache, die durch ihre hohe Verfügbarkeit mittlerweile sehr weit verbreitet ist, unterstützt Python bereits viele dieser Techniken, die in anderen Sprachen, z. B. Fortran, nur sehr mühsam umgesetzt werden könnten. Ein weiteres und wichtiges Argument dafür, das zentrale Steuerungssystem in Python umzusetzen, war dessen hervorragende Unterstützung zur Einbindung von Code-Modulen, die in anderen Sprachen entwickelt wurden.

Die MCDET-Algorithmen wurden von jeher als eigenständiges Modul in Fortran implementiert und werden auch weiterhin als solches gewartet und weiterentwickelt. Für die Einbindung dieses Probabilistik-Moduls in das MCDET-Steuerungsmodul ist eine programmiersprachenübergreifende Datenorganisation notwendig. Diese konnte leicht über die im vorherigen Abschnitt beschriebene Kommunikationsbibliothek realisiert werden und erlaubt MCDET eine flexible Ablage von Daten zu den Bewertungen der Ereignispfade.

Für den Datenaustausch zwischen Probabilistik-Modul und den ATHLET Simulationsprozessen sind sogenannte Simulator-Variable (benötigte System- und Prozessgrößen) vorgesehen. Diese werden vor Beginn der Simulationsläufe in der MCDET-Eingabedatei jeweils mit ihrem Namen und einem Anfangswert initialisiert. Die Namen sollten dabei mit den in ATHLET verwendeten Namen für die betreffenden Größen (z. B. GCSM-Signale) übereinstimmen. Sie sind wichtiger Bestandteil einer Hashtabelle, die separat für jeden ATHLET Simulationsprozess angelegt wird. Eine solche Hashtabelle (siehe Abschnitt 5.1.1.4) ermöglicht beteiligten Programmen (Probabilistik-Modul, Steuerungs-Programm, ATHLET Simulationsprozess) den schnellen Zugriff auf die aktuellen Werte der in ihr abgelegten Datenobjekte. Damit können die prozessspezifischen Werte der Simulator-Variablen, die die Grundlage für die Berechnungen von MCDET bilden, unmittelbar bereitgehalten und bei Bedarf geändert werden, ohne dass sie zu Lasten der Rechenzeit auf entsprechende Dateien geschrieben und von dort wieder gelesen werden müssen.

Neben den Simulator-Variablen mussten weitere Datenobjekte in den prozessspezifischen Hashtabellen abgelegt werden. Dazu gehören z. B. die epistemischen Größen, die aleatorischen Größen, die über Monte Carlo Simulation berücksichtigt werden, die Eintrittswahrscheinlichkeit für die gerade berechnete Sequenz oder die Nummer des Ereignisbaums, zu dem die gerade berechnete Sequenz gehört.

Prozessspezifische Zwischenergebnisse, die bisher auf Dateien geschrieben und für die spätere Auswertung und grafische Darstellung entsprechend gelesen wurden, werden jetzt ebenfalls in Hashtabellen abgelegt. Dadurch wird sowohl die I/O-Last (Ablaufverzögerungen durch notwendige Festplattenzugriffe) reduziert als auch die Verwaltung entsprechender Steuerdateien vermieden.

#### **5.1.2.2 ATHLET-Treiber**

Wie in Abb. 5.1 dargestellt, ist jeder Task ein Treiberobjekt (Driver) zugeordnet, welches die abstrakten Befehle des MCDDET-Steuerungsmoduls für das gekoppelte Rechenprogramm übersetzt. Als konkretes Beispiel hierfür stellt der ATHLET-Treiber also das Bindeglied zwischen MCDDET-Steuerungsmodul und ATHLET dar. Auf Anforderung durch das Steuerungsmodul startet der Treiber die ATHLET-Simulation in einem separaten Prozess. Im weiteren Verlauf kontrolliert er diesen über einen zur Kommunikation zwischen den Prozessen (IPC) geeigneten Datenkanal. Sowohl die Art dieses Kanals als auch die Form und Reihenfolge der darüber ausgetauschten Befehle und Daten, das sog. Protokoll, hängen von den Eigenschaften des angebundnen Rechenprogramms ab. Entsprechend den Fähigkeiten des Rechenprogramms kann dieser Kanal aus einfachen Befehlsdateien oder auch einer Socket-Verbindung über Netzwerk bestehen. Im Fall von ATHLET wurde dieser Kanal als Netzwerkverbindung realisiert, zum einen um die automatische Synchronisierung nutzen zu können und zum anderen um den Treiber grundsätzlich auf verteiltes Rechnen vorzubereiten.

#### **5.1.2.3 Programmiererweiterungen in ATHLET**

Abschnitt 5.1.1.3 beschreibt die Anforderungen, die ein Rechenprogramm erfüllen muss, um mit dem MCDDET-Steuerungsmodul gekoppelt werden zu können. Als ein Programm, das von jeher als möglichst eigenständig entwickelt wurde, erfüllt ATHLET diese Anforderungen nur zum Teil. Insbesondere der Datenzugriff von außen ist nur

sehr eingeschränkt möglich. Die bestehenden Möglichkeiten, um auf den Zustand der Simulation zuzugreifen, wurden ehemals für die Verwendung mit dem Analysesimulator ATLAS konzipiert und basieren auf der Ausgabedatei (.pd-Datei), die den Vektor der Plotgrößen enthält. Allerdings kann i. d. R. aufgrund des hohen Datenvolumens der Plotvektor nicht nach jedem Zeitschritt ausgegeben werden, was aber notwendig wäre, um MCDET in der erforderlichen Granularität den Zustand der Simulation bewerten lassen zu können.

Um ATHLET durch das Steuerungsmodul flexibel ansteuern und gleichzeitig die im Code nötigen Änderungen minimal halten zu können, wurde der Ansatz gewählt, ATHLET in ein Python-Kontrollprogramm einzubinden. Der zum Ablauf von Simulationen notwendige Prozess wird dabei durch den vom Kontrollprogramm gestarteten Python-Interpreter bereitgestellt. Zwar erfordert dieses Vorgehen, dass ATHLET als dynamisch ladbare Bibliothek vorliegt. Allerdings wird es so viel einfacher möglich, den bestehenden Code auf eine Ansteuerung per MCDET und verteiltes Rechnen umzurüsten, weil die in ATHLET fehlenden Schnittstellenfunktionen leicht im Kontrollprogramm nachgebildet werden können. Beispielsweise war es so nicht notwendig, das Protokoll für die Kommunikation mit dem Treiber innerhalb von ATHLET, und damit mühsam in Fortran, zu implementieren. Vielmehr konnte dieser Teil im Kontrollprogramm realisiert und dabei auf eine Fülle von bestehenden Python-Bibliotheken zurückgegriffen werden. ATHLET musste hierfür lediglich an einigen Stellen an die Bedingungen zur Ausführung als dynamische Bibliothek angepasst werden. So wurden zum Beispiel alle prozessbeendenden Maßnahmen durch eine erweiterte Ausnahmebehandlung (exception handling) ersetzt. Die in ATHLET realisierte Art der Fehlerbehandlung hätte bei einem Simulationsabbruch auch gleichzeitig den aufrufenden Prozess des Kontrollprogramms beendet, ohne die im Treiberprotokoll vorgesehenen Schritte einzuhalten.

Darüber hinaus verlangte der Zugriff des Kontrollprogramms auf die Variablen von ATHLET einige Erweiterungen in den Initialisierungsroutinen von ATHLET. Hierbei wurde die bereits beschriebene Kommunikationsbibliothek verwendet, um den internen Zustand durch eine Hashtabelle abzubilden. Da diese Hashtabelle alle internen Variablen von ATHLET referenziert, kommt das Kontrollprogramm ohne Kenntnisse über ATHLET-interne Speicherorganisation aus und kann allein über symbolische Namen auf sämtliche Zustandsgrößen lesend und schreibend zugreifen. Dadurch

wurde es sehr einfach möglich, den Simulationsablauf zu kontrollieren und alle für das Treiberprotokoll erforderlichen Funktionen zu implementieren.

### **5.1.3 Grafische Aufbereitung der mit ATHLET und MCDET gewonnenen Ergebnisse**

In diesem Vorhaben wurde damit begonnen, ein benutzerfreundliches Programmsystem zur Aufbereitung der umfangreichen Ergebnisse aus einer probabilistischen Dynamikanalyse mit MCDET und ATHLET (bzw. jedem anderen Rechenprogramm, das wie ATHLET einen Prozessablauf simuliert) zu entwickeln. Das Programmsystem bietet verschiedene Optionen sowohl zur Auswertung als auch zur grafischen Darstellung.

Um einen Überblick zu geben, in welcher Form die umfangreichen Daten einer probabilistischen Dynamikanalyse mit MCDET vorliegen, wird nachfolgend zunächst die Struktur der Ergebnisse einer MCDET-Simulation beschrieben. Anschließend wird ein Konzept zur grafischen Darstellung der Zeitverläufe von Prozessgrößen vorgestellt, die durch das verwendete Rechenprogramm bereitgestellt werden. Zur Veranschaulichung werden in Abschnitt 5.1.4 verschiedene Beispiele aufgeführt.

#### **5.1.3.1 Ergebnisstruktur von MCDET-Simulationen**

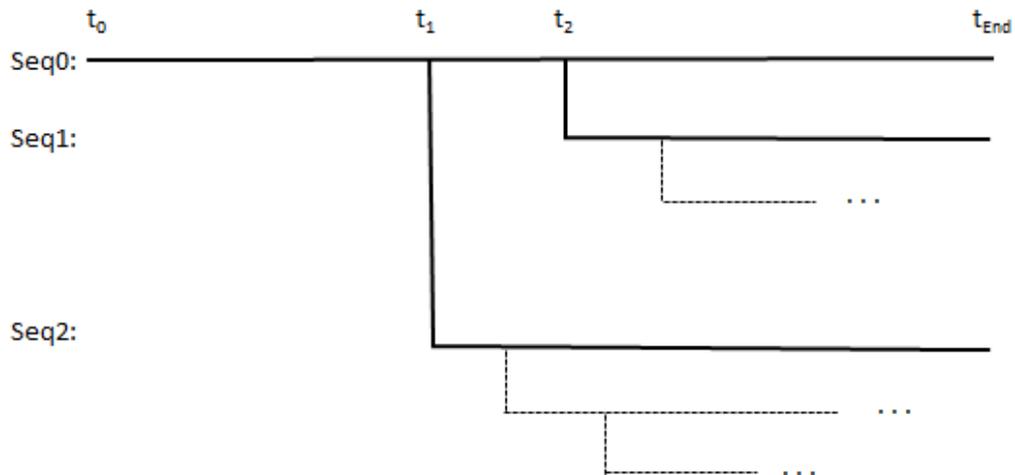
Im Verlauf einer Simulation mit MCDET und ATHLET ergeben sich viele unterschiedliche Prozessabläufe mit den dazugehörigen unterschiedlichen Ergebnisdateien. Für jeden Prozessablauf werden u. a. zwei Ergebnisdateien erzeugt, die für die MCDET-Analyse von besonderem Interesse sind. Dies ist zum einen die ATHLET Ausgabedatei, die die Zeitverläufe der Prozessgrößen enthält, und zum anderen die Datei mit den stochastischen Ereignissen, die den Ablauf beeinflusst haben. Letztere beinhaltet außerdem die Wahrscheinlichkeiten für den jeweiligen Ablauf.

Aus Gründen der Rechenzeiterparnis wird bei den MCDET-Simulationen für die einzelnen Abläufe nicht die ganze Sequenz vom Beginn bis zum Ende des Ablaufs berechnet, sondern nur diejenige Teilsequenz, die an einem Verzweigungspunkt startet. Dies wird in Abb. 5.2 anhand von drei Sequenzen Seq0, Seq1 und Seq2 veranschaulicht. Wie zu erkennen ist, wird gemäß der MCDET-Methodik nur eine

Sequenz - die sogenannte Basissequenz – vollständig vom Beginn des Ablaufs  $t_0$  bis zum Rechenzeitende  $t_{\text{End}}$  gerechnet. Die von der Basissequenz (Seq0) abzweigenden Sequenzen (Seq1 und Seq2) beschreiben dabei jeweils andere Randbedingungen, die sich aufgrund von stochastischen Ereignissen ergeben. Diese Sequenzen werden lediglich von dem Zeitpunkt an gerechnet, zu dem sie von der vorhergehenden Sequenz (hier: Basissequenz) abzweigen.

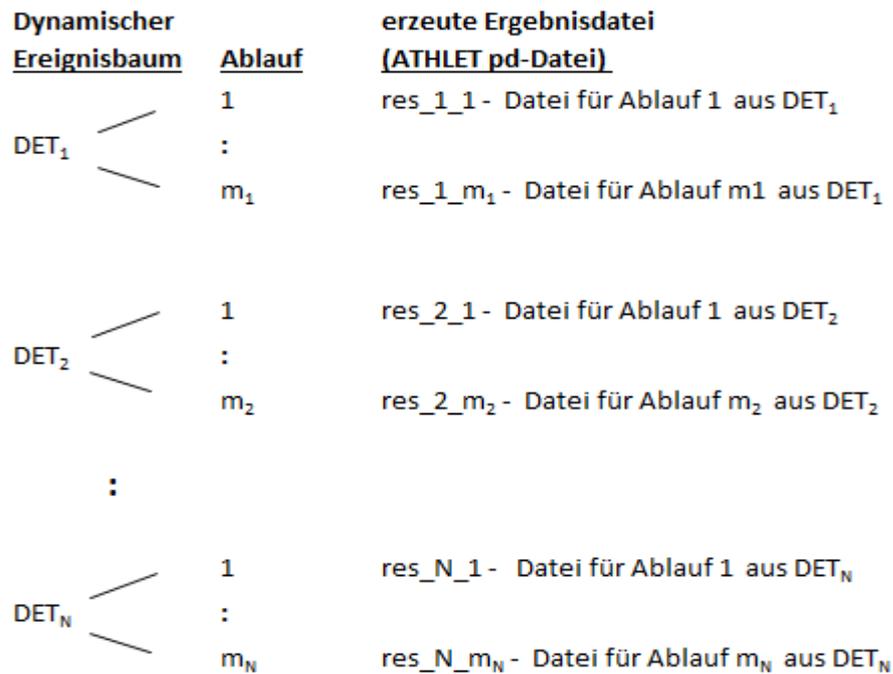
Dazu sei angenommen, dass durch MCDET die Verzweigungspunkte für die Zeitpunkte  $t_1$  und  $t_2$  ermittelt wurden. An diesen Verzweigungspunkten treten zufällige Ereignisse ein, die gegenüber der Basissequenz (Seq0) veränderte Randbedingungen zur Folge haben. In Seq0 sei z. B. die Situation gegeben, dass das Abblaseregelventil (ARV) während seiner Anforderungszyklen im Verlauf der automatischen Druckentlastung nicht ausfällt. Der Zeitpunkt  $t_1$  definiert einen Verzweigungspunkt, bei dem Seq2 von Seq0 abzweigt. Seq2 wird von  $t_1$  bis  $t_{\text{End}}$  unter der Bedingung gerechnet, dass das Abblaseregelventil ab dem Zeitpunkt  $t_1$  geschlossen ausgefallen ist. Die Teilsequenz zwischen  $t_0$  und  $t_1$  ist für Seq0 und Seq2 identisch und wird für Seq2 nicht nochmals berechnet. D. h., in der für Seq2 erzeugten Ergebnisdatei sind die Zeitverläufe der Prozessgrößen nur für die berechnete Teilsequenz von  $t_1$  bis  $t_{\text{End}}$  aufgeführt. Es ist für die Auswertung jedoch zu berücksichtigen, dass zum Ablauf von Seq2 auch die Teilsequenz zwischen  $t_0$  und  $t_1$  gehört, die jedoch nur für Seq0 berechnet wurde.

Seq1 beschreibe die Situation, dass das Abblaseregelventil zum Zeitpunkt  $t_2$  offen ausfällt. Entsprechend wird in Seq1 der Ablauf von  $t_2$  bis  $t_{\text{End}}$  unter der Bedingung gerechnet, dass das Abblaseregelventil ab dem Zeitpunkt  $t_2$  offen ausgefallen ist. Die Teilsequenz zwischen  $t_0$  und  $t_2$  wird für Seq1 nicht nochmal berechnet, da sie bereits bei der Berechnung des Ablaufs von Seq0 berücksichtigt wurde. In der Ergebnisdatei für Seq1 sind somit nur die Verläufe von  $t_2$  bis  $t_{\text{End}}$  aufgeführt. Analog zu Seq2 ist für die Auswertung von Seq1 zu berücksichtigen, dass die Teilsequenz von  $t_0$  bis  $t_2$ , die für Sequenz Seq0 gerechnet wurde, auch zum Ablauf von Seq1 gehört.



**Abb. 5.2** Skizze der durch MCDET berechneten Prozessabläufe

Generell wird in einer MCDET-Analyse eine Stichprobe von  $N$  Dynamischen Ereignisbäumen  $DET_1, \dots, DET_N$  erzeugt. In jedem einzelnen Dynamischen Ereignisbaum  $DET_i$ ,  $i=1, \dots, N$ , werden  $m_j$  unterschiedliche Abläufe gerechnet. Zu jedem Ablauf wird vom Rechenprogramm (hier ATHLET) eine Ergebnisdatei mit den dazugehörigen zeitlichen Verläufen von Prozessgrößen erstellt. Die Skizze in Abb. 5.3 veranschaulicht die erzeugten Ergebnisdateien (z. B. die pd-Dateien von ATHLET).



**Abb. 5.3** Übersicht über die im Verlauf von MCDET-Simulationen erzeugten Dateien für die anschließende Ergebnis-Auswertung

Zusätzlich zur Datei res<sub>i\_j</sub> (i=1, ..., N, ..., j=1, ..., m<sub>i</sub>), die vom Rechenprogramm pro gerechneten Ablauf angelegt wird (wie die pd-Dateien von ATHLET), wird von MCDET eine weitere Datei mit den stochastischen Ereignissen, den Zeitpunkten ihres Auftretens und den jeweiligen Eintrittswahrscheinlichkeiten angelegt.

Um die berechneten Prozessgrößen eines Ablaufs mit den zugehörigen Ereignissen und Wahrscheinlichkeiten zu verbinden, müssen die entsprechenden Informationen aus den entsprechenden Dateien herausgelesen und in Abhängigkeit der gewünschten Auswertung durch geeignete Post-Processing Programme verarbeitet werden.

### 5.1.3.2 Grafische Darstellung von Zeitverläufen von Prozessgrößen

Die Entwicklung von Post-Processing Programmen zur grafischen Darstellung der Ergebnisse aus den MCDET-Simulationen spielte innerhalb der bisherigen Entwicklung nur eine untergeordnete Rolle. So wurden Anweisungen, die für die Erstellung spezieller Grafiken notwendig waren, bisher im Quellcode der Post-Processing Programme spezifiziert, der danach immer neu kompiliert und gelinkt werden musste.

Da MCDET einem breiteren Benutzerkreis zugänglich gemacht werden soll, wurde damit begonnen, das Post-Processing und insbesondere auch die grafische Aufbereitung von Ergebnissen einfacher und benutzerfreundlicher zu gestalten. Die erste implementierte Option bezieht sich auf die grafische Darstellung von zeitlichen Verläufen von Prozessgrößen. Die Besonderheit dabei ist, dass Bedingungen stochastischer Einflussgrößen spezifiziert werden können, unter denen die Prozessverläufe dargestellt werden.

Für die grafische Darstellung der Ergebnisse aus einer MCDET-ATHLET Analyse wurde das freie Java Grafikwerkzeug AptPlot ausgewählt. AptPlot ist ein 2D-Grafiksystem, das bei der NRC (Nuclear Regulatory Commission) entwickelt wurde. AptPlot verfügt über eine komfortable grafische Benutzeroberfläche zur nachträglichen Editierung von bereits erstellten Abbildungen.

In einem ersten Schritt wurde ein Format spezifiziert, um alle diejenigen Informationen, die für bestimmte grafische Darstellungen erforderlich sind, in einer Eingabedatei zusammen zu stellen. Zusätzlich wurde ein Programm erstellt, das diese Informationen liest und verarbeitet. Um die Eingaben zum Post-Processing benutzerfreundlicher und einfacher zu gestalten, soll in Nachfolgeprojekten eine GUI (Graphical User Interface) entwickelt werden, in der die Informationen abgefragt und automatisch abgelegt werden. Dadurch wird gleichzeitig die Fehleranfälligkeit bei der Eingabe verringert.

Im Folgenden werden die Eingabeinformationen beschrieben, die zur grafischen Aufbereitung zeitlicher Verläufe von Prozessgrößen benötigt werden. Die Daten, die grafisch dargestellt werden sollen, sind – wie in Abschnitt 5.1.3.1 beschrieben – in verschiedenen Dateien gespeichert. Diese Dateien müssen zunächst spezifiziert werden. Dies erfolgt durch die Angaben in Abb. 5.4.

```
#####
##### POST-PROCESSING VON ERGEBNISSEN EINER MCDET-ANALYSE #
#####
#-----#
# Anzahl der | Pfad des Files (Spalte 8-47): | Format: #
# Parameter: | - sequence-File aus MCDET | #
# | - Ergebnisfiles aus deter- | #
# | ministischen Rechenprogramm | #
#-----#

46 C:\MCDET-SBO\Event.prn formatted
83 C:\MCDET-SBO\ATHLET.run.pd unformatted
```

**Abb. 5.4** Spezifikation der Dateien mit den Daten für die grafische Aufbereitung

Folgende Dateien müssen angegeben werden:

- die von MCDET erzeugte Ereignisdatei (hier: ‚Event.prn‘), in der die stochastischen Ereignisse, die zu dem jeweiligen Ablauf geführt haben, aufgeführt sind. Für jeden gerechneten Ablauf kann aus der Datei der Zeitpunkt gelesen werden, wann welche Ereignisse mit welcher Wahrscheinlichkeit aufgetreten sind. Um spezielle Daten aus der Ereignisdatei herauslesen zu können, müssen dem Post-Processing Programm Informationen darüber gegeben werden, welche Ereignisse bzw. Ereigniskombinationen für die gewünschten Resultate und grafischen Darstellungen von Interesse sind.
- Die vom Rechenprogramm (z. B. ATHLET) erzeugte Datei (hier: ATHLET.run.pd), die die zeitlichen Verläufe von Prozessgrößen für den jeweiligen Ablauf beinhaltet. Aus dieser Datei können bestimmte Funktionen bzgl. der jeweiligen Prozessgrößen berechnet werden, wie z. B. der maximale Wert einer Prozessgröße im jeweiligen Ablauf, zu welchem Zeitpunkt der Maximalwert erreicht wurde, zu welchem Zeitpunkt die Prozessgröße zum ersten Mal einen bestimmten Größe über- oder unterschreitet, etc.

Nach der Spezifikation der Dateien ist anzugeben, welche Option für die grafische Aufbereitung durchgeführt werden soll. In Abb. 5.5 wird die Option 5 angegeben, die besagt, dass eine grafische Darstellung von Zeitverläufen von Prozessgrößen erstellt werden soll. Zusätzlich ist noch angegeben, wieviel Abbildungen insgesamt und pro Seite dargestellt werden sollen. Dabei hat man die Auswahl zwischen 1, 2 oder 4 Abbildungen pro Seite.

```

#-----#
# Auswahl der Option: | Gesamtzahl der | Anzahl der Abb.   #
# 1 - .....         | Abbildungen:   | pro Seite:       #
# 2 - .....         |                 | (Es sind 1, 2 oder 4 #
# 3 - .....         |                 | Abb. auf einer Seite #
# 4 - .....         |                 | möglich)         #
# 5 - Zeitverläufe von |                 |                   #
#   Prozessgrößen     |                 |                   #
#-----#
                5                3                1

```

**Abb. 5.5** Spezifizierung der Option für die grafische Aufbereitung

Pro gewünschter Abbildung sind weitere Angaben zu machen, die im Folgenden beschrieben werden.

Zunächst müssen die Prozessgrößen angegeben werden, deren zeitliche Verläufe dargestellt werden sollen. Z. B. wurde in Abb. 5.6 angegeben, dass auf der x-Achse der Parameter 1 (Zeit) und auf der y-Achse der Parameter 3 der Ergebnisdatei darzustellen ist.

```
##### Grafik 1 #####
#-----#
# Parameterindex der zu      #
# plottenden Prozessgrößen  #
#   x-Wert      y-Wert      #
#-----#
#           1           3
```

**Abb. 5.6** Spezifikation der Prozessgrößen

Eine Besonderheit bei der grafischen Aufbereitung ist, dass man die Verläufe von Prozessgrößen unter Einhaltung bestimmter Bedingungen darstellen kann. Diese Bedingungen sind durch das Eintreten bestimmter stochastischer Ereignisse gegeben. Z. B. kann man angeben, dass diejenigen Verläufe dargestellt werden sollen, bei denen bestimmte Sicherheitssysteme geschlossen versagt haben. Um diese Bedingungen zu spezifizieren, müssen die Informationen aus der von MCDET erzeugten Ereignisdatei (hier z. B. Event.prn) gelesen werden.

In Abb. 5.7 wird ein Beispiel für eine Bedingung bzgl. eines Station-Blackout Szenarios (SBO) gegeben. Die Bedingung legt fest, dass nur diejenigen Zeitverläufe einer Prozessgröße dargestellt werden sollen, bei denen die Spannung früher als 6000 s nach Totalausfall der Eigenbedarfsversorgung wiederhergestellt wurde und das Abblaseregelventil (ARV) während der automatischen Druckentlastung geschlossen versagt hat.

```
#-----#
# Anzahl der Bedingungsblöcke | Spezifikation der  #
# für Parameter bzgl. Ereignisgrößen | Bedingungen:      #
#-----#
#           3           45 < 6000   11 = 0   12 = 0
```

**Abb. 5.7** Spezifikation von Bedingungen, unter denen Verläufe von Prozessgrößen dargestellt werden

Die Spezifikation von Bedingungen besteht aus verschiedenen Bedingungsblöcken, die sich auf Parameter in der von MCDET erzeugten Ereignisdatei beziehen. In Abb. 5.7 sind 3 Bedingungsblöcke angegeben. Der erste Bedingungsblock ‚45 < 6000‘ besagt,

dass diejenigen Abläufe ausgewählt werden, bei denen der Parameter Nr. 45 aus der Ereignisdatei *Event.prn* einen Wert  $< 6000$  hat. Die nächsten Bedingungsblöcke ,11 = 0' und ,12 = 0' geben an, dass Abläufe ausgewählt werden sollen, bei denen die Parameter Nr. 11 und Nr. 12 der Ereignisdatei den Wert 0 haben. Dabei gibt Parameter Nr. 45 den Zeitpunkt der Spannungswiederkehr an und die Parameter Nr. 11 und Nr. 12 den Zustand des Abblaseregelventils. Parameter Nr. 11 ist der Faktor (ARV\_F) auf den Zustand des Ventils (StateARV) und Parameter Nr. 12 ist der additive Term (ARV\_A). Es gilt  $\text{StateARV} = \text{ARV\_F} \cdot (\text{StateARV}) + \text{ARV\_A}$ .

Weitere vorzunehmende Eingaben zur Erstellung einer Grafik sind in Abb. 5.8 aufgeführt.

```
#-----#
# Titel der Abbildung #
#-----#

Spannungswiederkehr < 6000 s und DH-Abblaseventil öffnet nicht

#-----#
# Title der x-Achse #
#-----#

Zeit (s)

#-----#
# Titel der y-Achse #
#-----#

H2-Masse (kg)
```

**Abb. 5.8** Spezifikation von Titel und Achsen-Beschriftungen

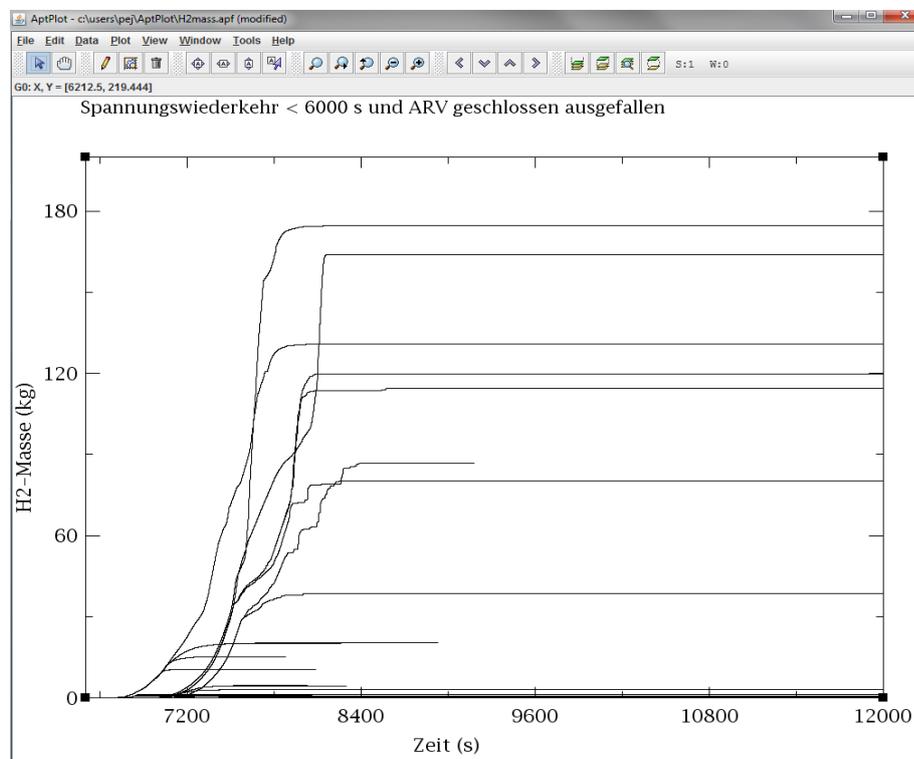
#### 5.1.4 Demonstrationsbeispiele der grafischen Darstellung zeitlicher Verläufe von Prozessgrößen

In diesem Abschnitt werden verschiedene Beispiele zur grafischen Darstellung von zeitlichen Verläufen von Prozessgrößen gegeben. Die Beispiele beziehen sich auf eine Analyse eines Station-Blackout Szenarios mit Spannungswiederkehr in der verschiedene stochastische Ereignisse berücksichtigt wurden, wie z. B. zufälliger Ausfallzeitpunkt der Abblaseregelventile SV1 und SV2 im geschlossenen bzw. offenen Zustand oder zufälliger Zeitpunkt der Spannungswiederkehr. Obwohl die MCDET-Simulationen in Verbindung mit dem Rechenprogramm MELCOR durchgeführt wurden,

ist die in diesem Vorhaben entwickelte Option zur grafischen Darstellung analog auf potentielle MCDET-ATHLET bzw. MCDET- ATHLET-CD- Analysen anwendbar.

### Beispiel 1:

In diesem Demonstrationsbeispiel sollen die zeitlichen Verläufe der gebildeten H<sub>2</sub>-Masse unter der Bedingung dargestellt werden, dass die Spannungswiederkehr innerhalb von 6000 s nach dem Totalausfall der batterieunabhängigen Eigenbedarfsversorgung wiederhergestellt wurde und das Abblaseregelventil während der automatischen Druckentlastung geschlossen versagt. Die dazu erforderlichen Eingabedaten sind im Abschnitt 5.1.3.2 beschrieben. Anhand der Eingaben wird mit AptPlot die in Abb. 5.9 dargestellte Grafik erzeugt.



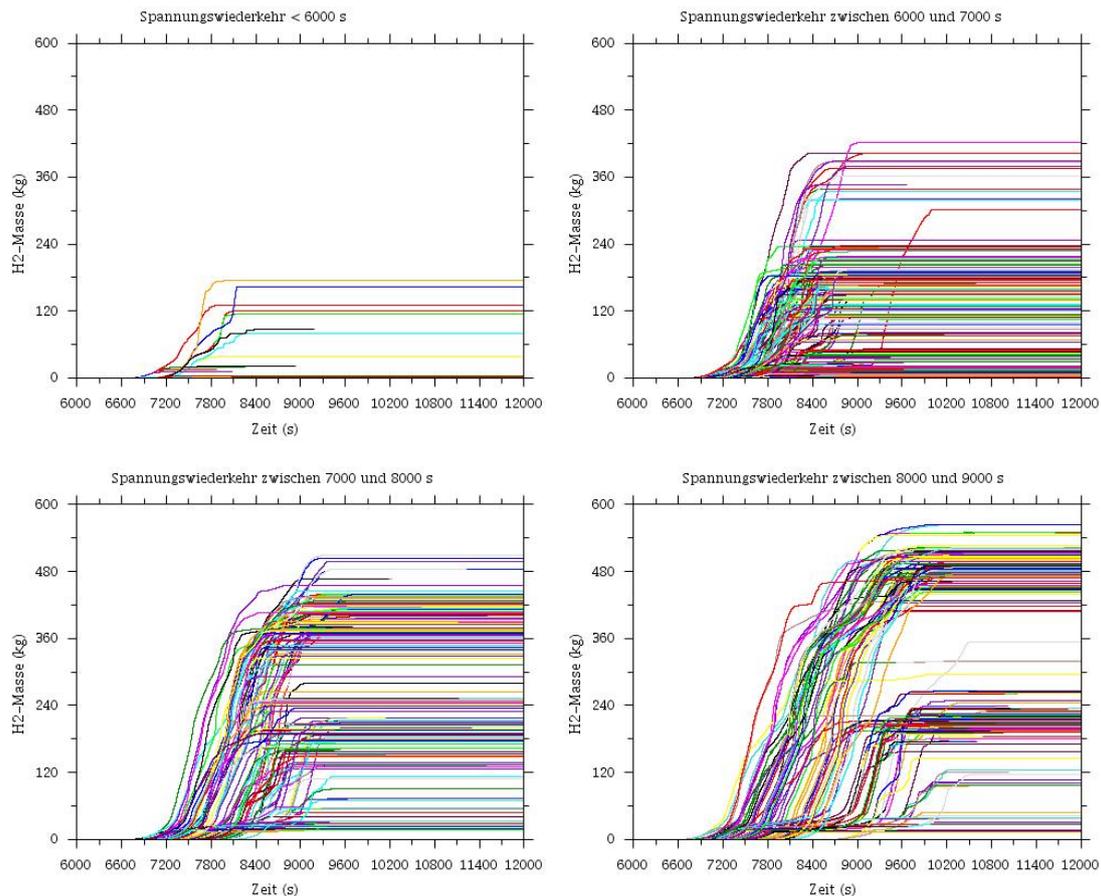
**Abb. 5.9** Darstellung der Verläufe der H<sub>2</sub>-Masse

Bei Bedarf bietet die GUI von AptPlot noch zahlreiche Optionen zur nachträglichen Bearbeitung der grafischen Darstellung, wie z. B. Formatierung der Kurven und Achsen, Erstellung einer Legende etc.. Die endgültige Grafik kann schließlich in unterschiedlichen Bild-Formaten abgespeichert werden, um in Veröffentlichungen eingefügt zu werden.

**Beispiel 2:**

In Beispiel 1 wurde die Entwicklung der H<sub>2</sub>-Masse für diejenigen Situationen dargestellt, in der die Spannung innerhalb von 6000 s nach dem Totalausfall der batterieunabhängigen Eigenbedarfsversorgung wiederhergestellt wurde und das DH-Abblaseregelventil während der automatischen Druckentlastung geschlossen versagt hat. In Beispiel 2 sollen zusätzlich zu diesen Verläufen auch die Verläufe dargestellt werden, bei denen die Spannung jeweils zwischen 6000 und 7000 s, 7000 und 8000 s und 8000 und 9000 s wiederhergestellt wurde. Die Verläufe der H<sub>2</sub>-Masse für die 4 Stufen der Spannungswiederkehrzeiten sollen jeweils in einer separaten Grafik dargestellt, aus Gründen einer besseren Vergleichbarkeit und Übersichtlichkeit jedoch auf einer Seite angeordnet werden. Neben den jeweiligen Spannungswiederkehrzeiten ist eine weitere Bedingung, dass nur diejenigen Verläufe der H<sub>2</sub>-Masse dargestellt werden, bei denen das Abblaseregelventil geschlossen versagt hat.

Die zugehörige Grafik ist in Abb. 5.10 dargestellt. Jeder dieser vier auf einer Seite dargestellten Plots kann über die Oberfläche von AptPlot nachträglich modifiziert werden.



**Abb. 5.10** Verläufe der H<sub>2</sub>-Masse unter 4 verschiedenen Bedingungen zum Zeitpunkt der Spannungswiederkehr bei geschlossenem Versagen des Abblaseregelventils

Der Vergleich der Kurvenverläufe in den vier Grafiken in Abb. 5.10 zeigt, dass sich bei zunehmender Spannungswiederkehrzeit höhere maximale H<sub>2</sub>-Massen ergeben. Obwohl die einfache Darstellung von Zeitverläufen von Prozessgrößen keine Aussagen über die Verteilung der maximal erzeugten H<sub>2</sub>-Massen in den jeweiligen Zeitbereichen der Spannungswiederkehr ermöglichen, kann diese Art der grafischen Darstellung dennoch einen ersten Überblick über den Einfluss stochastischer Ereignisse auf die zeitliche Entwicklung von Prozessgrößen liefern.

### 5.1.5 Zusammenfassung und Ausblick

Mit den im Vorhaben realisierten Weiterentwicklungen wurde eine weitgehend effiziente Kopplung von MCDET und ATHLET erreicht. Die MCDET-Module wurden derart modifiziert, dass sie auf die von ATHLET berechneten System- und Prozessgrößen unmittelbar zugreifen können. In ATHLET wurden alle erforderlichen

Anpassungen durchgeführt, damit es als dynamische Bibliothek durch das MCDET Steuerungssystem (bestehend aus Steuerungs- und Treiber-Modul) angesteuert werden kann. Außerdem wurde ein ATHLET-Treiberprogramm mit den erforderlichen Anweisungen zur Kommunikation mit den ATHLET-Simulationsprozessen entwickelt. Der Vorteil der entwickelten Kopplung von MCDET und ATHLET ist, dass durch die damit gewonnene Flexibilität schnell auf zukünftige Anforderungen reagiert werden kann.

Weiteren Entwicklungsbedarf gibt es in Bezug auf die für MCDET-Analysen benötigte Klon-Fähigkeit von ATHLET. Im Rahmen des Vorhabens RS1529 *Methodische Weiterentwicklungen und Anwendungen zur probabilistischen Dynamikanalyse* sollen weitere Entwicklungsarbeiten hierzu erfolgen.

Neben den genannten Entwicklungsarbeiten zur Kopplung von MCDET und ATHLET wurden ein geeignetes Konzept und darauf abgestimmte neue Programme zur grafischen Aufbereitung der mit MCDET und ATHLET gewonnenen Ergebnisse erstellt. Das Konzept sieht die Einbindung des vom NRC (Nuclear Regulatory Commission) entwickelten Grafiksystems *AptPlot* in das grafische Post-Processing vor. Als erste Option wurde die grafische Darstellung der zeitlichen Verläufe von Prozessgrößen implementiert. Die Besonderheit dabei ist, dass die Verläufe unter Bedingungen dargestellt werden können, die durch das Eintreten unterschiedlicher stochastischer Ereignisse gegeben sind. Die durchgeführten Arbeiten sind ein erster Schritt zur Entwicklung eines umfangreichen benutzerfreundlichen Post-Processing Systems für ATHLET-MCDET Analysen. Um das Post-Processing noch benutzerfreundlicher und einfacher zu gestalten, soll im Rahmen des Vorhabens RS1529 mit der Entwicklung einer entsprechenden grafischen Benutzeroberfläche begonnen werden.

Eine Erprobung der neuen Kopplung von MCDET und ATHLET anhand eines komplexen Anwendungsbeispiels wird im Vorhaben RS1529 erfolgen. Hierfür ist der Einsatz der Programme MCDET und ATHLET-CD geplant, deren Kopplung auf den hier beschriebenen Weiterentwicklungen aufbaut. Als Anwendungsfall soll ein nach Erkenntnissen der Reaktorunfälle von Fukushima Daiichi relevantes Unfallszenario mit Ausfall der externen Stromversorgung ('Station Black-Out') mit thermisch induziertem Dampferzeugerheizrohr-Versagen analysiert und bewertet werden.

## **5.2 Neue Sparse-Matrix Lösungsverfahren**

### **5.2.1 Startrechnung**

Die ATHLET-Startrechnung bestimmt ausgehend von wenigen Anwendereingaben den stationären thermohydraulischen Zustand des kompletten Systems. Im Falle einer Überbestimmtheit werden auch inkonsistente Anfangs- und Randbedingungen entsprechend angepasst. Zur Bestimmung der stationären Energieverteilung in durchströmten Systemen verwendet ATHLET ein Gauß-Eliminationsverfahren zur Lösung der Gleichungssysteme, das bei extrem großen Datensätzen sehr lange Rechenzeiten benötigt. Darum wurde testweise eine Bibliothek mit Sparse-Matrix Lösern eingebunden, um zu untersuchen, ob sich dadurch die Rechenzeit deutlich verkürzen lässt. Es stellte sich heraus, dass durch die Verwendung eines Sparse-Matrix Löser die für das Lösen der Gleichungssysteme benötigte Zeit um mehrere Zehnerpotenzen zurückgeht und nur noch einen vernachlässigbaren Anteil an der Gesamtrechenzeit hat. Die ausführlichen Ergebnisse und eine genaue Beschreibung der notwendigen Erweiterungen wurden in /WEY13/ dokumentiert.

#### **5.2.1.1 Gleichungslöser**

Um verschiedene Sparse-Matrix-Löser testen zu können wurde die LIS-Bibliothek (Library of Iterative Solvers, Version 1.3.33) eingebunden. Diese stellt alle modernen iterativen Löser (z. B. CG, BICG, GMRES,...) und Vorkonditionierer zur Verfügung. Eine genaue Beschreibung der Bibliothek findet man im zugehörigen Handbuch /LIS00/. Vorteil der LIS-Bibliothek ist, dass sie ohne große Änderungen in den ATHLET-Makefiles eingebunden werden konnte und im Gegensatz zu anderen Bibliotheken bereits einfach anzusprechende Schnittstellen zu Fortran besitzt.

#### **5.2.1.2 Implementierung in ATHLET**

Die ATHLET Subroutine DENTH berechnet die Enthalpie-Verteilung im System. Dafür muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Bisher wurde zum Lösen des Gleichungssystems die Subroutine DIMS aufgerufen, die ein Gaußverfahren mit partieller Pivotsuche verwendet. Da das Verfahren bei kleinen Systemen effizient und stabil arbeitet und nur bei größeren Systemen die Ausnutzung der dünnen Besetzung der

Matrix Vorteile bringt, wurde in DENTH eine Abfrage nach der Größe des Gleichungssystems (IHIMAX) eingebaut. Ab einer gewissen Größe von IHIMAX wird damit der Sparse-Matrix-Solver aktiviert. Zum Lösen des Gleichungssystems wird die neue Subroutine SPAMASOL aufgerufen, die als Schnittstelle zwischen ATHLET und der LIS-Bibliothek fungiert.

### 5.2.1.3 Ergebnisse

Als Testfall wurde der Datensatz *Oskarshamn-222ch-ss-24.in* verwendet, der einen Reaktorkern mit 222 Kernkanälen abbildet. Die einzelnen Kanäle wiederum bestehen jeweils aus 28 Kontrollvolumen, was insgesamt zu 6507 Leitungen im Datensatz führt. Zur Bestimmung der Rechenzeit des Gleichungslösers wurde die CPU-Zeit vor und nach dem Löser in der ATHLET Ausgabedatei (.out) ausgegeben:

```
DENTH START: CPU = 3.21220000000000 *****  
DENTH LIN. EQU. START: CPU = 3.39221100000000 *****  
DENTH: LINEAR EQUATION SOLVER DIMS called.
```

```
DENTH LIN. EQU. END: CPU = 143.148945000000 *****  
DENTH RETURN: CPU = 143.152946000000 *****
```

Der Löser braucht in diesem Fall also ca. 140 Sekunden. Die Startrechnung benötigte fünf Iterationen in denen der Löser jedes Mal auf fast die gleiche Rechenzeit von 140 Sekunden. Insgesamt betrug die Rechenzeit für die Startrechnung 747 Sekunden.

### Neuer Sparse-Matrix Löser

Der oben beschriebene Testfall *Oskarshamn-222ch-ss-24.in* wurde mit dem neuen Sparse-Matrix Löser auf demselben Rechner gerechnet. Hierbei betrug die komplette Rechenzeit nur 32 Sekunden. Noch deutlicher wird die Leistungsfähigkeit des neuen Lösers, wenn man die Rechendauer des Lösers allein betrachtet:

```
DENTH START: CPU = 1.21607601642609 *****  
DENTH: SPARSE MATRIX SOLVER USED.  
DENTH: ARRAY ANON0 EXTENDED! NNON0= 6283  
DENTH: ARRAY ANON0 EXTENDED! NNON0= 12565  
DENTH LIN. EQU. START: CPU = 1.56009697914124 *****  
DENTH: SPARSE-MATRIX SOLVER FROM THE LIS-LIBRARY CALLED.
```

Copyright LIS-LIBRARY: THE SCALABLE SOFTWARE INFRASTRUCTURE PROJECT.

PERFORMANCE OF SPARSE MATRIX SOLVER:

System siz, #Non 0 = 6282 12785

number of iterations = 2

double = 2

quad = 0

elapsed time = 1.049995422363281E-003

preconditioner = 1.537799835205078E-004

matrix creation = 1.907348632812500E-006

linear solver = 8.962154388427734E-004

rel. residual 2-norm = 1.570227879922375E-014

DENTH LIN. EQU. END: CPU = 1.56809794902802 \*\*\*\*\*

DENTH RETURN: CPU = 1.57209801673889 \*\*\*\*\*

Das einmalige Lösen des Gleichungssystems benötigte somit nur eine Zeit im Millisekundenbereich, also nur etwa ein zehntausendstel der Rechenzeit des bisherigen Löser (140 Sekunden).

#### 5.2.1.4 Fazit

Aufgrund der erzielten Ergebnisse ist beabsichtigt, einen Sparse-Matrix Löser für die Startrechnung dauerhaft in ATHLET zur Verfügung zu stellen. Da auch für die transiente Rechnung die Nutzung von externen Bibliotheken untersucht worden ist (siehe Kapitel 5.2.2), sollte nach Möglichkeit eine für beide Anwendungen gleichermaßen geeignete Löser-Bibliothek ausgewählt werden. Hierfür sind weiterführende Analysen erforderlich.

### 5.2.2 PETSc für transiente Rechnungen

Für die transiente Simulation thermohydraulischer Anwendungen muss in ATHLET ein Anfangs-Randwert-Problem für das gewöhnliche Differentialgleichungssystem

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t)$$

mit den Anfangswerten  $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$  gelöst werden. Die Komponenten des Lösungsvektors  $y_i = y_i(t)$  sind zeitabhängige Variablen, die den thermofluiddynamischen Zustand in den einzelnen ATHLET-Netzwerkelementen (Kontrollvolumen und Leitungen) beschreiben. Zur Zeitintegration des thermofluiddynamischen Gleichungssystems wird standardmäßig das ATHLET eigene Lösungsverfahren FTRIX angewandt /LUT96/. FTRIX beinhaltet ein direktes Sparse-Matrix Verfahren zur Lösung des impliziten, linearisierten Gleichungssystems

$$\left[ \frac{1}{\Delta t^{n+1}} \mathbf{I} - \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right)^n \right] \cdot \Delta \mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t^n) + \Delta t^{n+1} \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \right)^n$$

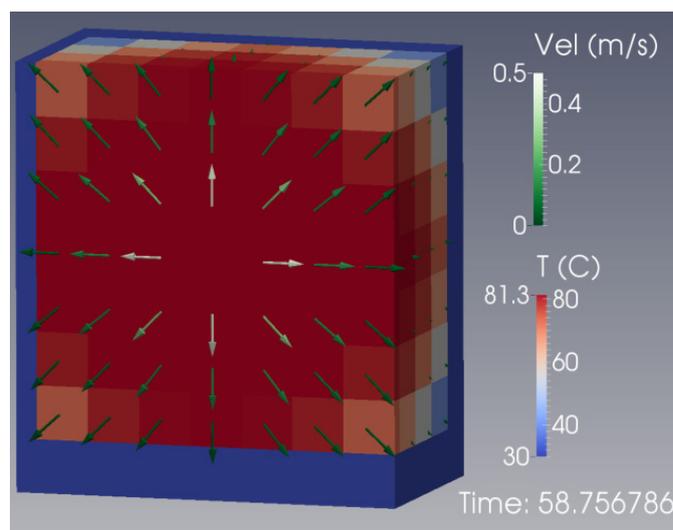
Hierin bezeichnen  $\mathbf{f}$  die rechte Seite des zu lösenden Differentialgleichungssystems (die sogenannte Funktionsroutine) und  $\left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right)$  die Jacobimatrix. Für typische ATHLET-Anwendungen ist die Jacobi-Matrix eine dünnbesetzte Matrix mit überwiegend diagonaler Bandstruktur.

Die erforderliche CPU-Zeit zur Lösung des impliziten Gleichungssystems steigt grundsätzlich mit der Größe der Matrix (d. h. der Anzahl der Lösungsvariablen) und der Dichte der Matrixbesetzung. Die Dichte wiederum wächst mit der Komplexität des numerischen Modells, für ATHLET z. B. durch den Einsatz mehrdimensionaler Gitter basierend auf zahlreichen Parallelkanälen und Querverbindungen. Im Rahmen mehrerer Anwendungen mit sehr umfangreichen ATHLET Modellen, bestehend aus mehrdimensionalen Nodalierungen mit  $10^4 - 10^5$  KV /NIK11/ hat sich herausgestellt, dass unverhältnismäßig große Zuwächse der Rechenzeit die Durchführung der Simulationen nicht weiter zulassen. Als hierfür ursächlich hat sich das FTRIX-Verfahren herausgestellt, das für kleinere und vor allem eindimensionale Netzwerke entwickelt wurde und optimiert ist. Um die Limitierung von ATHLET für den Einsatz mit hochauflösenden Geometriemodellen aufzuheben, wurden daher alternative Lösungsverfahren systematisch geprüft. Hierfür wurde die in ATHLET bestehende Schnittstelle zum Lösungsverfahren überarbeitet, um auch externe Pakete koppeln zu können.

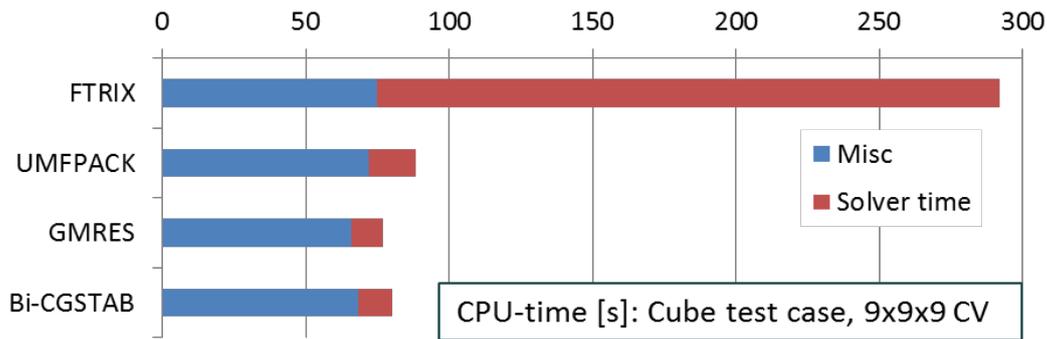
Zahlreiche Bibliotheken mit modernen und effizienten Lösungsverfahren sind frei verfügbar. Als Basis für weitergehende Untersuchungen alternativer Lösungsverfahren wurde das Paket PETSc ausgewählt /PET15/. PETSc wird kontinuierlich von dem Argonne National Laboratory weiterentwickelt und bietet viele direkte und iterative Lö-

sungsverfahren zur Auswahl. Unter Berücksichtigung der ATHLET spezifischen Anforderungen wurde eine Vorauswahl von potentiell geeigneten Lösungsverfahren getroffen, die anhand typischer ATHLET Anwendungen geprüft und bewertet wurden /JAC13/. Zu den näher untersuchten Lösungsverfahren zählen bekannte iterative Verfahren wie GMRES oder Bi-CGSTAB, aber auch direkte Verfahren wie UMFPACK, das eine Weiterentwicklung des schon früher erfolgreich getesteten KLU-Verfahrens darstellt /GLA12/.

Abb. 5.11 zeigt als einfaches, dreidimensionales Anwendungsbeispiel eine quasistationäre, radialsymmetrische Strömung. Simuliert wird eine Massenquelle mit warmem Fluid im Zentrum eines mit  $9 \times 9 \times 9$  KV großen, äquidistant diskretisierten 3D Gebiets, an dessen Rändern ein konstanter Druck vorgegeben ist. Das Beispiel wurde mit verschiedenen Lösern simuliert. Abb. 5.12 zeigt einen Vergleich der gemessenen CPU-Zeiten, aufgeteilt nach Solver-Programmteil (rot) und übrigen ATHLET Programm (blau), wobei mit allen Verfahren eine nahezu identische Anzahl an Zeitschritten zur Lösung des quasistationären Problems berechnet wurde. Es ist zu erkennen, dass die aus dem PETSc Paket verwendeten Lösungsverfahren nur etwa ein Zehntel der mit FTRIX verbrauchten Rechenzeit benötigen. Die Beschleunigung ist anwendungsspezifisch. Für umfangreichere mehrdimensionale Netzwerke konnten deutlich größere Beschleunigungen nachgewiesen werden, wohingegen FTRIX für überwiegend eindimensionale Probleme weiterhin konkurrenzfähig ist.



**Abb. 5.11:** Quellströmung auf einem 3D Gitter



**Abb. 5.12** CPU-Zeiten verschiedener Solver für das Beispiel 3D-Quellströmung

Da es bei einzelnen Anwendungen mit den iterativen Lösern zu zeitweisen Konvergenzproblemen kam und sich die Rechenzeiten von iterativen und direkten Lösern für die bisher untersuchten Netzwerkgrößen nur unwesentlich unterschieden, ist aktuell der Einsatz eines direkten Löser für sehr große ATHLET Netzwerke empfohlen. Nach Hinzubinden des PETSc Pakets zu ATHLET kann ein geeigneter Löser anhand des neuen Schlüsselworts SOLVER im Eingabedatensatz vom Anwender ausgewählt werden.

### 5.3 Anwenderunterstützung

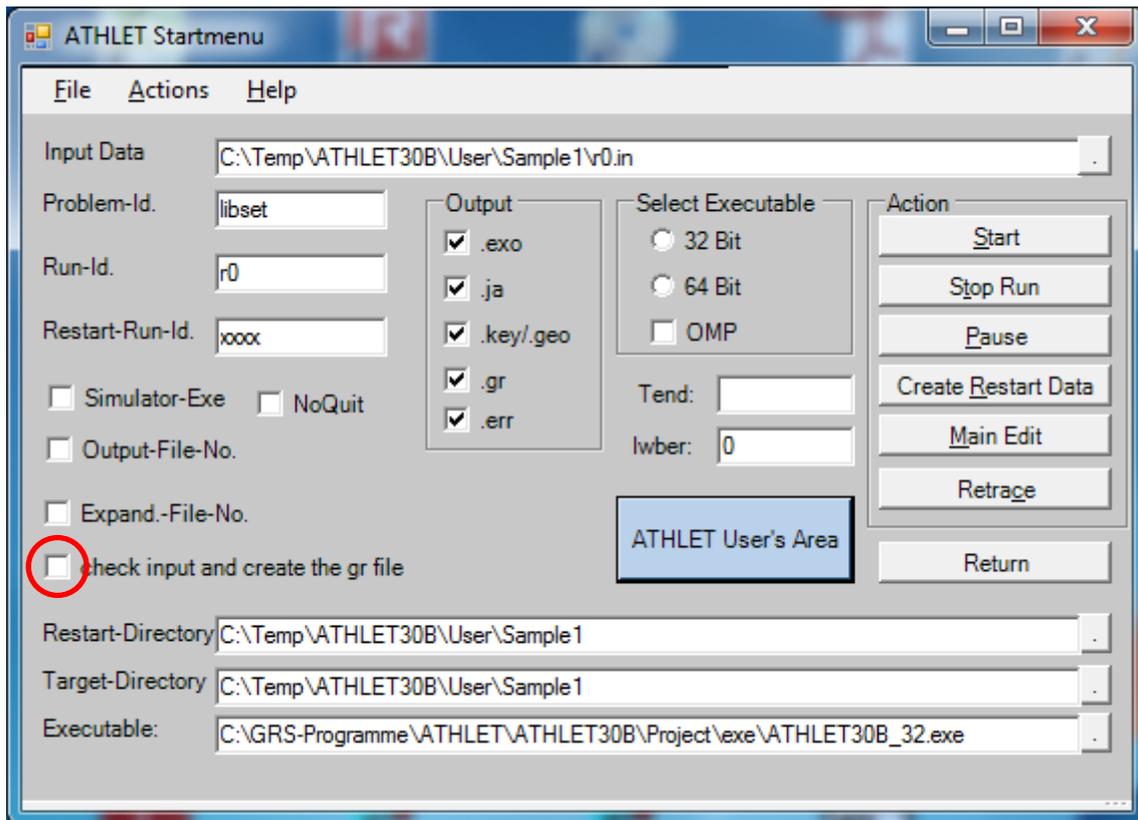
Die Verbesserung der Handhabung von ATHLET sowie der zahlreichen im ATHLET-Umfeld entwickelten Hilfsprogramme ist eine ständige, die Programmentwicklung begleitende Aufgabe. Eine Vielzahl von Anpassungen und Weiterentwicklungen wurden im Rahmen des vorliegenden Vorhabens für existierende Werkzeuge durchgeführt, um sowohl die Programmentwicklung als auch die Programmanwendung zu unterstützen. Zahlreiche Hilfsprogramme erleichtern dem Anwender das Pre- und Postprocessing und werden in aktualisierter Form mit jeder neuen ATHLET-Version bereitgestellt und verteilt. Die im Folgenden beschriebenen Entwicklungen verfolgen zum einen den Zweck, den Anwender sowohl bei der Erstellung, Pflege und Qualitätssicherung der Eingabedatensätze als auch bei der Darstellung und Bewertung der Rechenergebnisse zu unterstützen. Dies ist vor dem Hintergrund immer komplexer werdender Simulationsmodelle von großer Bedeutung, da damit auch der Umfang der Ein- und Ausgabedaten kontinuierlich steigt. Zum anderen werden nachfolgend Arbeiten beschrieben, mit denen insbesondere die ATHLET-Nutzer außerhalb der GRS bei der Programmanwendung wie auch bei der Anbindung eigener Modelle unterstützt werden.

### 5.3.1 Entwicklung eines Werkzeugs zur Unterstützung der Eingabedatenerzeugung und -kontrolle

Zum grafischen Postprocessing der Geometrie ist als 2D Visualisierungswerkzeug die ATHLET Input Grafik (AIG) verfügbar. Diese erlaubt neben der 2D-Visualisierung der Geometrie und Topologie des thermohydraulischen Netzwerks, zusammengesetzt aus sog. Thermofluidobjekten (TFO), auch die Darstellung der mit diesem verbundenen Wänden und Strukturen, den sogenannten Wärmeleitobjekten (HCO). Die AIG erwartet als Eingabedaten eine spezielle Datei (.gr), die die Geometrie- und Netzwerkinformationen enthält. Diese Datei wird im Rahmen einer ATHLET-Rechnung erzeugt, sodass der Nutzer die Visualisierung und Kontrolle der netzwerk- und objektspezifischen Eingabedaten nicht parallel zur Eingabedatenerstellung, sondern erst nach Fertigstellung eines ablauffähigen Inputdecks und Starten einer ATHLET-Rechnung vornehmen kann.

Zur Unterstützung des Anwenders und vor dem Hintergrund der zunehmenden Komplexität der Datensätze mit verfeinerten thermohydraulischen Netzwerken wurde nun die Möglichkeit geschaffen, die Fehlerkontrolle und Prüfung der Eingabedaten begleitend zu deren Erstellung und unabhängig von einem ATHLET Rechenlauf vornehmen zu können. Hierfür wurden zunächst die ATHLET Programmteile identifiziert, in denen zum einen die Eingabedaten gelesen und verarbeitet werden und zum anderen die Geometrie-Datei bereitgestellt wird. Anschließend wurde ATHLET mit einem zusätzlichen Aufrufparameter *-gronly* ausgestattet, der es erlaubt, nur unter Verwendung der identifizierten Programmteile die Geometrie- und Topologieinformation in die .gr-Datei auszugeben. Mit dieser Funktionalität können nun effizient Eingabedaten geprüft und Visualisierungsdaten erzeugt werden, um diese für die anschließende Anzeige der Thermofluid- und Wärmeleitobjekte mit einem Visualisierungswerkzeug zu nutzen. Hierbei wird automatisch auf die dem jeweiligen ATHLET Entwicklungsstand entsprechende aktuelle Version der Routinen zur Dateneingabe zurückgegriffen. Die durchgeführten Arbeiten können später z. B. innerhalb des Vorhabens zur Entwicklung grafischer Werkzeuge (RS1199) weiter verwendet werden.

Für den Anwender wurde ein Auswahlfeld zur Festlegung des Parameters *-gronly* in das Startmenü der ATHLET Benutzerschnittstelle integriert (Abb. 5.13). Die Anwenderdokumentation wurde entsprechend erweitert.



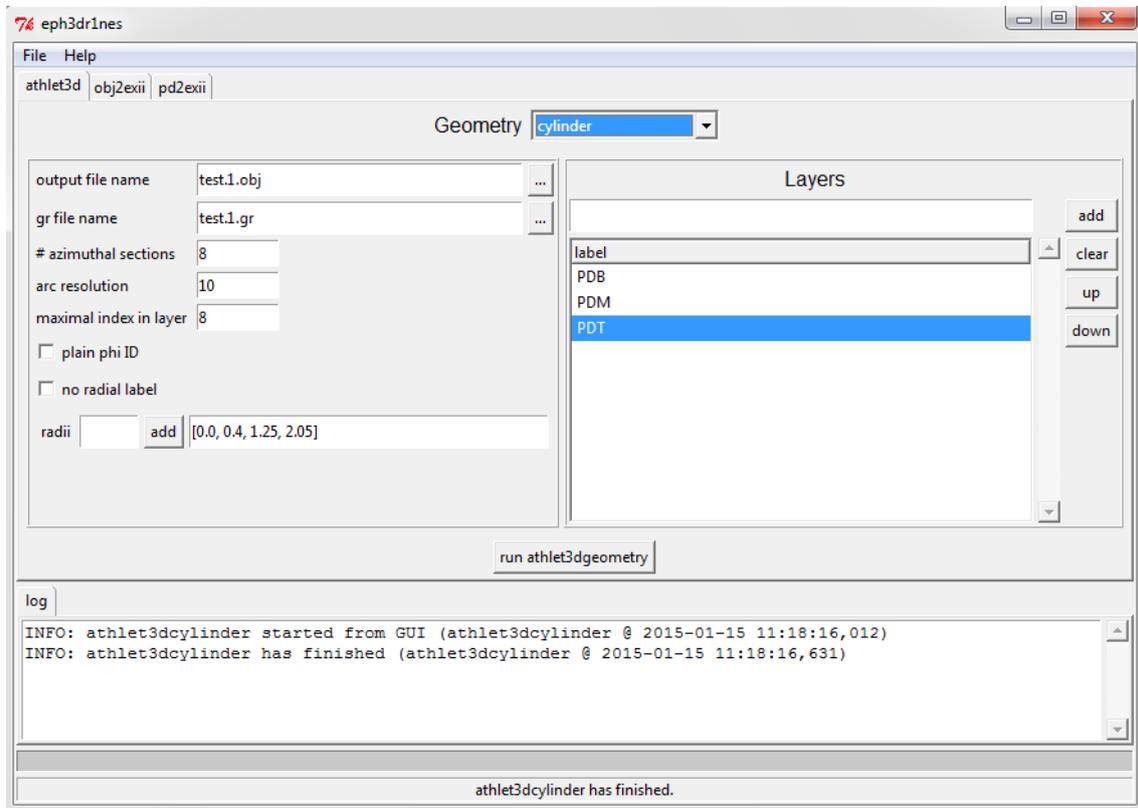
**Abb. 5.13** Erweitertes ATHLET Startmenü mit Auswahlfeld zur Erzeugung der Grafikdatei

### 5.3.2 3D Visualisierung von ATHLET Rechenergebnissen

Im Rahmen des Projekts RS1199 – *Entwicklung neuer Methoden zur Modellierung technischer Systeme und zur Ergebnisauswertung für Simulationsprogramme der Reaktorsicherheit* wird aktuell an Werkzeugen gearbeitet, die die 3D-Visualisierung von ATHLET-Rechenergebnissen ermöglichen. Diese Werkzeuge können dazu genutzt werden, einfache, z. B. kartesische oder zylindrische Gitter zu erzeugen und mit den Simulationsdaten zu verknüpfen. Damit können u. a. die Ergebnisse des neuen ATHLET 3D-Modells visualisiert und detailliert analysiert werden. Abb. 3.12 zeigt als Anwendungsbeispiel die Darstellung des Ringraums als Hohlzylinder. Die Ansicht wurde mit der Open-Source Software ParaView erzeugt /PAR15/. Die für eine derartige Ergebnisdarstellung erforderlichen Werkzeuge wurden in eine grafische Benutzeroberfläche integriert und stehen zukünftig allen ATHLET Anwendern zur Verfügung.

Abb. 5.14 zeigt eine Ansicht der Benutzeroberfläche, in der der Anwender das Gitter spezifizieren kann, dessen Knoten in einem abschließenden Schritt mit den ATHLET-

Rechenergebnissen zur Visualisierung verknüpft werden. Im Wesentlichen können die Gittergeometrie (im Beispiel *zylindrisch*), die Anzahl der azimuthalen Gittersegmente (*acht*) und der Umfang des 3D-Gebiets (hier bestehend aus den Thermofluidobjekten des unteren (*PDT*), mittleren (*PDM*) und oberen (*PDT*) Ringraums) festgelegt werden.



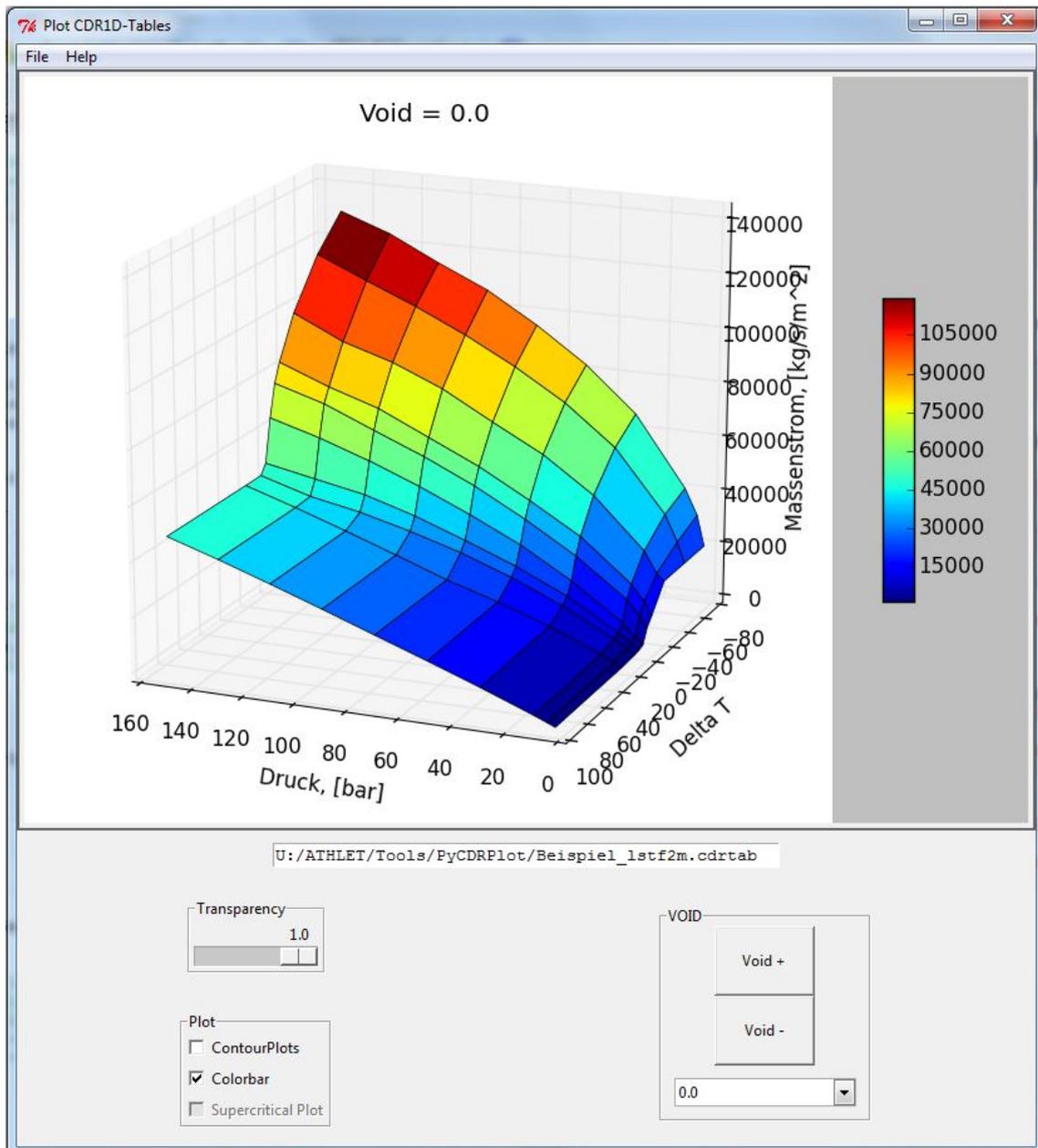
**Abb. 5.14** GUI für die Erstellung von 3D-Visualisierungsdaten

### 5.3.3 Visualisierung der CDR1D-Ergebnisse

Im Rahmen der Weiterentwicklung des Unterprogramms CDR1D zur Berechnung kritischer Leckmassenströme (siehe Kapitel 2.1) wurde auch ein neues Postprocessing-Programm zur Visualisierung der Ergebnisse entwickelt. Die von CDR1D erzeugten Tabellen kritischer Massenstromdichten hängen von drei Variablen ab (Druck, Temperatur und Dampfvolumenanteil), weshalb sich zur Visualisierung eine 3D-Oberfläche über einem zweidimensionalen Feld anbietet. Ein solches Postprocessing-Programm gab es bisher bereits, allerdings konnten die erzeugten Felder weder farbiger dargestellt noch räumlich gedreht werden, wodurch der Informationsgehalt deutlich eingeschränkt war.

Zur Implementierung wurde Python gewählt, da diese Sprache mit Matplotlib eine umfangreiche Grafik-Bibliothek zur Erstellung von mathematisch-wissenschaftlichen Diagrammen aller Art bietet. Weiter ist Python auch plattformunabhängig, wodurch das neue CDR1D Plotprogramm auch unter Linux verwendet werden kann, was bisher nicht der Fall war.

Die zu dem Programm zugehörige GUI ist in Abb. 5.15 zu sehen. Der Massenstrom wird immer für einen zu spezifizierenden Dampfvolumenteil in Abhängigkeit von Temperatur und Druck geplottet. Zusätzlich können die Kontouren in Richtung von Druck- und Temperaturachse projiziert und die Transparenz eingestellt werden.



**Abb. 5.15** GUI des neuen Visualisierungsprogramms für die mit CDR1D berechneten kritischen Massenstromfelder

### 5.3.4 Verwendung von Parametern im Eingabedatensatz

Der Programmteil zur Verwendung von Parametern im Eingabedatensatz wurde überarbeitet. Insbesondere wurde die von Dr. George Benthien entwickelte Routine EVALEXP zur Auswertung von algebraischen Ausdrücken in der Parameterdefinition implementiert. Die Parameterdefinition darf vergleichbar der symbolischen Mathematik numerische Ausdrücke und bereits vorher definierte Parameter enthalten. Erlaubt sind

die arithmetischen Operatoren +, -, \*, /, und ^ sowie trigonometrische Funktionen und eine Reihe weiterer mathematischer Funktionen.

### 5.3.5 PYTHON Schnittstelle

Modellentwicklung für ATHLET wird neben der GRS auch an einigen Universitäten und Forschungseinrichtungen betrieben. Das Hauptaugenmerk liegt hierbei meist nicht auf einer besonders effizienten Implementierung im Fortran Code von ATHLET, sondern auf der Entwicklung eines möglichst guten Modells. Diese Arbeit wird häufig von Doktoranden durchgeführt, die normalerweise über keine Kenntnisse des ATHLET-Quellcodes verfügen und oft die Programmiersprache Fortran nicht beherrschen, da diese im universitären Bereich nicht mehr gelehrt wird.

Aus diesem Grund sollte eine Schnittstelle zu einer modernen einfach zu benutzenden Sprache geschaffen werden, mit deren Hilfe neue Modelle schnell implementiert werden und anschließend im Zusammenspiel mit ATHLET getestet werden können, wobei der Modellentwickler hierfür kein oder nur wenig Wissen über den eigentlichen ATHLET Quellcode benötigen sollte. Ein weiterer Vorteil einer solchen Schnittstelle ist, dass GRS-externe Anwender eigene Modelle entwickeln und nutzen können, ohne dass der Quellcode von der GRS hierfür weitergegeben werden muss.

Als Sprache für diese Schnittstelle wurde Python gewählt, da hiermit folgende Vorteile verbunden sind:

- Python ist frei verfügbar und kann unter <http://www.python.org> heruntergeladen werden.
- Python ist leicht erlernbar, da es nur eine geringe Zahl von Schlüsselwörtern hat.
- Python-Code ist besonders gut lesbar, was mit dem vorgegebenen strukturierten Programmierstil zusammenhängt.
- Die zur Lesbarkeit ohnehin übliche Einrückung definiert gleichzeitig die Blockstruktur. Diese Art der Syntax ist relativ einzigartig und vermeidet viele Fehlerquellen.
- Es ist eine umfangreiche Standard-Bibliothek von Modulen (z. B. math, turtle) verfügbar.

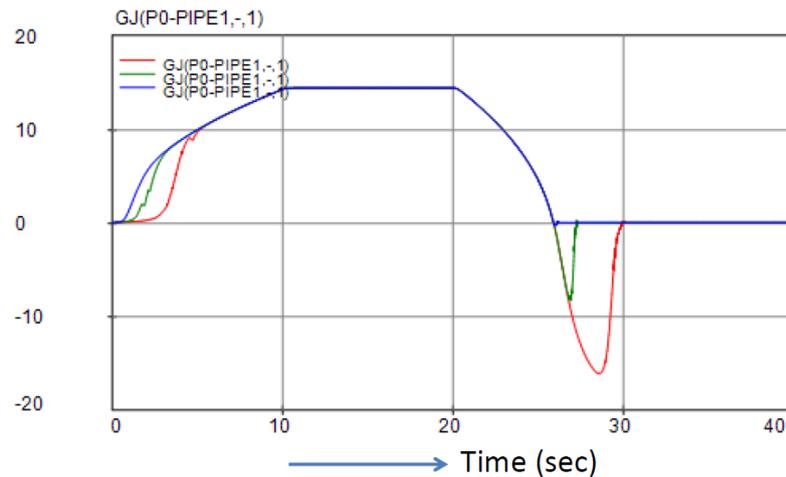
- Python ist eine objektorientierte Programmiersprache, die dank eines hochgradig portablen Interpreters auf vielen Plattformen zur Verfügung steht.
- Python ist eine Skriptsprache und kann in Anwendersoftware eingebunden werden, eine Kompilierung ist nicht erforderlich.
- Mit den Bibliotheken SciPy und NumPy bietet Python eine fast dem proprietären Mathematik-Programm MATLAB ebenbürtige Funktionalität.
- Python ist an den Universitäten weit verbreitet.

Um die Möglichkeiten von Python in nativ kompilierten Programmen nutzen zu können, existieren grundsätzlich zwei Verfahren: Embedding und Extending. Diese Begriffe wurden deshalb gewählt, weil sie sehr gut beschreiben, was im jeweiligen Verfahren mit dem Python-Interpreter passiert: Embedding versucht, den Python-Interpreter als Unterprogrammteil in das zu erweiternde nativ kompilierte Programm wie z. B. ATHLET einzubinden. Als quelloffenes C-Programm ist der Python-Interpreter leicht verfügbar. Je nach Grad der Integration des Python-Interpreters in den Ablauf des Hauptprogramms erfordert dieses Vorgehen allerdings weitreichende Quellcodeänderungen und sorgt für zusätzliche Abhängigkeiten beim Kompilieren und Linken. Um einen Datenaustausch mit Python zu ermöglichen, muss außerdem eine genaue Schnittstelle der zugreifbaren Daten definiert und im Hauptprogramm implementiert werden. Die Anforderungen an das Format der auszutauschenden Daten werden hierbei von Python festgelegt, was wegen oftmals nötiger Konvertierungen (besonders von Fortran aus) für zusätzlichen Implementierungsaufwand im Hauptprogramm sorgt. Aufgrund dieser Nachteile und dem daraus entstehenden Mangel an Flexibilität wird dieses Vorgehen meist nur dafür genutzt, Python für die Verarbeitung von Daten durch unidirektionalen Datentransfer (vom Hauptprogramm nach Python) in ein Programm einzubinden.

Im Gegensatz hierzu versucht das Extending-Verfahren, den Python-Interpreter durch die Fähigkeiten des eigenen Programms zu erweitern, indem es die hierin vorhandenen Funktionen aufrufbar und globale Daten für Python zugreifbar macht. Hierfür muss das Hauptprogramm lediglich in einer von Python ladbaren Form vorliegen: als Python-Modul oder Shared Library. Um ein eigenständig ablauffähiges Programm in eine dieser Formen zu bringen, gibt es verschiedene Vorgehensweisen, wobei sich die bisherigen Arbeiten und die Beschreibung im Folgenden auf zwei Ansätze beschränken: die automatisierte Konvertierung des Hauptprogramms in ein Python-Modul durch *f2py*

und die Nutzung des Python-Pakets *ctypes*, um das als Shared Library kompilierte Programm von Python aus anzusteuern. Der erste Ansatz mittels *f2py* wurde in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen der TU München im Rahmen eines Studentenprojektes (Honours Project der Bavarian Graduate School of Computational Engineering BGCE) getestet /KOM14/. Um die Möglichkeiten der Kopplung von ATHLET und Python zu evaluieren, wurden drei verschiedene Anwendungen verwirklicht.

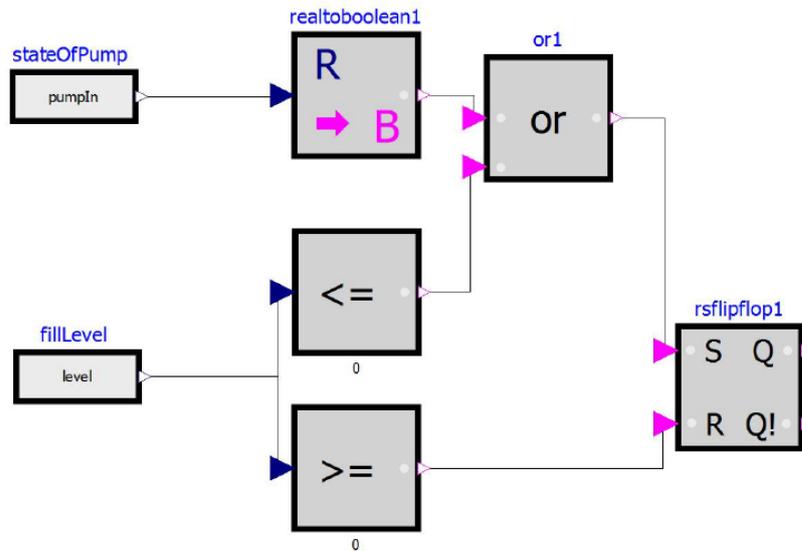
Eine Unidirektionale Schnittstelle, bei der lediglich ATHLET-Variablen während der Rechnung an eine Python-Routine übergeben werden, aber nichts zurückgegeben wird, wurde durch das Embedding-Verfahren realisiert. Als Anwendung wurden während der ATHLET-Rechnung Ergebnisdaten an Python übergeben und dort grafisch dargestellt, was die Prüfung der Daten bei noch laufender Rechnung die Ergebnisse ermöglicht. Der zweite Fall ist eine einfache Bidirektionale Schnittstelle, bei der von der aufgerufenen Python Routine Werte zurückgegeben werden, die allerdings keinen oder nur geringen Einfluss auf das numerische Lösungsverfahren haben. Als Beispiel wurde die Dittus-Boelter-Korrelation zur Berechnung eines Wärmeübergangskoeffizienten in Python implementiert. Die dritte Anwendung war die Implementierung einer Kopplungsschnittstelle, die analog der bidirektionalen Schnittstelle Variablen ausliest und wieder zurückgibt, die aber starken Einfluss auf das numerische Lösungsverfahren besitzen. Hier wird die Python Routine auch während des Lösungsprozesses innerhalb eines Zeitschrittes aufgerufen. Hiermit konnte die Simulation eines dynamischen Rückschlagventils umgesetzt werden. Das Ergebnis dieser Simulation ist in Abb. 5.16 dargestellt. Die blaue Kurve zeigt den Massenstrom durch das Ventil. Der langsam ansteigende Massenstrom zeigt an, dass sich das Ventil nicht wie mit ATHLET-internen Modell schlagartig öffnet, sondern allmählich aufgedrückt wird und ebenso verzögert wieder schließt. Vergrößert man das Trägheitsmoment der Klappe, dauert es länger, bis sich die Ventilklappe öffnet (grüne und rote Kurve). Beim Schließen bemerkt man, dass die Klappe jetzt so langsam schließt, dass die Strömung sich bereits umgedreht hat, bevor das Ventil völlig geschlossen ist. Für die Umsetzung der letzten beiden Anwendungen wurde der Ansatz verfolgt, ATHLET durch *f2py* automatisch in ein Python-Modul zu konvertieren.



**Abb. 5.16** Massenstrom durch ein mit Python simuliertes Rückschlagventil

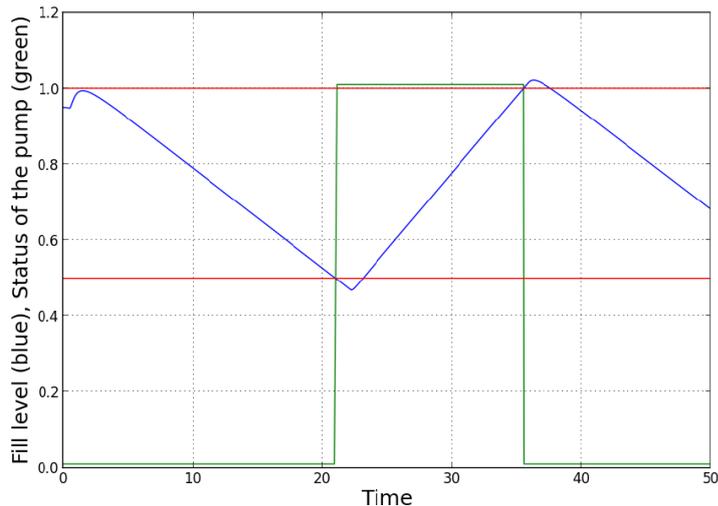
Auch der zweite Ansatz zur Realisierung der Schnittstelle Python – ATHLET verwendet das sogenannte Extending, d. h. die Main-Routine ist nicht mehr in ATHLET selbst, sondern wird nach Python ausgelagert. ATHLET wird dafür als Shared Library erzeugt und in Python eingebunden. Vorteil hierbei ist, dass von Python direkt auf alle ATHLET-Variablen im Speicher zugegriffen werden kann. Dieser Zugriff wird über das Python-Paket *ctypes* realisiert.

Auch diese Schnittstelle wurde im Rahmen einer Studentenarbeit getestet /NIE14/. Hintergrund war die Idee, in ATHLET über Python Modelica-Modelle einbinden zu können. Modelica ist eine objektorientierte Beschreibungssprache für physikalische Modelle, die zur Beschreibung von multiphysikalischen Problemen aus unterschiedlichsten Wissensgebieten geeignet ist: Mechanik, Elektrotechnik und Elektronik, Thermodynamik, Hydraulik und Pneumatik, Regelungstechnik und Prozesstechnik. Als Beispielproblem sollte das ATHLET GCSM-Modul, mit dem normalerweise die Regelungstechnik nachgebildet wird, durch ein Modelica-Modell ersetzt werden. Als Testfall wurde in ATHLET ein einfacher Behälter mit Zu- und Ablauf modelliert. Die zugehörige Füllstandsregelung wurde mit Modelica erstellt (siehe Abb. 5.17).



**Abb. 5.17** Füllstandsregelungsmodell in Modelica

Die Füllstandsregelung spricht an, sobald ein Minimalfüllstand erreicht wird und füllt den Behälter wieder bis zum Maximalfüllstand auf. Die Kopplung ATHLET-Python-Modelica erwies sich als deutlich langsamer als die nicht gekoppelte Version (Faktor zwei), was aber nicht an der Anbindung von Python an ATHLET über *ctypes* liegt, sondern an den Aufrufen von Modelica durch Python. Ansonsten arbeitete die Schnittstelle einwandfrei. Das Ergebnis der Testrechnung ist in Abb. 5.18 zu sehen. Die blaue Linie zeigt den Füllstandsverlauf über die Zeit an. Sobald der Füllstand unter die rot eingezeichnete Minimallinie fällt, wird von der Modelica-Füllstandsregelung die Pumpe eingeschaltet (grüne Linie) und der Füllstand steigt wieder an, bis beim Erreichen der Maximallinie die Pumpe von Modelica wieder abgeschaltet wird.



**Abb. 5.18** Füllstand im Behälter, geregelt mit Hilfe von Modelica

Beide Ansätze zur Implementierung der Schnittstelle ATHLET-Python (Embedding und Extending mittels *f2py* bzw. *ctypes*) erwiesen sich als anwendbar und voll funktionsfähig. Da *ctypes* zur Python Standard Bibliothek gehört, ist weitere Verfügbarkeit und die Weiterentwicklung hier gesichert. Daher wird dieser Ansatz für eine Integration in die nächste offizielle ATHLET Version favorisiert.

### 5.3.6 Zusammenarbeit mit externen Partnern

Die aktuelle ATHLET Version Mod. 3.0 A wird seit ihrer Fertigstellung im November 2012 den Anwendern zur Verfügung gestellt. Alle Anwender sind Mitglied der ATHLET User's Area, einer von den ATHLET Entwicklern betreuten Internetplattform, die dem Informationsaustausch zwischen Entwicklern und Anwendern und – über ein Forum – auch zwischen Anwendern untereinander dient. Über diese Plattform wurden die bisherigen Anwender über die Verfügbarkeit der neuen Programmversion und die darin enthaltenen Programmerweiterungen informiert. Bevor für einen Anwender der Zugang zum Downloadserver der aktuellen ATHLET Version freigegeben wird, müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

- Gültiger Programmüberlassungsvertrag mit der GRS sowie ein Programmschein für die neue ATHLET Version 3.0 A
- Zustimmung des BMWi und ggf. des BAFA zur Programmweitergabe
- Erstellung eines Erfahrungsberichts für die bisher verwendete ATHLET Version mittels eines Online-Formulars

Neue ATHLET Anwender müssen ein offizielles Schreiben an die Leitung des Bereichs Reaktorsicherheitsforschung der GRS richten, in dem sowohl das ATHLET anfordernde Unternehmen als auch das beabsichtigte Einsatzgebiet von ATHLET beschrieben werden.

Jeder ATHLET Anwender leistet – beabsichtigt oder nicht – einen wertvollen Beitrag zur Entwicklung und Validierung von ATHLET. Der Erfahrungsrückfluss aus deren Programmanwendungen gab immer wieder wertvolle Hinweise auf notwendige oder zumindest die Programmhandhabung unterstützende Programmverbesserungen. Dieses Feedback umfasste

- Hinweise auf mangelnde Stabilität oder unangemessen hohen Rechenzeitverbrauch bestimmter Anwendungen
- Nicht ablauffähige Anwendungen
- Anwenderfehler, die vom Programm nicht gemeldet wurden, obwohl sie hätten entdeckt werden können
- Wünsche und Anregungen, um die Handhabung des Rechenprogramms zu verbessern

Die in der Regel per Email oder telefonisch übermittelten Rückmeldungen wurden von den Entwicklern hinsichtlich ihrer Relevanz für notwendige Programmänderungen ausgewertet. Zahlreiche Entwicklungsarbeiten dieses Projektes wurden so von Anwendern initiiert, obgleich sie nicht im Projektplan vorgesehen waren.

In der Regel wurden diese Programmänderungen in der Entwicklungsversion 3.0 B durchgeführt. Entdeckte Programmfehler wurden auch in der aktuellen freigegebenen Version 3.0 A beseitigt. Die verbesserten Programmversionen wurden anschließend auf dem Downloadserver bereitgestellt. Über die ATHLET User's Area wurden die Anwender über beseitigte Fehler, die möglichen Konsequenzen für die Simulationen sowie die Bereitstellung des verbesserten Programms informiert.

Der wohl bedeutendste Nutzen, der sich aus der vielfältigen Anwendung von ATHLET durch externe Nutzer ergibt, sind die erfolgreichen Anwendungen und deren Berichte in Fachzeitschriften und auf Tagungen. Nur diejenigen Simulationsprogramme können internationale Bedeutung erlangen, die auch international von einer großen Zahl von Anwendern eingesetzt werden. Dies steigert die Qualität und den Validierungsstand

der Programme sowie deren Bekanntheitsgrad, wodurch neue Anwender gewonnen werden können.

Neben Beiträgen zur Programmvalidierung wurden auch konkrete Entwicklungsarbeiten von externen Nutzern geleistet. Diese erfolgen beispielsweise im Rahmen von Masterarbeiten oder Promotionen in enger Kooperation mit den ATHLET Entwicklern der GRS. Abhängig von der jeweiligen Aufgabenstellung werden Teile des Quellcodes an die externen Entwickler weitergegeben. Die erweiterten Programmteile werden der GRS kostenlos zur Verfügung gestellt, wo sie von den ATHLET Entwicklern geprüft und in die ATHLET Standardversion eingebunden werden. In der Regel müssen diese Programmteile noch überarbeitet werden, um sie konsistent, allgemein anwendbar und unter Beachtung der ATHLET Programmierstandards in ATHLET zu integrieren. Nichtsdestotrotz werden damit nützliche fremdfinanzierte Beiträge zum Fortschritt von ATHLET geliefert.

So hat beispielsweise J. Venker im Rahmen ihrer Promotion an der Universität Stuttgart Analysen mit ATHLET zum Verhalten von nachrüstbaren Wärmeabfuhrsystemen in Kernkraftwerken durchgeführt /VEN14/. Für die erfolgreiche Simulation dieser Systeme war die Weiterentwicklung des ATHLET Turbinenmodells durch die GRS grundlegend (siehe Kapitel 2.11). Die autarken Systeme bestehen aus Einheiten von Turbinen, Kompressoren und Wärmetauschern. Angetrieben von der Temperaturdifferenz zwischen dem Reaktorkühlmittel und der Umgebung führen sie eigenständig Wärme vom Reaktor an die umgebende Luft ab. Als Arbeitsmedium wird überkritisches Kohlendioxid (SCO<sub>2</sub>) verwendet. Um die Analysen durchführen zu können, musste ATHLET entsprechend erweitert werden. Im Rahmen der Promotion wurde ein neues Arbeitsmedium SCO<sub>2</sub> mit der entsprechenden Stoffwertberechnung sowie geeigneten Wärmeübergangskorrelationen implementiert. Nach der Durchführung von Testrechnungen wurden die modifizierten Programmteile an die GRS übergeben. Diese werden im Rahmen des nachfolgenden ATHLET Entwicklungsprojektes von der GRS in ATHLET übernommen.

#### **5.4 Qualitätssicherung und Versionsmanagement**

Die Entwicklung des Rechenprogramms ATHLET wird von umfangreichen Maßnahmen zur Qualitätssicherung begleitet. Hierfür bestehen Programmierstandards, die die Qualität der Software gewährleisten. Dabei angestrebte Qualitätsmerkmale sind u. a.

die Korrektheit, die Robustheit oder die Portabilität des Programms. Die Portabilität einer neuen ATHLET-Version wird mit den in der GRS verfügbaren Rechnertypen, Betriebssystemen und Compilern geprüft. Um die Kompatibilität der einzelnen Programmmodule und Programmerweiterungen einer neuen Version zu gewährleisten, werden Regressionstests mit standardisierten Datensätzen durchgeführt. Diese Tests stellen sicher, dass die mit früheren Programmversionen erzielten Ergebnisse mit mindestens gleicher Qualität reproduziert werden können.

Die Programmentwicklung wird durch den Einsatz der Versionsverwaltungssoftware Subversion (SVN) unterstützt. Subversion wird als freie Software seit dem Jahr 2000 von der Firma CollabNet entwickelt und ermöglicht ein weitgehend automatisiertes Versions- und Releasemanagement. Hierbei werden der ATHLET Quellcode sowie alle am Quellcode vorgenommenen Änderungen inkrementell in einem zentralen Projektarchiv gespeichert. Insbesondere die detaillierte Dokumentation der schrittweise erfolgenden Quellcodeerweiterungen und die Möglichkeit ihrer Rückverfolgung machen die Programmentwicklung transparenter und das Auffinden von möglichen Programmfehlern einfacher, was die Zuverlässigkeit und die Wartbarkeit des Codes verbessert.

In Abhängigkeit vom Entwicklungsfortschritt werden in unregelmäßigen Abständen neue ATHLET-Programmversionen erstellt. Die für die Qualitätssicherung wichtige systematische Archivierung der Programmversionen wird im Rahmen des Release-managements innerhalb des Versionsverwaltungssystems sichergestellt. Hierbei werden allgemein freigegebene Versionen (z. B. ATHLET Mod. 3.0 Cycle A) sowie erweiterte Zwischenversionen (Cycle B, C, ...) unterschieden, wobei die allgemein freigegebenen Versionen einen erweiterten Dokumentations- und Validierungsstand aufweisen.

## **5.5 Freigabe der Programmversion ATHLET 3.0A**

Im November 2012 wurde im Rahmen dieses Vorhabens RS1507 die aktuelle Programmversion ATHLET 3.0 A freigegeben. Sie enthält im Vergleich zur Vorgängerversion neben zahlreichen Modellertüchtigungen und die Programmhandhabung und -stabilität erhöhenden Maßnahmen folgende wesentliche Programmerweiterungen, die zum überwiegenden Teil im Vorgängerprojekt RS1184 /GLA12/ entwickelt worden waren:

- Neue Arbeitsmedien: Natrium, Blei, Blei-Bismut (eutektisch), Helium (sowohl als reines Arbeitsmedium als auch als nicht-kondensierende Gaskomponente)

- Korrelationen für Reibungsverluste und Wärmeübergang für Flüssigmetall in Rohr- und Bündelgeometrie
- Erweiterung für HTR mit Kugelhaufenkern, u. a. Wärmeleitung, Wärmeübergang und Strömungsdruckverlust in Kugelhaufenschüttungen, Stoffwertkorrelationen für Siliziumkarbid und Graphit
- 2D Erhaltungsgleichungen für planare oder ringförmige Gitter (z. B. zur Simulation des Ringraums)
- Explizite und semi-implizite Kopplung von ATHLET mit ANSYS-CFD
- Neue Komponentenmodelle für Turbine und Kondensator
- AGM als neues Softwaretool zur GCSM-Modellierung

Vor der Programmfreigabe wurden umfangreiche Testrechnungen durchgeführt. Darunter waren auch die im Validierungsband enthaltenen Simulationen der Experimente der Basisvalidierungsmatrix. Die mit ATHLET 3.0 A erzielten Ergebnisse wurden in den Validierungsband aufgenommen.

Die gesamte ATHLET Programmdokumentation wurde aktualisiert und als pdf-Dokumente publiziert /ATH12/. Des Weiteren wurde ein Dokument erstellt, das die Programmänderungen im Vergleich zur Vorgängerversion 2.2 A beschreibt. Das gesamte Programmpaket wurde in den Download Server *GRS-share* hochgeladen. Es enthält folgende Teile:

- Executables und Libraries für serielle und parallele Programmausführung für die Betriebssysteme Windows und Linux
- Vollständige Programmdokumentation
- Hilfsprogramme wie ATHLET Input Graphics, verschiedene Plotprogramme, Schnittstellen zu MS Excel, Postprocessing-Programme zur Aufbereitung der ATHLET-Ausgabedaten
- Installationsprogramme für Windows bzw. komprimierte tar-Files für Linux

Die ATHLET-Anwender wurden mit Hilfe der ATHLET User's Area über die Bereitstellung der neuen Programmversion informiert. Der Link zum Download von ATHLET wurde jeweils dann freigeschaltet, wenn die Voraussetzungen für die Programmweiter-

gabe (gültiger Code-Überlassungsvertrag und Programmschein für 3.0A sowie Erstellung eines Erfahrungsberichtes mit der Vorgängerversion) erfüllt waren (Kapitel 5.3.6).

## **5.6 Einfrieren der ATHLET-Version 3.0 B**

Es ist beabsichtigt, die ATHLET Entwicklungsversion Mod. 3.0 B zu Beginn des Nachfolgevorhabens (April 2015) einzufrieren, d. h. dass die Entwicklungsarbeiten für diese Programmversion nahezu abgeschlossen sind und die weitere Programmentwicklung in der intern mit Mod. 3.0 C bezeichneten Programmversion erfolgen. Sinn der *frozen version* ist, diese den Anwendern in der GRS insbesondere für Validierungsrechnungen bereitzustellen, um so vor einer allgemeinen Programmfreigabe einen erweiterten Erfahrungsrückfluss zu generieren, der über die bereits während der Entwicklung erzielten Erkenntnisse hinausgeht. Im Einzelfall kann diese Programmversion auch den externen Anwendern bereitgestellt werden, die in enger Kooperation mit den ATHLET Entwicklern geeignete Validierungsrechnungen insbesondere hinsichtlich der neu implementierten Modelle durchführen. Darüber hinaus wird sie in ATHLET-CD eingebunden.

Wie jede Freigabeversion auch wird eine *frozen version* von den Entwicklern umfangreich getestet. Die aktualisierte Eingabedatenbeschreibung wird als pdf-File erstellt. Ebenso wird die programmtechnische Dokumentation (Programmköpfe zur Beschreibung der Unterprogramme, Beschreibung und Verwendungstabelle der globalen Variablen, etc.) aktualisiert. Die Publikation der vollständigen Programmdokumentation als pdf-Files (s. /ATH12/) erfolgt jedoch erst bei der allgemeinen Freigabe einer Programmversion.

Abgeschlossene und laufende Entwicklungsarbeiten, die voraussichtlich mit der eingefrorenen ATHLET-Version verfügbar sein werden, umfassen neben vielfältigen Programm- und Modelloptimierungen insbesondere nachfolgend genannte Codeerweiterungen:

- 3D Impulsgleichungen in kartesischen und zylindrischen Koordinaten
- Viskose und turbulente Scherkräfte zur Vervollständigung der Bilanzgleichungen des 3D-Modells

- Neue und erweiterte Wärmeübergangskorrelationen für Kondensation im Innern und für unterkühltes und gesättigtes Blasensieden auf der Außenseite horizontaler Wärmetauscherrohrbündel
- Berücksichtigung der Bündelgeometrie für den Wärmeübergang im Brennstab- oder Rohrbündel
- Erweiterung des Anwendungsbereichs des Modells zur Bestimmung der kritischen Leckströmraten für überkritischen Druck und für Helium, erweiterte Berücksichtigung der Leckgeometrie (z. B. für Risse)
- Transport und Ablagerung von Zinkborat
- Detaillierte Modellierung der Freisetzung und Absorption von Stickstoff in Wasser
- Stoffwerte für Argon
- Erweitertes Turbinenmodell
- Neues Kompressormodell
- Berücksichtigung von axialer Wärmeleitung in Strukturen
- Weiterentwicklung des Wärmestrahlungsmodells, z. B. zur Simulation von HTR
- Verbessertes Modell für elektrische Heizleiter
- Kopplung mit der Sparse-Matrix Gleichungslöserbibliothek PETSc (Argonne National Laboratory)

## 6 Zusammenfassung und Bewertung

Im Rahmen des BMWi Vorhabens RS1507 zur *Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit* wurden Modelle und Methoden für die realistische Simulation von Kernkraftwerken unter Betriebs-, Störfall- und Unfallbedingungen mit dem *Best-Estimate* Programm ATHLET entwickelt. Übergeordnetes Projektziel war hierbei, ein aktualisiertes Werkzeug bereitzustellen, das die Durchführung von Sicherheitsanalysen für kerntechnische Einrichtungen nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik und entsprechend der fortlaufenden Entwicklung der Kernkraftwerkstechnologie ermöglicht.

Auf Basis der in Kapitel 1 dargestellten Gliederung des Arbeitsprogramms werden die in den vier technisch-wissenschaftlichen Arbeitspaketen erzielten Ergebnisse und Erkenntnisse nachfolgend in separaten Abschnitten zusammengefasst. Die Bewertung der Ergebnisse erfolgt in einem abschließenden Kapitel.

### 6.1 Weiterentwicklung der ATHLET Modellbasis

Insbesondere für die Simulation von LWR wurden zahlreiche Modelle in ATHLET adaptiert, erweitert oder neu entwickelt. Aufgrund des modularen Code-Designs können viele dieser Entwicklungen in Kombination mit alternativen Kühlmitteln verwendet werden und kommen somit auch der Simulation zukünftiger Reaktoren zugute. Die durchgeführten Arbeiten erfolgten sowohl vor dem Hintergrund aktueller sicherheitstechnischer Fragestellungen und neu entwickelter Sicherheitssysteme, berücksichtigten aber auch die Ergebnisse von Validierungsrechnungen für die geeignete Adaption von Modellen. Die wichtigsten Ergebnisse sind nachfolgend dargestellt.

Das in ATHLET verwendete Modell zur Berechnung kritischer Ausströmraten infolge von Kühlmittelverluststörfällen wurde verbessert. Durch die vorgenommenen Modelerweiterungen können in Ergänzung zu leichtem Wasser nun auch kritische Leckströmraten für schweres und überkritisches Wasser wie auch für Helium berechnet werden. Damit wurden die Grundlagen geschaffen, Kühlmittelverluststörfälle für fortschrittliche Reaktoren wie z. B. überkritische Leichtwasserreaktoren oder Hochtemperaturreaktoren zu simulieren. Zusätzlich kann die Leckgeometrie detaillierter vorgegeben werden, so dass nun auch realistische Leckraten für von einer Kreisform abweichende Leckquerschnitte, z. B. für Risse, berechnet werden können. Letzteres ist

von besonderem Interesse vor dem Hintergrund einer neuen KTA-Regel zur Leckvorbruch Thematik, die Anforderungen an die Leckratenberechnung formuliert, um Aussagen über die Zuverlässigkeit von Leckdetektionssystemen treffen zu können.

In Bezug auf Kühlmittelverluststörfälle ist aktuell auch die Simulation von Zinkborat von hohem sicherheitstechnischem Interesse. Durch die Implementierung eines entsprechenden Modells wurde in ATHLET die Möglichkeit geschaffen, den Einfluss von infolge Zinkborat-Ablagerung verengter Kernkanälen auf die Brennstabkühlung zu untersuchen. Zinkborat bildet sich nach einem Kühlmittelverluststörfall durch chemische Reaktion des borhaltigen Kühlmittels mit verzinkten Einbauten im Sicherheitsbehälter und gelangt bei Sumpfbetrieb in den Primärkreis des Reaktorkühlsystems.

Zur Simulation unterschiedlicher Strömungsbilder verfügt ATHLET über eine Transportgleichung für die Simulation der Zwischenphasenflächenkonzentration. Die Transportgleichung modelliert zweiphasige Strömungsvorgänge auf Basis eines mechanistischen Ansatzes ohne Rückgriff auf statische Strömungsbildkarten, was die transiente Simulation der von der Prozessdynamik gebildeten Strömungsformen ermöglicht. Das Modell wurde früher überwiegend anhand vertikaler, disperser Strömungen validiert. Im Rahmen der aktuellen Entwicklungsarbeiten unter maßgeblicher Beteiligung des Lehrstuhls für Nukleartechnik der TU München wurde das Modell nun für die Analyse horizontaler Zweiphasenströmungen mit Kontaktkondensation erweitert und zur Simulation kondensationsinduzierter Druckstöße eingesetzt. Druckstöße gefährden die Integrität des Kühlsystems und sind daher relevant für die Bewertung der Sicherheit von Reaktoren. Durch die vorgenommenen Modellerweiterungen konnten die wesentlichen Phänomene kondensationsinduzierter Druckstöße, die in den nachgerechneten Versuchen beobachtet wurden, reproduziert werden.

Infolge eines Kühlmittelverluststörfalles im Primärkreis eines DWR ermöglichen die Notakkumulatoren die Einspeisung von Kühlwasser bei hohem Druck zum Ersatz des ausfließenden Kühlmittels. Die Akkumulatoren enthalten Stickstoff als Polstergas, das sich im Druckspeicherwasser löst und daher ungewollt in den Primärkreis gelangen kann. Da Stickstoff auch im Kühlmittel gelöst wird, kann es während eines Störfalles zur Freisetzung und zum Wiederlösen des Stickstoffs kommen. Für die Simulation des weiteren Störfallablaufs ist die korrekte Abbildung der Verteilung des Stickstoffs im Reaktorkühlkreislauf wichtig. Das bereitgestellte Modell ermöglicht die Berechnung sowohl der plötzlichen Freisetzung als auch der langsamen Freisetzung und Absorpti-

on von Stickstoff in Wasser, wobei die vorliegende Strömungsform Berücksichtigung findet.

ATHLET verfügt über ein umfangreiches Paket zur Simulation des Wärmeübergangs zwischen Strukturen und dem ein- oder zweiphasigen Fluid. Die enthaltenen Wärmeübergangskorrelationen wurden sowohl für die Innenseite horizontaler Rohre bei Vorliegen von Kondensation als auch für die Außenseite von Brennstab- oder Rohrbündeln weiterentwickelt. Die vorgenommenen Adaptionen ermöglichen die realistischere Simulation des Wärmeübergangs sowohl für Brennstabbündel als auch für horizontale Wärmetauscherrohrbündel, die z. B. im Notkondensator, einem passiven Sicherheitssystem des SWR-Designs KERENA, Einsatz finden. Die Modellverbesserungen wurden durch die Nachrechnung von Brennstabbündelversuchen des Kurchatov-Instituts und der in Jülich durchgeführten Experimente zum Notkondensator erfolgreich überprüft.

Das in ATHLET seit der Programmversion 3.0 A enthaltene Modell zur Simulation einer Dampfturbine ist umfangreich erweitert worden. Zum einen kann nun das dynamische Verhalten mehrerer, voneinander unabhängiger Turbinen-Generator-Einheiten berechnet werden. Zum anderen ist es möglich, das Turbinenverhalten in vom Auslegungspunkt weit entfernten Betriebspunkten zu simulieren, womit auch das Anlaufen der Turbine aus dem Stillstand nachgebildet werden kann. Durch diese Erweiterungen ist es möglich, ein vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart entworfenes autarkes System zur passiven Nachwärmeabfuhr in Kernkraftwerken zu simulieren, das mehrere separat betriebene Kompressor-Turbinen-Einheiten beinhaltet.

Die vorgenommene Erweiterung des Wärmestrahlungsmodells und die Implementierung der 2D Wärmeleitung in Strukturen sind nicht zuletzt hinsichtlich der Analyse zukünftiger Reaktordesigns von Bedeutung. Beide Entwicklungen kamen für die Simulation des prismatischen Hochtemperaturreaktors MHTGR-350 zum Einsatz. Im Kern dieses Reaktors gibt es Graphitblöcke, die – ohne direkten Kontakt zum Kühlmittel – von den umliegenden leistungserzeugenden Strukturen aufgeheizt werden. Dieser Prozess kann durch die Neuentwicklung abgebildet werden. Insbesondere für die Simulation verschiedener GEN-IV Reaktoren wurde als weiteres nichtkondensierendes Gas das Edelgas Argon in ATHLET implementiert. Argon wird häufig als Polstergas bzw. Schutzgas bei flüssigmetallgekühlten Reaktoren eingesetzt und findet auch in verschiedenen Versuchsanlagen Verwendung, so z. B. im Karlsruher KASOLA Kreis-

lauf. Analysen zu Entleerungsexperimenten der Versuchsanlage KASOLA, die Bestandteil des Validierungsvorhabens RS1519 sind, gaben außerdem den Anlass für eine Verbesserung des Gemischspiegelmodells, das für vertikale Komponenten und bei Verwendung des 5-Gleichungsmodells in ATHLET die Simulation einer scharfen Phasengrenze zwischen Flüssigkeits- und Dampfphase erlaubt. Die hier durchgeführten Modelländerungen verbessern insbesondere die Simulation von Gemischspiegelbewegungen bei ausgeprägter Strömungsdynamik.

## **6.2 Entwicklung eines ATHLET internen 3D Modells**

Die Entwicklung eines programminternen 3D-Modells verfolgt das Ziel, makroskopische mehrdimensionale Strömungen, wie sie insbesondere in großen Behältern wie beispielsweise dem Reaktordruckbehälter auftreten, mit ATHLET detailliert zu simulieren. Dies ist für ein Spektrum von Ereignissen erforderlich, die wesentlich von mehrdimensionalen Phänomenen dominiert werden. Beispiele hierfür sind Strömungsvorgänge im RDB bei Deborierungsereignissen oder Kühlmittelverluststörfällen, aber auch großskalige Konvektionsströmungen in großen Wasserpools passiver Sicherheitssysteme, die das Betriebsverhalten der Systeme maßgeblich beeinflussen.

Um das 3D-Modell flexibel einsetzen und Behälter oder Becken mit unterschiedlicher Geometrie simulieren zu können, sind die zweidimensionalen und dreidimensionalen Gleichungen sowohl in kartesischen als auch in Zylinderkoordinaten implementiert. Die Implementierung erfolgte als Erweiterung des bekannten 1D 2-Fluid-Modells, das im Thermohydraulikmodul von ATHLET enthalten ist. Der Ansatz der Integration bisher fehlender 3D Terme in dieses Modul bietet hierbei im Gegensatz zur Kopplung eines unabhängigen 3D-Verfahrens mehrere wesentliche Vorteile. So bleibt zum einen die gesamte in ATHLET vorhandene und validierte Modellierung wie unterschiedliche Arbeitsmedien oder Wärmeübergang an Strukturen unmittelbar in Zusammenhang mit den mehrdimensionalen Gleichungen nutzbar. Außerdem besteht die Möglichkeit, die mehrdimensionalen Gleichungen gemeinsam mit den 1D-Gleichungen in einem gemeinsamen Gleichungssystem mit einer gemeinsamen Systemmatrix zu lösen. Dies gewährleistet die gleichermaßen robuste wie auch effiziente numerische Lösung mehrdimensionaler Phänomene mit großen Zeitschrittweiten und mit für Anlagensimulationen vertretbarem Rechenaufwand. Die Entwicklung des 3D-Modells ist noch nicht endgültig abgeschlossen. So müssen u. a. verschiedene Zweiphasenmodelle und das

Wasserspiegelmodell für mehrdimensionale Simulationen weiterentwickelt werden. Diese Arbeiten werden im Rahmen eines Anschlussvorhabens weiterverfolgt.

Begleitend zur Entwicklung wurde das 3D-Modell für Testfälle mit analytischen Lösungen und anhand von Anwendungen im Versuchs- und Anlagenmaßstab validiert. Untersucht wurden u. a. Kühlmittelvermischungspänomene bei Zwangs- und Naturkonvektion in den Anlagen UPTF, ROCOM und TALL. Die Simulationen zeigen, dass im Vergleich zu dem bisherigen pseudo-3D Ansatz eine deutliche Ergebnisverbesserung bei Verwendung des 3D-Modells in Verbindung mit moderat verfeinerten Gittern erzielt wird. Im Rahmen der bisherigen Versuchsnachrechnungen haben sich Gitterauflösungen mit 16 Parallelkanälen bzw. Zylindersegmenten für den RDB bewährt. Das 3D-Modell wurde bisher nur anhand einzelner Anwendungen für zweiphasige Strömungen (z. B. UPTF-7) wie auch für dreidimensionale zylindrische Gitter (z. B. ROCOM Test 2.1) verifiziert. Die weitere Modellvalidierung ist Bestandteil des Projekts RS1519. Diese wird eine detaillierte Bewertung des 3D-Modells ermöglichen und Anwenderempfehlungen hinsichtlich potentieller Einsatzgebiete und geeigneter Gitterauflösungen ergeben.

### **6.3 OECD Benchmark PREMIUM**

Die Teilnahme der GRS am OECD/NEA/CSNI Projekt PREMIUM diente der Qualifizierung der international eingesetzten Verfahren zur Bestimmung der Eingangunsicherheiten physikalischer Modelle zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Die GRS hat hierzu die Quantifizierung von Modellunsicherheiten sowie mit ATHLET blinde und offene Best-Estimate-Rechnungen und Unsicherheitsanalysen zu verschiedenen Quench-Experimenten der FEBA und PERICLES Versuchsanlagen durchgeführt. Die Analysen haben gezeigt, dass die vorgeschlagenen Verfahren zur Quantifizierung der Modelleingangsunsicherheiten für die betrachteten Experimente vom sog. *intermediate* Typ nur eingeschränkt zufriedenstellende Ergebnisse liefern. Die Verbesserung dieser Verfahren, insbesondere für *intermediate* Experimente, wird daher Bestandteil eines Nachfolgevorhabens sein. Neben der Absicherung der verwendeten Verfahren wurden im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen auch Unsicherheitsintervalle und -verteilungen der für Quench-Vorgänge relevanten Modellparameter erarbeitet, die bei zukünftigen Analysen berücksichtigt werden können. Zusätzlich wurde ein Beitrag zur Validierung von ATHLET geleistet und Weiterentwick-

lungsbedarf hinsichtlich des Entrainmentmodells und der Abbildung des Wassermittresses in Bündelgeometrien identifiziert.

#### **6.4 Querschnittaufgaben**

Die Querschnittaufgaben umfassten Arbeiten, die der Programmentwicklung und -anwendung insgesamt zugutekommen. Hierzu zählt z. B. die numerische Kopplung externer Pakete, die den Anwendungsbereich von ATHLET erweitern. Durch die Kopplung von ATHLET mit der GRS Software MCDET wurde die Grundlage geschaffen, zukünftig umfassende Unsicherheitsanalysen zu ATHLET Rechenergebnissen unter Berücksichtigung des Einflusses sowohl epistemischer als auch aleatorischer Unsicherheiten durchzuführen. Die Bereitstellung moderner und effizienter Sparse-Matrix Verfahren zur effizienten Simulation von ATHLET-Modellen mit umfangreichen und hochvernetzten Thermofluidsystemen wurde durch die Kopplung mit der quelloffenen PETSc-Bibliothek realisiert. Zusätzlich wurde in ATHLET ein Konzept für neue Schnittstellen auf Basis der Skriptsprache PYTHON umgesetzt, das insbesondere externen Programmanwendern die Anbindung eigener Modelle erleichtert. Neben der Kopplung externer Pakete betrafen die durchgeführten Arbeiten die Zusammenarbeit mit nationalen und internationalen Partnern, die Qualitätssicherung der Programmentwicklung, die kontinuierliche Fortführung der Programmdokumentation sowie die Freigabe neuer ATHLET-Versionen.

#### **6.5 Fazit**

Die übergeordnete Zielsetzung des Projekts RS1507 war, das Systemrechenprogramm ATHLET gemäß dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik für die Durchführung von Reaktorsicherheitsanalysen weiterzuentwickeln und den nationalen und internationalen Anwendern zur Verfügung zu stellen. ATHLET verfügt mit Abschluss des Projekts über etablierte Modelle und Methoden, die die Simulation aller gängigen Reaktoren der Generationen I, II und III erlauben. Darüber hinaus enthält das Programm wesentliche Weiterentwicklungen, die auch die Analyse fortschrittlicher Reaktorkonzepte der Generationen III+ und IV ermöglichen.

Durch die Verbesserung und Neuentwicklung zahlreicher thermohydraulischer und thermo-struktureller Modelle konnte die ATHLET Modellbasis insbesondere für die Beschreibung von LWR konsolidiert und vervollständigt werden. Die durchgeführten Ar-

beiten ermöglichen die detaillierte Simulation wichtiger sicherheitsrelevanter Phänomene im Rahmen postulierter Transienten oder Störfälle, die bisher nur eingeschränkt oder gar nicht berücksichtigt werden konnten. Beispiele hierfür sind

- die Berechnung kritischer Ausströmraten bei Kühlmittelverluststörfällen für unterschiedliche Leckgeometrien, wie z. B. rissförmige Lecks, sowie für alternative Arbeitsmedien wie z. B. schweres oder überkritisches Wasser,
- die adäquate Berücksichtigung der Bündelgeometrie der Brennelemente bei der Berechnung des zweiphasigen Wärmeübergangs im Reaktorkern,
- die Simulation von Zinkborat, das infolge eines Kühlmittelverluststörfalls bei Sumpfbetrieb in den Primärkreis gelangen und sich im Reaktorkern ablagern kann, was Einfluss auf die Kühlung der Brennelemente nimmt,
- die erweiterte Berücksichtigung der in Wasser erfolgenden Absorption und Freisetzung von Stickstoff, das infolge eines postulierten Kühlmittelverluststörfalls durch die Notkühleinspeisung aus den Druckspeichern in den Reaktorkühlkreislauf gelangen kann,
- die Simulation von kondensationsinduzierten Druckstößen in horizontalen Rohren, die z. B. infolge der Einspeisung von unterkühltem Notkühlmittel in die Stränge eines DWR entstehen können und die Integrität des Reaktorkühlsystems gefährden.

Des Weiteren konnte der Modellumfang von ATHLET im Hinblick auf die Simulation innovativer Sicherheitssysteme ausgebaut werden, deren Einsatz vor allem in fortschrittlichen und zukünftigen Reaktorkonzepten vorgesehen ist. Dies betrifft u. a. die Simulation des Notkondensators des SWR Designs KERENA wie auch die Abbildung eines vom IKE Stuttgart entworfenen autarken Nachwärmeabfuhrsystems.

Auch hinsichtlich der Simulation zukünftiger GEN-IV Reaktoren konnten wichtige Ergebnisse erzielt werden. Die Weiterentwicklung des Wärmestrahlungs- und Wärmeleitungsmodells diente nicht zuletzt für Analysen, die im Rahmen des OECD Benchmarks zum prismatischen Hochtemperaturreaktor MHTGR-350 durchgeführt wurden. Als weiteres nichtkondensierendes Gas wurde Argon in ATHLET implementiert. Argon findet häufig bei flüssigmetallgekühlten Reaktoren Verwendung und wird auch in verschiedenen Versuchsanalgen eingesetzt, so z. B. im Karlsruher KASOLA Kreislauf, der Gegenstand von Analysen im Rahmen des Validierungsvorhabens RS1519 ist.

Aktuelle Ergebnisse durchgeführter Validierungsrechnungen zeigen, dass insbesondere in großen Behältern auftretende mehrdimensionale Strömungsphänomene von ATHLET genauer reproduziert werden können, wenn das neu entwickelte 3D-Modell eingesetzt wird. Der bisher in ATHLET für die Simulation derartiger Strömungsvorgänge verfolgte Ansatz auf Basis der Parallelkanaltechnik basierte auf der Lösung unvollständiger Erhaltungsgleichungen und war daher in Bezug auf Ergebnisgenauigkeit und Aussagefähigkeit limitiert. Mit der Implementierung des 3D-Modells kann diese, in der Vergangenheit von den ATHLET Anwendern oft kritisch diskutierte, Programmschwäche beseitigt werden. Zudem wird eine im Vergleich zu anderen international eingesetzten thermohydraulischen Systemrechenprogrammen wie z. B. CATHARE, MARS oder TRACE bestehende Modellierungslücke geschlossen und die Konkurrenzfähigkeit wie auch die Akzeptanz von ATHLET gestärkt. Als Hauptanwendungsgebiete des 3D-Modells sind derzeit Kühlmittelverluststörfälle und Transienten mit asymmetrischem Strömungsverhalten im RDB sowie Konvektionsströmungen in großen Wasserpools anzusehen.

Die wachsende Bedeutung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen schlägt sich sichtbar im fortgeschriebenen deutschen Regelwerk nieder, das grundlegende Anforderungen an die deterministische Analyse von Ereignissen formuliert und die Durchführung deterministischer Bewertungen nach einem *Best-Estimate* Ansatz mit geeigneter Berücksichtigung von Unsicherheiten vorsieht. Die GRS hat hierfür ein statistisches Verfahren entwickelt, das international etabliert und anerkannt ist. Das Verfahren ist im Programm SUSA umgesetzt, das – auch in Kombination mit ATHLET – national wie international Verwendung findet. Durch die Teilnahme der GRS am OECD/NEA/CSNI Projekt PREMIUM wurde die Qualifizierung methodischer Aspekte des Verfahrens vorangetrieben. Hierdurch wird die Methode der GRS nachhaltig für den Einsatz im nationalen wie auch internationalen Genehmigungs- und Aufsichtsverfahren gestärkt.

Durch die im Rahmen des vorliegenden Vorhabens erzielten Fortschritte bei der Kopplung von ATHLET mit MCDET hat sich das Einsatzgebiet von ATHLET im Hinblick auf die effiziente Durchführung umfassender Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen erweitert. Eine umfassende Unsicherheitsanalyse bietet die Möglichkeit, die wechselseitige Abhängigkeit des betrachteten physikalischen Prozesses und der diesen begleitenden Unsicherheiten realistisch zu berücksichtigen. Damit kann die bestehende Vielfalt möglicher Abläufe sicherheitstechnisch relevanter Prozesse in ihrer Gesamtheit erfasst und hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Sicherheit von Reaktoren angemessen

bewertet werden. International verfolgte alternative Entwicklungsansätze für umfassende Unsicherheitsanalysen verfügen aktuell nicht über den Entwicklungsstand von MCDET, so dass ATHLET durch die enge Verknüpfung mit MCDET einen Entwicklungsvorsprung aufweist.

Die Gesamtheit der in diesem Forschungsvorhaben bereitgestellten Modelle, Methoden und Werkzeuge dient der Sicherstellung der mittel- und langfristigen Verfügbarkeit von ATHLET für Reaktorsicherheitsanalysen nach dem Stand von Wissenschaft und Technik im Kontext sich weiterentwickelnder Sicherheitstechniken, steigender Anforderungen an Nachweisverfahren und geänderter IT-Umgebungen. Die Entwicklungen zielen neben der Erweiterung des Programmanwendungsbereichs auf eine Erhöhung der Ergebnissicherheit und eine Erleichterung der Programmhandhabung. Dies alles ist Voraussetzung für die hohe Akzeptanz und die steigende nationale wie internationale Verbreitung des Rechenprogramms, womit ein wertvoller Beitrag zur Bewertung und Etablierung nuklearer Sicherheitsstandards von kerntechnischen Einrichtungen im Inland, in Europa sowie weltweit geleistet wird. Hierfür stellt die GRS die im Rahmen des Projekts RS1507 freigegebene Programmversion *ATHLET Mod. 3.0 Cycle A* zur Verfügung, die aktuell bei folgenden Institutionen und Unternehmen Anwendung findet:

- Im Inland: ANSYS Germany GmbH, E.ON Kernkraftwerk GmbH, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Hochschule Zittau/Görlitz, Universität Stuttgart (IKE), KIT (IFRT und INR), KSG/GFS Kraftwerks-Simulator-GmbH, RWTH Aachen, TH Deggendorf, TU Dresden (Institut für Energietechnik), TU Hamburg-Harburg (Institut für Energietechnik), TU München (FRM II, Lehrstuhl für Informatik, Lehrstuhl für Nukleartechnik), TÜV Nord, TÜV Süd, Universität der Bundeswehr München
- Im Ausland: Nuclear & Radiation Safety Center (Armenien), Enpro Consult Ltd. (Bulgarien), Shanghai Jiatong Universität (China), State Nuclear Power Research Institute (China), Xi'an Jiaotong University (China), DCNS (Frankreich), Universität Pisa (Italien), GET Engineering and Technology Center (Russland), NRC Kurchatov Institute (Russland), OKB Gidropress (Russland), Rostechnadzor (Russland), SEC NRS (Russland), Nuclear Regulatory Authority (Slowakei), Slovak University of Technology (Slowakei), Nuclear Research Institute Rez (Tschechien), Research Centre Rez Ltd. (Tschechien), Analytical Research Bureau (Ukraine), SSTC NRS State Scientific Technical Centre of Ukraine, Centre of Energy Research (Ungarn),

Budapest University of Technology and Economics (Ungarn), JIPNR Sosny (Weißrussland)

- Die Codeüberlassung ist außerdem beantragt von: Shanghai Nuclear Engineering, Research and Design Institute (China), Royal Institute of Technology (Schweden), Atomenergосervice Ltd (Ukraine), Energorisk Ltd. (Ukraine), Varans (Vietnam)

Die Programmanwendung außerhalb der GRS leistet zusätzlich einen wertvollen Beitrag zur Validierung von ATHLET. Sie wurde innerhalb des vorliegenden Vorhabens aktiv unterstützt, um den Rückfluss der erzielten Ergebnisse sicherzustellen und somit die Nutzbarkeit der gesammelten Erfahrungen für die weitere Programmentwicklung zu gewährleisten. Neben der Validierung wird die Qualitätssicherung der Programmentwicklung durch weitere Maßnahmen wie z. B. das softwaregestützte Versionsmanagement, die regelmäßige Durchführung von Regressionstests und die parallel zur Entwicklung betriebene ständige Aktualisierung der Programmdokumentation ergänzt. Diese Maßnahmen orientieren sich an den Anforderungen der Qualitätsmanagementrichtlinie der GRS zur Erstellung von Rechenprogrammen /GRS13/ und sind integrativer Bestandteil der im Forschungsvorhaben RS1507 erfolgten Entwicklungsarbeiten.

## Literatur

- /AKS94/ N. Aksan (PSI), F. D'Auria (Univ. Pisa), H. Glaeser (GRS), J. Lillington (AEAT), R. Pochard (IPSN), A. Sjöberg (Studsvik AB): Separate Effects Test Matrix for Thermal-Hydraulic Code Validation; NEA/CSNI/R(94) 14, Part 1 and Part 2; Paris; 1994.
- /ANN96/ A. Annunziato (JRC), H. Glaeser (GRS), J.N. Lillington (AEAT), P. Marsili (ANPA), C. Renault (IPSN), A. Sjöberg (Studsvik AB): CSNI Integral Test Facility Validation Matrix for the Assessment of Thermal-Hydraulic Codes for LWR LOCA and Transients; NEA/CSNI/R(96) 17; July 1996.
- /ATH12/ G. Lerchl et al.: ATHLET Mod. 3.0 Cycle A Code Documentation: Vol. I: User's Manual, Rev. 6; Vol. II: Programmer's Manual, Rev. 6; Vol III: Validation, Rev. 3; Vol IV: Models and Methods, Rev. 3; GRS-P-1; ATHLET Graphical User Interface; Program Updates; September 2012.
- /AUR11/ F. D'Auria, A. Petrucci: Error sources considered in the „EMAE driven“ CIAU methodology; Proc. of Winter ANS Meeting; LV, USA; 2011.
- /AUS05/ H. Austregesilo, K. Trambauer: Modeling of the Interfacial Area Concentration in the System Code ATHLET; 11<sup>th</sup> Int. Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11); 2005.
- /BEC35/ R. Becker, W. Döring: Kinetische Behandlung der Keimbildung in Übersättigten Dämpfen; Ann. Phys. (Leipzig) 24, 719; 1935.
- /BMU12/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Bekanntmachung der *Sicherheitsanforderungen an Kernkraftwerke* vom 20. November 2012; BAnz AT 24.01.2013 B3, Veröffentlicht am Donnerstag, 24. Januar 2013; [http://regelwerk.grs.de/downloads/banz\\_sianf.pdf](http://regelwerk.grs.de/downloads/banz_sianf.pdf), [www.bmu.de/P266](http://www.bmu.de/P266).
- /BUC14/ S. Buchholz und D. von der Cron: Nachrechnung von fünf Experimenten des NOKO-Versuchsstandes in Karlstein und Vergleich ATHLET und ATHLET-KONWAR; Technische Notiz TN-BUS-14/01; 2014.

- /CAC10/ D. A. Cacuci, M. Ionescu-Bujor: Best-Estimate Model Calibration and Prediction through Experimental Data Assimilation – I: Mathematical framework; NSE, Vol.165, pp. 18-45; 2010.
- /CEU14/ S.C. Ceuca und R. Macián-Juan: Untersuchungen zu Kondensationsschlägen in Rohrleitungssystemen – Condensation Induced Water Hammer CIWA; Abschlussbericht; Förderkennzeichen 02NUK011E; 2014.
- /CEU15/ S.C. Ceuca und P. Pandazis: Nachrechnung der ROCOM-Versuche 2.1 und 2.2 mit ATHLET unter Anwendung des 2D/3D-Modells im Ringraum und unteren Plenum; Technische Notiz TN-RCM-15/01; GRS; März 2015.
- /CLA71/ G. Class: Theoretische Untersuchung der Druckpulsentstehung bei der Dampfkondensation im DAS von SWR- Rechenprogramm KONDAS; KFK 2487;1977.
- /COL72/ J. G. Collier: Convective Boiling and Condensation; 2nd edition; McGraw-Hill Book Company (UK) Ltd.; 1972.
- /CRE01/ A. de Crécy: Determination of the uncertainties of the constitutive relationships of the CATHARE 2 code; M&C 2001; Salt Lake City, Utah, USA; September 2001.
- /CRE04/ A. de Crécy, P. Bazin: Quantification of the Uncertainties of the Physical Models of CATHARE; BE2004; Washington D.C., USA; November 2004.
- /CRE08/ A. de Crécy, P. Bazin, H. Glaeser, T. Skorek: Uncertainty and sensitivity analysis of the LOFT L2-5 test: Results of the BEMUSE programme; Nuclear Engineering and Design, Vol. 238, pp. 3561-3578; Dec. 2008.
- /CSN87/ CSNI Code Validation Matrix of Thermo-Hydraulic Codes for LWR LOCA and Transients; CSNI Report 132; März 1987.
- /DAN51/ P. V. Danckwerts: Significance of Liquid-Film Coefficients in Gas Absorption; Ind. Eng. Chem. 43; 1460; 1951.

- /DER85/ R. Deruaz, P. Clement P., J.M. Vateau: Study on two-dimensional effects in the core of a light water reactor during the ECC's phase following a loss of coolant accident; Nuclear science and technology series report; EUR 10076 EN; 1985.
- /DUA01/ R. Sun, W. Hu, Z. Duan: Prediction of Nitrogen Solubility in Pure Water and Aqueous NaCl Solutions up to high Temperature, Pressure, and ionic Strength; Journal of Solution Chemistry; Vol. 30 No.6; 2001.
- /EIS13/ S. Eismar: Simulation of the Transient Behaviour of the Glass Model with the Thermal-Hydraulic System Code ATHLET; Master Thesis; FH Aachen; September 2013.
- /FAR27/ L. Farkas: Keimbildungsgeschwindigkeit in übersättigten Dämpfen; Z. Physik Chem., A125-236-242; 1927.
- /FER02/ J. Ferziger und M. Peric: Computational Methods for Fluid Dynamics; Springer-Verlag; 2002.
- /FRE39/ J. Frenkel: Statistical Theory of Condensation Phenomena; J. Chem. Phys. 7; 1939.
- /FÜL66/ E. N. Füller, K. Ensley, J. Giddings: A New Method for Prediction of Binary Gas-Phase Diffusion Coefficients; Ind. Eng. Chem.; 58,19-27;1966
- /GEF14/ C. Geffray und R. Macián-Juan: Multi-scale uncertainty and sensitivity analysis of the TALL-3D experiment; Nucl. Eng. Des. (2014); Article in press; 2014.
- /GLA12/ H. Glaeser et al.: Thermohydraulische Rechenmethoden zu Transienten und Störfällen im Reaktorkühlkreislauf unter besonderer Berücksichtigung mehrdimensionaler Strömungen; Abschlussbericht RS1184; GRS-A-3644; 2012.
- /GOT85/ R. C. Gottula et al.: Forced convective, non-equilibrium, post-CHF heat transfer experimental data and correlations comparison report; NUREG/CR-3193, EGG-2245; March 1985.

- /GRS13/ Maßnahmen zur Qualitätssicherung bei der Erstellung von Computerprogrammen in der GRS (QM-Richtlinie Programmentwicklung); QM-Handbuch, Teil 3: Fachanweisung 3 *Fachliche Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen*, Anlage IV; GRS; 2013.
- /HAR03/ R. Fernandez-Prini, J. L. Alvarez, A. H. Harvey: Henry's Constants and Vapor-Liquid Distribution Constants for Gaseous Solutes in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O at High temperatures; J. Phys. Chem. Ref. Data, 32,903-916; 2003.
- /HEM76/ E. A. Hemmingsen, W. A. Gerth: Gas Supersaturation thresholds for Spontaneous Cavitation in Water with Gas Equilibration Pressures up to 570 atm; Z. Naturforsch. A31; 319, 1711-1716; 1976.
- /HER13/ W. Hering et al.: Scientific program of the Karlsruhe Sodium Laboratory; International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles; Paris, 2013.
- /HIG35/ R. Higbie: The Rate of Absorption of Pure Gas into a Still Liquid during Short Periods of Exposure; Trans. Am. Inst. Chem. Eng.; 31, 365-389; 1935.
- /HIR88/ C. Hirsch: Numerical Computation of Internal and External Flows; Vol. 1 und Vol. 2; John Wiley & Sons Ltd.; 1988.
- /HOB92/ W. Hobbhahn: Kondensationsmodell in der 5-Gleichungsversion von ATHLET; GRS-A-1891; März 1992.
- /HOF93/ E. Hofer: Probabilistische Unsicherheitsanalyse von Ergebnissen umfangreicher Rechenmodelle; GRS-A-2002; Januar 1993.
- /HOF01/ Hofer E., M. Kloos, B. Krzykacz-Hausmann, J. Peschke, M. Sonnenkalb: Methodenentwicklung zur simulativen Behandlung der Stochastik in probabilistischen Sicherheitsanalysen der Stufe 2; GRS-A-2997, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; Garching; Dezember 2001.
- /HRI12a/ H.-V. Hristov: Numerical Analyses of ROCOM Tests 1.1 and 1.2 with 1D and 3D ATHLET Models; Technische Notiz TN-HRI-01/12; GRS; 2012.

- /HRI12b/ H.-V. Hristov: Numerical Analyses of ROCOM Test 1.3 with 1D and 3D ATHLET Models; Technische Notiz TN-HRI-02/12; GRS; 2012.
- /HRI13/ H.-V. Hristov: Post test calculation of the UPTF 7 experiments with 1D and 3D ATHLET models; Technische Notiz TN-HRI-01/13; GRS; 2013.
- /HUG91/ E. D. Hughes, R. B. Duffey: Direct Condensation and Momentum Transfer in Turbulent Separated Flows; Int. Journal Multiphase Flow, 17:599-6169; 1991.
- /IHL84a/ P. Ihle, K. Rust: FEBA – Flooding Experiments with Blocked Arrays, Evaluation Report; Kfk Karlsruhe, Rep. KfK 3657; March 1984.
- /IHL84b/ P. Ihle, K. Rust: FEBA – Flooding Experiments with Blocked Arrays, Data Report 1; Test Series I through IV, Kfk Karlsruhe, Rep. KfK 3658; March 1984.
- /IHL86a/ P. Ihle, K. Rust: SEFLEX – Fuel Rod Simulator Effects in Flooding Experiments, Part 1: Evaluation Report; Kfk Karlsruhe, Rep. KfK 4024; March 1986.
- /IHL86b/ P. Ihle, K. Rust: SEFLEX – Fuel Rod Simulator Effects in Flooding Experiments, Part 2: Unblocked Bundle Data; Kfk Karlsruhe, Rep. KfK 4025; March 1986.
- /INA75/ A. YA. Inayatov: Correlation of Data on Heat Transfer. Flow Parallel to Tube Bundles at Relative Tube Pitches of  $1.1 < s/d < 1.6$ ; Heat Transfer – Soviet Research; Vol. 7; No. 3; Mai-Juni 1975.
- /JAC13/ V. Jacht: Implementation and Benchmarking of Sparse-Matrix Solvers for Two-Phase Flow Applications; Bachelor Thesis, Technische Universität München (TUM); 2015.
- /KAL12/ V. I. Kalimanov: Nucleation Theory (Lecture Notes in Physics); Springer; 2012.

- /KAS00/ D. Kashchiev: Nucleation, Basic Theory with Applications; Butterworth-Heinemann; Oxford; 2000.
- /KAV80/ M. C. Kavanaugh, R. R. Trussell: Design of aeration towers to strip volatile contaminants from drinking water; J. Am. Water Works Assoc., 72, 684-692; 1980.
- /KLO99/ M. Kloos, E. Hofer: SUSA –PC, A personal computer version of the program system for uncertainty and sensitivity analysis of results from computer models, Version 3.2 – User’s guide and tutorial; GRS; Garching; August 1999.
- /KLO14/ Kloos M., J. Peschke, J. Scheuer: Weiterentwicklung der MCDET-Methode und des zugehörigen Rechenwerkzeugs für probabilistische Dynamikanalysen; GRS - 330, ISBN 978-3-944161-10-5; Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Garching; Juni 2014.
- /KOL07/ N.I. Kolev: Multiphase Flow Dynamics I: Fundamentals; Springer; 2007.
- /KOM14/ R. Kommajosyula, X. Xiao: 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.
- /KWA83/ H.-W. Kwak, R. L. Panton: Gas Bubble Formation in Nonequilibrium Water-Gas Solutions; J.Chem.Phys.; Vol. 78(9); May 1983.
- /LAN14/ A. Langenfeld: Validierung von ATHLET-30B – Nachrechnung der Versuchsreihe am NOKO-TOPFLOW (HZDR) – Studie der Temperaturschichtung im Behälter; Technische Notiz TN-LAF-14/01; Juni 2014.
- /LER98/ G. Lerchl et al.: Separierte Impulsbilanzen in ATHLET; GRS-A-2546; 1998.
- /LER02/ G. Lerchl: Ein Modell zur Simulation des thermischen Mischens im Kaltstrang; Technische Notiz TN-LER-01/02; GRS; 2002.

- /LER14/ G. Lerchl: Verbesserung der Gemischspiegel-Modellierung in ATHLET; Technische Notiz TN-LER-14/01; GRS; Nov. 2014.
- /LIS00/ The Scalable Software Infrastructure Project <http://www.ssisc.org/>. Lis User Manual, Version 1.3.33.
- /LUM70/ H. Tennekes, J. L. Lumley: A First Course in turbulence; MIT; 1970.
- /LUT96/ W. Luther und P. Romstedt: Verbesserung der Zeitintegration und des Sparse Matrix Pakets in ATHLET; GRS-A 2356; GRS; 1996.
- /NEA11/ BEMUSE Phase VI Report: Status Report on the Area, Classification of the Methods, Conclusions and Recommendations; NEA/CSNI/R(2011)4; March 2011.
- /NER04/ W. Nernst: Theorie der Reaktionsgeschwindigkeit in heterogenen Systemen; Z. Phys. Chem. 47,52-55; 1904.
- /NIE14/ J. Niedermayer: Entwicklung einer interaktiven Kopplung von Simulationsprogrammen; Masterarbeit, Institut für Informatik, TU München; 2014.
- /NIK11/ S. P. Nikonov, K. Velkov, A. Pautz: Detailed Modeling of Kalinin-3 NPP VVER-1000 Reactor Pressure Vessel by the Coupled System Code ATHLET/BIPR-VVER; International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C); Rio de Janeiro, Brazil; 2011.
- /NIK12/ S. Nikonov, I. Pasichnyk, P. Schöffel und K. Velkov: From Macro- to Microscale Hydraulic Simulations of a Reactor Pressure Vessel in the Framework of the System Code ATHLET; 22nd Symposium on Atomic Energy Research on VVER Reactor Physics and Reactor Safety; Pruhonice, Czech Republic; 2012.
- /ORJ13/ J. Ortensi et al.: Prismatic coupled neutronics/thermal fluids transient benchmark of the MHTGR-350 MW core design; Benchmark definition; Februar 2013.

- /OTT02/ T. Ottmann, P. Widmayer: Algorithmen und Datenstrukturen, 4. Auflage, Spektrum Akademischer Verlag; Heidelberg, Berlin, 2002.
- /PAN78/ P. Pana, M. Müller: Subcooled and Two-Phase Critical Flow States and Comparison with Data; Nucl. Eng. Design 45, 117-125; 1978.
- /PAP14/ A. Papukchiev et al.: Comparison of different coupling CFD-STH approaches for pre-test analysis of TALL-3D experiment; Nucl. Eng. Des. (2014); Article in press; 2014.
- /PAR15/ ParaView Homepage: <http://www.paraview.org>; Link aufgerufen am 18.01.2015.
- /PER11/ M. Perez et al.: Uncertainty and sensitivity analysis of a LB LOCA in a PWR Nuclear Power Plant: Results of the Phase V of the BEMUSE programme, Nuclear Engineering and Design; Vol. 241, pp. 4206-4222; 2011.
- /PET10/ A. Petruzzi et al.: Best-Estimate Model Calibration and Prediction through Experimental Data Assimilation – II: Application to a Blowdown Benchmark Experiment; NSE, Vol.165, pp. 45-100; 2010.
- /PET15/ PETSc Homepage: <http://www.mcs.anl.gov/petsc>; Argonne National Laboratory; Link aufgerufen am 18.01.2015.
- /PIT73/ K. S. Pitzer: Thermodynamics of Electrolytes I. Theoretical Basis and General Equations; J. Phys. Chem. 77, 268; 1973.
- /PRA00/ J. M. Prausnitz, B. E. Poling, J. P. O'Connell: The Properties of Gases and Liquids; 5<sup>th</sup> Ed., McGraw-Hill; 2000.
- /PRA04/ H.-M. Prasser, Gy. Ézsöl, G. Baranyai: Water hammer tests, condensation caused by cold water injection into main steam-line of VVER-440-type PWR – Quick-Look Report (QLR); WAHALoads project deliverable D48; 2004.

- /PRA08/ H.M. Prasser, Gy. Ézsöl, G. Baranyai, T. Sühnel: Spontaneous waterhammers in a stream line in case of cold water ingress; *Multiphase Science and Technology* 20, pp. 265-289; 2008.
- /REL05/ RELAP5-3D© Code Manual Volume IV: Models and Correlations; Revision 2.4; Juni 2005.
- /RIN83/ F.J. Ringer: Nachrechnung der LOBI-Düseneichversuche mit dem 1D-Ausströmmodell; GRS-A-854; GRS; 1983.
- /ROO11/ E. van Rooyen: Boiling on a Tube Bundle: Heat Transfer, Pressure Drop and Flow Patterns; Dissertation; Ecole Polytechnique Federale de Lausanne; November 2011.
- /SCA96/ A. Schaffrath: Experimentelle und analytische Untersuchungen zur Wirksamkeit des Notkondensators des SWR 600/100; Dissertation; Forschungszentrum Jülich; Dezember 1996.
- /SCH11/ P. Schöffel: Entwicklung eines ATHLET-internen 2D/3D-Moduls - Herleitung der mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen und Implementierung der zweidimensionalen Gleichungen; Technische Notiz TN-SCO-01/11; GRS; 2011.
- /SCH12/ P. Schöffel: Nachrechnung der Versuchsreihe UPTF-TRAM C1 unter Einsatz des neuen ATHLET 2D/3D-Moduls; Technische Notiz TN-SCO-01/12; GRS; 2012
- /SCH12a/ P. Schöffel: Der Präprozessor des ATHLET-internen 2D/3D-Moduls; Technische Notiz TN-SCO-04/12; GRS; 2012.
- /SCH14/ P. Schöffel et al.: Towards multidimensional thermalhydraulic simulations with the system code ATHLET; 45. Annual Meeting on Nuclear Technology; Frankfurt; 2014.
- /SEI41/ A. Seidell: Solubilities of inorganic and organic compounds; NY 3rd Edition; 1941.

- /SHE00/ G. S. Triantafyllou, L. Shen, D. K. P Yue: Turbulent Diffusion near a Free Surface; Journal of Fluid Mechanics, 407:145-166; 2000.
- /SIE13/ J. Sievers et al.: Structural mechanical and thermal hydraulic aspects on the behaviour of crack like leaks in piping; Eurosafe; Köln; 2013.
- /SIE96/ UPTF-TRAM Versuch C1/C2, Strählen- und Streifenkühlung der RDB-Wand; Quick Look Report NT31/96/17; Siemens AG; Erlangen; 1996.
- /SIN13/ D. Singh: Enhanced modeling and calculation of critical discharge rates in the thermal hydraulic system code ATHLET; Diplomarbeit Universität Stuttgart; 2013.
- /THO10/ J. R. Thome: Engineering Data Book III; Wolverine Tube, Inc.; 2010.
- /TOO58/ H. L. Toor und J. M. Marchello: Film-Penetration Model for Mass and Heat Transfer; AIChE J. 4, 97-101; 1958.
- /VAR83/ N. B. Vargaftik, B. N. Volkov, L. D Voljak: International Tables of the Surface Tension of Water; J.Phys.Chem.Data, Vol.12, No.13, IAPWS; 1983.
- /VEN14/ J. Venker et al.: Transient Analysis of an Autarkic Heat Removal System; Proceedings of the 2014 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants; ICAPP 2014; Charlotte, USA (2014).
- /VER07/ F. Vera-García et al.: Assessment of condensation heat transfer correlations in the modelling of fin and tube heat exchangers; International Journal of Refrigeration 30 (2007) 1018-1028; Januar 2007.
- /VOJ78/ I. Vojtek: Auswertung der 25-Stabbündel-Versuche mit dem Rechenprogramm BRUDI-VA; GRS-A-208; GRS; September 1978.
- /VON13/ D. von der Cron: Weiterentwicklung des ATHLET-internen 2D/3D-Moduls – Implementierung des diffusiven Impulstransports (molekulare Viskosität und turbulente Scheinviskosität); Technische Notiz TN-VDC-13/01; GRS; November 2013.

- /VON14/ D. von der Cron: ATHLET development – Current activities – Revision of heat transfer models; Seminar on GRS Codes – Development, Validation and Application; GRS; März 2014.
- /WEY13/ F. Weyermann: Sparse-Matrixlöser für die ATHLET-Startrechnung, Technische Notiz TN-WEY-13/09, GRS, 2013.
- /WHI24/ W. K. Lewis, W. G. Whitman: Principles of gas Absorption; .Ind. Eng. Chem. 16,1215; 1924.
- /WIC98/ T. Wicket et al.: Report on the Uncertainty Methods Study for Advanced Best Estimate Thermal Hydraulic code Applications; NEA/CSNI/R(97)35; 1998.
- /WIN07/ J. Winkelmann: Diffusion in Gases, Liquids and Electrolytes, Liquids in their Mixtures; Landolt-Börstein, New Series IV/15A; 2007.
- /WOL79/ K. Wolfert: Die Berücksichtigung thermodynamischer Nichtgleichgewichtszustände bei der Simulation von Druckabsenkungsvorgängen; Dissertation TU München; 1979.
- /YAW03/ C. L. Yaws: Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds; Knovel; 2003.
- /ZEL43/ J. B. Zeldovich: On the Theory of New Phase Formation; Cavitation, 525 (English Translation: 1943, Acta Physochem. URSS 18,1.); 1943.
- /ZIT14/ Partikelentstehung und –transport im Kern von Druckwasserreaktoren; Hochschule Zittau/Görlitz; HZG-IPM-1501431-ASB-Entwurf; März 2014.



## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Von der GRS eingesetzte Rechenprogramme mit wichtigen ATHLET Codekopplungen.....	2
Abb. 2.1	Vergleich der kritischen Geschwindigkeit berechnet mit dem alten und dem neuen Gleichungssystem /SIN13/ .....	10
Abb. 2.2	Vergleich des Ausströmfeldes berechnet mit neuer und alter Version.....	11
Abb. 2.3	Kritische Heliummassenstromdichte [ $kg/m^2s$ ] in Abhängigkeit von Temperatur und Druck .....	13
Abb. 2.4	Entspannungsvorgang bei superkritischem Druck für verschiedene Temperaturen .....	15
Abb. 2.5	Kritische Massenstromdichte bei überkritischem Eintrittsdruck .....	16
Abb. 2.6	Riss in der Rohrwand einer Kühlmittleitung /SIE13/ .....	17
Abb. 2.7	Darstellung eines Risses und dessen hydraulischem Durchmesser .....	18
Abb. 2.8	Kritische Leckraten als Funktion des Kühlmitteldrucks am Leckeintritt.....	18
Abb. 2.9	Gemischspiegelpfad in ATHLET .....	21
Abb. 2.10	ATHLET-Nodalisierung zum Testen der Verbesserungen des Gemischspiegelmodells .....	27
Abb. 2.11	Massenstrom und Füllstand beim Entleeren .....	28
Abb. 2.12	Rechenergebnisse zum Entleeren vor der Modellverbesserung .....	29
Abb. 2.13	Rechenergebnisse zum Entleeren nach der Modellverbesserung.....	30
Abb. 2.14	Massenstrom und Füllstand beim Befüllen.....	31

Abb. 2.15	Rechenergebnisse zum Befüllen nach der Modellverbesserung (Fill als Tabelle) .....	31
Abb. 2.16	Massenstrom (Sinus) und Füllstand beim Befüllen .....	32
Abb. 2.17	Rechenergebnisse zum Befüllen nach der Modellverbesserung (Fill als Sinus) .....	32
Abb. 2.18	Rechenergebnisse zum Befüllen vor der Modellverbesserung (Fill als Tabelle) .....	33
Abb. 2.19	Maximale Löslichkeit von Zinkborat in Wasser.....	34
Abb. 2.20	Schematische Darstellung der PMK2-Integralversuchsanlage /PRA08/ ...	36
Abb. 2.21	Repräsentative Strömungsformen im Bereich der Testsektion bei Einsatz des dynamischen IACTE-Modells in ATHLET. PMK2 Exp 05 zu den Zeitpunkten 7,0 s; 7,51 s; 7,55 s (weiß: Dampf, blau: Wasser) /CEU14/ ..	38
Abb. 2.22	Systemdruckverlauf in den Simulationen und im Experiment, im Versuch PMK2 Exp05 /CEU14/ .....	38
Abb. 2.23	Relative Abweichung der Approximation des Duan-Modells zur Bestimmung der maximalen Löslichkeit von N <sub>2</sub> in H <sub>2</sub> O zum ursprünglichen Modell.....	43
Abb. 2.24	Schematische Darstellung der 2-Film-Theorie .....	50
Abb. 2.25	Lineare Interpolation der in /WIN07/ gesammelten Daten zum binären Diffusionskoeffizienten von Stickstoff in Wasser .....	53
Abb. 2.26	Nodalisierung der NOKO-Versuchsanlage in ATHLET (Kondensatorbehälter nur schematisch) .....	56
Abb. 2.27	Geschichtete Strömung mit Stratifizierungswinkel (links) und Ringströmung (rechts). Dampf ist weiß und Kondensat blau dargestellt.....	61

Abb. 2.28	NOKO-Leistung in Abhängigkeit von der Differenz zwischen primär- und sekundärseitiger Wassertemperatur (auf beiden Seiten liegt Sättigungszustand vor). Schwarz: Experiment; Grün: ursprüngliche ATHLET-Version; Rot: modifizierte ATHLET-Version .....	64
Abb. 2.29	Vergleich experimentell ermittelter Brennstabtemperaturen mit berechneten Werten (mit und ohne Bündelfaktor) entlang der Brennstablänge ( $LE \triangleq$ Längeneinheiten) .....	66
Abb. 2.30	Schematische Darstellung der axiale Wärmeleitung .....	67
Abb. 2.31	Radiale und axiale Ansicht des MHTGR-350 (entnommen aus /ORJ13/ und modifiziert) .....	68
Abb. 2.32	Axialer Verlauf der RDB-Innenwandtemperatur. Blau: Ohne Modell für axiale Wärmeleitung. Rot: Mit Modell für axiale Wärmeleitung .....	69
Abb. 2.33	Drei HCO grenzen an ein gemeinsames TFO .....	71
Abb. 2.34	Aufteilung der ursprünglich drei HCO in zehn HCO bei Verwendung des alten Wärmestrahlungsmodells .....	71
Abb. 2.35	HCO ohne Aufteilung bei Verwendung des erweiterten Wärmestrahlungsmodells .....	72
Abb. 2.36	Beispiel-Eingabe für die grüne Strahlungsgruppe in Abb. 2.35 Man beachte die neue Zeile mit SGRB und SGRE .....	72
Abb. 2.37	Unregelmäßige Nodalisierung .....	73
Abb. 2.38	MHTGR-Modell mit altem Strahlungsmodell .....	74
Abb. 2.39	MHTGR-Modell mit erweitertem Strahlungsmodell .....	74
Abb. 2.40	Nodalisierung des Testbeispiels von drei getrennten Turbinen .....	77
Abb. 2.41	Drehzahlverlauf für die drei Turbinen des Testbeispiels .....	78

Abb. 2.42	Temperaturen (oben) und Wärmeströme (unten) vor der Modelländerung .....	82
Abb. 2.43	Temperaturen (oben) und Wärmeströme (unten) nach der Modelländerung .....	83
Abb. 3.1	Versetzte numerische Gitter für Kontrollvolumen- und Leitungsvariablen.....	88
Abb. 3.2	Oben: Beispielgeometrie; Mitte: ATHLET Lösungsvariable; Unten: Geschwindigkeiten in der linken und rechten Halbleitung .....	89
Abb. 3.3	Konvektive Beiträge zur integralen Impulsbilanz.....	95
Abb. 3.4	Multiblock-Gitter für Ringraum (2D) und unteres Plenum (3D) .....	99
Abb. 3.5	2-D Operatorstern für die MF Diskretisierung.....	99
Abb. 3.6	TFO eines Vollzylindergitters .....	100
Abb. 3.7	In grün: BRANCH2M-Kopplung (1D-MF); In rot: 3D - MF Operatorstern .....	102
Abb. 3.8	Diskretisierung in zylindrischen Gittern: Zylindergittersegment in schwarz, abgeleitete ATHLET-Zonen in rot.....	105
Abb. 3.9	Druckrückgewinn für eine reibungsfreie, axialsymmetrisch nach außen gerichtete Strömung .....	105
Abb. 3.10	Instrumentierung im Ringraum /SIE96/ .....	109
Abb. 3.11	Nodalisierung des Ringraums und des unteren Plenums mit 16 Parallelkanälen .....	110
Abb. 3.12	Strömungs- und Temperaturverteilung im Ringraum.....	111
Abb. 3.13	Fluidtemperatur unterhalb des bespeisten kalten Strangs (DC16) .....	112

Abb. 3.14	Fluidtemperatur benachbart (links) und gegenüber (rechts) zur Einspeiseposition.....	112
Abb. 3.15	Vertikale Fluidgeschwindigkeit im unteren Ringraum .....	113
Abb. 3.16	Primärkreis der TALL Anlage /PAP14/ .....	115
Abb. 3.17	Querschnitt der zylindrischen Testsektion der TALL Anlage /GEF14/ ....	116
Abb. 3.18	Nodalisierungsschema der TALL Anlage .....	117
Abb. 3.19	Links: Strömungs- und Temperaturverteilung bei Zwangskonvektion mit ATHLET; Rechts: Geschwindigkeitsfeld mit ANSYS CFD .....	118
Abb. 3.20	Massenstrom durch den Anlagenstrang mit Testbehälter .....	119
Abb. 3.21	Fluidtemperatur am Testbehälteraustritt .....	119
Abb. 3.22	Links: Strömungs- und Temperaturverteilung bei Naturkonvektion mit ATHLET; Rechts: Temperaturfeld mit ANSYS CFD .....	120
Abb. 3.23	Schematische Darstellung eines zweidimensionalen Kanals (oben) und Nodalisierungsschema in ATHLET .....	126
Abb. 3.24	Ergebnisse der Simulation einer ebenen Kanalströmung ( $Re = 168$ ) Oben links: Zeitlicher Geschwindigkeitsverlauf in Kontrollvolumen 450 Unten links: Örtlicher Geschwindigkeitsverlauf zur Zeit $t \approx 262$ s Oben rechts: Geschwindigkeitsprofil über den Kanalquerschnitt bei $t \approx 262$ s .....	128
Abb. 3.25	Geschwindigkeitsprofile einer ebenen Kanalströmung für verschieden feine Nodalisierungen .....	129
Abb. 3.26	Druckverluste einer ebenen Kanalströmung für verschieden feine Nodalisierungen.....	130
Abb. 3.27	Querschnitte des 2D- und 3D-Rohrmodells.....	131

Abb. 3.28	Ergebnisse der Simulation einer laminaren Rohrströmung Oben links: Zeitlicher Geschwindigkeitsverlauf für KV 190 Unten links: Örtlicher Geschwindigkeitsverlauf zur Zeit 1500 s Oben rechts: Geschwindigkeitsprofil über den Kanalquerschnitt bei 1500 s.....	132
Abb. 4.1	Nodalisierung des thermohydraulischen Kanals und der Heizstäbe (schraffiert) .....	140
Abb. 4.2	FEBA Teststrecke mit Gehäuse und Isolierung.....	141
Abb. 4.3	Gemessene und berechnete Hüllrohrtemperaturen in der Höhe 1680 mm .....	150
Abb. 4.4	Hüllrohrtemperatur in Höhe 2225 mm – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung .....	151
Abb. 4.5	Hüllrohrtemperatur in Höhe 1135 mm – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung .....	151
Abb. 4.6	Quench-Front Progression – nach dem ersten Schritt der Quantifizierung .....	152
Abb. 4.7	Hüllrohrtemperatur auf Höhe 3315 mm.....	153
Abb. 4.8	Hüllrohrtemperatur auf Höhe 2225 mm.....	153
Abb. 4.9	Hüllrohrtemperatur auf Höhe 1135 mm.....	154
Abb. 4.10	Wasseraustrag aus der Teststrecke.....	154
Abb. 4.11	Druckverlust in der Mitte der Teststrecke.....	155
Abb. 4.12	Druckverlust entlang der gesamten Teststrecke .....	155
Abb. 4.13	Quench-Front Progression.....	156
Abb. 4.14	Druckverlust in der Mitte der Teststrecke.....	159

Abb. 4.15	Hüllrohrtemperatur auf Höhe 2225 mm.....	160
Abb. 4.16	Hüllrohrtemperatur auf Höhe 1135 mm.....	160
Abb. 4.17	ATHLET Parallelkanalmodell der PERICLES Teststrecke .....	162
Abb. 4.18	Räumliche Diskretisierung des thermohydraulischen Kanals und der Heizstäbe .....	163
Abb. 4.19	Anfängliche axiale Hüllrohrtemperaturverteilung .....	164
Abb. 4.20	Druckverlust in der Mitte des Kanals – Test Nr. RE0064.....	168
Abb. 4.21	Druckverlust in der Mitte des Kanals – Test Nr. RE0079.....	168
Abb. 4.22	Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm – zentrales Bündel.....	171
Abb. 4.23	Hüllrohrtemperatur in Höhe 1828 mm – seitliches Bündel.....	171
Abb. 4.24	Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm – zentrales Bündel.....	172
Abb. 4.25	Hüllrohrtemperatur in Höhe 2998 mm – seitliches Bündel.....	172
Abb. 4.26	Ursprüngliche „blinde“ Referenzrechnung (rot) mit oberer Toleranz- grenze (grün) und modifizierte Post-Test Referenzrechnung (orange) für den PERICLES-Versuch Nr. RE0062 .....	173
Abb. 5.1	MCDET Module für die Kopplung mit einem deterministischen Rechenprogramm und deren Zusammenspiel .....	177
Abb. 5.2	Skizze der durch MCDET berechneten Prozessabläufe.....	188
Abb. 5.3	Übersicht über die im Verlauf von MCDET-Simulationen erzeugten Dateien für die anschließende Ergebnis-Auswertung.....	189
Abb. 5.4	Spezifikation der Dateien mit den Daten für die grafische Aufbereitung .	190
Abb. 5.5	Spezifizierung der Option für die grafische Aufbereitung.....	191

Abb. 5.6	Spezifikation der Prozessgrößen .....	192
Abb. 5.7	Spezifikation von Bedingungen, unter denen Verläufe von Prozessgrößen dargestellt werden .....	192
Abb. 5.8	Spezifikation von Titel und Achsen-Beschriftungen.....	193
Abb. 5.9	Darstellung der Verläufe der H <sub>2</sub> -Masse .....	194
Abb. 5.10	Verläufe der H <sub>2</sub> -Masse unter 4 verschiedenen Bedingungen zum Zeitpunkt der Spannungswiederkehr bei geschlossenem Versagen des Abblaseregelventils .....	196
Abb. 5.11:	Quellströmung auf einem 3D Gitter.....	202
Abb. 5.12	CPU-Zeiten verschiedener Solver für das Beispiel 3D-Quellströmung ...	203
Abb. 5.13	Erweitertes ATHLET Startmenü mit Auswahlfeld zur Erzeugung der Grafikdatei .....	205
Abb. 5.14	GUI für die Erstellung von 3D-Visualisierungsdaten.....	206
Abb. 5.15	GUI des neuen Visualisierungsprogramms für die mit CDR1D berechneten kritischen Massenstromfelder .....	208
Abb. 5.16	Massenstrom durch ein mit Python simuliertes Rückschlagventil.....	212
Abb. 5.17	Füllstandsregelungsmodell in Modelica .....	213
Abb. 5.18	Füllstand im Behälter, geregelt mit Hilfe von Modelica .....	214

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Koeffizienten der Polynome zur Approximation des chemischen Potentials von Stickstoff.....	42
Tab. 2.2	Koeffizienten der Polynome zur Approximation der Fugazität von Stickstoff.....	43
Tab. 2.3	Vergleich der maximalen Löslichkeit: Approximation des Duan-Modells (links) und experimentelle Werte von Linke und Seidell (rechts) .....	44
Tab. 2.4	Koeffizienten zur Approximation der Henry-Konstante gemäß der Modelle von Harvey und Yaws mit Gültigkeitsbereich.....	51
Tab. 3.1	Validierung des 2D/3D-Modells.....	107
Tab. 3.2	Anfangs- und Randbedingungen der UPTF-TRAM C1 Versuche.....	108
Tab. 4.1	Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse.....	143
Tab. 4.2	FEBA Serie I: Tests mit intakter Bündelgeometrie und sieben Abstandshaltern.....	146
Tab. 4.3	Wichtige Eingangsparameter und quantifizierte Unsicherheiten.....	148
Tab. 4.4	Eingabeunsicherheiten für FEBA Unsicherheitsanalysen.....	158
Tab. 4.5	Randbedingungen der PERICLES Versuche .....	161
Tab. 4.6	Eingangsunsicherheiten der PERICLES Unsicherheitsanalysen.....	166



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

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum

**85748 Garching b. München**

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

**10719 Berlin**

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

**38122 Braunschweig**

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

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

**ISBN 978-3-944161-68-6**