

**Rechenmethoden-  
entwicklung für  
Reaktorsicherheits-  
analysen mit dem  
Systemcode ATHLET**

## Rechenmethoden- entwicklung für Reaktorsicherheits- analysen mit dem Systemcode ATHLET

Philipp Schöffel  
Joachim Herb  
Antoine Langenfeld  
Georg Lerchl  
Tomasz Skorek  
Daniel von der Cron

November 2018

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des BMWi (Bundesministerium für Wirtschaft und Energie) unter dem Kennzeichen RS1538 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

**Deskriptoren**

2-Fluidmodell, 3-Feldermodell, ATHLET, Continuous Integration, Druckstoß, Passive Sicherheitssysteme, Systemcode, Thermohydraulik, Unsicherheitsanalyse, Zweiphasenströmung

## Kurzfassung

Das vom BMWi geförderte Projekt RS1538 zur *Rechenmethodenentwicklung für Reaktorsicherheitsanalysen mit dem Systemcode ATHLET* hatte die Weiterentwicklung von Modellen und Methoden zur Untersuchung aktueller Fragestellungen der Reaktorsicherheit zum Ziel, um den zahlreichen nationalen und internationalen Nutzern des AC<sup>2</sup> Thermohydraulikmoduls ATHLET die Durchführung von Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik für bestehende und zukünftige Reaktoren und kerntechnische Einrichtungen zu ermöglichen.

Im Zentrum des Vorhabens standen die Weiterentwicklung und die Ertüchtigung von ATHLET zur Untersuchung von Leichtwasserreaktoren. Zur Simulation passiver Sicherheitssysteme fortschrittlicher Reaktoren der Generation III+ wurde das 3D 2-Fluid-Modell um ein Gemischspiegelmodell erweitert, um Strömungsvorgänge in großen Wasserpools, die zur passiven Nachwärmeabfuhr genutzt werden, abzubilden. Zur Qualifizierung von ATHLET für die Simulation von Druckstößen in Rohrleitungen wurde mit Blick auf kondensationsinduzierte Wasserschläge das Kontaktkondensationsmodell verbessert. Weiterführende Analysen wurden zu unterschiedlichen, Druckstöße auslösenden Ereignissen erfolgreich durchgeführt. Hierzu zählten neben schnellen Kondensationsvorgängen in horizontalen oder vertikalen Rohrleitungssegmenten auch schnelle Armaturenbewegungen und die Beschleunigung mit anschließendem Aufprall einer Wassersäule. Zur detaillierteren Simulation sicherheitsrelevanter, im Störfallverlauf auftretender Strömungsprozesse wurde die Zweiphasenmodellierung ausgebaut. Als Basis für eine geplante signifikante Modellerweiterung wurden Chancen und Herausforderungen der Implementierung eines im internationalen Kontext propagierten Mehrfeldermodells in ATHLET zur Simulation komplexer zweiphasiger Strömungsvorgänge im Reaktordruckbehälter analysiert.

Vor dem Hintergrund der wachsenden Bedeutung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen innerhalb der internationalen Regelwerke wurden die zugrundeliegenden Methoden vorangebracht. Mit den hierzu durchgeführten Arbeiten trägt die GRS maßgeblich zu dem laufenden OECD/NEA/CSNI Projekt SAPIUM bei, dessen Ziel die Entwicklung einer ausgereiften und international anerkannten Methodik zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten in Systemcodes ist. Im Rahmen einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zu einem NACIE-UP Experiment, das Flüssigmetall als Kühlmittel verwendet, wurden mit neuen Arbeitsmedien verbundene Modellunsicherheiten identifiziert und quantifiziert.

Unter Nutzung aktueller Erkenntnisse aus der Programmvalidierung und -anwendung erfolgte eine kontinuierliche Ertüchtigung sämtlicher Programmkomponenten, um ATHLET flexibel und effizient für neue Anwendungssituationen und Fragestellungen einsetzen zu können. Zur Stärkung des Kompetenzerhalts in der Reaktorsicherheit wurde Zuarbeit zu weiteren, vom BMWi geförderten Projekten geleistet und GRS-extern durchgeführte Entwicklungen in ATHLET integriert.

Die bestehenden Methoden zur Qualitätssicherung in der Programmentwicklung wurden ausgebaut und weiter an aktuelle, internationale Standards angeglichen. Zur Durchführung regelmäßiger und automatisierter Softwaretests wurde eine Testumgebung erzeugt, die seit zwei Jahren im produktiven Einsatz ist und die ATHLET-Entwicklung kontinuierlich unterstützt. Erweiterte und qualitätsgesicherte ATHLET-Programmversionen wurden den Anwendern im Rahmen des vorliegenden Projekts zur Verfügung gestellt und über die neu eingerichtete ATHLET User Area verteilt.

## **Abstract**

The research project RS 1538 for “Further Development of Methods for Reactor Safety Analyses with the System Code ATHLET” aimed at the ongoing development of models and methods for the demands of current issues concerning the reactor safety. Numerous national and international users of the thermal-hydraulic code AC<sup>2</sup> are enabled to perform and fulfill safety analyses for existing and future reactors as well as for nuclear facilities on base of the current state-of-the-art of science and technology. The project was financed by the German Federal Ministry for Economic Affairs and Energy (BMWi).

The main subject of the project was the further development and a widened capability of ATHLET to analyze light water reactors (LWRs). For the simulation of huge water pools used for residual heat removal by passive safety systems in advanced reactors of generation III+ the 3D 2-Fluid Model was extended with a mixture level model to capture processes which appear at the free water surface. To qualify ATHLET to simulate condensation induced water hammers the contact condensation model was improved. Further successful analyses had been made for diverse water hammer inducing processes. In addition to the prompt condensation processes in horizontal or vertical pipe segments, the fast-acting valve and the acceleration with following impact of a liquid column were numbered among as well. Furthermore, for a more detailed simulation of safety relevant flow processes in case of transients and accident conditions the two-fluid model was extended. As basis for a planned significant model extension of ATHLET, the implementation of a multi-field-model, its possibilities and challenges had been analyzed.

With respect to an increasing importance of uncertainty and sensitivity analyses in international guidelines their basic methods have been brought forward. For this purpose, GRS contributes essentially to the current OECD/NEA/CSNI project SAPIUM whose aim is to develop a methodological sound and international recognized method to quantify uncertainties of models in system codes. In frame of an uncertainty and sensitivity analysis for a NACIE-UP experiment which uses the liquid metal as coolant, the relevant model uncertainties related to the new working fluid were identified and quantified.

Using latest experiences from the continuous program validation an elaboration of many program components took place to apply ATHLET flexibly and efficiently for situ-

ations of new applications and questions. To ensure the competence maintenance in reactor safety in Germany input and support were provided for different projects supported by the ministry BMWi, as well GRS-external developments were integrated in ATHLET.

The existing methods for quality assurance in program development have been extended and adapted to current international standards. Two years ago, a continuous integration test area was installed to provide regular and automated software tests as well as to support and accompany the development of ATHLET. Enhanced and quality assured ATHLET program versions were provided in the frame of this project and were distributed via the newly established ATHLET User's Area.

# Inhaltsverzeichnis

	<b>Kurzfassung.....</b>	<b>I</b>
	<b>Abstract.....</b>	<b>III</b>
<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
1.1	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele .....	4
1.2	Organisation des Projekts.....	7
<b>2</b>	<b>Simulation von LWR und fortschrittlicher Reaktoren der Generation III+.....</b>	<b>9</b>
2.1	Simulation großer Wasserpools passiver Sicherheitssysteme .....	9
2.1.1	Erweiterung des 2-Fluidmodells um ein Gemischspiegelmodell.....	11
2.1.2	Impulsgleichung für vertikale Leitungen .....	13
2.1.3	Impulsgleichung für horizontale Leitungen im Bereich des Gemischspiegels .....	20
2.1.4	Verteilung der Massen- und Energieflüsse im Bereich des Gemischspiegels .....	27
2.1.5	Weiterentwicklung des Gemischspiegelmodells.....	28
2.1.6	Anwenderunterstützung bei der Gittererzeugung.....	29
2.1.7	Anwendungsbeispiele.....	30
2.2	Simulation von Druckstößen in Rohrleitungssystemen.....	37
2.2.1	Nachrechnung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Ventilschnellschluss.....	38
2.2.2	Nachrechnung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule .....	48
2.2.3	Modellerweiterung zur Simulation kondensationsinduzierter Druckstöße .....	55
2.2.4	Kondensationsinduzierte Druckstöße in vertikalen Rohren (Wasserkannone) .....	56
2.2.5	Kondensationsinduzierte Druckstöße in horizontalen Rohren .....	60
2.2.6	Schlussfolgerungen .....	63

2.3	Thermohydraulik wassergekühlter Systeme.....	65
2.3.1	Simulation zweiphasiger Strömungsvorgänge im Reaktorkern.....	65
2.3.2	Modellierung des Massen- und Energieaustauschs zwischen den Phasen .....	76
2.3.3	Verbesserte Modellierung der kritischen Ausströmung .....	76
2.3.4	Bewertung eines Mehrfeldermodells zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene .....	77
2.4	Erweiterung des Bortransportmodells .....	79
2.5	Neues Arbeitsmedium überkritisches CO <sub>2</sub> .....	80
2.6	Weitere Verbesserungen der thermohydraulischen Modellierung .....	80
2.7	Neutronenkinetik und thermo-strukturelle Modellierung des Reaktorkerns .....	91
2.7.1	Erweiterung des Wärmestrahlungsmodells .....	91
2.7.2	Modifiziertes Kriterium für das Eintreten von DNB .....	94
2.7.3	Berücksichtigung des Einflusses von Abstandshaltern auf den CHF.....	96
2.7.4	Punktkinetikmodell.....	98
2.7.5	Weitere Modellverbesserungen .....	98
2.8	Programmhandhabung und Benutzerfreundlichkeit .....	99
2.8.1	Verbesserungen im Gesamtprogramm .....	100
2.8.2	Verbesserungen der Programmeingabe .....	101
2.8.3	Verbesserung von GCSM .....	102
2.8.4	Verbesserte Benutzerwerkzeuge .....	103
<b>3</b>	<b>Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen .....</b>	<b>105</b>
3.1	Entwicklung einer Methodik zur Quantifizierung unsicherer Modelleingangsparameter .....	105
3.1.1	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	105
3.1.2	OECD/NEA/CSNI Projekt SAPIUM.....	109
3.2	Unsicherheitsanalyse zum Experiment NACIE-UP – Fundamental Test 1 .....	122
3.2.1	Auswahl des Experiments und Qualifizierung des Referenzdatensatzes.....	122
3.2.2	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	126

3.2.3	Neue Erkenntnisse zum Experiment .....	146
3.2.4	Zusammenfassung und Ausblick .....	147
<b>4</b>	<b>Qualitätssicherung und bilaterale Zusammenarbeit .....</b>	<b>149</b>
4.1	Refactoring .....	149
4.1.1	Einführung neuer Programmierstandards .....	149
4.1.2	Restrukturierung .....	150
4.1.3	Refactoring der Subroutine MAGM0 .....	151
4.1.4	Plug-in-basierte Kopplung aller AC <sup>2</sup> Module .....	152
4.2	Qualitätssicherung der Programmentwicklung .....	153
4.2.1	Freigabe neuer Programmversionen.....	154
4.2.2	Skriptbasierte Erzeugung der ATHLET-Installationsroutinen .....	155
4.2.3	Kontinuierliche Integration .....	156
4.2.4	Entwicklungsumgebung .....	171
4.2.5	Programmdokumentation.....	171
4.2.6	Neue Tools zur automatischen Erzeugung der Programmdokumentation.....	172
4.3	Kooperation mit externen Programmanwendern .....	172
4.3.1	Zusammenarbeit in der Programmentwicklung .....	172
4.3.2	Neue Benutzerschnittstellen .....	173
4.3.3	Erfahrungsaustausch.....	174
4.3.4	Neue ATHLET User Area .....	175
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>177</b>
5.1	Weiterentwicklung der Modellierung wassergekühlter Reaktoren .....	177
5.2	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen .....	180
5.3	Qualitätssicherung der Programmentwicklung und Kooperation mit nationalen und internationalen Programmanwendern .....	181
5.4	Fazit und Ausblick.....	183
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>187</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>195</b>

	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>201</b>
<b>A</b>	<b>Anhang: Machbarkeitsstudie zur Implementierung eines Mehrfeldermodells im Systemcode ATHLET .....</b>	<b>203</b>
A.1	Einleitung.....	203
A.2	Aktueller Stand der Mehrfeldermodelle .....	205
A.3	Einsatz von Mehrfeldermodellen in System- und Subchannelcodes .....	211
A.4	Erster Entwurf eines 3-Felder-Modells für ATHLET .....	217
A.5	Schließungsgleichungen.....	227
A.6	Planung und Risiken der Implementierung.....	237
A.7	Validierungsmöglichkeiten für das 3-Feldermodell .....	245
A.8	Zusammenfassung .....	247
A.9	Literatur .....	249

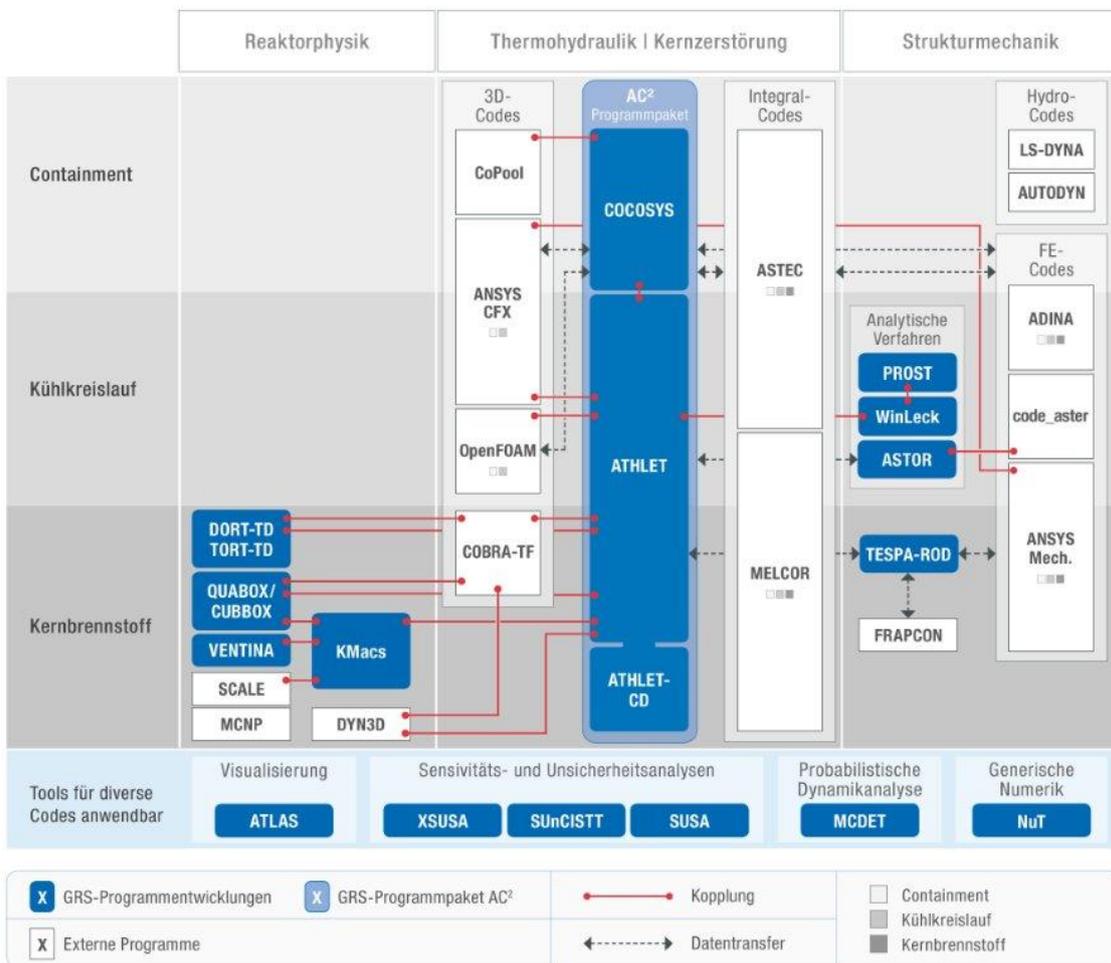
# 1 Einleitung

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 Energie (BMWi) fördert die Entwicklung und Validierung derartiger Programme im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung. Auf dieser Basis entwickelt die GRS das Programmpaket AC<sup>2</sup>, das die Module ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und ATLAS beinhaltet.

Das Systemrechenprogramm ATHLET (**A**nalyse der **T**hermohydraulik von **L**ecks und **T**ransienten) erlaubt hierbei die thermohydraulische Simulation der Kühlsysteme. Das Modul ATHLET-CD (**C**ore **D**egradation) stellt Modelle zur Spaltproduktfreisetzung sowie zur Schädigung und Verlagerung des Reaktorkerns bereit. COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem) dient der Untersuchung der Thermohydraulik und des Spaltproduktverhaltens im Reaktorsicherheitsbehälter. Ergänzt werden diese Programme durch die Simulatorsoftware ATLAS, die die interaktive Simulation und Visualisierung aller beteiligten Module und Prozesse ermöglicht. Das Anwendungsspektrum der Programme für Reaktoranlagen umfasst Zustände des Normalbetriebs und des anomalen Betriebs, Störfälle wie auch Unfälle.

Für die Simulation kerntechnischer Anlagen rücken allgemein und insbesondere für fortschrittliche Reaktoren, bei denen bspw. passive Sicherheitssysteme im Sicherheitsbehälter angeordnet sind, gekoppelte integrale Analysen, die die Vorgänge im Kühlkreislauf und im Containment gleichzeitig simulieren, zunehmend in den Vordergrund. Um dieser neuen Anforderung der Programmanwendung nachzukommen, hat die GRS nach Antragstellung für dieses Vorhaben entschieden, die Einzelcodes für den Kühlkreislauf, ATHLET bzw. ATHLET-CD, und für das Containment, COCOSYS, in einem einheitlichen Programmsystem AC<sup>2</sup> zu integrieren. Ein Schwerpunkt der aktuellen und zukünftigen Arbeiten der GRS ist dabei die Realisierung eines zuverlässig, flexibel und einfach nutzbaren Programmpakets, in dem die Einzelprogramme als Module aufeinander abgestimmt sind. Weiterhin erfolgt die Verteilung von ATHLET grundsätzlich als Bestandteil des Programmpakets AC<sup>2</sup>. Insofern sind die hier durchgeführten Arbeiten an ATHLET gleichermaßen und ohne Brüche auch Weiterentwicklungsarbeiten an AC<sup>2</sup>. Gleichwohl wird ATHLET auch in Zukunft als Einzelkomponente von AC<sup>2</sup> anwendbar bleiben.

AC<sup>2</sup> bzw. einzelne Module von AC<sup>2</sup> werden als deterministisches Analysewerkzeug sowohl im Inland als auch im Ausland von etwa 70 Organisationen für Forschungsaktivitäten sowie gutachterliche Tätigkeiten zur Behördenunterstützung in kerntechnischen Genehmigungs- und Aufsichtsverfahren eingesetzt. Wesentliche Zielsetzung des vorliegenden Projekts war die Weiterentwicklung des thermohydraulischen Systemrechenprogramms ATHLET entsprechend dem Fortschritt von Wissenschaft und Technik. Hiermit wird sowohl der GRS wie auch allen anderen nationalen und internationalen Programmanwendern die Möglichkeit gegeben, Sicherheitsanalysen für ein breites Spektrum nukleartechnischer Anlagen und postulierter Stör- und Unfälle durchzuführen, um auf dieser Basis Sicherheitsaussagen zuverlässig treffen und internationale Sicherheitsstandards weiterentwickeln zu können.



**Abb. 1.1** AC<sup>2</sup> mit ATHLET als Bestandteil der GRS Codelandschaft

Für weiterführende Multiphysik- und Multiskalenanalysen ist AC<sup>2</sup> mit unterschiedlichen, sowohl von der GRS entwickelten als auch externen Rechenprogrammen gekoppelt (Abb. 1.1). Zur detaillierten Simulation fluiddynamischer Vorgänge existieren Kopplungen zwischen ATHLET und den CFD-Programmen ANSYS-CFD und OpenFOAM. Es

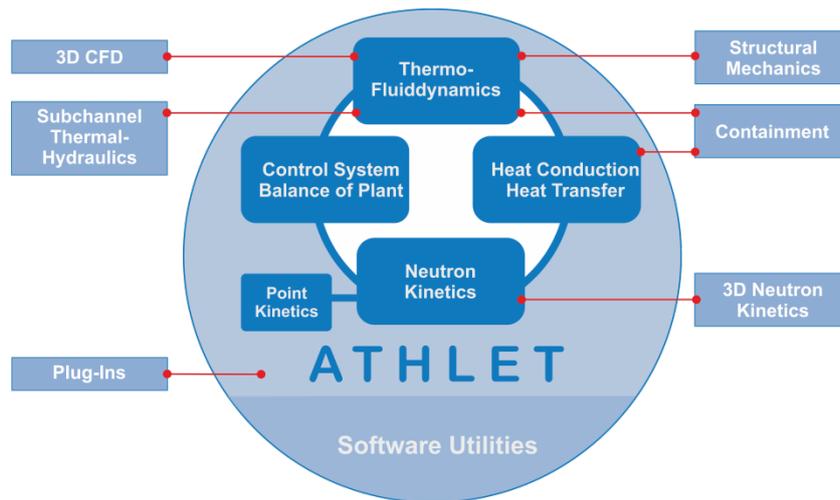
existieren außerdem Schnittstellen zu den GRS 3D-Neutronenkinetik-Codes QUABOX/CUBBOX und TORT-TD. Zusätzlich wurden Kopplungen zu BIPR, DYN3D, KIKO3D und PARCS realisiert. Des Weiteren sind strukturmechanische Programme wie TESP-ROD mit ATHLET gekoppelt.

Für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Bewertung der Aussagesicherheit von deterministischen Rechenergebnissen ist insbesondere ATHLET eng mit der GRS Software SUSA (**S**oftware für **U**nsicherheits- und **S**ensitivitäts **A**analysen) verzahnt. Beide Programme gemeinsam werden auch international weit verbreitet verwendet. Um auch umfassende Unsicherheitsanalysen, sogenannte integrierte deterministisch probabilistische Unsicherheitsanalysen, mit ATHLET durchführen zu können, existiert die Kopplung von ATHLET mit MCDET.

Das thermohydraulische Systemrechenprogramm ATHLET besteht aus mehreren grundlegenden Modulen, die der Simulation aller beim Betrieb von Reaktoren wichtigen Komponenten und auftretenden Phänomenen und Prozessen dienen (Abb. 1.2). Hierzu zählen

- das TFD-Modul zur Simulation der ein- und zweiphasigen Strömungsvorgänge,
- das HECU-Modul zur Beschreibung der Wärmeleitung in Strukturen sowie des Wärmeübergangs an das Fluid,
- das GCSM-Modul zur Abbildung des Regelsystems und
- das Neutronenkinetik-Modul zur Berechnung der nuklearen Leistungserzeugung.

Ein weiterer integraler Bestandteil des ATHLET-Pakets sind verschiedene Softwarewerkzeuge des Pre- und Postprocessings, die den Anwender bei der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung einer Sicherheitsanalyse unterstützen.



**Abb. 1.2** ATHLET-Module und Kopplungen

## 1.1 Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele

Übergeordnetes Ziel des vorliegenden Vorhabens ist es, den zahlreichen im Umgang mit ATHLET geschulten Anwendern ein leistungsstarkes, zuverlässiges und anwenderfreundliches Werkzeug zur Verfügung zu stellen, das die Durchführung von Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik für bestehende und zukünftige Reaktoren und kerntechnische Einrichtungen erlaubt. Dieses Hauptziel gliedert sich in folgende Einzelziele:

### Weiterentwicklung der Modellierung wassergekühlter Reaktoren

Ziel ist, aktuelle Entwicklungen der Kernkraftwerkstechnologie mit ATHLET zu simulieren und den Modellumfang von ATHLET an die neuen sicherheitstechnischen Herausforderungen anzugleichen. Erweiterte Anforderungen an die Modellbildung stellt die Simulation neuer Sicherheitstechniken und neuer Reaktordesigns. Ein Beispiel sind passive Sicherheitssysteme fortschrittlicher Reaktoren, deren Betriebsverhalten und Betriebsbedingungen sich signifikant von denen aktiver Systeme unterscheiden. Die Simulation derartiger Systeme mit ATHLET erfordert daher die genaue Prüfung und gezielte Erweiterung des bestehenden Modellumfangs.

Weitere Anforderungen ergeben sich aus aktuellen Fragestellungen der Reaktorsicherheit, die den Fokus auf neue, sicherheitsrelevante Phänomene lenken, deren hinreichend detaillierte Simulation häufig eine Erweiterung der Modellbasis erfordert. Ein Beispiel hierfür ist die Simulation von Druckstößen in Rohrleitungssystemen, z. B. in-

folge schnellen Öffnens oder Schließens von Armaturen oder schlagartiger Kondensationsvorgänge. Darüber hinaus liefern die kontinuierliche Programmvalidierung sowie regelmäßige Rückmeldungen aus der Programmanwendung Hinweise auf Programmschwächen, die die Ertüchtigung des ATHLET Modellumfangs erforderlich machen.

### **Verbesserte Programmhandhabung und Benutzerfreundlichkeit**

Die weite Verbreitung von ATHLET gibt der GRS die Verantwortung, den Nutzern nicht nur ein zuverlässiges, sondern auch ein anwenderfreundliches und effizientes Analyserwerkzeug zur Verfügung zu stellen. Bei der Weiterentwicklung von ATHLET werden daher auch Aspekte der Codehandhabung berücksichtigt. Hierzu zählen u. a. die bedarfsgerechte Bereitstellung neuer Optionen im ATHLET-Eingabedatensatz wie auch die Programmbeschleunigung zur Verringerung von Simulationszeiten.

Als modernes Simulationswerkzeug wird ATHLET mit verschiedenen grafischen Hilfsprogrammen für das Pre- und Postprocessing bereitgestellt, die dem Anwender die Durchführung und Analyse der Simulation erleichtern. Auch diese Werkzeuge müssen kontinuierlich dem erweiterten ATHLET-Umfang sowie neuen softwaretechnischen Möglichkeiten und Anforderungen angepasst werden.

### **Weiterentwicklung der Methodik zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten**

Neue Anforderungen resultieren auch aus einem fortgeschriebenen Regelwerk, das bereits in einigen Ländern die Durchführung von sogenannten *Best Estimate Plus Uncertainty* (BEPU) Analysen zur Sicherheitsbewertung vorsieht. Vor diesem Hintergrund sollte die Methodik zur Durchführung von Unsicherheitsanalysen im internationalen Kontext weiterentwickelt werden. Hierfür nimmt die GRS am OECD/NEA/CSNI Projekt SAPIUM (Systematic Approach for Input Uncertainty quantification Methodology) teil, in dessen Rahmen eine ausgereifte, für Industrieanwendungen geeignete Methodik zur Quantifizierung der Unsicherheiten von Modelleingangsparametern erarbeitet wird. So sollen z. B. Anforderungen an die experimentelle Datenbasis sowie an softwarebasierte Methoden zur Bestimmung der Modellunsicherheiten definiert werden, um deren Eignung sicherzustellen. Die Unsicherheit der physikalischen Modellierung liefert in der Regel den größten Beitrag zur Gesamtunsicherheit. Eine standardisierte und allgemein anerkannte Methodik zu deren Quantifizierung ist bisher nicht verfügbar.

## **Quantifizierung von Modellunsicherheiten in Korrelationen neuer Arbeitsmedien**

Zu Unsicherheiten der für die Simulation innovativer Reaktorkonzepte neu implementierten Modelle liegen bislang kaum Erfahrungen vor. Der Kenntnisstand hierzu sollte im Zuge einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zu einem Experiment, das in einer mit Flüssigmetall als Arbeitsmedium betriebenen Versuchsanlage durchgeführt wurde, ausgebaut werden. Die durchgeführte Analyse trägt neben der Quantifizierung relevanter unsicherer Modelleingangsparameter auch dazu bei, Verbesserungspotential der ATHLET-Modellierung für neue Arbeitsmedien offenzulegen und auf dieser Basis Empfehlungen für Weiterentwicklungen zu geben.

## **Qualitätssicherung**

Die Qualität des Rechenprogramms ATHLET wird durch zahlreiche Maßnahmen sichergestellt. Hierzu zählen z.B. eine detaillierte Programmdokumentation, ein softwarebasiertes Versions- und Freigabemanagement und eine kontinuierliche Programmvalidierung. Um die vorhandene Qualität des Programms langfristig aufrechtzuerhalten, sollten die qualitätssichernden Maßnahmen um neue Verfahren ergänzt werden. Hierzu zählt das Code-Refactoring, um die Codebasis an neue softwaretechnische Möglichkeiten und Fortschritte in der IT anzugleichen und somit Transparenz, Lesbarkeit, Wartbarkeit und Erweiterbarkeit des Programms langfristig sicherzustellen.

Ein weiteres Projektziel besteht in der Schaffung einer sogenannten *Continuous Integration* Testumgebung, die eine regelmäßige und automatisierte Verifikation der ATHLET-Programmentwicklung ermöglicht. Auf Basis automatisiert durchgeführter Tests und Regressionsrechnungen wird hierbei die Funktionsfähigkeit und Zuverlässigkeit der Software bewertet und sichergestellt. Dies ist auch Grundlage für die Erstellung qualitätsgesicherter Programmversionen. Im Rahmen des ATHLET-Release-managements sollten neuen Programmversionen eingefroren und an alle Programmanwender mittels der ebenfalls neu aufgesetzten ATHLET User Area verteilt werden.

## **Kooperation mit Programmanwendern**

Ein wichtiger Aspekt der Programmentwicklung ist der Erfahrungsrückfluss aus der Programmvalidierung und –anwendung. Zu diesem Zweck erfolgt ein regelmäßiger In-

formationsaustausch auch mit den GRS-externen ATHLET-Anwendern, z. B. über die ATHLET User Area oder im Rahmen von internationalen Anwendertreffen. Darüber hinaus werden die Anwender bei der Nutzung von ATHLET begleitet und eigene Modellentwicklungen, z.B. durch Bereitstellung geeigneter Schnittstellen, unterstützt. Die Entwicklungen können bei Bedarf in die ATHLET Hauptentwicklungslinie übernommen werden.

## **1.2 Organisation des Projekts**

Das abgeschlossene Vorhaben stellt eine kontinuierliche Fortführung des vom BMWi geförderten Projekts RS1507 /SCH15/ dar. Die durchgeführten Entwicklungsarbeiten, begleitet von Maßnahmen zur Qualitätssicherung und zur Anwenderunterstützung, gliedern sich inhaltlich entsprechend dem Arbeitsprogramm in drei technisch-wissenschaftliche Arbeitspakete:

### **Arbeitspaket 1: Simulation von LWR und fortschrittlichen Reaktordesigns der Generationen III und III+:**

Dieses Arbeitspaket umfasst Arbeiten zum Ausbau und zur Ertüchtigung der ATHLET-Modellierung zur Simulation wassergekühlter Anlagen unter Berücksichtigung spezieller Anforderungen passiver Sicherheitssysteme. Hierfür wurden alle ATHLET-Module (Abb. 1.2) weiterentwickelt.

Im Einzelnen sind folgende Arbeiten inbegriffen:

- Weiterentwicklung von ATHLET zur Simulation großer Wasservorlagen passiver Sicherheitssysteme (siehe Kapitel 2.1),
- Simulation von Druckstoßphänomenen in Rohrleitungen mit ATHLET (Kapitel 2.2),
- Verbesserung der thermohydraulischen Modellierung zur Simulation sicherheitsrelevanter Phänomene und zweiphasiger Strömungsvorgänge in wassergekühlten Systemen (Kapitel 2.3 und folgende)
- Ertüchtigung der neutronenkinetischen und thermo-strukturellen Modellierung (Kapitel 2.7).

Des Weiteren wurden im Rahmen dieses Arbeitspakets Arbeiten zur Verbesserung der Programmhandhabung und zur Erhöhung der Benutzerfreundlichkeit von ATHLET und der zugehörigen Softwarewerkzeuge durchgeführt. Diese sind in Kapitel 2.8 dokumentiert.

### **Arbeitspaket 2: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen:**

Dieses Arbeitspaket umfasste methodische Arbeiten zur Durchführung von Unsicherheitsanalysen zu ATHLET-Ergebnissen und die Untersuchung und Quantifizierung bisher nicht untersuchter Modellunsicherheiten, die mit der Modellierung neuer Arbeitsmedien verbunden sind. Die hierbei erzielten Ergebnisse sind im Kapitel 3 zusammengefasst.

### **Arbeitspaket 3: Qualitätssicherung und bilaterale Zusammenarbeit:**

Dieses Arbeitspaket widmete sich Aspekten der Qualitätssicherung in der Programmentwicklung und der Kooperation mit Anwendern und Entwicklern auf nationaler und internationaler Ebene (siehe Kapitel 4).

Ergänzt wurden und werden diese Arbeiten insbesondere durch Entwicklungen im Rahmen folgender, vom BMWi geförderter Projekte der GRS:

- RS1530 und RS1558 zur Modernisierung der numerischen Verfahren in den AC<sup>2</sup>-Programmen
- RS1535A – EASY: Integrale experimentelle und analytische Nachweise der Beherrschbarkeit von Auslegungsstörfällen allein mit passiven Systemen
- RS1527 – Entwicklung und Validierung von Rechenmodellen zur Simulation von Zweiphasenströmungen und kritischen Wärmeströmen
- RS1515 und RS1547 zur Rechenmethodenentwicklung für innovative Reaktorsysteme
- RS1519 und RS1548 zur Validierung von Rechenprogrammen zur Simulation von Störfällen
- RS1199 und RS1537 zur Weiterentwicklung der Werkzeuge zur grafischen Modellierung und Visualisierung

Die im Rahmen dieser Projekte gesammelten, neuen Erkenntnisse und Modelle zur Sicherheitsbewertung nukleartechnischer Anlagen werden im ATHLET-Quellcode zusammengeführt. Die kontinuierliche Qualitätssicherung dieser Entwicklungen sowie deren Freigabe für alle ATHLET-Anwender in Form neuer, validierter Programmversionen war Bestandteil des vorliegenden Vorhabens.

## **2 Simulation von LWR und fortschrittlicher Reaktoren der Generation III+**

### **2.1 Simulation großer Wasserpools passiver Sicherheitssysteme**

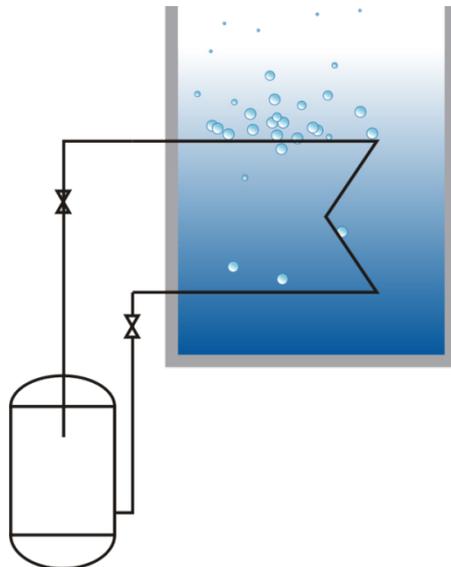
Insbesondere fortschrittliche Reaktordesigns der Generation III+, aber auch innovative Reaktoren der Generation IV, verfügen vermehrt über passive Sicherheitssysteme, deren korrekte Simulation die Entwicklung, Implementierung und Validierung neuer Modelle und Methoden in ATHLET erforderlich macht. Im Gegensatz zu aktiven Systemen, die die Basis des Sicherheitskonzepts von derzeit betriebenen Reaktoren der Generation II und III bilden, nutzen passive Systeme grundlegende physikalische Prozesse wie Naturumlauf, Verdampfung, Kondensation oder Gravitation. Aufgrund des (überwiegenden) Fehlens aktiver Komponenten wie z. B. Pumpen können die treibenden Kräfte sehr gering sein, insbesondere dann, wenn passive Systeme bei geringen Druck- bzw. Dichtedifferenzen eingesetzt werden. Passive Systeme suchen sich ihre im Verlauf einer Transiente kontinuierlich verändernden Betriebspunkte in Abhängigkeit der vorliegenden thermohydraulischen Randbedingungen selbst. Bei geringen treibenden Kräften haben Unsicherheiten in diesen Randbedingungen einen großen Einfluss auf das Betriebsverhalten passiver Systeme. Dies kann ggf. zu qualitativen Änderungen im Systemverhalten führen, z. B. wenn Critical Heat Flux an Brennstabhüllrohren auftreten kann oder wenn Ansprechdrücke von (passiven) Einspeisesystemen rechtzeitig erreicht werden sollen. Daher ist es von besonderer Bedeutung, relevante Randbedingungen mit hoher Genauigkeit vorhersagen zu können.

Passive Sicherheitssysteme können gemäß /IAE91/ nach dem Grad und der Ausgestaltung ihrer Passivität in vier Kategorien eingruppiert werden (Tab. 2.1).

**Tab. 2.1** Kategorisierung passiver Sicherheitssysteme /IAE91/

Kategorie	A	B	C	D
Beispiel	RDB, Brennstabhülle	Notkondensator	Rückschlagklappe, Druckspeicher	Kernflutsystem (gravitationsgetrieben mit batteriebetriebenen Ventil)
Bewegliches Arbeitsmedium	-	X	X	X
Bewegliche mechanische Teile	-	-	X	X
Externe Energieversorgung	-	-	-	X
Externe Signale	-	-	-	X

Zu der Kategorie B gehören in große Wasserbecken untergetauchte Wärmetauscher, die von verschiedenen Reaktordesigns genutzt werden, um Wärme (Nachzerfallsleistung) aus dem Primärkreis oder Sekundärkreis abzuführen. Abb. 2.1 veranschaulicht dies.



**Abb. 2.1** Passive Wärmeabfuhr aus dem Primärkreis mittels geodätisch erhöhter Wasservorlage

Die Wasserbecken sind meist innerhalb des Sicherheitsbehälters angeordnet. Um die Leistungsübertragung der Wärmetauscher möglichst genau vorhersagen zu können, müssen die relevanten thermohydraulischen Randbedingungen und Phänomene korrekt simuliert werden. Hierzu zählen das Strömungsverhalten und die Temperaturen an

den Wärmetauscherrohren im Pool, aber auch (unterkühltes) Sieden im Pool sowie Kondensations- und Verdampfungsvorgänge an der Wasseroberfläche, die wechselseitig mit dem Druckaufbau im Containment zusammenhängen.

Um die großskaligen Zirkulationsströmungen und die sich einstellenden Temperaturschichtungen in Wasserpools hinreichend detailliert wiedergeben zu können, wurde das 3D-Modell von ATHLET adaptiert. Besondere Anforderungen ergeben sich aus der Simulation der freien Wasseroberfläche. Um diese abzubilden, verfügt ATHLET zwar grundsätzlich über ein Wasserspiegelmodell. Dieses war jedoch bisher nur im Rahmen des eindimensionalen 5-Gleichungsmodells verfügbar, wohingegen die 3D-Gleichungen nur für das 6-Gleichungsmodell (2-Fluid-Modell) realisiert sind. Ziel war daher, das dreidimensionale 2-Fluid-Modell um ein Wasserspiegelmodell zur Simulation von großen Wasserpools zu erweitern.

Im Zusammenhang mit der Simulation großer Wasserpools koordiniert die GRS das Projekt EASY, in dessen Rahmen sowohl experimentelle als auch numerische Analysen zu passiven Sicherheitssystemen am Beispiel des KERENA Designs von AREVA durchgeführt werden. Die GRS ist u. a. für die Validierung eines ATHLET Pool-Modells zuständig. Die im vorliegenden Projekt entwickelten Methoden und Modelle werden im Rahmen des EASY-Vorhabens zur Simulation großer Wasservorlagen wie beispielsweise des Flutbeckens, das als Wärmesenke des Notkondensators dient, eingesetzt.

### **2.1.1 Erweiterung des 2-Fluidmodells um ein Gemischspiegelmodell**

Das in ATHLET implementierte Gemischspiegelmodell ermöglicht die dynamische Nachverfolgung einer horizontalen Zwischenphasenfläche zwischen stratifiziertem Wasser (ggf. mit Blasen) und der Dampf-/Gas-Atmosphäre (ggf. mit Tropfen). Zu diesem Zweck wird das Kontrollvolumen (KV), das aktuell den Gemischspiegel enthält, in zwei Sub-Kontrollvolumina ober- und unterhalb des Gemischspiegels aufgeteilt, die beide separat mittels eines jeweils eigenen Satzes an Erhaltungsgleichungen bilanziert werden. Die Erhaltungsgleichungen des 2-Fluidmodells wurden zu diesem Zweck erweitert, um den Gemischspiegel und seine Bewegung geeignet zu berücksichtigen. Dies betrifft insbesondere die Impulsgleichung, deren einzelne Beiträge adaptiert wurden.

Die phasenspezifische Impulsgleichung des 2-Fluidmodells ist in ATHLET als partielle Differentialgleichung für die Phasengeschwindigkeit formuliert, deren zeitliche Änderung aus einer Summe mehrerer Druckgradienten resultiert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(w_v^j A^j) = \frac{1}{DSA_j} (\Delta p_{stat} + \Delta p_{grav} + \Delta p_{MF} + \Delta p_{fric} + \Delta p_{source}) \quad (2.1)$$

Hierin bedeuten:

$\Delta p_{stat}$  der statische Druckunterschied zwischen zwei benachbarten KV

$\Delta p_{grav}$  der hydrostatische Druckunterschied

$\Delta p_{MF}$  der Momentum Flux Term

$\Delta p_{fric}$  der Reibungsverlust durch Wand- und Zwischenphasenreibung sowie durch Formverluste

$\Delta p_{source}$  weitere Quellterme (z.B. Pumpenhöhe etc.)

Die Impulsgleichung wird in ATHLET für Leitungen gelöst. Leitungen verbinden die Zentren zweier benachbarter KV. Die Berechnung der Quellterme der rechten Seite der Impulsgleichung (2-1), die früher nur homogene KV berücksichtigte, wurde für inhomogene KV mit Gemischspiegel erweitert. Nachfolgend werden die Modellierungen für vertikale und horizontale ATHLET-Leitungen detaillierter dargestellt. Hierbei bedeutet in ATHLET

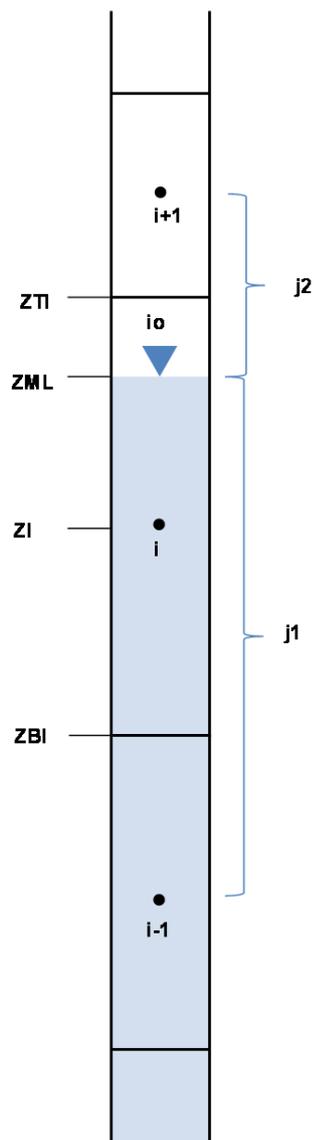
- Horizontal: eine horizontale oder eine zur Horizontalen leicht geneigte Leitung (mit  $\sin(\alpha) < 0,2$ )
- Vertikal: eine vertikale oder geneigte Leitung ( $\sin(\alpha) \geq 0,2$ )

Der Einfachheit halber dokumentieren die folgenden Kapitel nur die Modellierung für echt horizontale bzw. vertikale Leitungen und nicht für geneigte Leitungen. Die Implementierung in ATHLET berücksichtigt aber auch letztere. Des Weiteren wird nicht im Detail auf die Modellierung innerhalb der Massen- und Energiebilanzen eingegangen.

Hier konnte zu großen Teilen auf der bereits vorhandenen Implementierung des 5-Gleichungsmodells mit Gemischspiegel aufgesetzt werden, so dass sich die durchgeführten Maßnahmen eher auf die technische Ablauffähigkeit des Programms konzentrierten.

### 2.1.2 Impulsgleichung für vertikale Leitungen

Der Gemischspiegel teilt ein vertikales KV in zwei Sub-KV auf. Die Situation verdeutlicht Abb. 2.2.  $i_0$  bezeichnet das obere KV. Die Längen der angrenzenden vertikalen Leitungen ( $j_1$  und  $j_2$  in Abb. 2.2) verändern sich kontinuierlich entsprechend der aktuellen Lage der Gemischspiegelhöhe  $ZML$ .



**Abb. 2.2** KV- und Leitungsgrößen am Gemischspiegelpfad

### 2.1.2.1 Reibungsdruckverlust

Der gesamte Reibungsdruckverlust entlang einer Leitung ergibt sich aus den Verlusten der linken und rechten Halbleitung, die, mit ihrem jeweiligen relativen Anteil  $FZLJ$  (bzw.  $1 - FZLJ$ ) multipliziert, den gesamten Leitungsdruckverlust  $DPFRJ$  ergeben.  $FZLJ$  wird zu Beginn im Rahmen der ATHLET Startrechnung bestimmt. Für eine Leitung, die links (rechts) an ein Gemischspiegel-KV anschließt, wird nun der linke (rechte) relative Anteil entsprechend der veränderten Halbleitungslänge modifiziert (siehe z.B. Gleichung (2.2)). Die Reibungsdruckverlustkoeffizienten  $RLDF2L$  und  $RLDF2V$  werden für jede Phase separat berechnet. Für den Reibungsdruckverlust in der gesamten Leitung  $j1$  folgt somit entsprechend Abb. 2.2 für die Wasserphase (Gleichungen (2.2)) und die Dampfphase (2.3), jeweils unter Berücksichtigung der geänderten Halbleitungslänge (analog für Leitung  $j2$  die Gleichungen (2.4), (2.5)):

$$\begin{aligned}
 DPFR_{Lj1} &= f(FZL_{j1} \cdot RLDF2L_{j1}, Fluid_{i-1}) \\
 &+ f\left((1 - FZL)_{j1} \cdot \frac{ZML(i) - ZBI(i)}{ZI(i) - ZBI(i)} \cdot RLDF2L_{j1}, Fluid_i\right)
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\begin{aligned}
 DPFR_{Vj1} &= f(FZL_{j1} \cdot RLDF2V_{j1}, Fluid_{i-1}) \\
 &+ f\left((1 - FZL)_{j1} \cdot \frac{ZML(i) - ZBI(i)}{ZI(i) - ZBI(i)} \cdot RLDF2V_{j1}, Fluid_i\right)
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}
 DPFR_{Lj2} &= f\left(FZL_{j2} \cdot \frac{ZTI(i) - ZML(i)}{ZTI(i) - ZI(i)} \cdot RLDF2L_{j2}, Fluid_i\right) \\
 &+ f((1 - FZL)_{j2} \cdot RLDF2L_{j2}, Fluid_{i+1})
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned}
DPFRV_{j2} = f & \left( FZLJ_{j2} \cdot \frac{ZTI(i) - ZML(i)}{ZTI(i) - ZI(i)} \cdot RLDF2V_{j2}, Fluid_i \right) \\
& + f((1 - FZLJ)_{j2} \cdot RLDF2V_{j2}, Fluid_{i+1})
\end{aligned} \tag{2.5}$$

### 2.1.2.2 Trägheitsterm

Der Trägheitsterm  $DSAJ$  ist ein Faktor, der auf der rechten Seite der Impulsgleichungen im Nenner erscheint (Gleichung (2.1)). Er ist ein Maß für die Leichtigkeit, mit der die Fluidsäule einer Leitung beschleunigt werden kann. Die relativen Anteile des Trägheitsterms für die beiden Halbleitungen einer Leitung sind durch  $FSALJ$  bzw.  $(1 - FSALJ)$  gegeben. Befindet sich im linken (rechten) Kontrollvolumen einer Leitung ein Gemischspiegel, so wird der Trägheitsterm der entsprechenden Halbleitung unter Berücksichtigung der genauen Gemischspiegelposition angepasst. Für die beiden Leitungen  $j1$  und  $j2$  entsprechend Abb. 2.2 folgt somit:

$$\begin{aligned}
DSAJ_{j1}^* &= DSAJ_{j1} \cdot \left( FSALJ_{j1} + (1 - FSALJ_{j1}) \cdot \frac{ZML(i) - ZBI(i)}{ZI(i) - ZBI(i)} \right) \\
DSAJ_{j2}^* &= DSAJ_{j2} \cdot \left( FSALJ_{j2} \cdot \frac{ZTI(i) - ZML(i)}{ZTI(i) - ZI(i)} + (1 - FSALJ_{j2}) \right)
\end{aligned}$$

Das Vorgehen ist analog der Beschreibung für das 5-Gleichungsmodell in /LER14/.

### 2.1.2.3 Hydrostatischer Druckunterschied

Der hydrostatische Druckunterschied  $DPDZLJ$  bzw.  $DPDZVJ$  für die beiden Phasen entlang einer vertikalen Leitung (diese kann sowohl senkrecht als auch geneigt verlaufen) setzt sich für jede Phase aus zwei Termen zusammen, der Gravitation der Wasser-Dampf-/Gas-Mischung und der Auftriebskraft (bzw. Abtriebskraft) der einen Phase innerhalb der jeweils anderen.

$$\Delta p_{grav,k} = \Delta p_{mixture} + \Delta p_{buoyancy,k} \tag{2.6}$$

Beide Terme der rechten Seite hängen von der vertikalen Länge der Fluidsäule ab, die durch Leitungslänge und ggf. Neigungswinkel gegeben ist. Falls in einem der beiden einer Leitung benachbarten KV ein Gemischspiegel vorhanden ist, wird die Leitungslänge entsprechend der Position des Gemischspiegels modifiziert, analog wie in Abb. 2.2 für  $j_1$  und  $j_2$  abgebildet.

Für die Leitung  $j_1$  in Abb. 2.2 folgt bei Vorliegen eines Gemischspiegels in KV  $i$  für den Gravitations- und den Auftriebsterm:

$$\Delta p_{mixture} = -[\rho_{m,i} \cdot (ZML - ZB_i) + \rho_{m,i-1} \cdot (ZB_i - Z_{i-1})] \cdot g \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \Delta p_{buoyancy,l} &= -[\alpha_i \cdot (\rho_{l,i} - \rho_{v,i}) \cdot (ZML_i - Z_j) + \alpha_{i-1} \\ &\cdot (\rho_{l,i-1} - \rho_{v,i-1}) \cdot (Z_j - Z_{i-1})] \cdot g \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \Delta p_{buoyancy,v} &= \\ &[(1 - \alpha_i) \cdot (\rho_{l,i} - \rho_{v,i}) \cdot (ZML_i - Z_j) + (1 - \alpha_{i-1}) \\ &\cdot (\rho_{l,i-1} - \rho_{v,i-1}) \cdot (Z_j - Z_{i-1})] \cdot g \end{aligned} \quad (2.9)$$

Der hydrostatische Druckunterschied bestimmt maßgeblich die Druckdifferenz entlang einer vertikalen Leitung und somit den Druck im Zentrum eines KV, der von ATHLET letztlich ausgegeben wird. Zu beachten ist nun, dass durch die veränderliche Leitungslänge der Druck, der für die den Gemischspiegel enthaltende Zone berechnet wird, nicht mehr dem Druck im KV-Zentrum, sondern dem Druck auf Höhe des Gemischspiegels entspricht (d.h. am „Ende“ der Leitung). Vor der Ausgabe in die Plotdaten-Datei wird dieser Gemischspiegeldruck daher geeignet korrigiert, um sprungfreie Verläufe des KV-Drucks zu erhalten, falls der Gemischspiegel das KV erreicht/verlässt.

#### 2.1.2.4 Momentum Flux am Gemischspiegel

Der Momentum Flux Term setzt sich aus zwei Beiträgen zusammen, dem direkten (1D) Impulstransport in Strömungsrichtung sowie dem 3D Impulsquertransport. Nachfolgend wird die Behandlung des direkten Impulstransports im Gemischspiegelbereich be-

Innerhalb des 2-Fluidmodells wird der direkte Momentum Flux in Strömungsrichtung mittels eines Upwind-Verfahrens berücksichtigt. Dies bedeutet für die Geschwindigkeit in einer Leitung  $j$ , dass der Impulseintrag aus Richtung der stromaufwärts gelegenen Leitung berücksichtigt wird. Um bei Strömungsrichtungswechsel in Leitung  $j$  einen stetigen Übergang zu erzielen, wird zusätzlich in Abhängigkeit von der in der Leitung  $j$  herrschenden Geschwindigkeit (bei Strömungsumkehr klein, nahe Null) auch der Impulseintrag der Leitung stromabwärts berücksichtigt /LER98/. Dies ergibt, stark vereinfacht, als Beitrag zur Impulsbilanz:

$$\Delta p_{MF} = \frac{\rho}{2} (w_{j_1}^2 - w_j^2 - w_{j_2}^2) \quad (2.10)$$

Hierbei wird eine Nachbarleitung  $j_1$  bzw.  $j_2$  nur dann berücksichtigt, wenn ihre Geschwindigkeit in Richtung der Leitung  $j$  gerichtet ist.

Für die Simulation des Impulstransports innerhalb eines Gemischspiegel-Pfads muss zusätzlich geprüft werden, ob zwischen den benachbarten Leitungen  $j$  und  $j_1$  bzw.  $j$  und  $j_2$  aktuell ein Gemischspiegel vorhanden ist. Da unterhalb und oberhalb des Gemischspiegels unterschiedliche Strömungsbilder vorherrschen – z.B. Liquid mit aufsteigenden Blasen bzw. Dampf mit fallenden Tropfen – ist ein Impulstransport über den Gemischspiegel hinweg physikalisch schwierig zu beschreiben, außerdem vermutlich vernachlässigbar. Daher wird kein 1D Impulstransport *über* den Gemischspiegel hinweg in ATHLET berechnet. Gleichwohl wird für die jeweils kontinuierliche Phase (Liquid unterhalb des Gemischspiegels, Dampf oberhalb) die Gemischspiegelgeschwindigkeit  $w_{ML}$  zur Berechnung eines Impulseintrags auf die nächst gelegene Leitung verwendet. Damit wird z.B. berücksichtigt, dass die Flüssigkeit innerhalb der Leitung unterhalb eines Gemischspiegels, bei fallendem Gemischspiegel, einen nach unten gerichteten Impulseintrag erfährt, da sich am oberen Ende der Leitung eine bereits fallende Wassersäule befindet. Ansonsten würde ein physikalisch großer Beschleunigungsdruckverlust in der Leitung unterhalb des Gemischspiegels berechnet.

Um numerische Oszillationen in der Leitung  $j$  zu vermeiden, wird für die Berechnung des Impulseintrags die Geschwindigkeit der benachbarten, stromaufwärtigen

oder -abwärtigen Leitung vor Eintreten des Gemischspiegels in die entsprechende, stromaufwärts oder -abwärts gelegene Zone

- für die kontinuierliche Phase stetig in die Gemischspiegelgeschwindigkeit und
- für die disperse Phase stetig auf Null

überführt. Zusätzlich geht der gesamte konvektive Term in Leitung  $j$  gegen Null, wenn der Gemischspiegel die Höhe der Leitung  $j$  erreicht und überschreitet. Für die in Abb. 2.3 dargestellte Situation eines sukzessive steigenden Gemischspiegels ergibt sich somit folgende Implementierung für den konvektiven Term der beiden Phasen in Leitung  $j$ :

$$\Delta p_{MF}^{liquid} = \begin{cases} \frac{\rho}{2} \left( \frac{dZ_{j1}^-}{dZ_{i1up}} w_{j1}^2 - w_j^2 - w_{j2}^2 \right) & \text{für } Z_{j1up} < Z_{ML} < Z_{j1} \\ \frac{\rho}{2} (-w_j^2 - w_{j2}^2) \frac{dZ_j^-}{dZ_{i1}} & \text{für } Z_{j1} < Z_{ML} < Z_j \\ \frac{\rho}{2} (w_{j1}^2 - w_j^2 - w_{ML}^2) \frac{dZ_j^+}{dZ_{i2}} & \text{für } Z_j < Z_{ML} < Z_{j2} \\ \frac{\rho}{2} (w_{j1}^2 - w_j^2 - \tilde{w}_{j2}^2) & \text{für } Z_{j2} < Z_{ML} < Z_{j2up} \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\Delta p_{MF}^{vapor} = \begin{cases} \frac{\rho}{2} (\tilde{w}_{j1}^2 - w_j^2 - w_{j2}^2) & \text{für } Z_{j1up} < Z_{ML} < Z_{j1} \\ \frac{\rho}{2} (w_{ML}^2 - w_j^2 - w_{j2}^2) \frac{dZ_j^-}{dZ_{i1}} & \text{für } Z_{j1} < Z_{ML} < Z_j \\ \frac{\rho}{2} (w_{j1}^2 - w_j^2) \frac{dZ_j^+}{dZ_{i2}} & \text{für } Z_j < Z_{ML} < Z_{j2} \\ \frac{\rho}{2} \left( w_{j1}^2 - w_j^2 - \frac{dZ_{j2}^+}{dZ_{i2up}} w_{j2}^2 \right) & \text{für } Z_{j2} < Z_{ML} < Z_{j2up} \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\text{mit } \tilde{w}_{j1} = \frac{dZ_{j1}^-}{dZ_{i1up}} w_{j2} + \left( 1 - \frac{dZ_{j1}^-}{dZ_{i1up}} \right) w_{ML}$$



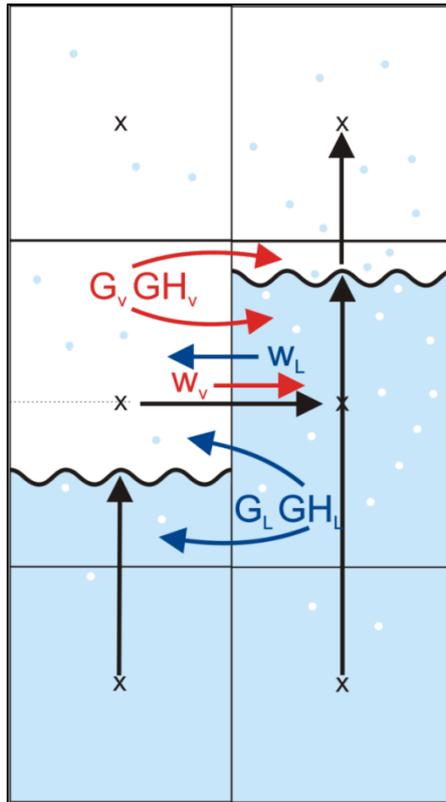
beim Entstehen/Verschwinden des Gemischspiegels eine Unstetigkeit nicht auszuschließen. Für den konkreten Fall der Simulation eines Pools bedeutet dies bei Verschwinden des Gemischspiegels am unteren Ende des Pools (z.B. nach Fluten des Reaktorkerns im Fall des KERENA Flutbeckens) für die erste Leitung *innerhalb* des Gemischspiegelpfades:

- Für die kontinuierliche Phase (in diesem Fall Dampf) wird im MF-Term von der ML-Geschwindigkeit auf die Leitungsgeschwindigkeit der Randleitung des Gemischspiegelpfades umgeschaltet. Da sich Gemischspiegel und die Strömung jedoch von der Leitung wegbewegen, wird in der Regel kein merklicher Einfluss auf den MF-Term eintreten (Gemischspiegel befindet sich stromabwärts).
- Für die disperse Phase (in diesem Fall Tropfen) wird im MF-Term von Null auf die Leitungsgeschwindigkeit umgeschaltet. Dieser Fall ist vernachlässigbar, da sich die disperse Phase in Richtung ML bewegt (der Gemischspiegel befindet sich also stromabwärts) und der ML selbst sich von der Leitung wegbewegt.

Nach derzeitigem Stand kann davon ausgegangen werden, dass die beschriebene, potentielle Unstetigkeit für die Simulation von Wasserpools ohne Bedeutung ist. Gleichwohl sollte die Implementierung zukünftig verbessert werden, um eine hohe Stabilität von Gemischspiegelsimulationen mit dem 2-Fluidmodell im Allgemeinen sicherzustellen.

### **2.1.3 Impulsgleichung für horizontale Leitungen im Bereich des Gemischspiegels**

Für die Simulation des RDB oder von Pools werden mehrdimensionale TFO-Netzwerke aus parallelen, vertikalen Pipes und horizontalen Querverbindungen verwendet. Horizontale Leitungen zwischen vertikalen KV von parallelen Pipe-Objekten werden mittels Single Junction Pipes oder Cross-Connection Objekten (CCO) dargestellt. Befindet sich in einem oder in beiden durch eine horizontale Leitung verbundenen KV ein Gemischspiegel, muss die Zweiphasenströmung oberhalb und unterhalb des Gemischspiegels geeignet modelliert werden. Abb. 2.4 veranschaulicht die Situation: Auf Basis der beiden horizontalen Phasengeschwindigkeiten  $w_l$  und  $w_v$ , die Ergebnisse der Lösung der Impulsgleichung (2.1) sind, werden unterschiedliche Massenströme  $G$  und Energieströme  $GH$  zwischen den Subkontrollvolumen oberhalb und unterhalb des Gemischspiegels modelliert.



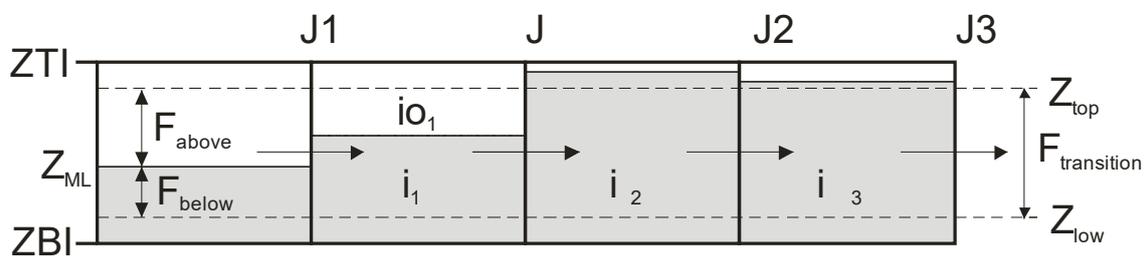
**Abb. 2.4** Strömungssimulation am Gemischspiegel

Zur Berechnung der Quellterme der rechten Seite der Impulsgleichung werden auf Basis des Füllstands in den beiden benachbarten Kontrollvolumen die phasenspezifischen Stoffwerte (Dichte etc.) für die Strömung innerhalb der Leitung als gemittelte Größen beider Sub-KV bestimmt. Hierfür wird ein Übergangsbereich zwischen  $Z_{top}$  und  $Z_{low}$  definiert (siehe hierzu Abb. 2.5), innerhalb dessen die Stoffwerte beim Fallen (Steigen) des Gemischspiegels von Querströmung unterhalb (oberhalb) des ML hin zu Querströmung oberhalb (unterhalb) des ML stetig ineinander überführt werden. Die Ausdehnung des Übergangsbereiches ist definiert als  $F_{transition}=0,8 \cdot (Z_{TI}-Z_{BI})$ . Er wird für den Fall einer geneigt horizontalen Leitung ggf. geeignet reduziert. Geneigte Leitungen können z.B. bei der geometrischen Nachbildung einer halbkugelförmigen Kalotte mit parallelen Kanälen auftreten (siehe z. B. Abb. 2.8).

Für die linke Hälfte der Leitung  $j_1$  berechnet sich eine Stoffgröße  $f$  somit wie folgt:

$$f(j_{1,left}) = \begin{cases} f(i_{o_1}) & \text{für } Z_{ML} \leq Z_{low} \\ \frac{F_{above}}{F_{transition}} f(i_{o_1}) + \frac{F_{below}}{F_{transition}} f(i_1) & \text{für } Z_{low} < Z_{ML} < Z_{top} \\ f(i_1) & \text{für } Z_{ML} \geq Z_{top} \end{cases} \quad (2.13)$$

Die Stoffwerte gehen anschließend in die Berechnung aller Quellterme von Gleichung (2-1) ein.



**Abb. 2.5** Geometriegrößen für eine horizontale Leitung im Bereich eines Gemischspiegels

### 2.1.3.1 Hydrostatischer Druck

Anders als für die vertikalen Leitungen werden die Leitungslängen horizontaler Leitungen bei Passage eines Gemischspiegels nicht modifiziert.

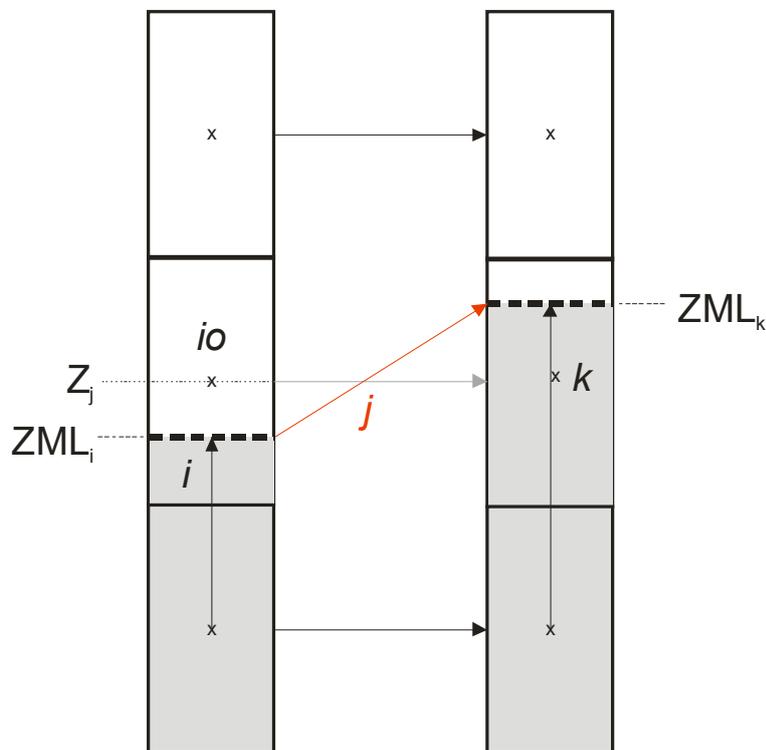
Die Berechnung des hydrostatischen Druckunterschieds setzt sich für horizontale Leitungen (die sowohl waagrecht als auch geneigt verlaufen können) aus den beiden Beiträgen *Gravitation des Gemischs* und *Auftrieb* zusammen, wobei die Auftriebskraft um die sog. Wasserspiegelkraft erweitert wird. Die einzelnen Beiträge werden nachfolgend beschrieben:

**Gravitation:** Die Gravitationskraft entlang einer horizontalen Leitung  $j$  ergibt sich generell aus den Fluidichten der beiden benachbarten Zonen und der Neigung der Leitung zu:

$$\Delta p_{mixture} = -[\rho_{m,i} \cdot (Z_j - Z_i) + \rho_{m,k} \cdot (Z_k - Z_j)] \cdot g \quad (2.14)$$

Befinden sich die Leitungshöhe  $Z_j$  wie auch die Zentren der beiden benachbarten KV  $Z_i, Z_k$  auf derselben Höhe, wird der Term Null. Befindet sich aber ein Gemischspiegel in einer oder beiden benachbarten Zonen, so verändern sich die Leitungslängen der anschließenden vertikalen Leitungen wie in Kapitel 2.1.2 beschrieben. Abb. 2.6 veranschaulicht dies. Die gleichermaßen veränderten hydrostatischen Druckunterschiede (Gleichung (2-7)) entlang der vertikalen Leitungen müssen auch von den horizontalen Leitungen geeignet erfasst werden (rote Leitung in Abb. 2.6), womit für den Gravitationsterm entlang einer horizontalen Leitung am Gemischspiegel folgt:

$$\Delta p_{mixture} = -[\rho_{m,io} \cdot (Z_j - ZML_i) + \rho_{m,k} \cdot (ZML_k - Z_j)] \cdot g \quad (2.15)$$



**Abb. 2.6** Gravitation entlang einer horizontalen Leitung am Gemischspiegel

**Wasserspiegelkraft:** Die sogenannte Wasserspiegelkraft (oder „water-level-force“ in der ATHLET-Terminologie) beschreibt die Wirkung des hydrostatischen Drucks innerhalb der Impulsgleichung für den Fall eines horizontalen Strömungspfad. Anschaulich lässt sich dieser Term verstehen als Ausgleich unterschiedlicher Füllstände in zwei benachbarten, durch eine Leitung verbundenen Kontrollvolumina.

Die Wasserspiegelkraft fand bisher bei Einsatz des 2-Fluidmodells in ATHLET für *alle* horizontalen Leitungen innerhalb des Simulationsgebiets Anwendung. (Hinweis: Hierbei wurde die Wasserspiegelkraft nicht auf Basis des echten Gemischspiegels, der bisher im 2-Fluid-Modell nicht vorhanden war, bestimmt, sondern anhand der kollabierten Füllstände.) Während dies für horizontale Rohrleitungen physikalisch unmittelbar plausibel erscheint, sind Vorhandensein und Wirkung der Wasserspiegelkraft innerhalb vertikaler Geometrien mit ausgeprägt vertikal orientierter Strömungsrichtung weniger offensichtlich. Beispiele für derartige Geometrien sind der Ringraum und der Kern im Reaktordruckbehälter, die in ATHLET typischerweise durch mehrere, mit horizontalen Querleitungen verbundene Parallelkanäle dargestellt werden. Hierzu durchgeführte Analysen haben gezeigt, dass die Wasserspiegelkraft den Queraustausch infolge eines vorhandenen Dampfgehaltsgradienten sogar erheblich überschätzen kann.

Daher wurden folgende Modifikationen der Wasserspiegelkraft für das 2-Fluidmodell in ATHLET vorgenommen:

- Die Wasserspiegelkraft kann für horizontale Querverbindungen von vertikalen Parallelkanälen deaktiviert werden (Standardeinstellung, empfohlen).
- Liegt innerhalb der vertikalen Parallelkanäle ein echter Gemischspiegel vor, so wird für diese Zone immer die Wasserspiegelkraft simuliert. Dies betrifft z.B. die Simulation von Wasserpools, für die auf Gemischspiegelhöhe ein Ausgleich unterschiedlicher Füllstände physikalisch zu erwarten ist.

Die Wasserspiegelkraft in Form einer Druckdifferenz lässt sich schreiben als Produkt der Größen Dichte, Erdbeschleunigung, charakteristische Länge (Höhe der KV) und räumliche Ableitung des Dampfgehalts. Für die beiden Phasen lautet diese:

$$\Delta p_{level,l} = -\alpha_j \cdot (\overline{\rho_{l,j}} - \overline{\rho_{v,j}}) \cdot [(\alpha_i - \alpha_k) \cdot (Z_{top,j} - Z_{low,j})] \cdot g \cdot \cos(j) \quad (2.16)$$

$$\Delta p_{level,v} = (1 - \alpha_j) \cdot (\overline{\rho_{l,j}} - \overline{\rho_{v,j}}) \cdot [(\alpha_i - \alpha_k) \cdot (Z_{top,j} - Z_{low,j})] \cdot g \cdot \cos(j) \quad (2.17)$$

Der Ausdruck  $[(\alpha_i - \alpha_k) \cdot (Z_{top,j} - Z_{low,j})]$  bedeutet hierin die unterschiedlichen Füllstände in Form unterschiedlicher kollabierter Füllstände in den beiden Zonen i und k. Die Leitungshöhe entspricht wiederum dem Übergangsbereich aus Abb. 2.5. Randbereiche werden für einen stetigen Übergang beim Eintreten/Austreten eines Gemischspiegels in eines der beiden KV benötigt.

Für den Fall von Leitungen zwischen Kontrollvolumina mit „echtem“ Gemischspiegel ist die Phasenverteilung in den Volumina durch die Position des Gemischspiegels unmittelbar gegeben. In diesem Fall kann die Wasserspiegelkraft aus dem Vergleich der beiden „echten“ Gemischspiegel-Positionen abgeleitet und muss nicht anhand der kollierten Füllstände berechnet werden.

### 2.1.3.2 Direkter Momentum Flux

Zur Berechnung des direkten (1D) Momentum Flux (Impulstransport in Strömungsrichtung) wird, wie in Kapitel 2.1.2.4 dargestellt, im Wesentlichen die Geschwindigkeit in der stromaufwärts gelegenen Leitung zur Berechnung des Impulstransports berücksichtigt. Bei Vorliegen eines oder mehrerer Gemischspiegel im Bereich einer horizontalen Leitung  $j_3$  (Abb. 2.5) wird der MF-Term nach folgenden Regeln ermittelt:

- Befindet sich ein Gemischspiegel im Übergangsbereich der Leitung (linke und/oder rechte Halbleitung), so wird der gesamte MF-Term vernachlässigt. Die Bereiche oberhalb des Übergangsbereichs  $[Z_{top}; Z_{TI}]$  bzw. unterhalb des Übergangsbereichs  $[Z_{BI}; Z_{low}]$  werden zum stetigen Ein- bzw. Ausblenden des gesamten MF-Terms genutzt.
- Befindet sich ein Gemischspiegel im Übergangsbereich des stromaufwärts über nächsten KV  $i_2$ , so wird der Impulstransport von Leitung  $j_2$  vernachlässigt. Auch hier werden die Bereiche oberhalb und unterhalb des Übergangsbereichs zum stetigen Ein- bzw. Ausblenden des MF-Beitrags von  $j_2$  verwendet.

Ziel dieser beiden Modellierungsvorgaben ist, einen Impulstransport nur für oberhalb *oder* unterhalb eines Gemischspiegels verlaufende Strömungen zu berechnen. Dies ist erforderlich, da ATHLET nur eine einzige Phasengeschwindigkeit für jede Leitung kennt (siehe Abb. 2.4). Damit kann beispielsweise für eine horizontale Leitung in Höhe eines Gemischspiegels nicht zwischen Dampfgeschwindigkeit oberhalb des Gemischspiegels und Blasengeschwindigkeit unterhalb des Gemischspiegels unterschieden werden. Infolgedessen könnte z.B. ein horizontaler Impulstransport von der Dampfphase oberhalb des Gemischspiegels auf die Blasen unterhalb des Gemischspiegels berechnet werden, der physikalisch unrealistisch und daher zu vermeiden ist.

Für eine positive Phasengeschwindigkeit in Leitung  $j_3$  von Abb. 2.5 folgt somit für den direkten MF:

$$\Delta p_{MF}(j_3) = \frac{\rho}{2} \left( \frac{Z_{ML}(i_2) - Z_{top}(i_2)}{ZTI(i_2) - Z_{top}(i_2)} \cdot w_{j_2}^2 - w_{j_3}^2 \right) \cdot \frac{Z_{ML}(i_3) - Z_{top}(i_3)}{ZTI(i_3) - Z_{top}(i_3)} \quad (2.18)$$

### 2.1.3.3 Weitere Modellterme

Eine Erweiterung der übrigen Modellterme aus Gleichung (2.1) wurde nicht vorgenommen, da die Länge der horizontalen Leitungen (anders als bei vertikalen Leitungen) als unverändert angenommen wird. Es wird somit auf die bestehende 1D bzw. 3D Formulierung aus dem 2-Fluid-Modell zurückgegriffen.

Eine grundsätzliche Frage der 3D-Strömungssimulation mit einem Systemcode betrifft die Modellierung der Wand- und Zwischenphasenreibung. Bisher werden hierfür (auch international) üblicherweise die für 1D-Strömungswege und ausgebildete Strömungen abgeleiteten Korrelationen eingesetzt. Dies ist auch in ATHLET der Fall. Erforderlich wäre, anhand dreidimensionaler Strömungssituationen vergleichbare Korrelationen abzuleiten. Hierbei besteht allerdings die grundsätzliche Schwierigkeit, lokale Messungen für eher komplexe, mehrdimensionale Geometrien (mit in der Regel nicht vollständig ausgebildeten Strömungen) durchzuführen. Solche Experimente existieren nur eingeschränkt und nur für spezielle Geometrien. Auf Basis dieser Experimente gibt es Vorschläge für eine Adaption der für 1D abgeleiteten Korrelationen. Im Systemcode CATHARE wird z. B. speziell für die 3D-Simulation des Reaktorkerns die skalare 1D-Geschwindigkeit durch den Betrag des mehrdimensionalen Geschwindigkeitsvektors ersetzt. Die experimentelle Basis zur Überprüfung solcher Adaptionen ist jedoch sehr gering und das Verbesserungspotential scheint nur eingeschränkt vorhanden. Mangels geeigneter experimenteller Daten zur Validierung einer derartigen Modellanpassung in der GRS wird daher zum jetzigen Zeitpunkt auf eine 3D-Adaption der bestehenden Reibungskorrelationen verzichtet. Zur Simulation viskoser und turbulenter Scherspannungen in wandfernen Gebieten (z.B. innerhalb Pools) verfügt ATHLET alternativ über ein einfaches Turbulenzmodell, das für feine Gitterauflösungen angewendet werden kann.

#### 2.1.4 Verteilung der Massen- und Energieflüsse im Bereich des Gemischspiegels

Ein weiterer wichtiger Aspekt betrifft die Modellierung der horizontalen Massen- und Energieströme im Bereich eines oder zweier Gemischspiegel-KV, wie in Abb. 2.4 dargestellt. In ATHLET wird auf Basis der mittels der Impulsgleichung berechneten Phasengeschwindigkeiten der aus einem KV austretende Gesamtphasenmassenstrom bestimmt. Hierbei wird der Wassermassenstrom (Dampf-/Gasmassenstrom) proportional zur Höhe des Gemischspiegels aus einem Teil kontinuierlichem Liquid (Dampf/Gas) und einem Teil Tropfen (Blasen) zusammengesetzt (zur Veranschaulichung siehe Abb. 2.4). Wichtig ist nun die Verteilung des Wassermassenstroms (Dampf-/Gasmassenstroms) auf die beiden Sub-KV der Zone, in die der Gesamtmassenstrom eintritt:

- Befindet sich der ML oberhalb von  $Z_{low}$  (siehe Abb. 2.5), so gelangt der Wassermassenstrom vollständig in das Sub-KV unterhalb des ML.
- Befindet sich der ML unterhalb von  $Z_{top}$  (siehe Abb. 2.5), so gelangt der Dampfmassestrom vollständig in das Sub-KV oberhalb des ML.
- Die jeweiligen Randbereiche (unterhalb von  $Z_{low}$  bzw. oberhalb von  $Z_{top}$ ) werden für den stetigen Übergang des Wassermassenstroms (Dampfmassestroms) in das Sub-KV oberhalb (unterhalb) des ML genutzt, so dass keine Unstetigkeit beim Eintreten bzw. Austreten des Gemischspiegels in/aus dem KV entstehen.

Mit diesem Modellierungsansatz wird der Situation entgegengewirkt, dass bei unterschiedlichen Gemischspiegelhöhen z. B. große Dampfmasseströme aus einem Sub-KV oberhalb eines ML in ein benachbartes Sub-KV unterhalb des dortigen ML strömen. Die Modellierung ist physikalisch sinnvoll, da unterschiedliche ML-Höhen in benachbarten Bereichen in ATHLET eine Folge der numerischen Diskretisierung sind, die sich in der Realität durch einen räumlich kontinuierlichen Verlauf der Gemischspiegelhöhe äußern. Letzteres bedeutet, dass die Phasenmassenströme ober- bzw. unterhalb eines ML bei Querströmung zumindest überwiegend in diesen Bereichen verbleiben. Darüber hinaus ist der oben beschriebene Modellierungsansatz wichtig für die numerische Stabilität einer Simulation. In ATHLET kann nämlich die Simulation eines Gemischspiegels beendet werden, wenn sich die Dampfvolumentanteile der beiden Sub-KV oberhalb und unterhalb des ML annähern.

### 2.1.5 Weiterentwicklung des Gemischspiegelmodells

Neben der Kopplung des 3D-2-Fluidmodells mit einem Gemischspiegelmodell wurde die Funktionalität des Gemischspiegelmodells selbst erweitert. Diese Erweiterungen kommen sowohl der Gemischspiegelsimulation mit dem 5-Gleichungsmodell wie auch mit 2-Fluidmodell zugute. Folgende Arbeiten wurden durchgeführt:

**Vertikale Anschlussleitungen:** Hydraulische Abzweige aus einem Gemischspiegelpfad waren bisher nur mittels horizontaler Leitungen möglich. Dabei wird von ATHLET ein vertikaler Übergangsbereich geschaffen, der in etwa dem Durchmesser der abzweigenden Leitung entspricht. Passiert der Gemischspiegel diesen Bereich, wird für die Berechnung der Strömung in der Junction kontinuierlich zwischen den Kühlmittelzuständen unterhalb und oberhalb des Gemischspiegels übergegangen. Hintergrund ist hierbei ein gewünscht *sukzessives Freilegen/Bedecken* eines Leitungsstutzens bei vorbeiwanderndem Gemischspiegel, um die numerische Stabilität zu gewährleisten. Gleichzeitig wird aber auch zwingend das Driftmodell für horizontale Strömung angewendet, auch wenn die abzweigende Leitung eigentlich senkrecht angeordnet ist. Dadurch kann es zum Auffüllen des ersten KVs der abzweigenden Pipes kommen, was wiederum numerische Probleme in der nachfolgenden Junction hervorrufen kann. Hinzu kommt, dass der Anwender bei der Vorgabe der Strömungsgeometrie Zugeständnisse an die Modelle machen muss und gezwungen ist, bei einer in der Realität vertikal abzweigenden Rohrleitung von der tatsächlichen Geometrie abzuweichen.

Eine Modellerweiterung erlaubt nun, auch vertikale Abzweige eines Gemischspiegelpfads zu simulieren. Dazu wird das Übergangsmodell der horizontalen Junction auch für die Vertikale übernommen. Die vertikale Lage des Übergangsbereichs wird, wenn nötig, automatisch an die gegebene Nodalisierung angepasst. Dazu wird modellintern eine zweite Größe für die „Junction Elevation“ eingeführt, die nur für dieses Modell und nicht auch für die Berechnung der hydrostatischen Terme der Impulsgleichung verwendet wird.

**Wiederentstehung eines Gemischspiegels:** Ein Gemischspiegel kann nicht nur dadurch verschwinden, dass er den oberen oder unteren Rand eines Behälters erreicht (also der Behälter voll oder leer wird), sondern auch, indem er sich auflöst. Letzteres heißt, dass der normalerweise signifikante räumliche Sprung des Volumendampfgehaltes am Gemischspiegel gegen Null geht. Aus programmtechnischen Gründen wird dann die Gemischspiegelsimulation für den weiteren Verlauf der Transiente beendet. Dies ist ohne signifikante Unstetigkeit möglich, da die Zustände in den beiden Sub-KV

(Dichte, Void, etc.) in diesem Moment nahezu identisch sind. Passiert das Auflösen des ML im obersten oder untersten Kontrollvolumen eines Gemischspiegelpfades, kann nun die Gemischspiegelsimulation dort wieder neu gestartet werden. Insbesondere in passiven Sicherheitssystemen, z. B. im sog. Core Makeup Tank eines Reaktors mit passiven Sicherheitssystemen, kann dieses Szenario eintreten.

### **2.1.6 Anwenderunterstützung bei der Gittererzeugung**

Die Implementierung des 3D-Modells in ATHLET bietet die Möglichkeit der Strömungsberechnung in mehrdimensionalen Geometrien. Entsprechende mehrdimensionale Gitter müssen vom Anwender spezifiziert werden. In ATHLET werden die mehrdimensionalen Gitter im Rahmen eines internen Preprocessing-Schritts aus 1D-Thermofluidobjekten zusammengesetzt, also z. B. durch parallele Pipe-Objekte, die durch Querverbindungen miteinander verbunden sind. Im Ergebnis entsteht ein strukturiertes Multiblock-Gitter, das ATHLET zur Diskretisierung der 3D-Erhaltungsgleichungen nutzt.

Für die Spezifikation eines mehrdimensionalen Gitters ist es erforderlich, sowohl die Geometrie als auch die Topologie, d. h. die Anordnung und Verknüpfung der einzelnen Gitterknoten, zu beschreiben. Während die Topologiedefinition zentral unter dem Kontrollwort *3D-MODULE* im Eingabedatensatz erfolgt, muss die Geometrie für jedes TFO separat spezifiziert werden. Für den Fall eines feinen Gitters, wie man es möglicherweise im Rahmen einer Gittersensitivitätsstudie benötigt, ist dieses Vorgehen unübersichtlich und fehleranfällig. Zudem könnten für ein regelmäßiges, z. B. rechtwinkliges Gitter viele Größen aus wenigen Geometrieangaben abgeleitet werden.

Um den Anwender bei der Datensatzerzeugung zusätzlich zu unterstützen, besteht nun optional die Möglichkeit, verschiedene Gittergeometriegrößen für alle TFOe eines rechtwinkligen (wie auch zylindrischen) Gitters auf Basis zentraler Geometrieangaben berechnen zu lassen. Berechnet werden z. B. Leitungslängen, Strömungsquerschnittsflächen und KV-Volumina. Mittels einer in den Eingabedaten optional aktivierbaren Kontrollausgabe können diese (entweder von ATHLET berechneten oder vom Anwender vorgegebenen) Größen visualisiert und überprüft werden.

## 2.1.7 Anwendungsbeispiele

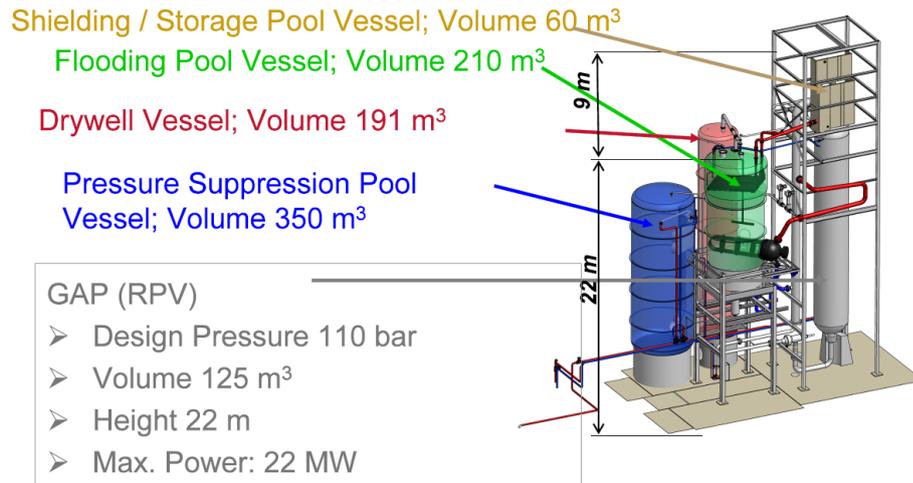
Im Rahmen der Entwicklungsarbeiten wurde das erweiterte Gemischspiegelmodell für verschiedene Anwendungsrechnungen eingesetzt. Hierbei wurde sowohl die Kopplung des 3D-Modells mit dem Gemischspiegelmodell für die Simulation von Wasserpools überprüft als auch die Verwendung des 2-Fluidmodells gemeinsam mit einem Gemischspiegelmodell für die Simulation von 1D-Anlagenkomponenten (z. B. Druckhalter) verifiziert.

### 2.1.7.1 3D-Pool-Simulation

Das 3D-Pool-Modell mit Gemischspiegel wurde begleitend zu den Arbeiten im Vorhaben RS1535A (EASY) entwickelt. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde das 3D-Pool-Modell zur Simulation des Flutbeckens der INKA-Versuchsanlage eingesetzt. Die nachfolgenden Darstellungen sollen in knapper Form den Entwicklungsstand des 3D-Pool-Modells dokumentieren. Detaillierte Ergebnisse können den Berichten des EASY-Vorhabens entnommen werden.

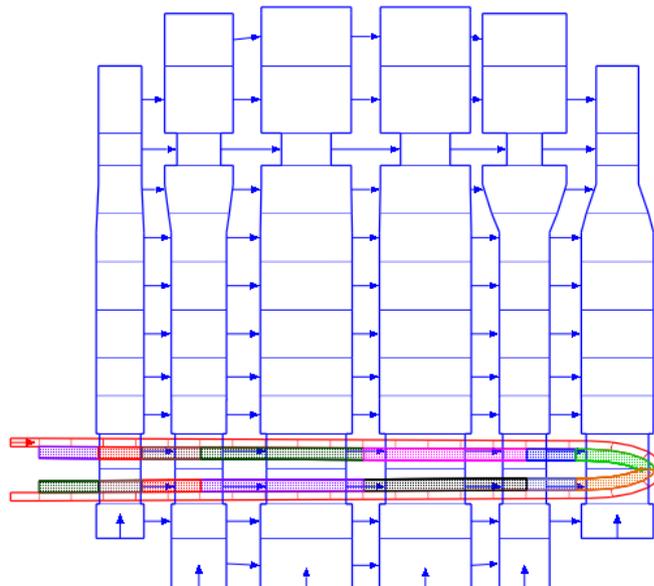
Die INKA (**IN**tegral Test Facility **KAR**lstein) Versuchsanlage wird von FRAMATOME betrieben und simuliert das Systemverhalten des SWR-Designs KERENA (Abb. 2.7). Insbesondere kann das Verhalten verschiedener passiver Sicherheitssysteme im Rahmen von Einzeleffekt- und Integraltests geprüft werden. Zwei zentrale PSS, die im Flutbeckenbehälter (Flooding Pool Vessel) angeordnet sind, sind der Notkondensator und der Gebäudekondensator. Beide Systeme bestehen aus Wärmetauscher-Rohrbündeln, die der passiven Wärmeabfuhr und dem Druckabbau aus dem Primärkreis bzw. dem Containment dienen. Bei beiden Systemen dient ein großer Wasserpool als Wärmesenke.

Der Notkondensator ist in der Wasservorlage des Flutbeckens untergetaucht. Im Störfallverlauf füllen sich die Rohre primärseitig mit Dampf, der unter Wärmeabfuhr an das Poolwasser kondensiert wird. Innerhalb des Pools setzt dadurch eine großskalige Zirkulationsströmung (ggf. mit unterkühltem) Blasensieden an den Wärmetauscherrohren) ein, die für einen effizienten Wärmeübertrag sorgt.



**Abb. 2.7** INKA Versuchsanlage /LEY11/

Abb. 2.8 zeigt einen Schnitt durch das ATHLET Geometriemodell des Flutbeckens. Das Flutbecken wird durch ein dreidimensionales Gitter repräsentiert. Dieses besteht aus insgesamt 19 parallelen Pipe-Objekten, die durch Querverbindungen miteinander verbunden sind (Abb. 2.9). Einige der Pipe-Objekte weisen sowohl im unteren als auch im oberen Bereich eine Querschnittsverengung auf. Diese berücksichtigt die Einbauten des Notkondensators (unten) bzw. des Gebäudekondensators (oben), die in ATHLET durch jeweils mehrere Rohrbündel simuliert werden. Abb. 2.8 zeigt eines dieser Rohrbündel.

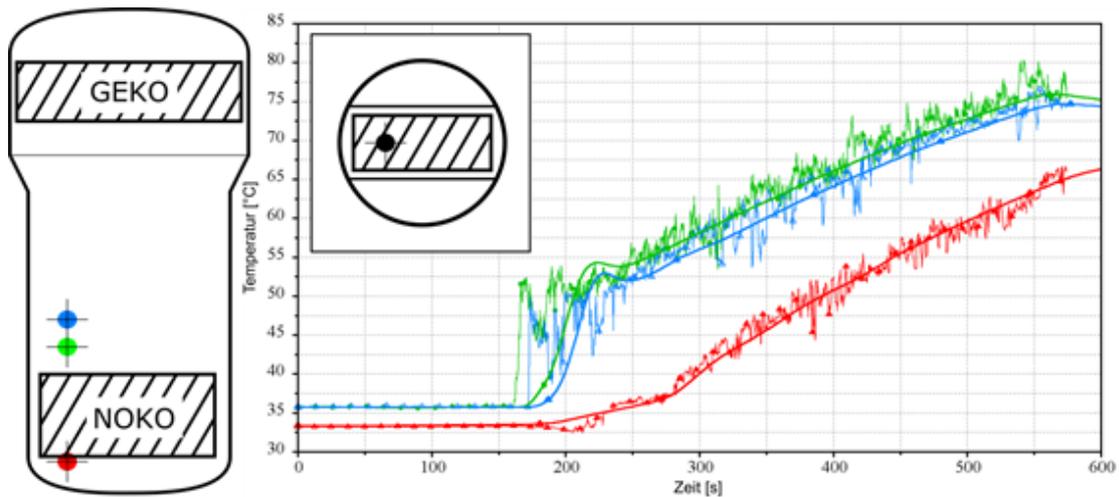


**Abb. 2.8** ATHLET Geometriemodell des INKA Flutbeckens mit Notkondensatorrohrbündel



**Abb. 2.9** 3D-Nodalisierung des INKA Flutbeckens mit Querverbindungen

Der Flutbeckenbehälter ist mit zahlreichen Temperaturmessstellen ausgestattet. Diese erlauben die Messung des sukzessiven Aufheizens des Pools sowie der sich bildenden Temperaturschichtung während des Störfallablaufs. Abb. 2.10 zeigt für verschiedene Temperaturmessstellen die Ergebnisse des Notkondensatortests NOKO\_1\_10\_85\_13\_1. Die Position der jeweiligen Messstelle kann den beiden Schnittzeichnungen in Abb. 2.10 entnommen werden. Im Diagramm rechts ist die Temperatur in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. Experiment und Simulation weisen eine gute Übereinstimmung auf. Dies gilt auch für weitere Messpositionen in anderen Bereichen des Flutbeckens. Insbesondere kann die Temperaturschichtung und somit auch die Zirkulationsströmung im Pool durch das 3D-Modell zuverlässig reproduziert werden.



**Abb. 2.10** 3D-Temperaturverteilung innerhalb des Flutbeckens

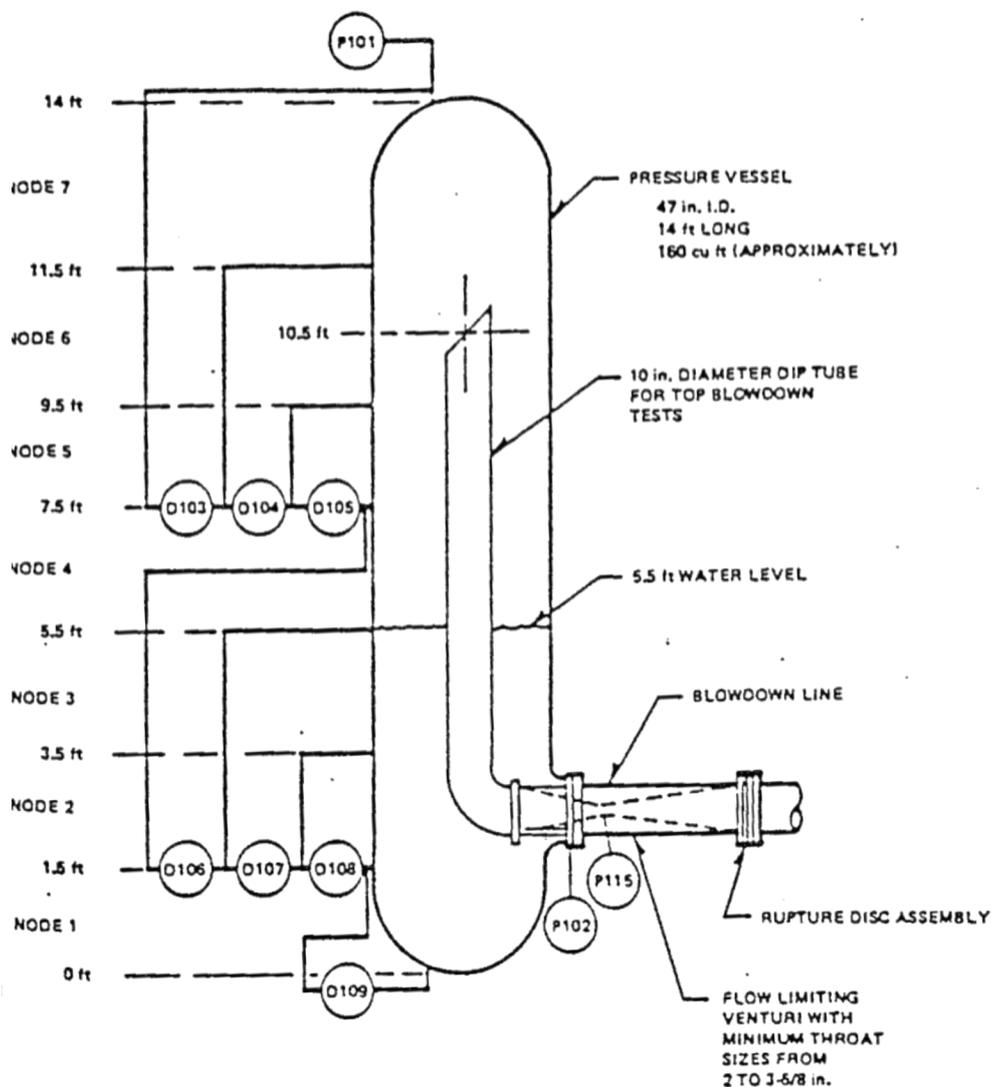
### 2.1.7.2 Simulation von 1D-Anlagenkomponenten mit Gemischspiegel

Bei Anlagensimulationen mit ATHLET wird das Gemischspiegelmodell üblicherweise bei der Abbildung von Anlagenkomponenten wie Druckhalter und Akkumulatoren verwendet. Für diese Komponenten musste in der Vergangenheit das 5-Gleichungsmodell eingesetzt werden, um die Gemischspiegel simulieren zu können. Durch die Neuentwicklung kann hierfür zukünftig auch das 2-Fluidmodell, kombiniert mit dem Gemischspiegelmodell, eingesetzt werden. Zur Verifizierung des neuen Modells wurden die mit dem 5-Gleichungsmodell und dem 2-Fluidmodell erzielten Ergebnisse verglichen. Hierfür wurden verschiedene Testfälle aus unterschiedlichen Versuchsanlagen nachgerechnet. U.a. wurden hierfür die Integralversuche LOFT LP-LB-1 (PWR 200 % Leck) und LSTF SB-CL-18 (5 % Leck im kalten Strang) ausgewählt, für die sich eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Modellierungen gezeigt hat. Nachfolgend detaillierter dargestellt sind Simulationsergebnisse zum von General Electric durchgeführten schnellen Druckabsenkungstests, die ein besonders dynamisches Verhalten des Gemischspiegels zeigen.

Die GE Large Blowdown Vessel Versuchsanlage untersucht das Blowdown-Verhalten eines teilweise mit gesättigtem Wasser gefüllten Behälters bei typischen SWR-Bedingungen (Ausgangsdruck ca. 73 bar). Abb. 2.11 veranschaulicht die Versuchsanlage.

Durch Zerstörung der Berstscheibe am Ende des installierten Rohres wird ein Leck im Dampfraum des Behälters simuliert. Durch die plötzliche Druckabsenkung kommt es

zum schlagartigen Verdampfen des Wassers und somit zum Aufschäumen des Gemischspiegels. Nachdem der Gemischspiegel das obere Ende des Rohres erreicht hat, kommt es zum Übergang von einphasiger Dampf- zu zweiphasiger Dampf-Wasser-Ausströmung am Leck. Die Anlage ist mit mehreren Druckdifferenzmessern entlang der Höhe des Behälters ausgestattet, die es ermöglichen, lokale Dampfvolumentanteile zu bestimmen. Die erfolgreiche Nachrechnung des Versuchs erfordert neben einem zuverlässigen Modell zur Simulation der kritischen Strömung am Leck ein Gemischspiegelmodell, das Stratifizierung und Aufschäumen des Wassers zuverlässig reproduziert.



**Abb. 2.11** Schematische Darstellung der GE Versuchsanlage Large Blowdown Vessel /HEW92/

Das ATHLET-Modell zur Simulation des Blowdown-Versuchs 5702-16 mit Leck im Dampfraum zeigt Abb. 2.12. Die Nodalisierung im Behälter orientiert sich an den Positionen der Druckmessungen in der Anlage.

Abb. 2.13 zeigt einen Ergebnisvergleich von 5-Gleichungsmodell und 2-Fluidmodell für den simulierten Druckentlastungsversuch. Nach Öffnen des Lecks fällt der Druck im Behälter schnell ab und nähert sich dem als Randbedingung vorgegebenen Umgebungsdruck. Der kritische Leckmassenstrom wird von beiden Modellen ähnlich berechnet, wobei der zweite Peak für das 2-Fluidmodell etwas höher resultiert. Die Ursache hierfür liegt in einer etwas unterschiedlichen Verteilung der Dampfvolumentehalte innerhalb des Behälters zu diesem Zeitpunkt, wodurch der Wassermassenstrom etwas höher berechnet wird (Abb. 2.13 links unten). Der Gemischspiegel erreicht jedoch in beiden Simulationen zu einem nahezu identischen Zeitpunkt das obere Ende des Abblaserohrs (Abb. 2.13 rechts unten). Die letztlich ausgetragene Masse ist ebenfalls in beiden Rechnungen sehr ähnlich, wie der kollabierte Füllstand im Behälter widerspiegelt. Letzteres bestätigt ebenfalls, dass das Aufschäumen des Gemischspiegels und die Prozesse am Gemischspiegel (Blasenaufstieg mit Wassermittelschicht, Verdampfung) vergleichbar berechnet werden.

Neben dem physikalischen Verhalten des Gemischspiegels ist auch das numerische Verhalten beim Umsetzen des Gemischspiegels von einem zum benachbarten KV für die Stabilität und Effizienz der Simulation von Bedeutung. Abb. 2.14 zeigt hierfür den Vergleich zwischen beiden Simulationen. Sowohl die erzielten Zeitschrittweiten als auch die Anzahl der Zeitschritte sind vergleichbar.

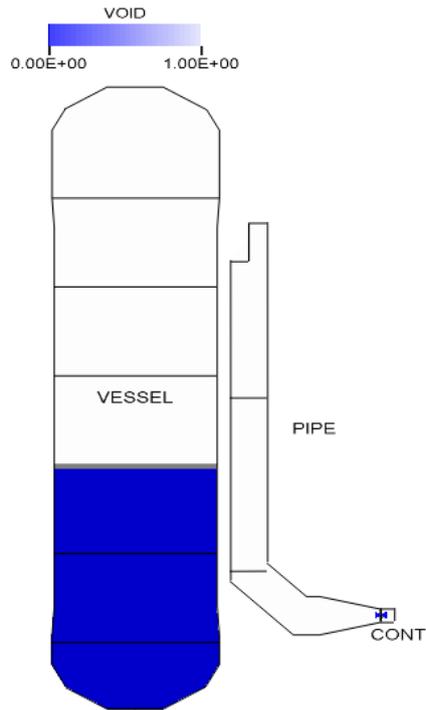


Abb. 2.12 ATHLET Modell des GE Large Blowdown Vessels mit Füllstand zu Versuchsbeginn

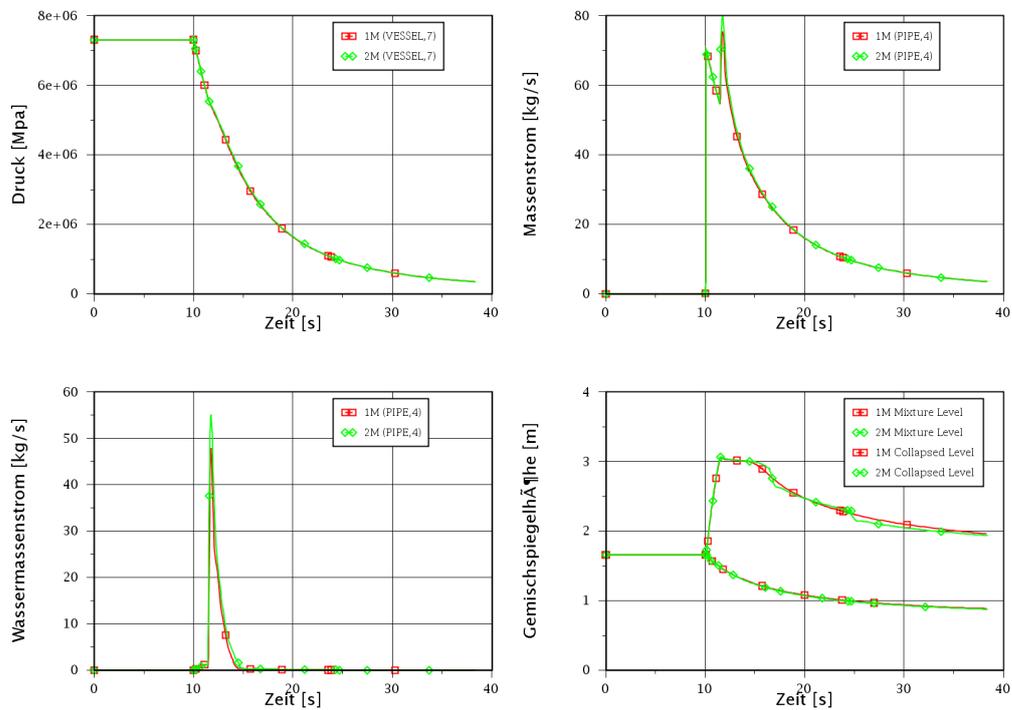
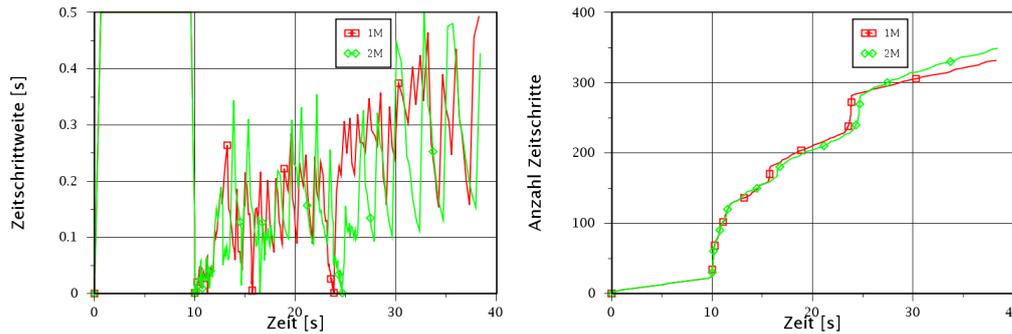


Abb. 2.13 GE Blowdown Versuch: Vergleich zwischen 5-Gleichungsmodell (1M) und 2-Fluidmodell (2M)



**Abb. 2.14** Vergleich zwischen 5-Gleichungsmodell (1M) und 2-Fluidmodell (2M)

## 2.2 Simulation von Druckstößen in Rohrleitungssystemen

In den Rohrleitungen des Reaktorkühlsystems kann es zu Druckstößen kommen, die die Integrität des Kühlkreislafs gefährden. Folgende Vorgänge lassen sich grundsätzlich als Ursachen für Druckstöße unterscheiden:

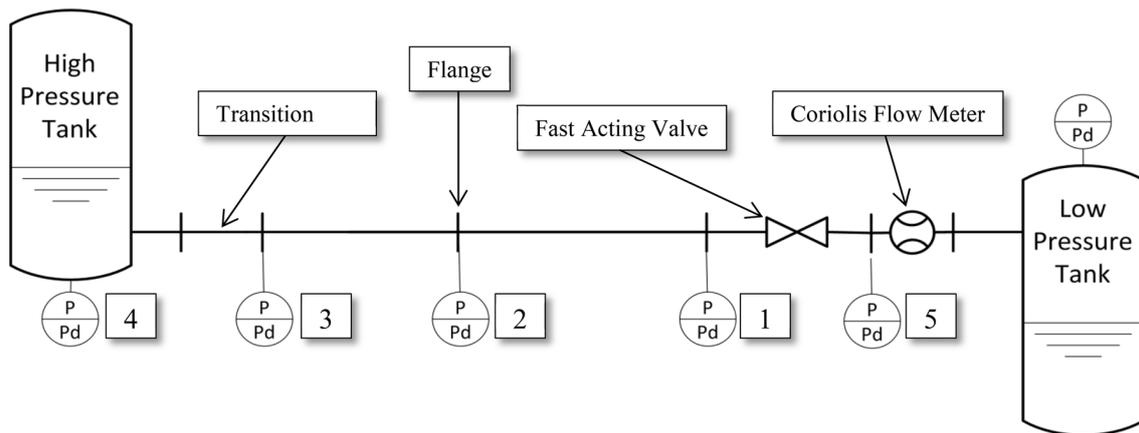
- Schnelle Armaturenbewegungen
- Schlagartige Kondensationsvorgänge
- Schwall- und Pfropfenströmung bzw. Beschleunigung einer Wassersäule

In allen Fällen wird der Druckstoß durch eine abrupte Beschleunigung bzw. Abbremsung der Strömung ausgelöst. Für die drei Vorgänge können verschiedene Mechanismen unterschieden werden, die letztlich zu dem Druckstoß führen. Schnelle Armaturenbewegungen können Folge des Verfahrens von Ventilen oder von Pumpenschaltungen sein. Schnelle Kondensationsvorgänge können bspw. durch Einschluss einer Dampfblase mit unterkühltem Wasser ausgelöst werden. Wasserpfropfen können sich in Leitungen oder als Kondensatanfall vor Ventilen bilden, die schließlich nach Beschleunigung auf Einbauten, Armaturen oder Krümmer treffen. Eine systematische Untersuchung und Zusammenstellung der Ursachen von Wasserschlägen und die Klassifikation der zugrundeliegenden Mechanismen ist in /EPR92/ zu finden.

Zu allen drei genannten Abläufen wurden mit ATHLET Untersuchungen und teilweise auch Modellerweiterungen vorgenommen. Die ausgewählten Versuchsanlagen die für die Validierung von ATHLET für Druckstoßphänomene herangezogen wurden, verfügten über vertikale, horizontale oder gegenüber der Horizontalen leicht geneigte Teststrecken. Die Rohrinnendurchmesser variierten bei den Anlagen zwischen 19 mm und 50 mm. Ziel der Analysen war die Prüfung, Bewertung und weitere Qualifizierung von ATHLET zur Simulation von Druckstoßvorgängen in Reaktoren.

### **2.2.1 Nachrechnung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Ventilschnellschluss**

Zu Druckstößen ausgelöst durch schnelle Armaturenbewegungen wurden Versuche mit Ventilschnellschluss analysiert. Die zur Nachrechnung ausgewählten Druckstoßexperimente wurden an der M3.5-Versuchsanlage des Instituts für Raumfahrtantriebe des Deutschen Luft- und Raumfahrtzentrums (DLR) durchgeführt. Die Versuchsanlage wurde für die experimentelle Untersuchung des Druckstoßphänomens ausgelegt /TRA16/. Dafür besteht die Versuchsanlage aus folgenden Hauptkomponenten: zwei Druckbehälter (ein Hochdruck- und ein Niederdruckbehälter), einer aus Edelstahl 1.4541 hergestellten Teststrecke mit einem Innerdurchmesser von 19 mm, einer Wandstärke von 1,5 mm, einer Gesamtlänge von ungefähr 8 m und einer Neigung von 1° gegenüber der Horizontalen. Die Teststrecke kann wahlweise durch starre Aluminiumprofile befestigt oder elastische Bänder aufgehängt werden. In Abb. 2.15 ist die DLR-Versuchsanlage M3.5 schematisch dargestellt, in der Konfiguration, die für die Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss benutzt wurde. Bei dem Schnellschlussventil handelt es sich um eine pneumatisch betriebene axiale Armatur (fast acting valve - FAV), deren Schließzeit bei jedem Versuch genau erfasst werden kann. Der Systemdruck wird durch Aufprägung von Stickstoff derart geregelt, dass der gewünschte Volumenstrom zwischen den zwei Tanks erzielt wird. Für die Erfassung des Volumenstroms wird ein Coriolis-Durchflussmessgerät verwendet. Die experimentelle Anlage wurde insgesamt mit sechs Drucksensoren ausgestattet, wobei jeder Druckbehälter jeweils einen Sensor beinhaltet und die restlichen vier Drucksensoren in der Teststrecke verbaut sind. Die genaue Entfernung der Drucksensoren 1 bis 3 aus Abb. 2.15 zum Schnellschlussventil beträgt: für Position 1: 0,3 m, für Position 2: 6,9 m und für Position 3: 7,6 m.



**Abb. 2.15** Schematische Darstellung der DLR-Versuchsanlage M3.5 /TRA16/

Folgende Anlagenfahrweise wurde für die Druckstoßexperimente ausgelöst durch einen Ventilschnellschluss gewählt: Vor jeder Versuchsdurchführung wurde sichergestellt, dass die Anlage von Luft befreit ist. Im Hochdrucktank wird der Druck für das System eingestellt und das Schnellschlussventil geöffnet, sodass sich der gewünschte Volumenstrom einstellt. Nachdem der Volumenstrom für eine gewisse Zeit erfolgreich konstant gehalten wurde, kann das Ventil (FAV) geschlossen werden. Jeder Versuch wird mindestens dreimal wiederholt, wobei sich eine gute Reproduzierbarkeit gezeigt hat.

Für die ATHLET-Nachrechnungen wurden drei unterschiedliche Versuche ausgewählt. Eine Übersicht über relevante Anfangs- und Randbedingungen ist in Tab. 2.2 dargestellt.

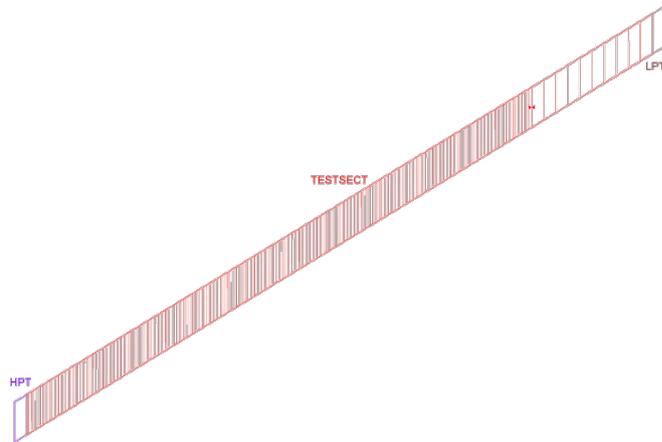
Tab. 2.2 Zusammenfassung der relevanten Anfangs- und Randbedingungen der ausgewählten DLR-Versuche von Druckstößen ausgelöst durch Ventilschnellschluss

Versuchsnummer	Druck [bar]	Strömungsgeschwindigkeit [m/s]
4	24	4,13
9	1,96	2,08
20	23,78	3,14

### 2.2.1.1 ATHLET-Nodalierungen für die Nachrechnung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Ventilschnellschluss – die DLR-Versuchsanlage

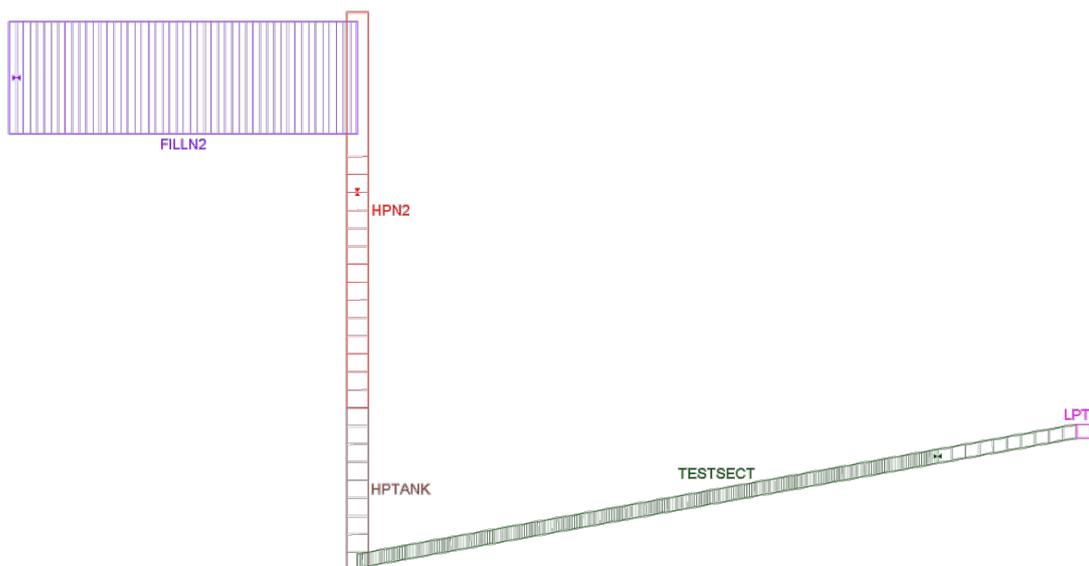
Für die Nachrechnung der „DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss“ wurden zwei unterschiedliche Modellierungsansätze in ATHLET untersucht. In beiden Modellen wurde der Teststreckenabschnitt zwischen Hochdrucktank und Schnellschlussventil mit Rechenzellen höher aufgelöst als zwischen Ventil und Niederdrucktank, da sich alle Druckmessstellen zur Untersuchung des Druckstoßes in diesem Bereich befanden.

In einem ersten Schritt wurde ein vereinfachtes Modell erstellt, das die zwei Tanks (HPT – Hochdrucktank und LPT - Niederdrucktank) nur als TDV-Komponenten berücksichtigt. Das vereinfachte ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss ist in Abb. 2.16 dargestellt. Dieser Modellierungsansatz wurde aber nicht weiterverfolgt, da sich gezeigt hat, dass die durch den Druckstoß erzeugten Druckwellen nicht realistisch durch die TDV-Komponenten abgedämpft werden.



**Abb. 2.16** Vereinfachtes ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss

Ein detaillierteres ATHLET-Modell für die Nachrechnung der „DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss“ berücksichtigt den Hochdrucktank thermofluidodynamisch (FILLN2 und HPN2 in Abb. 2.17 entsprechen dem stickstoffgefüllten Teil des Hochdrucktanks, HPTANK entspricht dem wassergefüllten Teil). Um auf die aufwendigen Druckregelkreise im Simulationsmodell verzichten zu können, wurde das Stickstoffreservoir im Tank deutlich größer als im Versuch gewählt. Damit wirkt sich das Ausströmen des Wassers aus dem Tank nur unwesentlich auf den Druck aus und eine stationäre Strömung konnte somit erzielt werden. Abb. 2.17 zeigt das detaillierte ATHLET-Modell.

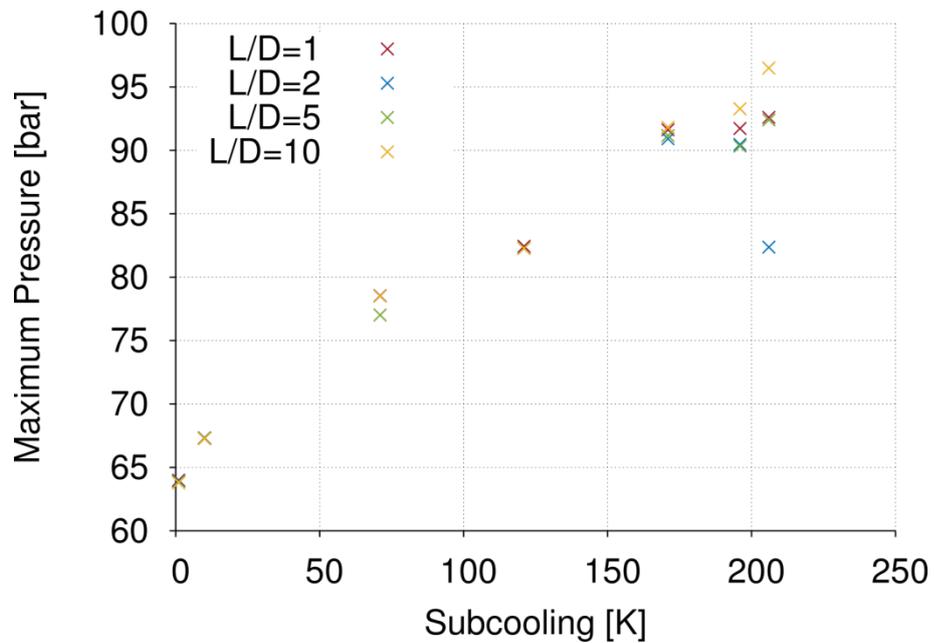


**Abb. 2.17** Detaillierteres ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss

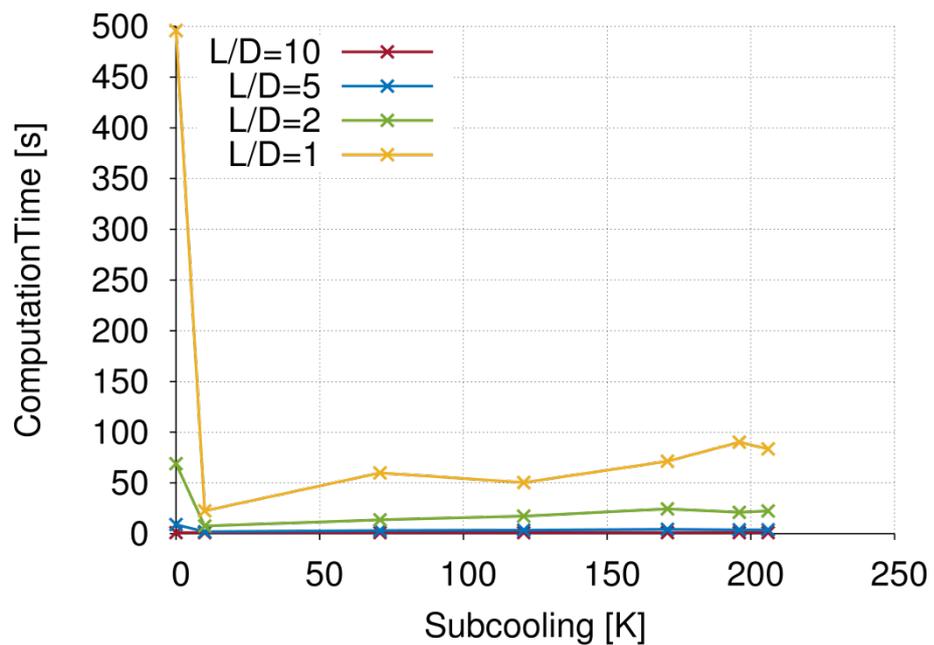
### 2.2.1.2 Numerische Analysen

Der Einfluss der Nodalisierung der Testsektion und der Unterkühlung auf die Druckspitzamplitude basierend auf dem detaillierten ATHLET-Simulationsmodell bei der Nachrechnung des Versuchs 4 sind in Abb. 2.18 illustriert. Dabei ist auf der X-Achse die Unterkühlung des Wassers (die Temperaturdifferenz zum Sättigungszustand) und auf der Y-Achse die maximale Druckstoßamplitude dargestellt. Die unterschiedlichen Nodalisierungen wurden anhand des Verhältnisses zwischen der Länge (L) und des hydraulischen Durchmessers (D) der Kontrollvolumina in der Teststrecke sortiert. Das L/D-Verhältnis von 1 entspricht der feinsten Rechengitterauflösung unter den angewendeten ATHLET-Nodalisierungen; dabei sind die Länge und der Innendurchmesser der Rechenzelle gleich.

Aus Abb. 2.18 kann erkannt werden, dass für große Unterkühlungen des Wassers die Nodalisierung einen großen Einfluss auf die maximale berechnete Druckstoßamplitude hat. Für niedrigere Unterkühlungen scheint dieser Einfluss zu verschwinden und die berechneten maximalen Druckspitzen unterscheiden sich kaum. Die benötigte Rechenleistung hingegen wird maßgeblich von der Rechengitterauflösung beeinflusst, wie in Abb. 2.19 dargestellt. Die benötigte Rechenzeit ist wie erwartet direkt von der Rechengitterauflösung abhängig; die Verwendung einer höheren Rechengitterauflösung führt zu längeren Rechenzeiten. Dieser Einfluss ist für kleinere Unterkühlung des Wassers deutlicher, da es in diesem Fall oft zu sehr dynamischen Verdampfungs- und Kondensationsvorgänge in bestimmten Zellen kommt, was eine Verkürzung des Rechenzeitschritts von ATHLET bedingt. Da sich die erzielten Simulationsergebnisse auf den beiden Gittern mit der höchsten Auflösung kaum unterscheiden, werden bevorzugt die ATHLET-Ergebnisse entsprechend  $L/D = 2$  präsentiert.



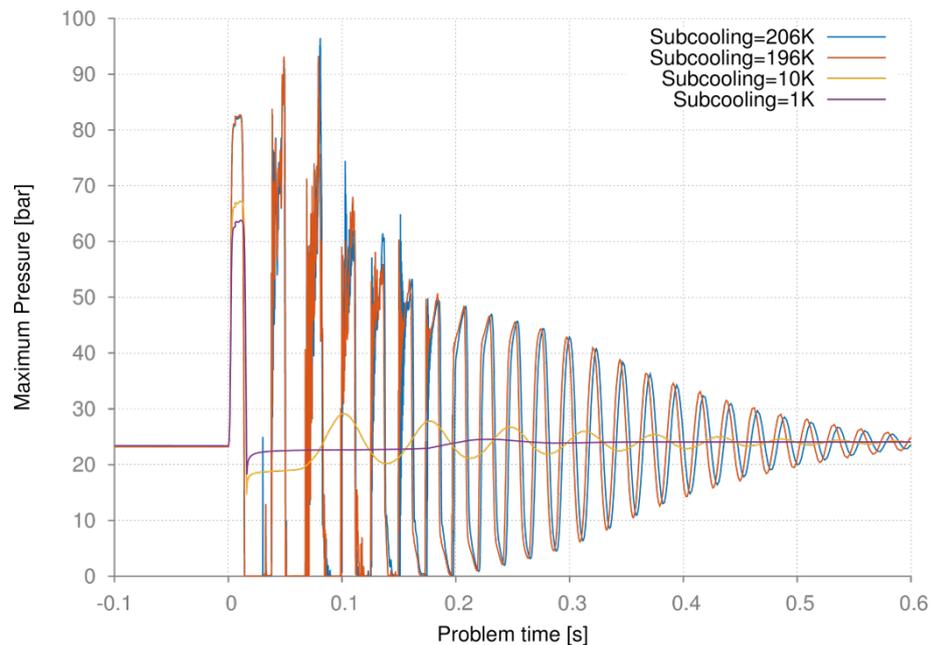
**Abb. 2.18** Einfluss der Nodalisierung und Unterkühlung des Wassers auf die Druckstoßamplitude am Sensor P1



**Abb. 2.19** Einfluss der Nodalisierung und Unterkühlung des Wassers auf die Rechenzeit

Um den Einfluss der Wasserunterkühlung auf den zeitlichen Verlauf eines Druckstoßszenarios ausgelöst durch einen Ventilschnellschluss zu untersuchen, werden vier Beispiele der Nachrechnung des DLR-Versuchs Nummer 4 bei unterschiedlichen Wassertemperaturen in Abb. 2.20 präsentiert. Aufgrund des größeren Einflusses der Unterkühlung des Wassers auf die maximale Druckspitze bei niedriger Rechengitterauflö-

sung werden für diesen Zweck die Rechenergebnisse erzielt auf das größte ATHLET-Gitter verwendet. Aus Abb. 2.20 ist einfach abzuleiten, dass bei niedrigeren Unterkühlungen des Wassers eine sehr schnelle Dämpfung der Druckwellen eintritt. Bei höheren Unterkühlungen hingegen kommt es zu deutlich weniger Verdampfung im System, sodass die Druckwellen hauptsächlich nur durch mit wassergefüllten Rohrstrecken reisen müssen, was zu einer niedrigeren Dämpfung führt. Bei niedrigeren Unterkühlungen kommt es oft vor, dass größere Dampfblasen entstehen, die einen Dämpfungseffekt auf die Druckwellen haben.



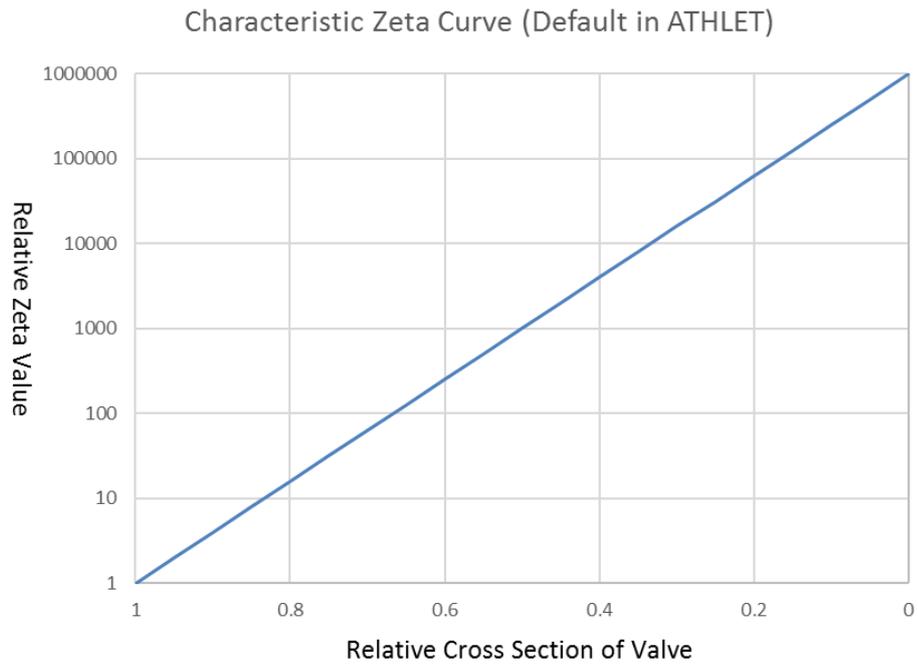
**Abb. 2.20** Einfluss der Unterkühlung des Wassers auf den zeitlichen Verlauf des Drucks am Sensor P1

### 2.2.1.3 Ergebnisse der Versuchsnachrechnungen

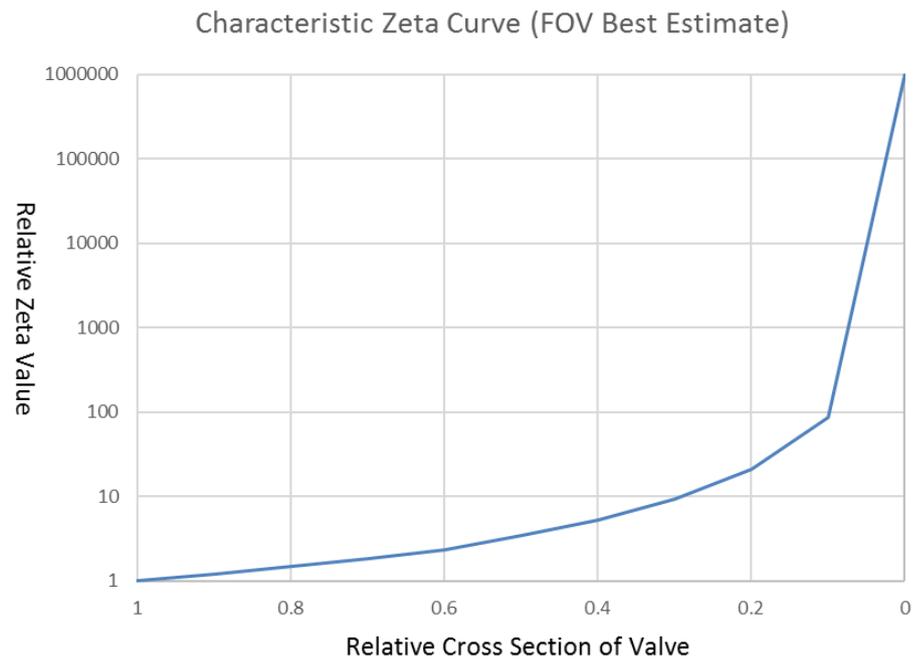
Ein Parameter mit maßgeblichem Einfluss sowohl auf den zeitlichen Verlauf als auch auf die maximal berechnete Druckstoßamplitude ist der Druckverlustbeiwert des Schnellschlussventils als Funktion des relativen Öffnungsquerschnitts. ATHLET besitzt hierfür eine integrierte Funktion für ein generisches Ventil, die standardmäßig Anwendung findet. Es ist aber bekannt, dass der von ATHLET berechnete Druckverlustbeiwert für ein axiales Ventil ungeeignet ist. Da für das eingesetzte Schnellschlussventil keine genaue Spezifikation ermittelbar war, wurde diese mittels Unterstützung von CFD-Analysen sinnvoll vorgegeben /LIU17/. Zum Vergleich werden in Abb. 2.21 und Abb. 2.22 jeweils der Verlauf des charakteristischen Druckverlustbeiwertes in Abhängigkeit der relativen Ventilöffnung berechnet mittels der in ATHLET integrierten Funktion bzw. für das reale Ventil angepasst dargestellt.

Die Vergleiche zwischen den gemessenen und den simulierten Druckverläufen am Sensor P1 sind für die DLR-Versuche Nummer 4, 9 und 21 in Abb. 2.23, Abb. 2.24 und Abb. 2.25 dargestellt. Die Bezeichnung „best estimate“ kennzeichnet die Simulationsergebnisse basierend auf dem angepassten Verlauf des charakteristischen Druckverlustbeiwertes des Ventils gemäß Abb. 2.22, „default“ bezieht sich auf Simulationsergebnisse ermittelt mit dem ATHLET-eigenen charakteristischen Druckverlustbeiwert gemäß Abb. 2.21. Anhand der ersten Druckspitze lässt sich der Einfluss des relativen Druckverlustbeiwertes in Abhängigkeit von der Ventilöffnung erkennen: Falls die eingebaute Funktion von ATHLET verwendet wird, resultiert eine Druckspitze, für die sowohl die Amplitude als auch Zeitpunkt des Ereignisses vom Code unterschätzt werden. Falls hingegen die angepasste Abhängigkeit zwischen Druckverlustbeiwert im Ventil und Ventilstellung verwendet wird, so werden die Simulationsergebnisse deutlich verbessert. Dieser Effekt ist auch in den ATHLET-Nachrechnungen der DLR-Versuche Nummer 9 und 21 deutlich sichtbar.

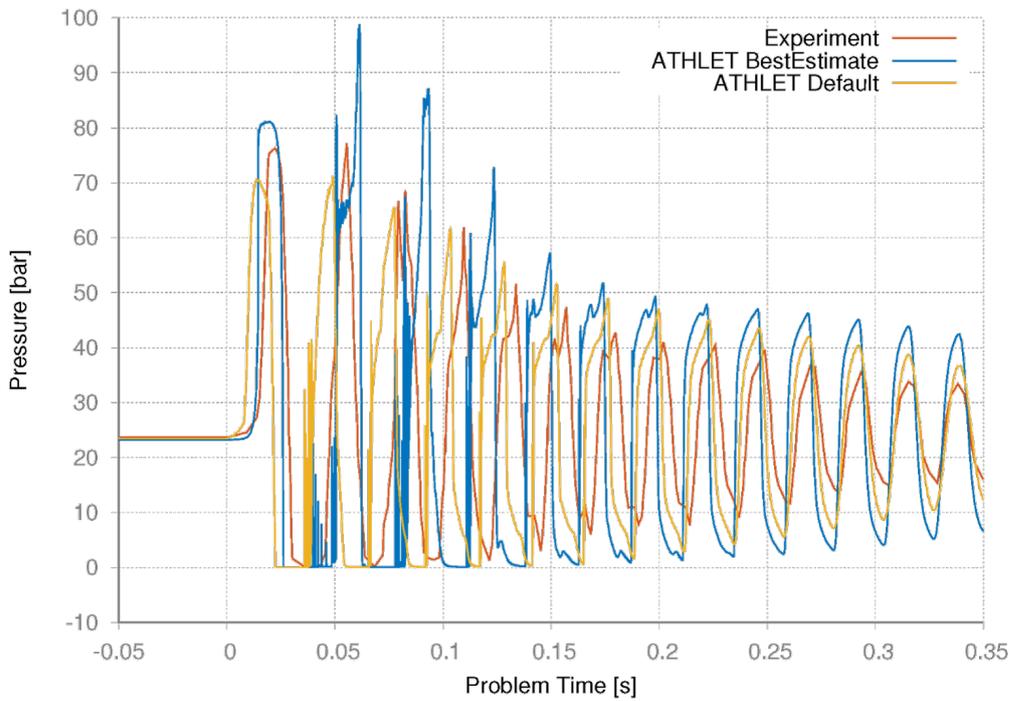
Insgesamt wird die Charakteristik des Druckstoßes und seiner Reflexionen von ATHLET realistisch wiedergegeben. Es fällt auf, dass die maximale Druckspitze in der Simulation tendenziell etwas überschätzt wird. Dies kann Folge der Annahme starrer Strukturen sein. Alle drei Versuche zeigen, dass der Druckstoß mehrfach im System reflektiert wird. Auch dieses Verhalten wird von ATHLET berechnet, wobei Laufzeiten der Druckwellen unterschätzt werden. Eine genaue Ursachenanalyse hierzu ist schwierig. Ein Grund könnte die in der Realität dreidimensionale Anlagengeometrie sein, die von ATHLET nur vereinfacht und eindimensional abgebildet wird, was andere Schwingungsmoden und Druckwellenüberlagerungen zufolge haben kann. Es können aber auch numerische Effekte eine Rolle spielen, wie bspw. numerische Diffusion. Für die Bewertung der Erhaltung der Systemintegrität ist jedoch vor allem die maximale Druckamplitude von Bedeutung. Aus Abb. 2.25 geht hervor, dass ATHLET für Versuch 20 zuverlässig vorhersagen kann, dass nicht der erste Druckstoß, sondern die anschließende Reflexion zur höchsten Druckamplitude führt. Des Weiteren kann ATHLET die zeitliche Aufweitung der reflektierten Druckwellen in den Versuchen 4 und 20 mit Ausbildung zweier Druckspitzen reproduzieren. Es kann somit festgehalten werden, dass ATHLET für die Simulation eines Druckstoßes nach Ventilöffnung grundsätzlich anwendbar ist.



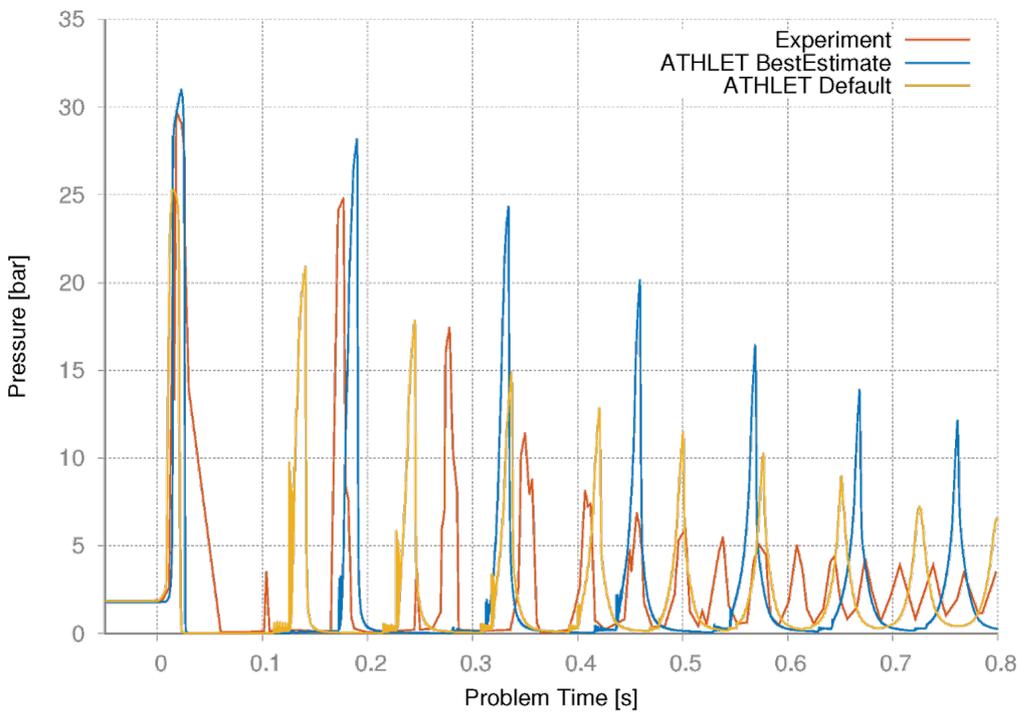
**Abb. 2.21** Charakteristische Druckverlustbeiwerte in Abhängigkeit der relativen Ventilöffnung, berechnet mit der in ATHLET integrierten generischen Funktion



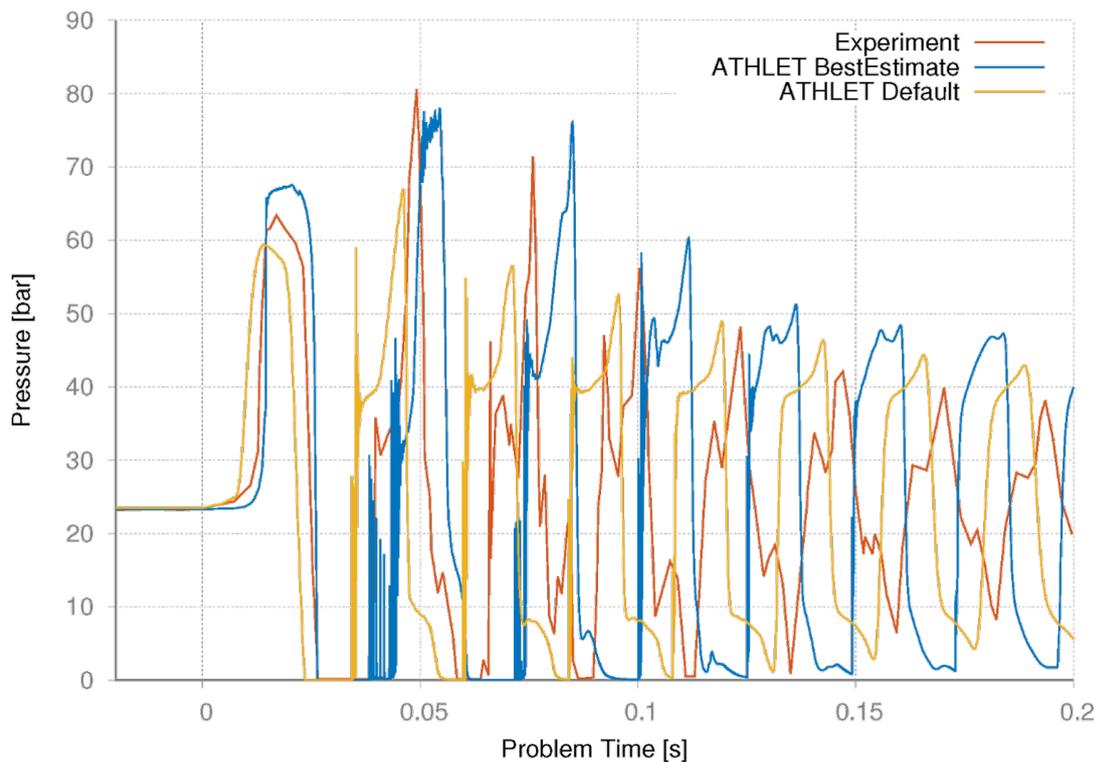
**Abb. 2.22** Angepasster Verlauf des charakteristischen Druckverlustbeiwertes in Abhängigkeit der relativen Ventilöffnung



**Abb. 2.23** Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 4



**Abb. 2.24** Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 9



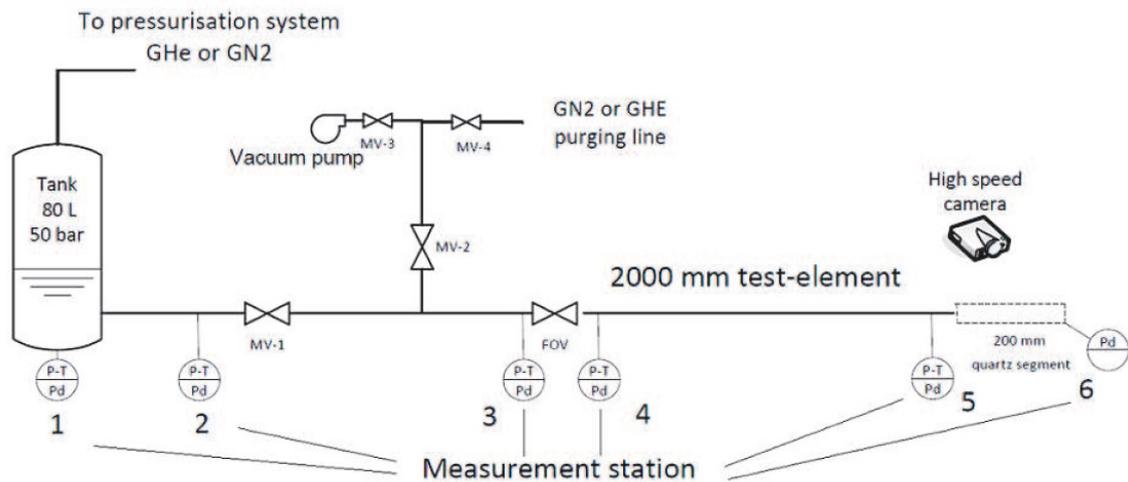
**Abb. 2.25** Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 20

### 2.2.2 Nachrechnung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule

Die zur Nachrechnung ausgewählten Druckstoßexperimente zum Phänomen „Aufprall einer Wassersäule“ wurden ebenso wie jene ausgelöst durch Ventilschnellschluss in der M3.5-Versuchsanlage des Instituts für Raumfahrtantriebe des Deutschen Luft- und Raumfahrtzentrums (DLR) durchgeführt. Die Versuchsanlage weist als wesentliche Änderung den Verschluss der Testsektion an der Verbindung zum Niederdrucktank auf. Abb. 2.26 zeigt den schematischen Aufbau der M3.5 Versuchsanlage. Die Druckstöße wurden durch das schnelle Öffnen des Ventils „FOV“ (Fast Opening Valve) ausgelöst. Anschließend kommt es zur Einspeisung von Wasser in das (teil-) evakuierte Rohrleitungssegment stromabwärts des Ventils mit Aufprall auf das verschlossene Ende der Teststrecke.

Vor jeder Versuchsdurchführung wird hierfür die Anlage mit Helium gespült und stromabwärts von der Armatur (FOV) mit Stickstoff befüllt. Dabei wird der gewünschte Druck in diesem Abschnitt der Testsektion eingestellt. Nach dem Öffnen der Armatur (FOV) kommt es darin kurzzeitig zur kritischen Strömung aufgrund des großen Druckgradienten-

ten zwischen Hochdrucktank und Testsektion. Das eingespeiste, unterkühlte Wasser verdampft teilweise und trifft auf den Blindflansch am Ende der Testsektion auf, was den Druckanstieg zur Folge hat.



**Abb. 2.26** Modifizierte DLR M3.5-Versuchsanlage zur Untersuchung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule

Für die ATHLET-Nachrechnung wurden unterschiedliche Versuche zu Druckstößen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule ausgewählt /BOM14/. Die Zusammenfassung der relevanten Anfangs- und Randbedingungen ist in Tab. 2.3 dargestellt. Außerdem sind wesentliche Messergebnisse für Messposition 6 enthalten.

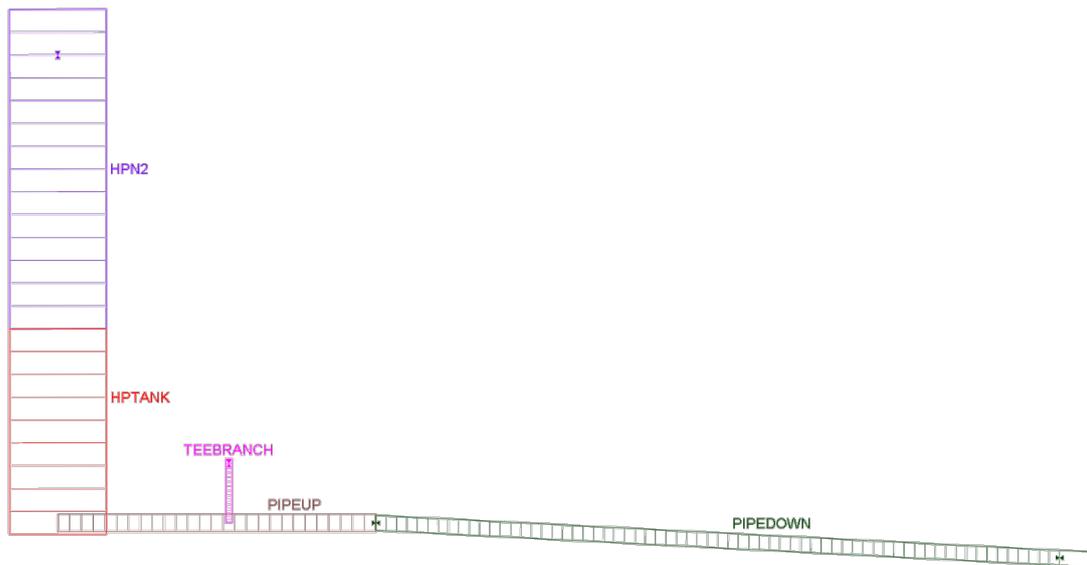
Basierend auf diesen Messdaten kann der stochastische Charakter des Druckstoßphänomens erkannt werden. Denn bei der Wiederholung eines Versuchs mit relativ unveränderten Anfangs- und Randbedingungen können die maximal gemessenen Druckstoßamplituden um 10 % variieren, wie es aus den Ergebnissen zu den Versuchen 1 bis 3 hervorgeht. Auch der auf den Öffnungsmoment der Armatur FOV bezogene Zeitpunkt, zu dem die Druckspitze an Messposition 6 erfasst wird, variiert bei gleichbleibenden Anfangs- und Randbedingungen.

**Tab. 2.3** Anfangs- und Randbedingungen sowie Messergebnisse ausgewählter DLR-Versuche zu Druckstößen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule

Versuchsnummer	Druck			Zeitpunkt
	Hochdrucktank [bar]	Testsektion [mbar]	P6 [bar]	P6 [ms]
1	20,31	993	42,58	164,5
2	20,30	993	42,29	166,1
3	20,32	993	46,37	162,0
4	39,48	990	148,6	116,3
5	39,51	992	149,0	114,8
6	39,50	992	138,2	116,8
7	42,56	993	164,3	110,7
8	45,10	993	187,3	106,6
9	45,10	993	175,0	107,6
10	45,14	994	179,5	106,9
11	20,16	21	198,9	150,6
12	20,17	22	203,7	153,0
13	20,14	20	201,0	151,4

### 2.2.2.1 ATHLET Nodalisierung

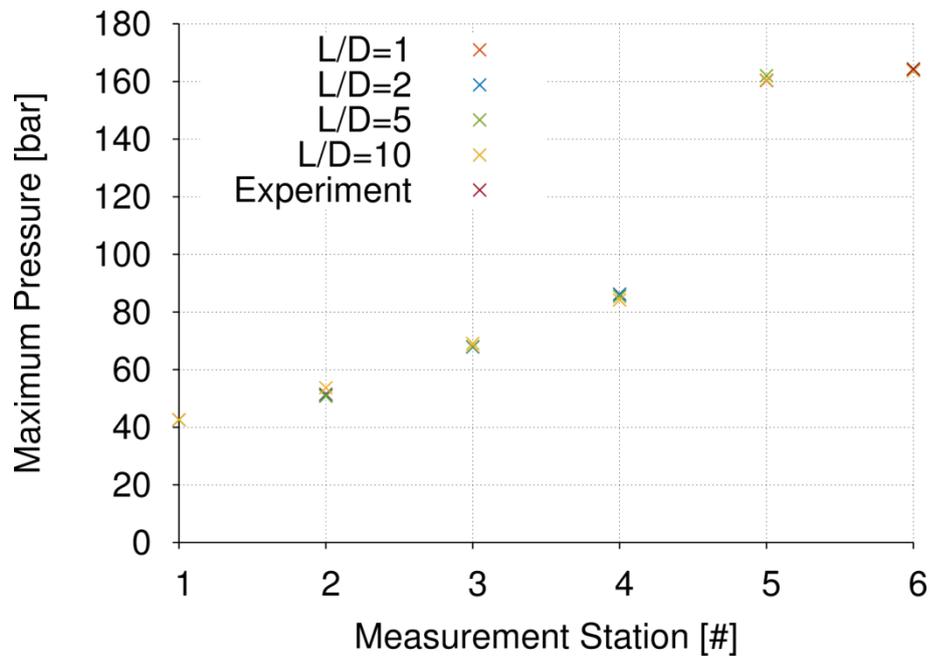
Für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente mit Einspeisung von Wasser in ein teilentleertes Rohrleitungssegment (gefüllt mit Stickstoff) wurde ein detailliertes ATHLET-Modell entwickelt, das die modifizierte DLR-Versuchsanlage abbildet (Abb. 2.27). Darin ist der Hochdrucktank fluiddynamisch abgebildet, bestehend aus den zwei Komponenten, die jeweils mit Stickstoff (HPN2) und Wasser (HPTANK) bestehen. Die leicht geneigte Testsektion wird durch ein ATHLET Pipe mit feiner Nodalisierung abgebildet.



**Abb. 2.27** ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule

### 2.2.2.2 Numerische Analysen

Es wurde eine Gitterunabhängigkeitsstudie für den Versuch 7 durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 2.28 dargestellt. Das Verhältnis  $L/D$  kennzeichnet das Verhältnis der Länge eines Kontrollvolumens zu seinem hydraulischen Durchmesser. Es ist erkennbar, dass in diesem Fall die Rechengitterauflösung der Versuchsanlage eine nur untergeordnete Rolle bezüglich der maximalen Druckamplitude spielt.

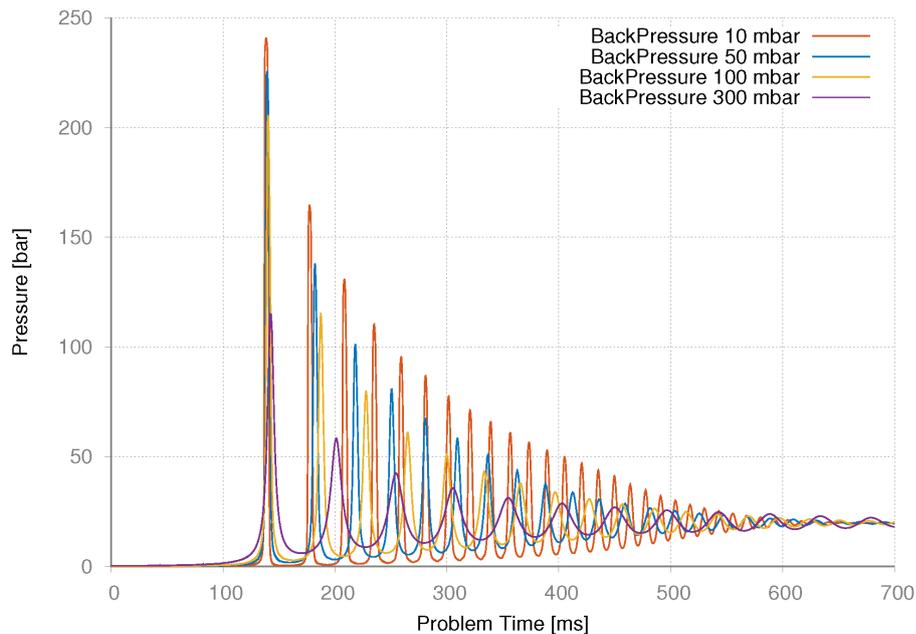


**Abb. 2.28** Einfluss der Nodalisierung auf die maximale Druckstoßamplitude für verschiedene Druckmesspositionen

Für die in Tab. 2.4 gegebenen Anfangs- und Randbedingungen wurde der Einfluss des Gegendrucks untersucht. Aus Abb. 2.29 geht wie erwartet hervor, dass der Gegendruck nach der Armatur ein wichtiger Faktor für den Versuchsablauf hinsichtlich der maximal resultierenden Druckstoßamplitude als auch dessen zeitlicher Dämpfung ist. Bei einem höheren Gegendruck fällt der Druckstoß milder aus und wird zudem auch effektiver gedämpft.

**Tab. 2.4** Anfangs- und Randbedingungen zur Untersuchung des Einflusses des Gegendrucks in der Teststrecke auf den Druckstoß

Test	Druck in der Testsektion [mbar]	Druck im Tank [bar]
1	300	20
2	100	20
3	50	20
4	10	20



**Abb. 2.29** Einfluss des Gegendrucks auf die maximale Druckstoßamplitude und den zeitlichen Druckwellenverlauf

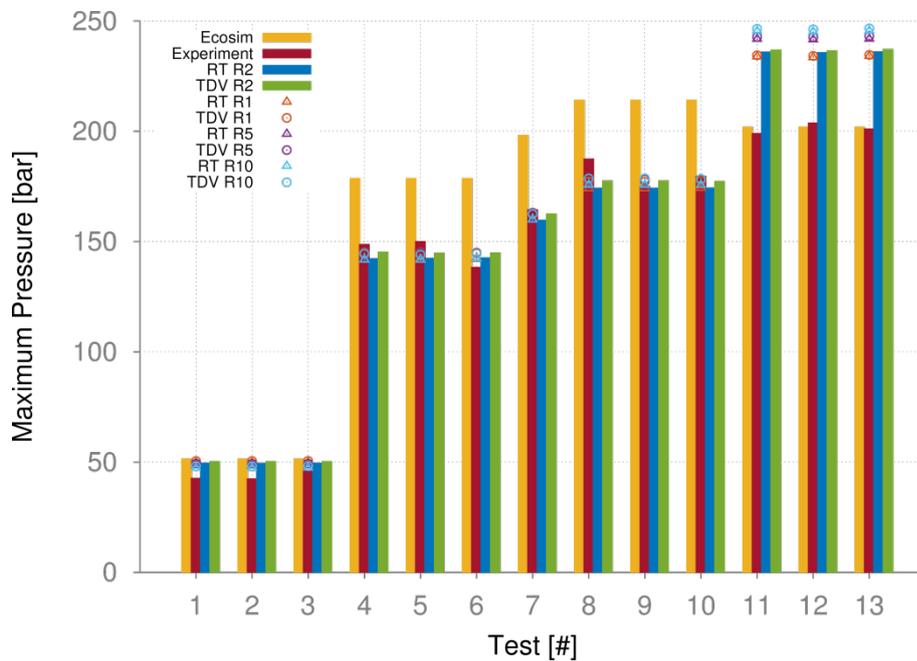
### 2.2.2.3 Ergebnisse der Versuchsnachrechnungen

Unter den vom DLR veröffentlichten Daten /BOM14/ befinden sich neben den maximal gemessenen Druckspitzen und dem Zeitpunkt, zu dem dieser gemessen wurde, auch Simulationsergebnisse des Computercodes EcosimPro, ein Computertool, das von Empresarios Agrupados entwickelt wird /ECO11/. Die Anfangs- und Randbedingungen der Untersuchung sind in Tab. 2.3 dargestellt. Abb. 2.30 und Abb. 2.31 zeigen einen Vergleich der ATHLET-Ergebnisse mit dem Experiment und den bereits erwähnten Ecosim-Simulationen. ATHLET-Ergebnisse sind für vier unterschiedliche L/D-Verhältnisse (1, 2, 5 und 10) dargestellt. Hierbei kamen je zwei unterschiedliche ATHLET-Modelle zum Einsatz (Bezeichnung „RT“ bzw. „TDV“), die sich in der Nodalisation des HPT unterschieden, aber nahezu identische Ergebnisse lieferten.

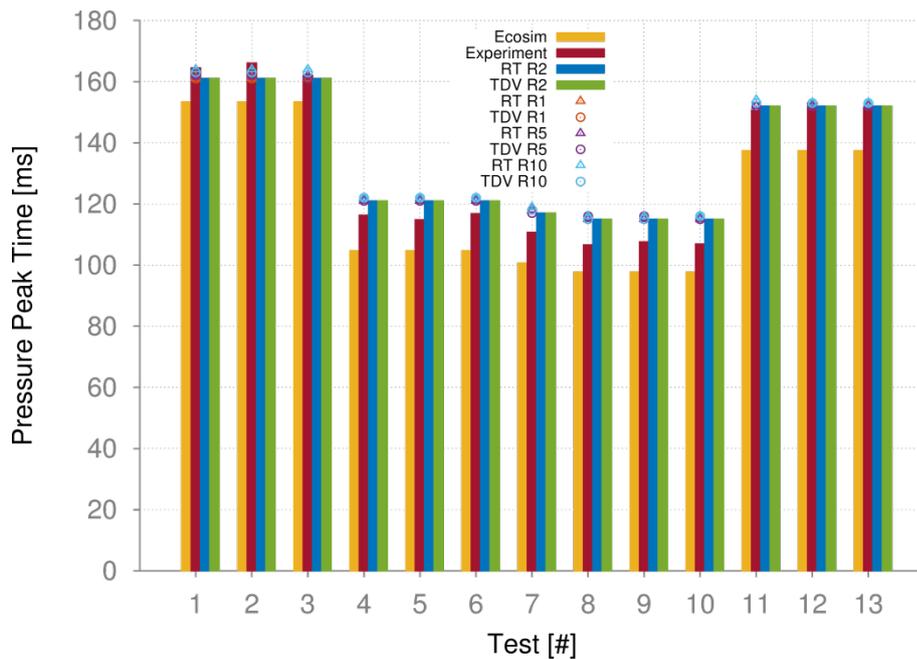
ATHLET kann die DLR-Druckstoßversuche ausgelöst durch die Wassereinspeisung in ein teilentleertes Rohrleitungssegment überwiegend sehr gut wiedergeben. Lediglich für die drei Versuche 11 bis 13, in denen der Gegendruck in der Testsektion auf ungefähr 20 mbar gesenkt wurde, werden die resultierenden Druckspitzen deutlich überschätzt (Abb. 2.30), was vermutlich eine Folge der für diesen Druckbereich ungenauen ATHLET-Stoffwerte ist. (Arbeiten zur Verbesserung der ATHLET-Stoffwerte für Wasser laufen derzeit im Vorhaben 1501552 der Hochschule Zittau-Görlitz.) Der Zeitpunkt des maximalen Druckstoßes wird immer sehr zuverlässig von ATHLET wiedergegeben,

auch für die Experimente mit sehr niedrigem Gegendruck in der Testsektion (Abb. 2.31). Daraus ist abzuleiten, dass die von ATHLET berechneten kritischen Ausströmraten gut mit der Realität übereinstimmen.

Unabhängig vom Detaillierungsgrad des Hochdrucktanks, TDV oder RT, oder der Auflösung der Testsektion kann ATHLET sowohl die maximal auftretende Druckamplitude als auch den Zeitpunkt, zu dem der Sensor P6 diese Druckspitze erfasst, mit guter Genauigkeit berechnen, siehe Abb. 2.30 und Abb. 2.31. In beiden Abbildungen ist das Verhältnis L/D zwischen der Zelllänge und des hydraulischen Durchmessers durch R ersetzt. Demnach entspricht die Bezeichnung R1 dem Gitterauflösung L/D=1.



**Abb. 2.30** Maximal gemessene Druckamplitude



**Abb. 2.31** Zeitpunkt der Erfassung der maximal gemessenen Druckamplitude am Drucksensor 6

### 2.2.3 Modellerweiterung zur Simulation kondensationsinduzierter Druckstöße

In der Vergangenheit vom Lehrstuhl Nukleartechnik der TUM durchgeführte Entwicklungen hatten das Ziel, kondensationsinduzierte Wasserschläge in waagerechten Rohren mit ATHLET besser zu simulieren. Hierfür wurde die Berechnung des Massen- und Energieaustauschs an der Wasser-Dampf-Grenzfläche modifiziert. Die neu implementierte Korrelation für den Wärmeübergangskoeffizienten an der Zwischenphasenfläche basiert auf der Oberflächenerneuerungstheorie (Surface Renewal Theory, SRT) und ist für unterschiedliche Strömungsbilder in horizontalen Rohren gültig CEU13. Sie wurde anhand von Versuchsdaten aus der ungarischen PMK2-Anlage mit Zweiphasenströmungen in waagerechten Rohren überprüft. Bei gleichzeitiger Verwendung der Transportgleichung für die Zwischenphasenflächendichte, die für die durchgeführten Nachrechnungen – anders als die alternativ in ATHLET verfügbaren Korrelationen – eine größere Zwischenphasenflächendichte und damit höhere Kondensationsraten berechnete, konnte die neue Korrelation die experimentell beobachteten Wasserschläge qualitativ zuverlässig reproduzieren. Die hierfür in einer älteren ATHLET-Programmversion erfolgten Programmerweiterungen wurden nun in die aktuelle ATHLET-Entwicklung integriert.

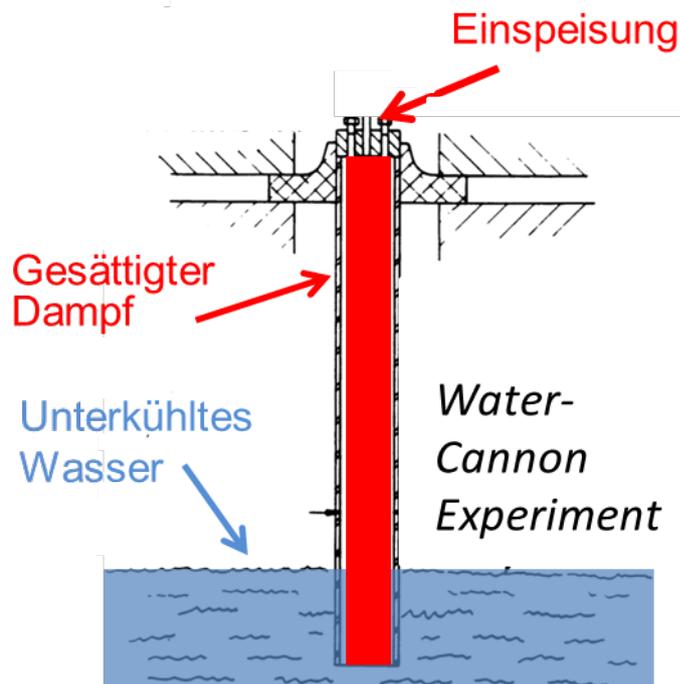
Im Eingabedatensatz kann festgelegt werden, ob die neue SRT-basierte Wärmeübergangskorrelation speziell zur Simulation von Wasserschlägen Verwendung finden soll.

#### **2.2.4 Kondensationsinduzierte Druckstöße in vertikalen Rohren (Wasserkanone)**

Zu kondensationsinduzierten Druckstößen wurden zunächst Versuche zum sog. Water-Cannon-Phänomen analysiert. Hierbei kommt es innerhalb eines vertikalen Rohres durch Kontakt mit unterkühltem Wasser zur schlagartigen Kondensation von gesättigtem Dampf. Aufgrund der damit einhergehenden schnellen Druckabsenkung strömt weiteres Wasser bspw. aus einem Pool in das vertikale Rohr nach und schlägt schließlich am oberen Ende des Rohres auf. Das Water-Cannon-Phänomen ist ähnlich dem bei Siedewasserreaktoren als Chugging bekannten Problem beim Abblasen von Dampf in eine Wasservorlage, das durch nicht zu kleine Abblasemassenströme und die Verwendung von Düsenstöcken vermieden werden kann.

Bei der simulierten Versuchsanlage handelt es sich um die vertikale „Wasserkanone“, die für die experimentelle Untersuchung von Kondensationsschlägen entwickelt worden war [BLO77]. Die Hauptkomponente der Versuchsanlage ist die 711,2 mm lange vertikale Testsektion mit einem Innendurchmesser von 38,1 mm, die mit Sattedampf von oben befüllt wird. Am oberen Ende des Rohrs ist ein Drucksensor installiert. Das andere Ende der Testsektion ist in einen großen Tank mit um 80 K unterkühltem Wasser eingetaucht. Die Versuchsanlage Wasserkanone ist in Abb. 2.32 veranschaulicht.

Der Versuchsablauf sieht vor, dass der Dampf progressiv das unterkühlte Wasser aus dem vertikalen Rohr verdrängt, wobei sich im Wasser eine Temperaturschichtung ergibt, welche den Kontaktkondensationsvorgang an der Phasengrenzfläche limitiert. Sobald die gesättigte Wasserschicht aus der Testsektion den Tank erreicht, wird es durch stark unterkühltes Wasser ersetzt, wodurch die Kontaktkondensation wieder angeregt und das Wasser schlagartig nach oben beschleunigt wird. Durch den Aufprall des Wassers an dem oberen Rohrende erfolgt ein Druckstoß.



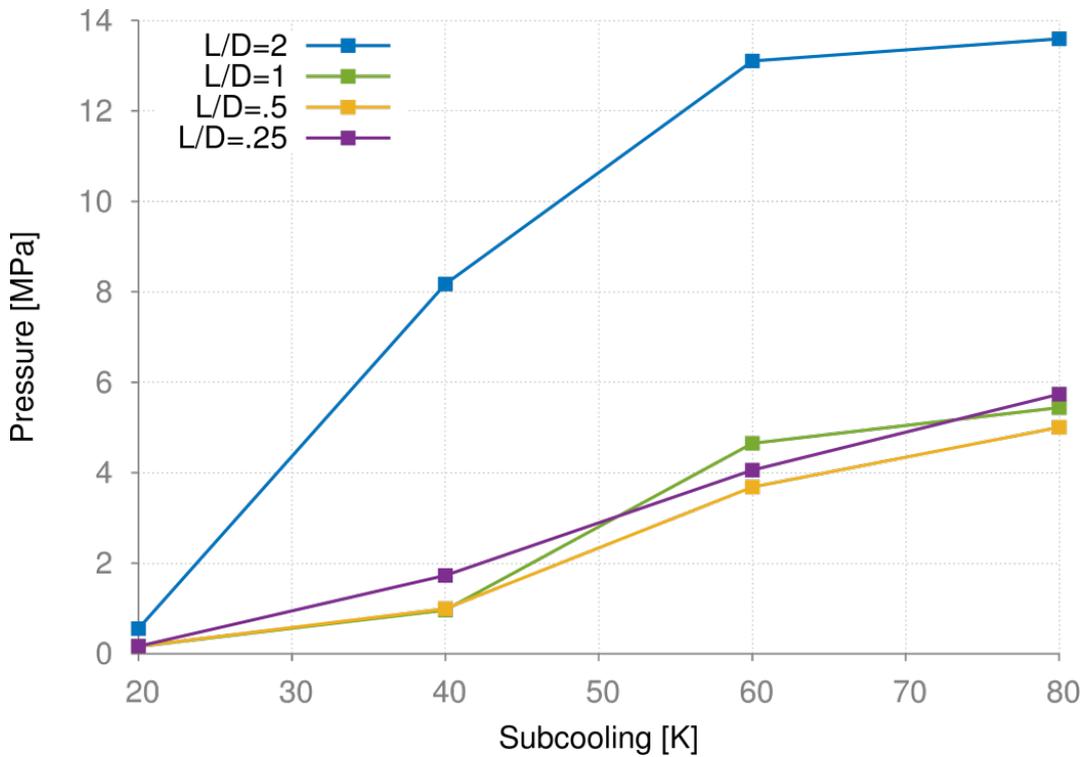
**Abb. 2.32** Schematische Darstellung der Water-Cannon Versuchsanlage /BLO77/

#### 2.2.4.1 Numerische Analysen

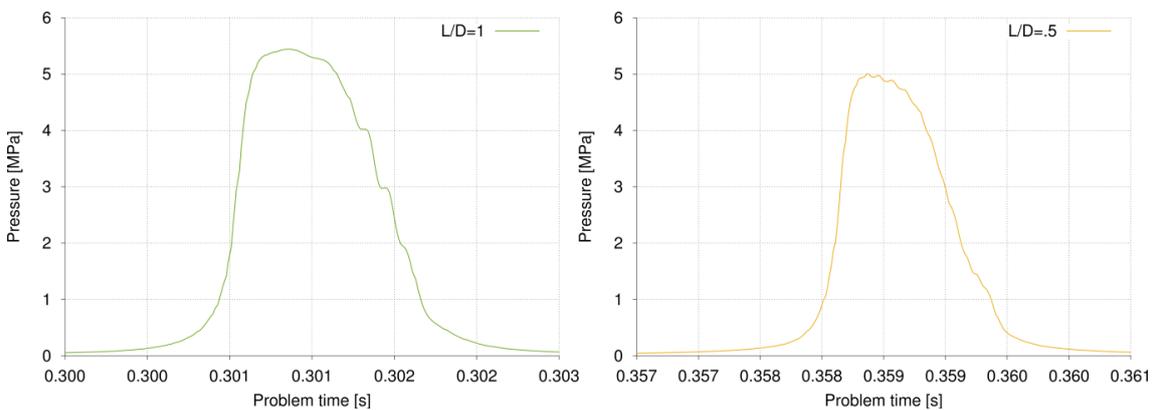
Zunächst wurde eine Gittersensitivitätsstudie mit ATHLET zu dem vorliegenden Versuch durchgeführt. Dabei wurde das L/D-Verhältnis der Rechenzellen im vertikalen Rohr variiert. Das L/D-Verhältnis wird aus der Rechenzelllänge und dessen hydraulischem Durchmesser gebildet. Zudem wurde der Einfluss der Wasserunterkühlung auf die Höhe der Druckspitze untersucht. Die Ergebnisse beider Sensitivitätsstudien zeigt Abb. 2.33. Die Simulationen weisen für die drei feinsten Gitter keine nennenswerten Unterschiede auf, sodass Konvergenz vorliegt. Nur bei Verwendung des größten Gitters unterscheiden sich die ATHLET-Ergebnisse deutlich. Eine Gitterauflösung von ca.  $L/D=1$  liefert somit hinsichtlich Rechengenauigkeit einerseits und benötigter Rechenzeit andererseits einen guten Kompromiss. Wie erwartet spielt das Maß der Wasserunterkühlung eine sehr wichtige Rolle für die resultierende Druckspitzhöhe: Je stärker das Wasser unterkühlt ist, desto höher fallen die Druckspitzen aus. Dies ist zu erwarten, da die Wasserunterkühlung direkt die Kondensationsrate, die treibende Kraft zur Bildung eines Druckstoßes, beeinflusst.

Einen detaillierteren Blick auf den zeitlichen Druckstoßverlauf für die Rechengitterauflösungen  $L/D = 1$  und  $L/D = 0,5$  zeigt Abb. 2.34. Für beide Auflösungen hat der Druckstoß eine ähnliche Form mit Blick auf die Amplitude und die Zeitdauer. Bei größerer

Auflösung tritt der Druckstoß jedoch deutlich früher auf. Dies resultiert sowohl aus der größeren numerischen Diffusion als auch aus potentiell höheren Kondensationsraten durch größere KV, was eine größere Beschleunigung zur Folge hat.



**Abb. 2.33** Einfluss der Rechengitterauflösung und der Wasserunterkühlung auf die maximale Druckstoßamplitude



**Abb. 2.34** Vergleich des zeitlichen Druckverlaufs beim Water-Cannon-Versuch für die Rechengitterauflösungen L/D=1 (links) und L/D=0,5 (rechts)

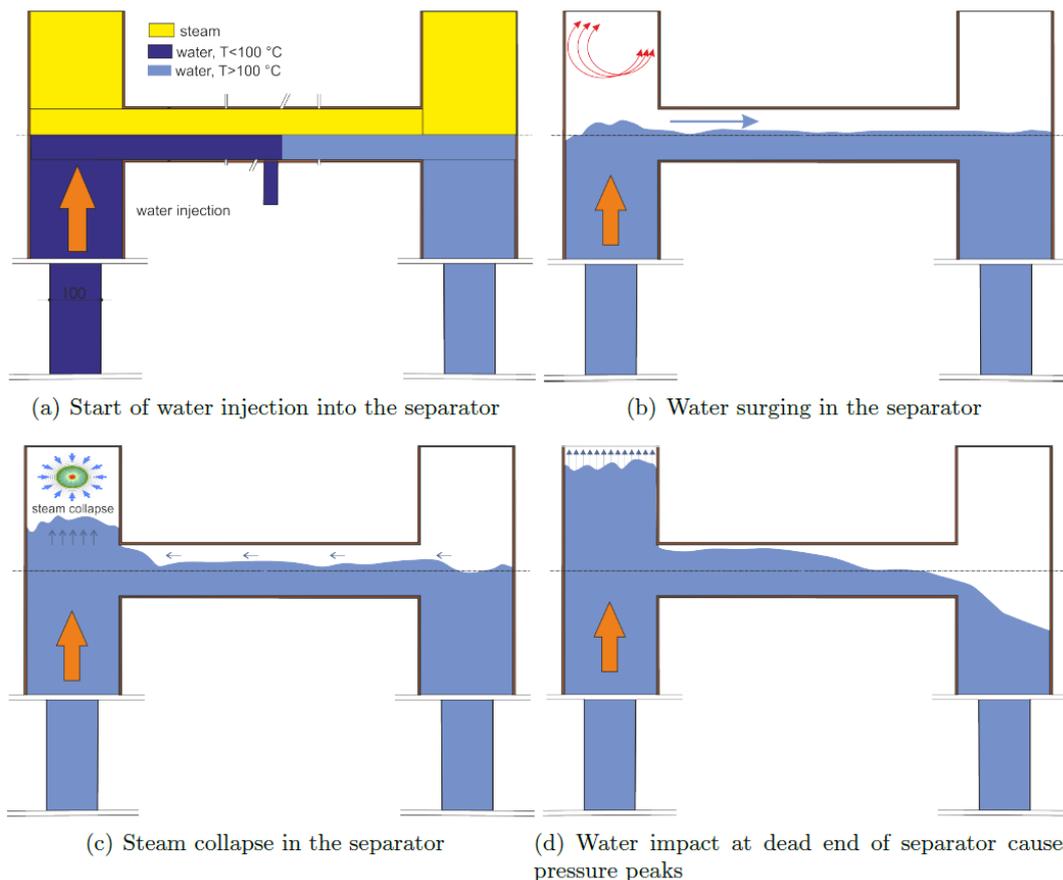
#### **2.2.4.2 Ergebnisse der Versuchsnachrechnungen**

Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit in /BLO77/ veröffentlichten Ergebnissen liefert insgesamt eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Zusammenfassend kann festgestellt werden:

- Aufgrund der Kontaktkondensation bildet sich ein Unterdruck aus, der zwischen 0,004 MPa und 0,069 MPa gemessen und zwischen 0,08 MPa und 0,09 MPa berechnet wurde.
- Die maximal gemessene Druckamplitude wurde zwischen 4,83 MPa und 8,97 MPa gemessen und zwischen 5,0 MPa und 5,5 MPa berechnet.
- Das Druckstoßintervall dauerte zwischen 0,9 ms und 1,1 ms im Experiment und zwischen 1,39 ms und 1,6 ms in der Nachrechnung.
- Die anhand der Messdaten rekonstruierte durchschnittliche Wassergeschwindigkeit lag im Versuch bei ungefähr 6,1 m/s, in der Simulation lag die Aufprallgeschwindigkeit zwischen 4,9 m/s und 5,0 m/s.

#### **2.2.4.3 Weiterführende Analysen**

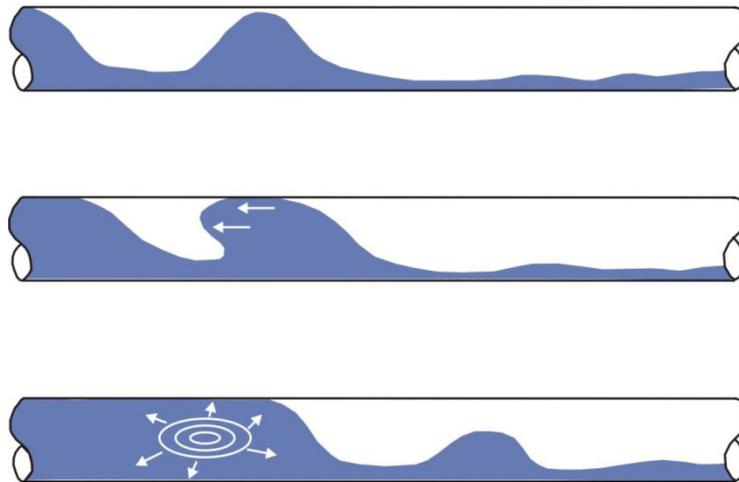
Die Universität der Bundeswehr in Neubiberg (München) betreibt eine Versuchsanlage zur Untersuchung von kondensationsinduzierten Druckstößen /DIR14/. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurden mit Unterstützung der GRS begleitende ATHLET-Analysen durchgeführt. Obwohl die Anlage eigentlich zur Analyse von Druckstößen in horizontalen Rohren bei zweiphasiger, stratifizierter Strömung von unterkühltem Wasser und gesättigtem Dampf konzipiert war, kam es bei zahlreichen Experimenten zur Ausbildung von Druckstößen in vertikalen Anlagenteilen. Der Verlauf der Druckstoßausbildung ist in Abb. 2.35 veranschaulicht. Dieses Phänomen konnte mit ATHLET erfolgreich nachgebildet werden. Darüber hinaus wurden Nachrechnungen von Versuchen durchgeführt, bei denen es aufgrund der gewählten Randbedingungen zu keinem Druckstoß in der Anlage gekommen war. Auch dieses Ergebnis konnte mit ATHLET bestätigt werden /DIR17/.



**Abb. 2.35** Druckstoßentstehung in der CIWA Versuchsanlage der Universität der Bundeswehr /DIR17/

### 2.2.5 Kondensationsinduzierte Druckstöße in horizontalen Rohren

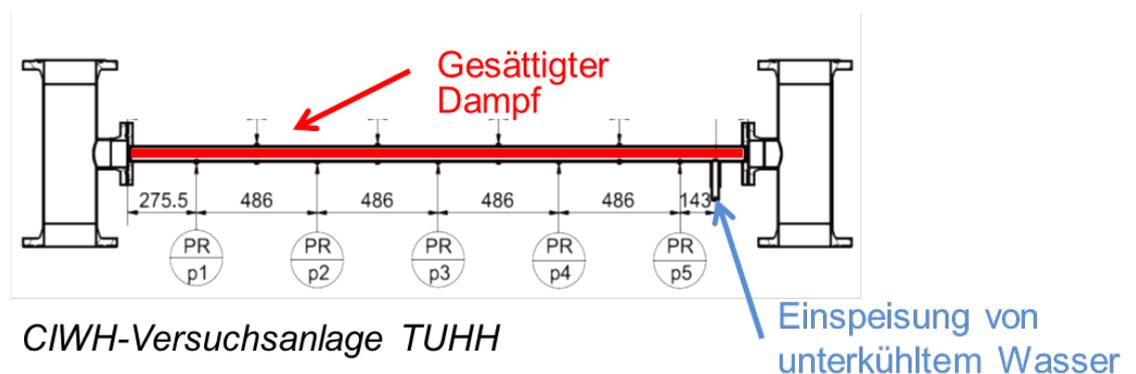
Kondensationsinduzierte Druckstöße in horizontalen Rohren werden z. B. für geschichtete Strömungen von unterkühltem Wasser und Sattampf beobachtet. Bei entsprechenden Strömungsgeschwindigkeiten kommt es durch Wellen und Kondensation an der Wasseroberfläche zur Ausbildung einer Schwallströmung, deren Wasserpfropfen den gesamten Strömungsquerschnitt ausfüllen und eine Dampfblase einschließen (Abb. 2.36). Das durch Turbulenz und Tropfenbildung vergrößerte Kondensationspotential des Wassers sorgt schließlich für den Kollaps der Dampfblase, was aufgrund des plötzlichen Abbremsens des Wasserpfropfens in einem Druckstoß resultiert.



**Abb. 2.36** Phänomenologie eines kondensationsinduzierten Druckstoßes durch Dampfblaseneinschluss

### 2.2.5.1 Die Kondensationsschlagversuchsanlage der TUHH

Bei der mit ATHLET nachgerechneten Druckstoßversuchsserie handelt es sich um die experimentelle Anlage der Technischen Universität Hamburg-Harburg (TUHH). Die Versuchsanlage wurde ausgelegt, um Kondensationsvorgänge in horizontalen oder leicht geneigten Rohrleitungen zu untersuchen. Das Herzstück der Anlage ist die ungefähr 2,5 m lange DN50 Testsektion, die an beiden Enden mit Separatoren verbunden ist. Das unterkühlte Wasser wird über ein T-Stück in die Testsektion eingespeist. Die Anlage ist in Abb. 2.37 dargestellt und in /URB14/ detaillierter beschrieben.



**Abb. 2.37** Schematische Darstellung der CIWA-Versuchsanlage der TUHH

In der Versuchsanlage wurden insgesamt 183 Experimente durchgeführt. Hierin inbegriffen sind auch Versuchswiederholungen (mit typischerweise geringfügig unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen), um auch den stochastischen Effekt der Kondensationsschläge einzubeziehen. Bei den Experimenten hat man eine

Versuchsmatrix, bestehend aus vier unterschiedlichen Wassereinspeise-Massenströmen und zwei unterschiedlichen Wasserunterkühlungen, festgelegt (Tab. 2.5). Die Einspeise-Massenströme wurden anhand der dimensionslosen Froude-Zahl ermittelt. Die Froude-Zahl ist ein Maß für das Verhältnis von Trägheitskräften zu Schwerkraften:

$$Fr = \frac{v}{\sqrt{D_i g}} \quad (2.19)$$

Hierbei sind  $v$  in [m/s] die Leerrohrgeschwindigkeit in der Testsektion,  $D_i$  in [m] der Innendurchmesser der Testsektion und  $g$  in [m/s<sup>2</sup>] die Erdbeschleunigung.

Die Anzahl, mit der ein bestimmter Versuch wiederholt wurde, und die Anzahl der Versuche, bei denen es tatsächlich zu einem Kondensationsschlag gekommen war, ist in Tab. 2.5 dargestellt.

**Tab. 2.5** Versuchsmatrix der TUHH-Versuchsanlage mit Anzahl der durchgeführten Versuchswiederholungen und der dabei aufgetretenen Druckstöße

Fr [-]	ΔT Unterkühlung	
	40 K	60 K
0,3	0 / 20	4 / 24
0,6	10 / 20	18 / 24
0,9	5 / 22	6 / 31
1,1	4 / 21	3 / 21

### 2.2.5.2 Durchgeführte Versuchsnachrechnungen

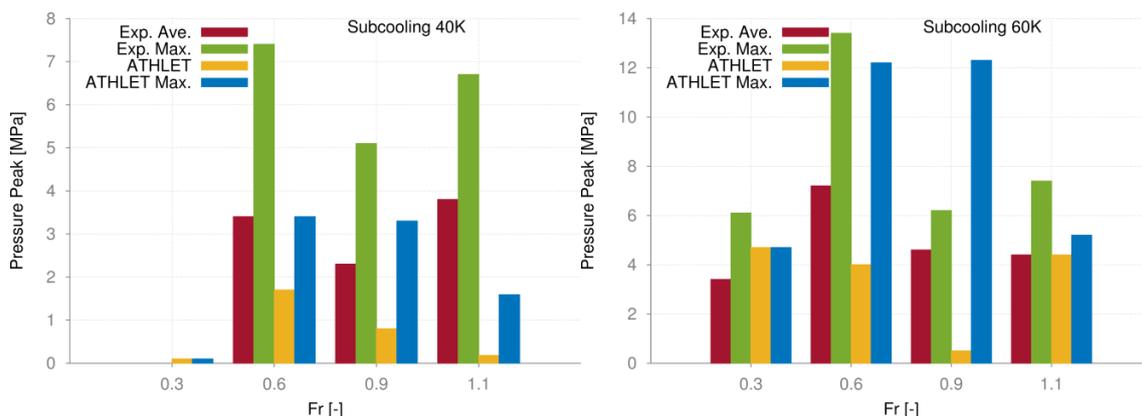
Zu den acht Versuchen der Versuchsmatrix in Tab. 2.5 wurde jeweils eine ATHLET-Simulation durchgeführt. Die TUHH-Versuche wurde nur mit einem einzigen Rechenetz mit einer Auflösung von L/D=1 (Verhältnis von KV-Länge und KV-Durchmesser) durchgeführt, da diese Nodalisierungsauflösung bei allen bisherigen Analysen einen guten Kompromiss zwischen Qualität der Rechenergebnisse und Rechenzeit geliefert hat.

Abb. 2.38 zeigt für jeden der acht Versuche den Mittelwert der gemessenen Kondensationsschlagamplituden (rot), das gemessene Maximum (grün), den simulierten Maxi-

malwert an der Stelle, die der Position des Drucksensors mit der im Versuchsverlauf höchsten gemessenen Intensität des Kondensationsschlags entspricht (gelb), und die maximal simulierte Druckstoßamplitude innerhalb der gesamten Testsektion (blau).

Für die Versuche bei niedriger Unterkühlung kann festgestellt werden, dass bei der niedrigsten Einspeisemenge weder im Versuch noch in der ATHLET-Simulation Kondensationsschläge beobachtet wurden. Bei Einspeisemengen entsprechend den Froude-Zahlen von 0,6 und 0,9 stimmen die ATHLET-Ergebnisse (blau) gut mit den Durchschnittswerten der Experimente (rot) überein. Bei der höchsten Einspeisemenge hingegen wird die Intensität der Kondensationsschläge in der Simulation deutlich unterschätzt, gleichwohl der Kondensationsschlag richtigerweise reproduziert wird.

Bei der Versuchsserie mit höherer Wasserunterkühlung kann ATHLET die Kondensationsschläge ähnlich den Messungen in der TUHH-Anlage wiedergeben, außer beim Versuch mit einer Einspeisemenge entsprechend der Froude-Zahl 0,9. Bei diesem Versuch wird die Intensität des Druckstoßes deutlich überschätzt.



**Abb. 2.38** Vergleich der gemessenen und berechneten Druckamplituden für die in der TUHH-Anlage durchgeführten Druckstoßversuche

## 2.2.6 Schlussfolgerungen

Mit der aktuellen ATHLET Programmversion konnten Versuche zu unterschiedlichen Druckstoßphänomenen erfolgreich nachgerechnet werden. Hierzu zählen Druckstöße ausgelöst durch Ventilschnellschluss und durch Aufprall einer Wassersäule. Außerdem kondensationsinduzierte Druckstöße in vertikalen und horizontalen Rohrleitungen, wofür ATHLET um ein spezielles Kontaktkondensationsmodell erweitert wurde und das auf der Oberflächenerneuerungstheorie basiert sowie unterschiedliche Wirbelskalen berücksichtigt.

Für die verschiedenen Phänomenologien der Druckstöße wurden numerische Analysen und Gittersensitivitätsstudien durchgeführt. Für alle Prozesse konnte gezeigt werden, dass eine Gitterauflösung mit einem Verhältnis KV-Länge zu KV-Durchmesser von „1“ zufriedenstellende und teilweise sogar konvergierte Ergebnisse liefert. Eine vergleichbare Gitterauflösung wird daher für alle Druckstoßanalysen mit ATHLET empfohlen. Grundsätzlich gilt hierbei, dass größere KV eine erhöhte numerische Diffusion mit sich bringen, wodurch z.B. Druckwellen mit scharfen Flanken beim Transport durch das Leitungssystem abgeschwächt werden. Oben genannte Empfehlungen werden in die Programmdokumentation übernommen.

Betrachtet man insbesondere die Ergebnisse der Nachrechnungen zum stark stochastischen Prozess der kondensationsinduzierten Druckstöße, so kann als wichtiges Fazit festgehalten werden, dass ATHLET keine „falschen“ Druckstöße berechnet. D. h., dass nur für die Versuche, in denen aufgrund der gewählten Randbedingungen auch tatsächlich ein Druckstoß gemessen werden konnte, ATHLET einen Druckstoß simulierte. Für gröbere Gitterauflösungen mit größeren KV ergeben sich hierbei größere Druckstoßamplituden. Dies ist eine Folge des höheren Kondensationspotentials in größeren KV aufgrund einer größeren Zwischenphasenfläche. Auf gröberen Gittern mit großem L/D-Verhältnis für die KV ist daher mit zwar nicht-konvergierten, aber konservativen Abschätzungen der Druckstoßintensität durch ATHLET zu rechnen.

Das für die Simulation kondensationsinduzierter Druckstöße entwickelte, hybride Kontaktkondensationsmodell wurde auch zur Simulation von Versuchsanlagen und reaktor-typischer Transienten eingesetzt und überprüft. Es hat sich herausgestellt, dass das standardmäßig von ATHLET verwendete Kondensationsmodell hierbei deutlich bessere Ergebnisse liefert. Daher ist das neue Kondensationsmodell nur zur Simulation von Druckstößen empfohlen und kann explizit im Eingabedatensatz durch den Anwender angewählt werden.

Für die Simulation von Druckstoß-Szenarien, die durch schnelles Öffnen oder Schließen von Ventilen ausgelöst werden, wird empfohlen, eine möglichst realistische Ventilcharakteristik für die Druckverluste zu verwenden, da diese den Druckstoßverlauf maßgeblich beeinflussen kann. Die Ventilcharakteristik sollte idealerweise der Ventilspezifikation entnommen werden oder auf Basis der von in der Literatur für Ventile des entsprechenden Typs publizierten Charakteristiken definiert werden.

## 2.3 Thermohydraulik wassergekühlter Systeme

### 2.3.1 Simulation zweiphasiger Strömungsvorgänge im Reaktorkern

#### 2.3.1.1 Verbesserte Modellierung der Wasserspiegelkraft

Im Rahmen der Überarbeitung der Zweiphasenmodellierung wurde die Wasserspiegelkraft, d.h. der Beitrag innerhalb der Impulsbilanzgleichung, der den Einfluss der (vertikal wirkenden) Gravitation auf Strömungen in horizontalen Leitungen beschreibt, neu abgeleitet. In der erweiterten Form des Terms wird zwischen Leitungen in einem horizontalen Objekt (z.B. horizontale Rohrleitung) und horizontalen Querverbindungen zwischen zwei vertikalen Objekten (z.B. ATHLET Parallelkanäle im Reaktorkern) unterschieden. In den Leitungen, die eine Querverbindung paralleler Kanäle darstellen, wird die „water level force“ standardmäßig nicht mehr berücksichtigt. Dies ist eine realistische Betrachtung des Phänomens, die auch der Modellierung im ATHLET 5-Gleichungsmodell vergleichbar ist. Die Wasserspiegelkraft kann aber optional im 2-Fluidmodell berücksichtigt werden. Analoges gilt für das 5-Gleichungsmodell, in dem der Effekt unterschiedlicher Füllstände innerhalb des Phasendriftmodells optional betrachtet werden kann. Die vorgenommenen Modelländerungen führen insgesamt zur Angleichung beider Gleichungssysteme.

Die Ableitung der neu modellierten Wasserspiegelkraft wird nachfolgend skizziert. Der Term in der Impulsgleichung entspricht anschaulich der Auswirkung der Gravitationskraft zwischen zwei horizontal benachbarten KV mit unterschiedlichen Füllständen.

$$dp_{level} = d(\rho \cdot g \cdot H) \quad (2.20)$$

Für die Wasserphase entspricht dies einem Gradienten der (kollabierten) Füllstände auf beiden Seiten der horizontalen Leitung:

$$dp_{level} = d((1 - \alpha)\rho \cdot g \cdot H) \quad (2.21)$$

wobei  $H = D_j$  dem geometrischen Durchmesser der Leitung entspricht und  $\alpha$  der Dampfvolumentgehalt ist. Hiermit folgt:

$$dp_{level} = g \cdot D_j \cdot \Delta((1 - \alpha)\rho) = g \cdot D_j \cdot [\rho \cdot d(1 - \alpha) + (1 - \alpha) \cdot d\rho] \quad (2.22)$$

und schließlich für die beiden Phasen nach der Integration entlang der Leitung:

$$\Delta p_{level,l} = g \cdot D_j \cdot \left[ \overline{(1 - \alpha)} \cdot (\rho_{l,1} - \rho_{l,2}) + \bar{\rho}_l (\alpha_2 - \alpha_1) \right] \quad (2.23)$$

$$\Delta p_{level,v} = g \cdot D_j \cdot \left[ \bar{\alpha} \cdot (\rho_{v,1} - \rho_{v,2}) - \bar{\rho}_v (\alpha_2 - \alpha_1) \right] \quad (2.24)$$

worin die Indizes „1“ und „2“ die KV auf der linken bzw. rechten Seite der Leitung bezeichnen. Größen mit einem Überstrich sind über beide KV gemittelte Größen. Die Summe der beiden „zweiten“ Terme auf den rechten Seiten der Gleichungen (2.23) und (2.24) ergibt die so genannte „water level force“ als Folge unterschiedlicher Füllstände in den benachbarten KV:

$$\Delta p_{level} = g \cdot D_j \cdot \left[ \bar{\rho}_l (\alpha_2 - \alpha_1) - \bar{\rho}_v (\alpha_2 - \alpha_1) \right] \quad (2.25)$$

Die beiden ersten Terme in (2.23) und (2.24) bedeuten einen Austausch aufgrund unterschiedlicher Wasser- bzw. Dampfdichten in den beiden KV.

Die Ableitung der Wasserspiegelkraft, die den Einfluss der Gravitation in der Querrichtung beschreibt, erfolgte soweit ohne jegliche Annahmen über die Phasenverteilung und das Strömungsbild innerhalb des analysierten Bereichs. Im Zweiphasengebiet von ATHLET kann ein Anteil der Wasserphase in Form von Tropfen vorliegen. Dieser Anteil wird als „entrained water fraction“  $E_d$  berechnet. Die Tropfen haben i. d. R. eine hohe Geschwindigkeit nahe der Geschwindigkeit der Gasphase, so dass ihr Beitrag zur hydrostatischen Druckdifferenz unbekannt ist. Daher wird die Annahme getroffen, dass der Wasseranteil in Form von Tropfen bei der Berechnung der „water level force“ nicht zu berücksichtigen ist. Diese Annahme erfolgt für eine Querleitung zwischen vertikalen Kontrollvolumina, da in einem vertikalen KV die Tropfen in einer Richtung parallel zur Gravitation getragen werden. Bei einer Leitung zwischen horizontalen Kontrollvolumina bewegen sich die Tropfen in senkrechter Richtung zur Gravitation aber parallel zur betrachteten Leitung, so dass in diesem Fall der gesamte Wasseranteil bei der Berechnung der „water level force“ berücksichtigt wird.

Nach Umformung beträgt der gesamte Modellterm der Gravitation in der Querrichtung

zu vertikalen Parallelkanälen:

$$\Delta p_{level} = g \cdot D_j \cdot [\alpha_2(1 - E_{D2}) \cdot (\rho_{l,2} - \rho_{v,2}) - \alpha_1(1 - E_{D1}) \cdot (\rho_{l,1} - \rho_{v,1})] \quad (2.26)$$

Wenn das ganze Wasser in Form von Tropfen vorliegt, verschwindet somit dieser Term und die „water level force“ ist Null. Ähnliches gilt für die überkritischen Zustände, für die der Dichteunterschied zwischen Wasser und Dampf Null ist.

### **2.3.1.2      Erweiterte Modellierung der Zwischenphasenreibung bei Ringströmung**

Bereits im Rahmen des vorangegangenen Projekts RS1507 wurden Analysen mit ATHLET zum Reflooding durchgeführt. Hierfür wurden Versuche nachgerechnet, die die Untersuchung von Phänomenen ermöglichen, die während des Wiederauffüllvorgangs im RDB nach einem großen Kühlmittelverluststörfall auftreten. Hierfür herangezogene Versuchsanlagen waren FEBA, FLECHT und PERICLES, deren Teststrecken mit beheizten Stabbündeln unterschiedlicher Geometrie ausgestattet sind. Bei der Analyse der Simulationen wurden deutliche Abweichungen von den experimentellen Daten im Bereich der zweiphasigen Strömung bei hohen Dampfvolumentgehalten beobachtet. Insbesondere bei der Simulation der Wiederauffüllphase kamen diese Unterschiede zum Tragen. Die durchgeführten PERICLES-Analysen haben gezeigt, dass ATHLET den Wassermitttriss im Kern teilweise erheblich überschätzt. Da ein erhöhter Wassermitttriss den Wiederauffüllvorgang verlangsamt und die Kühlung der Brennelemente beeinflusst, sollte dieses Resultat nun genau analysiert werden.

In einem ersten Schritt wurde die Datenbasis nochmals erweitert und zusätzlich zu den FEBA-, FLECHT- und PERICLES-Experimenten, die im vorherigen Projekt analysiert wurden, Tests aus dem Experiment ACHILLES analysiert. Die Ergebnisse wurden dokumentiert und in einem Konferenzbeitrag im Rahmen der NUTHOS-11 veröffentlicht /SKO16/.

Die beobachteten Unterschiede beim Wiederauffüllvorgang wurden zunächst auf das Entrainment-Modell zur Berechnung des Wassermitttrisses zurückgeführt. Daher wurden für den Wiederauffüllvorgang auf der Basis von FEBA, FLECHT, PERICLES und ACHILLES Experimenten verschiedene Korrelationen für den Wassermitttriss getestet. Hierzu zählten eine Korrelation von Ishii, eine Korrelation aus dem Programm TRAC und die in ATHLET genutzte Korrelation mit modifizierten Modellkonstanten. Bei der Analyse der Ergebnisse stellte sich heraus, dass keine der Korrelationen eine eindeuti-

ge Verbesserung brachte. Bezüglich des Experiments ACHILLES hat sich herausgestellt, dass die in dem Experiment verwendeten Abstandshalter eine besondere Form haben, so dass die experimentellen Ergebnisse nur bedingt für die Validierung der Wassermittels-Korrelationen geeignet sind.

Da die Modifikation der Modellierung des Wassermittels die Simulationsergebnisse nicht signifikant verbessern konnte, wurde als weitere mögliche Ursache die Modellierung der Zwischenphasenreibung im Bereich hoher Dampfvolumentehalte vermutet.

Als zweite Option wurde daher eine Korrelation für die Zwischenphasenreibung im Bereich hoher Dampfvolumentehalte, d.h. bei Ringströmung, eingeführt. Bisher wurde in ATHLET hierfür auf das „flooding based drift“-Modell zurückgegriffen. Das bedeutet, dass die Phänomene bei der Ringströmung aus der Extrapolation des Bereichs der Gegenströmungsbegrenzung ermittelt wurden. Implementiert wurde eine von der Wallis Korrelation abgeleitete Formulierung der Zwischenphasenreibungskraft  $\vartheta_i$ , wie sie ähnlich auch im TRAC Programm benutzt wird:

$$\vartheta_i = C_i \cdot v_{rel} \cdot |v_{rel}| \quad (2.27)$$

mit

$$C_i = 0,01 \cdot (1 + 75(1 - \alpha)) \cdot \rho_v / D_H \quad (2.28)$$

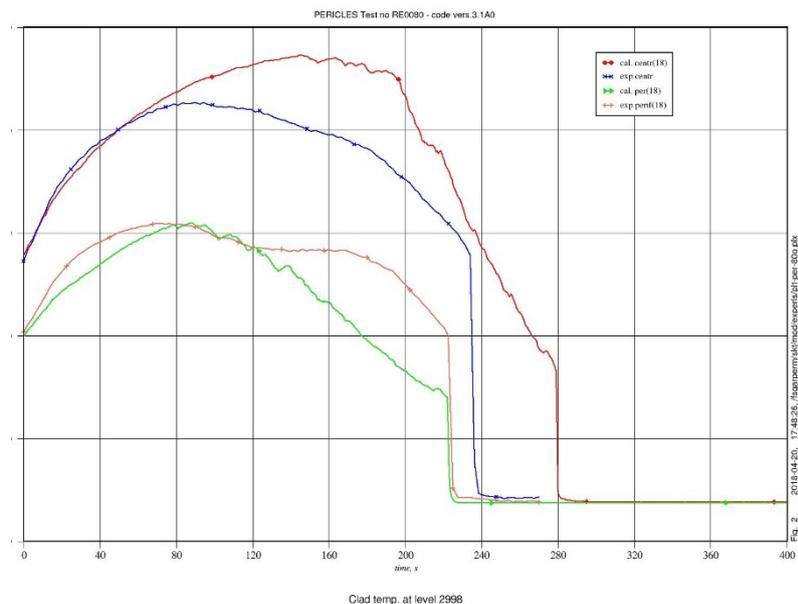
wobei  $D_H$  der hydraulische Durchmesser und  $v_{rel}$  die Relativgeschwindigkeit der Phasen ist. (Eine ähnliche Korrelation wurde für Zwischenphasenreibung bei stratifizierten horizontalen Strömungen verwendet.) Der Übergang zur Ringströmung wird bei sehr hohen Dampfvolumentehalten  $\alpha > 0,9$  angenommen. Der Übergang zur „flooding based drift“-Korrelation ist im Bereich  $0,9 > \alpha > 0,8$  realisiert.

Die beschriebene Modifizierung der Zwischenphasenreibung verbessert die Simulation der zweiphasigen Strömungen bei hohen Dampfvolumentehalten. Mit den eingeführten Änderungen konnte vor allem eine bessere Übereinstimmung mit den Ergebnissen des PERICLES-Experiments erreicht werden. Bei den Experimenten FEBA und FLECHT konnte eine geringfügige Verbesserung der Simulationen erreicht werden.

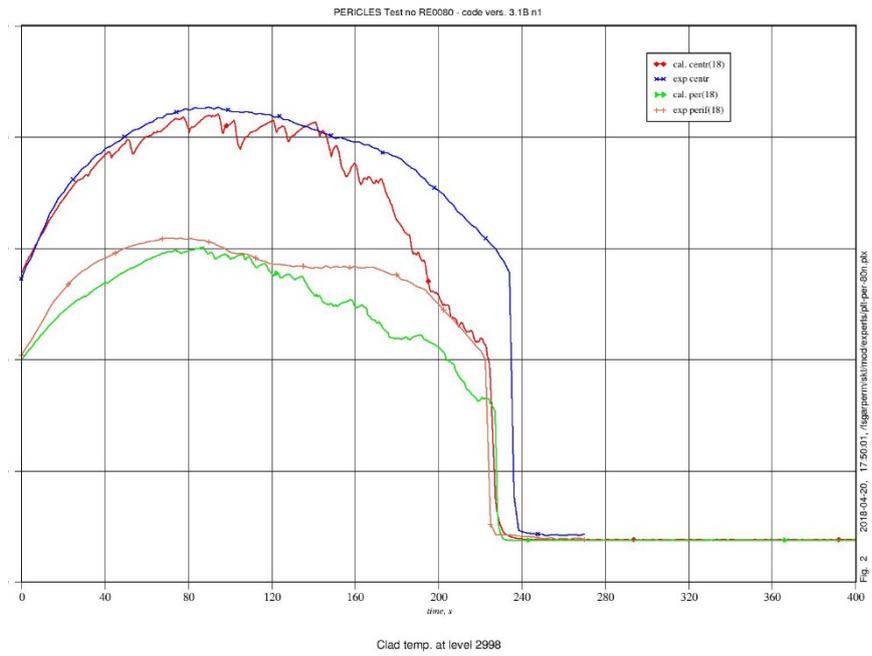
Die Teststrecke des PERICLES-Experiments besteht aus drei elektrisch geheizten 7x17 Brennelementsimulatoren von typischen DWR Brennstäben, die die Untersu-

chung von Phänomenen während des Wiederauffüllvorgangs im RDB nach einem großen Kühlmittelverluststörfall ermöglichen. Die Experimente erlauben auch die Berücksichtigung von 2D-Effekten infolge einer radialen Leistungsverteilung auf den Flutvorgang. Bei der Simulation der Tests aus dem PERICLES Experiment traten ursprünglich die größten Unterschiede im oberen Bereich der Brennelementsimulatoren auf. Mit der Modellmodifikation konnte eine Verbesserung der maximalen Hüllrohr-Temperatur als auch des Zeitpunkts der Wiederbenetzung erreicht werden, siehe beispielhaft Abb. 2.39 und Abb. 2.40 zu Test Nr. RE0080. Im unteren Bereich sind die Unterschiede zwischen altem und neuem Modell in den beiden Simulationen minimal, wie Abb. 2.41 und Abb. 2.42 entnommen werden kann. Der Verlauf der Hüllrohr-Temperaturen und die Zeit der Wiederbenetzung sind in beiden Fällen nahezu identisch.

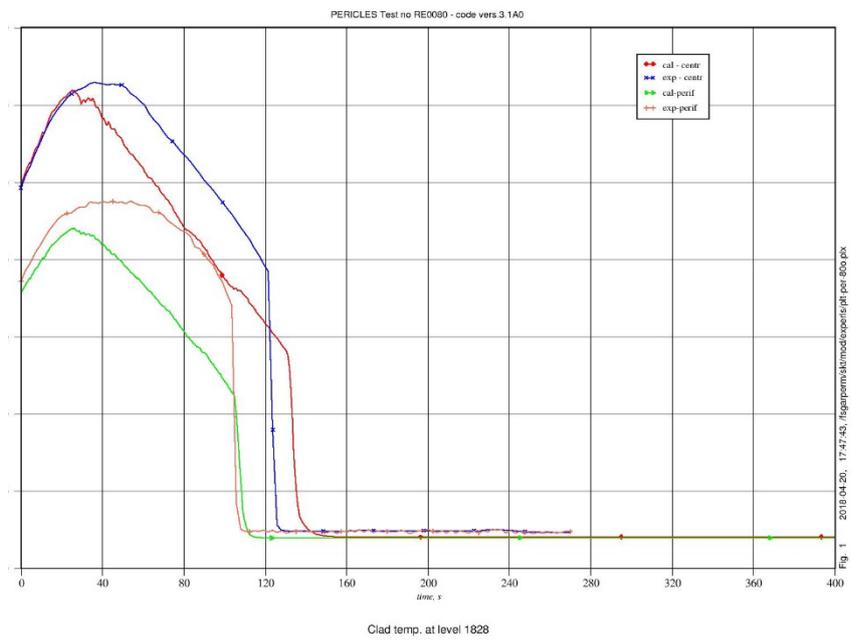
Eine leichte Verbesserung der berechneten und gemessenen Druckdifferenzen in der Mitte des Bundles konnte ebenfalls erreicht werden (siehe Abb. 2.43 und Abb. 2.44).



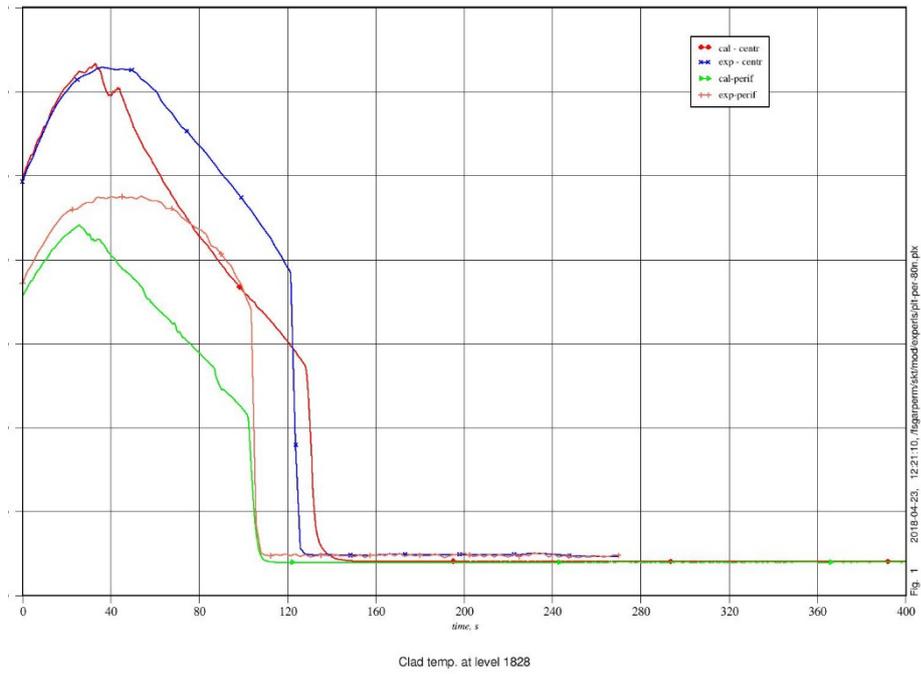
**Abb. 2.39** PERICLES-Test Nr. RE0080; Hüll-Rohr Temperatur; Level 2998 mm; ATHLET 3.1A



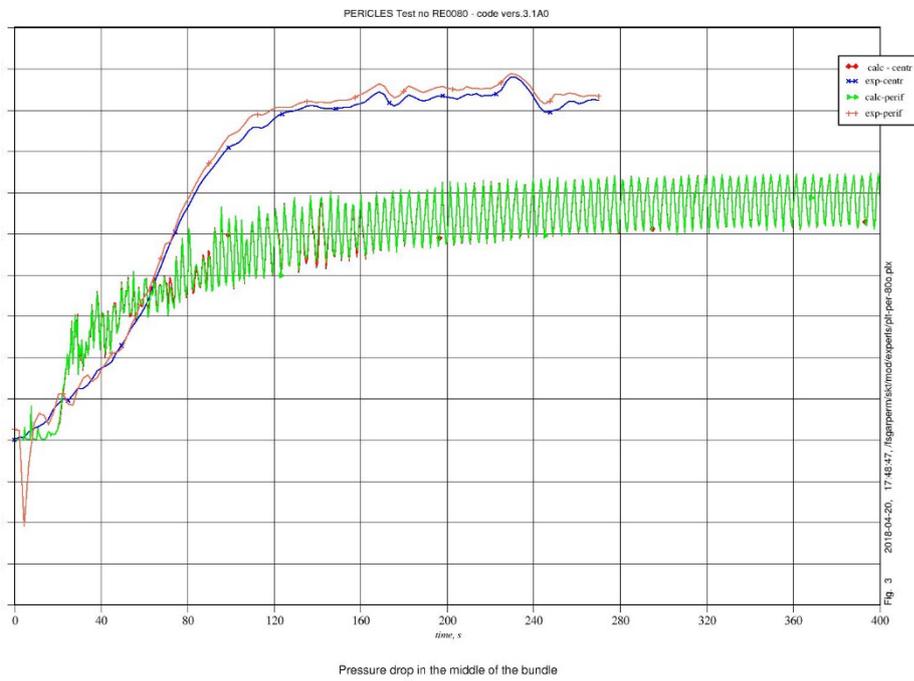
**Abb. 2.40** PERICLES-Test Nr. RE0080; Hüllrohrtemperatur; Level 2998 mm; Rechnung mit neuem Modell



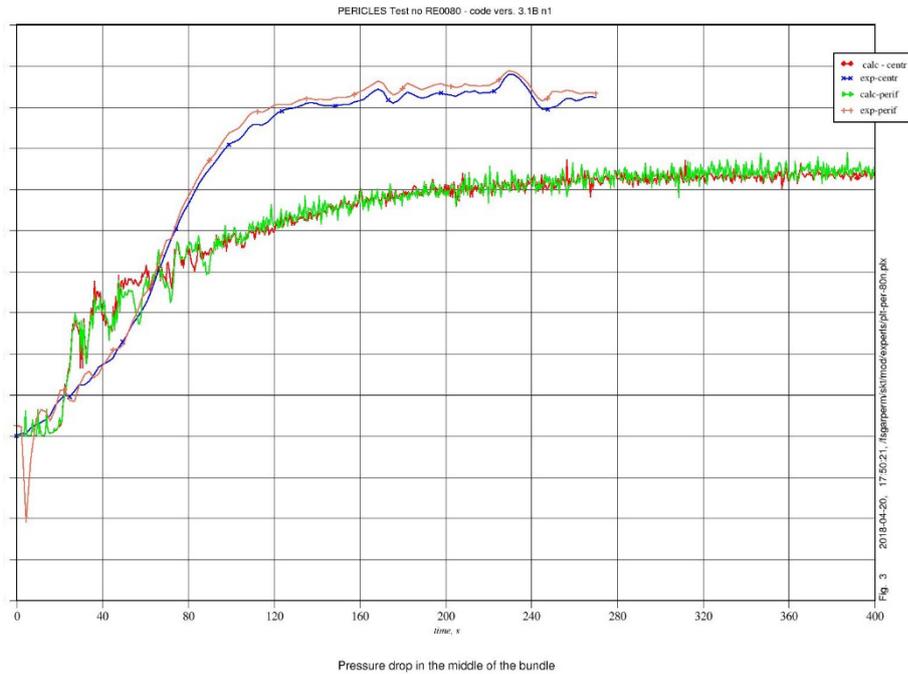
**Abb. 2.41** PERICLES-Test Nr. RE0080; Hüllrohrtemperatur; Level 1828 mm; ATHLET 3.1A



**Abb. 2.42** PERICLES-Test Nr. RE0080; Hüllrohrtemperatur; Level 1828 mm; Rechnung mit neuem Modell



**Abb. 2.43** PERICLES-Test Nr. RE0080; Druckdifferenz in der Mitte des Bündels; ATHLET 3.1A



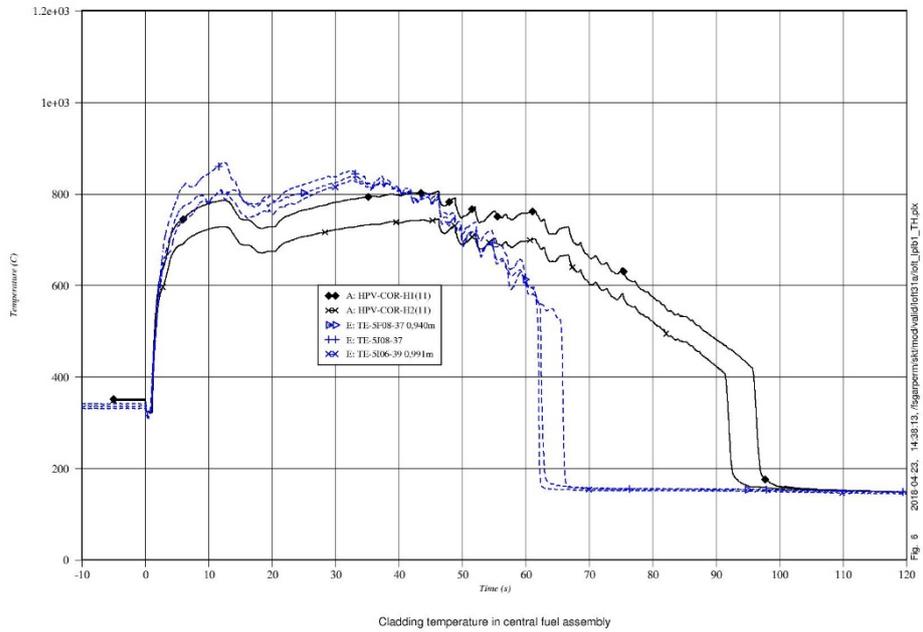
**Abb. 2.44** PERICLES-Test Nr. RE0080; Druckdifferenz in der Mitte des Bündels; Rechnung mit neuem Modell

### 2.3.1.3 Modellvalidierung anhand von Integralversuchen

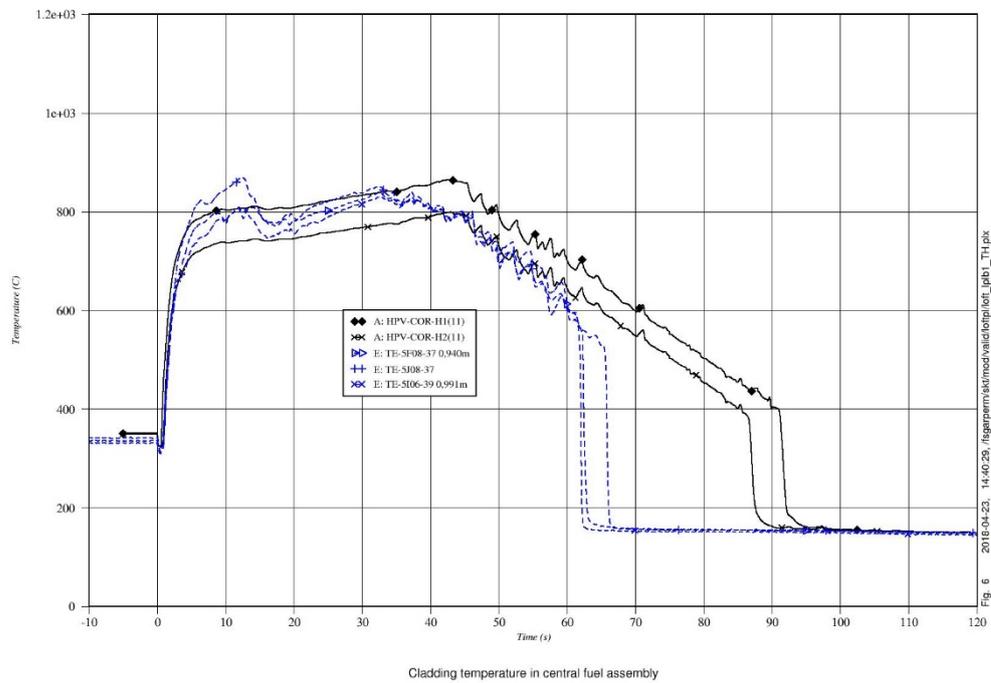
Die neuentwickelte Approximation des Gravitationsterms in Querrichtung (Wasserspiegelkraft, siehe Kapitel 2.3.1.1) sowie die erweiterte Modellierung der Zwischenphasenreibung in vertikalen Leitungen (siehe Kapitel 2.3.1.2) wurden auf der Basis von Integralversuchen weiterführend validiert. Hinsichtlich der Nachrechnungen des LOFT-Experiments LP-LB1 (Kühlmittelverluststörfall mit großem Bruch im kalten Strang) konnte eine Verbesserung der Ergebnisse erreicht werden.

Das Stabbündel der LOFT-Versuchsanlage wurde in ATHLET mittels zweier paralleler Kanäle abgebildet, einem zentralen und einem peripheren Kanal. Für das zentrale Bündel ist die Verbesserung hinsichtlich der Ergebnisse für die Hüllrohrtemperaturen gering (siehe Abb. 2.45 und Abb. 2.46). Vor allem der Zeitpunkt der Quenchen wird mit dem neuen Modell früher berechnet. Für das Randbündel konnte eine eindeutige Verbesserung erzielt werden. Während bei der Simulation mit der ATHLET 3.1A Version alle simulierten Brennstäbe eine deutliche Aufheizung aufzeigten (siehe Abb. 2.47, Abb. 2.49), ist dies in der Simulation mit den geänderten Modellen nur für einen Teil der Brennstäbe zu sehen. Ähnlich dem Experiment weist ein Brennstab eine nur geringfügige Aufheizung auf (Abb. 2.48 und Abb. 2.50). Darüber hinaus liegt auch für das

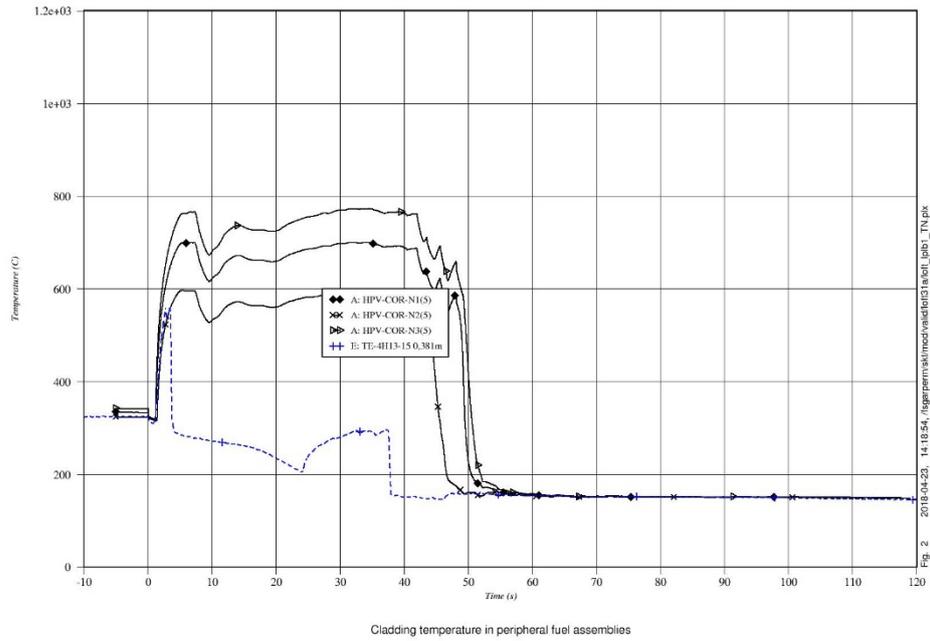
periphere Bündel der errechnete Zeitpunkt der Wiederbenetzung mit der neuen Modellierung deutlich früher, was den experimentellen Daten näherkommt, obgleich die Phase der Wiederbenetzung immer noch überschätzt wird.



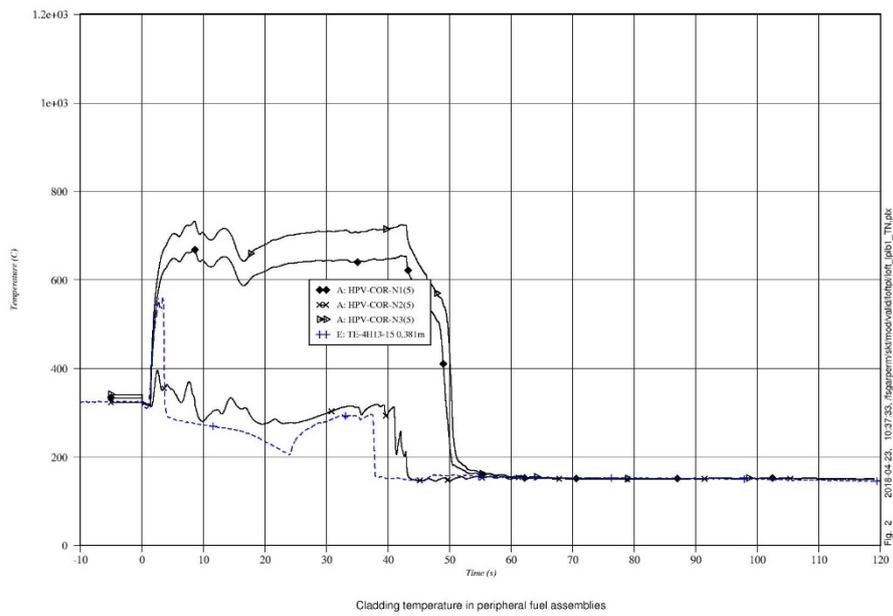
**Abb. 2.45** Hüllrohr-Temperatur, zentrales Bündel. Level 11; ATHLET 3.1A



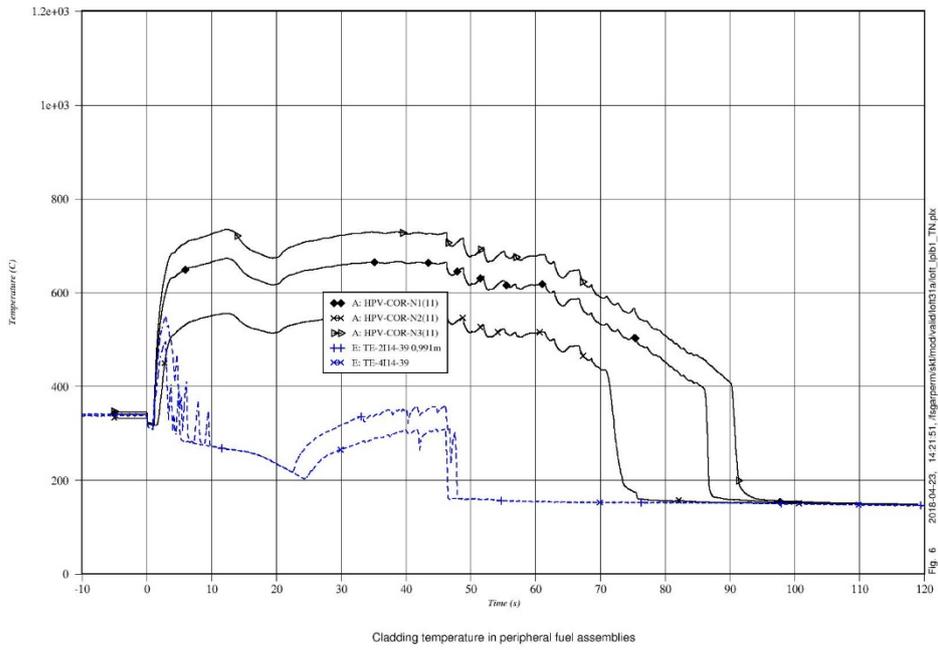
**Abb. 2.46** Hüllrohr-Temperatur, zentrales Bündel. Level 11; ATHLET neue Version



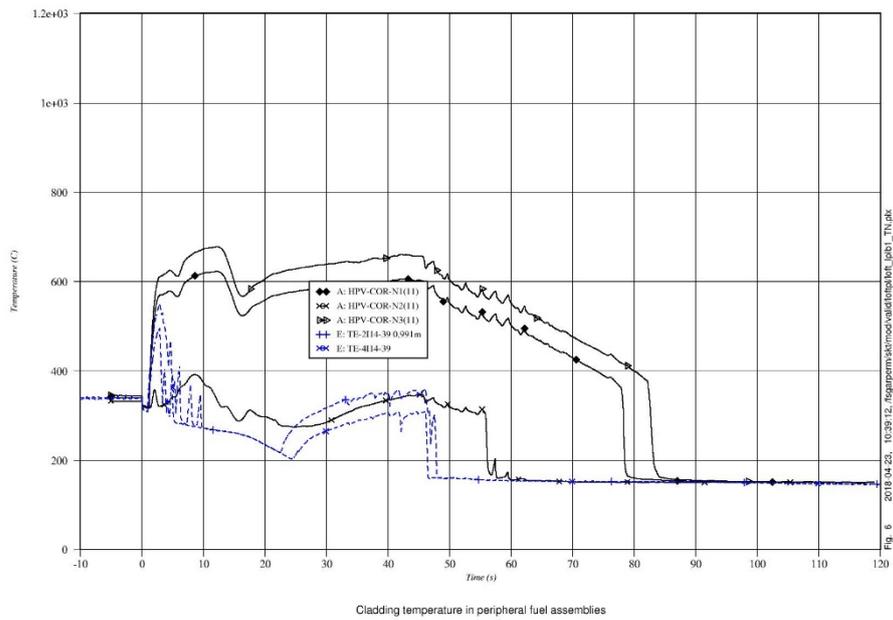
**Abb. 2.47** Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 5; ATHLET 3.1A



**Abb. 2.48** Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 5; ATHLET neue Version



**Abb. 2.49** Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 11; ATHLET 3.1A



**Abb. 2.50** Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 11; ATHLET neue Version

### **2.3.2 Modellierung des Massen- und Energieaustauschs zwischen den Phasen**

ATHLET verfügt über eine sehr umfangreiche Modellierung zur Berechnung der Verdampfungs- und Kondensationsraten an der Zwischenphasengrenze. Im Rahmen des Refactoring-Prozesses wurde der entsprechende Programmteil verbessert (siehe Kapitel 4.1.3). Ein Aspekt betraf hierbei die Integration neuer, aktueller Modelle sowie die Überarbeitung der Methoden zur Bestimmung der Wärmeübergangskoeffizienten /LAF16/. Es wurde eine neue Korrelation von Goudar implementiert, die die Methode von Martinelli-Nelson zur Berechnung der Druckverluste verwendet /GOU08/. Darüber hinaus wurde die Bestimmung der Wärmeübergangskoeffizienten entsprechend der "Surface Renewal Theory" von Hobbhahn /HOB96/ umgestellt und mit der Methode der Filmpenetrationstheorie von Toor-Marchello gekoppelt. Der Grenzwert des Übergangs zur Korrelation der Filmpenetrationstheorie wurde aus numerischen Gründen leicht angepasst und die in der Hobbhahn-Methode verwendete Konstante wurde nach Literaturrecherche leicht erhöht /LAF16/.

Die vorgenommenen Modellmodifikationen wurden anhand verschiedener Versuchsnachrechnungen validiert. Unter anderem wurden hierfür Experimente aus den Anlagen HDR, ISB, LOFT, ROSA und ROCOM herangezogen /LAF16/. Nach der Überarbeitung der Bestimmung der Wärmeübergangskoeffizienten sollte zukünftig eine ähnliche Untersuchung mit Blick auf die Bestimmung der Dissipationsrate durchgeführt werden. Außerdem könnte man die angewendeten Korrelationen je nach Strömungsform anpassen, da die Information zur Zwischenphasenfläche schon vorhanden ist. Dabei wäre zu prüfen, ob die Korrelationen und Grenzwerte für eine spezifische Strömungsform gültig und hinreichend genau sind.

### **2.3.3 Verbesserte Modellierung der kritischen Ausströmung**

In ATHLET wird für die Simulation von postulierten Kühlmittelverluststörfällen das Modell CDR1D zur Berechnung der kritischen Ausströmraten verwendet. Die Bestimmung der Ausströmraten ist wesentlich für die realistische Abbildung des Störfallablaufs, allerdings auch 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. Da sich auch im Rahmen von Unsicherheitsanalysen gezeigt hat, dass das

kritische Ausströmmodell häufig einen wesentlichen Anteil zur Gesamtunsicherheit des Rechenergebnisses beiträgt, wurde das Modell weiter ertüchtigt.

Bisher hatte das CDR1D-Modell zwar ein thermisches Ungleichgewicht zwischen den beiden Phasen simuliert, es wurde jedoch ein dynamisches Gleichgewicht unterstellt. Damit wird vorausgesetzt, dass zwischen beiden Phasen eine ausgeprägte mechanische Kopplung besteht, die einer Relativbewegung entgegenwirkt. Es wurde nun ein neues, erweitertes Gleichungssystem abgeleitet und in ATHLET implementiert, welches auch eine Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen berücksichtigt. Die Validierung des neuen Modells lieferte zufriedenstellende Ergebnisse. Hinsichtlich der untersuchten Moby-Dick-Versuchsreihe konnte im Vergleich zum alten Modell eine bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment nachgewiesen werden. Im Zuge der Untersuchung konnten außerdem die beiden semi-empirischen Parameter für die Blasen- und Tropfenanzahl angepasst werden. Hierbei wird das Ziel verfolgt, mit diesen beiden ATHLET-internen Parametern den vom Anwender in den Eingabedaten des kritischen Ausströmmodells vorzugebenden Parameter CTURB zu ersetzen, welcher eine erhöhte Verdampfungsrate durch erhöhte zweiphasige Turbulenz modelliert.

#### **2.3.4 Bewertung eines Mehrfeldermodells zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene**

Für Sicherheitsanalysen von Kernkraftwerken werden international Rechenprogramme entwickelt, die das Verhalten des Gesamtsystems möglichst realistisch abbilden sollen. Diese sogenannten Systemcodes werden u. a. in Deutschland (ATHLET), Finnland (APROS), Frankreich (CATHARE), Korea (MARS) Russland (KORSAR) und den USA (TRACE, RELAP5-3D) entwickelt. Die Leistungsfähigkeit der Codes wird im Rahmen des jeweiligen Validierungsprozesses demonstriert. Die Simulation von Ein- und Zweiphasenströmungen basiert in der Regel auf einem 1D-Zwei-Fluid-Modell mit phasen-separierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Ergänzt wird das Modell durch zusätzliche Bilanzgleichungen zur Simulation der Konzentration und des Transportes von Borsäure und anderen Komponenten, wie z. B. Wasserstoff oder Stickstoff. Wenige Programme bieten zusätzlich ein Wasserspiegelmodell an, das die Simulation einer scharfen Phasengrenze von Flüssigkeit und Dampf bzw. Gas erlaubt. Die Austauschterme zwischen den Fluidphasen und die Wechselwirkung von Fluid und Struktur werden durch mechanistische und empirische Schließungsgleichungen für Reibung, Massen- und Wärmetransfer beschrieben. Es ist internationaler Konsens,

dass die heutzutage eingesetzten Systemcodes mit dem klassischen Zwei-Fluid-Modell an die Grenzen ihrer Simulationsfähigkeit gestoßen sind. Eine signifikante Verbesserung der Simulationsfähigkeit der Programme ist nur durch den Einsatz zusätzlicher Erhaltungsgleichungen – z. B. für die Zwischenphasenflächendichte, Turbulenzmodellierung oder Mehrfeldersimulation – zu erwarten: “The intrinsic limitations of the two-fluid 6-equation model were reached in this generation of system code. Further progress would require additional equations, such as transport equations for interfacial area or for turbulent scales, or a multifield modelling. These were the conclusions of several OECD-CSNI specialist meetings. Use of more advanced modelling for reducing the degree of empiricism: multifield models, turbulence modelling and dynamic interfacial area are the main directions for improving the predictive capability of the codes” /BES 08/.

Anwendungsfälle mit Relevanz für die Reaktorsicherheitsbewertung, für welche bereits gezeigt wurde bzw. zu erwarten ist, dass der Einsatz eines Mehrfeldermodells die Simulationsfähigkeit eines Systemcodes deutlich verbessert, sind z. B. Dryout, Top-Down-Quenching oder der Reflux-Condenser-Mode. Diese Phänomene treten vor allem nach einem Kühlmittelverluststörfall auf. Vor diesem Hintergrund wurden im Rahmen einer Machbarkeitsstudie die Aussichten einer Implementierung eines Mehrfeldermodells, etwa eines 3-Feldermodells, in ATHLET analysiert. Die vollständige Bewertung ist im Anhang A dieses Dokuments zu finden. Folgende Aspekte einer Implementierung eines Mehrfeldermodells im Systemcode ATHLET wurden im Rahmen der Machbarkeitsstudie betrachtet:

- Die Untersuchung des aktuellen Standes der Technik in anderen System- und Subchannel-Codes hat gezeigt, dass ein realer Bedarf an weiteren Feldern zur Modellierung komplexer Strömungsformen und Wärmeübergängen besteht. Für verschiedene der untersuchten Codes werden unabhängig voneinander Mehrfeldermodelle entwickelt, wobei die Aufteilungen der Phasen in verschiedene Felder je nach Anwendungsgebiet voneinander abweichen. Für ATHLET wird aufgrund des geplanten Modelleinsatzgebiets insbesondere für Strömungsvorgänge im Reaktor-druckbehälter zunächst die Implementierung eines 3-Feldermodells mit separater Behandlung von dispersem Liquid in der Gasphase (Tröpfchen) als dringend erachtet.
- Ein erster Entwurf der Erhaltungsgleichungen für ein 3-Feldermodell wurde mit detaillierter Beschreibung aller Terme erarbeitet.

- Eine Literaturstudie zu den benötigten Schließungsgleichungen und deren Strömungsformabhängigkeit wurde erfolgreich durchgeführt. Für den Einsatz in ATHLET ist geplant, dass diese Schließungsgleichungen zunächst optional vom Benutzer je nach Bedarf ausgewählt werden können, sodass alle physikalischen Effekte und Wechselwirkungen zwischen den Feldern abgedeckt werden.
- Es besteht die Absicht, im Zuge der Implementierung eines dritten Feldes in ATHLET den Code so anzupassen, dass zukünftig ggf. weitere Felder ohne großen Aufwand hinzugefügt werden können, wenn der internationale Kenntnisstand hinreichend präzise Schließungsgleichungen zu deren Modellierung liefert.
- Wissenschaftliche Motivation und besondere Herausforderungen bei der Implementierung eines Mehrfeldermodells wurden analysiert. Aufgrund der Vielfalt an Modellen, die durch Einbau eines dritten Feldes betroffen wären, wird ein erheblicher Aufwand bei der Umstrukturierung des Quellcodes sowie bei der Anpassung der Grundgleichungen erwartet.
- Möglichkeiten der Modellvalidierung wurden ebenfalls untersucht.

Die Umsetzung eines Drei-Felder-Modells in ATHLET ist für das geplante Nachfolgevorhaben beabsichtigt.

## **2.4 Erweiterung des Bortransportmodells**

Um den Transport von Borsäure oder Zinkborat innerhalb des Reaktorkühlkreislaufs mit ATHLET simulieren zu können, verfügt ATHLET über ein Bortransportmodell. Das Modell ist mit dem Neutronenkinetikmodul von ATHLET gekoppelt, um die Rückwirkung des Bors auf die Reaktorphysik berücksichtigen zu können. Optional besteht für den Anwender die Möglichkeit, den Vorgang der Ablagerung (Clogging durch Zinkboratablagerungen im Reaktorkern) und des Wiederlösens zu simulieren. Hierfür sind temperaturabhängige Löslichkeitskurven in ATHLET enthalten.

Das Bortransportmodell wurde nun erweitert, um neben den implementierten Kurven zur maximalen Löslichkeit von Borsäure und Zinkborat auch eigene Tabellen einlesen zu können. Damit kann der Anwender den Transport und die Ablagerung eines beliebigen in Wasser gelösten „inerten“ Stoffes simulieren. Ein Beispiel ist die Simulation von Natrium-Pentaborat, das als Neutronengift in SWR Anwendung findet.

Diese Anforderung konnte durch die Modellerweiterung im Rahmen einer Anlagenrechnung erfolgreich berücksichtigt werden.

## **2.5 Neues Arbeitsmedium überkritisches CO<sub>2</sub>**

Zur Steigerung der Sicherheit von LWRs wird die Nachrüstung bestehender Anlagen mit autarken Systemen zur Nachwärmeabfuhr untersucht. Vom IKE Stuttgart wurde ein passives Wärmeabfuhrsystem vorgeschlagen, das einen geschlossenen Joule-Kreisprozess darstellt und überkritisches CO<sub>2</sub> als Arbeitsmedium nutzt. Deshalb wurde GRS-extern im Rahmen einer Dissertation ATHLET für die Simulation von überkritischem CO<sub>2</sub> erweitert /VEN 15/. Die Programmerweiterung umfasst die Ansteuerung des neuen Arbeitsmediums, die Berechnung der Stoffwerte sowie die Implementierung einer geeigneten Wärmeübergangskorrelation. Die dafür geänderten Programmteile, die auf der ATHLET-Version 2.2C basierten, wurden der GRS zur Verfügung gestellt. Diese wurden in die aktuelle ATHLET-Version unter Berücksichtigung der Programmstandards (u.a. Anpassung an den Fortran90 Sprachstandard) integriert. Ebenso wurde die ATHLET-Programmdokumentation entsprechend ergänzt.

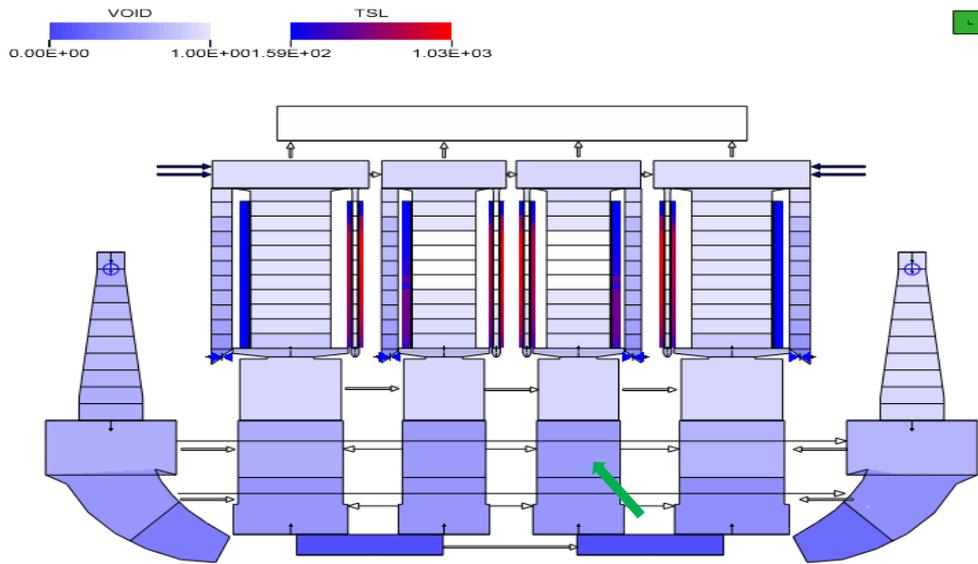
## **2.6 Weitere Verbesserungen der thermohydraulischen Modellierung**

Die Anwendung von ATHLET und die dabei gewonnenen Erfahrungen und Erkenntnissen waren Anlass für weitere Verbesserungen und Erweiterungen der thermohydraulischen Modelle. Diese werden im Folgenden beschrieben.

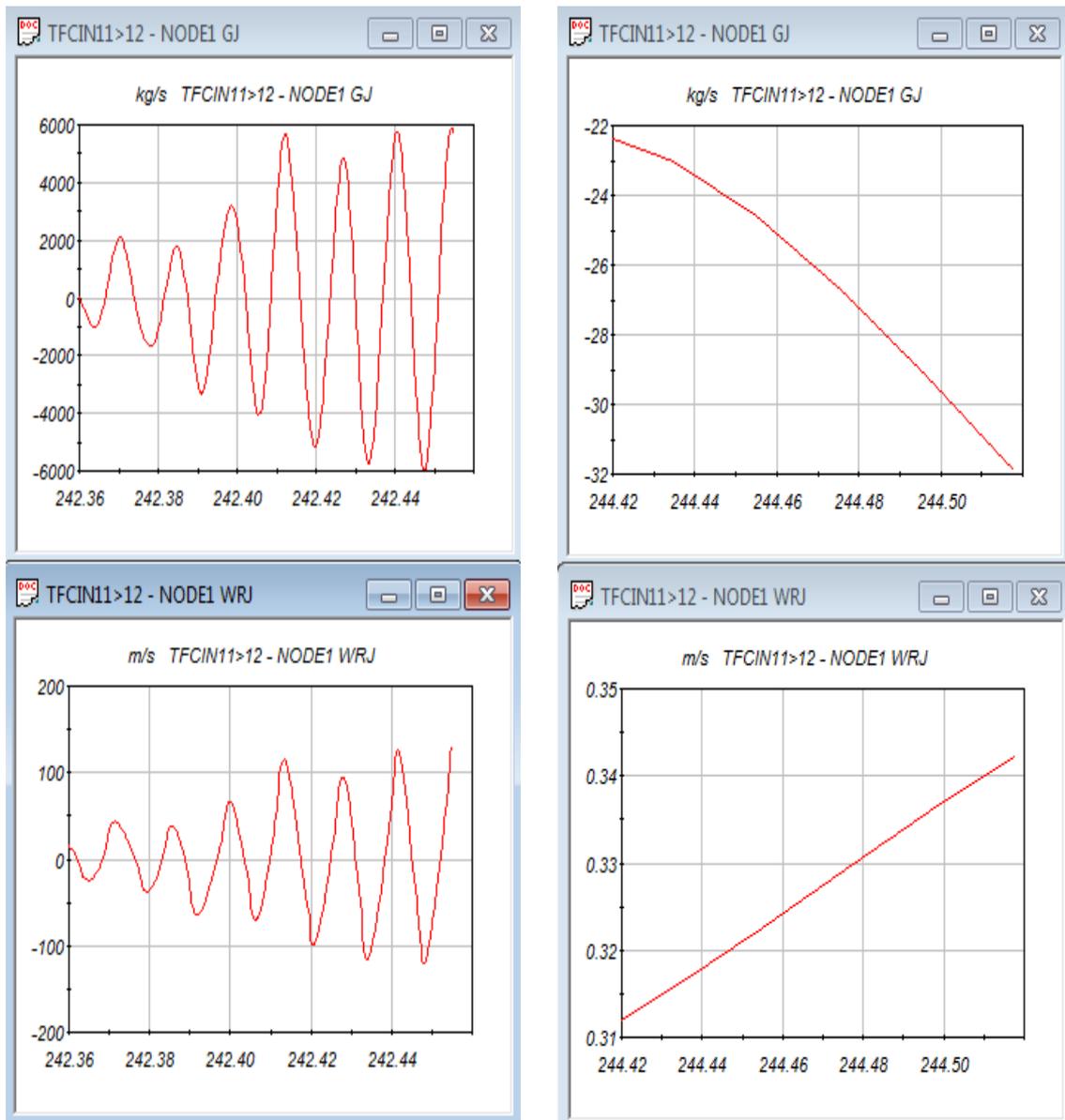
### **Dämpfung des Neigungswinkels für das Driftmodell in horizontalen Leitungen**

Bei der Simulation eines KMV-Störfalls in einem SWR (Abb. 2.51) wurden starke Oszillationen der Massenströme im teilentleerten Unteren Plenum beobachtet (Abb. 2.52, l. o.). Als Ursache konnte das Driftflux-Modell für horizontale Strömungen ausgemacht werden (s. Relativgeschwindigkeit in Abb. 2.52, l. u.). Das Modell berechnet unter bestimmten Bedingungen (geführte Strömung in einer horizontalen Rohrleitung) aus den beiden benachbarten Volumendampfgehalten jeweils einen Füllstand und daraus einen Neigungswinkel, der die Phasengeschwindigkeiten stark beeinflussen kann. Da das Driftflux-Modell ein quasi-stationäres Modell ist, das ihm beigestellte Entrainment-Modell aus Stabilitätsgründen über eine Zeitkonstante gedämpft wird, können sich bei schnellen Vorgängen hohe Relativgeschwindigkeiten ergeben. Das Problem wurde

dadurch gelöst, dass der Neigungswinkel nun auch über eine Zeitkonstante gedämpft wird. Damit konnten die Oszillationen verhindert werden (Abb. 2.52, rechts).



**Abb. 2.51** Dampfgehaltsverteilung im RDB, grüner Pfeil: Leitung mit Oszillationen



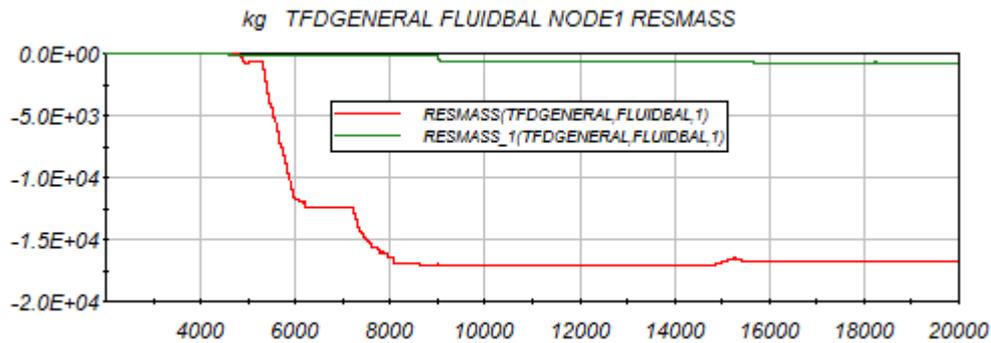
Vorher

Nachher

**Abb. 2.52** Massenstrom GJ und Relativgeschwindigkeit WRJ in der in Abb. 2.51 mit grünem Pfeil markierten Junction

### Massenfehler im DH-Abblasetank

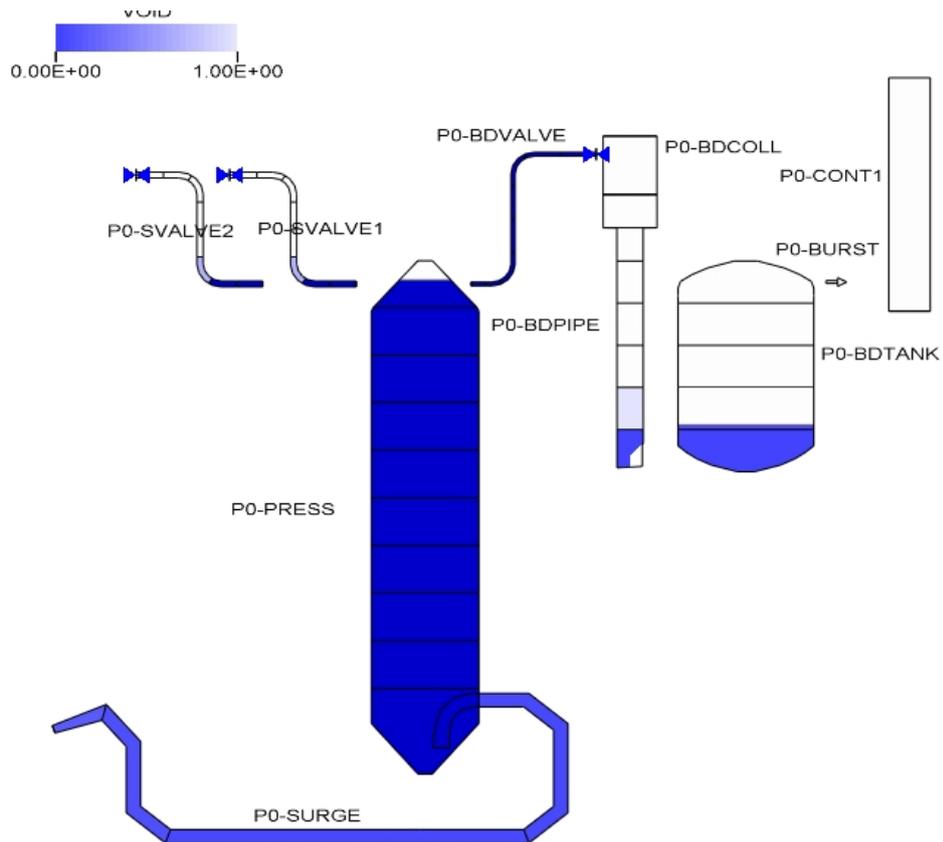
Eine von HZDR mit ATHLET-CD 3.1A durchgeführte Simulation eines Station Black-outs in einer generischen Konvoi-Anlage zeigte hohe Massenfehler im Primärkreis. Untersuchungen seitens HZDR wiesen darauf hin, dass dieser vermutlich von der Modellierung des Druckhalterabblasetanks verursacht wird. Bei Simulationen ohne Modellierung dieser Anlagenkomponente war der Fehler deutlich kleiner (Abb. 2.53).



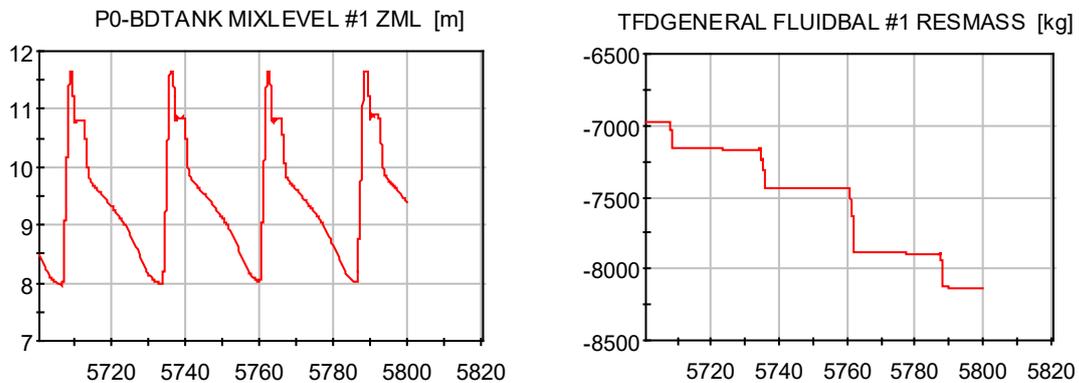
**Abb. 2.53** Von HZDR übermittelter Massenfehler: rot: mit Abblasetank; grün: ohne

Das Inputdeck wurde GRS zur Verfügung gestellt. Rechnungen mit der aktuellen ATHLET-CD Entwicklerversion führten zu einem ähnlichen Ergebnis.

Die Störfallphase mit dem großen Massenfehler ist gekennzeichnet von Abblasevorgängen im Druckhalter, die besonders heftig sind, da dieser unter hohem Druck steht (ca. 165 bar) und bereits vollständig bis hin zum Abblaseventil mit heißem Wasser (ca. 340 °C) gefüllt ist (Abb. 2.54). Bei jedem Öffnen des Abblaseventils strömt eine große Menge Kühlmittel in das unter Umgebungsdruck stehende Abblasesystem, wo ein großer Anteil sofort verdampft. Der Dampf strömt mit hoher Geschwindigkeit durch das Tauchrohr des Abblasebehälters in die Wasservorlage und schiebt den Gemischspiegel (ML) sehr schnell bis zu der bereits gebrochenen Berstscheibe (P0-BURST) nach oben (Abb. 2.55, links). Dabei wandert der ML durch mehrere Kontrollvolumen (KV) des Abblasebehälters. Nach dem Schließen des Abblaseventils kollabiert das Gemisch im Abblasebehälter und der ML fällt wieder.



**Abb. 2.54** DH Zustand zwischen zwei Abblasezyklen



**Abb. 2.55** Gemischspiegelverlauf im Abblasetank (links) und Massenfehler bei mehreren Abblasezyklen vor der Modellverbesserung

Rechts in Abb. 2.55 ist der von ATHLET berechnete Massenfehler dargestellt. Bei jedem der heftigen Anstiege des ML kommt es demnach zu einem Massenfehler von mehreren 100 kg. Löst man die Rechenergebnisse über die Problemzeit fein auf, ergibt sich folgendes Bild:

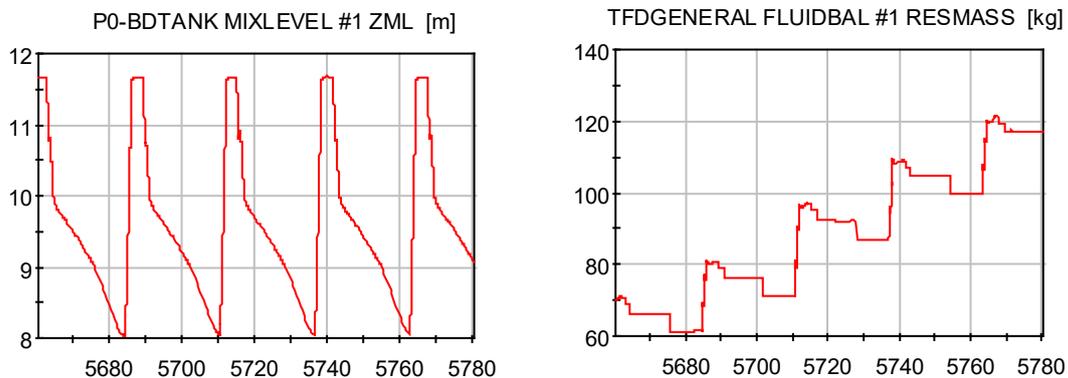
Die Massenfehler treten immer unmittelbar nach dem Umsetzen des ML in das nächst höher liegende KV auf. Beim Umsetzen eines ML werden die Zustände in den neu erzeugten sehr kleinen Teil-KV unterhalb bzw. oberhalb des ML sowie die Massenströme in den davon betroffenen Leitungen mit Hilfe eines Newton-Iterationsverfahrens so bestimmt, dass man einen neuen, möglichst konsistenten (quasi-stationären) Zustand erhält. Das gelingt nicht immer zufriedenstellend. Physikalisch haben fehlerbehaftete Lösungen keine große Bedeutung, da die Teil-KV sehr klein sind, numerisch jedoch schon, eben weil sie sehr klein sind. Trotz dieses numerisch fragilen Zustands wurde die Jacobi-Matrix in den der ML-Wanderung folgenden Zeitschritten nicht neu berechnet. Erzwingt man diese Neuberechnungen, wird der Massenfehler deutlich geringer. Da die Steuerung der Neuberechnung der Jacobi-Matrix in dem vorliegenden Fall nicht zuverlässig funktionierte, wird nun für die dem Umsetzen des ML folgenden 10 Zeitschritte die Neuberechnung erzwungen.

Eine der Lösungsvariablen für das ML-KV ist XXML, die Fluidmasse unterhalb des ML geteilt durch die Gesamtmasse im ML KV. Da sich unterhalb des ML in der Regel vor allem Flüssigkeit befindet, stellt die Lösungsvariable eine Art Flüssigkeitsmassengehalt dar. Wie der Dampfmassegehalt auch, gibt diese das Masseninventar eines ML-KV je nach Flüssigkeitsdruck sehr nichtlinear wieder. Deshalb wird zu Beginn eines jeden Zeitschrittes eine aktuelle Fehlerschranke ermittelt, die in etwa einem zulässigen relativen Massenfehler entspricht. Diese variiert über mehrere Größenordnungen und kann bei kleinem XXML und niedrigem Druck (= großes Wasser-Dampf-Dichteverhältnis) Werte von 0.1 oder größer annehmen. Begrenzt man dies Fehlerschranke auf einen Maximalwert, wird der Massenfehler geringer.

In einem ML-KV werden drei Kühlmitteldrücke verwendet: 1. Druck am ML (= Lösungsvariable), 2. Druck im unteren Teil-KV, 3. Druck im oberen Teil-KV; letztere werden zur Bestimmung der dort vorliegenden Fluidstoffwerte herangezogen. Beim Umsetzen des ML müssen diese drei Drücke sowie der Druck in dem KV, das der ML eben verlassen hat, neu berechnet werden. Die bisherige Methode war hinsichtlich der Massenerhaltung nicht ganz konsistent und wurde entsprechend verbessert.

Die durchgeführten Programmänderungen führen dazu, dass der Massenfehler auf ein akzeptables Maß reduziert wird (Abb. 2.56). Auch der Verlauf des Gemischspiegels ist nun deutlich glatter: Trotz des zunächst erhöhten numerischen Aufwands (engere Fehlerschranken, mehr Jacobi-Berechnungen) steigt die Rechengeschwindigkeit an.

(Die Programmänderungen wurden für den Patch 4 der aktuellen Release-Version ATHLET 3.1A übernommen.)



**Abb. 2.56** Gemischspiegelverlauf im Abblasetank (links) und Massenfehler bei mehreren Abblasezyklen nach der Modellverbesserung

### Reduzierung von Druckwellen

Die Simulation von ASTRID (Flüssigmetallgekühlter Pool-Reaktor) wird mit stagnierendem Kühlmittel aber voller Kernleistung gestartet, da die stationäre Massenstromverteilung komplex und nicht genau bekannt ist. Diese stellt sich bereits nach kurzer Einschwingrechnung nach dem sofortigen Start der Kühlmittelpumpen ein. Allerdings sind dabei (heftige) Druckwellen zu Beginn der Rechnung nicht zu vermeiden. Da der KM-Druck nur etwa 2 bar beträgt, können diese Druckwellen dazu führen, dass der Druck lokal gegen Null geht. Die dann einsetzende Verdampfung führt wegen des extrem niedrigen Drucks zu sehr hohen Dampfvolumenströmen, wodurch die Simulation abgebrochen wird.

Beispiel:

$p = 29 \text{ Pa}$ ,  $\Gamma = 0.03 \text{ kg/s}$ , entspricht  $350 \text{ m}^3/\text{s}$

Lösung:

Die Entstehung und Ausbreitung von Druckwellen kann durch starke Reduktion des Trägheitsterms der Junctions verhindert oder wenigstens deutlich reduziert werden. Deshalb wird nun dem Anwender die Möglichkeit gegeben, per Eingabe während der „zero-transient“-Rechnung die Trägheitsterme vorübergehend deutlich zu reduzieren. Druckwellen treten dann praktisch nicht mehr auf. Die Berechnung des stationären Zu-

stands wird dadurch nicht beeinträchtigt, da die Trägheitsterme unter stationären Bedingungen keine Bedeutung haben.

### **Startrechnung: Iterativ-algebraische Berechnung der Wärmeströme bei kleinen Durchsätzen**

In der ATHLET-Startrechnung werden die stationären Zustände der TFOs und der HCOs algebraisch und iterativ bestimmt. Sie beginnt mit der Berechnung der Kühlmittelzustände (Druck, Temperatur, etc.) in den TFOs. Damit der erste Iterationsschritt realistische Temperaturen bestimmen kann, sind die sog. relevanten Wärmeströme (Heizung, Wärmetauscher) per Eingabe vorzugeben. Danach wird HECU aufgerufen, das dann anhand der Kühlmitteltemperaturen die Wärmeströme zwischen HCO und TFO sowie die HCO-Temperaturen (neu) berechnet. Anschließend berechnet die TFO-Startrechnung aus den Wärmeströmen neue TFO-Temperaturen usw. Diese Iteration wird solange ausgeführt, bis die Wärmeströme (und weitere TF-Zustände) vorgegebene Konvergenzkriterien erfüllen, maximal jedoch 15-mal.

Bei sehr kleinen KM-Durchsätzen führen bereits kleine Wärmeströme zu deutlichen örtlichen Temperaturänderungen. Diese hängen unter stationären Bedingungen ausschließlich vom Durchsatz (und  $c_p$ ) ab, nicht von der KM-Masse. Da die HECU-Startrechnung die Wärmeströme nur aus den aktuellen Temperaturdifferenzen zwischen dem linken und rechten TFO berechnet, ohne die Auswirkung auf die KM-Temperaturen zu berücksichtigen, können diese überschießen und die Iteration läuft dann völlig aus dem Ruder.

Beispiele:

Schwerwassermoderierte DWR-Anlage: Aufheizung der sehr langsam durchströmten Moderator tanks durch Wärmeleitung in den Wänden der Druckröhren

SWR: Aufheizung des sehr kalt eingespeisten Wassers der Steuerstabspülung durch Wärmeleitung in Rohrwänden zwischen stark durchströmtem heißen KM und sehr gering durchströmtem kaltem Spülwasser

Weichen die KM-Temperaturen stark vom stationären Zustand ab, muss eine sehr lange Einschwingrechnung folgen, wenn der Durchsatz im Vergleich zum KM-Inventar sehr klein ist.

Bisheriges Vorgehen für die Startrechnung:

- Ohne Massenstrom starten, sodass man die stationäre Temperaturverteilung vorgeben kann;
- Heat exchanger Modell verwenden, sodass man die stationäre Leistungsverteilung vorgeben kann;

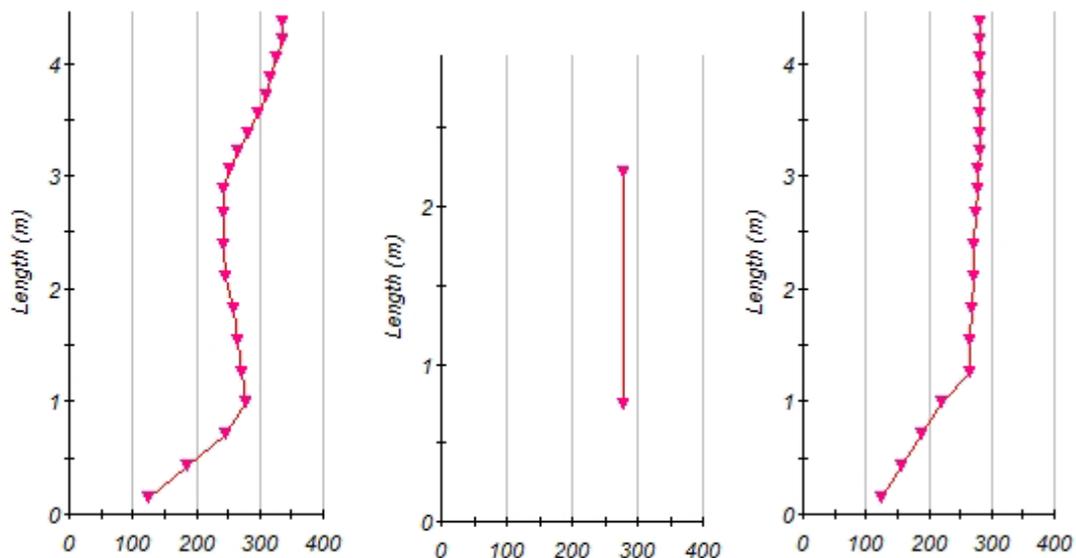
Beides ist umständlich, weder Temperatur- noch Leistungsverteilung sind bekannt.

Programmverbesserung:

Für die Berechnung der Wärmeströme in der HECU-Startrechnung wird nun die Auswirkung auf die KM-Temperaturen abgeschätzt. Es wird berechnet, wie sich ein im Vergleich zum letzten Iterationsschritt veränderter Wärmestrom auf die KM-Temperatur auswirkt. Wenn notwendig, wird der Wärmestromzuwachs (im Vergleich zum letzten Iterationsschritt) begrenzt.

Diese Methode bleibt aber „unsicher“, da jeweils nur ein HCV berechnet wird und die „Vorgeschichte“, also die stromaufwärts liegenden HCVs und deren Wärmeströme zu den KVs, nicht bekannt sind.

Beispiel: Steuerstabspülung in einem SWR-Modell:



**Abb. 2.57** Räumliche KM-Temperaturverteilungen vor (links) und nach (rechts) der Modellverbesserung

Die mittlere Grafik in Abb. 2.57 zeigt die Verteilung der Reaktor-Kühlmitteltemperatur im Unteren Plenum, die konstant bei etwa 280 °C liegt. Links wird die bisher berechnete Verteilung der Spülwassertemperatur am Ende der Startrechnung dargestellt. Sie übersteigt deutlich die eigentlich heißere Kühlmitteltemperatur. Die mit dem verbesserten Verfahren berechnete Spülwassertemperatur, die zumindest einen plausiblen Verlauf hat, ist im rechten Bild zu sehen. (Die unterschiedlichen Längen der TFOs sind nodalisierungsbefehlt; sie haben auf die Aussage der Bilder keinen Einfluss.)

### **Weitere Änderungen der thermohydraulischen Programme, die die Aussage-sicherheit oder Zuverlässigkeit von ATHLET verbessern:**

- Begrenzung der Relativgeschwindigkeit  $< 100$  m/s. Diese war notwendig, weil das Driftmodell sich auf das Entrainmentmodell verlässt und u. U. zunächst sehr hohe Relativgeschwindigkeiten berechnet, das Entrainmentmodell aber wegen der darin verwendeten Dämpfungsmethode (time lag) nicht schnell genug eingreift. Da die hohen Relativgeschwindigkeiten nur bei sehr hohen Dampfgehalten auftraten, war dies physikalisch unbedeutend, konnte aber zu numerischen Problemen führen.
- Bei der Berechnung der Zwischenphasenreibung des 6-Gleichungsmodells werden Mittelwerte der Zustände der angrenzenden KVs verwendet. Das kann bei vertikaler Strömung zur Bildung eines „checker boards“ führen, also einer Folge von KVs mit abwechselnd hohen und niedrigen Dampfgehalten. Durch separate Berechnung der ZP-Reibung für die beiden Halbleitungen unter Verwendung der jeweiligen lokalen Dampfgehalte konnte dieser Effekt deutlich reduziert werden.
- Die Berechnung des „Momentum Flux Terms“ der Impulsgleichung wurde überarbeitet. Das bisherige Upwind-Verfahren wurde ersetzt durch die geeignete Summenbildung der Beiträge links und rechts (also stromaufwärts und stromabwärts) der Leitung. Damit werden aufeinander zuströmende Massenströme besser modelliert. Anlass waren unrealistische Strömungsverteilungen in den Steuerstabführungsrohren eines DWR in ATHLET 3D-Simulationsmodellen.
- Ventilmodell: Die Anforderung eines (Teil-) Updates der Jacobi-Matrix bei sich ändernder Ventilfläche war lückenhaft, sodass das Update u. U. später als vorgesehen kommen konnte. Der Programmteil wurde korrigiert.

- Modell für kritische Strömung CDR1D: In ATHLET werden zu Beginn einer Simulation die Felder mit kritischen Massenstromdichten nur dann neu berechnet, wenn der Anwender Änderungen in den entsprechenden Eingabedaten vorgenommen hat. Die zu diesem Zweck durchgeführten Kontrollen haben nicht alle möglichen Kombinationen von eigenen Eingabedaten und bereitgestellten Default-Werten richtig berücksichtigt, sodass einerseits unnötigerweise die Neuberechnung initiiert, andererseits erforderliche Aktualisierungen unterlassen wurden. Der Fehler wurde beseitigt. Neue Tabellen werden nun automatisch erzeugt, wenn dies wegen geänderter Eingabedaten für das CDR1D-Modell (Geometrie, Gültigkeitsbereich, etc.) notwendig ist, wenn sich die CDR1D-Programmversion geändert hat oder wenn der Compiler gewechselt wurde. Zu diesem Zweck werden entsprechende Informationen mit abgelegt.
- Modell für kritische Strömung CDR1D: Falls Formverlustbeiwerte im Strömungskanal erfasst werden sollen, wird die CDR1D-Domain nicht mehr wie bisher verlängert, sondern der Formverlust unmittelbar vor dem Ort der kritischen Strömung berechnet. Die Verlängerung der CDR1D-Domain konnte größeren Einfluss auf die Ergebnisse haben als der Formverlust selbst.
- Die Berechnung des höhenkorrigierten Drucks als GCSM Prozesssignal war für nach unten gerichtete Branch-Objekte fehlerhaft und wurde korrigiert.
- OMP: Einige serielle und parallele ATHLET-Simulationen führten zu (numerisch) unterschiedlichen Ergebnissen, was von der Programmierung her nicht zu erwarten ist und die Fehlersuche erschwert. Es wurden zwei Ursachen ausgemacht:
  - 1.) Der Intel-Compiler (V16) optimiert für serielles und paralleles Programm unterschiedlich. Die Potenz 0.5 wird als ‚pow‘ oder als ‚sqrt‘ ausgeführt. Die damit verbundenen winzigen Unterschiede führen im Verlauf einer Simulation sogar zu unterschiedlichen Zeitschrittweiten. In den entsprechenden Programmteilen wurden die Potenzen 0.5 durch sqrt ersetzt. Ebenso wurden negative Potenzen als Divisionen geschrieben.
  - 2.) T-Junctions (Abzweige) müssen in der Abarbeitungsreihenfolge der Funktionsroutine sicher erst nach dem Main Pipe ausgeführt werden. Dies war für normale T-Junctions bereits sichergestellt, nicht jedoch für T-Junctions, die gleichzeitig „Discharges“ sind. Die Funktionsroutine wurde entsprechend umstrukturiert.

## 2.7 Neutronenkinetik und thermo-strukturelle Modellierung des Reaktorkerns

### 2.7.1 Erweiterung des Wärmestrahlungsmodells

Insbesondere bei Hochtemperaturreaktoren spielt die Wärmestrahlung des RDB an die Umgebung eine sicherheitsrelevante Rolle. Die Rückstrahlung der Umgebung auf den RDB ist demgegenüber vernachlässigbar. Um überhaupt eine Umgebung als Strahlungswärmesenke simulieren zu können, musste sich der Benutzer bisher ein sehr umständliches Konstrukt aus Hilfs-Thermofluid- und Wärmeleitungsobjekten überlegen. Um die Modellerstellung mit ATHLET zu vereinfachen, wurde das vorhandene Wärmestrahlungsmodell, welches ausschließlich den Strahlungswärmeaustausch zwischen verschiedenen Wärmeleitobjekten (HCOs) berücksichtigte (vgl. /GRS 15/), um ein Modell zur Berechnung der Wärmestrahlungsverluste an die Umgebung erweitert.

Das Modell beruht auf der allgemeinen Gleichung zur Beschreibung des Strahlungswärmeaustausches zwischen zwei Körpern

$$\dot{Q}_{surf \leftrightarrow env} = \frac{\sigma \cdot (T_{surf}^4 - T_{env}^4)}{\frac{1 - \varepsilon_{surf}}{A_{surf} \cdot \varepsilon_{surf}} + \frac{1}{A_{surf} \cdot \phi_{surf \rightarrow env}} + \frac{1 - \varepsilon_{surf}}{A_{env} \cdot \varepsilon_{env}}} \quad (2.17)$$

welche sich unter der Annahme, dass die Umgebung deutlich größer als das betroffene HCO ist ( $A_{env} \gg A_{surf}$ , der Index *env* steht für die Umgebung, *surf* für die Oberfläche des HCOs), zu

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{surf \leftrightarrow env} &= \sigma \cdot A_{surf} \cdot \varepsilon_{surf} \cdot (T_{surf}^4 - T_{env}^4) \\ &\cdot \frac{1}{1 + \varepsilon_{surf} \cdot \left( \frac{1}{\phi_{surf \rightarrow env}} - 1 \right)} \end{aligned} \quad (2.18)$$

vereinfacht.  $\sigma$  ist die Stefan-Boltzmann-Konstante,  $\varepsilon_{surf}$  der Emissionsgrad der HCO-Oberfläche und  $\phi_{surf \rightarrow env}$  der Sichtfaktor der Oberfläche auf die Umgebung

( $\phi_{surf \rightarrow env} = 1$  für konvexe Flächen).  $T_{surf}$  und  $T_{env}$  (jeweils in Kelvin) bezeichnen die Temperaturen der HCO-Oberfläche bzw. der Umgebung. Die Umgebung wird als grauer Körper betrachtet.

Um das Modell anzuwenden, muss der Benutzer ein neues Keyword „ENVIRON“ einlesen und das HCO, welches im Strahlungswärmeaustausch mit der Umgebung steht, als Pseudokeyword vorgeben (siehe Abb. 2.58). Ferner muss die am Wärmeaustausch beteiligte Oberfläche des HCOs (rechts oder links) sowie deren Emissionsgrad und der Sichtfaktor spezifiziert werden. Die Temperatur der Umgebung kann sowohl durch ein Thermofluidobjekt als auch durch ein GCSM-Signal als zeitabhängige Randbedingung vorgegeben werden.

Ein Nebeneffekt der Erweiterung des Wärmestrahlungsmodells ist die Notwendigkeit, nun auch für die Nutzung der bereits vorhandenen Funktionalität (Berechnung des Strahlungswärmeaustausches zwischen verschiedenen HCOs) ein zusätzliches Keyword „TFO“ einzulesen. Das bedeutet, dass ältere Datensätze, in welchen das Wärmestrahlungsmodell angesprochen wird, geringfügig modifiziert werden müssen, um mit der aktuellen ATHLET-Version lauffähig zu sein.

In Abb. 2.58 ist ein Beispiel für die Benutzereingabe zum Aktivieren des Wärmestrahlungsmodells gegeben. Unter dem Keyword „TFO“ wird eine Strahlungsgruppe „CHAN00“ von HCOs definiert. Innerhalb der Gruppe findet Wärmeübertragung durch Strahlung zwischen allen beteiligten HCOs statt. Dies entspricht dem bisher bereits verfügbaren Wärmestrahlungsmodell. Die Benutzereingabe ist im Detail z. B. in /GRS 15/ beschrieben.

Unter dem Keyword „ENVIRON“ ist das HCO „HCO\_04“ als Pseudokeyword aufgeführt; dieses HCO steht also im Strahlungswärmeaustausch mit der Umgebung. Die der Umgebung zugewandte Fläche des HCOs befindet sich auf dessen rechter Seite ('RIGHT'), ihr Emissionsgrad beträgt 80 % und der Sichtfaktor ist 1.0.

In Abb. 2.59 ist die zugehörige Benutzereingabe für das Controlword „HEATCOND“ dargestellt. Die Temperatur auf der rechten Seite des HCOs „HCO\_04“ ist in diesem Fall durch ein GCSM-Signal mit der beliebigen Bezeichnung „TENVIIRON“ vorgegeben.

```

C----- RADIATION
@
K----- TFO
@  NRADGR
   1
@
@-----
----- CHAN00
@  IRDGEO  NBOD
   0       2
@  VOID    TWALL
   0.1     10.0
@  SGRB    SGRE
   7.0     9.5
@  ANAMRD          EPSRAD
   'HCO_01'      0.85
   'HCO_02'      0.85
@  VIEW_11 VIEW_12 VIEW_13 VIEW_14 VIEW_15 VIEW_16 VIEW_17
   0.1     0.9     0.0     0.0     0.0     0.0     0.0
@  VIEW_21 VIEW_22 VIEW_23 VIEW_24 VIEW_25 VIEW_26 VIEW_27
   0.6     0.4     0.0     0.0     0.0     0.0     0.0
@  VIEW_31 VIEW_32 VIEW_33 VIEW_34 VIEW_35 VIEW_36 VIEW_37
@  0.4     0.4     0.2     0.0     0.0     0.0     0.0
@
@-----
@
K----- ENVIRON
@
----- HCO_04
@  ASIDE    EPSRAD  VIEW_1E
   'RIGHT'  0.8     1.0
@
@

```

**Abb. 2.58** Controlword „RADIATION“ in der ATHLET-Eingabedatei

```

C----- HEATCOND
@
K----- HCO_04
@ AOLH      SBOLH  SEOLH  AORH      SBORH  SEORH
@ 'ENVIRON'  0.0    9.5    'CHAN02'  0.0    9.5
@ 'CHAN02'   0.0    9.5    'TENVIRON' -1.0   9.5
@
@ NIHC0 N10 N20 N30 IGE00 ICOMP0 ACOMP0      ICHF0 IPRIPL0
@ 1      6  4  0  0      0      'DUMMY'    2      0
@
----- GEOMETRY
@ FPARH  TL0
@ 1.0    0.1
@
COPY_TFO L
@ SG0    Z0      DI0      DS10      GAP10      DS20      GAP20      DS30
@ 0.00   0.0    0.3     0.03     0.0        0.0        0.0        0.0

```

Abb. 2.59 Controlword „HEATCOND“ in der ATHLET-Eingabedatei

## 2.7.2 Modifiziertes Kriterium für das Eintreten von DNB

Ein wichtiger Aspekt der ATHLET-Anwendung ist die Simulation des Wärmeübergangs im Reaktorkern. Von der GRS durchgeführte Analysen haben gezeigt, dass ATHLET unter sehr speziellen Umständen unerwartete Ergebnisse liefern kann. So haben im Rahmen von Unsicherheitsanalysen die variierten Parameter für einzelne Rechnungen derart „ungünstige“ Wertekombinationen angenommen, dass ATHLET das (physikalisch nicht zu erwartende) Überschreiten der kritischen Wärmestromdichte, einmalig sogar innerhalb der Simulation des stationären Anlagenzustands, vorausgesagt hat. Hintergrund ist eine (im Vergleich zum internationalen Stand von W&T) sehr strikte Formulierung des Kriteriums für das Auftreten von DNB (departure of nucleate boiling). Die mit ATHLET erzielten Ergebnisse sind zwar konservativ, mit Blick auf den best-estimate-Charakter des Codes in Zusammenhang mit Unsicherheitsanalysen jedoch nicht zufriedenstellend.

In dem bisherigen ATHLET-Modell wurde der Übergang zum DNB als Oder-Verknüpfung zweier Kriterien bestimmt: In der Simulation wurde geprüft, ob *entweder* die minimale Filmsiedetemperatur  $T_{MFB}$  (Minimum Film Boiling Temperatur) *oder* die auf Basis unterschiedlicher CHF (critical heat flux) Korrelationen berechnete kritische Wärmestromdichte überschritten wird.

Die kritische Heizflächenbelastung ist ein allgemein anerkanntes Kriterium, das den Übergang von Blasensieden zu Filmsieden beschreibt. Demgegenüber basiert die minimale Filmsiedetemperatur in ATHLET auf der Groeneveld-Korrelation /GRO82/, die maßgeblich entwickelt wurde, um den Kollaps der Dampf-Tropfenkühlung, also den Übergang von der Dampf-Tropfenkühlung zurück zum Blasensieden (RNB – return to nucleate boiling), zu berechnen /GRO82/. Es handelt sich hierbei also um kein dediziertes DNB-Kriterium.

Die bisherige Vorgehensweise bei der Berechnung von DNB in ATHLET ist aufgrund der Verwendung beider Kriterien ausgesprochen konservativ. Zwar ist in den meisten ATHLET-Rechnungen das Überschreiten der kritischen Heizflächenbelastung der Grund für die Simulation von DNB. In einigen Fällen war jedoch auch das Kriterium der minimalen Filmsiedetemperatur der Auslöser für DNB. Das passierte insbesondere bei Unsicherheitsanalysen und führte bereits bei den ersten Unsicherheitsanalysen /GLS94/ zu unerwarteten Ergebnissen. Auch eine relativ geringe Variation der minimalen Filmsiedetemperatur konnte zur Überschreitung des ATHLET-DNB-Kriteriums und zum Anstieg der Hüllrohrtemperatur führen, obwohl aus den experimentellen Daten bekannt war, dass kein DNB aufgetreten war.

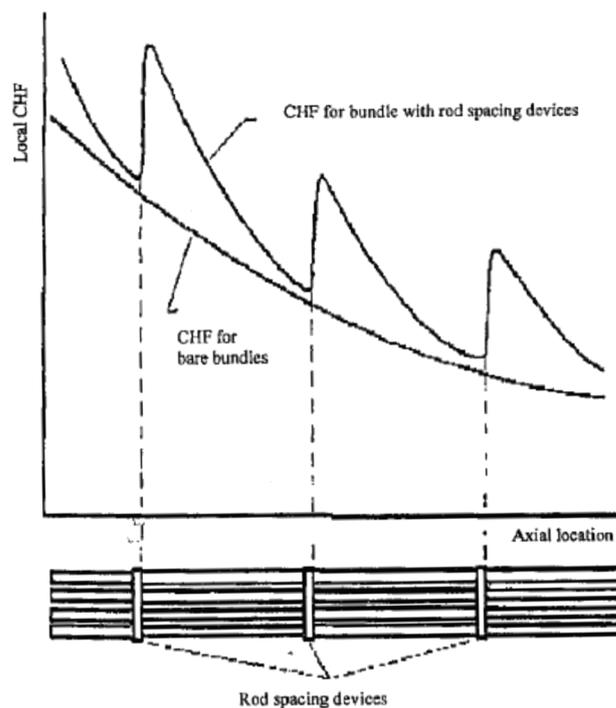
Weiterhin wurden für die CHF-Berechnung in ATHLET aktualisierte und verbesserte Korrelationen implementiert /GRO06/ (siehe auch Kapitel 2.7.3). Auch deshalb besteht keine Notwendigkeit für eine ausgesprochen konservative Vorgehensweise bei der DNB-Berechnung. Daher wurde das Wärmeübergangsmodell nun so geändert, dass das DNB-Kriterium jetzt ausschließlich auf der Berechnung der kritischen Heizflächenbelastung basiert. Die minimale Filmsiedetemperatur wird nur noch für den RNB-Vorgang verwendet, wofür die zugrundeliegende Korrelation auch ursprünglich entwickelt worden war.

Im Rahmen weiterer Analysen hat sich bereits gezeigt, dass die Änderung des DNB-Kriteriums – wie erwartet – zur Verbesserung der Ergebnisse bei Unsicherheitsanalysen führte. Für die meisten Anwendungsrechnungen hat es jedoch keinen Einfluss, da DNB von ATHLET i. d. R. durch Überschreiten der kritischen Heizflächenbelastung identifiziert wird.

### 2.7.3 Berücksichtigung des Einflusses von Abstandshaltern auf den CHF

Um mit ATHLET den Wärmeübergang im Reaktorkern korrekt berechnen zu können, wird die spezielle Bündelgeometrie der Brennelemente mittels eines den Wärmeübergang erhöhenden Bündelfaktors berücksichtigt /INA75/. Von besonderer Bedeutung ist die Vorhersage des Überschreitens der kritischen Heizflächenbelastung. Im Rahmen des Projektes „Entwicklung und Validierung von Rechenmethoden zur Simulation von 2-Phasenströmungen und kritischen Wärmeströmen“ befasste sich ein Arbeitspunkt mit der Verbesserung der Critical Heat Flux (CHF) Modelle in ATHLET. Die von Groeneveld veröffentlichte Look-up-Tabelle (LUT) /GRO06/ ist eine für 8 mm Rohre normalisierte Datenbank, die auf einer Datenbasis von inzwischen mehr als 30.000 Datenpunkten basiert. Hierbei werden die CHF-Werte in Abhängigkeit von den lokalen Werten für Druck, Enthalpiedampfgehalt und Massenstromdichte aus den Tabellenwerten interpoliert. Korrekturfaktoren stehen zur Verfügung, um die Anwendung der LUT für abweichende Rohrdurchmesser, Stabbündel, Abstandshalter, geneigte und horizontale Strömungen und weitere Einflussgrößen zu erweitern /IAE01/.

Die Untersuchung des Einflusses von Abstandshaltern auf die lokale kritische Wärmestromdichte CHF zeigt eine erhebliche Zunahme in unmittelbarer Nähe der Abstandshalter. Diese Zunahme ist primär auf die höhere Turbulenz der Zweiphasenströmung durch die Abstandshalter zurückzuführen und ergibt einen CHF-Verlauf, wie er qualitativ in Abb. 2.60 aufgetragen ist.



**Abb. 2.60** Verlauf von CHF im Bereich von Abstandshaltern /IAE01/

Die in der Literatur angegebenen Faktoren  $K_2$  für Bündelgeometrie sowie  $K_3$  für die Berücksichtigung des Einflusses vom Abstandshaltern im Stabbündel wurden programmiert. Die CHF-Daten aus der LUT von Groeneveld einschließlich der Korrekturfaktoren für Bündelgeometrie und Abstandshalter wurden anhand der Versuchsnachrechnung LOFT-LP-LB1 geprüft.

Hierfür musste ein bestehender Eingabedatensatz zur Berücksichtigung der Abstandshalter erweitert und die Nodalisierung der Thermofluid- und der Wärmeleitobjekte im Kernbereich geändert werden, um spezifische Modellanforderungen zu erfüllen. Obwohl die berechneten Korrekturfaktoren den resultierenden CHF-Wert z. T. signifikant erhöhen, zeigen die Vergleiche mit den Ausgangsrechnungen, dass die Ergebnisse ohne große Änderungen reproduziert werden können. Der aktualisierte und erweiterte Datensatz wurde der Bibliothek von ATHLET-Testfällen hinzugefügt, die im Rahmen der Continuous Integration (siehe Kapitel 4.2.2) regelmäßig automatisiert gerechnet und überprüft werden.

#### 2.7.4 Punktkinetikmodell

Für das ATHLET-Punktkinetikmodell wurde die Option geschaffen, den Reaktorkern in mehrere neutronenphysikalische Bereiche zu unterteilen. In jedem Bereich werden die neutronenphysikalischen Rückwirkungen (Kühlmittel, Doppler, Bor) getrennt gemittelt und in der Leistungsberechnung der zugeordneten Brennstabgruppen mit individuellen Rückwirkungskoeffizienten verarbeitet. Ebenso ist es möglich, verschiedene externe Reaktivitäten vorzugeben. Damit kann beispielsweise das unterschiedliche Verhalten der Spalt- und Brutzone eines Schnellen Reaktors besser erfasst werden. Erste Anwendungen für den ASTRID-Kern im Rahmen einer Benchmark Exercise des EU-Projektes ESNII+ /ESN13/ ergaben gute Übereinstimmung mit den anderen Projektteilnehmern, die teilweise aufwendigere neutronenphysikalische Modelle eingesetzt hatten.

Mittels der beschriebenen Modellerweiterung kann man grundsätzlich auch einen LWR-Kern räumlich durch mehrere Bereiche mit separater Punktkinetik darstellen, vorausgesetzt es stehen geeignete Rückwirkungskoeffizienten von 3D-Neutronenkinetik-Programmen zu Verfügung. (Derartige Simulationen wurden bisher nicht durchgeführt.)

Von externen ATHLET-Anwendern wurde die Anforderung an die ATHLET-Entwickler herangetragen, die Abhängigkeit des Moderator-dichte-Reaktivitätskoeffizienten von der Bormengendichte zu berücksichtigen. Moderator-dichte und Bormenge sind gekoppelt, da z. B. mit abnehmender Kühlmitteldichte (z. B. aufgrund eines steigenden Dampf-volumengehalts) die Bormenge (auch bei gleichbleibender Borkonzentration im Fluid) abnimmt. Dieser Effekt wird üblicherweise durch den Moderator-dichte-Reaktivitätskoeffizienten bei der Bestimmung mittels eines 3D-Neutronenkinetikprogramms implizit berücksichtigt. Optional wurde nun in ATHLET die Möglichkeit geschaffen, diesen Effekt durch einen modifizierten, von der Moderator-dichte abhängigen Reaktivitätskoeffizienten der Borkonzentration zu berücksichtigen.

#### 2.7.5 Weitere Modellverbesserungen

Erkenntnisse aus ATHLET-Anwendungen waren Anlass für weitere Modellverbesserungen:

- **Modell für elektrischen Heizleiter:** Dieses Modell ist – wie einige andere auch – hinsichtlich des stationären Zustandes überbestimmt (Vorgabe von Stromstärke,

elektrischem Widerstand und Leistung). Während der Startrechnung wird nun die vom Anwender vorgegebene Stromstärke so angepasst, dass sich die spezifizierte Gesamtleistung ergibt.

Die vom Modell berechneten Quellterme wurden während der Startrechnung immer wieder überschrieben, sodass die Überprüfung der Konvergenz der stationären Lösung unwirksam war.

- **Berechnung und Ausgabe der im Kern gespeicherten Energie:** Die Berechnung dieser Größe ist ein Wunsch vieler Anwender. Da keine Enthalpiedaten für feste Strukturen (z. B. Brennstoff, Hüllrohr) in ATHLET vorliegen, musste die spezifische Wärmekapazität sowohl der in ATHLET implementierten als auch der vom Anwender bereitgestellten Materialien über die Temperatur integriert werden. Referenztemperatur ist 20 °C.
- Die **MASL-Methode** (minimaler Abstand von der Siedeübergangslinie, SWR-Methode zur Bewertung der sicheren Kernkühlung) wurde verbessert, sodass die MASL-Berechnung nun sofort mit der transienten Rechnung gestartet wird. Außerdem werden als Startwerte für den sog. transienten MASL nicht mehr eingelesene Werte, sondern die Ergebnisse des stationären MASL verwendet. Damit werden Unstetigkeiten beim Wechsel vom stationären zum transienten MASL vermieden.
- Bei gekoppelten Rechnungen (ATLAS-ATHLET-COCOSYS) kam es immer wieder zu Programmabbrüchen. Als Ursache konnte das in ATHLET implementierte MASL-Verfahren (Minimaler Abstand zu Siedeübergangslinie in SWRs) identifiziert werden. Das Verfahren hat nur einen begrenzten Anwendungsbereich. Die Ausführung des MASL-Programms wird nun rechtzeitig beendet (z. B. bevor Strömungsstagnation im Kern auftritt).

## 2.8 Programmhandhabung und Benutzerfreundlichkeit

Die korrekte Anwendung von ATHLET stellt an den User hohe Anforderungen. Nicht nur die Entwicklung und Wartung eines dem Anwendungsfall adäquaten und den zahlreichen modelltechnischen Anforderungen seitens ATHLET genügenden Simulationsmodells (Inputdeck) ist aufwendig und birgt die Gefahr Fehler zu machen, auch bei der Ausführung der Simulation können einige „Fallstricke“ sowohl die Ablauffähigkeit der Rechnung als auch die Qualität der Ergebnisse negativ beeinflussen. Es ist deshalb von herausragender Bedeutung, den Anwender in allen Arbeitsschritten umfassend zu unterstützen. Das beginnt mit der Art und Weise, wie das Simulationsmodell zu spezifi-

zieren ist, umfasst eine möglichst lückenlose Kontrolle der Eingabedaten hinsichtlich Vollständigkeit, Wertebereich und Widerspruchsfreiheit sowie die Überwachung aller Abschnitte der Simulation. Der Anwender muss durch klar verständliche Informationen über den Zustand seiner Simulation in Kenntnis gesetzt werden.

Es ist deshalb ein die Entwicklung und Anwendung von ATHLET ständig begleitender Prozess, in diesem Bereich Lücken zu schließen, missverständliche Informationen zu präzisieren sowie die Methoden dem sich erweiternden Anwendungsspektrum anzupassen. Viele der in diesem Bericht beschriebenen Arbeiten dienen auch diesem Ziel.

### **2.8.1 Verbesserungen im Gesamtprogramm**

- Der Programmentwickler (und auch der Anwender) kann den Verlauf der Startrechnung, also die Zwischenergebnisse der einzelnen Iterationsschritte, als „zeitlichen“ Verlauf plotten (Service PLT\_SSC), etwa um das Scheitern der Startrechnung oder unbefriedigende Ergebnisse genauer untersuchen zu können. Diese Methode wurde verfeinert. Auf Anforderung werden nun zusätzlich bereits nach der TFD und vor der HECU-Berechnung Plotdaten ausgegeben. Damit kann der Verlauf der Startrechnung genauer verfolgt werden.
- Von der RSK wurde eine statistische LOCA-Analyse für hochbelastete Heißstäbe angefordert, für die 1809 ATHLET-Simulationen durchzuführen waren. Um diese Simulationen hinsichtlich Rechenaufwand und erzeugter Datenmenge zu optimieren, wurde ATHLET erweitert:
  1. Ein neues GCSM-Signal „Max. Hüllrohrtemperatur“ erlaubt es dem Anwender, die Rechnung genau dann abubrechen, wenn der Kern wieder gekühlt ist;
  2. Die Ausgabe der Ergebnisdaten im Plotfile kann nun so gesteuert werden, dass nur einzelne physikalische Größen als GCSM-Prozesssignale selektiv ausgegeben werden.
- In ATHLET sind alle Real-Größen vom Typ doppeltgenau. Um Speicherplatz zu sparen werden die Plotdaten aber nur einfachgenau ausgegeben. Falls die Konvertierung R8 -> R4 (wegen des kleineren Wertebereichs) fehlschlägt, wird nun der Objektname (TFO oder HCO) mit ausgegeben, sodass man den Fehler leichter lokalisieren kann.

- Änderungen, die notwendig waren, um mit den Debuggern der Compiler ifort und gfort arbeiten zu können, in der Release-Version aber meist keine Probleme verursachten:

Initialisierung verschiedener Größen, die erst zur Laufzeit und nur dann belegt werden, wenn die entsprechenden Modelle auch angesprochen werden (beispielsweise Anzahl der Quenchfronten, Brennstäbe, modell-spezifische Tabellen, etc.). Die vom Compiler für die ATHLET-Release-Versionen automatisch durchgeführte Initialisierung mit Null führt zu korrektem Programmablauf. Zwingt man jedoch den Compiler, mit  $\neq 0$  zu initialisieren (um bisher unerkannte Programmfehler zu finden), melden die Debugger entsprechende Fehler und brechen den Test ab. Die durchgeführten Programmänderungen erlauben nun, diese Debug-Option sinnvoll einzusetzen.

### **2.8.2 Verbesserungen der Programmeingabe**

- Die Überschreibung einer Variablen (z. B. Gasgehalt) für alle Elemente eines TFOs bzw. HCOs per REDEFINE-Eingabe ist nun mit nur einer Eingabekarte möglich.
- Um die örtliche Änderung der Impulsflussdichte auch an Verzweigungspunkten des Strömungsnetzwerkes korrekt berechnen zu können, müssen dort unter BRANCHING bzw. BRANCH2M für jedes angrenzende Pipe Anweisungen vorgegeben werden, wie das Programm vorzugehen hat. Letztlich geht es dabei um die räumliche Anordnung der TFOs, die ATHLET aus den Eingabedaten nicht ableiten kann. Bei Simulationen von vielen Kernkanälen, beispielsweise im Zuge eines Kern-stand-alone Modells, kann die Eingabe recht umfangreich werden. Durch Vorgabe von ALL\_IN bzw. ALL\_EX können nun gemeinsame Eigenschaften für die ein- bzw. ausströmenden Pipes definiert werden.

Folgende Kontrollen der Eingabedaten wurden neu implementiert bzw. ergänzt:

- Für die Wärmeleitelemente eines Wärmetauschers wird die Kühlmittelreferenztemperatur durch Mittelwertbildung mit der lokalen und der stromaufwärts liegenden Temperatur gebildet, um den generischen Diskretisierungsfehler von lumped-parameter Modellen zu reduzieren. Eine Kontrolle stellt nun sicher, dass die damit verbundenen Anforderungen an die Nodalisierung erfüllt sind.
- Es wird nun überprüft, ob alle TFOs der linken bzw. rechten Seite eines HCOs
  - wie von ATHLET erwartet – zum gleichen TFD-System gehören.

- Die vom Benutzer nodalisierungsunabhängig vorzugebende grobe Schätzung des stationären Wärmeübertragungsprofils eines Wärmetauschers wird benutzt, um für jedes HCV des Wärmetauschers den anfangs übertragenen Wärmestrom zu berechnen. Der Programmteil funktioniert jedoch nur dann fehlerfrei, wenn hier die HCOs in der richtigen Reihenfolge eingelesen werden. Eine neu programmierte Kontrolle stellt dies nun sicher.

### 2.8.3 Verbesserung von GCSM

Die im Folgenden beschriebenen Maßnahmen sollen die Anwendung von GCSM erleichtern, Programmschwächen reduzieren und dazu beitragen, Anwendungsfehler frühzeitig zu erkennen.

- Flexible Generierung von GCSM-Prozesssignalen aus Variablen- und Modulnamen: Damit stehen dem Anwender nicht mehr nur die in ATHLET vorbereiteten Prozesssignaltypen wie Massenstrom oder Temperatur zur Verfügung, sondern alle globalen Variablen, deren Datenstruktur kongruent zur räumlichen Diskretisierung ist. Voraussetzung ist auch, dass diese als „visible“ deklariert sind.
- Alle GCSM Hardwareactions werden nun in einem separaten Block ausgegeben. Dies erleichtert die Fehlersuche, wenn unklar ist, ob Störungen von GCSM ausgehen – also in der Verantwortung des Anwenders liegen – oder von ATHLET-Modellen verursacht werden.
- Die Kontrolle, ob das Eingangssignal eines GCSM SWITCHes im Bereich der Hysterese liegt (der stationäre Zustand somit nicht sicher zu bestimmen ist), wird nun auch beim SWITCH mit „negative rotation“ durchgeführt.
- Um das mit GCSM modellierte Leit- und Regelsystem schnell testen zu können, kann in ATHLET GCSM auch stand-alone ausgeführt werden (also ohne thermohydraulische Komponenten). Anders als für gekoppelte Rechnungen müssen dann allerdings alle GCSM-Blöcke vom Anwender „lose“ gekoppelt werden. Das bedeutet, dass die Eingabedaten nur für die Testrechnungen geändert – und vor allem danach wieder zurückgesetzt - werden müssen. GCSM erkennt nun die Art der Rechnung und schaltet ggf. intern die Blöcke auf „lose“ Kopplung. Der Anwender kann also seine Originaldaten testen.

- Die GCSM-gesteuerte Verkürzung der FEBE-Zeitschrittweite wurde verbessert. Sie konnte bei kleinen Zeitschrittweiten übersprungen werden. Zusammen mit rückdatiertem SWITCH führte dies zum Programmabsturz.

#### 2.8.4 Verbesserte Benutzerwerkzeuge

Integraler Bestandteil des ATHLET-Softwarepakets sind neben dem ATHLET-Rechenprogramm unterschiedliche **Werkzeuge zum Pre- und Postprocessing** sowie eine **grafische Benutzeroberfläche (GUI)**. Werkzeuge und GUI wurden entsprechend den Anforderungen der ATHLET-Anwender kontinuierlich weiterentwickelt. Neben zahlreichen punktuellen Verbesserungen und Korrekturen wurden vor allem folgende Programme zur Anwender- und Entwicklerunterstützung weiterentwickelt:

- Zum Konvertieren von Design-Dateien für Zeitdiagramme aus dem plt-Datenformat (ursprünglich benötigt für das nicht mehr unterstützte Plotprogramm JSPlot) in das plx-Format (u. a. für APTPlot) wurde ein neues Tool entwickelt und auf dem GRS Rechencluster (Unix) bereitgestellt. Unter Windows ist es in die grafische ATHLET-Benutzeroberfläche integriert und kann im Menü „Utilities“ ausgewählt werden. Zusätzlich wurde der Konverter in die APTPlot-GUI integriert, sodass beide Formate, plt und plx, verwendet werden können.
- Zur leichteren Handhabung wurde bereits in der Vergangenheit die ATHLET Startprozedur *athlgo* entwickelt. Diese steht insbesondere den GRS-internen Entwicklern und Anwendern auf dem GRS Rechencluster „manni“ zur Verfügung. *Athlgo* wurde erweitert und an das geänderte Queuing-System des GRS Rechenclusters angepasst.
- Die „Jacobi-Matrix-Tools“, mittels derer Analysen der während einer Simulation erzeugten Jacobi-Matrizen durchgeführt werden können, wurden um zusätzliche Funktionen erweitert. Diese Tools sind für die Programmentwicklung und hierbei insbesondere für eine effiziente Fehlerdiagnose und -behebung von großer Bedeutung.
- Um unterschiedlichen Anwenderwünschen nachzukommen, stehen innerhalb der ATHLET-GUI neben dem Standard-Plotprogramm APTPlot noch weitere Programme zur Visualisierung zur Verfügung. Hierzu zählen Quickplot (ermöglicht die schnelle und grafisch einfache Datenvisualisierung einzelner Größen direkt auf dem Bildschirm) und Excelplot (ermöglicht den Export einzelner Grö-

ßen nach Microsoft Excel mit automatischer Darstellung als Excel-Diagramm). Beide GUI-Programme wurden derart erweitert, dass im jeweils erzeugten Diagramm mehrere Kurven beliebig zusammengestellt, d. h. hinzugefügt und auch wieder gelöscht werden können.

Das Programm APTPlot dient für ATHLET als Standard-Plotprogramm. Es ermöglicht die Darstellung der Ausgabegrößen als zeit- oder ortsabhängige Kurven. Mittels der ATHLET GUI können darüber hinaus sog. Design-Files (.plx) erzeugt und gespeichert werden, sodass ein einmal generierter Satz an Analysediagrammen reproduziert und für spätere Analysen erneut verwendet werden kann. Unter Windows wurde mit Blick auf die Erstellung von Berichten eine „Scripting-Funktionalität“ für die Design-Datei ergänzt, mit der mittels eines Batch-Skripts automatisiert ein Satz an Bilddateien (z.B. .jpg) entsprechend den im Design-File definierten Diagrammen erzeugt werden kann. Zur Veranschaulichung der Skriptingoption wurden für alle mit ATHLET verteilten Anwendungsbeispiele (den ATHLET-Samples) Batch-Skripte erstellt und verteilt.

### **3 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen**

#### **3.1 Entwicklung einer Methodik zur Quantifizierung unsicherer Modelleingangsparameter**

##### **3.1.1 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse**

Ziel von Analysen zur Unsicherheit und Sensitivität von Anwendungen komplexer Rechenmodelle ist die Beantwortung zweier Fragestellungen:

- (1) In welchem Bereich liegt die Voraussage der numerischen Simulation und mit welcher Wahrscheinlichkeit wird sie erzielt. Für die Verfahren, die auf der Fortpflanzung der Eingabeunsicherheiten basieren, ist dies äquivalent mit der Fragestellung: Wie groß ist der gemeinsame Einfluss aller Eingangsunsicherheiten auf die Ergebnisse des Rechenmodells? (Unsicherheitsanalyse)
- (2) Welche dieser Eingangsunsicherheiten tragen am meisten zur Ergebnisunsicherheit bei? (Sensitivitätsanalyse)

Im Rahmen der Unsicherheitsanalyse kann man durch folgende Vergleiche auf die Leistungsfähigkeit des Programms und der Simulationsmodelle schließen:

- (1) Vergleich von Rechenmodellergebnissen mit Messwerten bei Voraus- oder Nachrechnung von Experimenten. Damit lässt sich der Grad der Übereinstimmung von Experiment und Rechnung bewerten.
- (2) Vergleich von Ergebnissen verschiedener Rechenmodelle zu demselben Szenario. Damit lässt sich der Grad der Übereinstimmung der Ergebnisse der beteiligten Rechenmodelle untereinander bewerten.

Aussagen von Sensitivitätsanalysen (2) liefern Anhaltspunkte dafür, in welchem Bereich der Kenntnisstand durch weitere theoretische Untersuchungen, Experimente, Expertenbefragungen, Literaturrecherchen, Datensammlungen usw. vorrangig verbessert werden sollte, um die Unsicherheit der Gesamtergebnisse in möglichst effizienter Weise zu reduzieren. Damit können Schwerpunkte für die Weiterentwicklung und Verbesserung des Rechenmodells gesetzt oder Hinweise geliefert werden, ob Entwicklungsarbeiten eingestellt werden könnten, weil auch durch eine genauere Modellierung keine wesentliche Reduzierung der Gesamtunsicherheit der Rechnung zu erzielen ist.

### 3.1.1.1 GRS-Methode für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Hauptmerkmale der von der GRS entwickelten Methode zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse sind:

Die Behandlung von epistemischen und aleatorischen Eingangsunsicherheiten erfolgt separat.

Die Quantifizierung der epistemischen Eingangsunsicherheiten, d. h. Unsicherheiten im Kenntnisstand der Eingangsparameter, erfolgt unter Zugrundelegung der Bayes'schen Interpretation des Wahrscheinlichkeitsbegriffs (Wahrscheinlichkeit zur Quantifizierung des Kenntnisstandes = „Grad des Für-wahr-haltens“, „degree-of-belief“).

Die „Fortpflanzung“ der Eingangsunsicherheiten durch das Rechenmodell bis zur Ergebnisunsicherheit erfolgt mit Methoden der Statistik unter Verwendung des Monte-Carlo-Ansatzes. Wegen des hohen Rechenzeitbedarfs der verwendeten Rechenprogramme (z. B. ATHLET, COCOSYS) soll der Stichprobenumfang, die Anzahl der im Zuge dieser Monte-Carlo-Simulation durchzuführenden Rechenläufe, möglichst klein sein.

Aussagen zur resultierenden Ergebnisunsicherheit basieren auf statistischen Methoden der „geordneten Stichproben“ („order statistics“) und werden in Form verteilungsfreier statistischer Toleranzgrenzen formuliert. Die „Schärfe“ dieser Unsicherheitsaussagen wird dabei durch zwei statistische Größen  $u$  und  $v$  vorgegeben:

- (1)  $u$  = „Wahrscheinlichkeitsinhalt“, „Überdeckungswahrscheinlichkeit“, „probability content“, „coverage“ gibt an, welcher Anteil der Ergebnisunsicherheit von den zu ermittelnden Grenzen erfasst werden soll (bei Reaktorsicherheitsanalysen in der Regel  $u = 95\%$ ), und
- (2)  $v$  = „Vertrauensgrad“, „Konfidenzniveau“, „confidence level“ gibt an, mit welcher statistischen Sicherheit (Vertrauen, Konfidenz) dies aufgrund der Beschränktheit des Stichprobenumfangs gelten soll (in der Regel  $v = 95\%$ ).

In der gängigen internationalen Praxis wird bei Reaktorsicherheitsanalysen eine Aussage über die Gesamtunsicherheit des Rechenergebnisses mit einem Vertrauensgrad von mindestens 95 % und einer Wahrscheinlichkeit von 95 % gefordert.

Bei einer Normalverteilung beträgt die Wahrscheinlichkeit für den Bereich  $\mu \pm 2\sigma$  (= Mittelwert  $\pm$  doppelte Standardabweichung) ungefähr 95 %. Die Standardabweichung ist gleich der Wurzel aus der Varianz, d. h. dem Mittelwert der quadrierten Abweichungen. Eine Abdeckung der doppelten mittleren Abweichungen wird als adäquat und ausreichend angesehen. Angaben zur statistischen Aussagesicherheit sind nicht zu 100 % möglich, da nur eine begrenzte Zahl von Rechnungen durchgeführt werden kann. Im Sprachgebrauch der Statistik heißt das, der Stichprobenumfang ist beschränkt.

Sensitivitätsaussagen sollen zum Ausdruck bringen, wie hoch der Beitrag ist, den die Unsicherheit jedes einzelnen Eingangsparameters zur Gesamtunsicherheit der Ergebnisgröße liefert, d. h. „Sensitivität“ im Sinne von Unsicherheitseinfluss, „uncertainty importance“. Sie basieren auf geeigneten „Sensitivitätsmaßen“ oder „Sensitivitätsindizes“ („uncertainty importance indices“), in deren Berechnung sowohl die im Rechenmodell abgebildeten funktionalen Zusammenhänge als auch die Verteilungen zur Quantifizierung der Unsicherheiten eingehen.

Die „GRS-Methode“ hat gegenüber anderen Methoden der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse folgende Vorteile:

- Sie ist ohne Einschränkungen auf jedes beliebige Rechenmodell anwendbar. Die zu variierenden Parameter müssen über den Eingabedatensatz zugänglich sein.
- Die Anzahl der durchzuführenden Rechenläufe hängt nur von der geforderten „Schärfe“ der Unsicherheitsaussagen ab, nicht aber von der Anzahl der beteiligten unsicheren Eingangs- und Ergebnisparameter. Die Zahl der Rechenläufe in Abhängigkeit von gewünschter Wahrscheinlichkeit und Vertrauensniveau wird nach der Wilks-Korrelation ermittelt. Nach dieser Methode sind z. B. für eine einseitige 95 %/95 %-Toleranzgrenze mindestens 59 Rechenläufe durchzuführen, für die zweiseitigen 95 %/95 %-Toleranzgrenzen sind es mindestens 93 Rechenläufe.
- Für die Ableitung der Sensitivitätsaussagen werden keine zusätzlichen Rechenläufe benötigt.

### 3.1.1.2 Schritte einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Für die Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sind folgende Arbeitsschritte erforderlich:

- Erstellung eines Eingabedatensatzes für ATHLET zur Nachbildung einer zu simulierenden Einrichtung (Reaktor, Experimentalstand).
- Auswahl derjenigen Eingabeparameter, deren Unsicherheiten für einflussreich auf das Ergebnis erachtet werden.
- Quantifizierung der Unsicherheiten für jeden der ausgewählten Eingabeparameter: Festlegung von Referenzwert, Wertebereich, Wahrscheinlichkeitsverteilung und evtl. weiterer Zusatzbedingungen und Abhängigkeiten, die im Zuge der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zu beachten sind.
- Auswahl der Ergebnisparameter, für welche die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt werden sollen.
- Durchführung der Variationsrechnungen mit ATHLET: Für jeden unsicheren Parameter werden aus den festgelegten Wertebereichen entsprechend den Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Abhängigkeiten jeweils Parameterwerte nach dem Zufallsprinzip ausgewählt. Mit diesen Parameterwerten werden Rechenläufe mit ATHLET durchgeführt. Aus jedem Rechenlauf ergibt sich je ein alternativer zeitabhängiger Verlauf für jede Ergebnisgröße. Durch die Gesamtheit der alternativen Ergebnisse wird eine Stichprobe aus der (zeitabhängigen) Wahrscheinlichkeitsverteilung für jede der interessierenden Ergebnisgrößen festgelegt.
- Angabe quantitativer Unsicherheitsaussagen zu den Rechenergebnissen: Aus der Gesamtheit der im vorhergehenden Schritt errechneten alternativen Ergebnisse werden quantitative Unsicherheitsaussagen, z. B. in Form von 95 %/95 %-Toleranzgrenzen und/oder -bereichen hergeleitet.
- Berechnung von Sensitivitätsmaßen: Damit wird die Rangfolge der Beiträge der einzelnen Eingangsunsicherheiten zur Ergebnisunsicherheit ermittelt.
- Darstellung und Interpretation der Analyseergebnisse: Dazu zählen die resultierenden Unsicherheitsbereiche der Rechenergebnisse, die Sensitivitätsmaße und zusätzlich die gewonnenen Erfahrungen bei der Bestimmung der Wertebereiche und Wahrscheinlichkeitsverteilungen der unsicheren Modellparameter.

### 3.1.2 OECD/NEA/CSNI Projekt SAPIUM

Mit Blick auf Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen wurden Aktivitäten in Bezug auf die Entwicklung neuer Methoden zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten durchgeführt, mit denen die GRS auch zum OECD/NEA/CSNI Projekt SAPIUM beiträgt. Vorteile der internationalen Einbettung der Arbeiten bestehen sowohl in der Einbeziehung von Erkenntnissen der teilnehmenden Projektpartner bei der Entwicklung einer geeigneten Methodik als auch in der hiermit verbundenen internationalen Akzeptanz. Laufzeit des SAPIUM Projekts ist Januar 2017 bis voraussichtlich Frühjahr 2019. Die Teilnehmer sind IRSN, JAEA, KINS, Tractebel, CEA, NINE, CSN/UPC, EDF und GRS.

Da die Quantifizierung von Unsicherheiten der physikalischen Modellierung der wohl anspruchsvollste und schwierigste Schritt innerhalb einer Unsicherheitsanalyse darstellt, trägt eine Verbesserung der hierzu bestehenden Methoden unmittelbar auch zur Erhöhung der Aussagekraft von Sicherheitsanalysen nach dem BEPU-Verfahren bei.

#### 3.1.2.1 Ausgangssituation und Zielsetzung

Grundsätzlich lässt sich feststellen, dass die auf der Fortpflanzung der Eingabeunsicherheiten basierenden Methoden für Unsicherheitsanalysen die am weitest verbreiteten Verfahren sind. Erfahrungen und Erkenntnisse aus den früheren internationalen Projekten UMS /WIC98/, BEMUSE /CRE08, PER11/ und PREMIUM /MEN17/ als auch individuelle Erfahrungen der an diesen Projekten beteiligten Institutionen haben gezeigt, dass die Quantifizierung der Eingabeunsicherheiten und insbesondere die Quantifizierung von Modellunsicherheiten eine der wichtigsten und gleichzeitig schwierigsten Schritte einer Unsicherheitsanalyse sind. Da den Programmanwendern, die die Unsicherheitsanalysen durchführen, im Allgemeinen das notwendige „Knowhow“ bezüglich der physikalischen Modelle im verwendeten deterministischen Programm fehlt und insbesondere keine Kenntnis bezüglich der Genauigkeit (bzw. Unsicherheit) der Modelle und Korrelationen vorliegt, erweist sich die Quantifizierung von Modellunsicherheiten in der Praxis als kritische Stelle bei der Durchführung von Unsicherheitsanalysen. Dies bestätigen auch Erfahrungen aus der Anwendung von Unsicherheitsanalysen.

Im Rahmen des **BEMUSE**-Projekts wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zu einem Experiment in der LOFT-Versuchsanlage mit 200 % Leck und zu einem hypothetischen 2F-Bruch der Hauptkühlmittelleitung im Zion-Referenz-Kernkraftwerk

durchgeführt. In diesem Projekt nahmen zehn verschiedene Institutionen teil, die unterschiedliche Thermohydraulikprogramme verwendeten: RELAP, ATHLET, CATHARE, MARS und TRACE. Im Laufe des Projekts wurden die Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen verglichen. Der Vergleich der berechneten Toleranzlimits für die maximale Hüllrohrtemperatur zeigte, dass sogar die Benutzer des gleichen deterministischen Programms sehr unterschiedliche Toleranzlimits berechnet hatten. Hintergrund hierbei waren u. a. Unterschiede in den ermittelten wichtigsten Eingabeunsicherheiten. Obwohl sich aufgrund methodischer Unterschiede bei der Durchführung der Unsicherheitsanalysen eine exakte Ursachenerforschung als schwierig gestaltete, konnten letztlich als die wichtigsten Ursachen identifiziert werden:

- Unterschiede innerhalb der Referenz-Eingabedaten
- Unterschiede bei den berücksichtigten Eingabeunsicherheiten

Der erste Punkt spiegelt den Anwendereinfluss wider. Hinsichtlich der berücksichtigten Eingabeunsicherheiten lassen sich zwei Aspekte betrachten. Die Eingabeunsicherheiten unterscheiden sich nicht nur hinsichtlich der quantifizierten Unsicherheitsbereiche, sondern auch bzgl. der als potentiell einflussreich identifizierten Parameter. Verschiedene Anwender hatten also teilweise unterschiedliche unsichere Parameter für die Analyse als wesentlich eingestuft und berücksichtigt. Als wesentlicher Einfluss konnten jedoch die Unterschiede bei der Quantifizierung der Modellunsicherheiten ausgemacht werden.

Diese Erkenntnis gab Anlass für die Definition des **PREMIUM**-Projekts, das sich mit der Quantifizierung von Modellunsicherheiten befasste. Im Rahmen dieses Benchmarks wurden existierende Methoden für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten auf der Basis von experimentellen Daten, insbesondere CETs (Combined Effect Tests) verglichen. Die wichtigsten Erkenntnisse hierzu wurden im Projektabschlussbericht unter Mitwirkung der GRS kürzlich veröffentlicht /MEN17/ und waren:

- Die Ergebnisse der Quantifizierung der Modellunsicherheiten waren stärker von der Methode der Quantifizierung als von dem deterministischen Programm, dessen Modellunsicherheit quantifiziert wurde, abhängig.
- Die Auswahl der Modellparameter, die quantifiziert wurden, sowie die für deren Quantifizierung benutzten experimentellen Parameter waren von Bedeutung.

- Die Erstellung und Strukturierung der experimentellen Datenbasis zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten war einflussreich.

Die Erkenntnisse aus dem PREMIUM-Benchmark zeigen, dass neben einer geeigneten (eventuell mathematischen) Prozedur der Quantifizierung der Modellunsicherheiten auch die gesamte Methodik, d. h. alle Schritte, die letztlich zur Bestimmung der Unsicherheiten des physikalischen Modells beitragen, für die Ergebnisse der Quantifizierung von Bedeutung sind. *Als sehr wichtig erwies sich hierbei die Auswahl der experimentellen Datenbasis.* Aus diesem Grund rücken die Verfahren zur Definition und Selektion von Experimenten für die Bestimmung von Modelleingangsunsicherheiten nun stärker in den Fokus.

Die Erfahrung zeigt, dass bei den oben genannten internationalen Projekten immer wieder ähnliche Fehler bei der Durchführung von Unsicherheitsanalysen gemacht wurden. Die jeweils neuen Benchmark-Teilnehmer wiederholten Fehler, die bei den vorangegangenen Projekten schon beobachtet worden waren. Diese Tatsache war letztlich Anstoß zur *Entwicklung und Beschreibung* einer Methodik, die zukünftig für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten empfohlen werden kann. Zu diesem Zweck wurde eine internationale Projektgruppe von NEA/CSNI organisiert und das Projekt **SAPIUM** (Systematic Approach for Input Uncertainty Quantification Methodology) gestartet, das erst nach Abschluss dieses Vorhabens endet.

Im Rahmen des SAPIUM-Projekts wird derzeit auf der Basis eines internationalen Konsenses und unter maßgeblicher Mitwirkung der GRS eine Methodik zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten erstellt. Diese soll schließlich als „Best Practice Guide“ zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten formuliert werden. In der ersten Phase des Projekts wurden Erfahrungen der Teilnehmer und anderer Institutionen zu diesem Thema gesammelt und kritisch analysiert. Da die GRS eine lange Tätigkeit und entsprechende Erfahrung auf dem Gebiet vorweisen kann, ist sie in Formulierung und Analyse aller wichtigen Schritte der Methodik involviert. Dies umfasst die Erstellung der experimentellen Basis für die Quantifizierung, die Durchführung der Quantifizierung sowie die Validierung der quantifizierten Unsicherheiten.

### 3.1.2.2 Neue Methoden zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten

Die Antwort auf die Schwierigkeit der Bestimmung von Modellunsicherheiten ist die Entwicklung von detaillierten und formalisierten Methoden, z. B. in /UNA11, POU11/. Hierbei besteht Konsens, dass die Quantifizierung von Modellunsicherheiten generell folgende Schritte beinhalten soll /BAC18/:

- Spezifizierung des Problems und der Rahmenbedingungen
- Identifizierung, Auswahl und Beurteilung der Rechenmodelle für die Simulation
- Erstellung und Überprüfung der experimentellen Basis für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten
- Quantifizierung von Modellunsicherheiten
- Validierung von quantifizierten Modellunsicherheiten

In Bezug auf die Details der Durchführung der erforderlichen Schritte bestehen Unterschiede zwischen den reinen Nutzern der Programme und den Institutionen, die auch Entwickler der Programme für Simulation und Unsicherheitsanalyse sind, wie z. B. die GRS. Hier unterscheiden sich die Konzepte und Vorgehensweise zumindest in Teilen signifikant.

Die von der GRS bis jetzt praktizierte Methodik zur Quantifizierung von Eingabeunsicherheiten kann in die folgenden formalisierten Schritte unterteilt werden.

1. Spezifizierung des Problems
2. Expertenbefragung zu und vertiefte Analyse der relevanten Phänomene und Experimente
3. Auswahl der relevanten unsicheren Parameter
4. Quantifizierung von Eingabeunsicherheiten
5. Transfer der Eingabeunsicherheiten in den Eingabedatensatz des Programms (z.B. über die GRS-Software SUSAN)

Die Bestimmung von Modellunsicherheiten für die Unsicherheitsanalyse ist eine schwierige Aufgabe, für die die Kompetenzen der Programmbenutzer oft nicht ausreichend sind. Häufig fehlen sowohl Erkenntnisse aus der Modellentwicklung, der Implementierung und der Validierung sowie Zugang zu geeigneten Experimentaldaten zur

Quantifizierung der Unsicherheiten. Eine Auswertung hat ergeben, dass beides wichtige Voraussetzungen sind, um Modellunsicherheiten sinnvoll zu bestimmen. Der Vorschlag, der aus Sicht der GRS eine effektive Lösung des Problems darstellt, ist eine *systematische Quantifizierung aller Modellunsicherheiten durch die Programmentwickler* im Rahmen einer erweiterten Programmvalidierung. Die von den Entwicklern abgeleiteten Unsicherheitsintervalle und empfohlenen Verteilungen der Parameter sollten in die Programmdokumentation aufgenommen und an die Nutzer verteilt werden. Mit einer Verteilung der ermittelten Unsicherheiten würde zudem der oben beschriebene Anwendereinfluss bei der Unsicherheitsanalyse reduziert. Der Anwender hätte die Möglichkeit, alle relevanten Modellunsicherheiten adäquat zu berücksichtigen und nicht nur diejenigen, für die er selbst in der Lage ist, Unsicherheiten zu quantifizieren.

Nachfolgend ist die von der GRS im Rahmen dieses Vorhabens ausgearbeitete Methodik dargestellt, die unter Nutzung der Möglichkeiten und Kenntnisse der Programmentwicklung alle erforderlichen Schritte der Quantifizierung von Modellunsicherheiten definiert. Für die neue Methodik wurden bisherige Erfahrungen aus den oben genannten internationalen Projekten und aus eigenen Unsicherheitsanalysen der GRS sorgfältig ausgewertet. Die Grundlagen und Ansätze der Methodik sind in /SKT18/ ausgeführt und veröffentlicht. Folgende Einzelschritte sind für den vorgeschlagenen Ansatz definiert:

1. Identifizierung aller Modelle im Programm, für die die Genauigkeit/Unsicherheit bestimmt werden muss/soll, und Angabe des aktuellen Stands ihrer Quantifizierung. Hierfür sind Informationen aus der Programmentwicklung hilfreich, teils sogar erforderlich.
2. Festlegung von geeigneten Parametern für die Darstellung der Unsicherheit der einzelnen Modelle im Programm und Einfügen von geeigneten Eingabeparametern in den Programm-Input (zur Variation der unsicheren Parameter während der Unsicherheitsanalyse), soweit diese Möglichkeit noch nicht besteht. Letzteres erfordert in der Regel Änderungen des Programms (wie z. B. ATHLET), die nur durch den Programmentwickler implementiert werden können.

3. Definition der experimentellen Basis für die Bestimmung von Unsicherheiten jedes Modells:
  - Vollständigkeit der experimentellen Basis: Kriterien sind: Abdeckung des gesamten Anwendungsbereichs der Modelle, Zahl der Experimente, Wichtung der Experimente für die Bestimmung unsicherer Parameter, verschiedene Skalierung der Experimente, etc.
  - Auswahl geeigneter Experimente
  - Analyse der experimentellen/Mess-Unsicherheiten
4. Quantifizierung von Modellunsicherheiten
  - Quantifizierung auf Basis von Experimenten
    - Einzeleffekt-Experimente
    - Weitere Experimente: insbesondere CET und eventuell Nutzung von Erkenntnissen aus Simulationen von IET
  - Quantifizierung auf Basis von Literatur, Vergleich mit anderen Modellen, Expertenbefragungen, etc.
5. Berücksichtigung von Skalierungseffekten bei der Quantifizierung von Modellunsicherheiten
  - Groß- und kleinskalige Versuchsanlagen
  - Unterscheidung nach thermohydraulischen Kriterien
6. Verifizierung und Validierung von quantifizierten Modellunsicherheiten
  - Validierung auf der Basis von IETs
  - Validierung auf der Basis von CETs

7. Beurteilung der Ergebnisse der Validierung anhand festgelegter Indikatoren
  - Für den Fall einer nicht erfolgreichen Validierung: Durchführung eines Iterationsschrittes
    - Erweiterung der experimentellen Basis, falls möglich und notwendig, oder
    - Modifizierung des Unsicherheitsbereiches infolge zusätzlicher Quantifizierung
  
8. Dokumentation der quantifizierten Modellunsicherheiten
  - Überführung in die Programmdokumentation für Anwender, z. B. in Form von Tabellen mit Angabe des Anwendungsbereichs, zugrundeliegender Skalierung, Gültigkeitsgrenzen, Vertrauensniveau etc.
  - Formulierung von Empfehlungen an die Programmentwicklung für Verbesserung und Weiterentwicklung der analysierten Modelle.

Eine besondere Bedeutung kommt den Schritten 2, 3, 4 und 8 der vorgeschlagenen Methodik zu, für die die Einbindung der Programmentwicklung erforderlich ist bzw. Kenntnisse aus der Programmentwicklung besonders hilfreich sind. Die Schritte sind nachfolgend konkretisiert.

**Zu Schritt 2:** Festlegung von geeigneten Parametern für die Darstellung von Unsicherheitsbandbreiten

Modellunsicherheiten werden durch unsichere Parameter ausgedrückt. Diese Parameter sind

- a. Korrekturfaktoren in einer unsicheren Modellgleichung (oder zusätzliche additive Terme in der Modellgleichung) und/ oder
- b. Indizes zur Kennzeichnung von verschiedenen Modellgleichungen, die alternativ verwendet werden.

In dem Programm ATHLET stehen beide Möglichkeiten in Abhängigkeit des betrachteten Modells zur Verfügung. Für die meisten Modellunsicherheiten wurde Möglichkeit a) als geeignet erachtet (z. B. minimale Filmsiedetemperatur), für andere Unsicherheiten

Möglichkeit b) (z. B. verschiedene Approximationen des Fluidimpulsterms). In einigen Fällen besteht die Möglichkeit, beide Optionen a) und b) zu verwenden (z. B. Zweiphasenmultiplikator für den Druckverlust, kritische Heizflächenbelastung, Dampf-Tropfenkühlung, einphasige Konvektion an Dampf), d. h. ein eigener unsicherer Korrekturfaktor wurde für jede alternative Modellgleichung eingeführt.

Einige der zusätzlich zu variierenden unsicheren Korrekturfaktoren in den Modellgleichungen mussten über die Programmeingabe verfügbar gemacht werden, da Änderungen dieser Modellformulierungen dem „normalen“ Anwender bewusst nicht zugänglich gemacht sind. Hierzu zählen Faktoren für unterschiedliche Drift-Flux-Modelle, der Faktor für den Zweiphasenmultiplikator zur Berechnung des Druckverlustes und Multiplikationsfaktoren für Wärmeübergangskorrelationen.

Hinsichtlich der Auswahl von Modellgleichungen bestehen im Rechenprogramm ATHLET Optionen, die über die Programmeingabe ausgewählt werden können. Will man diese Möglichkeit im Rahmen der Anwendung des Programms nicht nutzen, so werden sog. "Default" - Optionen verwendet, die standardmäßig genutzt werden sollen. Im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse besteht dann die Möglichkeit, mehrere mögliche Optionen einzubeziehen, um deren Einfluss auf den Unschärfbereich des Rechenergebnisses zu untersuchen. Im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse verwendete diskrete Verteilungen unsicherer Parameter kennzeichnen Indizes zur Auswahl alternativer Modellgleichungen.

Die Implementierung zur Berücksichtigung unsicherer Modellparameter wird kontinuierlich ergänzt. U. a. wurde für eine von der GRS durchgeführte Unsicherheitsanalyse die Implementierung des Zweiphasen-Multiplikators der Reibung verbessert und an neue Anforderungen angepasst.

### **Zu Schritt 3:** Definition der experimentellen Basis

Als besonders wichtig für die Definition von Modellunsicherheiten erwies sich die experimentelle Datenbasis. Die experimentelle Datenbasis muss adäquat sein für die Modelle/Korrelationen, deren Unsicherheiten quantifiziert werden sollen.

Bei der Definition der experimentellen Datenbasis müssen mehrere Aspekte beachtet werden:

## 1. Umfang und Charakter der Datenbasis

Hierbei sind die wichtigsten Festlegungen:

- Soll die experimentelle Datenbasis allgemein oder spezifisch definiert sein? Spezifisch bedeutet eine detaillierte Aufteilung, für jede Korrelation separat. Demgegenüber heißt allgemein übergreifend für ein ganzes Modell wie z. B. das Wärmeübergangspaket.
- Soll die experimentelle Datenbasis abhängig sein von bestimmten Anwendungsbereichen (Störfallphasen) oder von bestimmten thermohydraulischen Zuständen, definiert als Funktion thermohydraulischer Parameter?

Die zur experimentellen Basis getroffenen Festlegungen haben einen maßgeblichen Einfluss auf die Güte der zu quantifizierenden Modellunsicherheiten. Insofern beeinflusst bereits die Auswahl der Experimente das mögliche Ergebnis der Quantifizierung. Generell wird empfohlen, eine möglichst spezifische Quantifizierung vorzunehmen. Dies bedeutet z. B., Strömungen bei hohen Dampfgehalten (Tropfen-Strömung) separat von sonstigen Strömungsformen zu behandeln. Üblicherweise wird auch zwischen Phänomenen bei niedrigen und hohen Drücken unterschieden.

## 2. Aufteilung der experimentellen Datenbasis

Die experimentelle Datenbasis muss in zwei unabhängige Teile unterteilt werden: ein Teil zur Quantifizierung und ein zweiter Teil zur Validierung der Modellunsicherheiten (siehe auch Schritt 6). Eine typische und empfohlene Aufteilung der experimentellen Datenbasis ist die folgende:

Datenbasis zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten:

- Einzeleffekttests – diese sind bevorzugt für die Quantifizierung, da bei Einzeleffektexperimenten keine Überlagerung von Modelleinflüssen vorliegt. Außerdem ist die Quantifizierung auf Basis von Einzeleffektexperimenten relativ einfach.

- Combined Effekt Tests (CETs) – diese werden für die Quantifizierung verwendet, wenn Phänomene komplex sind und mit Einzeleffekttests nicht wiedergegeben werden können oder wenn keine Einzeleffekttests vorliegen.

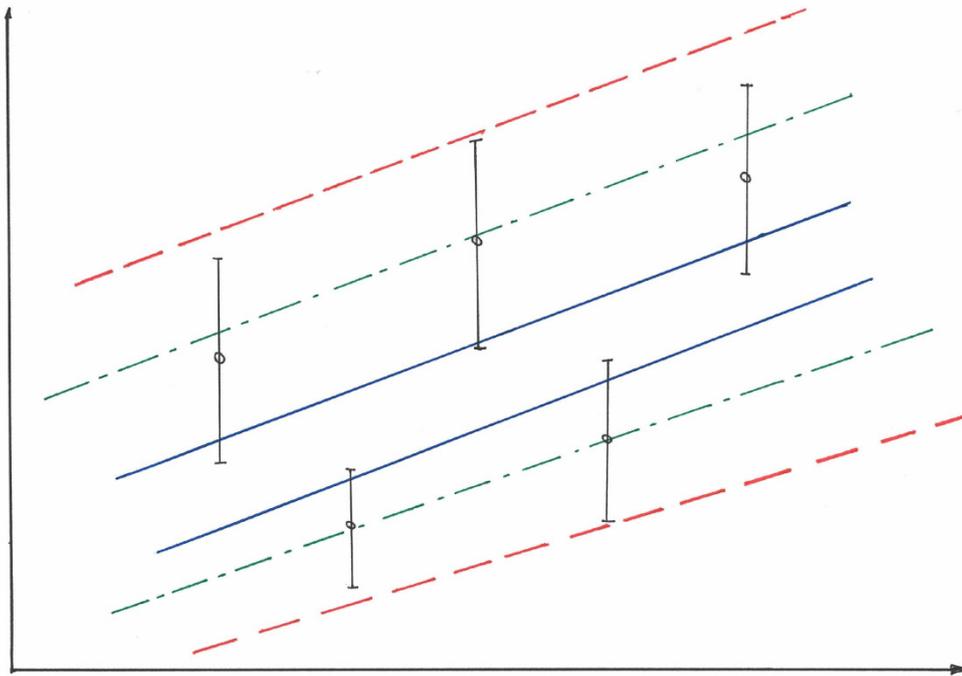
Datenbasis für die Validierung von Modellunsicherheiten:

- Integraltests – Bevorzugte Tests für die Validierung von quantifizierten Modellunsicherheiten. Validierung auf Basis von Integraltests gibt Auskunft nicht nur über Gültigkeit der ermittelten Unsicherheitsbereiche, sondern auch über die Vollständigkeit der identifizierten und angewandten Parameter.
- Combined Effekt Tests (CETs) – Validierung auf Basis von CETs ist genauer und weniger anfällig für Verzerrungen aufgrund von Kompensationseffekten, die bei zu vielen unsicheren Parametern auftreten können.

Ein Beispiel für dieses vorgeschlagene Vorgehen zeigt die Unsicherheitsanalyse in Kapitel 3.2. Während einfache Vorversuche zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten herangezogen wurden, diente ein komplexerer Test zu deren Prüfung.

### 3. Berücksichtigung von experimentellen Unsicherheiten

Ein weiterer Aspekt bezieht sich auf die Frage der Berücksichtigung von experimentellen Unsicherheiten. Eine Nichtberücksichtigung der Messunsicherheiten, sprich die Annahme exakter Messwerte, hat einen negativen Einfluss auf die quantifizierten Unsicherheitsintervalle /SKT17/. Allerdings ist die Vorgehensweise hinsichtlich der Berücksichtigung von experimentellen Unsicherheiten noch nicht eindeutig geklärt. Das Problem verdeutlicht Abb. 3.1. Mit dem Verständnis der Reaktorsicherheit bietet eine Approximation der Modellunsicherheit, die die Messung komplett mit Messunsicherheit umfasst, eine konservative Schätzung der Toleranzgrenzen (rote Linien in Abb. 3.1). Eine Vorgehensweise, bei der die Approximation die Messunsicherheiten nur überschneidet (blaue durchgezogene Linien in Abb. 3.1), ist eher eine für die Modellvalidierung typische Situation und weniger für die Quantifizierung geeignet. Aus Sicht eines *Best-Estimate-Ansatzes* ist die beste Lösung ein sog. *Best-Fit* der gemessenen Daten, bei dem nur die tatsächlichen Messergebnisse von dem Intervall der Modellunsicherheit eingeschlossen werden.



**Abb. 3.1** Wert und Unsicherheit einer beliebigen Messgröße und ihre Berücksichtigung bei der Quantifizierung von Modellunsicherheiten. Rot: Maximale Modellunsicherheit umfasst Messungen komplett mit Messunsicherheiten; Blau: Minimale Modellunsicherheit, überschneidet alle Messunsicherheiten; Grün: Best-Fit zu den gemessenen Werten

Dabei muss beachtet werden, dass Messungen mit wachsender Messunsicherheit weniger Information beitragen. Sollte die Messunsicherheit die erwartete (vorläufig festgelegte) Unsicherheit des Modells erreichen oder sogar übersteigen, kann das Experiment und die enthaltene Information nicht mehr positiv zur Quantifizierung der Genauigkeit des Modells beitragen. In diesem Fall ist das Experiment für die Quantifizierung der Modellunsicherheit ungeeignet.

#### **Zu Schritt 4:** Quantifizierung von Modellunsicherheiten

Die bevorzugte Methodik der Quantifizierung von Modellunsicherheiten erfolgt auf der Basis von Einzeleffektexperimenten. Diese Art der Quantifizierung hat wesentliche Vorteile:

- Die zugrundeliegende mathematische Prozedur der Quantifizierung ist vergleichsweise einfach
- Der Fall einer Kompensation von Fehlern tritt nicht auf

Die Quantifizierung erfolgt durch Vergleich der gemessenen Daten mit Modellvorausagen. Entspricht die Messung unmittelbar der von dem Modell berechneten Größe, so ist ein direkter Vergleich möglich. Wenn ein direkter Vergleich nicht unmittelbar möglich ist, aber dennoch eine Messung einem spezifischen Modell zugeordnet werden kann, (z. B. bei der Quantifizierung der Drift-Modell-Unsicherheit auf Basis gemessener Dampfvolumengehalte oder Druckdifferenzen), so wird mittels eines Iterationsverfahrens die Drift-Geschwindigkeit derart angepasst, dass der berechnete Wert dem gemessenen entspricht. Die beiden Prozeduren sind in /SKT18/ beschrieben. Beide Ansätze sind aus mathematischer Sicht einfache iterative Vorgehensweisen, für deren Lösung geeignete Methoden abgeleitet und erfolgreich eingesetzt wurden.

Die Alternative zu der Quantifizierung auf Basis von Einzeleffektexperimenten ist die Quantifizierung auf Basis von CETs. Die Methodik der Quantifizierung auf der Basis von CETs ist deutlich komplizierter. Es müssen gleichzeitig mehrere Parameter berücksichtigt und quantifiziert werden. Daher wird diese Art der Quantifizierung nur angewandt, wenn keine geeigneten Einzeleffektexperimente zur Verfügung stehen. In der letzten Zeit wurden einige Methoden für die Quantifizierung auf der Basis von CETs vorgeschlagen /HEO14/, /KOV15/. Die GRS hat eine eigene Methodik auf Basis des *Inverted Uncertainty* Ansatzes entwickelt. Hierbei wird eine mittels eines Samples erzielte Ergebnisbandbreite stufenweise durch Reduzierung des Sampleumfangs verringert, bis die Messdaten in optimaler Form von der Ergebnisbandbreite abgedeckt werden. Das Verfahren wurde in /SKT17/ für die Bestimmung von für den Refloodingvorgang relevanten Modellunsicherheiten erfolgreich angewandt und mit einem simplen *trial-and-error*-Ansatz für die Bestimmung der Unsicherheitsbandbreiten verglichen. Mit dem neuen verbesserten Verfahren konnten zuverlässig, im Vergleich zum alten Vorgehen leicht korrigierte, Unsicherheitsintervalle ermittelt werden.

Eine wichtige Frage bei der Quantifizierung der Unsicherheiten von komplexen Modellen ist, wie detailliert die Bestimmung der Modellunsicherheiten erfolgen soll. Generell gilt, dass eine detaillierte Quantifizierung bessere Ergebnisse liefern kann /SKT17/, d. h. eine spezifische Quantifizierung von einzelnen Korrelationen, wie z. B. bei der Zwischenphasenreibung die Quantifizierung der Unsicherheit jeder einzelnen Zwischenphasenreibungskorrelation für jede Strömungsform separat und zusätzlich die Quantifizierung der Unsicherheit aller Übergangskriterien. Dieses Vorgehen liefert ein

zuverlässigeres Ergebnis als die einheitliche Quantifizierung des gesamten Modells, erfordert aber auch eine geeignete experimentelle Basis.

### **Zu Schritt 8:** Dokumentation der quantifizierten Modellunsicherheiten

Die Quantifizierung der Eingabeunsicherheiten wird üblicherweise im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse durchgeführt. Für testspezifische Unsicherheiten wie z. B. bzgl. der Anfangs- und Randbedingungen ist dies nötig. Unsicherheiten der physikalischen Modellierung sind jedoch programmspezifisch. Letzteres spricht für eine zentrale Quantifizierung und Dokumentation der Modellunsicherheiten im Rahmen der Programmentwicklung. Dies hat unterschiedliche Vorteile:

- Nutzung umfangreicher Kenntnisse aus der Modellentwicklung
- Zugriff auf eine breitere experimentelle Datenbasis
- Reduzierung des Aufwands aufgrund wiederholter Bestimmung von Unsicherheiten, allerdings verbunden mit einem etwas erhöhten Aufwand bei der Programmentwicklung und -validierung

Ein Nachteil wäre, dass die Quantifizierung der Modellunsicherheiten weniger problemspezifisch ist. (Bei Bedarf könnte diese jedoch wie bisher im Rahmen der Unsicherheitsanalyse angepasst werden.)

### **3.1.2.3 Überprüfung der Methodik**

Einen sehr interessanten Fall stellt die Quantifizierung der Unsicherheit des kritischen Ausströmungsmodells dar. Die Validierung der bisherigen Modellimplementierung in ATHLET lässt den Schluss zu, dass entweder das Modell selbst oder die ermittelten Unsicherheitsbereiche nicht zufriedenstellend sind. Das Modell wurde daher erweitert, indem ein Phasen-Schlupf-Modell zur Berechnung der Zwischenphasengeschwindigkeit (siehe Kapitel 2.3.3) implementiert wurde. Ziel ist nun, die Unsicherheit des erweiterten Modells mittels der neuen Methodik zu quantifizieren und zu validieren. Dies erfolgt im weiteren Verlauf des SAPIUM-Projekts, wobei alle Vorgaben des im Rahmen von SAPIUM zu erstellenden *Best Practice Guides* strikt befolgt werden sollen. Die Ergebnisse sollen mit Ergebnissen anderer Teilnehmern des SAPIUM-Projekts für deren Modelle der kritischen Ausströmung verglichen werden. Die Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden im Abschlussbericht von SAPIUM dargestellt. Sie liefern nicht nur ei-

ne Quantifizierung und Validierung der Unsicherheiten des erweiterten ATHLET-Modells zur kritischen Ausströmung, sondern sind auch Demonstration und Test der entwickelten Methodik zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten.

### **3.2 Unsicherheitsanalyse zum Experiment NACIE-UP – Fundamental Test 1**

In der GRS wurden in der Vergangenheit zahlreiche Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zu ATHLET Simulationsergebnissen durchgeführt. Basierend auf Erfahrungen aus der Modellentwicklung und anhand von Analysen zu Einzeleffekt- und Integralversuchen wurden hierzu potentiell wichtige unsichere Modelleingangsparameter identifiziert sowie Unsicherheitsintervalle und -verteilungen quantifiziert. Zu Unsicherheiten der für die Simulation innovativer Reaktorkonzepte neu implementierten Modelle liegen bislang jedoch nur wenige Erfahrungen vor.

Zielsetzung dieses Arbeitspunktes war die Unsicherheitsanalyse zu einer ATHLET-Nachrechnung eines in der NACIE-UP-Versuchsanlage mit Flüssigmetallkühlung durchgeführten Experiments. Im Rahmen der Analyse wurde die Identifikation und Quantifizierung von einigen unsicheren Modelleingangsparametern vorgenommen, die für Analysen thermohydraulischer Phänomene in Kreisläufen mit Flüssigmetall als Arbeitsmedium relevant sind und in der Vergangenheit in ATHLET implementiert wurden. Die ermittelten Unsicherheiten und Verteilungen sollen in der Zukunft als Basis für Unsicherheitsanalysen zu Generation IV Reaktorsystemen herangezogen werden. Darüber hinaus lässt sich grundsätzlich anhand der Ergebnisse einer Unsicherheitsanalyse Weiterentwicklungsbedarf in ATHLET im Hinblick auf die Simulation innovativer Reaktorkonzepte ableiten.

#### **3.2.1 Auswahl des Experiments und Qualifizierung des Referenzdatensatzes**

Für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurde ein Experiment aus der italienischen NACIE-UP (**N**atural **C**irculation **E**xperiment **U**pgrade) Anlage mit Blei-Bismuth-Eutektikum (LBE) als Arbeitsmedium gewählt. Die Versuchsdaten wurden der GRS über das SESAME-Projekt im Rahmen des europäischen Horizon 2020 Programms zur Verfügung gestellt /PIA16/. Die Versuche haben den Vorteil, dass die GRS im Rahmen des SESAME-Projekts an den Vorausrechnungen der Experimente beteiligt war, sodass umfangreiche Informationen bezüglich der Anlage und des durchgeführten

Experiments zu Verfügung stehen /FOR16/, /PIA13/. Darüber hinaus tritt in einem Teil der Versuchsanlage Zweiphasenströmung (Flüssigmetall mit Argon-Gas) auf, sodass auch die Eignung der in ATHLET implementierten Zweiphasenmodelle für Flüssigmetall auf Basis der Versuche geprüft werden können. Für die Unsicherheitsanalyse konnte auf den Referenzdatensatz aus den Vorausrechnungen zurückgegriffen werden, der noch umfangreich verbessert wurde.

### **3.2.1.1 Die Versuchsanlage NACIE-UP**

Die experimentelle Anlage besteht aus dem Primärkreis mit LBE als Arbeitsmedium und dem Sekundärkreis, der Wasser als Kühlmittel verwendet. Die Zirkulation im Primärkreis kann durch Aufheizen des Kühlmediums im Kernbündel und/oder Einspeisung des neutralen Gases Argon im aufsteigenden Strang (Riser) der Anlage erzeugt werden (Abb. 3.2). Während der Versuche wurden Temperaturen, Drücke und Massenströme in beiden Kreisläufen gemessen.

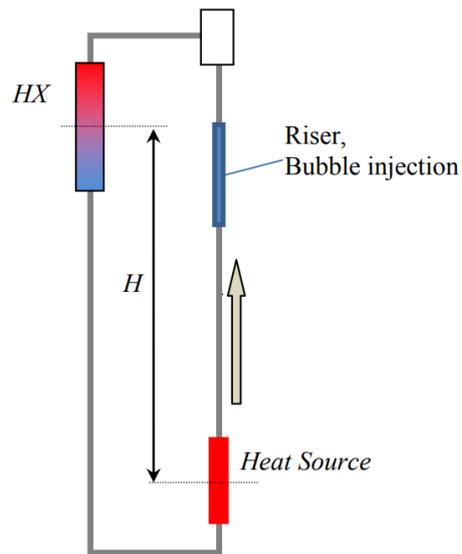
### **3.2.1.2 Versuchsprogramm**

Das betrachtete NACIU-UP Versuchsprogramm wurde in der experimentellen Einrichtung von ENEA R. C. in Brasimone (Italien) durchgeführt. Das Ziel der Untersuchungen (sowohl des Experiments als auch der damit zusammenhängenden numerischen Simulationen) war die Validierung der Rechenprogramme für die Analyse von Heavy Liquid Metal (HLM) gekühlten Reaktoren.

Im Rahmen des Versuchsprogramms wurden zwei vorbereitende und drei grundlegenden Tests durchgeführt. Die zwei vorbereitenden Tests sollten zur Qualifizierung der Eingabedaten (Modellierung der Anlage, der Wärmeverluste, der Zweiphasenströmung im Bereich der Gaseinspeisung etc.) der Rechenprogramme dienen. Die Vorausrechnungen für die grundlegenden Tests wurden im Rahmen eines internationalen Benchmarks durchgeführt. In diesen Tests wurden der Einfluss von Transienten der Kernleistung, der Gaseinspeiserate und des sekundärseitigen Massenstroms auf den Naturumlauf der Primärseite untersucht und die Fähigkeit der Programme zur Nachbildung dieser Phänomene geprüft.

Der grundlegende Test 1, der für die Durchführung der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgewählt wurde, simulierte eine Transiente der Gaseinspeisung bei konstanter Heizung. Die Heizleistung des Bündels betrug 50 kW; die axiale Leistungsver-

teilung war gleichmäßig. In der Anfangsphase des Versuchs betrug der eingespeiste Argonvolumenstrom 20 l/min. Nachdem sich in der Anlage ein stationärer Zustand eingestellt hatte, wurde im Verlauf des Experiments die Argoneinspeisung auf 10 l/min verringert. Der konstante, volumetrische Wasserstrom auf der Sekundärseite betrug 10 m<sup>3</sup>/h. Die konstante Wassereinflauftemperatur lag bei 208 °C /ANG18/.



**Abb. 3.2** Schematische Darstellung der NACIE-UP Anlage /PIA13/

### 3.2.1.3 Erstellung des Referenzdatensatzes

Ein aus den Vorausrechnungen im Rahmen des SESAME-Projekts bereits vorhandener ATHLET-Eingabedatensatz für die NACIE-UP-Anlage wurde überprüft und mit zahlreichen Verbesserungen versehen. Die Verbesserungen wurden auf Basis der beiden vorbereitenden Tests des Versuchsprogramms durch Vergleich der Ergebnisse aus Nachrechnung und Experiment vorgenommen.

Die wichtigsten Änderungen/Verbesserungen waren:

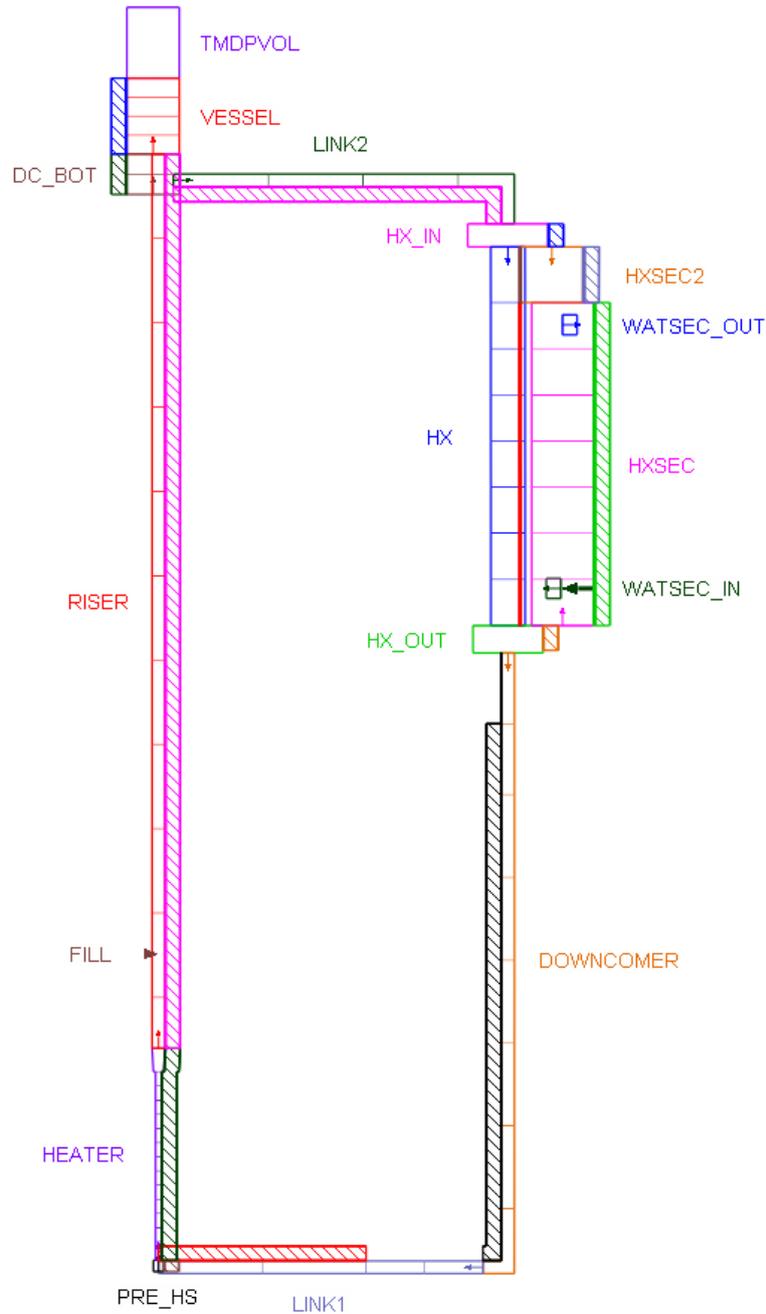
- Einstellung eines höheren LBE-Füllstands im Kompensations-Behälter auf der Primärseite. Dadurch konnte eine bessere Übereinstimmung mit Druckmessungen in dem unmittelbar unter dem Kompensations-Behälter liegenden Strang erreicht werden.
- Ein Teil der Primärkreisleitung unmittelbar unterhalb des Wärmetauschers wurde ohne Isolierung modelliert. Dadurch konnte eine bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Temperaturen in diesem Bereich erzielt werden. Die

Maßnahme wurde auf Basis eines Bildes in der Beschreibung der experimentellen Anlage vorgenommen, welches auf ein Fehlen der Isolierung in diesem Bereich schließen ließ.

- Reduktion der Dicke der Isolationsschicht in dem Bereich des thermischen Massenstrommeters: Messungen der Temperaturen in diesem Bereich zeigten signifikante Wärmeverluste, die auf diese Weise simuliert werden konnten.
- Eine Verbesserung der Modellierung des Wärmetauschers wurde anhand von detaillierten technischen Zeichnungen, die bei der Voraussrechnung noch nicht zur Verfügung standen, vorgenommen.

Die für die Referenzrechnung verwendete Nodalisierung der NACIE-UP-Anlage zeigt Abb. 3.3. Der Bereich des beheizten Bündels ist in 13 axiale Zonen unterteilt. Das Leitungsnetzwerk der NACIE-UP-Anlage ist mit insgesamt 18 Thermofluidobjekten nachgebaut; davon 4 „Branches“ und 14 „Pipes“. Die Thermofluidobjekte wurden in 70 Control-Volumina und 70 Leitungen unterteilt.

Die wärmeleitenden Strukturen wurden mit Hilfe von 14 Wärmeleitobjekten nachgebildet, die in 80 Volumina mit 297 Schichten unterteilt wurden.



**Abb. 3.3** ATHLET Geometriemodell und Nodalisierung der NACIE-UP Anlage

### 3.2.2 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Der auf Basis der beiden Vorversuche modifizierte und qualifizierte Eingabedatensatz der NACIE-UP-Anlage wurde benutzt, um eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum grundlegenden Test 1 durchzuführen.

### 3.2.2.1 Auswahl und Quantifizierung der unsicheren Eingabeparameterwerte

Im Zuge der Festlegung der Unsicherheiten von Modelleingangsparametern wurden die potentiell wichtigen Eingangsunsicherheiten identifiziert und quantifiziert. Die Arbeiten basierten auf einer Literaturrecherche sowie Sensitivitätsrechnungen der Vorversuche aus der NACIE-UP Anlage.

Es wurde eine Liste von 21 potentiell wichtigen Eingabeunsicherheiten erstellt und deren Verteilungen ermittelt. Die potentiell wichtigen Eingabeunsicherheiten sind in Tab. 3.1 aufgelistet. Für die Quantifizierung der Unsicherheiten der Anfangs- und Randbedingungen sowie der Wärmeverluste wurden Angaben aus der Anlagen- und Versuchsbeschreibung verwendet, aber auch Erkenntnisse aus der Auswertung der Nachrechnungen der Vorversuche. Die Unsicherheiten der Stoffwerte oder Wärmeübergangskorrelationen von LBE basieren auf Informationen aus der Literatur /OEC07/.

Im Fall der ATHLET-eigenen Korrelation für die Drift-Geschwindigkeit in der vertikalen Riser-Sektion erfolgte die Quantifizierung anhand des Vergleichs der Nachrechnungen der Vorversuche mit den gemessenen Daten. Hierfür wurde die Druckdifferenz in dem Abschnitt des vertikalen Strangs, in den das Gas eingespeist wurde und somit zweiphasige Strömung herrschte, herangezogen. Die Druckdifferenz ist (neben der Dichte des LBE und des eingespeisten Argons) wesentlich von dem Gasgehalt in dem Zweiphasengemisch abhängig. Da beim Naturumlauf die Fluidgeschwindigkeiten klein sind, sind die Druckverluste auf Grund von Wandreibung vernachlässigbar.

In der ATHLET-Eingabe wurde der Multiplikationsfaktor für die Relativgeschwindigkeit derart variiert, dass bei allen in den vorbereitenden Experimenten eingestellten Gas-einspeiseraten (und daraus resultierenden Gasgehalten) Übereinstimmung der berechneten Druckdifferenz mit den Messdaten erzielt wurden. Auf Basis des angepassten Multiplikationsfaktors konnte somit ein Unsicherheitsbereich der zugrundeliegenden Driftkorrelation für die in den NACIE-UP Experimenten vorherrschenden Bedingungen ermittelt werden.

Tab. 3.1 Unsichere Eingabeparameter mit Quantifizierung für den NACIE-UP Test 1

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Ranges		Referenz	Verteilung	Quantifizierung
				Min.	Max.			
<b>Modellunsicherheiten</b>								
Drift Modell								
1	ODVPI	Multiplikationsfaktor für relative Geschwindigkeit	Vertikale Rohre	0.4	1.6	1.0	Rechteckverteilung	Stationäre NACIE-UP Versuche mit Gas Einspeisung
Wandreibung								
2	OFRIC	Koeffizient für den Anteil von Flüssigkeit und Gas an der Wandreibung	Alle Leitungen	-3.2	4.0	0.0	Rechteckverteilung	Beurteilung der Experten und experimentelle Erkenntnisse
3	ITPMRS	Zweiphasen-Multiplikator für vertikale Rohre - Modellauswahl	Alle Thermofluid-Objekte mit Zweiphasenströmung	2	5	2	Diskret 2: Martinelli-Nelson – 34% 3: Chisholm – 33% 5: Homogen I – 33%	Auswahl der vorhandenen Optionen
Wärmeübergangskoeffizienten								
4	OHWFC	Einphasige Konvektion im Bündel (Mikityuk Korrelation) – Multiplikationsfaktor; Einphasige Konvektion im Rohr (Cheng et al. Korrelation) - Multiplikationsfaktor	Bündel- und Rohr-Geometrie	0.75	1.33	1.0	Treppenpolygon 0.75-1.0-1.33/ 50%/50%	Literatur /MIK09, CHE06/ und Beurteilung der Experten

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Ranges		Referenz	Verteilung	Quantifizierung
				Min.	Max.			
<b>Stoffwerte</b>								
5	OPVISL	Flüssigkeit Viskosität – Multiplikationsfaktor	Bi-Pb	0.94	1.15	1.0	Rechteckverteilung	Literatur /OEC07/
6	OPLAML	Flüssigkeit Wärmeleitung – Koeffizient	Bi-Pb	0.83	1.17	1.0	Rechteckverteilung	Literatur /OEC07/
7	OPCPL	Flüssigkeit Wärmekapazität – Koeffizient	Bi-Pb	0.98	1.06	1.0	Rechteckverteilung	Literatur /OEC07/
8	WLF_POW	Wärmeleitfähigkeit des Pulvers– Multiplikationsfaktor	Wärmetauscher	0.70	1.10	1.0	Rechteckverteilung	Literatur /ROZ15/
<b>Anlage- und Experimentbedingte Unsicherheiten</b>								
<b>Druckverluste</b>								
9	ZETABU	Formwiderstand im Bündel – Multiplikationsfaktor	Bündel	0.5	2.0	1.0	Treppenpolygon: 0.5-1.0-2.0/ 50% - 50%	Literatur /IDE86/ und ingenieurmäßige Abschätzung
10	ROUOBU	Wandreibung	Bündel	$5.0 \cdot 10^{-6}$	$5.0 \cdot 10^{-5}$	$4.57 \cdot 10^{-5}$ [m]	Logverteilung	Ingenieurmäßige Abschätzung
<b>Wärmeverluste</b>								
11	HTCL1	Multiplikationsfaktor für Wärmeverluste an die Umgebung	Kreislauf	0.5	2.0	1.0	Treppenpolygon: 0.5-1.0-2.0/ 50% - 50%	Auswertung der Messdaten und ingenieurmäßige Abschätzung
12	DS21	Dicke der Isolierungsschicht nach dem Wärmetauscher	Kreislauf	0.001 m	0.10m	0.001 m	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten und Anlagen-Beschreibung
13	DS22	Fiktive Dicke der Isolierungsschicht bei TFM	Thermischer Strömungsmesser	0.001 m	0.01 m	0.01 m	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten
<b>Anfangs- und Randbedingungen</b>								
14	ZML0	Pb-Bi Füllstand im Kompensations-Behälter	Kompensations-Behälter	0.18 m	0.40 m	0.40 m	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Ranges		Referenz	Verteilung	Quantifizierung
				Min.	Max.			
Anfangs- und Randbedingungen								
14	ZML0	Pb-Bi Füllstand im Kompensations-Behälter	Kompensations-Behälter	0.18 m	0.40 m	0.40 m	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten
15	QROD	Wärmeleistung	Heizung	0.99	1.01	1.0	Rechteckverteilung	NACIE Anlagenbeschreibung und Auswertung der Messdaten
16	P0	Systemdruck	Pb-Bi Kreislauf	1.15 bar	1.65 bar	1.40 bar	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten und Ingenieurmäßige Abschätzung
17	TAIR	Umgebungstemperatur für Wärmeverlustberechnung	Alle Außenflächen	20. °C	40. °C	25. °C	Rechteckverteilung	Ingenieurmäßige Abschätzung
18	G-GAS	Argon Massenstrom – Multiplikationsfaktor	Riser	0.945	1.055	1.0	Rechteckverteilung	Experimentatoren
19	G-SEC	Wassermassenstrom – Multiplikationsfaktor	Wärmetauscher	0.98	1.02	1.0	Rechteckverteilung	Auswertung der Messdaten und ingenieurmäßige Abschätzung
20	T-SEC	Wassertemperatur – Additionsfaktor	Wärmetauscher	-1 °C	1 °C	0 °C	Rechteckverteilung	Experimentatoren
21	Q-TFM	TFM Heizung – Multiplikationsfaktor	Thermischer Strömungsmesser	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	Messdaten der Vorversuche

Die ermittelten Input-Unsicherheiten wurden in den bestehenden Referenzdatensatz eingepflegt. Der Datensatz wurde anschließend erneut getestet.

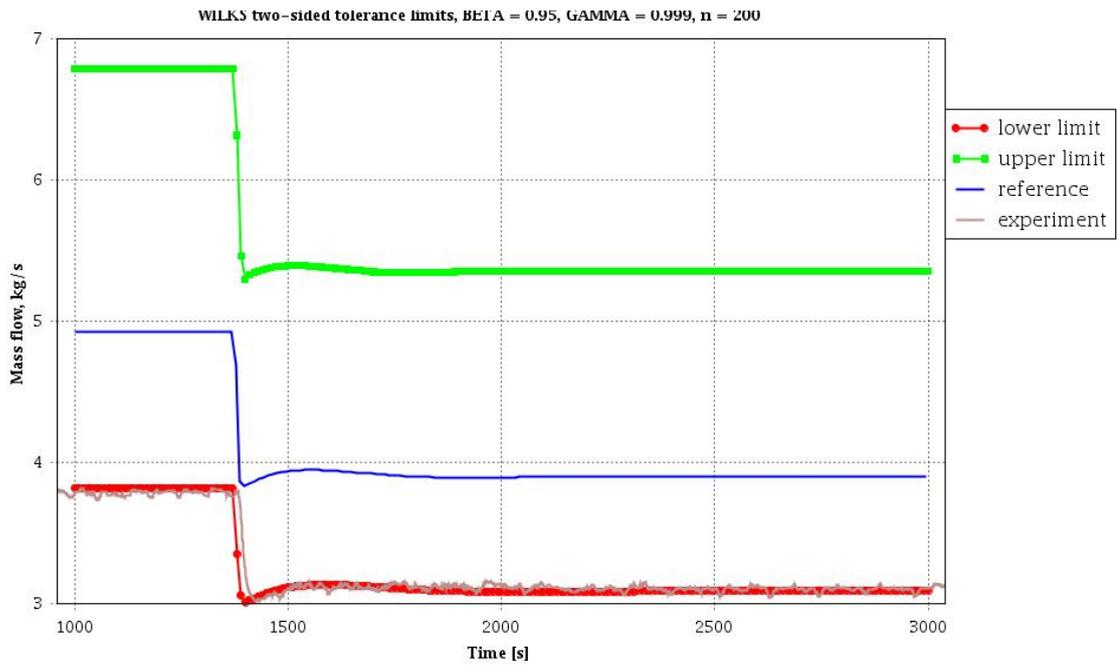
### **3.2.2.2 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse**

Für die durchzuführenden Variationsrechnungen wurde der Vektor von Input-Unsicherheiten mit Hilfe der Software SUSA ausgespielt und anschließend die entsprechenden Simulationsläufe mit ATHLET durchgeführt. Da die simulierte Versuchsanlage relativ einfach und daher die Gesamtgröße der Ausgabedatei nicht groß ist, konnten alle standardmäßig ausgegebenen ATHLET-Plotvariablen zur weiteren Analyse gespeichert werden. Es wurden insgesamt 200 Rechenläufe durchgeführt, die allesamt erfolgreich abgeschlossen werden konnten.

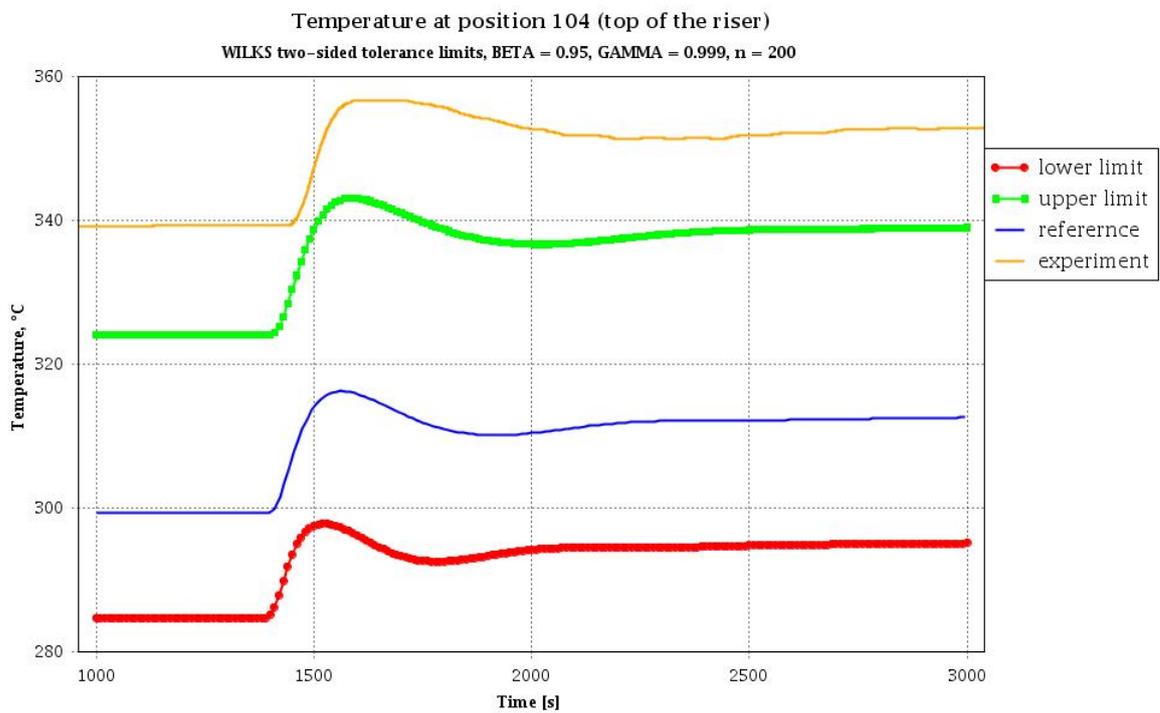
Für sieben als besonders wichtig identifizierte Ergebnisgrößen wurden die Unsicherheiten und Sensitivitätsmaße bestimmt. Anhand dieser ausgewählten Größen kann das zeitabhängige Verhalten der Anlage im Versuchsverlauf am besten beschrieben werden. Es wurden folgende Rechenergebnisse analysiert:

- Massenstrom im Primärkreislauf
- Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Messposition TP104)
- Druck am oberen Ende des Risers (Messposition P105)
- Druckdifferenz entlang des Risers
- Temperaturdifferenz im kalorimetrischen Durchflussmesser
- Primärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher
- Sekundärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher

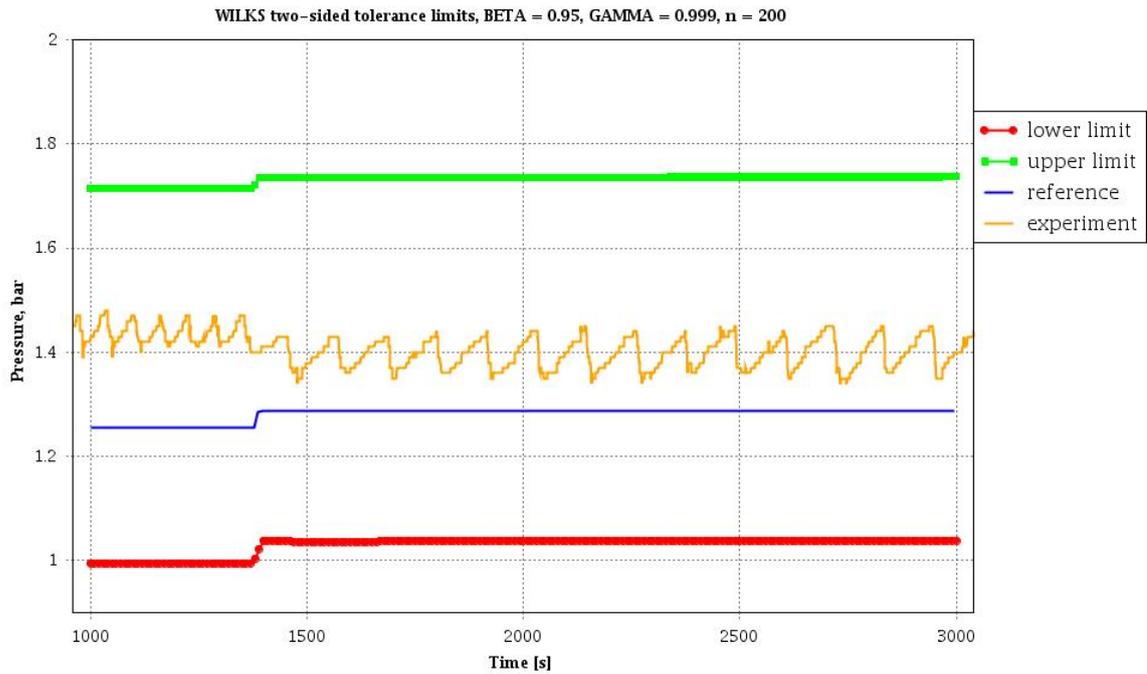
Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse für die ausgewählte Rechenergebnisse sind in den Abbildungen Abb. 3.4 bis Abb. 3.10 dargestellt. Auf den Bildern ist ein Vergleich der experimentellen Daten, der Ergebnissen der Referenzrechnung und des zweiseitigen Toleranzintervalls für die Wahrscheinlichkeit 95% und das Vertrauensniveau 99.9% gezeigt. Die Ergebnisse aller 200 Variationsrechnungen der Unsicherheitsanalyse sind in Abb. 3.11 bis Abb. 3.17 dargestellt.



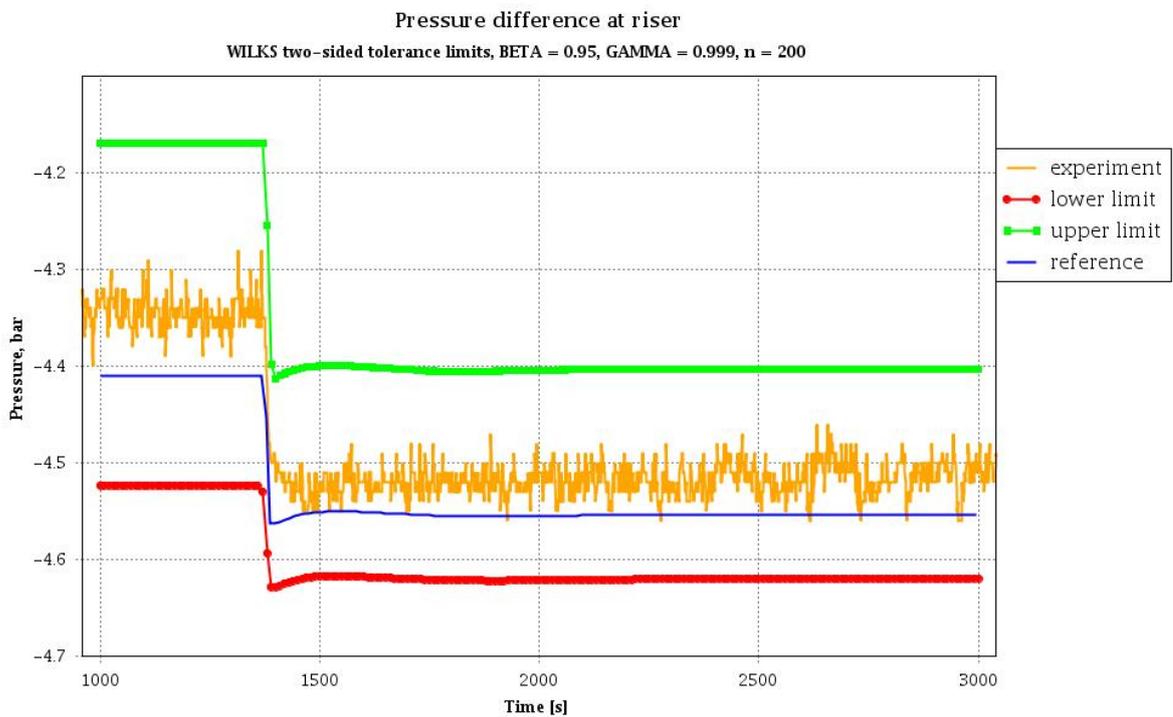
**Abb. 3.4** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den LBE Massenstrom



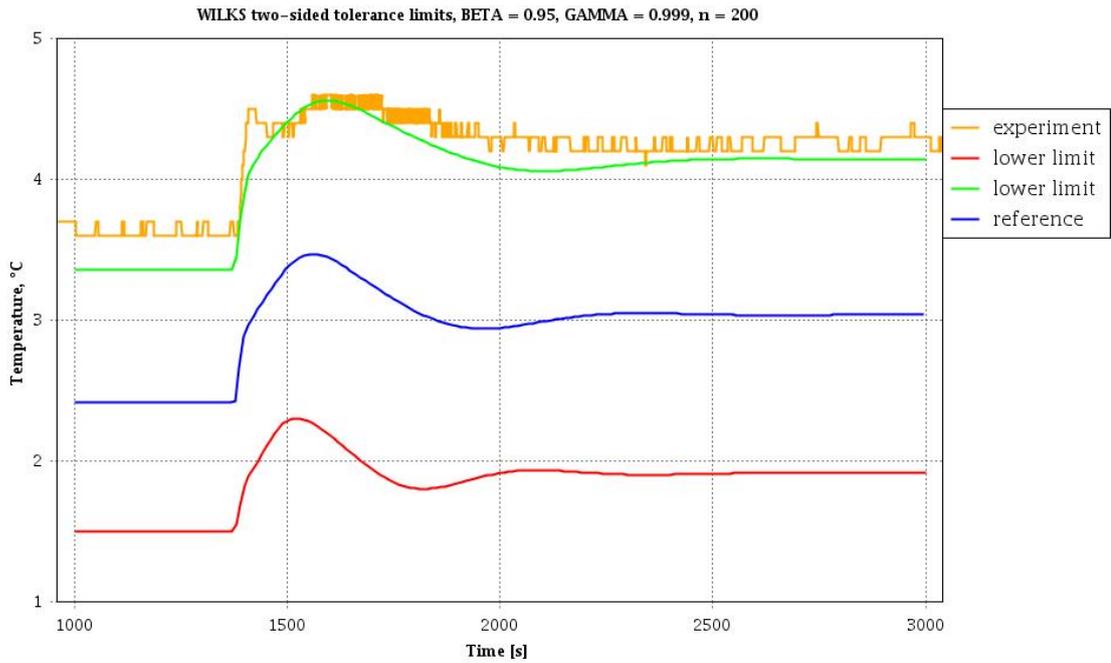
**Abb. 3.5** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die primärseitige Temperatur (TP104)



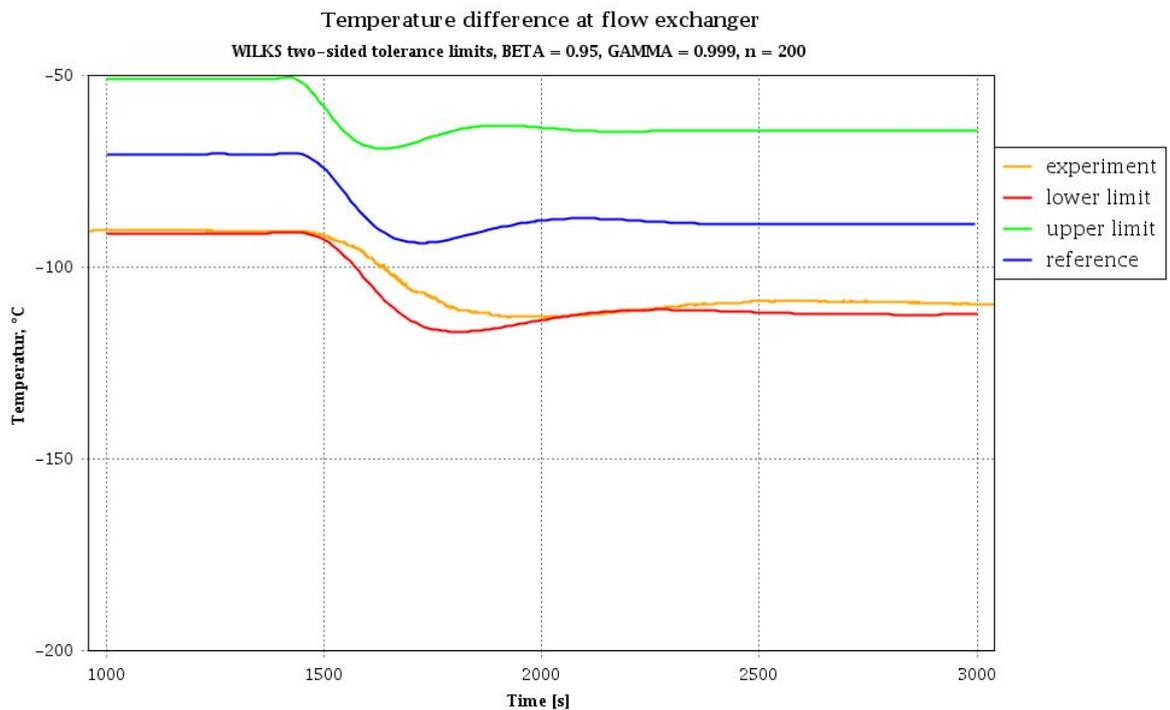
**Abb. 3.6** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den primärseitigen Druck (P105)



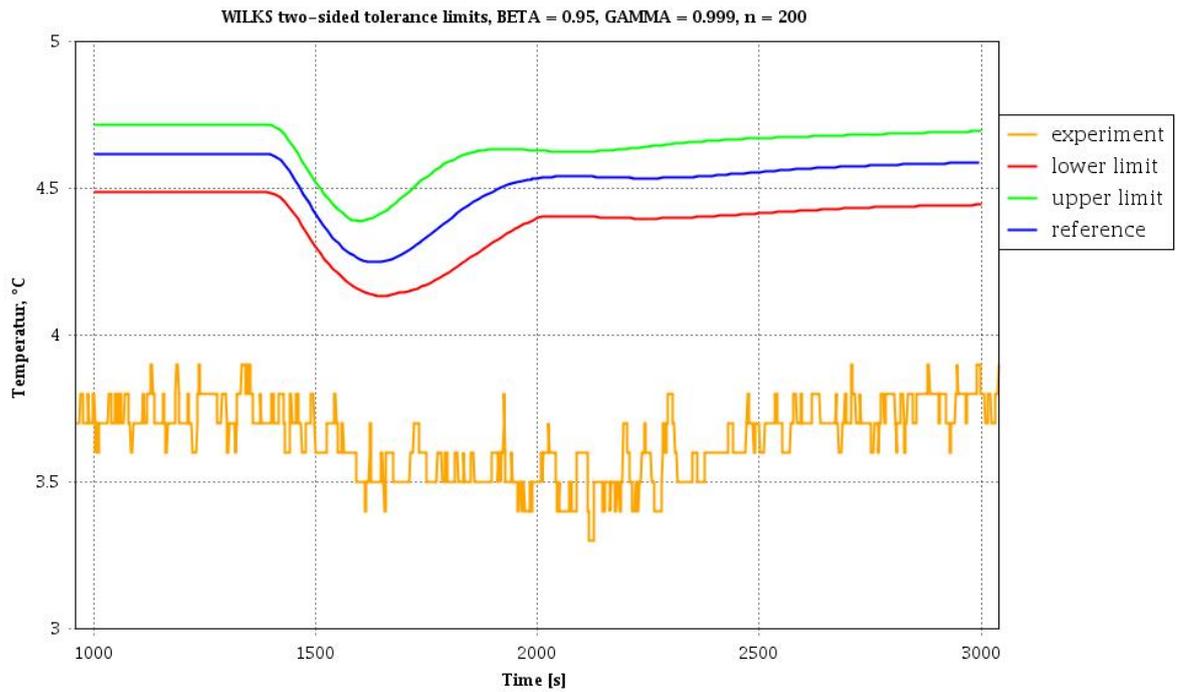
**Abb. 3.7** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den Differenzdruck über dem Zweiphasenbereich im Riser



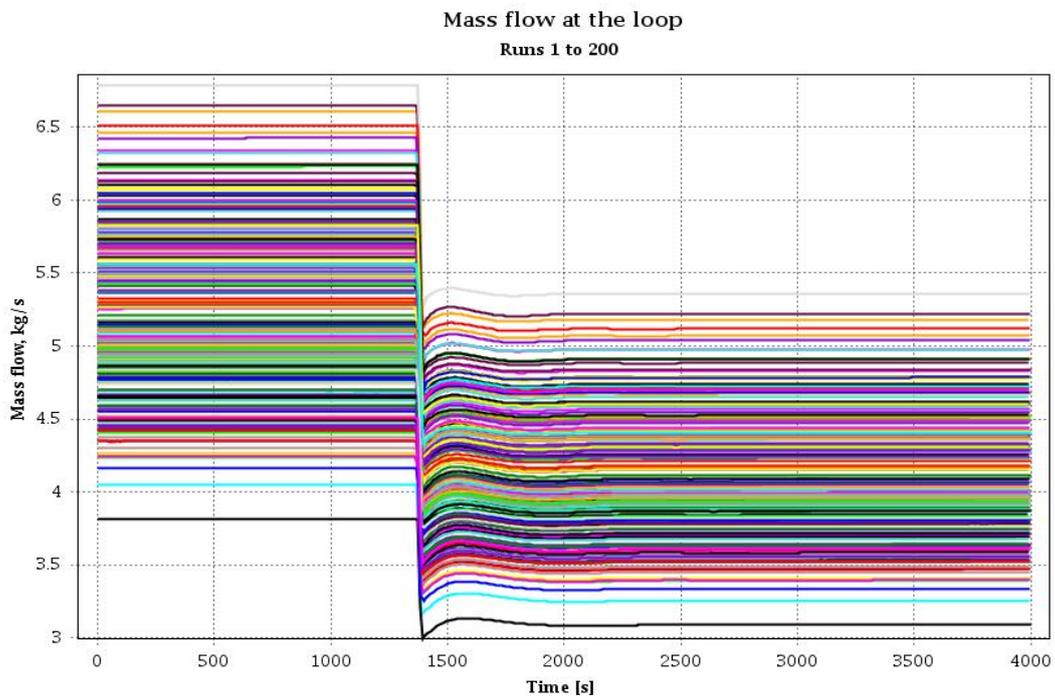
**Abb. 3.8** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die Temperaturdifferenz über den Massenströmmesser



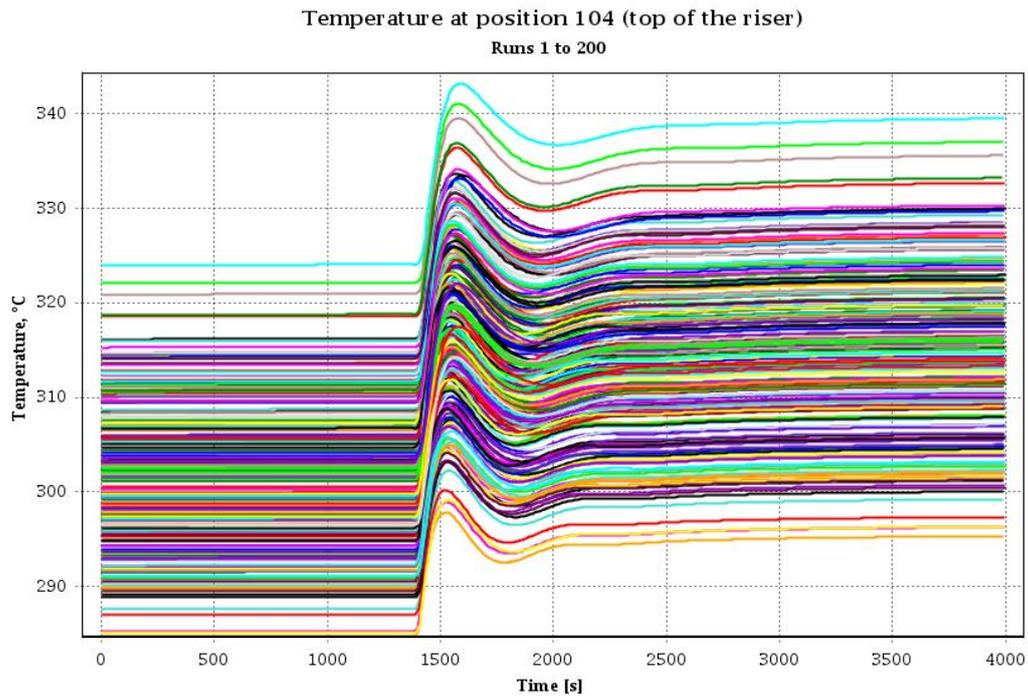
**Abb. 3.9** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die primärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher



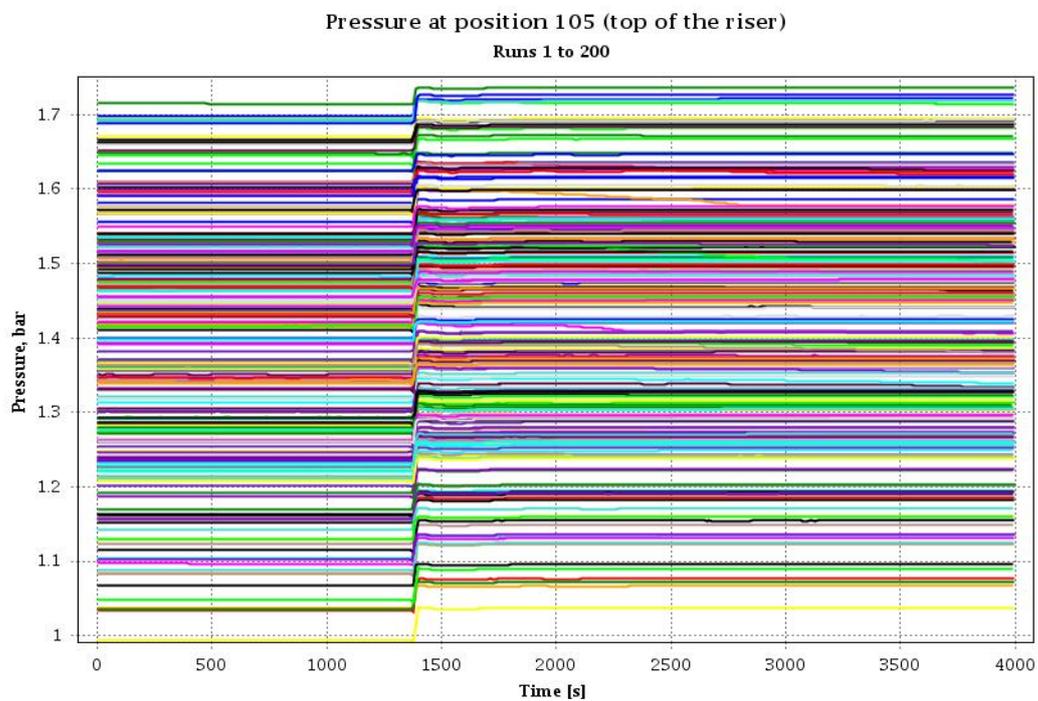
**Abb. 3.10** Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die sekundärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher



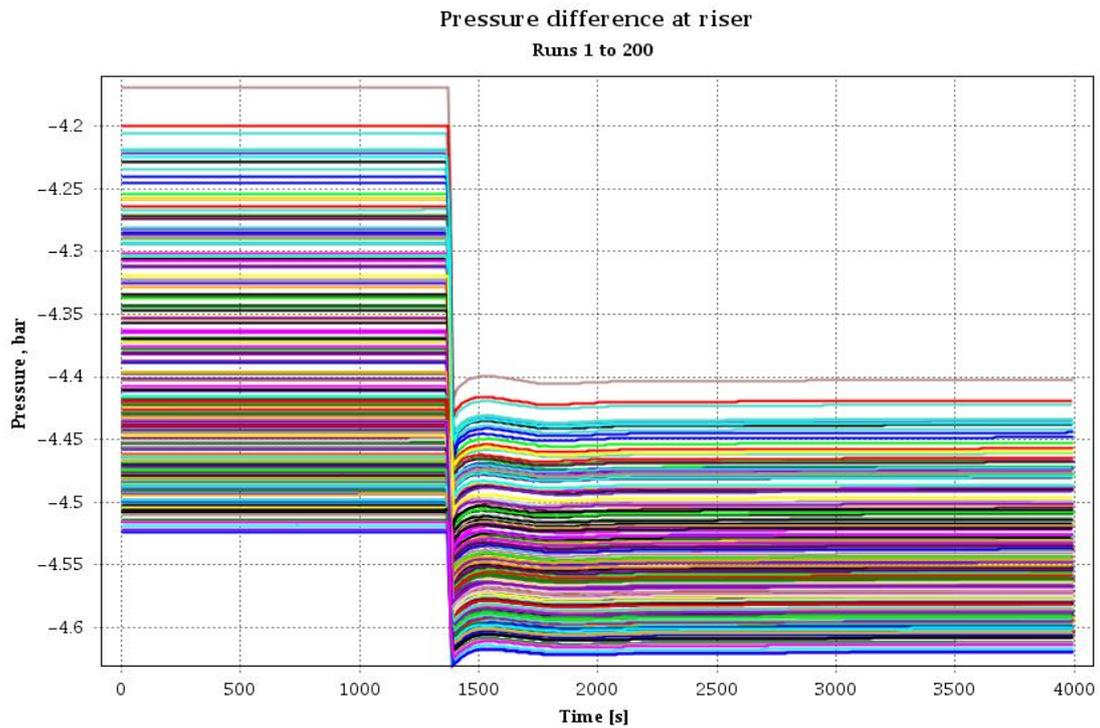
**Abb. 3.11** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen des berechneten Massenstroms im Primärkreislauf



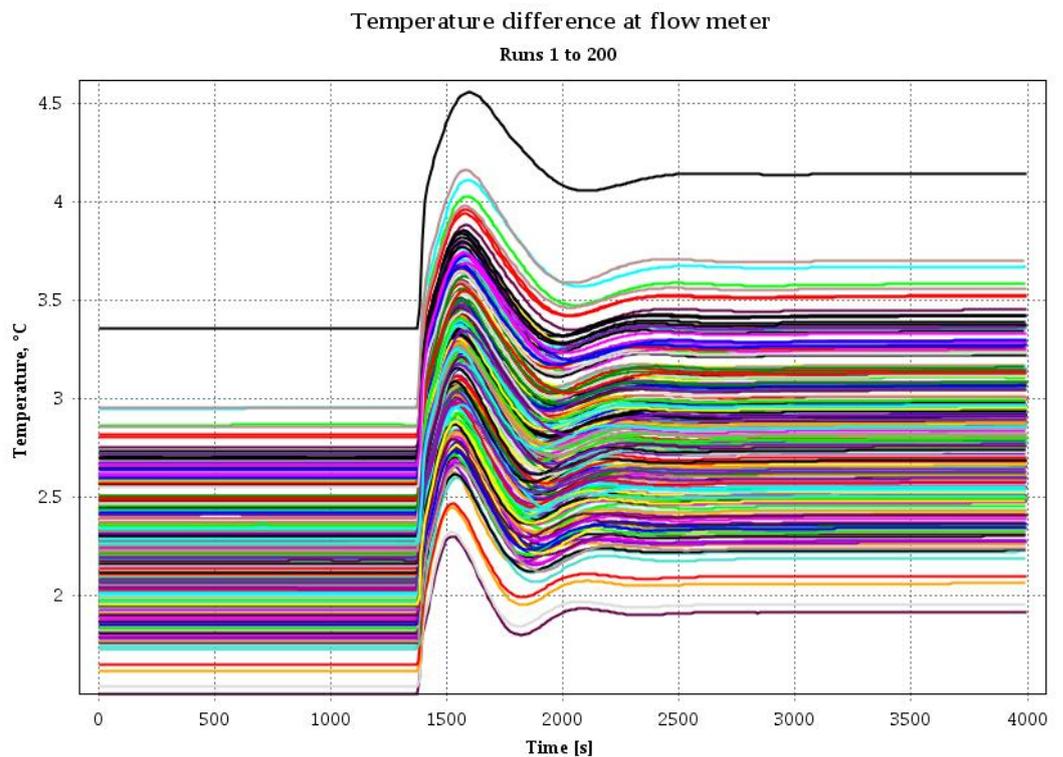
**Abb. 3.12** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Messposition 104)



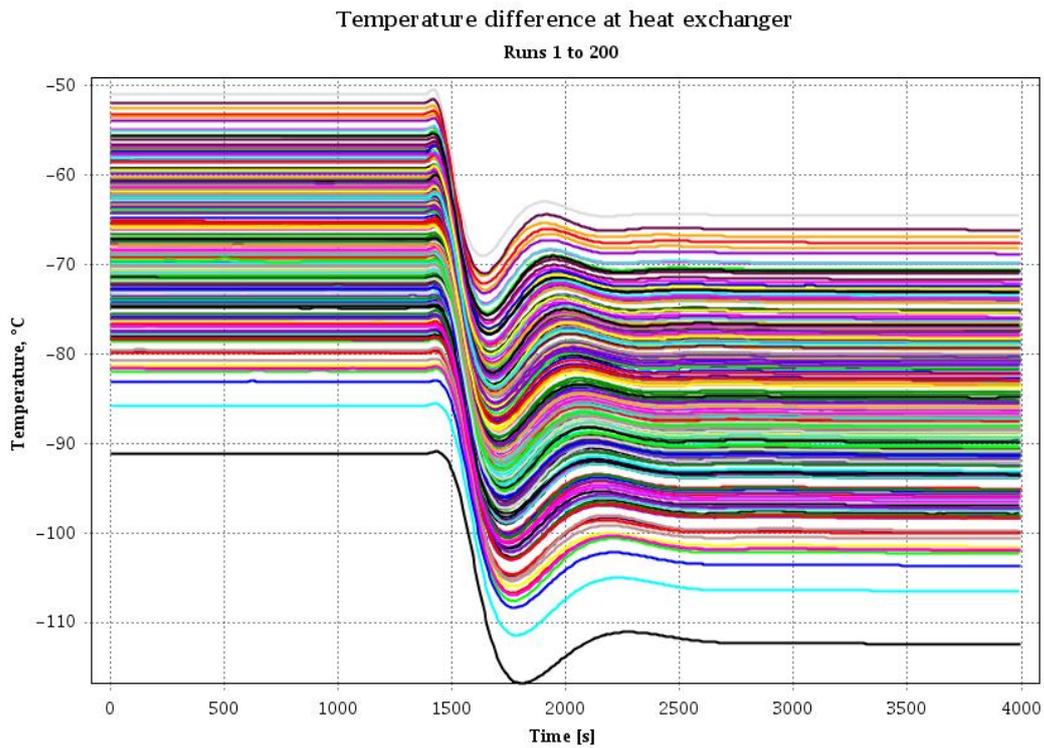
**Abb. 3.13** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen des berechneten Drucks am oberen Ende des Risers (Messposition 105)



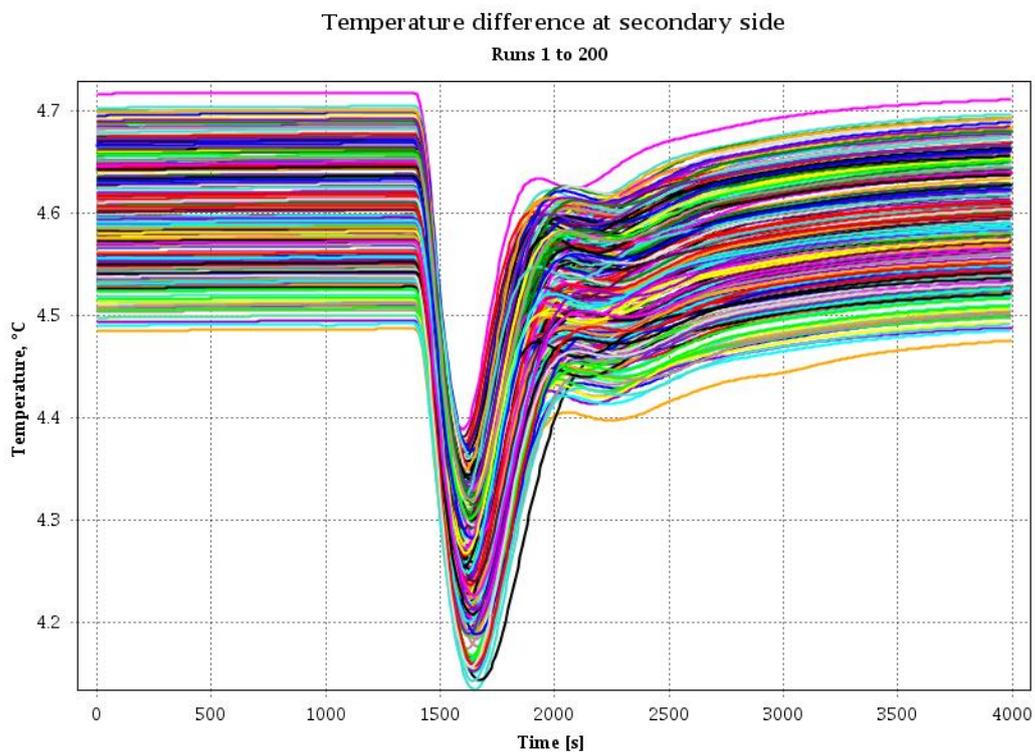
**Abb. 3.14** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Druckdifferenz innerhalb des Risers oberhalb der Gaseinspeiseposition



**Abb. 3.15** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz im kalorimetrischen Durchflussmesser



**Abb. 3.16** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz auf der Primärseite des Wärmetauschers



**Abb. 3.17** Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers

Der Vergleich der berechneten Toleranzintervalle, der Ergebnisse der Referenzrechnung und der experimentellen Daten zeigt, dass sich nicht für alle Größen die Messdaten innerhalb der Toleranzgrenzen befinden. Der im Experiment gemessene Massenstrom befindet sich an der unteren Grenze des Toleranzintervalls. Die gemessene Temperatur in dem oberen Teil des aufsteigenden Strangs der Anlage liegt deutlich unter dem unteren Toleranzlimit.

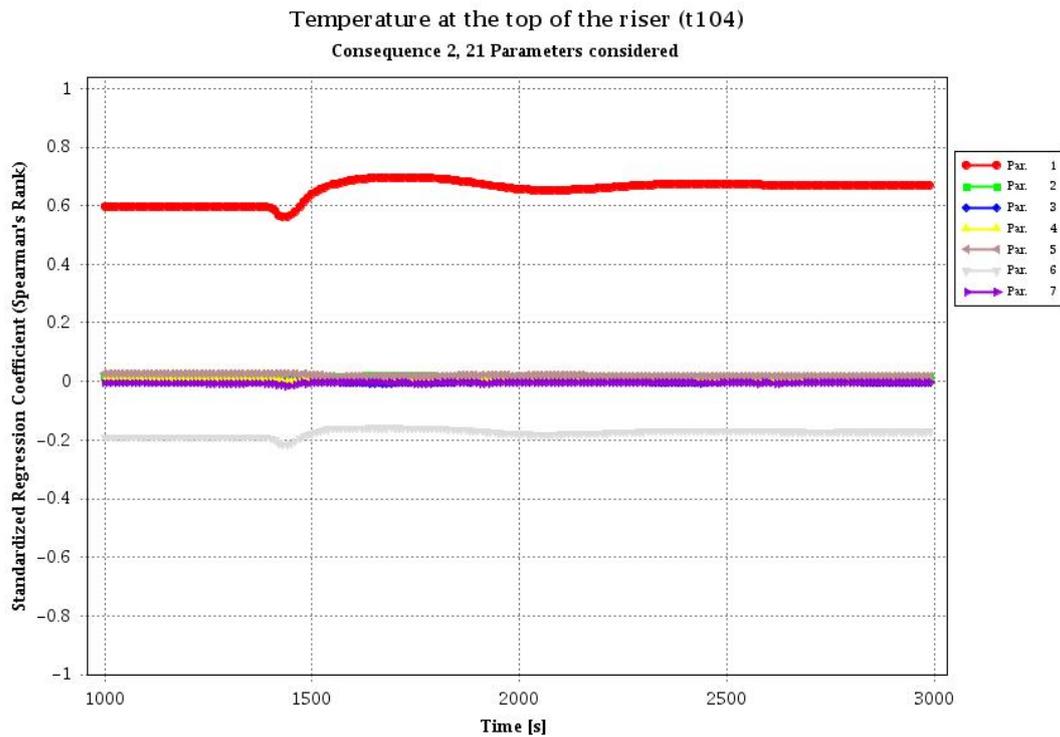
Der Druck in dem oberen Teil des Risers liegt innerhalb des Toleranzintervalls. Auch schließt das berechnete Toleranzintervall für die Druckdifferenz entlang des Risers im Bereich der Zweiphasenströmung oberhalb der Gaseinspeisestelle die gemessenen Daten ein. Da die Druckdifferenz in dem Bereich der zweiphasigen Strömung hauptsächlich von dem Gasgehalt abhängig ist, weist das darauf hin, dass der Unsicherheitsbereich der Korrelation für die Driftgeschwindigkeit korrekt quantifiziert wurde.

Die experimentellen Daten für die Temperaturdifferenz im kalorimetrischen Durchflussmesser liegen über dem oberen Toleranzlimit. Die gemessene Temperaturdifferenz auf der Primärseite des Wärmetauschers liegt an der unteren Grenze des Toleranzintervalls. Die gemessene Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers liegt dagegen deutlich unterhalb des unteren Toleranzintervalls.

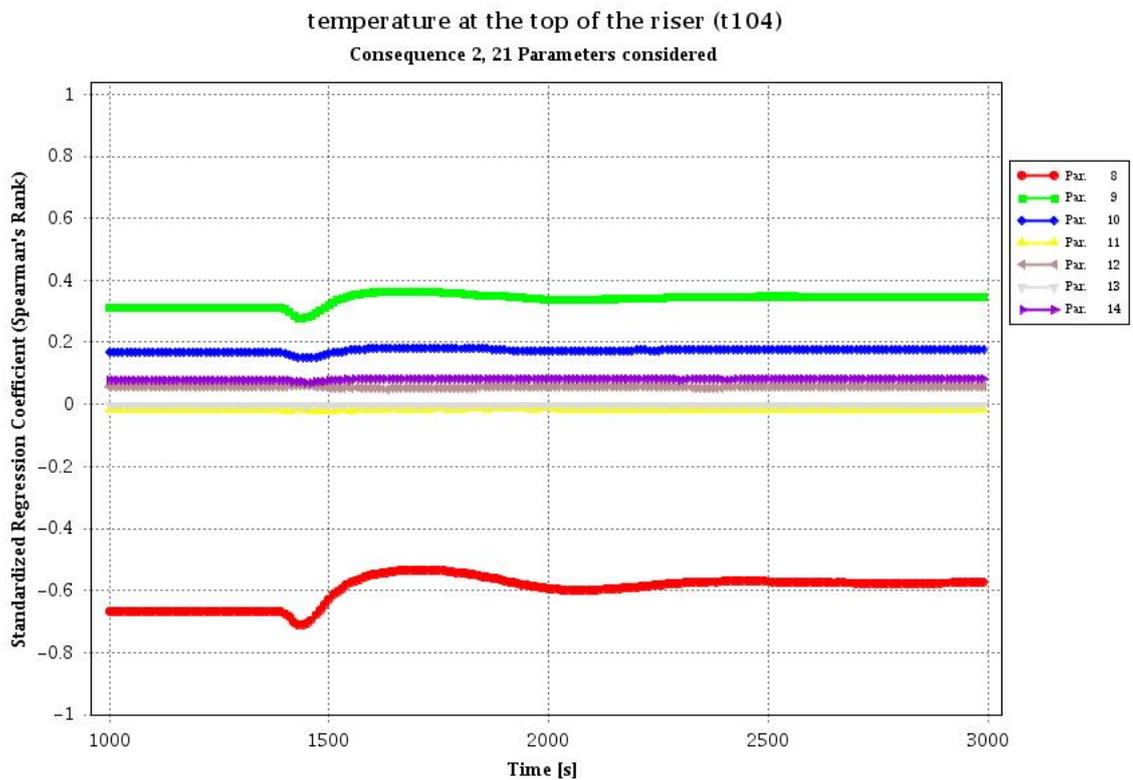
### **3.2.2.3 Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse**

Für die Darstellung der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse wurde hauptsächlich der Spearman's Standard-Regression-Koeffizient verwendet. Da die anderen Sensitivitätsmasse sehr ähnliche bis identische Ergebnisse zeigten es wurde für die Darstellung bei dem Spearman's Standard-Regression-Koeffizient belassen.

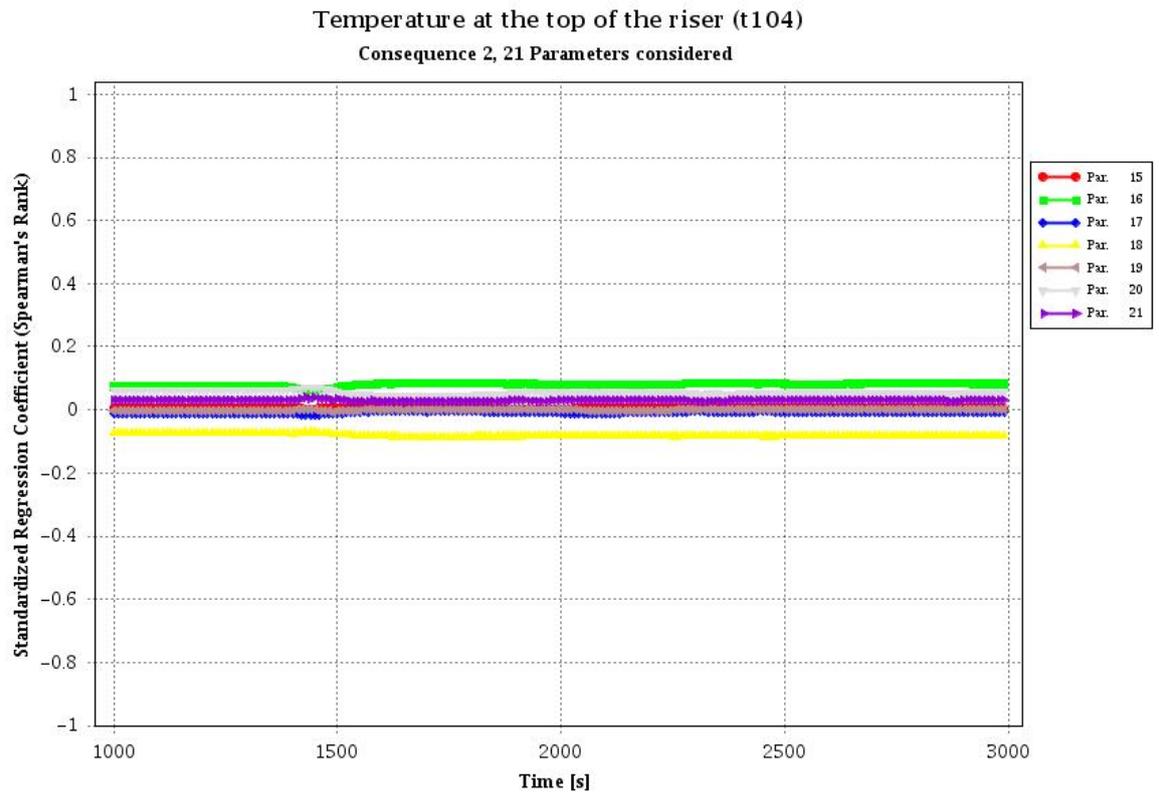
Bei der Sensitivitätsanalyse wurden mehrere Rechenergebnisse, insbesondere die Ergebnisse die für Unsicherheitsanalyse ausgewählt wurden, näher analysiert. Da sich die Erkenntnisse hieraus weitgehend wiederholen, beschränkt sich die Darstellung auf Fluidtemperatur an dem oberen Ende des Risers und Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers, den Rechenergebnisse die größte Abweichung von der experimentellen Daten zeigten und welchen Analyse als interessanteste erscheint.



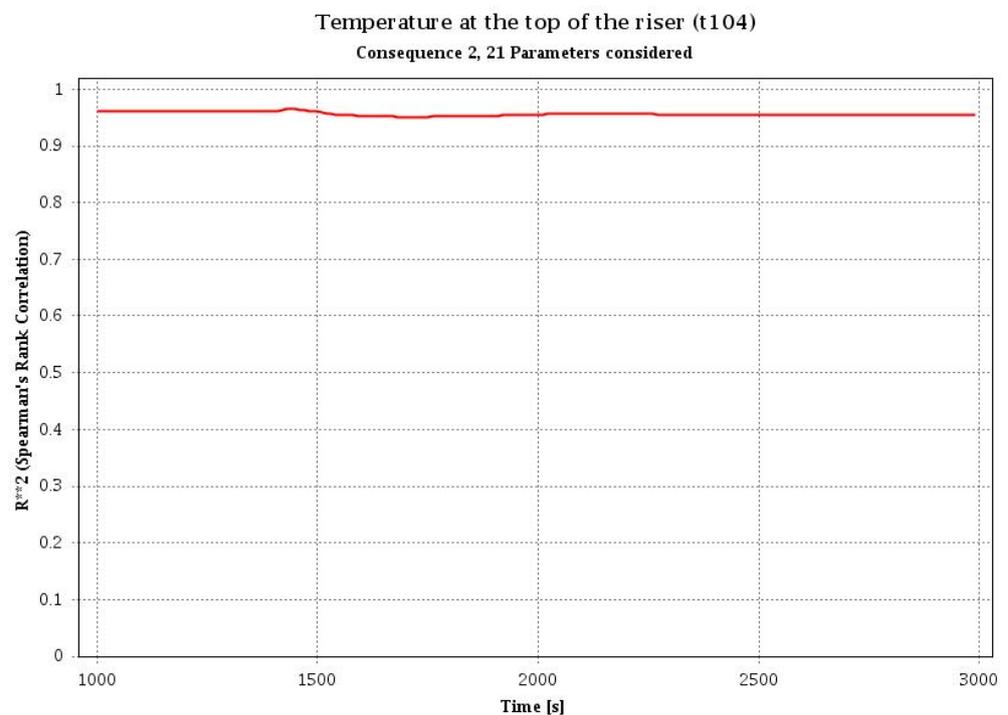
**Abb. 3.18** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 1 bis 7)



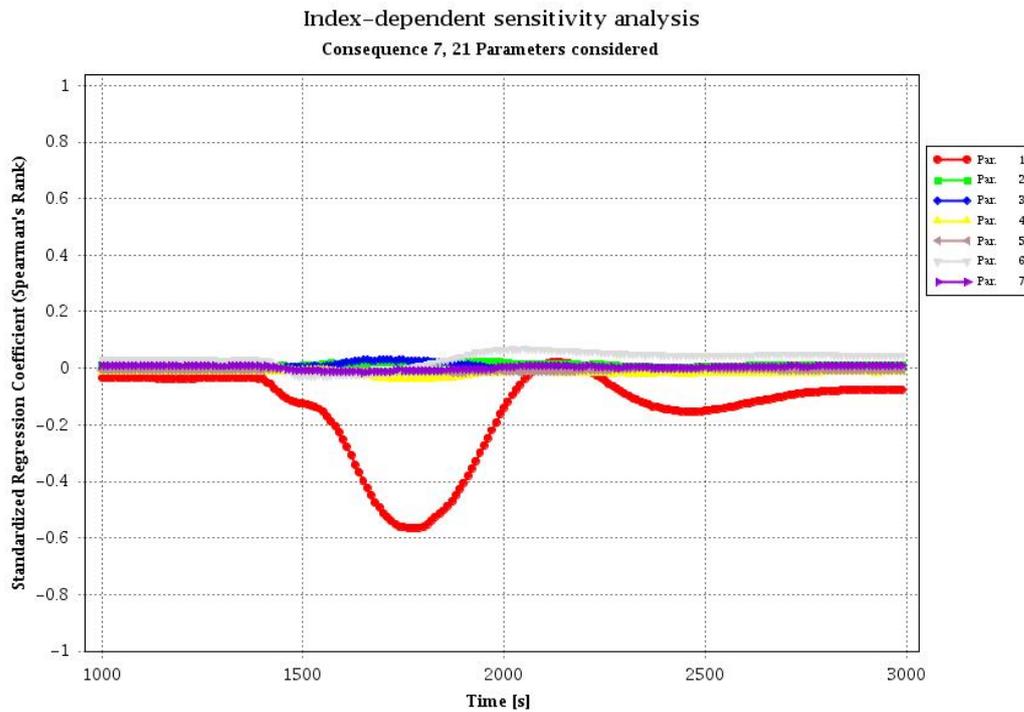
**Abb. 3.19** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 8 bis 14)



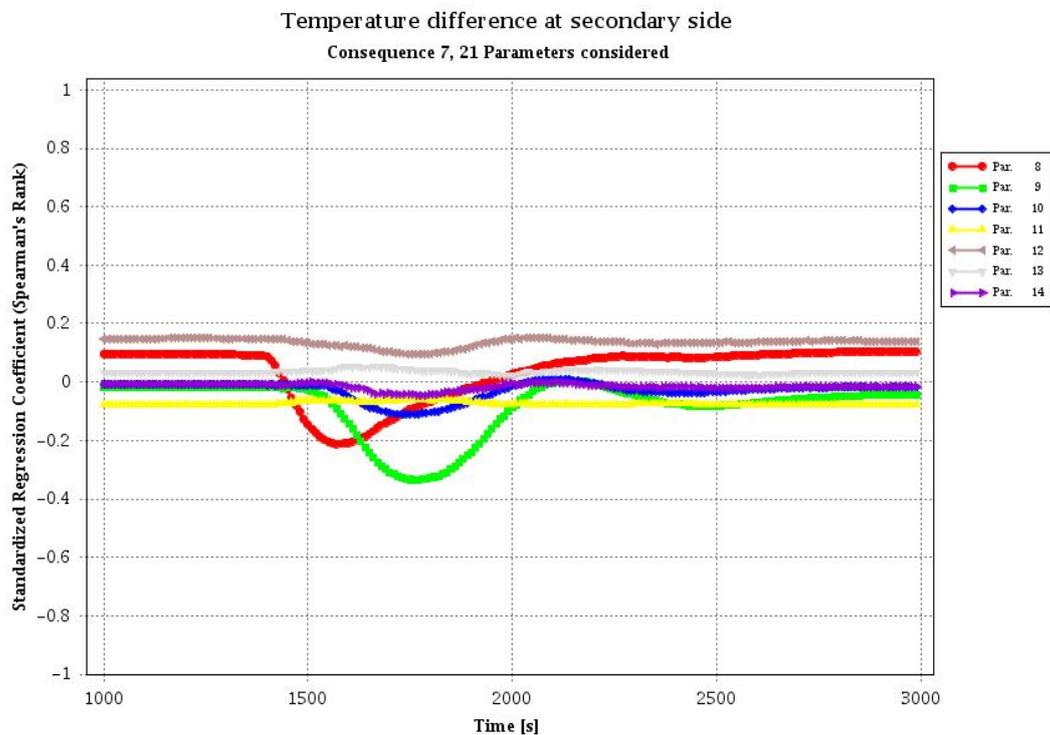
**Abb. 3.20** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 15 bis 21)



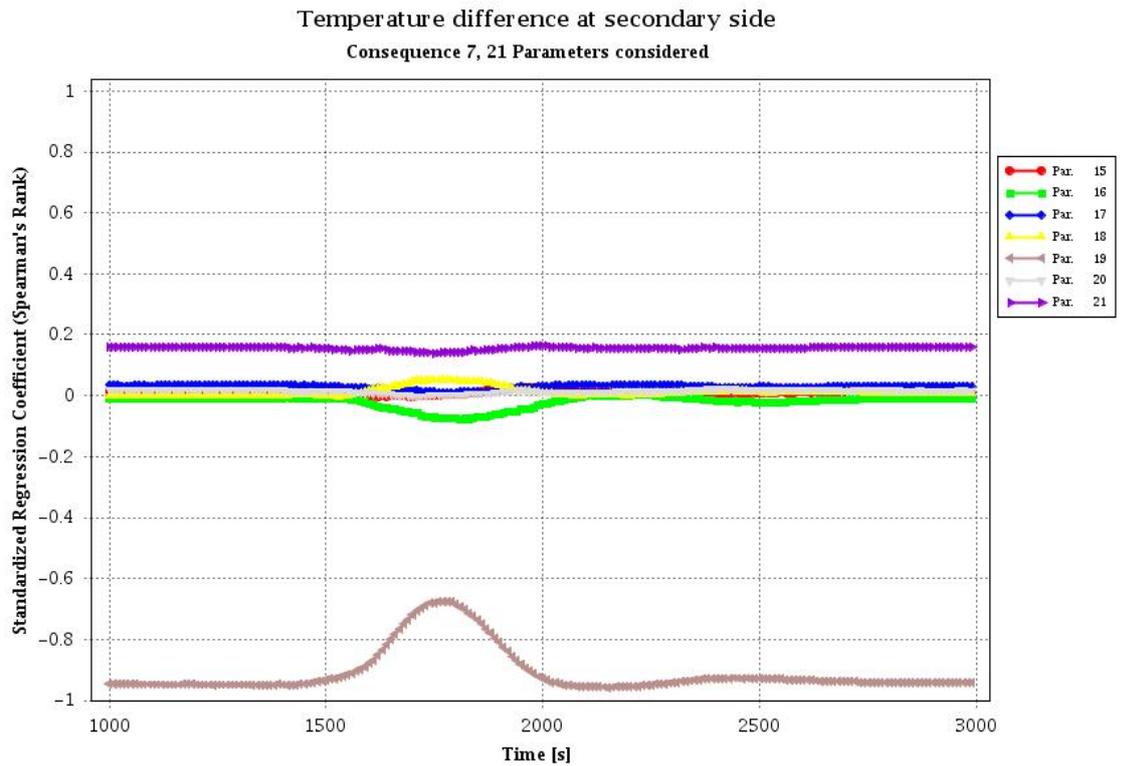
**Abb. 3.21** Quadrat des multiplen Rang-Korrelationskoeffizienten für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers



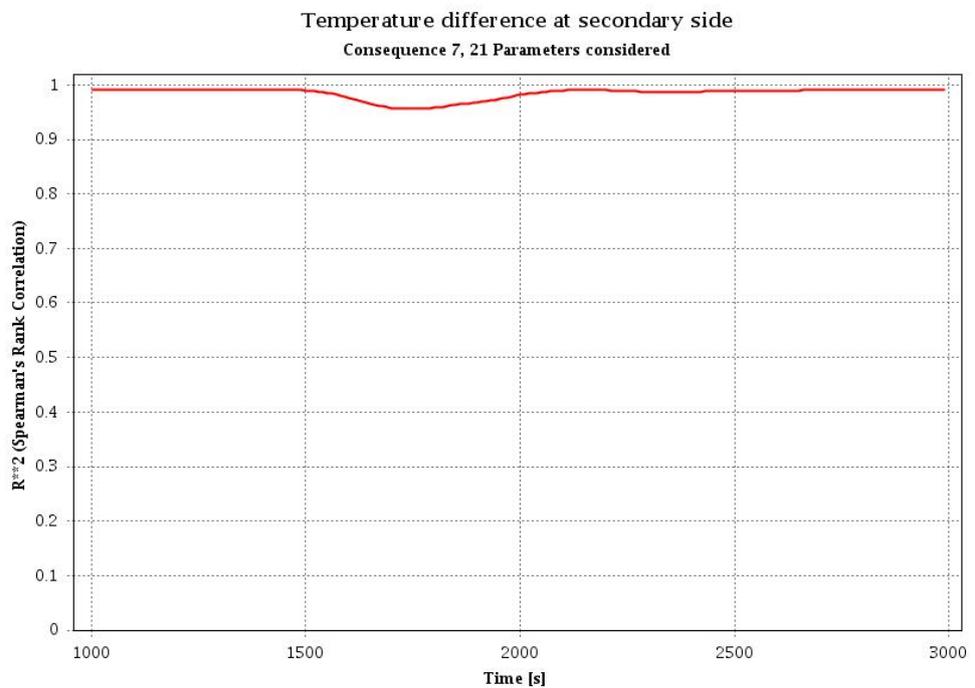
**Abb. 3.22** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 1 bis 7)



**Abb. 3.23** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 8 bis 14)



**Abb. 3.24** Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 15 bis 21)



**Abb. 3.25** Quadrat des multiplen Rang-Korrelationskoeffizienten für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers

Der zeitliche Verlauf der Sensitivitätsmaße ist in den analysierten Fällen meistens konstant, so wie für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers in den Abb. 3.18 bis Abb. 3.20 dargestellt. Die zeitliche Variation der Sensitivitätsmaße während der Transiente, so wie bei der Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers aufgetreten, ist die Ausnahme (Abb. 3.22 bis Abb. 3.24).

Die hohen Werte des Quadrats des multiplen Rang-Korrelationskoeffizienten (so wie in den Abb. 3.21 und Abb. 3.25 nahe eins) bedeuten, dass die Variation der Ergebnisgröße nahezu vollständig der Variationen der einzelnen Eingabeunsicherheiten bei der Bestimmung der Sensitivität Masse zugeordnet werden kann.

Die jeweils wichtigsten Eingabeunsicherheiten waren für

- den Massenstrom im Primärkreislauf:
  - Parameter 1 (Koeffizient: -0.9): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen
  - Parameter 9 (Koeffizient: .0.45): Druckverluste im Bündel
- die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Messposition 104):
  - Parameter 1 (Koeffizient: 0.6 – 0.7): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen
  - Parameter 8 (Koeffizient: - 0.6): Multiplikationsfaktor für spezifische Wärmeleitfähigkeit des Pulvers in den Rohren des Wärmetauschers
  - Parameter 9 (Koeffizient: 0.3): Druckverluste im Bündel
- den Druck am oberen Ende des Risers (Messposition 105):
  - Parameter 16 (Koeffizient: 0.9): Genauigkeit der Systemdruckmessung
  - Parameter14 (Koeffizient: 0.4): Anfangslevel des LBE im Expansionsbehälter
- die Druckdifferenz im Riser:
  - Parameter 1 (Koeffizient: -0.95): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen

- die Temperaturdifferenz im kalorimetrischen Durchflussmesser:
  - Parameter 1 (Koeffizient: 0.75): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen
  - Parameter 21 (Koeffizient: 0.45): Heizleistung der thermischen Massstrommessung
  - Parameter 9 (Koeffizient: 0.40): Druckverluste im Bündel
- die Temperaturdifferenz an der Primärseite des Wärmetauschers:
  - Parameter 1 (Koeffizient: -0.9): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen
  - Parameter 9 (Koeffizient: - 0.45): Druckverluste im Bündel
- die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers:
  - Parameter 19 (Koeffizient: -0.9): Genauigkeit der Wasserstrommessung
  - Parameter 1 (Koeffizient: -0.5, während der transienten Argon-Einspeisung): Multiplikationsfaktor für Relativgeschwindigkeit der Phasen
  - Parameter 9 (Koeffizient: -0.35, während der transienten Argon-Einspeisung): Druckverluste im Bündel

Die Sensitivitätsanalyse hat gezeigt, dass nur wenige von den identifizierten Eingabeunsicherheiten wirklich von Bedeutung für die Unsicherheit der Ergebnisse waren. Die dominierenden Eingabeunsicherheiten sind diejenigen, die mit dem Massenstrom im Primärkreislauf zusammenhängen. Für die meisten Größen liefert die Unsicherheit bzgl. des Phasendriffs den wesentlichen Beitrag.

#### **3.2.2.4 Bewertung der Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse**

Die Analyse des Vergleichs der experimentellen Daten mit den Ergebnissen der Unsicherheitsanalyse sowie die Resultate der Sensitivitätsanalyse lassen auf die Ursachen der Inkonsistenz der Messdaten und der berechneten Toleranzlimits schließen.

Die zu hoch berechneten Werte des Massenstroms im Primärkreis lassen sich auf zu niedrig bestimmte hydraulische Widerstände zurückführen. Die hauptsächlich treibende Kraft des Naturumlaufs, also die geringere Dichte in dem aufsteigenden Strang auf-

grund der Gaseinspeisung, ist korrekt simuliert, da die berechnete Druckdifferenz in dem zweiphasigen Bereich mit den Messdaten im Einklang ist.

Die zu niedrig gerechnete Temperatur im oberen Teil des Risers spiegelt die generell zu niedrig simulierte Temperatur im Primärkreislauf wider. Als Ursache wurde ein zu niedriger thermischer Widerstand im Wärmetauscher vermutet. Insbesondere der Kontaktwiderstand des Pulvers, der unbekannt ist, könnte hierfür verantwortlich sein. Die zu niedrig berechnete primärseitige Temperatur könnte teilweise auch Folge der zu niedrigen hydraulischen Widerstände sein. Denn bei einem kleineren Massenstrom müsste die Aufheizspanne größer werden, was in einer höheren Fluidtemperatur, zumindest nach der Heizstrecke, resultieren müsste.

Die zu klein berechnete Temperaturdifferenz entlang des kalorimetrischen Durchflussmessers ist durch den wahrscheinlich zu großen Massenstrom in dem Kreislauf bedingt, was im Einklang mit anderen Beobachtungen bezüglich des Massenstroms und der hydraulischen Widerstände in dem Kreislauf steht. Zusätzlich könnte die Temperaturdifferenz durch Wärmeverluste am Durchflussmesser, die unbekannt sind, beeinflusst werden.

Die eigentlich zu kleine berechnete Temperaturdifferenz auf der Primärseite des Wärmetauschers könnte auf die insgesamt zu hohen Massenstrom in dem Kreislauf zurück zu führen sein. Als Ursache wurde auch die Möglichkeit in Betracht gezogen, dass die Messstellen im Experiment nicht genau den Positionen in den Rechnungen entsprechen.

Die berechnete und die gemessene Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers liegen weit auseinander. Die Messdaten liegen beinahe um 1 °C unter dem unteren Toleranzlimit. Als Ursache wurden hierfür zunächst nicht bekannte bzw. nicht berücksichtigte Wärmeverluste in dem Wärmetauscher vermutet.

### **3.2.3 Neue Erkenntnisse zum Experiment**

Die im Rahmen des SESAME-Projekts durchgeführten Experimente und Voraussrechnungen wurden nachträglich analysiert und ausgewertet. Diskussionen mit den Experimentatoren im April 2018 (nach Durchführung der oben dargestellten Unsicherheitsanalyse) haben zusätzliche Informationen und Erkenntnisse geliefert, die die Ursachen der Inkonsistenz zwischen berechneten Toleranzintervallen und Messdaten weitge-

hend erklären können. So wurde von den Experimentatoren festgestellt, dass der thermische Widerstand in den Rohren des Wärmetauschers wesentlich größer war als in der Versuchsspezifikation definiert. Insbesondere die Wärmeleitfähigkeit des Pulvers war deutlich niedriger als in der früher zur Verfügung gestellten Anlagenbeschreibung angegeben. Es wurde auch festgestellt, dass der hydraulische Widerstand, insbesondere im Heizrohrbündel, größer war als in den Rechnungen angenommen.

Die daraus resultierenden falschen Angaben im Eingabedatensatz haben qualitativ zur Folge, dass in den Rechnungen der LBE-Massenstrom überschätzt und die Temperaturen im Primärkreis unterschätzt wurden. Mit dem durch eine Korrektur zu erwartenden kleineren LBE-Massenstrom würden auch die Temperaturdifferenzen in dem kalorimetrischen Durchflussmesser kleiner.

Die generell zu niedrigen Temperaturen im Primärkreislauf trugen auch zu der Diskrepanz bei der Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher bei. Erhöhung des thermischen Widerstands der Wärmetauscher-Rohre führt zum höheren primärseitigen Temperaturniveau. Mit den höheren Temperaturen im Primärkreislauf würden die Wärmeverluste zur Umgebung steigen, während der Wärmetransfer zur Sekundärseite eher kleiner würde, Das bedeutet eine kleinere Aufheizspanne auf der Sekundärseite des Wärmetauschers, was den experimentellen Ergebnissen entspräche. Das und kleinere Massenstrom auf der Primärseite wurden zu einer besseren Übereinstimmung mit den experimentellen Daten führen.

Die identifizierten Defizite in der von den Experimentatoren verteilten Beschreibung der Anlage geben somit deutliche Hinweise, dass die gefundenen Diskrepanzen zwischen den Ergebnissen der Unsicherheitsanalyse und dem Experiment auf die unzureichende Information über die Unsicherheiten der Testanlage zurück zu führen sind.

### **3.2.4 Zusammenfassung und Ausblick**

Im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum NACIE-UP Fundamental Test 1 konnten Unsicherheiten, die mit der Modellierung des neu in ATHLET zu Verfügung stehenden Arbeitsmediums LBE verbunden sind, quantifiziert werden. Für den untersuchten Versuch hat sich herausgestellt, dass die Unsicherheit in Bezug auf die Modellierung der Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen einen signifikanten Einfluss auf viele Ergebnisgrößen hat. Gleichwohl konnte die Unsicherheit der vorhandenen Modellierung sinnvoll quantifiziert werden, da der gemessene Druckverlust über

die zweiphasige Versuchsstrecke innerhalb der Toleranzgrenzen liegt. Die Bedeutung der Phasenrelativgeschwindigkeit und des damit verbundenen zweiphasigen Druckverlusts deutet auf ein entsprechendes Weiterentwicklungspotential in ATHLET hin, um die mit der Modellierung des Phasendriffs verbundenen Unsicherheiten abzubauen.

Da die Fehler in der Versuchs- und Anlagenbeschreibung, die erst kürzlich von den Experimentatoren korrigiert wurden und daher weder bei der Referenzrechnung noch bei der Unsicherheitsanalyse berücksichtigt worden sind, kann als mögliche Ursache gefolgert werden, dass der vorliegende Datensatz die Versuchsanlage nicht ausreichend genau beschreibt. Im Rahmen von RS1548 sind ergänzende Rechnungen geplant, um den bestehenden ATHLET-Referenzdatensatz entsprechend zu ertüchtigen.

## 4 Qualitätssicherung und bilaterale Zusammenarbeit

### 4.1 Refactoring

Der Systemcode ATHLET wird von der GRS ständig weiterentwickelt. Entsprechend den Anforderungen der Programmentwicklung und neuen Möglichkeiten der IT-Umgebung wurden Anpassungen des Code-Designs und der Programmierstandards vorgenommen. Dieses sog. Refactoring verfolgt als Ziel eine höhere Codetransparenz, die eine bessere Lesbarkeit, Wartbarkeit und Erweiterbarkeit sowie eine geringere Fehleranfälligkeit bei Programmiererweiterungen mit sich bringt. Unterschiedliche Maßnahmen wurden ergriffen. Diese reichen von der Umstrukturierung einzelner, sehr viele Codezeilen umfassende Unterprogramme über die Einführung von Modulen bzw. Submodulen bis hin zur Einführung neuer Sprachstandards wie bspw. dem Übergang vom bisher in ATHLET üblichen *Fortran fixed Format* auf das *Fortran free Format*:

#### 4.1.1 Einführung neuer Programmierstandards

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden umfangreiche Maßnahmen durchgeführt, um den aktuellen Quellcode nach neuen Standards zu modernisieren. Ein Ziel ist, die Modularität von ATHLET sowie die Kopplungsmöglichkeiten zu erhöhen. Hierzu wurden in AHTLET (sowie in ATHLET-CD) die letzten verbliebenen COMMON- und EQUIVALENCE-Statements entfernt, die einer veralteten FORTRAN 77 Programmierung entsprachen.

Darüber hinaus wurde der Quellcode vollständig in das *Fortran free Format* übertragen. Das bisherige *fixed Format* beschränkte den Quellcode auf 72 Spalten (mit besonderer Behandlung der Spalten 1 bis 6) und gilt seit der Einführung von Fortran 90 als veraltet. Die Beschränkung auf 72 Spalten hatte bei der Implementierung von Schnittstellen zu programmiertechnischen Schwierigkeiten geführt. Außerdem schränkt sie grundsätzlich die Anwendbarkeit von Softwarewerkzeugen zum automatisierten Refactoring (z. B. für das Layout) ein. Mit der Abkehr vom *fixed Format* wurden auch die Tools zur automatischen Programmdokumentation, die Teile des Programmierhandbuchs erzeugen, überarbeitet und dem neuen Quellcodedesign angepasst.

In sämtlichen Unterprogrammen wurde mittels der Einführung des IMPLICIT NONE-Statements die automatische Fortran Typdeklaration ersetzt, sodass alle globalen und

lokalen Variablen nun explizit deklariert werden müssen. Neben einer verringerten Fehleranfälligkeit ermöglicht dieser Schritt auch, dass Teile des Codes als Module und Submodule implementiert werden können. Die Möglichkeit der Modularisierung ist außerdem Voraussetzung für die Einführung von Unit-Tests (siehe Kapitel 4.2.3).

Als weitere Maßnahme wurden alle lokalen SAVE-Variablen durch globale Variablen in Modulen ersetzt. Dies ermöglicht nun ein sauberes Aufräumen des Speichers beim Ende des Programmlaufes und eine klare Aufteilung im Fall paralleler Läufe. Außerdem kann mit diesen Änderungen ATHLET innerhalb einer Schleife mehrfach aufgerufen werden, eine Anforderung, die Seitens des aktuell neu entwickelten Analysesimulators ATLASneo an ATHLET gestellt wurde. Mit Blick auf den Aufruf von ATHLET durch ein externes Programm (Controller-Code) wurden mehrere Stellen in ATHLET bearbeitet, so dass auch die *shared library* Version von ATHLET mehrmals hintereinander aufgerufen werden kann, ohne den kompletten Prozess zu beenden.

#### 4.1.2 Restrukturierung

Verschiedene Teile des ATHLET-Quellprogramms wurden überarbeitet und neu strukturiert:

- Es wurde eine neue Typenstruktur für Multikomponentenfluide umgesetzt, um die Implementierung weiterer Komponente zu erleichtern. Damit werden nicht-kondensierbare Gase von kondensierbaren Komponenten programmtechnisch getrennt behandelt.
- Die DRTMI-Routinen wurden bearbeitet. Sie sind für die Lösung nicht linearer Gleichungen zuständig. Die in Teilen redundanten Routinen wurden durch eine einzige generische Routine ersetzt, welche nun auch den aktuellen Programmierrichtlinien entspricht. Ähnlich wurden die SOCMP-Routinen überarbeitet, die für die Plotdatenausgabe zuständig sind. Es wurde eine klare Trennung zwischen verschiedenen Variablentypen implementiert, die eine sichere Ausführung von ATHLET und von Plug-ins ermöglicht.
- Es wurde ein spezielles Modul für mathematische und physikalische Größen implementiert, damit physikalische Konstanten wie  $\pi$  oder der Wert der Erdbeschleunigung  $g$  zentral definiert werden können.

- Der Parser zum Einlesen des ATHLET-Datensatzes wurde bearbeitet, um die zukünftige Pflege zu erleichtern und die Programmausführung zu beschleunigen.
- Einige veraltete Modelle der GCSM-LIBRARY, die zuletzt keiner Qualitätssicherung mehr unterlagen, wurden deaktiviert. Bessere Modelle werden schon seit längerem direkt in ATHLET angeboten (z.B. für Akkumulator, Boron-Tracking etc.).
- Der Code wurde dahingehend ertüchtigt, dass weitere hilfreiche Compiler-Optionen genutzt werden können. Dies unterstützt insbesondere die Umstrukturierung des Quellcodes in Module mit klaren Schnittstellen. Dies erhöht die Lesbarkeit und ermöglicht neuen Entwicklern einen rascheren Einstieg. Eine erste Phase der Aufteilung des Quellcodes in mehrere Verzeichnisse und entsprechende Module wurde bereits für leicht abtrennbare Programmteile durchgeführt, so z. B. für das Modell zur Berechnung kritischer Leckströmraten (CDR1D). Gleichwohl müssen auf diesem Feld noch weitere Anstrengungen erfolgen.

#### **4.1.3 Refactoring der Subroutine MAGM0**

Im Rahmen des Refactorings wurde die Subroutine MGAM0 umfassend überarbeitet /LAF16/. Sie berechnet die Kondensation und Verdampfung an der Zwischenphasengrenzfläche. Ziel der Arbeiten war es, dem Entwickler-Team eine klare Übersicht und ein besseres Verständnis der verwendeten, vor vielen Jahren von mittlerweile ausgeschiedenen Mitarbeitern implementierte Modelle zu geben. In einem ersten Schritt wurde MGAM0 in drei Unterprogramme (MGAM0, MGAEPS, MGAINTAR) aufgeteilt. Die zwei neuen Routinen berechnen Werte für die turbulente kinetische Energie, die Dissipationsrate und die Zwischenphasengrenzfläche. Jede Routine wurde entsprechend der bestehenden QM-Vorschriften für ATHLET strukturiert und einer gründlichen Analyse des Inhalts unterzogen. Dabei wurden die ursprünglichen Teile der Routine MGAM0 gepflegt, falls veraltet gelöscht und umstrukturiert, ohne dass sich hierdurch die Ergebnisse (merklich) ändern.

Der zweite Schritt bestand in der Integration neuer, aktueller Modelle sowie in der Überarbeitung der Methoden zur Bestimmung der Wärmeübergangskoeffizienten (Kapitel 2.3.2). Anschließend wurde derjenige Teil der Routine MGAM0, der für die Verdampfung in Liquid- und Dampfphase zuständig ist, gepflegt. Aufgrund der Anfrage ei-

nes Anwenders zur Möglichkeit der Erweiterung des Verdampfungsmodells war ein Ziel dieser Änderungen der Einbau dreier Schnittstellen (Hooks), die dazu dienen, das ATHLET-eigene Verdampfungsmodell im Rahmen externer Modellentwicklungen zu ergänzen bzw. zu ersetzen. Zukünftig kann die Zusammenarbeit zwischen dem ATHLET-Team und dem Anwender auf Basis dieser Hooks ohne Weitergabe des ATHLET-Quellcodes erfolgen.

Das *Models and Methods* Manual für die kommende ATHLET-3.2.0 Version wurde entsprechend den vorgenommenen Modifikationen aktualisiert und liefert nun eine detaillierte Übersicht über die im Unterprogramm MGAM0 durchgeführte Bestimmung der Zwischenphasenfläche und der HTC-Werte.

#### **4.1.4 Plug-in-basierte Kopplung aller AC<sup>2</sup> Module**

Vor Einführung der Plug-in-Technik in die ATHLET-Programmentwicklung wurde der Quellcode von ATHLET zur Durchführung gekoppelter Simulationen üblicherweise mit leichten Modifikationen zur Aktivierung der jeweils gewünschten Kopplung versehen. Somit hatte jede gekoppelte Programmversion eine spezifische Implementierung. Um die Pflege der Programmversionen und ihrer Schnittstellen zu vereinfachen und mit einem einzigen generellen Quellcode arbeiten zu können, wurden zur Programmkopplung Schnittstellen auf Basis der Plug-In-Technik implementiert. Dieses Verfahren wird in den zukünftigen Programmversionen auch für die Kopplung der Komponenten des AC<sup>2</sup>-Pakets eingesetzt.

In diesem Zusammenhang wurde z.B. der ATHLET-CD spezifische Programmteil in das Plug-in *core-degradation* umgewandelt. Dieses Plug-in in Form einer dynamischen Bibliothek kann für eine Störfallrechnung zum ATHLET-Programm hinzugebunden und im Eingabedatensatz bei Bedarf aktiviert werden. Damit verwenden nun alle thermohydraulischen (rein ATHLET) Simulationen sowie Simulationen schwerer Störfälle (ATHLET-CD) exakt die gleiche Version von ATHLET, was die Programmpflege deutlich erleichtert. Die in einem eigenen Modul gekapselte eigentliche Schnittstelle kann ebenfalls entsprechend leicht gepflegt werden. Mit dieser Implementierung wurde außerdem die Kompilierungszeit von ATHLET-CD deutlich reduziert.

Der Kommunikationsteil zwischen COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD wurde ebenfalls erfolgreich in ein Plug-in umgewandelt und wird bereits in Validierungsläufen verwendet. Damit wird die Freigabe zukünftiger AC<sup>2</sup>-Pakete deutlich vereinfacht, da jeder

Teil des Pakets ohne spezielle Einstellungen gekoppelt wird und validiert werden kann. Die ATHLET/ATHLET-CD-Schnittstelle zu COCOSYS wurde in einem weiteren Schritt für neue aus dem EASY-Projekt hervorgehende Kopplungsvarianten angepasst.

Außerdem wurde der ATHLET-Programmteil, der zur Durchführung interaktiver Simulationen die Kommunikation mit dem Analysesimulator ATLAS ermöglicht, in ein Plug-in *atlas\_process* umgewandelt. Somit kann die freigegebene ATHLET-Version auch unmittelbar für interaktive Simulationen verwendet werden, soweit das ATLAS Plug-in im ATHLET-Eingabedatensatz aktiviert ist. Dies vereinfacht einerseits die Bereitstellung und Verteilung von ATHLET, da für die Anwender nicht zwei unterschiedliche Versionen vorbereitet werden müssen: für interaktive und für „offline“ Rechnungen. Darüber hinaus erleichtert es auch den Anwendersupport und die Fehlersuche, da interaktive (mit ATLAS gekoppelte) Datensätze nun auch mit der ATHLET-Standardversion gerechnet werden können, die – anders als ATLAS – auch unter Unix-Betriebssystemen lauffähig ist.

Mit dieser neuen Schnittstellenimplementierung gibt es nun eine einzige offizielle ATHLET-Version, die gleichermaßen für *Stand-Alone* wie auch für mit anderen AC<sup>2</sup>-Modulen gekoppelte Simulationen eingesetzt werden kann. Kopplungen können vom User sehr einfach im Eingabedatensatz aktiviert/deaktiviert werden. Zur Erhöhung der Transparenz wurde eine spezielle, GRS-interne Wiki-Seite eingerichtet, die eine Übersicht über alle ATHLET-Schnittstellen und deren Abhängigkeiten gibt.

## **4.2 Qualitätssicherung der Programmentwicklung**

Die qualitätsgesicherte Programmentwicklung ist ein Prozess, der aus verschiedenen Stufen besteht. Hierbei lassen sich grob unterscheiden:

- **Programmentwicklung**
  - Implementierung im Quellprogramm
  - Prüfung der Implementierung und regelmäßige Verifikation mittels Regressionstests
- **Programmdokumentation**
  - Code-nahe Dokumentation im Quellprogramm

- Dokumentation in Handbüchern für die Programmbenutzer
- **Programmfreigabe**
  - Releasemanagement
  - Erzeugung und Verteilung des gesamten Programmpakets als Installationsroutine

Für die einzelnen Stufen der Programmentwicklung bestehen für ATHLET seit jeher Vorgaben und Methoden. Um das hohe Niveau der Qualitätssicherung beizubehalten und weiterzuentwickeln, wurden zu allen oben genannten Stufen bestehende Richtlinien auf Basis aktueller Anforderungen fortgeschrieben und neue Softwarewerkzeuge in die Entwicklung eingeführt. Diese sind nachfolgend beschrieben.

#### **4.2.1 Freigabe neuer Programmversionen**

Ein zentraler Baustein einer qualitätsgesicherten Programmentwicklung ist ein transparentes und nachvollziehbares Releasemanagement. Hierdurch wird sichergestellt, dass nur validierte Programmversionen verteilt werden und zu einem früheren Zeitpunkt erzielte Ergebnisse jederzeit auf eine bestimmte Programmversion zurückgeführt und somit auch reproduziert werden können. Für das Releasemanagement von ATHLET wird die Versionsverwaltungssoftware Subversion (SVN) verwendet. Unter Versionsverwaltung stehen mittlerweile neben dem ATHLET-Quellcode auch folgende weitere Programmteile und Dateien:

- Makefiles (Unix) und Visual Studio Project Dateien (Windows): Diese Dateien beinhalten für die ATHLET-Entwicklung festgelegten Compilereinstellungen etc.
- GUI und mit ATHLET verteilte Softwarewerkzeuge
- Mit ATHLET verteilte Beispielanwendungen (z. B. mit versionsspezifischen Eingabedatensätzen)
- Dateien für die Programmverifikation und für Testfälle der Continuous Integration unter Jenkins (z. B. mit versionsspezifischen Eingabedatensätzen und Grenzwertkurven) (siehe Kapitel 4.2.3)
- Programmerweiterung (z.B. Plug-in-Schnittstellen etc.)

Im Rahmen des Projekts RS1538 wurden folgende Programmversionen fertiggestellt, validiert und an die Programmnutzer verteilt:

- Neue Releaseversion ATHLET 3.1A
- Patches 1 bis 4 für die Programmversion 3.1A: Alle vier Patches enthalten kleinere Fehlerkorrekturen und Verbesserungen hinsichtlich der Programmhandhabung. Sie sind als unkritisch eingestuft, d. h. es wurde seit Freigabe der Releaseversion kein schwerwiegender Fehler erkannt.
- Ein weiterer Patch für die Programmversion 3.0A: Auch diese etwas ältere Programmversion wird gepflegt, um Anwendern bei Bedarf eine aktualisierte Version bereitstellen zu können.

Um Simulationsergebnisse nachvollziehbar einer bestimmten Programmversion zuordnen zu können und somit auch den User-Support zu erleichtern, werden nun verschiedene Kenngrößen mittels eines Python-Skripts dem ausführbaren ATHLET-Programm (sowohl *.exe* als auch *.dll* bzw. *.so*) mitgegeben. Besonders wichtig sind hierbei die ATHLET-Versionsbezeichnung, die Subversion-Revisionsnummer, das Baudatum sowie der benutzte Compiler. Die Informationen werden zur Laufzeit von ATHLET ausgelesen und im Kopf der Ausgabedatei ausgegeben. Zukünftig können diese Informationen auch zur Feststellung der Kompatibilität von gekoppelten Programmen oder Plugins genutzt werden.

Seit Freigabe der aktuellen Programmversion 3.1A im Mai 2016 wurde ATHLET (meist als Bestandteil von AC<sup>2</sup>) an ca. 40 Einrichtungen in 16 Ländern weitergegeben. Die Verteilung erfolgt über die neue ATHLET User Area (Kapitel 4.3.4). Insgesamt wird ATHLET von etwa 70 Institutionen weltweit genutzt. Zu den Anwendern zählen Sachverständigenorganisationen, Forschungszentren, Hochschulen sowie vereinzelt auch Hersteller oder Betreiber von Kernkraftwerken, Forschungsreaktoren oder sonstigen kerntechnischen Einrichtungen.

#### **4.2.2 Skriptbasierte Erzeugung der ATHLET-Installationsroutinen**

ATHLET wird in Form eines Programmpakets verteilt, das neben dem eigentlichen Rechenprogramm (als Executable und Shared Library) die Programmdokumentation, die Softwarewerkzeuge für Pre- und Postprocessing, Plug-in-Schnittstellen, Beispiel-Samples der Programmanwendung und einiges mehr enthält. Alle Informationen sind

in einer Installationsdatei (*setup.exe*) enthalten, mittels derer das Programm korrekt und vollständig auf dem jeweiligen Rechner installiert wird.

Bisher wurden zwei Installationsdateien für Windows und Unix/Linux verteilt, die jedoch nicht vollautomatisiert, sondern teilweise mit manuellen Einstellungen erzeugt wurden, was eine spätere Nachvollziehbarkeit erschwerte. Mit Fertigstellung der ATHLET 3.1A Version wurde daher der Prozess der Erstellung der Installationsroutinen modernisiert. Eine vollautomatisierte und SVN-unterstützte Erstellung der Setup-Dateien mit Hilfe von Skripten vermeidet hierbei manuelle Eingriffe und daraus möglicherweise resultierende Fehler bei der Installation des Programms. Die Skripte unterliegen wie der gesamte ATHLET-Quellcode der SVN-Versionsverwaltung. Soweit hilfreich, greifen sie auf weitere Freeware-Software zurück, wie bspw. unter Windows *Inno Setup*. Darüber hinaus werden die für ATHLET verfügbaren Utilities des Pre- und Postprocessings teilweise erst während der Programminstallation als separater Download angeboten und können optional installiert werden. Dies hat die Größe der weitergegebenen Installationsdateien stark reduziert.

Bisher unterschieden sich die Ordnerstrukturen im ATHLET-Installationsverzeichnis unter Windows und Unix/Linux. Auch die Programmentwicklung, die auf der Organisation des ATHLET SVN-Repositories aufsetzt, hatte eine dritte, sich unterscheidende Ordnerstruktur. Da ATHLET neue Komponenten und Erweiterungen wie Plug-ins enthält, die eine feste Ordnerstruktur benötigen, wurde mit Freigabe der ATHLET 3.1A Version eine neue Ordnerstruktur vereinbart und umgesetzt. Damit erhalten die Anwender und die Entwickler unter beiden Betriebssystemen Windows und Unix/Linux immer die gleiche Umgebung und Programmstruktur, was die Zusammenarbeit vereinfacht und weniger fehleranfällig macht.

#### **4.2.3 Kontinuierliche Integration**

Als typischer „Legacy Code“ /FEA11/ wird ATHLET seit den 1970iger Jahren aktiv entwickelt /GRS77/. Entsprechend kamen verschiedene Standards der Programmiersprache FORTRAN, verschiedene Softwareentwicklungsmethoden und verschiedene Softwareentwicklungsmodelle zum Einsatz. Insbesondere bestehen zwischen den verschiedenen Programmteilen von ATHLET starke Abhängigkeiten. Daraus ergibt sich ein erhöhtes Risiko, durch Änderungen und Erweiterungen in vorhandenen Teilen der Software Fehler einzubauen.

Eine weitere Herausforderung in der Qualitätssicherung einer Software über so einen langen Entwicklungszeitraum besteht in der Pflege und Aktualisierung von Eingabedatensätzen für Verifizierungs- und Validierungsrechnungen. Ziel sollte es sein, diese jederzeit mit der aktuellen Version von ATHLET durchführen zu können.

Methoden zur kontinuierlichen Integration sind mittlerweile Stand der Technik zur Qualitätssicherung in der Softwareentwicklung. Ziel einer solchen Plattform ist es, die Entwickler durch das automatische Bauen der Software und die automatische Durchführung von Tests mit entsprechenden, automatisch generierten Berichten zu unterstützen. Diese Tätigkeiten zusammen werden als kontinuierliche Integration (Continuous Integration, CI) bezeichnet.

Im Rahmen dieses Projekts hat die GRS eine Plattform zur kontinuierlichen Integration auf Basis der Software Jenkins /SMA11/ aufgesetzt. Die Anforderungen der Architektur und die Anwendung dieser Plattform für die Bestandteile des GRS Codesystems AC<sup>2</sup> wurde bereits in einer Veröffentlichung bei der 26th ICONE 2018 /HEJ18/ beschrieben.

#### **4.2.3.1 Anforderungen an die Plattform zur kontinuierlichen Integration von ATHLET**

Die Anforderungen an die Plattform zur kontinuierlichen Integration von ATHLET ergeben sich zum einen aus den GRS-internen Qualitätssicherungsvorgaben zur Softwareentwicklung. Außerdem können Anforderungen aus dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik abgeleitet werden, wie z. B. im IAEA Specific Safety Guide No. SSG-2 "Deterministic Safety Analysis for Nuclear Power Plants" /IAE09/ dokumentiert. SSG-2 enthält Anforderungen und Empfehlungen zur Entwicklung von Simulationsprogrammen für die deterministische Sicherheitsanalyse von Kernkraftwerken.

Demnach sollen „alle Aktivitäten, die die Qualität von Computerprogrammen beeinflussen, verwaltet werden“ und es sollen „die besten verfügbaren Praktiken des Software-Engineerings [...] eingesetzt werden“ /IAE09/. Insbesondere sollen „Verfahren umgesetzt werden, um sicherzustellen, dass das Programm alle erwünschten Funktionen korrekt durchführt und dass es keine unerwünschten Funktionen ausführt“, sowie „in einem kontinuierlichen Prozess Fehler verfolgt und der Status ihrer Korrektur protokolliert wird“ /IAE09/. Außerdem sollen, „wenn neue Versionen des Programms entwickelt werden, ein feststehender Satz von Testfällen simuliert werden“ /IAE09/.

Zur Erfüllung dieser Anforderungen ist es u. a. notwendig, ATHLET für unterschiedliche Betriebssysteme (Windows, Linux) mit Hilfe verschiedener Compiler (mit unterschiedlichen Debug- bzw. Optimierungseinstellungen) als ausführbares Programm zu erstellen. Außerdem müssen verschiedene Testfälle, wie einfache Lauffähigkeitstests, sowie Simulationen von Einzeleffekten und Integraltests ausgewertet werden. Die Simulationsergebnisse werden dabei mit Messungen aus entsprechenden Experimenten verglichen. In der Vergangenheit wurden diese Tätigkeiten manuell ausgeführt, was einen erheblichen Aufwand erforderte. Dies führte dazu, dass sie nur relativ selten vollständig durchgeführt werden konnten, z. B. bei der Freigabe von neuen Programmversionen und nach Abschluss von tiefgehenden Änderungen in physikalischen Modellen bzw. der numerischen Methoden des Programms.

Moderne Softwareentwicklungsmethoden wie *Extreme Programming* /BEC00/ und *Scrum* /SCH02/ fordern hingegen, dass Änderungen möglichst schnell in den Hauptentwicklungszweig eines Programmes integriert und regelmäßig Tests automatisch durchgeführt werden. Je nach Laufzeit der Tests sollen diese möglichst bei jeder Änderung im Quellcodeverwaltungssystem (Gesamtlaufzeit der Tests im Minutenbereich), jeden Tag (Testlaufzeit wenige Stunden) oder mindestens einmal pro Woche durchgeführt werden.

Für alle Tests müssen Bänder von gültigen Werten bzw. Grenzwerte vorgegeben werden. Die Ergebnisse der Testläufe werden mit diesen Sollwerten verglichen. Kommt es zu Abweichungen, so sollen die verantwortlichen Entwickler automatisch informiert werden. Außerdem sind die Abweichungen zu dokumentieren. Damit wird es möglich, Probleme wie z. B. nicht mehr funktionierende Compilerläufe oder Fehlschläge von Tests sofort zu beheben.

#### **4.2.3.2 Aufbau der GRS-Plattform zur kontinuierlichen Integration**

##### **4.2.3.2.1 Die Jenkins Plattform**

Die GRS-Plattform zur kontinuierlichen Integration wurde auf Basis des Softwarepakets Jenkins /PAT17/ aufgebaut. Um sowohl die Windows- wie auch die Linux-Version von ATHLET zu kompilieren und zu testen, wurde auf Basis jedes der beiden Betriebssysteme ein Jenkins-Server aufgesetzt.

Die Anweisungen, die notwendig sind, um ATHLET zu kompilieren und zu testen, wurden in einem „Job“ zusammengefasst. Die Abarbeitung der entsprechenden Befehle erfolgt auf Basis einer domänenspezifischen Sprache, die wiederum auf der Programmiersprache *Groovy* /PAT17/ basiert. Die Beschreibung des Jobs wird zusammen mit dem Quellcode von ATHLET im Quellcodeverwaltungssystem der GRS aufbewahrt.

In Abb. 4.1 sind die verschiedenen Jobs, die auf der GRS Plattform zur kontinuierlichen Integration regelmäßig ausgeführt werden, dargestellt.

S	W	Name ↓	Letzter Erfolg	Letzter Fehlschlag	Letzte Dauer	Number of builds
🌞	🌞	<a href="#">ATHLET_CD Pipeline</a>	1 Stunde 17 Minuten - <a href="#">3120 release.64.qfortran trunk HEAD</a>	1 Tag 23 Stunden - <a href="#">3110 release.64.qfortran trunk HEAD</a>	7 Minuten 45 Sekunden	39 0 5
🌞	🌞	<a href="#">ATHLET Nightly Pipeline Matrix</a>	18 Stunden - #676	18 Tage - #658	3 Stunden 54 Minuten	2 96 8
🌞	🌞	<a href="#">ATHLET Nightly Pipeline Matrix 3.1A</a>	4 Tage 5 Stunden - #228	Unbekannt	2 Stunden 25 Minuten	4 18 0
🌞	🌞	<a href="#">ATHLET NuT Pipeline</a>	1 Stunde 22 Minuten - <a href="#">87 release.64.qfortran trunk</a>	1 Tag 3 Stunden - <a href="#">79 release.64.qfortran trunk HEAD</a>	2 Minuten 2 Sekunden	22 11 3
🌞	🌞	<a href="#">ATHLET Pipeline</a>	1 Stunde 20 Minuten - <a href="#">11635 release.64.ifort trunk</a>	1 Tag 23 Stunden - <a href="#">11611 release.64.qfortran trunk</a>	11 Minuten	103 78 3
🌞	🌞	<a href="#">COCOSYS Pipeline</a>	3 Stunden 44 Minuten - <a href="#">475 release.32.ifort trunk</a>	Unbekannt	44 Minuten	5 0 0
🌞	🌞	<a href="#">COCOSYS_Easy</a>	2 Stunden 28 Minuten - <a href="#">#144 release.64.ifort.mpich</a>	Unbekannt	6 Minuten 10 Sekunden	6 0 0
🗑️	🗑️	<a href="#">deprecated</a>	Nicht anwendbar	Unbekannt	Nicht anwendbar	0 0 0
🗑️	🗑️	<a href="#">Triggers</a>	Nicht anwendbar	Unbekannt	Nicht anwendbar	0 0 0

Symbol: S M L

Legende: RSS Alle Builds RSS Nur Fehlschläge RSS Nur jeweils letzter Build

**Abb. 4.1** Übersicht über alle Jobs, die auf der GRS-Plattform zur kontinuierlichen Integration laufen

Die Verwaltung, Ausführung, Auswertung und Dokumentation der Jenkins-Jobs wird durch verschiedene sogenannte Plug-ins, die als Open Source verfügbar sind, wesentlich erleichtert.

#### 4.2.3.2.2 Die Stufen des ATHLET-Integrationsjobs

Der Job zur Integration von ATHLET besteht aus einer sogenannten Pipeline, die aus mehreren Stufen aufgebaut ist (siehe Abb. 4.2). Beim Starten eines Laufs eines Jobs können Parameter angegeben werden. Damit ist es möglich, z. B. die genaue Version von ATHLET auszuwählen, die gebaut und getestet werden soll. Auch können einzelne Stufen der Pipeline an- bzw. abgeschaltet werden sowie ein bestimmter Compiler und seine Debug-/Optimierungsoptionen ausgewählt werden.

## Stage View

	precheckout	Jenkinsfile	checkout	build	test	documentation	validation	cleanup
Average stage times: (Average full run time: ~21min 56s)	2s	4s	1min 15s	5min 26s	12min 7s	19s	7min 22s	1s
11613 release.64.ifort.trunk Apr 10 15:49 No Changes	1s	1s	32s	46s	9min 54s	261ms	8ms	3s
11612 release.64.gfortran.trunk Apr 10 15:46 commit	1s	1s	23s	19s	3min 1s	1s	9ms	3s
11611 release.64.gfortran.trunk Apr 10 15:42 1 commit	2s	5s	27s	28s	21s failed			
11610 release.64.ifort.trunk Apr 10 15:14 No Changes	1s	3s	26s	45s	18s failed			
11609 release.64.gfortran.trunk Apr 10 15:14 2 commits	1s	5s	28s	27s	32s failed			
11608 release.64.ifort.trunk Apr 10 14:34 No Changes	964ms	4s (paused for 1ms)	25s	38s	13min 24s	243ms	8ms	463ms
11607 release.64.gfortran.trunk Apr 10 14:34 1 commit	1s	5s	26s	27s	4min 9s	236ms	14ms	588ms

**Abb. 4.2** Übersicht über verschiedene Läufe des Jobs, um ATHLET zu bauen und zu testen. Bei einem Teil der Läufe wurde mit Fehlern in der Teststufe abgebrochen (in rot)

Die einzelnen Stufen des Integrationsjobs von ATHLET sind:

### 1. Auschecken des Quellcodes

In der ersten Stufe wird der Sourcecode von ATHLET sowie aller notwendigen Werkzeuge für die Kompilierung und die Durchführung der Tests vom Sourcecodeverwaltungssystem der GRS ausgecheckt. Dabei kann ein bestimmter Entwicklungszweig von ATHLET ausgewählt werden. Da alle notwendigen Quellen im Sourcecodeverwaltungssystem der GRS hinterlegt sind, ist sichergestellt, dass eine aktuelle, lauffähige Version von ATHLET direkt aus dem Quellcode erstellt werden kann und dies in nachvollziehbarer Weise passiert.

### 2. Kompilieren:

Durch Angabe von entsprechenden Parametern beim Aufruf des Jobs können gezielt Optimierungs- bzw. Debugversionen von ATHLET erstellt werden bzw. Compiler und Betriebssystem ausgewählt werden.

### 3. Testen:

In der Teststufe wird verifiziert, ob das Programm sich so verhält wie spezifiziert. Dazu werden Unit- und Einzeleffekttests durchgeführt. Die Unittests basieren auf dem Testharnisch pfUnit /RIL14/, das dazu verwendet wird, einzelne Funktionen

und Prozeduren von ATHLET aufzurufen. Die Ergebnisse dieser Aufrufe werden mit von den Entwicklern vorgegebenen Sollwerten verglichen. Bei Einzeleffekttests wird ATHLET mit einem einfachen Eingabedatensatz, z. B. für ein einfaches Experiment, aufgerufen. Die Ergebnisse dieser Simulationen werden mit Werten, die z. B. aus analytischen Rechnungen gewonnen wurden, verglichen. Außerdem werden Regressionstests durchgeführt. Dabei werden die Ergebnisse von Simulationen mit denen von Rechnungen früherer Versionen von ATHLET verglichen. Bei Abweichungen müssen die Entwickler überprüfen, ob diese zulässig bzw. erwünscht sind, da z. B. physikalische Modelle verändert wurden, oder ob ein Programmierfehler vorliegt. Alle Tests in dieser Stufe müssen schnell ausführbar sein, da sie bei jedem Einchecken in das Versionsverwaltungssystem automatisch ausgeführt werden.

4. **Dokumentation:**

Ein Teil der Programmdokumentation von ATHLET wird automatisch aus dem Quellcode generiert.

5. **Integraltests:**

Durch die Simulationen von ausgewählten Integraltests an speziellen Versuchseinrichtungen soll das Zusammenwirken der verschiedenen Komponenten von ATHLET überprüft werden. In Integraltests werden Bedingungen herbeigeführt, wie sie auch während Störfällen in Kernkraftwerken herrschen. In den Testständen können diese Bedingungen gezielt herbeigeführt werden. Außerdem sind die Teststände im Vergleich zu Reaktoren besser instrumentiert. Die Ergebnisse der Integraltestsimulationen werden mit Grenzwertkurven für zeitabhängige Maximal- und Minimalwerte verglichen. Dadurch ist es möglich, sofort unerwartete und möglicherweise ungewollte Effekte von Codeänderungen festzustellen, die sonst erst im Freigabeprozess einer neuen Release-Version auffallen würden.

6. **Benachrichtigung:**

Jeder Lauf wird entweder als "stabil", „instabil“ oder „fehlerhaft“ markiert. Kommt es zu Fehlern in der Kompilierungsstufe oder zu einem Abbruch durch Programmfehler, so gilt der Lauf als fehlerhaft. Wenn ein oder mehrere Tests fehlschlagen, so wird der Lauf als instabil gekennzeichnet. Werden alle Tests erfolgreich durchgeführt, so wird der Lauf als stabil gekennzeichnet. Treten während des Laufs Programmfehler oder fehlgeschlagene Tests auf, so werden alle Entwickler, die seit dem letzten stabilen Lauf Änderungen am Sourcecode vorgenommen haben, per

Mail über das nicht stabile Ergebnis des Laufs informiert. Dies erfolgt ebenfalls, wenn ein Lauf zum ersten Mal wieder ein stabiles Ergebnis liefert.

#### **4.2.3.2.3 Start für einen neuen Lauf des Integrationsjobs**

Jedes Mal, wenn sich Änderungen im Sourcecodeverwaltungssystem ergeben, wird ATHLET für alle unterstützten Betriebssysteme und eine Auswahl an Optimierungs-/Debug-/Kompilervarianten kompiliert. Danach wird die Teststufe ausgeführt und dabei Unit-, Einzeleffekt- und Regressionstests durchgeführt. Ein solcher Lauf dauert ungefähr zehn Minuten und liefert damit sofortige Rückmeldung, wenn es zu Problemen beim Bauen der Software bzw. zu fehlgeschlagenen Tests kommt.

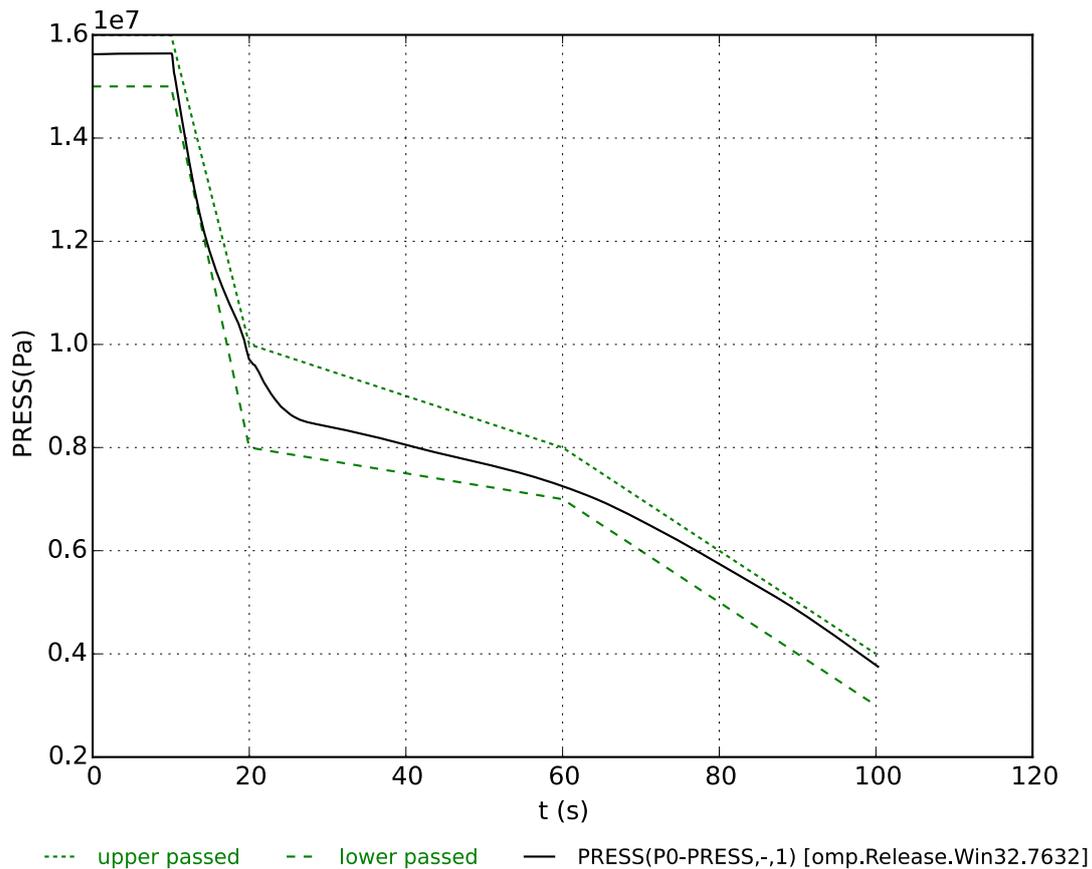
Jede Nacht werden alle Konfigurationen der Software gebaut. Danach werden die Test- und die Integrationsstufe ausgeführt.

Einmal in der Woche werden die Release-Zweige der Software neu erstellt und getestet, um sicherzustellen, dass der Sourcecode in diesen Zweigen noch mit den aktuellen Tools für die Programmerstellung, das Pre- und Postprocessing, sowie die Tests kompatibel sind.

#### **4.2.3.3 Beispiele für Testspezifikationen**

Die Aufgabe von Tests ist es, zunächst nachzuweisen, dass sich ein neuer Code wie spezifiziert verhält. Besonders wichtig ist aber auch sicherzustellen, dass die bestehende Qualität auch bei Änderungen am Code erhalten bleibt. Nur durch eine ausreichende Abdeckung eines bestehenden Programms mit Tests ist es möglich, Änderungen und Weiterentwicklungen durchzuführen und dabei das bestehende Qualitätsniveau aufrechtzuerhalten.

Für alle Tests ist es notwendig, Soll- oder Grenzwerte vorzugeben, mit denen die Testergebnisse verglichen werden können. In Abb. 4.3 sind beispielhaft eine obere und eine untere Grenzwertkurve für das Ergebnis einer physikalischen, zeitabhängigen Größe in einer Simulationsrechnung vorgegeben.



**Abb. 4.3** Beispiel für durch den Entwickler vorgegebene Gültigkeitsgrenzen für einen Einzeleffekttest

#### 4.2.3.3.1 Testvorbereitung und Testspezifikationen

Unittests rufen einzelne Funktionen und Prozeduren auf. Für jeden Test müssen die Argumente des Aufrufs vorgegeben werden. Darüber hinaus muss sichergestellt sein, dass globale oder Modulvariablen mit den notwendigen Werten vor dem Test vorbelegt werden. Dies gilt auch für Dateien, auf die im Rahmen des Tests zugegriffen wird.

Für Regressions-, Einzeleffekt- und Integraltests müssen ATHLET-Eingabedateien für die Tests bereitgestellt werden, da darüber die durchzuführende Simulation spezifiziert wird.

#### 4.2.3.3.2 Soll- und Grenzwerte von Tests

Bei Unittests werden die Ergebnisse von Funktions- oder Prozeduraufrufen direkt mit Grenz- oder Sollwerten verglichen. Der Testharnisch *pfUnit* stellt dafür sogenannte „Assertions“ zur Verfügung. Damit ist es nicht nur möglich, Zahlenwerte zu vergleichen,

sondern es kann damit auch überprüft werden, ob das Programm Fehler (z. B. durch falsche oder inkonsistente Eingaben) richtig abfängt bzw. behandelt.

Der Sourcecode der Unittests und die Tools zu ihrer Auswertung sowie alle Angaben zu Grenz- und Sollwerten werden zusammen mit dem ATHLET Sourcecode im GRS-Sourcecodeverwaltungssystem abgelegt.

Für Regressions-, Einzeleffekt und Integraltests müssen die Ergebnisdateien nach Ausführen der Simulation analysiert werden. In Abb. 4.3 ist gezeigt, wie für eine zeitabhängige Ergebnisgröße der Simulation Grenzwertkurven durch den Entwickler spezifiziert wurden. Die Grenzwertkurve besteht aus Punkten, zwischen denen linear interpoliert wird.

Im Rahmen dieses Projekts wurden Skripte (in der Programmiersprache Python mit Hilfe der Bibliothek *pytest* /OKK17/) entwickelt, die die Werte aus den Ergebnisdateien mit den vorgegebenen Grenzwertkurven vergleichen. Dazu werden für jeden gespeicherten Zeitschritt der Simulation interpolierte Grenzwerte ermittelt. Dann wird für jeden Simulationsschritt überprüft, dass keiner der Grenzwerte verletzt wird. Falls dies doch festgestellt wird, so wird der Test als fehlgeschlagen markiert.

Die Anzahl der ATHLET-internen Zeitschritte, die benötigt wird, um bis zum Ende der vorgegebenen Simulationszeit zu rechnen, ist der Testsollwert für die Regressions-tests. Es hat sich gezeigt, dass dieser Wert sehr empfindlich auf Änderungen an physikalischen Modellen oder der Ablaufsteuerung des Programms reagiert. Deshalb wird für einen neuen Lauf des ATHLET-Integrationsjobs die Anzahl der Zeitschritte für bestimmte Testsimulationen mit denen der vorhergehenden Rechnung verglichen. Werden Unterschiede festgestellt, so werden die für die letzten Änderungen verantwortlichen Entwickler informiert. Deren Aufgabe ist es dann, zu überprüfen, ob die Abweichungen gewollt sind oder ob diese auf Programmierfehler zurückzuführen sind.

#### 4.2.3.3.3 Bestimmung der Grenzwertkurven für die Integraltests

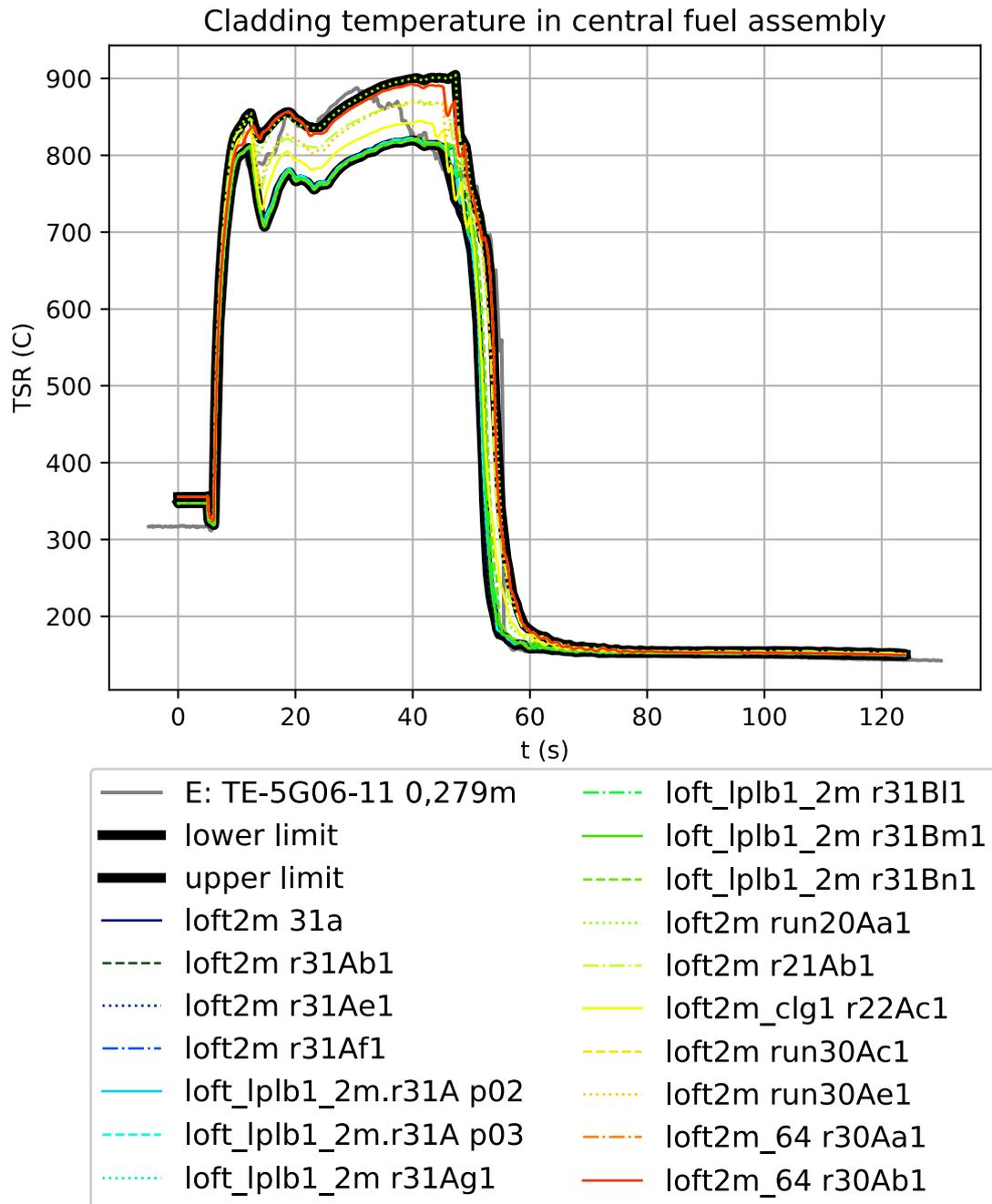
Es gibt verschiedene Gründe, warum Messdaten aus Integraltests nicht direkt mit Simulationsergebnissen verglichen werden können. Diese sind z. B. fehlende Informationen bzw. Unsicherheiten über Randbedingungen und den Ablauf der Tests. Auch könnte es unbekannte Effekte wie nicht dokumentierte lokale Wärmeverluste oder andere Probleme während der Experimente gegeben haben. Der direkte Vergleich von Experimentdaten mit Simulationsergebnissen erfordert entsprechendes Wissen, z. B. hinsichtlich der Auswahl der physikalischen Größen, die verglichen werden sollen.

Deshalb basieren die Grenzwertkurven für die Integraltests auf Validierungsrechnungen von bereits veröffentlichten ATHLET-Versionen. Bei diesen Validierungsrechnungen, die für jede veröffentlichte Version von ATHLET in einem Validierungsbericht dokumentiert sind (z. B. /LER16/), wurden die zu vergleichenden Größen bestimmt. Es wurde durch Experten überprüft, ob die Simulationsergebnisse die Experimente zufriedenstellend im Sinne der Anforderungen an einen Code für Reaktorsicherheitsanalysen abbilden. Jede Version von ATHLET, die entsprechend validiert wurde, repräsentiert also ein akzeptables Qualitätsniveau und die Ergebnisse dieser Versionen für die unterschiedlichen Integraltests stellen akzeptable Simulationsergebnisse dar.

Die Ergebnisse der Validierungsrechnungen und die Angaben darüber, welche Größen verglichen wurden, wurden zusammen mit den jeweiligen ATHLET-Versionen archiviert. Auf Basis dieser Daten wurde nun eine Methode entwickelt, mit der aus den vorhandenen Validierungsrechnungen Grenzwertkurven bestimmt werden können.

Für alle Größen, die in Validierungsberichten bisheriger ATHLET-Versionen verwendet wurden, werden konvexe Einhüllende /GRA72/ für die Ergebnisse dieser Größe aus allen Validierungsrechnungen bestimmt.

In Abb. 4.4 ist dargestellt, wie aus 17 vorhandenen und validierten Simulationsläufen unter Verwendung von unterschiedlichen ATHLET-Versionen die Grenzwertkurven für eine physikalische Größe, in diesem Fall die Hüllrohroberflächentemperatur an einer bestimmten Stelle des Versuchsaufbaus, ermittelt werden. Die Kurven der validierten Simulationsergebnisse sind farbig dargestellt, die Einhüllenden in schwarz. Außerdem ist noch der Verlauf der Messung des Experiments in grau dargestellt. Die Messdaten aus dem Experiment werden aus den oben dargelegten Gründen nicht für die Bestimmung der Grenzwertkurven verwendet.



**Abb. 4.4** Beispiel für die Erzeugung von Grenzwertkurven aus konvexen Einhüllenden vorhandener und validierter Simulationsläufe

Im Rahmen dieses Projektes wurden Skripte entwickelt, mit denen dieses Vorgehen automatisiert durchgeführt werden kann. Damit ist es zukünftig auch einfach möglich, weitere validierte ATHLET-Versionen zur Ermittlung der Grenzwertkurven mitzuverwenden.

Basierend auf dieser Methode wurden für vier ausgesuchte Integraltestsimulationen (LOFT\_LPLB1, LSTF\_SBCL18, ISB2 und ROSA\_R916) für zusammen ungefähr 400 simulierte Größen obere und untere Grenzwertkurven bestimmt.

Verwendet man direkt die so ermittelten Grenzwertkurven für die Integrationstests, so können bereits sehr kleine Änderungen zu einem Fehlschlagen der Tests führen. Deshalb wurden die Grenzwertkurven so verschoben, dass sie einen Abstand von 2 % zu den aus den alten Simulationen ermittelten Kurven besitzen, bezogen auf den Abstand zwischen Minimal- und Maximalwert der jeweiligen Größe und der Dauer der Transiente. Dies erfolgt auf Basis des Vatti-Clipping-Algorithmus /VAT92/.

Die Grenzwertkurven sind als Bestandteil des ATHLET-Pakets im Versionsverwaltungssystem mit eingecheckt. Damit wird sichergestellt, dass zu jeder freigegebenen Version von ATHLET nachvollzogen werden kann, welche Tests mit welchen Grenzwerten bei der Freigabe verwendet wurden.

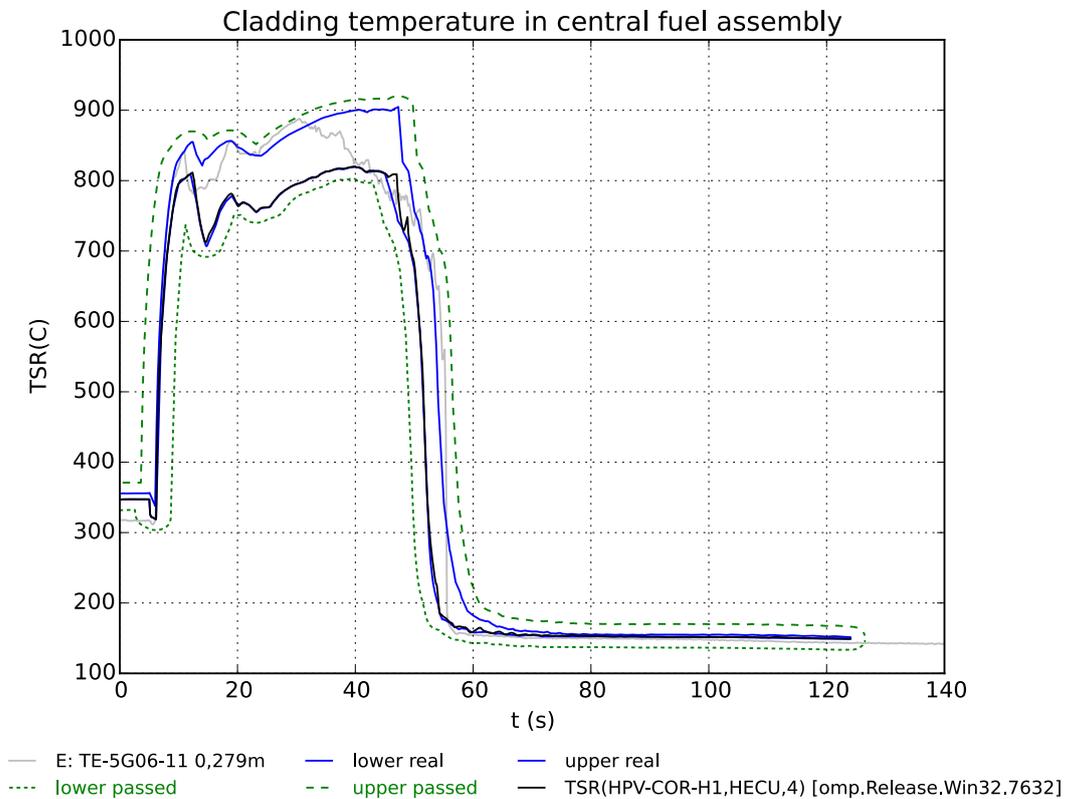
#### **4.2.3.3.4 Auswertung der Integraltests**

Die Ergebnisse der Simulationen im Rahmen der Integraltests werden in der Integrationsteststufe mit den Grenzwertkurven verglichen. Abb. 4.5 zeigt einen solchen Vergleich für die Größe, für die oben die Ermittlung der Grenzwertkurven beschrieben wurde. Zusätzlich zu den aus den freigegebenen Versionen von ATHLET ermittelten Grenzwertkurven (blau in Abb. 4.5) sind auch die verschobenen (für die Bewertung relevanten) Grenzwertkurven in grün dargestellt. Diese werden für die automatisierte Überprüfung verwendet: Für jeden Zeitschritt der Simulation wird, wie in 4.2.3.3.2 beschrieben, überprüft, ob die linear interpolierten Grenzwerte eingehalten werden. Wenn nicht, wird der Test als fehlgeschlagen markiert.

Eine solche Grenzwertverletzung ist in Abb. 4.6 dargestellt. In diesem Fall kam es durch eine Änderung am Code zu einer zu niedrig berechneten Hüllrohrtemperatur. Um den Entwicklern die Fehlersuche zu erleichtern, wird der Bereich der Grenzwertkurve, in dem die Grenzwertverletzung aufgetreten ist, rot markiert.

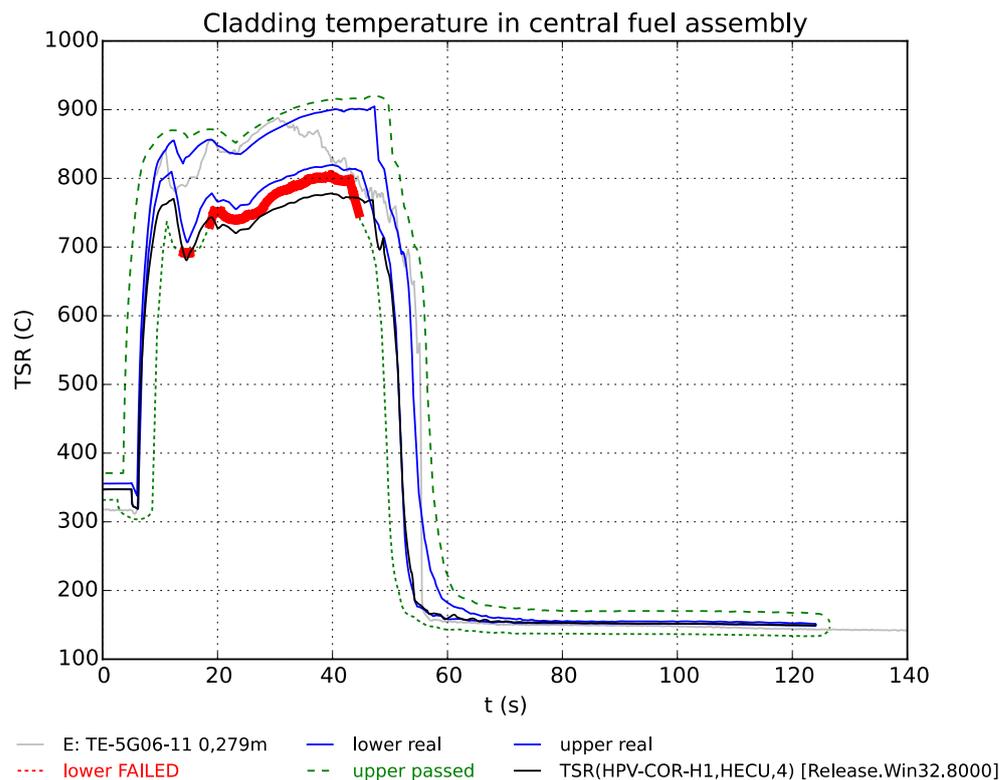
Bei Grenzwertverletzungen werden die Entwickler automatisch per Email informiert. Es ist dann ihre Aufgabe zu überprüfen, ob die Änderungen auf erwünschte Effekte zurückzuführen sind, oder ob möglicherweise ein Programmierfehler vorliegt. Sollten erwünschte Effekte zu einer Verletzung der Grenzwertkurven geführt haben, so sind die

Grenzwertkurven neu zu generieren, wobei die neue Rechnung in das Ensemble der validierten Rechnungen aufgenommen wird. Gegebenenfalls sind aber alte Rechnungen aus diesem Ensemble zu entfernen, falls die Grenzwertkurven zukünftig enger gezogen werden sollen.



**Abb. 4.5** Vergleich von Simulationsergebnissen (schwarz) mit den zugehörigen Grenzwertkurven (blau, grün) und Messwerten (hellgrau)

Jede Nacht werden mit dieser Methode die Simulationsergebnisse automatisch erzeugt, die für die weiterhin manuell durchzuführende Validierung von ATHLET notwendig sind. Eine vollständige Automatisierung ist nicht möglich, da weiterhin durch Expertenentscheidung festgestellt werden muss, dass die ATHLET-Ergebnisse die Messungen aus den Integraltests angemessen wiedergeben.



**Abb. 4.6** Fehlgeschlagener Test (die Grenzkurve für Zeitschritte mit Grenzwertverletzungen ist rot markiert)

Die Ergebnisse aller Unit-, Einzeleffekt-, Regressions- und Integraltests werden in einer standardisierten XML-Datei zusammen mit anderen Informationen wie der Ausgabe der Kompilierung oder die Graphen der Vergleichstests für jeden Lauf auf dem Jenkins-Server vorgehalten. Für jeden Lauf sind diese Informationen auch direkt auf einer Übersichtsseite verlinkt, sodass sie für die Entwickler einfach zugänglich sind.

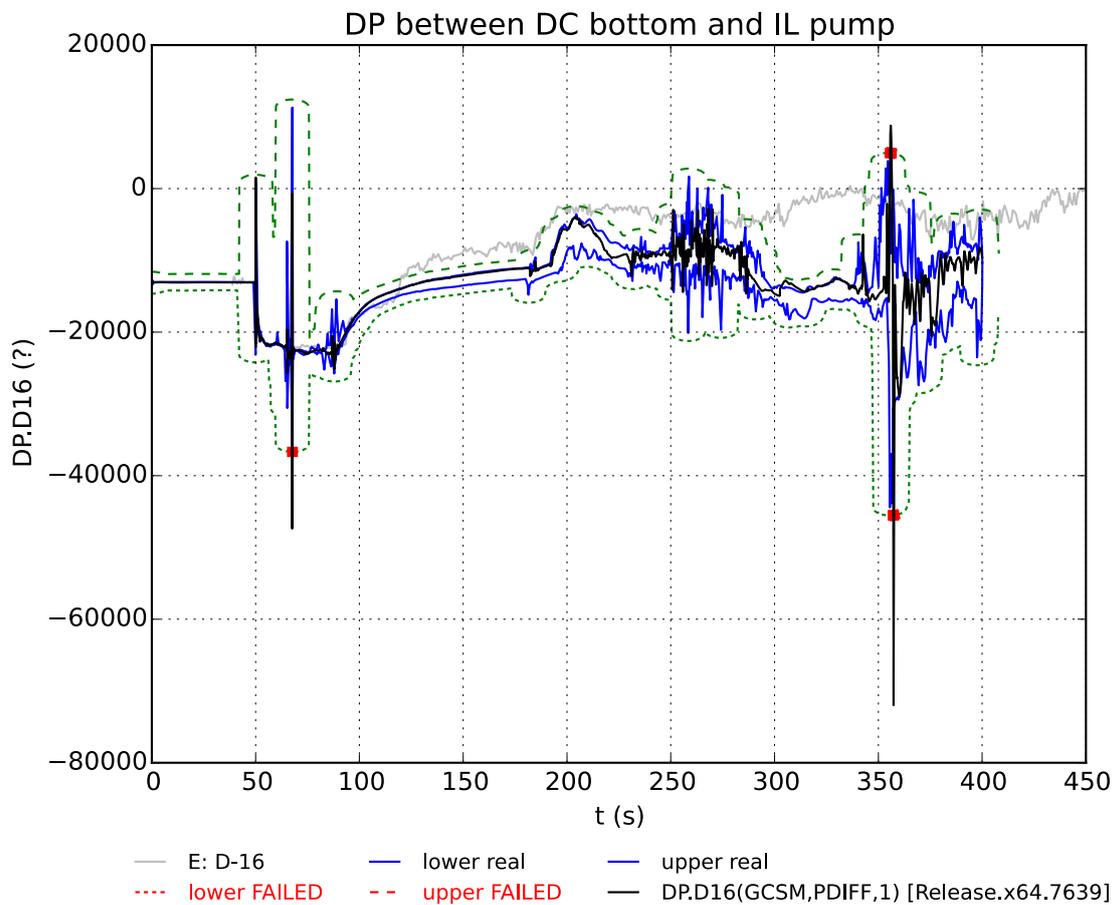
Damit ist es möglich, auch nach dem Ende eines Joblaufes nachzuvollziehen, welche Tests fehlgeschlagen sind.

#### 4.2.3.4 Bisher gesammelte Erfahrungen

Im Rahmen dieses Projekts war die Jenkins-Plattform für mehr als zwei Jahre im produktiven Einsatz. Es zeigt sich, dass dies sofort zu einer Steigerung der Produktivität geführt hat, da nun viele Probleme direkt nach einem Einchecken in das Versionsverwaltungssystem erkannt werden konnten. Dies betraf insbesondere Probleme mit den unterschiedlichen Buildsystemen auf Linux und Windows.

Vor dem Einsatz der kontinuierlichen Integration war das Testen, insbesondere das Simulieren von Integraltests und besonders das Auswerten der Ergebnisse, mit erheblichem Aufwand verbunden. Dieser ist nun deutlich reduziert und das Testen ist zu einem Bestandteil der täglichen Arbeit geworden.

Aufgrund der regelmäßigen Tests und der Erzeugung von Ergebniskurven, für die jeder Zeitschritt dargestellt wird, sind sehr vereinzelt auch unerwartete Ergebnisse beobachtet worden, wie z. B. kurzzeitige Druckspitzen (siehe z.B. Abb. 4.8). Diese weisen zum Teil auf numerische Instabilitäten bei der Berechnung der entsprechenden Größen hin und werden weiter analysiert.



**Abb. 4.7** Fehlgeschlagener Test durch Druckspitze in den Simulationsergebnissen

Auch zeigte sich, dass es notwendig ist, Testabweichungen möglichst zeitnah zu korrigieren, um keine zu großen „technischen Schulden“ /CUN92/ anzuhäufen, da diese eine spätere Korrektur erschweren. Außerdem zeigte sich, dass bereits vorhandene Testabweichungen, die noch nicht in Form aktualisierter Grenzkurven akzeptiert wurden, verhindern können, dass neue Grenzkurvenverletzungen erkannt werden.

#### **4.2.4 Entwicklungsumgebung**

Aus Gründen der Qualitätssicherung werden für ATHLET bestimmte Compilerversionen als Referenz festgelegt, die von allen ATHLET-Entwicklern verbindlich zu verwenden sind. Die gleichen Compilerversionen sind auch auf den beiden Continuous Integration Servern installiert. Die derzeitigen Referenz-Compiler sind Intel Fortran 16.4 sowie seit November 2017 der GFORTRAN Compiler gcc 7.2.0. Letzterer wurde eingeführt, um neue Möglichkeiten des Fortran-Sprachumfangs wie z. B. Submodules anwenden zu können. Um das Releasemanagement zu erleichtern, wurde außerdem entschieden, 32-bit Programmversionen nicht mehr zu unterstützen, da diese von den Anwendern nicht mehr nachgefragt wurden.

Um den GRS-internen Informationsaustausch zwischen Entwicklern und Anwendern zu verbessern, wurde die webbasierte Projektmanagementsoftware TRAC eingerichtet. Entsprechend der GRS QM-Richtlinie zur Programmentwicklung /GRS17/ sind unter TRAC u. a. der Qualitätssicherungsplan von ATHLET in Form eines leicht erweiterbaren Wikis hinterlegt und Vorgaben für die Programmentwicklung (Sprachstandards, Compilerversionen etc.) dokumentiert. Zusätzlich ist ein Ticketsystem eingerichtet. Für unterschiedliche Meilensteine (ATHLET-Versionen oder Patches) können hier Feature-Requests und Bug-Reports eingestellt und zur Bearbeitung an die Mitarbeiter verteilt werden. Dieses Ticketsystem kann zukünftig mit dem für externe Programmanwender auf der ATHLET User Area (siehe Kapitel 4.3.4) verfügbaren Ticketsystem verknüpft werden, um ein einheitliches Dokumentationssystem für den Verlauf aller Programmänderungen zu erhalten.

#### **4.2.5 Programmdokumentation**

Zur Benutzerführung beinhaltet ATHLET eine detaillierte und umfassende Programmdokumentation. Diese umfasst neben einem Benutzerhandbuch und einer umfangreichen Modellbeschreibung ein Programmierhandbuch zur Erläuterung programmtechnischer Details und einen Validierungsband mit der Dokumentation des aktuellen Validierungsstands. Die Programmdokumentation wurde kontinuierlich aktualisiert und allen Anwendern zusammen mit dem ATHLET-Rechenprogramm zur Verfügung gestellt. Die Werkzeuge zur automatischen Erzeugung der Dokumentation im Programmierhandbuch wurden hierfür grundlegend überarbeitet und an neue Anforderungen angepasst (Kapitel 4.2.6).

#### **4.2.6 Neue Tools zur automatischen Erzeugung der Programmdokumentation**

Bisher wurden Teile der Programmdokumentation im Programmer's Manual automatisch mit Hilfe der kommerziellen Software *FORCHECK* und eigener Fortran-Routinen erzeugt. Um jedoch das in ATHLET verwendete und breiter werdende Spektrum des Fortran-Sprachstandards besser zu unterstützen, wurde entschieden, die automatische Dokumentationserzeugung mittels Python neu umzusetzen.

Das Python-Skript zur Erstellung der im Programmierhandbuch dargestellten Dokumentation stützt sich auf die Unix-Funktion „*readelf --syms*“. Diese Funktion verwendet das Executable von ATHLET (bzw. ATHLET-CD) als Input und liefert eine Liste aller Symbole, sprich Routinen, Funktionen und globale Variablen, die im Executable vorhanden sind. Das Python-Skript interpretiert anschließend diese Liste und durchläuft auf Basis dieser Informationen den Quellcode. Das Tool ist objektorientiert programmiert und kann nach Kompilation von ATHLET eine komplette Dokumentation der Routinen, Module und globalen Variablen innerhalb von zehn Minuten automatisiert erstellen. Außerdem wird ein Flussdiagramm (Flowchart) aller Routinen im interaktiven JSON-Format ausgegeben, das in Form eines ausklappbaren Baumschemas einen schnellen Überblick über den ATHLET-Programmablauf ermöglicht.

Zusätzlich wird von dem Python-Skript z. B. geprüft, ob die Routinenköpfe, die für jedes ATHLET-Unterprogramm von den Entwicklern zwingend bereitgestellt werden müssen, vollständig enthalten sind. Dazu kommt ein neues Python-Tool zum Ergänzen bzw. zur Korrektur der Routinenköpfe, welches das Ergebnis des Dokumentationstools einliest und, falls erforderlich, die Programmköpfe im Quellcode anpasst.

### **4.3 Kooperation mit externen Programmanwendern**

#### **4.3.1 Zusammenarbeit in der Programmentwicklung**

ATHLET wurde und wird vorwiegend von der GRS entwickelt. Zum Teil werden jedoch spezielle Entwicklungen auch außerhalb der GRS vorangetrieben. Soweit die externen Entwicklungen von Interesse für weitere ATHLET-Nutzer sind, werden diese anschließend in die jeweils aktuelle ATHLET-Entwicklungsversion übernommen. Ein Beispiel ist die in Kapitel 2.4 beschriebene Implementierung zu überkritischem CO<sub>2</sub>, die vom IKE Stuttgart vorgenommen wurde. Die Einbindung extern entwickelter Modelle ist al-

lerdings erfahrungsgemäß mit erheblichem Aufwand verbunden. Hierbei müssen insbesondere folgende Arbeiten berücksichtigt werden:

- Die Erstimplementierung außerhalb der GRS erfolgt in der Regel in einer etwas älteren Programmversion und muss für die aktuelle Entwicklungsversion angepasst werden.
- Die für den ATHLET-Quellcode geltenden formalen Programmierrichtlinien müssen überprüft und umgesetzt werden.
- Die in der Regel für einen speziellen Einzelfall vorgenommene Erstimplementierung muss konsistent und unter Berücksichtigung spezieller Anforderungen weiterer ATHLET-Modelle in das Programm eingebunden werden.
- Die Programmdokumentation muss erweitert werden.
- Die Implementierung muss abschließend validiert werden.

Neben der Übernahme externer Entwicklungsarbeiten in das ATHLET-Rechenprogramm wurden und werden diese Arbeiten auch aktiv begleitet. Beispiele für laufende Arbeiten sind u. a. die Entwicklung neuer Stoffwertpakete für ATHLET (Hochschule Zittau-Görlitz) oder die Untersuchungen zu Druckstoßphänomenen (RUB).

#### **4.3.2 Neue Benutzerschnittstellen**

Neue Interface-Funktionalitäten ermöglichen insbesondere externen Anwendern, ATHLET in eigene Umgebungen einzubetten und mit externen Modellen zu koppeln. Die für ATHLET verfügbare Plug-in-Technik erlaubt, fremden Code als dll (Windows) oder shared object (Linux) zur Laufzeit in ATHLET einzubinden. Auf Basis dieser Methode wurden mehrere Schnittstellen geschaffen, die es dem Anwender ermöglichen, ohne großen Aufwand eigene Programmteile (z. B. neu entwickelte oder proprietäre Modelle) zu verwenden. Die Schnittstellen wurden so gestaltet, dass sie per Eingabe angesteuert werden können und korrekt in den Programmablauf eingebunden sind. Folgende Schnittstellen wurden (teilweise auf Anwenderanfrage) bereitgestellt:

- Schnittstelle für Korrelationen zur Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten für überkritisches Wasser
- Schnittstelle für Korrelationen zur Berechnung der kritischen Heizflächenbelastung

- Schnittstelle für (proprietäre) XL-Korrelationen (MASL Methode)
- Die bisherige Fortran-Schnittstelle zum Einbinden eigener GCSM Regler (als Fortran-Routine) wurde durch ein Plug-in ersetzt
- Schnittstelle zur Erweiterung des Verdampfungsmodells
- Generische Schnittstelle zur Kopplung von 3D-Neutronenkinetik-Codes: Die neue Schnittstelle wird bisher von den Programmen Quabox/Cubbox, DYN3D und PARCS genutzt.

Auch mit Blick auf zukünftige Kopplungen und erweiterten Kommunikationsbedarf werden jetzt alle Argumente des ATHLET-Programmaufrufs noch vor dem Lesen der Eingabedaten in einen Datenbereich (Scope) gespeichert und können entsprechend auch von einem Plug-in abgerufen werden. Diese Änderung war aufgrund der Kopplung mit den 3D-Neutronenkinetikprogrammen Quabox/Cubbox, DYN3D, PARCS erforderlich. Darüber hinaus wurde die bestehende Kopplung von ANSYS-CFD mit der ATHLET 3.0A-Version auf den neuen Stand der Programmversion 3.1A aktualisiert.

#### **4.3.3 Erfahrungsaustausch**

**Anwender-Feedback:** ATHLET wird im Rahmen unterschiedlicher Projekte und Fragestellungen von Partnern im In- und Ausland validiert und angewendet. Aus dem Erfahrungsrückfluss der Programmanwender ergeben sich wertvolle Hinweise zu wichtigen Programmerweiterungen, aber auch zu Modell- oder Programmschwächen. Die Nutzung dieser Erfahrungen für die Codeentwicklung wird durch eine intensive Zusammenarbeit mit den Anwendern sichergestellt.

Das entsprechend der Lizenzvereinbarung von den Anwendern erwartete Feedback wird über die User Area in Form eines Formulars standardisiert und regelmäßig erhoben. Seit der Freigabe der Programmversion 3.1A haben etwa 40 Organisationen diesen Weg der Rückmeldung genutzt. Die Formulardaten wurden sorgfältig ausgewertet und die Erkenntnisse haben, soweit erforderlich und möglich, Eingang in die laufenden Entwicklungsarbeiten gefunden.

Darüber hinaus haben zahlreiche GRS-interne und –externe Anwender das vorhandene Ticketsystem für Fragen oder Anwendungsprobleme genutzt. Die Anwender wurden daraufhin kontaktiert und bei der Anwendung von ATHLET unterstützt.

**Internationales ATHLET/ATHLET-CD Anwendertreffen:** Im Rahmen eines viertägigen internationalen Anwendertreffens in der GRS Garching im März 2016 wurden den externen Programmanwendern aktuelle ATHLET-Erweiterungen vorgestellt. Auch die User präsentierten zahlreiche Anwendungen und Ergebnisse und lieferten somit ein wichtiges Feedback für zukünftige Entwicklungen. Insgesamt besuchten mehr als 50 Gäste aus verschiedenen deutschen und ausländischen Organisationen die Veranstaltung. Das Programm mit insgesamt 40 Präsentationen kann auf der ATHLET User Area eingesehen werden:

<https://user-codes.grs.de/ATHLET/users-meetings/athlet-athlet-cd-users-meeting-2016>

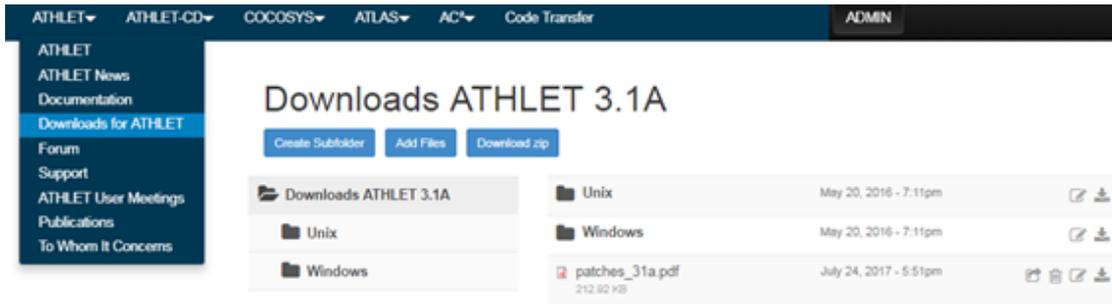
Das nächste Internationale Anwendertreffen zu dem gesamten AC<sup>2</sup>-Paket wird vom 19. – 21. November 2018 wieder in der GRS Garching stattfinden.

#### **4.3.4 Neue ATHLET User Area**

Die neue ATHLET User Area auf Basis der Open Source Software Open Atrium wurde fertiggestellt und für den externen Zugriff freigeschaltet:

<https://user-codes.grs.de/athlet>

Hierfür wurden u. a. mehrere Foren zu unterschiedlichen Themen sowie ein Support Ticket System insbesondere für die GRS-externen Programmanwender bereitgestellt. Die Nutzer der bisherigen User Area wurden auf das neue System migriert. Mittels eines passwortgeschützten Download-Bereichs erfolgt derzeit die Verteilung der aktuellen ATHLET Version 3.1A an diejenigen Nutzer, die die Code-Überlassung beantragt haben und einen gültigen Programmschein besitzen (Abb. 4.8). Da ATHLET als Bestandteil des Programmpakets AC<sup>2</sup> verteilt wird, welches auch die Programme ATHLET-CD, COCOSYS und ATLAS enthält, wurden in der User Area jeweils separate Bereiche für diese Programme erstellt. Durch das Forum und die Möglichkeit des Austauschs von bspw. Dateien unterstützt und erleichtert die User Area die Zusammenarbeit zwischen der GRS und externen Programmnutzern. Darüber hinaus werden weiterführende Programminformationen oder Publikationen auf der User Area bereitgestellt.



**Abb. 4.8** ATHLET User Area mit Menüstruktur und Downloadbereich

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Die GRS entwickelt, validiert und verteilt zur Bearbeitung aktueller Fragestellungen der Reaktorsicherheit(-sforschung) eigene Simulationsprogramme. Das Programmpaket AC<sup>2</sup>, bestehend aus den thermohydraulischen Systemrechenprogrammen ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS sowie der Simulatorsoftware ATLAS, dient der Analyse des Normalbetriebs und des anomalen Betriebs, von Störfällen wie auch von Unfällen in Reaktoranlagen und anderen kerntechnischen Einrichtungen. Im Rahmen des BMWi Vorhabens RS1538 zur *Rechenmethodenentwicklung für Reaktorsicherheitsanalysen mit dem Systemcode ATHLET* wurden Modelle und Methoden für die realistische Simulation von Kernkraftwerken nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik für ATHLET entwickelt.

Im Zentrum des Vorhabens standen die Weiterentwicklung und die Ertüchtigung von ATHLET zur Untersuchung bestehender und zukünftiger Reaktoren. Weitere Projektschwerpunkte waren das Voranbringen der Methoden für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, die Kooperation mit nationalen und internationalen Programmnutzern sowie die Weiterentwicklung bestehender und Etablierung neuer Methoden zur Qualitätssicherung der ATHLET-Programmentwicklung. Auf Basis der in Kapitel 1 dargestellten Gliederung des Arbeitsprogramms werden die in den drei technisch-wissenschaftlichen Arbeitspaketen erzielten Ergebnisse und Erkenntnisse nachfolgend in separaten Abschnitten zusammengefasst. Eine Bewertung der erzielten Ergebnisse und ein Ausblick auf zukünftige Arbeiten schließen den Bericht ab.

### 5.1 Weiterentwicklung der Modellierung wassergekühlter Reaktoren

Insbesondere für die Simulation von bestehenden und fortschrittlichen LWR der Generationen III und III+ wurden zahlreiche Modelle in ATHLET adaptiert, erweitert oder neu entwickelt. Die durchgeführten Arbeiten erfolgten vor dem Hintergrund sowohl aktueller sicherheitstechnischer Fragestellungen und innovativer Sicherheitssysteme, berücksichtigten aber ebenso die Ergebnisse von Programmvalidierung und -anwendung. Die wichtigsten Ergebnisse sind nachfolgend dargestellt.

Ein wesentliches Merkmal fortschrittlicher Reaktordesigns ist die Verwendung passiver Sicherheitssysteme zur Beherrschung von Störfällen. Häufig genutzt werden große Wasserpools als Wärmesenke zur Nachwärmeabfuhr aus dem Primärkreis und zum

Druckabbau. Zur Wärmeübertragung werden Wärmetauscherrohrbündel unterschiedlicher Geometrie verwendet. Da sich passive Systeme – anders als aktiv gesteuerte - ihren Betriebspunkt in Abhängigkeit von den vorliegenden Randbedingungen transient suchen, ist es zur zuverlässigen Bestimmung der Leistungsfähigkeit des Wärmeübertragers von entscheidender Bedeutung, die thermohydraulischen Strömungsbedingungen im Wasserpool detailliert vorherzusagen. Der Zustand im Pool ist geprägt von einer inhomogenen Temperaturschichtung und großskaliger Konvektionsströmung. Zur Abbildung dieser Phänomene konnte das ATHLET-eigene 3D-Modell adaptiert und erfolgreich um ein Wasserspiegelmodell erweitert werden. Das Wasserspiegelmodell ermöglicht die scharfe Auflösung der Phasengrenzfläche zwischen stratifiziertem Liquid und der Gas-Wasserdampf-atmosphäre sowie die Simulation des Massen- und Energieaustauschs über den Gemischspiegel hinweg. Das erweiterte 3D-Modell hat bereits im Rahmen des EASY-Projekts RS1535A bei der Simulation des Flutbeckens der INKA-Versuchsanlage Einsatz gefunden.

Vor dem Hintergrund neuer, sicherheitstechnischer Fragestellungen wurde ATHLET für die Simulation von Druckstößen weiterentwickelt. Druckstöße können die Integrität des Reaktorkühlsystems gefährden und entstehen beispielsweise infolge schlagartiger Kondensationsvorgänge, zu deren Simulation das Kontaktkondensationsmodell von ATHLET geeignet erweitert wurde. Im Rahmen des Projekts wurden Analysen zu unterschiedlichen, einen Druckstoß auslösenden Vorgängen durchgeführt. Hierzu zählen neben schnellen Kondensationsvorgängen in horizontalen oder vertikalen Rohrleitungssegmenten auch schnelle Armaturenbewegungen und die Beschleunigung mit anschließendem Aufprall einer Wassersäule. Es konnte demonstriert werden, dass ATHLET alle Vorgänge qualitativ zuverlässig reproduziert und somit grundsätzlich zur Simulation und Vorhersage von Druckstößen infolge der genannten Szenarien geeignet ist.

Zur Simulation der Strömungsvorgänge im Reaktorkühlsystem von LWR verfügt ATHLET über eine leistungsfähige Zweiphasenmodellierung. Zur Abbildung verschiedener sicherheitsrelevanter Strömungssituationen wurde die Modellierung weiter erüchtigt:

- Für die Simulation des Wiederauffüllvorgangs nach einem großen Kühlmittelverluststörfall wurde das Zwischenphasenreibungmodell um eine Korrelation für Ringströmungen in vertikalen Geometrien bei hohen Dampfgehalten erweitert. Anhand von Nachrechnungen verschiedener Versuchsanlagen wie FEBA,

FLECHT oder PERICLES konnte gezeigt werden, dass damit Wassermittels und Wiederbenetzung beim Wiederauffüllen des Reaktorkerns, die in dieser Phase einen wesentlichen Einfluss auf die Kernkühlung haben, realistischer simuliert werden können.

- Für die Simulation von Störfällen und Transienten in SWR wurde das Bortransportmodell von ATHLET erweitert. Es können nun temperaturabhängige Löslichkeiten von unterschiedlichen borhaltigen Lösungen betrachtet werden, so z.B. auch Natrium-Pentaborat, das als Neutronengift in SWR Einsatz findet.
- Das in ATHLET verwendete Modell zur Berechnung kritischer Ausströmraten infolge von Kühlmittelverluststörfällen wurde weiter verbessert. Neben thermischem Ungleichgewicht der beiden Phasen wird nun auch das dynamische Ungleichgewicht mittels eines Phasendriftmodells berücksichtigt, um die Leckausströmung realistischer abzubilden.

Auf Basis von Anwenderrückmeldungen konnten im Rahmen des Projekts zahlreiche physikalische Modelle erweitert und besser an mögliche Anwendungssituationen angepasst werden. Eine Verbesserung des ATHLET-Gemischspiegelmodells ermöglichte z. B. die genauere Abbildung hochdynamischer Vorgänge im Druckhalterabblasebehälter, die im Zuge einer am HZDR durchgeführten Störfallsimulation beobachtet worden waren. Insgesamt ist es durch die Modellerweiterungen gelungen, ATHLET nachhaltig für die Simulation eines weiten Spektrums von Reaktoranlagen und Stör- und Unfallabläufen zu qualifizieren.

Das ATHLET Thermofluidmodul bietet dem Anwender zwei verschiedene Gleichungsmodelle zur Auswahl, ein 5-Gleichungsmodell mit einer Mischungsimpulsbilanz für beide Phasen und ein 6-Gleichungsmodell (2-Fluidmodell) mit vollständig separierten Impulsbilanzen. Zur weiteren Etablierung des 2-Fluidmodells, das sich international in vergleichbaren Programmen als Standard durchgesetzt hat, wurde dieses (ähnlich dem 5-Gleichungsmodell) um ein Gemischspiegelmodell ergänzt. Gleichwohl können in Reaktoren im Störfallverlauf sehr komplexe Strömungsphänomene auftreten, die auch von einem 6-Gleichungsmodell nicht vollständig beschrieben werden können. Ein Beispiel ist die Ringtropfenströmung z.B. beim Top-Down-Quenching im Reaktorkern nach einem Kühlmittelverluststörfall, die durch unterschiedliche thermohydraulische Zustände der Wassertropfen im Rohrrinnern und des Wasserfilms an der Wand charakterisiert ist. Zu ihrer Beschreibung werden derzeit für verschiedene Systemcodes Mehrfeldermodelle aktiv entwickelt. Chancen und Herausforderungen der Implementierung eines

Mehrfeldermodells in ATHLET wurden im Rahmen dieses Projekts analysiert und ein mögliches Modellgleichungssystem als Basis für zukünftige Arbeiten abgeleitet.

Darüber hinaus wurde auch die thermo-strukturelle Modellierung des Reaktorkerns in ATHLET verbessert. Von besonderer Bedeutung sind hierbei die Simulation des Wärmeübergangs und die Vorhersage des Überschreitens der kritischen Heizflächenbelastung. Die in ATHLET implementierten Kriterien für das Erreichen von DNB (departure of nucleate boiling) hatten sich als sehr konservativ herausgestellt, was sich vor allem für BEPU-Analysen als ungeeignet erwiesen hat. Die DNB-Kriterien wurden dem Stand der Technik angepasst.

Insbesondere für Hochtemperaturreaktoren spielt die Wärmeabstrahlung des Reaktor-druckbehälters im Störfallverlauf eine sicherheitsrelevante Rolle. Um den Strahlungswärmeaustausch mit der Umgebung in ATHLET effizient erfassen zu können, wurde das bestehende Strahlungsmodell um die Möglichkeit der Betrachtung einer Strahlungswärmesenke erweitert, sodass entsprechende Störfälle in Hochtemperaturreaktoren realistischer simuliert werden können.

Für eine erfolgreiche Durchführung und Bewertung von Sicherheitsanalysen spielt neben einem korrekt arbeitenden Simulationsprogramm auch die Anleitung und Führung des Nutzers durch die einzelnen Analyseschritte eine zentrale Rolle. Zu diesem Zweck beinhaltet das ATHLET-Rechenprogramm Werkzeuge des Pre- und Postprocessings, die den Anwender bei der Vorbereitung, Durchführung, Analyse und Visualisierung einer Störfallsimulation unterstützen. Die Werkzeuge werden gemeinsam mit ATHLET verteilt und konnten im Rahmen des abgeschlossenen Projekts gepflegt, verbessert und um neue Tools ergänzt werden.

## **5.2 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen**

Die international wachsende Bedeutung von Unsicherheitsanalysen, die sich auch in den Anforderungen an die Nachweisführung in den Sicherheitsanforderungen für Kernkraftwerke /BMU15/ widerspiegelt, erfordert die Entwicklung und Bereitstellung entsprechender Methoden für ATHLET. Zur Quantifizierung der Aussagesicherheit deterministischer Rechenmodelle mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen hat die GRS in der Vergangenheit eine allgemein anwendbare Methode entwickelt, die in dem GRS-Programm SUSA umgesetzt ist. Ein wesentlicher und schwieriger Aspekt ist hier-

bei die Bestimmung der Unsicherheiten der physikalischen Modellierung des verwendeten Rechenprogramms, hier ATHLET, die in aller Regel den wesentlichen Beitrag zur Gesamtergebnisunsicherheit liefern. Zu ihrer Quantifizierung sind Kenntnisse aus der Modellimplementierung sowie Erfahrungen aus Versuchsnachrechnungen zur Validierung des betreffenden Modells erforderlich. Beides ist üblicherweise nur der programmentwickelnden Organisation bekannt. Innerhalb des vorliegenden Projekts wurde eine neue Methodik entwickelt, mit der die GRS auch zum internationalen OECD/NEA/CSNI-Projekt SAPIUM beiträgt. Hauptziel von SAPIUM ist die Definition einer ausgereiften und international anerkannten Methode zur Quantifizierung der Unsicherheiten von Modelleingangsparametern in Form eines Best Practice Guide. Mit ihren Arbeiten trägt die GRS maßgeblich zu einer weiteren Etablierung und Qualifizierung von Unsicherheitsanalysen für die Sicherheitsbewertung von Reaktoren bei.

Für die Durchführung einer Unsicherheitsanalyse ist die wissenschaftlich fundierte Vorgabe von Unsicherheiten der physikalischen Modellierung unerlässlich. Hierfür sind grundsätzlich die Identifikation der für die betrachtete Anwendung relevanten Modellunsicherheiten sowie deren Quantifizierung erforderlich. Da bisher hinsichtlich neuer, in Generation IV Reaktoren eingesetzter Arbeitsmedien kaum Kenntnisse über Unsicherheiten vorlagen, wurde eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zu einem NACIE-UP-Experiment durchgeführt, das Flüssigmetall (LBE) als Arbeitsmedium nutzt. Neben der Identifikation und Quantifizierung wesentlicher Modellunsicherheiten, die für zukünftige Analysen genutzt werden können, lieferten die Arbeiten Hinweise auf Weiterentwicklungspotential in ATHLET zur Simulation entsprechender Reaktoren.

### **5.3 Qualitätssicherung der Programmentwicklung und Kooperation mit nationalen und internationalen Programmanwendern**

Um allen ATHLET-Anwendern ein zuverlässiges Analysewerkzeug zur Verfügung stellen zu können, sind umfangreiche Maßnahmen der Qualitätssicherung erforderlich. Begleitend zur Programmentwicklung betrifft dies insbesondere die Dokumentation und das Testen des Quellprogramms sowie die Erstellung und Freigabe neuer Programmversionen. Vor dem Hintergrund international spezifizierter Standards zur Qualitätssicherung in der Softwareentwicklung wurden die bestehenden qualitätssichernden Maßnahmen an neue softwaretechnische Möglichkeiten angepasst.

Auf Basis der *Continuous Integration* Software Jenkins wurden zwei Server unter Windows und Unix eingerichtet, die den ATHLET-Quellcode bei jeder Programmänderung, die vom Entwicklerteam in das ATHLET-Versionsverwaltungssystem eingepflegt wird, umfangreich und automatisiert testen. Der Testumfang reicht von einfachen Softwaretests bis hin zu Integraltests mit einer automatisierten Bewertung der Simulationsergebnisse und Erstellung eines Testreports, um das Entwicklerteam im Falle einer (möglicherweise ungewollten) Ergebnisveränderung unmittelbar zu informieren. Das *Continuous Integration* Verfahren ist innerhalb der Projektlaufzeit bereits zu einem festen Bestandteil des ATHLET-Entwicklungsprozesses geworden. Mittels dieser Unterstützung hat sich auch der Prozess der Freigabe neuer ATHLET-Programmversionen vereinfacht, da zahlreiche Tests bereits während der Entwicklungsphase ablaufen. Im Rahmen von RS1538 konnte die neue Programmversion ATHLET 3.1A allgemein freigegeben und mittlerweile an ca. 40 Organisationen verteilt werden.

Ein weiterer Aspekt des abgelaufenen Projekts war die enge Kooperation mit den Programmanwendern und den GRS-externen Programmentwicklern, um deren Erfahrungen in die Programmentwicklung einfließen und allen Nutzern zugänglich machen zu können. Zur Sicherstellung eines intensiven Austauschs und zur effektiven Nutzbarmachung externer Entwicklungsarbeiten wurden folgende Maßnahmen ergriffen:

- Zum Informations-, Erfahrungs- und Datenaustausch wurde eine neue, moderne ATHLET User Area mit Foren, Ticketsystem und passwortgeschützten Downloadbereichen aufgebaut. Neben ATHLET unterstützt die User Area auch die anderen Module von AC<sup>2</sup>.
- In Ergänzung zu bilateralen Projekttreffen wurde im Jahr 2016 ein viertägiges Anwendertreffen mit ca. 50 nationalen und internationalen Gästen in der GRS Garching abgehalten, um neue Entwicklungen und Erfahrungen zu kommunizieren.
- Für GRS-externe Modellentwicklungen wurden auf Anfrage verschiedenen Universitäten und Forschungseinrichtungen, u. a. KIT und TUM, bedarfsgerecht Schnittstellen auf Basis der Plug-in Technik bereitgestellt.
- Externe Modellentwicklungen können nach erfolgreicher Fertigstellung in das ATHLET-Rechenprogramm übernommen werden, um allen Anwendern zugute zu kommen. Die vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart durchgeführte Implementierung der Stoffwerte von überkri-

tischem CO<sub>2</sub> zur Simulation eines neu vorgeschlagenen, autarken Systems zur Nachwärmeabfuhr wurde in ATHLET integriert.

Darüber hinaus lieferte die kontinuierliche Unterstützung aller Programmnutzer einen wichtigen Beitrag zum zielführenden und erfolgreichen Einsatz von ATHLET innerhalb vieler weiterer, wesentlich vom BMWi geförderter Projekte und somit auch zum deutschen Kompetenzerhalt in der Reaktorsicherheit.

#### **5.4 Fazit und Ausblick**

Die übergeordnete Zielsetzung des Projekts RS1538 war, den zahlreichen, im Umgang mit ATHLET geschulten Anwendern ein leistungsstarkes, zuverlässiges und anwenderfreundliches Werkzeug zur Verfügung zu stellen, das die Durchführung von Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik für bestehende und zukünftige Reaktoren und kerntechnische Einrichtungen erlaubt. Zu diesem Zweck wurden zahlreiche, insbesondere thermohydraulische Modelle für LWR in ATHLET konsolidiert, erweitert und neu entwickelt sowie auch Methoden für Sicherheitsanalysen im internationalen Kontext weiterentwickelt. Die durchgeführten Arbeiten ermöglichen die detaillierte Simulation wichtiger, sicherheitsrelevanter Phänomene im Rahmen von Analysen zu postulierten Transienten, Störfällen und Unfällen in Reaktoren, die bisher nur eingeschränkt oder gar nicht berücksichtigt werden konnten. Mit Abschluss des Projekts kann ATHLET viele der bestehenden Baulinien von Leistungsreaktoren der Generationen I, II und III simulieren und verfügt darüber hinaus über Programmerweiterungen, die die Simulation zukünftiger, fortschrittlicher und innovativer Reaktorkonzepte der Generationen III+ und IV sowie kleiner modularer Reaktoren (SMR) erlauben. Mit Blick auf die große, internationale Anwendergemeinde von ATHLET bietet dies die Basis für die Entwicklung und Etablierung neuer nuklearer Sicherheitsstandards für kerntechnischen Einrichtungen im Inland, im angrenzenden europäischen Ausland sowie weltweit.

Die Entwicklung der Methoden für Reaktorsicherheitsanalysen ist ein kontinuierlicher Prozess, der mit dem fortgeschriebenen Stand von Wissenschaft und Technik Schritt halten muss und mit Ende des vorliegenden Projekts nicht abgeschlossen ist. Es ist daher geplant, die Arbeiten an ATHLET auch in der Zukunft weiterzuführen und im Rahmen unterschiedlicher Projekte zu vertiefen. So ist mit Blick auf die detaillierte Beschreibung komplexer, zweiphasiger Strömungsformen im Reaktorkern die Implemen-

tierung eines 3-Feldermodells in ATHLET vorgesehen, dessen Basis die hier durchgeführte Machbarkeitsstudie liefern wird. Zur Simulation von Druckstößen in Rohrleitungsnetzen sind ergänzende Entwicklungen und Validierungsrechnungen am Lehrstuhl für Energiesysteme und Energiewirtschaft (LEE) der Ruhruniversität Bochum geplant. Darüber hinaus werden laufende Entwicklungen zu verbesserten numerischen Verfahren (RS1558) und zur genaueren und schnelleren Stoffwertberechnung (1501552, SBRS-AC2) in die ATHLET-Entwicklung integriert werden.

Für die Weiterentwicklung von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen innerhalb des laufenden internationalen SAPIUM-Projekts wird die GRS ihre neu gewonnenen Erfahrungen und Erkenntnisse einbringen, um eine auch allgemein anerkannte Methodik zum zentralen Aspekt der Quantifizierung von Modellunsicherheiten zu formulieren. Die Überprüfung der neuen Methodik soll im Rahmen von SAPIUM von der GRS anhand des hierfür weiterentwickelten kritischen Ausströmmodells von ATHLET durchgeführt werden.

Hinsichtlich der im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum NACIE-UP Fundamental Test 1 aufgeworfenen Fragen zur Modellierung der Versuchsanlage sind weiterführende Untersuchungen im Rahmen der ATHLET-Validierung (RS1548) geplant. Der vorhandene Datensatz soll unter Einbeziehung neuer Informationen der Experimentatoren ertüchtigt und überprüft werden.

Nach dem erfolgreichen Aufbau einer *Continuous Integration* Plattform für automatisierte Softwaretests zur Qualitätssicherung der ATHLET-Programmentwicklung ist in einem nächsten Schritt die Vergrößerung des Testumfangs geplant. Ziel ist daher, möglichst viele Modelle und Schnittstellen von ATHLET regelmäßig automatisiert zu testen. Hierfür werden auch Testrechnungen für ATHLET-Kopplungen mit den weiteren Modulen von AC<sup>2</sup>, mit 3D-Neutronenkinetikprogrammen und mit CFD-Codes eingerichtet. Es werden Datensätze herangezogen, die im Rahmen weiterer Projekte (z. B. EASY) in der GRS entwickelt und verifiziert wurden.

Die intensive Zusammenarbeit mit allen nationalen und internationalen Programmwendern wird wieder ein wichtiger Bestandteil des kommenden Nachfolgevorhabens sein. Gemeinsame Arbeiten zur Programmentwicklung und -validierung sind u. a. mit der RUB (Druckstöße, Validierung Verdampfungs-/Kondensationsmodelle), der HSZG (Stoffwertentwicklung), der TUM (HTC für überkritisches Wasser) und dem KIT (Validierung Flüssigmetall, HTC für überkritisches Wasser) geplant. Für den Erfahrungsaus-

tausch auf breiterer Ebene wird das nächste internationale AC<sup>2</sup>-Anwendertreffen im November 2018 in der GRS Garching veranstaltet.

Die allgemeine Freigabe der neuen ATHLET-Programmversion 3.2 ist für das vierte Quartal 2018 avisiert. Viele der im Rahmen des abgeschlossenen Vorhabens RS1538 durchgeführten Modellentwicklungen werden damit für alle Programmanwender verfügbar werden.



## Literaturverzeichnis

- /ANG18/ M. Angelucci,, I. Di Piazza, D. Martelli: Experimental campaign on the HLM loop NACIE-UP with instrumented wire-spaced fuel pin simulator; Nuclear Engineering and Design 332 (2018), 137-146; 2018
- /BAC18/ J. Baccou et al.: SAPIUM: A Systematic Approach for Input Uncertainty Quantification; Proceedings of BEPU 2018 Conference, Lucca; 2018.
- /BEC00/ K. Beck; Extreme Programming Explained: Embrace Change; Addison-Wesley, Reading, MA.; 2000.
- /BLO77/ J.A. Block, C.J. Crowley, P.H. Rothe, G.B. Wallis, L.R. Young: An evaluation of PWR steam generator water hammer; NUREG-0291. Technical Report, USNRC; 1977.
- /BMU15/ Bundesministerium für Umwelt, Natur, Bau und Reaktorsicherheit, Sicherheitsanforderungen für Kernkraftwerke, Neufassung vom 3. März 2015, BAnz AT 30.03.2015 B2, 2015.
- /BOM14/ C. Bombardieri, T. Traudt, C. Manfletti: Experimental and Numerical Analysis of Water Hammer During the Filling Process of Pipelines; Space Propulsion Conference, 19. – 22. Mai 2014, Cologne, Germany; 2014.
- /CEU13/ S. Ceuca, R. Macián-Juan: Validation of an Hybrid Surface Renewal Theory Based HTC Model for the Simulation of Condensation Induced Water Hammer; ICONE 21; Chengdu; China; 2013.
- /CHE06/ X. Cheng und N. Tak: Investigation on turbulent heat transfer to lead-bismuth eutectic flows in circular tubes for nuclear applications; NED vol. 236, pp. 385-393; 2006.
- /CRE08/ A. de Crécy, et al.: 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.

- /CUN92/ W. Cunningham; The WyCash Portfolio Management System; Proc. OOPSLA, ACM, 1992.
- /DIR14/ S. Dirndorfer: Condensation induced water hammer - CIWA : Abschlussbericht zum BMBF geförderten Teilprojekt F ; Bericht der Universität der Bundeswehr München; Projektlaufzeit: 07/2010 - 12/2013; Univ. der Bundeswehr München, Inst. für Hydromechanik und Wasserwesen; Neubiberg; 2014.  
<https://www.tib.eu/suchen/id/TIBKAT:83351461X/>
- /DIR17/ S. Dirndorfer: Steam Condensation Induced Water Hammer in a Vertical up-fill Configuration within an Integral Test Facility: Experiments and Computational Simulations; Dissertation; Univ. der Bundeswehr München, Neubiberg; 2017.  
<http://athene-forschung.unibw.de/doc/116017/116017.pdf>
- /ECO11/ [http://www.ecosimpro.com/wp-content/uploads/2015/02/EcosimPronewsletter\\_N5\\_december\\_2011.pdf](http://www.ecosimpro.com/wp-content/uploads/2015/02/EcosimPronewsletter_N5_december_2011.pdf)
- /EPR92/ Electric Power Research Institute (EPRI): Water Hammer Prevention, Mitigation, and Accommodation, Volume 6: Review of Plant Systems and Procedures; Technical Report; NP-6766; 1992.
- /ESN 13/ ESNII+, Evaluation of the ASTRID core behaviour in ULOF before sodium boiling, D6.1.3-1, 14/07/2016
- /FEA11/ M. C. Feathers: Effektives Arbeiten mit Legacy Code. Refactoring und Testen bestehender Software; Mitp-Verlag; Heidelberg; 2011.
- /FOR16/ N. Forgione et al.: SESAME Task 5.4: NACIE\_UP benchmark activity - Proposal for a Numerical Benchmark on thermal-hydraulics for heavy liquid metal cooled system; Pisa; 2016.
- /GLS94/ H. Glaeser, E. Hofer, M. Kloos und T. Skorek: Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchungen von Analysen mit Thermalhydraulik Rechenprogrammen; GRS-A-2177, Garching; Juli 1994.

- /GOU08/ C.T.Goudar, J.R.Sonnad; Comparison of the iterative approximations of the Colebrook-White equation; Fluid Flow and rotating Equipment; 2008.^
- /GRA72/ R. L. Graham; An Efficient Algorithm for Determining the Convex Hull of a Finite Planar Set; Information Processing Letters Vol. 1: pp 132–133. DOI 10.1016/0020-0190(72)90045-2, 1972.
- /GRO06/ D. C. Groeneveld et al.: The 2006 CHF look-up table; Nuclear Engineering and Design 237, 1909-1922; 2006.
- /GRO82/ D. C. Groeneveld, J.C. Stewart: The minimum film boiling temperature for water during film boiling collapse; Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Heat Transfer Conference; pp. 393-398, Munich; 1982.
- /GRS17/ Maßnahmen zur Qualitätssicherung von Computerprogrammen der GRS (QM-Richtlinie Programmentwicklung); QM-Handbuch, Teil 3: Fachanweisung 3 Fachliche Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen, Anlage IV; GRS; 2017.
- /GRS 15/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktors (GRS) gGmbH; Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit; Abschlussbericht des F&E-Vorhabens RS1507; GRS – 387; September 2015.
- /GRS77/ Gesellschaft für Reaktorsicherheit: „Jahresbericht 1977“; Gesellschaft für Anlagen- und Reaktors (GRS) mbH; Köln (1977); <https://www.grs.de/content/grs-jahresbericht-1977>.
- /HEJ18/ J. Herb; A Continuous Integration Platform for the Deterministic Safety Analyses Code System AC<sup>2</sup>; Proceedings of the 2018 26<sup>th</sup> International Conference on Nuclear Engineering ICONE26; London, England; July 22-26, 2018.

- /HEO14/ Heo Jaeseok, Lee Seung-Wook, Kim Kyung Dom: Implementation of Data Assimilation Methodology from physical Model Uncertainty Evaluation using post-CHF Experimental Data; Nuclear Engineering and Technology, Vol. 46, No. 5; October 2014.
- /HEW92/ G.F. Hewitt, J.M. Delhay, N. Zuber: Multiphase Science and Technology, Volume 6; 107ff; Hemisphere Publishing Cooperation; ISBN 0-89116-990-3; 1992.
- /HOB96/ W.Hobbhahn: Beschreibung der Direktkondensation von Dampf an unterkühltem Wasser mit Anwendung in der Störfallberechnung von Druckwasserreaktoren, GRS-81; 1996.
- /IAE01/ IAEA-TECDOC-1203: Thermohydraulic relationships for advanced water cooled reactors; Wien; April 2001.
- /IAE91/ IAEA-TECDOC-626; Safety Related Terms for Advanced Nuclear Plants; Wien; 1991.
- /IAE09/ International Atomic Energy Agency; Specific Safety Guide No. SSG-2 "Deterministic Safety Analysis for Nuclear Power Plants"; ISBN 978-92-0-113309-0; Vienna; 2009.
- /IDE86/ Idelchik; Handbook of hydraulical resistance; Hemisphere Publishing Co., 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.
- /KOV15/ A. Kovtonyuk, S. Lutsanych, F. Moretti, A. Petruzzi: Development and Assessment of a Method for Evaluating Uncertainty of Input Parameters; Proceedings of NURETH-16 Conference; Chicago; 2015.
- /LAF16/ A. Langenfeld: Restrukturierung der Subroutine MGAM0 und Modifikation einiger Modelle; Technische Notiz TN-LAF-16/06; GRS Garching; 2016.

- /LER14/ G. Lerchl: Verbesserung der Gemischspiegel-Modellierung in ATHLET; Technische Notiz TN-LER-14/01; GRS-Garching; November 2014.
- /LER98/ G. Lerchl et. al.; Separierte Impulsbilanzen in ATHLET; GRS-A-2546; 1998.
- /LER16/ G. Lerchl et al.; ATHLET 3.1A – Validation.“ GRS - P - 1 / Vol. 3, Rev. 4. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH; 2016.
- /LEY11/ S. Leyer und M. Wich: The Integral Test facility Karlstein – INKA; Proceedings of the 14th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics (NURETH-14); Toronto, Ontario, Canada; September 25-30, 2011.
- /LIU17/ C. Liu: Numerical Simulation of Water Hammer with the System Analysis Code ATHLET; Masterarbeit, TUM Lehrstuhl für Nukleartechnik; 2017.
- /MEN17/ R. Mendizabal et al.: Post-BEMUSE Reflood Model Input Uncertainty Methods (PREMIUM) Benchmark; NEA/CSNI/R(2016)18; June 2017.
- /MIK09/ K. Mikityuk: Heat transfer to liquid metal: Review of data and correlations for tube bundles; NED Vol. 239, pp. 680-687; 2009.
- /OEC07/ Handbook on Leadbismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermalhydraulics and Technologies; NEA No. 6195; OECD; 2007.
- /OKK17/ B. Okken; Python Testing with pytest; Pragmatic Bookshelf; 2017.
- /PAT17/ N. Pathania; Pro Continuous Delivery: With Jenkins 2.0; Apress, New York, NY; 2017.
- /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 program; Nuclear Engineering and Design; Vol. 241, pp. 4206-4222, 2011.

- /PIA16/ I. Di Piazza et al.: SESAME – NACIE-UP Setup for PLOFA; Deliverable; SESAME Workflow – D4.9; Horizon 2020 Program; 2016.
- /PIA13/ I. Di Piazza et al.: An heavy liquid metal loop for mixed convection experiments with instrumented pin bundle; Proceedings of Heavy Liquid-Metal Coolants in Nuclear Technologies (HLMC); Obninsk, Russia; 2013.
- /POU11/ Pourgol-Mohamad M., Mosleh A., Modarres M.: “Structured treatment of model uncertainty in complex thermal-hydraulics codes: Technical challenges, prospective and characterization”, Nuclear Engineering and Design, 241, 285-295, 2011.
- /ROZ15/ D. Rozzia et al.: Experimental investigation on powder conductivity for the application to double wall heat exchanger (NACIE-UP); NED, vol. 283, pp. 100-113; 2015.
- /SCH15/ P. Schöffel et al.: Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit; GRS-Bericht GRS 387; 2015.
- /SCH02/ K. Schwaber, Ken, M. Beedle; Agile software development with Scrum; Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ; 2002.
- /SKT18/ T. Skorek: V&V and Uncertainty Quantification of Code Models; Proceedings of BEPU 2018 Conference, Lucca; 2018.
- /SKT17/ T. Skorek: Input uncertainties in uncertainty analyses of systems codes: quantification of physical model uncertainties on the basis of CET (Combined Effect Tests); NED, vol.321, pp. 301-317; 2017.
- /SKO16/ T. Skorek und L. Tiborcz: Validation of ATHLET System Code, scaling effects by simulation of reflooding experiments; Paper no N11A0055, Proceedings of 11<sup>th</sup> International Topical meeting on Nuclear Thermal Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-11); Gyeongju, Korea Rep.; October 2016.

- /SMA11/ J. Smart: Jenkins: The Definitive Guide; O'Reilly Media; Sebastopol, CA; 2011.
- /RIL14/ M. Rilee, T. Clune; Towards test driven development for computational science with pFUnit; Proceedings of the 2nd International workshop on Software Engineering for High Performance Computing in Computational Science and Engineering, SE-HPCCSE'14: pp 20-27. New Orleans, LA, November 16-21, 2014. DOI 10.1109/SE-HPCCSE.2014.5.
- /TRA16/ T. Traudt, C. Bombardieri, C. Manfretti: Influences on water-hammer wave shape: an experimental study; CEAS Space J, 8:3, pp 215–227; 2016.
- /UNA11/ C. Unal et al.: Improved best estimate plus uncertainty methodology, including advanced validation concepts, to license evolving nuclear reactors; Nuclear Engineering and Design, 241, 1813-1833; 2011.
- /URB14/ C. Urban and M. Schlüter: Investigations on the stochastic nature of condensation induced water hammer. International Journal of Multi-phase Flow, 67:1-9; 2014.
- /VAT92/ B. R. Vatti; A generic solution to polygon clipping; Communications of the ACM 35, pp 56-63; 1992.
- /VEN 15/ J. Venker: Development and Validation of Models for Simulation of Supercritical Carbon Dioxide Brayton Cycles and Application to Self-Propelling Heat Removal Systems in Boiling Water Reactors  
Dissertation, IKE, ISSN–0173–6892, 31.03.2015
- /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.



## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	AC <sup>2</sup> mit ATHLET als Bestandteil der GRS Codelandschaft.....	2
Abb. 1.2	ATHLET-Module und Kopplungen .....	4
Abb. 2.1	Passive Wärmeabfuhr aus dem Primärkreis mittels geodätisch erhöhter Wasservorlage.....	10
Abb. 2.2	KV- und Leitungsgrößen am Gemischspiegelpfad .....	13
Abb. 2.3	Geometriegrößen für einen Gemischspiegel innerhalb der vier benachbarten KV zu einer Leitung $j$ .....	19
Abb. 2.4	Strömungssimulation am Gemischspiegel .....	21
Abb. 2.5	Geometriegrößen für eine horizontale Leitung im Bereich eines Gemischspiegels .....	22
Abb. 2.6	Gravitation entlang einer horizontalen Leitung am Gemischspiegel .....	23
Abb. 2.7	INKA Versuchsanlage /LEY11/ .....	31
Abb. 2.8	ATHLET Geometriemodell des INKA Flutbeckens mit Notkondensatorrohrbündel .....	31
Abb. 2.9	3D-Nodalisierung des INKA Flutbeckens mit Querverbindungen .....	32
Abb. 2.10	3D-Temperaturverteilung innerhalb des Flutbeckens.....	33
Abb. 2.11	Schematische Darstellung der GE Versuchsanlage Large Blowdown Vessel /HEW92/.....	34
Abb. 2.12	ATHLET Modell des GE Large Blowdown Vessels mit Füllstand zu Versuchsbeginn.....	36
Abb. 2.13	GE Blowdown Versuch: Vergleich zwischen 5-Gleichungsmodell (1M) und 2-Fluidmodell (2M).....	36
Abb. 2.14	Vergleich zwischen 5-Gleichungsmodell (1M) und 2-Fluidmodell (2M) ....	37
Abb. 2.15	Schematische Darstellung der DLR-Versuchsanlage M3.5 /TRA16/ .....	39
Abb. 2.16	Vereinfachtes ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss .....	41
Abb. 2.17	Detaillierteres ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Ventilschnellschluss .....	41

Abb. 2.18	Einfluss der Nodalisierung und Unterkühlung des Wassers auf die Druckstoßamplitude am Sensor P1.....	43
Abb. 2.19	Einfluss der Nodalisierung und Unterkühlung des Wassers auf die Rechenzeit.....	43
Abb. 2.20	Einfluss der Unterkühlung des Wassers auf den zeitlichen Verlauf des Drucks am Sensor P1 .....	44
Abb. 2.21	Charakteristische Druckverlustbeiwerte in Abhängigkeit der relativen Ventilöffnung, berechnet mit der in ATHLET integrierten generischen Funktion.....	46
Abb. 2.22	Angepasster Verlauf des charakteristischen Druckverlustbeiwertes in Abhängigkeit der relativen Ventilöffnung.....	46
Abb. 2.23	Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 4.....	47
Abb. 2.24	Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 9.....	47
Abb. 2.25	Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten zeitlichen Druckverlauf am Sensor P1 – DLR-Versuch Nummer 20.....	48
Abb. 2.26	Modifizierte DLR M3.5-Versuchsanlage zur Untersuchung von Druckstoßphänomenen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule.....	49
Abb. 2.27	ATHLET-Modell für die Nachrechnung der DLR-Druckstoßexperimente ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule.....	51
Abb. 2.28	Einfluss der Nodalisierung auf die maximale Druckstoßamplitude für verschiedene Druckmesspositionen.....	52
Abb. 2.29	Einfluss des Gegendrucks auf die maximale Druckstoßamplitude und den zeitlichen Druckwellenverlauf .....	53
Abb. 2.30	Maximal gemessene Druckamplitude .....	54
Abb. 2.31	Zeitpunkt der Erfassung der maximal gemessenen Druckamplitude am Drucksensor 6.....	55
Abb. 2.32	Schematische Darstellung der Water-Cannon Versuchsanlage /BLO77/ .....	57
Abb. 2.33	Einfluss der Rechengitterauflösung und der Wasserunterkühlung auf die maximale Druckstoßamplitude .....	58
Abb. 2.34	Vergleich des zeitlichen Druckverlaufs beim Water-Cannon-Versuch für die Rechengitterauflösungen $L/D=1$ (links) und $L/D=0,5$ (rechts).....	58

Abb. 2.35	Druckstoßentstehung in der CIWA Versuchsanlage der Universität der Bundeswehr /DIR17/.....	60
Abb. 2.36	Phänomenologie eines kondensationsinduzierten Druckstoßes durch Dampfblaseneinschluss .....	61
Abb. 2.37	Schematische Darstellung der CIWA-Versuchsanlage der TUHH.....	61
Abb. 2.38	Vergleich der gemessenen und berechneten Druckamplituden für die in der TUHH-Anlage durchgeführten Druckstoßversuche .....	63
Abb. 2.39	PERICLES-Test Nr. RE0080. Hüll-Rohr Temperatur, Level 2998 mm. ATHLET 3.1A .....	69
Abb. 2.40	PERICLES-Test Nr. RE0080. Hüllrohrtemperatur, Level 2998 mm. Rechnung mit neuem Modell .....	70
Abb. 2.41	PERICLES-Test Nr. RE0080. Hüllrohrtemperatur, Level 1828 mm. ATHLET 3.1A .....	70
Abb. 2.42	PERICLES-Test Nr. RE0080. Hüllrohrtemperatur, Level 1828 mm. Rechnung mit neuem Modell .....	71
Abb. 2.43	PERICLES-Test Nr. RE0080. Druckdifferenz in der Mitte des Bündels. ATHLET 3.1A.....	71
Abb. 2.44	PERICLES-Test Nr. RE0080. Druckdifferenz in der Mitte des Bündels. Rechnung mit neuem Modell.....	72
Abb. 2.45	Hüllrohr-Temperatur, zentrales Bündel. Level 11; ATHLET 3.1A .....	73
Abb. 2.46	Hüllrohr-Temperatur, zentrales Bündel. Level 11; ATHLET neue Version .....	73
Abb. 2.47	Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 5; ATHLET 3.1A.....	74
Abb. 2.48	Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 5; ATHLET neue Version .....	74
Abb. 2.49	Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 11; ATHLET 3.1A.....	75
Abb. 2.50	Hüllrohr-Temperatur, Rand-Bündel. Level 11; ATHLET neue Version .....	75
Abb. 2.51	Dampfgehaltsverteilung im RDB, grüner Pfeil: Leitung mit Oszillationen .....	81
Abb. 2.52	Massenstrom GJ und Relativgeschwindigkeit WRJ in der in Abb. 2.51 mit grünem Pfeil markierten Junction .....	82
Abb. 2.53	Von HZDR übermittelter Massenfehler: rot: mit Abblasetank; grün: ohne .....	83

Abb. 2.54	DH Zustand zwischen zwei Abblasezyklen .....	84
Abb. 2.55	Gemischspiegelverlauf im Abblasetank (links) und Massenfehler bei mehreren Abblasezyklen vor der Modellverbesserung.....	84
Abb. 2.56	Gemischspiegelverlauf im Abblasetank (links) und Massenfehler bei mehreren Abblasezyklen nach der Modellverbesserung .....	86
Abb. 2.57	Räumliche KM-Temperaturverteilungen vor (links) und nach (rechts) der Modellverbesserung .....	88
Abb. 2.58	Controlword „RADIATION“ in der ATHLET-Eingabedatei.....	93
Abb. 2.59	Controlword „HEATCOND“ in der ATHLET-Eingabedatei .....	94
Abb. 2.60	Verlauf von CHF im Bereich von Abstandshaltern /IAE01/ .....	97
Abb. 3.1	Wert und Unsicherheit einer beliebigen Messgröße und ihre Berücksichtigung bei der Quantifizierung von Modellunsicherheiten. Rot: Maximale Modellunsicherheit, umfasst Messungen komplett mit Messunsicherheiten; Blau: Minimale Modellunsicherheit, überschneidet alle Messunsicherheiten; Grün: Best-Fit zu den gemessenen Werten.....	119
Abb. 3.2	Schematische Darstellung der NACIE-UP Anlage /PIA13/.....	124
Abb. 3.3	ATHLET Geometriemodell und Nodalisierung der NACIE-UP Anlage....	126
Abb. 3.4	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den LBE Massenstrom .....	132
Abb. 3.5	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die primärseitige Temperatur (TP104) .....	132
Abb. 3.6	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den primärseitigen Druck (P105) .....	133
Abb. 3.7	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für den Differenzdruck über dem Zweiphasenbereich im Riser.....	133
Abb. 3.8	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die Temperaturdifferenz über den Massenstrommesser .....	134
Abb. 3.9	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die primärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher.....	134

Abb. 3.10	Vergleich des berechneten Toleranzintervalls mit experimentellen Daten und Referenzrechnung für die sekundärseitige Temperaturdifferenz über den Wärmetauscher.....	135
Abb. 3.11	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen des berechneten Massenstroms im Primärkreislauf .....	135
Abb. 3.12	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Messposition 104).....	136
Abb. 3.13	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen des berechneten Drucks am oberen Ende des Risers (Messposition 105).....	136
Abb. 3.14	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Druckdifferenz innerhalb des Risers oberhalb der Gaseinspeiseposition.....	137
Abb. 3.15	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz im kalorimetrischen Durchflussmesser .....	137
Abb. 3.16	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz auf der Primärseite des Wärmetauschers .....	138
Abb. 3.17	Zeitlicher Verlauf aller Variationsrechnungen der berechneten Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers.....	138
Abb. 3.18	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 1 bis 7).....	140
Abb. 3.19	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 8 bis 14).....	140
Abb. 3.20	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers (Parameter 15 bis 21).....	141
Abb. 3.21	Quadrat des multiplen Rang-Korrelationskoeffizienten für die Fluidtemperatur am oberen Ende des Risers.....	141
Abb. 3.22	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 1 bis 7).....	142
Abb. 3.23	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 8 bis 14).....	142

Abb. 3.24	Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße der unsicheren Eingabeparameter für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers (Parameter 15 bis 21).....	143
Abb. 3.25	Quadrat des multiplen Rang-Korrelationskoeffizienten für die Temperaturdifferenz auf der Sekundärseite des Wärmetauschers.....	143
Abb. 4.1	Übersicht über alle Jobs, die auf der GRS-Plattform zur kontinuierlichen Integration laufen .....	159
Abb. 4.2	Übersicht über verschiedene Läufe des Jobs, um ATHLET zu bauen und zu testen. Bei einem Teil der Läufe wurde mit Fehlern in der Teststufe abgebrochen (in rot).....	160
Abb. 4.3	Beispiel für durch den Entwickler vorgegebene Gültigkeitsgrenzen für einen Einzeleffekttest.....	163
Abb. 4.4	Beispiel für die Erzeugung von Grenzwertkurven aus konvexen Einhüllenden vorhandener und validierter Simulationsläufe .....	166
Abb. 4.5	Vergleich von Simulationsergebnissen (schwarz) mit den zugehörigen Grenzwertkurven (blau, grün) und Messwerten (hellgrau) .....	168
Abb. 4.6	Fehlgeschlagener Test (die Grenzkurve für Zeitschritte mit Grenzwertverletzungen ist rot markiert) .....	169
Abb. 4.7	Fehlgeschlagener Test durch Druckspitze in den Simulationsergebnissen.....	170
Abb. 4.8	ATHLET User Area mit Menüstruktur und Downloadbereich .....	176
 <b>Anhang A</b>		
Abb. A. 2.1	Entgegengesetzte Strömung von Flüssigkeitstropfen mit der Temperatur <i>T<sub>droplets</sub></i> und Flüssigkeitsfilm mit der Temperatur <i>T<sub>film</sub></i> .....	205
Abb. A. 2.2	Schematische Darstellung der Wechselwirkungen: (a) <i>n<sub>F</sub></i> = 4 Felder und <i>n<sub>W, max</sub></i> = 6 Wechselwirkungen pro Bilanzgleichung (b) Zwischen Tropfen- und Blasenfeld wird keine Wechselwirkung angenommen.....	207
Abb. A.5.1	Zusatzterme in den Feldern der Tropfen-Phase, nach /ROT17/.....	227
Abb. A.5.2	Zusatzterme in den Feldern der Blasen-Phase, nach /ROT17/ .....	228

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Kategorisierung passiver Sicherheitssysteme /IAE91/ .....	10
Tab. 2.2	Zusammenfassung der relevanten Anfangs- und Randbedingungen der ausgewählten DLR-Versuche von Druckstößen ausgelöst durch Ventilschnellschluss.....	40
Tab. 2.3	Anfangs- und Randbedingungen sowie Messergebnisse ausgewählter DLR-Versuche zu Druckstößen ausgelöst durch Aufprall einer Wassersäule .....	50
Tab. 2.4	Anfangs- und Randbedingungen zur Untersuchung des Einflusses des Gegendrucks in der Teststrecke auf den Druckstoß.....	52
Tab. 2.5	Versuchsmatrix der TUHH-Versuchsanlage mit Anzahl der durchgeführten Versuchswiederholungen und der dabei aufgetretenen Druckstöße .....	62
Tab. 3.1	Unsichere Eingabeparameter mit Quantifizierung für den NACIE-UP Test 1 .....	128

## Anhang A

Tab. A.4.1	Massenbilanz-Terme .....	219
Tab. A.4.2	Bedeutung der Terme der Impulsbilanzgleichung .....	222
Tab. A.4.3	Bedeutung der Terme der Energiebilanzgleichung .....	224
Tab. A.5.1	Verfügbare Schließungsgleichungen in Abhängigkeit von Geometrie und Strömungsform .....	230



## **A Anhang: Machbarkeitsstudie zur Implementierung eines Mehrfeldermodells im Systemcode ATHLET**

### **A.1 Einleitung**

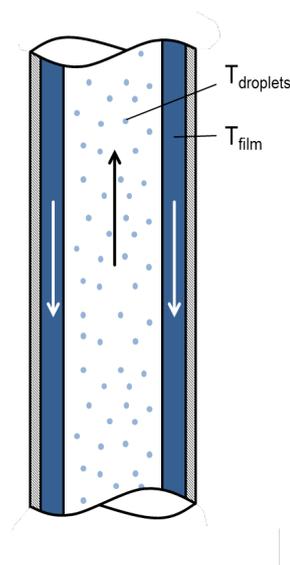
Für Sicherheitsanalysen von Kernkraftwerken werden international Rechenprogramme entwickelt, die das Verhalten des Gesamtsystems möglichst realistisch abbilden sollen. Diese sogenannten Systemcodes verfügen über Modelle, die die Thermohydraulik der Reaktorkühlkreisläufe und der Sicherheits- und Hilfssysteme, die Neutronenkinetik des Reaktorkerns, die Wärmeleitung in Strukturen sowie die Wärmeübertragung zwischen Kühlmittel und Strukturen beschreiben. Ebenso stehen Programmmodule für die Simulation der in Kernreaktoren aufwendigen Leit- und Regelungstechnik und des Reaktorschutzsystems zur Verfügung. Systemrechenprogramme werden u. a. in Deutschland (ATHLET), Finnland (APROS), Frankreich (CATHARE), Korea (MARS) Russland (KORSAR) und den USA (TRACE, RELAP5-3D) entwickelt. Die Leistungsfähigkeit der Codes wird im Rahmen von Validierungsprozessen demonstriert. Die Simulation von Ein- und Zweiphasenströmungen basiert in der Regel auf einem 1D-Zwei-Fluid-Modell mit phasenseparierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Ergänzt wird das Modell durch zusätzliche Bilanzgleichungen zur Simulation der Konzentration und des Transportes von Borsäure und anderen Komponenten, wie z. B. Wasserstoff oder Stickstoff. Wenige Programme bieten zusätzlich ein Wasserspiegelmodell an, das die Simulation einer scharfen Phasengrenze von Flüssigkeit und Dampf bzw. Gas erlaubt. Die Austauschterme zwischen den Fluidphasen und die Wechselwirkung von Fluid und Struktur werden durch mechanistische und empirische Schließungsgleichungen für Reibung, Massen- und Wärmetransfer beschrieben.

Es ist internationaler Konsens, dass die heutzutage eingesetzten Systemcodes mit dem klassischen Zwei-Fluid-Modell an die Grenzen ihrer Simulationsfähigkeit gestoßen sind. Eine signifikante Verbesserung der Simulationsfähigkeit der Programme ist nur durch den Einsatz zusätzlicher Erhaltungsgleichungen – z. B. für die Zwischenphasenflächendichte, Turbulenzmodellierung oder Mehrfeldersimulation – zu erwarten: “The intrinsic limitations of the two-fluid 6-equation model were reached in this generation of system code. Further progress would require additional equations, such as transport equations for interfacial area or for turbulent scales, or a multifield modelling. These were the conclusions of several OECD-CSNI specialist meetings. Use of more advanced modelling for reducing the degree of empiricism: multifield models, turbulence modelling and dynamic interfacial area are the main directions for improving the predictive capability of the codes” /BES 08/.

## A.2 Aktueller Stand der Mehrfeldermodelle

### A.2.1 Kurze Beschreibung

Gegenwärtig werden Zweiphasenströmungen in Systemcodes üblicherweise mit einem 2-Fluid-Modell mit phasenseparierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie simuliert. Das bedeutet, dass sechs Erhaltungsgleichungen zu lösen sind: Massen-, Impuls- und Energiebilanz für die flüssige Wasserphase sowie Massen-, Impuls- und Energiebilanz für die Dampfphase. Für einen auf dem Finite-Volume-Ansatz basierenden Simulationscode – wie z. B. ATHLET – bedeutet dies, dass innerhalb eines Bilanzvolumens nur eine Temperatur und eine Geschwindigkeit pro Phase (nämlich  $T_{liq}$  und  $T_{vap}$ , bzw.  $w_{liq}$  und  $w_{vap}$ ) existieren. Beim Vorliegen gewisser Strömungsformen ist diese Annahme schlicht falsch: In Abbildung Abb. A.2.1 ist eine Ring-Tropfen-Strömung gezeigt, bei welcher die flüssigen Tropfen mit der Temperatur  $T_{droplets}$  aufsteigen, während der flüssige Film der Temperatur  $T_{film}$  an der Rohrwand nach unten fließt. Geschwindigkeit und Temperatur der Dampfphase sind der Übersichtlichkeit halber nicht abgebildet; im allgemeinen ist davon auszugehen, dass der Dampf mit einer eigenen Temperatur und Geschwindigkeit strömt. In jedem Fall ist es offensichtlich, dass die Verwendung von nur einer Temperatur und Geschwindigkeit der flüssigen Phase im abgebildeten Fall stark von der Realität abweicht.



**Abb. A.2.1** Entgegengesetzte Strömung von Flüssigkeitstropfen mit der Temperatur  $T_{droplets}$  und Flüssigkeitsfilm mit der Temperatur  $T_{film}$

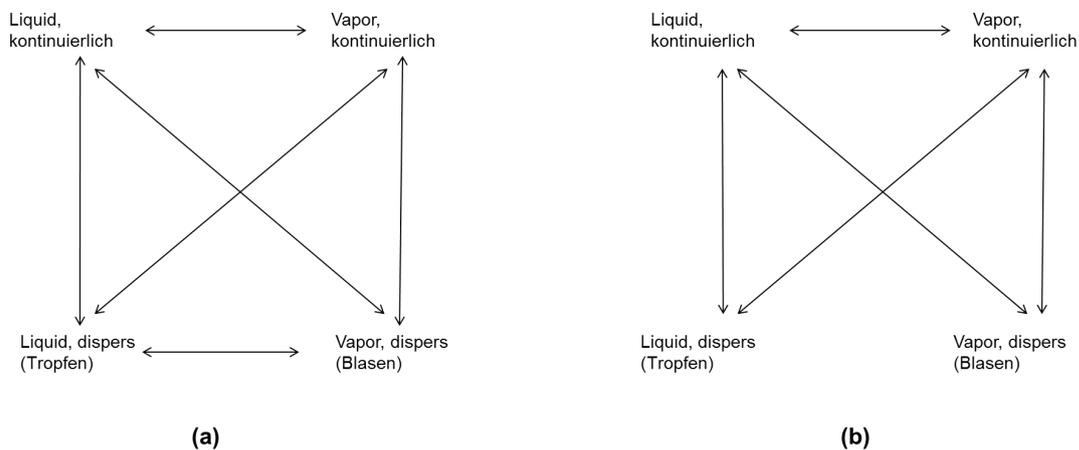
Eine detailliertere und realistischere Beschreibung einer wie in Abb. A.2.1 gezeigten Strömung erhält man, wenn man die Flüssigkeitstropfen und den Film als separate Felder betrachtet und für jedes Feld die Erhaltungsgleichungen löst. Für ein solches "Drei-Felder-Modell" wären somit neun Erhaltungsgleichungen zu lösen: Massen-, Impuls- und Energiebilanz für die Felder Dampf, flüssiger Film und flüssige Tropfen. Diese Anzahl an Gleichungen ließe sich wiederum durch Vereinfachungen reduzieren, z. B. könnte für manche Fälle eine einheitliche Temperatur von flüssigem Film und Tropfen unterstellt werden ( $T_{film} = T_{droplets}$ ), sodass nur eine Energiebilanz für die flüssige Phase zu lösen wäre. Analog zu den Tropfen als disperse flüssige Phase in einem Dampfvolument, welche neben einer kontinuierlichen Flüssigkeitsphase existiert (im obigen Beispiel der Wasserfilm), kann man gasförmige Blasen in einem Flüssigkeitsvolumen als zweites gasförmiges Feld zusätzlich zur kontinuierlichen Gasphase einführen. Die Modellierung lässt sich noch weiter verfeinern, indem beispielsweise das Feld der Flüssigkeitstropfen in verschiedene Unterfelder aufgeteilt wird, etwa in ein Feld großer und ein Feld kleiner Tropfen, welche sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit bewegen.

Prinzipiell ist zu erwarten, dass eine Computersimulation mit zunehmend feiner Unterteilung der Felder zunehmend realistischere Ergebnisse liefert, ähnlich wie dies bei einer zunehmend feineren Nodalisierung der Fall sein sollte. Allerdings wächst mit jedem zusätzlich betrachteten Feld die benötigte Rechenzeit. Außerdem – und das ist das wesentliche Problem – müssen die Schließungsgleichungen bekannt sein, mit welchen die Quell- bzw. Senkenterme für den Massen-, Impuls- und Energietransport zwischen den einzelnen Feldern berechnet werden. Diese Schließungsgleichungen sind i. d. R. abhängig von der jeweiligen Strömungsgeometrie (z. B. vertikale oder horizontale Strömung) und müssen den Einfluss spezieller Gegebenheiten berücksichtigen. Zum Beispiel führt das Vorhandensein von Abstandshaltern in einem Strömungskanal zu einem Aufbrechen großer Tropfen in mehrere kleine und damit zu einem Senkenterm in den Differentialgleichungen für das Feld großer Tropfen und einem betragsmäßig gleich großen Quellterm in den Gleichungen für das Feld kleiner Tropfen. Gegenwärtig sind solche Schließungsgleichungen nur unvollständig bekannt. In einem aktuellen Fachzeitschriftenartikel über Schließungsmodelle für die Massenbilanzgleichungen /ROT 17/ ist beispielsweise vermerkt, dass für einige Blasenwechselwirkungen bislang keine geeigneten Modelle vorliegen; stattdessen wird daher die vorübergehende Verwendung von Schließungsmodellen empfohlen, welche für das Tropfenfeld entwickelt wurden. Prinzipiell sind bei der Simulation von  $n_F$  Feldern  $n_{W,max}$  Wechselwirkungen

pro Erhaltungsgleichung (Masse, Impuls und Energie) zwischen den jeweiligen Feldern möglich:

$$n_{W,max} = \sum_{i=1}^{n_F} (n_F - i) = \frac{1}{2} \cdot (n_F - 1) \cdot n_F$$

Bei vier Feldern sind rechnerisch somit sechs Wechselwirkungen pro Erhaltungsgleichung möglich, vgl. Abb. A.2.2 (a). Oft finden einige der rechnerisch möglichen Wechselwirkungen physikalisch nicht statt oder können vernachlässigt werden; z. B. ist eine direkte Wechselwirkung zwischen Tropfen- und Blasenfeld unwahrscheinlich, wodurch sich die Anzahl der Wechselwirkungen pro Bilanzgleichung auf fünf verringert, vgl. Abbildung Abb. A.2.2 (b).



**Abb. A.2.2** Schematische Darstellung der Wechselwirkungen: (a)  $n_F = 4$  Felder und  $n_{W,max} = 6$  Wechselwirkungen pro Bilanzgleichung (b) Zwischen Tropfen- und Blasenfeld wird keine Wechselwirkung angenommen

## A.2.2 Einsatzgebiete

Für viele thermohydraulische Simulationen ist die Verwendung eines Zwei-Felder-Modells (flüssig und gasförmig, wie gegenwärtig in ATHLET implementiert) ausreichend /ROT15b/, was durch zahlreiche Validierungsrechnungen belegt ist /AUS16/. Allerdings gibt es, wie im vorigen Kapitel beschrieben, inhärente Schwächen bei der Simulation verschiedener zweiphasiger Strömungsbilder. So haben bereits frühere Analysen gezeigt, dass Ringtropfenströmungen mit ATHLET nicht zufriedenstellend reproduziert werden können /TRA 04/. Anwendungsfälle mit Relevanz für die Reaktorsicherheitsbewertung, bei welchen erwartet wird, dass der Einsatz von Mehrfeldermodellen die Simulationsfähigkeit von Systemcodes wie ATHLET deutlich verbessert, sind:

- **Critical Heat Flux- (CHF-) Berechnung und Dryout-/Post-Dryout-Wärmeübergang:** Als Dryout wird für Zweiphasen(ring)strömungen mit hohem Dampfgehalt das Austrocknen des Flüssigkeitsfilms entlang der Brennstabhüllrohre bezeichnet. CHF bezeichnet in diesem Zusammenhang die Wärmestromdichte, bei welcher Dryout entsteht. Eine Folge des Nicht-Benetzens der Hüllrohroberfläche ist ein verschlechterter Wärmeübergang an das Kühlmittel. Da Dryout ein hydrodynamisches Problem ist, welches neben Verdampfungsprozessen von Entrainment und Wiederanlagern von Flüssigkeitstropfen am Hüllrohr bestimmt ist, sind Mehrfeldermodelle zu seiner mechanistischen Beschreibung gut geeignet /JAY 04/, /JAY 05/. Während der Abblase- und Flutungsphase eines Kühlmittelverluststörfalls wird unter Dryout-Bedingungen im Kern Wärme von den Hüllrohren sowohl an die kontinuierliche Dampfphase als auch an die dispersen, mitgerissenen Flüssigkeitstropfen abgegeben. Dieser Vorgang wird als “dispersed flow film boiling” (DFFB) bezeichnet. Die Mischung von Dampf und Wassertropfen kann dabei die Hüllrohre ausreichend kühlen, sodass die Hüllrohrtemperaturen unter den maximal zulässigen Werten bleiben. Auch dieses Phänomen kann mit Hilfe von Mehrfeldermodellen berechnet werden /ERG 06/.
- **Quenchfrontbewegung bei Top-Down-Quenching:** Aufgrund der entgegengesetzten Strömungsrichtung von flüssigem Film und im Dampf mitgerissenen Tropfen wird eine verbesserte Simulation dieses Phänomens mit einem Mehrfeldermodell erwartet /VAL 11/, /BES 10/.

- **Reflux-Condenser-Mode: Tropfentransport vom Reaktorkern in Richtung Dampferzeuger** bei gleichzeitiger, auch entgegengesetzter Strömung der kontinuierlichen Flüssigkeitsphase. Mit dem Tropfentransport vom Kern zu den Dampferzeugern verbunden ist zum einen der Effekt, dass durch die Verdampfung der Tropfen auf ihrem Weg zum Dampferzeuger die Rückflussrate des Wassers zum Kern beeinflusst wird ("Steam Binding"), und zum anderen, dass Oszillationen beim Rückströmen gedämpft werden (/VAL 11/, /BES 10/).
- Die o. g. Phänomene werden vor allem bei Kühlmittelverluststörfällen in DWRn erwartet. Aber auch beim **Normalbetrieb von Siedewasserreaktoren** liegen sowohl Flüssigkeits- als auch Gasphase einerseits kontinuierlich und andererseits dispers als Tropfen und Blasen verschiedener Durchmesser vor, weshalb die Simulationsfähigkeit von ATHLET für diesen Reaktortyp durch den Einsatz von Mehrfeldernmodellen verbessert werden kann /ROT 15b/, /ROT 17/.

Weitere Anwendungsfälle, bei denen der Einsatz eines Mehrfeldernmodells sinnvoll erscheint, sind:

- **Strömung in Heatpipes/Thermosiphons**, welche zur Brennelementlagerbeckenkühlung eingesetzt werden sollen und in denen Ring-Nebel-Strömung mit Gegenströmung der kontinuierlichen Wasserphase an der Rohrwand und der mitgerissenen Wassertropfen in Rohrzentrum auftreten kann (vgl. laufendes Projekt "Passive Lagerbeckenkühlung durch Wärmerohre", Förderkennzeichen RS1543).
- **Druckhaltersprühen**: Bei einigen Druckhaltern kann das eingesprühte Wasser aus unterschiedlichen Quellen stammen (aus dem kalten Strang und Zusatzboriersystem sowie aus dem Volumenregelsystem) und damit unterschiedliche Temperaturen aufweisen. Zur realistischen Simulation solcher Druckhaltersprühsysteme könnte ein Modell mit mehreren Tropfenfeldern eingesetzt werden.



## A.3 Einsatz von Mehrfeldermodellen in System- und Subchannelcodes

### A.3.1 CATHARE

CATHARE (Code for **A**nalysis of **T**hermalhydraulics during an **A**ccident of **R**eactor and safety **E**valuation) ist ein Thermohydraulik-Systemcode für die Sicherheitsanalyse (vor allem) von Druckwasserreaktoren. CATHARE wird von der CEA entwickelt, unterstützt durch AREVA-NP, EDF und IRSN. Die aktuelle Codeversion, welche u. a. in Genehmigungsverfahren eingesetzt wird, CATHARE-2, basiert auf einem Zwei-Phasen-Sechsgleichungsmodell. Im Rahmen des NEPTUNE-Projekts wird gegenwärtig eine zukünftige Codeversion, CATHARE-3, entwickelt /GUE07/. Die physikalischen Modelle betreffend soll die hauptsächliche Weiterentwicklung von CATHARE im Einsatz von Mehrfeldermodellen, gekoppelt mit einer Gleichung zur Berechnung der Zwischenphasenflächendichte und einem Zwei-Phasen-Turbulenzmodell, bestehen /EMO09/. Bezüglich des Einsatzes von Mehrfeldermodellen wurde bisher ein Drei-Felder-Modell (Flüssigkeit kontinuierlich, Tropfen; Gasphase kontinuierlich) in CATHARE implementiert. Dieses Modell wird in einer Simulation lokal an den Stellen eingesetzt, an welchen man sich eine Verbesserung der Simulation hierdurch erhofft (z. B. im Reaktorkern bei Simulationen von Kühlmittelverluststörfällen mit Kernfluten), während das übrige Simulationsgebiet standardmäßig mit dem Zwei-Felder-Modell berechnet wird /VAL11/. Dieser Ansatz erfordert eine Behandlung "hybrider" Leitungen an den Schnittstellen der Simulationsgebiete mit zwei bzw. drei Feldern. Das Drei-Felder-Modell kann bei 0D-, 1D-, und 3D-Simulationen eingesetzt werden. Versuchsnachrechnungen von Experimenten zur kritischen Wärmestromdichte/Dryout und zum Post-Dryout-Wärmetransport mit dem Drei-Felder-Modell im 1D-Simulationsgebiet haben zufriedenstellende Ergebnisse geliefert. Simuliert wurden die Experimente von Wurtz, Bennet et al. und Becker et al. /JAY04/ sowie die Versuchsreihen TPTF (JAERI) und THTF (ORNL) /JAY05/. Darüber hinaus wurde das Drei-Felder-Modell zur Nachrechnung von Kernflutungsexperimenten an den Brennstabbündelversuchsständen PERICLES und RBHT sowie am Integralversuchsstand BETHSY verwendet. Bei den Simulationen der PERICLES- und RBHT-Versuche wurde das Modell in einem 1D-Simulationsgebiet eingesetzt, während es bei der Nachrechnung des BETHSY-Experiments 6.7C sowohl im 0D- und 1D- als auch im 3D-Bereich zum Einsatz kam /VAL11/. Bei BETHSY 6.7C wurden außerdem verschiedene Komponenten des Primärkreislaufs mit dem Drei-Felder-Modell berech-

net: Kern, oberes Plenum, heiße Stränge und Dampferzeuger. Die Nachrechnungen der PERICLES- und RBHT-Experimente lieferten zufriedenstellende Ergebnisse. Die Nachrechnung von BETHSY 6.7C zeigte, dass das Drei-Felder-Modell im Vergleich zum Zwei-Felder-Modell besser in der Lage ist, den Top-Down-Quenching-Prozess mit entgegengesetzter Strömung von Flüssigkeitsfilm und Tropfen zu simulieren. Während das Strömungsverhalten am Kernaustritt korrekt berechnet wurde, konnte das Verhalten der Tropfen nach Verlassen des Kerns noch nicht zufriedenstellend abgebildet werden, da noch kein geeignetes Schließungsmodell zur Berechnung der Tropfendeposition in den entsprechenden Komponenten (oberes Plenum und heiße Stränge) zur Verfügung stand.

### **A.3.2 RELAP**

RELAP (**R**eactor **E**xcursion and **L**eak **A**nalysis **P**rogram) ist ein Systemcode zur Simulation des Verhaltens des Reaktorkühlkreislaufs bei verschiedenen Unfällen und Transienten. RELAP wird seit den 1960er Jahren entwickelt. Gegenwärtig existieren verschiedene Versionen des Codes; die bekanntesten sind RELAP5-3D und RELAP-7, beide werden am Idaho National Laboratory (INL) entwickelt.

RELAP-7 befindet sich gegenwärtig im Entwicklungsstadium. Es basiert auf einem Zwei-Felder-Modell mit sieben Bilanzgleichungen; die zusätzliche Bilanzgleichung gegenüber einem klassischen Sechsgleichungsansatz basiert auf der Tatsache, dass die Drücke in den beiden Feldern (Phasen) nicht gleich sind (die Vereinfachung, dass die Drücke gleich sind, wird im Sechsgleichungsansatz gemacht). Für RELAP-7 sind derzeit keine Entwicklungen zu Mehrfeldermodellen bekannt. RELAP5-3D ist die aktuelle RELAP-Version, welche klassisch auf einem Zwei-Felder-Modell mit sechs Bilanzgleichungen basiert. Zurzeit wird ein Sechs-Felder-Modell (Flüssigkeit kontinuierlich, kleine Tropfen, große Tropfen; Gasphase kontinuierlich, kleine Blasen, große Blasen) für die spätere Implementierung in RELAP5-3D entwickelt /ROT 15a/, /ROT 15b/, /ROT 16/, /ROT 17/, vgl. Kapitel 3.5.

### **A.3.3 TRACE**

TRACE (**TRAC/RELAP Advanced Computational Engine**) ist das Referenz-Codesystem der U.S.NRC zur Simulation der Thermohydraulik von Lecks und Transienten, bestehend aus den Rechenprogrammen TRAC-P, TRAC-B, RELAP5 und RAMONA. TRACE verwendet ein klassisches Zwei-Felder-Modell mit sechs Bilanzgleichungen. Gemäß /ROT 15b/ und /MAR 13/ ist die Entwicklung eines dritten Feldes (Tropfen) geplant.

### **A.3.4 SPACE**

Der Thermohydraulik-Systemcode SPACE (**Safety and Performance Analysis Code**) wird von Korea Nuclear Hydro and Nuclear Power Co. (KHNP) zur Sicherheitsbewertung bestehender Druckwasserreaktoren und fortschrittlicher Reaktordesigns entwickelt. Erklärtes Ziel der Entwicklung von SPACE ist es, bisher verwendete Systemcodes zur Reaktorsicherheitsbewertung zu ersetzen. SPACE löst die Erhaltungsgleichungen für drei Felder (flüssig kontinuierlich, Tropfen; gasförmig) /NOH 13/, /HAS 11/. In /HAS 11/ ist kurz die Nachrechnung von CHF-Experimenten ("Bennet's Heated Tube Experiments", vgl. die Bemerkungen zu CATHARE in Kapitel 5) mit SPACE erwähnt, allerdings wurde hierbei offensichtlich nicht das Drei-Felder-Modell eingesetzt, sondern klassische "Look-up Tables". Eine dokumentierte Anwendung des Drei-Felder-Modells konnte im Rahmen der Recherche nicht gefunden werden.

### **A.3.5 COBRA-TF, COBRA/TRAC, WCOBRA/TRAC**

COBRA-TF (**COolant-Boiling in Rod Arrays - Two Fluids**), bzw. CTF, seine Weiterentwicklung an der Reactor Dynamics and Fuel Management Group (RDFMG) der Pennsylvania State University, ist ein Thermohydraulik-Subchannel-Code zur Analyse von Transienten in Brennstabbündeln von Leichtwasserreaktoren. Die aktuelle Codeversion enthält ein Drei-Felder-Modell (Flüssigkeit kontinuierlich, Tropfen; Gasphase), welches – im Gegensatz zu den oben aufgelisteten Codes – auf der Vereinfachung beruht, dass sich das Tropfenfeld und das Feld der kontinuierlichen flüssigen Phase im thermischen Gleichgewicht befinden, wodurch nur eine Energiebilanzgleichung für beide flüssigen Felder zu lösen ist /SAL 15/.

In /ROT17/ ist vermerkt, dass die Programme COBRA/TRAC (eine Fusion von COBRA-TF und TRAC) und WCOBRA/TRAC ein Drei-Felder-Modell (Flüssigkeit kontinuierlich, Tropfen; Gasphase) im Reaktordruckbehälter verwenden; das Tropfenfeld ist dabei nur im 3D-Simulationsgebiet anwendbar. Da die Verwendung des Drei-Felder-Modells in COBRA/TRAC bereits seit mindestens 1982 dokumentiert ist /THU82/, sollten genügend Validierungsrechnungen zu den verwendeten Schließungsgleichungen existieren.

In einer eher aktuellen Arbeit /ERG 06/ wurde ein zusätzliches Feld für kleine Tropfen in COBRA-TF eingeführt, sodass die dort verwendete Programmversion ein Vier-Felder-Modell (Flüssigkeit kontinuierlich, große Tropfen, kleine Tropfen; Gasphase) enthält, wobei allen Feldern der flüssigen Phase unterstellt wird, dass sie sich im thermischen Gleichgewicht befinden. Mit dem modifizierten Code wurden verschiedene Experimente der Versuchsreihen FLECHT-SEASET (**F**ull **L**ength **E**mergency **C**ore **H**eat **T**ransfer - **S**ystem **E**ffects and **S**eparate **E**ffects **T**ests) und RBHT (**R**od **B**undle **H**eat **T**ransfer) nachgerechnet. Im Vergleich zu Simulationen mit dem Original-Code haben sich einige Rechenergebnisse verbessert, während insbesondere für die FLECHT-SEASET-Experimente eine Verschlechterung einiger Simulationsergebnisse durch die Einführung des vierten Feldes eingetreten ist.

### A.3.6 Weitere Codes

Weitere Simulationsprogramme, welche Mehrfeldermodelle anwenden, sind:

- TRAC-M (**T**ransient **R**eactor **A**nalysis **C**ode): In /LEE 06/ sind die Implementierung eines Tropfenfeldes in den Systemcode sowie Nachrechnungen der Experimente von Collier&Hewitt und von Würtz mit dem modifizierten Programm beschrieben. Das Tropfenfeld wird als im thermischen Gleichgewicht mit der kontinuierlichen flüssigen Phase stehend betrachtet; die Schließungsgleichungen entsprechen im Wesentlichen den in COBRA-TF verwendeten.
- FIDAS (**F**ilm **D**ryout **A**nalysis Code in **S**ubchannels): Ein Subchannelcode welcher neben den kontinuierlichen Feldern ein Tropfenfeld enthält /JAY 04/, /LEE 06/. Die Tropfen können eine andere Temperatur haben als die kontinuierliche flüssige Phase.
- MONA: Ein Subchannelcode, welcher neben den kontinuierlichen Feldern ein Tropfenfeld enthält /JAY 04/
- Gemäß /ROT 17/ profitieren auch CFD-Codes von Mehrfeldermodellen.
- STRAP: Ein von der Belgrad-Universität entwickelter prädiktiver Code für stratifizierte und vertikale annulare Strömungen /STE 95/. Hier handelt es sich um ein 3-Felder-Modell.

Keine Informationen bezüglich der Verwendung von Mehrfeldermodellen wurden in folgenden bekannten Systemcodes gefunden:

- MARS (**M**ulti-dimensional **A**nalysis of **R**eactor **S**afety)
- KORSAR (**K**ompleksnyi **R**a**S**chet **A**tomnykh **R**eaktorov)
- APROS (**A**dvanced **P**ROcess **S**imulation environment)



## A.4 Erster Entwurf eines 3-Felder-Modells für ATHLET

Wie bereits weiter oben beschrieben, entstehen beim Aufteilen einer Phase in mehrere Felder (z. B. Aufteilen einer flüssigen Phase in die zwei Felder "Flüssigkeit kontinuierlich" und "Flüssigkeit, Tropfen") "Schnittstellen", welche in den Erhaltungsgleichungen berücksichtigt werden müssen. Im Folgenden sind einige der zusätzlichen Terme exemplarisch beschrieben. Bei der Beschreibung geht es darum, einen prinzipiellen Überblick zu liefern und noch nicht eine detaillierte Herleitung der einzelnen Terme für jedes Feld (diese ist ggf. Thema eines weiterführenden Dokumentes) zu liefern. Eine sehr übersichtliche Beschreibung der Bilanzgleichungen für ein Sechs-Felder-Modell ist in /ROT 15b/ und /ROT 16/ zu finden.

Als beispielhafte Gleichungen werden die Bilanzgleichungen eines Drei-Felder-Modells (Flüssigkeit kontinuierlich, Dampf kontinuierlich, Flüssigkeit dispers) betrachtet. Die Formulierung der Zusatzterme ist entsprechend der Formulierungen der Bilanzgleichungen ("Basic Field Equations") in der ATHLET-Modellbeschreibung /AUS 16/ gewählt und von /JAY 04/ inspiriert. Der Einfluss verschiedener Strömungsformen auf die Gleichungsterme ist noch nicht berücksichtigt, stattdessen werden die Volumenanteile der verschiedenen Phasen als Verteilungsparameter benutzt. Daher sind die folgenden Gleichungen nur als grober Entwurf für eine Implementierung in ATHLET zu betrachten, welcher während der Entwicklungsarbeiten zum Dreifeldermodell modifiziert werden muss.

Im Folgenden steht  $\vec{w}_r$  als volumetrischer Fluss und ist abhängig von der Phasenwechselrichtung.

Verdampfung der kontinuierlichen flüssigen Phase:  $\vec{w}_r = \vec{w}_{lc}$

- Kondensation der Dampfphase:  $\vec{w}_r = \vec{w}_{vc}$
- Verdampfung der dispersen flüssigen Phase:  $\vec{w}_r = \vec{w}_{ld}$

Darüber hinaus werden die Mischungsdichte und die relative Geschwindigkeit eingeführt:

$$\rho_m = \alpha_{vc} \rho_{vc} + \alpha_{lc} \rho_{lc} + \alpha_{ld} \rho_{ld}$$

$$\vec{w}_{R|vc,lc} = \vec{w}_{vc} - \vec{w}_{lc}$$

$$\vec{w}_{R|vc,ld} = \vec{w}_{vc} - \vec{w}_{ld}$$

$$\rho_{vap} = \left( \rho_{vc} \cdot \frac{\alpha_{vc}}{\alpha_{vc} + \alpha_{ld}} + \rho_{ld} \cdot \frac{\alpha_{ld}}{\alpha_{vc} + \alpha_{ld}} \right)$$

Es gilt für n-Felder (in unserem Fall  $n = 3$ ):

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = \alpha_{lc} + \alpha_{vc} + \alpha_{ld} = 1$$

#### A.4.1 Massenbilanz

Der in der Gleichung des ATHLET 2-Fluid-Modells bisher enthaltene Phasenwechselterm  $\psi$  müsste durch die Terme zur Beschreibung des Massenverlustes durch Verdampfen von Flüssigkeit aus dem kontinuierlichen Feld in die Dampfphase  $\varphi_{lc \rightarrow vc}$ , des Massenverlustes durch Verdampfen von Flüssigkeit aus dem dispersen Feld in die Dampfphase  $\varphi_{ld \rightarrow vc}$  sowie des Tropfenmitrisses (Entrainment) aus dem kontinuierlichen Flüssigkeitsfeld in das disperse Feld  $\varphi_e$  und des (Wieder-) Eindringens von Tropfen in das kontinuierliche Flüssigkeitsfeld (Deposition)  $\varphi_d$  ergänzt bzw. ersetzt werden.

**Kontinuierliche Liquid-Phase:**

$$\frac{\partial(\alpha_{lc}\rho_{lc})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{lc} \rho_{lc} \vec{w}_{lc}) = \varphi_d - \varphi_e - \varphi_{lc \rightarrow vc}$$

**Disperse Liquid-Phase:**

$$\frac{\partial(\alpha_{ld}\rho_{ld})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{ld} \rho_{ld} \vec{w}_{ld}) = -\varphi_d + \varphi_e - \varphi_{ld \rightarrow vc}$$

**Kontinuierliche Gas-Phase:**

$$\frac{\partial(\alpha_{vc}\rho_{vc})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{vc} \rho_{vc} \vec{w}_{vc}) = \varphi_{lc \rightarrow vc} + \varphi_{ld \rightarrow vc}$$

**Tab. A. 4.1** Massenbilanz-Terme

Term	Beschreibung	Einheit
$\varphi_e$	Massenverlust in das Tropfenfeld aufgrund von Tropfenmitriss (Index $e$ für Entrainment)	$kg/m^3 \cdot s$
$\varphi_d$	Massengewinn aus dem Tropfenfeld durch Tropfen, die in das kontinuierliche Feld (wieder-) eindringen (Index $d$ für Deposition)	$kg/m^3 \cdot s$

#### A.4.2 Impulsbilanz

Wie bei der Massenbilanz müssen nun statt der bzw. zusätzlich zu dem Term  $\psi \cdot \vec{w}_\Gamma$ , welcher die Impulsflussdichteänderung aufgrund von Phasenübergängen berücksichtigt, weitere Terme eingeführt werden (s. untenstehende Gleichungen),

z. B.  $\varphi_{lc \rightarrow vc} \cdot \vec{w}_{\Gamma,lc \rightarrow vc}$ .

$\vec{w}_{\Gamma,lc \rightarrow vc}$  ist dabei die Geschwindigkeit des flüssigen kontinuierlichen oder des gasförmigen Feldes, abhängig davon, ob ein Kondensations- oder Verdampfungsvorgang vorliegt. Des Weiteren müssten die Terme für die Zwischenphasenreibung, die Wandreibung, die Wasserspiegelkraft und – sofern aktiviert – die virtuelle Masse überarbeitet werden. Die virtuelle Masse ist gemäß /AUS16/ in der aktuellen Codeversion von ATHLET nicht berücksichtigt.

#### Kontinuierliche Liquid-Phase:

$$\begin{aligned} \frac{\partial[\alpha_{lc} \rho_{lc} \vec{w}_{lc}]}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{lc} \rho_{lc} \vec{w}_{lc} \vec{w}_{lc}) + \nabla \cdot (\alpha_{lc} p) &= -\vec{\tau}_{i,lc \rightarrow vc} - \vec{\tau}_{i,lc \rightarrow ld} \\ &- \alpha_{lc} \vec{f}_W \\ &- \varphi_{lc \rightarrow vc} \vec{w}_{\Gamma,lc \rightarrow vc} \\ &- \varphi_e \vec{w}_{lc} \\ &+ \varphi_d \vec{w}_{ld} \\ &- \alpha_{lc} \rho_{lc} g \sin(\gamma) \\ &+ (\alpha_{vc} + \alpha_{ld}) \alpha_{lc} (\rho_{lc} - \rho_{vap}) g \cos(\gamma) D_h \nabla \alpha_{vc} \\ &- \alpha_{lc} \alpha_{vc} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|vc,lc}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|vc,lc} \right) \\ &+ \alpha_{lc} \alpha_{ld} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|lc,ld}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|lc,ld} \right) \\ &+ S_{I,lc} \end{aligned}$$

### Disperse Liquid-Phase:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial[\alpha_{ld} \rho_{ld} \vec{w}_{ld}]}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{ld} \rho_{ld} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld}) + \nabla \cdot (\alpha_{ld} p) &= -\vec{\tau}_{i,ld \rightarrow vc} + \vec{\tau}_{i,lc \rightarrow ld} \\
 &- \alpha_{ld} \vec{f}_W \\
 &- \varphi_{ld \rightarrow vc} \vec{w}_{\Gamma,ld \rightarrow vc} \\
 &+ \varphi_e \vec{w}_{lc} \\
 &- \varphi_d \vec{w}_{ld} \\
 &- \alpha_{ld} \rho_{ld} g \sin(\gamma) \\
 &- \alpha_{vc} \alpha_{ld} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|vc,ld}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|vc,ld} \right) \\
 &- \alpha_{lc} \alpha_{ld} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|lc,ld}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|lc,ld} \right) \\
 &+ S_{I,ld}
 \end{aligned}$$

### Kontinuierliche Gas-Phase:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial[\alpha_{vc} \rho_{vc} \vec{w}_{vc}]}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{vc} \rho_{vc} \vec{w}_{vc} \vec{w}_{vc}) + \nabla \cdot (\alpha_{vc} p) &= +\vec{\tau}_{i,lc \rightarrow vc} + \vec{\tau}_{i,ld \rightarrow vc} \\
 &- \alpha_{vc} \vec{f}_W \\
 &+ \varphi_{lc \rightarrow vc} \vec{w}_{\Gamma,lc \rightarrow vc} \\
 &+ \varphi_{ld \rightarrow vc} \vec{w}_{\Gamma,ld \rightarrow vc} \\
 &- \alpha_{vc} \rho_{vc} g \sin(\gamma) \\
 &- (\alpha_{vc} + \alpha_{ld}) \alpha_{lc} (\rho_{lc} - \rho_{vap}) g \cos(\gamma) D_h \nabla \alpha_{vc} \\
 &+ \alpha_{vc} \alpha_{ld} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|vc,ld}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|vc,ld} \right) \\
 &+ \alpha_{vc} \alpha_{lc} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|vc,lc}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|vc,lc} \right) \\
 &+ S_{I,vc}
 \end{aligned}$$

**Tab. A.4.2** Bedeutung der Terme der Impulsbilanzgleichung

Term	Beschreibung	Einheit
$\tau_i$	Zwischenphasenreibung	$N/m^3$
$\vec{f}_W$	Wandreibungskraft pro Volumeneinheit	$N/m^3$
$\varphi_k \cdot w_\Gamma$	Impulsfluss aufgrund von Phasenwechseln (Kondensation/Verdampfung)	$kg/m^2 \cdot s^2$
$\alpha_{vc} \rho_{vc} g \sin(\gamma)$	Erdbeschleunigungsterm	$kg/m^2 \cdot s^2$
$\varphi_e \cdot w_{lc}$	Impulsverlust in das Tropfenfeld aufgrund von Tropfenmitriss (Anm.: Gemäß /ROT15b/ müsste für diesen Term statt $w_{lc}$ die Geschwindigkeit $w_{ld}$ verwendet werden. Es ist noch zu klären, welche Größe hier die richtige ist.)	$kg/m^2 \cdot s^2$
$\varphi_d \cdot w_{ld}$	Impulsgewinn aus dem Tropfenfeld durch Tropfen, die in das kontinuierliche Feld (wieder-)eindringen	$kg/m^2 \cdot s^2$
$\alpha_{vc} \alpha_{lc} \rho_m$ $\left( \frac{\partial \vec{w}_R}{\partial t} + \nabla \vec{w}_R \right)$	Virtuelle Masse	$N/m^3$
$[\dots] D_h \nabla \alpha_{vc}$	Wasserspiegelkraft	$N/m^3$
$S_I$	Externe Quellterme wie Pumpen, Turbinen...	$N/m^3$

### A.4.3 Energiebilanz

Die Erweiterung der Energiebilanzgleichungen (2.3) und (2.4) aus /AUS16/ sieht prinzipiell ähnlich aus. Die zusätzlichen Terme, welche den Energieeintrag oder -abzug aus einem Feld aufgrund von Phasenwechseln oder Entrainment/Tropfendeposition beschreiben, haben die Form  $\varphi \cdot \left( h + \frac{1}{2} \vec{w} \cdot \vec{w} \right)$ . Außerdem kommen weitere Terme hinzu, wie z. B. Wärmeströme zwischen den Feldern oder die durch Scherkräfte geleistete Arbeit und Dissipation.

### Kontinuierliche Liquid-Phase:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \left[ \left( \alpha_{lc} \rho_{lc} \left( h_{lc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{lc} \vec{w}_{lc} \right) \right) \right]}{\partial t} - \alpha_{lc} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \alpha_{lc} \rho_{lc} \vec{w}_{lc} \left( h_{lc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{lc} \vec{w}_{lc} \right) \right) = \\
 \alpha_{lc} \vec{\tau}_{i,vc \rightarrow lc} | \vec{w}_{R|vc,lc} | \\
 + \alpha_{lc} \vec{\tau}_{i,lc \rightarrow ld} | \vec{w}_{R|lc,ld} | \\
 + \alpha \rho_{lc} g \sin(\gamma) \vec{w}_{lc} \\
 + \dot{q}_{w,lc} \\
 + \dot{q}_{i,lc \rightarrow vc} + \dot{q}_{i,lc \rightarrow ld} \\
 + \varphi_{lc \rightarrow vc} \left( h_{\psi,lc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{\Gamma} \vec{w}_{\Gamma} \right) \\
 + \varphi_d \left( h_{lc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \\
 - \varphi_e \left( h_{lc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \\
 + S_{friction} + S_{compression} + S_{E,lc}
 \end{aligned}$$

### Disperse Liquid-Phase:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \left[ \left( \alpha_{ld} \rho_{ld} \left( h_{ld} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \right) \right]}{\partial t} - \alpha_{ld} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \alpha_{ld} \rho_{ld} \vec{w}_{ld} \left( h_{ld} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \right) = \\
 \alpha_{ld} \vec{\tau}_{i,vc \rightarrow ld} | \vec{w}_{R|vc,ld} | \\
 + \alpha_{ld} \vec{\tau}_{i,lc \rightarrow ld} | \vec{w}_{R|lc,ld} | \\
 + \alpha \rho_{ld} g \sin(\gamma) \vec{w}_{ld} \\
 + \dot{q}_{w,ld} \\
 + \dot{q}_{i,ld \rightarrow vc} - \dot{q}_{i,lc \rightarrow ld} \\
 + \varphi_{ld \rightarrow vc} \left( h_{\psi,ld} + \frac{1}{2} \vec{w}_{\Gamma} \vec{w}_{\Gamma} \right) \\
 - \varphi_d \left( h_{ld} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \\
 + \varphi_e \left( h_{ld} + \frac{1}{2} \vec{w}_{ld} \vec{w}_{ld} \right) \\
 + S_{friction} + S_{compression} + S_{E,ld}
 \end{aligned}$$

**Kontinuierliche Gas-Phase:**

$$\frac{\partial \left[ \left( \alpha_{vc} \rho_{vc} \left( h_{vc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{vc} \vec{w}_{vc} \right) \right) \right]}{\partial t} - \alpha_{vc} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \alpha_{vc} \rho_{vc} \vec{w}_{vc} \left( h_{vc} + \frac{1}{2} \vec{w}_{vc} \vec{w}_{vc} \right) \right) =$$

$$\begin{aligned} & \alpha_{vc} \vec{\tau}_{i,vc \rightarrow lc} | \vec{w}_R |_{vc,lc} | \\ & + \alpha_{vc} \vec{\tau}_{i,vc \rightarrow ld} | \vec{w}_R |_{vc,ld} | \\ & + \alpha \rho_{vc} g \sin(\gamma) \vec{w}_{vc} \\ & + \dot{q}_{w,vc} \\ & - \dot{q}_{i,lc \rightarrow vc} - \dot{q}_{i,ld \rightarrow vc} \\ & - \varphi_{lc \rightarrow vc} \left( h_{\psi,vc} + \frac{1}{2} \vec{w}_\Gamma \vec{w}_\Gamma \right) \\ & - \varphi_{ld \rightarrow vc} \left( h_{vc} + \frac{1}{2} \vec{w}_\Gamma \vec{w}_\Gamma \right) \\ & + S_{friction} + S_{compression} + S_{E,vc} \end{aligned}$$

**Tab. A.4.3** Bedeutung der Terme der Energiebilanzgleichung

Term	Beschreibung	Einheit
$\alpha_k \vec{\tau}_i   \vec{w}_R  $	Dissipation durch interfacial Shear	$W/m^2$
$\alpha_k \rho_k g \sin(\gamma) \vec{w}_k$	Erdbeschleunigungsterm	$W/m^2$
$\dot{q}_i$	Wärmefluss an der Phasengrenze	$W/m^2$
$\dot{q}_{w,k}$	Wärmefluss an der Wand/Struktur	$W/m^2$
$S_{friction}$	Dissipation durch Wandreibung : $P w_k \tau_W$	$W/m^2$
$S_{compression}$	Dissipation durch Kompressionsarbeit : $P \cdot \nabla(w_k A)$	$W/m^2$
$S_{E,vc}$	Externe Quellterme wie Pumpe, Turbine...	$W/m^2$

#### A.4.5 Annahmen und mögliche Vereinfachungen

Folgende Annahmen werden zur Vereinfachung des beschriebenen Modells gemacht:

- Es gibt keinen Wärmeaustausch und keine durch Scherkräfte übertragene Arbeit zwischen der dispersen und kontinuierlichen Liquid-Phase:

- $\dot{q}_{i,lc \rightarrow ld} = 0$

- $\tau_{i,lc \rightarrow ld} = 0$

- $f_W = 0$  für die disperse Liquidphase bei Ringtropfenströmung (dieser Punkt ist erst bei der Unterscheidung verschiedener Strömungsformen relevant)

- Die Tröpfchen bewegen sich mit der gleichen Geschwindigkeit wie die kontinuierliche Gas-Phase:

- $w_{ld} = w_{vc}$

- Die Wasserspiegelkraft wird durch eine Mischungsdichte  $\rho_{vap}$  für die kontinuierliche Dampfphase und Tropfen ermittelt.

- Wie bisher werden folgende Terme im Code vernachlässigt:

- Geometrie- und Strukturänderungen:  $\frac{dV}{dt} = 0$

- virtuelle Masse : z.B. :  $\alpha_{vc} \alpha_{lc} \rho_m \left( \frac{\partial \vec{w}_{R|vc,lc}}{\partial t} + \nabla \vec{w}_{R|vc,lc} \right) = 0$

- potentielle Energie-Terme

- Scherkraft- und Dissipationsterme für die Energieerhaltungsgleichung:  
 $\tau_i = 0$

- Erdbeschleunigungsterme für die Massen- und Energieerhaltungsgleichungen (siehe /AUH 16/ "Mass and Energy Balances")

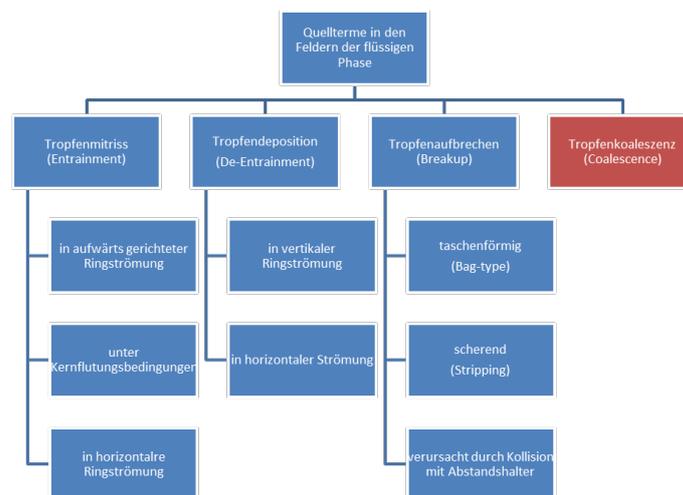
- Kompressionsarbeit und Dissipation durch Wandreibung



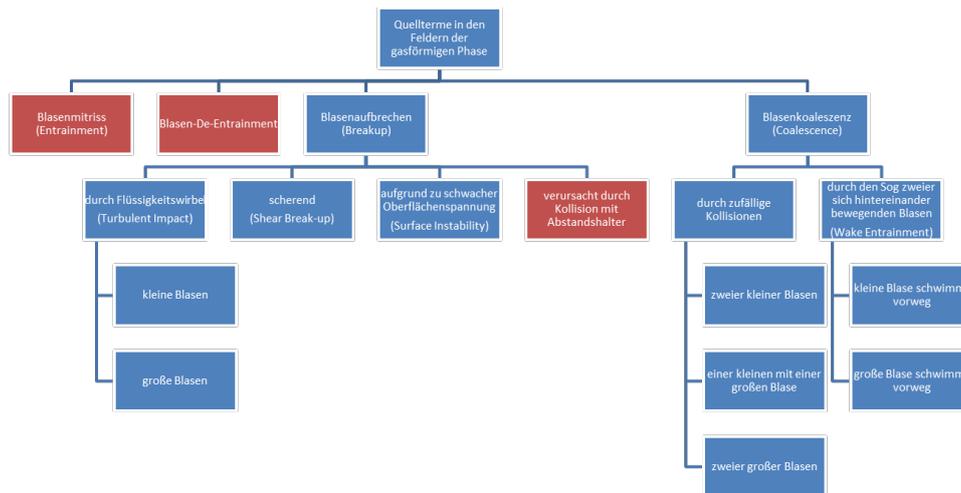
## A.5 Schließungsgleichungen

Ein grundsätzliches Problem bei der Anwendung von Mehrfeldermodellen ist die Beschreibung der neuen Quell- und Phasenwechselterme. Hierfür werden Schließungsgleichungen benötigt, welche in der Regel nur für spezielle Geometrien, Strömungsformen und Parameterbereiche gültig sind. In der Literatur ist daher eine Vielzahl von Schließungsgleichungen für die jeweils untersuchten Fälle zu finden, z. B. in /JAY 04/, /JAY 05/, /LEE 06/, /STE 07/, /BON 09/, /VAL 11/, /ROT 17/.

Um ein Beispiel für die verschiedenen Phänomene zu geben, welche von den Schließungsgleichungen abgedeckt werden müssen, sind Abb. A.5.1 und Abb. A.5.2 die Quellterme in den Erhaltungsgleichungen eines Sechs-Felder-Modells (Flüssigkeit kontinuierlich, kleine Tropfen, große Tropfen; Gasphase kontinuierlich, kleine Blasen, große Blasen) abgebildet. Die detaillierte Beschreibung der Gleichungen ist in /ROT17/ zu finden. Rot ausgefüllte Boxen in den Abbildungen bedeuten, dass gemäß /ROT17/ gegenwärtig (die Quelle ist aus dem Jahr 2017) keine Schließungsgleichungen für den entsprechenden Prozess bekannt sind. Stattdessen werden vorübergehend die analogen Schließungsgleichungen der jeweils anderen Phase empfohlen: Tropfenkoaleszenz soll z. B. durch die Gleichungen für Blasenkoaleszenz berechnet werden, solange kein spezielles Modell bekannt ist.



**Abb. A. 5.1** Zusatzterme in den Feldern der Tropfen-Phase, nach /ROT17/



**Abb. A. 5.2** Zusatzterme in den Feldern der Blasen-Phase, nach /ROT17/

Versuchsnachrechnungen mit CATHARE haben gezeigt, dass die Simulationsfähigkeit des Codes bei Verwendung eines Drei-Felder-Modells Modell (flüssig kontinuierlich, Tropfen; gasförmig) anstelle des traditionellen Zwei-Felder-Modells verbessert werden konnte, allerdings nur für die Phänomene, zu welchen Schließungsgleichungen bekannt sind /VAL 11/: “In these preliminary calculations with a three-field model, the flow behavior at the core outlet is already better described but the behavior of droplets downstream of the core is not yet well captured since no adequate deposition law is available for these components.”

Andererseits konnte – obwohl die Schließungsgleichungen prinzipiell strömungsformabhängig sind /ROT 15a/, /JAY 04/ – nachgewiesen werden, dass zumindest für langsame Transienten in (nahezu) horizontalen Rohren mit dominanter Strömungsrichtung durchaus strömungsformunabhängige Schließungsgleichungen verwendet werden können /BON 09/. Die Autoren konnten mit ihrem Vier-Felder-Modell (flüssig kontinuierlich, Tropfen; gasförmig kontinuierlich, Blasen) sogar die Strömungsformen in einer Pipeline in guter Übereinstimmung mit der Strömungskarte von Taitel&Dukler vorhersagen.

### A.5.1 Schließungsgleichungen zum 3-Felder-Modell

Wie bereits angesprochen, sind beim 3-Felder-Modell grundsätzlich 3 Wechselwirkungen möglich. Schließungsgleichungen müssen entsprechend zusätzlich für folgende physikalischen Effekte gefunden werden:

1. liq. kontinuierlich  $\Leftrightarrow$  liq. dispers:
  - Tropfendeposition
  - Tropfenentrainment
2. liq. dispers  $\Leftrightarrow$  vap. kontinuierlich:
  - Tropfen “drag”, Zwischenphasenflächenreibung für Tropfen
  - Wärmetransport zwischen Tropfen und Gasphase
3. Wärmetransport zwischen Tropfen und Wand + Konvektion + Wärmestrahlung
4. Tropfendurchmesser
5. Übergänge zwischen verschiedenen Strömungsformen

Die Tab. A.5.1 listet die aus der Literatur bekannte Schließungsgleichungen mit deren Abhängigkeiten zur Geometrie und Strömungsform auf. In der Tabelle sind folgende Abkürzungen zu finden: v.=vertical, h.=horizontal, A-F=Annular-Flow, Bub.=Bubbly-Flow, Strat.=Stratified Flow, A-M=Annular-Mist-Flow, Dis.=Dispersed Flow, Corr.=Correlation, cont.=continuous, interf.=interfacial, k. A.=keine Angaben

**Tab. A.5.1** Verfügbare Schließungsgleichungen in Abhängigkeit von Geometrie und Strömungsform

Korrelation / Bezeichnung	Modell- zweck	Referenz	Geome- trie	Strömungs- form	Code
-	Deposition	/VAL 11/	k.A.	k.A.	CATHARE3
-	Entrainment	/VAL 11/	k.A.	k.A.	CATHARE3
-	Friction droplets-gas	/VAL 11/	k.A.	k.A.	CATHARE3
-	Heat trans- fer droplets- gas	/VAL 11/	k.A.	k.A.	CATHARE3
Hoyer	Deposition	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
Hewitt-Govan	Entrainment	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	cont. phases interf. friction	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Friction Wall - cont. pha- ses	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Droplets Di- ameter	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Mass Trans- fer cont.liq, gas	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Mass Trans- fer disp.liq, gas	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Heat trans- fer droplets- gas	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3

Korrelation / Bezeichnung	Modell- zweck	Referenz	Geome- trie	Strömungs- form	Code
Dittus-Boelter	Heat trans- fer liquid- wall	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
forced. conv	Heat trans- fer cont. phases	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
-	Gas Droplets Shear Stress	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
Milashenko	Break-Up of bubbles	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
Ueda	Break-Up of bubbles	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
list of models	Transition to Annular Flow	/JAY 04/	v.	A-F	CATHARE3
Pan-Hanratty	Deposition	/HAS 11/	?	?	SPACE
Pan-Hanratty	Entrainment	/HAS 11/	?	?	SPACE
-	Liquid Gas Interfacial Area	/STE 07/	v.	Bub.	-
-	Wall shear stress	/STE 07/	v.	Bub.	-
Paleev,Sugawar a	Deposition	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
Saito,Sugawara	Entrainment	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
Kim,Dunkler	Friction Film-Gas	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP

Korrelation / Bezeichnung	Modell-zweck	Referenz	Geometrie	Strömungsform	Code
Cliff,Saito,Sami	Friction Droplets-Gas	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
Blasisus,Ardron	Friction Wall-Film	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
-	Film Thickness	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
Kim,Bankoff	Condensation	/STE 95/	v.	A-F, Strat.	STRAP
Pan-Hanratty	Deposition	/BON 09/	h.	Bub.,Strat., Slug	k.A.
Pan-Hanratty	Entrainment	/BON 09/	h.	Bub.,Strat., Slug	k.A.
Alipchenkov	droplets Drag	/BON 09/	h.	Bub.,Strat., Slug	k.A.
Sarkhi-Hanratty	droplets Diameter	/BON 09/	h.	Bub.,Strat., Slug	k.A.
list of	Friction Factors	/BON 09/	h.	Bub.,Strat., Slug	k.A.
Kataoka et al.	Deposition	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Kataoka et al.	Entrainment	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Kataoka + Ishii	Interfacial-area transport	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Kim,Wallis	Friction cont. liq.-Gas	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.

Korrelation / Bezeichnung	Modell-zweck	Referenz	Geometrie	Strömungsform	Code
Ishii and Chawla	Friction Droplets-Gas	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
-	Heat Correlations	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Whalley	Eddy viscosity	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Crowley et al.	Film Thickness	/TRE 11/	h.	Strat.	k.A.
Wurtz	Deposition	/LEE 06/	k.A.	A-M	TRAC-M/F90
Wurtz	Entrainment	/LEE 06/	k.A.	k.A.	TRAC-M/F90
Clift	Droplets Drag	/LEE 06/	k.A.	k.A.	TRAC-M/F90
RELAP5/MOD3.2	Droplets Diameter	/LEE 06/	k.A.	k.A.	TRAC-M/F90
Wallis	Interf. Friction	/LEE 06/	k.A.	k.A.	TRAC-M/F90
/KAT 82/	Entrainment	/AUS 16/	v.,h.	A-F,A-M	ATHLET_31 A
-	Interf. Shear Stress	/AUS 16/	v.	A-F,A-M	ATHLET_31 A
-	Interf. Shear Stress	/AUS 16/	h.	Wavy,Slug, Dis.	ATHLET_31 A
-	Heat Corr. for Film/Wall	/AUS 16/	-	-	ATHLET_31 A

Die Modelle und Schließungsgleichungen, die in /JAY 04/ zur Simulation einer Ringströmung angewendet wurden, wurden auch für eine Brennstabbündelgeometrie in /JAY 05/ angewendet.

## A.5.2 Übergangskriterien zu Ringtropfenströmungen

Ein wichtiger Aspekt der Entwicklung und Implementierung eines zusätzlichen Feldes in ATHLET ist der reibungslose und stetige Übergang innerhalb des fluiddynamischen Netzwerks zwischen dem aktuellen 2-Felder- (2F) Gleichungssystem und dem neuen 3-Felder- (3F) Gleichungssystem. Neben dem räumlichen Übergang gilt dies auch für den zeitlichen Übergang sicherzustellen. Falls die gleichen Annahmen gemacht werden, muss das 3F-Modell bei Verschwinden der zusätzlichen Phase in das 2F-Modell übergehen.

Zum Übergang würde man z.B.  $\alpha_{ld} = 0$  setzen, mit folgenden Konsequenzen:

- alle Wechselwirkungsterme der dispersen Phase wie z.B.  $(\vec{\tau}_{i,vc \rightarrow ld})$  werden dann null.
- $\rho_{vap} = \rho_{vc}$
- $\rho_m = \alpha_{vc} \rho_{vc} + \alpha_{lc} \rho_{lc}$
- ...usw.

Analoges gilt für den Fall eines verschwindenden Flüssigkeitsfilms,  $\alpha_{lc} = 0$ .

In diesem Fall sind keine großen numerischen Instabilitäten beim Übergang zwischen 2F zu 3F zu erwarten. Allerdings wäre ein Übergang zwischen 1F und 3F deutlich schwieriger und ist im Rahmen dieser Studie nicht vorgesehen.

Da aber das 3F-Modell zunächst nur für spezielle Strömungsformen implementiert und eingesetzt werden soll, braucht das Modell ein oder mehrere entscheidende Übergangskriterien zum Aktivieren/Deaktivieren des Modells in Abhängigkeit von den Strömungsbedingungen. Im ersten Schritt wird das 3F-Modell nur für den Fall einer vertikalen Ringströmung verwendet werden.

Zurzeit wird bereits in ATHLET der Übergang zur Ring-Tropfen-Strömung an verschiedenen Stellen berechnet (siehe /AUS 16/):

- zur Berechnung der Zwischenphasenoberfläche im “Direct Condensation” Modell, falls  $\alpha_{vc} > 0.75$  .
- zur Modellierung der Zwischenphasen-Scherkräfte. Die Kriterien für das Einsetzen von Entrainment sind:
  - Im Fall vertikaler Geometrie :  $j^* > w_{V,e}$
  - Im Fall horizontaler Geometrie :  $w_{V,e} \leq w_{max}$

mit

$$\text{horizontal: } w_{V,e} = \max \left[ 0.5 \sqrt{\frac{(\rho_L - \rho_V)g\alpha A}{\rho_g D}}, 0.6 \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_V}} \right]$$

$$\text{vertikal: } w_{V,e} = \left[ \left( \frac{4}{3} \frac{We}{C_D} \right)^{\frac{1}{4}} + 1.6 + \cos(\theta) \right] \cdot \left( \frac{\sigma \Delta \rho g}{\rho_V^2} \right)^{\frac{1}{4}}$$

$j^*$  ist dabei die größte der Phasenoberflächengeschwindigkeiten.

Die Entscheidung zwischen dem Aktivieren oder dem Deaktivieren des 3F-Modells soll auf einer höheren Ebene der Software erfolgen, da diese später eine Vielfalt an Modellen beeinflusst. Deswegen wäre eine Implementierung von zentralen Strömungskarten als Übergangskriterien von Vorteil. Zurzeit wird im Rahmen des Projektes “**P**Assive **N**achzerfallswärme-**A**bfuhr**S**ysteme” (PANAS) unter anderem die Anwendung der Strömungskarten von /HAJ 03/ und /TAN 82/ für horizontale Rohre in ATHLET untersucht. Beide Strömungskarten wurden in einer Entwicklerversion von ATHLET implementiert, verifiziert und werden zurzeit anhand von Experimentaldaten validiert und können einen Ausgangspunkt für die Entwicklungen zum Dreifeldermodell darstellen. Für vertikale (und auch horizontale) Geometrien könnte man sich an den in /WOL 07/ erwähnten Strömungskarten orientieren.

Folgendes muss allerdings berücksichtigt werden:

- Geometrie der Rohre (horizontal, vertikal, Durchmesser...)
- Richtung der Strömung (abwärts, aufwärts)
- Arbeitsfluid (Wasser, Luft...)
- Welche Parameter werden zur Erstellung der Mappe benutzt (dimensionslose Größe, Komplexität, Anzahl...)
- Strömungskarte sind meistens für 2-Phasen-Modelle vorgesehen

Parallel dazu könnte man das Modell von /AUS 05/ für disperse vertikale Strömungen zur Anwendung mit dem 3F-Modell anpassen, was die Abbildung von Kondensations- und Verdampfungsprozesse deutlich verfeinern würde und ein mögliches Übergangskriterium ( $\alpha > 0.7$ ) liefern würde.

## **A.6 Planung und Risiken der Implementierung**

### **A.6.1 Nutzen und Risiken**

In den folgenden Unterkapiteln sind die potenziellen Nutzen einer oder mehrerer zusätzlicher Feldgleichungen aufgelistet sowie die Risiken/Schwierigkeiten, die mit ihrer Implementierung einhergehen.

### **A.6.2 Was spricht für eine Realisierung?**

- Wie eingangs erwähnt, ist es internationaler Konsens, dass die heutzutage eingesetzten Systemcodes mit klassischem Zwei-Felder-Modell an die Grenzen ihrer Simulationsfähigkeit gestoßen sind. Die Modellierung zusätzlicher Felder wird explizit als eine deutliche Möglichkeit zur Weiterentwicklung genannt. Andere Systemcodes wie RELAP5-3D oder CATHARE haben diesen Weg bereits eingeschlagen. Wenn sich die Mehrfeldersimulation als Stand der Technik durchsetzt, sollte ATHLET mit dieser Entwicklung Schritt halten können.
- Anhand von Versuchsnachrechnungen konnte nachgewiesen werden, dass sich die Simulationsfähigkeit von Systemcodes durch den Einsatz von Mehrfeldermodellen für die Phänomene und Geometrien, für welche Schließungsgleichungen bekannt sind, verbessert hat. Insbesondere betrifft dies Phänomene wie CHF oder Post-Dryout-Wärmetransport, die während eines Kühlmittelverluststörfalls auftreten können und für die Reaktorsicherheit von Bedeutung sind.
- Da die Einführung neuer Feldgleichungen evtl. Auswirkungen auf zahlreiche andere, bisher in ATHLET enthaltene Modelle hat, bietet sich eine Chance zur Modernisierung des Codes. Eine solche Modernisierung kann die Codestruktur betreffen, aber auch konkrete physikalische Modelle – so wird CHF in ATHLET bislang mittels sogenannter “Look-up Tables” bestimmt, durch die Simulation mehrerer Felder könnte dieses Phänomen mechanistisch berechnet werden. Oder die Vorhersage von Strömungsformen bei transienten Vorgängen könnte mit einem Mehrfeldermodell im Zusammenspiel mit einem (ebenfalls zu implementierenden) Modell zur Berechnung der Zwischenphasenflächendichte geschehen, anstatt wie bisher auf starren Kriterien, abgeleitet aus Strömungskarten, welche nur für stationäre Vorgänge validiert sind, zu beruhen.

- Aktuelle Vorhaben, wie RS1543 zur passiven Lagerbeckenkühlung durch Wärmehohlräume haben Bedarf nach Modifikationen des Wand- und Zwischenphasenreibungssmodells aufgezeigt. Da diese Modelle auch bei der Einführung weiterer Feldgleichungen modifiziert werden müssten, ist der Zeitpunkt hierfür geeignet.

### **A.6.3 Welche Risiken gibt es? Mit welchen Maßnahmen könnte man diesen begegnen?**

- Schließungsgleichungen für die neuen Quellterme sind bislang nicht ausreichend bekannt.
- → Angesichts der aktuellen internationalen Bemühungen, Systemcodes um ein oder mehrere Felder zu erweitern, ist jedoch zu erwarten, dass die Kenntnisse über die Schließungsmodelle in näherer Zukunft wachsen werden. Auch die GRS könnte hier einen Beitrag zur Fortschreibung des Standes von W&T leisten (d. h. eigene Entwicklung von Schließungsgleichungen, z. B. durch Doktoranden). Voraussetzung ist jedoch die Verfügbarkeit geeigneter Experimente.
- Es ist unklar, wie viele neue Felder benötigt werden, um eine ausreichende Verbesserung der Simulationsfähigkeit eines Codes zu erhalten, ohne gleichzeitig zu viel Aufwand zu betreiben. Theoretisch könnte man unendlich viele Abstufungen bzgl. Tropfen- und Blasengröße vornehmen.
- → Erfahrungen mit Mehrfeldermodellen in anderen Codes haben gezeigt, dass bereits ein zusätzliches Tropfenfeld die Simulationsfähigkeit deutlich verbessern kann. Ähnlich wie bei der Feinheit einer Nodalisierung wird es auch bei der Anzahl der verwendeten Felder ein Optimum aus Nutzen und Aufwand geben. Dieses kann nur durch Erfahrung in der Anwendung der Modelle ermittelt werden. Hierbei kommt der Entwicklung zugute, dass einzelne Felder sowie einzelne Modellterme sukzessive ergänzt werden können, was eine schrittweise Implementierung ermöglicht (z. B. über die Stufen Drei-Felder-Modell für vertikale Geometrien. Drei-Felder-Modell für vertikale und horizontale Geometrien => Vier-Felder-Modell für vertikale und horizontale Geometrien => Sechs-Felder-Modell usw.).
- Man benötigt für viele verschiedene Geometrien und Strömungsbilder viele verschiedene Schließungsgleichungen. Es besteht die Gefahr, dass der Code durch zu viele Korrelationen für den Programmierer wie den Anwender unübersichtlich wird.

- → Eine Lösung wäre hier, die Anwendung eines Mehr-Felder-Modells zunächst nur auf wenige spezielle Geometrien und Strömungsbilder zu beschränken (z. B. Ringströmung in vertikalen Kanälen). Durch eine sukzessive Implementierung neuer Felder (siehe Punkt oben) würden auch nicht sofort unnötig viele neue Quellterme nötig werden (vgl. Gl. (2.1)). Möglicherweise wird durch aktuelle theoretische Arbeiten an den Schließungsmodellen auch zukünftig eine Art generischer Schließungsgleichung entwickelt.
- Generell konkurriert der Einbau neuer Felder in den Code natürlich mit anderen Aufgaben der ATHLET-Entwicklung um Ressourcen: z.B. Pre-/Postprocessing, Code-Umstrukturierung, Zwischenphasenflächenmodell.
- → Aufgrund des schon genannten Vorteils der Möglichkeit zum sukzessiven Ausbau des Modells lässt sich der Aufwand einer Implementierung zusätzlicher Feldgleichungen begrenzen. Einige Programmentwicklungen könnten auch parallel hierzu verlaufen, da sie evtl. voneinander profitieren, wie z. B. Code-Restrukturierung, oder die Weiterentwicklung der Transportgleichung für die Zwischenphasenflächendichte.

#### **A.6.4 Grundsätzliche Fragen bzgl. der Implementierung**

In diesem Abschnitt sind einige grundsätzliche Fragen bezüglich der Anforderungen an ein Mehrfeldermodell in ATHLET und der Implementierung desselben aufgelistet, welche vor dem Aufstellen einer konkreten "Roadmap" geklärt werden müssen.

- Wie viele Felder sollen implementiert werden?  
 → Vor dem Hintergrund, dass später evtl. mehrere neue Felder in ATHLET implementiert werden sollen (z. B. kleine Tropfen/Blasen, große Tropfen/Blasen), hätte der "Top-Down"-Ansatz, die Schnittstellen für die später möglichen (sechs?) Felder im Vorfeld vorzubereiten, sich bei der konkreten Implementierung der Schließungsgleichungen allerdings nur auf ein neues Feld zu konzentrieren und die übrigen, noch nicht benötigten Felder zunächst abzuschalten, den Vorteil, dass der nachträgliche Einbau neuer Felder weniger aufwändig ist. Nachteilig ist der größere Aufwand, der aktuell betrieben werden muss, wodurch das Modell auch erst später für Validierungsrechnungen bereitsteht. Die Vor- und Nachteile kehren sich beim "Bottom-Up"-Ansatz, zunächst nur ein zusätzliches Feld hinzu-

zufügen, um. Allerdings hätte ein “Bottom-Up”-Ansatz den zusätzlichen Vorteil, dass man später beim Einbau weiterer Felder von den “lessons learned” aus dem Einbau des ersten zusätzlichen Feldes profitieren kann: Aufgrund der Komplexität der Implementierung ist es wahrscheinlich, mit verschiedenen unerwarteten Schwierigkeiten konfrontiert zu werden. Aus diesem Grund ist der Einbau zunächst nur eines neuen Feldes sinnvoll.

- Welche Phase soll in zwei Felder aufgeteilt werden?

→ Entsprechend den in der Literatur gefundenen bisherigen Anwendungen von Mehrfeldermodellen mit Bezug zur Reaktorsicherheit (siehe Kapitel 2.2) ist die Aufteilung der flüssigen Phase in ein kontinuierliches und ein Tropfenfeld sinnvoll. Es handelt sich hierbei nicht einfach um eine bloße Erweiterung um ein neues Feld (im Sinne von “zusätzlicher Implementierung neuer Feldgleichungen”), sondern um eine echte Aufteilung des bisherigen flüssigen Feldes auf zwei Felder mit separaten Erhaltungsgleichungen.

- Welche Geometrien sollen berücksichtigt werden?

→ Zunächst wäre die ausschließliche Betrachtung vertikaler Geometrien zu bevorzugen, da hierfür zum einen ausreichend Erfahrung bezüglich der Schließungsgleichungen vorliegt (z.B. für COBRA-TF) und da mit vertikalen Strömungskanälen sicherheitsrelevante Themen (z.B. Quenchfrontbewegung im Kern oder Post-Dryout-Wärmetransport an den Brennelementhüllrohren) abgedeckt werden können.

- Wo soll das Mehrfeldermodell eingesetzt werden? Im 3D-Bereich oder auch im 1D-Bereich?

→ Das Modell sollte zunächst vor allem im 1D-Bereich eingesetzt werden, da das 3D-Modell hauptsächlich für die Simulation von Strömungen im Downcomer entwickelt wurde und die Anwendungsgebiete des Mehrfeldermodells z. T. woanders liegen: Druckhalter, Heatpipes, Kernkanäle. Längerfristig ist ein Einsatz auch im 3D-Bereich überlegenswert. Wenn das Modell nur in einigen Simulationsbereichen/Komponenten eingesetzt werden soll, muss die Schnittstelle zum übrigen Simulationsgebiet für den räumlichen Übergang von 2F auf 3F sinnvoll definiert werden (vgl. die Notwendigkeit “hybrider” Leitungen in CATHARE, Kapitel 2.3.1).

- Die Schließungsgleichungen für die neuen Quellterme sind strömungsformabhängig. ATHLET enthält bisher nur vereinzelt in einigen Modellen Informationen über die lokal vorliegenden Strömungsformen. Welche Arbeiten sind auf diesem Gebiet notwendig?

→ Diese Frage eröffnet ein weiteres Feld bzgl. der Entwicklung von ATHLET: Entweder müssen die Strömungskarten in ATHLET für die jeweiligen Modelle vereinheitlicht werden oder aber es ist eine Transportgleichung für die Zwischenphasenflächendichte zu implementieren (genaugenommen existiert eine solche Gleichung schon im Code und ist bisher nur noch nicht offiziell freigegeben). Prinzipiell wäre es wünschenswert, die Entwicklung und Validierung von Mehrfeldermodellen und einer Transportgleichung für die Zwischenphasenflächendichte parallel voranzutreiben; siehe hierzu auch /EMO 09/: "A very sensitive parameter of a droplet field is the size distribution of droplets which affects all interfacial transfers. Dynamic interfacial area modeling or polydispersion models using the MUSIG [...] method or the Method of Statistical Moments (MSM) are considered to address this problem." Durch einen gemeinsamen Einsatz beider Modelle wäre evtl. auch der Einsatz von Strömungskarten für einzelne Strömungsbilder obsolet.

- Wie viele Erhaltungsgleichungen sollen für das zusätzliche neue Feld gelöst werden?

→ In manchen Codes wird vereinfachend ein thermisches Gleichgewicht zwischen Tropfenfeld und kontinuierlicher flüssiger Phase angenommen. Aufgrund dieser Vereinfachung können jedoch Kondensationsprozesse nicht angemessen wiedergegeben werden /ERG 06/.

→ Wenn ATHLET um ein Tropfenfeld für vertikale Geometrien weiterentwickelt wird, wäre ein möglicher Einsatzbereich nicht nur die CHF- und Quenchfrontberechnung im Kern (s. o.), sondern auch das Druckhaltersprühen. Daher wäre es sinnvoll, alle Erhaltungsgleichungen für das neue Feld zu lösen.

- Welche anderen ATHLET-Modelle wären von der Implementierung betroffen?
  - Die Implementierung eines zusätzlichen Feldes hat Auswirkungen auf folgende bereits in ATHLET enthaltene Modelle (sei es durch Modellüberarbeitung oder vollständiges Ersetzen): Zwischenphasenreibung, Wandreibung, 3D-Modell. Zusätzlich müssen verschiedene Spezialmodelle ggf. angepasst werden: Druckhalterprüfmodell, Entrainment-Modell, Quenchfront-Modell
  
- Wie könnte die Integration des Mehrfeldermodells in ATHLET aussehen?
  - Die Aktivierung des Dreifeldermodells für bestimmte Systembereiche könnte dem Anwender zunächst über eine Input-Option (z.B. IARTO=3, als Ergänzung zu 1M und 2M) ermöglicht werden. Soweit in diesem Bereich nach der ATHLET-Startrechnung, d. h. zu Beginn der transienten Rechnung, eine zweiphasige Strömungssituation, die mit dem Dreifeldermodell simuliert werden kann, besteht bzw. entsteht, würde das dritte Feld dynamisch aktiviert und geeignet initialisiert. Analoges gilt für das Verschwinden des dritten Feldes. Eine ähnliche Methodik ist bereits für den Übergang von ein- auf zweiphasige Strömung implementiert und entscheidend für die erforderliche numerische Stabilität der Simulation. Falls in nachfolgenden Schritten weitere Felder in ATHLET implementiert werden sollen, könnte man dem Anwender zunächst über IARTO = 3, 4, 5 usw. die Wahl zwischen verschiedenen Mehrfeldermodellen geben, um die entsprechenden Modelle in den für sie relevanten Systembereichen einzusetzen. Die einfache Auswahl verschiedener Modelle über den Eingabeparameter IARTO könnte außerdem für Sensitivitätsstudien genutzt werden. Sobald die Modelle hinreichend validiert sind, sollte die Entscheidung über den Einsatz der Modelle vom Programm selbst gefällt werden.
  
  - Um den Einbau eines neuen Feldes in ATHLET zu erleichtern, sollte der Quellcode vorbereitend modular strukturiert werden. Eine solche Umstrukturierung hat bereits begonnen und wird auch die Implementierung weiterer Gleichungen in Zukunft erleichtern (neue Stoffe, Transportgleichungen, ...). Es muss darauf geachtet werden, die bereits in ATHLET enthaltene Kontrolle des Massen- und Energiefehlers auf alle Felder anzuwenden. Evtl. wäre auch die Kontrolle des Fehlers in den Impulsbilanzen in Erwägung zu ziehen.

### A.6.5 Roadmap der Implementierung

Eine Roadmap für das Ziel der Implementierung eines Tropfenfeldes mit separater Massen-, Impuls- und Energiebilanz könnte wie folgt aussehen:

- Zunächst Festlegung auf eine spezielle Strömungssituation. Geeignet ist Reflooding in einem vertikalen Brennstabündel, da hierfür Schließungsgleichungen bekannt sind. Vor der Entscheidung für eine bestimmte Strömungssituation sollte geklärt werden, ob Experimentaldaten für Testrechnungen oder zur Validierung verfügbar sind.
- Da die Schließungsgleichungen der Mehrfeldermodelle im allgemeinen strömungsformabhängig sind, wäre es eventuell sinnvoll, das aktuelle bereits implementierte Modell zur Berechnung der Zwischenphasenflächendichte für die vertikale Geometrie zu validieren und parallel zum 3F-Modell anzuwenden (sofern die Schließungsgleichungen für dieses Modell bekannt sind).
- Formulierung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie für alle Felder (da jedes Feld zumindest neue Quellterme enthält)
- Umformung der Erhaltungsgleichungen in ATHLET-Lösungsgleichungen
- Formulierung der Schließungsgleichungen für die spezielle Strömungssituation
- Vorbereitung von ATHLET für Einbau neuer DGLn parallel zur Modellentwicklung: Entwicklung einer modularen Struktur
- Implementierung der DGLn für das Tropfenfeld, Modifizierung der bestehenden Lösungsgleichungen für flüssige und Gasphase, Implementierung der Schließungsgleichungen
- Testrechnungen zur Lauffähigkeit und Plausibilität
- Validierungsrechnungen



## A.7 Validierungsmöglichkeiten für das 3-Feldermodell

In diesem Kapitel werden Experimente genannt, welche grundsätzlich zur Validierung von Mehrfeldermodellen geeignet sind.

### A.7.1 Einzeleffektversuche

- PERICLES /VAL 11/: Boil-up, Boil-off und Reflooding-Tests in einem DWR-Bündel
- BFBT
- FLECHT-SEASET (Full Length Emergency Core Heat Transfer-System Effects and Separate Effects Tests) /ERG 06/: Brennstabbündel (161 Stäbe). Reflood Experimente
- RBHT (Rod Bundle Heat Transfer) /VAL 11/, /ERG 06/: DWR-Bündel. Quenchfrontbewegung
- Heatpipe (Projekt "Passive Lagerbeckenkühlung durch Wärmerohre", Förderkennzeichen RS1543): vertikale Geometrie
- STRA23/29 oder ähnliche Versuche zum Druckhaltersprühen an der DHVA Zittau?
- Bennet et al. /JAY 04/: Dryout- und Post-Dryout-Experimente in Rohren. 70 bar
- Becker et al. /JAY 04/: Post-Dryout Heat Transfer in Rohren. 30-200 bar
- Wurtz (oder Würtz) /LEE 06/, /JAY 04/: vertikale adiabate Strömung eines Dampf-Wasser-Gemisches in Rohren und Annuli. Zweck war die Untersuchung von Entrainment. 30 - 90 bar
- Collier&Hewitt /LEE 06/: vertikale Strömung eines Luft-Wasser-Gemisches. Zweck war die Untersuchung von Entrainment. Ca. 1 bar, Umgebungsbedingungen

- TPTF (TWO-Phase Test Facility) /JAY 05/: Versuchsanlage von JAERI. Pre- und Post-Dryout Heat Transfer. Brennstabbündel (5x5)
- THTF (Thermal Hydraulic Test Facility) /JAY05/: Versuchsanlage des ORNL.-DWR Brennstabbündel (8x8). Stationäre Bedingungen.
- REGARD Versuchsprogramm für Hot Leg Geometrie /VAL 11/: Ein neues Experiment namens REGARD wird zurzeit von der CEA-Grenoble durchgeführt. Dabei wird eine mit einem Luft/Wassergemisch durchströmte horizontale transparente Rohrleitung verwendet (240 mm Durchmesser). Am Rohreintritt kann eine geschichtete Strömung oder eine disperse Tropfenströmung eingestellt werden. Es werden viele Parameter gemessen, u. a.: Tropfendurchmesser, Geschwindigkeitsprofile, Filmdicken und lokale Massenstromraten mittels isokinetik Sonden. Unterschiedliche Testfälle sollen Reflooding-Bedingungen nachbilden; die gewonnenen Ergebnisse werden in einer Datenbank zusammengefasst, auf deren Basis ein Modell zum Mitriss- und (Wieder-)Eindringen von Tropfen in die kontinuierliche flüssige Phase für horizontale Geometrie entwickelt und validiert werden soll.
- SEROPS /VAL 11/: Modelle des oberen Plenums eines DWR. SEROPS 1 investigates the deposition of droplets coming out of an assembly without the influence of the flow from the other assemblies. The SEROPS 2 mockup investigates the droplets behavior with the influence of a transverse flow in the upper plenum.
- UPTF (Upper Plenum Test Facility) test-70: Cousins' vertical horizontal annular flow für die Validierung von Entrainment-Modellen.

#### **A.7.2 Integralversuche**

- BETHSY 6.7C /VAL 11/ (Validierungsrechnungen für CATHARE3 - 3 Fields Model): BETHSY ist ein Integralversuchsstand zur Untersuchung von Unfalltransienten in Druckwasserreaktoren. 1:100 volumenskaliert, 1:1 Höhenskaliert. Experiment BETHSY 6.7C dient der Untersuchung der Kernflutungsphase bei einem Kühlmittelverluststörfall.

## A.8 Zusammenfassung

Verschiedene Aspekte einer Implementierung eines Mehrfeldermodells in den Systemcode ATHLET wurden anhand dieser Machbarkeitsstudie untersucht:

- Die Untersuchung des aktuellen Stands der Technik in anderen System- und Subchannel-Codes hat gezeigt, dass ein realer Bedarf an weiteren Feldern zur Modellierung komplexer Strömungsformen und Wärmeübergängen besteht. Für verschiedene der untersuchten Codes werden unabhängig voneinander Mehrfeldermodelle entwickelt, wobei die Aufteilungen der Phasen in verschiedene Felder je nach Anwendungsgebiet abweichen. Für ATHLET wird aufgrund der geplanten Modell-Einsatzgebiete zunächst die Implementierung eines 3-Felder-Modells mit dispersem Liquid in der Gasphase (Tröpfchen) als sinnvoll erachtet.
- Ein erster Entwurf der Erhaltungsgleichungen für ein 3-Felder Modell wurde mit detaillierter Beschreibung aller Terme erläutert.
- Eine Literaturstudie zu den benötigten Schließungsgleichungen und deren Strömungsformabhängigkeit wurde erfolgreich durchgeführt. Für den Einsatz in ATHLET ist geplant, dass diese Schließungsgleichungen zunächst vom Entwickler je nach Bedarf ausgewählt werden können, sodass alle physikalischen Effekte und Wechselwirkungen zwischen den Feldern abgedeckt werden.
- Es besteht die Absicht, im Zuge der Implementierung eines dritten Feldes in ATHLET den Code so anzupassen, dass zukünftig ggf. weitere Felder ohne großen Aufwand hinzugefügt werden können, wenn der Stand der Technik genügend Schließungsgleichungen zu deren Modellierung liefert.
- Wissenschaftliche Motivation und Risiken der Implementierung eines Mehrfeldermodells wurden erwähnt und analysiert. Aufgrund der Vielfalt an Modellen, die durch Einbau eines dritten Feldes betroffen wären, wird der größte Aufwand bei der Umstrukturierung des Quellcodes sowie bei der Anpassung der Grundgleichungen erwartet.
- Eine experimentelle Datenbasis zur Validierung wurde gesammelt.



## A.9 Literatur

- /AUS 05/ H. Austregesilo, K. Traumbauer: Modelling of the Interfacial Area Concentration in the System Code ATHLET, NURETH-11, Oct. 2005.
- /AUS 16/ H. Austregesilo et al.: "ATHLET 3.1A, Models and Methods", Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - P - 1 / Vol. 3, Rev. 4, 2016.
- /BES 08/ D. Bestion, "System Code Models and Capabilities", THICKET 2008 - Session III - Paper 06, 2008.
- /BES 10/ D. Bestion, "Contribution by CEA on CATHARE-2 / CATHARE-3 code", FONESYS Pisa, 2010.
- /BON 09/ M. Bonizzi et al.: "Flow regime independent, high resolution multi-field modelling of near-horizontal gas-liquid flows in pipelines", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 35, pp. 34-46, 2009.
- /CHE 13/ H. Cheon No, S. Jun Ha, K. Doo Kim, H. Sik Lim, E. HWAK Lee, H. Gon Jin, "Korean development of advanced thermal-hydraulic codes for water reactors and HTGRs: SPACE and GAMMA", 2013.
- /EMO 09/ P. Emonot et al.: "CATHARE-3: A new system code for thermal-hydraulics in the context of the NEPTUNE project", The 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13), 2009.
- /ERG 06/ S. Ergun: "Modeling of Dispersed Flow Film Boiling with Two Flow, Five Field Eulerian- Eulerian Approach and Effects of Spacer Grids on Heat Transfer", Dissertation, Pennsylvania State University, 2006.
- /GUE 07/ A. Guelfi et al.: "NEPTUNE: A New Software Platform for Advanced Nuclear Thermal Hydraulics", Nuclear Science and Engineering, Vol. 156, pp. 281-324, 2007.

- /HAJ 03/ J. El Hajal, J.R. Thome, A. Cavallini: "Condensation in horizontal tubes, part 1: two-phase flow pattern map and new heat transfer model based on flow regimes", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 46, 2003.
- /HAS 11/ Sang Jun Ha et al.: "Development of the Space Code for Nuclear Power Plants"; Nuclear Engineering and Technology, Vol. 43; No.1; 2011.
- /JAY 04/ S. Jayanti, M. Valette: "Prediction of dryout and post-dryout heat transfer at high pressures using a one-dimensional three-fluid model", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 47, pp. 4895-4910, 2004.
- /JAY 05/ S. Jayanti, M. Valette: "Calculation of dry out and post-dry out heat transfer in rod bundles using a three field model", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 48, pp. 1825-1839, 2005.
- /KAT 82/ I. Kataoka, M. Ishii: "Mechanism and Correlation of Droplet Entrainment and Deposition in Annular Two-Phase Flow", NUREG/CR-2885, 1982.
- /LEE 06/ Sang Ik Lee, Hee Cheon No: "The Implementation of a Three-field Model into TRAC-M/F90 and its Application to Annular-mist Flow", Journal of Nuclear Science and Technology, Vol. 43, pp. 88-97, 2006.
- /LER 16/ G. Lerchl et al.: "ATHLET Validation", Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - P - 1 / Vol. 3, Rev. 4, 2016.
- /MAR 13/ S.O. Marshall: "Using the TRACE Code for Reactor Simulations", Presentation, 2013.
- /NOH 13/ Hee Cheon No et al.: "Korean Development of Advanced Thermal-Hydraulic Codes for Water Reactors and HTGRs: SPACE and GAMMA", Nuclear Technology, Vol. 181, 2013.
- /ROT 15a/ G.A. Roth, F. Aydogan: "Six Field Governing Equations for RELAP5", Mechanical Engineering Department, University of Idaho, International RELAP Users' Group Seminar, 2015.

- /ROT 15b/ G.A. Roth, F. Aydogan: "Derivation of new mass, momentum, and energy conservation equations for two-phase flows", Progress in Nuclear Energy, Vol. 80, pp. 90-101, 2015.
- /ROT 16/ G.A. Roth, F. Aydogan: "Development of Governing Equations Based on Six Fields for the RELAP Code", NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING, Vol. 182, pp. 71-82, 2016.
- /ROT 17/ G.A. Roth, F. Aydogan: "Mass closure models for a system code based on six fields", Progress in Nuclear Energy, Vol. 94, pp. 147-161, 2017.
- /SAL 15/ R.A. Salko et al.: "COBRA-TF Subchannel Thermal-Hydraulics Code (CTF) Theory Manual", Rev. 0, CASL-U-2015-0054-000, 2015
- /STE 95/ V. Stevanovic, M. Studovic: "A simple model for vertical annular and horizontal stratified two-phase flows with liquid entrainment and phase transitions: one-dimensional steady state conditions", Nuclear Engineering and Design Vol. 154, pp. 357-379, 1995.
- /STE 07/ V. Stevanovic et al.: "Multi-Fluid Model Predictions of Gas-Liquid Two-Phase Flows in Vertical Tubes", Faculty of Mechanical Engineering, Belgrade, FME Transactions, Vol. 35, pp. 173-181, 2007.
- /TAN 82/ T.N. Tandon, H.K. Varma, C.P. Gupta. A New Flow Regimes Map for Condensation Inside Horizontal Tubes. Journal of Heat Transfer, vol. 104, pp. 763-768. 1982
- /THU 82/ M.J. Thurgood et al.: "COBRA/TRAC - A Thermal-Hydraulics Code for Transient Analysis of Nuclear Reactor Vessels and Primary Coolant Systems - Equations and Constitutive Models", P. N. Laboratory for U.S. Nuclear Regulatory Commission, 1982.
- /TRA 04/ K. Trambauer et al.: "Weiterentwicklung des Rechenprogrammsystems ATHLET/ATHLET-CD", Abschlussbericht GRS-A 3215, 2004.
- /TRE 11/ R.R. Trewin: "One-dimensional three-field model of condensation in horizontal countercurrent flow with supercritical liquid velocity", Nuclear Engineering and Design, Vol. 241, p2470-2483.

/VAL 11/ M. Valette et al.: "Revisiting large break LOCA with the CATHARE-3 three-field model", Nuclear Engineering and Design, Vol. 241, pp. 4487-4496, 2011.

/WOL 07/ J.R. Thome, Wolverine Tube Inc, Engineering Data Book III - Chap. 12 Two-Phase Flow Patterns, 2007.

#### **Weiterführende Literatur (nicht im Text referenziert)**

/AVR 13/ M. Avramova et al.: "Comparative Analysis of CTF and Trace Thermal-Hydraulic Codes Using OECD/NRC PSBT Benchmark Void Distribution Database", Science and Technology of Nuclear Installations, 2013.

/BES 11/ D. Bestion et al.: "Status and Limits of Current Methods for Plant Analysis", 7th EURATOM Framework Programm 2008-2012, Collaborative Project NURISP, 2011.

/EMO 11/ P. Emonot: "CATHARE-3: current status and main improvements", 24th CATHARE Users' club, 2011.

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

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

Boltzmannstraße 14  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

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

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

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