

**Validierung & Verifikation
der Rechenprogramme
COCOSYS und ASTEC**

Validierung & Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC

Nils Reinke
Siegfried Arndt
Ivan Bakalov
Sebastian Band
Sara Beck
Sebastian Buchholz
Dandy Eschricht
Walter Klein-Heßling
Dimitar Iliev
Holger Nowack
Claus Spengler
Jörn Stewering
Martin Sonnenkalb

August 2019

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des BMWi (Bundesministerium für Wirtschaft und Energie) unter dem Kennzeichen RS1544 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

COCOSYS, Iod und Aerosolverhalten, Programme AC², Reaktorsicherheitsforschung Containment, Unsicherheitsanalyse: Schmelze-Beton-Wechselwirkung, Validierung: Thermohydraulik

Kurzfassung

Die GRS entwickelt für aktuelle Fragestellungen der Reaktorsicherheitsforschung im In- und Ausland eigene Analysemethoden. Die bereitgestellten Berechnungswerkzeuge der GRS decken dabei eine umfassende Bandbreite an Phänomenen und Unfallszenarien in verschiedenen Reaktoren durch ein weit gefächertes Spektrum benötigter Methoden ab. Zu diesen Methoden gehören die GRS-Rechencodes ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS für Stör- und Unfälle im Kühlkreislauf und im Sicherheitsbehälter bzw. der Gesamtanlage. Mit Realisierung der Kopplung der GRS-Codes im Gesamtsystem AC² sind umfassende, im Sinne integrale Analysen kompletter Unfallabläufe sichergestellt wie im Integralcode ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code), der in der Vergangenheit gemeinsam von IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) und GRS entwickelt wurde.

Die im vorliegenden Bericht dokumentierten Arbeiten zu COCOSYS umfassen die Validierung des in der Umstrukturierung befindlichen Moduls für Aerosol- und Spaltprodukte (AFP) insbesondere mit Blick auf die Kopplung mit der Iodchemie. Dazu werden bei Becker Technologies GmbH durchgeführte Versuche an der THAI-Anlage intensiv begleitet. Aktuelle Schwerpunkte betrafen hier z. B. die Wechselwirkung des Iods mit Stahlstrukturen bzw. Farbe auf Strukturen sowie das Abwaschen von Strukturoberflächen.

Weitere Themenpunkte bildeten die Validierung verbesserter oder neuer Modelle im Thermohydraulikmodul von COCOSYS. Dies betraf Modelle zur Wärmeübertragung zwischen Atmosphäre und Strukturen, zum Auffüllen von Zonen sowie zur H₂-Verbrennungsmodellierung. Weiterhin wurden typische Szenarien, die infolge eines postulierten Unfalls auftreten, und die damit verbundenen thermohydraulischen Phänomene (z. B. Schichtung einer Leichtgaswolke) anhand der Begleitung entsprechender THAI-Experimente zur Validierung genutzt.

Anwendungsrechnungen stellen für Simulationsprogramme aufgrund ihrer vielseitigen Wechselwirkungen eine Herausforderung dar. Für die gekoppelte ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS-Anwendung (jetzt Programmpaket AC²) am Beispiel eines DWR KONVOI wurden aufgrund von Parameterrechnungen die Ergebnisse auf Plausibilität überprüft sowie die Stabilität der numerisch-mathematischen Kopplungsmethodik getestet. Zukünftig stellt dies ein maßgebliches Kriterium bei der Anwendung von AC² auf komplexe Anlagenszenarien dar. Einen weiteren Schwerpunkt bildete die Einbindung von CoPool zur Simulation 3-dimensionaler Strömungen in großen Wasserpools in

COCOSYS bzw. ATHLET/COCOSYS und die Validierung anhand der Nachrechnung unterschiedlicher Anwendungsfälle u. a. auch für generische SWR und DWR KONVOI.

Für die Übertragung von Aussagen aus der Nachrechnung von Experimenten auf die Prognosefähigkeit der Programme bei Anlagenrechnungen wurde erstmalig eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (UaSA) für Experimente zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass die statistischen Toleranzintervalle und die Beiträge einzelner unsicherer Eingabeparameter zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse signifikant durch die Modellierung des experimentellen Artefakts von Krustenbildung an der Schmelzeoberfläche beeinflusst werden.

Ein erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS wird aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch und begleitender Analysen im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen und experimenteller Programme gezogen. Dazu zählen insbesondere Aktivitäten der OECD, wie z. B. der WGAMA – Working Group on the Analysis and Management of Accident als auch die experimentellen Programme THAI – Thermal-hydraulics, Hydrogen, Aerosols and Iodine, BIP – Behaviour of Iodine Project und STEM – Source Term Evaluation and Mitigation. Im Rahmen der Beteiligung hat die GRS erfolgreich an Auslegungs-, Voraus- und Nachrechnungen von Experimenten teilgenommen.

Die Beteiligung an Vorhaben der EURATOM, dem Forschungs- und Ausbildungsprogramm der Europäischen Atomgemeinschaft, ist ein weiteres wichtiges Instrument bei der Einbindung der GRS in die internationale Forschungslandschaft. Im Rahmen des von der GRS koordinierten Vorhabens CESAM zur Weiterentwicklung und Anwendung von ASTEC konnte die GRS insbesondere mit der Erstellung und Bereitstellung eines Datensatzes für einen generischen Siedewasserreaktor (SWR) einen wichtigen Beitrag liefern. Dadurch ist die ursprünglich auf Druckwasserreaktor-Anwendungen fokussierte Entwicklung von ASTEC auch auf SWR erweitert worden.

Zum Gesamtpaket Programmentwicklung und -validierung gehört auch die Dokumentation und die Anwenderunterstützung. Dazu werden die entsprechenden Dokumente kontinuierlich aktualisiert und vervollständigt und bei kommunizierten Problemen externer Anwender Unterstützung bei der Fehlersuche geboten. Zum Dokumentationspaket gehören das User-Manual, die Dokumentation zum Regressionstesten sowie das Handbuch zur Modellbeschreibung.

Abstract

GRS develops the program package AC² with its main programs ATHLET/ATHLET-CD and COCOSYS for the reliable computational simulation of significant phenomena occurring during normal operation, anticipated operational occurrences, design basis accidents, and severe accidents in the cooling circuit and containment, respectively, of a nuclear power plant.

The current report details the results gained within a project sponsored by the Federal Ministry of Economics and Technology (BMW_i) on further validation of the GRS code system COCOSYS (Containment Code System) and the Franco-German integral code ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code). Furthermore, CoPool, developed by the Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM), provides a 3-dimensional numerical model for the simulation of convective flow and thermal stratification in large water pools. Coupling of COCOSYS or ATHLET/COCOSYS with CoPool broadens the range of applicability of the codes.

The validation of the aerosol- and fission product module (AFP), currently under extensive restructuring, more precisely the coupling to the models for iodine chemistry marked an important development step. Key topics concerned both the iodine-steel and the iodine-paint interaction at containment walls. Furthermore, washdown of iodine and iodine-spray interaction have been assessed. This goes along with corresponding experiments performed in the THAI-facility operated by Becker Technologies (BT).

Further topics concern the validation of newly or improved models for thermal hydraulic phenomena as for example heat transfer correlations at wall-atmosphere interfaces, the complete filling-up of COCOSYS-Zones, and hydrogen deflagration modelling. In addition, characteristic phenomena occurring under typical accident conditions, have been investigated and the corresponding COCOSYS model basis has been assessed. Here, the participation to an international benchmark as part of the commissioning test of the THAI+ facility marked an important step. Already during the double-blind phase COCOSYS for predicted excellent results.

Applying COCOSYS or coupled with ATHLET/ATHLET-CD as part of AC² to real plant scenarios demands specific attention. This regards the stability of the numerical-mathematical coupling method, the correct implementation of models for heat, mass and fission product transfer as well as the correct boundary conditions for coupling the reactor

coolant circuit with the containment. The coupling of CoPool to COCOSYS, in addition, broadened the range of applicability of COCOSYS and AC² in general.

Significant benefit can be drawn from the participation to international co-operations with view to knowledge exchange in general and the development and validation of COCOSYS in particular. For the latter, activities of OECD/NEA proved to be of great value e.g. WGAMA – Working Group on the Analysis and Management of Accident, as well as experimental programs such as THAI – Thermal-hydraulics, Hydrogen, Aerosols and Iodine, BIP – Behaviour of Iodine Project und STEM – Source Term Evaluation and Mitigation. GRS successfully participated in design-, pre-, and post-calculations of experiments for iodine specific phenomena, thus assessing and qualifying the corresponding COCOSYS models.

Another field of international activities concerned projects in the European research framework (EURATOM). In the 7th framework programme, GRS participated in the CESAM (Code for Severe Accident Management) project, where GRS also took over responsibility for the coordination and the application of ASTEC for BWR reactors.

Finally, with view to the release of the entire code package, quality assurance measures must be applied. As regards documentation, the user manual, the validation and regression-testing report, the installation manual, and reference manual have to be kept up-to-date and included in the code-release package.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele	2
1.2	Stand des Wissens / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens	6
1.2.1	Containmentcode COCOSYS	6
1.2.2	Integralcode ASTEC	8
2	Validierung von COCOSYS	11
2.1	Validierung der Iod-Modellierung im neuen Hauptmodul NEWAFP.....	11
2.1.1	THAI Iod-18 zur Wechselwirkung von Iod mit Stahl	12
2.1.2	THAI Iod-21 zur Wechselwirkung von Iod mit Farboberflächen.....	20
2.1.3	THAI Iod-24 Abwaschen von Iod von Farbflächen	28
2.1.4	THAI Iod-31 Wechselwirkung Iod/Sprühen	33
2.1.5	THAI Iod-33 Raumkettenversuch	50
2.1.6	Fazit Iod-Modellierung	54
2.2	Validierung neuer oder aktualisierter thermohydraulischer Modelle	55
2.2.1	Validierung des CO1-Modells zur kombinierten Wärmeübertragung an Strukturen.....	55
2.2.2	Validierung des Modells zum Auffüllen von Zonen mit Wasser (ATM_FULL).....	64
2.2.3	Interaktion zwischen H ₂ -Verbrennungsvorgängen und Sprühstrahlen – Validierung des Entrainmentmodells.....	77
2.3	Begleitung der THAI-Versuche zur Thermohydraulik	94
2.3.1	THAI TH-27 Inbetriebsetzungsversuch	95
3	Verifizierung von COCOSYS durch Anlagenrechnungen	113
3.1	Erprobung der GRS-Rechenkette ATHLET-CD/COCOSYS.....	113
3.1.1	Simulation eines kleinen Lecks in DWR KONVOI	113
3.2	Gekoppelte ATHLET/COCOSYS-Rechnung mit CoPool.....	122
3.2.1	Rechnung für eine Anlage des Typs DWR KONVOI	122
3.2.2	Rechnung für eine Anlage des Typs SWR-72.....	132
3.2.3	Ergänzungen der CoPool/COCOSYS-Kopplung und Testrechnungen...	147

3.2.4	COCOSYS/CoPool Rechnungen für THAI TH-27	182
3.2.5	COCOSYS/CoPool-Parameterstudien für THAI TH-27	192
4	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit COCOSYS.....	215
4.1	COCOSYS Modul CCI zur Simulation der Schmelze-Beton- Wechselwirkung.....	215
4.1.1	Randbedingungen der Unsicherheitsanalysen	216
4.1.2	Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen	217
4.1.3	Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen.....	221
4.1.4	Schlussfolgerungen	227
4.2	COCOSYS AIM-Modul zum Iodverhalten in PHEBUS FPT1	228
5	Internationale Aktivitäten	237
5.1	OECD THAI-3.....	237
5.1.1	OECD THAI-3 Iod-32: Wiederfreisetzung von Iod aus siedendem Pool .	238
5.1.2	OECD THAI-3 Iod-34: Iod-Freisetzung durch Wasserstoffdeflagration...	249
5.1.3	OECD THAI-3, HD-49: H ₂ -Rekombinatorverhalten in Gegenströmung ..	256
5.1.4	OECD THAI-3, HD-Versuchsserien: H ₂ -Verbrennungsversuche	264
5.2	OECD BIP-3	305
5.3	OECD STEM-2	308
5.3.1	OECD STEM AER-Versuche	309
5.4	CESAM-Projekt im 7. Rahmenprogramm der EU.....	329
5.5	EU Projekt ALISA	332
5.5.1	Kurzbeschreibung der WAFT-Versuchsanlage	335
5.5.2	Erstellung eines COCOSYS-Datensatzes.....	338
5.5.3	COCOSYS-Rechnungen	340
5.5.4	Fazit der Arbeiten zu WAFT.....	345
5.6	Internationales Vorhaben IPRESCA	346
5.7	Veröffentlichung von Ergebnissen auf Konferenzen.....	347
6	Regressionstesten & Validierungsmatrix	349
6.1	Regressionstesten	349
6.2	Validierungsmatrix	351

7	Qualitätssicherung, User Support und Code Manuals.....	359
7.1	COCOSYS User Support.....	359
7.1.1	Probleme bei der Mittelung thermodynamischer Zustände für Iod- Compartments	359
7.1.2	Diskussion bezüglich der Wechselwirkung zwischen Iod und Sprühtröpfchen	360
7.1.3	Überprüfung des AC ² -Gesamtsystems anhand eines angenommenen Unfalls in einer Anlage vom Typ KONVOI.....	360
7.2	Qualitätssicherung und Code Manuals	378
8	Zusammenfassung	381
	Literaturverzeichnis.....	391
	Abbildungsverzeichnis.....	401
	Tabellenverzeichnis.....	423

1 Einleitung

Die GRS entwickelt für aktuelle Fragestellungen der Reaktorsicherheitsforschung im In- und Ausland eigene Analysemethoden. Die bereitgestellten Berechnungswerkzeuge der GRS decken dabei eine umfassende Bandbreite an Phänomenen und Szenarien durch ein weit gefächertes Spektrum benötigter Methoden ab. Zu diesen Methoden gehört das Programmpaket AC² mit den Programmen COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD als thermohydraulische und thermodynamische Simulationsmethoden für Stör- und Unfälle im Sicherheitsbehälter (SB), im Kühlkreislauf bzw. der Gesamtanlage. Darüber hinaus auch das Integralprogramm ASTEC, das in der Vergangenheit gemeinsam, heute allein von IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) Frankreich weiterentwickelt wird.

Ziel des Vorhabens ist die Erhöhung des Validierungsstandes von COCOSYS (**Containment Code System**) durch Überprüfung der weiterentwickelten und ertüchtigten Modelle anhand geeigneter Einzeleffekt- und Integraltests sowie durch Reaktor Anwendungen. Durch die Analyse und Bewertung der erzielten Ergebnisse kann der Gültigkeitsbereich einzelner Modelle sowie deren Zusammenwirken für ein breites Spektrum von Betriebszuständen, Transienten, Stör- und Unfällen bestimmt und ggf. erweitert werden. COCOSYS ist das detaillierte Analysewerkzeug der GRS, das auf der Basis von weitgehend mechanistischen Modellen entwickelt wird.

Durch verstärkte Bestrebungen, die Kopplung der Einzelprogramme ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS voranzutreiben und als Gesamtpaket AC² zu etablieren, sind in den zurückliegenden Jahren vermehrt gekoppelte Anwendungen durchgeführt worden. Dies betrifft zunächst die Schnittstellen zwischen ATHLET und COCOSYS hinsichtlich thermohydraulischer Phänomene, insbesondere aber auch die Kopplungsschnittstellen für die Phase der Kernaufheizung, Kernzerstörung und -verlagerung und nachfolgendem Versagen des Reaktordruckbehälters (RDB) in ATHLET-CD. In diesen Unfallphasen kommt dem Transport von Spaltprodukten, der damit verbundenen Nachzerfallsleistung, der Freisetzung von Kernschmelze und Strukturmaterialien aus dem RDB in die Reaktorgube des Containments sowie der wärmetechnischen Kopplung von Primärkreislaufstrukturen an die Containmentatmosphäre u. a. eine wesentliche, den weiteren Unfallablauf beeinflussende Bedeutung zu.

Die Funktionsfähigkeit der thermohydraulischen Kopplung der Codes war in der Vergangenheit schon weit fortgeschritten und wurde in einer Vielzahl von Anwendungen

nachgewiesen. Auch die Kopplung während der Phase der Kernzerstörung ist programmtechnisch umgesetzt. Bei Anwendungen z. B. für Analysen zum Unfall in Fukushima Dai-ichi sind aber noch verschiedene Inkonsistenzen und Programmfehler entdeckt worden. Dazu wurden basierend auf verfügbaren Datensätzen für generische Datensätze deutscher KKW weitere Analysen durchgeführt und der Modellstand bewertet.

Ein weiteres Ziel des Vorhabens war die Fortsetzung der Einbindung des vom Fraunhofer ITWM (Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik) entwickelten Programmes CoPool zur dreidimensionalen Berechnung von Wasserpools im Containment in COCOSYS. Das Pool-Modell berechnet detailliert die Konvektion und Temperaturverteilung in einer Wasservorlage /KLE 17b/. In Zusammenarbeit zwischen ITWM und GRS wurde die Anbindung an COCOSYS weiterverfolgt, eine Validierung des Gesamtsystems wurde im Rahmen dieses Vorhabens vorangetrieben und die gekoppelte Codeversion ist jetzt verlässlich anwendbar.

Im Rahmen der internationalen Zusammenarbeit ist es ein Ziel des Vorhabens, die gemeinsame Entwicklung an ASTEC (**A**ccident **S**ource **T**erm **E**valuation **C**ode) mit IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) abzuschließen. Nach Abschluss laufender gemeinsamer Projekte wird die Weiterentwicklung von ASTEC eigenverantwortlich von IRSN weitergeführt.

1.1 Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele

Aufbauend auf den mit der bisherigen Validierung und Anwendung von COCOSYS und ASTEC gemachten Erfahrungen sowie dem fortgeschrittenen Entwicklungsstand der Programme wurden in diesem Vorhaben die im Folgenden genannten Arbeitsziele verfolgt:

- **(AP 1)** Validierung von COCOSYS
- **(AP 2)** Verifizierung von COCOSYS durch Anlagenrechnungen
- **(AP 3)** Sensitivitäts- und Unsicherheits-Analysen mit COCOSYS
- **(AP 4)** Internationale Aktivitäten u. a. zu ASTEC
- **(AP 5)** Regressionstesten mit COCOSYS
- **(AP 6)** Qualitätssicherung, User Support und Code Manuals

AP 1: Validierung von COCOSYS (s. Kap. 2, S. 11)

Die Arbeiten im Rahmen dieses Arbeitspaketes (AP 1) umfassen zu einem großen Anteil Validierungsrechnungen zur Überprüfung und Absicherung neu implementierter oder erweiterter Modelle oder Module in COCOSYS. Weiterhin zählt dazu aber auch die analytische Begleitung von Versuchsprogrammen insbesondere an der THAI-Anlage zur Ableitung neuer Erkenntnisse insbesondere mit Blick auf notwendige Weiterentwicklungen.

Im Rahmen des parallel laufenden COCOSYS-Entwicklungsvorhabens ist ein zentrales Thema die mit höchster Priorität durchgeführte Neukonzeption und damit verbundene Umstrukturierung des **Spaltprodukt- und Aerosol-Moduls AFP (Aerosol & Fission Products)**. Sie stellt die konsistente Simulation der Aerosole, chemischen Verbindungen und Spaltprodukte einschließlich ihrer Wechselwirkungen sicher. Sie umfasst auch die Modellierung des Iod-Verhaltens im SB, das bisher im Programmteil **AIM (Advanced Iodine Model)** berechnet wurde. Damit soll z. B. den gestiegenen Genauigkeitsanforderungen an die Analysen zukünftig Rechnung getragen werden.

AP 2: Verifizierung von COCOSYS durch Anlagenrechnungen (Kap. 3, S. 113)

Aufgrund der Komplexität der miteinander wechselwirkenden Prozesse und Phänomene von Primärkreis und Containment und im Sinne einer vollständigen Simulationskette ist eine grundlegende Analyse der Ergebnisse von **gekoppelten ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS-Rechnungen** notwendig. Dies umso mehr, als dass in den laufenden Entwicklungsvorhaben noch Weiterentwicklungen an der Kopplung realisiert werden sollten, deren korrektes Zusammenspiel in gekoppelten Rechnungen noch validiert bzw. verifiziert werden muss. Dies betrifft insbesondere Modelle der späten Unfallphase mit Verlagerung der Schmelze innerhalb des Reaktordruckbehälters (RDB) sowie bis zum RDB-Versagen.

Die Ankopplung des in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) in der Entwicklung befindlichen mechanistischen Pool-Modells **CoPool** für die detaillierte Berechnung der Konvektion in einer Wasservorlage an COCOSYS ist im Entwicklungsvorhaben RS1508 /SPE 14/ realisiert worden. Die Kopplung wird im Vorhaben anhand eines Datensatzes für einen deutschen SWR-72 überprüft. Weiterführende Arbeiten betreffen die Verifikation innerhalb einer kompletten Anlagenrechnung sowie die Einbindung eines Beispieldatensatzes ins Regressionstesten.

AP 3: Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit COCOSYS (Kap. 4, S. 215)

Die separierte Validierung einzelner Modelle im Rahmen der Nachrechnung von Experimenten stellt aber nur den ersten, wenn auch wesentlichen und notwendigen Schritt in der Programmqualifizierung dar. Für die Übertragung von Erkenntnissen aus der Nachrechnung solcher Experimente auf die Prognosefähigkeit der Programme hinsichtlich Aussagen z. B. zum Quellterm bei Unfallanalysen sind weitere Kriterien zu erfüllen. So fordern sicherheitstechnische Fragestellungen im Rahmen von Stör- und Unfallanalysen nicht nur Analysen mit Best-Estimate-Rechenprogrammen, sondern zusätzlich **Angaben zur Aussagesicherheit** der erzielten Ergebnisse. Nur so lässt sich z. B. der Abstand zu sicherheitsrelevanten Grenzwerten quantitativ beurteilen oder die Relevanz einzelner Parameter, die bei den Analysen besonders zu beachten sind, bestimmen. **Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen** nach der GRS-Methode mit dem Programmsystem SUSA /KLO 15/ wurden in der Vergangenheit bereits für ausgewählte Experimente und Phänomene durchgeführt und stellen ein weiteres Standbein zur Qualifizierung von Rechenprogrammen dar. Sie sollen in einem ersten Themenpunkt für **lod- und Aerosolmodelle** in COCOSYS wiederholt werden, um den Fortschritt in der Modellierung in den letzten Jahren bewerten zu können. Insbesondere auch vor dem Hintergrund der AFP-Umstrukturierung müssen mögliche Modellunsicherheiten bzw. sensitive Parameter möglicherweise neu quantifiziert werden.

In einem zweiten Themenpunkt sollen derartige Analysen erstmals auch auf die Berechnung der **Schmelze-Beton-Wechselwirkung** (engl.: Molten Core Concrete Interaction, MCCI) mit CCI ausgedehnt werden, um dort verbleibende unsichere oder sensitive Modell- und Eingabeparameter zu bestimmen. Da Beobachtungen und Datenauswertungen in MCCI-Experimenten oftmals dadurch beeinträchtigt werden, dass die Grenzen der technischen Realisierbarkeit erreicht werden, verbleibt für die Interpretation der Beobachtungen ein Spielraum, der sich in beträchtlichen Modellunsicherheiten bei der Extrapolation auf Anlagenmaßstab niederschlägt. Zur Validierung von CCI sind zuletzt Experimente in der MOCKA-Anlage bei KIT herangezogen worden, bei denen erstmals Experimente mit Armierung im Beton durchgeführt werden. Die Ergebnisse der Nachrechnung zeigten noch Entwicklungsbedarf auf, der durch die Unsicherheitsanalyse weiter eingegrenzt werden soll.

AP 4: Internationale Aktivitäten (Kap. 5, S. 237)

Zielsetzung ist die Fortführung der Unterstützung des Bundes bei der Wahrnehmung internationaler Verpflichtungen durch die Beteiligung der GRS an diversen internationalen Aktivitäten, insbesondere durch die **Begleitung experimenteller Programme der OECD/NEA (THAI, BIP, STEM)**. Hier ist die aktive Mitarbeit in den Programme Review Groups (PRG) als auch den Analytical Working Groups (AWG) vorgesehen. Mit COCOSYS werden Voraus- und Nachrechnungen von Experimenten durchgeführt.

Geplant ist ferner der **Abschluss** (Fortsetzung der Beteiligung aus Vorläufervorhaben) des **EU-Vorhabens CESAM¹ zur Verbesserung der ASTEC-Modellbasis** und der Anwendbarkeit von ASTEC auf eine SWR-Referenzanlage.

Schließlich ist ein kontinuierlicher fachlicher Austausch durch die Beteiligung an internationalen Arbeitsgruppen des CSNI und an EURATOM, dem Forschungs- und Ausbildungsprogramm der Europäischen Atomgemeinschaft, angestrebt, welches das Europäische Forschungsprogramm HORIZON 2020 auf dem Gebiet der Kerntechnischen Forschung und der Ausbildung ergänzt. Die Aktivitäten werden über die Plattform NUGENIA (Nuclear Generation II & III Association) initiiert und gebündelt, um den Anforderungen und der Strategie einer effizienten europäischen Forschung gerecht zu werden.

AP 5: Regressionstesten mit COCOSYS (Kap. 6, 349)

Neue bzw. geänderte Modelle in Codes können aufgrund der gegenseitigen Wechselwirkung und der zunehmenden Komplexität der Modellentwicklung auch eine unbeabsichtigte Auswirkung auf Rechenergebnisse von nicht unmittelbar betroffenen Modellen bzw. Phänomenen haben. Generell sind nachvollziehbare und konsistente Ergebnisse beim Übergang zu neueren COCOSYS-Versionen hinreichend nachzuweisen und zu dokumentieren. Um dies sicherzustellen, werden Regressionstests regelmäßig durchgeführt. Dazu werden ausgewählte Experimente und exemplarische Anlagenrechnungen mit demselben Datensatz aber unterschiedlichen Programmversionen wiederholt nachgerechnet. Die Basis für das Regressionstesten soll hinsichtlich der neuen Modelle erweitert werden. Durch wiederholte Abarbeitung der Regressionsmatrix kann somit auch

¹ <https://cordis.europa.eu/project/rcn/108084/factsheet/en>

der Entwicklungsfortschritt nachvollziehbar dokumentiert werden. Die ausgewählten Experimente werden dazu der sehr viel umfangreicheren Validierungsmatrix entnommen. Letztere soll im Rahmen dieses Arbeitspunktes ebenfalls überarbeitet und z. B. um nicht mehr notwendige Experimente reduziert und um neue Experimente erweitert werden

AP 6: Qualitätssicherung, User Support und Code Manuals (Kap. 7, S. 359)

Zielsetzung dieses Arbeitspunktes ist zur Sicherstellung von Qualitätsstandards die zeitnahe Aktualisierung der Dokumentation von COCOSYS unter Berücksichtigung von Rückflüssen aus Entwicklung und Anwendung /GRS 18/. Rückflüsse und Anforderungen aus der Anwendung von COCOSYS werden zusätzlich auch im Rahmen von Arbeits-treffen mit einer Expertengruppe aus GRS und externen Experten inhaltlich diskutiert und bewertet. Die Expertengruppe soll analog zum Entwicklungsvorhaben RS1532 das Vorhaben begleiten. Dabei wird z. B. die Berücksichtigung neuer Experimente internationaler Versuchsreihen (s. o.), die bei Projektstart noch nicht spezifiziert sind, diskutiert. Schließlich wird durch die Organisation von Workshops der direkte Austausch der Anwender untereinander sowie die Diskussion mit dem Entwickler GRS sichergestellt.

1.2 Stand des Wissens / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens

1.2.1 Containmentcode COCOSYS

Die bisherigen Arbeiten zur Validierung und Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS für die Simulation von Transienten, Stör- und Unfällen im Sicherheitseinschluss von Leichtwasserreaktoren (LWR) und ASTEC zur integralen Simulation des Anlagenverhaltens von LWR sowie zukünftigen Reaktorgenerationen haben dazu beigetragen, dass beide Rechenprogramme eine weite Verbreitung gefunden haben und im Rahmen aktueller nationaler und internationaler Vorhaben angewendet wurden /KLE 12/, /SPE 12/. Nachfolgend werden die beiden Rechenprogramme kurz beschrieben.

COCOSYS (Abb. 1.1) ist ein detailliertes Analysewerkzeug auf der Basis von weitgehend mechanistischen Modellen für Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen im SB und den angrenzenden Gebäuden von LWR. Darüber hinaus werden auch noch zur detaillierten Simulation der Vorgänge im Reaktorkreislauf die Systemcodes ATHLET/ATHLET-CD entwickelt. Zielsetzung in COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD ist es, die Einzelphänomene bei Transienten, Stör- und Unfällen in KKW sowie deren

Wechselwirkung möglichst detailliert (d. h. mechanistisch) abzubilden. Weiterhin deckt COCOSYS gekoppelt mit ATHLET/ATHLET-CD zukünftig im Programmpaket AC² ein erweitertes Aufgabenspektrum ab. Hier sind vor allem die detaillierte Simulation des Reaktorschutzes, der Sicherheitssysteme und von Notfallmaßnahmen zu nennen und andererseits Brandanalysen in kerntechnischen Anlagen.

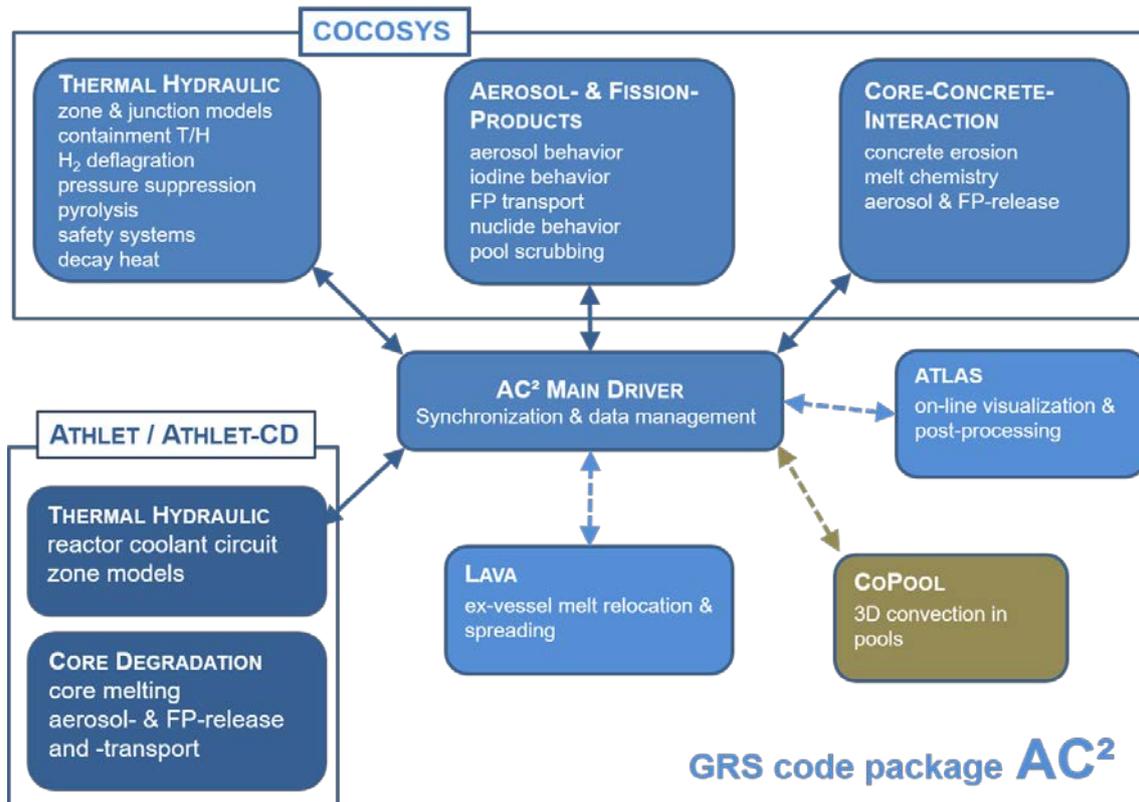


Abb. 1.1 Struktur des Programmsystems AC² mit dem Containmentprogramm COCOSYS und seinen Modulen

Schließlich wird durch die Möglichkeit der Ankopplung weiterer Rechenprogramme die gezielte Berücksichtigung besonderer Einzelphänomene und Prozesse geschaffen. Dazu zählt z. B. der vom Fraunhofer Institut ITWM entwickelte Rechencode CoPool zur dreidimensionalen Simulation von Konvektionsvorgängen und Temperaturverteilung in einer Wasservorlage /KLE 17b/.

Schwerpunkte der Validierung im Vorläufervorhaben RS1514 /KLE 16/ orientierten sich an der aktuellen COCOSYS-Entwicklung mit den quelltermrelevanten Schwerpunkten bezüglich Aerosol- und Iodverhalten sowie der Modellierung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und thermohydraulischer Phänomene z. B. infolge von Wasserstoffverbrennung oder auch -rekombination. Weiterhin spielt die Erweiterung der THAI-Anlage zu THAI+ mit zwei gekoppelten Behältern eine wesentliche Rolle. Die Durchführung von

Versuchen zur Inbetriebnahme bietet die einmalige Gelegenheit, Rechnungen ohne vorherige Kenntnis der genauen Anlageneigenschaften durchzuführen, um die Prognosefähigkeit von COCOSYS zu prüfen.

Hinsichtlich der Übertragung der an Einzeleffektexperimenten validierten Modelle auf Reaktorbedingungen hat COCOSYS für deutsche und europäische Anlagentypen vorrangig der Generation II und III (z. B. DWR Konvoi, SWR-69, SWR-72, WWER-440 und -1000) mittlerweile einen sehr guten Anwendungsstand erreicht /BAN 15/, /WOL 11/, /WOL 14/, und die Anwendung für die neue Generation III+ (z. B. EPR, AP 1000, WWER-1200, CAP 1400) ist weiter fortgeschritten. In der Entwicklung befindliche Modelle für wichtige innovative Design-Merkmale von Anlagen der Generation III+, z. B. bzgl. der Rückhaltung der Kernschmelze im RDB (AP 1000) oder im Containment (z. B. WWER 1200) oder der passiven Wärmeabfuhr aus dem Containment bedürfen noch einer Validierung /SPE 12/, /SPE 17/.

Die in zurückliegenden Projekten wie RS1190 /KLE 12/, RS1504 /REI 14/ und INT-Ost /WOL 14/ begonnenen gekoppelten Rechnungen von ATHLET/ATHLET-CD mit COCOSYS zur Simulation der Stör- oder Unfallphase vor RDB-Versagen für verschiedene Anlagen hat an Umfang und Bedeutung zugenommen. Dies zeigt sich z. B. an der Beteiligung Deutschlands am OECD/NEA-Vorhaben BSAF (**Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station**) mit gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen für die Blöcke 2 und 3 /BAN 15/. Die laufenden Arbeiten in den Vorhaben RS1505 /LUT 11/ und RS1532 /SPE 17/ konzentrieren sich auf die Komplettierung der Modelle, so dass dann auch über das RDB-Versagen hinaus gekoppelte Analysen möglich sind. Dazu werden für die späte Unfallphase die Modelle zur Verlagerung der Schmelze im RDB in ATHLET-CD sowie die Kopplung nach RDB-Versagen hinsichtlich Schmelze- und Spaltproduktaustrag in die Reaktorgrube (auch inklusive Modul LAVA) ertüchtigt und verifiziert. Sie wurden auch für die Fortsetzung der Arbeiten der GRS zur Analyse der Unfallabläufe in Fukushima im Vorhaben RS1534 benötigt /BAN 18/.

1.2.2 Integralcode ASTEC

Gemeinsam mit IRSN entwickelte die GRS bisher den Integral Code ASTEC /KLE 12/ mit den Zielsetzungen:

- Berechnung des integralen Anlagenverhaltens (Kühlkreislauf und Containment) und Ermittlung radiologischer Freisetzungen aus dem SB in die Umgebung,

- Deterministische Analysen als Basis für PSA der Stufe 2,
- Untersuchungen zu präventiven (d. h. schadensbegrenzenden) und mitigativen (d. h. schadensmildernden) Maßnahmen des Notfallschutzes,
- Begleitung und Analyse von Experimenten.

Die offiziell freigegebene Version zu Beginn des Vorhabens war ASTEC V2.0. Sie besteht im Wesentlichen aus den Modulen entsprechend Abb. 1.2. Der Anteil der GRS an der gemeinsamen Entwicklung von ASTEC war auf die Modelle für die Vorgänge im SB („ex-vessel“) fokussiert (Module CPA und MEDICIS). Ein weiterer Beitrag wurde bei den Erweiterungen für SWR im Kernbereich durch die Bereitstellung von Modellen geleistet. Derzeit konzentriert sich die ASTEC-Entwicklung auf die Erstellung der Version ASTEC V2.1; Arbeiten dazu laufen auch im EU-Vorhaben CESAM (Code for European Severe Accident Management).

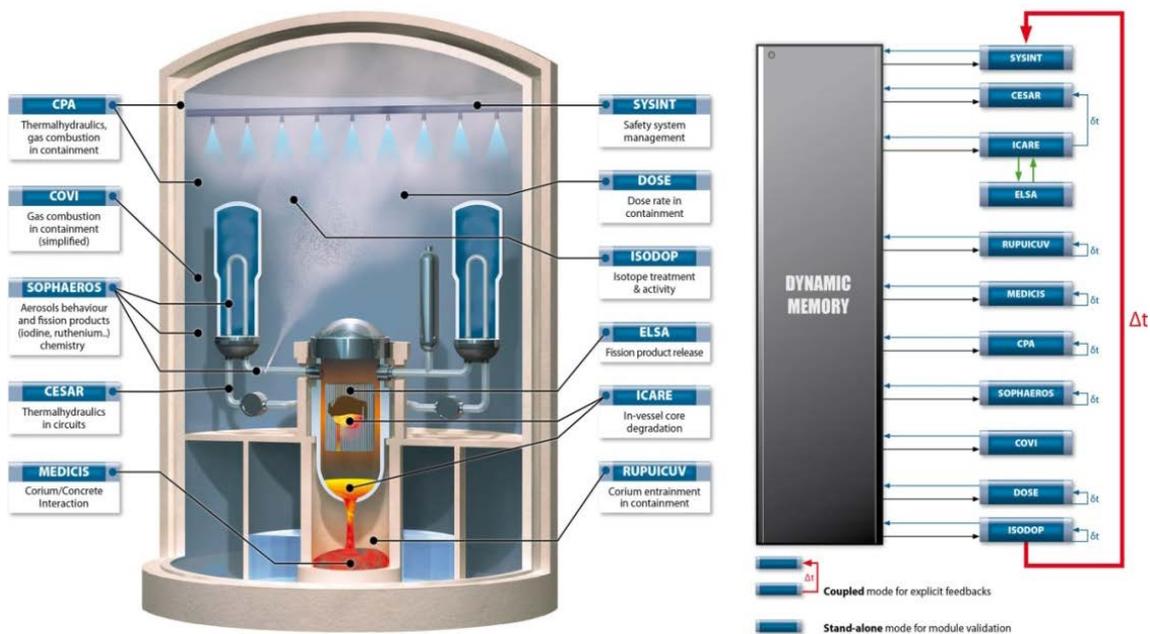


Abb. 1.2 Struktur von ASTEC V2.1

Infolge der umfangreichen Neukonzeption der Version ASTEC V2.1 gegenüber der Version V2.0 wurde der Anwendungsbereich einzelner Module deutlich erweitert bzw. verändert. Seitens IRSN sind dazu in den letzten Jahren mit hohem Aufwand die Module CESAR und ICARE umfangreich überarbeitet worden. Dazu zählt u. a. auch die Möglichkeit, die typischen Kerneinbauten von SWR (z. B. Brennelementkasten, Dampfseparator/Dampftrockner) zu simulieren. Mit der seit Ende 2014 in einer ersten beta-Version realisierten neuen Kopplung von ICARE und CESAR, bei dem CESAR über die gesamte Rechnung die Thermohydraulik in der Kernregion rechnet, sollen bisherige Probleme

beseitigt und insbesondere auch die Simulation von SWR-typischen Kernstrukturen ermöglicht werden. Außerdem wurde der Anwendungsbereich von SOPHAEROS für die Berechnung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens einschließlich der Iodchemie im Reaktorkreislauf auf die Raumzonen des Containments erweitert und somit das in CPA verfügbare Modul AFP der GRS zukünftig ersetzt. CPA berechnet zukünftig nur noch die Thermohydraulik im SB, also Prozesse und Phänomene wie z. B. Gasverteilung, Druckaufbau, Wasserstoffverbrennung, Wassertransport, Wasserstoffrekombination mit katalytischen und thermischen Rekombinatoren, Verhalten von Sicherheitssystemen und Pumpensystemen.

Zu Beginn dieses Vorhabens ist die GRS noch im Rahmen des laufenden EU-Vorhabens CESAM an Arbeiten zu ASTEC beteiligt, u. a. der Erstellung eines Referenzdatensatzes für einen SWR. Nach Abschluss des EU-Vorhabens endet die gemeinsame Entwicklung und IRSN setzt diese eigenständig fort.

2 Validierung von COCOSYS

Die Arbeiten im Rahmen dieses Arbeitspaketes (AP 1) umfassen zu einem großen Anteil Validierungsrechnungen zur Überprüfung und Absicherung neu implementierter oder erweiterter Modelle oder Module in COCOSYS. Das betrifft in erster Linie das in Umstrukturierung befindliche Hauptmodul zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten AFP (jetzt NEWAFP) einschließlich der Kopplung mit dem Iodmodell AIM. Im Weiteren wird auch die gezielte Validierung einzelner Modellerweiterungen thermohydraulische Phänomene betreffend anhand der Nachrechnung verfügbarer THAI-Experimente dokumentiert. Schließlich sollen mit der Fortführung der analytischen Begleitung des THAI-Versuchsprogramms Rückschlüsse zum Validierungsstand abgeleitet werden. Letzterer Punkt ist thematisch eng mit den Aktivitäten im Rahmen von OECD-Projekten verknüpft. Entsprechende Arbeiten sind deshalb im Kapitel 5.1 (S. 237ff.) dokumentiert.

2.1 Validierung der Iod-Modellierung im neuen Hauptmodul NEWAFP

Parallel zu der im aktuellen Entwicklungsvorhaben RS1561 (*Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC²*) im Anschluss an das Vorhaben RS1534 weitergeführten, sehr umfangreichen und noch nicht abgeschlossenen Umstrukturierung des AFP-Moduls musste die Validierung in wesentlichen Bereichen neu angestoßen werden, insbesondere zur Iod-Modellierung. Eine Überprüfung schon bestehender Modelle durch Regressionstesten reicht hier nicht aus. Die nachfolgend aufgeführten Versuche wurden teilweise auch schon mit dem „alten“ AFP-Modul gerechnet, so dass nach Implementierung der Modelle eine umfassende Analyse und Absicherung der AFP-Umstrukturierung notwendig war.

Die komplexen Versuchsrandbedingungen und die Flexibilität der Versuchsanlage THAI+ lassen Analysen zum Phasen- und Massentransfer von Iod im technischen Maßstab zu. Dies ist notwendig, weil häufig die verfügbaren Daten aus Versuchen im Labormaßstab gewonnen werden, so dass deren Übertragbarkeit auf reale Störfallbedingungen nicht sicher ist.

Zum besseren Verständnis der im Weiteren dokumentierten Analysen mit COCOSYS ist es notwendig, auf einige grundsätzliche Unterschiede der Modellierung der Wechselwirkung von Iod mit Dekontaminationsfarbe auf den Oberflächen, z. B. Wänden oder Böden in Räumen im Containment, in beiden AFP-Modulen kurz einzugehen. Generell werden Wände oder Böden im Containment als wärmeleitende Strukturen modelliert. An der

Oberfläche der Strukturen wird auch Wandkondensation berechnet. Reaktionen von Iod mit den (Farb-)Oberflächen werden zusätzlich simuliert. Im originalen AFP-Modul wird ein Wasserfilm auf der Oberfläche von Strukturen nicht separat betrachtet, sondern als Sumpfteil (Wasserpool) des zugeordneten Iod-Compartments abgebildet bzw. diesem zugeschlagen. Dabei wird die Oberfläche der Struktur (hier einer Wand) formal sowohl in der Atmosphäre als auch im Sumpf, also doppelt, abgebildet. Im neuen AFP-Modul sind solche Inkonsistenzen nicht mehr vorhanden. Hier wird der Film auf der Oberfläche einer Struktur als separates Wasservolumen abgebildet, das ganz oder teilweise die Oberfläche bedeckt. Ein Abfließen des Kondensatfilms auf der Oberfläche wird ebenfalls berücksichtigt. In diesem Wasservolumen wird die Iodchemie zusätzlich berechnet, genauso wie auch in Wasserpools in den Zonen. Die modellierten Prozesse sind in beiden AFP-Modulen daher relativ unterschiedlich.

2.1.1 THAI Iod-18 zur Wechselwirkung von Iod mit Stahl

Im Rahmen des nationalen THAI-Vorhabens (Phase III) wurden im Zeitraum 2006 bis 2008 sechs Iod-Versuche im THAI-Versuchsbehälter durchgeführt. In dem hier betrachteten Versuch THAI Iod-18 wurde die Wechselwirkung von Iod mit Stahloberflächen unter überhitzten Bedingungen untersucht. Im Vordergrund standen dabei die Wiederfreisetzbarkeit von abgelagertem Iod von der Oberfläche und der Einfluss der relativen Feuchte auf die Bildung von nicht wiederfreisetzbarem Iod („FeI₂“).

Der Versuchsaufbau ist in Abb. 2.1 dargestellt. Die zu Versuchsbeginn (Beginn der I₂-Einspeisung) vorhandene Atmosphärentemperatur ist ca. 95 °C, die Wandtemperaturen liegen zwischen 80 °C im zylindrischen Bereich und 110 °C im Deckelbereich bzw. 95 °C am Sumpfboden des THAI-Behälters. Die anfängliche Feuchte betrug ca. 12 %. Durch die Einspeisung von Dampf wurde diese stufenweise erhöht.

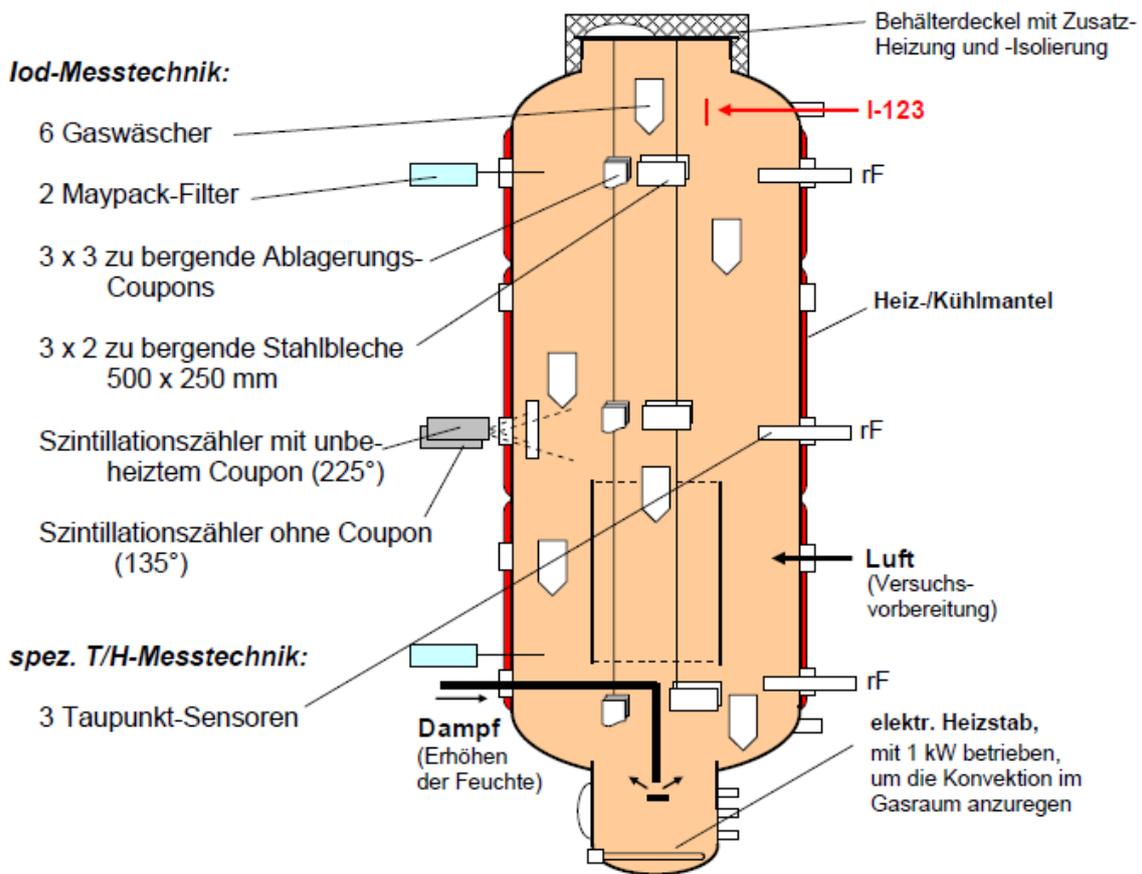


Abb. 2.1 THAI Iod-18: Versuchsaufbau und Instrumentierung

Für die COCOSYS-Rechnung wird dabei eine Einraum-Nodalisierung mit einer Wandstruktur verwendet. Der Vergleich zwischen Rechnung und Experiment bezüglich der thermohydraulischen Randbedingungen ist in den Abb. 2.2 bis Abb. 2.5 (S. 14ff.) dargestellt. Dabei wird das umstrukturierte AFP-Modul (*blaue Kurven; new-def*) mit dem ursprünglichen AFP-Modul (*rote Kurven, org-def*) verglichen.

In diesen Rechnungen wurden die Koeffizienten für die Iod/Stahl-Reaktionen so eingestellt, wie sie in /HÖH 10/ für die THAI-Anlage abgeleitet wurden (Tab. 2.1). Aufgrund der sehr einfachen Nodalisierung können die tatsächlichen unterschiedlichen Wandoberflächentemperaturen (z. B. durch die Beheizung des Deckels) nur sehr grob wiedergegeben werden. Wie in /LAN 08/ erläutert, sind einzelne Feuchtesensoren ausgefallen bzw. zeitweise ausgefallen. Diese wurden dann teilweise anhand anderer experimenteller Daten abgeschätzt. Generell zeigt sich kein Einfluss der geänderten Iodmodellierung auf die berechneten thermohydraulischen Größen.

Tab. 2.1 Koeffizienten der Iod/Stahl-Wechselwirkung

	Koeffizienten	Aktuelles Modell	Altes Modell
Physisorption an Stahl	$k(51)^2$	$1,8 \cdot 10^{-4}$ m/s	$1,8 \cdot 10^{-4}$ m/s
Resuspension von Stahl	k(63): BAS1	$1,04 \cdot 10^{-5}$ s ⁻¹	$1,04 \cdot 10^{-5}$ s ⁻¹
	k(63): EAKT1	$5,4 \cdot 10^{-4}$ J/mol	$5,4 \cdot 10^{-4}$ J/mol
Chemisorption an Stahl	k(74)	$1,3 \cdot 10^{-4}$ s ⁻¹	$1,0 \cdot 10^{-4}$ s ⁻¹
Weitere Reaktion von FeI ₂ (Oxidation / Freisetzung)	k(75)	$4,6 \cdot 10^{-6}$ s ⁻¹	0,0
“Splitting Faktor” der weiteren Reaktion (75)	C75	0,54	-
Maximale Ablagerung	FEMAX	$2 \cdot 10^{-4}$ mol/m ²	-

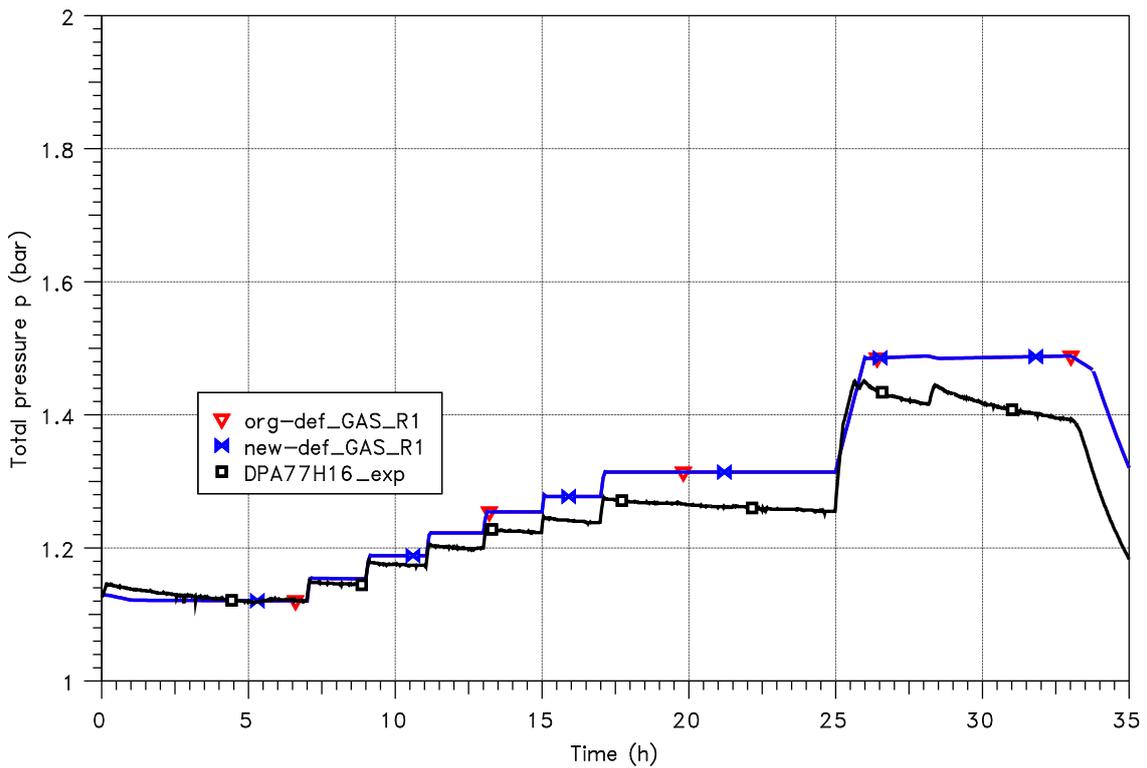


Abb. 2.2 THAI Iod-18: Vergleich des Gesamtdrucks

² Die Benennung der Koeffizienten bezieht sich auf die ursprüngliche AFP-Version

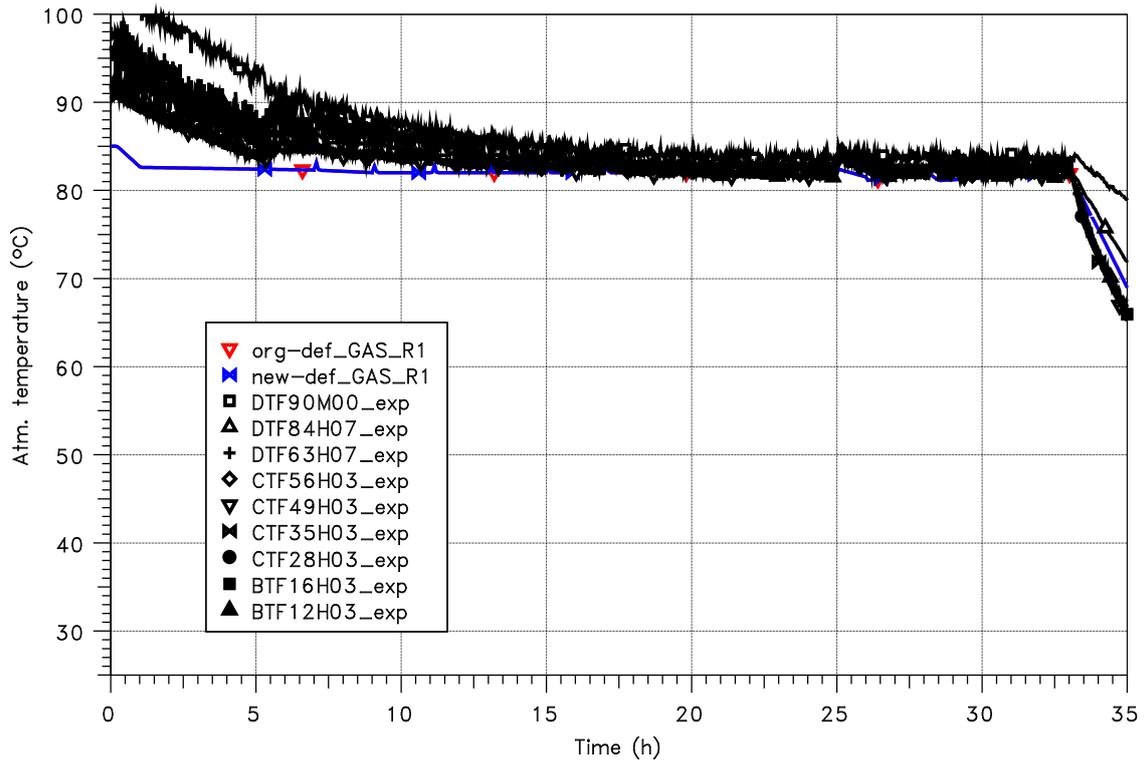


Abb. 2.3 THAI Iod-18: Vergleich der Atmosphärentemperatur

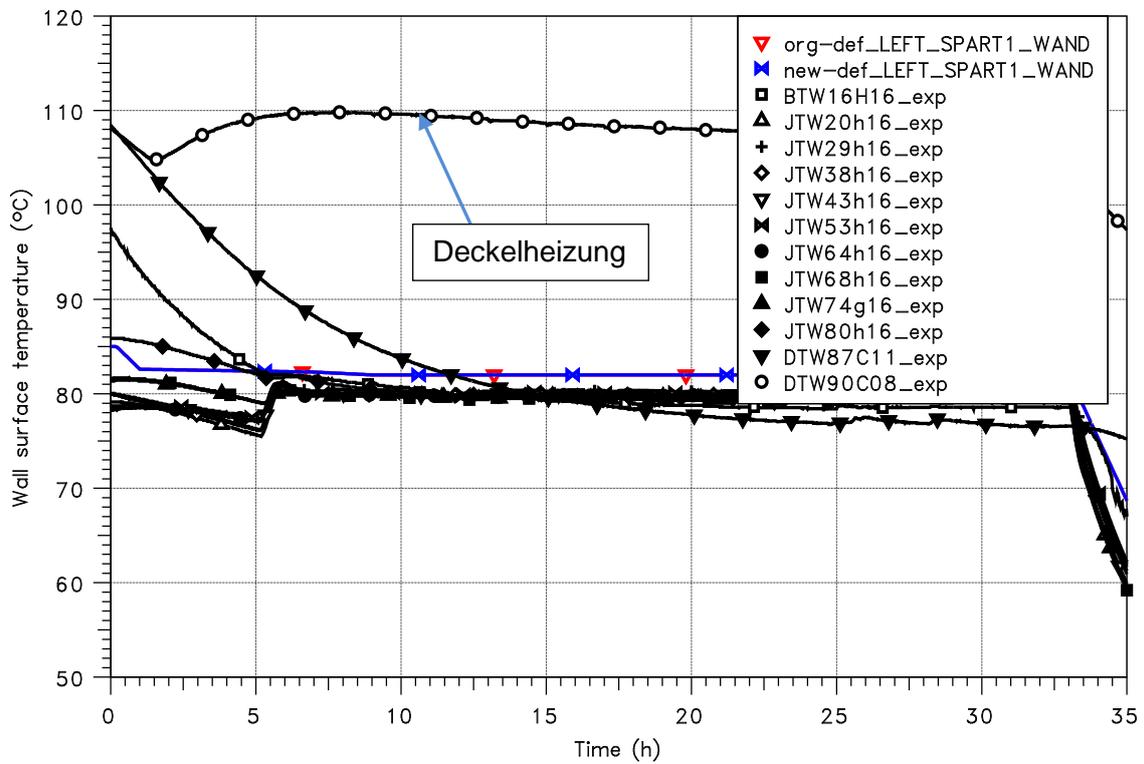


Abb. 2.4 THAI Iod-18: Vergleich der Wandtemperaturen

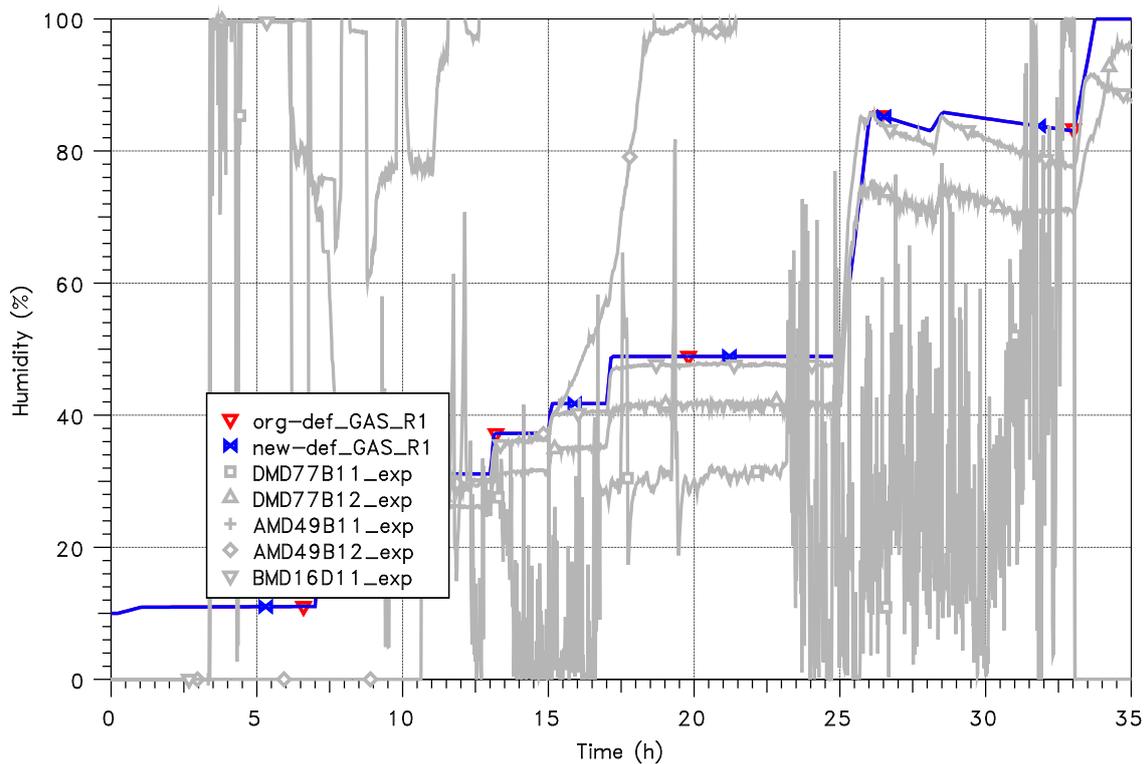


Abb. 2.5 THAI Iod-18: Vergleich der relativen Feuchten

Die folgenden Abbildungen zeigen den Verlauf der I_2 -Konzentration in der Atmosphäre, wobei in Abb. 2.6 eine logarithmische und in Abb. 2.7 eine lineare Darstellung der Konzentration gewählt wurden. Neben den beiden Rechnungen mit dem umstrukturierten AFP-Modul (*blaue Kurven; new-def*) und mit dem ursprünglichen AFP-Modul (*rote Kurven, org-def*) wurden noch zwei weitere Rechnungen hinzugefügt. Die erste Rechnung („pel“, *pinke Kurve, □*) zeigt die Rechenergebnisse, wie sie in /HÖH 10/ dargestellt wurden. In der zweiten hinzugefügten Rechnung („org“, *grüne Kurven, ◇*) wurde die Rechnung mit der COCOSYS-Version V2.4 wiederholt. Beide Rechnungen verwenden das ursprüngliche AFP-Hauptmodul. In beiden Rechnungen wurde die Bildung FeI_2 nicht begrenzt und die Bildung von nicht-löslichem „ FeI_2 _f“ (bzw. I_2 _FIXED im ursprünglichen AFP-Modul) ausgeschaltet. Da die grüne und pinke Kurve übereinstimmen, konnte die Rechnung aus /HÖH 10/ mit der COCOSYS-Version V2.4 reproduziert werden.

Der stärkere Abfall der I_2 -Gaskonzentrationen im Experiment ab ca. 26 h ist vermutlich durch eine Wandkondensation verursacht, welche in den Rechnungen nicht so deutlich reproduziert wird. In der linearen Darstellung ist zu erkennen, dass der Feuchteinfluss auf die Iod/Stahl-Ablagerung nur minimal ist.

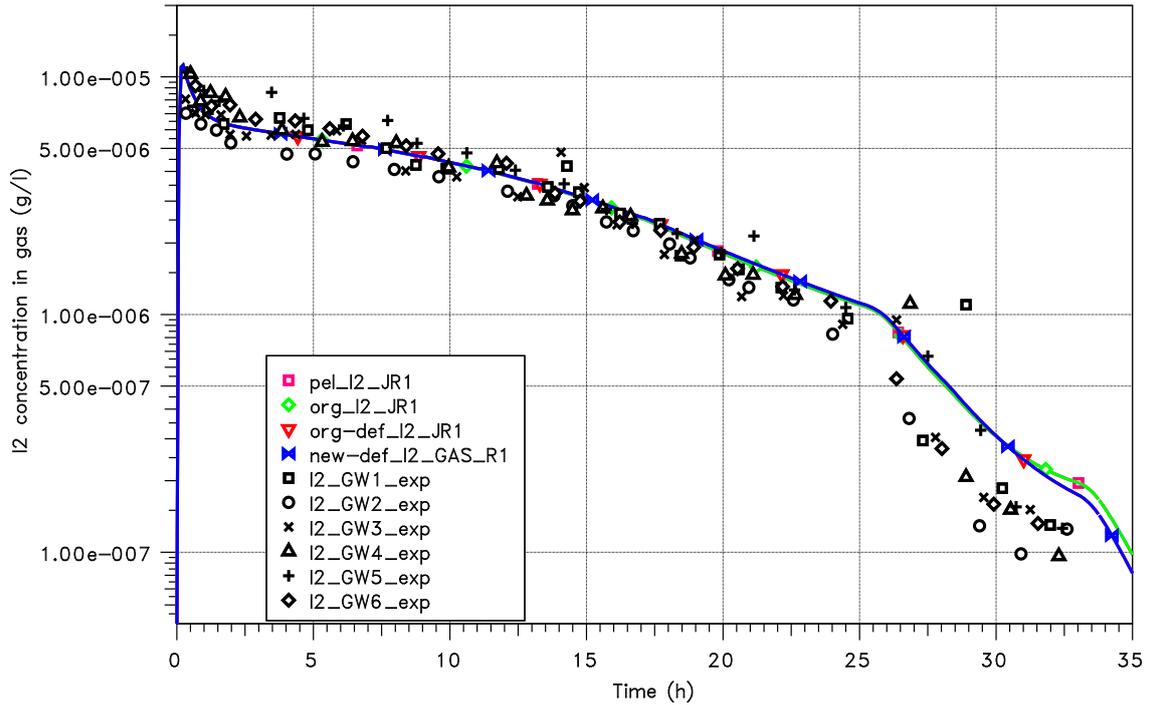


Abb. 2.6 THAI Iod-18: Vergleich der I₂-Gaskonzentrationen (log. Darstellung)

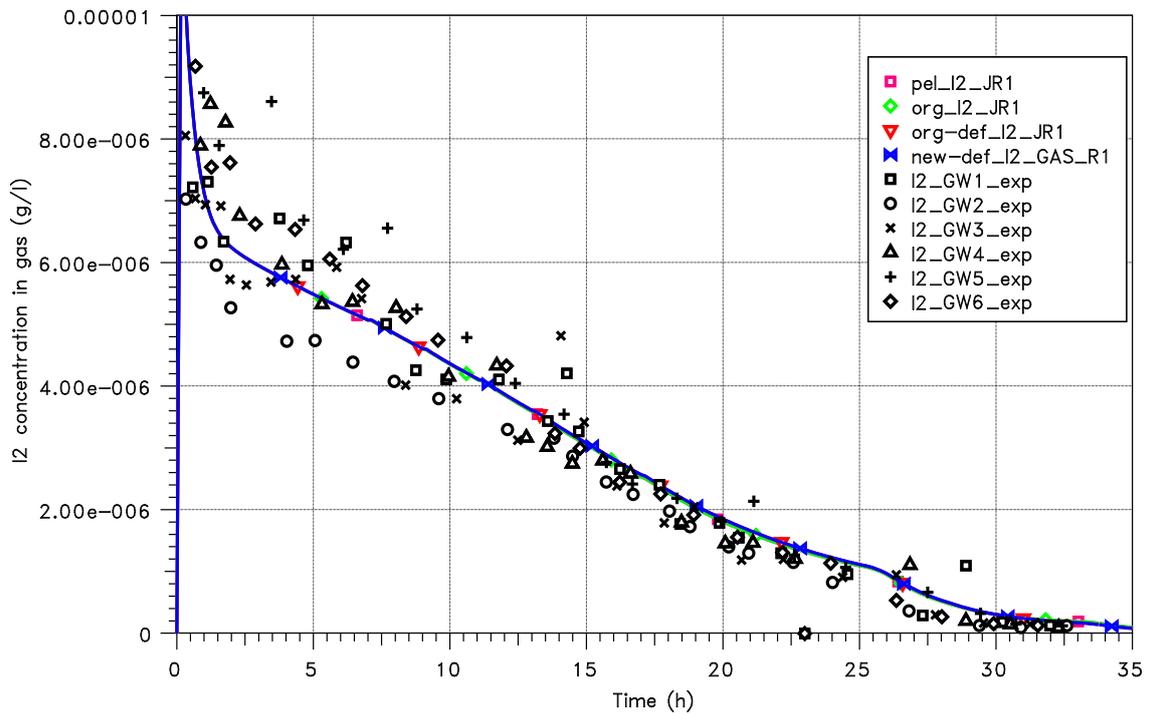


Abb. 2.7 THAI Iod-18: Vergleich I₂-Gaskonzentrationen (lineare Darstellung)

Die Abb. 2.8 zeigt den Vergleich der berechneten, abgelagerten Iod-Menge auf Stahl mit dem Experiment. Wie schon in /LAN 08/ sind die mittels Szintillationssonde gemessenen Werte deutlich höher. Die rote Linie zeigt die abgelagerten Mengen an Iod auf Stahl, welche über die Messwerte der Gaswäscher rückgerechnet wurden. Die COCOSYS-

Nachrechnungen stimmen damit überein, da auch die Iod-Gaskonzentrationen gut berechnet wurden.

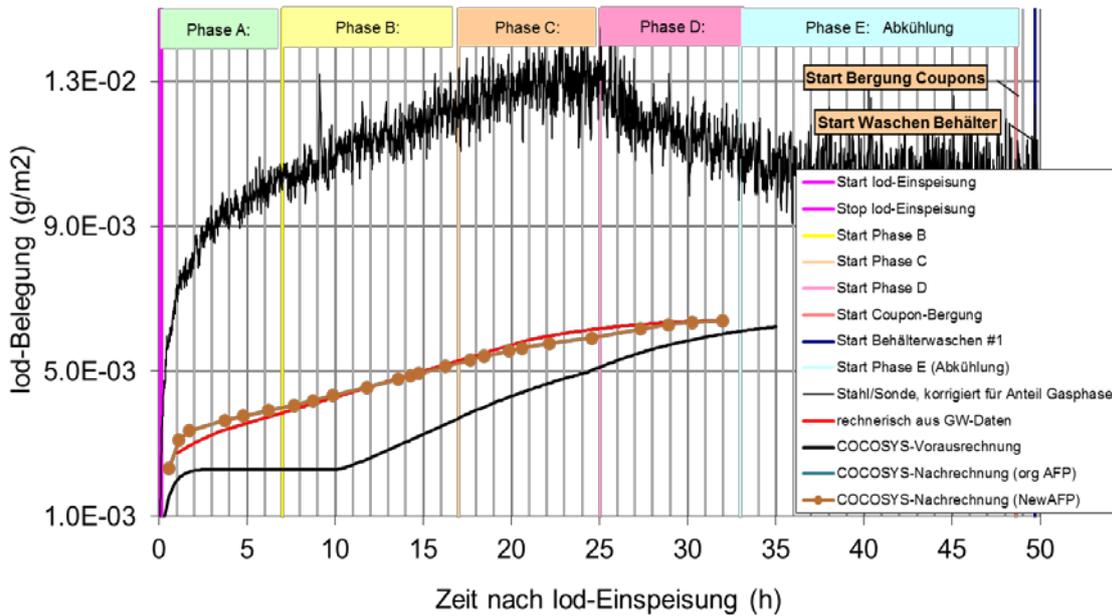


Abb. 2.8 THAI Iod-18: Vergleich der Iod-Ablagerung auf Stahl /LAN 08/

In Abb. 2.9 wird die berechnete Iod-Ablagerung mit den experimentellen Ergebnissen der großen und kleinen Stahlcoupons verglichen. Wie in /LAN 08/ beschrieben, wurden diese in unterschiedlichen Höhen (7,7 m, 4,7 m und 1,7 m) angebracht. Die kleinen Coupons mit einer Fläche 0,02 m² (160 mm x 125 mm) hatten eine unterschiedliche Historie. Es wurden neue Coupons und solche, welche bereits in den Versuchen THAI Iod-16 und -17 zum Einsatz kamen, verwendet. Die großen Coupons mit einer Fläche von $A = 0,125 \text{ m}^2$ (250 mm x 500 mm) wurden teilweise ebenfalls bereits im Versuch Iod-17 verwendet. Unabhängig von Höhenquote und der Historie der Coupons konnte kein charakteristisches Verhalten bezüglich der Flächenbeladung nachgewiesen werden /LAN 08/. Die Unterschiede sind mit bis zu einem Faktor 3 sehr groß. Allerdings liegen die Messwerte deutlich unter den „rückgerechneten“ Werten und besonders unter den mittels Szintillationssonde gemessenen Werten (vgl. Abb. 2.9, S. 19).

Interessant ist der nicht-lösliche Anteil des abgelagerten Iods (Abb. 2.10). In COCOSYS wird dieser Anteil durch Fel2_f (bzw. im alten AFP-Modul durch I2_FIXED) abgebildet. Der von COCOSYS berechnete Anteil ist um ca. einen Faktor 2 zu hoch.

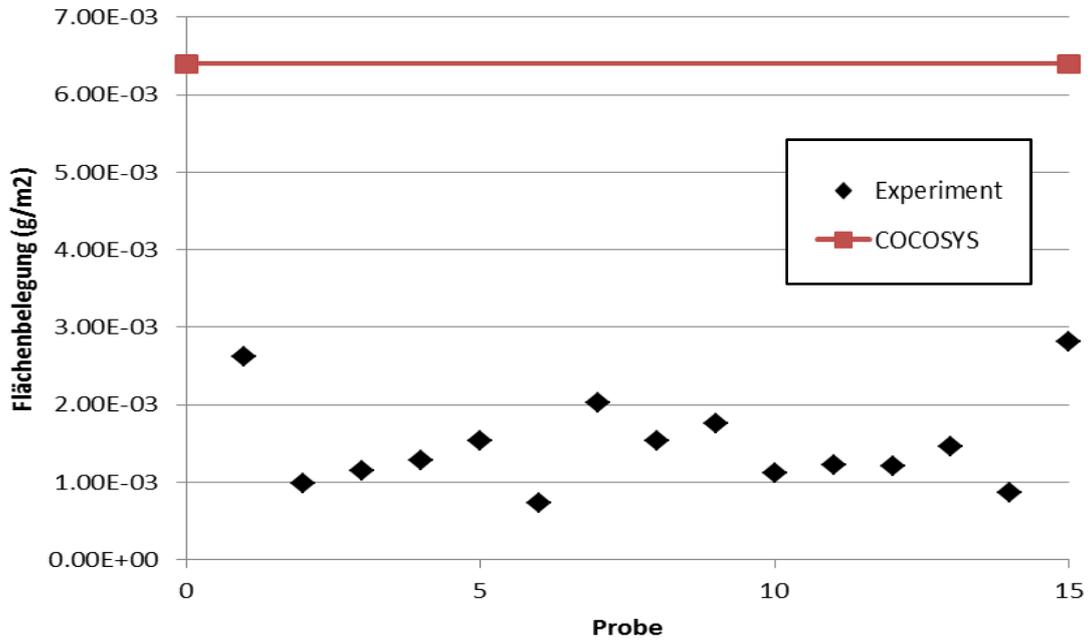


Abb. 2.9 THAI Iod-18: Gesamte Iod-Flächenbelegung (Proben 1 – 9: kleine Stahlcoupons, Proben 10 – 15: große Stahlcoupons)

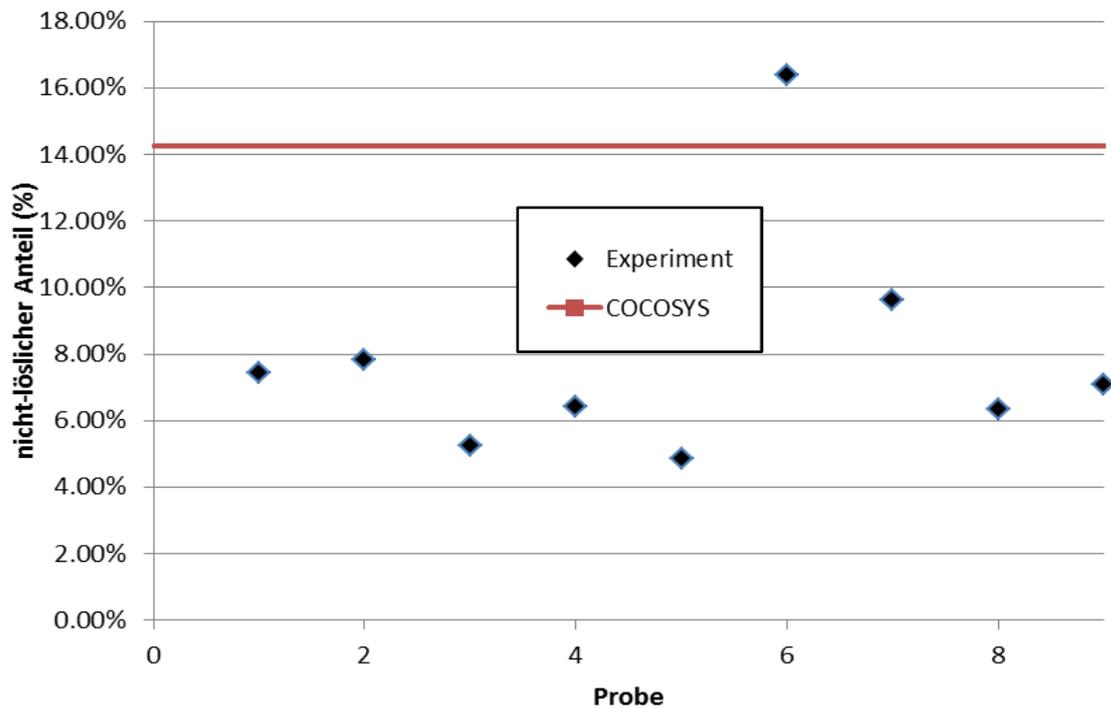


Abb. 2.10 THAI Iod-18: Vergleich des nicht-löslichen Iod-Anteils im Modell Fel2_f

Fazit – Iod/Stahl-Wechselwirkung

Die Ergebnisse zwischen umstrukturiertem und ursprünglichem AFP sind gleich, so dass bezüglich der Iod/Stahl-Wechselwirkung unter trockenen Randbedingungen die

Umstrukturierung erfolgreich durchgeführt wurde. Allein die experimentellen Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-18 sind teilweise zu hinterfragen, wie bereits in /LAN 08/ diskutiert. Zu beachten ist, dass die Nodalisierung mit nur einer Zone sehr einfach ist. Die Temperaturabhängigkeit der Iod/Stahl-Wechselwirkung wird somit nicht detailliert berücksichtigt. Diese könnte deutlich höher sein, als die Abhängigkeit von der Feuchte. Ebenso wird für die Berechnung der Reaktionskonstante, wie im ursprünglichen AFP-Modul auch, noch die Gastemperatur verwendet. Im neuen Modell ist es im Prinzip möglich, die von COCOSYS berechnete Oberflächentemperatur der jeweiligen Wandstruktur zu nehmen. Da die Konsistenzprüfung der Umstrukturierung im Vordergrund stand, wurden keine Änderungen am Datensatz vorgenommen.

2.1.2 THAI Iod-21 zur Wechselwirkung von Iod mit Farboberflächen

Zur Überprüfung des Iod-Farbe-Modells unter kondensierenden Bedingungen im neuen AFP-Modul wurde der THAI-Versuch Iod-21 wiederholt nachgerechnet /LAN 09/. Die Modellierung unter kondensierenden Randbedingungen unterscheidet sich im neuen AFP-Modul erheblich von der ursprünglichen Version, da nun auch die Iodchemie im Wasserfilm sowie der Massentransfer zwischen Atmosphäre und Film simuliert werden. Ebenso werden nun die Flächenanteile (nass, trocken) durch COCOSYS berechnet. Im ursprünglichen Modell wurden die nassen Flächen ab Beginn der erhöhten Kondensation (nach 5 h) dem Sumpfbereich des Iod-Compartments zugeordnet. Da in der ersten Phase die Farbflächen im Experiment nahezu trocken waren, ist in der Rechnung mit dem ursprünglichen AFP zur ‚Umsortierung‘ der Flächen ein Restart notwendig.

Während der ersten Versuchsphase (0 – 5 h) des THAI-Versuchs Iod-21 wurde eine geringe Dampfeinspeisung vorgenommen, wobei der Dampf nicht oder nur sporadisch auf den Farboberflächen kondensierte, sondern auch an anderen kalten Stellen im Behälter, z. B. den Zuleitungen zu den Kühlkörpern. Während der ersten 5 h fand also eine mehr oder weniger „trockene“ Iod-Ablagerung auf den Farboberflächen statt. Zu Beginn der zweiten Versuchsphase (5 – 25 h) wurde die Dampfeinspeisung erhöht und es trat Kondensation an den Farboberflächen auf.

In der Abb. 2.11 ist die Nodalisierung für diesen Versuch dargestellt. Diese ist ebenfalls vergleichsweise einfach gehalten. So wurde ein Gebläse zwischen R1 und R2 verwendet, um die richtigen I_2 -Konzentrationen über der Sumpfoberfläche zu erhalten.

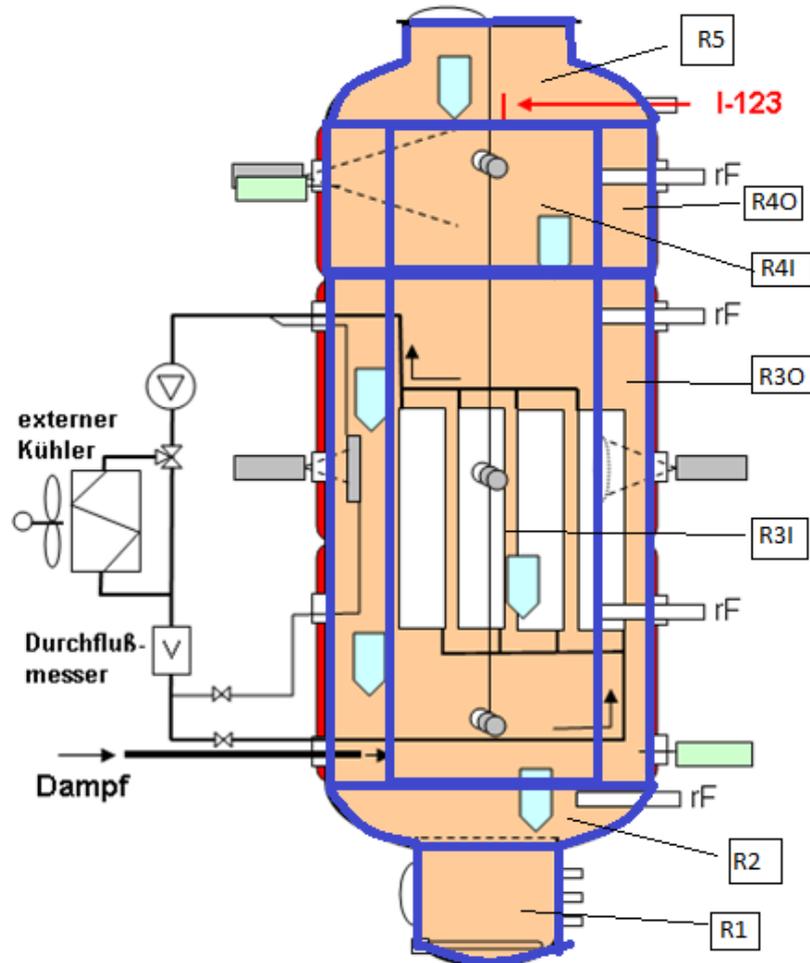


Abb. 2.11 THAI Iod-21: Anlagenschema und COCOSYS-Nodalisierung (blau)

Im Folgenden werden drei Rechnungen dargestellt und diskutiert:

- mit der originalen AFP-Version in der aktuellen COCOSYS-Version V3.0 („org“, blaue Kurven)
- einer modifizierten COCOSYS-Version V2.4beta aus dem Jahr 2011 („pel“, grüne Kurven)
- sowie der umstrukturierten AFP-Version (COCOSYS V3.0 Entwicklerversion) („new“, rote Kurven).

Die Abb. 2.12 zeigt den Vergleich der gasförmigen I_2 -Konzentration im Sumpfbereich des THAI-Behälters. Im Experiment sowie in den Rechnungen steigt die I_2 -Konzentration durch die I_2 -Einspeisung im oberen Teil des Behälters an und sinkt danach kontinuierlich ab. Die Erhöhung der Kondensationsrate (aufgrund einer stärkeren Kühlung) führt zu keiner nennenswerten Änderung in der Charakteristik des Konzentrationsabfalls. Die

Ergebnisse der aktuellen AFP-Version (blaue Kurve) sind noch ca. eine halbe Größenordnung zu niedrig, liegen aber näher an den experimentellen Werten.

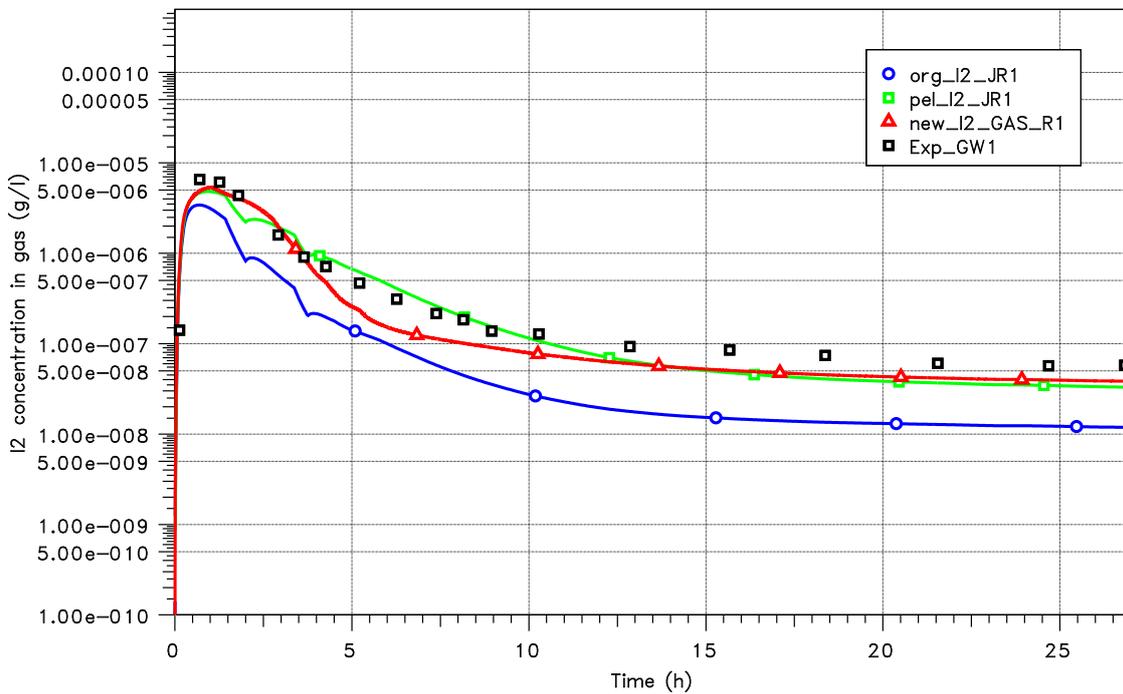


Abb. 2.12 THAI Iod-21: Vergleich der I_2 -Konzentration in der Atmosphäre von R1

In der Abb. 2.13 wird die Iod-Ablagerung an den gekühlten Farbflächen verglichen. Bei Verwendung des alten AFP-Moduls ist die „trockene“ Phase bis 5 h nicht dargestellt. Bei Verwendung des neuen AFP-Moduls tritt in dieser Phase bereits ein Einfluss zwischenzeitlicher Wandkondensation auf (siehe Abb. 2.14 und Abb. 2.15), wodurch die Ablagerung auf der Farbfläche unterschätzt wird. Hier muss der Datensatz hinsichtlich der Thermohydraulik noch verbessert werden. Im Vergleich zu der frühen AFP-Version wurde das Modell für die Bildung des chemisorbierten Iods überarbeitet. So ist in der alten Rechnung die Konzentration des physisorbierten Iods (I_2_{pel}) deutlich höher und wird bei höherer Kondensation abgewaschen. Dieses wird allerdings im Experiment nicht beobachtet. Ein ähnliches Bild zeigt sich für den nicht-gekühlten Farbcoupon im oberen Teil des THAI-Behälters. Hier wird die Konzentration im neuen AFP-Modul etwas überschätzt (Abb. 2.16).

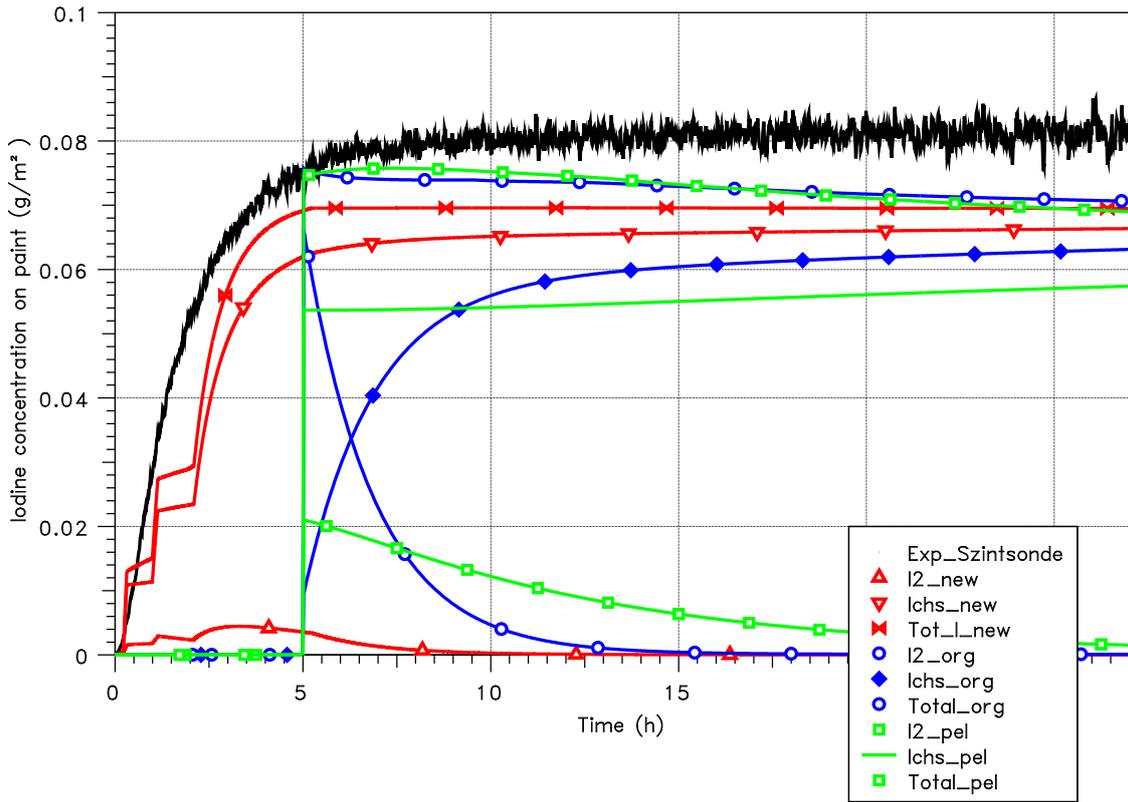


Abb. 2.13 THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung an den gekühlten Farbflächen

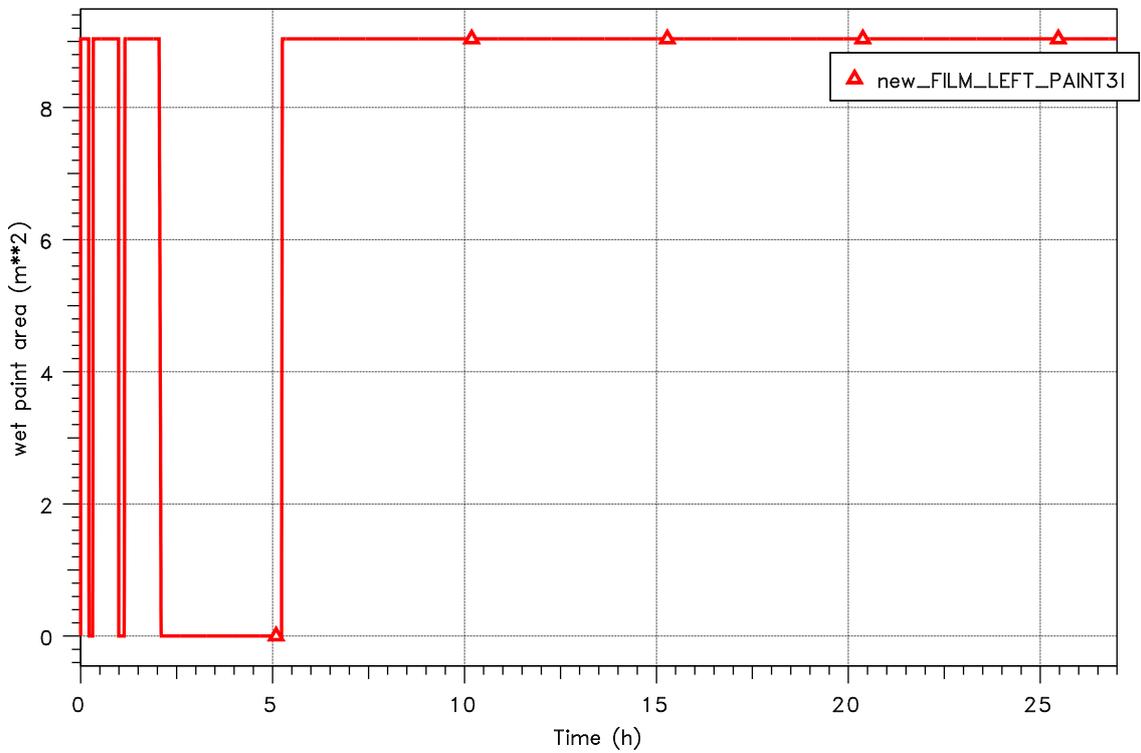


Abb. 2.14 THAI Iod-21: Darstellung der ‚nassen‘ Fläche (umstrukturiertes AFP)

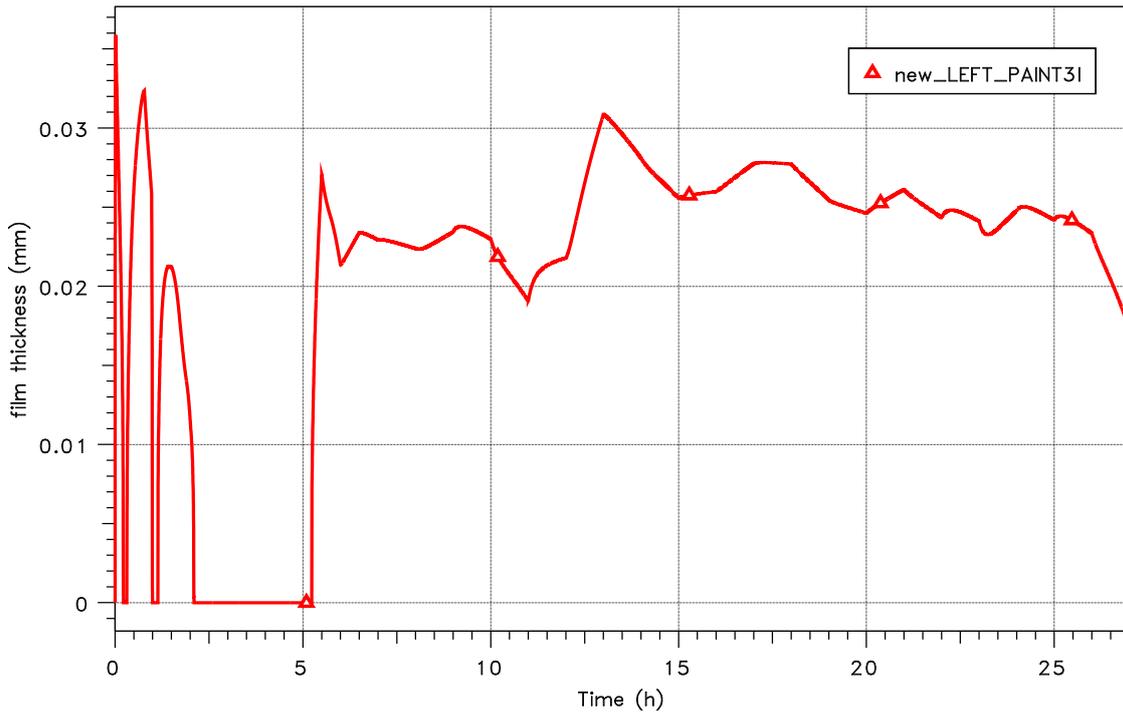


Abb. 2.15 THAI Iod-21: Darstellung der Filmdicke an den gekühlten Farbflächen (NEWAFP)

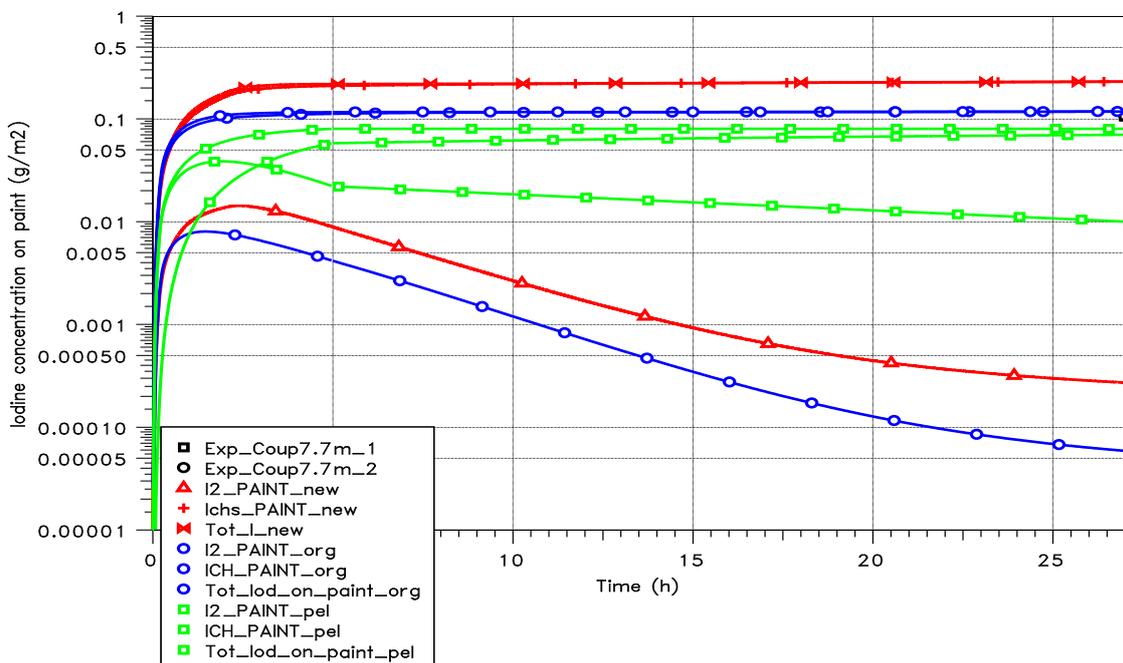


Abb. 2.16 THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung an der nicht gekühlten Farbfläche im oberen Teil des Behälters

Die Abb. 2.17 zeigt den Vergleich der Iod-Konzentration am gekühlten Stahlcoupon. Dieser Coupon wird in den alten Rechnungen nicht richtig abgebildet. In der Rechnung mit dem neuen AFP-Modul wird das Abwaschen von Iod von den Stahlcoupons mit Beginn

der Kondensation ab 5 h deutlich unterschätzt. Das Abwaschen von Iod an Stahloberflächen sollte daher weiter untersucht werden (z. B. anhand des THAI-Versuchs Iod-9).

Aufgrund des unterschätzten Abwaschens von Iod an Stahloberflächen wird auch die Iod-Konzentration im Sumpf des THAI-Behälters ab Beginn der erhöhten Kondensationsrate unterschätzt (Abb. 2.18). Da von den Farbflächen praktisch kein Iod abgewaschen wird, müssen Abwaschprozesse an Stahloberflächen der Behälter die Ursache sein.

Die Abb. 2.19 und Abb. 2.20 zeigen den integralen Vergleich der ‚alten‘ Rechnung und der Rechnung mit dem neuen AFP-Modul. Die neue Simulation zeigt zu Beginn den Einfluss der ‚lokalen‘ Kondensation an den Farbflächen sowie eine konstante Iod-Ablagerung an den Farbflächen. Ein Abwaschen von Iod von den Farbflächen ist nicht erkennbar.

Die Abb. 2.20 enthält die experimentellen Werte zu den Zeitpunkten 5 h und 27 h. Auch hier wird deutlich, dass ein Abwaschen von Iod von Stahlflächen eine mögliche Erklärung für die Abweichungen darstellt. Die experimentelle Auswertung in Abb. 2.20 zeigt einen Anstieg der integralen Iod-Masse am Ende nach 27 h, was nur ein Bilanzfehler in den Messungen sein kann.

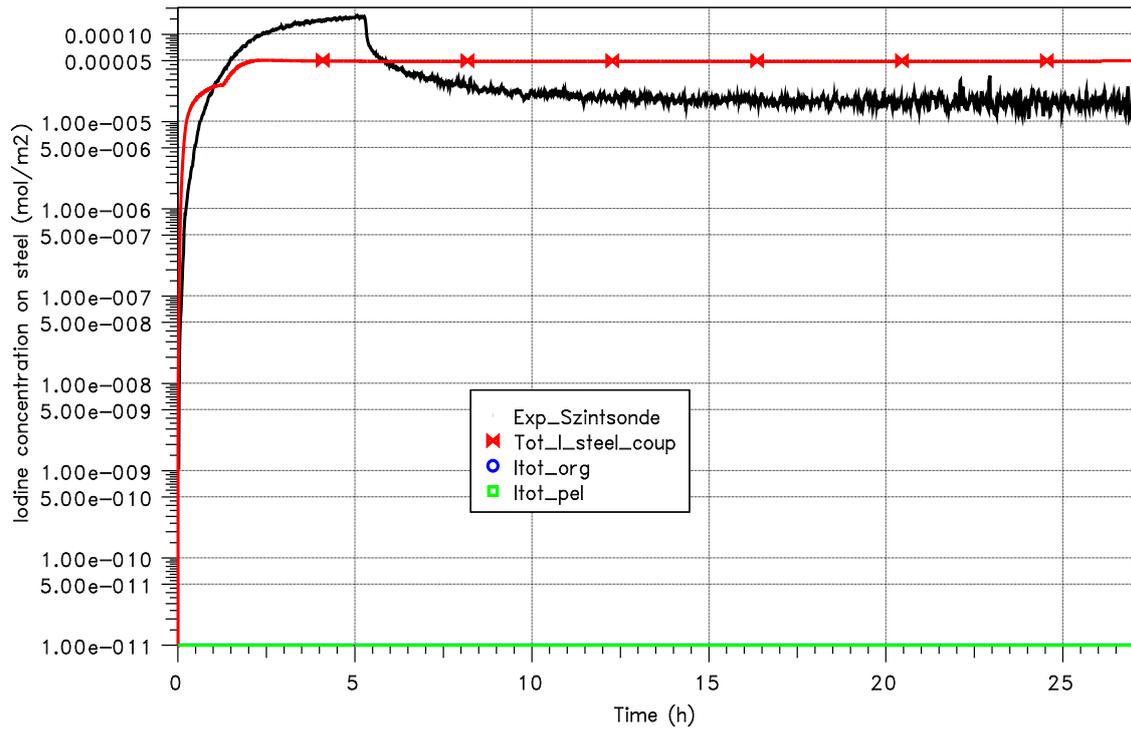


Abb. 2.17 THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung am gekühlten Stahlcoupon

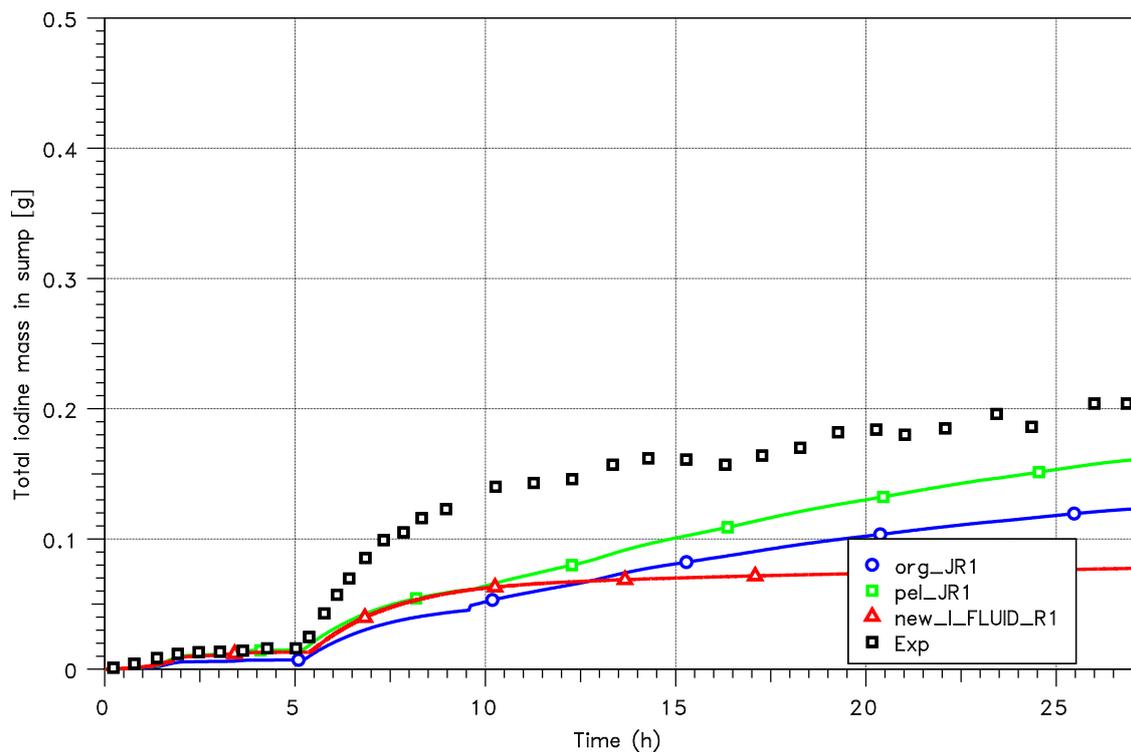


Abb. 2.18 THAI Iod-21 Vergleich der Iod-Masse im Sumpf R1

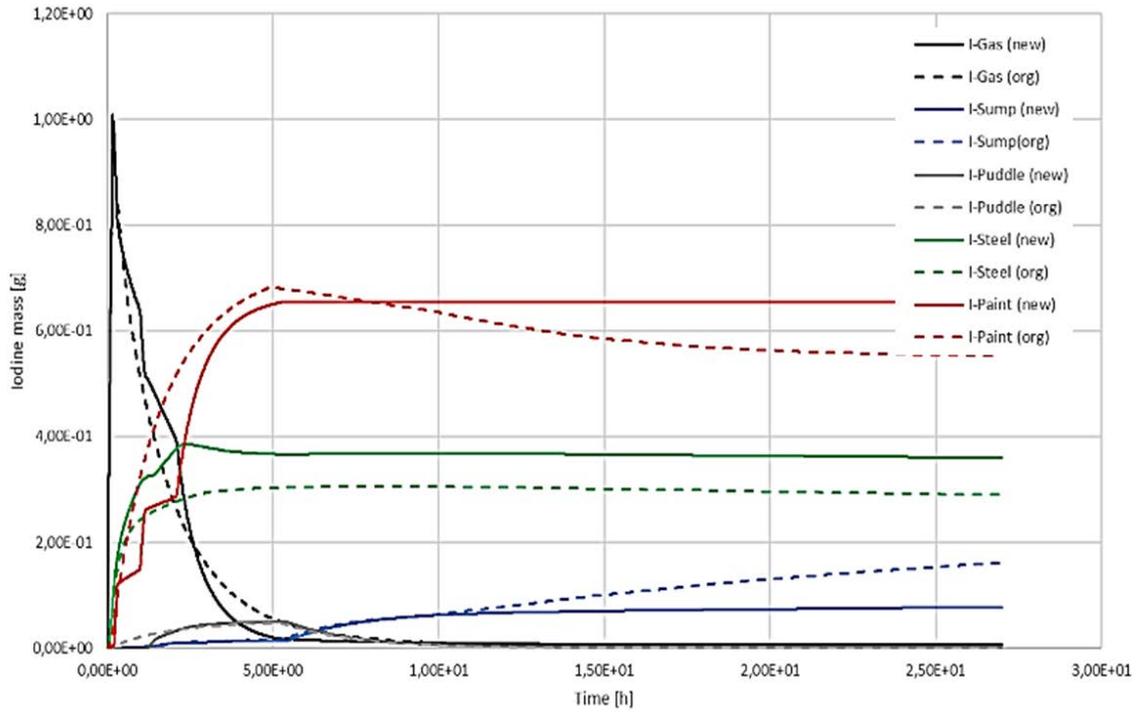


Abb. 2.19 THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Verteilung

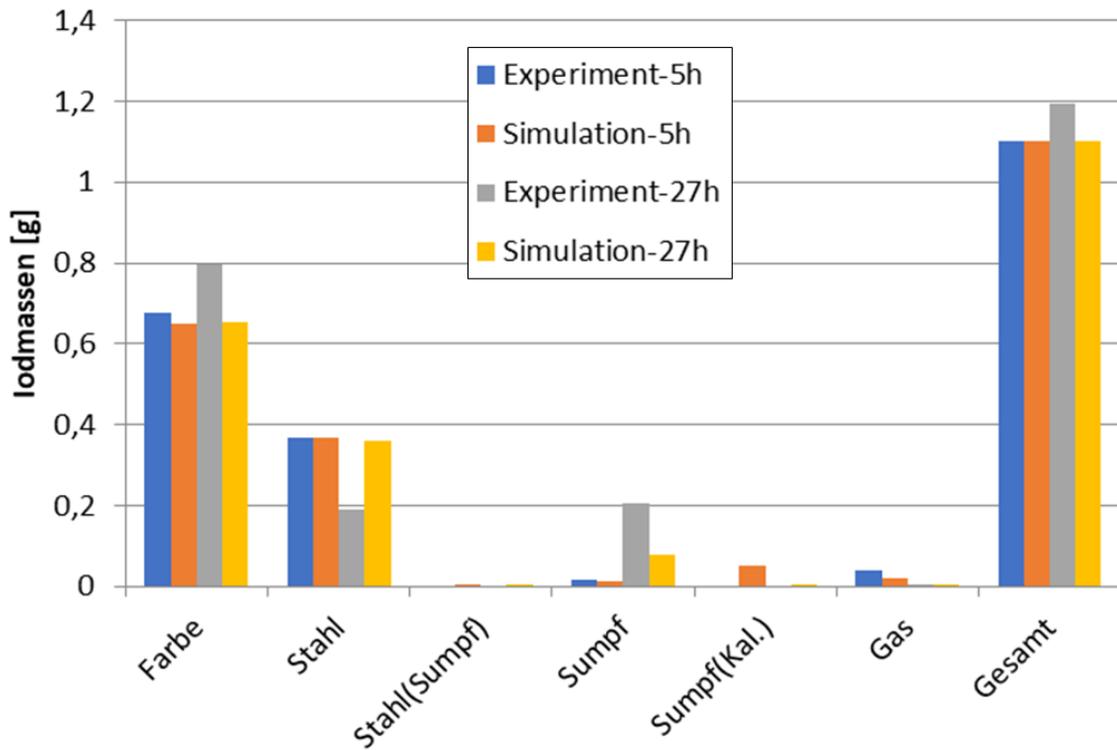


Abb. 2.20 THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Verteilung nach 5 h und 27 h

2.1.3 THAI Iod-24 Abwaschen von Iod von Farbflächen

Im THAI-Versuch Iod-24 /LAN 12/ wurden zwei mit Farbe beschichtete Kühlkörper in den THAI-Behälter eingeführt, die verschieden stark gekühlt wurden. Der permanent eingespeiste Dampf kondensierte an den beiden Oberflächen konstant über den Versuchverlauf mit einer unterschiedlichen Kondensationsrate je Farbfläche von $1,25 \text{ g/m}^2\text{s}$ bzw. $0,15 \text{ g/m}^2\text{s}$. Die Iod-Einspeisung erfolgte in den oberen Teil des Versuchsbehälters, nachdem sich stabile Kondensationsbedingungen an den Oberflächen eingestellt hatten (Abb. 2.21).

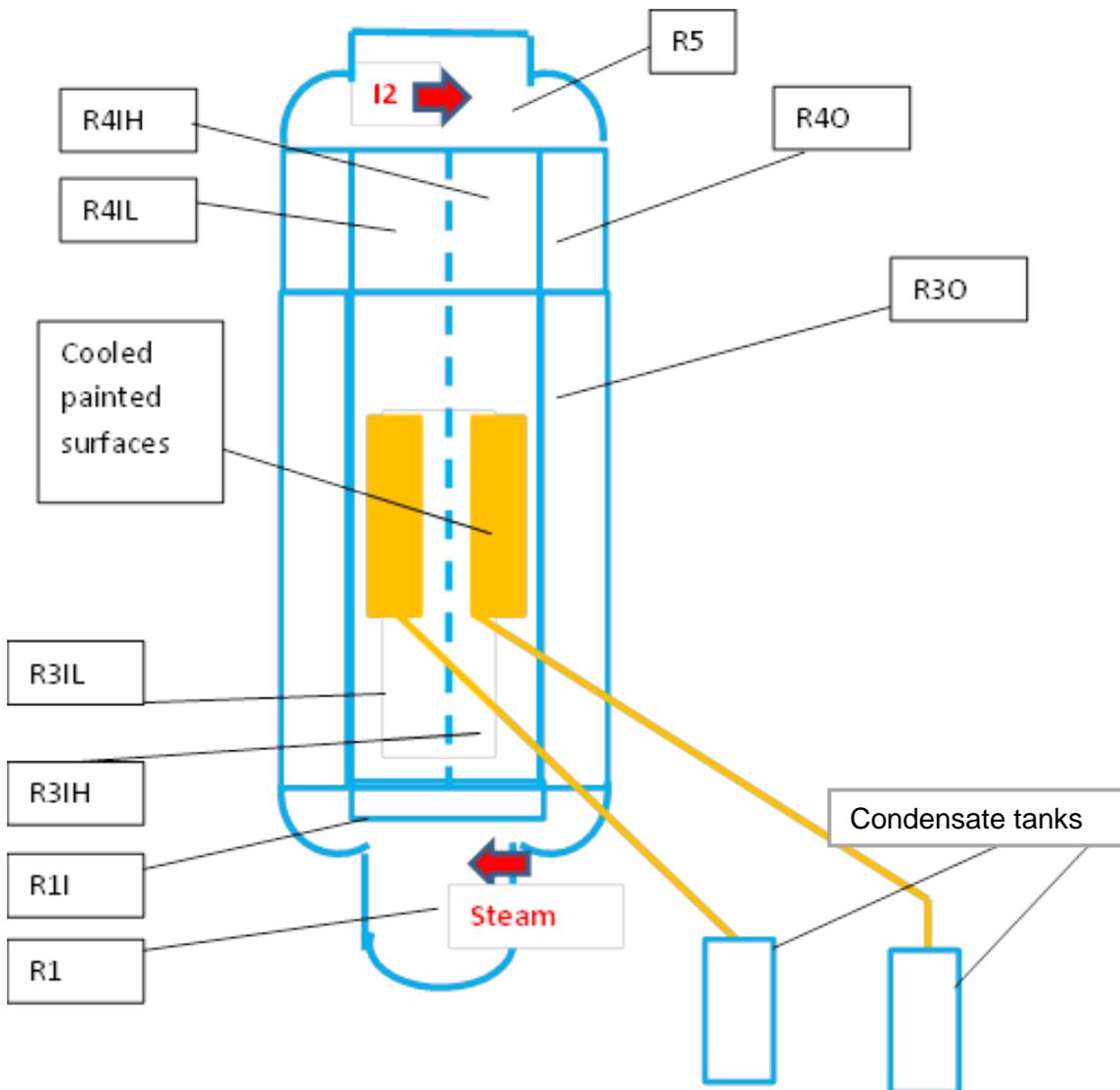


Abb. 2.21 COCOSYS-Nodalisierungsschema für THAI Iod-24

Wie für THAI Iod-21 werden drei Rechnungen dargestellt (vgl. S. 21 unten). In Abb. 2.22 wird ein Vergleich der I_2 -Konzentration im Gas im unteren Bereich des THAI-Behälters dargestellt. Die blaue Kurve zeigt im Vergleich zur grünen Kurve niedrigere

Konzentrationen, da zusätzlich eine Ablagerung von Iod an den Farbflächen berechnet wird und chemisorbiertes Iod gebildet wird. In den Ergebnissen mit der neuen AFP-Version (rote Kurven) ist der Abfall der I_2 -Konzentration jetzt deutlich zu niedrig. Der Knick im Verlauf ist durch den Übergang zu trockenen Bedingungen verursacht. Nun steht die gesamte Farbfläche für eine „trockene“ Ablagerung zur Verfügung. Da die I_2 -Konzentration im Vergleich zum Experiment noch deutlich zu hoch ist, ist der Knick auch deutlicher vorhanden.

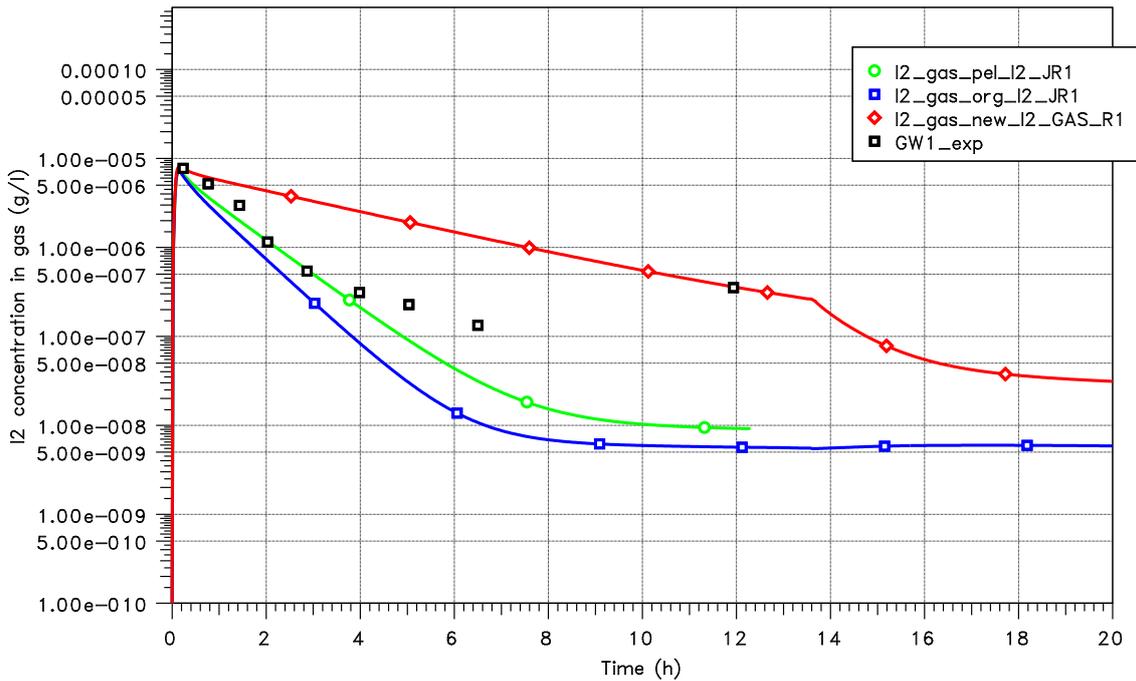


Abb. 2.22 THAI Iod-24: Vergleich der I_2 -Konzentration im Gas oberhalb des Sumpfes

Die auf den Farbflächen abgelagerte Iod-Menge ist in Abb. 2.23 für die Oberfläche mit hoher Kondensationsrate dargestellt und in Abb. 2.24 für jene mit niedrigerer Kondensationsrate. Dabei wird in den Ergebnissen mit der originalen AFP-Version (blaue Kurven) die Ablagerung auf den Farbflächen mit hoher Kondensationsrate überschätzt, und die Ablagerung auf den Farbflächen mit niedriger Kondensationsrate unterschätzt. Mit der neuen AFP-Version (rote Kurven) sind die berechneten Ablagerungen insbesondere bei hoher Kondensationsrate zu niedrig.

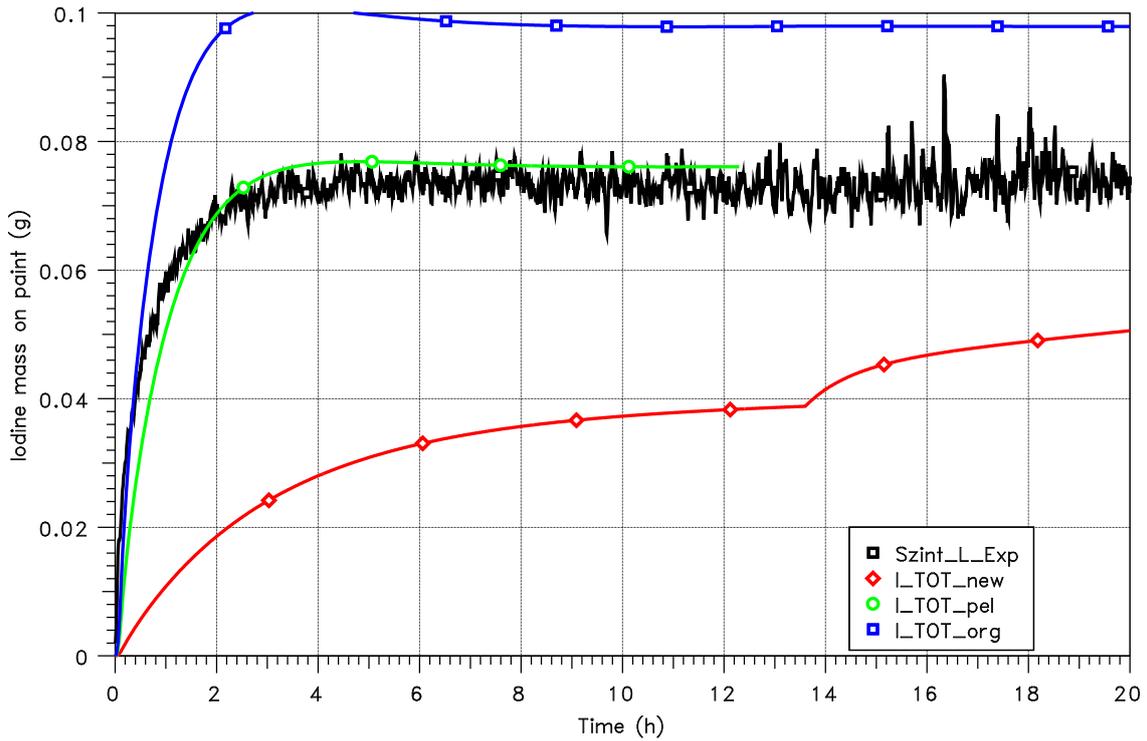


Abb. 2.23 THAI Iod-24: Vergleich der abgelagerten Iod-Menge auf der Farbfläche bei hoher Kondensationsrate (1,25 g/m²s)

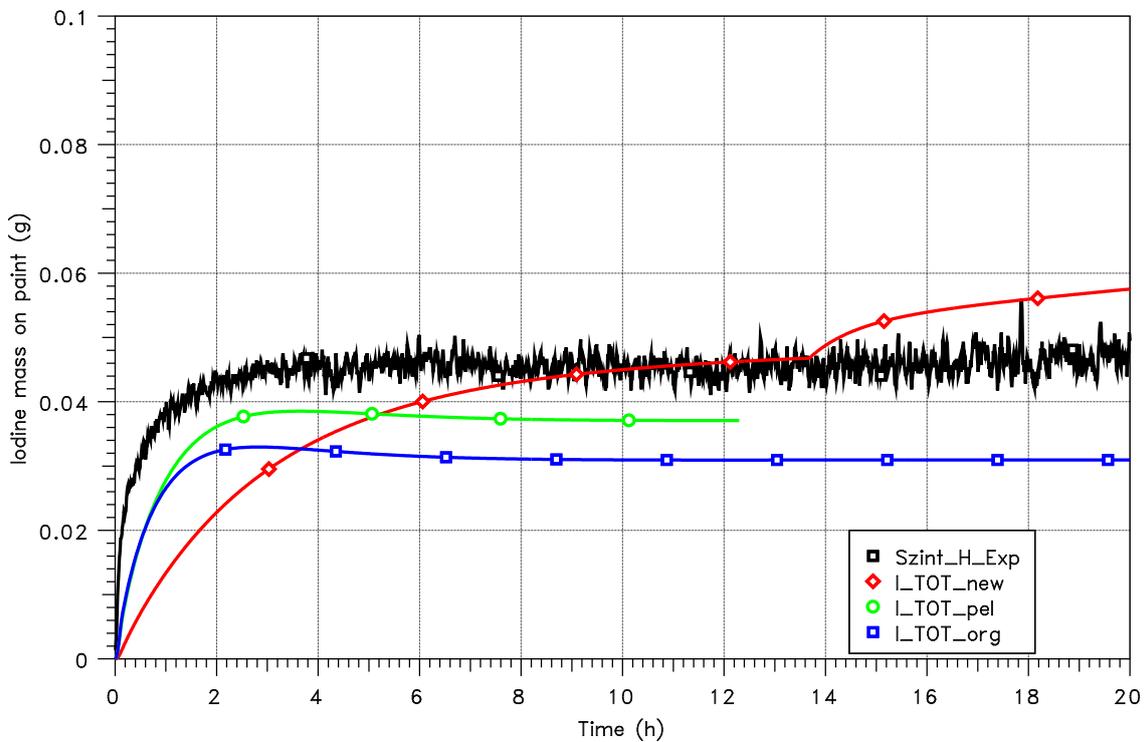


Abb. 2.24 THAI Iod-24: Vergleich der abgelagerten Iod-Menge auf der Farbfläche bei niedriger Kondensationsrate (0,15 g/m²s)

Die Abb. 2.25 und Abb. 2.26 zeigen den Vergleich des gesamten abgewaschenen Iods für beide Farbflächen. Auch hier sind die Ergebnisse mit dem neuen AFP-Modul deutlich zu niedrig, die mit dem alten AFP-Modul zu hoch. Ob dies durch die unterschätzte Ablagerung begründet ist, muss bei weiteren Tests untersucht werden.

Die Abb. 2.27 zeigt die berechnete chemische Zusammensetzung im Film (für die Fläche mit geringerer Kondensation). Hier zeigt sich, dass im originalen AFP-Modul (gestrichelte Kurven) die I⁻-Konzentration deutlich höher ist und während I⁻ im neuen Modul (durchgezogene Kurven) im Wesentlichen über die Hydrolyse erst gebildet werden muss.

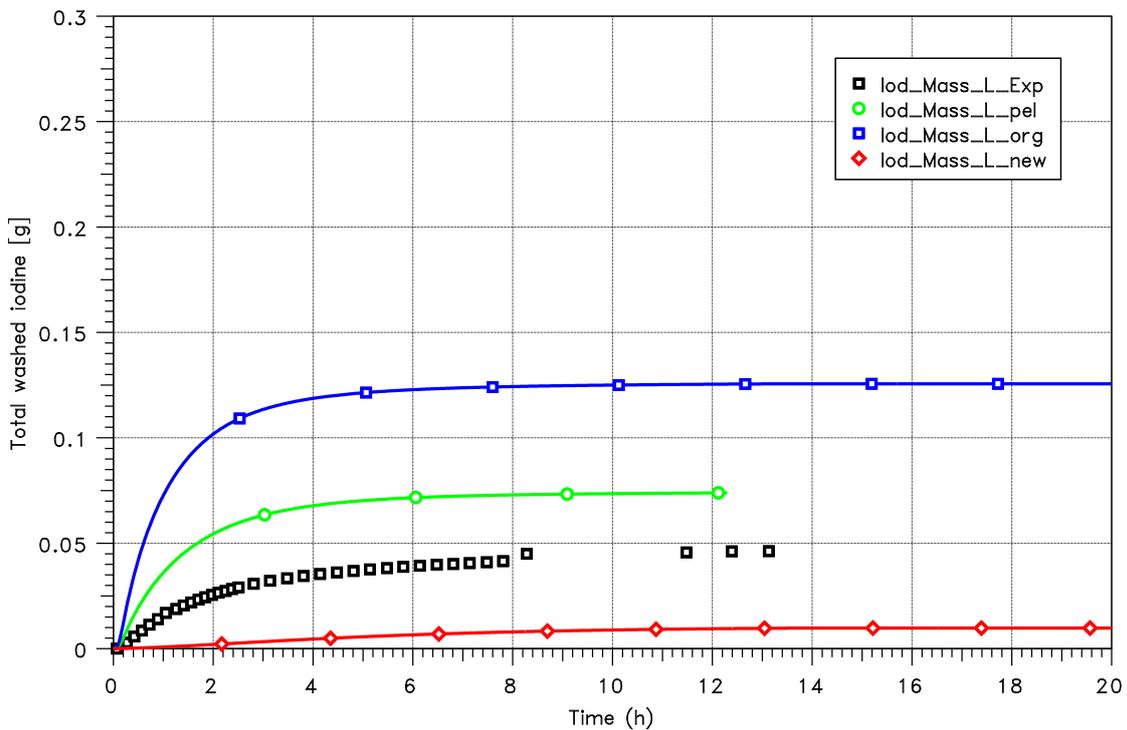


Abb. 2.25 THAI Iod-24: Vergleich der gesamten Iod-Menge in den Auffangbehältern bei hoher Kondensationsrate (1,25 g/m²s)

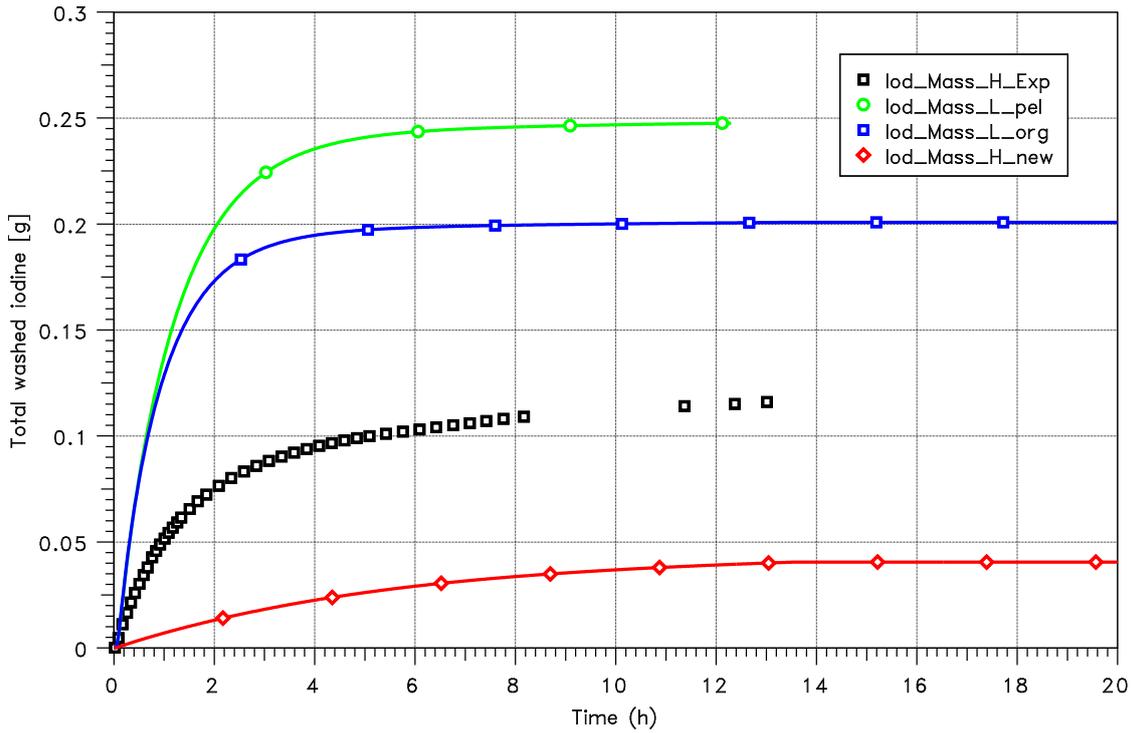


Abb. 2.26 THAI Iod-24: Vergleich der gesamten Iod-Menge in den Auffangbehältern bei hoher Kondensationsrate (0,15 g/m²s)

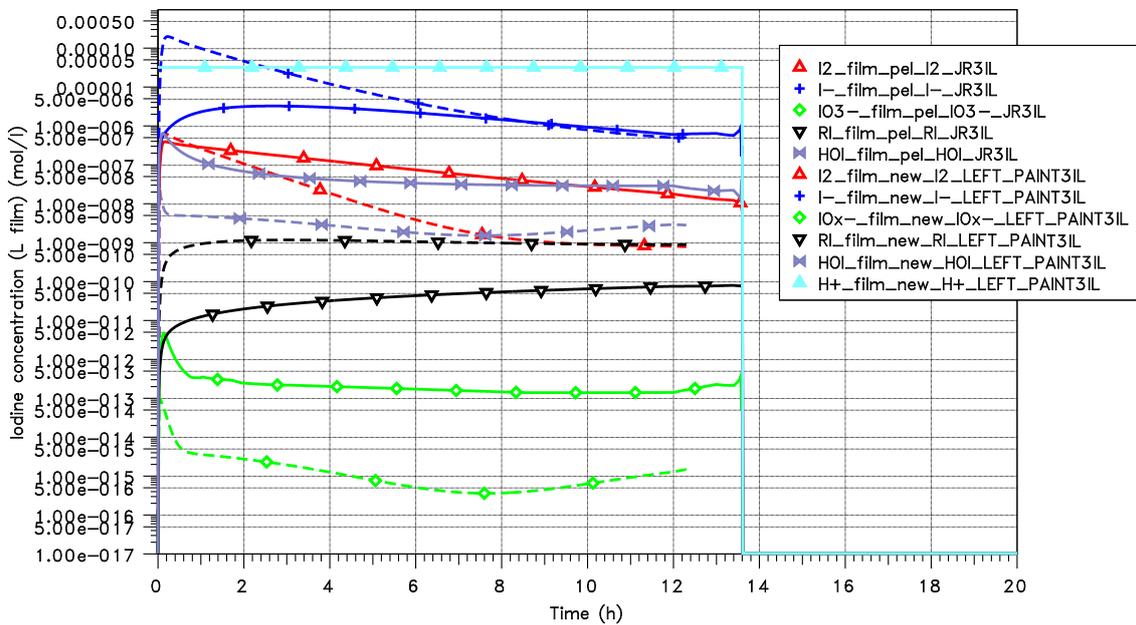


Abb. 2.27 THAI Iod-24: Vergleich der chemischen Zusammensetzung im Wasserfilm (Wand mit geringerer Kondensationsrate)

Fazit – Iod-Farbe-Wechselwirkung

Aktuell wird mit dem neuen AFP-Modul, der Abfall der Iod-Konzentration in der Gasphase unter kondensierenden Bedingungen bzw. die Ablagerung an Farbflächen deutlich unterschätzt. Dies gilt für den Eintrag von Iod in den Wasserfilm, wo der „Abbau“ von I_2 erhöht werden muss sowie auch für die Ablagerung von Iod an Farbe. Konzeptionell ist allerdings das neue AFP-Modul deutlich besser, da die Randbedingungen nun realistisch abgebildet werden können. Verbesserungen werden auch für die Berechnung der Flächenanteile (Filmbedeckung der Farbfläche) erwartet.

2.1.4 THAI Iod-31 Wechselwirkung Iod/Sprühen

Im Rahmen der Umstrukturierung von AFP ist ein neues Modell in COCOSYS eingebaut worden, das die Wechselwirkung zwischen einem Sprühsystem bzw. den Sprühtröpfchen und gasförmigem Iod simuliert. Dieses neue Modell wurde anhand des THAI-Versuches Iod-31 validiert. Die Auswertung der Ergebnisse der durchgeführten Nachrechnungen zeigen, dass mit dem neuen Modell die gasförmige Iod-Konzentration im THAI-Behälter durch das Sprühen reduziert wird und das Iod in den Tropfen in den Sumpf transportiert wird. Mit der neuen Möglichkeit, den Massentransfer für die Wasservorlage und für die Tropfen sowie für den Wasserfilm getrennt voneinander in tabellarischer Form im Input anzugeben, werden die Erkenntnisse aus vorangegangenen Versuchen umgesetzt und die Rechenergebnisse zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den Versuchsergebnissen.

Ziel des nationalen THAI-Versuches Iod-31 ist, das Auswaschen von gasförmigem molekularem Iod ($I_2(g)$) aus der Atmosphäre durch Sprühen zu untersuchen. Es wurde mit frischem Wasser und mit rezirkuliertem Wasser (Iod-beladenem Wasser) und bei zwei verschiedenen pH-Werten des Wassers gesprüht. Der Versuch wurde als erster Iod-Versuch in der neuen Anlage THAI+ (THAI Test Vessel – TTV-Behälter, Parallel Attachabel Drum – PAD-Behälter, obere und untere Verbindungsleitung) durchgeführt.

Das Iod/Sprühmodell setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Im thermohydraulischen Teil wird die Wechselwirkung der Tropfen mit der Atmosphäre gerechnet, wie das Abbremsen der Tropfen und der Wärme- und Stoffaustausch (Kondensation und Verdampfung) zwischen Tropfen und Gas. Beim Atmosphärenaustausch zwischen Sprühkegel und Umgebung (Entrainment) sind nur thermische Effekte erfasst. Der mechanische Einfluss der Tropfen auf die Gasströmung wird nicht berücksichtigt. Für die thermohydraulische

Rechnung stehen das sogenannte IVO- und das MARCH-Modell zu Verfügung /GRS 15/. Hier kommt das empfohlene IVO-Modell zum Einsatz.

Um auch die Chemie im Sprühtropfen simulieren zu können, sind umfangreiche Ergänzungen notwendig gewesen. Die Tab. 2.2 zeigt einen groben Vergleich der Eigenschaften des alten und des neuen Modells. In Bezug auf das Aerosol auswaschen durch Sprühtropfen werden die Modelle beibehalten. Die eigentliche Implementation ist allerdings etwas unterschiedlich. Im alten Modell werden Auswaschraten berechnet und diese dann bei der Transportberechnung mitberücksichtigt. Die Berechnung im neuen Modell erfolgt nach der Zeitintegration und der Transport durch das Auswaschen wird dann in den jeweiligen Bilanzbäumen berechnet. Im neuen Modell wird die Chemie im Tropfen simuliert. Ähnlich wie in der Thermohydraulik erfolgt die Integration in einer separaten Schleife nach der eigentlichen Zeitintegration. Dies ist notwendig, da die Fallzeiten der Tröpfchen relativ kurz sind. Die Implementation ist so gestaltet, dass die Module in Bezug auf die Iodchemie direkt verwendet werden können. Zur Berechnung des Massentransfers werden nun die tatsächlichen Randbedingungen des Tropfens sowie seiner Umgebung verwendet. Die I₂-Aufnahme des Tropfens ist vor allem vom I₂-Massentransfer abhängig. Zusätzlich wird berücksichtigt, dass die Sprühtropfen vollständig verdunsten können. Die (Wieder-)Freisetzung von Iod und Aerosolen erfolgt dann im entsprechenden Gasvolumen. Hier werden dann allerdings Annahmen für die Größenverteilung der Aerosole getroffen.

Tab. 2.2 Vergleich der Eigenschaften beider Aerosol-Sprühmodelle SPE 17

Eigenschaften	Altes Modell	Neues Modell
Aerosol auswaschen	<ul style="list-style-type: none"> – Berechnung der Koeffizienten E – Berechnung der Auswaschraten 	<ul style="list-style-type: none"> – Berechnung der Koeffizienten E – Berechnung des Aerosoltransports
Chemie im Tropfen		<ul style="list-style-type: none"> – Gleiche Reaktionen wie im Sumpf- bzw. Filmvolumen

Eigenschaften	Altes Modell	Neues Modell
Massentransfer von I₂ und RI (Organoid)	<ul style="list-style-type: none"> – Nur ein Iodcompartment möglich – Verwendung des Massentransferkoeffizienten für Sumpfoberfläche 	<ul style="list-style-type: none"> – Verwendung der Sprühpfade – Berechnung des Massentransfers an der Tröpfchenoberfläche mit entsprechenden Korrelationen – Zeitabhängige Vorgabe des Massentransfers vom Sprühtröpfchen und im Sumpf
Vollständige Verdunstung des Tropfens	<ul style="list-style-type: none"> – Kann nicht berücksichtigt werden (Spezies gelangen in den Sumpf) 	<ul style="list-style-type: none"> – Freisetzung aller Spezies im entsprechenden Gasvolumen (für Aerosole wird eine Größenverteilung angenommen)

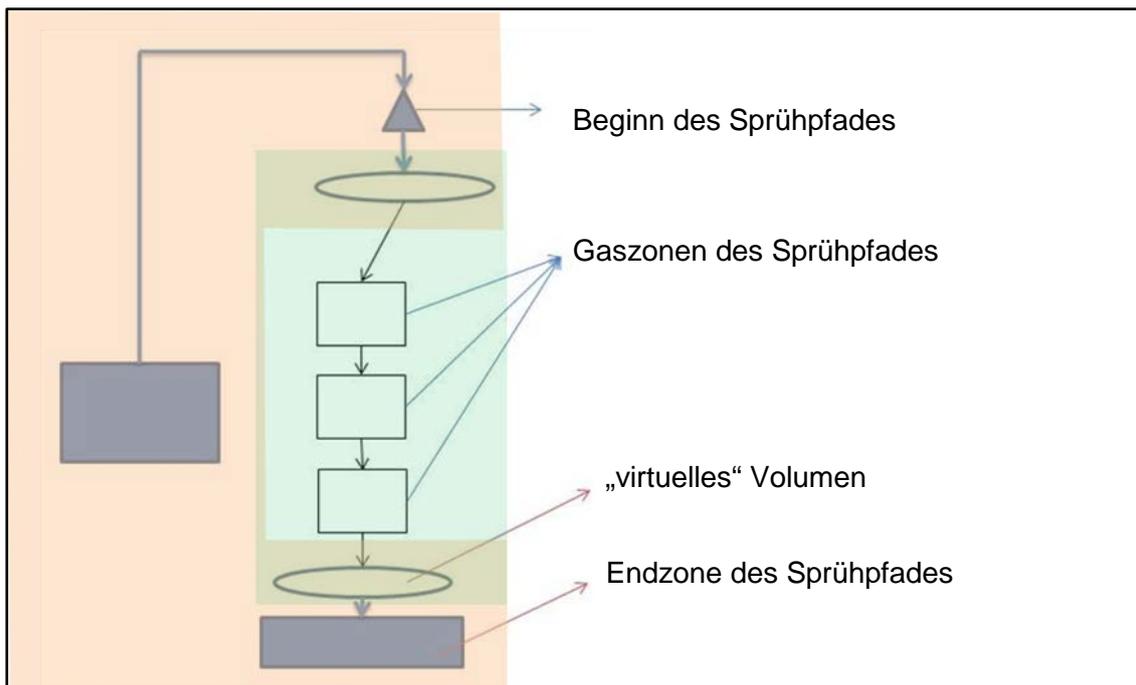


Abb. 2.28 Konzeption des Sprühmodells im NEWAFP-Modul /SPE 17/

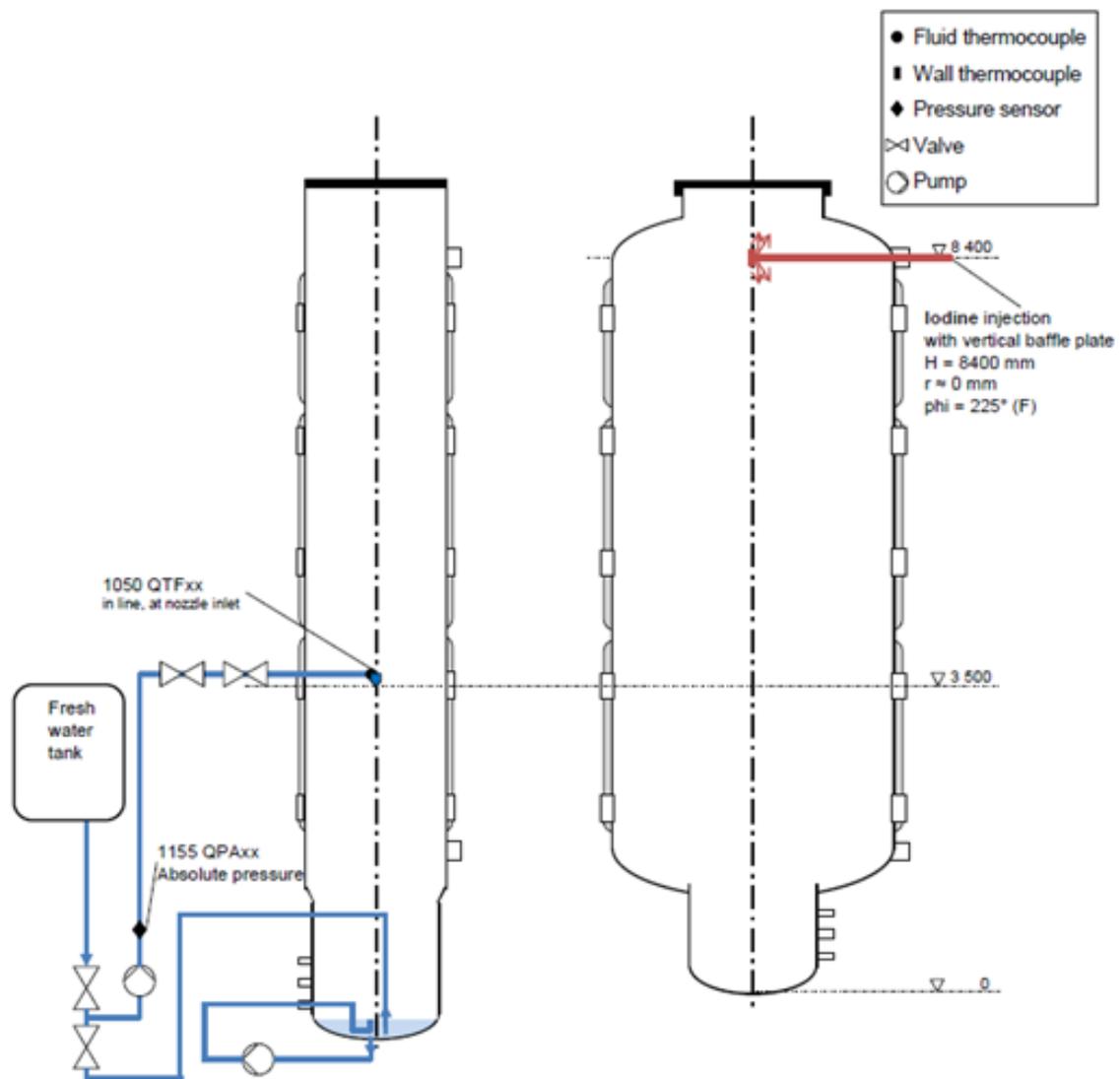


Abb. 2.29 THAI Iod-31: Testkonfiguration mit Details zum Sprühwasser-Set-up und zur Iod-Einspeisung /FUN 16/

Der Versuch Iod-31 setzt sich aus vier Versuchsphasen zusammen. In der Konditionierungsphase (Phase 0) werden TTV- und PAD-Behälter auf 90 °C aufgeheizt. Zu Beginn von Phase 1 wird das I₂ in den TTV eingespeist und danach werden die Behälter für 3 Stunden ohne zusätzliche Eingriffe in Ruhe gelassen. In Testphase 2a wird zunächst mit Frischwasser gesprüht (pH = 4,5). Diese Sprühphase beträgt 0,455 h. Das Sumpfwasser erreicht einen Füllstand von 0,825 m oberhalb des PAD-Sumpfbodens. Das korrespondierende Volumen beträgt 1116 l. In der Phase 2b wird nun mit rezirkulierendem Wasser, entnommen aus dem PAD-Sumpf (siehe Abb. 2.29), gesprüht. Der pH-Wert hat immer noch einen Wert von 4,5. Die folgenden 3 Sprühphasen in Phase 2b mit rezirkulierendem Sprühwasser betragen jeweils ~0,5 h. In der 3. Versuchsphase wird zunächst das Sumpfwasser neu konditioniert. Unter Zugabe von Natriumhydroxid (NaOH) wird der pH-

Wert alkalisiert, d. h. stufenweise von 4,5 auf 11 erhöht. Anschließend wird mit dem nächsten Intervallsprühen begonnen. Es folgen erneut 3 Sprühphasen mit rezirkulierendem Wasser, die jeweils ~0,25 h andauern.

In der Praxis werden dem Sprühwasser oft chemische Substanzen zugesetzt, die den pH-Wert (z. B. NaOH) anheben und die I₂-Aufnahmefähigkeit der Tropfen und damit den Sprüh-Effekt erheblich erhöhen. Ein hoher pH-Wert beschleunigt die Hydrolyse-Reaktion, mit der flüchtiges I₂ extrem rasch zu nicht-flüchtigem I⁻ reagiert. Sprühwasser mit hohem pH-Wert wurde unter anderem in den CSE-Sprühtest eingesetzt.

Anhand einer einfachen 4-Zonen-Nodalisierung (Abb. 2.30) wurde der Sprüheffekt untersucht und der Versuch mit verschiedenen MTC (Massentransferkoeffizienten) nachgerechnet. Die I₂/Stahl-Reaktion wurde ebenfalls berücksichtigt. Die Rechnungen bilden die Randbedingungen und Fahrweise des Versuches Iod-31 vollständig ab.

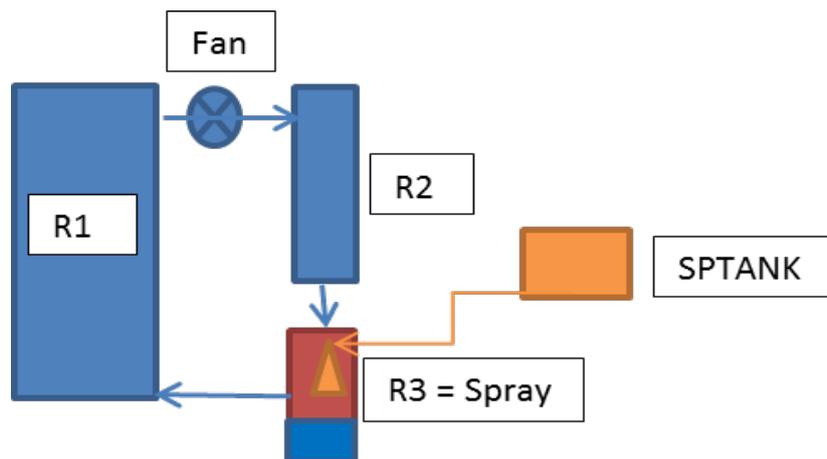


Abb. 2.30 COCOSYS-Nodalisierungsschema der THAI+ Anlage

Fahrweise für Rechnungen

0 – 0,167 h	I ₂ -Einspeisung
0 – 3 h	I ₂ -Verteilung im Behälter (Gebläse) und Einstellen des I ₂ -Gleichgewichts zwischen Gas und Stahlwand
3 – 3,455 h	1. Sprühen mit frischem Wasser ($v_D = 3$ m/s, $d_D = 0,6$ mm, $\Delta H = 3$ m, $k_G = 8,4E-3$ m/s, $k_W = 4,0E-5$ m/s)
3,883 – 4,383 h	1. Sprühen mit rezirkuliertem Sumpfwasser pH = 4,5
4,800 – 5,3 h	2. Sprühen mit rezirkuliertem Sumpfwasser pH = 4,5

Phase 2

- | | |
|-------------------|---|
| 23,283 – 23,533 h | 1. Sprühen mit rezirkuliertem Sumpfwasser pH = 11,0 |
| 24,167 – 24,417 h | 2. Sprühen mit rezirkuliertem Sumpfwasser pH = 11,0 |
| 25,333 – 25,933 h | 3. Sprühen mit rezirkuliertem Sumpfwasser pH = 11,0 |

Phase 3

Nachfolgend ist der I₂-Auswascheffekt durch die Sprühtropfen anhand einer COCOSYS-Rechnung mit NEWAFP und dem darin neu enthaltenen Iod/Sprühmodell gerechnet und mit den Versuchsdaten des Iod-31 Experiments verglichen worden. Ziel der Nachrechnung war es zu zeigen, dass das neue Modell in NEWAFP das I₂-Auswaschen aus der Atmosphäre zum einen prinzipiell abbilden kann und eine deutliche Verbesserung zum alten Modell darstellt, so dass nun das I₂-Auswaschen durch Sprühen auch realistisch berechnet werden kann.

Die Untersuchungen des I₂-Auswaschens mit dem neuen Sprühmodell sind auch ein Bestandteil des BMWi-Vorhabens AMICO von Framatome. In den nachfolgend beschriebenen Berechnungen wurde darauf geachtet, dass die thermohydraulischen Randbedingungen möglichst genau getroffen werden, ohne diese genau an die experimentellen Daten anzupassen. Deshalb gibt es Abweichungen in Druck- und Temperaturverlauf, die aber keinen gravierenden Einfluss auf die Iodchemie und damit auch auf das Iod-Auswaschen haben.

In Abb. 2.31 bis Abb. 2.35 sind sowohl die Druckverläufe in PAD- und TTV-Behälter sowie die Temperaturen in der PAD-Atmosphäre (R3 und R2), als auch die Wassertemperatur im PAD-Sumpf und im TTV dargestellt und mit den Versuchsdaten verglichen. In Abb. 2.36 ist der Massendurchsatz der Sprühtröpfchen den Messwerten des Versuches gegenübergestellt.

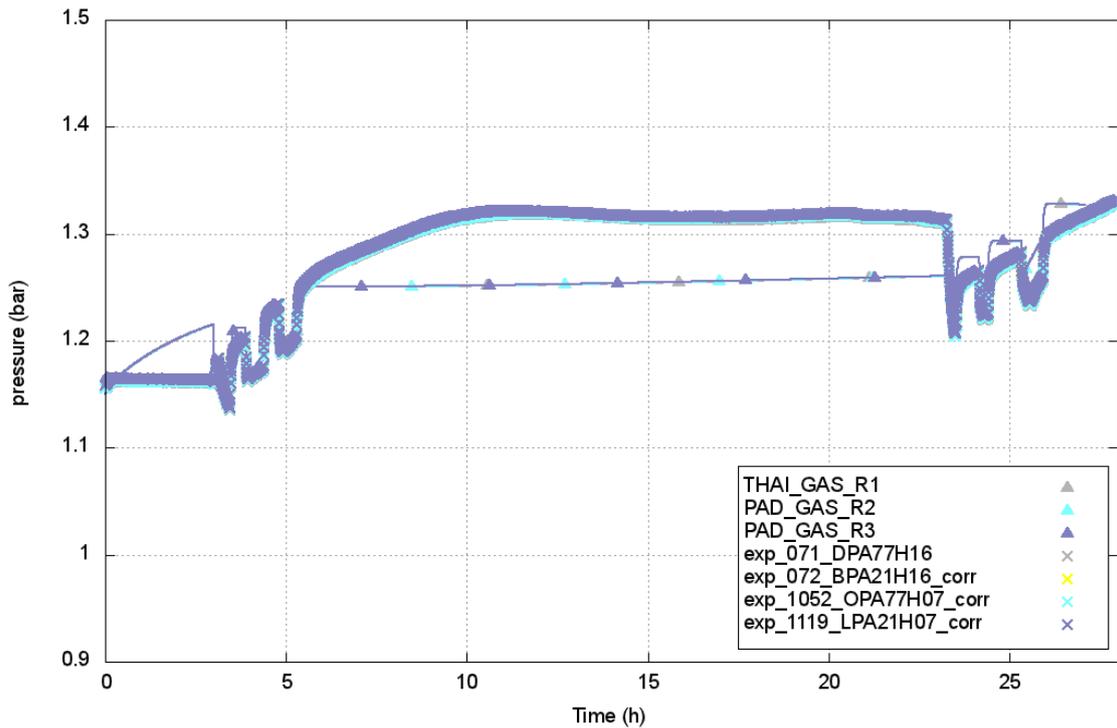


Abb. 2.31 THAI Iod-31: Druckverlauf im PAD- und TTV-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse

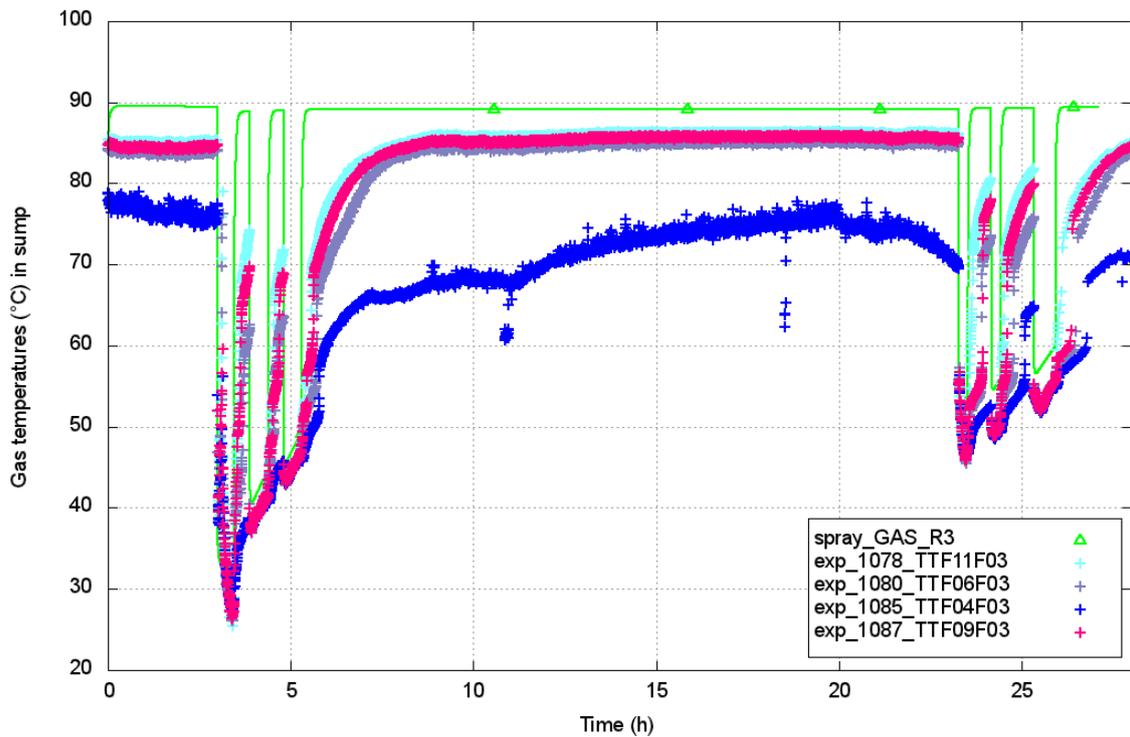


Abb. 2.32 THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R3 der COCOSYS-Analyse

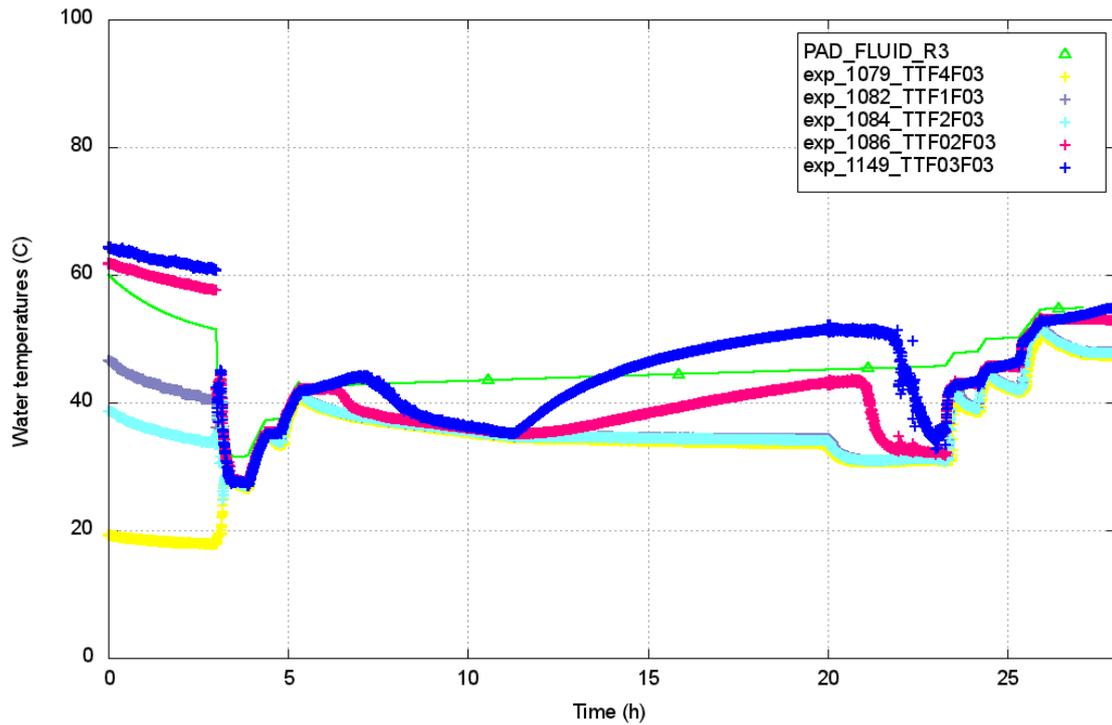


Abb. 2.33 THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Sumpf während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse

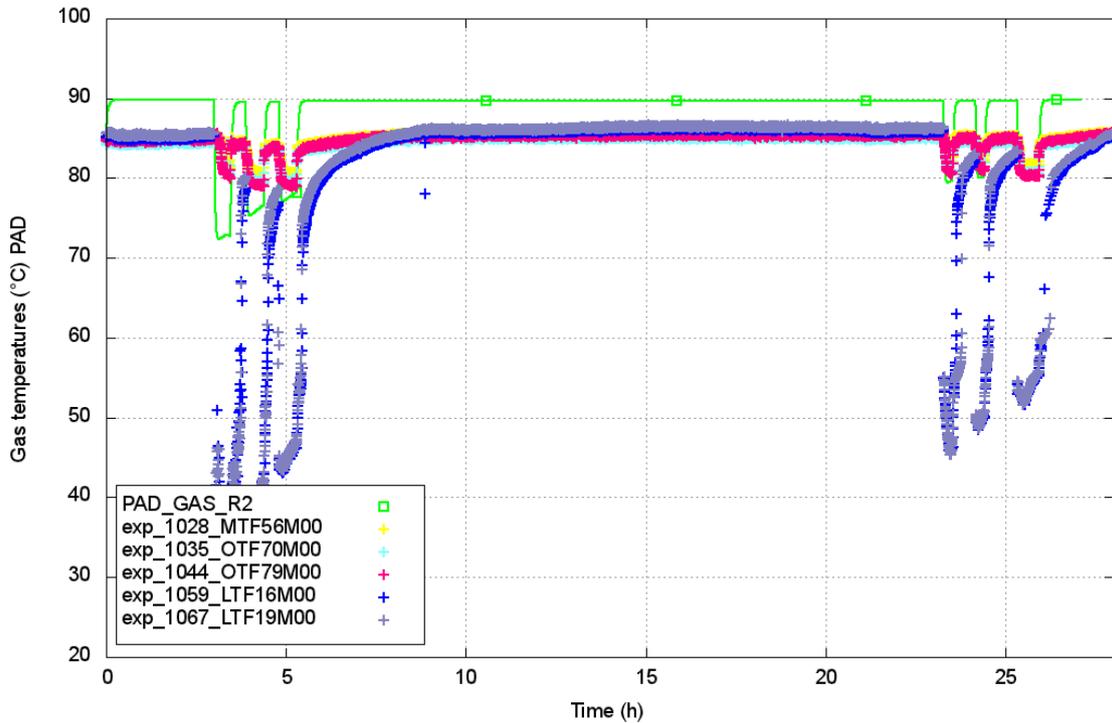


Abb. 2.34 THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R2 der COCOSYS-Analyse

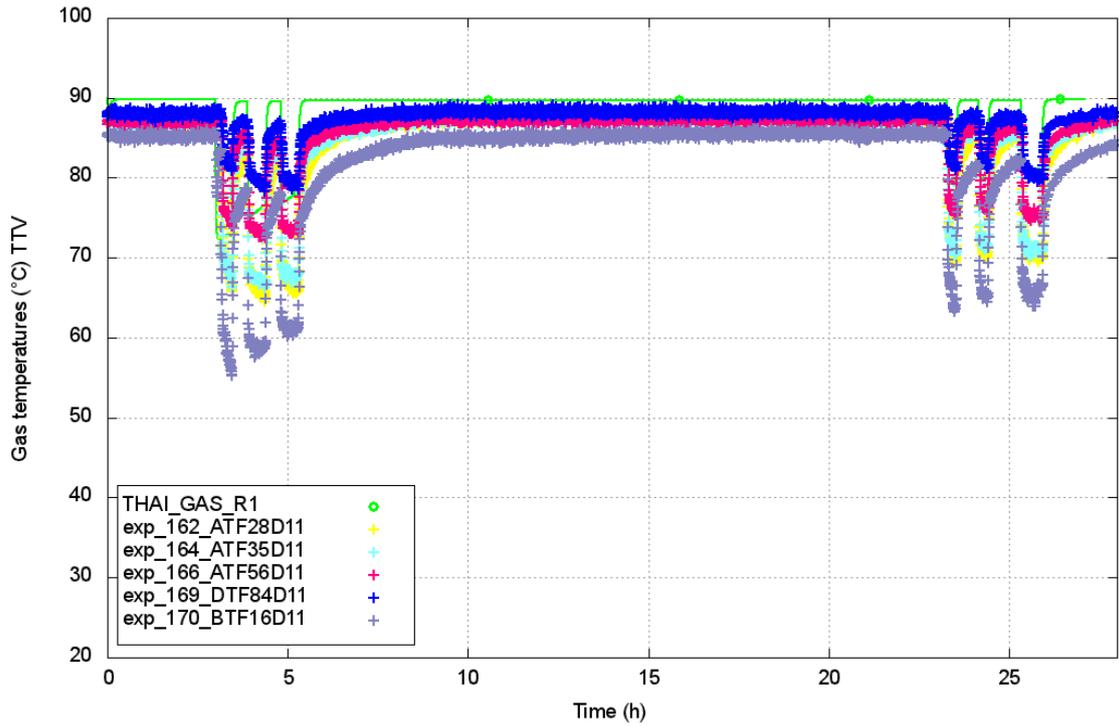


Abb. 2.35 THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im TTV-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R1 der COCOSYS-Analyse

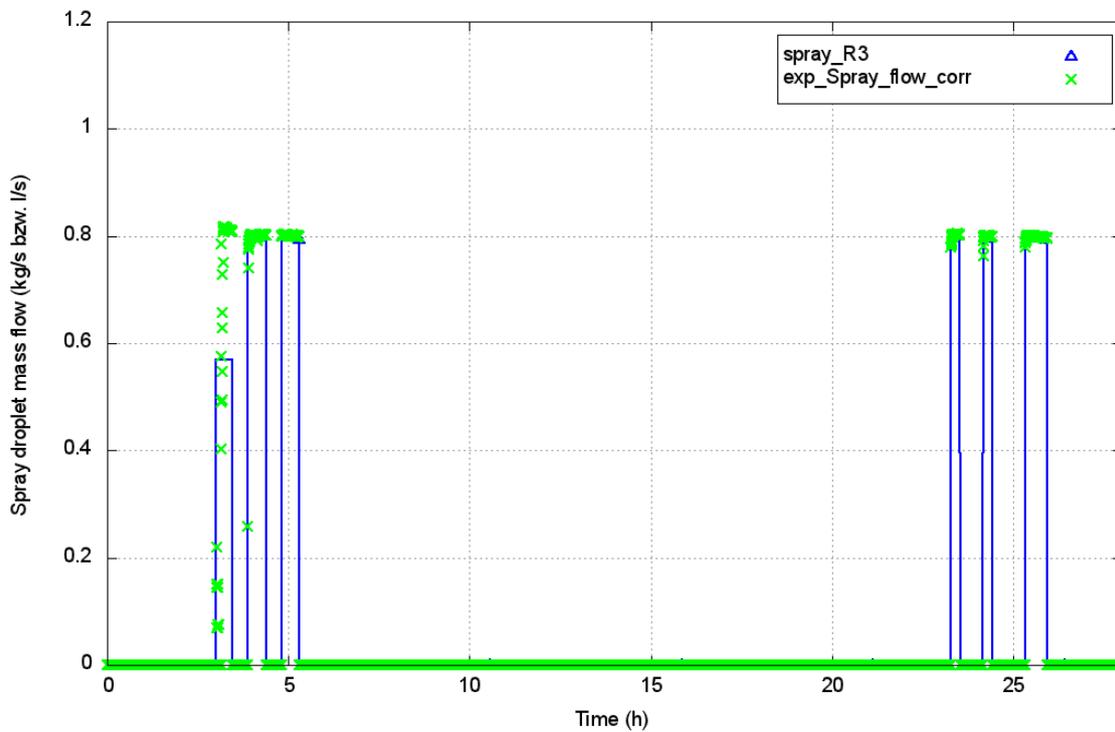


Abb. 2.36 THAI Iod-31: Massendurchsatz der Sprühtropfen während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse

Da es im neuen Modell möglich ist, den zeitlichen Verlauf des wasserseitigen als auch des gaseitigen Massentransfers tabellarisch im Inputfile für den Sumpf und die Sprüh-tropfen einzugeben, werden auf der Basis der Erkenntnisse aus /EVA 97/ verschiedene Massentransferkoeffizienten untersucht und die Ergebnisse der COCOSYS-Rechnung diskutiert.

Die nachfolgend dargestellten Rechenergebnisse beschränken sich allerdings auf die Diskussion von zwei Rechenfällen mit Massentransferkoeffizienten KMTWAS und KMTGAS , die in Tab. 2.3 aufgeführt sind.

Tab. 2.3 In Rechnung #26 und #28 verwendete KMTWAS und KMTGAS Inputwerte

#26	KMTWAS		KMTGAS	
Zeit [s]	Sumpf	Sprühpfad	Sumpf	Sprühpfad
0,0	3,0E-04	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
1000,0	3,0E-04	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
10799,0	3,0E-04	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
10800,0	3,0E-04	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
82790,0	3,0E-04	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
82800,0	4,0E-03	4,0E-03	1,4E-03	1,1E-01
100000,0	4,0E-03	4,0E-03	1,4E-03	1,1E-01
#28	KMTWAS		KMTGAS	
Zeit [s]	Sumpf	Sprühpfad	Sumpf	Sprühpfad
0,0	1,0E-05	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
1000,0	1,0E-05	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
10799,0	1,0E-05	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
10800,0	1,0E-05	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
82790,0	1,0E-05	3,0E-04	1,4E-03	1,1E-01
82800,0	1,0E-05	4,0E-03	1,4E-03	1,1E-01
100000,0	1,0E-05	4,0E-03	1,4E-03	1,1E-01

Im COCOSYS User-Manual sind die Massentransferkoeffizienten $k_G = 1,4E-03$ m/s und $k_W = 1,0E-05$ m/s für einen stagnierenden großen Sumpf empfohlen. Für bewegte Sümpfe sind auch größere MTC bis zu $3,0E-04$ m/s möglich.

Die Abb. 2.37 und Abb. 2.38 zeigen die Iod-Konzentrationen in der Gasphase für die beiden Rechnungen #26 und #28. Es werden jeweils die Ergebnisse der COCOSYS-Rechnung mit dem neuen Modell in NEWAFP (grüne Kurve) mit der alten Rechnung (rote Kurve) und den Messwerten verglichen. Während der ersten drei Stunden nach der Iod-Einspeisung, nimmt die I_2 -Konzentration in der Gasphase deutlich ab. Rechnung und Messwerte stimmen überein. Die Abnahme der I_2 -Konzentration ist dabei hauptsächlich auf die Ablagerung des Iods auf den Stahlflächen zurückzuführen. Anhand der Messwerte, die durch die Rechnung auch bestätigt werden, wird deutlich, dass der neue PAD-Stahl keinen erheblichen Einfluss auf das Ablagerungsverhalten von Iod auf Stahl im Vergleich zum TTV-Stahl zu zeigen scheint, so dass man zunächst annehmen kann, dass das I_2 /Stahl-Modell in COCOSYS weiterhin Gültigkeit hat und angewendet werden kann.

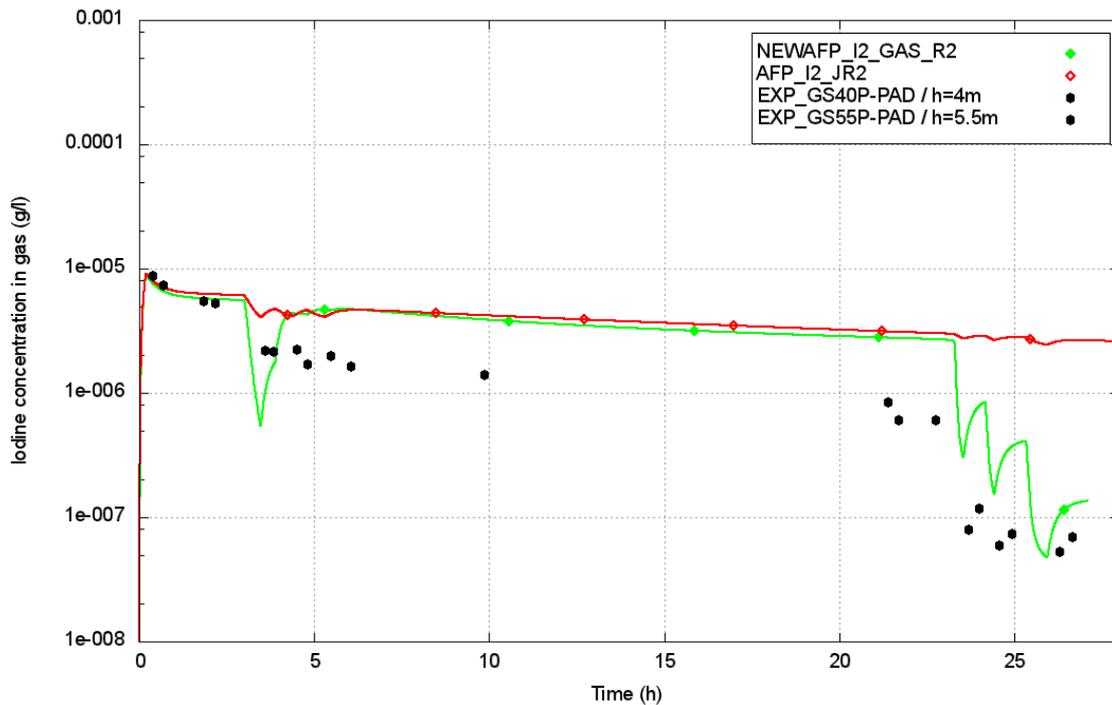


Abb. 2.37 THAI Iod-31: Gasförmige I_2 -Konzentration im PAD-Behälter (#26)

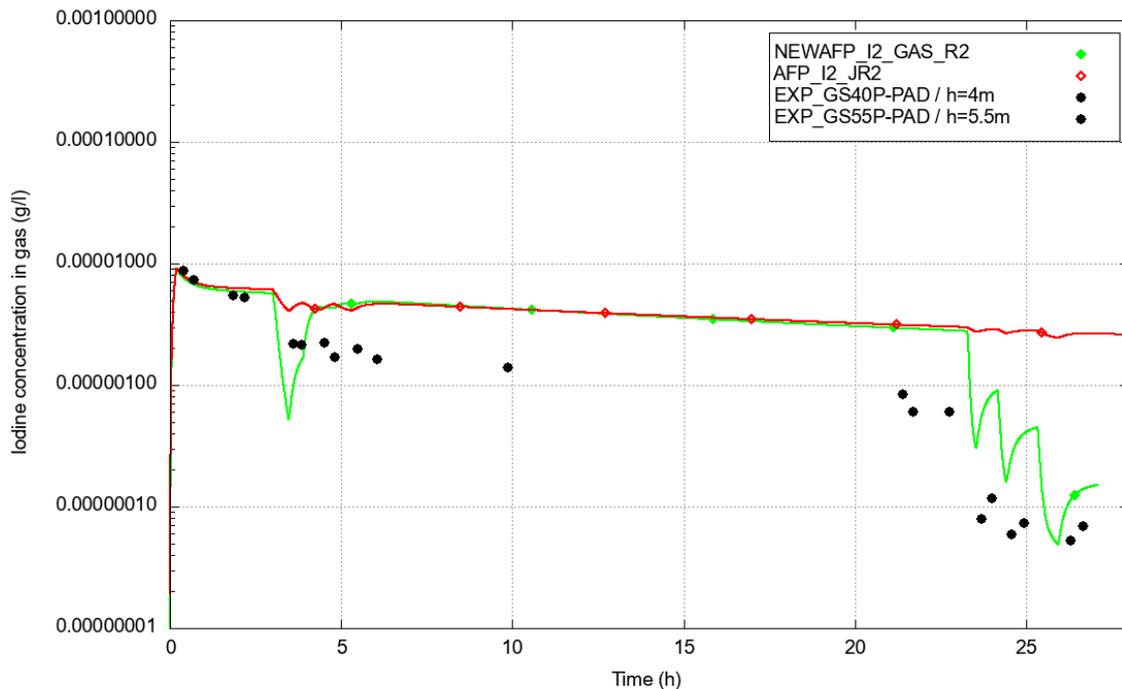


Abb. 2.38 THAI Iod-31: Gasförmige I₂-Konzentration im PAD-Behälter (#28)

Für beide Fälle (#26 und #28) zeigen Abb. 2.37 und Abb. 2.38, dass das neue Iod/Sprühmodell einen deutlichen Effekt auf die Iod-Konzentration in der Atmosphäre hat und Iod effektiv ausgewaschen wird. In der Versuchsphase 2 (Sprühen zunächst mit Frischwasser und anschließendem Rezirkulationssprühen zwischen 3,0 und 5,3 h) ist allerdings auch zu erkennen, dass Sprühen mit bereits I₂ kontaminiertem Wasser und einem niedrigen pH-Wert im Sprühwasser kein weiteres Auswaschen hervorruft, sondern im Gegenteil die I₂-Konzentration wieder ansteigt.

Das 1. Sprühen mit frischem Wasser wäscht im Vergleich zu den Messwerten zu viel I₂ aus der Gasphase aus. Der Anstieg der Iod-Masse im Sumpf beträgt mehr als die im Experiment ausgewaschenen 0,23 g (siehe Abb. 2.39 und Abb. 2.40). Nach Beendigung des ersten Sprühens entsteht damit ein deutlicher Konzentrationsunterschied von Iod in Gas- und Wasserphase. In der Rechnung wird ein Großteil des im Wasser befindlichen Iods während der nachfolgenden zwei Sprühphasen mit rezirkulierendem Wasser wieder in die Atmosphäre freigesetzt, und ein Gleichgewichtszustand hergestellt. In der Rechnung steigt die Iod-Konzentration in der Atmosphäre wieder an. Dieses gilt für beide Rechenfälle mit unterschiedlichen MTCs (#26 und #28).

Dieses berechnete Verhalten ist allerdings im Experiment nicht zu erkennen. Dort bleibt die Iod-Konzentration im Wasser nach dem Sprühen mit Frischwasser auf gleichem

(niedrigerem) Niveau. Zusätzlich wird der Anstieg der $I_2(g)$ -Konzentration nach dem Sprühen auch durch I_2 -Resuspension vom Stahl hervorgerufen. Die anschließenden zwei Sprühphasen mit rezirkulierendem Wasser im Experiment zeigen keine nennenswerte Änderung der Iod-Konzentration in der Gasphase als auch im Sumpf. Es ist anzunehmen, dass bereits ein Gleichgewichtszustand zwischen Gas- und Wasserphase vorliegt. Das erneute Sprühen ändert lediglich das Verhältnis der Oberfläche zwischen Gas- und Wassergrenzfläche aufgrund des Vorhandenseins von Sprühtropfen. Dies verändert aber nicht mehr das bereits ausgebildete I_2 -Gleichgewicht.

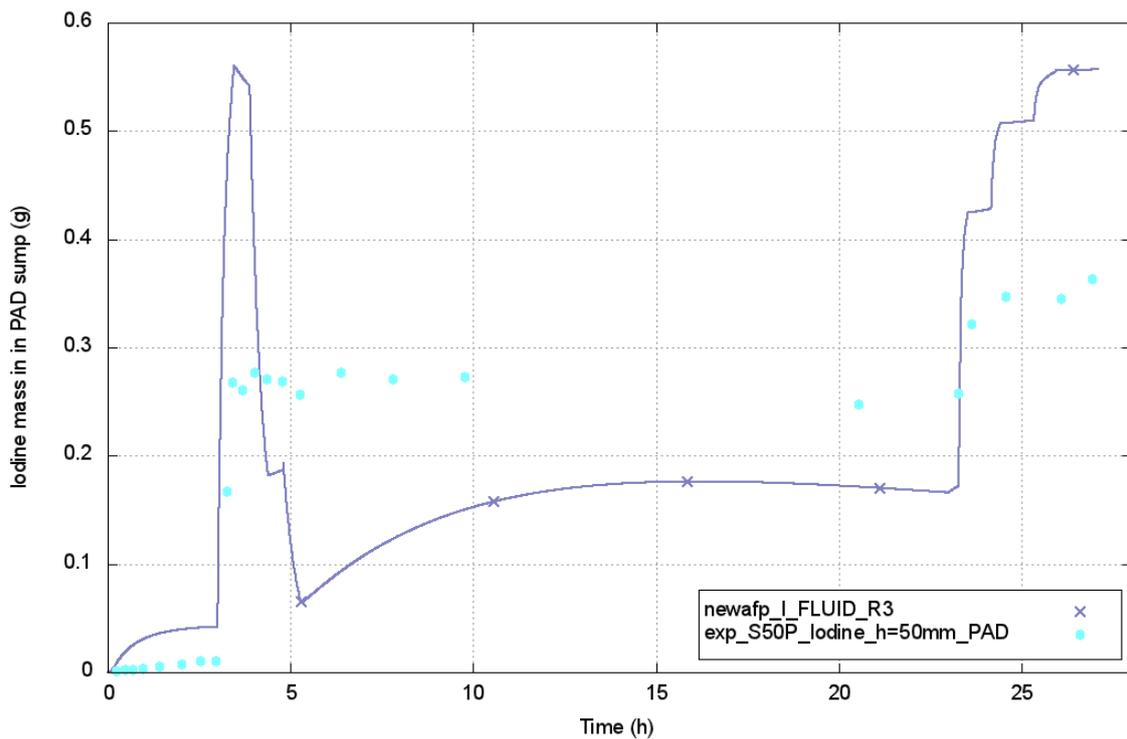


Abb. 2.39 THAI Iod-31: Iod-Masse im PAD-Sumpf (#26)

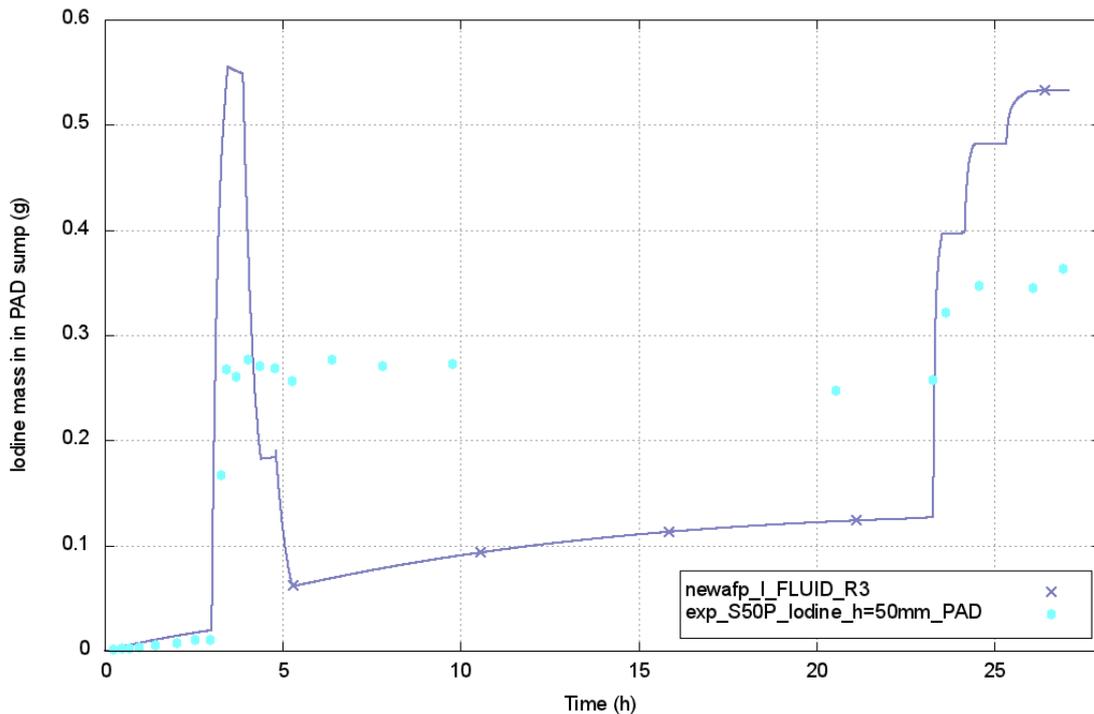


Abb. 2.40 THAI Iod-31: Iod-Masse im PAD-Sumpf (#28)

Ein Blick auf die Ablagerung von Iod auf den Stahlwänden zeigt, dass in den Rechnungen im Vergleich mit den experimentellen Daten zu wenig Iod auf den Stahloberflächen abgelagert wird (vgl. Abb. 2.41 und Abb. 2.42). Hier zeigen die Versuchsdaten allerdings auch, dass wider Erwarten die Ablagerung von Iod auf Stahl auf dem bereits benutzten Stahl des TTV größer ist, als die Ablagerung auf dem neuen Stahl des PAD, obwohl zunächst vermutet wurde, dass dieser reaktiver sein könnte. Vergangene THAI-Tests sowie auch kleinskalige Labortests haben gezeigt, dass die Iod-Beladung auf Oberflächen des Systems von Online-Sonden / Ablagerungscoupons mit gewissen Unsicherheiten behaftet ist. Außerdem haben Tests gezeigt, dass eine Extrapolation der Ergebnisse von I₂/Stahl von kleinen Oberflächen auf große Wände weitere Unsicherheiten beinhaltet. Unter Berücksichtigung dieser Unsicherheiten wird in /FUN 16/ eingeschätzt, dass die Reaktivität des frischen und benutzten Behälterstahls als hinreichend gleich anzusehen ist.

Die Ablagerung von Iod auf Stahl in der 1. Versuchsphase verläuft in der Rechnung sehr schnell, ist in Übereinstimmung mit dem Versuch (Abb. 2.41 und Abb. 2.42) und für beide Behälter gleich stark. Allerdings wird zu wenig physisorbiertes Iod auf dem Stahl abgelagert. Während der neue Stahl (OS49F/PAD-Behälter) im Experiment kein weiteres physisorbiertes Iod aufnimmt und sich im Equilibrium mit der Gasphase zu befinden

scheint, nimmt die Iod-Ablagerung auf dem Coupon aus altem Stahl (OS49D/TTV-Behälter) weiterhin zu. Dafür gibt es bisher keine Erklärung.

Die Abnahme der Iod-Masse auf dem Stahl während des ersten Sprühens, sowohl im Versuch als auch in der Rechnung, ist auf den I_2 -Auswascheffekt in der Atmosphäre zurückzuführen und der damit verbundenen Wiederfreisetzung von physisorbiertem Iod in die Gasphase, um ein Gleichgewicht zwischen Gas und Stahl wiederherzustellen. Auch hier fällt bei der Betrachtung der Messwerte auf, dass der frische Stahl mehr Iod freisetzt als der alte Stahlcoupon. In den darauffolgenden Sprühphasen ist keine weitere Freisetzung des abgelagerten Iods vom Stahl zu erkennen, da sich langfristig, aufgrund der Bildung von chemisorbiertem Iod, deutlich weniger physisorbiertes Iod auf dem Stahl befindet und damit das Potential der I_2 -Freisetzung von Stahl stark reduziert.

Zwischen 6 und 23 h nach I_2 -Einspeisung lassen die Messdaten vermuten, dass die Iod-Konzentration im Sumpf leicht abnimmt (vgl. Abb. 2.39 und Abb. 2.40). Das könnte laut /FUN 16/ daran liegen, dass I_2 aus dem Sumpf verdampft und sich auf die an die Gasphase angrenzenden Stahlflächen ablagert. Die Rechnungen zeigen dies nicht.

In der 3. Versuchsphase zwischen 23,3 h und 25,8 h wird mit alkalischem rezirkuliertem Sumpfwasser gesprüht. Da bereits die I_2 -Ausgangskonzentration in der Gasphase am Ende der 2. Versuchsphase deutlich zu hoch ist, ist der Sprüheffekt mit alkalischem Wasser in COCOSYS im Vergleich mit den experimentellen Daten auch zu stark. Im THAI-Test ist die Effizienz des 4. und 5. Sprühens deutlich geringer als die Effizienz des 1. Sprühens. In der Wasserphase ist aufgrund des hohen pH-Werts von 11 und der Umwandlung von I_2 in I^- (Hydrolysereaktion) kein I_2 mehr im Wasser enthalten (vgl. Abb. 2.43 und Abb. 2.44). Aus diesem Grund ist in dieser Versuchsphase auch nur die Aufnahme von I_2 in die Tropfen und ins Sumpfwasser und keine Wiederfreisetzung möglich.

Dieser Effekt ist auch in den Rechnungen wiederzufinden. Es wird wie bereits in Phase 1 zu viel I_2 aus der Gasphase in die Wasserphase ausgewaschen. Das ist an dem Iod-Massenanstieg in Abb. 2.39 und Abb. 2.40 deutlich zu erkennen. Die Rechenergebnisse zeigen auch, dass ab 23 h kein Iod aus dem Sumpf in die Gasphase wieder freigesetzt wird.

In Abb. 2.43 und Abb. 2.44 sind die im Sumpfwasser berechneten Iod-Spezies abgebildet. Auch in diesen Abbildungen wird der Hydrolyseeffekt durch die Anhebung des pH-

Werts im Wasser sichtbar, da ab 23 h kein I₂ mehr im Wasser vorhanden ist und die I⁻-Konzentration angestiegen ist. Allerdings gibt es keine Messwerte der I₂ und I⁻-Konzentrationen im Sumpf, da eine direkte Messung nicht funktioniert hat und somit die Iod-Spezies-Verteilung der Rechnung im Sumpf nicht verglichen werden kann.

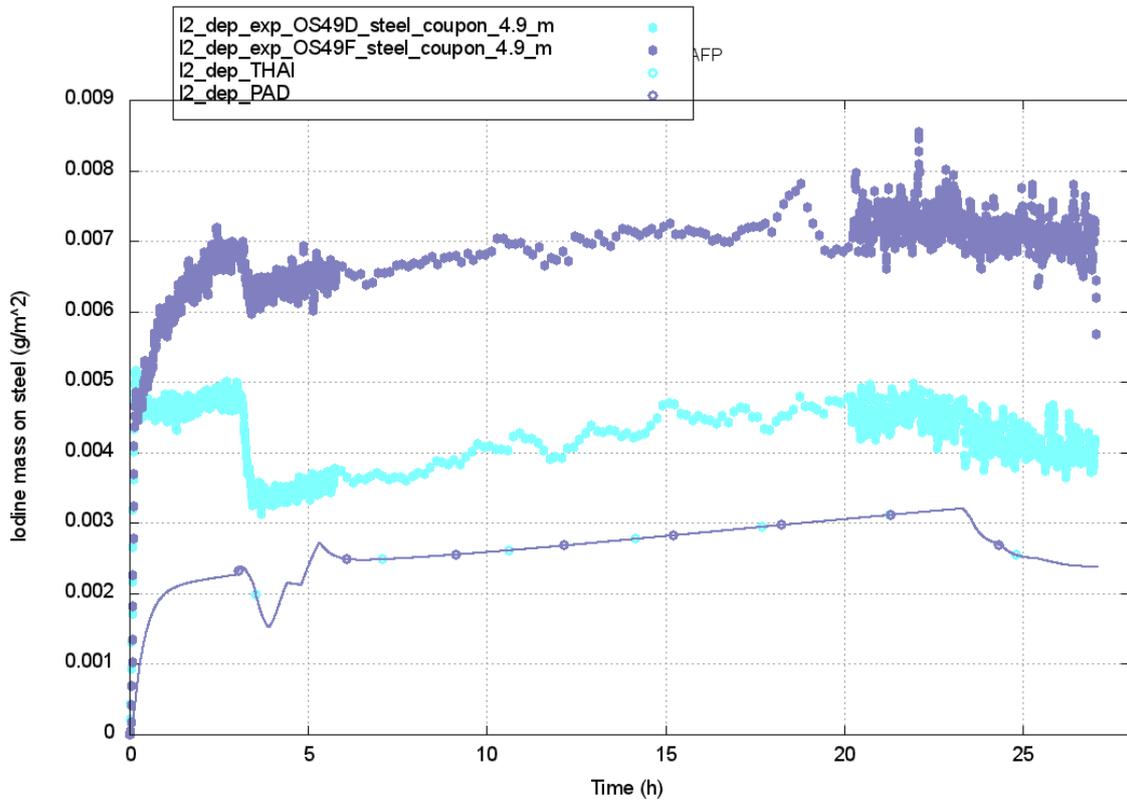


Abb. 2.41 THAI Iod-31: Abgelagerte Iod-Masse auf dem Stahl im PAD- und TTV-Behälter (#26)

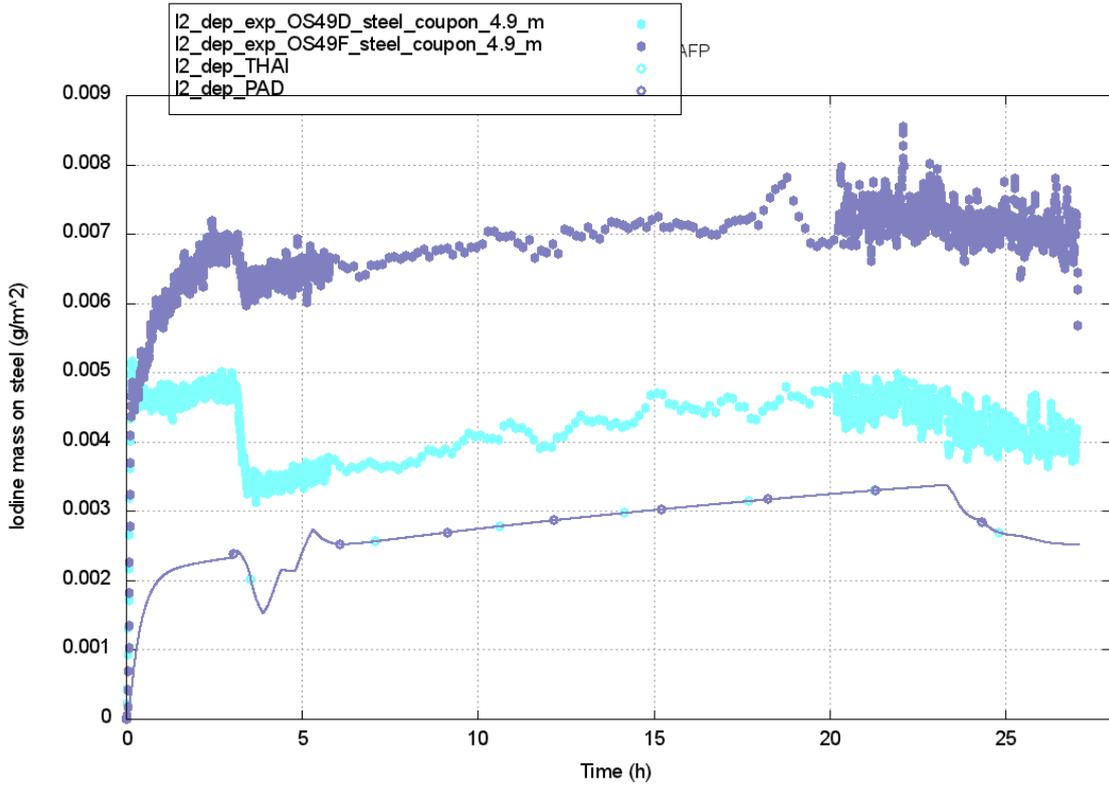


Abb. 2.42 THAI Iod-31: Abgelagerte Iod-Masse auf dem Stahl im PAD- und TTV-Behälter (#28)

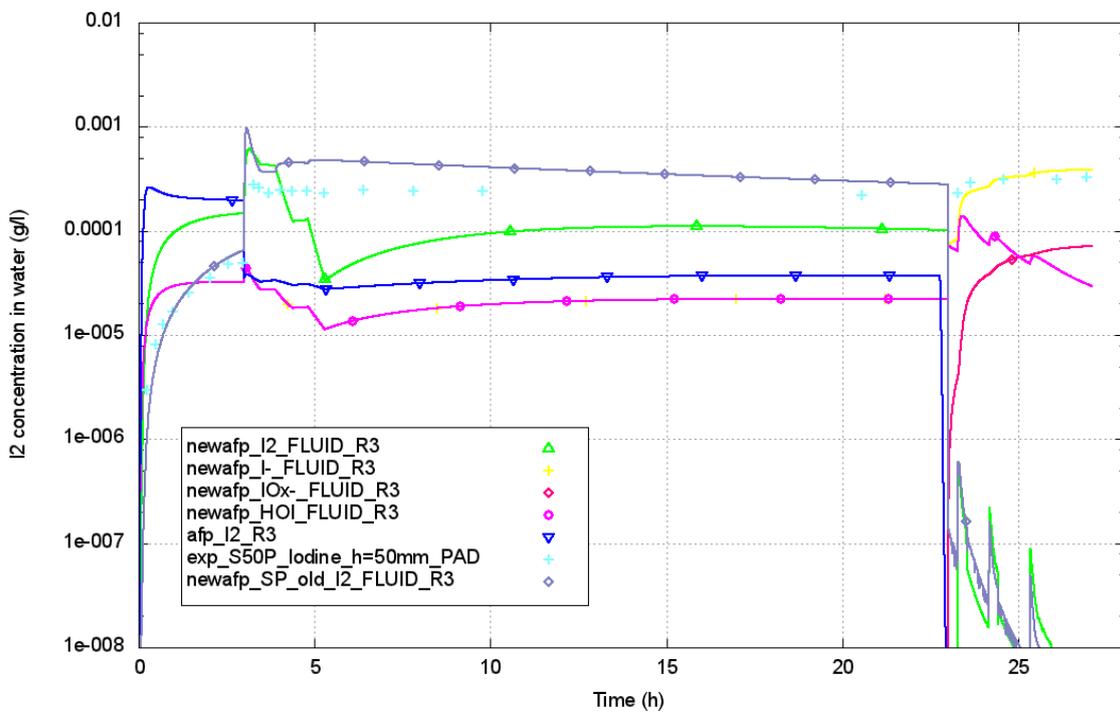


Abb. 2.43 THAI Iod-31: Konzentrationen der Iod-Spezies im PAD-Sumpf (#26)

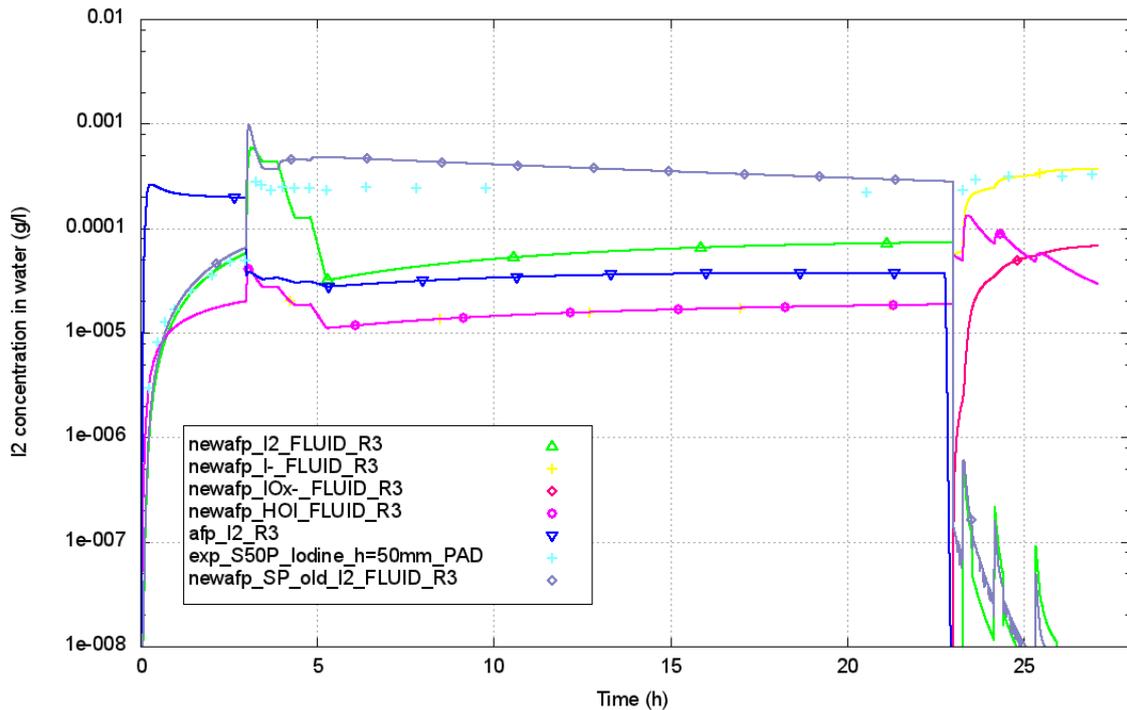


Abb. 2.44 THAI Iod-31: Konzentrationen der Iod-Spezies im PAD-Sumpf (#28)

Wie die Versuchsergebnisse als auch Rechnungen zeigen, hat das Sprühen mit Frischwasser und auch alkalischem Wasser einen messbaren Effekt. Der Versuch bestätigt somit prinzipiell die Rechenwerte und ist ein Beitrag zur Validierung des neuen Iod/Sprühmodells in COCOSYS-AIM. Das Auswaschen von I₂ aus der Atmosphäre durch Sprühen wird in COCOSYS-AIM zu stark berechnet, es wird zu viel Iod aus der Atmosphäre in den Sumpf durch die Sprühtröpfchen gewaschen und muss noch angepasst werden. Auch bedürfen die Berechnung der I₂-Verteilung im Behälter und ein Einstellen des I₂-Gleichgewichts zwischen Gas/Wasser und Gas/Stahlwand noch weiterer Untersuchung. Die Verwendung der sich zeitlich leicht unterscheidenden MTCs aus Tab. 2.3 zeigt nur kleine Veränderungen der Iod-Konzentrationsverläufe in Gas- und Wasserphase. Daher wird empfohlen, den konkreten Einfluss unterschiedlicher MTCs für Sumpf, Tröpfchen, Wandfilme eingehender zu untersuchen.

2.1.5 THAI Iod-33 Raumkettenversuch

Ein weiterer Versuch, der dem aktuellen nationalen Programm THAI-VI von Becker Technologies zugehörig ist, ist der THAI-Versuch Iod-33. Für den Iod-33 Raumkettenversuch sind Auslegungsrechnungen durchgeführt worden. Ziel war es zu überprüfen, welche Konfigurationen mit den Farbflächen noch zu ausreichend messbaren Iod-Konzentrationen in der THAI-Anlage führen. Der geplante Iod-33 Raumkettenversuch

untersucht mit Hilfe einer Langzeiteinspeisung von Iod die Iod-Verteilung und den Iod-Abbau in der Anlage THAI+ mit einer umlaufenden Strömung über einen Zeitraum von mehr als 5 Stunden. Die analytischen Ergebnisse sagen voraus, dass selbst mit einem großen Farbflächenanteil (30 m²) im THAI-Behälter die Iod-Konzentrationen in den beiden Behältern gut messbar sind und über der Nachweisgrenze liegen. Da der Versuch Iod-33 erst zum Ende dieses Vorhabens durchgeführt worden ist, gibt es bisher noch keine Veröffentlichung der Ergebnisse und damit sind auch keine Validierungsrechnungen im Rahmen des Vorhabens mehr möglich.

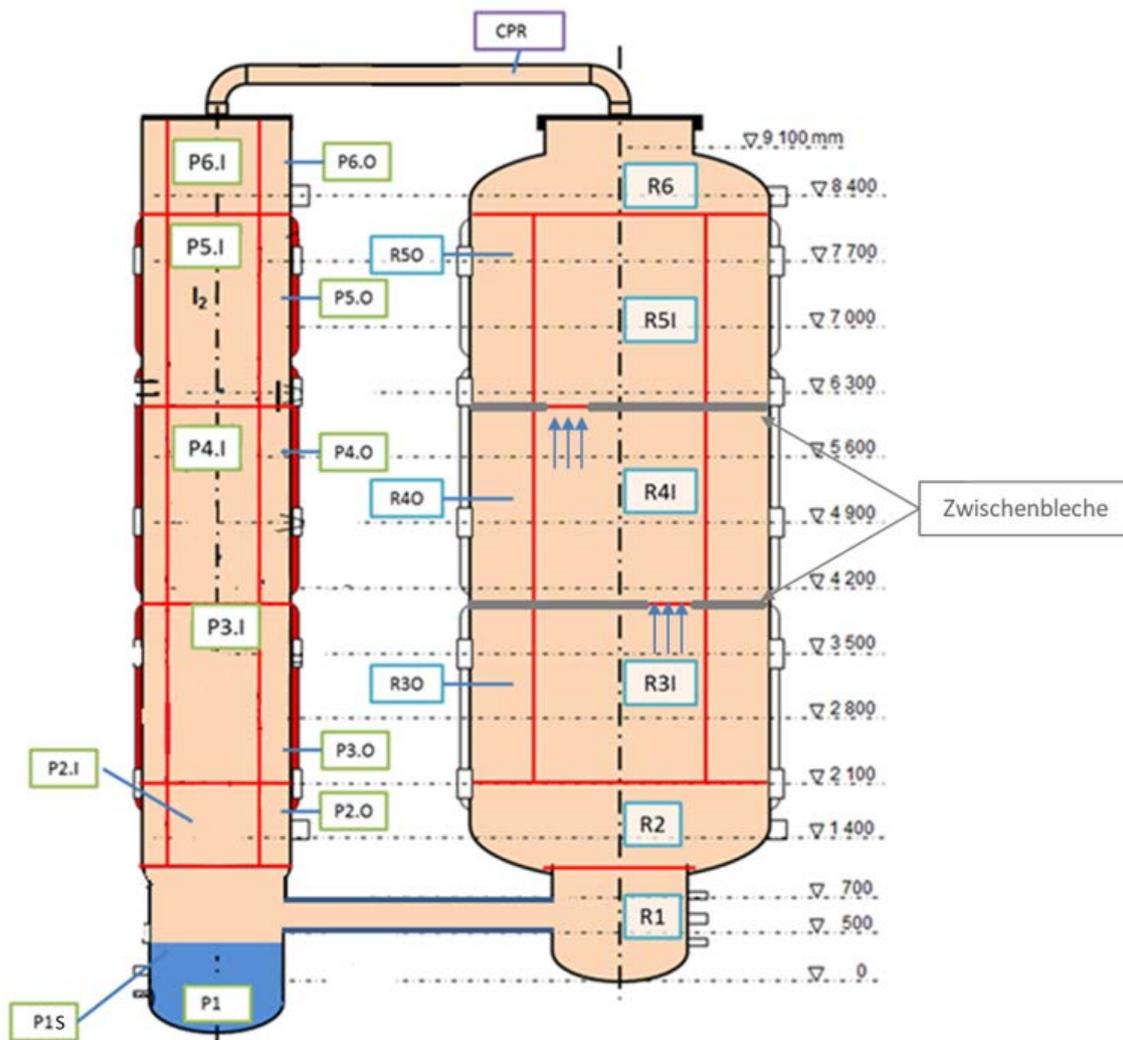


Abb. 2.45 THAI Iod-33: Anlagenschema und COCOSYS-Nodalisierung (rote Linien) für die Auslegungsrechnung

In Abb. 2.45 ist die für die Auslegungsrechnung mit COCOSYS verwendete Nodalisierung der Anlage THAI+ dargestellt. Für die Auslegungsrechnung wird angenommen, dass das I₂ über 5 Stunden (18.000 s) mit einer Rate von 0,1 g/h in die untere

Verbindungsleitung der Behälter eingespeist wird. Danach stoppt die Einspeisung. Der im PAD-Behälter angenommene Sumpf hat ein Volumen von 1030 l. Die Zwischenbleche im TTV sind (für die Rechnung angenommen bzw. variiert) beidseitig mit Farbe angestrichen und haben eine Gesamtfarbfäche von 30 m².

Die Ergebnisse der Auslegungsrechnung (Abb. 2.46 - Abb. 2.48) zeigen, dass eine erkennbare Stratifikation im TTV bedingt durch die I₂-Ablagerung auf den Farbbblechen und der Raumkette vorliegt. Im oberen PAD-Behälter ist die I₂-Konzentration homogen verteilt. Da lediglich der Raumbereich unterhalb und oberhalb der unteren Verbindungsleitung höhere Iod-Konzentrationen aufweist als der Rest des PAD-Behälters, ist anzunehmen, dass durch die Einspeisung in die untere Verbindungsleitung auch Iod direkt in den PAD-Behälter entgegengesetzt der Umlaufströmung strömt.

Abb. 2.48 zeigt das Ablagerungsverhalten des physisorbierten und chemisorbierten Iods auf den Farbzwisechenblechen. Das meiste Iod auf den Farbbblechen ist wie zu erwarten, entsprechend des Modells, chemisorbiert. Auf dem oberen Zwischenblech ist deutlich weniger chemisorbiertes Iod als auf dem unteren Zwischenblech abgelagert. In dem gewählten y-Achsenabschnitt ist auch lediglich die Ablagerungskurve vom physisorbierten Iod auf dem unteren Blech dargestellt. Die abgelagerte physisorbierte Iod-Menge auf dem oberen Blech ist so klein, dass die Konzentration zu gering ist, um diese hier noch sinnvoll darzustellen.

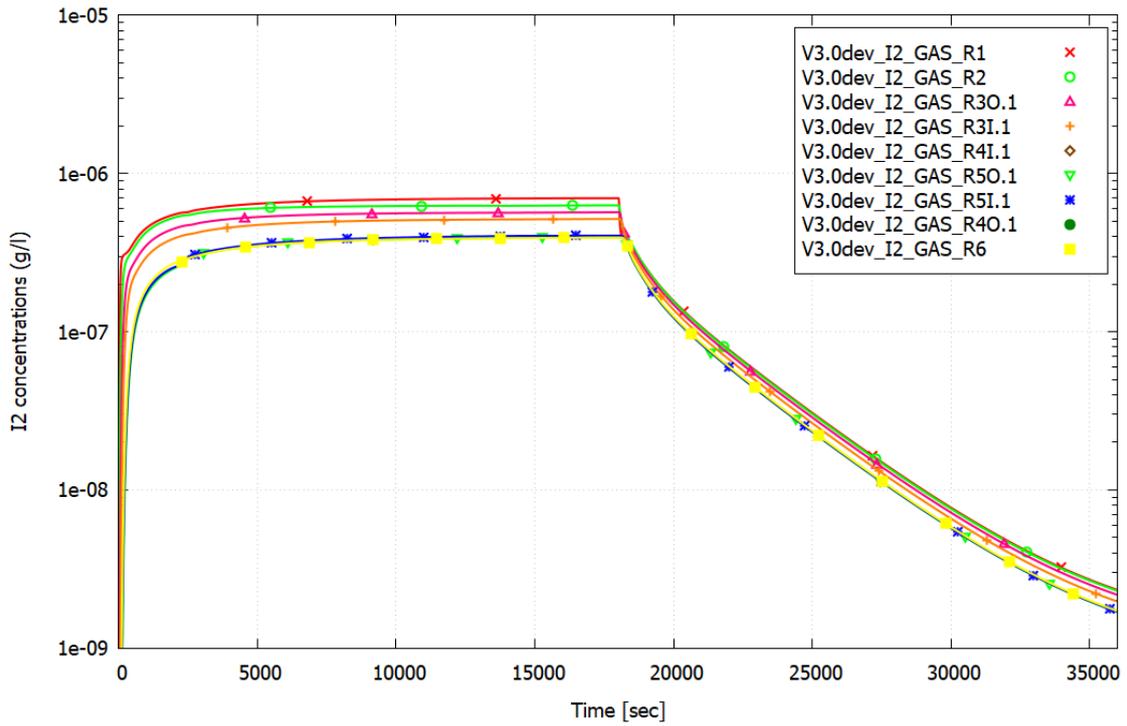


Abb. 2.46 THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung des I₂(g)-Konzentrationsverlaufs im TTV

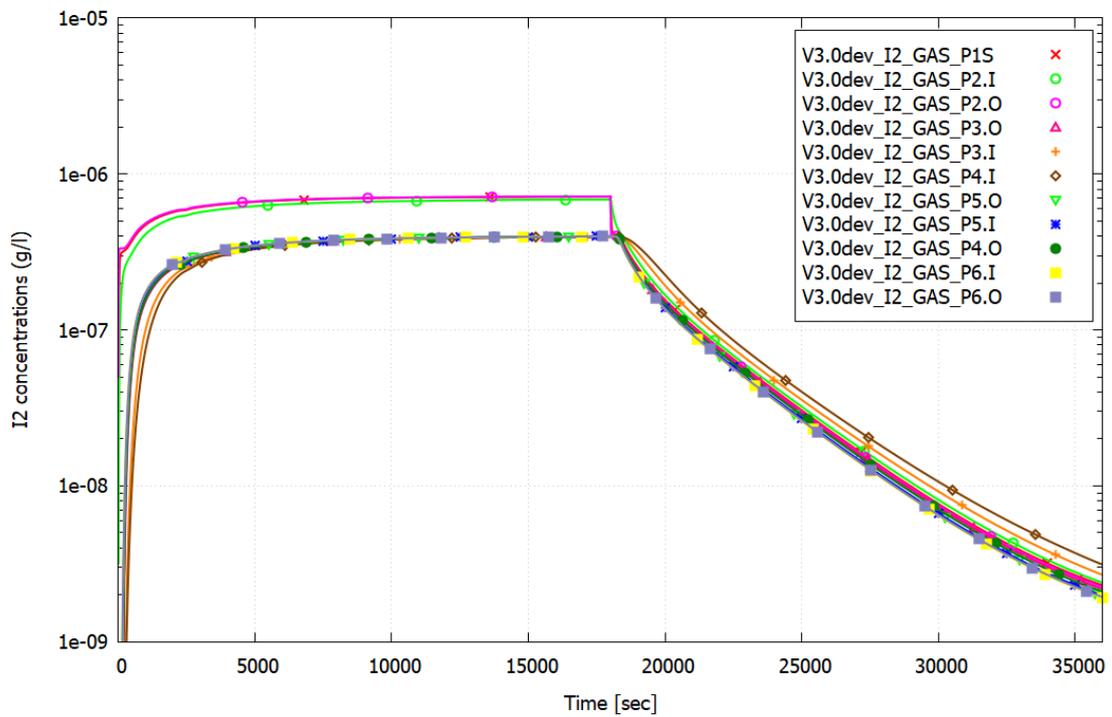


Abb. 2.47 THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung des I₂(g)-Konzentrationsverlaufs im PAD berechnet

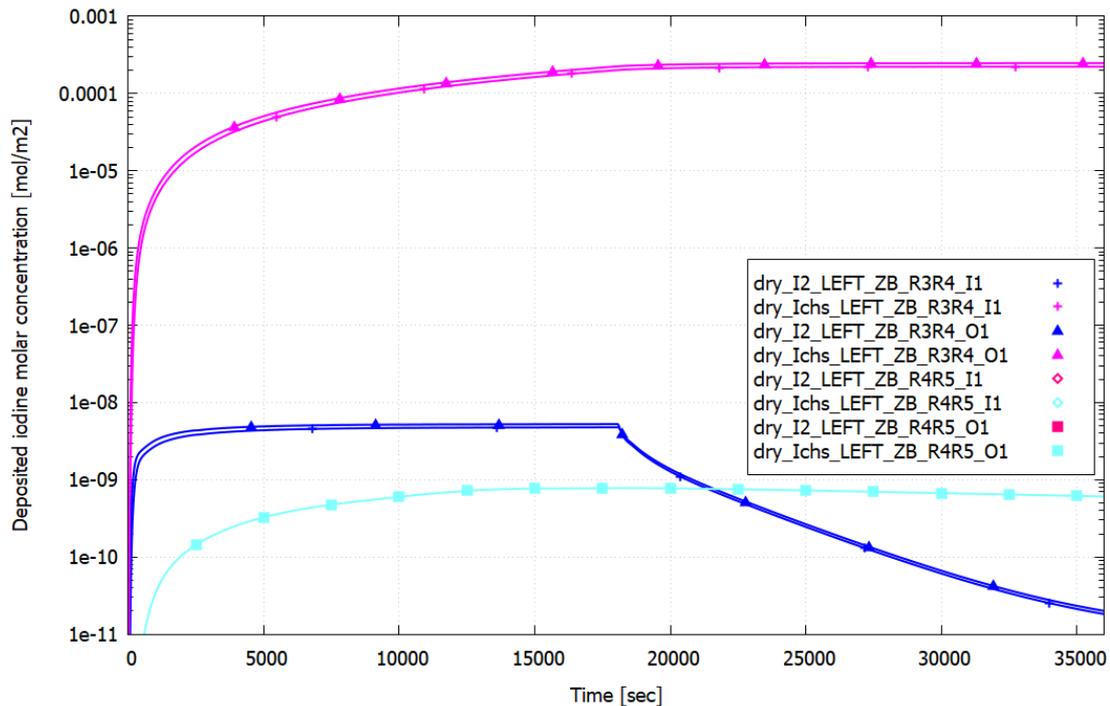


Abb. 2.48 THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung der abgelagerten Iod-Konzentration auf den Farbwischenblechen im TTV

Die Nachrechnung des Iod-33 Versuchs wird dann im Nachfolgevorhaben erfolgen.

2.1.6 Fazit Iod-Modellierung

Die THAI-Iodversuche unter kontrollierten thermohydraulischen Bedingungen in einer Mehrraumgeometrie sind weltweit einzigartig. Wesentliche Aspekte und ihre Wechselwirkungen bei einer Mehrraum-Modellierung können in COCOSYS modelliert und die Modelle validiert werden. Die Versuchsergebnisse bestätigen die mit COCOSYS-AFP/AIM vorhergesagten, sehr ausgeprägten Mehrraumeffekte auf die Ausbreitung und das Verhalten des Iods in der Containmentatmosphäre und in den Sümpfen. Der Modellierungsstand ist mit Blick auf Einzeleffekte als verstanden und validiert zu betrachten, bei Integralexperimenten sind die Wechselwirkungen weitestgehend bekannt, die für LP-Programme typischen korrelativen Ansätze müssen aber noch besser aufeinander abgestimmt werden.

2.2 Validierung neuer oder aktualisierter thermohydraulischer Modelle

2.2.1 Validierung des CO1-Modells zur kombinierten Wärmeübertragung an Strukturen

Um in COCOSYS den Wärmeaustausch zwischen der Zonenatmosphäre und angrenzenden Strukturen zu beschreiben, wird der Wärmeübergang durch Korrelationen für freie und erzwungene Konvektion, Strahlung und Kondensation in Abhängigkeit der Zonen- und Strukturzustände simuliert. Die jeweiligen Eingabeoptionen werden durch FRC bzw. FOC für die freie bzw. erzwungene Konvektion, COD/CDW für die Effekte von Kondensation und WGR für die Wärmeübertragung zwischen Wand und Gas durch Strahlung aktiviert. Die Wärmeübergangsmodelle können auch kombiniert werden. Die Korrelationen für die Modelle basieren auf Grundlagenarbeiten zu COCOSYS bzw. seinem Vorläufer RALOC und können einschlägigen Standardwerken wie dem VDI-Wärmeatlas entnommen werden bzw. wurden aus diesen abgeleitet.

Vor der Entwicklung des kombinierten Konvektion- und Kondensation-Modells CO1 war die Empfehlung laut COCOSYS-Benutzerhandbuch eine Kombination der vier Modelle FRC, FOC, COD/CDW und WGR. Demzufolge findet sich diese Kombination in den meisten existierenden Datensätzen wieder. Es gibt aber einige Nachteile bei der Kombination von freiem und erzwungenem Kondensationsmodell sowie von Konvektions- und Kondensations-Modell. So interpretieren zum Beispiel das FRC- und FOC-Modell die charakteristische Länge HLENG, die in den Korrelationen für die Reynolds-Zahl, die Nußelt-Zahl sowie die Grashof-Zahl verwendet wird, auf unterschiedliche Weise. Der Grund ist darin zu sehen, dass der in COCOSYS verwendete Lumped-Parameter-Ansatz die realen Verhältnisse nur näherungsweise wiedergeben kann und die Korrelationen für ideale Verhältnisse hergeleitet wurden. Wandstrukturen im Containment entsprechen diesen idealen Verhältnissen nicht zwangsläufig. Umfangreiche Analysen führten zu der Empfehlung, Werte von 5 cm für diesen Eingabeparameter HLENG zu benutzen, was im Gegensatz zu den Annahmen in den allgemeingültigen Korrelationen ist /VER 10/ und beim Anwender zu Irritationen führen kann. Um dieses und andere Probleme anzugehen, wurde das kombinierte Konvektions- und Kondensationsmodell CO1 entwickelt. Zur Absicherung der Modellentwicklung ist es wichtig, den Effekt bei der Umstellung der bisher verwendeten FRC-, FOC- und COD- bzw. CDW-Modelle durch das CO1-Modell zu untersuchen, insbesondere für reale Systeme.

Die charakteristische Höhe HHIGH ist für vertikale Strukturen wie z. B. Wände die Höhe der Struktur. Üblicherweise bilden Strukturen die Trennwand zwischen zwei Zonen. In

dem Fall ist die charakteristische Höhe auf der linken und rechten Seite gleich der Höhe der Struktur. In anderen Fällen können auch mehrere übereinander angeordnete Strukturen zwischen zwei Zonen definiert werden. Das muss insbesondere dann gemacht werden, wenn die Struktur aus unterschiedlichen Materialien auf unterschiedlichen Höhen zusammengesetzt ist. Auch wenn nur ein Material benutzt wird, kann eine unterschiedliche Materialstärke die Definition einer separaten Wandstruktur notwendig machen. Die Summe der Höhen aller Strukturen zwischen diesen Zonen muss die Höhe der Zonen sein. In allen Fällen ist die charakteristische Höhe HHIGH auf beiden Seiten der Struktur gleich. Für horizontale Strukturen wie Böden und Decken soll HHIGH auf 1,0 m eingestellt werden.

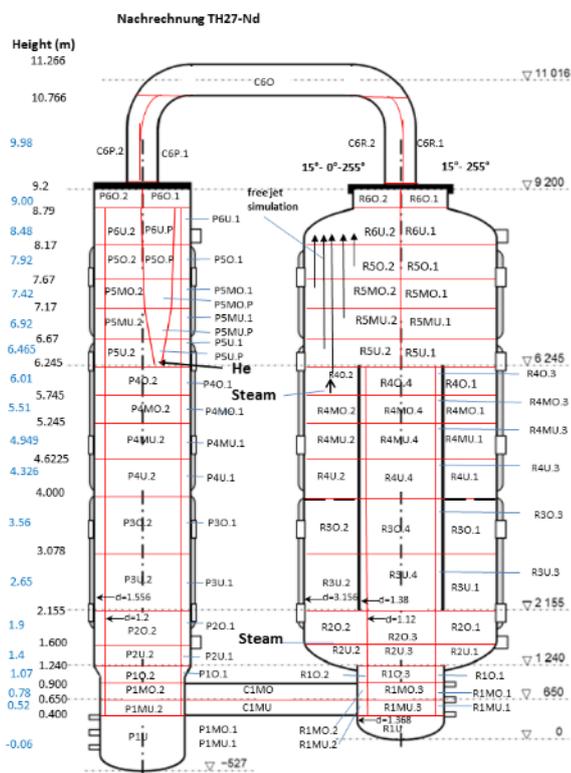
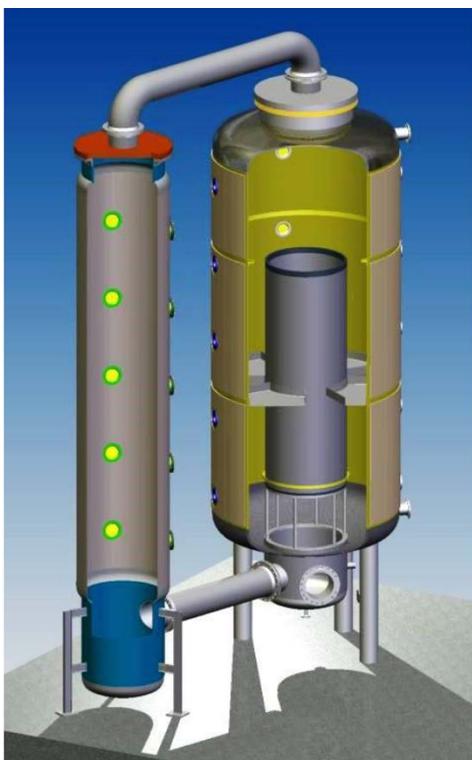
Anders als HHIGH kann HLENG nicht immer eindeutig definiert werden. HLENG wird für die Wärmeübergangskorrelationen des Modells für die freie Konvektion (FRC bzw. CO1) benötigt. Für die Kombination von FRC mit FOC bzw. COD wird für HLENG für vertikale Strukturen bisher ein Wert von 0,05 m empfohlen, der sich aus umfangreichen Analysen als praktikabel ergeben hat. Im Gegensatz dazu soll bei Verwendung des neuen CO1-Modells für HLENG konsistent mit den realen Dimensionen der Strukturen gerechnet werden. Für vertikale Strukturen ist HLENG die Länge des Strömungspfades, d. h. im Prinzip die gesamte Konvektionsschleife entlang einer oder mehrerer übereinander angeordneter Strukturen. Für eine „ungestörte“ Wand in einer Zone ist HLENG die Höhe der Wand bzw. der Zone. Wenn aber ein Raum durch mehrere (sog. virtuelle) Zonen auf unterschiedlichen Niveaus unterteilt ist, dann kann HLENG größer als die Höhe der einzelnen Zone sein, wenn eine Konvektionsschleife entlang der Wände führt. Anders als HHIGH kann HLENG auch andere Werte auf den beiden Seiten einer Struktur annehmen, abhängig von den jeweiligen Gegebenheiten. Weiterhin muss berücksichtigt werden, dass jegliche Kanten, Vorsprünge etc. an der Wand die Konvektionsschleife unterbrechen können, und damit HLENG verändern. Dies erfordert detaillierte Daten und Kenntnisse der Versuchsanlage oder des jeweiligen Containments.

Für horizontale Strukturen soll die charakteristische Länge zu $l = A/U$ bestimmt werden, mit der Fläche A und dem Umfang U der Projektion der Struktur auf die Strömungsrichtung (horizontale Platte). Zum Beispiel für Boden- und Deckenstrukturen ist HLENG die Fläche der Struktur geteilt durch den Umfang der Struktur.

Nachfolgend wurde der Effekt des CO1-Modells sowie der Definition der charakteristischen Größen HHIGH und HLENG für die Versuchsanlage THAI+ am Beispiel des Versuchs TH-27 untersucht.

2.2.1.1 THAI TH-27 Versuchsaufbau

Die Versuchsanlage THAI+, dargestellt in Abb. 2.49 links, wurde für die Validierung von vielen Modellen im thermohydraulischen Modul THY sowie im Modul zum Aerosolverhalten AFP in COCOSYS verwendet. Im Versuch TH-27 wurde Dampf in den größeren TTV-Behälter (THAI Test Vessel) und Helium in den kleineren PAD-Behälter (Parallel Attachable Drum) eingespeist. Mehr Informationen über die Anlage THAI+ und den Versuch TH-27 sind in /FRE 15/, /GUP 17/ dokumentiert. Als COCOSYS-Nodalisierung ist für diese Validierung die in Abb. 2.49 rechts dargestellte Nodalisierung benutzt worden.



Für THAI+ sind sehr detaillierte Anlagendaten verfügbar, die für die Umstellung auf CO1 und die Bestimmung der geometrischen Eingabedaten notwendig sind. Für das CO1-Modell besonders wichtig sind Eingabeparameter für die charakteristische Höhe HHIGH und charakteristische Länge HLENG, der jeweiligen COCOSYS-Strukturen. So befinden sich z. B. in der Versuchsanlage THAI+ Kondensatrinnen an der Behälterinnenseite auf verschiedenen Höhen, die das an der Wand kondensierte Wasser sammeln und für weitere Untersuchungen nach außen leiten (Abb. 2.50). Diese Kondensatrinnen unterbrechen die Konvektionsschleifen an der Wand und müssen durch eine entsprechende

Wahl von HLENG berücksichtigt werden. Im PAD-Behälter gibt es ebenfalls Kondensatrinnen, die den Strömungspfad maßgeblich unterbrechen könnten (Abb. 2.50), und auch berücksichtigt werden.

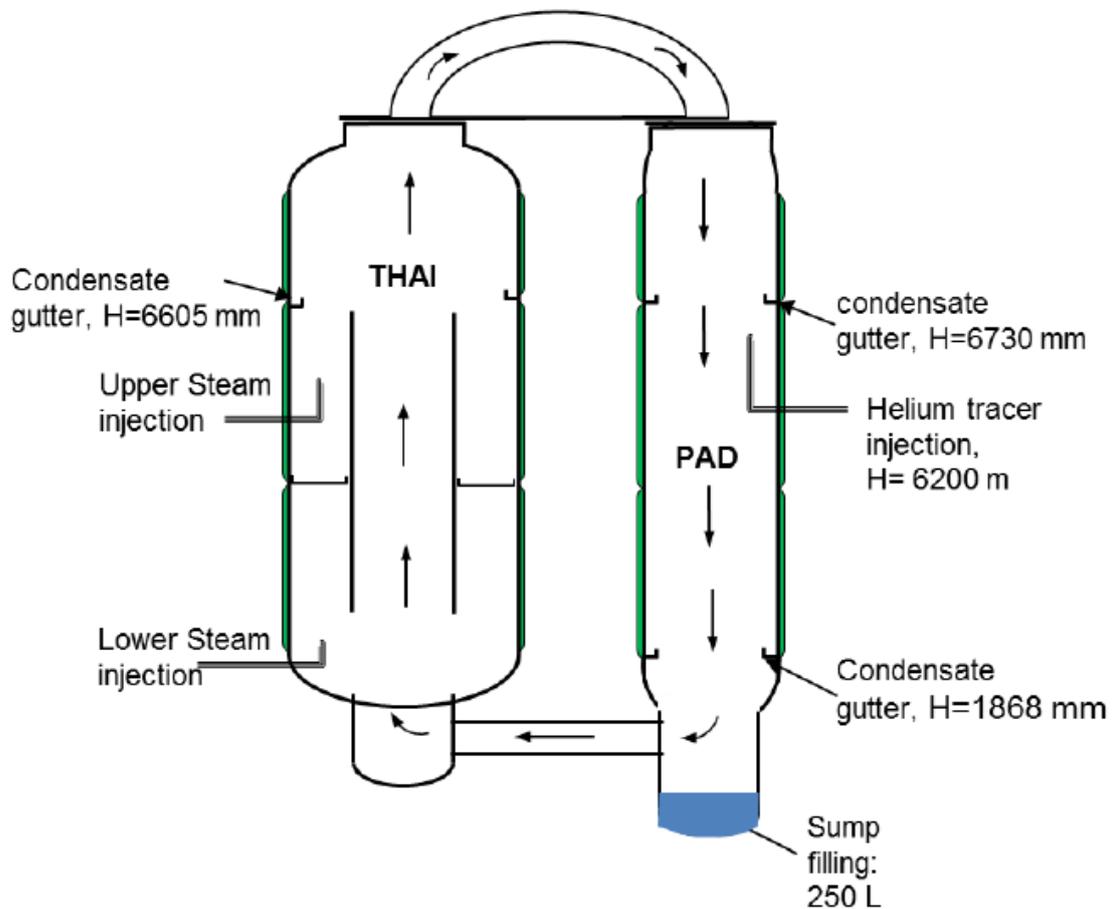


Abb. 2.50 Anlage THAI+ mit Abbildung von Kondensatrinnen /GUP 17/

2.2.1.2 Ergebnisse der Validierung des CO1-Modells

Nachfolgend werden die Ergebnisse der COCOSYS-Nachrechnung des Versuchs THAI TH-27 dargestellt. Die roten Kurven (Legende: open_...) zeigen die Ergebnisse der Nachrechnung nach Freigabe der experimentellen Daten und Modifikationen am Datensatz im Vergleich zu einer blinden Vorausrechnung. Zunächst wurden die Modelle FRC, FOC, COD und WGR verwendet. Die blauen Kurven (Legende CO1_...) zeigen die Ergebnisse nach Umstellung auf das CO1-Modell. Im letzteren Fall entsprechen HHIGH und HLENG den realen Anlagendaten.

In Abb. 2.51 ist die Energieabgabe zur Umgebung dargestellt, die maßgeblich durch den Wärmetransport an die Wand beeinflusst wird. Zwar lässt sich deutlich ein Unterschied

zwischen den beiden Rechnungen feststellen, aber er ist nicht unverhältnismäßig groß; die Wärmeabgabe nimmt durch Anwendung des CO1-Modells ab.

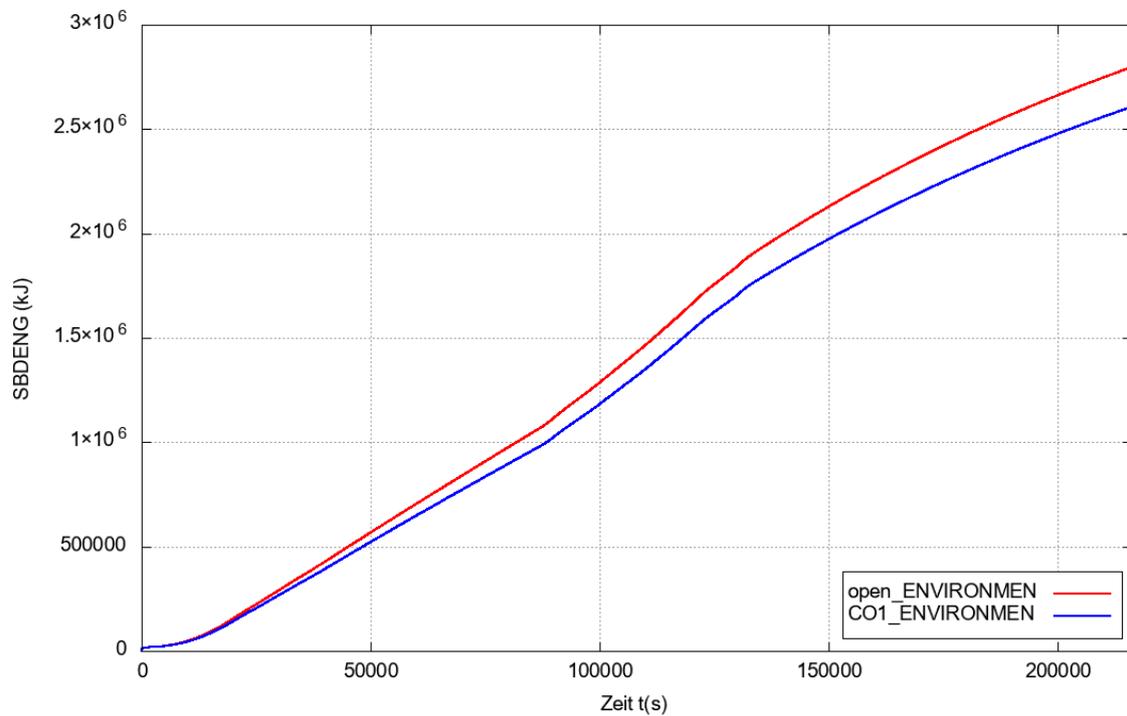


Abb. 2.51 THAI TH-27: Energieaustausch zur Umgebung

Zusätzliche Erkenntnisse lassen sich aus dem Vergleich weiterer Daten ableiten. So ist in den Abb. 2.52 und Abb. 2.53 die Energieänderung in den Wänden bzw. den Zonen dargestellt. Die Unterschiede der Energieänderung in den Strukturen und Zonen sind mit der Umstellung auf das neue CO1-Modell gering.

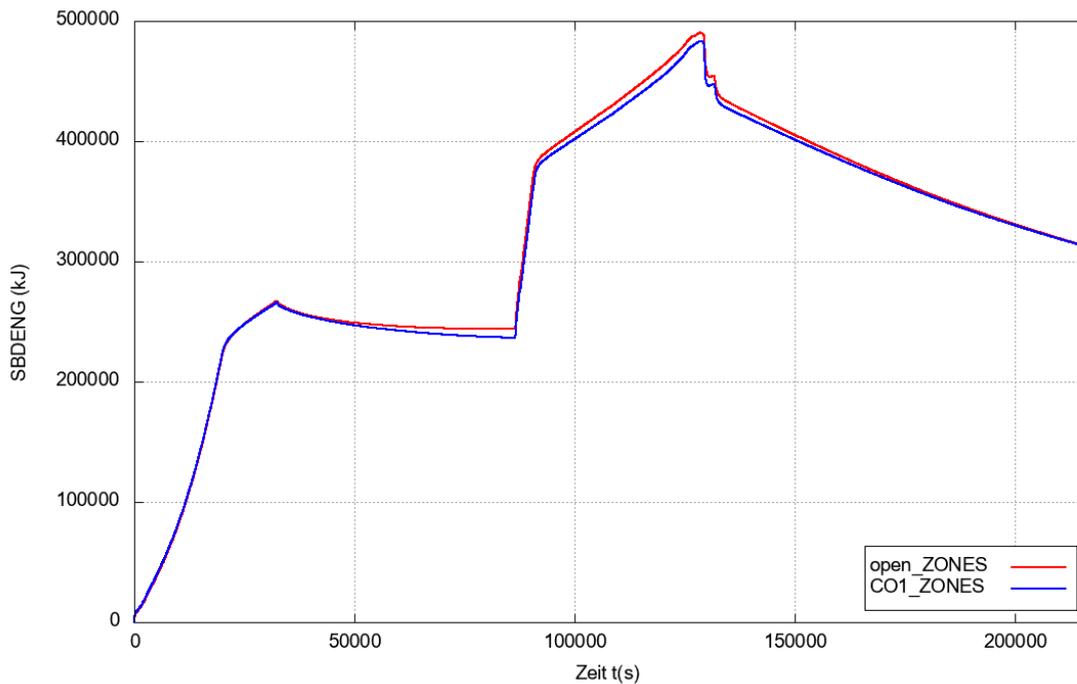


Abb. 2.52 THAI TH-27: Energieänderung in den Strukturen

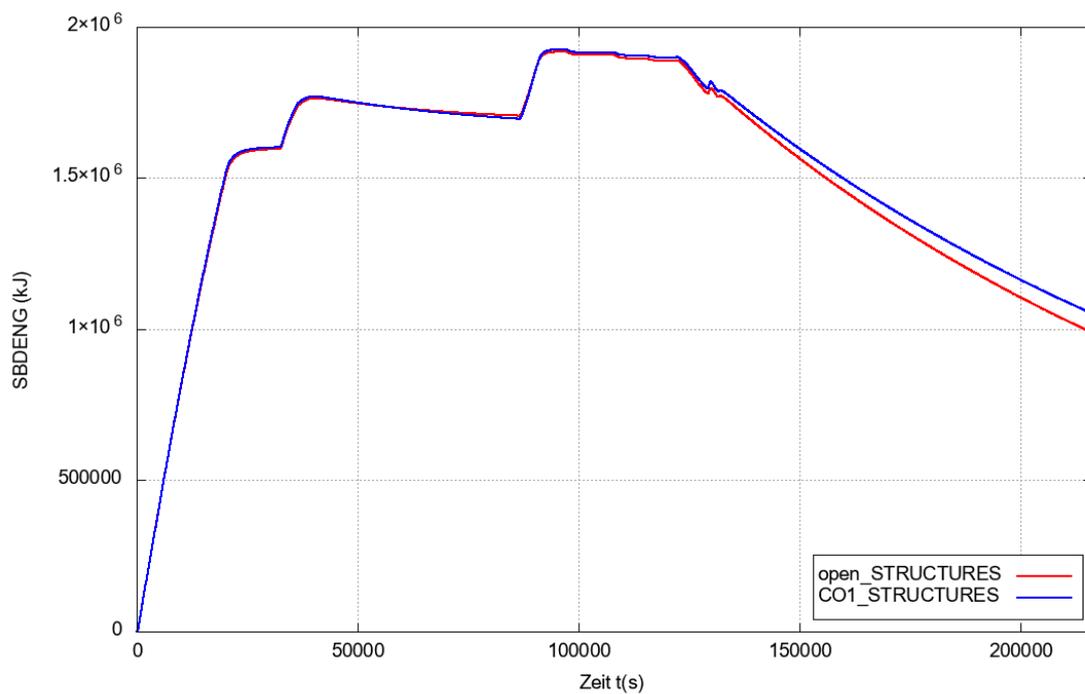


Abb. 2.53 THAI TH-27: Energieänderung in Zonen

In Abb. 2.54 und Abb. 2.55 ist die Änderung der integralen Dampf- und Wassermassen in den Zonen visualisiert. Bei Anwendung des neuen CO1-Modells würde in diesen Fall geringfügig weniger Dampf kondensieren, und dies auch erst in der späten Phase gegen

Ende des Experiments. Die globalen Effekte der Umstellung sind auch hier allgemein klein. Experimentelle Daten liegen zum Vergleich nicht vor.

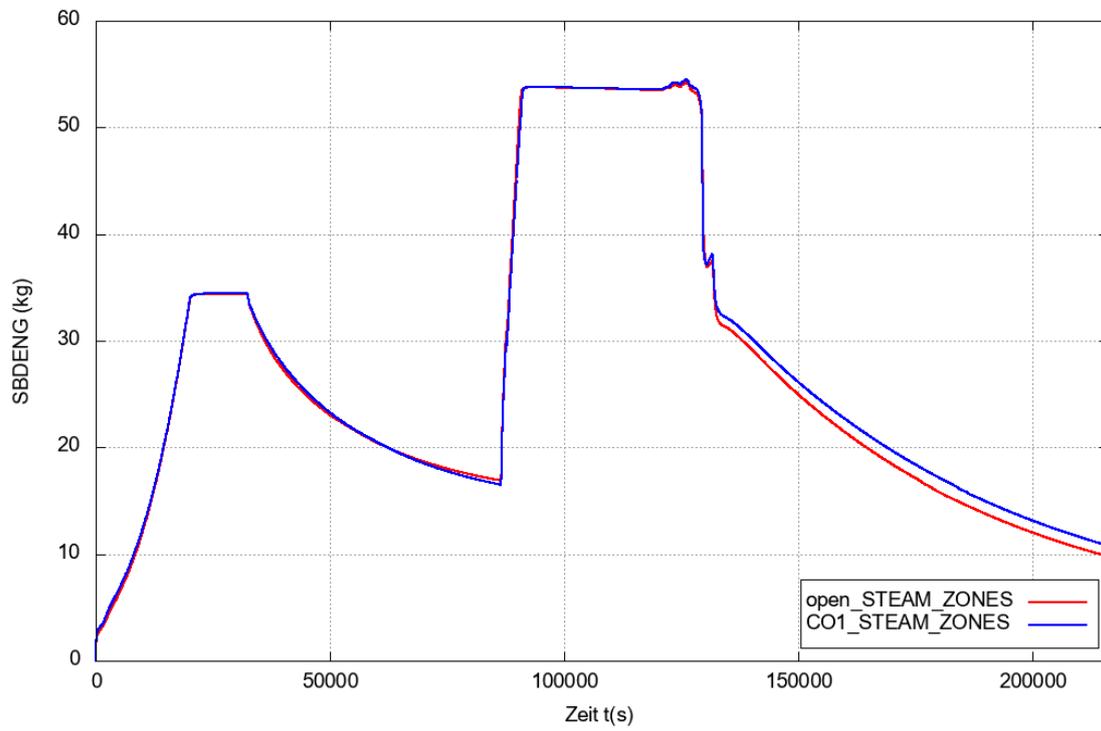


Abb. 2.54 THAI TH-27: Integrale Dampfmasse in den Zonen

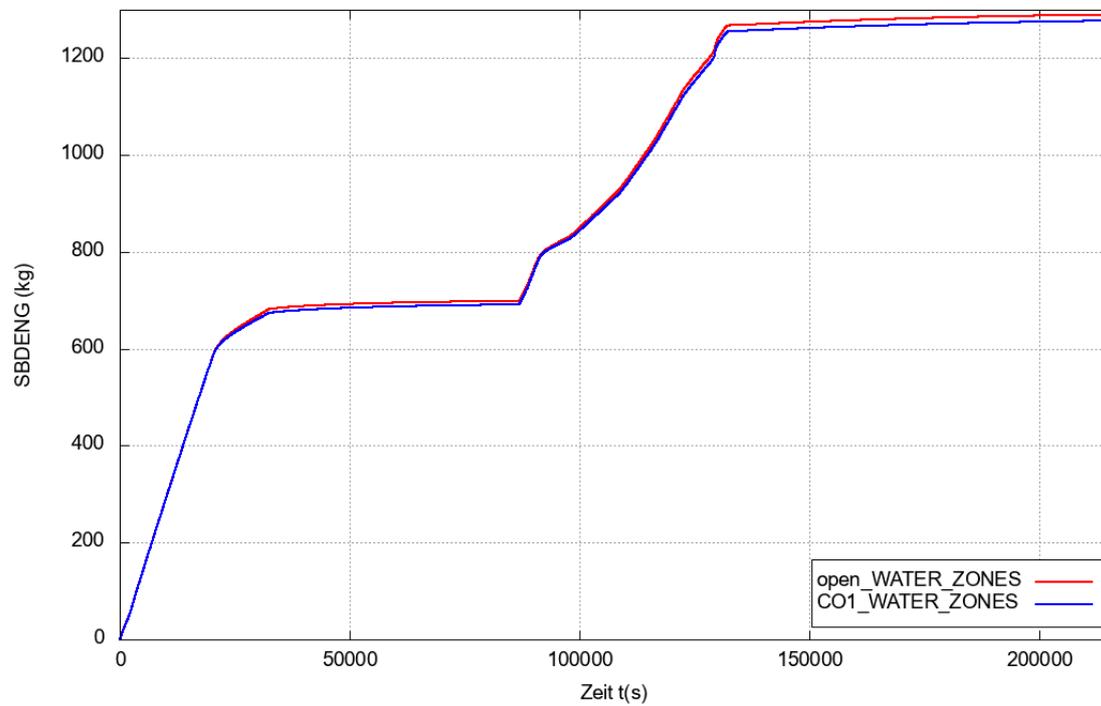


Abb. 2.55 THAI TH-27: Integrale Wassermasse in den Zonen

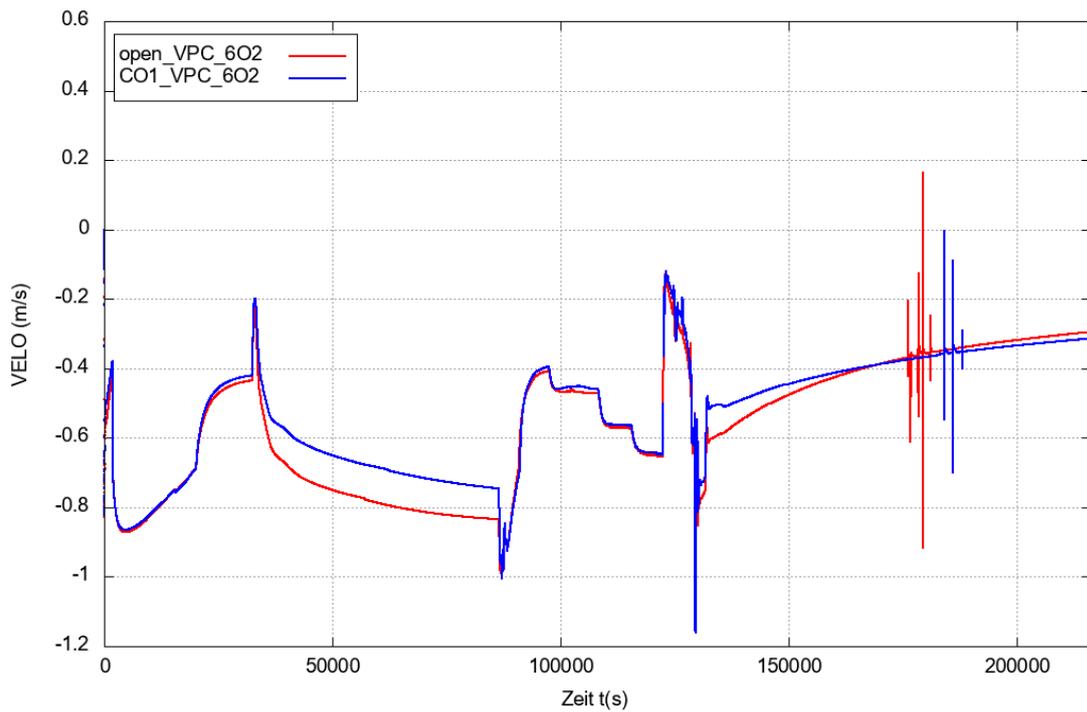
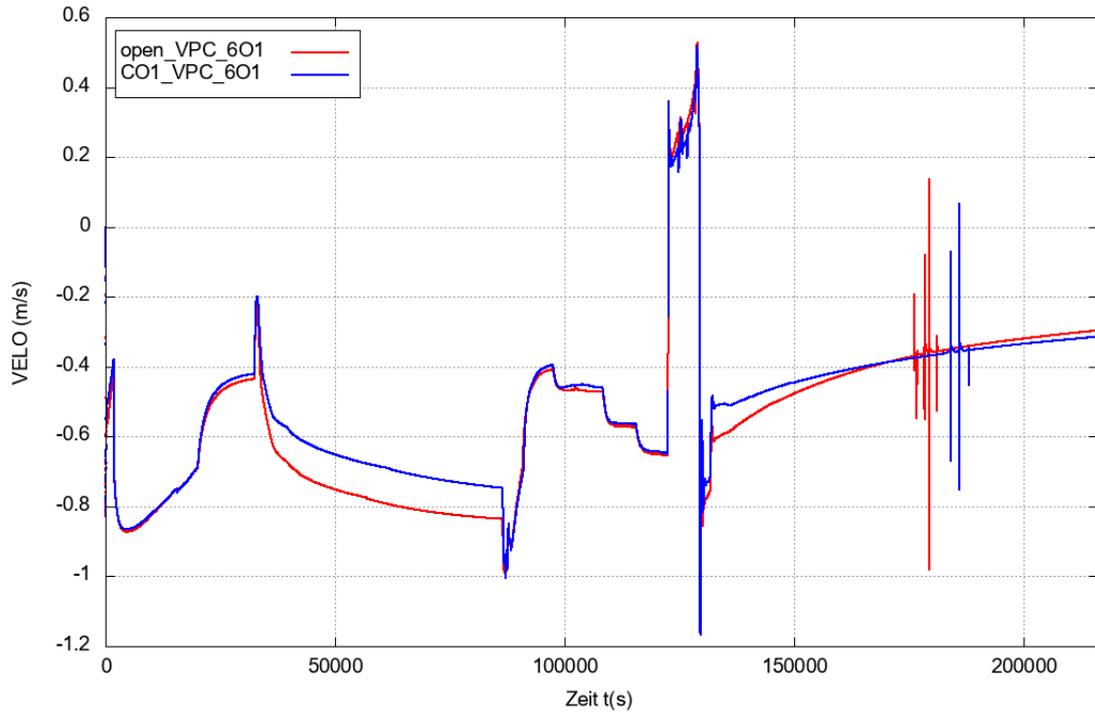


Abb. 2.56 THAI TH-27: Geschwindigkeiten in den Verbindungen VPC_601 und VPC_602 aus dem PAD in die obere Verbindungsleitung

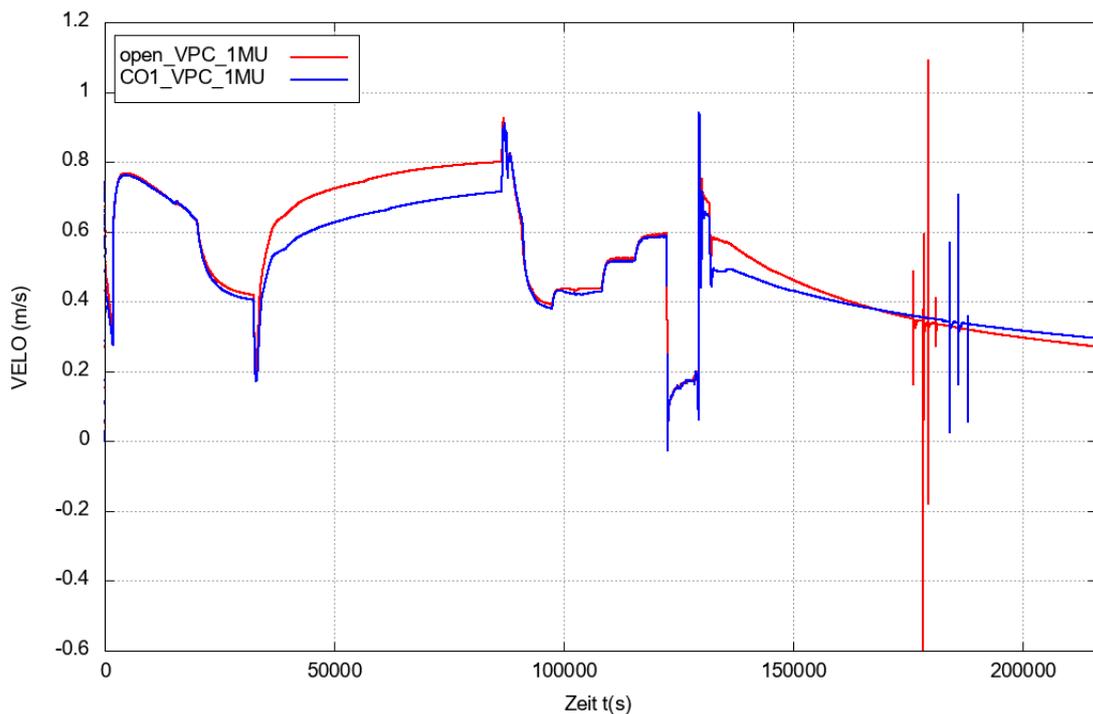
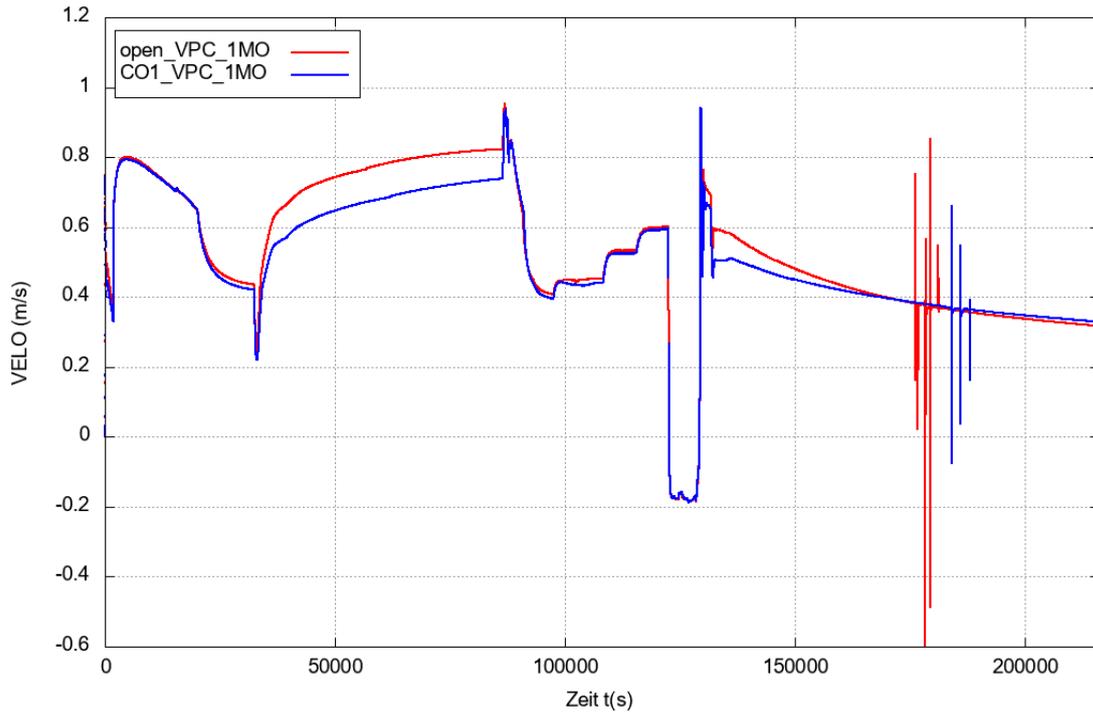


Abb. 2.57 THAI TH-27: Geschwindigkeiten in den Verbindungen VPC_1MO und VPC_1MU aus dem PAD in die untere Verbindungsleitung

Weitere Informationen können aus der Analyse lokaler Effekte abgeleitet werden. Eine deutlich sichtbare Änderung gibt es bei der Geschwindigkeitsverteilung im oberen bzw. unteren Verbindungsrohr beider Behälter in einzelnen Phasen des Experimentes. In

Abb. 2.56 sind die Geschwindigkeiten aus dem PAD ins obere Verbindungsrohr visualisiert und in Abb. 2.57 vom PAD ins untere Verbindungsrohr. Das CO1-Modell errechnet in einigen Phasen des Experiments jeweils eine niedrigere Geschwindigkeit in Richtung PAD (negative Geschwindigkeit) für das obere Rohr und im unteren Rohr in Richtung zum Verbindungsrohr (positive Geschwindigkeit). Langfristig ist das Verhalten mit den beiden Modellen jedoch sehr ähnlich. Auffällig ist noch, dass das CO1-Modell im Vergleich zum „alten“ Modell im Zeitraum um ca. 180000 s ein stabileres Verhalten zeigt. Die Geschwindigkeitsschwankungen sind in diesem Zeitraum teilweise wesentlich geringer, d. h. die Rechnung stabiler.

Fazit

Obwohl es Unterschiede zu den bisher verwendeten Wärmeübergangsmodellen (FRC, FOC, CON, COD) im Vergleich zum CO1-Modell gibt, sind diese im Allgemeinen klein und akzeptabel. Im Rahmen der Erstellung neuer Datensätze wird bei Verfügbarkeit entsprechender Anlagendaten die Verwendung des CO1-Modells empfohlen, da das Modell wesentlich konsistenter aufgebaut ist und die realen Gegebenheiten besser wiedergibt, auch wenn der Effekt verglichen mit bisherigen Modellen klein sein kann.

2.2.2 Validierung des Modells zum Auffüllen von Zonen mit Wasser (ATM_FULL)

Durch die Einführung eines neuen Verbindungstypen (ATM_FULL) ist es in COCOSYS möglich geworden, Zonen gänzlich mit Wasser zu füllen. Diese Möglichkeit ist insbesondere notwendig geworden, da Anwender physikalische Räume im Containment in mehrere oder viele kleinere Zonen einteilen, um detaillierte Ergebnisse über die Zustände zu bekommen. In den Zonen kann sich Wasser ansammeln und diese je nach gewählter Zonengröße komplett auffüllen. Bisher musste die Nodalisierung so gewählt werden, dass ein komplettes Auffüllen von Zonen mit Wasser vermieden wurde.

Zonen, die physikalische Räume weiter unterteilen, werden virtuelle Zonen genannt. Stratifikationseffekte (Temperatur) in Wasser gefüllten Räumen können bei bestimmten Abläufen eine Rolle spielen, z. B. bzgl. der Effektivität der Kondensationskammer als Druckabbausystem in einem Siedewasserreaktor im Falle eines schweren Störfalls bei lokaler Einspeisung von Dampf. Hier würde die Simulation der gesamten Kondensationskammer inklusive des Wasserpools mit nur einer Zone zu einer Überschätzung der Kondensation von Dampf führen, d. h. lokale Effekte würden unterdrückt.

Das Zonenfluten wurde anhand des experimentellen Aufbaus der „GES-Wanne“ sowie für eine DWR Anlage KONVOI bewertet. Dabei kam die neue Verbindung ATM_FULL zum Einsatz, durch die Gas und Wasser gleichzeitig strömen können.

2.2.2.1 Auffüllen von Zonen – Simulation am Beispiel der „GES-Wanne“

Die Abb. 2.58 zeigt eine schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus /GES 10/. Eine 5 m x 1,5 m x 1,5 m große Stahlwanne ist durch eine Zwischenwand in zwei Bereiche unterteilt. Die Zwischenwand ist 1,3 m hoch und besitzt einen 20 cm breiten Überlauf, der sich 1 m über dem Wannensboden an einer Seitenwand befindet (vgl. Abb. 2.59).

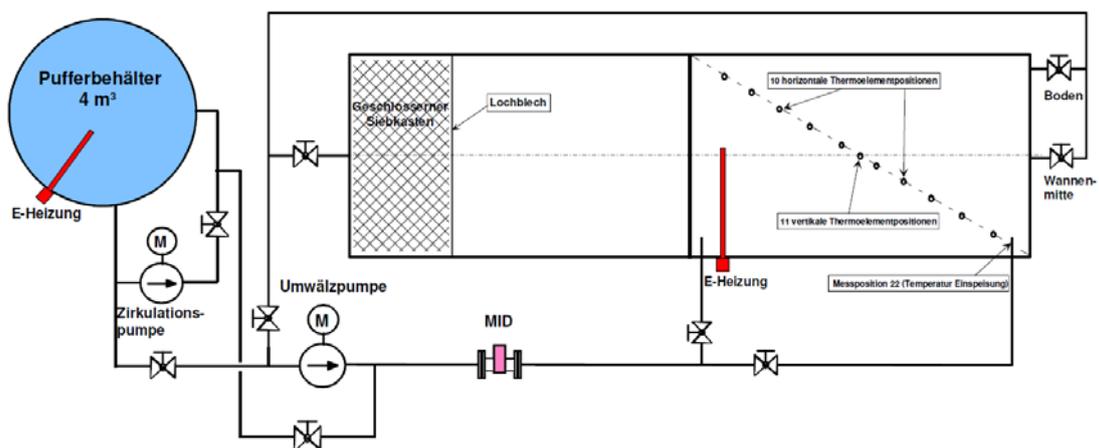


Abb. 2.58 Schematische Darstellung der Versuchsanlage GES-Wanne /GES 10/

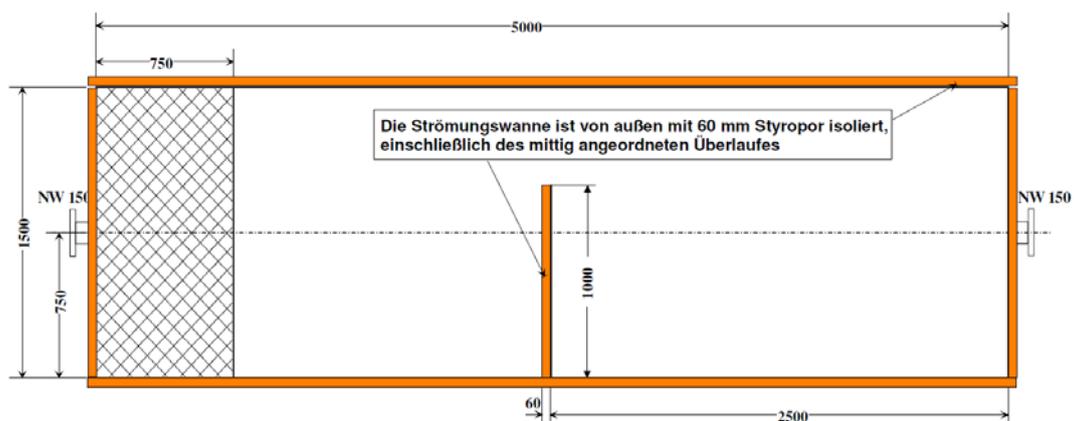


Abb. 2.59 Vertikaler Schnitt durch die Versuchsanlage GES-Wanne /GES 10/

Zur Validierung des Zonenflutens wurde ein COCOSYS-Datensatz zu der gezeigten Wannengeometrie erstellt. Die Abb. 2.60 und Abb. 2.61 zeigen eine schematische

Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung. Die rechte Hälfte der Wanne wurde in 18 Zonen unterteilt. Die Zonen haben eine Grundfläche von 0,4167 m². Die Höhe der unteren Zonen (l1 bis l9) beträgt 0,8 m, die der oberen Zonen (u1 bis u9) 0,3 m. Die Zone u9 ist über einen Überlauf mit der linken Wannenhälfte verbunden. Die linke Wannenhälfte wird im COCOSYS-Datensatz als eine Zone (ten) abgebildet. Die Grundfläche der Zone „ten“ beträgt 3,75 m² und sie besitzt ein Volumen von 3,75 m³.

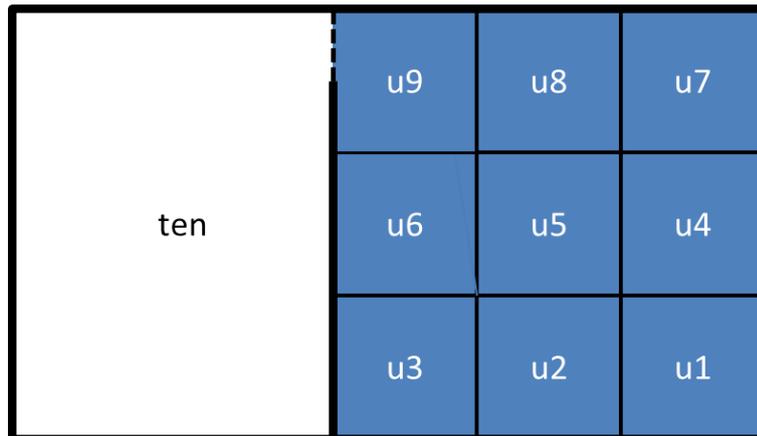


Abb. 2.60 Schematische Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Draufsicht) der Versuchsanlage GES-Wanne und Darstellung der oberen Zonenanordnung

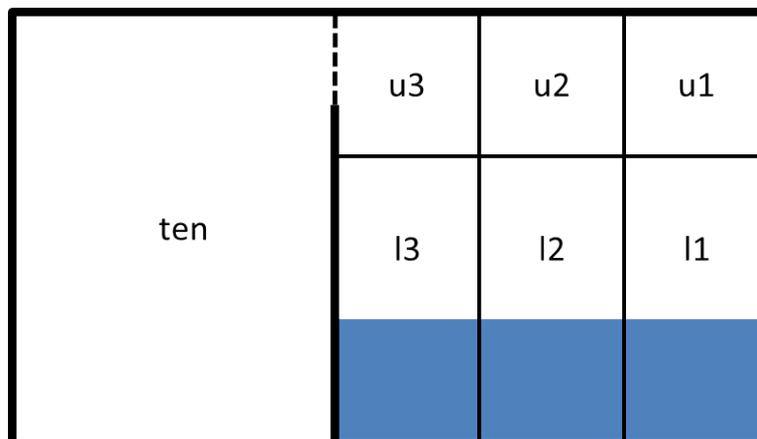


Abb. 2.61 Schematische Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Seitenansicht) der Versuchsanlage GES-Wanne

In den Darstellungen Abb. 2.60 und Abb. 2.61 ist eine Umgebungszone, die über atmosphärische Verbindungen mit den Zonen „u1“ bis „u9“ sowie der Zone „ten“ verbunden ist, nicht dargestellt. Die Zonen der Wanne sind untereinander durch die Verbindungen des neuen Verbindungstyps ATM_FULLL verbunden.

Für die vertikalen Verbindungen der oberen mit den unteren Zonen sind die Eingabedaten in Tab. 2.4 zusammengefasst. Der Wert 0,0 bei der „Höhe der Verbindung in Startzone“ gibt an, dass die Verbindung bei der Startzone an die Bodenfläche anschließt. Der Wert -0,0 bei der „Höhe der Verbindung in Zielzone“ gibt an, dass die Verbindung bei der Zielzone an die Deckenfläche anschließt.

Für die horizontalen Verbindungen der Zonen einer Ebene sind die Eingabedaten in Tab. 2.5 zusammengefasst. Durch die Angabe einer Verbindungsbreite wird festgelegt, dass es sich um eine Verbindung mit rechteckigem Querschnitt handelt. Wird diese Angabe nicht gemacht, wird von einer Verbindung mit kreisrundem Querschnitt ausgegangen. Die Eingabe „Höhe der Verbindung“ gibt die Höhe der Verbindungsunterkante an.

Tab. 2.4 Eingabedaten für vertikale Verbindungen

Startzone	Zielzone	Fläche	Länge der Verbindung	Höhe der Verbindung in Startzone	Höhe der Verbindung in Zielzone
		[m ²]	[m]	[m]	[m]
u1	l1	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u2	l2	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u3	l3	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u4	l4	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u5	l5	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u6	l6	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u7	l7	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u8	l8	0,4167	0,3	0,0	-0,0
u9	l9	0,4167	0,3	0,0	-0,0

Tab. 2.5 Eingabedaten für horizontale Verbindungen

Start- zone	Ziel- zone	Fläche	Länge der Verbindung	Breite der Verbindung	Höhe der Verbindung
		[m ²]	[m]	[m]	[m]
l1	l2	0,67	0,83	0,83	0,0
l2	l3	0,67	0,83	0,83	0,0
l4	l5	0,67	0,83	0,83	0,0
l5	l6	0,67	0,83	0,83	0,0
l7	l8	0,67	0,83	0,83	0,0
l8	l9	0,67	0,83	0,83	0,0
l1	l4	0,4	0,5	0,5	0,0
l4	l7	0,4	0,5	0,5	0,0
l2	l5	0,4	0,5	0,5	0,0
l5	l8	0,4	0,5	0,5	0,0
l3	l6	0,4	0,5	0,5	0,0
l6	l9	0,4	0,5	0,5	0,0
u1	u2	0,25	0,83	0,83	0,0
u2	u3	0,25	0,83	0,83	0,0
u4	u5	0,25	0,83	0,83	0,0
u5	u6	0,25	0,83	0,83	0,0
u7	u8	0,25	0,83	0,83	0,0
u8	u9	0,25	0,83	0,83	0,0
u1	u4	0,15	0,5	0,5	0,0
u4	u7	0,15	0,5	0,5	0,0
u2	u5	0,15	0,5	0,5	0,0
u5	u8	0,15	0,5	0,5	0,0
u3	u6	0,15	0,5	0,5	0,0
u6	u9	0,15	0,5	0,5	0,0

2.2.2.2 Simulation des Auffüllens eines Behälters am Beispiel der „GES-Wanne“

Zur Validierung des Zonenflutens wurde die Rechnung mit folgenden Anfangsbedingungen initialisiert. Die unteren Zonen „l1“ bis „l9“ sind zur Hälfte mit 10 °C kaltem Wasser gefüllt. Die übrigen Zonen enthalten nur Luft. Zum Zeitpunkt $t = -2000$ s wird in die Zone „u1“ 10 °C kaltes Wasser eingespeist. Die Einspeiserate beträgt 1,25 l/s. In Abb. 2.62 ist

die sich daraus ergebende Änderung der Wassermasse in den Zonen „l1“ bis „l9“ zu sehen. Bis zum Zeitpunkt $t = -800$ s steigt die Wassermasse linear an und bleibt von da an konstant bei 333,36 kg. Ebenfalls ab $t = -800$ s ist das Gasvolumen in den Zonen „l1“ bis „l9“ auf null abgesunken und in den Zonen „u1“ bis „u9“ steigt die Wassermasse danach an. Die unteren Zonen sind folglich vollständig mit Wasser gefüllt und das weiter eingespeiste Wasser befüllt die oberen Zonen.

Die Rechnung zeigt, dass das neue Modell plausible Werte liefert. Durch das Unterteilen eines physikalischen Raumes in mehrere virtuelle Zonen kann es bei der Berechnung des Zonenflutens mit COCOSYS aber auch zu Instabilitäten kommen, so dass die Zeitschrittweite bis auf $0,1E-06$ absinkt oder die Rechnung ganz abgebrochen wird. Das liegt oft daran, dass aufgrund groß gewählter Verbindungen zwischen den virtuellen Zonen und der Vielzahl der miteinander verbundenen Zonen kleinste Druckunterschiede, Dichteunterschiede oder Füllstandunterschiede zu verstärktem Wassertransport in den Verbindungen führen. Es kann dadurch zu sehr schnellen Änderungen der Strömungsrichtung kommen, was zu den niedrigen Zeitschrittweiten führt. Dies kann gedämpft werden, indem Widerstandsbeiwerte in den Verbindungen künstlich erhöht werden.

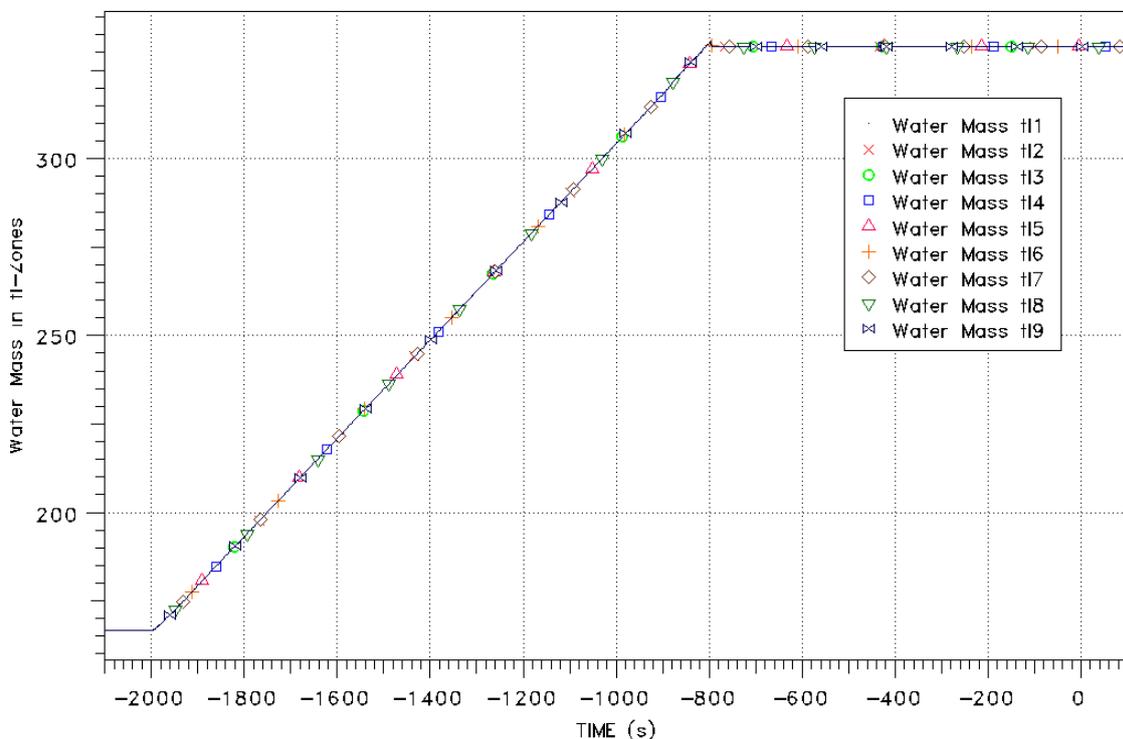


Abb. 2.62 GES-Wanne: Wassermasse in den unteren Zonen „l1“ bis „l9“

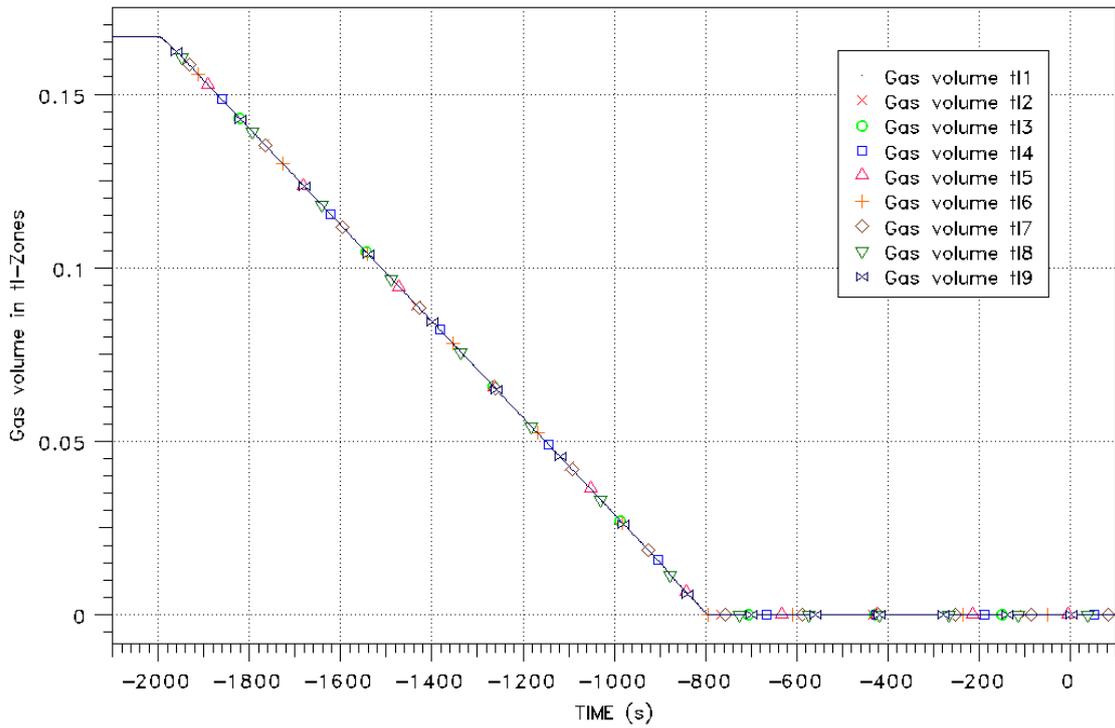


Abb. 2.63 GES-Wanne: Gasvolumen in den unteren Zonen „l1“ bis „l9“

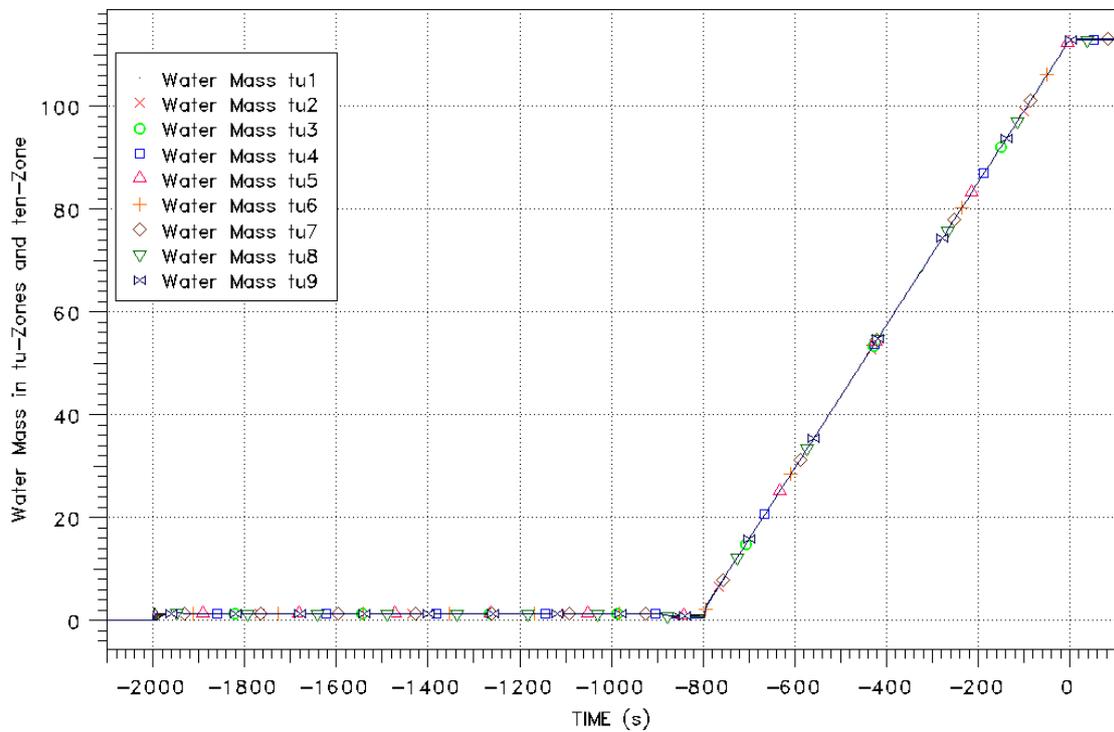


Abb. 2.64 GES-Wanne: Wassermasse in den oberen Zonen „u1“ bis „u9“

2.2.2.3 Simulation einer Temperaturstratifikation in gefluteten Zonen durch Beheizen am Beispiel der „GES-Wanne“

Wird ein physikalischer Raum in mehrere virtuelle Zonen in horizontaler und vertikaler Richtung unterteilt und werden diese mit Wasser gefüllt, wie im oben dargestellten Beispiel beschrieben, ist es möglich, Temperaturstratifikationen zu simulieren. Dazu wird nach dem Füllen der Wanne angenommen, dass die obere Zone „u1“ geheizt wird. Im Zeitraum von $t = 421$ s bis $t = 3421$ s wird das Wasser in der einzelnen Zone mit 100 kW Wärmeleistung aufgeheizt. Durch Wärmetransport im Wasser und sich bildende Konvektionsströmungen bildet sich eine heiße Wasserschicht auf einer kalten Wasserschicht aus.

In Abb. 2.65 sind die zeitlichen Temperaturverläufe der Rechnung dargestellt. In die Zone „u1“ wurde dabei über den angegebenen Zeitraum die Wärme eingespeist. Es ist deutlich zu sehen, dass sich das Wasser in den oberen Zonen durch Wärmetransport und einsetzende Konvektionen gleichmäßig erwärmt, wobei die Zone u1 stets die höchste Temperatur hat. Die unteren Zonen bleiben deutlich kälter, heizen sich aber auch langsam auf.

Hier tritt bei dem Lumped-Parameter-Ansatz in COCOSYS folgende Schwierigkeit auf. Das Wasser in der beheizten oberen Zone „u1“ wird aufgeheizt, dehnt sich zunächst lokal in dieser Zone aus, und der Füllstand in dieser Zone steigt an. Durch die horizontale Verbindung zunächst zu „u2“ und „u4“ strömt nun Wasser ab, um die „Füllstandsunterschiede“ zwischen den benachbarten Zonen auszugleichen. Dadurch steigt der Füllstand in diesen Zonen an und Wasser strömt weiter in die angrenzenden Zonen. Mit dem Temperaturanstieg in den oberen Zonen geht auch eine Reduzierung des statischen Drucks auf die darunter liegende(n) Zone(n) einher. Diese Reduktion des Drucks lässt kaltes Wasser aus den unteren Zonen nach oben strömen und dadurch wird eine Temperaturstratifikation behindert. Die Strömungen zwischen den Zonen fluktuieren und führen zu der berechneten Temperaturstratifikation, deren zeitliche und quantitative Ausprägung von der Stärke der Konvektionen abhängt.

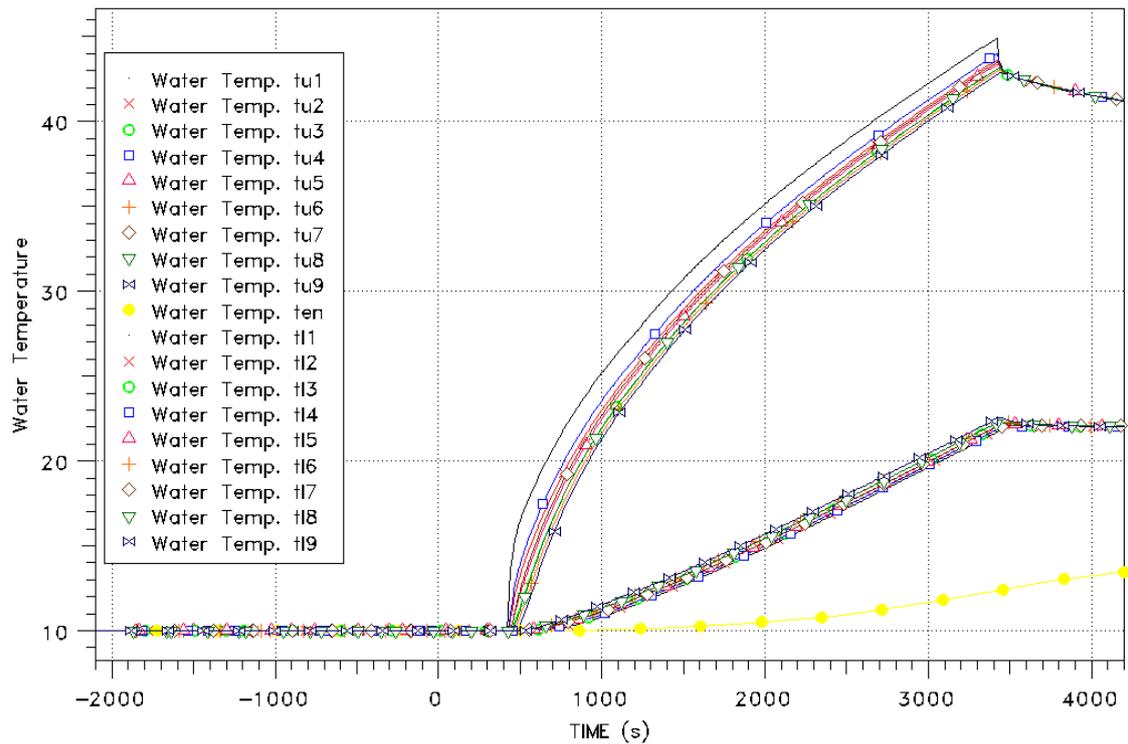


Abb. 2.65 GES-Wanne: Temperaturentwicklung in oberen (tux) und unteren (lux) Zonen bei Beheizung einer oberen Zone

In einer weitere Testrechnung wurde versucht, den Einfluss der Konvektionsströmungen zu begrenzen, um die Temperaturstratifikation zu verstärken. Dabei wurden insbesondere die horizontalen Verbindungen variiert und der Wasseraustausch mit benachbarten Zonen begrenzt, Wärmetransport findet dennoch statt. In Abb. 2.66 sind die zeitlichen Temperaturverläufe dieser Rechnung mit sonst gleichen Randbedingungen dargestellt. Deutlich zu sehen ist jetzt ein quasi linearer Anstieg der Temperatur in den oberen Zonen und ein deutlich langsamerer Temperaturanstieg der unteren Zonen. Welche der beiden Rechnungen realistischer ist, kann ohne einen Vergleich mit experimentellen Werten nicht festgestellt werden.

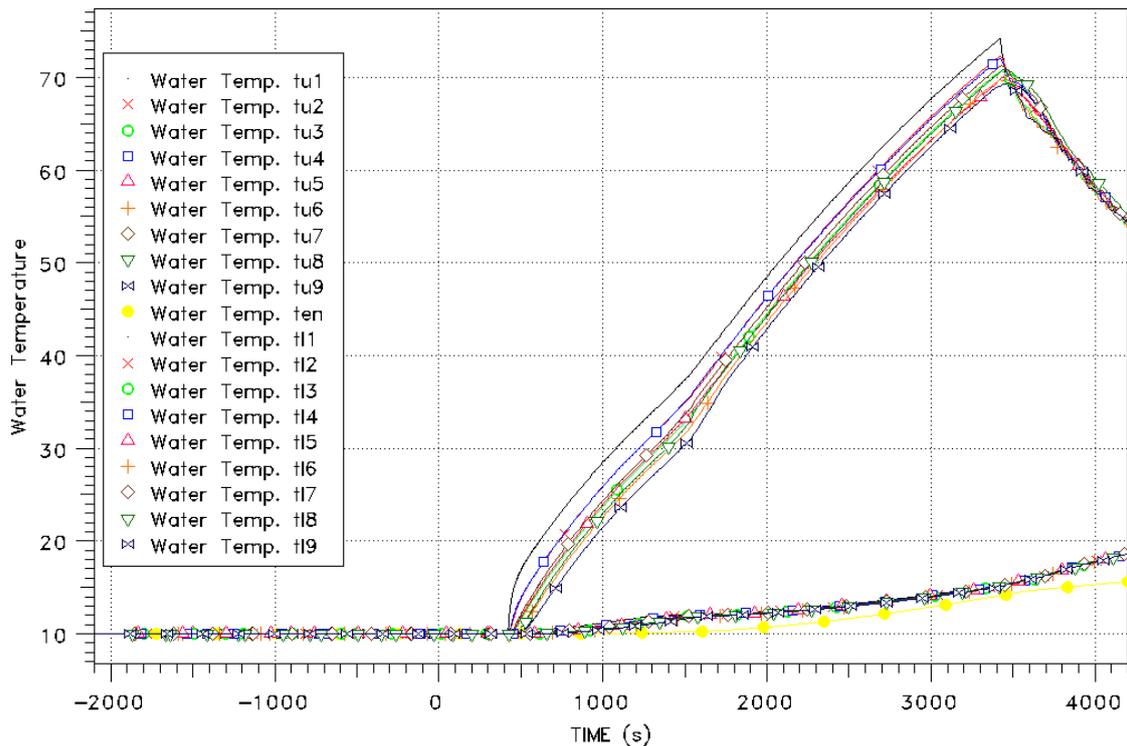


Abb. 2.66 GES-Wanne: Temperaturentwicklung in oberen (tux) und unteren (lux) Zonen bei Beheizung einer oberen Zone und begrenzter Konvektion

2.2.2.4 Simulation der Temperaturstratifikation durch Einspeisen von heißem Wasser am Beispiel eines Experimentes an der „GES-Wanne“

Die prinzipielle Möglichkeit, Temperaturschichtungen in gefluteten Zonen mit COCOSYS mit dem neuen Modell zu berechnen, wurde aufgezeigt. Anhand der Nachrechnung eines Experimentes an der „GES-Wanne“ /GES 10/ wurde dies weitergehend untersucht, indem jetzt warmes Wasser in die mit kaltem Wasser gefüllte Wanne oben eingespeist wurde.

Der Versuchsaufbau ist in Abb. 2.58 (S. 65) beschrieben. Für das Experiment wurde die rechte Hälfte der Stahlwanne mit 10 °C kaltem Wasser bis zum Überlauf gefüllt. Anschließend wurde in die Wannenecke diagonal gegenüber dem Überlauf und etwa 5 cm unterhalb der Wasseroberfläche 70 °C warmes Wasser eingespeist. Die Einspeiserate betrug ca. 1 l/s und die Einspeisedauer ca. 3600 s. Um ein vertikales Temperaturprofil messen zu können, wurden in der Mitte der rechten Wannenhälfte Temperaturmessfühler installiert. Die Höhen der Messfühler sind in Tab. 2.6 zusammengefasst.

Tab. 2.6 Höhen der Temperaturmessfühler in der GES-Wanne und Zuordnung zu COCOSYS-Zonen

Messfühler	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Höhe [m]	0,05	0,15	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95
Ebene in COCOSYS	Untere Zonen „l“								Obere Zonen „u“	

Die COCOSYS-Rechnung wurde mit dem oben beschriebenen Datensatz durchgeführt. Das warme Wasser wurde in die Zone „u1“ eingespeist und kann aus Zone „u9“ in den linken Bereich des Behälters überlaufen. Um die experimentell gemessenen Temperaturen mit den Rechenergebnissen vergleichen zu können, wurden die Temperaturen der Messfühler 1 bis 8 gemittelt, da die unteren Zonen im COCOSYS-Datensatz eine Höhe von 0,8 m aufweisen und somit die berechnete Wassertemperatur auch als Durchschnittstemperatur über diese Höhe verstanden werden kann. Entsprechend wurde für die Messfühler 9 und 10 verfahren, um die gemessenen Temperaturen mit den Rechenergebnissen vergleichen zu können.

Abb. 2.67 zeigt den Vergleich der Rechenergebnisse mit den experimentellen Daten. Das eingespeiste warme Wasser führt zu einem signifikanten Temperaturanstieg in den oberen Zonen, aber auch zu einem deutlichen Temperaturanstieg in den unteren Zonen. Man sieht, dass der Temperaturverlauf für die unteren Zonen sehr gut mit den gemittelten experimentellen Daten übereinstimmt. In den oberen Zonen wird während der Einspeisung die Wassertemperatur überschätzt. Nach Ende der Einspeisung (t = 4020 s) ist ein Abfall der Wassertemperatur in den oberen Zonen und ein Anstieg der Wassertemperatur in den unteren Zonen zu sehen, der stärker ausfällt, als im Experiment.

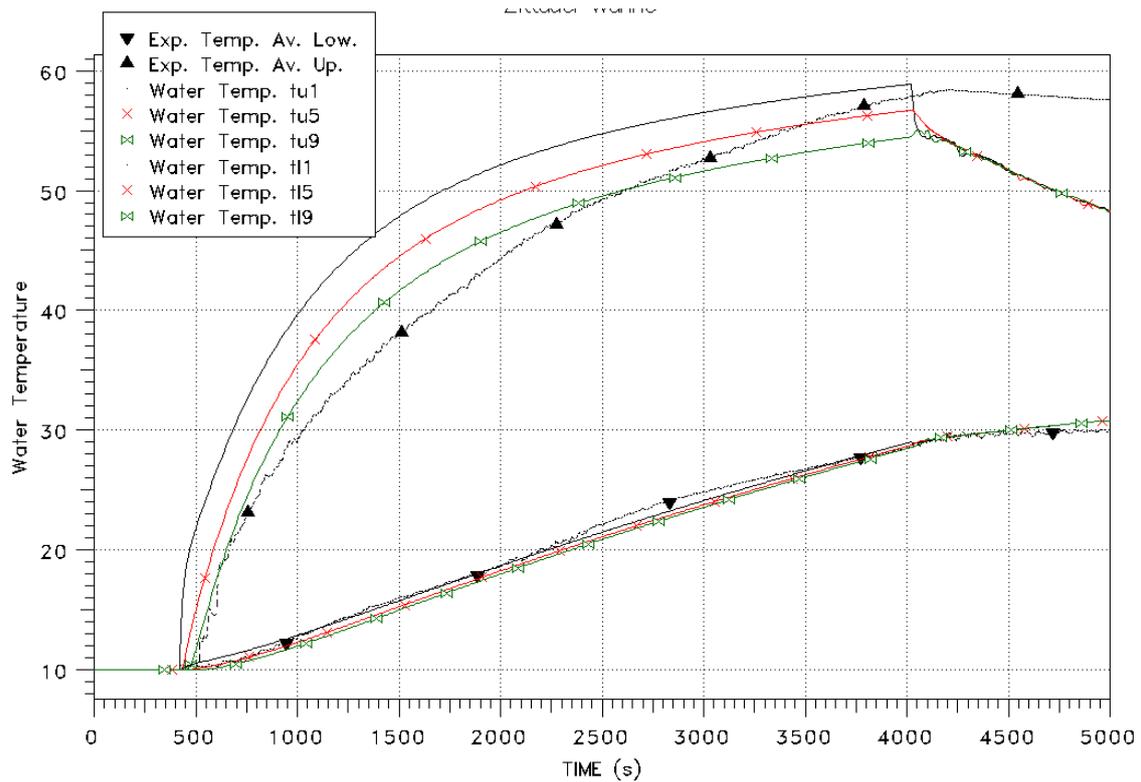


Abb. 2.67 GES-Wanne: gemittelttes vertikales Temperaturprofil in Experiment und COCOSYS-Rechnung

In Abb. 2.68 ist die Durchflussrate in den Verbindungen zwischen den oberen und unteren Zonen dargestellt. Es fällt auf, dass in den Zeiträumen vor 500 s und nach ca. 4000 s, in denen keine Warmwasserseinspeisung stattfindet, die Strömung in den Verbindungen oszilliert, d. h. die Strömungsrichtung rasch wechselt. Dies ist auf die genannten Effekte der Lumped-Parameter-Modellierung zurückzuführen und führt zu der rascheren Temperaturangleichung zwischen oberen und unteren Zonen in der Rechnung gegenüber dem Experiment. Prinzipiell wird aber das Ergebnis des Experiments mit den Möglichkeiten des Codes gut wiedergegeben.

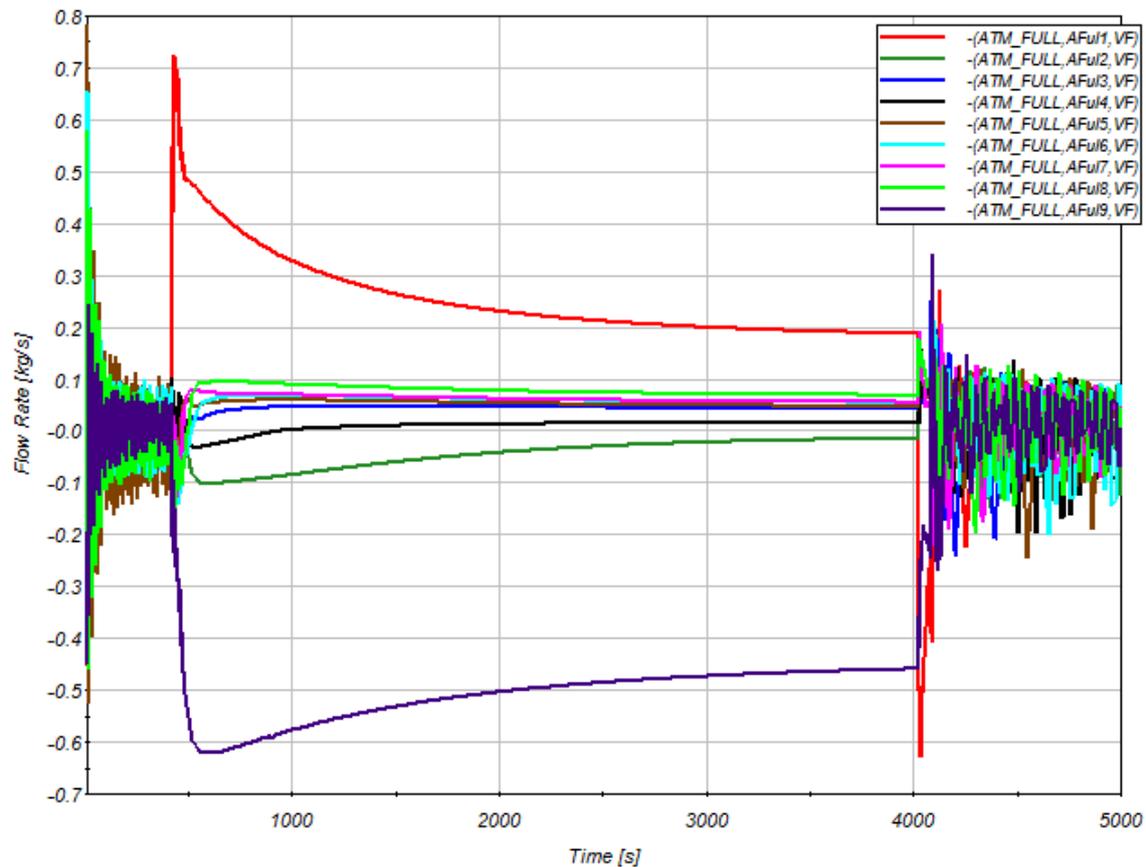


Abb. 2.68 GES-Wanne: berechneter Wassertransport durch vertikale Verbindungen in COCOSYS

Fazit der neuen Modelloption ATM_FULL

Die Option, COCOSYS-Zonen komplett mit Wasser aufzufüllen in Kombination mit dem neuen Verbindungstyp ATM_FULL, ermöglicht es, derartige Vorgänge näherungsweise zu beschreiben und dabei mit nur einem Verbindungstyp Gas- und Flüssigkeitsaustausch zwischen benachbarten oder übereinander angeordneten Zonen, die teilweise oder vollständig mit Wasser gefüllt sind, zu berechnen. Dies wurde erfolgreich an Beispielrechnungen mit dem experimentellen Aufbau der „GES-Wanne“ demonstriert. Die Definition der Verbindungen zwischen übereinander angeordneten Zonen als auch zwischen benachbarten Zonen als vertikale oder horizontale Verbindungen beeinflusst dabei die Berechnung der Temperaturschichtung (Stratifikation) und ihrer zeitlichen Ausprägung. Dies ist bei Anwendung des Modells zu beachten. Das Auffüllen übereinander angeordneter Zonen funktionierte gut.

2.2.3 Interaktion zwischen H₂-Verbrennungsvorgängen und Sprühstrahlen – Validierung des Entrainmentmodells

Schwere Störfälle in Leichtwasserreaktoren gehen zumeist mit einer massiven Freisetzung von Wasserstoff aus dem Reaktorkreislauf in den SB einher. Wasserstoffverbrennungen im SB sind möglich und erzeugen plötzliche kurzzeitige Druckanstiege. Diese dynamischen Belastungen stellen eine mögliche Gefährdung für die Sicherheitsbehälter- und Einbautenintegrität dar. Voraussetzung für eine Wasserstoffverbrennung ist ein zündfähiges Gasgemisch, welches durch Kondensations- und Verwirbelungseffekte beeinflusst werden kann, wie sie beim Einsatz von Sprühsystemen entstehen /RIS 15/ sowie das Vorhandensein einer Zündquelle. In COCOSYS wird die von Sprühtropfen bzw. -strahlen verursachte Atmosphärenbewegung nicht a priori simuliert, d. h. trotz laufendem Sprühsystem findet keine Gasbewegung innerhalb des Sprühkegels statt. Eine Möglichkeit zur Berücksichtigung der Atmosphärenbewegung ist bisher die Implementierung eines Gebläses in den COCOSYS-Datensatz /KLE 16/. Ab der COCOSYS-Version 2.4v4 ist das Sprühmodell in COCOSYS um Entrainment-Modelle zur Simulation der von Sprühtropfen bzw. -strahlen verursachten Atmosphärenbewegung erweitert worden.

Zur Untersuchung der in COCOSYS zur Verfügung stehenden Entrainment-Modelle wurde der THAI-Versuch HD-30 unter Verwendung der implementierten Entrainment-Modelle nachgerechnet. Die Rechnungen zielten weiterhin darauf ab, die Wechselwirkungen zwischen der H₂-Verbrennung und dem Sprühen unter Verwendung eines Entrainment-Modells zu untersuchen.

2.2.3.1 Experiment THAI HD-30

Beim THAI-Versuch HD-30 wurde im unteren Bereich des THAI-Behälters (siehe Abb. 2.69) das Wasserstoffgemisch gezündet und gleichzeitig das Sprühsystem aktiviert. Die Ausbreitung der Flammenfront wurde mit schnellen Thermoelementen gemessen. Die Sprühdüse war in einer Höhe von 7,4 m angebracht. Der Sprühkegel hatte einen Winkel von 30°. Tab. 2.7 zeigt die nominalen Start- und Randbedingungen des Versuchs. Die tatsächlichen Werte wichen geringfügig ab /KLE 16/.

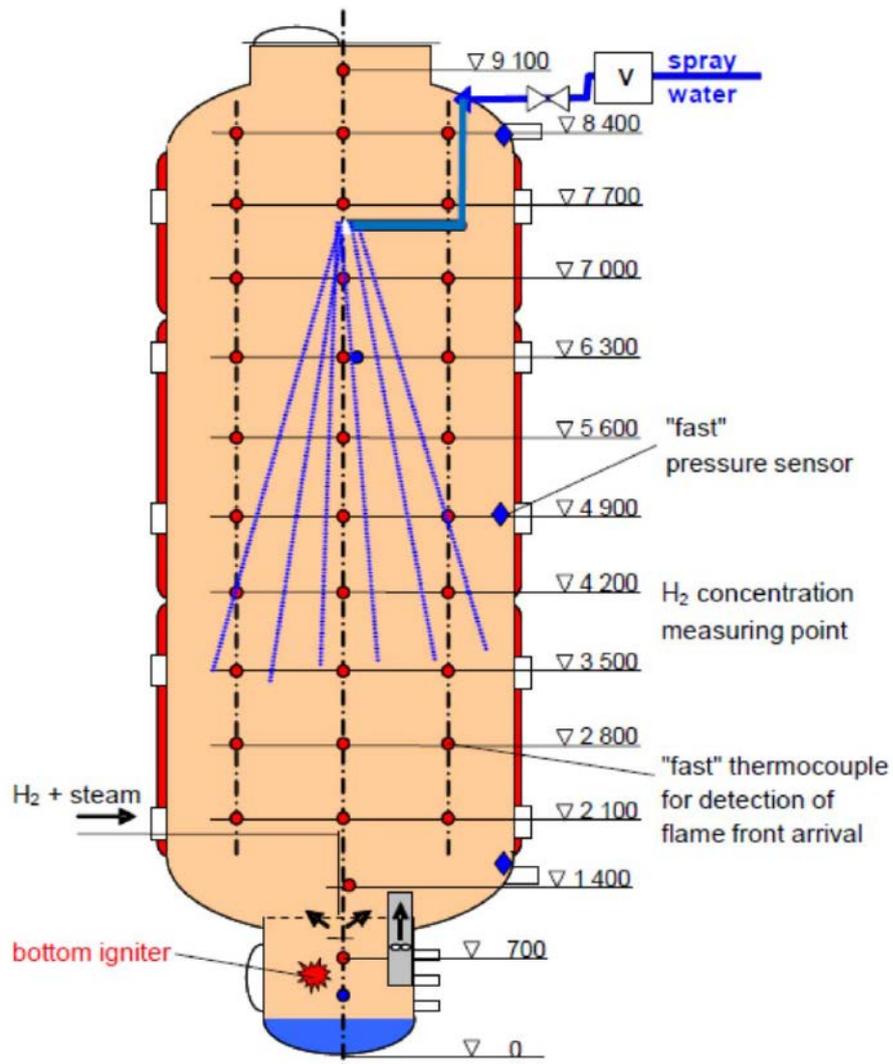


Abb. 2.69 Konfiguration der THAI, HD-Versuche mit Sprühen

Tab. 2.7 THAI HD-30 Startbedingungen

	Druck	Temperatur	Dampf	H ₂ -Anteil	Sprührate	Sprühtemperatur
	(bar)	(°C)	(vol-%)	(vol-%)	(kg/s)	(°C)
HD-30	1,5	20	0	10	1	20

2.2.3.2 Verwendete COCOSYS-Datensätze

Die Abb. 2.70 zeigt die verwendete Nodalisierung bei den Rechnungen ohne und mit Entrainment-Modell. Die geodätische Höhe der Zonenmittelpunkte entspricht den Positionen der THAI-Versuchsanlage /GRS 15/.

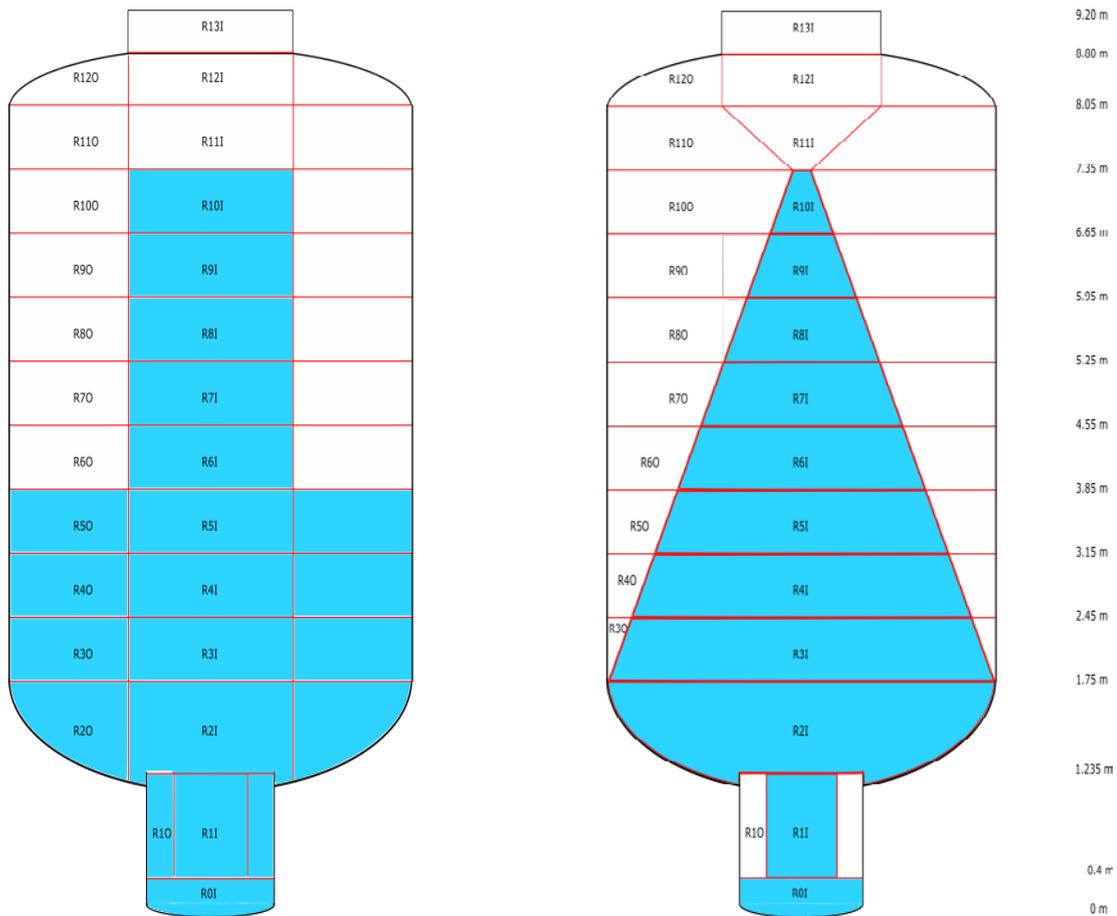


Abb. 2.70 COCOSYS-Nodalisation für Rechnungen ohne Entrainment-Modell (links) und mit Entrainment-Modell (rechts)

Zur Durchführung von Rechnungen mit Entrainment-Modell ist eine Modifikation der ursprünglichen Nodalisation (Abb. 2.70 links) notwendig. Die angepasste Nodalisation (Abb. 2.70 rechts) spiegelt dann die Geometrie des Sprühkegels wider. Im Vergleich zur ursprünglichen Nodalisation ist die Zone R2O entfallen, da der Sprühkegel diese äußere Zone überdeckt. Im unteren Bereich ist die Zone R1O erhalten geblieben. Sie ist notwendig, um eine Gaszirkulation im Bereich der Zündquelle simulieren zu können. Die Zone R1O kann nicht in den Sprühpfad aufgenommen werden, da bei aktiviertem Entrainment-Modell jede Zonenverbindung eines Sprühpfads nur einmal vorkommen darf. Bei einer Berücksichtigung von R1O kämen die Verbindungen zwischen den Zonen R10I bis R2I sowohl in dem in Abb. 2.70 gezeigten Sprühpfad als auch in dem Sprühpfad durch die Zone R1O vor. Es wurde das IVO-Sprühmodell verwendet und der mittlere Anfangsdurchmesser der Sprühtröpfchen wurde mit $6 \cdot 10^{-4}$ m angenommen.

Die Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen einer H₂-Verbrennung und einem Sprühsystem wurde in drei Schritten analysiert. Im ersten Schritt wurde der für die Nutzung eines Entrainment-Modells modifizierte Datensatz für eine Rechnung genutzt, bei dem keine H₂-Verbrennung simuliert wurde.

2.2.3.3 Simulation des Experimentes HD-30 mit Sprühsystems ohne H₂-Verbrennung

Bei den Rechnungen ohne Verbrennung sollte der Einfluss der Veränderung der Nodalisierung untersucht werden. Die Abb. 2.71 und Abb. 2.72 zeigen, dass Druck- und Temperaturverlauf durch die Änderung der Nodalisierung nicht beeinflusst werden.

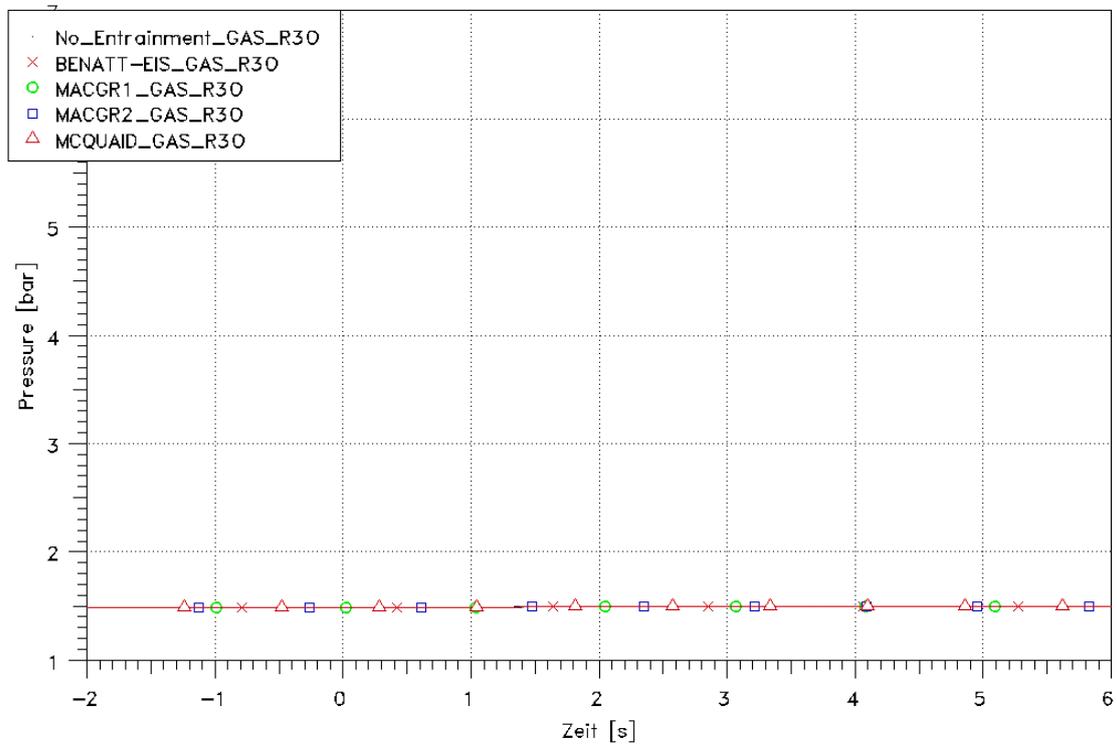


Abb. 2.71 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Druckverlauf im THAI-Behälter

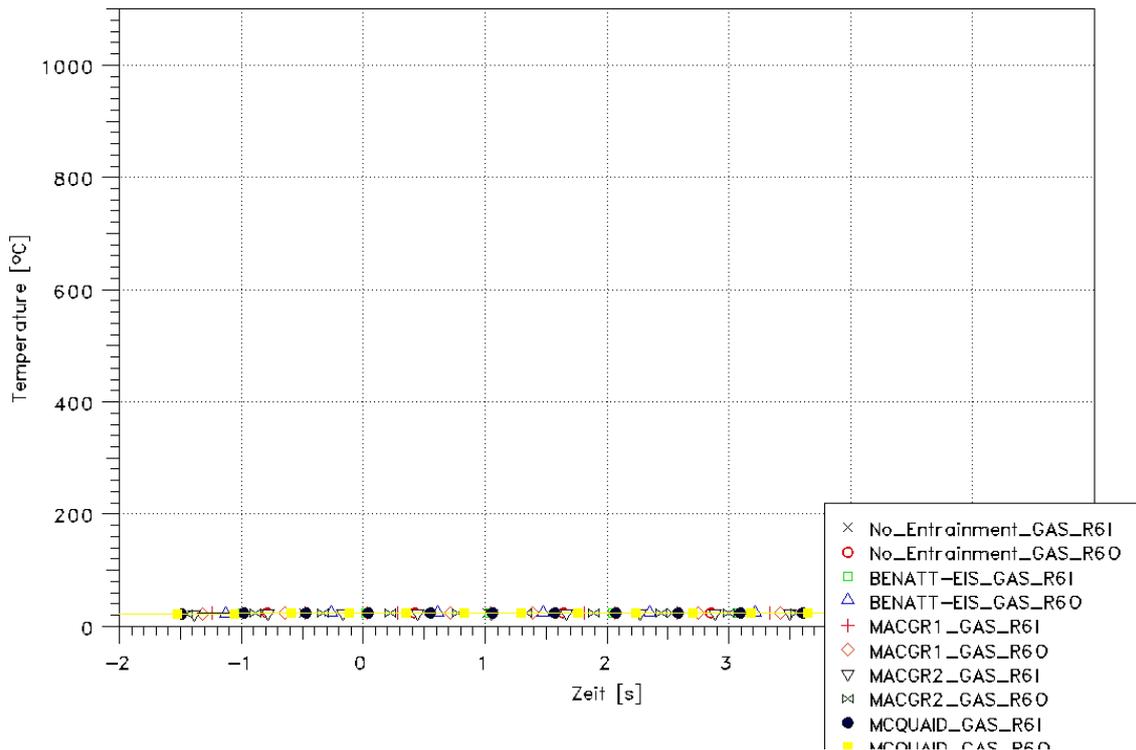


Abb. 2.72 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O

In Abb. 2.73 bis Abb. 2.76 sind die errechneten Gasgeschwindigkeiten (VELO) innerhalb des Sprühstrahles von oben nach unten in den Verbindungen zwischen den Zonen R9I – R10I, R7I – R8I, R5I – R6I sowie R3I – R4I für die Rechnungen ohne Entrainment-Modell (Nodalisierung wie in Abb. 2.70 links) und für die Rechnungen mit den Entrainment-Modellen „BENATT-EIS“, „MACGR1“, „MACGR2“ und „MCQUAID“ (Nodalisierung jeweils wie in Abb. 2.70 rechts) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei deaktiviertem Entrainment-Modell durch keine der vertikalen Verbindungen innerhalb des Sprühkegels Gas strömt. Bei aktiviertem Entrainment-Modell nimmt die Gasgeschwindigkeit mit zunehmender Entfernung vom Sprühkopf (Zone R10I) ab, da die Strömungsfläche zunimmt und gleichzeitig Sprühtropfen auch verdampfen können. Die errechnete Gasgeschwindigkeit ist bei allen Entrainment-Modellen in der ersten Verbindung R10I – R9I unterhalb des Sprühkopfes mit 210 m/s deutlich höher, als z. B. in der weiter abwärts liegenden Verbindung zwischen R8I – R7I. Diese Geschwindigkeit wird bei allen Entrainment-Modellen instantan nach dem Einschalten des Sprühsystems erreicht und bleibt bis zum Ende der Simulation konstant. Die Ursachen für die sehr hohen Gasgeschwindigkeiten können in dem kleinen Strömungsquerschnitt in Kombination mit einem hohem Sprühmassenstrom liegen.

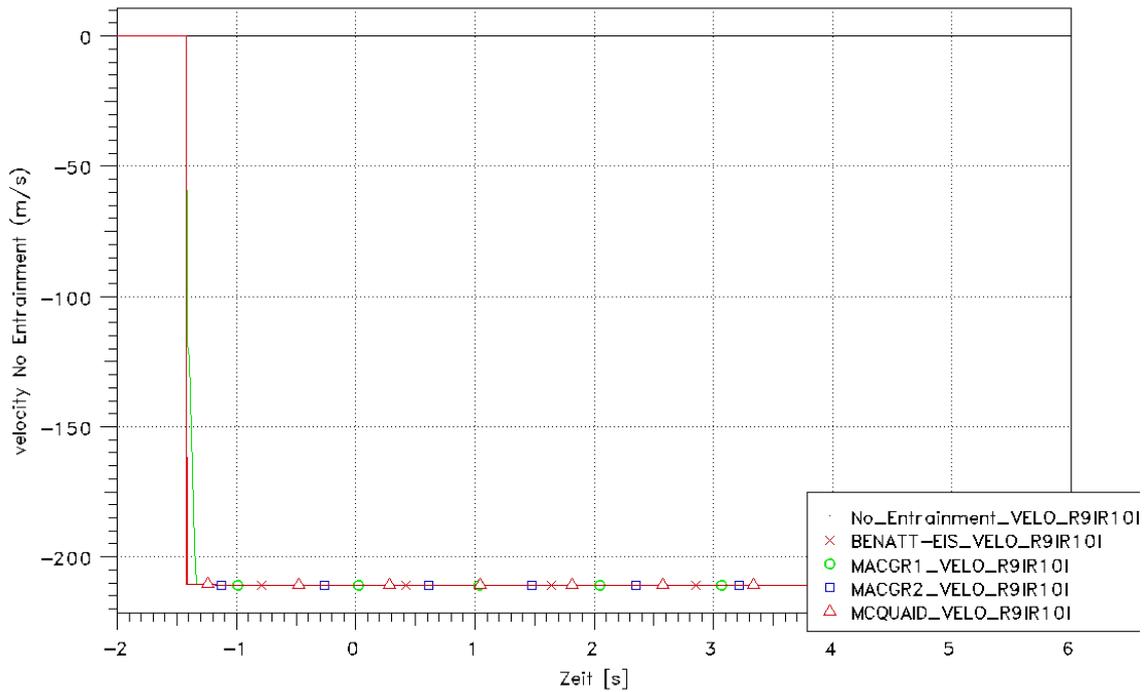


Abb. 2.73 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I

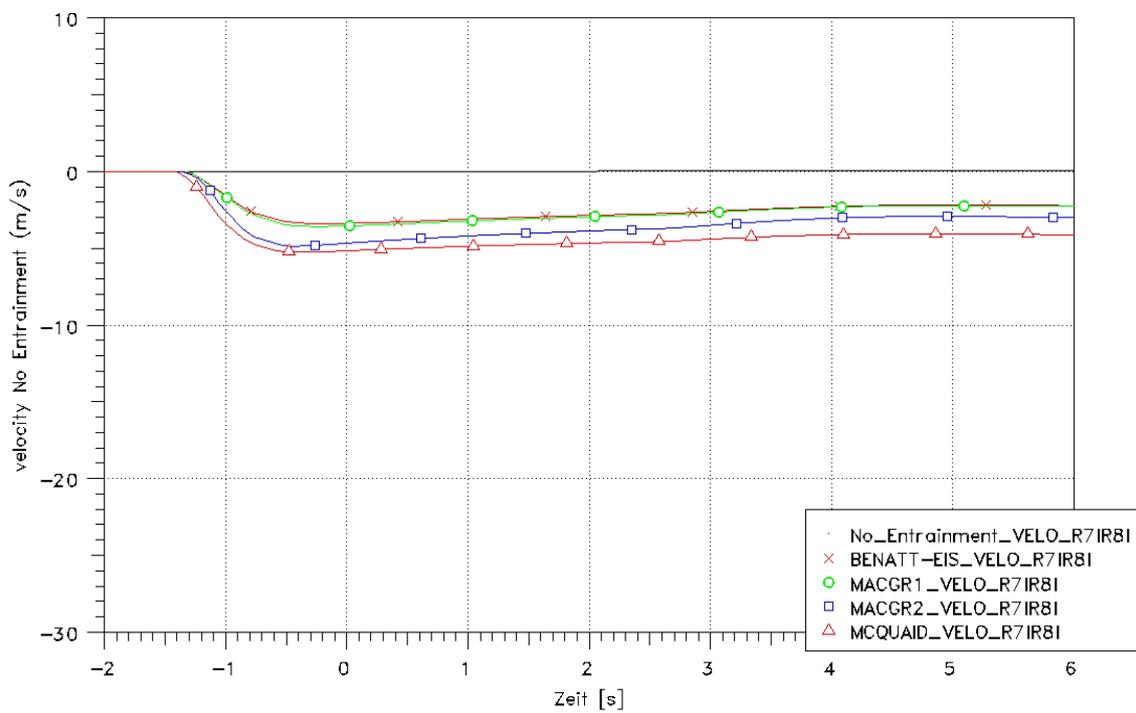


Abb. 2.74 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I

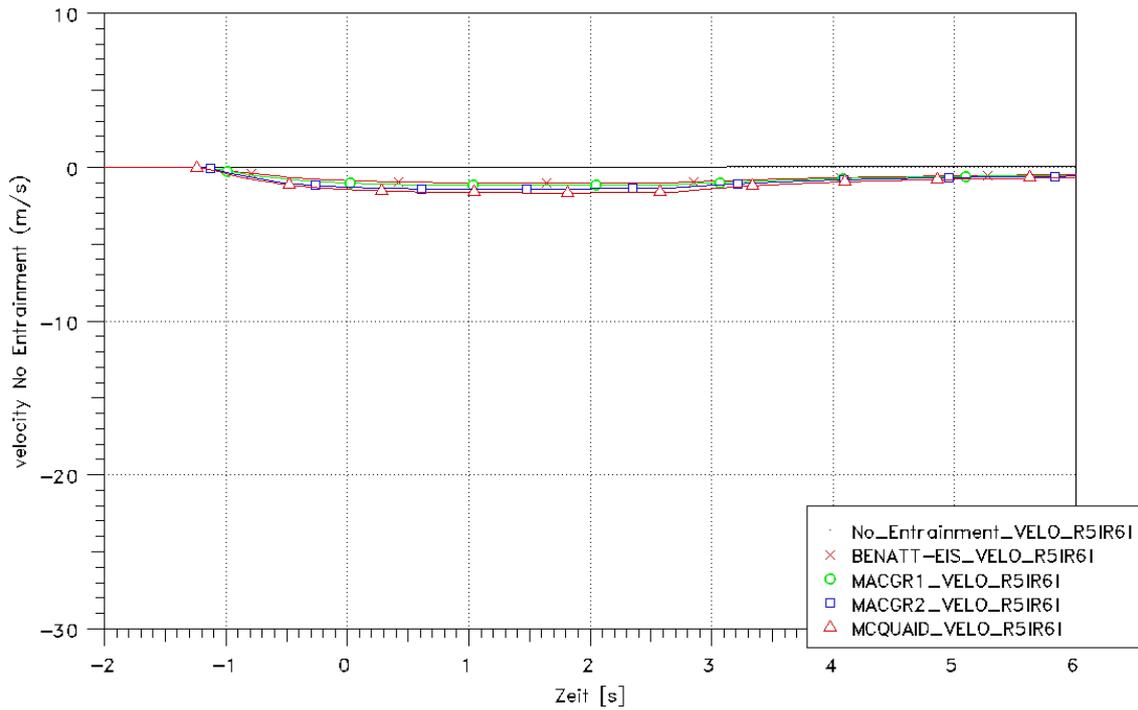


Abb. 2.75 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I

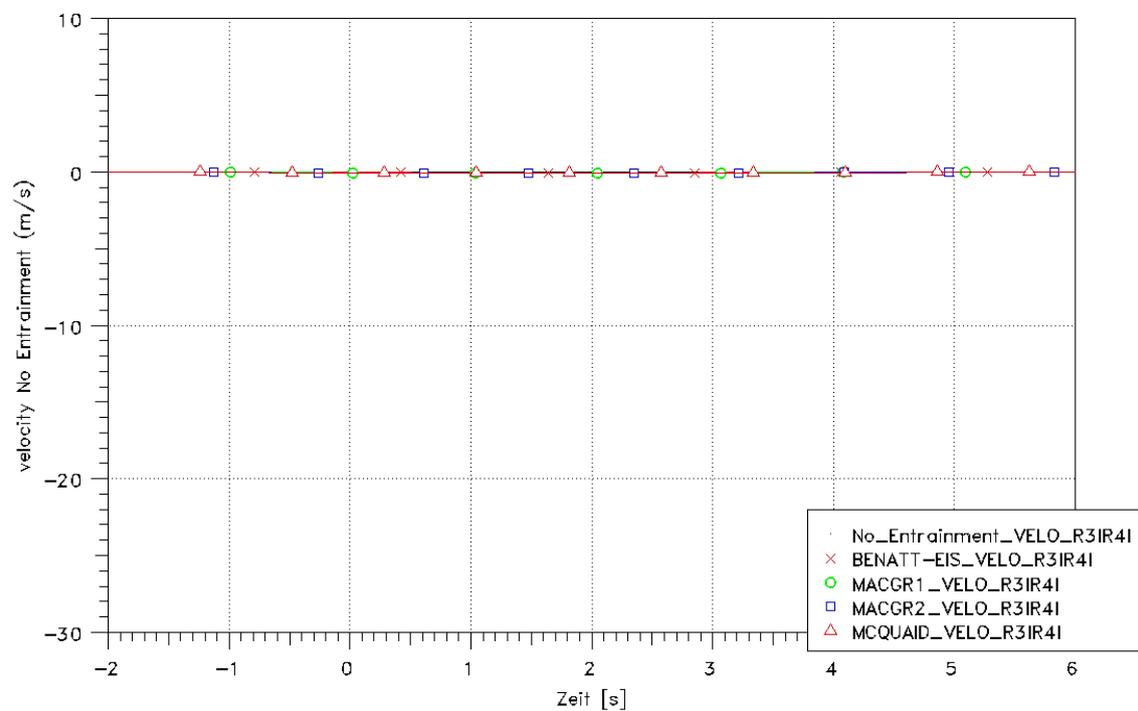


Abb. 2.76 THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I

2.2.3.4 Simulation des Experimentes HD-7 mit H₂-Verbrennung und ohne Sprühen

Der Einfluss der für das Sprühen angepassten Nodalisierung auf die H₂-Verbrennung wurde anhand von Rechnungen untersucht, bei der das Sprühsystem deaktiviert wurde. Obwohl kein Einfluss auf das Ergebnis erwartet wurde, wurde die Rechnung jeweils mit einer der vier Entrainmentmodelle durchgeführt, wie auch im Fall mit aktiviertem Sprühsystem. Dieses experimentelle Set-up entspricht dem THAI-Versuch HD-7 /KLE 16/.

In Abb. 2.77 ist die berechnete freigesetzte Verbrennungsenergie für die Rechnung ohne Entrainment-Nodalisierung und mit Entrainment-Nodalisierung gezeigt. Es ist zu sehen, dass die Veränderung der Nodalisierung den Verbrennungsprozess beschleunigt. Die Nodalisierung beschleunigt die Verbrennung und fördert eine Durchmischung der Atmosphäre.

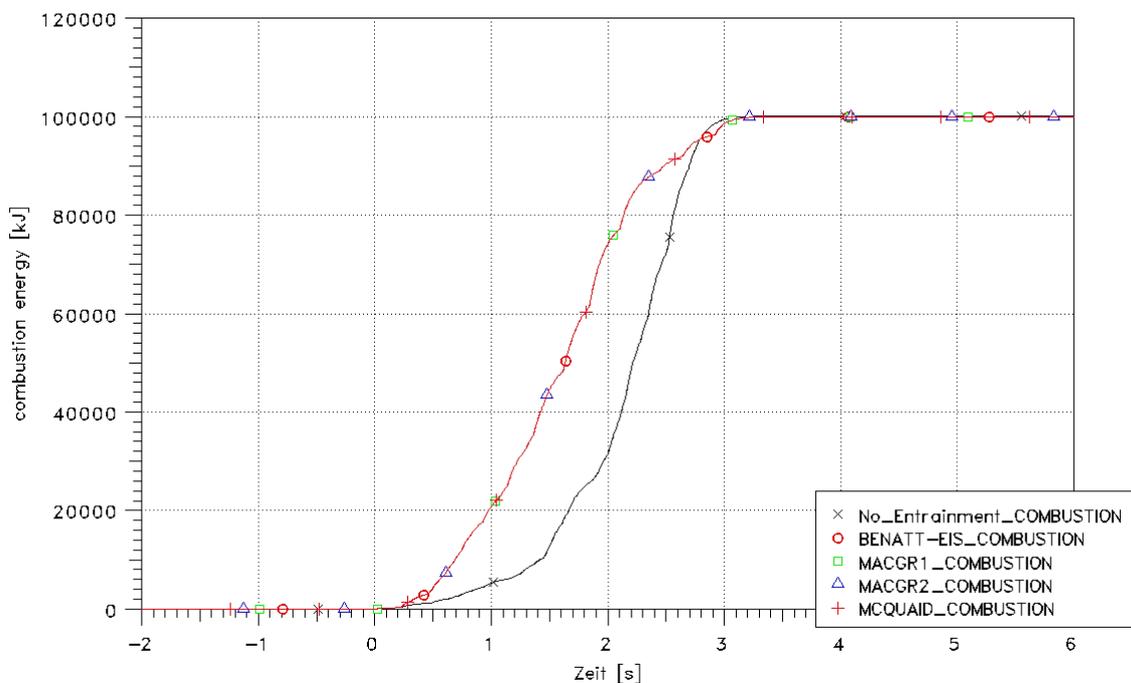


Abb. 2.77 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Freigesetzte Verbrennungsenergie

Ein Vergleich der berechneten Behälterdrücke und der experimentellen Messwerte zeigt Abb. 2.78. Es ist zu sehen, dass entsprechend der freigesetzten Verbrennungswärme der Druck bei der Rechnung ohne Entrainment-Nodalisierung zu Beginn der Verbrennung deutlich langsamer ansteigt als bei der Rechnung mit Entrainment-Nodalisierung. In beiden Fällen wird das Druckmaximum etwa bei $t = 3$ s erreicht. Bei der Rechnung mit Entrainment-Nodalisierung ist der Maximaldruck etwa 0,3 bar niedriger als bei der

Rechnung ohne Entrainment-Nodalisierung. Der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt, dass in den ersten 1,5 s der Verbrennung die Rechnung mit Entrainment-Nodalisierung den Druckanstieg überschätzt, danach wird er unterschätzt. Im Experiment wird das Druckmaximum nach 2 s und damit etwa 1 s eher als in den Rechnungen erreicht.

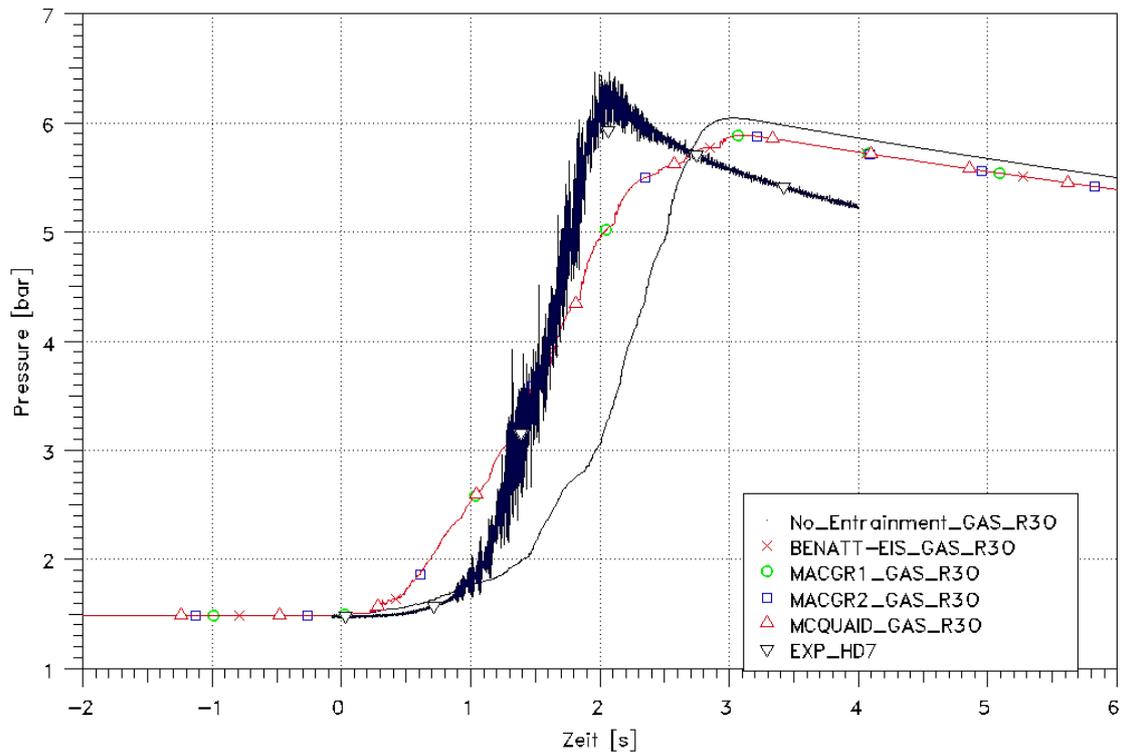


Abb. 2.78 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Druckverlauf im THAI-Behälter, Vergleich Experiment und COCOSYS-Rechnungen

Die Abb. 2.79 zeigt die Temperaturen in den Zonen R6O und R6I für die Rechnungen mit und ohne Entrainment-Nodalisierung. Es fällt auf, dass bei der Rechnung ohne Entrainment-Nodalisierung die Temperatur in der inneren Zone (R6I) stets höher ist als in der äußeren (R6O). Dies gilt bei der Rechnung mit Entrainment-Nodalisierung für die ersten zwei Sekunden nicht. Die Nodalisierung bewirkt, dass das heiße aufsteigende Gas eher in die äußeren Zonen strömt und von diesen in die Zonen gelangt, die den Sprühkegel simulieren. Ab etwa $t = 2$ s kühlen sowohl die innere als auch äußere Zone ab. Die schnellere Abkühlung der äußeren Zone ist durch die Wärmeleitung über die metallische Behälterhülle zu erklären.

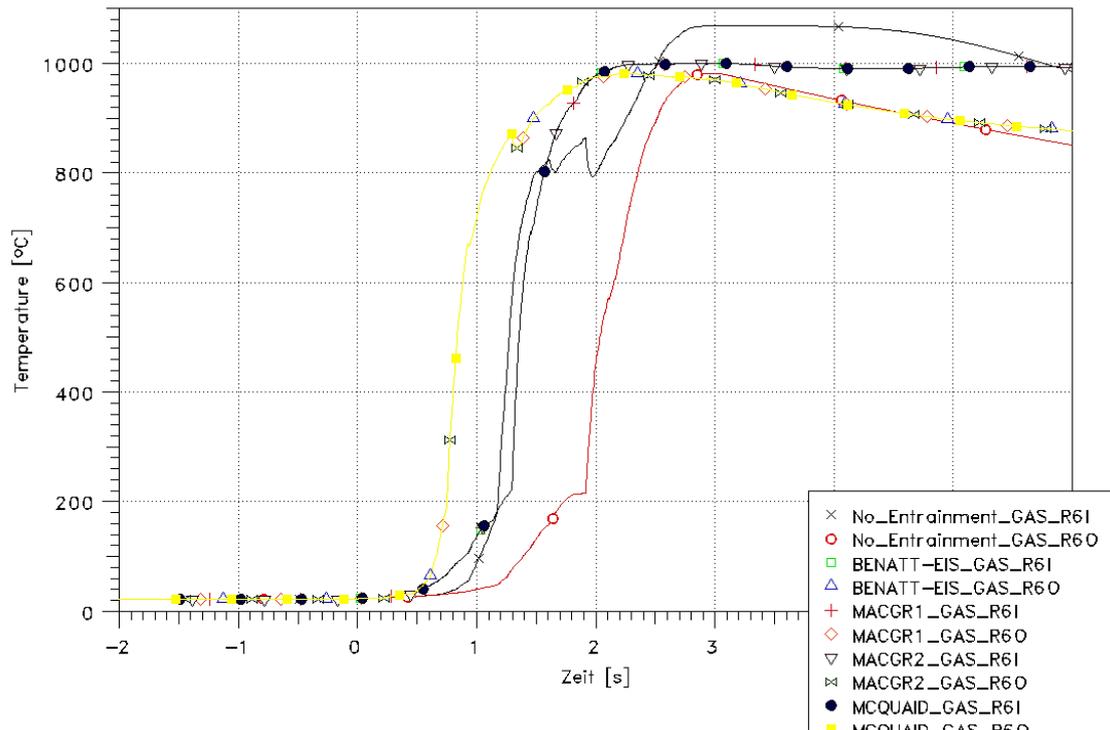


Abb. 2.79 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O

Die Abb. 2.80 bis Abb. 2.83 zeigen die Gasgeschwindigkeiten (VELO) zwischen den Zonen R9I – R10I, R7I – R8I, R5I – R6I sowie R3I – R4I für die Rechnungen ohne Entrainment-Nodalisierung und für die Rechnungen mit Entrainment-Nodalisierung. Es ist auch hier zu sehen, dass die Nodalisierung die Gasströmung beeinflusst. Während bei der Nodalisierung entsprechend Abb. 2.70 links die Gasströmung aufwärtsgerichtet ist (positive Werte), ist dies bei der Entrainment-Nodalisierung nicht der Fall. Es werden teils starke abwärtsgerichtete Gasströmungen (negative Werte) errechnet.

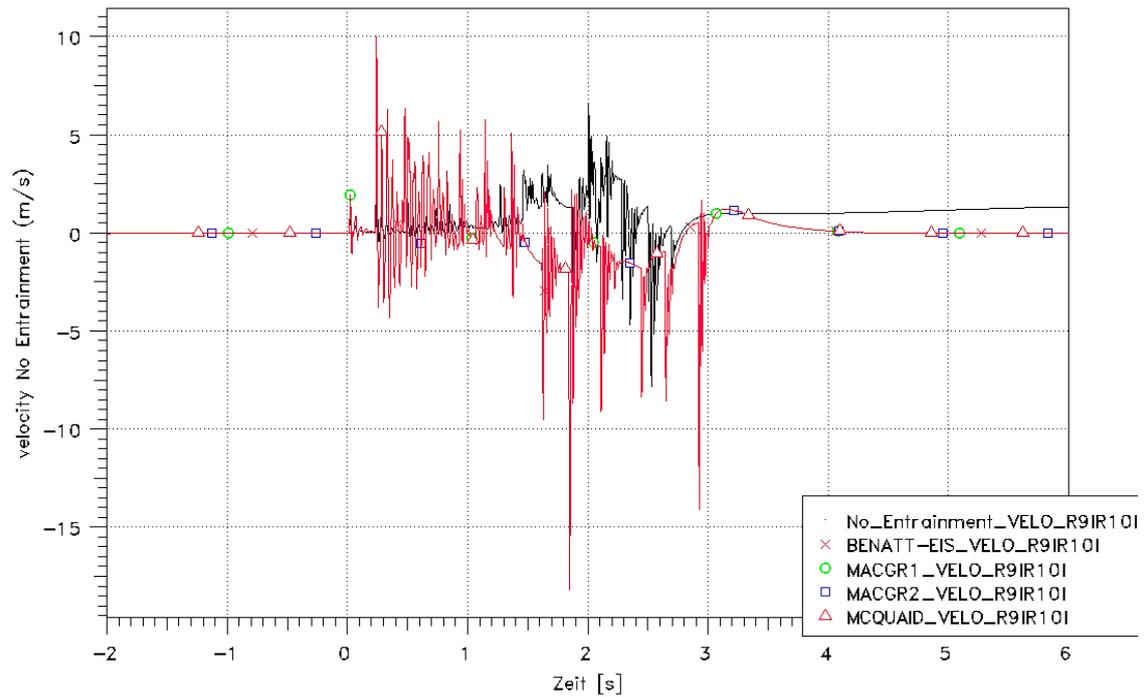


Abb. 2.80 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I

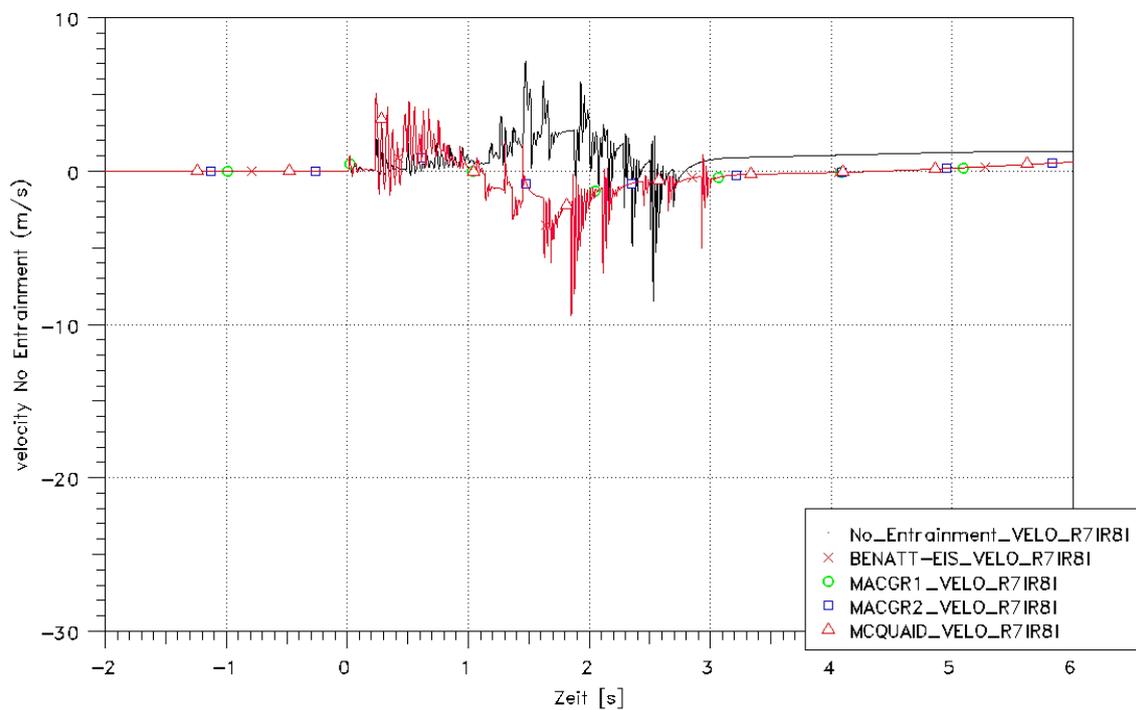


Abb. 2.81 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I

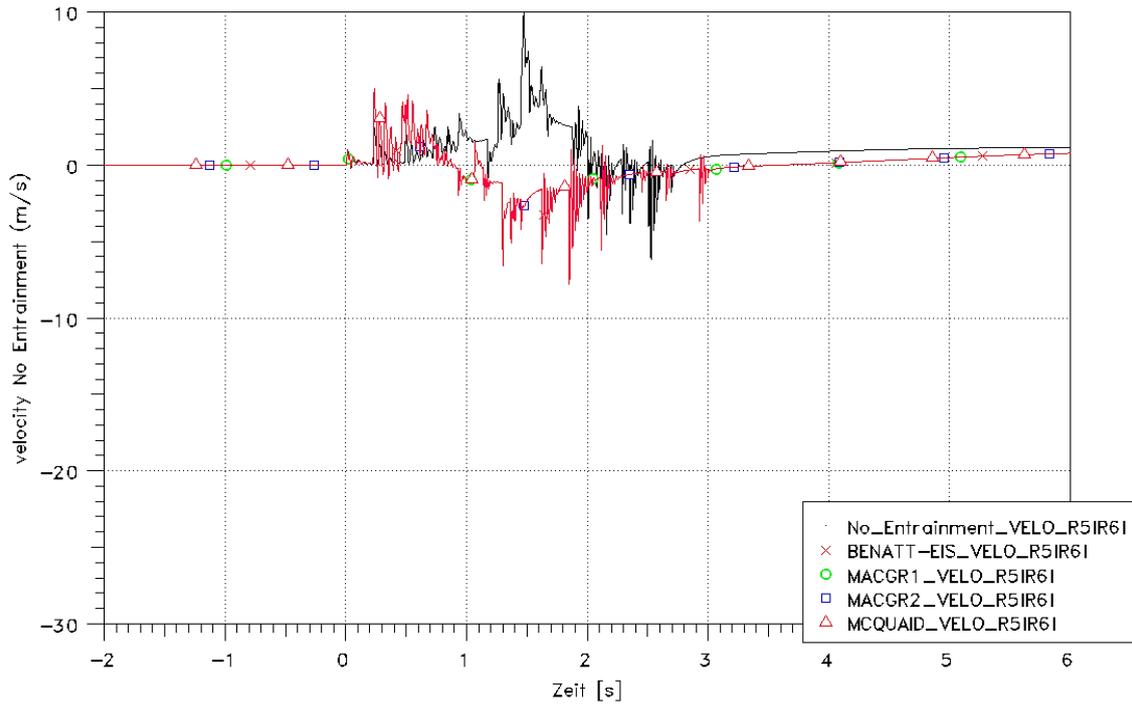


Abb. 2.82 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I

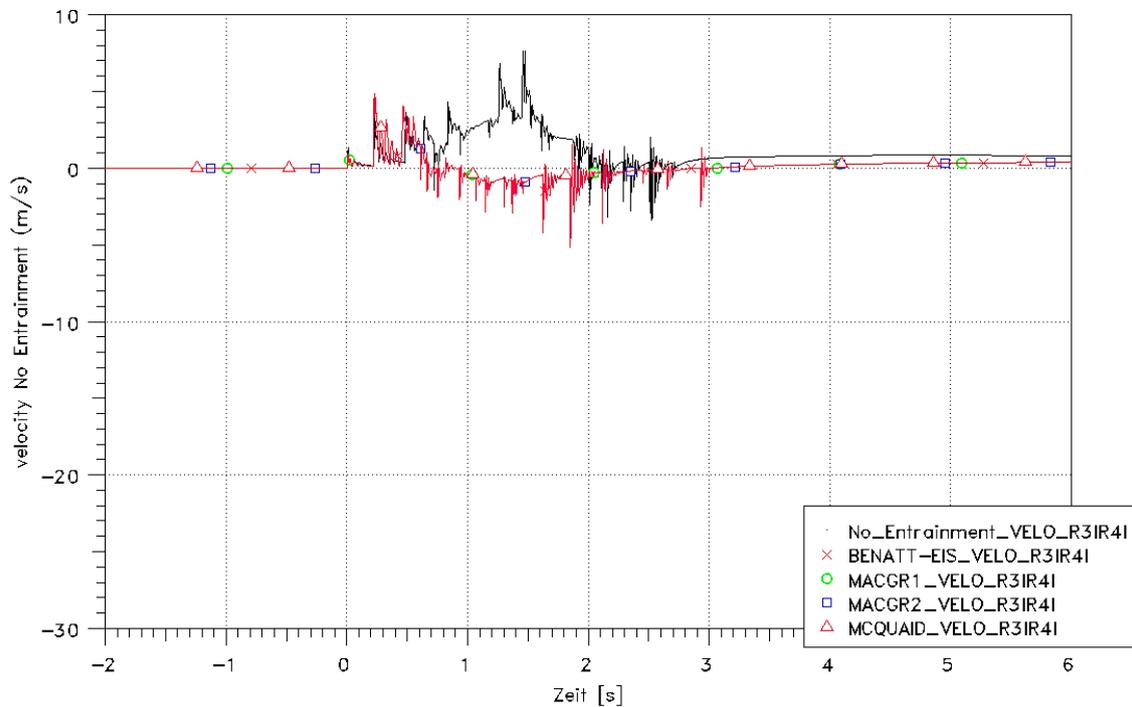


Abb. 2.83 THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I

2.2.3.5 Simulation des Experimentes HD-30 mit H₂-Verbrennung und mit Sprühen

In einer dritten Rechnung wurde die Wechselwirkung zwischen Sprühen mit Entrainment-Modellen und H₂-Verbrennung untersucht. In Abb. 2.84 ist die berechnete freigesetzte Verbrennungsenergie für die Rechnungen ohne Entrainment-Modelle und mit Entrainment-Modellen gezeigt. Im Vergleich zu den Ergebnissen der Rechnungen ohne Sprühen (Abb. 2.77, S. 84) erkennt man, dass die Durchmischung der Atmosphäre durch das Entrainment den Verbrennungsprozess noch einmal beschleunigt. Die schnellste Verbrennung verursacht das „MCQUAID“ Modell.

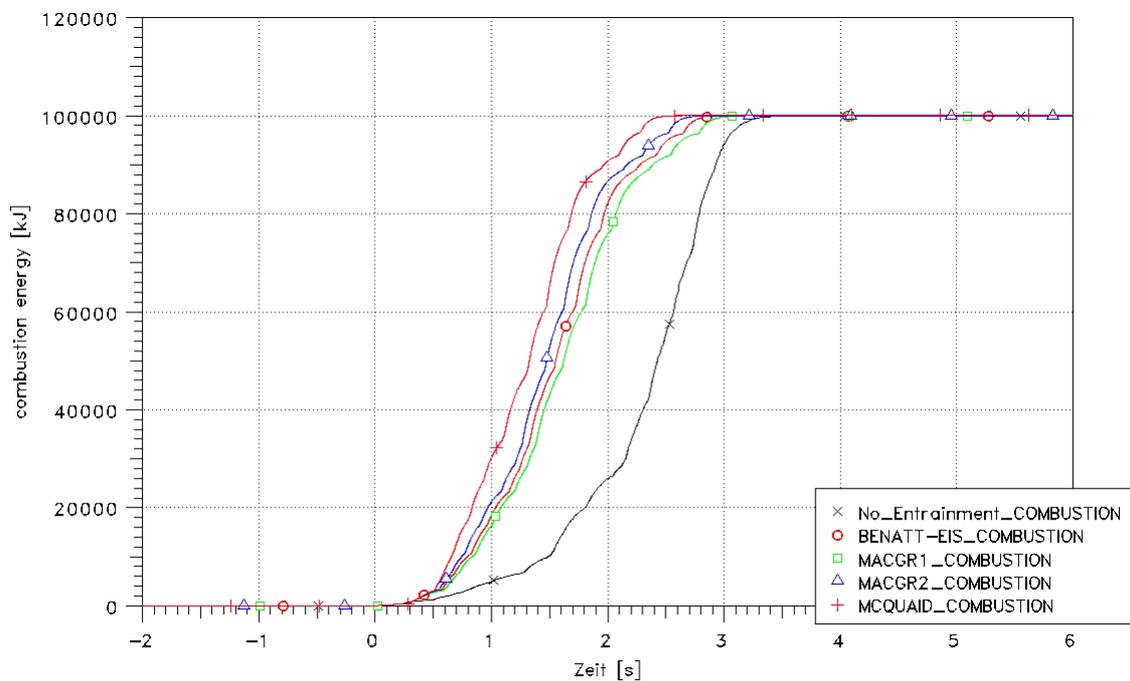


Abb. 2.84 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Freigesetzte Verbrennungsenergie

Einen Vergleich der berechneten Behälterdrücke und der experimentellen Messwerte zeigt Abb. 2.85. Wie schon beschrieben, verläuft der Druck analog zur freigesetzten Verbrennungswärme. Im Experiment verursachen die Sprühtropfen Atmosphärenbewegungen und Turbulenzen, die den Brennvorgang beschleunigen, was anfangs einen schnelleren Druckanstieg verursacht. Dann schwächen die Sprühtröpfchen die Verbrennung, und der Druckanstieg wird bedeutend langsamer. Bei der Rechnung ohne Entrainment-Modell wird die von den Sprühtropfen verursachte Atmosphärenbewegung nicht simuliert. Somit werden die Beschleunigung des Verbrennungsvorgangs und als Folge der raschere Druckanstieg nicht simuliert (Abb. 2.85). Die Entrainment-Modelle bewirken

einen schnelleren Druckanstieg. Allerdings ist auch dieser Druckanstieg langsamer als im Experiment. Die Abschwächung der Verbrennung im weiteren Versuchsverlauf wird in keiner Rechnung erfasst.

In früheren Simulationen wurde die Atmosphärenbewegung als Folge eines Sprühsystems mit einem Gebläse künstlich erzeugt. Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abb. 2.85 mit „FAN-SYSTEM_GAS_R30“ beschriftet. Im Vergleich zum Entrainment-Modell „MCQUAID“ steigt der Druck in den ersten 0,8 s noch schneller an. Zwischen $t = 0,8$ s und $t = 1,5$ s stimmen diese beiden Rechnungen sehr gut überein. Der mit „MCQUAID“ errechnete Maximaldruck ist niedriger als bei der Rechnung mit Gebläse und der Zeitpunkt des Maximaldrucks stimmt gut mit dem Experiment überein. Obwohl mit den Entrainment-Modellen die Implementierung eines künstlichen Gebläses ersetzt werden kann, wird mit keiner Vorgehensweise eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht.

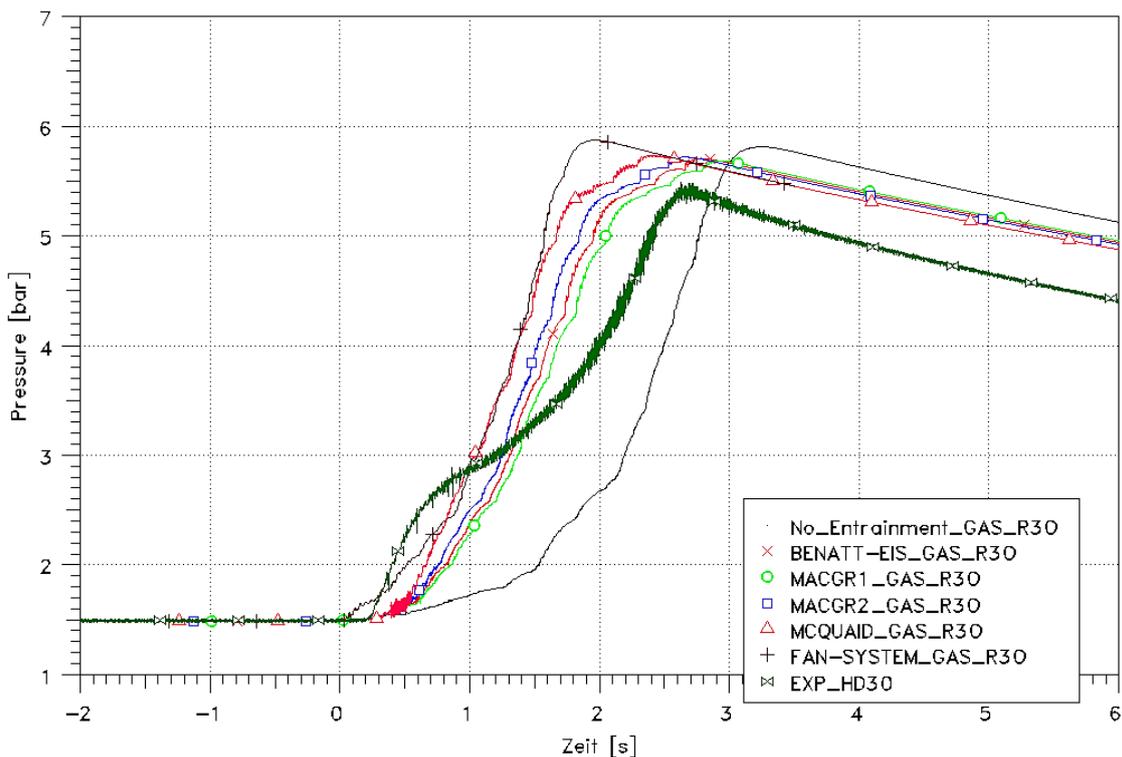


Abb. 2.85 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: THAI HD-30: Druckverlauf im THAI-Behälter

Die Abb. 2.86 zeigt die Temperaturen in den Zonen R6O und R6I für die Rechnungen mit und ohne Entrainment-Modell. Bei den Rechnungen mit Entrainment ist die innere Zone (R6I) stets kälter als die äußere Zone (R6O). Die Nodalisierung und das Einströmen von Gas in die Sprühzone bewirken, dass das heiße aufsteigende Gas entlang der

äußeren Zonen strömt. Die inneren Zonen werden durch das Sprühen zusätzlich gekühlt. Bei der Rechnung ohne Entrainment ist in den ersten 2,3 s die innere Zone heißer. Das heiße Gas strömt senkrecht nach oben. Erst ab $t = 2,3$ s überwiegt die Kühlung durch die Sprühtröpfchen und die Temperatur in der äußeren Zone übersteigt den Wert in der inneren Zone.

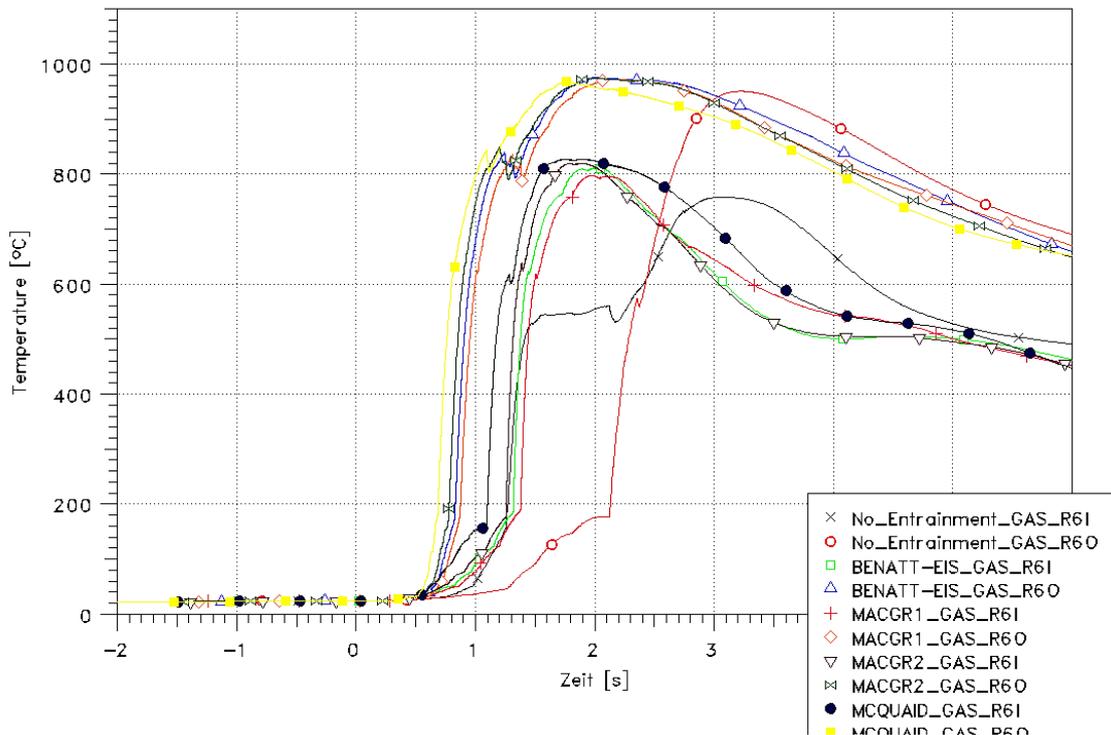


Abb. 2.86 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O

Die Abb. 2.87 bis Abb. 2.90 geben die Gasgeschwindigkeiten (VELO) in den Verbindungen zwischen den Zonen R9I – R10I, R7I – R8I, R5I – R6I sowie R3I – R4I für die Rechnungen ohne Entrainment-Modelle und mit Entrainment-Modellen wieder. Es ist zu sehen, dass die Gasgeschwindigkeiten nicht nur durch die Nodalisierung beeinflusst werden, das Sprühen und die Entrainmentmodelle verursachen in den Verbindungen eine zusätzliche abwärts gerichtete Strömung. In der Verbindung zwischen R9I und R10I werden Gasströmungsgeschwindigkeiten von mehr als 300 m/s errechnet. Dies scheint eine deutliche Überschätzung zu sein, kann aber durch die Nodalisierung verursacht werden. Die in den äußeren Zonen von unten nach oben zuerst ablaufenden Verbrennungsvorgänge beschleunigen das Gas, das dann nur durch die inneren Zonen nach unten abströmen kann. Das kann die Ursache für die sehr hohen Gasgeschwindigkeiten nahe des Sprühkegels an einer Stelle mit engstem Strömungsquerschnitt sein. Ob und

in welchem Umfang dies auch durch die gewählte, veränderte Nodalisierung zur Abbildung des Sprühkegels verursacht wird, konnte nicht untersucht werden.

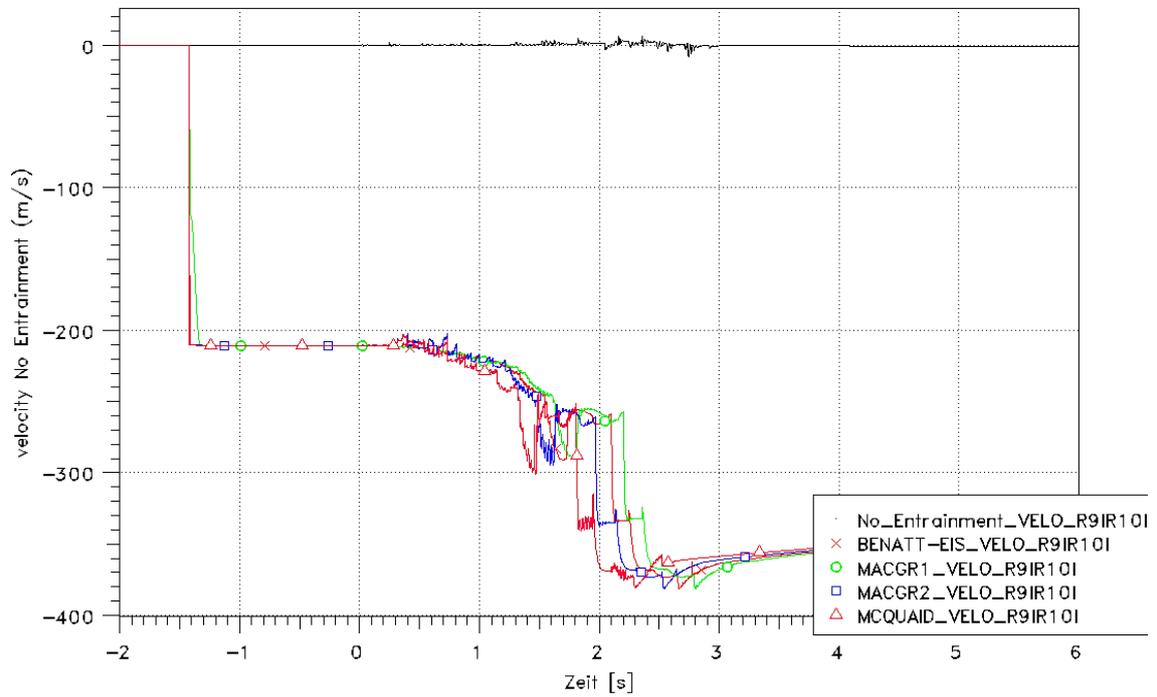


Abb. 2.87 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I

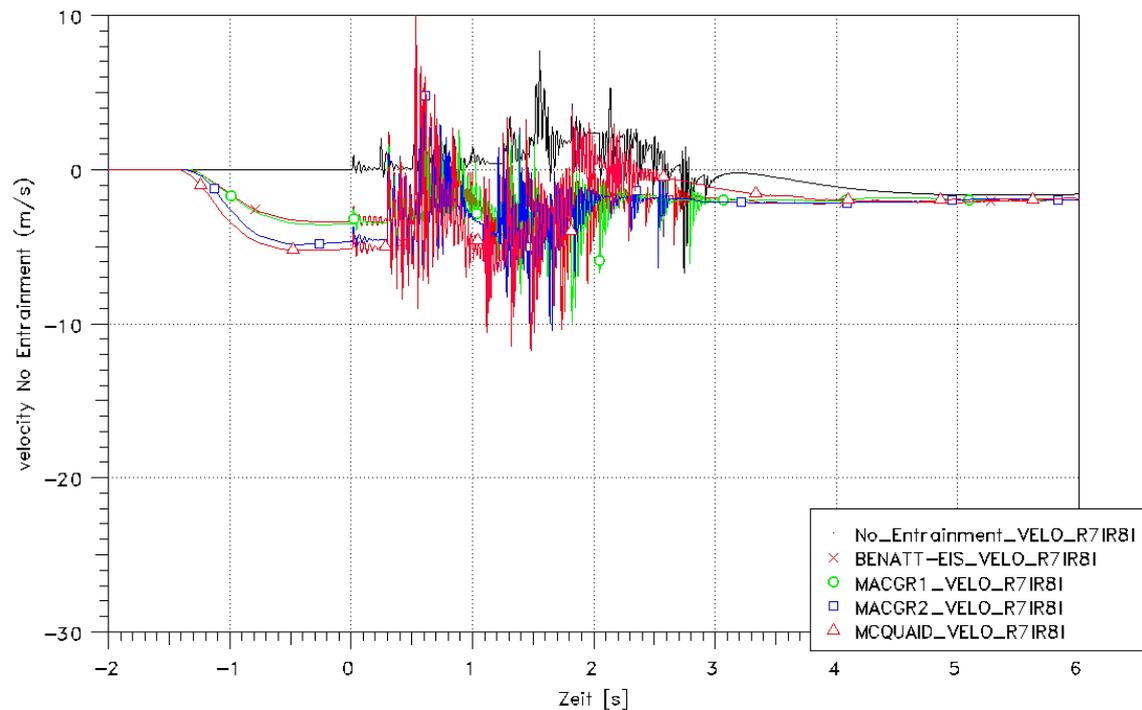


Abb. 2.88 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I

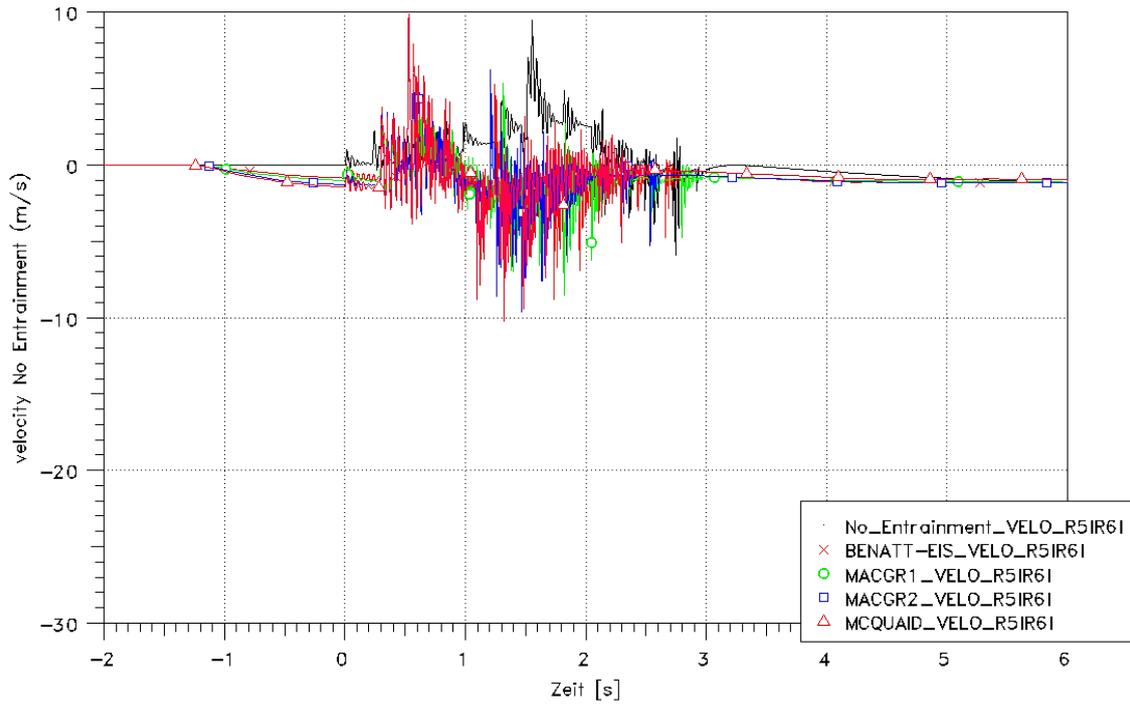


Abb. 2.89 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I

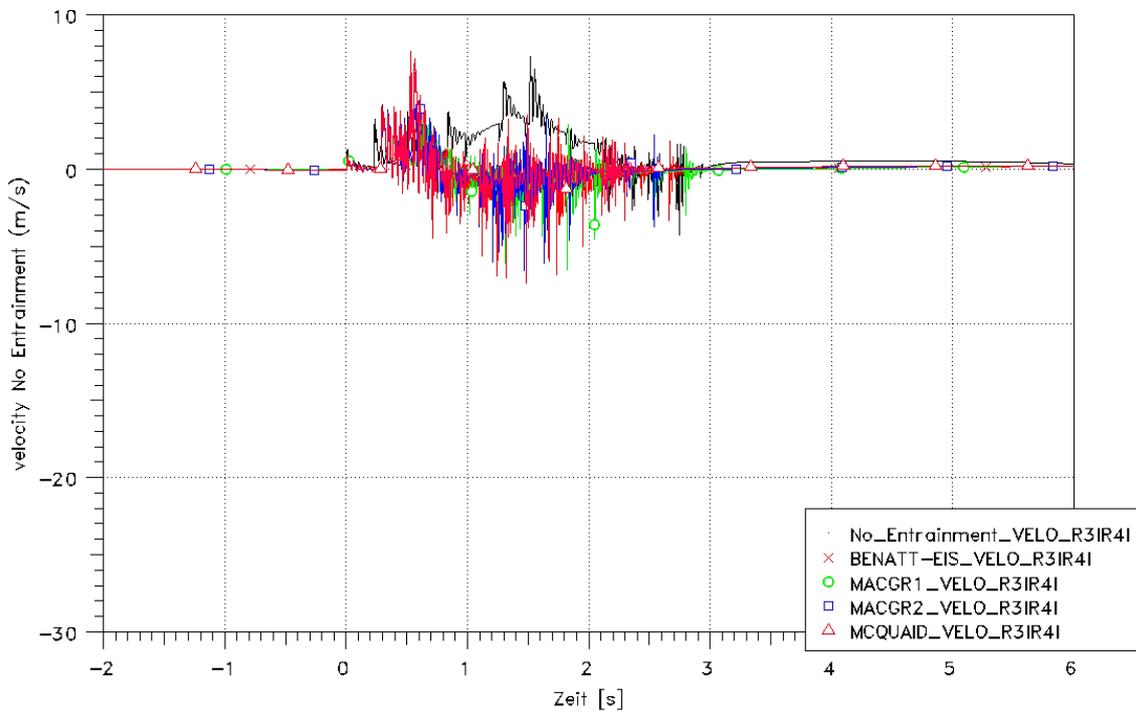


Abb. 2.90 THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I

2.2.3.6 Fazit der Simulationen von H₂-Verbrennung in Kombination mit Sprühsystemen

Die Verwendung der Entrainment-Modelle ermöglicht es, die von den Sprühtropfen bzw. -strahlen verursachte Atmosphärenbewegung entlang und innerhalb des Sprühkegels bzw. generell im Behälter zu simulieren. Sie erfordert aber auch eine angepasste Nodalisierung. Generell kann die damit verbundene verstärkte Verbrennung in der Anfangsphase des Experiments auch berücksichtigt werden. Im weiteren Verlauf des Experiments wird die Verbrennung durch die Sprühtöpfchen abgeschwächt, was auch mit den Entrainment-Modellen nicht hinreichend von COCOSYS simuliert wird. Die zur Verwendung der Entrainment-Modelle nötige Veränderung der Nodalisierung führt zu signifikanten Veränderungen in dem Strömungsverhalten des Gases im THAI-Behälter. Es werden in einzelnen Zonenverbindungen insbesondere nahe der Sprühdüse Strömungsgeschwindigkeiten von mehr als 200 m/s ohne Verbrennung bzw. noch darüber in Kombination mit Verbrennung errechnet. Die Ursachen für diese hohen Geschwindigkeiten sind noch weiter zu untersuchen. Dadurch, dass in COCOSYS gewünschte Strömungseffekte insbesondere beim Sprühen durch die Nodalisierung in Kombination mit den jeweiligen Modellen erzeugt werden, kann es zu Konflikten zwischen den verschiedenen Anforderungen hier bzgl. der Simulation der H₂-Verbrennung kommen.

2.3 Begleitung der THAI-Versuche zur Thermohydraulik

Zentraler Baustein der Modellvalidierung für COCOSYS ist die THAI-Versuchsanlage. Die Begleitung der THAI-Versuche wurde im Vorhaben fortgesetzt. Seit Inbetriebsetzung der THAI-Anlage in 2001 beteiligt sich die GRS regelmäßig und umfangreich mit COCOSYS-Analysen zu thermohydraulischen Versuchen, zu Iod- und Aerosol-Versuchen als auch zu Versuchen im Zusammenhang mit H₂-Phänomenen (z. B: /ALL 03/, /ALL 07/, /KLE 10/, /KLE 12/, /KLE 16/). Die Planung der in der THAI-Anlage durchzuführenden Versuche erfolgt stets unter intensiver Mitwirkung der GRS, um einen möglichst hohen Nutzen für COCOSYS zu erzielen. Die Erfahrung zeigt, dass eine enge analytische Begleitung für Versuchsprogramme, wie sie in THAI durchgeführt werden, große Vorteile bietet. Auf regelmäßig durchgeführten Expertentreffen werden die im vorangegangenen Zeitraum durchgeführten Versuche vorgestellt und deren Ergebnisse diskutiert, sofern sie nicht für 'blinde' Analysen herangezogen werden. Neben Interpretation und vorläufigen Schlussfolgerungen auf Basis durchgeführter Versuche werden die anstehenden neuen Versuche im Detail besprochen. Als Grundlage dazu dienen

auch die Auslegungsrechnungen, die in überwiegenderem Maße von der GRS mit COCOSYS durchgeführt werden. Die Anforderungen an Fahrweise, Instrumentierung und Probenahme werden dann festgelegt.

2.3.1 THAI TH-27 Inbetriebsetzungsversuch

Durch die Erweiterung der THAI-Anlage (THAI Test Vessel – TTV) um einen zweiten Behälter (Parallel Attachable Drum – PAD) bestand die einmalige Möglichkeit, ohne genaue Erfahrungen über das thermohydraulische Verhalten in dieser neuen Konfiguration Rechnungen mit COCOSYS durchzuführen. Im Vorgängervorhaben (RS1514) sind im Rahmen des Benchmarks bereits blinde Rechnungen zu THAI TH-27 durchgeführt worden, an dem sich die GRS mit COCOSYS beteiligt hat. Da die experimentellen Ergebnisse noch nicht freigegeben waren, konnte damals keine vergleichende Analyse durchgeführt werden. Die Arbeiten wurden in diesem Vorhaben fortgeführt. Das betrifft einerseits den Vergleich der doppeltblinden Rechnung mit den experimentellen Daten sowie die daran anschließende Phase der offenen Rechnung.

Ein doppeltblinder Benchmark zeichnet sich dadurch aus, dass das Experiment noch nicht durchgeführt worden ist, also auch keine Erfahrungswerte zur Anlage bekannt sind. Die blinde Phase ist dadurch definiert, dass nach Durchführung des Experiments die Randbedingungen, die für die doppeltblinde Phase verwendet worden sind, mit den tatsächlich im Experiment anliegenden Randbedingungen abgeglichen werden. Häufig lassen sich die vorab spezifizierten Randbedingungen erst nach Auswertung des Experiments explizit definieren. Auf Basis dieser „bereinigten“ Bedingungen schließt sich dann die Phase der blinden Rechnung an, wobei dann noch keine Ergebnisse für die Simulation verfügbar sind. Schließlich wird nach Freigabe der Ergebnisse die offene Phase gestartet, bei der die Anwender basierend auf den experimentellen Ergebnissen ihre Rechnung auswerten können und mögliche Veränderungen z. B. an der Nodalisierung vornehmen können, um gezielt einzelne Phänomene besser abzubilden.

2.3.1.1 Anlage THAI+ und Versuchsablauf

Die erweiterte Anlage THAI+ /FRE 15/ besteht aus dem ursprünglichen THAI-Behälter (THAI Test Vessel – TTV) und dem dazu parallel angeordneten PAD (Parallel Attachable Drum) (vgl. Abb. 2.91). Die Behälter sind oben und unten mit je einer Rohrleitung DN 500 verbunden. Der TTV hat ein freies Volumen von 59 m³, der PAD von 18 m³. Beide Behälter haben zur Temperaturregung Heiz-Kühlmäntel, durch die Thermoöl fließen kann.

Für die restlichen Wandflächen ist der THAI-Behälter mit einer regelbaren elektrischen Beheizung ausgestattet. Die Behälter sowie die Rohrleitungen sind äußerlich mit Mineralfaserwolle isoliert. Im Versuch TH-27 befanden sich im THAI-Behälter der Innenzylinder und die Kondensatwannen.

Die spezifizierte Fahrweise des Versuchs wird anhand von Tab. 2.8 erläutert. Nicht aufgeführt in der Tabelle sind die Spülung der FASP-Messeinrichtung mit Stickstoff zu Versuchsbeginn sowie der Atmosphärenabzug für die Heliumkonzentrationsmessungen. Beides sind nur geringe Atmosphärenmengen.

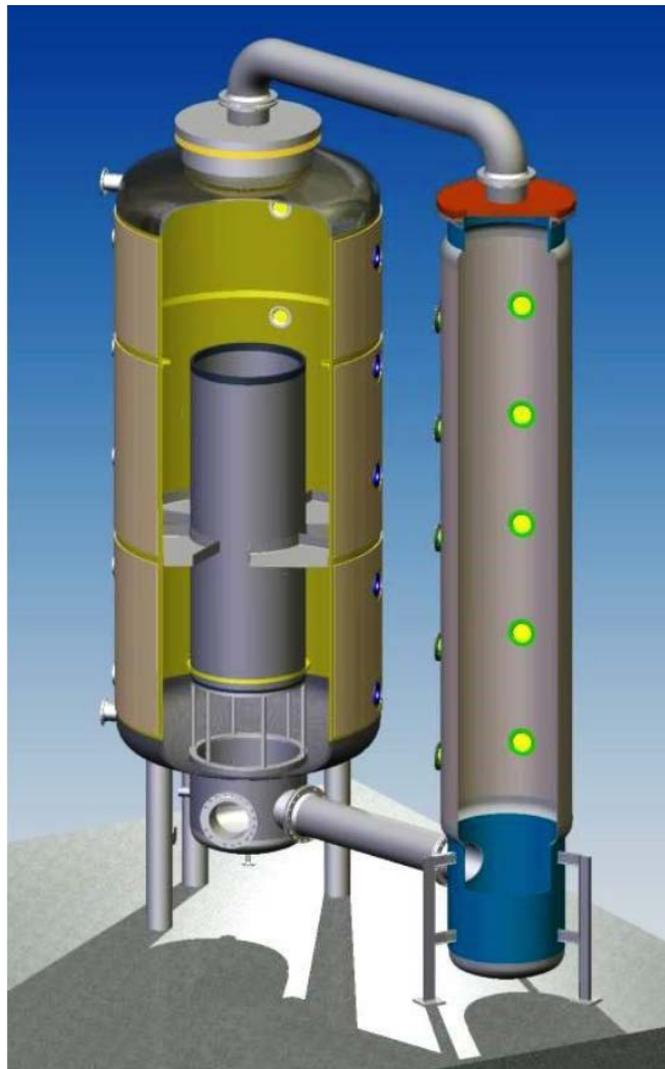


Abb. 2.91 THAI+ Versuchsanlage /FRE 15/

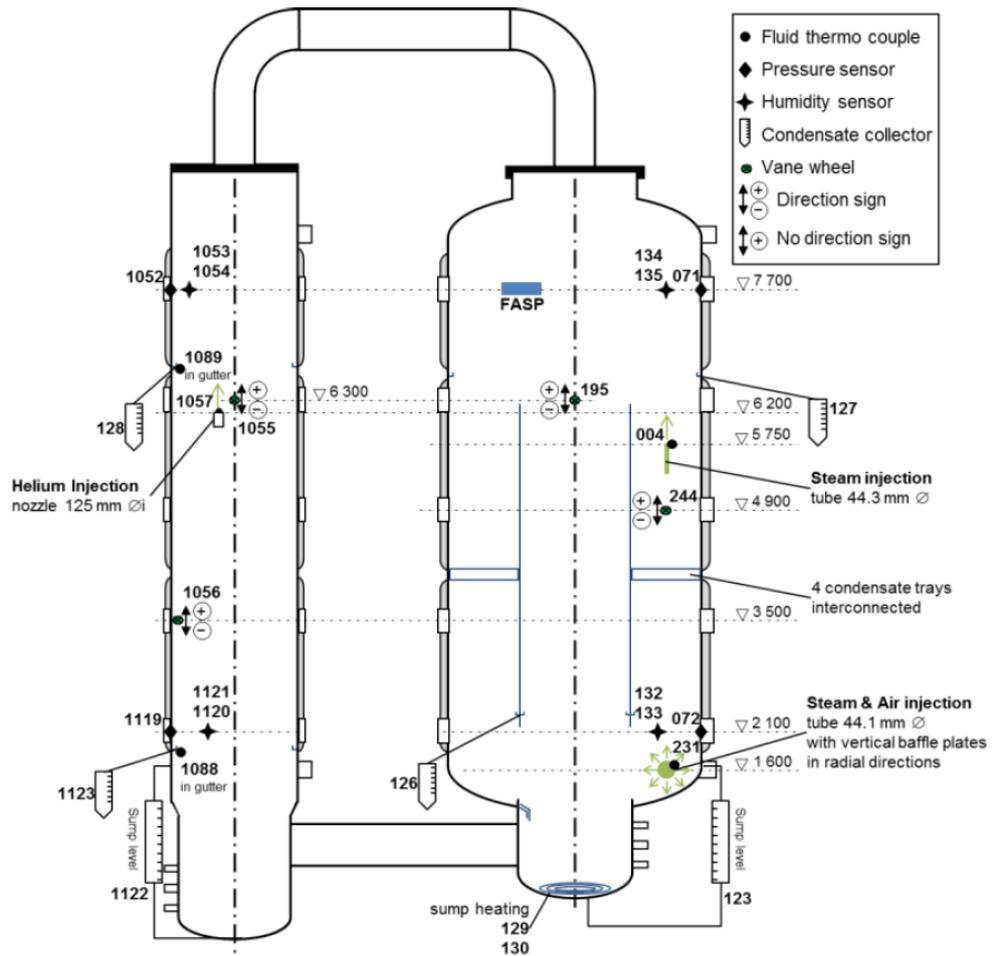


Abb. 2.92 THAI+ in der Konfiguration des Versuchs TH-27 mit Einspeisestellen von Dampf und Helium sowie Heiz-/Kühlmänteln und Messstellen

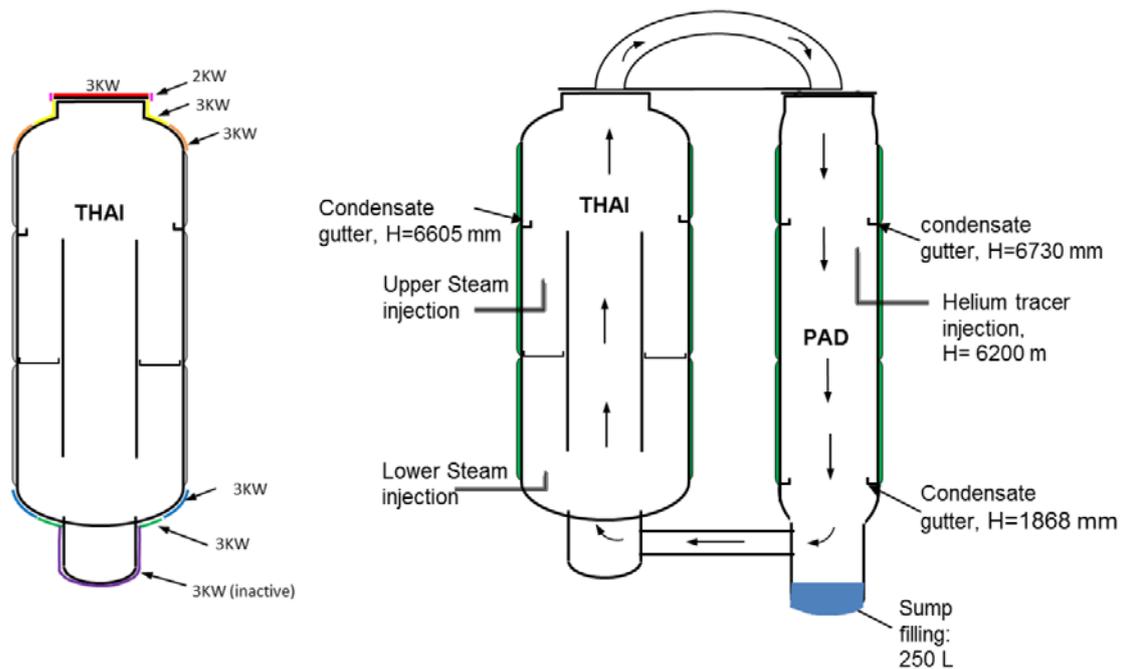


Abb. 2.93 THAI TH-27: Schema der elektrischen Wandheizung des THAI-Behälters

Tab. 2.8 Fahrweise des Versuches THAI TH-27

Zeit (h)	Fahrweise des Versuchs
0 – 0,5	THAI, obere Dampfeinspeisung (35 g/s) auf Höhe 5,75 m durch vertikal nach oben gerichtete Düse von 44,3 mm Durchmesser
0,5 – 9	THAI, untere Dampfeinspeisung bei Höhe 1,6 m gegen horizontale Prallplatte. Einspeiserate zunächst 35 g/s, dann Druckregelung auf 2 bar
9 – 36	THAI, Temperaturreglung der Wände des Behälters auf 105 °C, für Heiz-Kühlmäntel mittels Öldurchsatz, für übrige Wände, außer Sumpfbereich mittels elektrischer Beheizung.
24 – 34	THAI, obere Dampfeinspeisung. Einspeiserate zunächst 35 g/s, dann Druckregelung auf 2,5 bar
27 – 36	PAD, Wärmeabzug von 6 kW über den unteren Heiz-Kühlmantel
30 – 36	PAD, Wärmeabzug von 6 kW über den mittleren Heiz-Kühlmantel
32 – 36	PAD, Wärmeabzug von 4 kW über den oberen Heiz-Kühlmantel
34	PAD, Heliumeinspeisung (1 g/s, Gesamtmasse = 2 kg) bei Höhe 6,2 m durch vertikal nach oben gerichtete Düse von 125 mm Durchmesser.
34 – 36	THAI, Fortsetzung der oberen Dampfeinspeisung. Einspeiserate unverändert wie bei 34 h (ohne Druckregelung)
36 – 60	Natürliches Abkühlen der Anlage ohne jegliche Einspeisung

2.3.1.2 COCOSYS Modellierung

Die COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Abb. 2.94 bis Abb. 2.96, unterteilt das freie Volumen von THAI+ in 109 Zonen. Zusätzlich vorhanden sind die Umgebungszone sowie 5 Zonen zur Bilanzierung des Kondensatabzugs aus der Anlage und eine Zone für den Atmosphärenabzug der Heliumkonzentrationsmessungen.

Der THAI-Behälter ist in Umfangsrichtung in 3 Segmente unterteilt (Abb. 2.96 und Abb. 2.97):

- Die mit „1“ endenden Zonen erfassen den Winkelabschnitt von 15° bis 255°. In ihm liegen 3 der durch die Kondensatwannen führende Strömungsöffnungen.

- Die mit „2“ endenden Zonen erfassen den Winkelabschnitt von 15° über 0° bis 255° (also insgesamt 120°). In diesem Winkelabschnitt liegen die beiden Dampfeinspeisungen (bei 315°). Die in diesem Sektor durch die Kondensatwannen führende Strömungsöffnung wird durch den Plume (s. u.) ausgefüllt.
- Das Aufsteigen der Atmosphäre oberhalb der unteren Dampfeinspeisestelle wird mit Plumezonen simuliert („P“).

Der Innenzylinder besteht aus zwei radialen Abschnitten, von denen nur der Äußere („4“) Kontakt zur Innenwand des Innzylinders hat. Der Sumpfraum ist analog aufgebaut.

Der PAD-Behälter ist in zwei radiale Abschnitte unterteilt, wovon der Äußere („1“) Kontakt zur Wand hat. Das Aufsteigen der Atmosphäre oberhalb der Heliumeinspeisung wird mit Plumezonen simuliert („P“).

Die Verbindungsleitungen zwischen THAI und PAD sind entlang ihres Hauptströmungsquerschnitts unterteilt, so dass die Berechnung einer Gegenströmung möglich ist.

Die Hintergrundinformation zur Simulation von Einspeisungen, die entweder einen Freistrahler oder einen Plume erzeugen, sind im COCOSYS-User-Manual dokumentiert /GRS 15/.

Die obere Dampfeinspeisung tritt mit einer Geschwindigkeit von 31 m/s aus der Düse aus. Sie formt einen Freistrahler, der bis an die Decke des THAI-Behälters geht. Auf ihrem Weg reißt sie Atmosphäre mit. Dies wird simuliert, indem der Dampf in die Zone R6U.2 eingespeist wird und der Atmosphärenmitriss, der ab der Zone 4O.2 stattfindet, durch FAN-Systeme beschrieben wird. Die Grundlage zur Berechnung des Atmosphärenmitrisses ist das Modell von Liepe. Beim Eintritt in die Zone R6U.2 beträgt der Volumenstrom das 15-fache des eingespeisten Dampfvolumenstroms.

Die untere Dampfeinspeisung geht gegen eine Prallplatte und verlässt diese in horizontaler Richtung. Am Austritt der Prallplatte ($d = 0,15$ m) hat sie eine Geschwindigkeit von 6 bis 9 m/s (35 g/s, 1,2 bar und 2 bar). Danach weitet die Strömung sich um 20° (Annahme). Somit hat sie bei $d = 0,3$ m eine Geschwindigkeit von 0,5 bis 0,75 m/s. Bei $d = 0,4$ m hat sie eine Geschwindigkeit von 0,24 bis 0,37 m/s. Dann wird die Strömung hauptsächlich aufwärtsgerichtet sein. Die Atmosphäre bestehend aus eingespeistem Dampf und beigemischter Atmosphäre wird plumeförmig aufwärtssteigen. Der „Fuß“ des Plumes wird mit einem Durchmesser von 0,4 m, die Vergrößerung des Plumeradius mit

6° angenommen. Bei Erreichen der Kondensatwannen füllt der Plume eine durch die Kondensatwannen führende Strömungsöffnung aus. Die weitere Ausdehnung des Plumes findet zunächst nur in Umfangsrichtung statt, da sie radial durch die Wand und den Innenzylinder von THAI begrenzt ist. Für den weiteren Weg des Plumes wird somit eine lineare Vergrößerung der Plume Strömungsfläche entsprechend eines Winkels von 8° angenommen. Diese Vergrößerung der Fläche wird vereinfachend in etwa auch oberhalb des Innenzylinders angesetzt.

Wegen der im PAD zu erwartenden sehr geringen Strömungsgeschwindigkeiten wird die Heliumeinspeisung einen Plume erzeugen. Es wird angenommen, dass sich dieser zunächst in einem Winkel von 20° und danach von 4° erweitert.

Die Kühlleistung von PAD wird mit Hilfe von Tabellen vorgegeben (negative Wärmeeinspeisung).

Die Wandtemperaturreglung des THAI-Behälters wird mit Tabellen für Wärmeeinspeisung sowie mit Temperaturreglung vorgegeben. Für die elektrische Beheizung werden Maximalwerte für die Leistung gegeben; der Regler stellt dann die erforderliche Leistung ein. Für die Heiz-Kühlmäntel wird in gleicher Weise verfahren. Mit Beginn der Heliumeinspeisung gehen die Mäntel jedoch von Heizen auf Kühlen über. Um dies zu simulieren, wird dann eine negative Leistung vorgegeben. Die wurde nachträglich in einem Restart der Rechnung eingegeben.

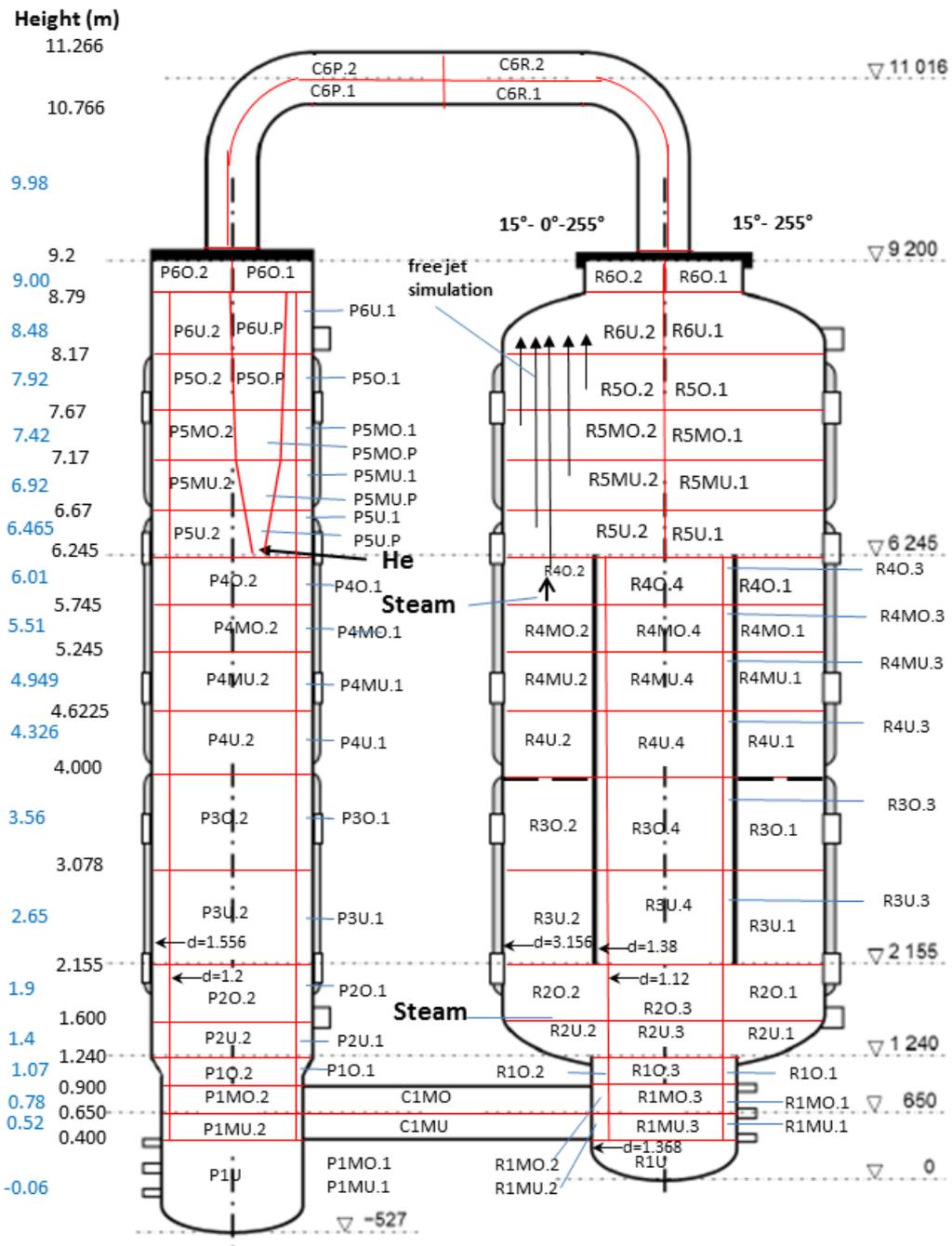


Abb. 2.94 THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung Ansicht mit Jet für obere Dampfinspeisung in TTV

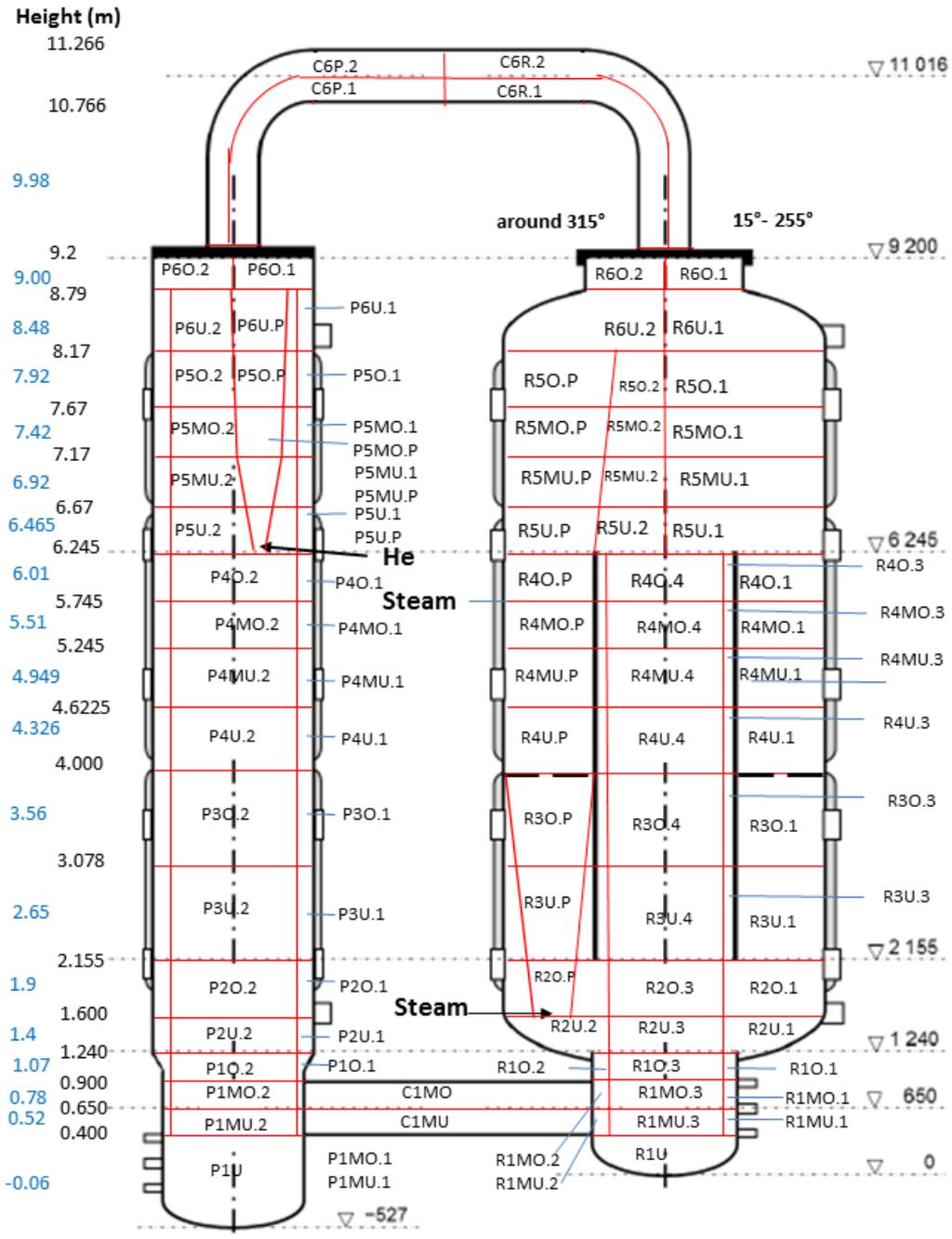


Abb. 2.95 THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung; Ansicht mit Plume für untere Dampfinspeisung in TTV

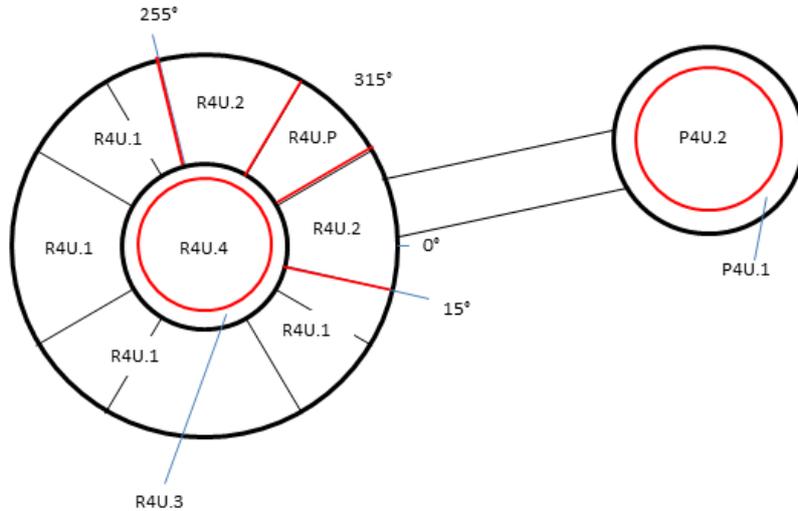


Abb. 2.96 THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung (Querschnitt)

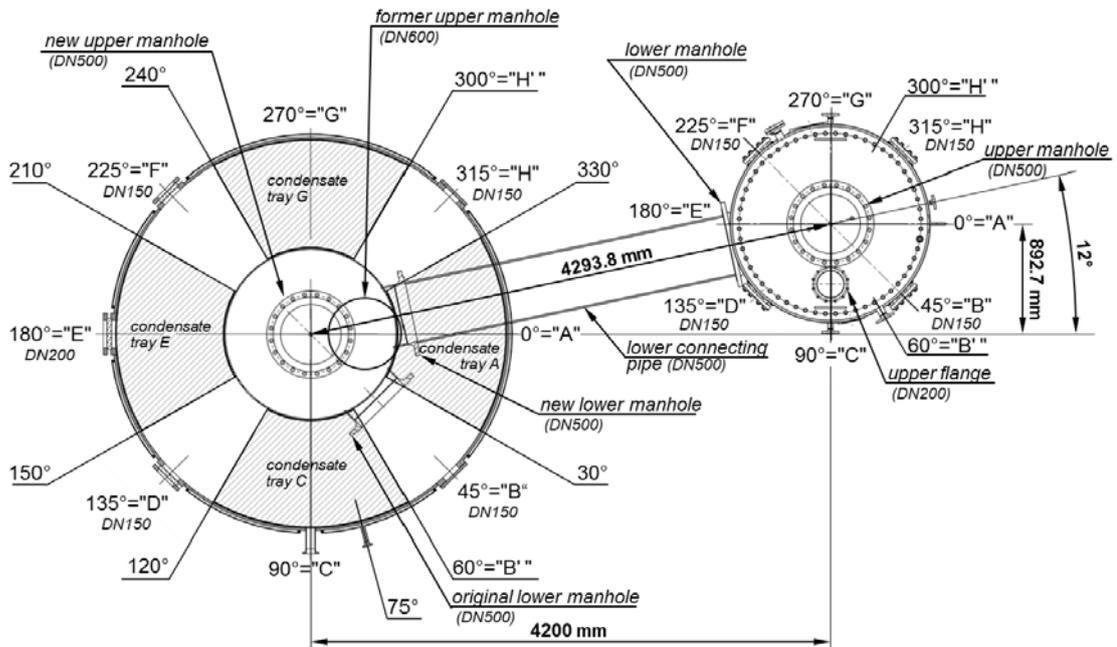


Abb. 2.97 Querschnitt THAI+, Draufsicht (TTV links, PAD, rechts)/FRE 15/

2.3.1.3 THAI TH-27 Benchmark Ergebnisse (doppeltblinde und blinde Rechnungen)

Die Ergebnisse der drei Rechnungsphasen werden nachfolgend vergleichend gegenübergestellt. Zum THAI-Inbetriebnahmeversuch TH27 waren im zweiten Halbjahr 2015 doppelblinde COCOSYS-Rechnungen erstellt worden und im ersten Halbjahr 2016 blinde Rechnungen. Abschließend wurden offene Nachrechnungen durchgeführt. Es wurden Abweichungen von den spezifizierten zu den experimentellen Randbedingungen berücksichtigt, z. B. die um einen Faktor 1,7 höhere PAD-Kühlerleistung. Die

Wärmeleitfähigkeit des Isoliermaterials der Behälter und Rohrleitungen wurde aufgrund der experimentellen Ergebnisse erhöht. Die obere Verbindungsleitung wurde in vertikaler Richtung unterteilt. Die Ergebnisse des Benchmarks sind in /FRE 17a/ dokumentiert. Die teilnehmenden Institute und eingesetzten Simulationsprogramme können den Tab. 2.9 und Tab. 2.10 entnommen werden.

Tab. 2.9 THAI TH-27 Benchmark: Teilnehmer und Simulationsprogramme

Institut	Simulationsprogramm	Nodalisierung	Kennzeichnung	Phase
Becker Technologies, Germany	GOTHIC 8.0	867 cells, 6 LP zones	BT-GOTHIC	DB*
Jozef Stefan Institute, Slovenia	ASTEC v2.1	41 zones	JSI-ASTEC	DB, B**
Ruhr-Universität Bochum, LEE, Germany	COCOSYS V2.4v3	233 zones, 781 junct., 260 structures	RUB-COCOSYS	DB, B
Ruhr-Universität Bochum, LEE, Germany	ASTEC V2.0R2p2	153 zones, 541 junct., 251 structures	RUB-ASTEC	DB
NUBIKI, Hungary	ASTEC V21_0_1 (CPA modul)	42 zones	NUBIKI-ASTEC	DB, B
RWTH Aachen/FZ Jülich, Germany	COCOSYS v2.4.1	173 zones	FZJ-COCOSYS	DB, B
GRS gGmbH, Garching, Germany	COCOSYS v3.0	109 zones	GRS-COCOSYS	DB, B
IRSN, France	ASTEC V2.0	133 zones, 139 structures, 246 junct.	IRSN-ASTEC	DB, B
Lithuanian Energy Institute, Lithuania	ASTEC V2.1.0,1	68 zones	LEI-ASTEC	DB, B
NRG, The Netherlands	FLUENT 15	1747983 fluid cells, 190453 solid cells	NRG-FLUENT	DB
University of Stuttgart, IKE, Germany	ANSYS CFX 16.1	7118431 cells	IKE-CFX	DB
KIT Campus Nord, Germany	GASFLOW-MPI	348920 cells	KIT-GASFLOW	DB, B
UJV Rez, a.s., Czech Republic	MELCOR 2.1	282 zones, 597 junct., 336 structures	UJV-MELCOR	B

*DB: doppelblinde Rechnung, **B = blinde Rechnung

Tab. 2.10 THAI TH-27 Benchmark: Simulationsprogramme

Simulation	Vertical resolution of THAI+ Steam and helium injection
BT-GOTHIC	17 levels Mass, energy, orientation and momentum of gas injections considered
JSI-ASTEC	7 zones momentum free injection of gases, no plume modeling
RUB-COCOSYS	30 levels for PAD, 20 levels for TTV momentum free injection of gases, no plume modeling
RUB-ASTEC	30 levels for PAD, 20 levels for TTV momentum free injection of gases, no plume modeling
NUBIKI-ASTEC	6 levels for PAD, 7 levels for TTV 11° plume for helium injection considered, momentum free injection of steam
RWTH-COCOSYS	24 levels 20° plume for both steam and helium injections considered
GRS-COSOSYS	18 levels entrainment and jet approximation for upper steam injection, non-linear plume for lower steam and helium injection
IRSN-ASTEC	15 level for PAD, 18 levels for TTV none jet approximation for upper steam injection
LEI-ASTEC	7 levels for PAD, 17 levels for TTV momentum free injection of gases, no plume modeling
NRG-FLUENT	Highly resolved mesh with mainly tetrahedral cells and Abid low Reynolds k- ϵ (Abid, 1993) injections as boundary conditions w/ mass, energy and momentum, mesh refinement at injection locations
IKE-CFD	Highly resolved mesh with mainly tetrahedral cells, SST model injections modelled as boundary conditions w/ mass, energy and momentum
KIT-GASFLOW	121 vertical hexahedral cells with standard k- ϵ , wall functions injections modelled as boundary conditions considering mass, energy and momentum
UJV-MELCOR	23 levels for both vessels 2° plume for upper steam injection considered, momentum free injection of helium

Die folgenden Abbildungen stellen zunächst die Ergebnisse der beteiligten Simulationsprogramme den experimentellen Daten für die doppelblinde Phase gegenüber. Die COCOSYS-Rechnungen der GRS sind die grauen Kurven (GRS-COCOSYS. Der Druckverlauf (Abb. 2.98) zeigt in zwei Phasen bei einigen Rechnungen deutliche Abweichungen vom Experiment und auch der Rechnungen untereinander.

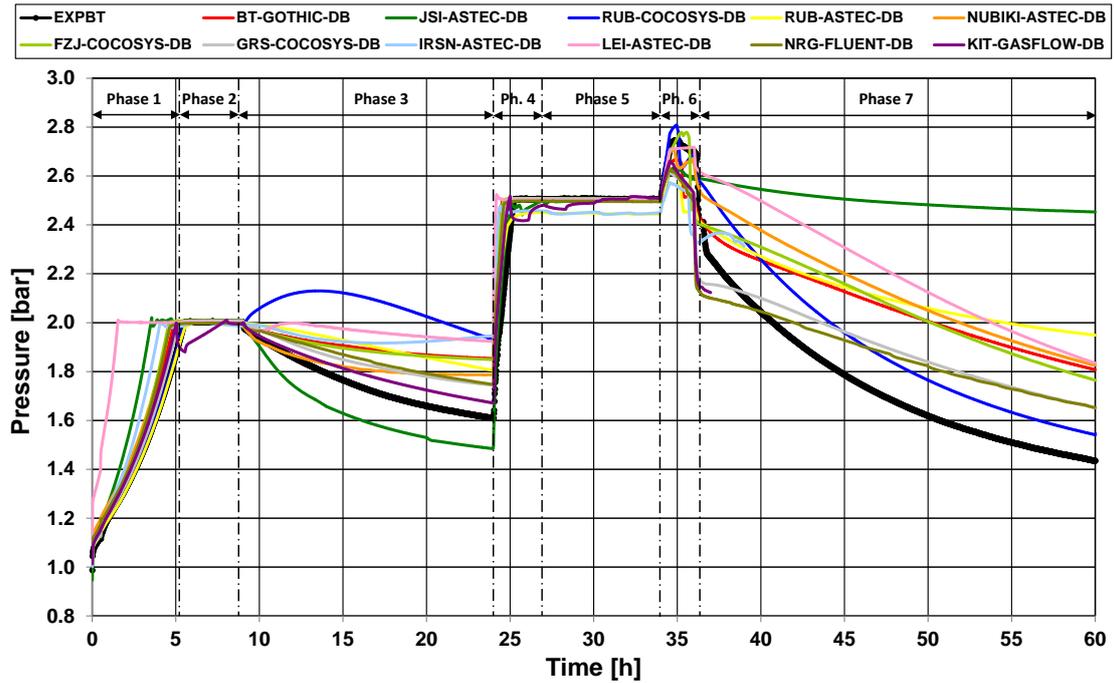


Abb. 2.98 THAI TH-27 Benchmark: Druckverlauf im PAD während der Versuchszeit (doppeltblinde Rechnungen) /FRE 17a/

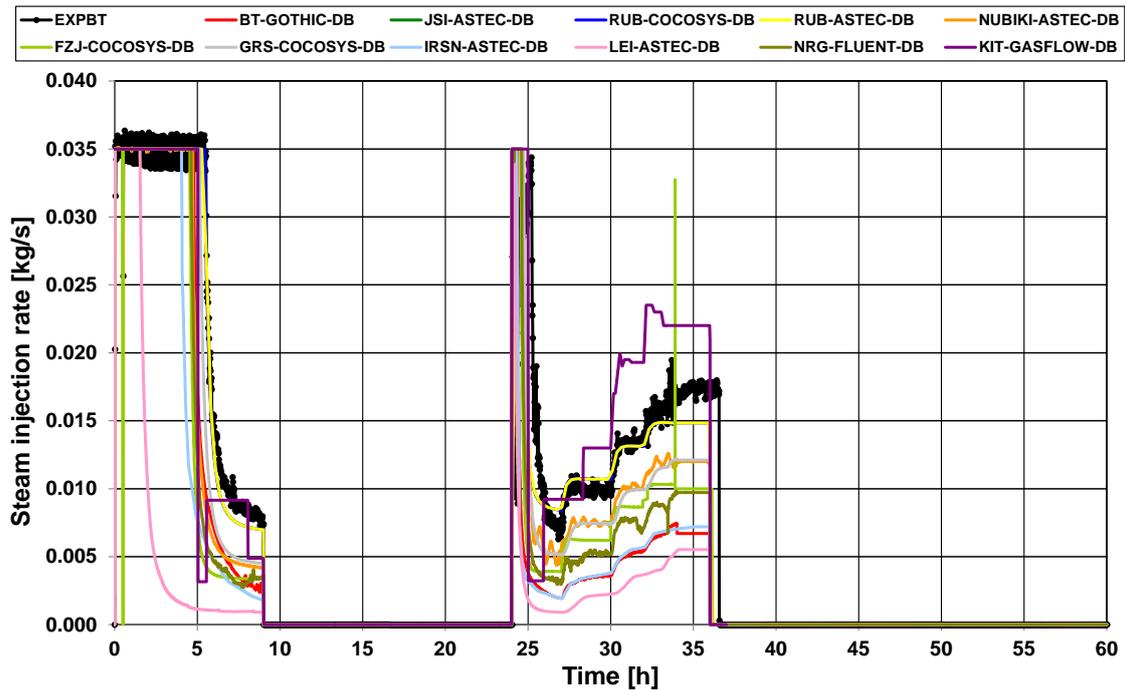


Abb. 2.99 THAI TH-27 Benchmark: Dampfeinspeisung während der Versuchszeit (doppeltblinde Rechnungen) /FRE 17a/

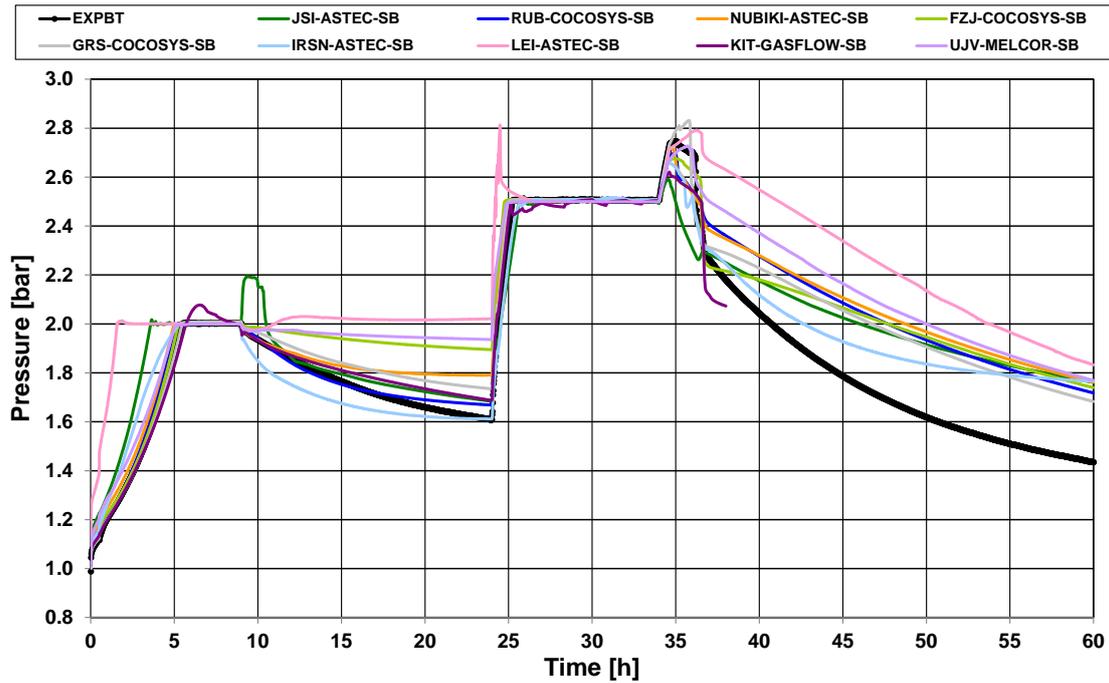


Abb. 2.100 THAI TH-27 Benchmark: Druckverlauf im PAD während der Versuchszeit (blinde Rechnungen) /FRE 17a/

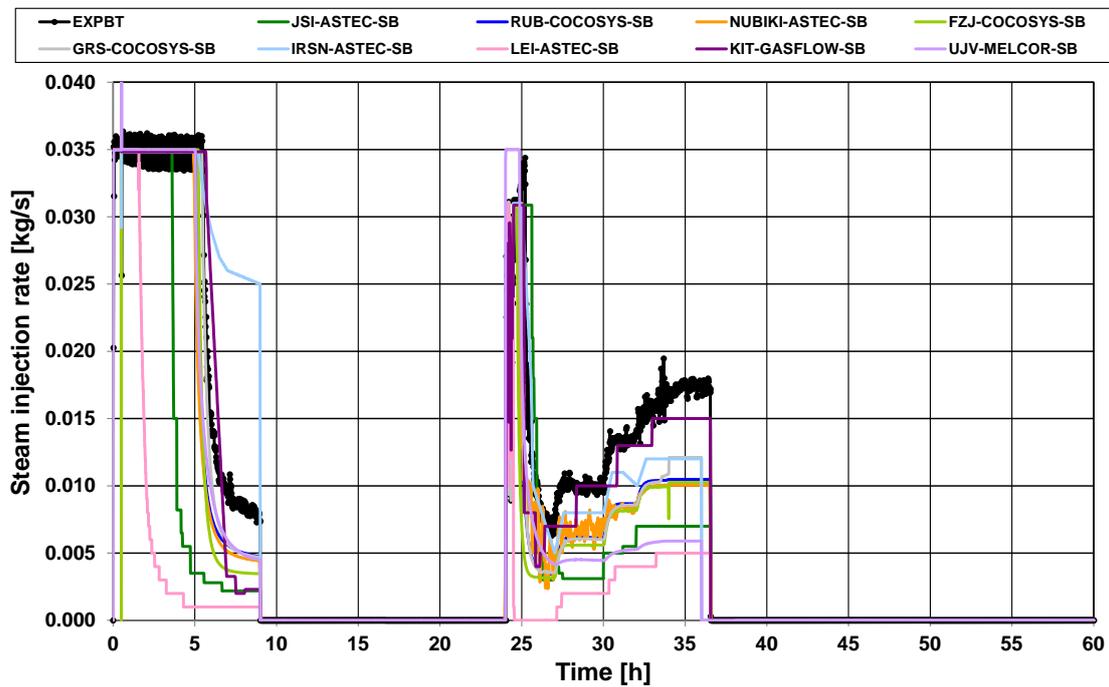


Abb. 2.101 THAI TH-27 Benchmark: Dampfeinspeisung während der Versuchszeit (blinde Rechnungen) /FRE 17a/

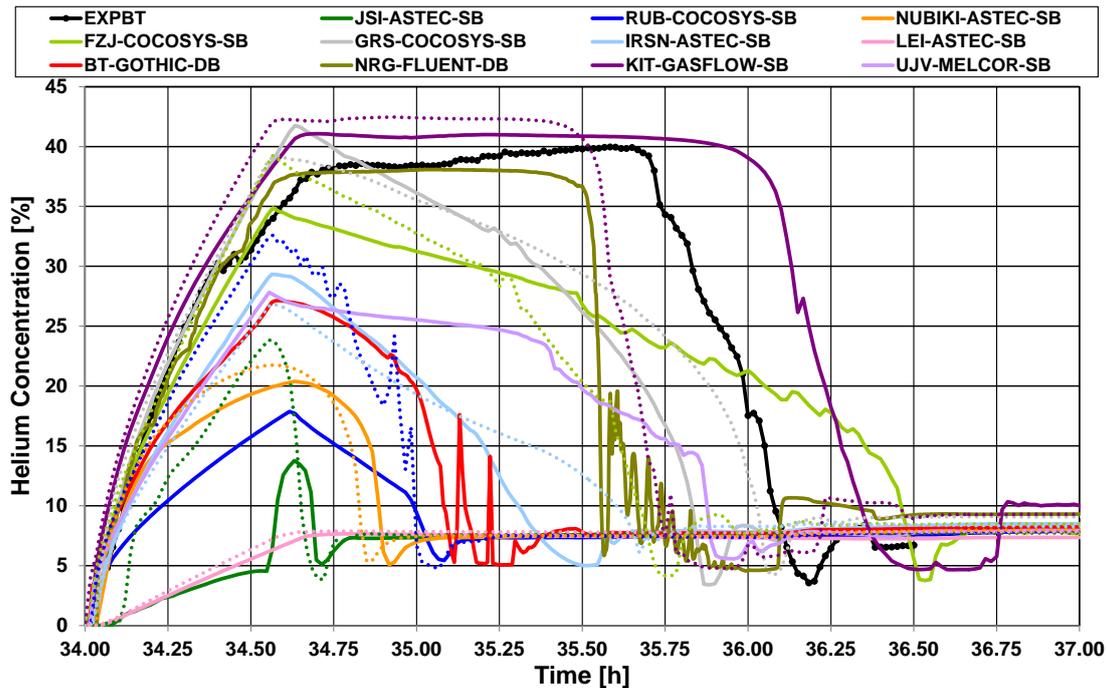


Abb. 2.102 THAI TH-27 Benchmark: Heliumkonzentration im oberen Verbindungsrohr (doppeltblinde (gepunktete) und blinde (durchgezogene) Rechnungen) /FRE 17a/

THAI TH-27 offene Nachrechnung

Die bereits guten Ergebnisse der doppeltblinden und der blinden COCOSYS-Rechnungen der GRS zu THAI-TH27 konnten in der offenen Nachrechnung weiter verbessert werden. Dies betrifft einerseits die Druck- und Temperaturverläufe aufgrund der besseren Beschreibung der Wärmeleitfähigkeit des Isoliermaterials sowie der gemessenen Kühlerleistung. Des Weiteren wurden der Aufbau und die Auflösung der Heliumschichtung aufgrund der vertikalen Unterteilung der oberen Verbindungsleitung noch besser simuliert.

Für die offene Rechnung wurde die Nodalisierung des oberen Verbindungsrohres geringfügig überarbeitet um die Heliumkonzentration in diesem Bereich besser abbilden zu können. Außerdem wurden die Randbedingungen entsprechend den Nachanalysen des Experiments angepasst. Dies betraf die Kühlung der äußeren Behälterwände durch äußere Kühlmäntel, die von Öl durchflossen wurden. Weitere Anpassungen betrafen die Wärmeleitfähigkeit λ der Isolierung aus Steinwolle, die mit gewissen Unsicherheiten behaftet ist und aus Wärmebilanzbetrachtungen für das Experiment abgeleitet werden kann. Mit diesen Änderungen konnten die Rechnung hinsichtlich z. B. des Druckverlaufs nochmals verbessert werden, da die Wärmeabgabe einen direkten Einfluss auf den

Druckverlauf hat (Abb. 2.103). Genauso konnten die Ausbildung und Auflösung der Heliumschichtung jetzt besser abgebildet werden (Abb. 2.104). Wenngleich die Ansammlung während der Anfangsphase jetzt etwas mehr überschätzt wurde, werden die experimentellen Daten über den gesamten Versuchszeitraum jetzt besser getroffen, z. B. hinsichtlich der stabilen Ausbildung der Schichtung über einen Zeitraum von nahezu 1 h.

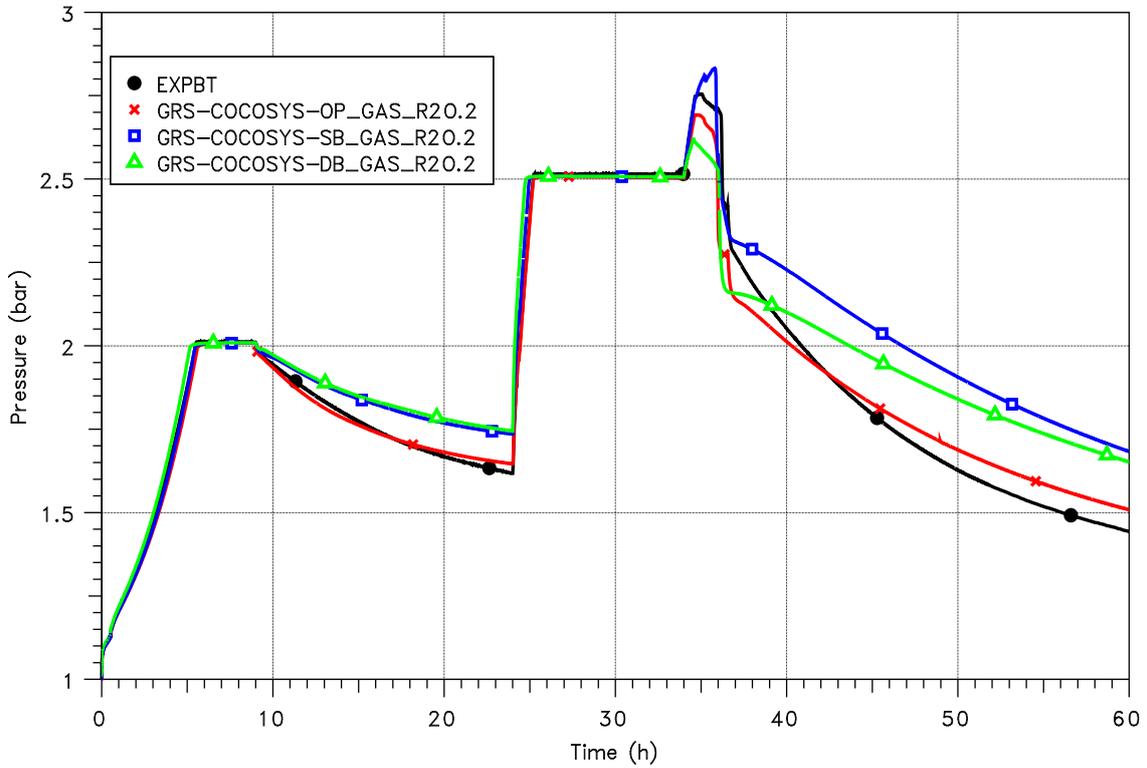


Abb. 2.103 THAI TH-27: Druckverlauf für doppelblinde (grün), blinde (blau) und offene (rot) GRS-COCOSYS-Rechnung /FRE 17a/

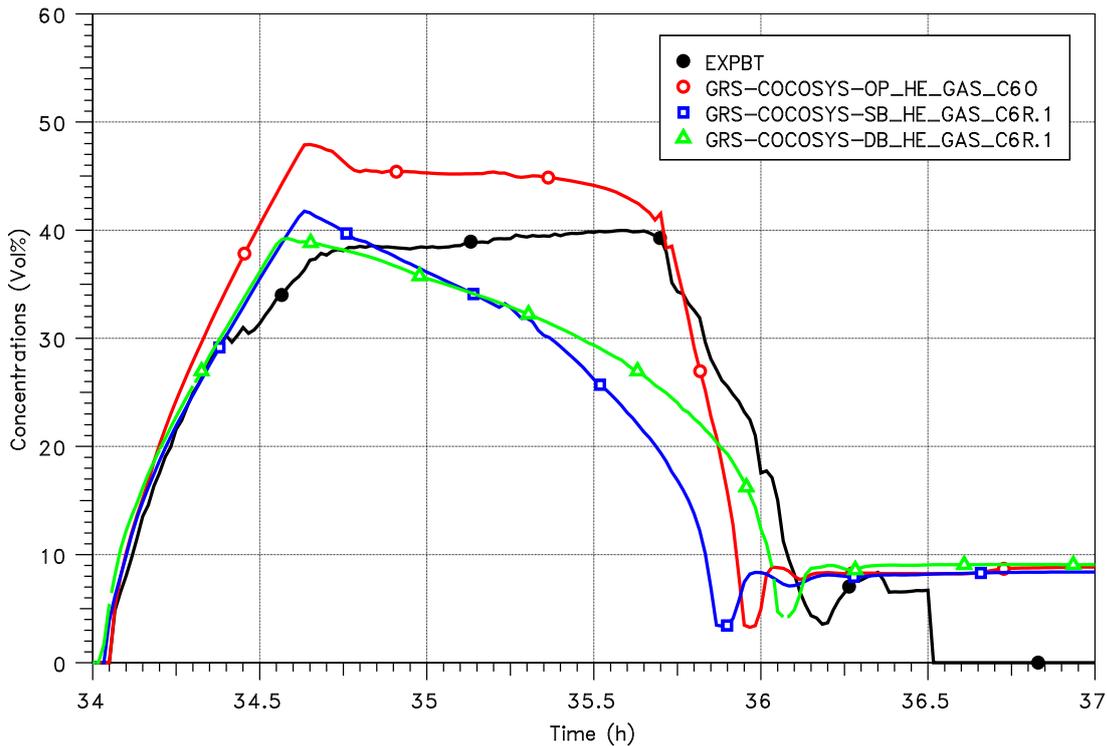


Abb. 2.104 THAI TH-27: Heliumkonzentration für doppelblinde (grün), blinde (blau) und offene (rot) GRS-COCOSYS-Rechnung /FRE 17a/

2.3.1.4 Fazit zu COCOSYS-Analysen von THAI TH-27

Die integrale Wärmekapazität der Anlage, also die Bilanz aus aufgenommener Energie und abgegebener Energie, ist sehr gut berechnet worden. Dies zeigt die erste Phase der Aufheizung von 0 – 7 h mittels Dampfeinspeisung (Energiequelle). Die Wärmeverluste werden geringfügig unterschätzt, können aber angesichts der Anlagenverhältnisse (Isolierung), die teils nicht anlagentypisch sind, als sehr akzeptable angesehen werden. Dies zeigt sich in der Phase der Druckstabilisierung sowie in der passiven Phase der Abkühlung, in der das Gesamtsystem sozusagen sich selbst überlassen wird und auskühlt, verbunden mit einem langsamen Druckabfall.

Hinsichtlich der Anforderung an die Nodalisierung können folgende Schlüsse gezogen werden. Die Nodalisierung erfordert gute Kenntnisse der zugrundeliegenden numerisch-physikalischen Möglichkeiten eines LP-Programmes zur realistischen Modellierung thermohydraulischer Phänomene. Dies betrifft bei TH-27 insbesondere die Bildung und Auflösung einer Leichtgaswolke. Anlagenbedingt wurde bei TH-27 Helium verwendet, im Containment wäre es Wasserstoff. Charakteristische Stoffwerte, wie z. B. die Temperaturleitfähigkeit $a = \lambda / (c_P \cdot \rho)$, sind von gleicher Größenordnung (Helium $a = 2,55E - 04$, Wasserstoff $a = 2,37E - 04$). In der doppelblinden und blinden Simulation konnte

dies eindeutig vorhergesagt werden. Nach Auswertung der experimentellen Daten und geringen Modifikationen konnten die Ergebnisse sogar noch verbessert werden. Als Gründe für die Abweichungen konnten u. a. die Besonderheiten der THAI-Anlage identifiziert werden. Durch die Verbindungsleitung zwischen TTV und PAD am oberen Ende entwickeln sich temporär entgegengesetzte Strömungen. Die gegenläufigen Strömungen induzieren an ihrer Grenzschicht eine Turbulenz, die sich im weiteren Verlauf (zeitlich wie räumlich) verstärken kann und einen Impuls- und Massenaustausch bewirkt. Dies kann mit einem LP-Programm so nicht simuliert werden. Für Anlagengeometrien wird dies aber nicht als entscheidend angesehen.

Bezüglich der Temperaturen in der Anlage zeigen die COCOSYS-Rechnungen bereits in der doppelblinden Rechnung eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Dies gilt sowohl für die Atmosphärentemperaturen als auch die Wandtemperaturen.

Als Resümee kann die Beteiligung am TH-27 Benchmark als sehr gute Bestätigung der Qualität von COCOSYS gewertet werden. Insbesondere die Vorausrechnung von Experimenten stellt die höchsten Anforderungen an das Programm. Weiterhin gilt die Erfahrung, dass für eine korrekte Anwendung von COCOSYS, und dies gilt sicherlich für alle derartigen Programmsysteme, eine ausreichende Anwendererfahrung notwendig ist. Diesem Umstand trägt die GRS durch eine umfangreiche Dokumentation und Nutzerempfehlungen Rechnung, die gerade aus Analysen wie dieser abgeleitet werden.

3 Verifizierung von COCOSYS durch Anlagenrechnungen

Aufgrund der Komplexität der miteinander wechselwirkenden Prozesse und Phänomene von Primärkreis und Containment und im Sinne einer vollständigen Simulationskette ist eine grundlegende Analyse der Ergebnisse von gekoppelten ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS-Rechnungen notwendig. Weiterhin wurde die Anbindung von COCOSYS an CoPool fortgeführt und entsprechende Anwendungsrechnungen durchgeführt.

3.1 Erprobung der GRS-Rechenkette ATHLET-CD/COCOSYS

3.1.1 Simulation eines kleinen Lecks in DWR KONVOI

Für die hier dargestellten Rechnungen für das einleitende Ereignis „kleines Leck mit Ausfall weiterer Sicherheitssysteme (Sumpfumwälzbetrieb)“ wurde ein verfügbarer gekoppelter ATHLET-CD/COCOSYS-Datensatz verwendet. Eine Skizze des eingesetzten ATHLET-Datensatzes ist in Abb. 3.1 dargestellt. Es sind alle vier Stränge des Primär- und Sekundärkreises separat modelliert. Das Leck befindet sich am heißen Strang 1 (HL 1) und ist mittels „Minor Branching“ mit diesem verbunden. Es ist als kurzes Pipe-Objekt (Objekt TFJEC10H1B) mit Discharge-Valve (Objekt VAJEC10H1B) und angeschlossenen Time Dependent Volume (TDV) (Objekt TFJEC10H1T) modelliert. Druck, Temperatur und Stoffwerte in diesem Volumen werden von COCOSYS bestimmt. Das entsprechende COCOSYS-Volumen ist R12B.

Die Fläche des Lecks ist über die maximale Ventilquerschnittsfläche ($0,4417 \text{ m}^2$) und die maximale relative Querschnittsfläche ($4,5279\text{E}-03$) bestimmt und liegt damit bei ca. $0,002 \text{ m}^2$. Für die kritische Ausströmung wird das CDR1D-Modell von ATHLET verwendet. In der für das Leck genutzten Geometrie-Tabelle (IBLAS = 3) ist die Fläche A2 allerdings ein Wert von $0,005 \text{ m}^2$ angegeben. Die damit für die Bestimmung der kritischen Strömung zu Grunde gelegte Fläche stimmt nicht mit der Querschnittsfläche überein, die bei nicht-kritischer Strömung angenommen wird.

Weiterhin sind die ATHLET-CD Module ECORE, Quench Front, MEWA, FIPREM, SAFT, OREST, FIPISO, AIDA und VESSEL aktiv. In ECORE wird das Triggersignal (MTLP) vorgegeben, das den Zeitpunkt der Schmelzeausbreitung aus dem Kernbereich in das untere Plenum des Reaktors definiert (Versagen der unteren Kerngitterplatte). Dieses Signal wird 1 gesetzt, wenn die Gesamtschmelzemasse (MTLP1) und die Masse der

keramischen Schmelze (MTLP2) im Kern jeweils einen bestimmten Wert erreichen. Dabei wurden die in Tab. 3.1 aufgelisteten Kombinationen untersucht.

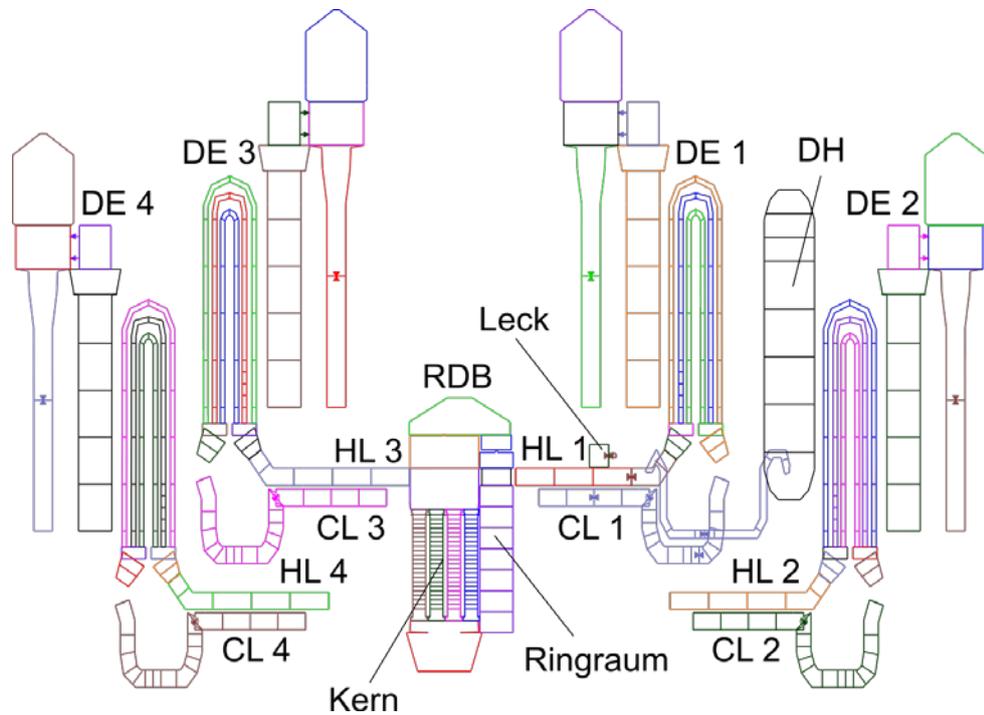


Abb. 3.1 ATHLET-Nodalisierung DWR KONVOI, HL: Heißer Strang, CL: Kalter Strang, DE: Dampfzeuger, RDB: Reaktor-druckbehälter, DH: Druckhalter

Tab. 3.1 Gewählte Kombinationen aus gesamer und keramischer Schmelzemasse (Rechnung 2 mit den Standardwerten)

Nummer	Gesamtschmelzemasse (kg)	Masse keramischer Schmelze (kg)
1	25000	10000
2	35000	10000
3	35000	15000
4	35000	20000
5	45000	10000

Der gekoppelte COCOSYS-Datensatz beinhaltet neben den Modulen für die Thermohydraulik (THY), die Aerosol- und Spaltproduktmodellierung (AFP) auch das CCI Modul für die Beton-Schmelze-Wechselwirkung. In früheren Analysen waren Probleme bei der Modellierung der Schmelzeverlagerung im Reaktor-druckbehälter aufgetreten, die ein realistisches Weiterführen der Rechnung nicht ermöglichten. Es hatte sich gezeigt, dass während der Verlagerung von Kernschmelze ins untere Plenum die Nachzerfallsleistung

nicht korrekt bilanziert worden war, so dass die Schmelzetemperaturen meist zu niedrig waren und kein RDB-Versagen detektiert werden konnte. Untersuchungsziel war deshalb der Zeitraum der Schmelzeverlagerung und der Zeitpunkt des RDB-Versagens. Speziell sollte der Einfluss des Zeitpunktes der Schmelzeverlagerung ins untere Plenum untersucht werden, da aktuell kein mechanistisches Verlagerungsmodell in ATHLET-CD existiert. Vielmehr muss der Anwender vorab im Eingabedatensatz Kriterien für die Schmelzemasse definieren, bei deren Erreichen eine Verlagerung getriggert wird. Nachfolgend werden diese Parameter variiert, um den Einfluss der Wahl auf den Zeitpunkt des RDB-Versagens zu untersuchen.

3.1.1.1 Ergebnisse der Rechnungen (Standardfall)

Zunächst wird der Verlauf des Unfalls anhand des in der vorangegangenen Tab. 3.1 beschriebenen Standardfalls mit 35 t Gesamtschmelzemasse und 10 t keramischer Schmelze bei Materialumlagerung zur AIDA-Aktivierung beschrieben.

Tab. 3.2 Anfangsbedingungen

Größe	Wert	Größe	Wert
<i>Primärkreis</i>		<i>Sekundärkreis</i>	
Druck Druckhalter	156,35 bar	Druck	62,9 bar
Temperatur Kerneintritt	324,5 °C	FD-Temperatur	278,9 °C
Temperatur Kernaustritt	289,7 °C	SpW-Temperatur	218,9 °C
Thermische Leistung	3850 MW	Füllstand DE	14,47 m (abs)
Füllstand Druckhalter	6,124 m (abs)		
<i>Sicherheitsbehälter</i>			
Druck	1,0251 bar		

Die Anfangsbedingungen vor dem Öffnen des Lecks sind in Tab. 3.2 aufgelistet. Zusätzlich zum Leck wird angenommen, dass die Notkühlsysteme in Sumpfansaugung, An- und Abfahrpumpen, Hauptspeisewasserpumpen, Notspeisewasserpumpen sowie Notstromdiesel nicht zur Verfügung stehen.

Der Verlauf des Unfalls ist in Abb. 3.2 dargestellt. Da die ersten 5000 s dem Einschwingen in den stationären Zustand dienen, werden diese nicht mit abgebildet. Mit Öffnen des Lecks fällt der Füllstand im Druckhalter (JEF10CL851 in Abb. 3.2) und der Druck im

SB (JMA30CP12B in Abb. 3.2) steigt an. Durch die dann ausgelöste Reaktorschnellabschaltung (RESA) fällt die Reaktorleistung (TOTNPOW in Abb. 3.2) exponentiell ab. Die über das Leck abgegebene Leistung ist bis ca. 18000 s größer als die Kernleistung (GHJ_LEAK in Abb. 3.2). Die Notkühlkriterien werden ausgelöst (DHF < 2,28 m, SB-Druckanstieg > 30 mbar, Primärdruck < 110 bar) und die Hochdruckeinspeisung des Not- und Nachkühlsystems speist aus dem Sicherheitseinspeisebehälter Kühlmittel in den Primärkreis ein. Der abfallende Primärdruck wird durch das Not- und Nachkühlsystem (HD-Pfad) bei 80 bar konstant gehalten (Massenstrom in den dritten heißen Strang GJ_30_ECC in Abb. 3.2). Der niedrige Druck führt zu einer Dampfbildung im oberen Plenum des Reaktordruckbehälters (Deckelblase), da hier aufgrund unzureichender Durchmischung die Kühlmitteltemperatur nicht genauso schnell abnimmt, wie im Rest des Primärkreises und dadurch die Sättigungstemperatur (d. h. ca. 295 °C bei 80 bar) erreicht wird. Durch Konstanthalten des Drucks auf 80 bar durch das Not- und Nachkühlsystem kühlt sich jedoch auch die Deckblase langsam ab und kollabiert zum Zeitpunkt $t = 9500$ s, wodurch kurzzeitig der Druck im Primärkreis auf etwas über 40 bar absinkt. Die Hochdruckeinspeisung drückt ihn jedoch wieder auf 80 bar. Ab $t = 17500$ s ist der Sicherheitseinspeisebehälter leer und die Hochdruckeinspeisung fällt aus. Daraufhin sinkt der Druck im Primärkreis weiter ab. Ab ca. 9 bar speisen die Druckspeicher ihr Inventar in den Primärkreis ein (auch in GJ_30_ECC in Abb. 3.2 abgebildet). Da die Sumpfansaugung der Niederdruckeinspeisung deaktiviert ist, kann diese kein Kühlmittel in den Primärkreis verbringen. Daher sinkt der Füllstand im Reaktordruckbehälter nach der Druckspeichereinspeisung immer weiter ab und der Druck im Primärkreis nimmt wieder zu. Infolgedessen nimmt auch der Leckmassenstrom (GJ_LEAK in Abb. 3.2) wieder zu und auch der Druck im SB.

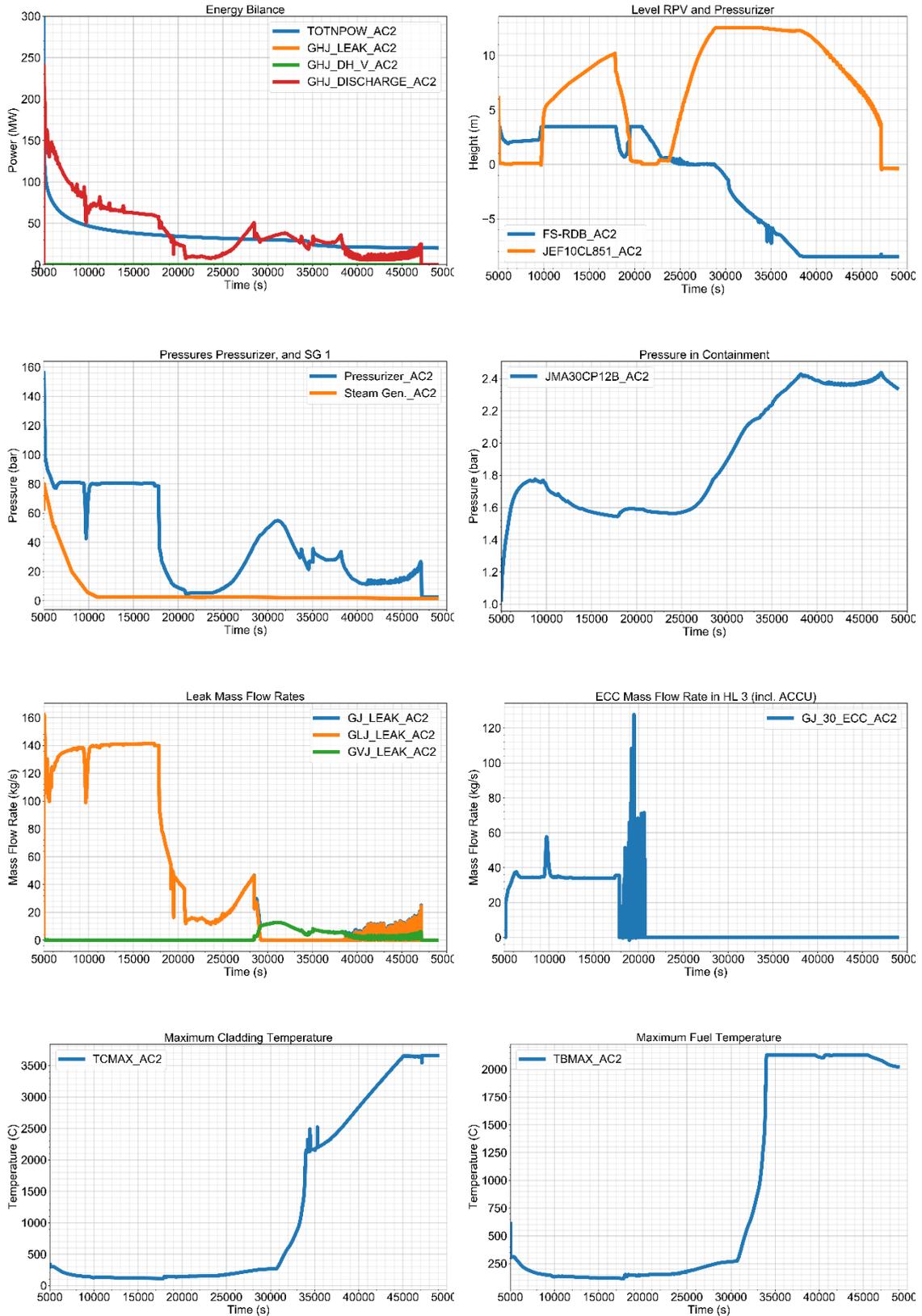


Abb. 3.2 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Verlauf des Unfalls (Standardwerte für Gesamtschmelzmasse und Masse keramischer Schmelze)

Der Füllstand im Reaktordruckbehälter bildet zwischen 23000 s und 29000 s ein Plateau bei ca. 0 m. Hier ist zwar zunächst das obere Plenum mit Dampf gefüllt, die Hauptkühlmittelleitungen und die Dampferzeuger jedoch noch mit Wasser. Dieses verdampft bis ca. 29000 s bevor der Füllstand weiter absinken kann. Zu diesem Zeitpunkt schlägt auch die Leckausströmung von Wasser zu Dampf um (GLJ_LEAK und GVJ_LEAK in Abb. 3.2). Mit Abfall des Füllstandes unter -1,85 m wird nun der Kern auf seiner aktiven Länge freigelegt. Dieser Punkt ist ab ca. 31000 s erreicht und die max. Hüllrohr- und Brennstofftemperaturen steigen stark an (TCMAX, TBMAX Abb. 3.2).

Ab diesem Punkt sinkt auch der Primärdruck wieder ab. Der Grund hierfür ist die immer geringer werdende Dampfproduktion im Kern durch den abfallenden Füllstand. Mit Ansteigen der Brennstofftemperaturen beginnt der Kern zu schmelzen. Die dabei entstehenden Schmelzmassen sind in Abb. 3.3 (TOT-MELT und CER-MELT) dargestellt. Die Schmelze verlagert sich bei Versagen der unteren Kerngitterplatte in das untere Plenum gemäß dem gewählten Kriterium (Tab. 3.1). Hier ist es bei ca. 34500 s der Fall. Nach 47.000 s versagt der Reaktordruckbehälter und die Rechnung endet.

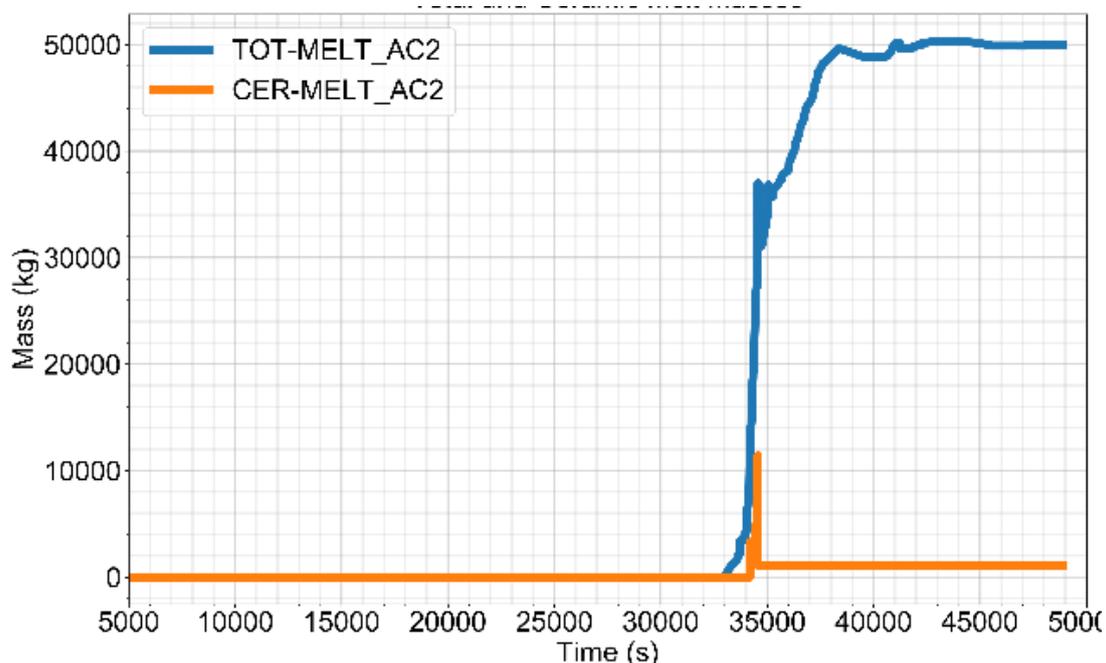


Abb. 3.3 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Schmelzmassen (gesamt und keramisch)

3.1.1.2 Rechnung mit Variation der Gesamtschmelzemasse

Nachfolgend werden die Ergebnisse der Fälle 1, 2, und 5 gemäß Tab. 3.1 dargestellt. Der grundlegende Ablauf aller drei Rechnungen ähnelt dem Basisfall. In Abb. 3.4 sind die Schmelzmassen, die Drücke in Reaktorkreislauf und SB und die Triggersignale für AIDA für die Gesamtschmelzemasse (MTLP1) und die Masse der keramischen Schmelze (MTLP2) dargestellt.

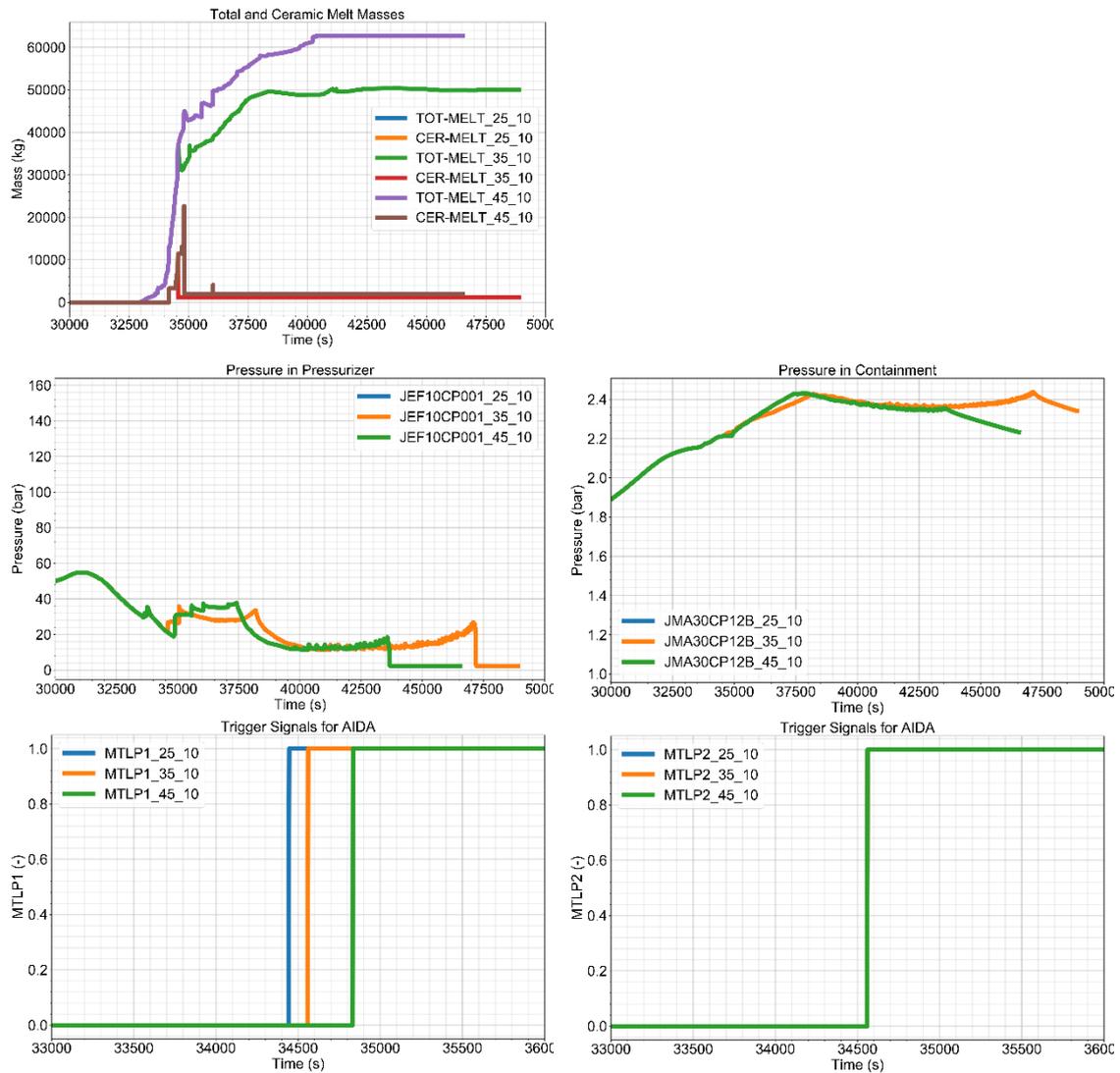


Abb. 3.4 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Vergleich verschiedener Rechnungen mit gleicher AIDA auslösende Masse keramischer Schmelze aber verschiedene auslösende Gesamtschmelzmassen

MTLP2 wird in allen drei Rechnungen gleichzeitig aktiviert (CER-MELT = 10 t), MTLP1 mit einer der Schmelzemasse entsprechenden Staffelung. Erst wenn beide Signale erreicht sind, kommt es zur Umlagerung ins untere Plenum. Daher verhalten sich die

beiden Rechnungen 1 und 2 mit den Gesamtschmelzemassen 25 t und 35 t quasi identisch. Durch die spätere Schmelzeverlagerung in das untere Plenum entsteht im Fall 5 mit 45 t Gesamtschmelze insgesamt mehr Schmelze (TOT-MELT in Abb. 3.4) und es kommt zur späteren Umlagerung. Allerdings tritt das RDB-Versagen ca. 3400 s früher auf. Die Verläufe des SB-Drucks ähneln sich sehr stark. Sie fallen mit Versagen des Reaktordruckbehälters ab. Im Fall mit 45 t entsteht jedoch weniger Wasserstoff im Kern (ACCH2 in Abb. 3.5). Er wird durch das Leck in den SB übertragen (MASS_003 in Abb. 3.5, Gesamtmasse Wasserstoff integriert aus GVMCJ/003 des Lecks (ebenfalls Abb. 3.5).

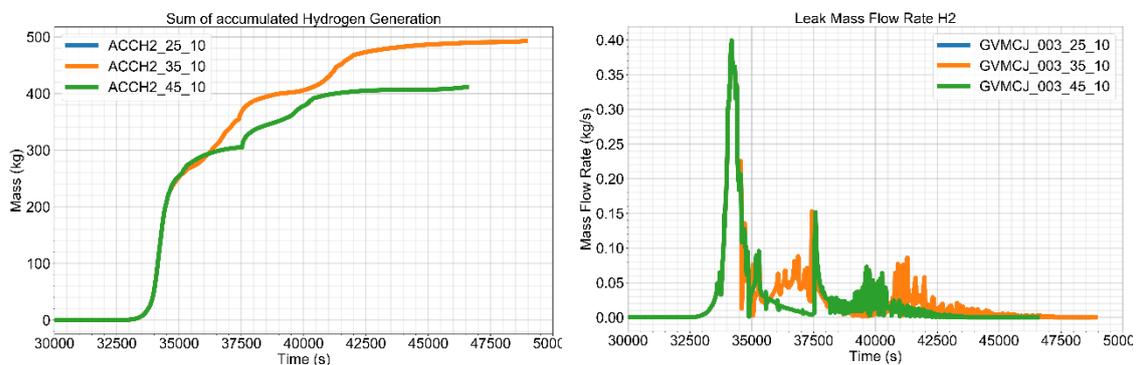


Abb. 3.5 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: H₂-Erzeugung im Kern, H₂-Massenstrom durch das Leck in den SB

3.1.1.3 Rechnung mit Variation der Masse der keramischen Schmelze

Hierbei handelt es sich um die Fälle 2, 3 und 4 aus Tab. 3.1. MTLP2 wird in allen drei Rechnungen gestaffelt aktiviert, MTLP1 ist dagegen gleich bei 35 t Gesamtschmelze. Der grundlegende Ablauf aller drei Rechnungen ähnelt dem generellen Verlauf. In Abb. 3.6 sind die Schmelzemassen, die Drücke in Reaktorkreislauf und SB und die Triggersignale für AIDA für die Gesamtschmelzemasse (MTLP1) und die Masse der keramischen Schmelze (MTLP2) dargestellt. MTLP1 wird in allen drei Rechnungen gleichzeitig aktiviert, MTLP2 ist entsprechend gestaffelt, wobei der Fall mit 15 t keramischer Schmelze mit dem Fall 20 t zusammenfällt, da der Verlauf von CER-MELT sehr steil ist (Abb. 3.6). Daher verhalten sich beide Fälle quasi identisch. Wie auch im Abschnitt weiter oben beschrieben, entsteht mehr Schmelze, je später die Verlagerung in das untere Plenum stattfindet. Auch das RDB-Versagen tritt dann schneller ein und es wird mehr Wasserstoff im Kern erzeugt (Abb. 3.7).

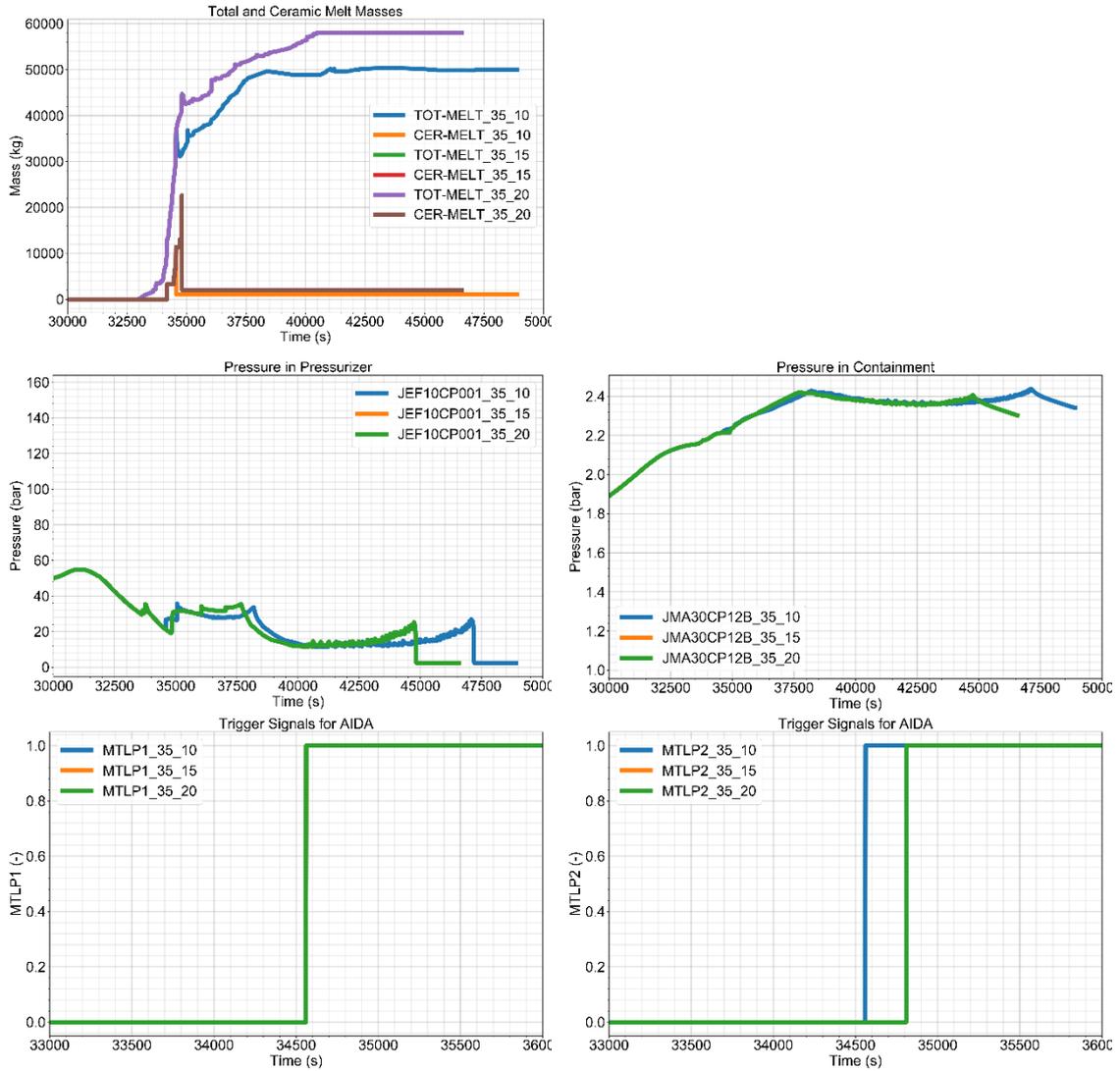


Abb. 3.6 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Vergleich verschiedener Rechnungen mit gleicher AIDA auslösenden Schmelzgesamtmasse aber verschiedene auslösende keramische Schmelzmassen

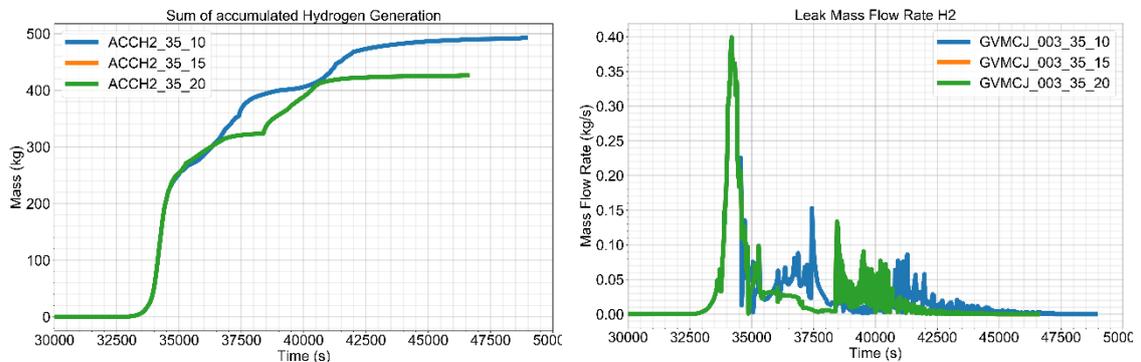


Abb. 3.7 ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: H₂-Erzeugung im Kern und H₂-Massenstrom durch das Leck in den SB

3.1.1.4 Fazit ATHLET-CD/COCOSYS-Anwendung

Für den Unfall durch ein kleines Leck im heißen Strang mit gleichzeitigem Ausfall weiterer Sicherheitssysteme wurde eine Parameteranalyse hinsichtlich des Zeitpunkts der Schmelzeverlagerung in das untere Plenum durchgeführt. Der Zeitpunkt des Versagens der unteren Kerngitterplatte wird durch eine vom Benutzer vorgegebene Menge der gesamten Schmelze und der keramischen Schmelze im Kern bestimmt. Diese Werte wurden variiert und ihr Einfluss auf den weiteren Verlauf des Unfalls untersucht.

In allen untersuchten Fällen versagt der Reaktordruckbehälter frühestens 43500 s nach dem auslösenden Ereignis (Lecköffnung). Je später die Verlagerung in das untere Plenum stattfindet, desto mehr Schmelze wird im Kern generiert und desto weniger Wasserstoff wird erzeugt.

Weiterhin wurden einige Unklarheiten im ATHLET-Datensatz identifiziert: Zum einen handelt es sich hierbei um Inkonsistenzen in der Modellierung der Leckquerschnittsfläche, die in der Ventilbeschreibung kleiner als im CDR1D-Input gewählt wurde. Auch scheint die Leckquerschnittsfläche zu groß gewählt, da mehr Energie über das Leck ausgetragen wird, als über die Nachzerfallsleistung eingetragen wird. Möglicherweise hätte die Niederdruckeinspeisung, wenn die Sumpfansaugung verfügbar gewesen wäre, einspeisen können.

Zum anderen wurden die Geschwindigkeiten für das Abfließen der Schmelzeströmen möglicherweise zu hoch gewählt. Um numerisch stabile Rechnungen zu erzeugen, wurden die Eingabewerte von WSL (Abfließgeschwindigkeit der metallischen Schmelze) von 0,05 m/s auf 0,01 m/s sowie WSLUO (Abfließgeschwindigkeit der keramischen Schmelze) von 0,015 m/s auf 0,01 m/s gesetzt. Ansonsten werden die Rechnungen durch FEBE infolge einer zu geringen Zeitschrittweite beendet. Die Verringerung der Zeitschrittweite wird durch einen starken Gradienten im Volumenstrom in der ersten Leitung des zweiten Kernringes verursacht.

3.2 Gekoppelte ATHLET/COCOSYS-Rechnung mit CoPool

3.2.1 Rechnung für eine Anlage des Typs DWR KONVOI

Die in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten sind eine Fortführung der Aktivitäten aus dem Vorhaben RS1514 /KLE 16/. Im Rahmen des COCOSYS-

Entwicklungsvorhabens RS1532 wurde die CoPool/COCOSYS-Schnittstelle weiter verbessert. Insbesondere werden nun die unterschiedlichen Stoffwerte für Wasser in CoPool und COCOSYS weitgehend berücksichtigt, so dass die Konsistenz der Rechenergebnisse mit bzw. ohne CoPool erreicht wird /SPE 17/. Außerdem sind Rechnungen mit ATHLET/COCOSYS gekoppelt mit CoPool möglich und wurden erprobt.

Der CoPool-Datensatz wird in /KLE 16/ beschrieben. Zum Vergleich zeigt Abb. 3.8 zunächst einen Ausschnitt eines DWR KONVOI Sicherheitsbehälters mit überlagerter COCOSYS Nodalisierung und den Sumpfbzonen RSUC und RSUA. Das entsprechende CoPool-Schema der Wandelemente des unteren SB-Bereiches ist in Abb. 3.9 dargestellt. Aufgrund der Erfahrungen bei der CoPool-Validierung wurde das Fluidgitter verfeinert. Die Anzahl der Zellen wurde in x- und y-Richtung verdoppelt, so dass die Seitenverhältnisse der einzelnen Zellen nicht mehr so stark verzerrt sind. Diese betragen nun $0,5 \times 0,5 \times 0,2 \text{ m}^3$.

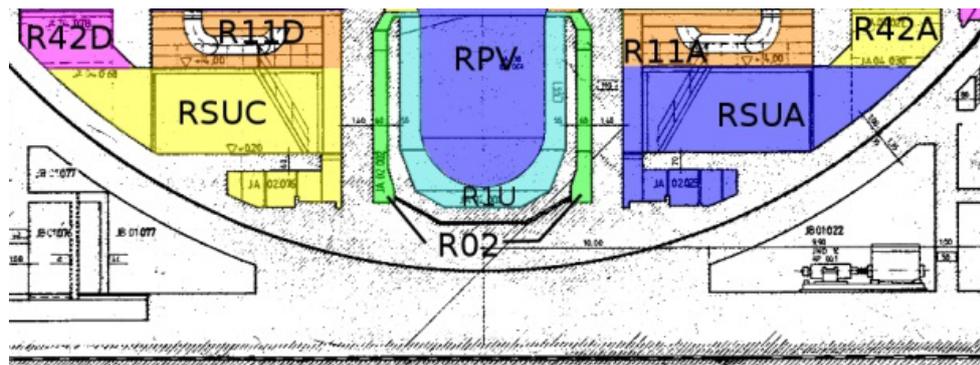


Abb. 3.8 COCOSYS: Nodalisierung für den Sumpfbereich des DWR KONVOI /KLE 16/

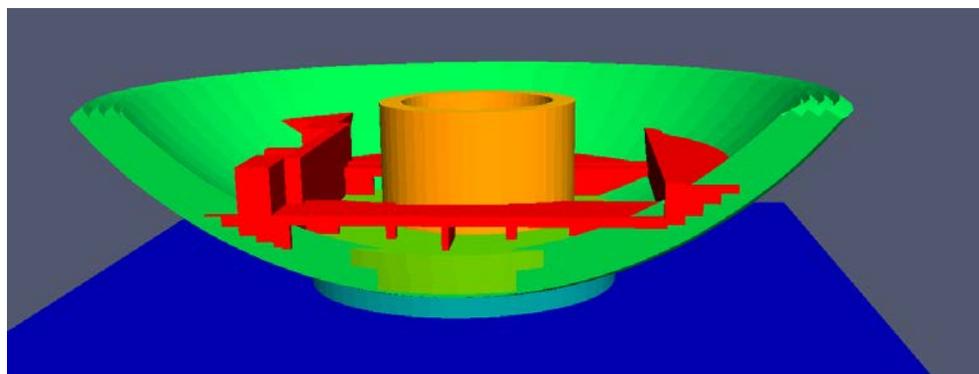


Abb. 3.9 CoPool: Wandelemente (Compounds) für den Sumpfbereich des DWR KONVOI /KLE 16/

3.2.1.1 Szenario

Die wesentlichen Merkmale des angenommenen Szenarios sind:

- Unterstellter Bruch an der heißseitigen Hauptkühlmittelleitung mit einem Querschnitt von 200 cm²,
- Sekundärseitiges Abfahren der DE,
- Ausfall des Kühlers im ND-Notkühlsystem im Strang 1 bei Sumpfumwälzbetrieb,
- Ausfall des Sumpfumwälzbetriebes für die Stränge 2 und 3,
- Ausfall der Hoch- und Niederdruckpumpe im Strang 4,
- Ausfall der Speisewasserversorgung sowie der Notspeisewasserversorgung (inklusive mobiler Pumpen).

Der verwendete ATHLET-Datensatz (Primärkreislauf mit 4 Loops) basiert auf dem Datensatz, welcher für Vergleichsrechnungen zwischen ATHLET-CD und ASTEC verwendet wurde. Eine Beschreibung ist in /REI 14/ zu finden. Ebenso ist dort der Containment-Datensatz beschrieben, der für COCOSYS verwendet wurde. In dieser Rechnung wurden ATHLET 3.2 (Entwicklerversion), COCOSYS 3.0 (Entwicklerversion) sowie CoPool Revision 1202 verwendet. Aufgrund der neuen ATHLET-Version mussten einige Eingabedaten korrigiert bzw. angepasst werden.

3.2.1.2 Ergebnisse

Im Folgenden werden die erzielten Rechenergebnisse dargestellt. Die Rechenergebnisse mit CoPool werden durch blaue Kurven und diejenigen ohne CoPool durch schwarze Kurven dargestellt. Die charakteristischen Zeitpunkte des Szenarios können aus der Tab. 3.3 entnommen werden. Die Rechnung wurde bis 3600 s durchgeführt.

Tab. 3.3 ATHLET/COCOSYS: charakteristische Ereignisse des Leckstörfalls

Ereignis	Zeit nach Beginn des Störfalls
200 cm ² Leck und RESA/TUSA und sekundärseitiges Abfahren der DE	~ 3 s
Beginn HD-Einspeisung (3v4)	14 s
Beginn Druckspeicher-Einspeisung	508 s
Beginn ND-Einspeisung (3v4)	815 s
Sumpfumwälzbetrieb (1v4), Stopp HD Einspeisung	2319 s

Zunächst werden einzelne Ergebnisse in Bezug auf den Kühlkreislauf sowie der Sekundärseite dargestellt. Dies sind die Drücke im Primär- und Sekundärkreis (Abb. 3.10), die Temperatur im RDB (Abb. 3.11) sowie der Wasserstand im Dampferzeuger (Abb. 3.12), ein Ergebnis von ATHLET. Die Ergebnisse der COCOSYS Stand-Alone-Rechnung sind jeweils mit „coc-x-yyy“ bezeichnet, diejenigen der gekoppelten COCOSYS-CoPool-Rechnung mit „cpl-x-yyy“.

Die Unterschiede in den Rechenergebnissen sind relativ gering, was für eine funktionierende Code-Kopplung spricht und zeigt, dass der Einfluss der detaillierten Sumpfmotivierung mit CoPool auf das Gesamtergebnis (Druckverlauf) untergeordnet ist. In der gekoppelten Rechnung (blaue Kurven) wird der Synchronisationszeitschritt durch CoPool vorgegeben. Somit werden Zeitschrittreduktionen für CoPool weitgehend vermieden. Aufgrund der kleineren Zeitschritte in der gekoppelten Rechnung sind einzelne Schwingungen in den Rechenergebnissen zu erkennen. Ab ca. 1700 s sind die Kerntemperaturen und der Wasserstand im Dampferzeuger in beiden Rechnungen etwas unterschiedlich (Abb. 3.12). Da es zu Beginn noch keine Rückwirkung des Containments auf das Verhalten im Kühlkreislauf geben kann, müssen die Unterschiede durch die unterschiedlichen Zeitschrittweiten begründet sein.

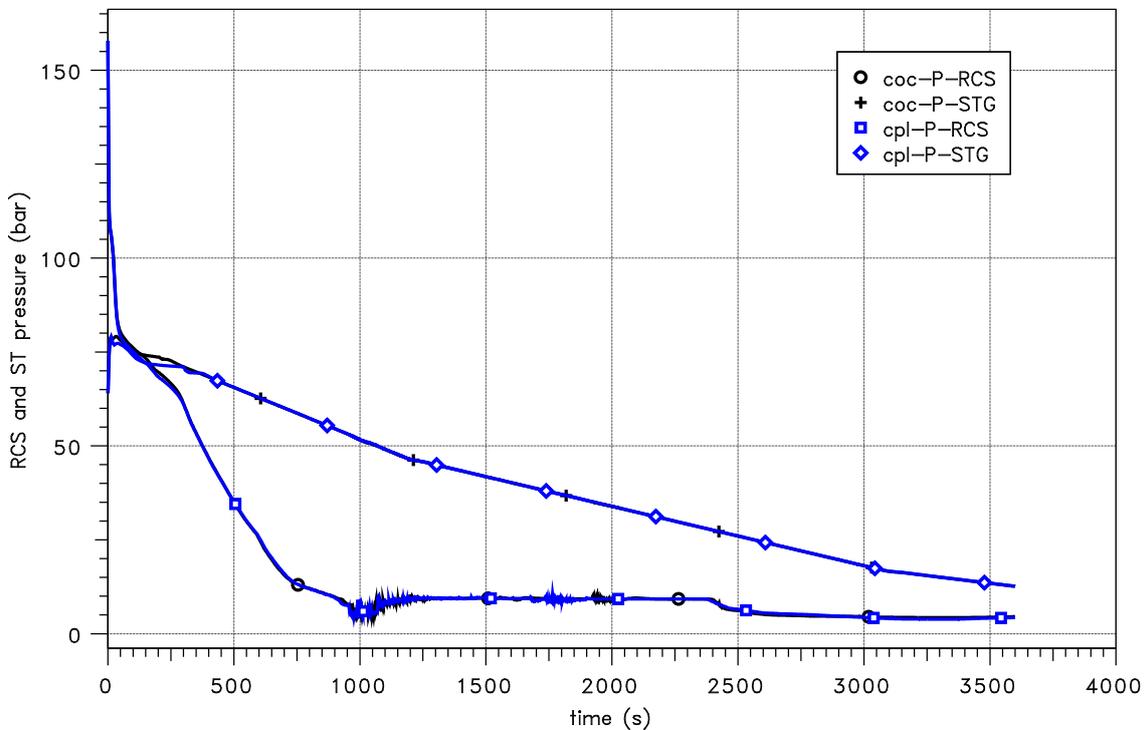


Abb. 3.10 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Primär- und Sekundärkreis

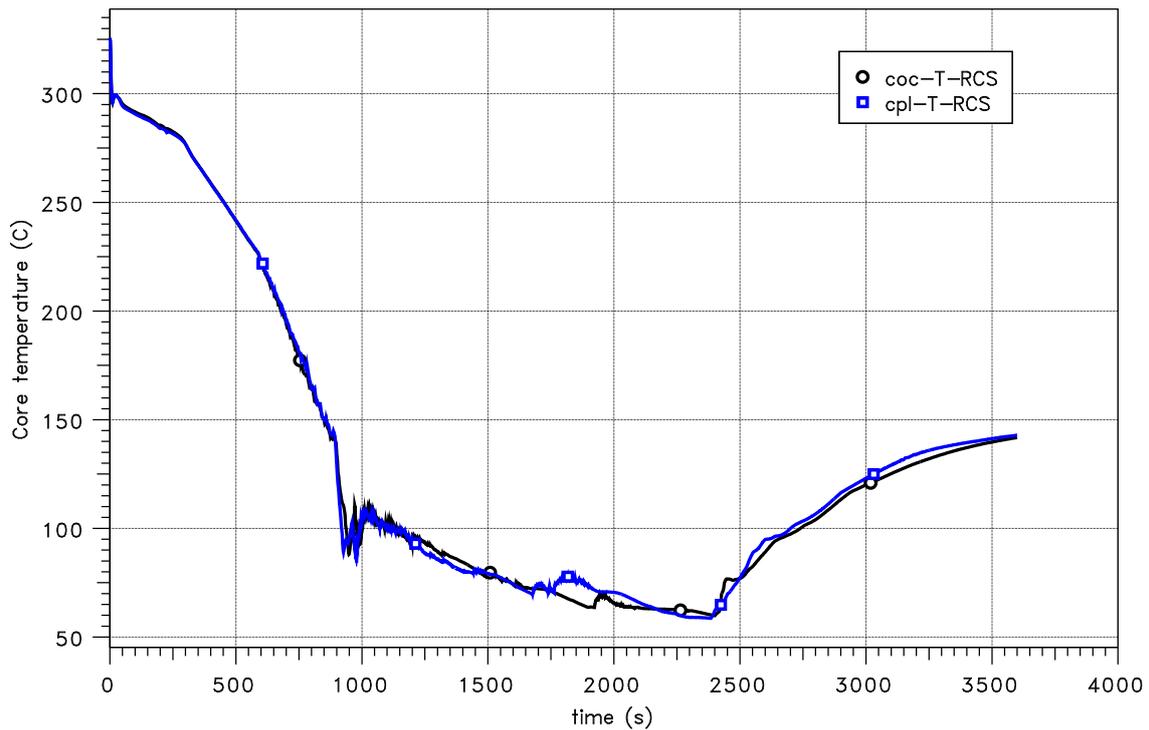


Abb. 3.11 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der RDB-Temperatur

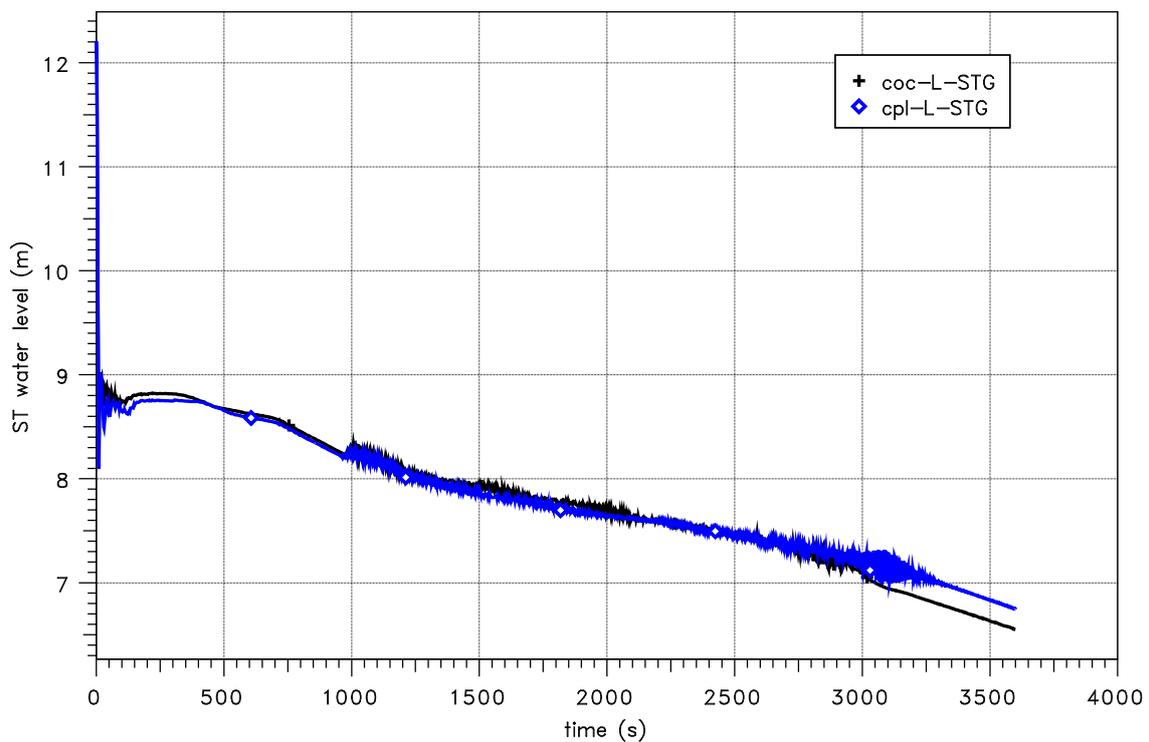


Abb. 3.12 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes im Dampferzeuger (Strang 2)

In Abb. 3.13 werden die Temperaturverteilungen im Sumpf für die Zeiten 1290 s, 1530 s und 3600 s nach Störfallbeginn gezeigt.

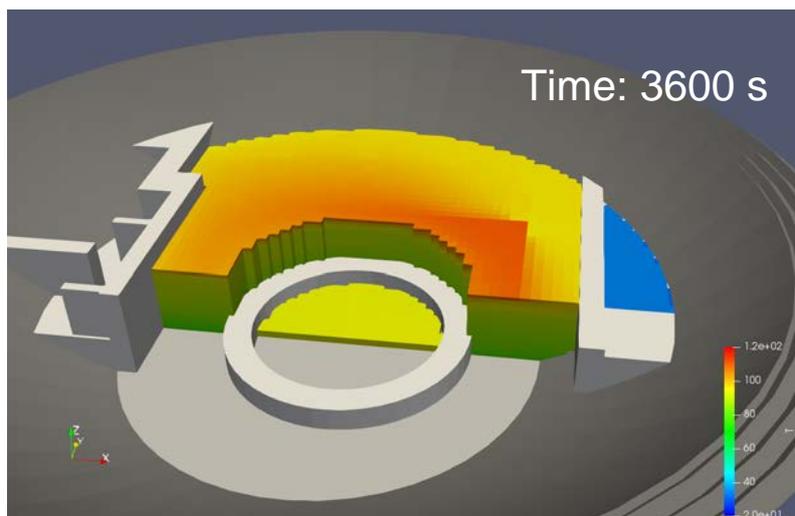
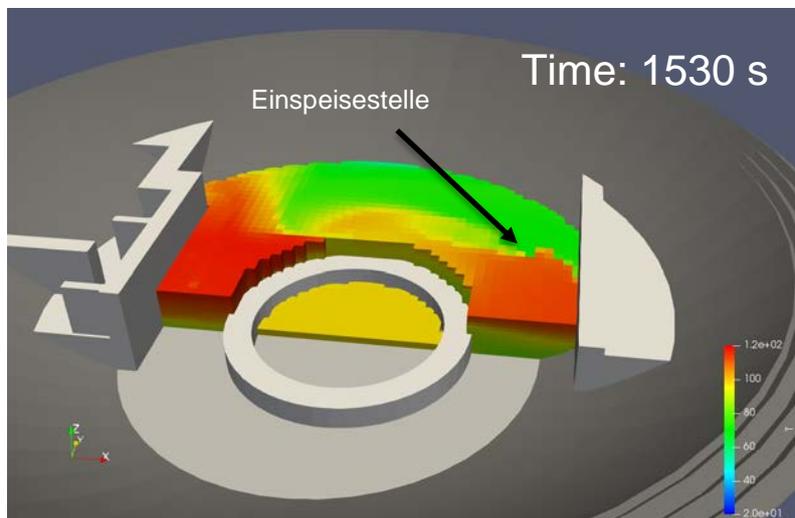
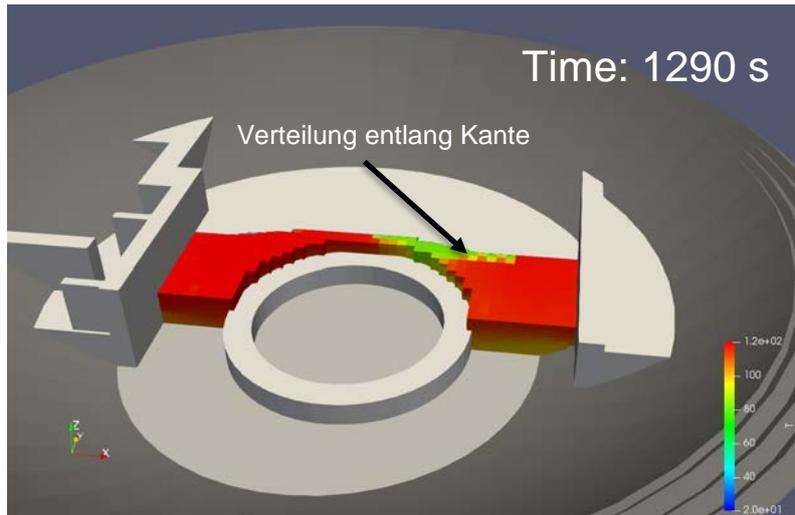


Abb. 3.13 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Ergebnisse der Temperaturverteilung im Sumpf bei 1290 s, 1530 s und 3 600 s

Im ersten Bild bei 1290 s ist im Sektor B (oben rechts) der Einfluss der Notkühlung erkennbar. Da eine dünne Wasserschicht auf der Zwischendecke in CoPool nicht simuliert werden kann (bzw. sollte), wird, solange sich der Wasserstand unterhalb der Zwischendecke befindet, der Zufluss über die Drainage in Lecklage entlang der Kante der Zwischendecke im Sektor B verteilt. Diese Verteilung führt zu einer im Vergleich zu den früheren Rechenergebnissen gleichmäßigeren Temperaturverteilung. Im späteren Zeitverlauf bei ca. 1530 s ist eine Temperaturschichtung deutlich zu erkennen. Ebenso zu erkennen ist die Zufuhr von kälterem Wasser aus der Notkühlung im Sektor B. Da der Kühler als ausgefallen angenommen wird, steigen die Temperaturen langsam wieder an. Die Schichtung ist eine Stunde nach Störfallbeginn trotz der Entnahme im unteren Sumpfbereich aus Sektor A noch vorhanden.

Im Folgenden werden erste einzelne Ergebnisse des Containmentverhaltens diskutiert. In der ursprünglichen Rechnung war der Gesamtdruck in der mit CoPool gekoppelten Rechnung ca. 0,15 bar geringer. Nun ist der Gesamtdruck in beiden Rechnungen praktisch gleich (Abb. 3.14). Aufgrund des großen Gasvolumens im Containment werden sich Temperaturunterschiede an der Sumpfoberfläche nur minimal auswirken. Entsprechend sind auch die Temperaturunterschiede im Dom nicht mehr vorhanden (Abb. 3.15).

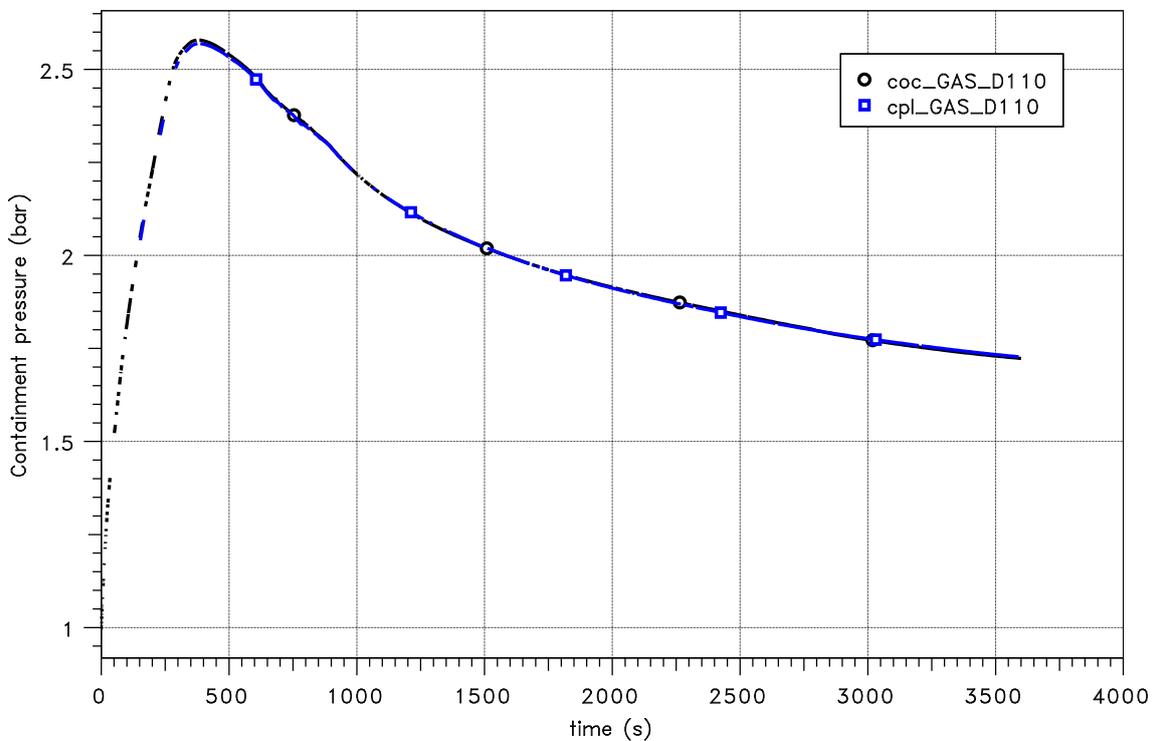


Abb. 3.14 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Containmentdrucks

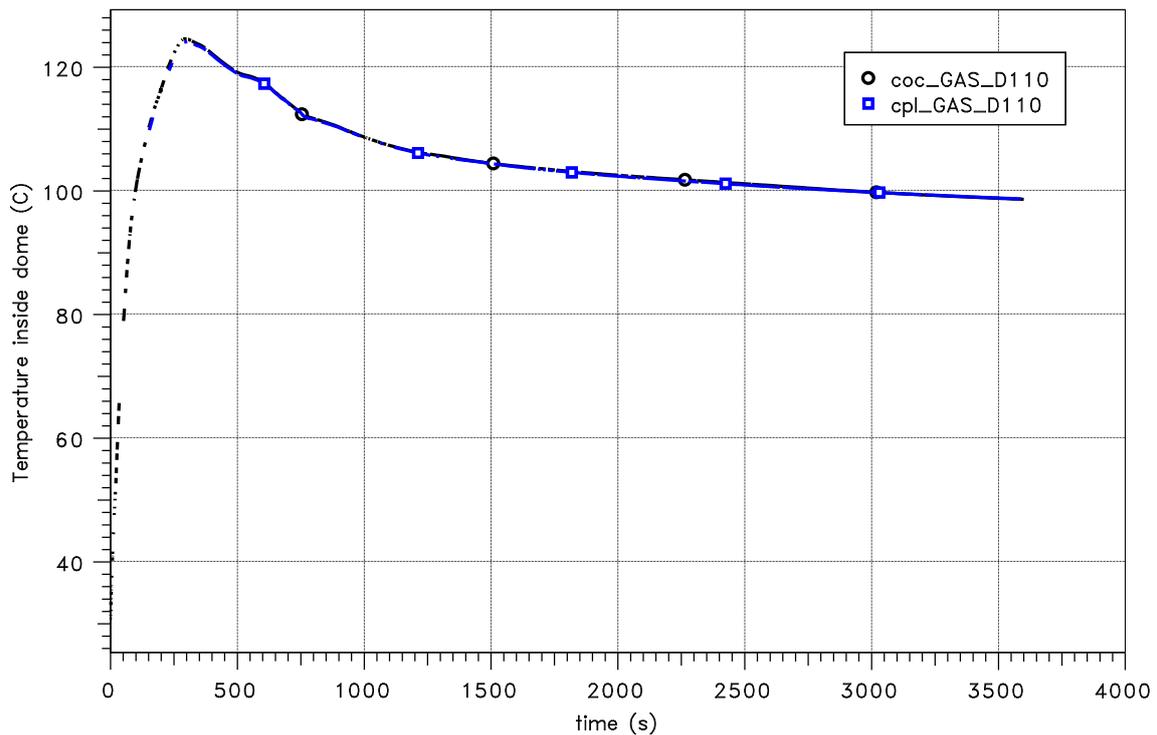


Abb. 3.15 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Temperaturen im Dombereich

Das Wasservolumen im Sumpf wird in CoPool berechnet und an COCOSYS übertragen. Hier ist die Übereinstimmung in der Anfangsphase relativ gut (Abb. 3.16). Im weiteren Verlauf werden die Unterschiede größer. Eine Ursache ist, dass COCOSYS eine temperaturabhängige Dichte des Wassers berücksichtigt, während in CoPool die Dichte konstant ist. Um gleiche Massen- und Energieverteilungen zu erreichen, werden die jeweiligen Austauschraten in der Schnittstelle angepasst. Bei Zirkulationsströmungen, also gleichzeitiger Entnahme und Einspeisung führt dies zu Abweichungen beim Wasservolumen, wie dies in der Abbildung zu sehen ist.

Der Wasserstand wird in Abb. 3.17 verglichen. Im COCOSYS-Datensatz werden die kleinen ca. 1 m tiefen Sumpftrichter abgebildet. Im CoPool-Datensatz wurden diese vernachlässigt. Damit sind die Bezugspunkte in beiden Datensätzen. In der Abbildung ist die Aktivierung der CoPool/COCOSYS-Kopplung bei ca. 300 s zu sehen. Wird das Ergebnis von CoPool um die Differenz des Bezugspunkts nach oben verschoben (rote Kurve), ist die Übereinstimmung relativ gut, obwohl im CoPool-Datensatz keine Füllstandkurve hinterlegt ist.

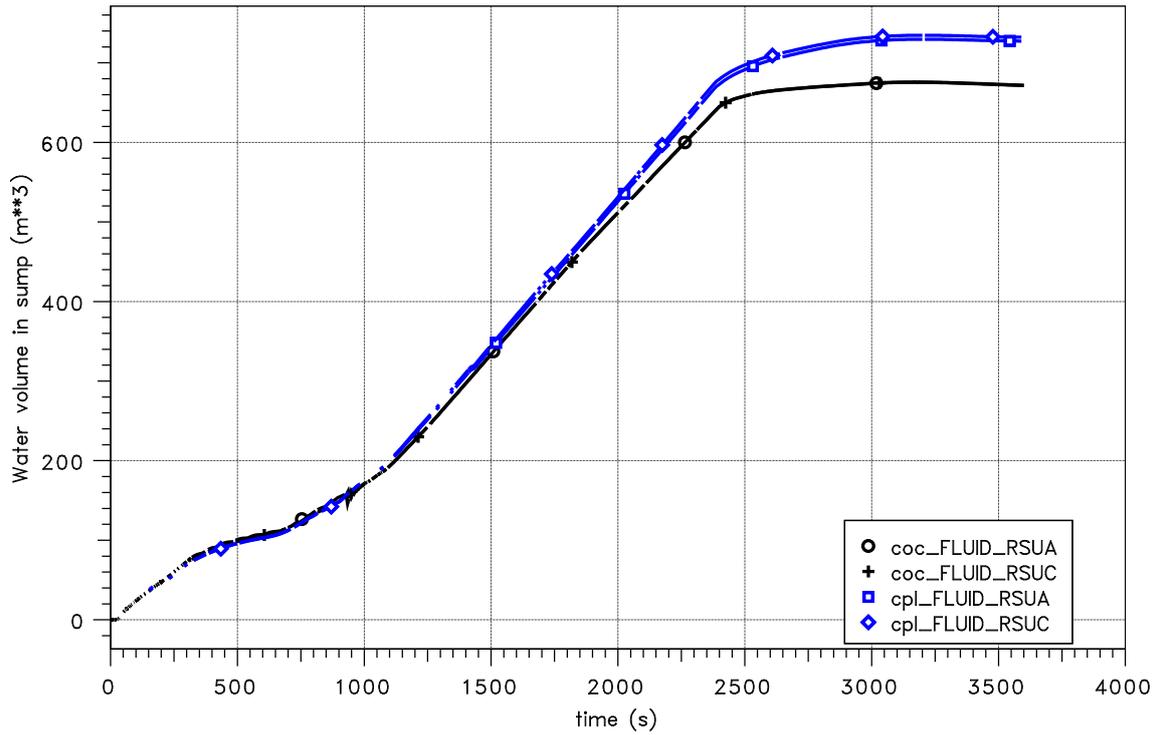


Abb. 3.16 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Wasservolumina in RSUA und RSUC

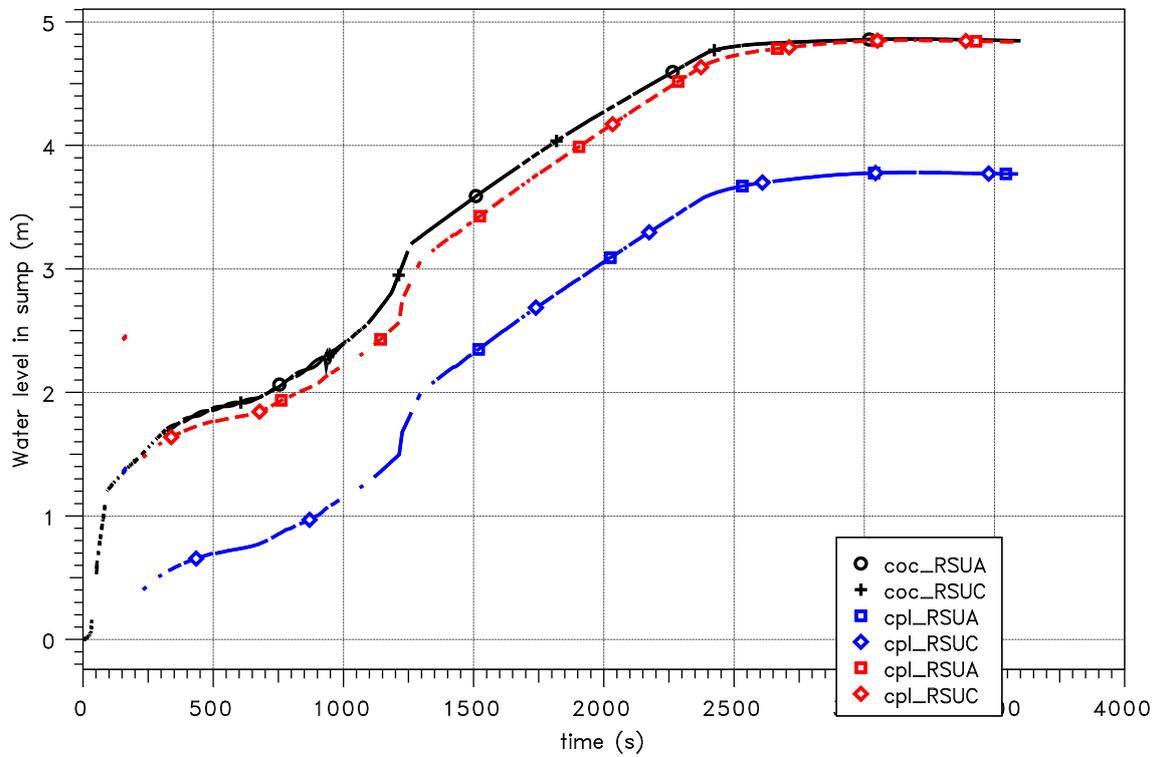


Abb. 3.17 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpfwasserstände in RSUA und RSUC

In Abb. 3.18 ist ein Vergleich der Sumpftemperaturen dargestellt. Die von CoPool berechneten mittleren Sumpftemperaturen (blaue Kurven) zeigen im Vergleich zur Stand-alone-Rechnung (schwarze Kurven) in der Anfangsphase bis zur Sumpfumwälzung größere Temperaturunterschiede in den beiden Sektoren A/B und C/D. Später sind die mittleren Temperaturen ca. 7 K höher. Eingezeichnet sind auch einzelne Monitorpunkte aus den 4 Sektoren und die entsprechenden CoPool-Datenkurven. Diese befinden sich ca. 0,7 m über dem Sumpfboden, d. h. ab ca. 350 s werden die Werte zu den lokalen Sumpftemperaturen angezeigt. Die Temperaturunterschiede in den Sektoren betragen maximal ca. 30 K. Nach Beginn der Notkühlung sammelt sich das kältere Wasser im unteren Bereich des Sektors C (grüne Kurve, 1 200 s). Nach einer Stunde ist im Sektor A die Temperatur etwas höher (rote Kurve), da in diesem Sektor das Wasser entnommen wird. Deutlich zu sehen ist hier die Temperaturschichtung (Unterschied der mittleren Temperatur und der lokalen Temperaturen bei 0,7 m, sowie in Abb. 3.18).

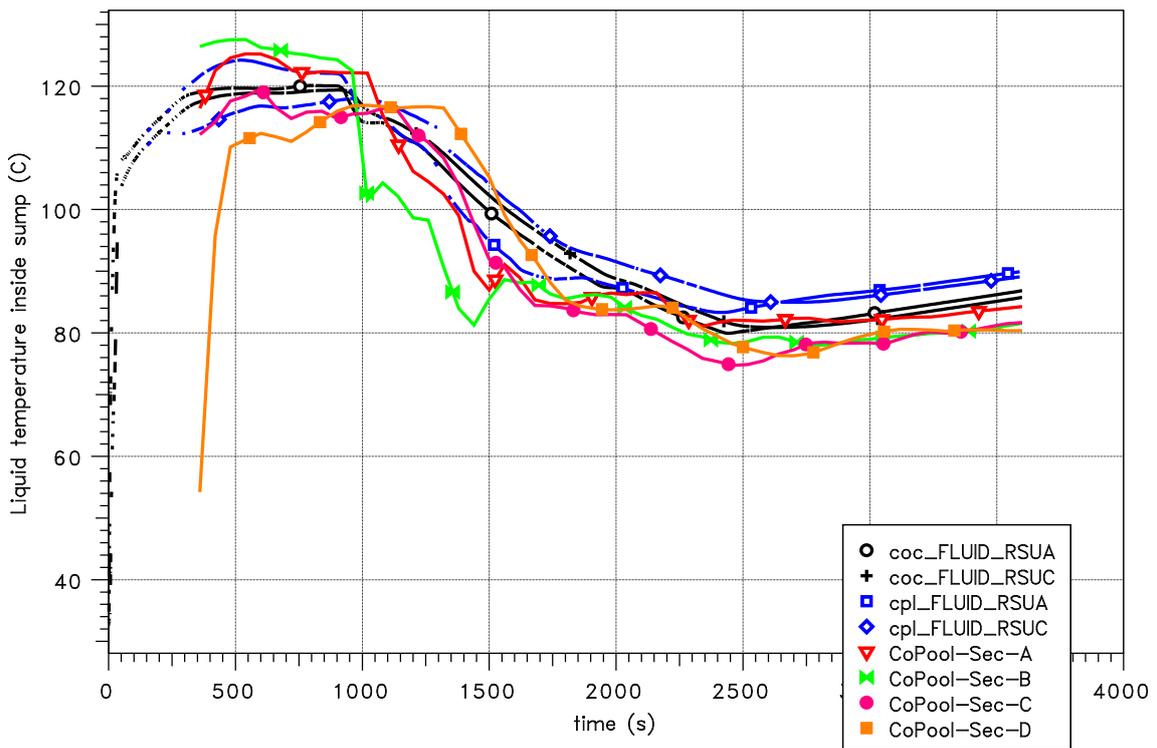


Abb. 3.18 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpftemperaturen in RSUA und RSUC

3.2.1.3 Fazit ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung

Im Vergleich zu den früheren Ergebnissen ist der Vergleich zwischen ATHLET/COCOSYS (stand-alone) und ATHLET/COCOSYS/CoPool nun deutlich konsistenter. Wie zu erwarten, ist der Einfluss der detaillierten Sumpfmmodellierung mit Co-Pool auf den Containmentdruck sehr gering, da das Gasvolumen sehr hoch ist. Deutlicher ist er bzgl. der in den Notkühlsystemen vorliegenden Temperaturen des angesaugten Wassers.

Um Instabilitäten im Rechenergebnis zu vermeiden, wurde die maximale Zeitschrittweite auf 0,05 s gesetzt, was zu einer entsprechend längeren Rechenzeit von ca. 2 Wochen auf einem PC führt. Ebenso wurde das Gitter verfeinert (Faktor 4). Im weiterlaufenden Entwicklungsvorhaben bei ITWM wird aber das CoPool-Programm weiter beschleunigt, so dass hier noch Verbesserungen zu erwarten sind. So wurde die mögliche Parallelisierung des SAMG-Lösers noch nicht genutzt. Der Einfluss der Zeitschrittweite auf das ATHLET-Ergebnisse sollte weiter untersucht werden.

3.2.2 Rechnung für eine Anlage des Typs SWR-72

Die Kopplung zwischen ATHLET/COCOSYS und CoPool wurde ebenfalls anhand eines Szenarios in einer generischen Anlage vom Typ SWR-72 getestet. Verwendet wird hierzu die COCOSYS-Entwicklerversion (Rev. 7049), die ATHLET-Version 3.1A und die Entwicklerversion von CoPool 3.05 (Rev. 993). Um die Rechnung durchführen zu können, mussten bestehende Datensätze für die neuen Versionen modifiziert bzw. neue Datensätze erstellt werden.

3.2.2.1 Erstellung und Anpassung der Datensätze

Im Folgenden werden Aspekte hinsichtlich der Datensatzerstellung beschrieben. Ausgangspunkt für den ATHLET-Datensatz waren die Arbeiten zu den ersten gekoppelten Datensätzen für SWR-72 aus dem Jahr 2006 /SON 06/. Daher musste der Datensatz zunächst auf die aktuelle ATHLET-Version 3.1A angepasst werden. Die Ergänzung der Kopplung erfolgte in der ATHLET-Entwicklerversion. Dies machte eine erneute Anpassung des Datensatzes notwendig. Hiervon war insbesondere die Eingabe bezüglich der GCSM-Signale betroffen. Weiterhin wurden im ursprünglichen Datensatz die S&E-Ventile nur zusammengefasst dargestellt. Da in der gekoppelten Rechnung die verschiedenen Freisetzungspeditionen berücksichtigt werden sollen, wurden die sogenannten Discharges in ATHLET getrennt und einzeln abgebildet. Die Zuordnung zu einzelnen

Ventilen und deren Lage in der Kondensationskammer (KoKa) ist in Abb. 3.19 dargestellt. Auch die Lage der Ansaugstellen der TH-Pumpsysteme wurde aus Zeichnungen ermittelt und der ATHLET-Datensatz erweitert. Nun werden mit Hilfe der neuen JBTEMP-Option die lokalen von CoPool berechneten Temperaturen an der Ansaugstelle in der KoKa in ATHLET verwendet. Für sämtliche Verbindungen müssen entsprechende Einträge im CoPool-Datensatz erstellt werden. Dies sind:

- 2 Kondensationsrohre mit 39 bzw. 24 Einspeisepositionen (Rohre)
- 11 Sicherheits- und Entlastungsventile (S&E Ventile)
- 3 Begrenzungsventile
- 7 Drainageverbindungen
- 2 x 4 Pumpeinlässe der TH-Systeme

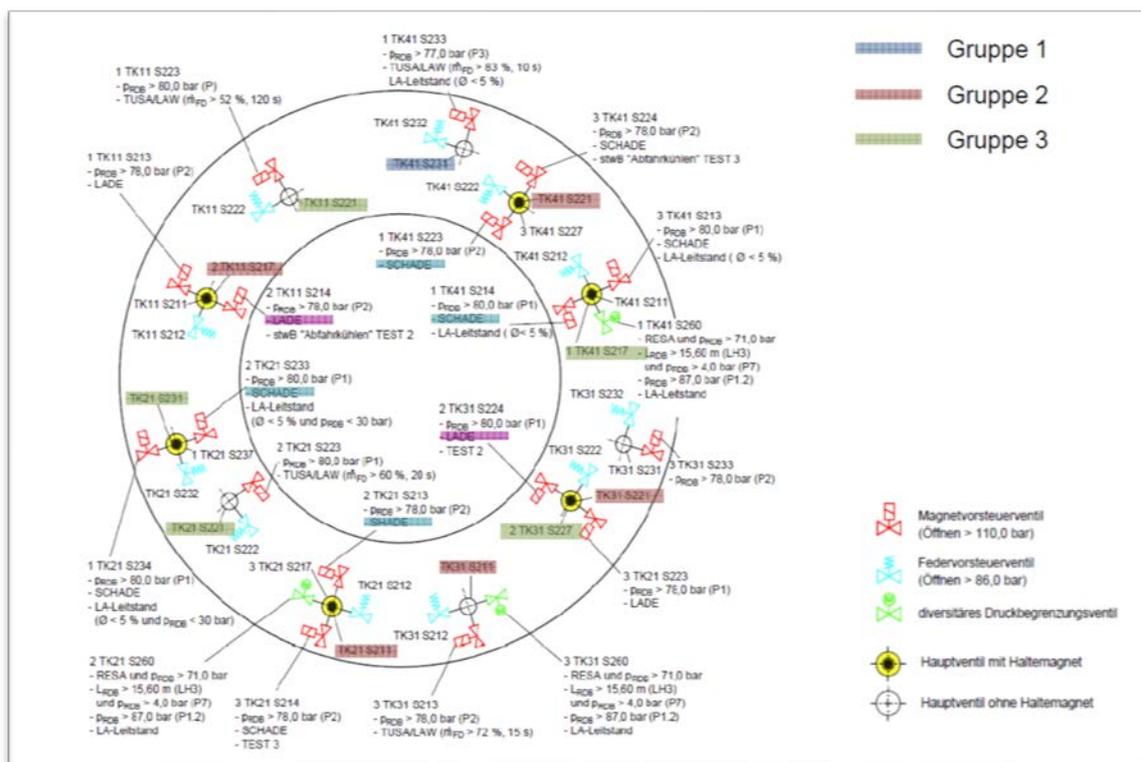


Abb. 3.19 SWR-72: Lage und Zuordnung der S&E-Ventile in der Kondensationskammer

Ausgangspunkt für den COCOSYS-Datensatz ist ein Datensatz, welcher für Analysen der Wasserstoffverteilung unter Verwendung von katalytischen Rekombinatoren und für Regressionstests verwendet wurde /ARN 16/, /KER 98/. Für eine Kopplung zwischen Co-Pool und COCOSYS ist es insbesondere im Zusammenhang mit dem vollständigen

Fluten von Zonen notwendig, die Volumina und Höhenkoten zwischen beiden Datensätzen genau abzustimmen. In den Bereichen, wo ein Fluten der Zonen möglich ist (Abb. 3.20), wurden Atmosphären- und Drainageverbindungen durch den neuen Verbindungstyp ATM_FULL ersetzt. In der folgenden Analyse soll ein Vergleich zwischen einer ATHLET/COCOSYS-Rechnung (stand-alone) und einer mit CoPool gekoppelten Rechnung durchgeführt werden. Um Unterschiede aufgrund von unterschiedlichen geometrischen Randbedingungen, wie Wandoberflächen, weitgehend zu vermeiden, wurden die Daten zu Wandstrukturen zwischen CoPool und COCOSYS angepasst.

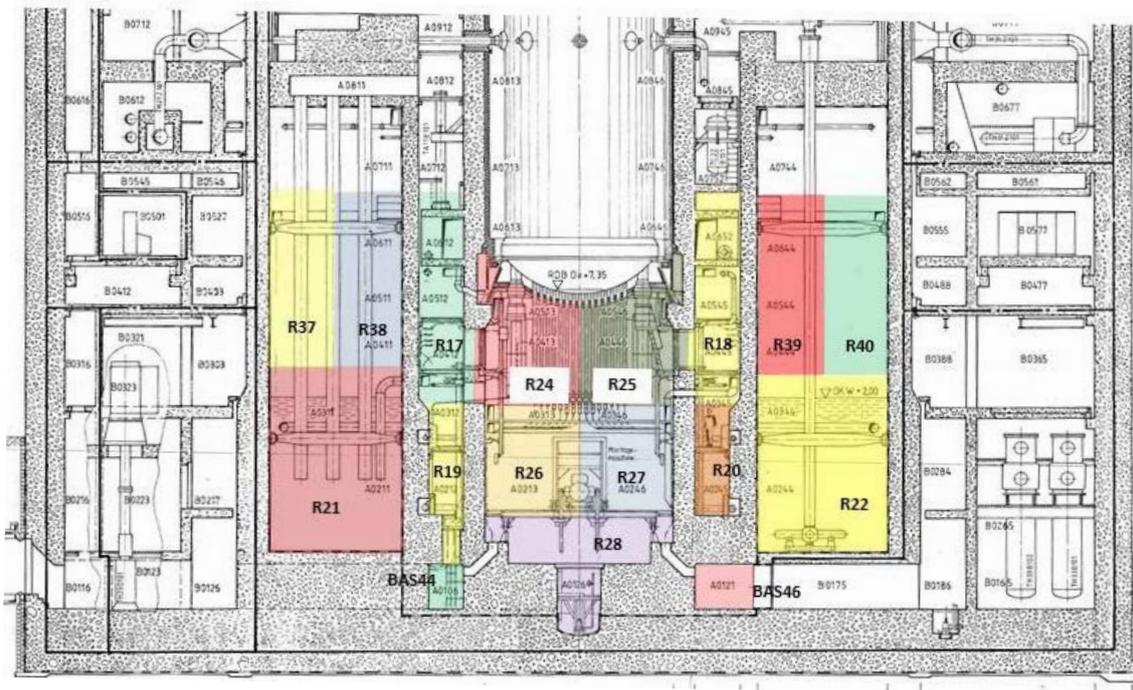


Abb. 3.20 Darstellung der mit CoPool gekoppelten COCOSYS-Zonen (farbig)

In CoPool wird die Geometrie durch geometrische Grundelemente aufgebaut, welche in CoPool als Compounds bezeichnet werden. Der Aufbau dieser Compounds für eine SWR-72-Anlage ist in Abb. 3.21 (links) dargestellt. Compound 1 und 2 beschreiben die zylindrischen Wände im unteren und oberen Bereich. Die Reaktorkaverne wird durch den Compound 3 dargestellt. Hier wurden die einzelnen Kabelschächte nur vereinfacht als ganzer Ring abgebildet. Die beiden Schleusen werden durch die Compounds 4 und 5 realisiert. Die Luftkammern werden formal als Festkörper mit Luftstoffwerten simuliert (Compound 6 und 7). Die Compounds 8 bis 12 sind einzelne Trennwände im unteren Basement.

In CoPool können Unterräume (im Prinzip Raumbereiche mit einem gleichen Wasserstand) nur paarweise verknüpft werden. Daher wurde das ringförmige Basement in nur

zwei getrennte Segmente unterteilt. Die rechte Seite der Abb. 3.21 zeigt die Gittereinteilung. Im Fluidbereich haben die Gitterzellen eine Größe von ca. $0,5 \times 0,5 \times 0,2 \text{ m}^3$. Um eine sinnvolle Wärmeleitung in den Wandstrukturen simulieren zu können, muss die Schichteinteilung (ähnlich wie in COCOSYS) entsprechend fein gewählt werden. Um die Anbindung an Wandstrukturen zu optimieren, wurde die Gitterweite der Fluidzellen entsprechend angepasst, so dass die Gitterpunkte mit den Wandflächen zusammenfallen.

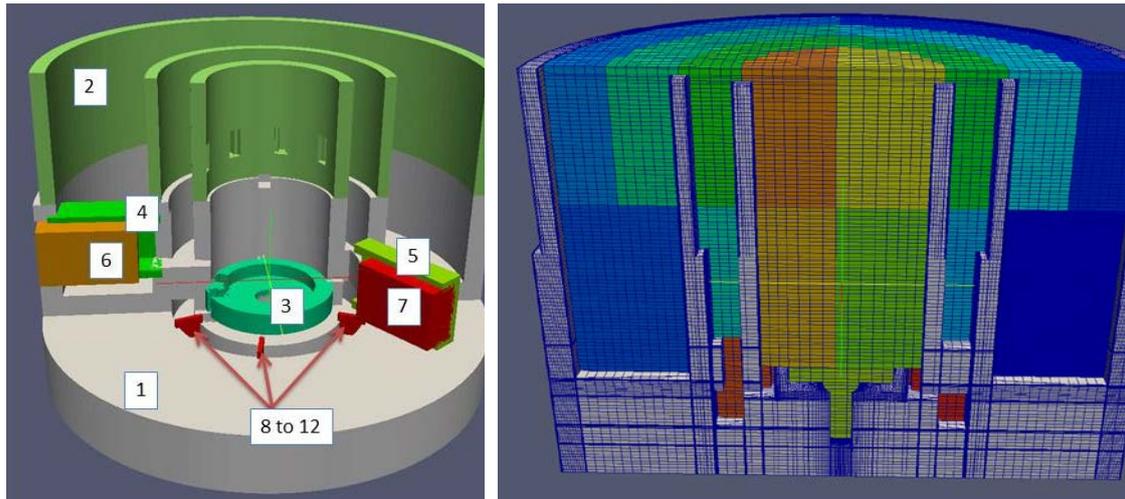


Abb. 3.21 CoPool: Aufbau und Gitter des Datensatzes für eine SWR-72-Anlage

Während der ersten Analysen wurde festgestellt, dass bei zu großen Änderungen der Gitterweite benachbarter Zellen Instabilitäten entstehen. Als Beispiel wird in Abb. 3.22 die Geschwindigkeitsverteilung in der Kondensationskammer nach 10 s gezeigt. Hier werden Geschwindigkeiten bis zu 9 m/s berechnet, obwohl bis zu diesem Zeitpunkt keine Einspeisung erfolgte. Die Gittergröße benachbarter Zellen darf also höchstens maximal um einen Faktor von 1,2 (bzw. 0,8) abweichen. Die von CoPool beim Preprocessing generierten Zonen müssen entsprechend des Containmentdatensatzes zusammengefasst und den COCOSYS-Zonen zugeordnet werden. Dabei ist darauf zu achten, dass die Volumina als auch die Füllstandskurven in beiden Datensätzen übereinstimmen. Dies gilt insbesondere im Hinblick auf das vollständige Fluten von COCOSYS-Zonen. Daher wurden nach der Zuordnung die Volumina der COCOSYS-Zonen an denen von CoPool angepasst. Anhand von mehreren „Startrechnungen“ mit verschiedenen Wasserständen wurde die Füllstandskurve der einzelnen Zonen ermittelt. Für die Wandoberflächen müssen entsprechende Schritte durchgeführt werden. Auch hier wurden die Wandoberflächen im COCOSYS-Datensatz angepasst. Teilweise wurden ‚innere‘ Wandstrukturen entfernt, da diese in der CoPool-Rechnung aus Gründen der Vereinfachung nicht berücksichtigt wurden.

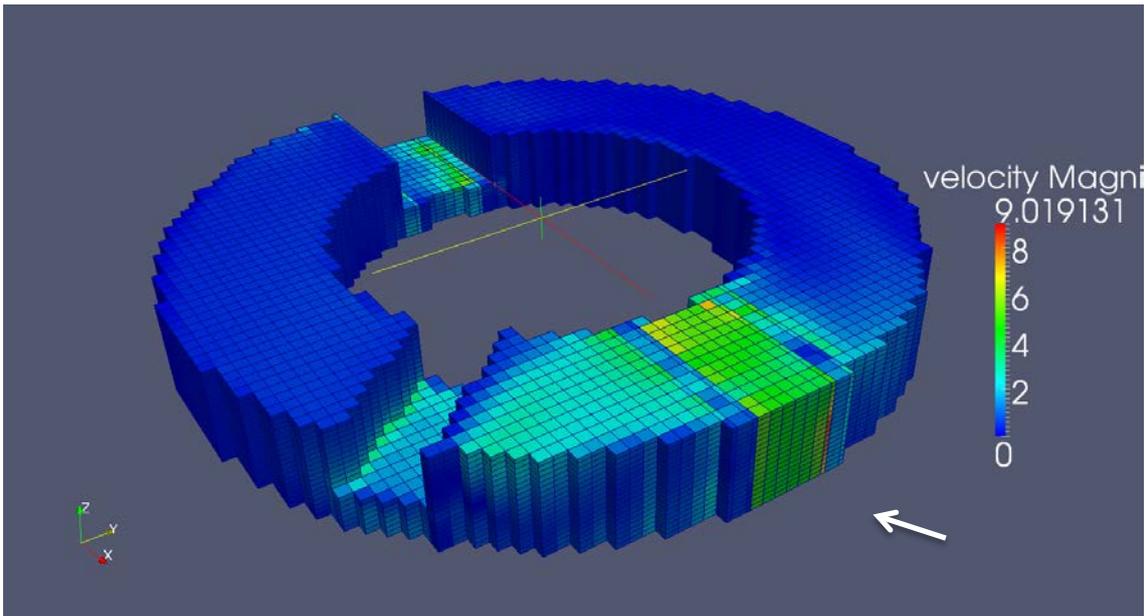


Abb. 3.22 CoPool: Geschwindigkeitsverteilung in der KoKa nach ca. 10 s durch numerische Instabilitäten

3.2.2.2 Darstellung der Ergebnisse

In dem Szenario wird ein Leck von 250 cm^2 in der Speisewasserleitung des Reaktorkühlsystems angenommen. Weiterhin stehen alle Sicherheitssysteme zur Verfügung. Dies sind unter anderem die Druckentlastung des Kühlkreislaufs in die Kondensationskammer und die TH-Systeme, welche einerseits Wasser aus der Kondensationskammer über einen Kühler in den Kühlkreislauf pumpen und andererseits über das Kondensationskammersprühen die Kondensationskammer kühlen.

Die relevanten Ereignisse werden in der Tab. 3.4 dargestellt. Das Leck wird im Ringraumbereich des inneren Zylinders im Containment angenommen, so dass die Zone BAS46 zuerst aufgefüllt wird. Später wird der innere Sumpfbereich (Zone R28) geflutet. Der Wasserstand steigt bis zur Höhenkote der vier Überlaufrohre, d. h. ab 2632 s strömt Wasser aus dem inneren Ringbereich zurück in die Koka. Die drei TH-Systeme entnehmen das Wasser aus dem unteren Bereich der KoKa (jeweils mit einer Rate von ca. 700 kg/s). Das meiste gelangt über einen Kühler in den Reaktorkühlkreislauf zurück. Ca. 10 % gelangen über das KoKa-Sprühsystem wieder in die KoKa.

Tab. 3.4 SWR-72: Ereignisablauf 250 cm² in der Speisewasserleitung

Ereignis	Zeit nach Beginn des Störfalls (bei 300 s)
Reaktorschnellabschaltung	~2 s
Beginn der Druckentlastung	~4 s
Start der TH Hochdruckpumpen	~10 s
Start der TH Niederdruckpumpen	173 s
Beginn des Überlaufs in die Kondensationskammer	2332 s

Im Folgenden werden die Ergebnisse zwischen der ATHLET/COCOSYS-Rechnung (stand-alone) und der mit CoPool gekoppelten Rechnung verglichen. Die Ergebnisse der Stand-alone-Rechnung sind in schwarzen Kurven dargestellt, die der gekoppelten Rechnung werden in blauen Kurven dargestellt. In den Abbildungen wird die stationäre Phase über 300 s ebenfalls gezeigt.

Abb. 3.23 zeigt den Vergleich des Druckes im Reaktorkühlkreislauf. Aufgrund der durchgeführten Druckentlastung fällt der Druck schnell auf ca. 6 bar ab. Gegen Ende der Problemzeit von 3000 s werden die S&E-Ventile geschlossen (Abb. 3.27), wodurch der Druck etwas ansteigt. Der Zeitpunkt ist zwischen beiden Rechnungen um ca. 100 s versetzt. Ansonsten stimmen erwartungsgemäß die Ergebnisse in beiden Rechnungen gut überein.

Der Verlauf der Drücke in Druckkammer (R10) und KoKa (K14) wird in Abb. 3.24 verglichen. Hier gibt es nur geringe Unterschiede zwischen beiden Rechnungen. Dieses Ergebnis zeigt, dass die geometrische Abbildung des Containments in CoPool und COCOSYS gut übereinstimmen. Zwar ist der Fehler in der Energiebilanz in der gekoppelten Rechnung größer als in der Stand-alone-Rechnung (Abb. 3.34), dennoch sind die Auswirkungen auf den Gesamtdruck nur gering. Somit ist die Kopplung zwischen CoPool und ATHLET/COCOSYS im Grundsatz funktionsfähig. Da der Pumpenmassenstrom der TH-Systeme (Abb. 3.28) in beiden Rechnungen gleich ist, ist auch der Wasserstand in der Kondensationskammer (Abb. 3.25) praktisch gleich. Unterschiede zwischen beiden Rechnungen können allerdings durch die unterschiedlichen Dichteberechnungen (konstante Dichte des Wassers in CoPool) verursacht werden.

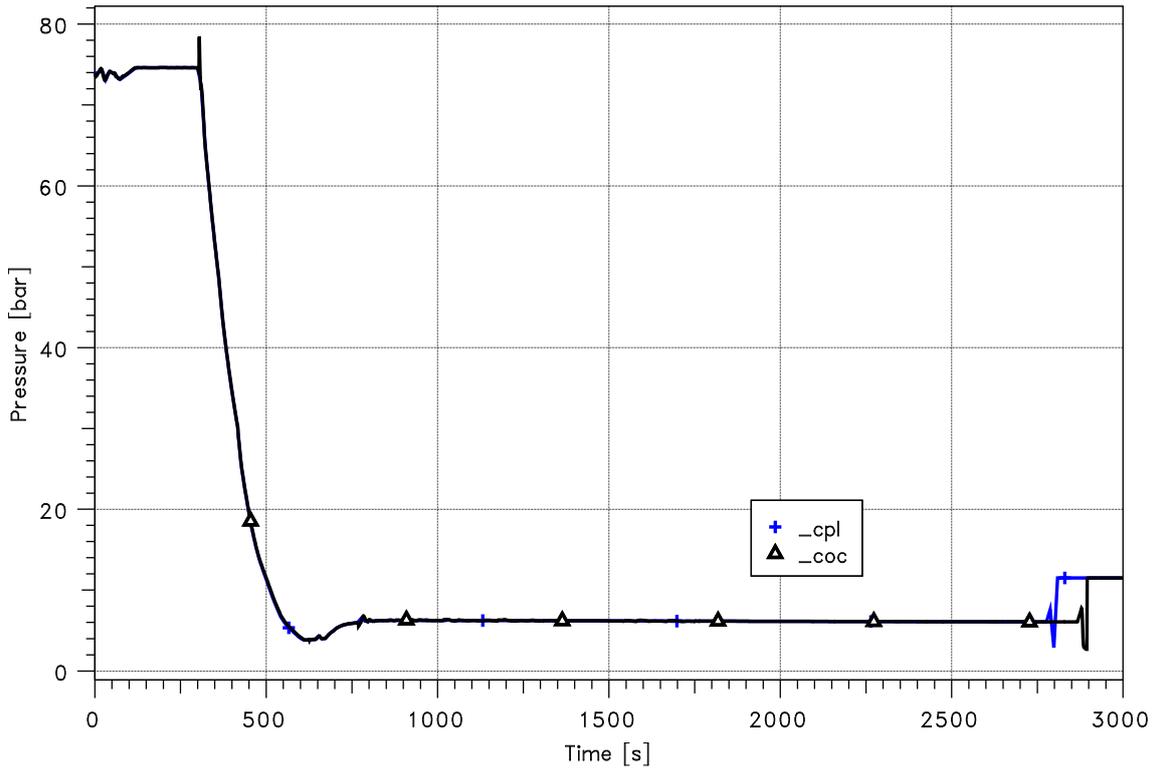


Abb. 3.23 ATHLET/COOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Reaktor-
kühlkreislauf

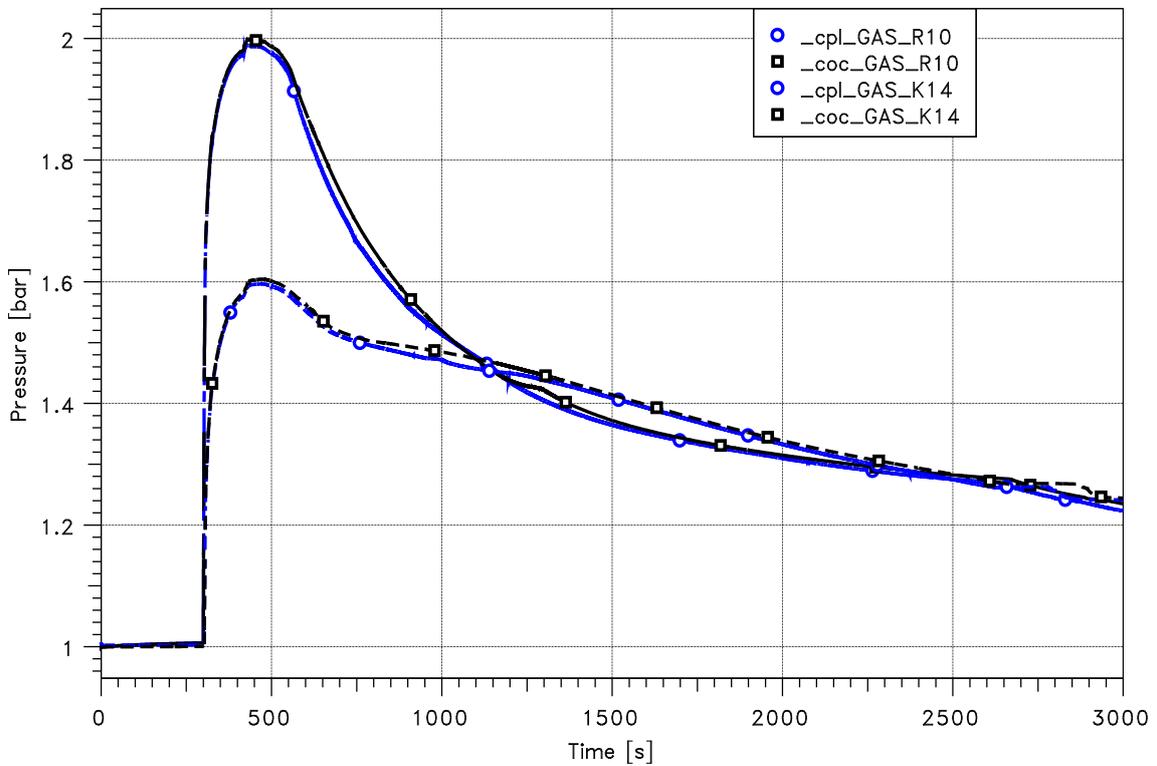


Abb. 3.24 ATHLET/COOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Contain-
ment: Druckkammer (R10) und KoKa (K14)

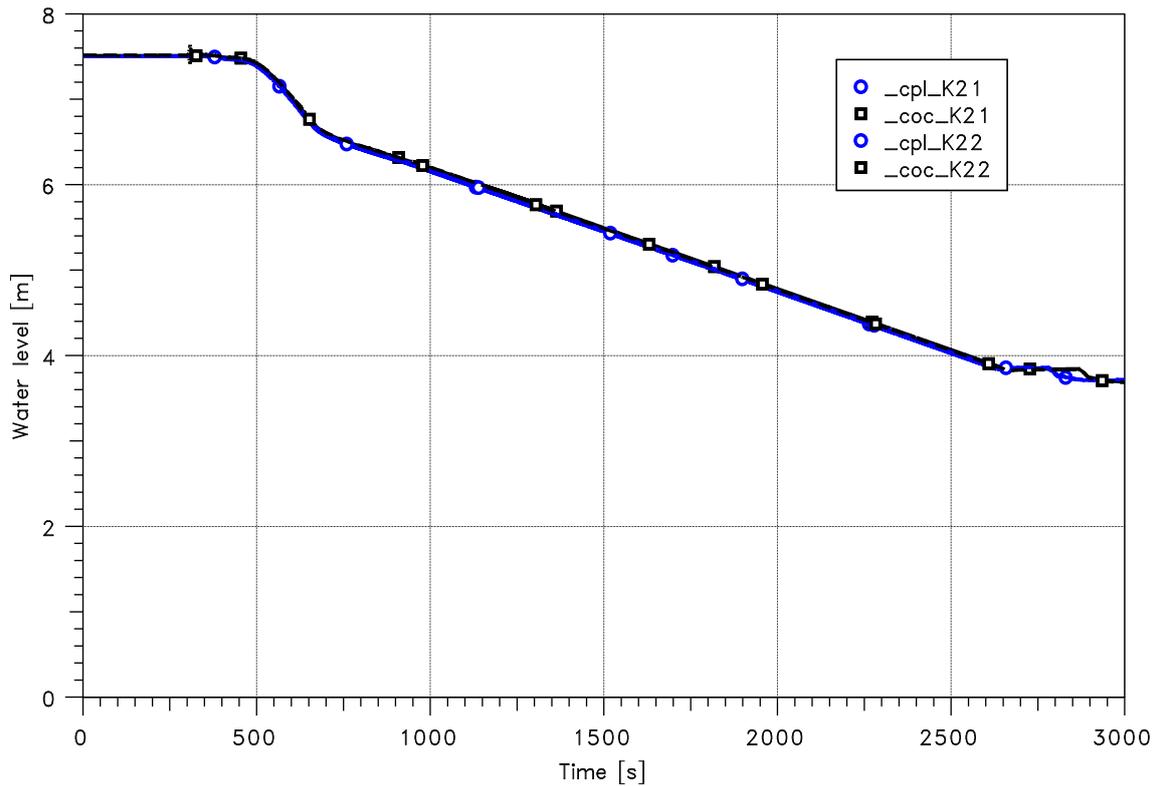


Abb. 3.25 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes in der KoKa

In der Abb. 3.26 werden die mittleren Wassertemperaturen in den beiden Zonen der Kondensationskammer (K21 und K22) verglichen. In der gekoppelten Rechnung steigen die mittleren Temperaturen etwas höher an. Grund ist die Temperaturschichtung in der Kondensationskammer, so dass in der gekoppelten Rechnung unten kälteres Wasser entnommen wird. Der Temperaturunterschied beträgt aber nur wenige Kelvin. Im weiteren Verlauf sinken die Temperaturen in der gekoppelten Rechnung etwas stärker ab. Dargestellt werden ebenfalls die Wasseroberflächentemperaturen der gekoppelten Rechnung. Gerade zu Beginn der Druckentlastung sind diese deutlich höher. In der späteren Phase sinken die Temperaturen aufgrund des KoKa-Spühens stärker ab. Ähnlich zu den oben beschriebenen Tests ist im Temperaturverlauf die Gitterstruktur sichtbar. Nach dem Beginn des Überlaufs vom inneren Bereich der Druckkammer in die Kondensationskammer (Abb. 3.29) steigen die Oberflächentemperaturen wieder an.

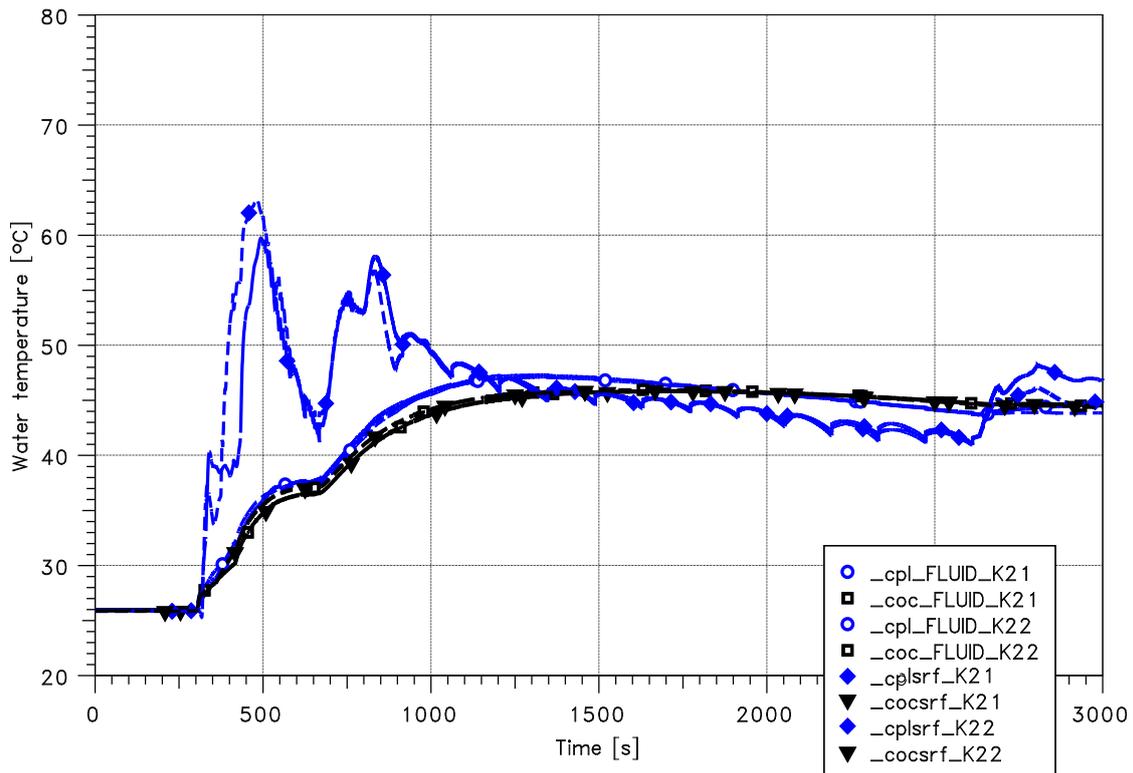


Abb. 3.26 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der mittleren Wassertemperatur und der Wasseroberflächentemperatur in der Kondensationskammer

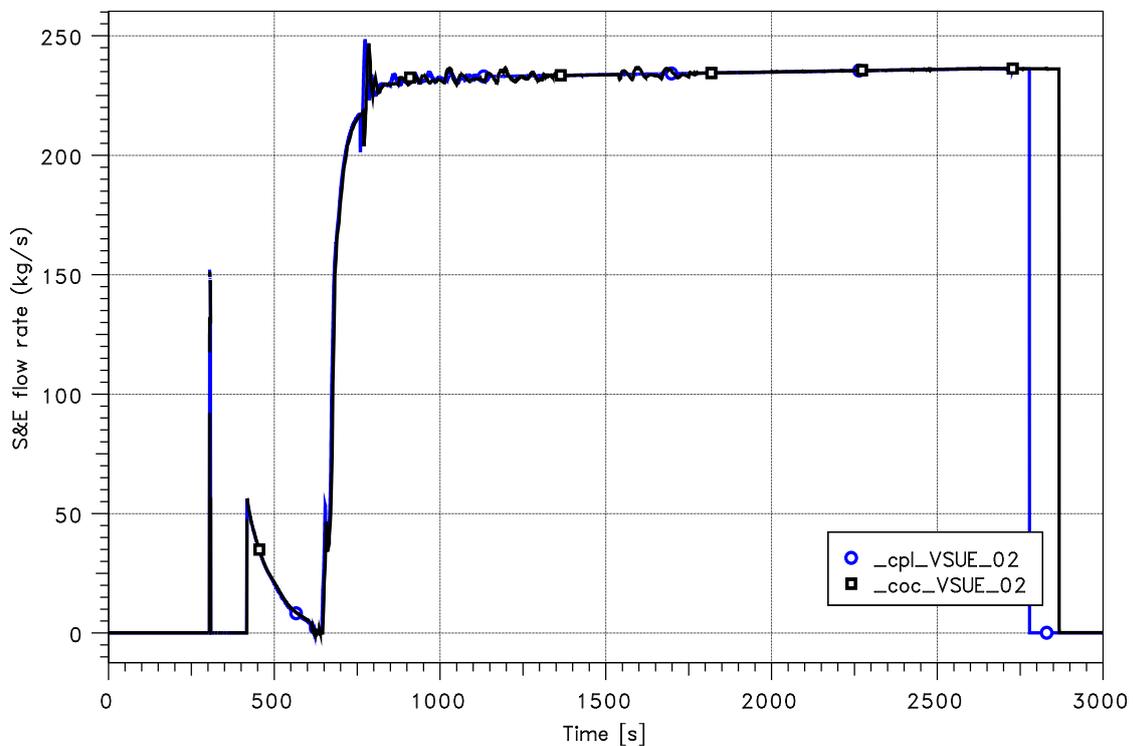


Abb. 3.27 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Druckentlastung durch das 2. S&E-Ventil

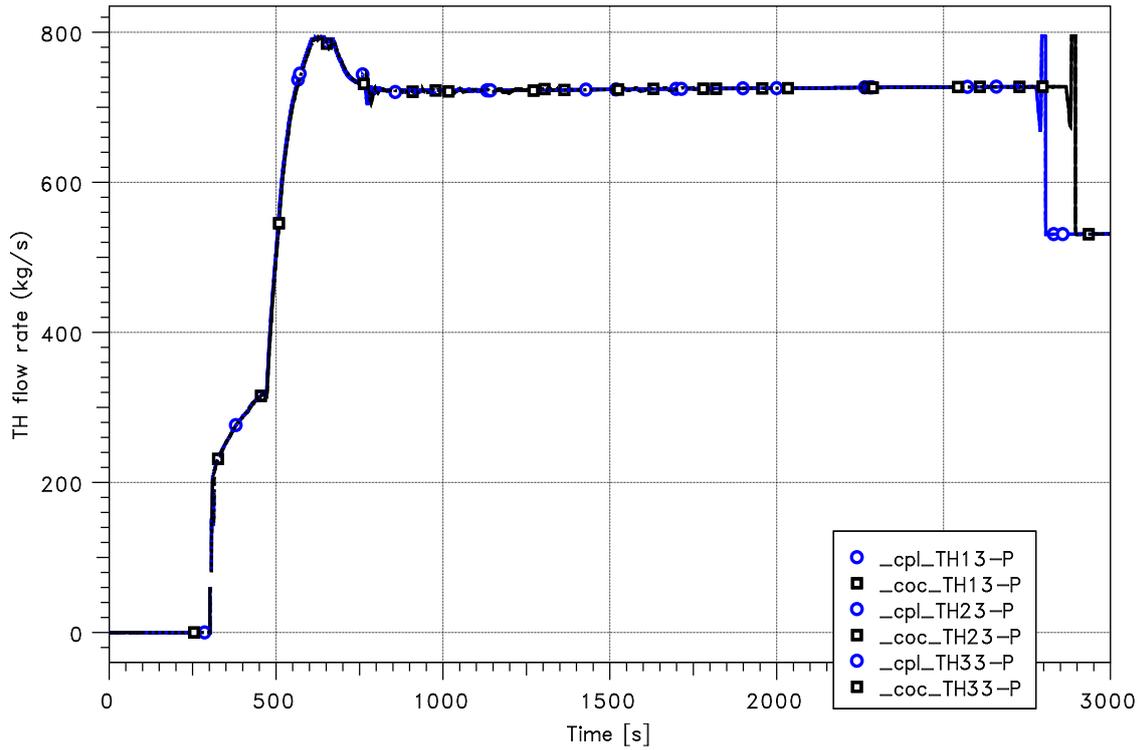


Abb. 3.28 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Massenstrom TH-Pumpen

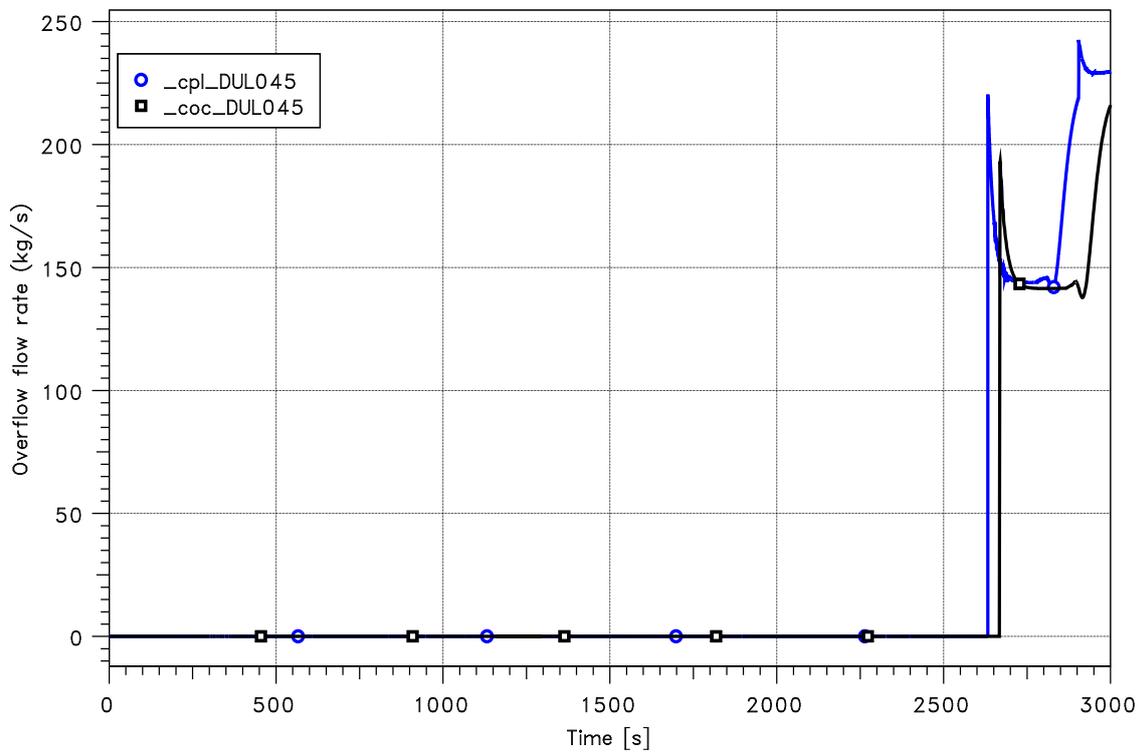


Abb. 3.29 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Wassermassenstrom durch den Überlauf in die Kondensationskammer

Die Abb. 3.30 zeigt den Vergleich bezüglich der Einlasstemperatur eines TH-Systems sowie die Temperatur nach dem Kühler. Aufgrund der Schichtung im Pool in der Kondensationskammer ist in der Kondensationskammer die Einlasstemperatur bis zu 7 K niedriger. Somit ist auch die Temperatur nach dem Kühler tendenziell niedriger. Allerdings sind die Unterschiede nur minimal. Dies erklärt auch die geringen Unterschiede in beiden Rechnungen. Somit bleiben die Einspeisetemperaturen in den Kühlkreislauf sowie die Temperaturen für das KoKa-Sprühen praktisch gleich. Durch das Sprühen in der Kondensationskammer sind Druckunterschiede aufgrund einer höheren Wasseroberflächentemperatur nicht mehr zu erwarten.

Die in der gekoppelten Rechnung vorhandenen Temperatursprünge am Einlass sind durch die unterschiedlichen numerischen Verfahren bedingt. Zu den Zeiten zwischen 750 s und 1000 s mit der höheren Temperatur wurde das in CoPool vorhandene sogenannte nicht-konservative Lösungsschema verwendet. Dies führt sehr schnell zu einer stärkeren Vermischung im Pool und somit zu einer höheren Einlasstemperatur. Die Umschaltung wurde aufgrund von Stabilitätsproblemen bei der Berechnung der Wasseroberflächentemperaturen durchgeführt. Sobald eine maximale Zeitschrittweite von 0,0125 s nicht mehr ausreichte, wurde auf die nicht-konservative Methode umgeschaltet.

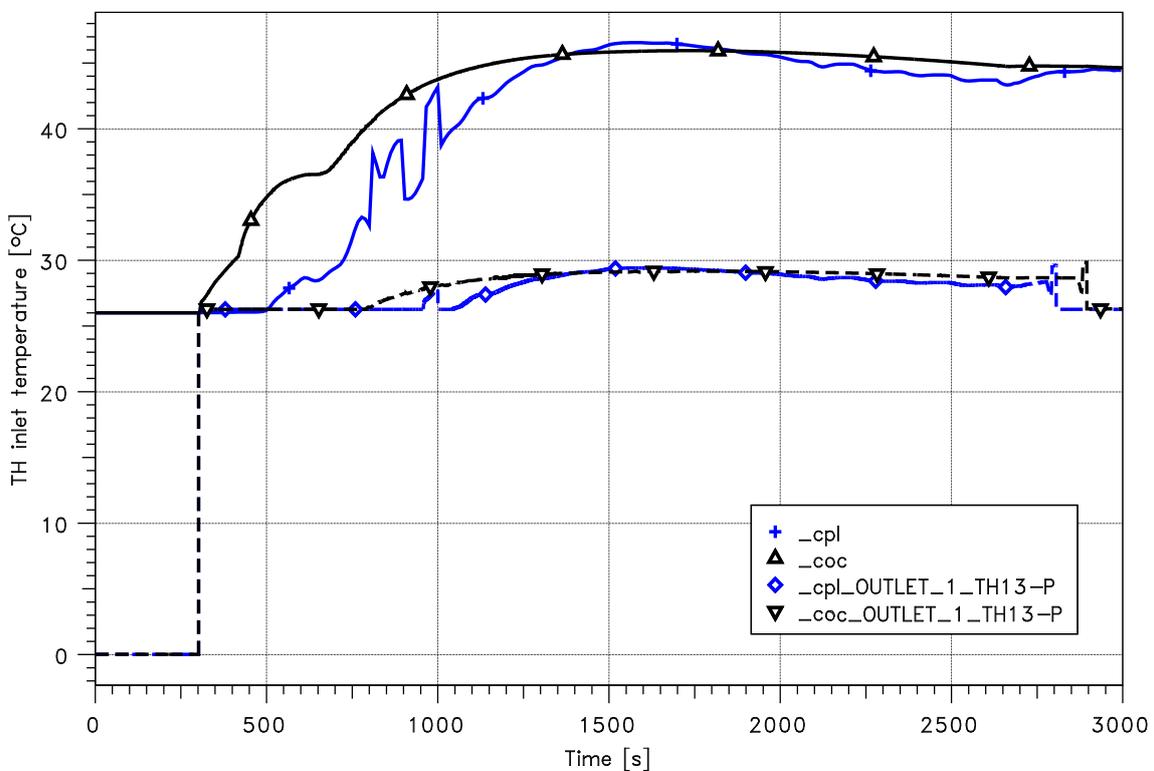


Abb. 3.30 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Ein- und Auslass-temperaturen des TH-Systems

Durch das Speisewasserleck sowie aufgrund des Betriebs aller TH-Systeme wird der innere Bereich des Containments geflutet. Zunächst strömt das Wasser in die inneren Basement-Räume, welche im CoPool-Datensatz in zwei Sektoren verbunden sind. Dies sind die Zonen BA23, BA41, BAS44, BAS45 und BAS46. Danach wird die innere Kaverne (Zone R28 geflutet). Sobald die unteren Zonen vollständig geflutet sind, werden die inneren Zonen R26 und R27 sowie der äußere Ringbereich R19 und R20 aufgefüllt.

Der Vergleich der berechneten Wasserstände wird in Abb. 3.31 dargestellt. Die Übereinstimmung ist relativ gut. Unterschiede sind teils durch die unterschiedliche Berechnung der Dichte des Wassers begründet. Für die Zone BAS46 ist der Schacht deutlich zu erkennen. Die Übereinstimmung in beiden Rechnungen ist auch hier gut. Die Schwingungen im Wasserstand treten in der Stand-alone-Rechnung auf.

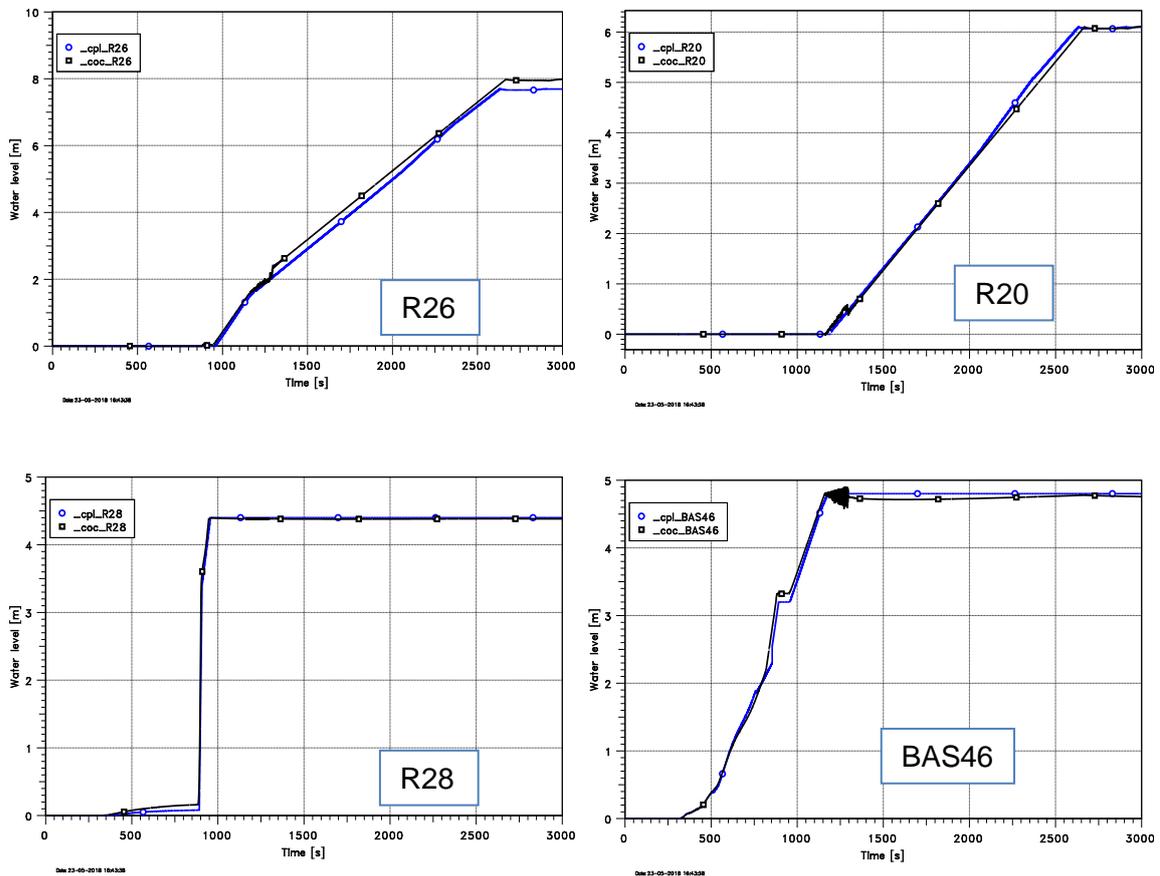


Abb. 3.31 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der relativen Wasserstände

Die Abb. 3.32 zeigt den Vergleich der mittleren Wassertemperaturen. Hier treten in beiden Rechnungen größere Unterschiede auf. Für die unteren Räume BAS46 und R28 ist der tendenzielle Verlauf der Temperaturen noch relativ gleich. Auch ist die

Oberflächentemperatur in beiden Zonen nahe der mittleren Temperatur, so dass wenn überhaupt nur eine geringe Temperaturschichtung in der Wasservorlage vorhanden ist.

In der inneren Zone R26 sind die mittleren Temperaturen zu Beginn des Auffüllens (ab ca. 1000 s) die mittleren Temperaturen in der gekoppelten Rechnung etwas höher. Dies gilt insbesondere für die Wasseroberflächentemperatur. Die Temperaturen in R20 stimmen dagegen gut überein. Diese werden im Wesentlichen durch das eingespeiste Wasser bestimmt.

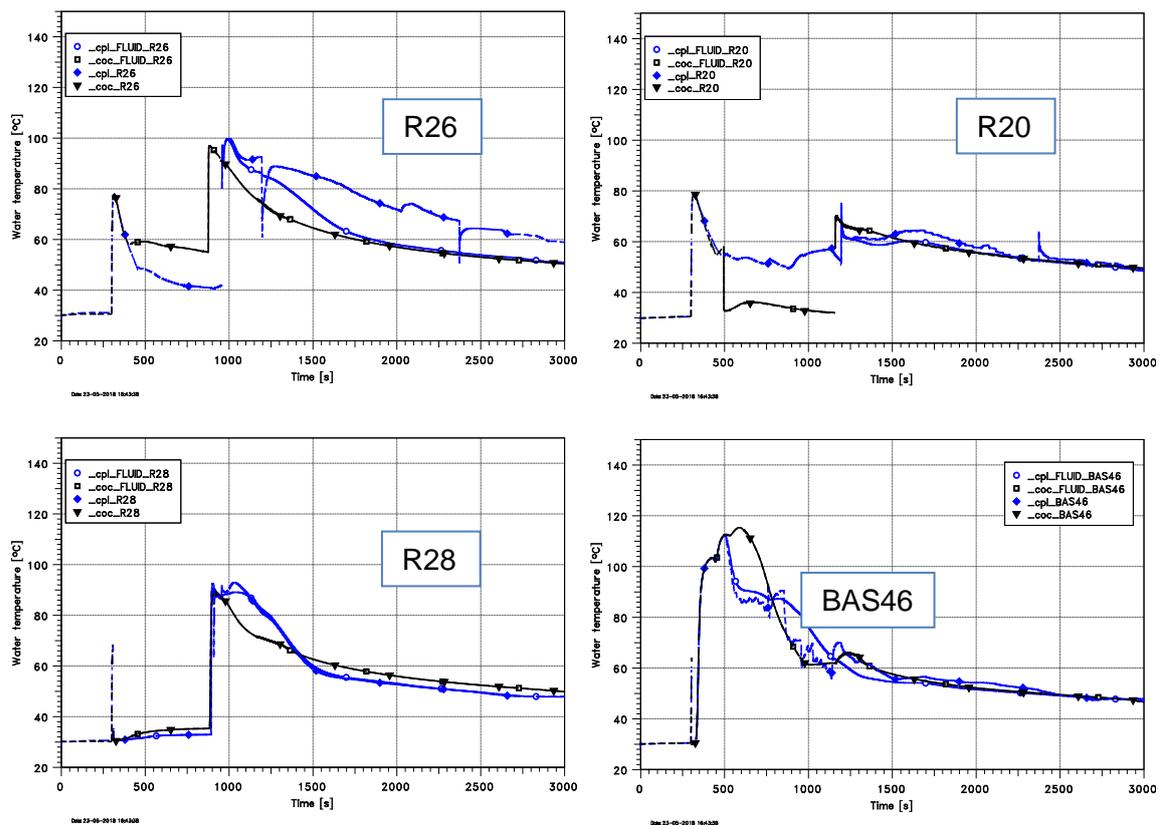


Abb. 3.32 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der mittleren Wassertemperaturen und Darstellung der Wasseroberflächentemperaturen (gestrichelt)

Die Temperaturverteilung der Pools sowie der Wände zu den Zeiten 500 s, 1500 s und 2700 s werden in Abb. 3.33 dargestellt. Zu Beginn ist die Temperaturschichtung in der Kondensationskammer deutlich. Später zu Beginn des Überlaufs ist die Temperaturschichtung im inneren Zylinder deutlicher. Insgesamt sind die Temperaturunterschiede relativ gering. Bis 3000 s sind die Wände noch relativ kalt und können noch entsprechend Wärme aufnehmen.

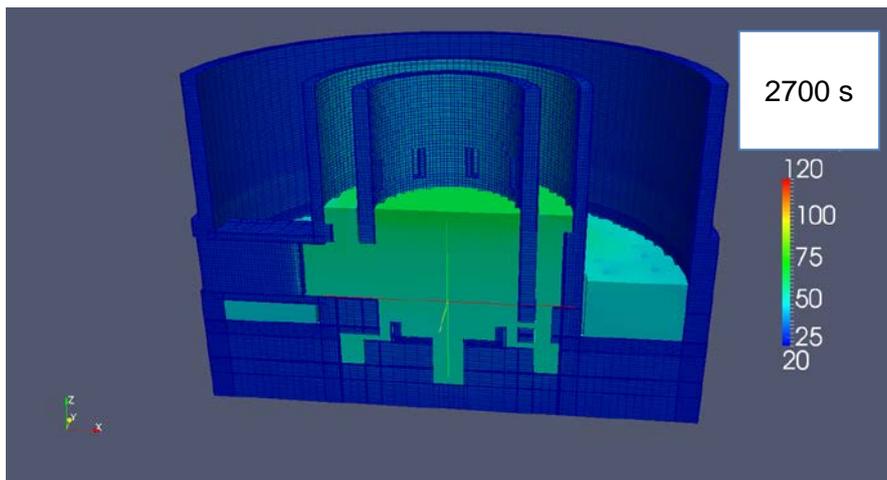
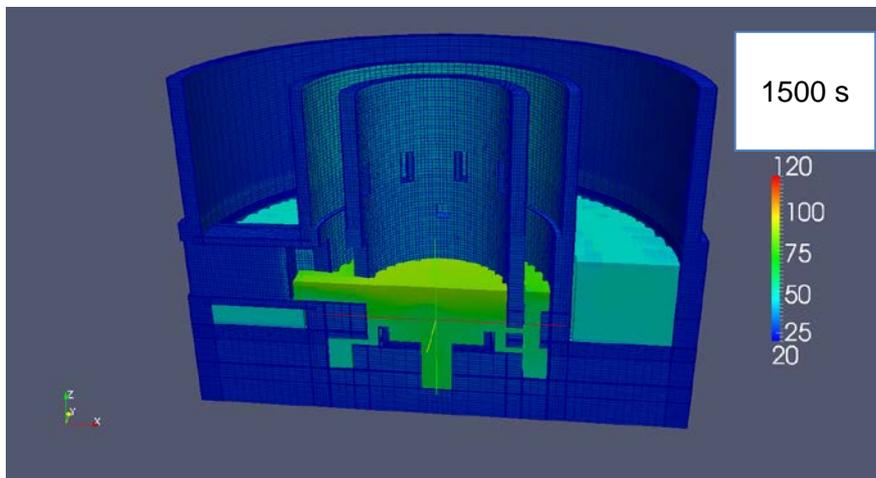
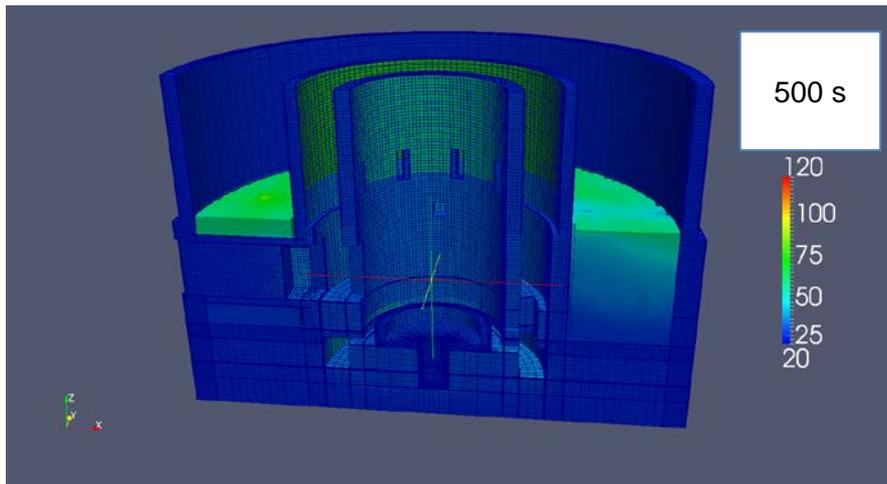


Abb. 3.33 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Temperaturverteilung bei 500 s, 1500 s und 2700 s

Die Abb. 3.34 zeigt die energetische Verteilung. Dargestellt werden die Energiezu- und -abfuhr (INJ+EX+JSY). Diese setzt sich zusammen aus der Freisetzung aus dem Bruch, der Entnahme der Notkühlsysteme und Kondensationskammersprühen. Dargestellt wird auch der Vergleich des Energieinhalts der Kondensationskammer. Der Unterschied im Energieinhalt ist konsistent zu den Temperaturunterschieden. Dargestellt wird auch der Fehler in der Energiebilanz. Dieser ist in der gekoppelten Rechnung ungefähr doppelt so groß wie in der Stand-alone-Rechnung.

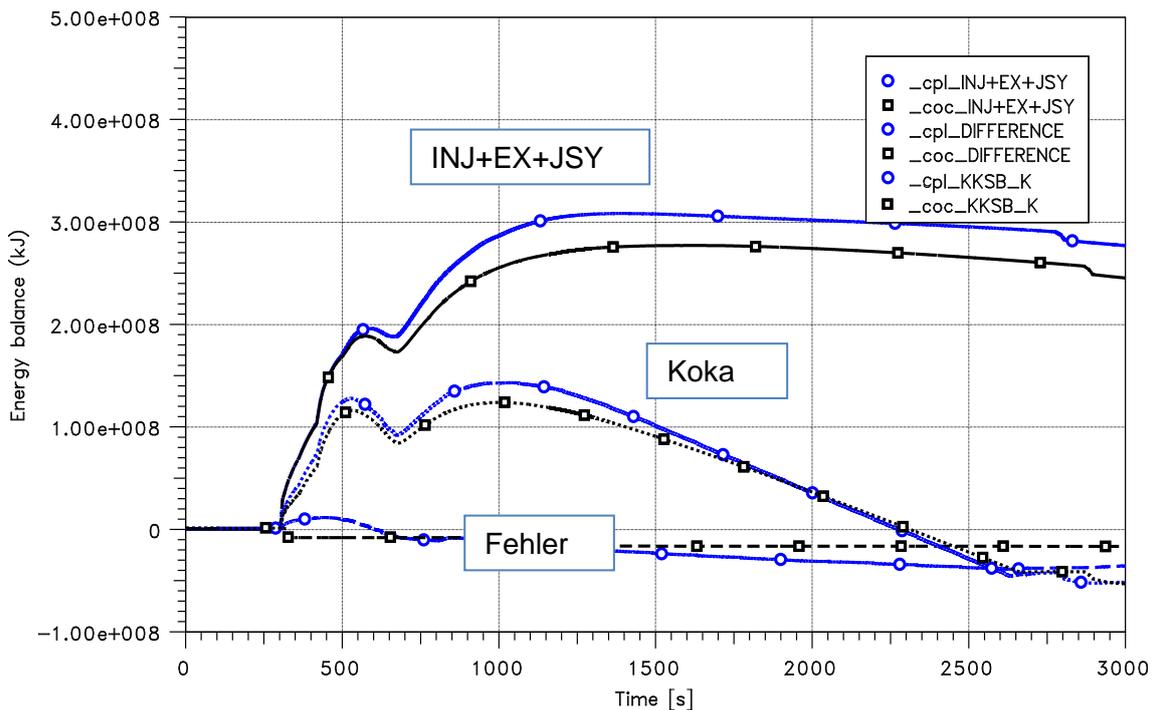


Abb. 3.34 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Energiebilanzen

3.2.2.3 Fazit

In diesem Vorhaben wurde die Kopplung von ATHLET/CoPool und COCOSYS anhand einer SWR-72 überprüft. Dabei wurden Ergebnisse einer ATHLET/COCOSYS-Rechnung mit denen einer gekoppelten Rechnung mit CoPool verglichen. Um grundsätzliche Unterschiede aufgrund unterschiedlicher Randbedingungen zu vermeiden, wurden der CoPool-Datensatz und der COCOSYS-Datensatz weitgehend aufeinander abgestimmt. Dies ist auch aufgrund des vollständigen Flutens von Zonen in COCOSYS notwendig. Im Verlauf der Arbeiten wurden noch Probleme behoben und die Kopplung weiter verbessert. Die Verbesserungen wurden anhand von Testrechnungen überprüft.

Die gekoppelten Rechenergebnisse für einen Speisewasserbruch mit verfügbaren Notkühlsystemen stimmen gut mit denen der Stand-alone-Rechnung überein. Durch die verfügbaren Systeme, insbesondere der TH-Kühler, werden Unterschiede in den Randbedingungen (z. B. Einlasstemperatur vor der TH-Pumpe), wieder ausgeglichen, so dass die Rechenergebnisse für beide Fälle weitgehend gleich sind. Durch diese Arbeiten wurde die Funktionsfähigkeit der Kopplung weitgehend erfolgreich überprüft. In Bezug auf die Stabilität der Wasseroberflächentemperatur besteht noch Verbesserungsbedarf. Hier wurden dazu aber schon Verbesserungen durchgeführt, die anhand des Tests 17 erfolgreich überprüft wurden.

Für die Simulation über eine Problemzeit von 3000 s wurden 10 d 13 h benötigt. Für die Rechnung wurde die CoPool Revision 1052 verwendet. Ab 2700 s wurde die Revision 1067 verwendet. Die maximale Zeitschrittweite wurde zwischen 0,0125 und 0,2 s gewählt. Aufgrund der Stabilitätsprobleme in Bezug der Oberflächentemperaturen musste die Zeitschrittweite stückweise auf 0,0125 s abgesenkt werden (eine automatische Zeitschrittsteuerung ist in CoPool nicht vorhanden). Da die benötigte Rechenzeit bei ca. 7 s pro Zeitschritt liegt, spielt die maximale Zeitschrittweite eine erhebliche Rolle bei der Reduktion der Rechenzeit. In der CoPool-Version 1027 betrug die Rechenzeit pro Zeitschritt noch ca. 13,1 s. Hier hat die verbesserte Bearbeitung der zahlreichen Quellen und Senken zur Reduktion der Rechenzeit beigetragen.

Trotz der ab 2700 s modifizierten Berechnung an der Pooloberfläche, traten Instabilitäten bei den Oberflächentemperaturen auf. Daher wurde für diesen Zeitbereich ebenfalls das nicht-konservative Schema verwendet.

3.2.3 Ergänzungen der CoPool/COCOSYS-Kopplung und Testrechnungen

Die CoPool-Entwicklung ist innerhalb der Vorhabenszeit so weit fortgeschritten, dass gekoppelte Rechnungen mit ATHLET/COCOSYS möglich wurden. Die Ergebnisse wurden in den beiden vorangegangenen Kapiteln dargestellt. Die dafür erforderlichen Ergänzungen an der Kopplung und deren Validierung werden im folgenden Kapitel dargestellt.

3.2.3.1 Übereinanderliegende Zonen und vollständiges Auffüllen von Zonen in COCOSYS

Ab der Version COCOSYS V3.0 ist es möglich, Zonen vollständig aufzufüllen. Dazu wird als Verbindungstyp zwischen den Zonen dann ATM_FULL verwendet, welche eine atmosphärische Verbindung und eine Drainageverbindung kombiniert. Dabei wird auch

bei horizontalen Verbindungen ein Ausgleich der Wasserstände und eine Vermischung des Wassers abgebildet (SUMP_BAL Verbindungen). Die Kopplung wurde ergänzt, so dass neben SUMP_BAL nun auch ATM_FULL Verbindungen automatisch erkannt werden. Es werden in diesen Verbindungen die von CoPool berechneten Wassermassenströme verwendet. Diese funktionieren ebenfalls für übereinanderliegende Zonen. Ebenso ist ein Auffüllen von Zonen in einer gekoppelten Rechnung möglich.

Die in CoPool verwendete Rechenmethode setzt voraus, dass der Wasserstand in einem sogenannten Unterraum flach ist, d. h. insbesondere, dass keine sich überschlagenden Oberflächen („Wellen“) berücksichtigt werden. Somit muss der Wasserstand in den zum Unterraum zugehörigen COCOSYS-Zonen gleich sein. Zu Beginn einer gekoppelten Rechnung werden diese Wasserstände zonenspezifisch mit den jeweiligen Starttemperaturen vorgegeben. Im Zusammenhang mit übereinanderliegenden Zonen musste die Definition des Wasserstandes etwas modifiziert werden. In CoPool ist der Bezugspunkt das Minimum der Unterkanten der zugeordneten Unterräume einer Zone. Damit der Anwender den zonenbezogenen Wasserstand ermitteln kann, werden die dazu notwendigen Informationen in der Datei ‚FluidZonesFinal.xml‘ unter ‚ZCoordinates‘ gespeichert (Abb. 3.35). In der Schnittstelle zwischen CoPool und COCOSYS werden mit Hilfe der Funktion ‚getZcoordRangeFluidZone‘ die Höhenkoten ausgewertet und der resultierende Wasserstand umgerechnet, so dass der resultierende Wasserstand sich auf die Kote des Zonenbodens bezieht.

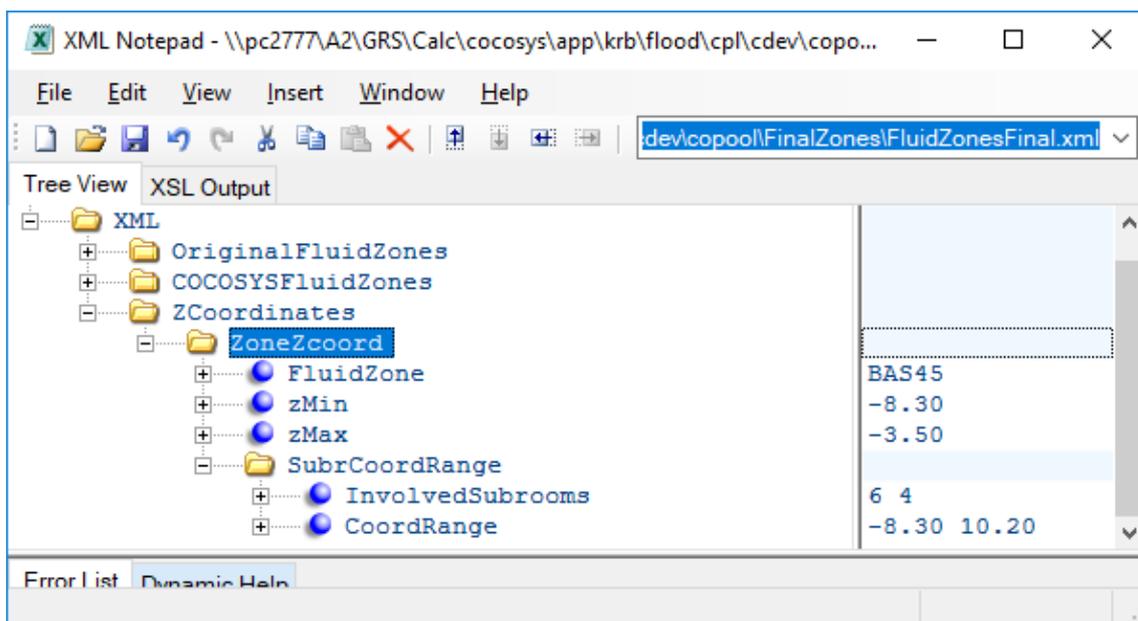


Abb. 3.35 CoPool: Ausgabe der zugehörigen Unterräume und Höhenkoten der Zone BAS45

3.2.3.2 Aktivierung der Kopplung

Wie schon im Entwicklungsvorhaben RS1532 festgestellt wurde, ist eine CoPool-Rechnung mit nur sehr geringen Wasserständen (weniger als 2 Gitterzellen in vertikaler Richtung) nur begrenzt möglich. Daher wurde die Kopplung ergänzt und die Kopplung der Wasserphase erfolgt zonenweise ab einer bestimmten Wasserhöhe. Im Zusammenhang mit übereinanderliegenden Zonen musste die Methodik verbessert werden. Nun ist es per Eingabe möglich, eine Liste von Zonen vorzugeben, deren Kopplung mit CoPool bei der Aktivierung der Kopplung einer gegebenen Zone ebenfalls aktiviert wird. Insgesamt werden nun vier Phasen unterschieden:

- **Phase 0: Kopplung zwischen THY und CoPool ist nicht aktiviert**
Der Wasserstand in der Zone liegt unterhalb des Grenzwerts. Ebenso wurde die Kopplung nicht über andere Zonen aktiviert. Das Sumpfvolumen wird über THY simuliert, die Werte in den Schnittstellen nach CoPool (z. B. Drainageströme) werden auf null gesetzt. Die Randtemperaturen der Bodenstrukturen in CoPool werden auf die zugehörige Sumpftemperatur aus THY gesetzt. Für alle anderen Wände wird die zugehörige Atmosphärentemperatur verwendet.
- **Phase 1: Initialisierung der Kopplung**
Die Sumpftemperatur sowie der Wasserstand wird als Startwert nach CoPool übertragen. Im Fall übereinanderliegender Zonen werden die Wassermassen in der höher gelegenen Zone ignoriert.
- **Phase 2: Übergangstatus der Kopplung (für einen Zeitschritt)**
Die Simulation des Sumpfes wird sowohl in CoPool als auch in COCOSYS durchgeführt.
- **Phase 3: Kopplung**
Vollständige Realisierung der Kopplung.

3.2.3.3 Kopplung CoPool mit ATHLET

In mit ATHLET gekoppelten Rechnungen werden Notkühlsysteme meistens durch das GCSM-Modul abgebildet. Hierbei werden Randbedingungen des Containments durch sogenannte Prozesssignale vorgegeben. Im Hinblick auf die Temperatur konnte bisher nur die mittlere Temperatur eines Zonenteils übergeben werden. Es wurde eine neue Option ‚JBTEMP‘ eingeführt, um die von CoPool berechnete lokale Temperatur an

ATHLET zu übergeben. Dieses wird insbesondere für die Notkühlsysteme in Bezug auf die Einlasstemperatur der Pumpsysteme benötigt.

3.2.3.4 Verbesserung der Kopplung an der Sumpfoberfläche

Die Berechnung des Wärmeübergangs an der Sumpfoberfläche zum Containment unter siedenden Randbedingungen wurde verbessert. In dem bisherigen Ansatz wurde der gesamte Wärmestrom inklusive der latenten Wärme in einen reinen konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten umgerechnet, was zum Teil zu sehr hohen Wärmeübergangskoeffizienten führte. Um die Wärmeströme CoPool-seitig abführen zu können (z. B. beim Sieden), müssen auch im Fluidbereich entsprechende Temperaturgradienten existieren. Dies führte insbesondere unter siedenden Bedingungen zu Instabilitäten und unrealistischen Temperaturen an der Sumpfoberfläche. In dem geänderten Ansatz wird der Energietransfer, welcher durch Massenaustausch bedingt ist, analog um Massentransfer ebenfalls als Volumenquelle bzw. -senke berücksichtigt. Dadurch werden nun realistische Temperaturen berechnet.

3.2.3.5 Durchführung von weiteren Testrechnungen mit COCOSYS/CoPool: Testfälle mit einem Pool

Um die Modifikationen und Ergänzungen zu überprüfen, wurden zusätzliche Testrechnungen durchgeführt, deren Ergebnisse nachfolgend exemplarisch beschrieben sind.

Um die CoPool/COCOSYS-Kopplung zu überprüfen, wurden einzelne Tests wiederholt bzw. zusätzliche Testfälle mit einer einfachen Poolgeometrie durchgeführt. Die erzielten Ergebnisse werden beispielhaft diskutiert.

Test 01³: Überprüfung der Wärmeleitung

In diesem sehr einfachen Testbeispiel wurde ein Volumen mit den Maßen 10 m x 10 m x 10 m umgeben von einer 0,5 m dicken Stahlwand untersucht (Abb. 3.36). Im Gasvolumen wurde Wärme eingespeist (über Einspeisetabelle in COCOSYS). Die in COCOSYS berechneten Temperaturrandbedingungen werden korrekt an CoPool übergeben.

³ Die Nummerierung der Testbeispiele bezieht sich auf die Nummerierung im Vorhabensbericht GRS-V-RS1532-2/2017.

Der Vergleich zwischen Stand-alone- und gekoppelter COCOSYS-Rechnung ist für einzelne Ergebnisse in Abb. 3.36 bis Abb. 3.38 dargestellt. In den früheren Versionen wurde für trockene Wände nicht die von CoPool berechnete mittlere Wandtemperatur in COCOSYS verwendet. Dieser Fehler ist nun behoben. Es zeigen sich nur noch geringe Unterschiede der berechneten Wandtemperatur (Abb. 3.39), unabhängig von der Zeitschrittweite. Diese liegt an der Oberfläche nach 500 s bei ca. 0,005 K.

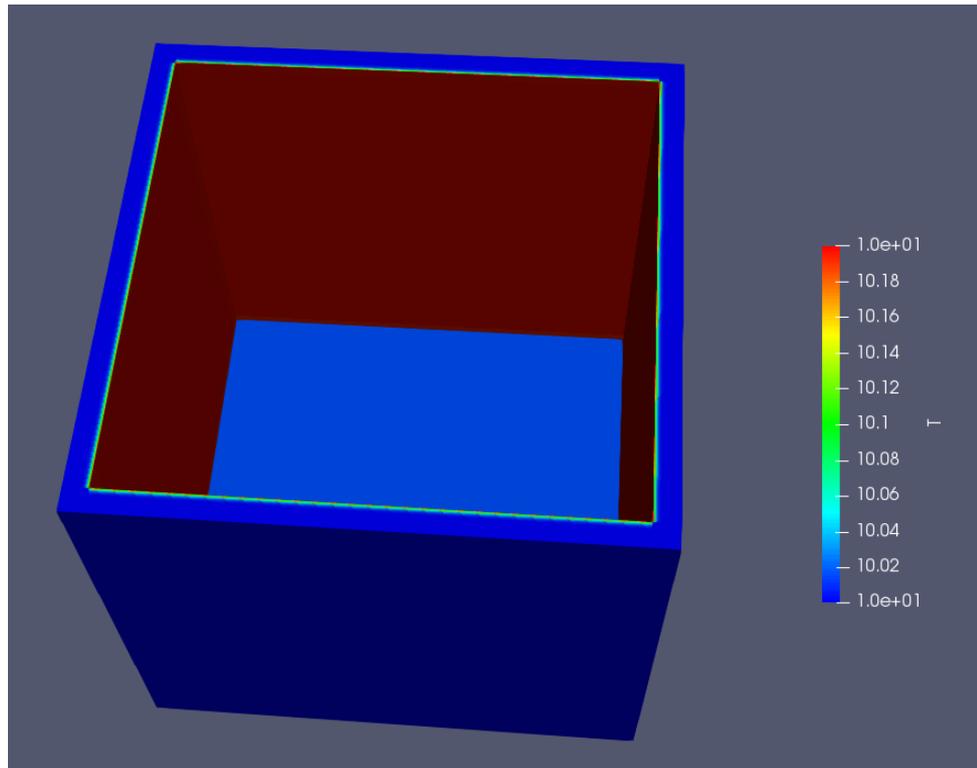


Abb. 3.36 CoPool, Test 01: Wandtemperatur bei 500 s

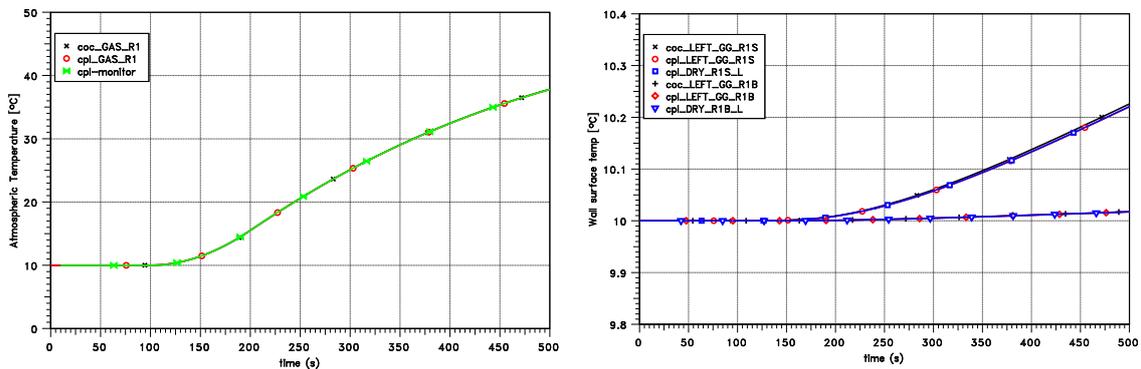


Abb. 3.37 CoPool, Test 01: Vergleich Gas- und Wandoberflächentemperatur

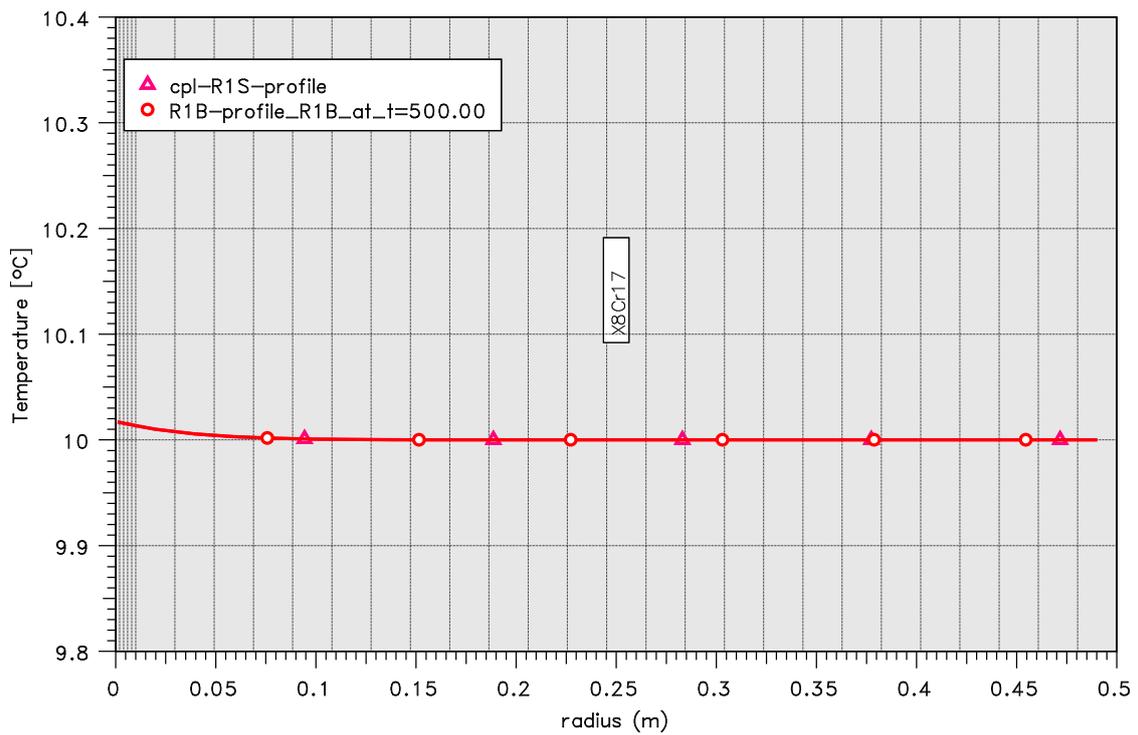
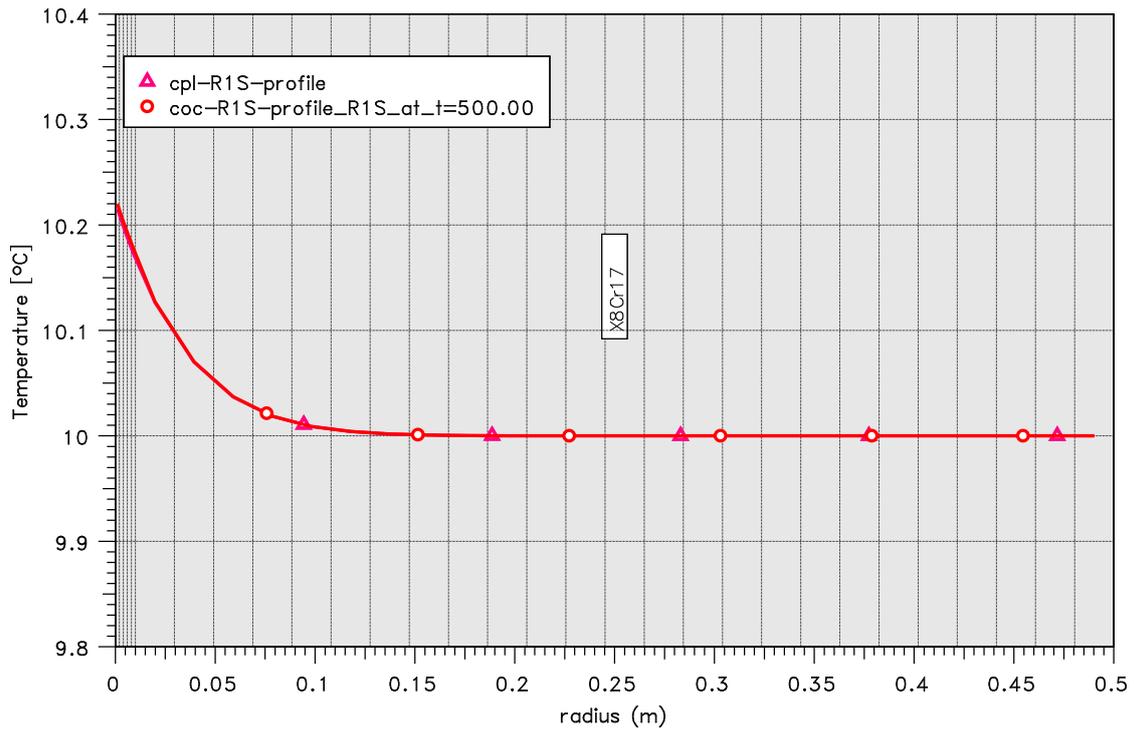


Abb. 3.38 CoPool, Test 01: Vergleich der Temperaturprofile in der Seitenwand (oben) und im Boden (unten) bei 500 s

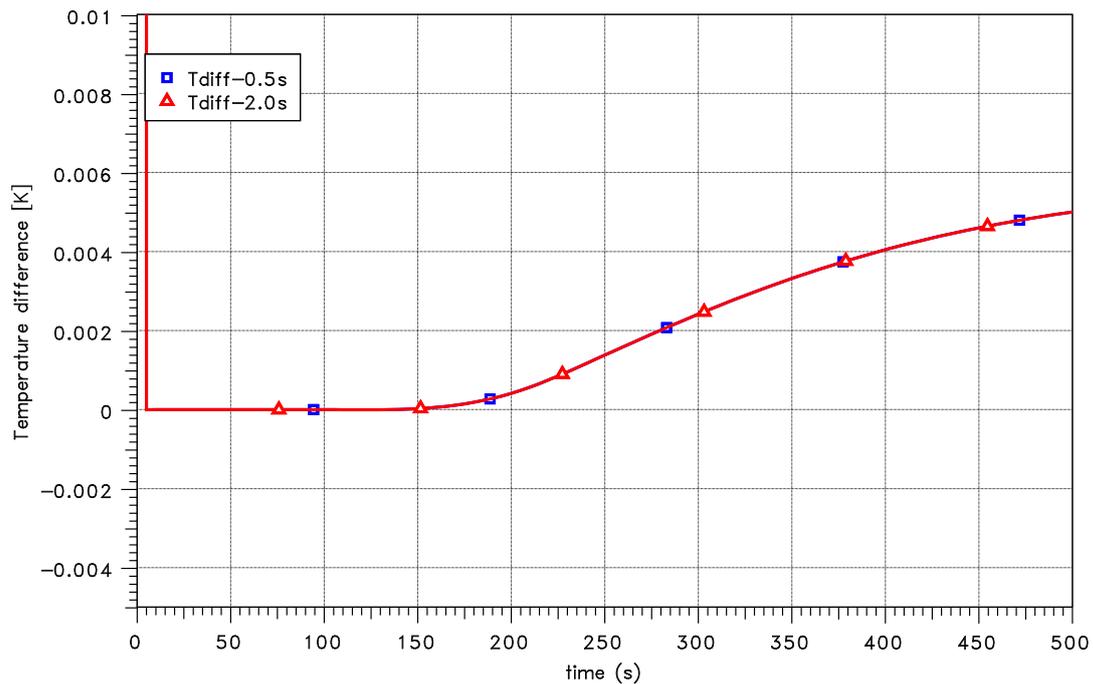


Abb. 3.39 CoPool, Test 01: Temperaturdifferenz zwischen Stand-alone-Rechnung und CoPool-Rechnung

Test 07: Überprüfung der Kopplung bezüglich Pump- und Sprühsysteme

In diesem Test wird die Schnittstelle zwischen CoPool und COCOSYS bezüglich Pumpen und Sprühsystemen geprüft. Oberhalb der Poolzone R1 wurde eine gleichgroße Domzone RDOM angehängt. Die Entnahme des Pumpmassenstroms erfolgt bei $(x,y,z) = (1;1;0,5)$. Der Sprühkegel beginnt in der Domzone und endet dann mittig in der Wasseroberfläche von R1. Alle Zonen starten mit 80 °C, die Wände sind isoliert. Es wurde eine gekoppelte Rechnung mit konservativem Lösungsschema (blaue Kurven) und eine mit dem gemischtem Lösungsschema (grüne Kurven) durchgeführt und die Ergebnisse mit einer COCOSYS-Rechnung, stand-alone (schwarze Kurven) verglichen.

Abb. 3.40 zeigt einen diagonalen Schnitt der Temperaturverteilung im Pool bei 300 s. Das kältere Sprühwasser sinkt relativ direkt zum Boden. Das Verhalten der beiden gekoppelten Rechnungen ist etwas unterschiedlich.

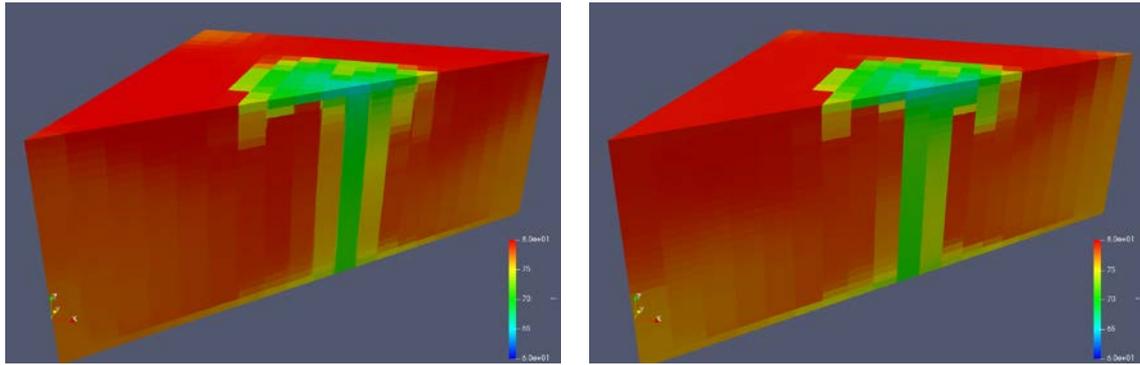


Abb. 3.40 CoPool, Test 07: Diagonaler Schnitt der Temperaturverteilung im Pool bei 300 s (Lösungsschema: links konservativ, rechts gemischt)

Die mittlere Pooltemperatur der gekoppelten Rechnung mit konservativem Lösungsschema ist gleich der Stand-alone-Rechnung (Abb. 3.41). Die Werte mit dem gemischtem Lösungsschema sind dagegen etwas niedriger. Gestrichelt sind die Temperaturen am Pumpeneinlass dargestellt. Hier gibt es Unterschiede zwischen gekoppelten Rechnungen und der Stand-alone-Rechnung. Zu Beginn verharrt die Temperatur bei 80 °C und ist somit höher als die mittlere Temperatur. Sobald das kalte Wasser den Poolboden erreicht, sinkt die Einlasstemperatur rapide ab und ist im Folgenden unterhalb der mittleren Pooltemperatur. Aufgrund der Kühlung sind die Auswirkungen in diesem Beispiel allerdings sehr gering. Beide Lösungsschema zeigen etwas unterschiedliche Ergebnisse.

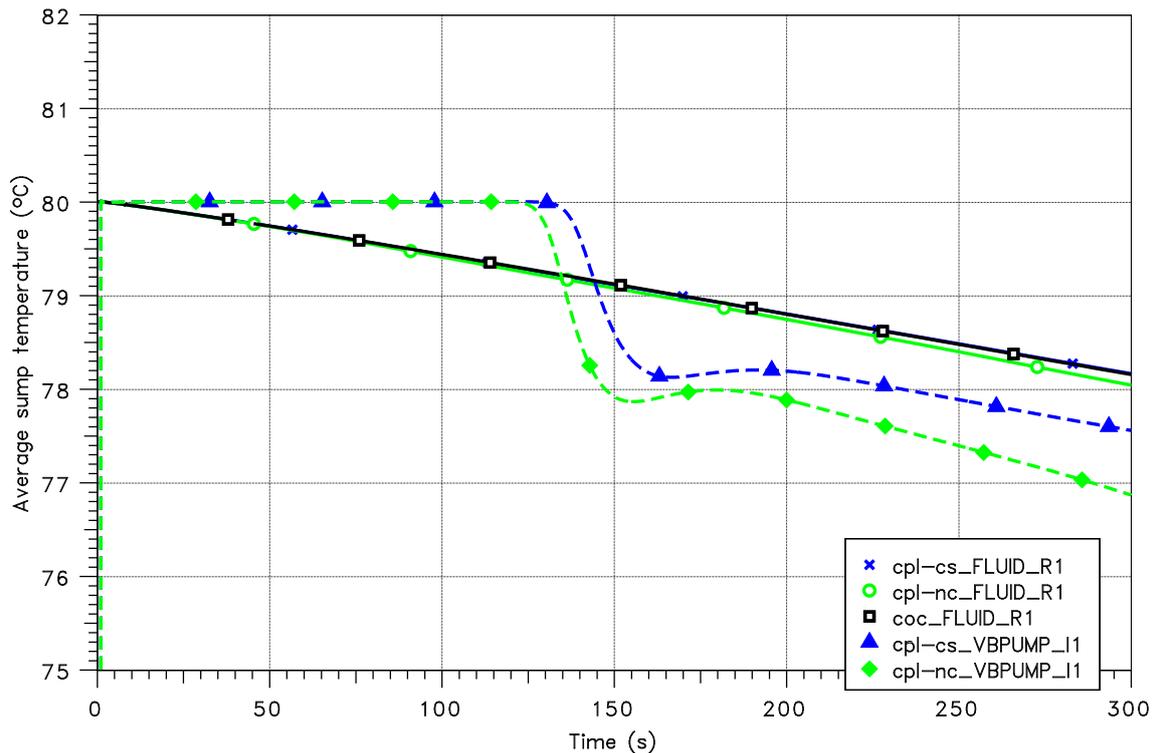


Abb. 3.41 CoPool, Test 07: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlasstemperatur (gestrichelte Kurven)

Abb. 3.42 zeigt den Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur. Erwartungsgemäß liegt die von CoPool berechnete Sumpfoberflächentemperatur unterhalb der mittleren Pooltemperatur. Die anfängliche Temperaturschwankung ist dadurch bedingt, dass es eine Zeit dauert, bis das kalte Wasser in tiefere Bereiche absinkt und die Zirkulation in Gang kommt. Die Atmosphärentemperaturen sind in allen Rechnungen praktisch gleich (Abb. 3.43). Die Abweichungen in der gekoppelten Rechnung korrelieren mit der Einlasstemperatur.

Wie in Abb. 3.44 zu sehen ist, weichen die berechneten Wasserstände um ca. 13 cm ab. Während in COCOSYS die Wasserdichte temperaturabhängig ist, verwendet CoPool eine konstante Wasserdichte. Um ein gleiches Verhalten zu erhalten, ist es notwendig, dass die Wassermasse in beiden Rechnungen gleich ist, so dass bei der Kopplung unterschiedliche Wasserstände in Kauf genommen werden müssen. Wird diese Randbedingung nicht beachtet, kann dies zu Beginn der Rechnung zu einem Drucksprung mit entsprechenden Massenströmen führen.

Bei Verwendung des gemischten Lösungsschemas ist die Energiebilanz nicht so gut wie in den anderen Rechnungen. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.45 dargestellt. Bezogen auf die gesamte Energieänderung (aufgrund der Kühlung) beträgt der relative Fehler ~5 %.

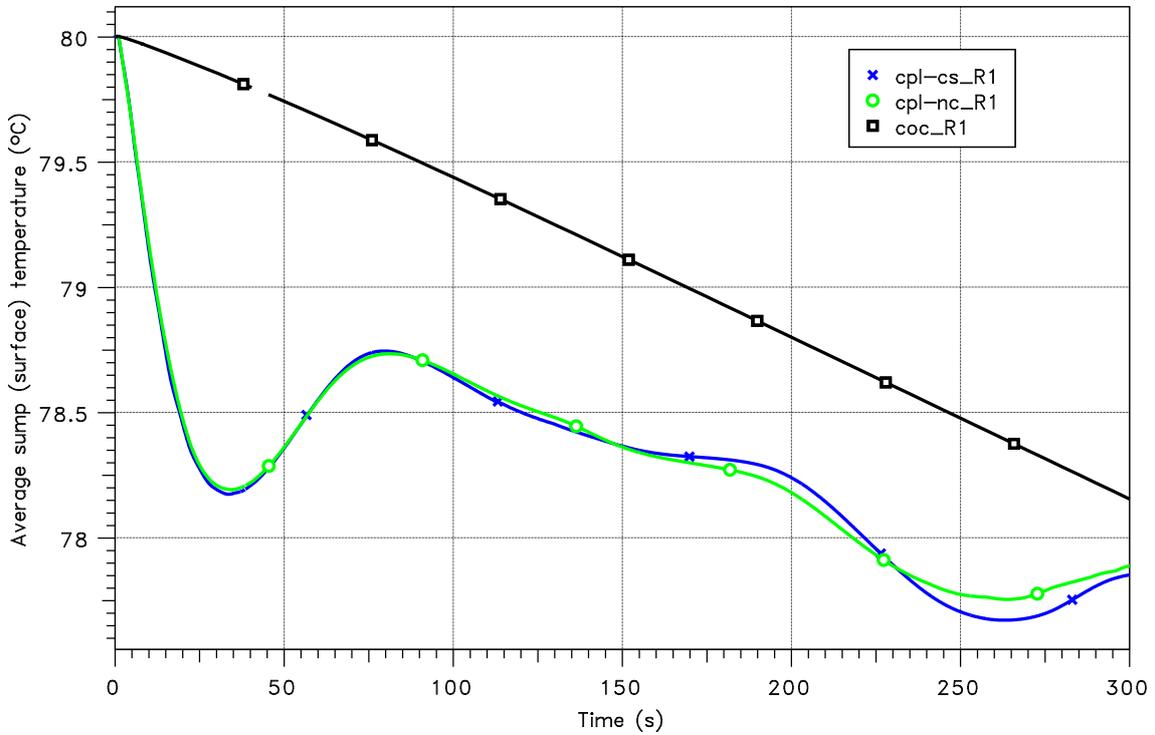


Abb. 3.42 CoPool, Test 07: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur

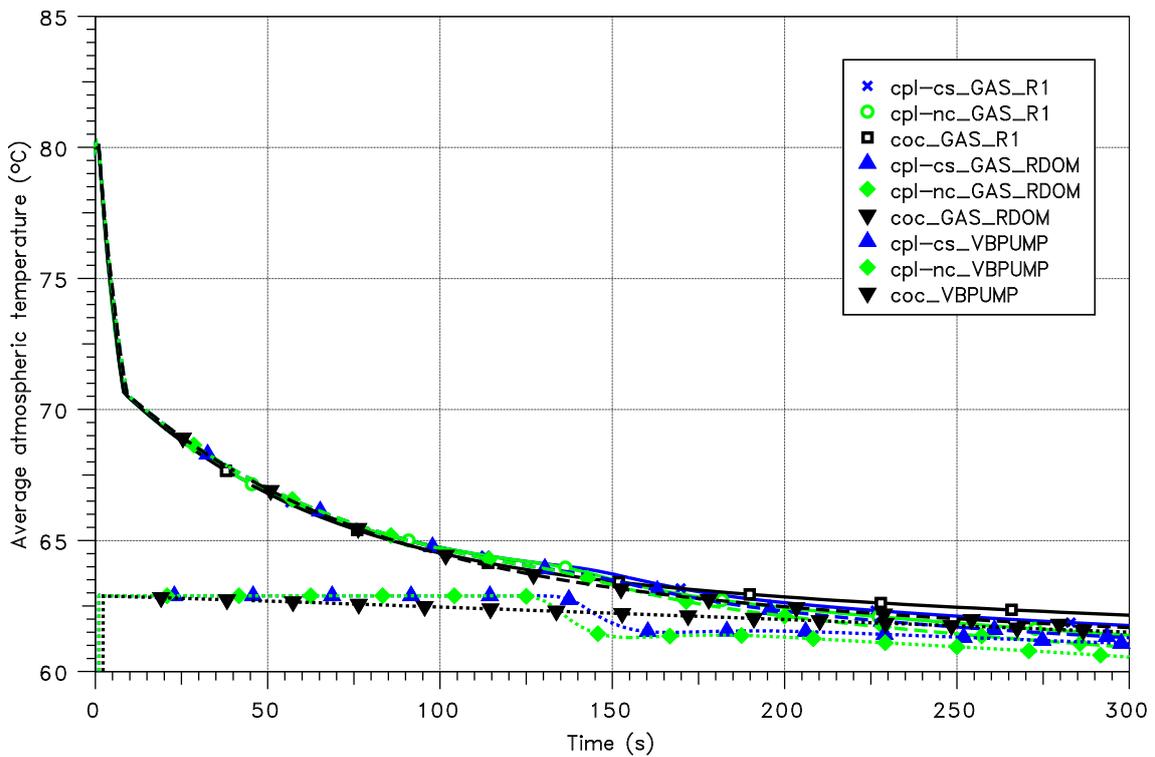


Abb. 3.43 CoPool, Test 07: Vergleich der Atmosphärentemperatur

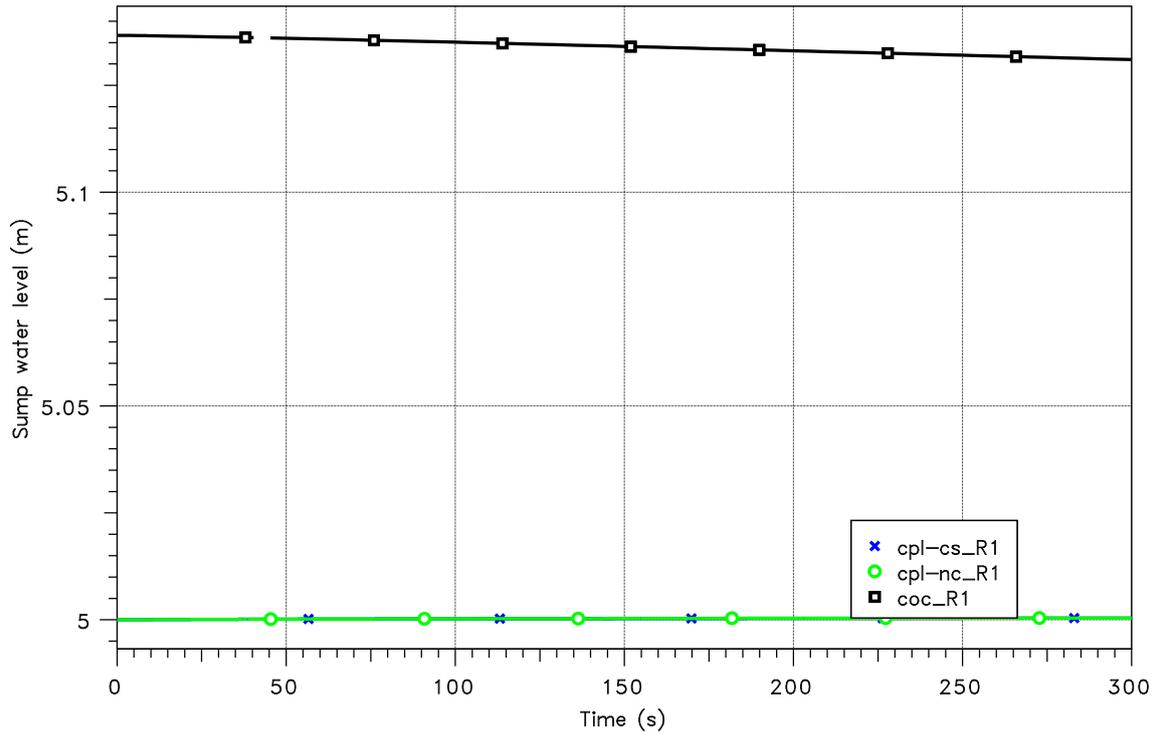


Abb. 3.44 CoPool, Test 07: Vergleich der Wasserstände

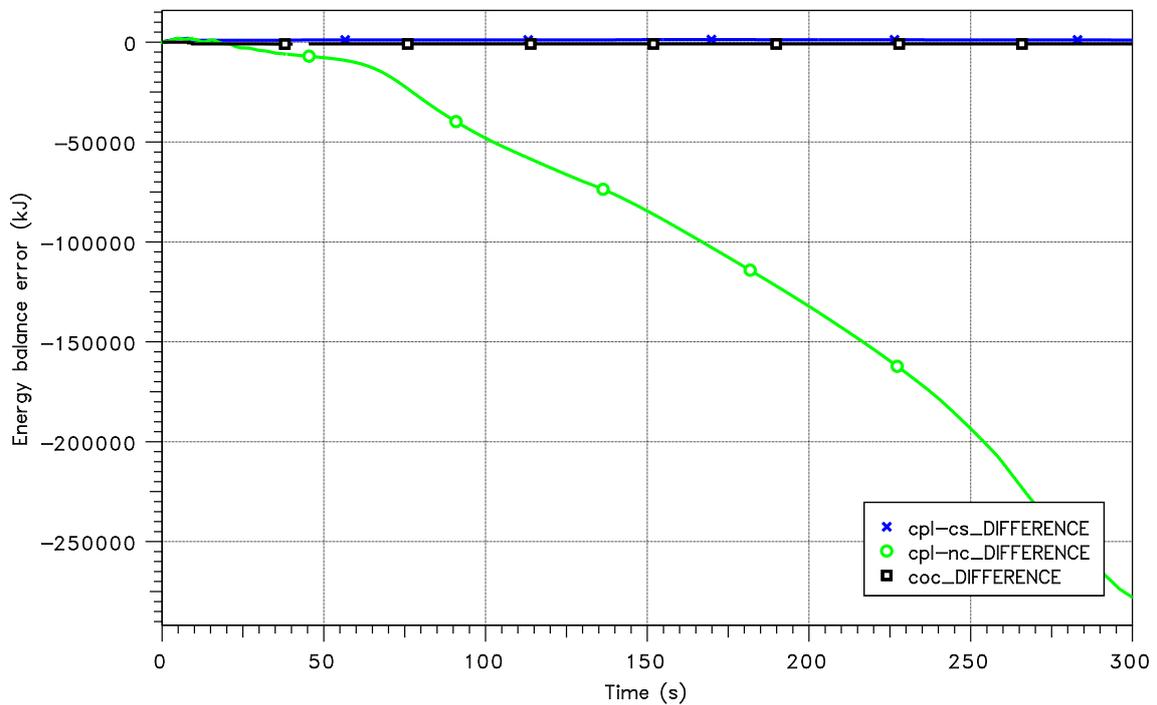


Abb. 3.45 CoPool, Test 07: Vergleich der Energiebilanz

Test 07b: Abkühlung durch Sprühsystem mit zusätzlicher Wasserentnahme

Dieses Testbeispiel unterscheidet sich zum Test 07 dadurch, dass zusätzlich an der Position $(x,y,z) = (9;1;0,5)$ Wasser mit einer Rate von $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$ entnommen wird, wodurch

der Wasserspiegel insgesamt sinkt. Ziel ist es, das Verhalten von CoPool bei variablem Wasserspiegel zu untersuchen.

Insgesamt wurden vier Rechnungen durchgeführt:

- COCOSYS-Rechnung, stand-alone (,coc', schwarze Kurven)
- Gekoppelte Rechnung mit konservativem Lösungsschema und einer max. Zeitschrittweite von 0,2 s (,cpl-cs', blaue Kurven)
- Gekoppelte Rechnung mit gemischtem Lösungsschema und einer max. Zeitschrittweite von 0,2 s (,cpl-nc', grüne Kurven)
- Gekoppelte Rechnung mit konservativem Lösungsschema und einer kleineren max. Zeitschrittweite von 0,05 s (,cpl-dt', rote Kurven)

Der Vergleich der mittleren Sumpftemperatur ist in Abb. 3.46 dargestellt. Auffällig ist, dass die mittlere Sumpftemperatur in den gekoppelten Rechnungen mit dem konservativen Lösungsschema niedriger ist als die in anderen Rechnungen. Zu erwarten wäre eher eine leicht höhere Temperatur, da über die Verbindung VTPUMP eher kälteres Wasser entnommen wird. Insgesamt ist das Verhalten ähnlich zum Test 07, allerdings ist die Temperaturabsenkung an den Pumpeneinlässen früher, da mehr Wasser entnommen wird. Bei den konservativen Rechnungen ist ein Einfluss hinsichtlich der Temperaturen am Pumpeneinlass sichtbar. Dies gilt auch für die mittlere Sumpfoberflächentemperatur (Abb. 3.47).

Hinsichtlich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur ist der Übergang der Gitterstruktur beim sinkenden Wasserspiegel sichtbar. Sinkt in einer Gitterzelle der Wasserstand unterhalb der halben Zellenhöhe, wird diese Zelle mit der darunterliegenden Zelle zusammengeführt und eine neue volumengemittelte Temperatur berechnet. Die Berechnung der mittleren Sumpfoberflächentemperatur ist hier etwas unterschiedlich. Hier wird die Mittelung über eine ,konstante' Zellenhöhe durchgeführt. Dadurch ergeben sich Sprünge. Diese sind hier besonders ausgeprägt, da die Temperaturen in den beiden obersten Zellen sehr unterschiedlich sind (Abb. 3.48). Bei kleinen Zeitschritten werden Instabilitäten in der Oberflächentemperatur ab ca. 400 s beobachtet. Hinsichtlich der Massen sind die Ergebnisse der gekoppelten Rechnungen sehr ähnlich. Dies zeigt sich zum Beispiel am Wasserstand (Abb. 3.49).

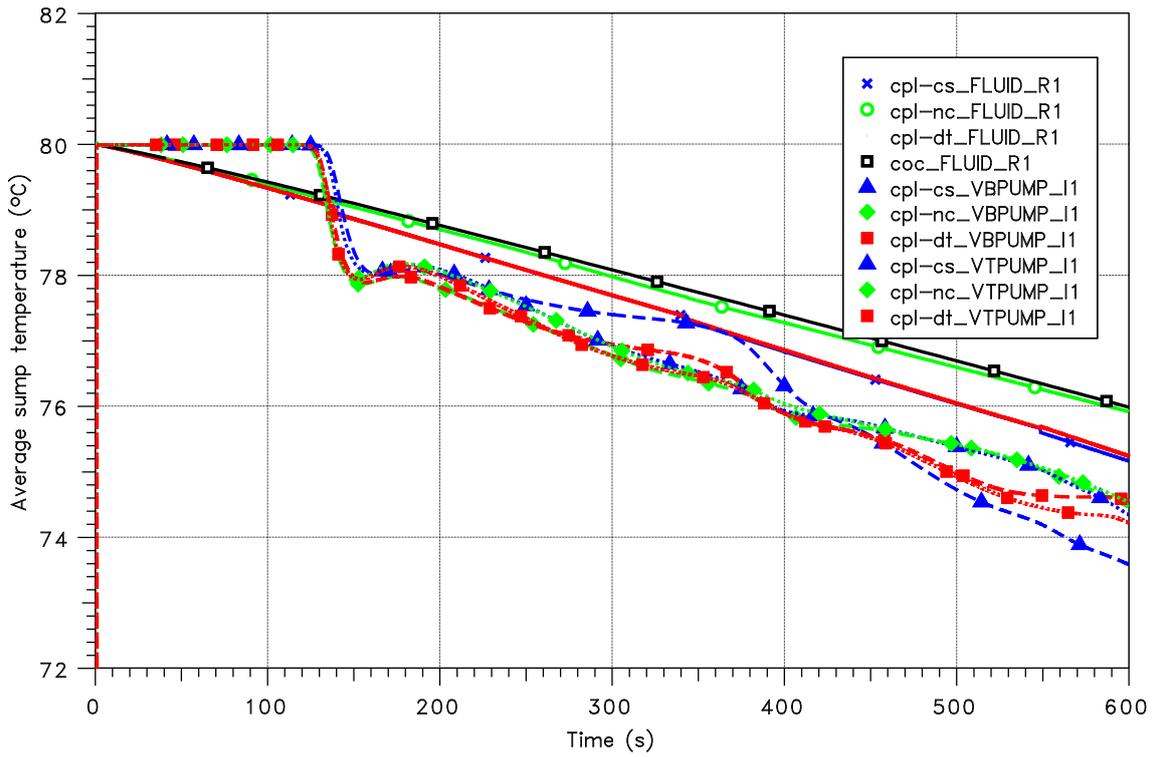


Abb. 3.46 CoPool, Test 07b: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlass-temperaturen (gestrichelte und gepunktete Kurven)

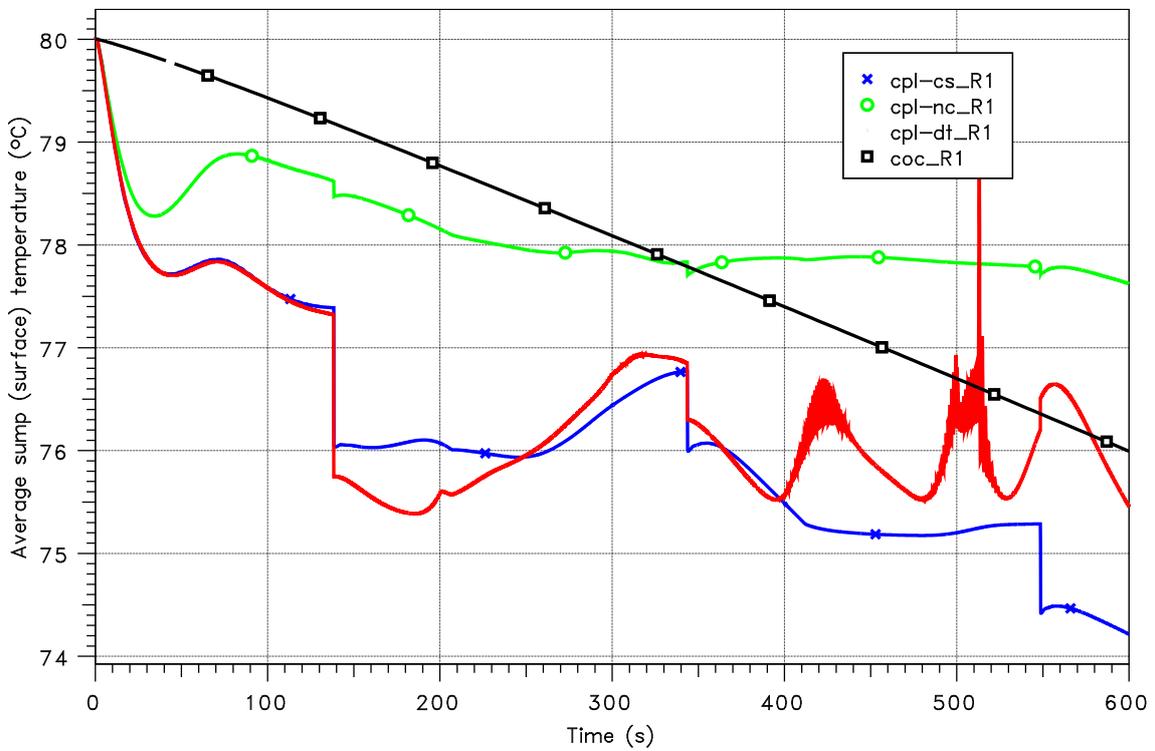


Abb. 3.47 CoPool, Test 07b: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur

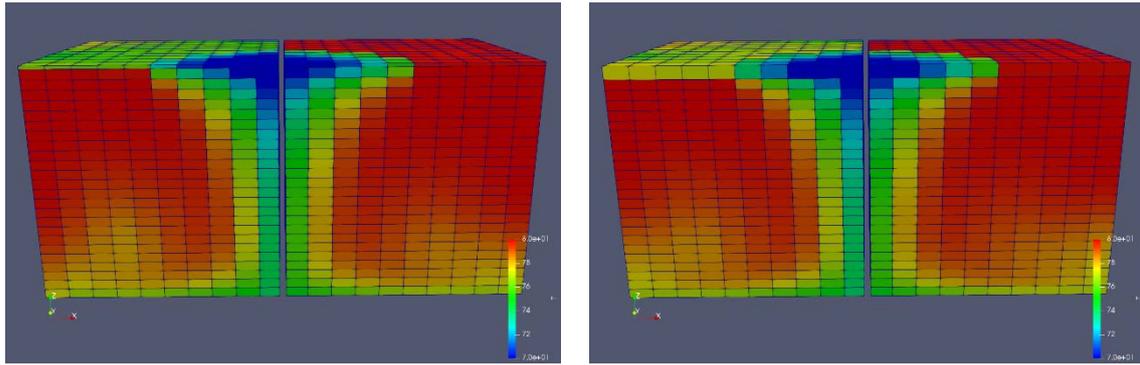


Abb. 3.48 CoPool, Test 07b: Vergleich der Temperaturprofile bei 135 s und 140 s (linke Seite: konservatives Schema, rechte Seite: gemischtes Schema)

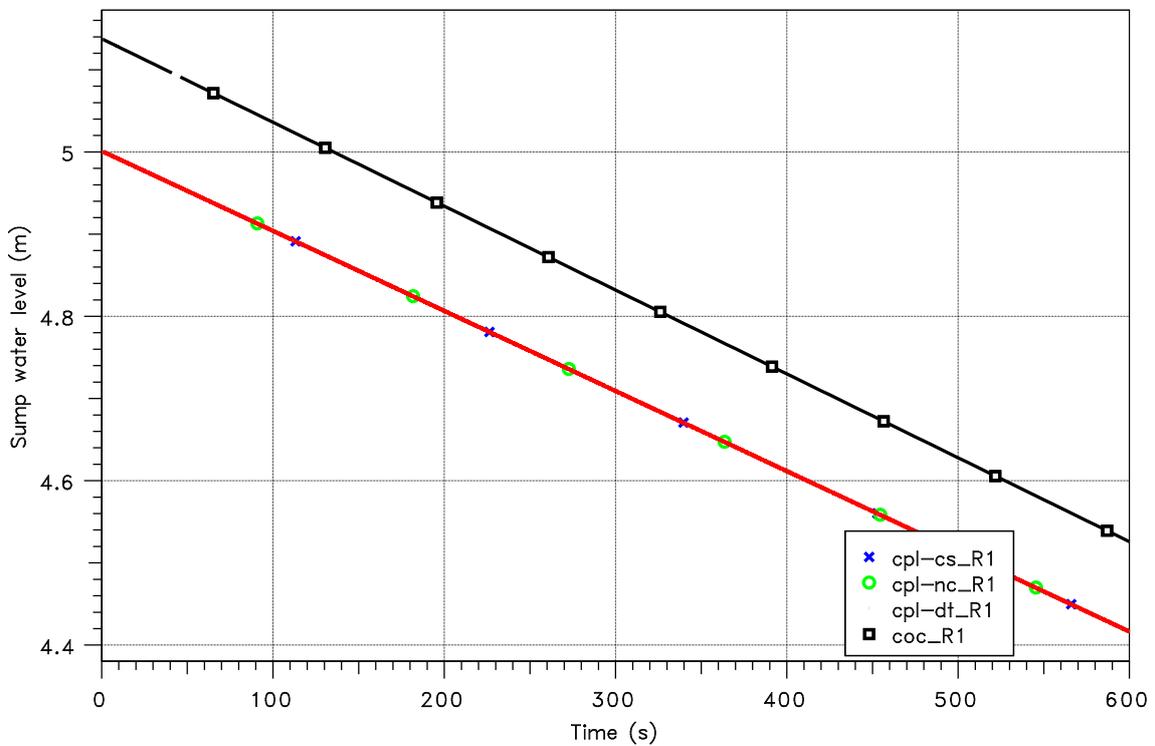


Abb. 3.49 CoPool, Test 07b: Vergleich der Wasserstände

Größere Unterschiede werden bei den Rechnungen mit konservativem Schema in Bezug auf die Energiebilanz beobachtet (Abb. 3.50). Hier besteht noch Verbesserungsbedarf. Der Fehler liegt bei 22 % und wird auch bei kleineren Zeitschrittweiten nicht besser.

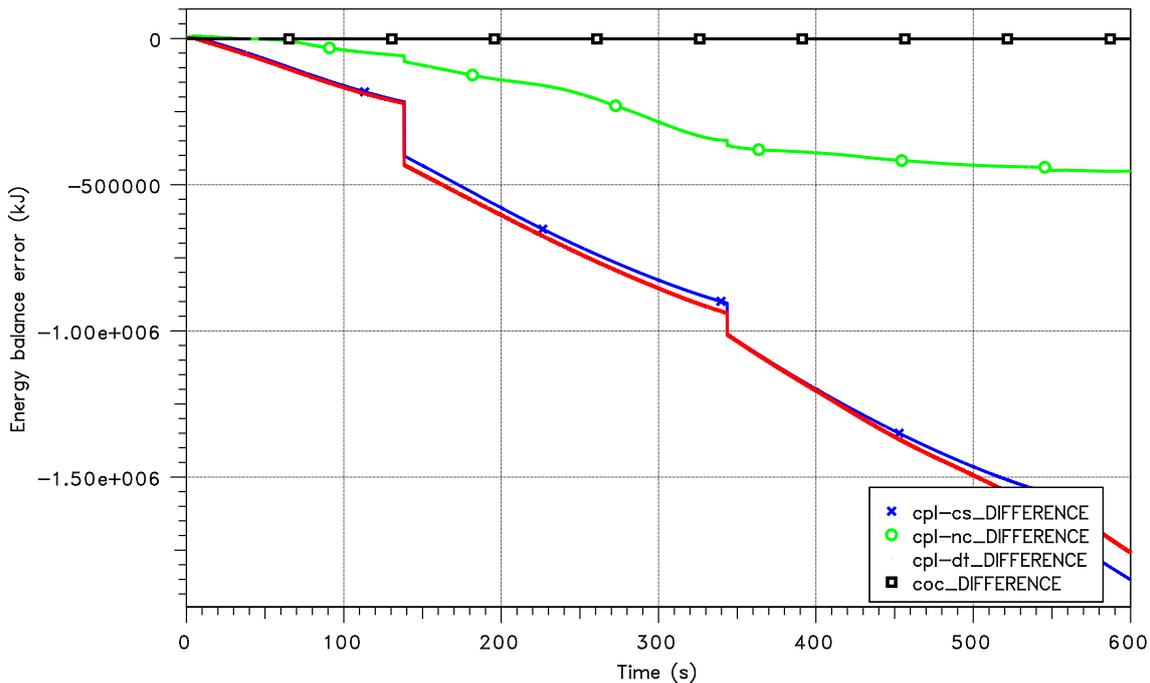


Abb. 3.50 CoPool, Test 07b: Vergleich der Energiebilanz

Test 07c: Abkühlung durch Sprühsystem mit zusätzlicher Wasserentnahme und adiabater Sumpfoberfläche

Um die Ursachen der doch großen Abweichungen in den Ergebnissen sowie der Energiebilanz beim obigen Test 07b und bei Verwendung des konservativen Schemas zu identifizieren, wurde eine zusätzliche Testvariante untersucht. Dieser Test 07c ist analog Test 07b, allerdings wird die Sumpfoberfläche als adiabatisch angenommen. Somit gibt es keinen Wärme- und Stoffaustausch (Verdunstung oder Kondensation) an der Sumpfoberfläche. Durch das Sprühen kommt es allerdings zu einer Volumen Kondensation in der Atmosphäre. Die Ablagerung der Nebeltröpfchen in den Pool wird berücksichtigt. Betrachtet werden die gekoppelten Rechnungen mit konservativem Schema (blaue Kurven) und gemischtem Schema (grüne Kurven) sowie die Stand-alone-Rechnung (schwarze Kurven).

Aufgrund der Kühlung ist der Einfluss der Temperatur am Pumpeneinlass auf die resultierende mittlere Sumpftemperatur eher gering (Abb. 3.51). Somit sind wie erwartet die mittleren Sumpftemperaturen der aus der Stand-alone-Rechnung sehr ähnlich. Langzeitig ist die Sumpftemperatur in der gekoppelten Rechnung etwas höher, da im Vergleich zur Stand-alone-Rechnung kälteres Wasser entnommen wird. Die Übereinstimmung bei Verwendung des gemischten Lösungsschemas ist in Test 07b und 07c gleich. Bei Verwendung des konservativen Schemas ist das Verhalten sehr unterschiedlich. Daher

sollte die Modellierung der Wechselwirkung an der Sumpfoberfläche weiter untersucht werden.

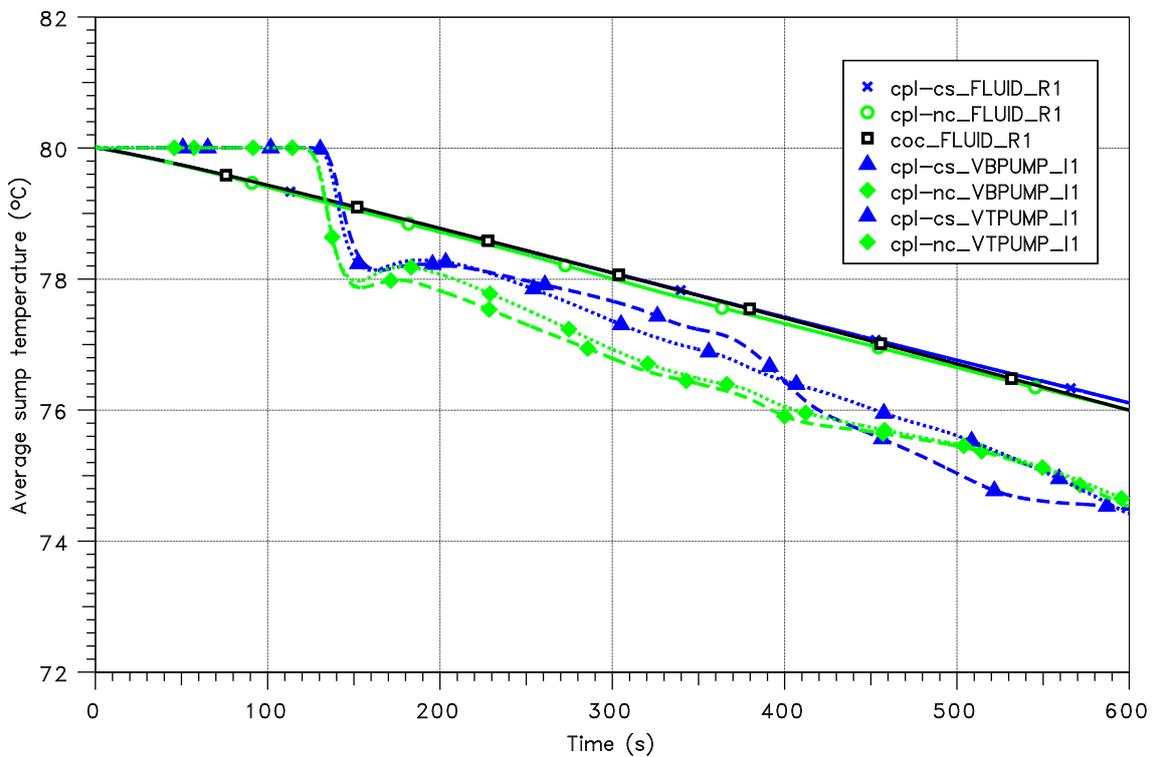


Abb. 3.51 CoPool, Test 07c: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlass-temperaturen (gestrichelte und gepunktete Kurven)

In der Abb. 3.52 werden die mittleren Sumpfoberflächentemperaturen verglichen. Hier ist die Übereinstimmung zwischen den verschiedenen Lösungsschemata deutlich besser als beim Testfall 07b. Hier fällt auf, dass die Temperatursprünge beim Gitterwechsel deutlich geringer sind. Dies zeigt sich auch beim Vergleich der Temperaturverteilung in der Abb. 3.53. Die Ergebnisse sind für beide Lösungsschemata praktisch gleich.

Die Abb. 3.54 zeigt den Vergleich der Energiebilanz. Der Fehler bei Verwendung des gemischten Schemas ist ungefähr gleich wie beim Testfall 07b. Dagegen ist das Ergebnis bei Verwendung des konservativen Schemas nun deutlich besser und beträgt nur noch 0,5 %.

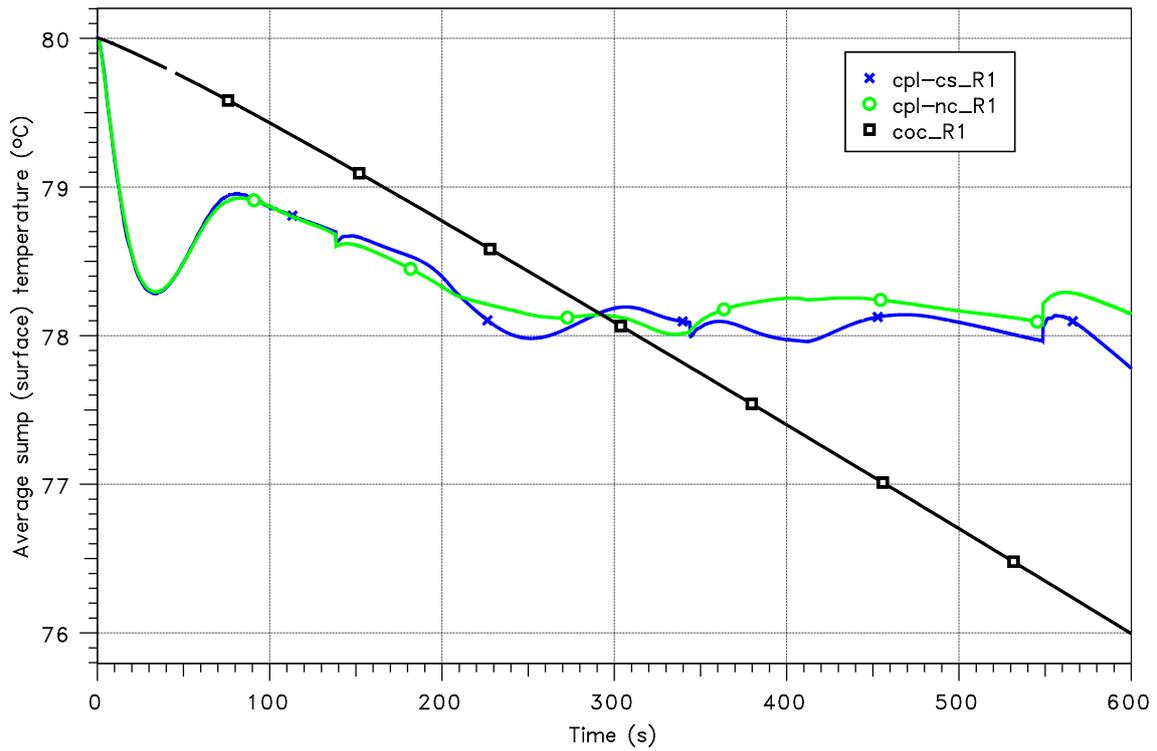


Abb. 3.52 CoPool, Test 07c: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur

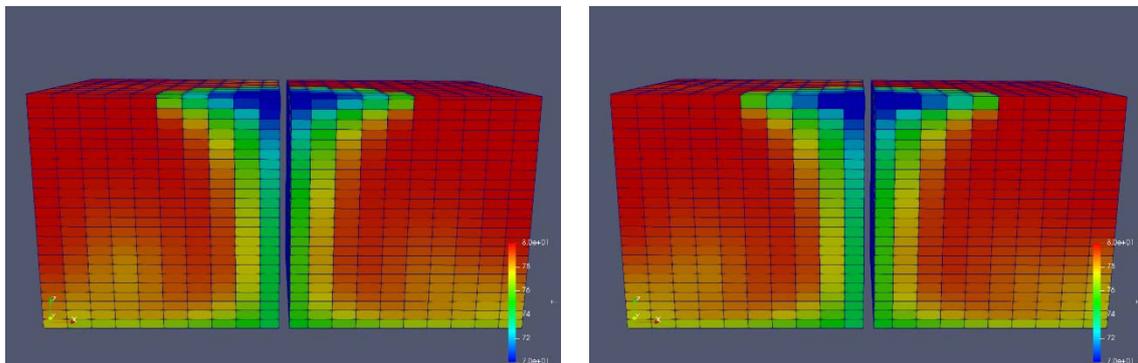


Abb. 3.53 CoPool, Test 07c: Vergleich der Temperaturprofile bei 135 s und 140 s (linke Seite: konservatives Schema, rechte Seite: gemischtes Schema)

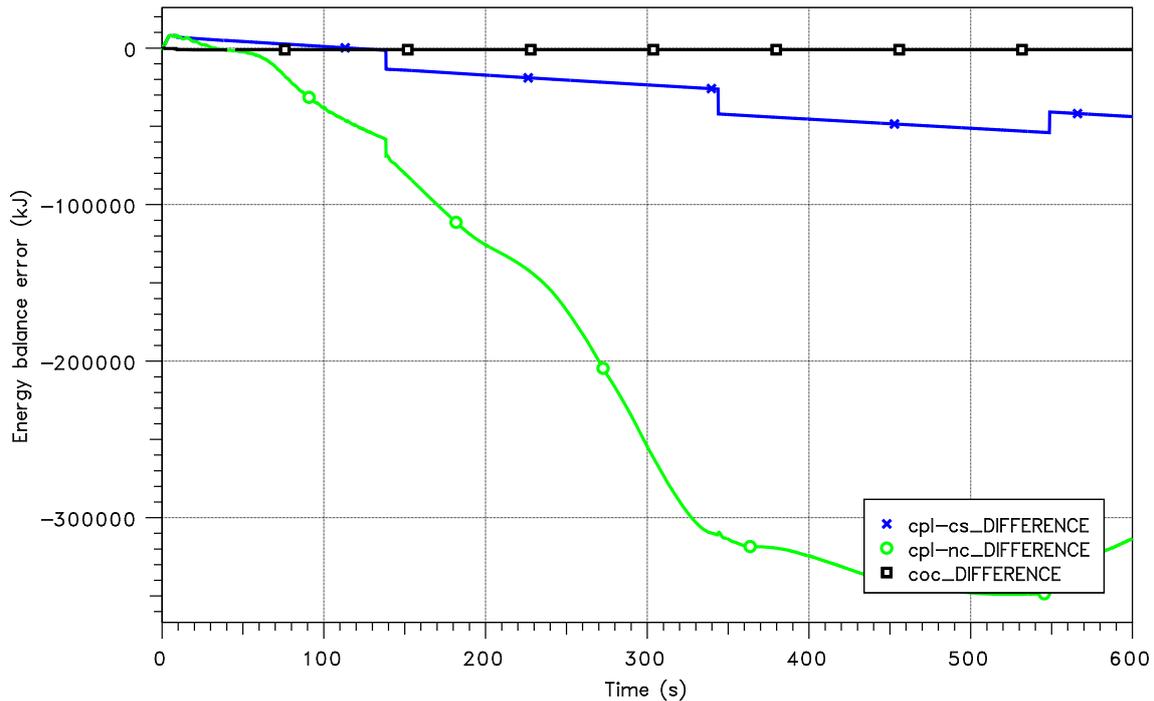


Abb. 3.54 CoPool, Test 07c: Vergleich der Energiebilanz

Test 17: Simulation einer siedenden Sumpfoberfläche

Bei einem Siedewasserreaktor wird Dampf in einen Pool (KoKa) über die S&E-Ventile bzw. Kondensationsrohre eingetragen. Je nach Randbedingungen können dabei siedende Zustände im Pool entstehen. Zu beachten ist, dass CoPool selbst nur einphasige Fluide berechnen kann. Eine Dampfzufuhr wird dabei als ‚sehr heißes‘ Wasser mit der entsprechenden Enthalpie eingespeist. Der Auftrieb des Dampfes wird als zusätzlicher Impulseintrag vereinfacht abgebildet.

Im Fall siedender Zustände an der Pooloberfläche sind in älteren CoPool-Versionen Stabilitätsprobleme aufgetreten. In der neuen CoPool-Version (ab Revision 1067) werden die Strömungsterme an der Pooloberfläche ausgeschaltet und die turbulente Diffusion erhöht. Mittels der Option ‚OnFreeB‘ kann die turbulente Wärmeleitfähigkeit für die oberste Schicht erhöht werden.

Zur Überprüfung der aktuellen CoPool-Version wurde jeweils eine Testrechnung mit konservativem Lösungsschema (‚cpl-cs‘, blaue Kurven), mit gemischtem Lösungsschema (‚cpl-nc‘, rote Kurven) und gemischtem Lösungsschema und Verwendung ‚OnFreeB‘-Option (cpl-nc-b, grüne Kurven) durchgeführt. In diesem Test 17 wird der Pool mit sehr heißem Wasser aufgefüllt, so dass der Pool zu sieden beginnt.

Die Abb. 3.55 zeigt den Vergleich zum Gesamtdruck zwischen Stand-alone-Rechnung und den gekoppelten Rechnungen. Aufgrund der Schichtung in CoPool beginnt die Pooloberfläche früher zu siedeln und somit steigt der Gesamtdruck auch früher an. Alle CoPool-Versionen zeigen sehr ähnliche Ergebnisse. Durch die Wassereinspeisung steigt der Wasserstand ständig an. Somit werden nach und nach Gitterzellen aufgefüllt. In allen CoPool-Rechnungen ist die „Gitterstruktur“ deutlich durch „Zacken“ im Verlauf zu sehen.

Die Temperaturen werden in Abb. 3.56 dargestellt. Die mittlere Pooltemperatur ist in den gekoppelten Rechnungen etwas niedriger. Grund ist der höhere Wärmetransfer an der Pooloberfläche sowie das frühere Sieden. So sind die Pooloberflächentemperaturen in der gekoppelten Rechnung ca. 5 K höher als die mittlere Temperatur. Instabilität der Pooloberflächentemperatur sind in der aktuellen CoPool-Version nicht mehr vorhanden. Allerdings ist auch hier in der späteren Phase wieder die Gitterstruktur in den Ergebnissen sichtbar.

Abb. 3.57 zeigt den Vergleich der Siederate. In den gekoppelten Rechnungen beginnt diese früher, hat aber in der späteren Phase niedrigere Werte. Die Gitterstruktur ist auch hier deutlich zu sehen.

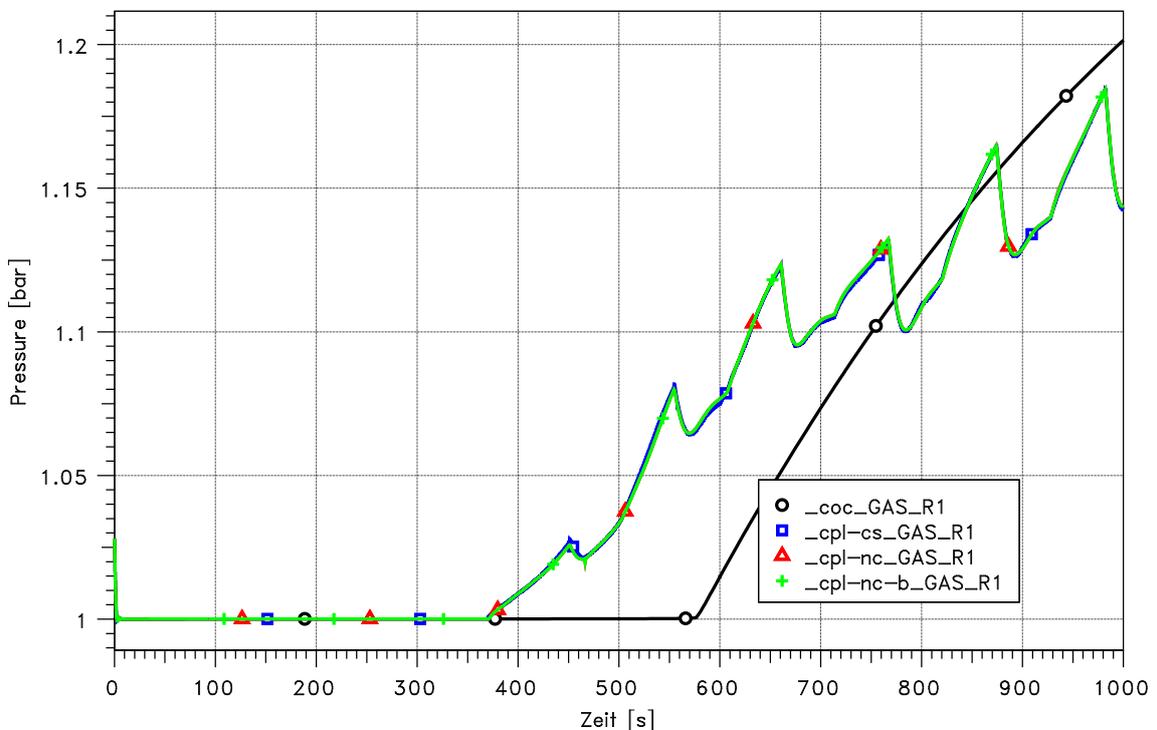


Abb. 3.55 CoPool Test 17: Vergleich des Gesamtdrucks

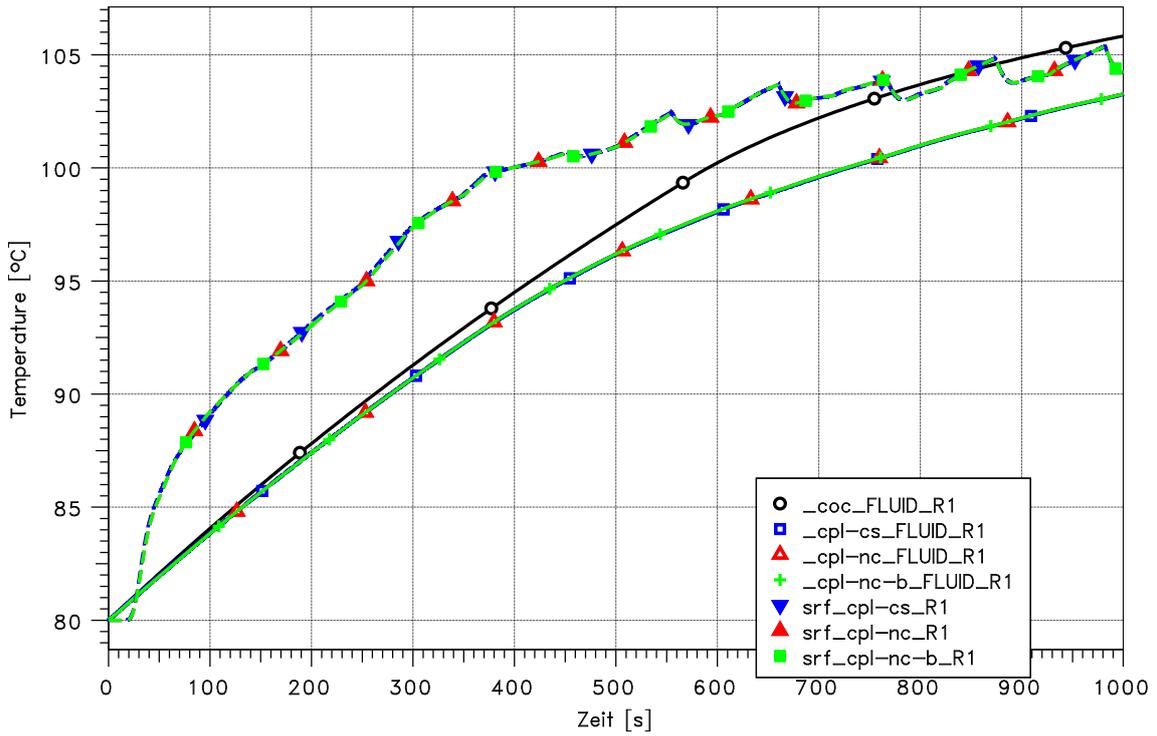


Abb. 3.56 CoPool, Test 17: Vergleich der mittleren Pooltemperatur und Pooloberflächentemperatur

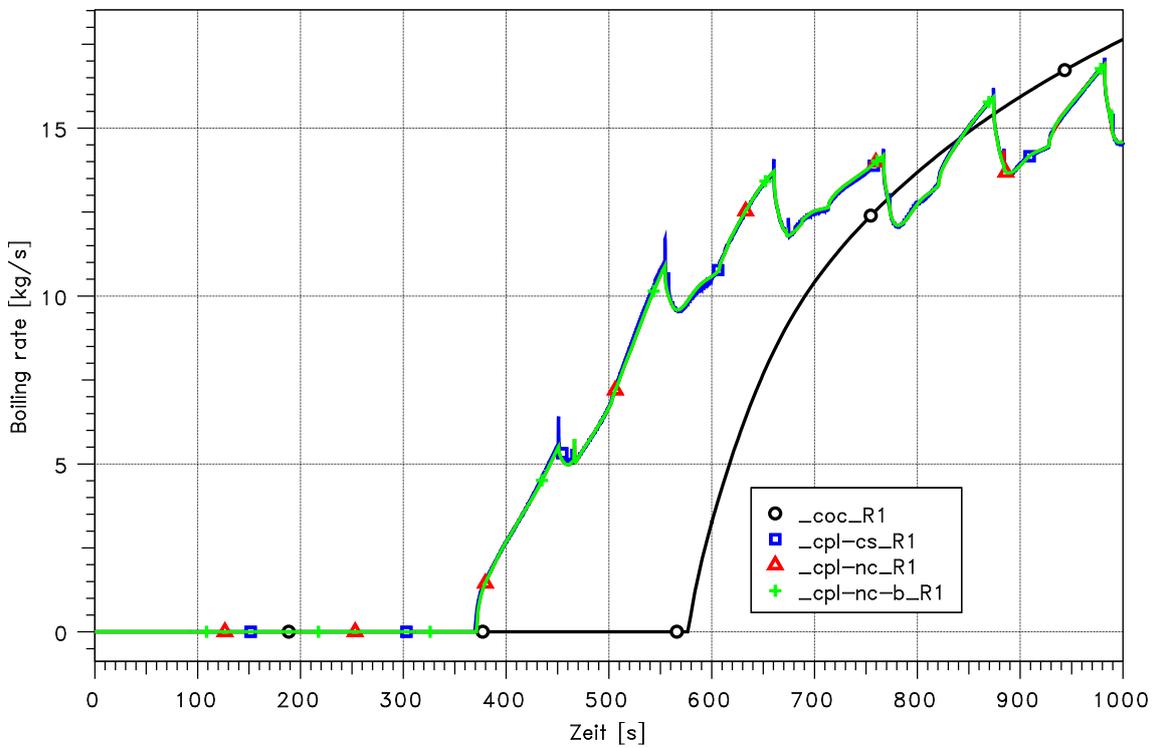


Abb. 3.57 CoPool, Test 17: Vergleich der Siederate im Pool

3.2.3.6 Überprüfung der COCSYS/CoPool-Kopplung anhand von Testrechnungen in der THAI-Geometrie

Im Rahmen des CoPool-Vorhabens wurden Validierungsrechnungen anhand des THAI-Versuchs TH-27 seitens Becker Technologies durchgeführt. In diesen Rechnungen sind noch verschiedene Probleme bei der Kopplung zwischen CoPool und COCOSYS aufgetreten. Ebenso soll anhand von Testrechnungen die Energiebilanz in CoPool sowie die Auswahl des Lösungsschemas überprüft werden. Durch eine schrittweise Vorgehensweise werden die einzelnen bei der THAI-Rechnung relevanten Prozesse überprüft. In den folgenden Testrechnungen wird nur der Sumpf im PAD-Behälter betrachtet.

Fall A: Wärmeeinspeisung in den PAD-Wasserpool

Der PAD-Sumpf ist mit ca. 260 kg Wasser gefüllt, mit einer Starttemperatur von 20 °C. In den Sumpf wird ein konstanter Wärmestrom von 10 kW zugeführt. In CoPool erfolgt die Wärmezufuhr als „Punktquelle“ mit den Koordinaten (-2,2197 -0,3424 -0,4). An der Sumpfoberfläche wurde die Wechselwirkung mit der Atmosphäre ausgeschaltet. Ebenso sind die Wände isoliert, so dass auch hier praktisch kein Wärmeaustausch stattfindet. Insgesamt wurden vier Rechnungen durchgeführt:

- Eine COCOSYS-Rechnung, stand-alone (,coc', schwarz)
- Eine gekoppelte Rechnung mit konservativem Lösungsschema (,cpl-con', rot)
- Eine gekoppelte Rechnung mit gemischtem Lösungsschema und einer maximalen Zeitschrittweite von 0,5 s (,cpl-nco', grün)
- Eine gekoppelte Rechnung mit gemischtem Lösungsschema und einer maximalen Zeitschrittweite von 1,0 s (,cpl-nco-1s', blau)

Verglichen werden die mittlere Temperatur im Sumpf sowie die Energiebilanz des Sumpfes (Abb. 3.58, Abb. 3.59). Ein Vergleich der mittleren Sumpftemperatur zeigt, dass die gekoppelte Rechnung mit Verwendung des konservativen Lösungsschemas die gleiche mittlere Sumpftemperatur wie die Stand-alone-Rechnung berechnet. Dagegen sind die Ergebnisse der gekoppelten Rechnungen mit Verwendung des gemischten Lösungsschemas (grüne und blaue Kurven) etwas niedriger, wobei hier die vorgegebene maximale Zeitschrittweite einen Einfluss hat.

Dieses Verhalten zeigt sich auch bei der Betrachtung der inneren Energien. Verglichen wird hier die eingespeiste Energie (inklusive der Wärmeströme am Rand des Sumpfes)

sowie die innere Energie des Sumpfes. Hier zeigt sich, dass die Energiebilanz bei Verwendung des gemischten Lösungsschemas, also des nicht-konservativen Schemas für die beiden oberen Gitterzellen und des konservativen Schemas für alle anderen Gitterzellen, Abweichungen zeigt, die dann zu etwas niedrigeren Temperaturen führen.

Die Abb. 3.60 zeigt eine 3D-Ansicht der Temperaturverteilung im Sumpf. Das erhitzte Wasser am Einspeisepunkt steigt auf und führt zu einer Temperaturschichtung im Sumpf.

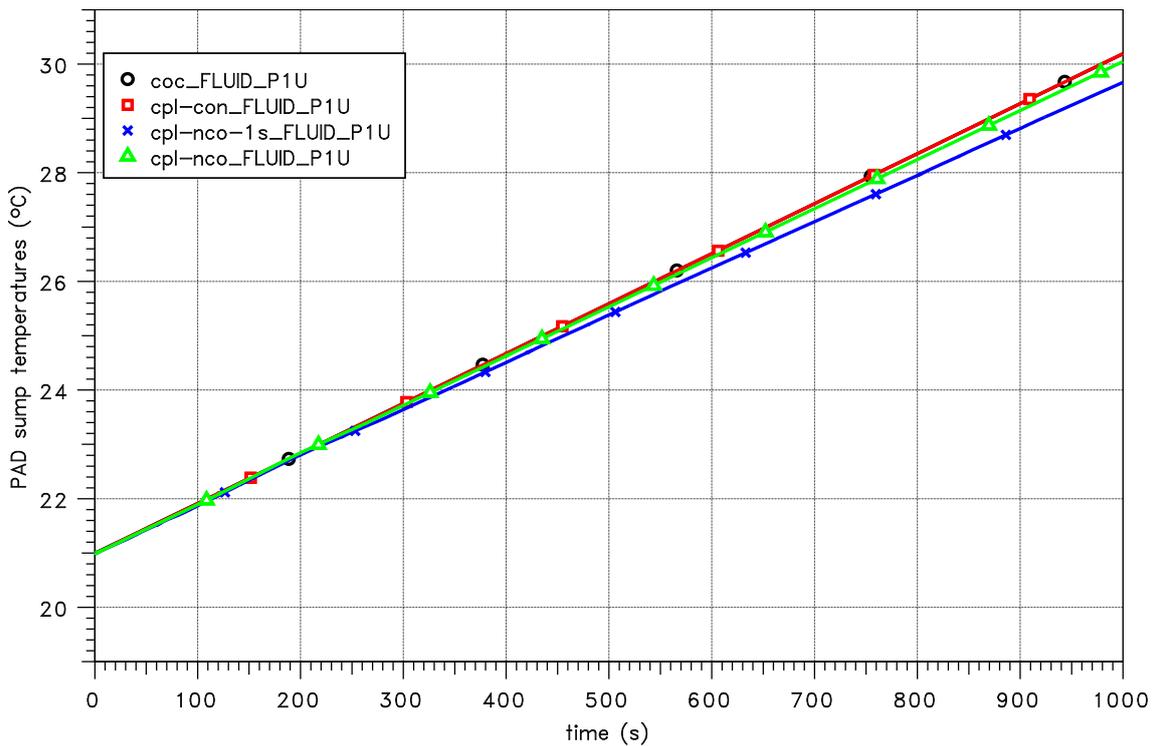


Abb. 3.58 CoPool, THAI, Testfall A: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur

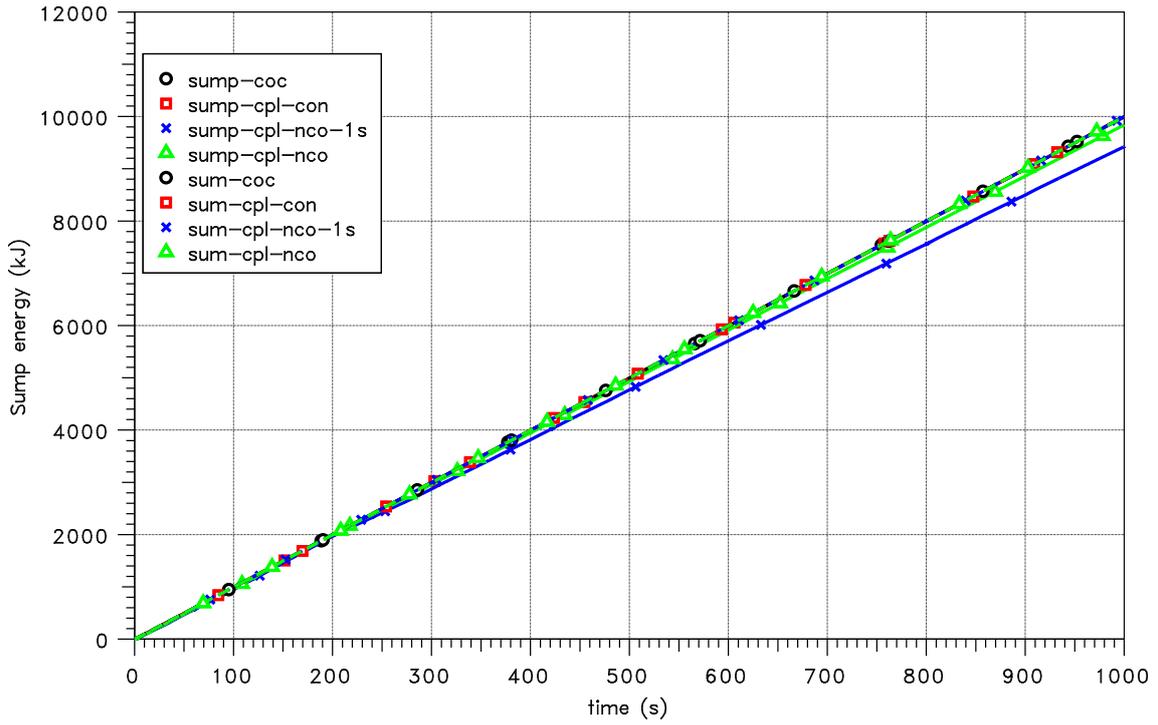


Abb. 3.59 CoPool, THAI, Testfall A: Vergleich der inneren Energien

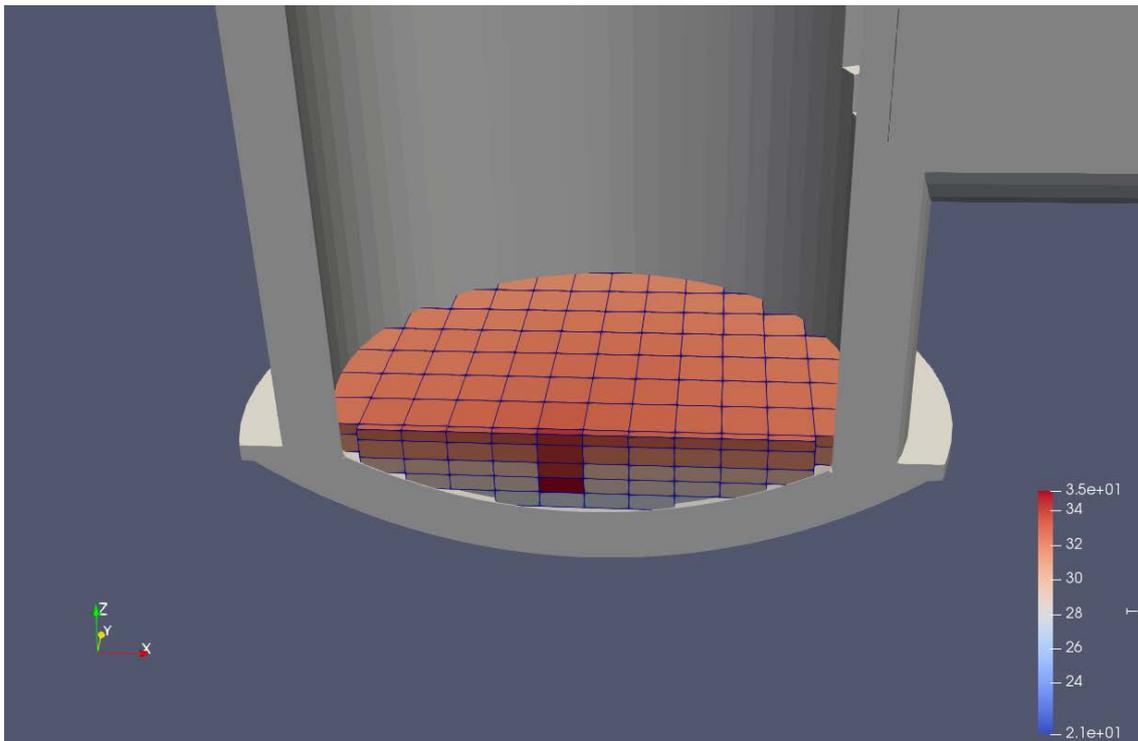


Abb. 3.60 CoPool, THAI, Testfall A: Temperaturverteilung im Sumpf bei 1000 s

Fall B: Definierte Wärmeeinspeisung an der Sumpfoberfläche

Im THAI-Experiment TH-27 wird die Gasphase aufgeheizt, so dass Wärme über die Sumpfoberfläche eingebracht wird. Um die Schnittstelle und um insbesondere das Verhalten von CoPool zu testen, wurde die Schnittstelle modifiziert, so dass ein konstanter Wärmestrom von 10 kW eingebracht wird. Wie beim Fall A wird wieder die COCOSYS-Simulation (stand-alone) mit den gekoppelten Rechnungen und Verwendung der beiden Lösungsschemata verglichen (Abb. 3.61, Abb. 3.62). Die Ergebnisse sind sehr ähnlich zum Fall A. Auch hier sind die berechneten mittleren Sumpftemperaturen mit Verwendung des gemischten Lösungsschemas etwas niedriger. Mit der konservativen Lösungsmethode in CoPool stimmen die Ergebnisse mit denen der Stand-alone-Rechnung überein. Die gemischte Lösungsmethode hat insbesondere einen Einfluss auf die Strömungen an der Sumpfoberfläche. Somit können aber auch größere Zeitschritte verwendet werden. Insgesamt sind die Strömungsgeschwindigkeiten bei dieser Lösungsmethode niedriger. Ein Vergleich der Geschwindigkeiten ist in Abb. 3.63, wobei auf der linken Seite die Geschwindigkeiten der konservativen Methode und auf der rechten Seite die der gemischten Methode gezeigt werden.

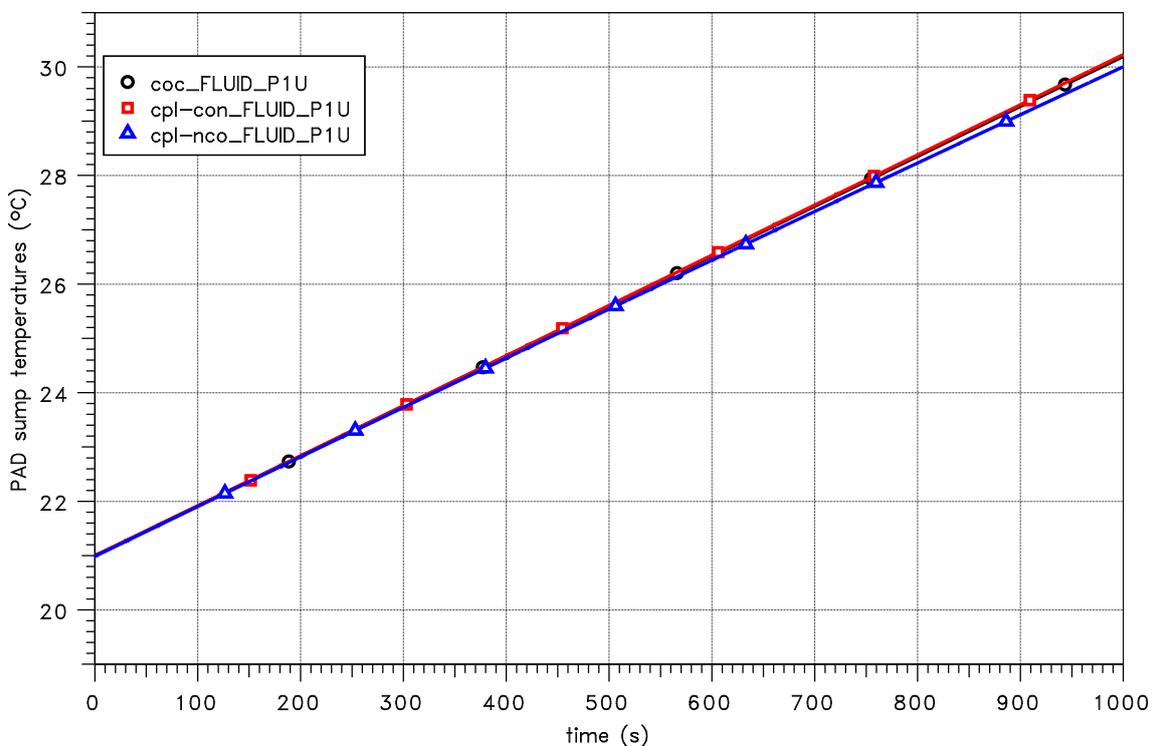


Abb. 3.61 CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur

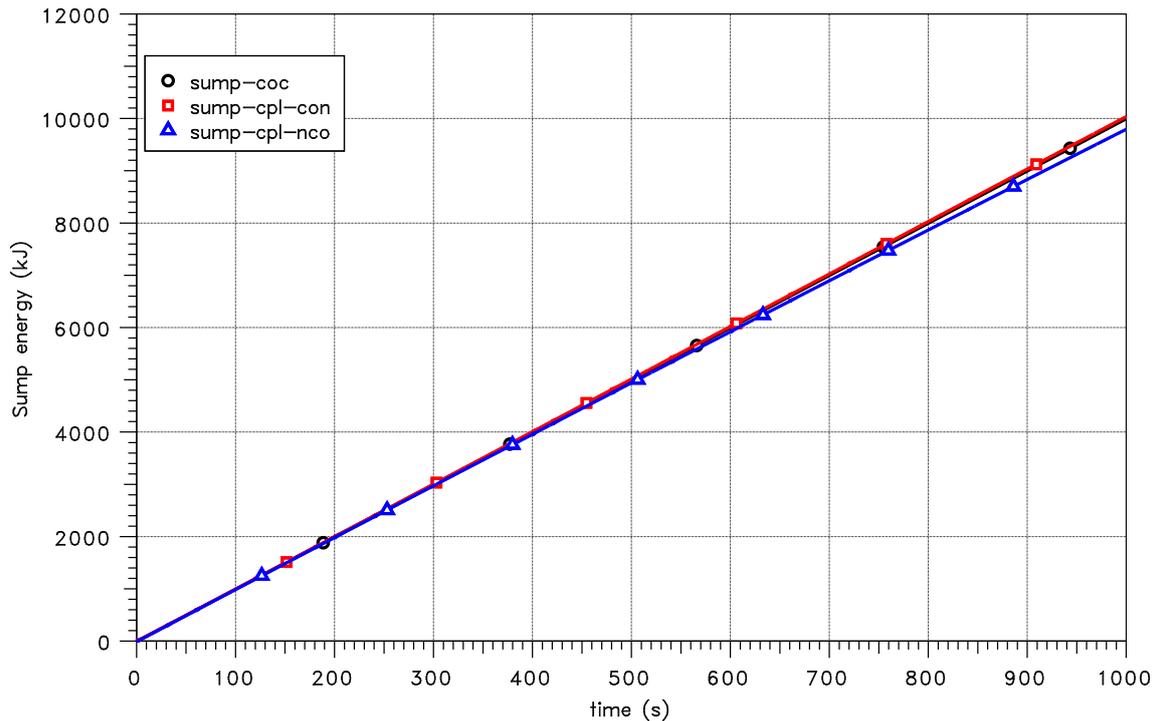


Abb. 3.62 CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der inneren Energien

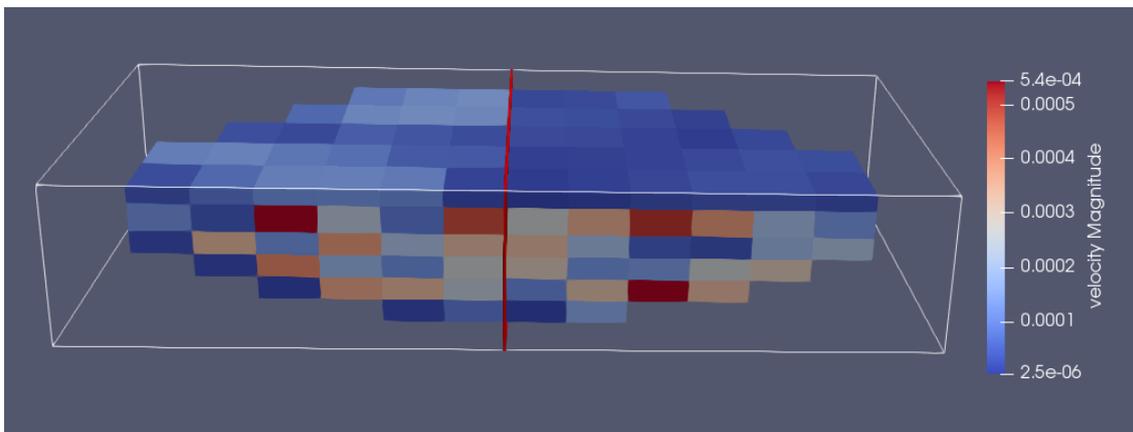


Abb. 3.63 CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten bei 300 s (links: konservative Methode, rechts: gemischte Methode)

Fall C: Definierte Wärmeeinspeisung an der Sumpfoberfläche + Wassereinspeisung im Sumpf

Dieser Testfall basiert auf dem Fall B. Zusätzlich wird Wasser mit einer Temperatur von 21 °C (entspricht der Starttemperatur) und einer Rate von 0,15 kg/s eingespeist. Durch die Einspeisung werden die Gitterzellen nach und nach aufgefüllt. Ziel ist, das Verhalten von CoPool an der Sumpfoberfläche unter diesen Randbedingungen zu überprüfen. Die Problemzeit wurde von 1000 s auf 3000 s erhöht. Wieder wird die Abhängigkeit vom Lösungsschema und der Zeitschrittweite untersucht.

Die Ergebnisse werden in Abb. 3.64 und Abb. 3.65 dargestellt. Wie in den anderen Fällen stimmen die Rechenergebnisse der gekoppelten Rechnung mit Verwendung des konservativen Lösungsschemas mit denen der COCOSYS-Rechnung (stand-alone) überein. Bei Verwendung des gemischten Schemas werden höhere Temperaturen berechnet. Bei einer Zeitschrittweite von 1 s beträgt die Abweichung am Ende der Rechnung ca. 1 K. Beim Übergang zu den nächst höheren Gitterzellen erhöht sich der Fehler stufenweise. Dieses Verhalten ist bei der höheren Zeitschrittweite etwas ausgeprägter. Interessant ist, dass in diesem Fall die Temperaturen im Gegensatz zu den obigen Fällen überschätzt werden. Ebenso stimmen die Ergebnisse bis 500 s (vor dem ersten Gitterwechsel) überein. Möglicherweise wird durch die Einspeisung generierter Strömung die Lösung auch für das gemischte Schema besser. Hinsichtlich der inneren Energie werden entsprechende Abweichungen beobachtet.

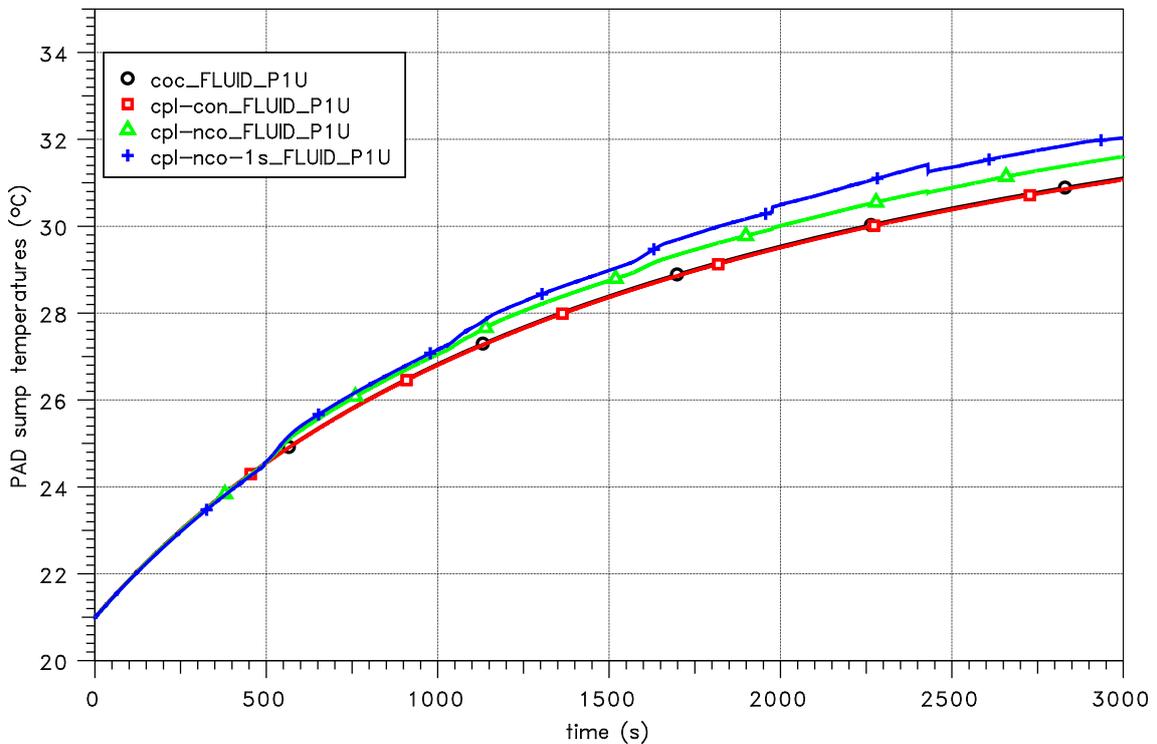


Abb. 3.64 CoPool, THAI, Testfall C: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur

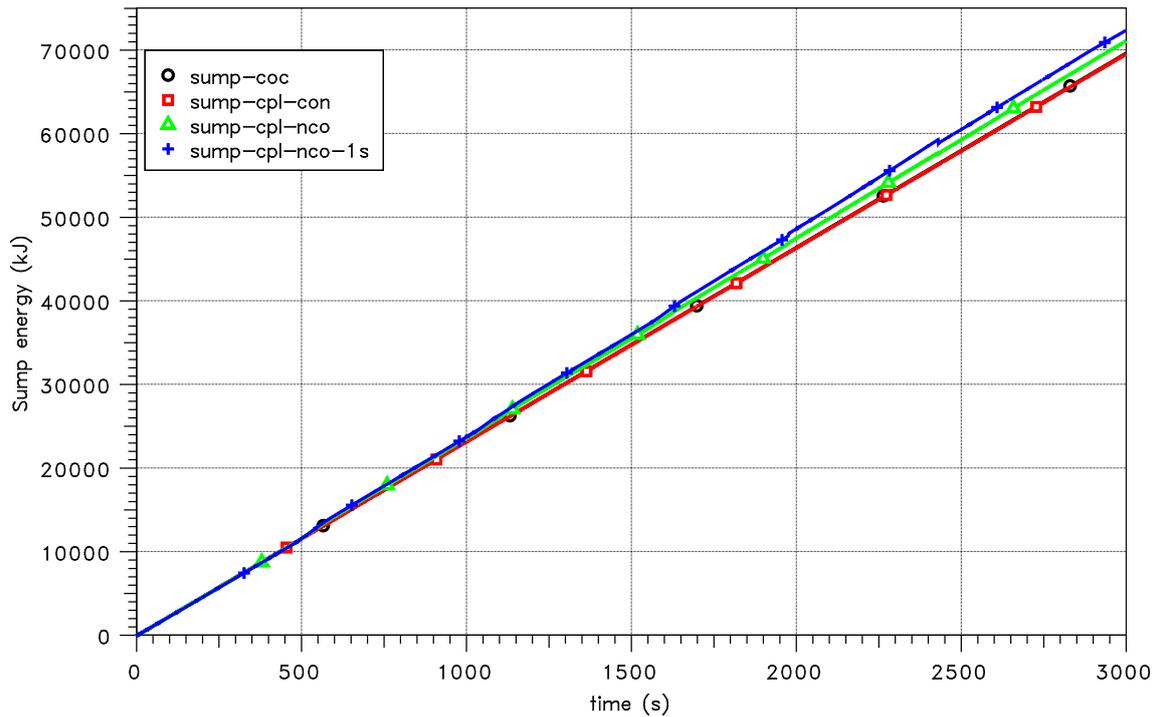


Abb. 3.65 CoPool, THAI, Testfall C: Vergleich der inneren Energien

Fall D: Definierte Wärmeeinspeisung an der Sumpfoberfläche und Auffüllen des Sumpfes durch Drainage entlang der Wand

Dieser Fall basiert auf dem Fall C. Die Wassereinspeisung erfolgt nun allerdings entlang der Wandoberfläche oberhalb des Sumpfes. Diese Quelle wird als Linienquelle in CoPool dargestellt. Die Einspeisetemperatur des Wassers beträgt 80 °C. Für die Wand werden nun die realistischen Stoffwerte der THAI-Anlage verwendet. (*Anmerkung:* Die Verwendung von sehr niedrigen Wärmeleitkoeffizienten und niedrigen Wärmekapazitäten führte zu Instabilitäten). Der Wasserfilm wird in CoPool nicht simuliert, sondern es werden die entsprechenden Wärmestromraten in die Wand von COCOSYS nach CoPool übertragen. Es ist aber wesentlich, dass CoPool die Filmtemperatur als Bulktemperatur verwendet. Diesbezüglich wurde CoPool korrigiert.

Die Abb. 3.66 zeigt den Vergleich der mittleren Sumpftemperatur. Die Verwendung des gemischten Lösungsschemas führt zu höheren Sumpftemperaturen. Der Temperaturunterschied beträgt nach 1000 s bereits ca. 2,5 K. Mit Verwendung des konservativen Schemas sind die Unterschiede deutlich geringer.

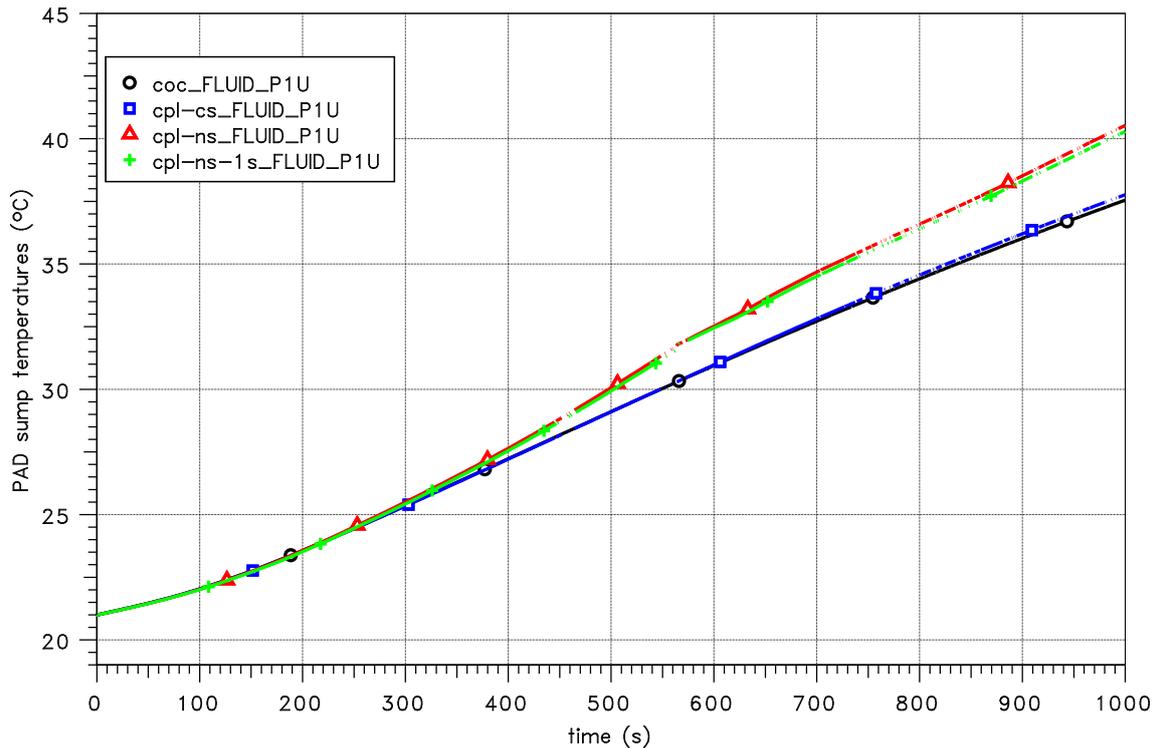


Abb. 3.66 CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur

Wie beim Test 01 (Kap. 3.2.3.5) sind die berechneten mittleren Wandoberflächentemperaturen in CoPool etwas niedriger. Allerdings sind die Unterschiede mit ca. 0,6 K deutlich höher. Zu beachten ist aber, dass 3D-Effekte in der Wärmeleitung (z. B. Wärmeleitung in den oberen Wandbereich) mit COCOSYS nur sehr eingeschränkt simuliert werden können. Ebenso ist der Wärmeeintrag in diesem Beispiel im Vergleich zum Test 01 viel höher. Auffällig ist, dass obwohl die Filmtemperatur in der gekoppelten Rechnung eher niedriger im Vergleich zur Stand-alone-Rechnung ist, die Sumpftemperatur in der gekoppelten Rechnung etwas höher ist. Eine mögliche Ursache ist die Temperaturschichtung im Sumpf, welche in der Stand-alone-Rechnung nicht simuliert werden kann.

Durch die etwas niedrigere Wandoberflächentemperatur in der gekoppelten Rechnung ist der Wärmestrom in die Wand etwas höher (Abb. 3.69).

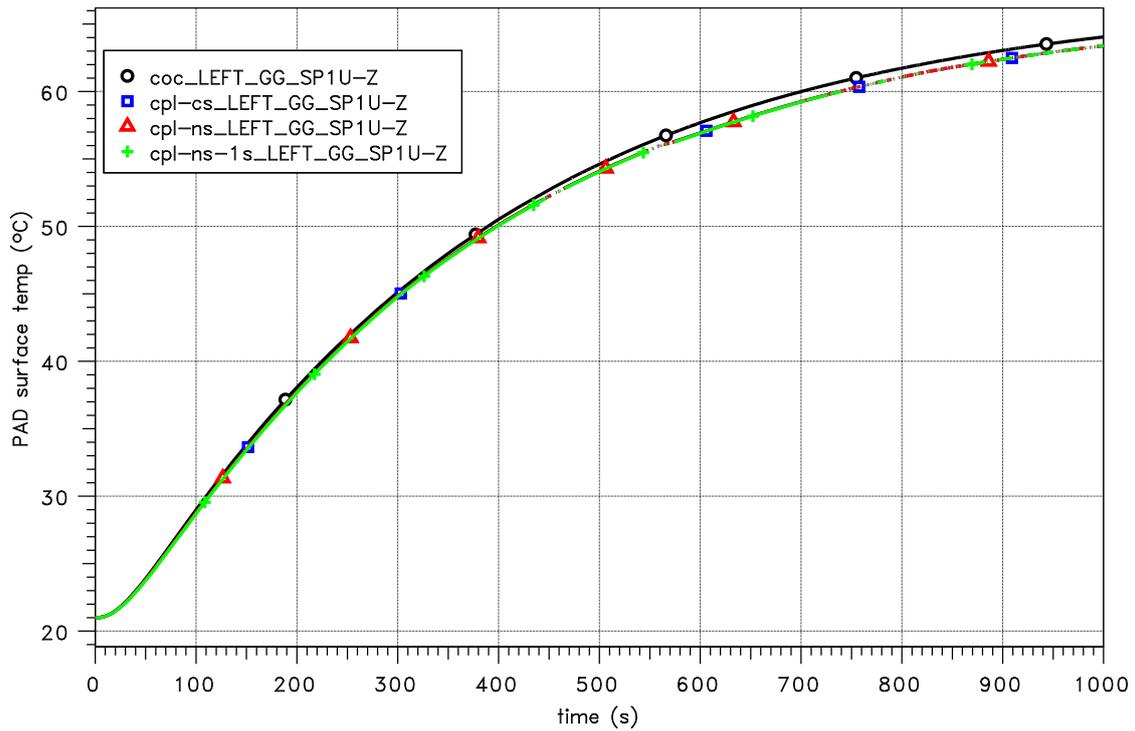


Abb. 3.67 CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der mittleren Wandoberflächentemperatur (oberhalb des Sumpfes)

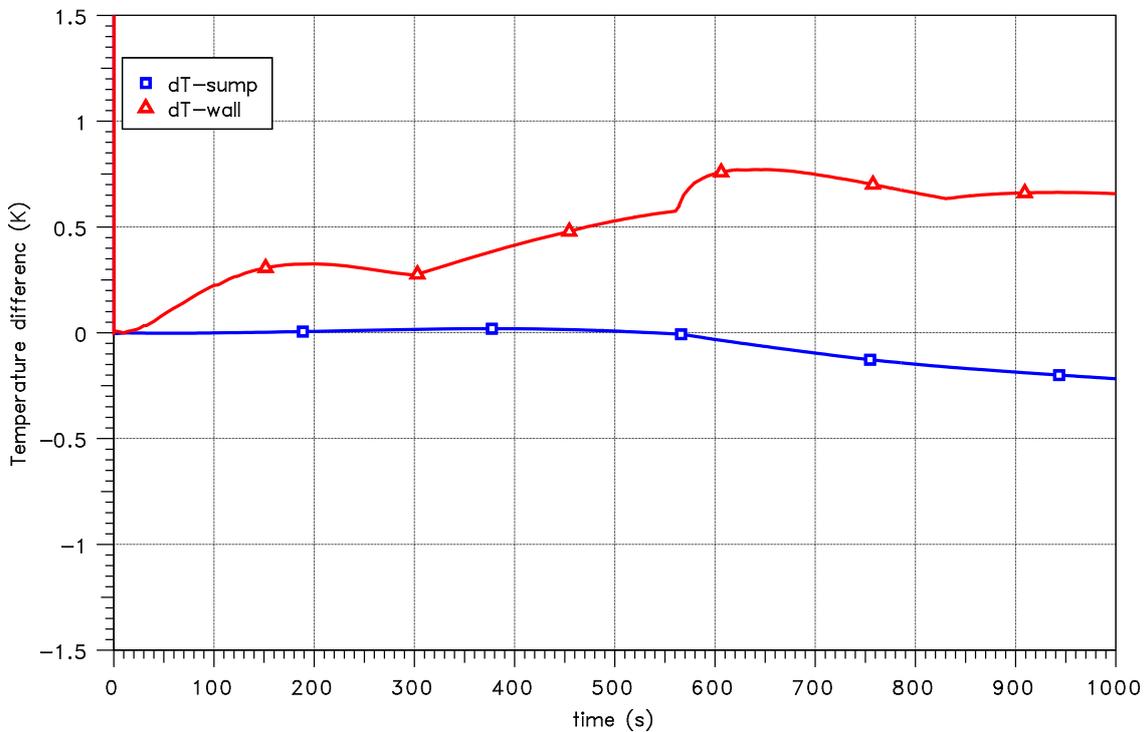


Abb. 3.68 CoPool, THAI, Testfall D: Temperaturdifferenz $T_{coc} - T_{cpl}$ zwischen stand-alone und gekoppelt mit konservativem Lösungsschema

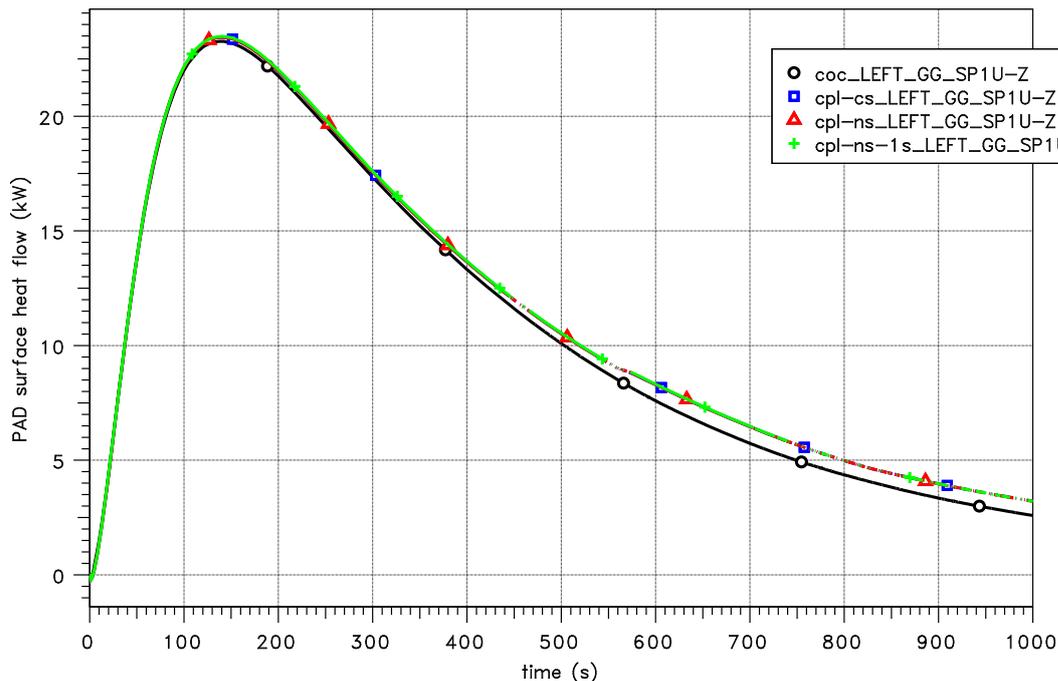


Abb. 3.69 CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich des Wärmestroms in die Wand (oberhalb des Sumpfes)

Komplizierter ist der Vergleich der mittleren Wärmeströme in die Wände im Sumpfbereich, welcher sich in den zylindrischen Teil und den Sumpfboden aufteilt. Die Trennlinie ist in Abb. 3.70 durch eine weiße Linie markiert. In dieser Abbildung ist auch die Temperaturverteilung bei 1000 s dargestellt. Die Temperaturschichtung in der gekoppelten Rechnung hat einen erheblichen Einfluss auf die resultierenden Wärmeströme in diesen Wandbereich. Die Abb. 3.71 zeigt den Vergleich der Wärmeströme für den oberen zylindrischen Teil. Dieser ist in der gekoppelten Rechnung deutlich höher, bricht aber bei der Aktivierung der nächsthöheren Gitterzellen ein. Eine mögliche Ursache ist die Umschaltung der Zuordnung von ‚heißen‘ Wandoberflächenzellen von der atmosphärischen Randbedingung zu einer Fluidzelle. In der Stand-alone-Rechnung wird zu Beginn Wärme in die kalte Wand eingetragen. Beim Anstieg des Wasserspiegels kommt der Sumpf mehr und mehr in Kontakt mit der durch den Film aufgewärmten Wand, so dass der Wärmestrom sich umkehrt.

Durch die Temperaturschichtung ist der Wärmeeintrag in den Sumpfboden in der gekoppelten Rechnung niedriger (Abb. 3.72). Der Vergleich zeigt eine deutliche Abhängigkeit des Lösungsschemas, wobei der Einfluss der Zeitschrittweite beim gemischten Schema eher gering ist.

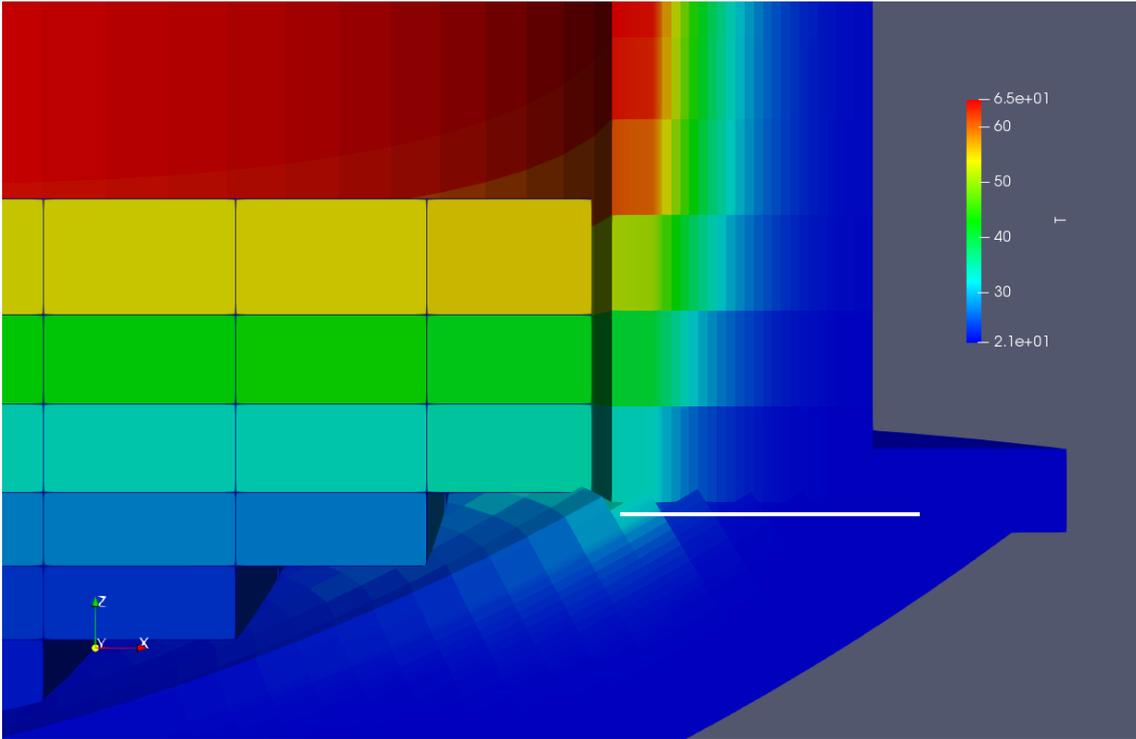


Abb. 3.70 CoPool, THAI, Testfall D: Temperaturverteilung im Fluid und den Wänden bei 1000 s

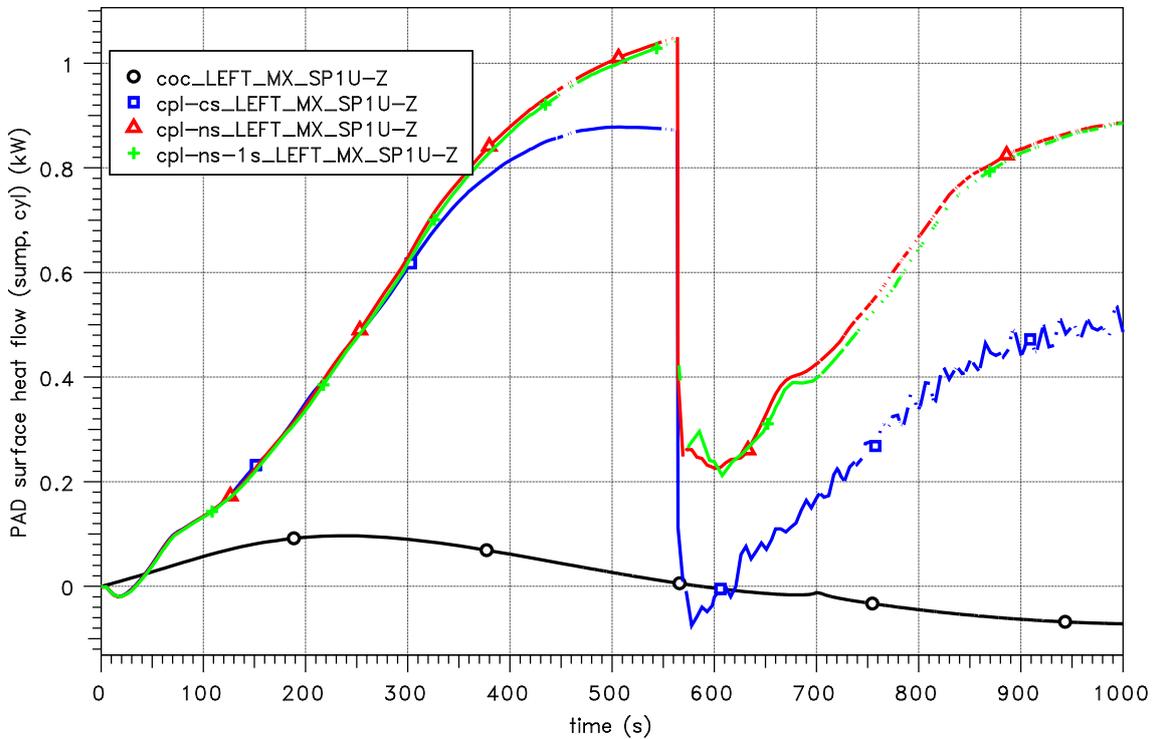


Abb. 3.71 CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der Wärmeströme an den Wänden im Sumpfbereich (oberer zylindrischer Bereich)

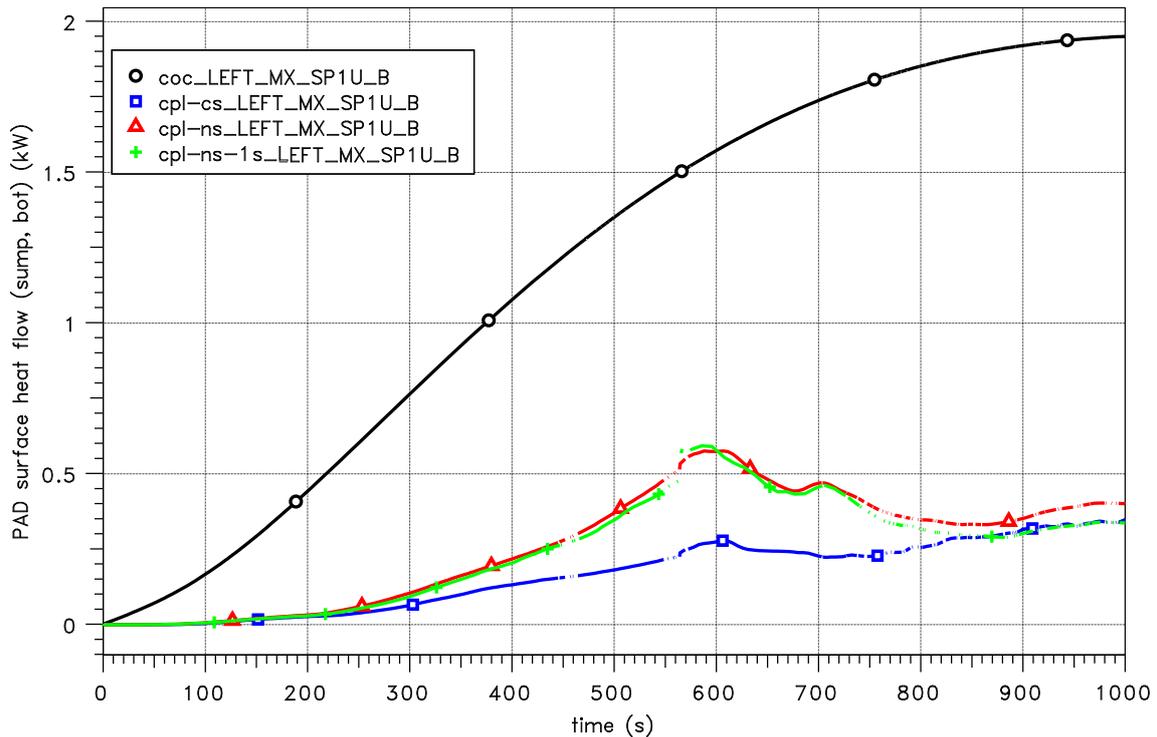


Abb. 3.72 CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der Wärmeströme an den Wänden im Sumpfbereich (schalenförmiger Boden)

Fall E: Einspeisung trockener Wärme oberhalb der Sumpfoberfläche und Aufheizung des Sumpfes über die Wärmeleitung der Stahlwand

In diesem Testfall wird trockene Wärme in Atmosphäre oberhalb der Sumpfoberfläche eingespeist. Die Sumpfoberfläche wird als adiabat betrachtet, so dass kein Wärme- und Stoffaustausch an dieser Oberfläche stattfindet. Durch die Wärmeeinspeisung mit einer anfänglichen Rate von 30 kW und ab 1000 s einer langsamen Absenkung der Rate auf 10 kW werden die Atmosphäre und die anliegenden Wandoberflächen in dem THAI-Volumen aufgeheizt. Durch Wärmeleitung entlang der Stahloberfläche wird auch das Wasservolumen im PAD-Sumpf aufgeheizt und es bildet sich eine Temperaturschichtung aus. Die Temperaturverteilung nach 20000 s wird in Abb. 3.73 dargestellt.

Der Wasserstand wurde so eingestellt, dass sich die Sumpfoberfläche auf Höhe der Oberkante des sphärischen Bodens befindet. Auch im COCOSYS-Datensatz (stand-alone) befindet sich auf dieser Höhe die Grenze der Strukturen SP1U-Z für den zylindrischen Teil und SP1U_B für den Sumpfboden (sphärischer Teil). Die Wärmeleitung entlang der Wand wird durch eine sogenannte STRU_JUNC Verbindung modelliert. Normalerweise würde man die Verbindungslänge von der Mitte der einen Wand zur Mitte der anderen Wand vorgeben (ca. 70 cm). Dies führt allerdings im Vergleich zur

gekoppelten Rechnung zu deutlich niedrigeren Sumpftemperaturen, da sich zunächst der gesamte Sumpfboden aufheizen muss, um Wärme in das Wasservolumen abzugeben. Daher wurde diese Verbindungslänge so angepasst, dass die resultierenden mittleren Sumpftemperaturen in beiden Rechnungen relativ gut übereinstimmen. Die resultierende Länge beträgt 4,3 cm.

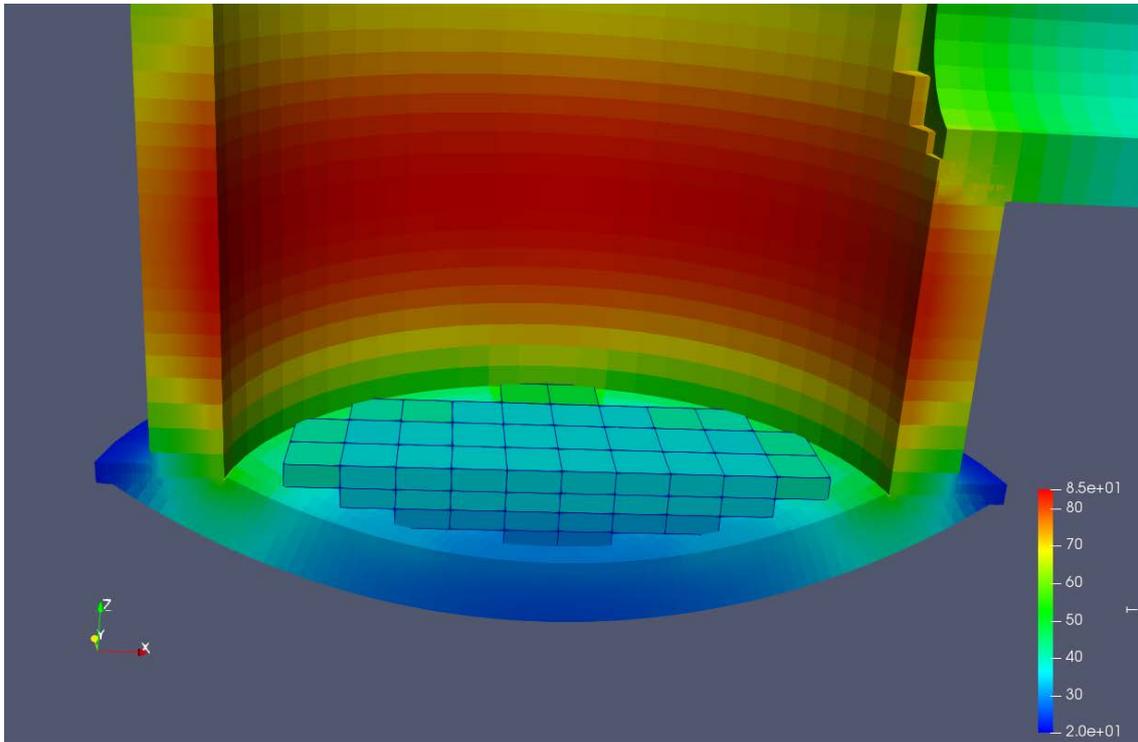


Abb. 3.73 CoPool, THAI, Testfall E: Temperaturverteilung im PAD nach 20000 s

Da die Wechselwirkungen im Wesentlichen nur an der Sumpfoberfläche stattfinden, hat das Lösungsschema in CoPool einen Einfluss auf die Ergebnisse. Daher wurden insgesamt drei Rechnungen durchgeführt: eine COCOSYS-Rechnung, stand-alone (schwarze Kurven, ‚coc‘), eine gekoppelte Rechnung mit konservativem Lösungsschema (blaue Kurven, ‚cpl-cs‘) und eine gekoppelte Rechnung mit gemischtem Lösungsschema und doppelter Zeitschrittweite von 1 s (grüne Kurven, ‚cpl-ns-1s‘).

Die berechneten Gastemperaturen oberhalb des Sumpfes stimmen praktisch überein (Abb. 3.74). Hinsichtlich der mittleren Wandoberflächentemperatur im zylindrischen Teil oberhalb des Sumpfes stimmen die Resultate der gekoppelten Rechnungen überein. Sie liegen etwas höher als die COCOSYS-Rechnung (stand-alone). Die Gründe hierzu können sehr vielfältig sein, da z. B. die Modellierung der Wärmeleitung in beiden Fällen unterschiedlich ist.

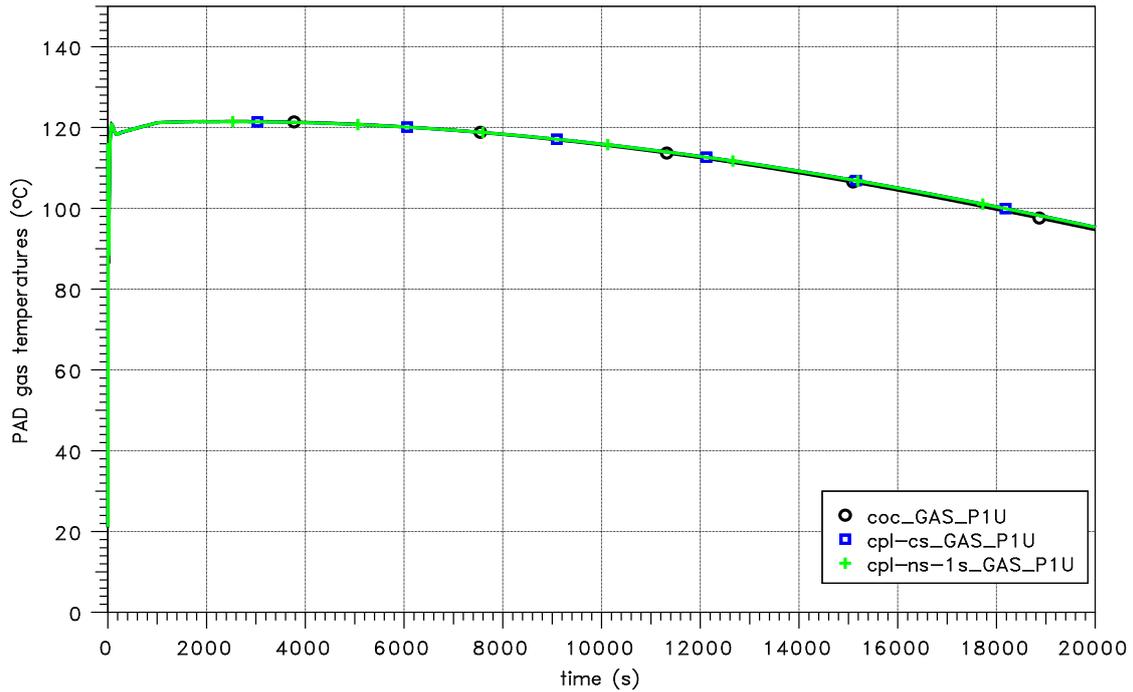


Abb. 3.74 CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der Gastemperatur oberhalb des Sumpfes

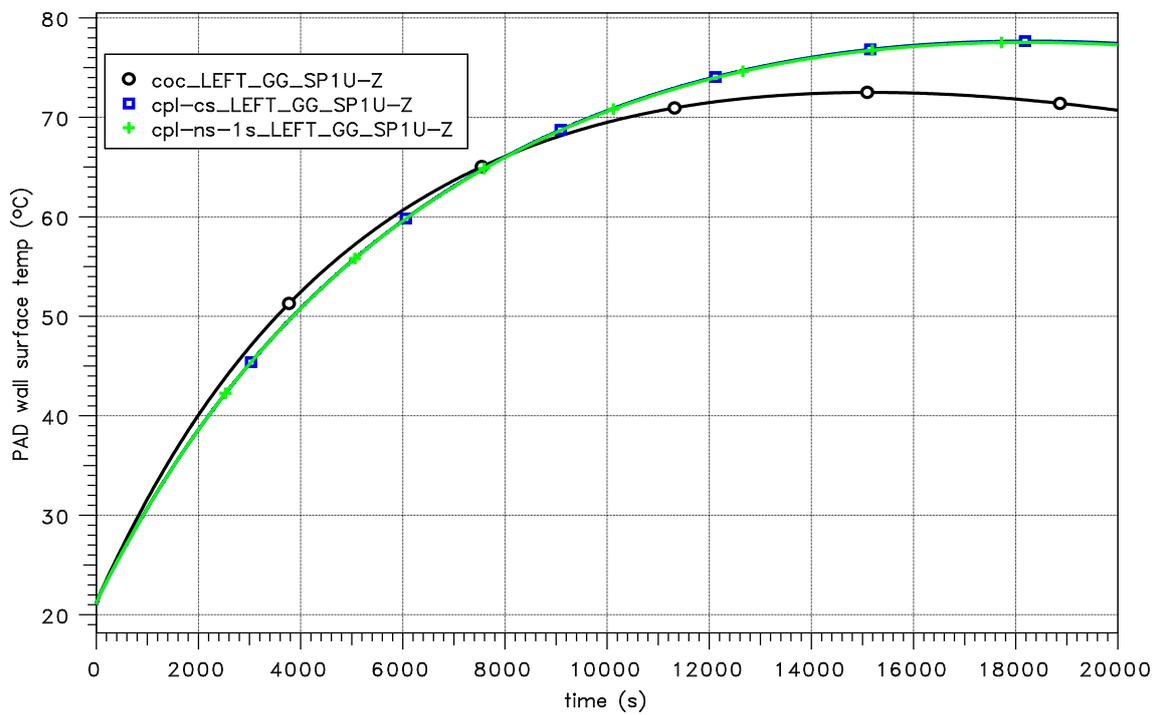


Abb. 3.75 CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der mittleren Wandoberflächentemperatur oberhalb des Sumpfes

Es ist daher im Grunde auch nicht zu erwarten, dass die Ergebnisse zwischen stand-alone und gekoppelt auch in Bezug auf die Sumpftemperatur gleich sind. Durch die

Anpassung der Verbindungslänge, stimmt der Verlauf weitgehend überein (Abb. 3.76). Hier zeigen sich allerdings auch Unterschiede zwischen den verwendeten Lösungsschemata. So wird die mittlere Sumpftemperatur bei Verwendung des gemischten Schemas unterschätzt.

Dies zeigt sich auch in der Energiebilanz (Abb. 3.77) zwischen 6000 s und 8000 s. Der ab ca. 8000 s zu beobachtende Fehler in der Energiebilanz ist auf Inkonsistenzen der Wandtemperaturen in COCOSYS und CoPool zurückzuführen. Die Wärmeabgabe über die Isolierung in die Umgebung basiert auf gemittelten Wandoberflächentemperaturen, welche in CoPool berechnet werden und 3D-Wärmeleitungseffekte berücksichtigen. COCOSYS selbst berechnet ebenfalls die Wärmeleitung in den Wandstrukturen. Aufgrund der unterschiedlichen Modellierung können die Temperaturen in einzelnen Wand-schichten negativ werden. Diese werden auf positive Werte korrigiert, was dann in der Folge zu positiven Werten in dem Fehler der Energiebilanz (auf Basis der Wandtempe-raturen in COCOSYS) führt.

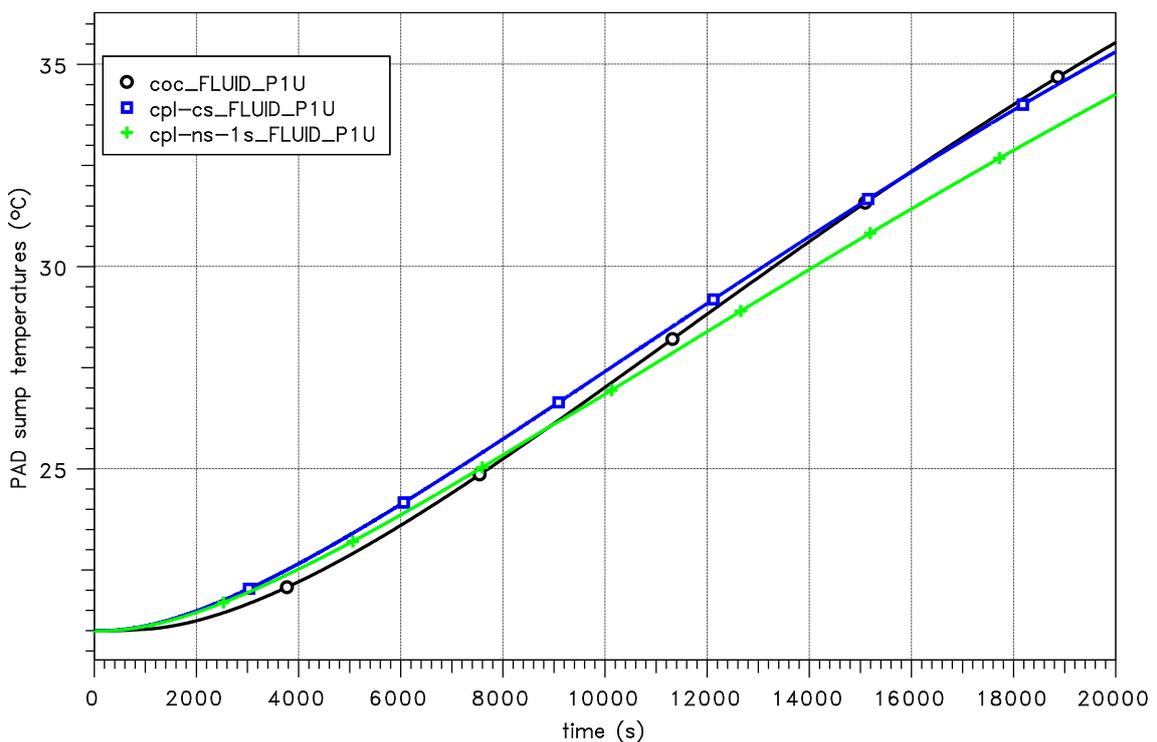


Abb. 3.76 CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur

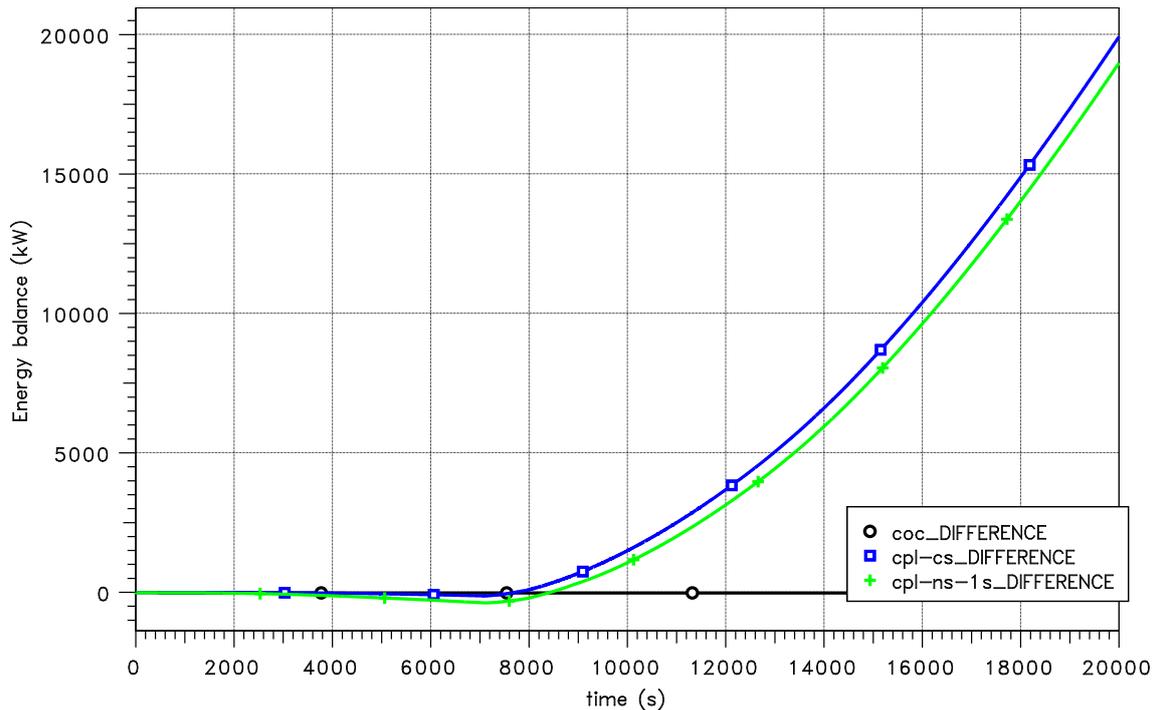


Abb. 3.77 CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der Energiebilanz

3.2.4 COCOSYS/CoPool Rechnungen für THAI TH-27

Die Validierung des gekoppelten Programmsystems erfolgte dann unter anderem anhand des THAI-Versuchs TH-27. Der Versuch TH-27 zeichnet sich durch eine langzeitige Temperaturschichtung in beiden Sümpfen, nur geringen Massenströmen sowie Wärmeleitung entlang der Stahlschale aus. Ein wesentliches Ziel der Arbeiten war es zu zeigen, dass grundsätzlich langanhaltende Temperaturschichtungen mit CoPool berechnet werden können.

3.2.4.1 CoPool-Datensatz

Im ersten Schritt wurde, der von Becker Technologies übergebene Datensatz entsprechend der tatsächlichen Geometrien und Randbedingungen verbessert, um mögliche fehlerhafte Einflüsse auf die Temperaturschichtung auszuschließen.

Folgende Änderungen wurden durchgeführt

- Verwendung einer sphärischen Bodenstruktur und Anpassung des Fluidgitters an die Wandstruktur sowie nicht adiabater Randbedingungen zur Simulation der Wärmeverluste

- Anpassung einzelner Stoffwerte
- Verwendung der LVEL-Modelloption

Die Aktivierung der Kopplung zwischen CoPool und den COCOSYS-Zonen wurde verbessert. Ebenso war es notwendig, Zonenvolumina, Wasserstandtabellen und Wandoberflächen zwischen CoPool und COCOSYS genau abzustimmen. Für die Überströmung des Wassers vom TTV-Sumpf in den PAD-Sumpf werden nun die Ergebnisse von CoPool verwendet. Eine separate Pumpverbindung ist nicht mehr notwendig. Da die entsprechenden Unterräume in CoPool nicht aneinander liegen, musste das CoPool-Programm noch korrigiert werden. Die neue Option ‚UseExtended‘ für Linienquellen liefert eine gleichmäßige Verteilung des Kondensats an die Sumpfoberfläche. Die Untersuchung der Energiebilanzen im Sumpf zeigte, dass das ‚konservative‘ Lösungsschema mit entsprechend kleinen Zeitschritten von 0,25 s verwendet werden muss.

Zu Vergleichszwecken wurde zusätzlich mit dem gleichen COCOSYS-Datensatz eine Stand-alone-Rechnung mit dem identischen COCOSYS-Datensatz durchgeführt. Im Folgenden werden die Ergebnisse der gekoppelten Rechnung (‚cpl‘) blau, die der Stand-alone-Rechnung (‚coc‘) grün und die experimentellen Ergebnisse schwarz dargestellt.

Die Abb. 3.78 zeigt den Vergleich der erstellten Gitter. Im oberen Bild wird das Gitter, welches von Becker Technologies erstellt wurde, gezeigt. Unten links wird für den Boden zwar schon eine Sphäre verwendet, allerdings ist der Kontakt zwischen dem oberen Zylinder und der Sphäre nicht ausreichend, so dass keine Wärme nach unten geleitet wird. Ebenso war das Fluidgitter noch nicht optimal an den Wandstrukturen ausgerichtet, was zu asymmetrischen Fluidzellen führte. Unten rechts ist das endgültige Gitter dargestellt.

Die Abb. 3.79 zeigt den Vergleich hinsichtlich des Gesamtdrucks. Beide Rechnungen liefern praktisch die gleichen Ergebnisse. Zu beachten ist, dass ab ca. 20000 s und ab ca. 90000 s eine Drucksteuerung für die Dampfeinspeisung verwendet wird. Damit werden mögliche Unterschiede zwangsweise ausgeglichen. Nur unterschiedliche Einspeisungen von Dampf sind möglich, welche dann zu Abweichungen im Wasserstand führen können.

Der Vergleich der absoluten Wasserstände im PAD und TTV Sumpf wird in Abb. 3.80 gezeigt. Hier sind die Ergebnisse in beiden Rechnungen unterschiedlich. Im PAD wird in beiden Rechnungen der Wasserstand unterschätzt, im TTV eher überschätzt. Die Abb. 3.81 zeigt den Vergleich der Wassermassen in beiden Sümpfen. Bis 80000 s sind

die Ergebnisse in TTV gleich, im PAD ist die Wassermasse in der gekoppelten Rechnung etwas höher. Allerdings sind die Unterschiede auch in Bezug auf die gesamte Dampfeinspeisung relativ gering (Abb. 3.82). Mit Beginn der Überströmung des Wassers von TTV (Wasserstand = 0,4 m) zum PAD werden die Unterschiede zwischen beiden Rechnungen etwas größer. Zu beachten ist, dass in der gekoppelten Rechnung der Wasserstand in CoPool berechnet wird und hier eine konstante Dichte angenommen wird. Somit ist in beiden Rechnungen beim Wasserstand von 0,4 m im TTV eine unterschiedliche Wassermasse im TTV-Sumpf enthalten (siehe Abb. 3.81). Die Wassermasse im TTV ist in der gekoppelten Rechnung höher, und folglich strömt weniger Wasser in den PAD und der Wasserstand ist dort niedriger.

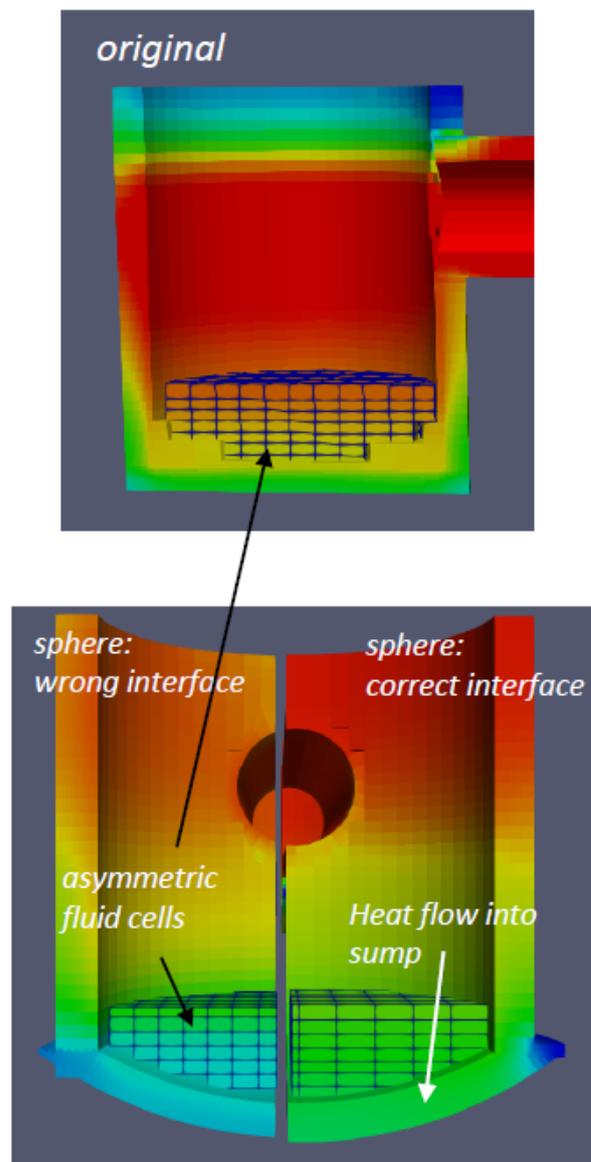


Abb. 3.78 CoPool, THAI TH-27: Gitteraufbau original (oben) und modifiziert (unten)

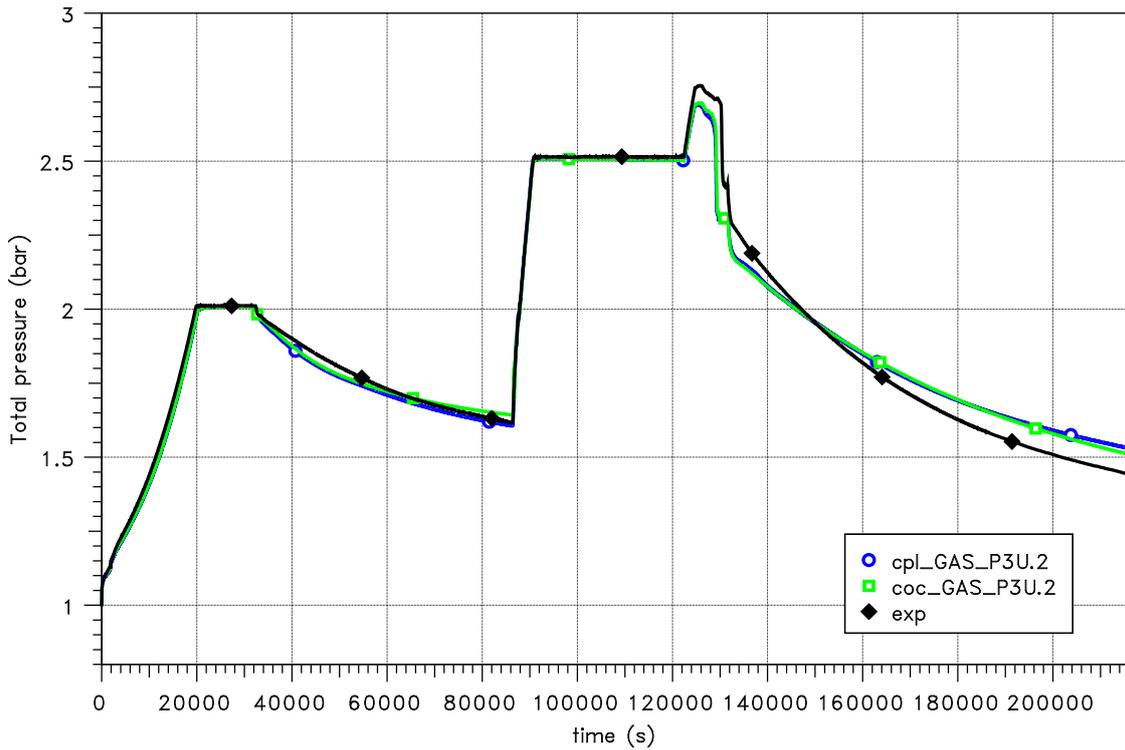


Abb. 3.79 CoPool, THAI TH-27: Vergleich des Gesamtdrucks

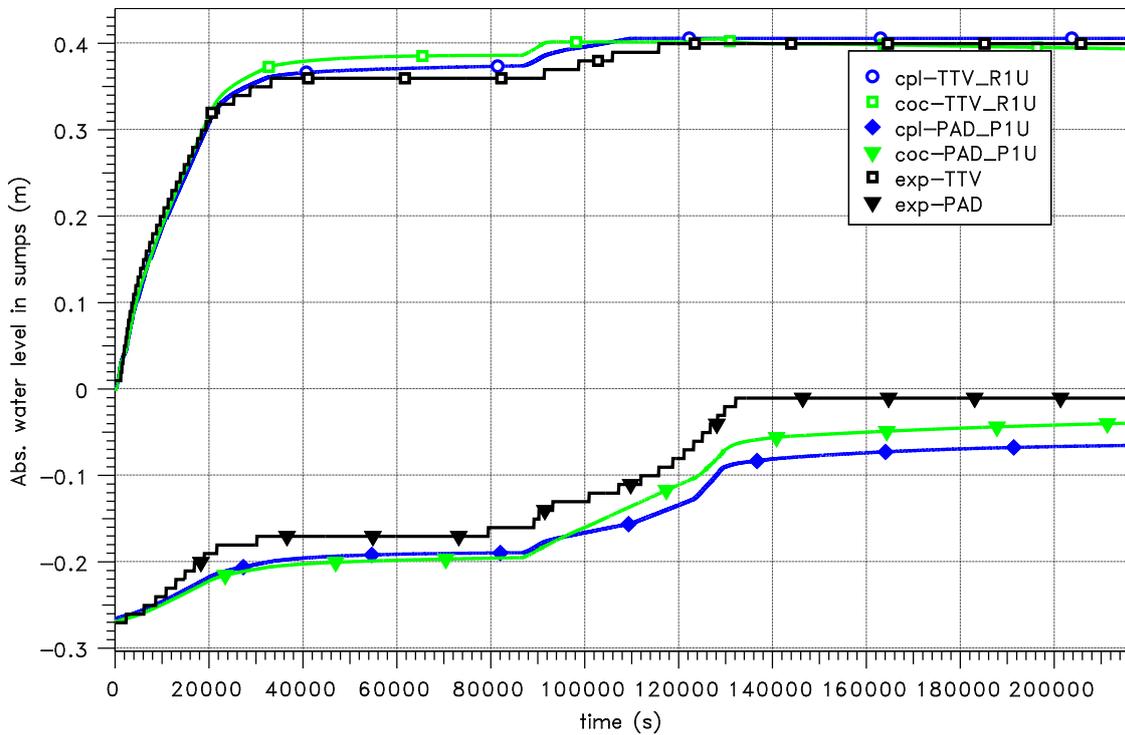


Abb. 3.80 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wasserstände im TTV und PAD

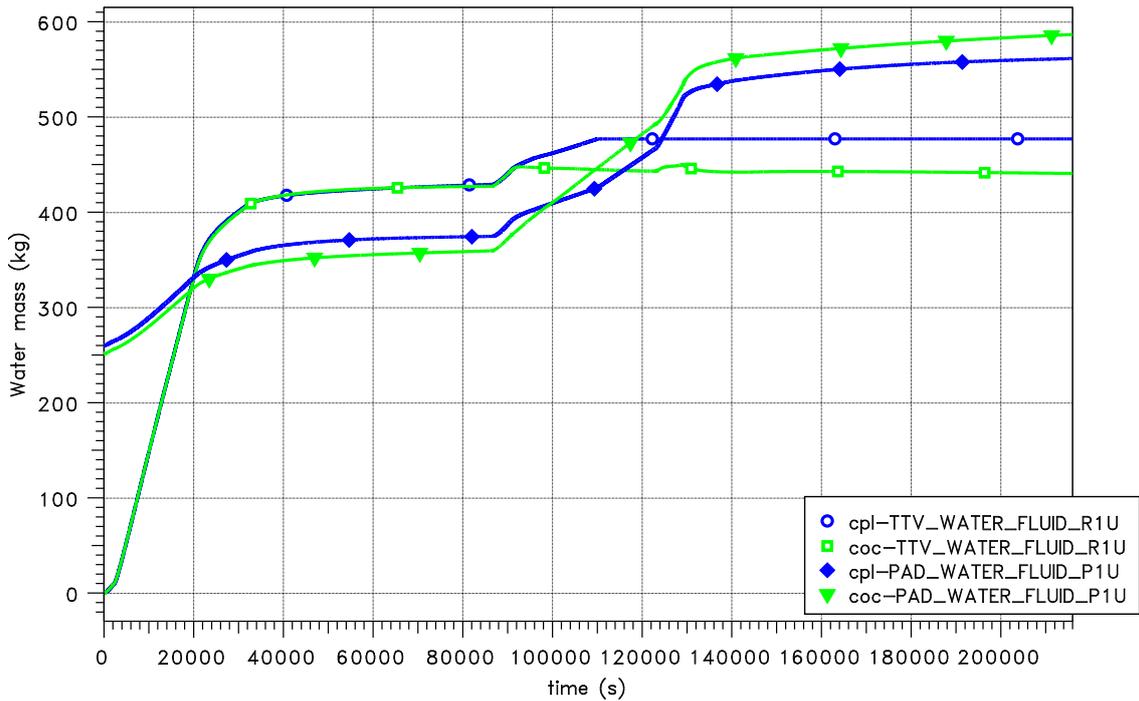


Abb. 3.81 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wassermassen im Sumpf des TTV und PAD

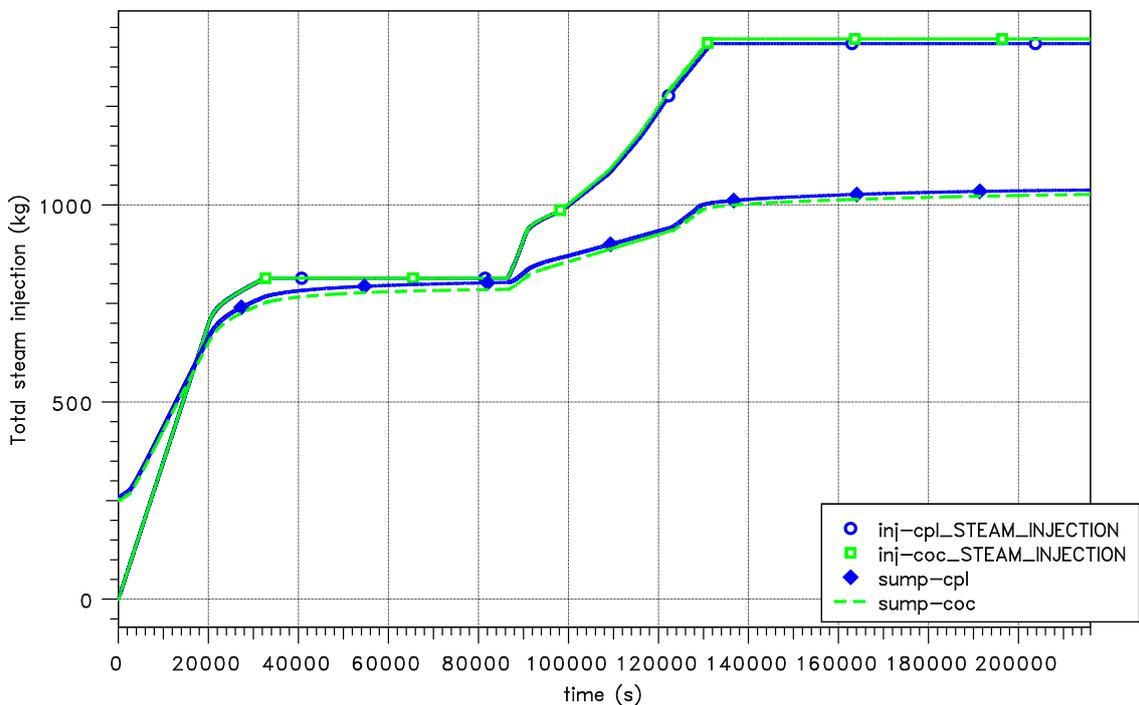


Abb. 3.82 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der gesamten Dampfeinspeisung und der Gesamtwassermasse in den unteren Sümpfen des TTV und PAD

Abb. 3.83 zeigt den Vergleich der Temperaturen im Sumpf des PAD. Dargestellt werden die lokalen Temperaturen in den angegebenen Höhen (mit jeweils gleichen Markern für

Rechnung und Experiment) und die mittleren Sumpftemperaturen der gekoppelten Rechnung (blau) und der Stand-alone-Rechnung (grün). In Bezug auf die mittleren Temperaturen liegt die gekoppelte Rechnung ca. 20 K höher als die Stand-alone-Rechnung. Das Ergebnis der Stand-alone-Rechnung ist im Vergleich zum Experiment etwas zu niedrig, die Ergebnisse der gekoppelten Rechnung sind eher zu hoch. Aufgrund der Schichtung sind zwar grundsätzlich Unterschiede in beiden Ergebnissen möglich, allerdings sollte sich das Gesamtsystem langfristig ausgleichen. Hinsichtlich der Temperaturschichtung im Sumpf werden die Temperaturunterschiede in der gekoppelten Rechnung unterschätzt, allerdings sind die Ergebnisse im Vergleich zu den anfänglich erzeugten Ergebnissen, wo die Schichtung bereits bei ca. 40000 s aufgelöst war, deutlich besser.

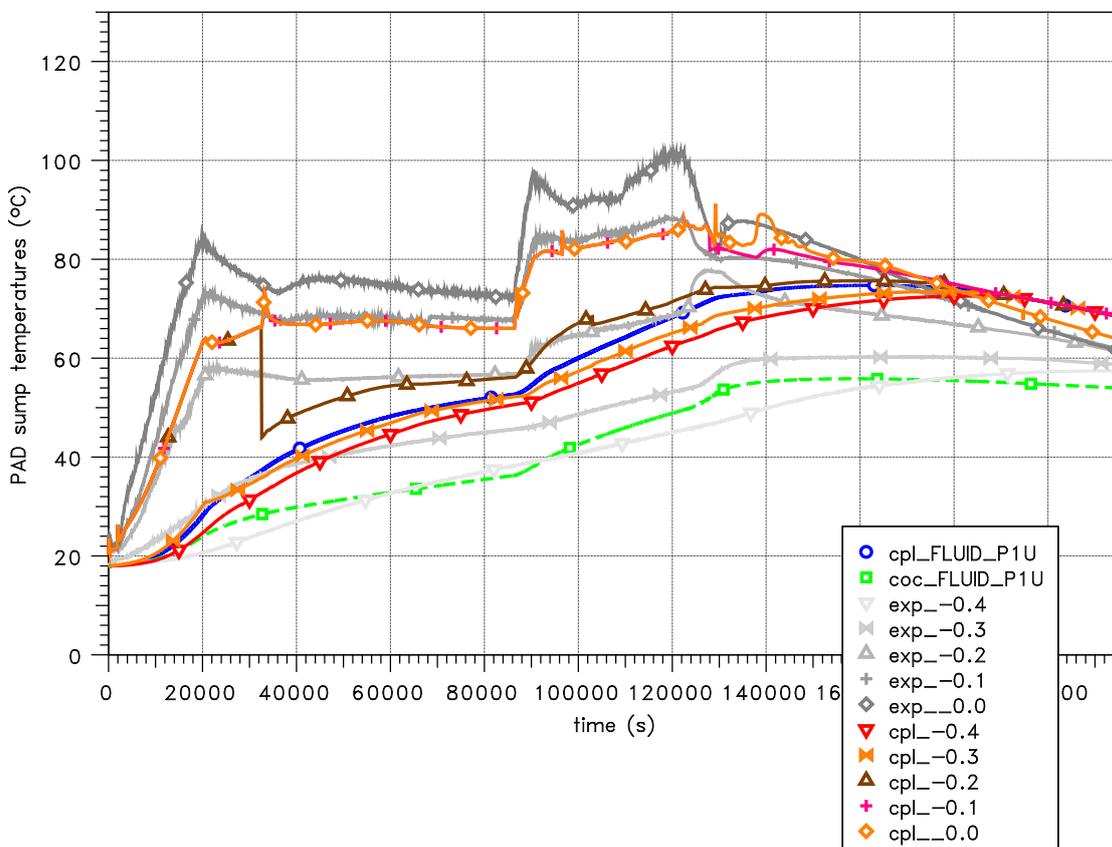


Abb. 3.83 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Temperaturen im PAD-Sumpf

Die lokalen Wandtemperaturen werden in Abb. 3.84 verglichen. Wie zu erwarten, ist die berechnete Temperatur am Sumpfboden zu hoch. Bei 0 m sind die berechneten Temperaturen eher zu niedrig. Somit ist eine zu hohe Kondensattemperatur nicht die Ursache für die zu hohen Temperaturen im PAD-Sumpf.

Für die Wassermasse im PAD-Sumpf wurde eine Energiebilanz aufgestellt. Wie in Abb. 3.85 zu sehen ist, wird die Energie im Sumpf etwas überschätzt. Diese entspricht ungefähr einer Temperaturüberschätzung von 3,5 K. Bei den durchgeführten Rechnungen stellte sich heraus, dass es unbedingt notwendig ist, das (vollständig) konservative Lösungsschema zu verwenden. Auch sollte die Zeitschrittweite nicht zu hoch gewählt werden. In dieser Rechnung wurde eine Zeitschrittweite von 0,25 s gewählt.

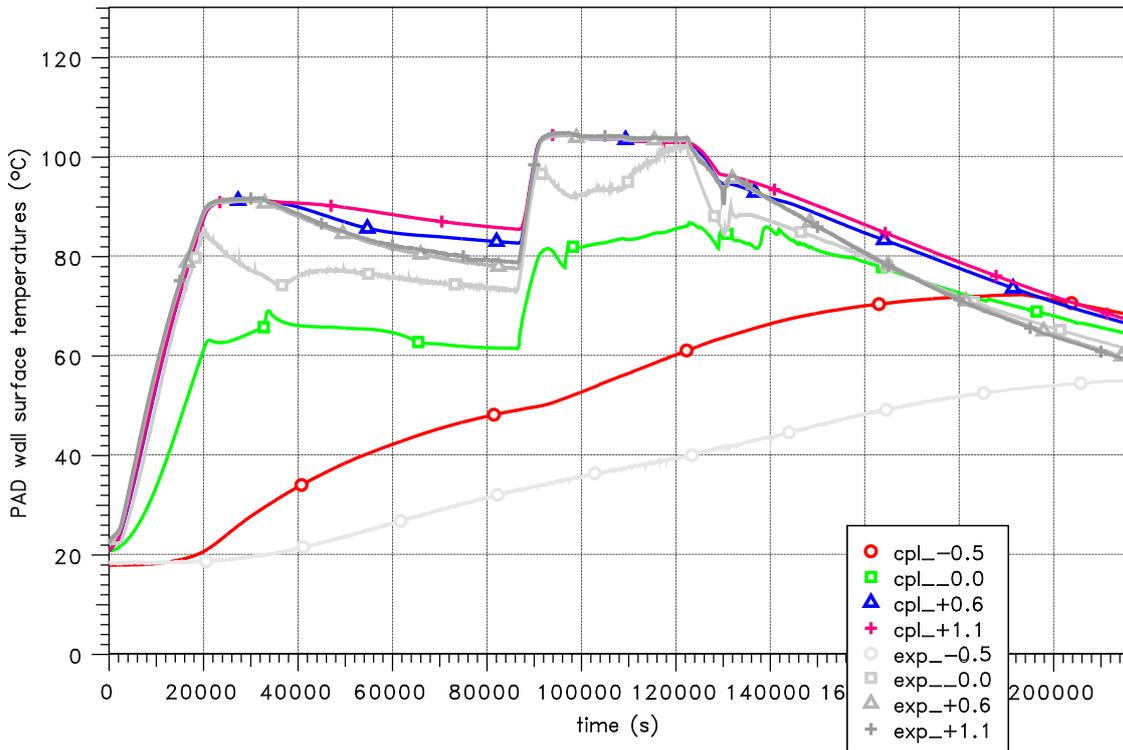


Abb. 3.84 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wandoberflächentemperaturen im PAD Sumpf

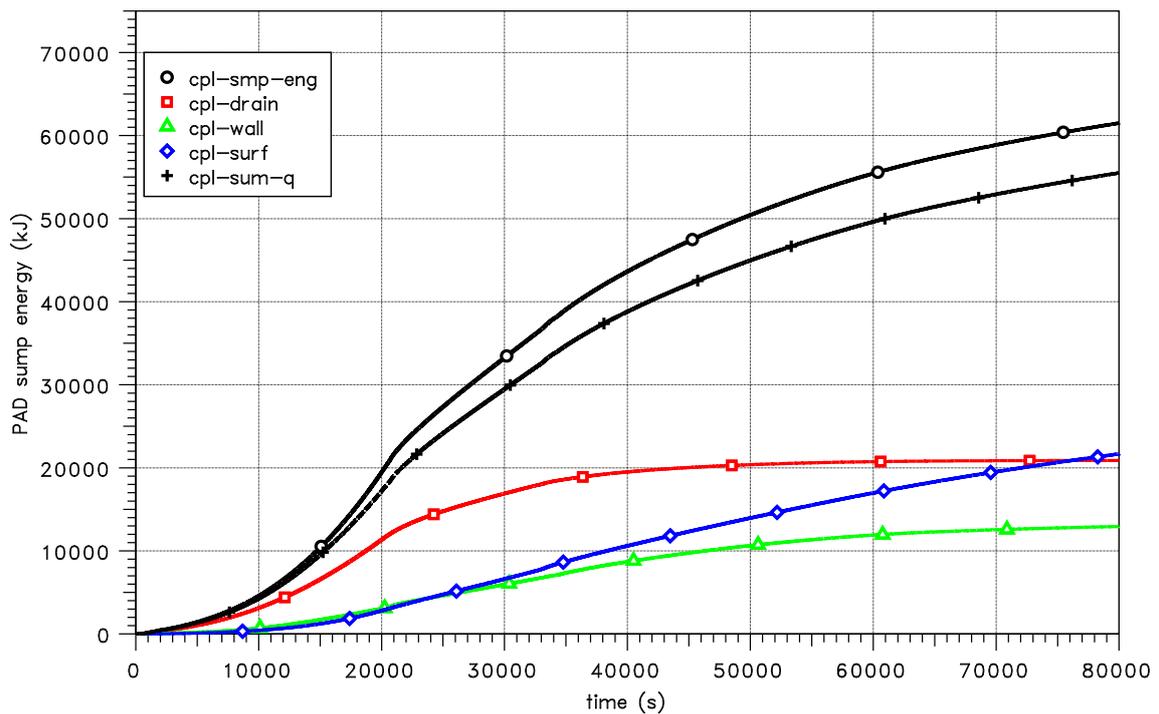
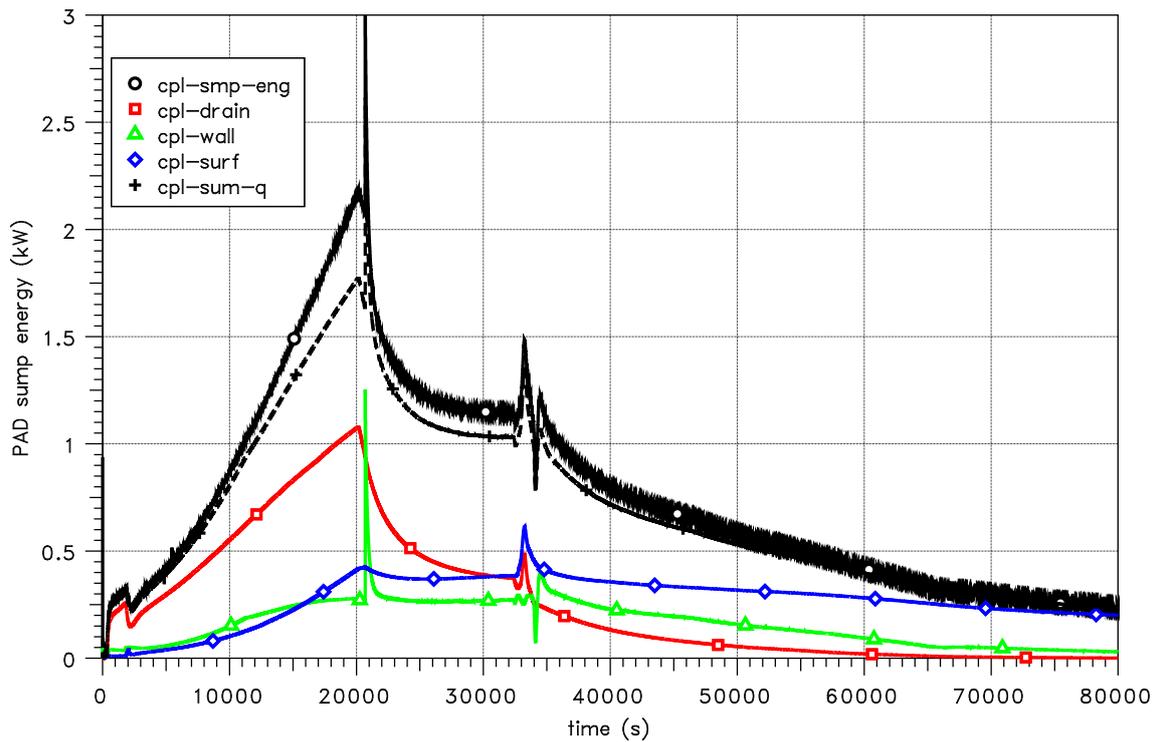


Abb. 3.85 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Energieströme (oben) und Energiebilanz (unten) im PAD Sumpf (bis 80000 s)

Die Temperaturen im Sumpfbereich des TTV-Behälters werden in Abb. 3.86 verglichen. Hier liegen die Temperaturen im Vergleich zum Experiment und der Stand-alone-Rechnungen eher niedriger. Die Temperaturdifferenzen bei 0,1 und 0,3 m sind zwar etwas

kleiner im Vergleich zum Experiment, aber im Vergleich zu den Ergebnissen im PAD-Behälter deutlich ausgeprägter. Die Gasttemperatur (orange Kurve bis ca. 104000 s) stimmt sehr gut mit dem Messwert überein. Danach wird die Wassertemperatur gemessen, die etwas niedriger im Vergleich zum Experiment liegt. In der Stand-alone-Rechnung sind die berechneten Temperaturen zu hoch. Gute Ergebnisse werden auch für die Wandoberflächentemperaturen erzielt (Abb. 3.87).

Der Einfluss auf die Heliumkonzentrationen ist eher gering. Exemplarisch werden die Konzentrationen im oberen und unteren Verbindungsrohr verglichen (Abb. 3.88).

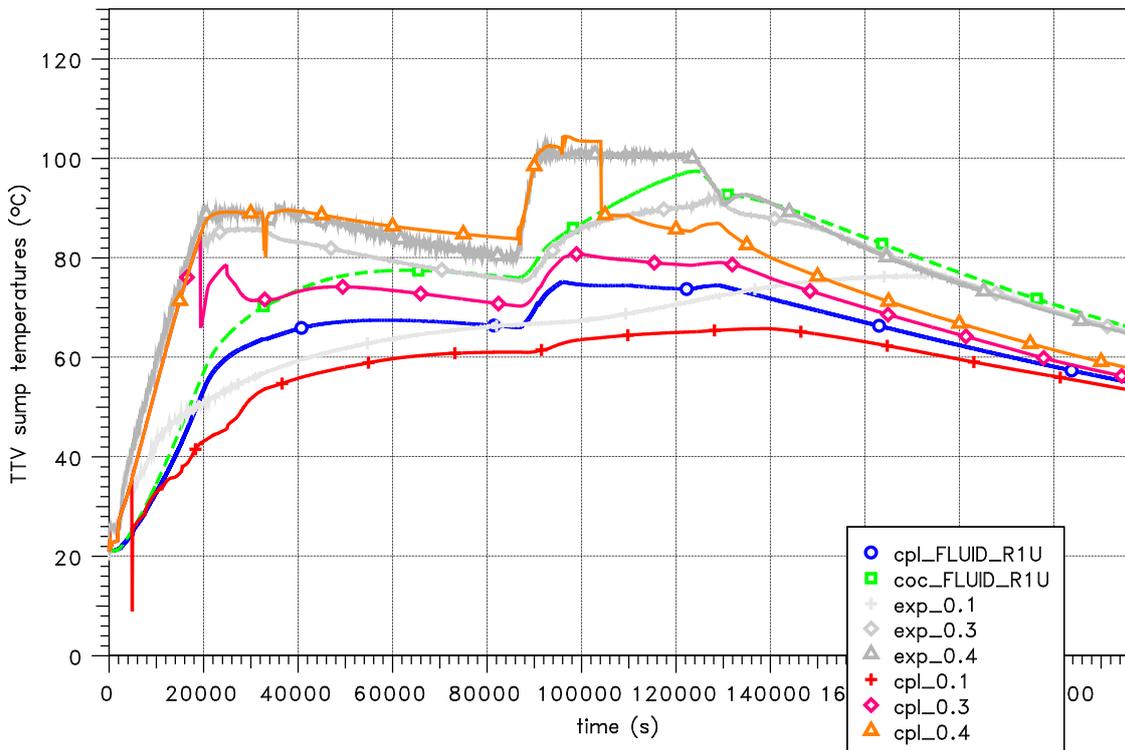


Abb. 3.86 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Temperaturen im TTV-Sumpf

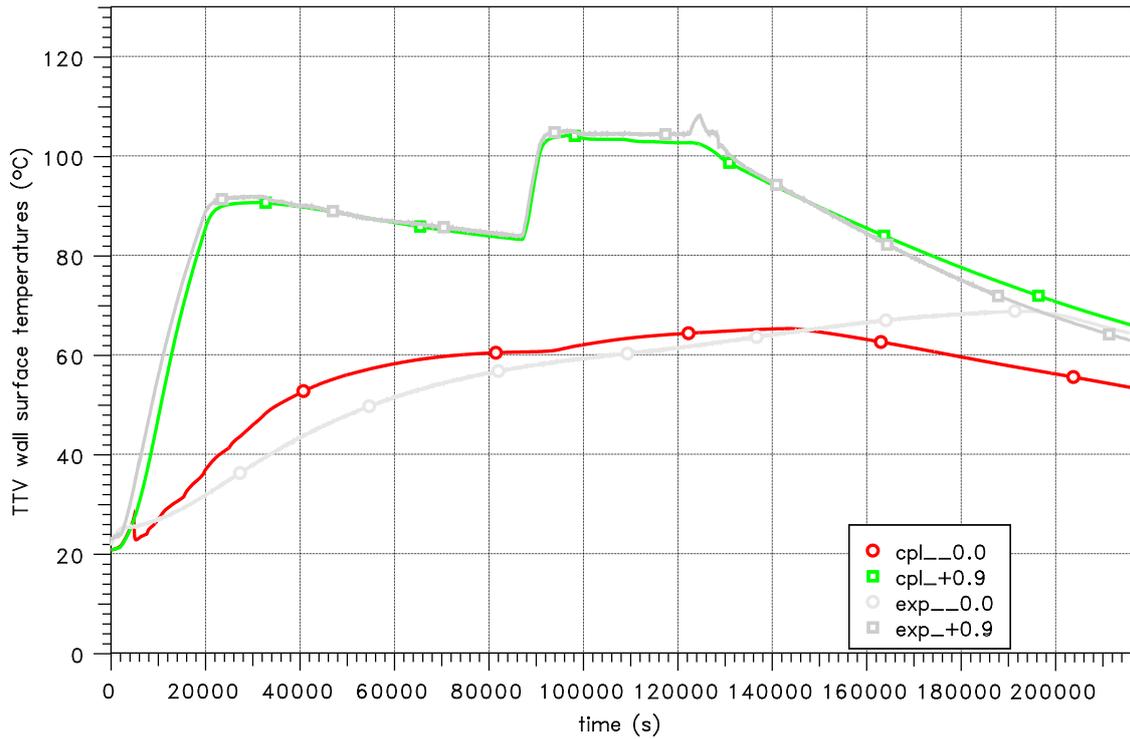


Abb. 3.87 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wandoberflächentemperaturen im TTV-Sumpf

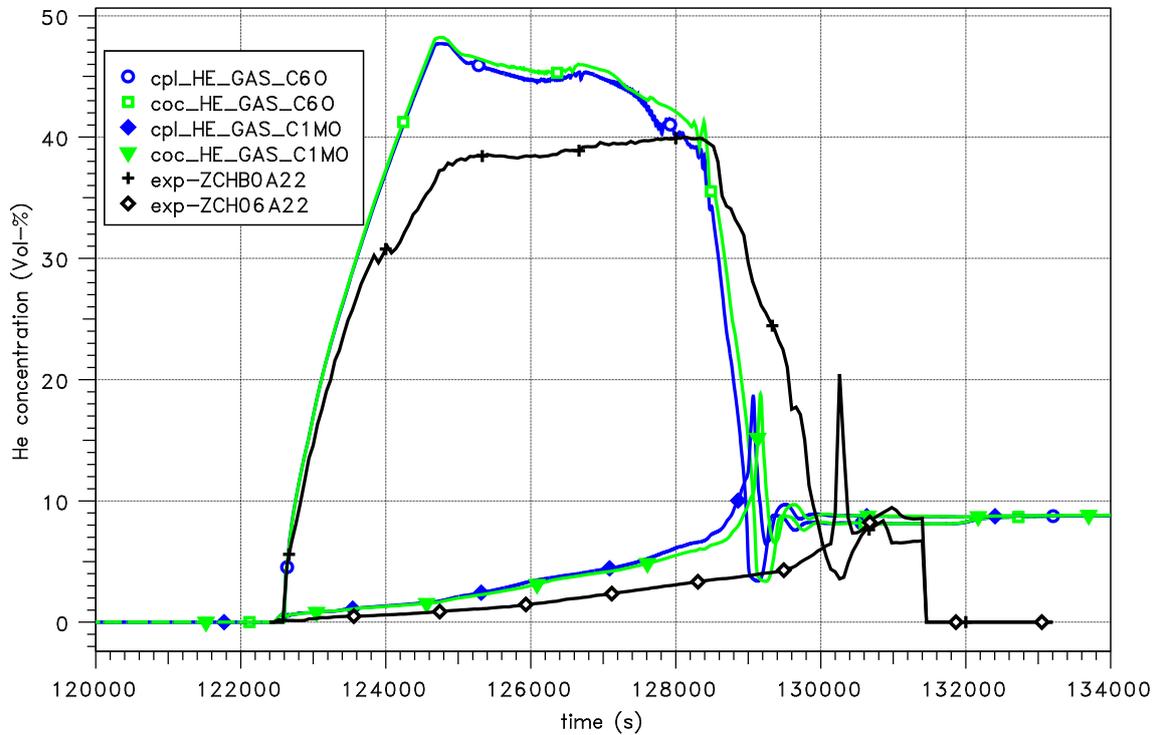


Abb. 3.88 CoPool, THAI TH-27: Vergleich der He-Konzentrationen in den Verbindungsleitungen

3.2.5 COCOSYS/CoPool-Parameterstudien für THAI TH-27

Anhand des neuen fertiggestellten gekoppelten CoPool/COCOSYS-Datensatzes wurden mehrere Parameterstudien durchgeführt. Ziel war es, die Sensitivität der Berechnungsergebnisse und der Berechnungsdauer auf unterschiedliche numerische Parameter (Zeitschrittweite, Gitterfeinheit, turbulente Viskosität) zu untersuchen. Eine Reduktion von Diskretisierungsfehlern durch feinere Zeitschritte oder Gitter führt gleichzeitig auch immer zu höheren Berechnungsdauern. Hier ist es wichtig, die richtige Balance zwischen Genauigkeit und Schnelligkeit zu finden. Dabei soll die vorliegende Parameterstudie helfen. Abschließend werden die Ergebnisse noch mit einer CFX-Rechnung verglichen. Dieses dient der erweiterten Absicherung der Berechnungsergebnisse.

3.2.5.1 Einfluss der Gitterfeinheit

Ausgehend vom ursprünglichen Datensatz sollte der Einfluss der Gitterfeinheit sowohl auf die Rechenzeiten, wie auch auf die Ergebnisse untersucht werden. Dazu wurde die ursprüngliche Rechnung mit einem feinen Gitter mit einer Rechnung mit einem größeren Gitter verglichen (siehe Abb. 3.89). Die Variation der Gitterfeinheit erfolgt hier nur in horizontaler Richtung (Abmaße: 0,5 m x 0,5 m und 1,0 m x 1,0 m), während in vertikaler Richtung die Schichtdicke von 0,2 m erhalten blieb. Die Rechnung mit dem groben Gitter zeigte eine deutlich schnellere Rechnung als die Simulation mit dem feinen Gitter (Tab. 3.5).

Tab. 3.5 Berechnungsparameter für die Gitterstudie

Rechnung	Gitterfeinheit	Berechnungsdauer für 500 s
Nr. 1	Fein (0,5 x 0,5 x 0,2 m)	61,5 Stunden
Nr. 2	Grob (1,0 x 1,0 x 0,2 m)	11,3 Stunden

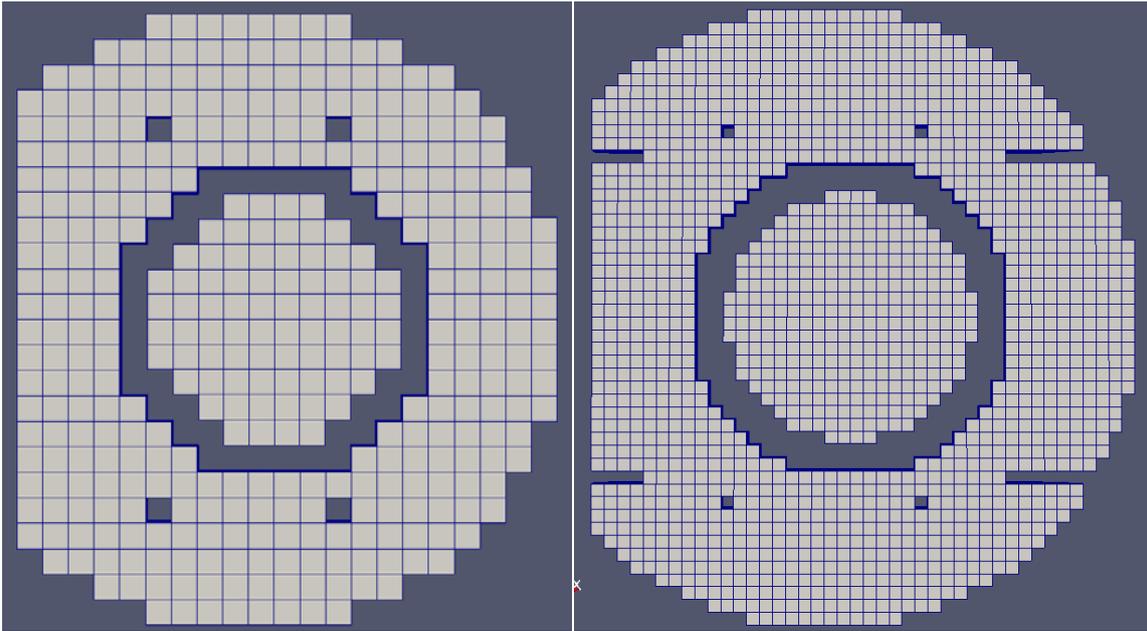


Abb. 3.89 CoPool-Gitterstudie: links grobes Gitter 1,0 m x 1,0 m, rechts feines Gitter 0,5 m x 0,5 m)

In Abb. 3.90 werden die Berechnungsergebnisse mit unterschiedlicher Gitterfeinheit qualitativ miteinander verglichen. Dargestellt sind jeweils Temperaturverteilungen an unterschiedlichen Zeitpunkten. Hier sind zwar die groben Muster ähnlich, im Detail sind jedoch Unterschiede zwischen den beiden Rechnungen zu erkennen.

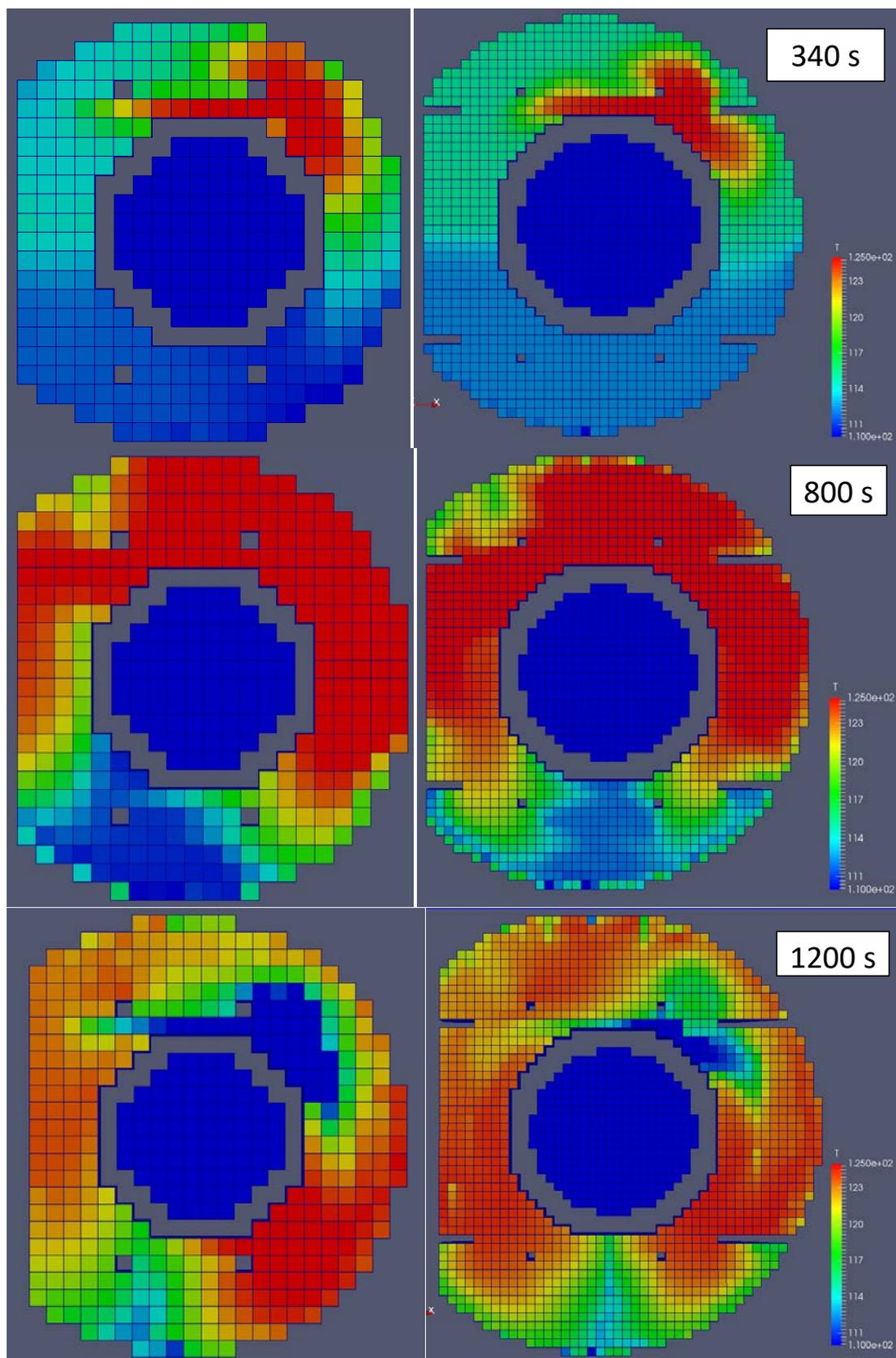


Abb. 3.90 CoPool-Gitterstudie: Vergleich der Ergebnisse mit unterschiedlicher Gitterfeinheit (Temperaturen auf einer Skala von 110 °C – 125 °C)

Um die Ergebnisse quantitativ miteinander zu vergleichen, wurden Proben an zwei unterschiedlichen Positionen im Sumpf (Position 1 und 2, siehe Abb. 3.91) und jeweils noch in unterschiedlichen Höhen (-1,2 m / -1,4 m / -1,6 m) genommen. Die Bodenhöhe liegt bei -1,8 m und in Abb. 3.92 ist der Füllstandsverlauf dargestellt. Dieser beginnt erst bei ca. 300 s bei -1,4 m, da CoPool eine gewisse Anfangshöhe benötigt. In Abb. 3.93 bis Abb. 3.96 werden die Temperaturverläufe für die Probepositionen 1 und 2 miteinander verglichen (grob und fein, jeweils bei $H = -1,2$ m und $H = -1,6$ m). Die Temperaturverläufe beginnen jeweils erst ab Zeiten oberhalb von 300 s, weil dann der Sumpf die Höhe der Probeposition erreicht hat. Zunächst sind die Temperaturen (in allen Rechnungen) höher, da heißes Wasser eingespeist wird, später sinken sie ab, da kälteres Wasser nachfließt. Im Zeitraum von 400 s bis 1200 s sind die Temperaturverläufe für die unterschiedlichen Gitterfeinheiten sehr ähnlich. Bei der Einspeisung des kälteren Wassers ab 1200 s sinken die Temperaturen jedoch bei der Rechnung mit dem groben Netz deutlich schneller ab als bei der Rechnung mit dem feinen Gitter. Insofern zeigt sich hier bei dem unterschiedlich feinen Gitter ein deutlicher numerischer Einfluss. Theoretisch müsste das Gitter noch weiter verfeinert werden, um zu sehen, ob und wann die Ergebnisse gegen einen festen Wert konvergieren. Dieses würde jedoch den Rahmen dieses Arbeitspunktes übersteigen. Grundsätzlich sollte davon ausgegangen werden, dass das feinere Gitter eine höhere Genauigkeit hat. Diese muss aber mit zusätzlicher Rechenzeit erkauft werden.

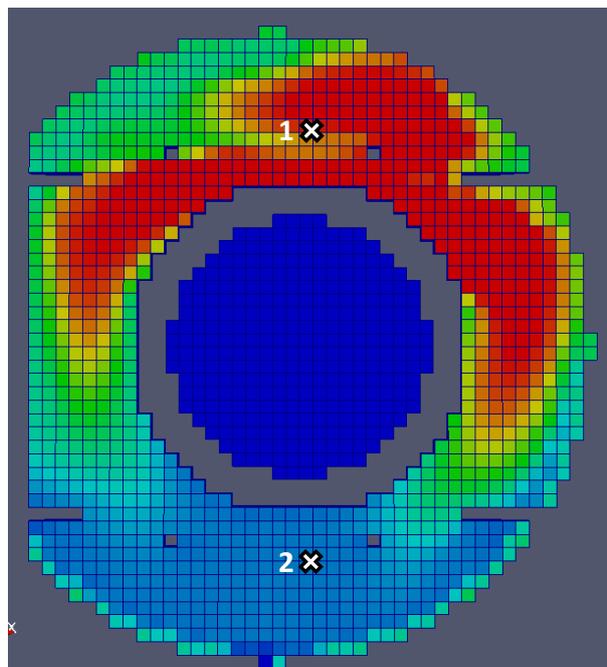


Abb. 3.91 CoPool-Gitterstudie: Probepunkte 1 und 2 im Sumpf

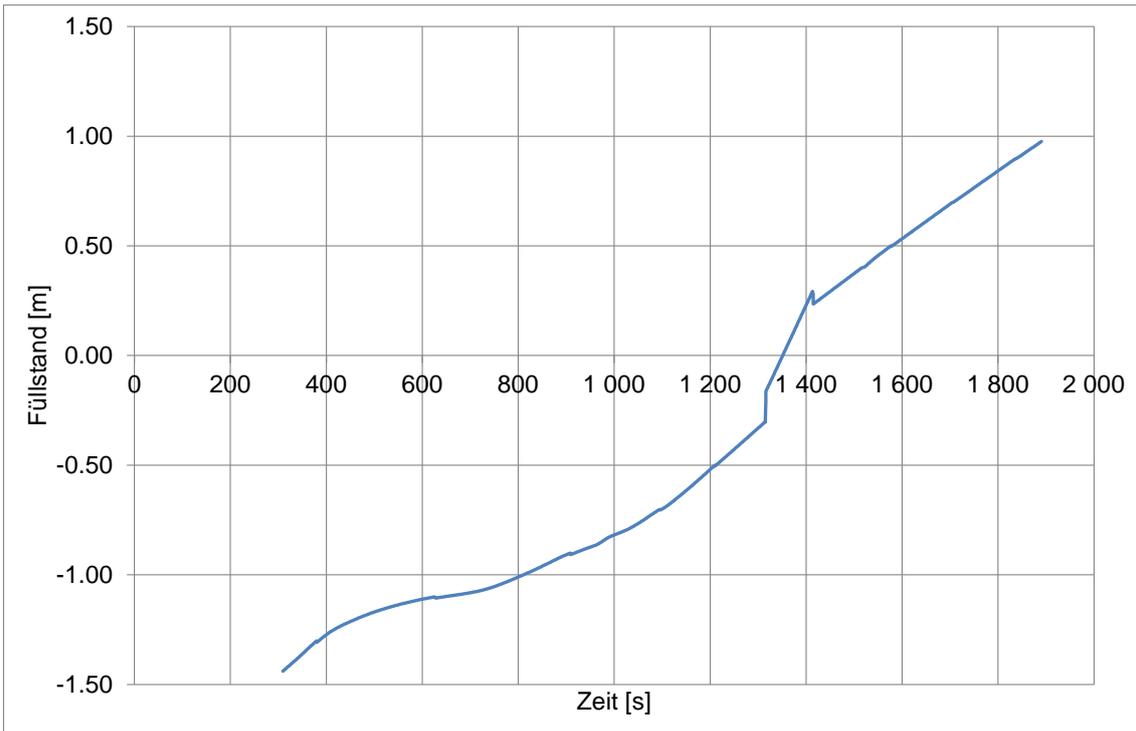


Abb. 3.92 CoPool-Gitterstudie: Füllstandsverlauf (Bodenhöhe -1,8 m)

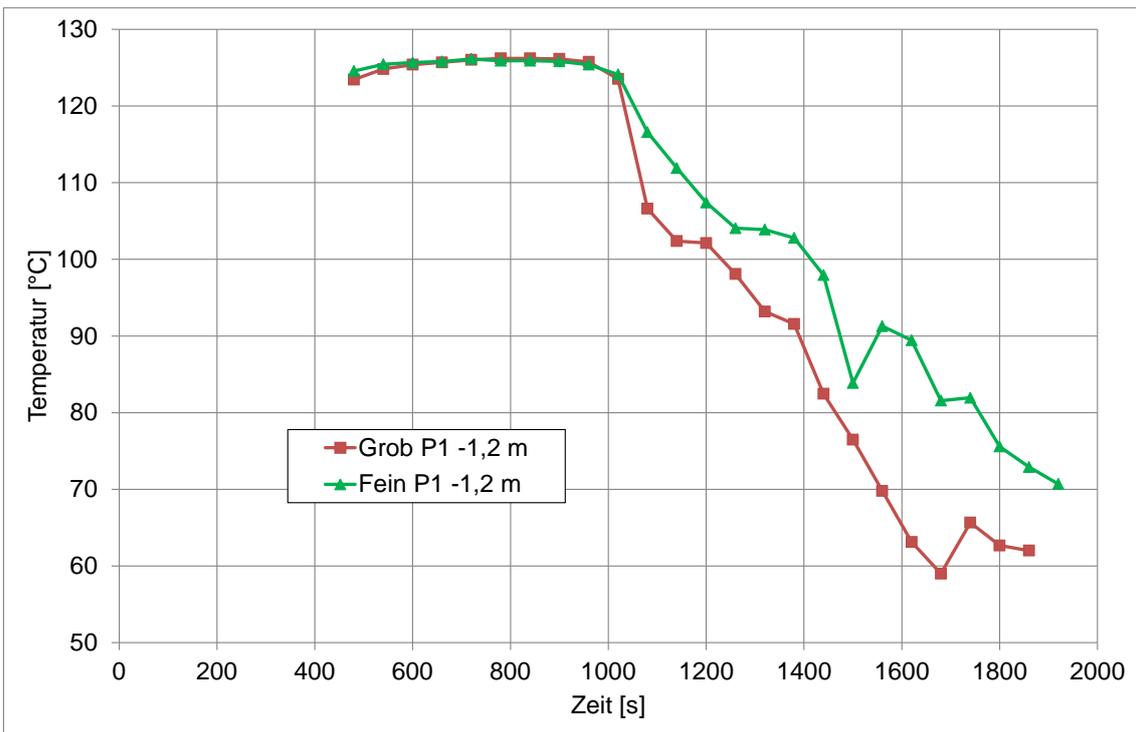


Abb. 3.93 CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1,2 m)

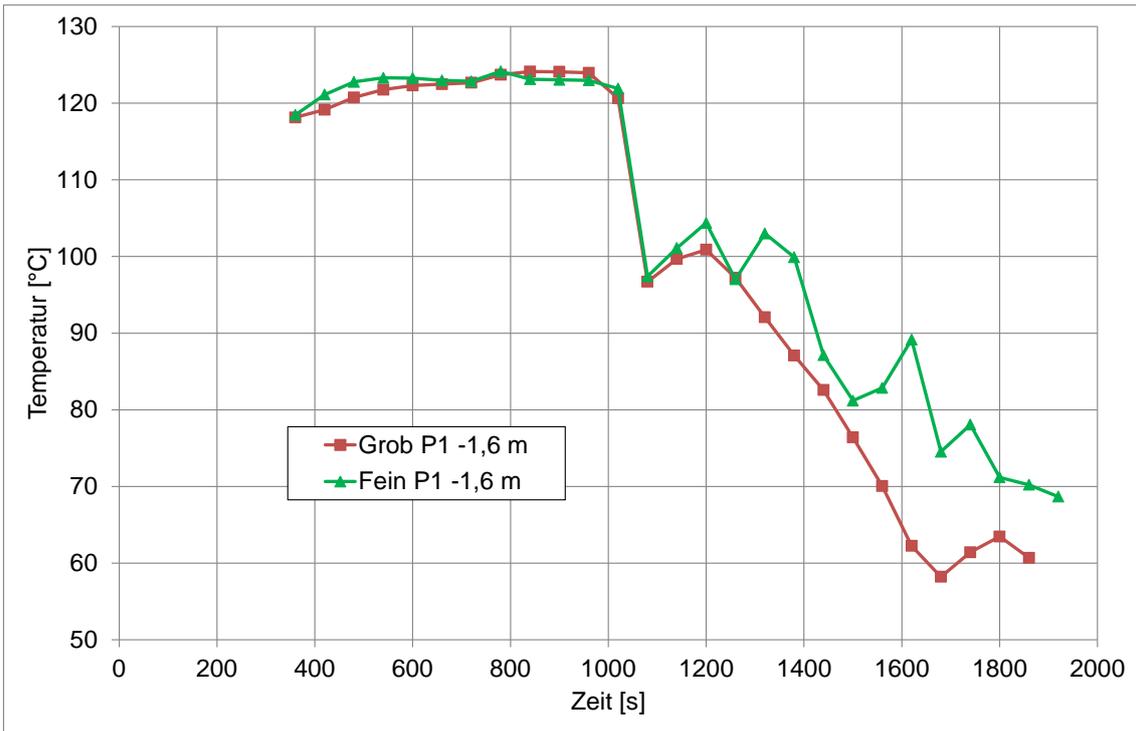


Abb. 3.94 CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1,6 m)

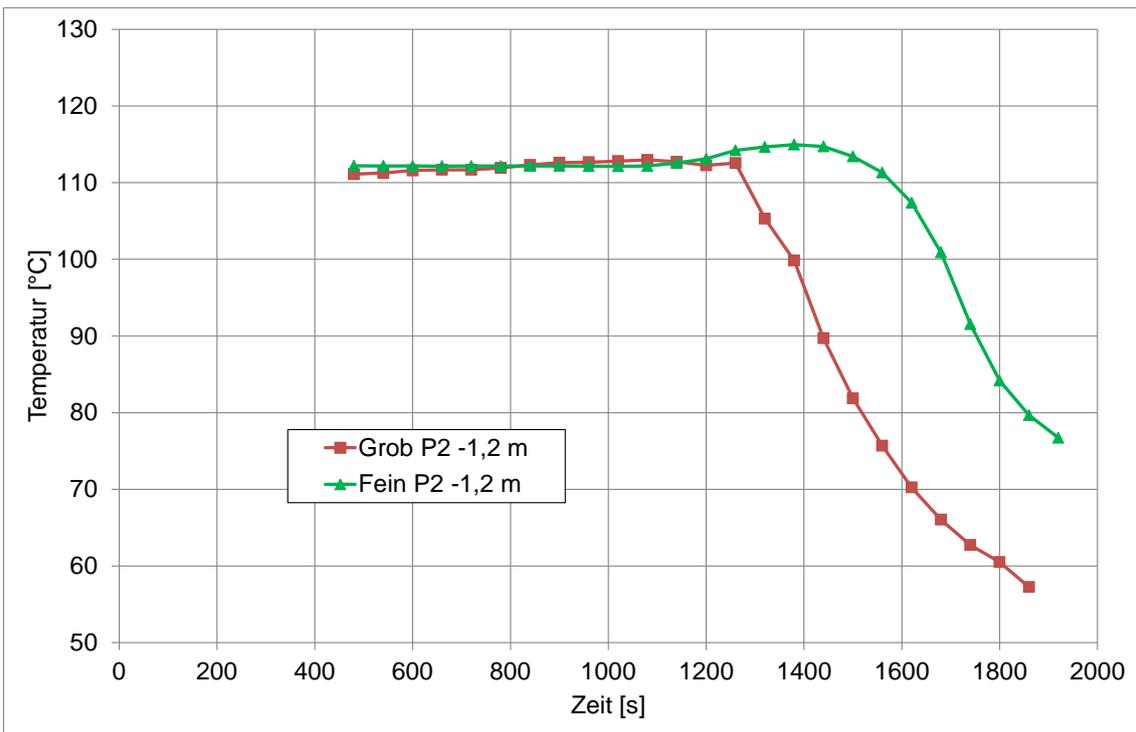


Abb. 3.95 CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1,2 m)

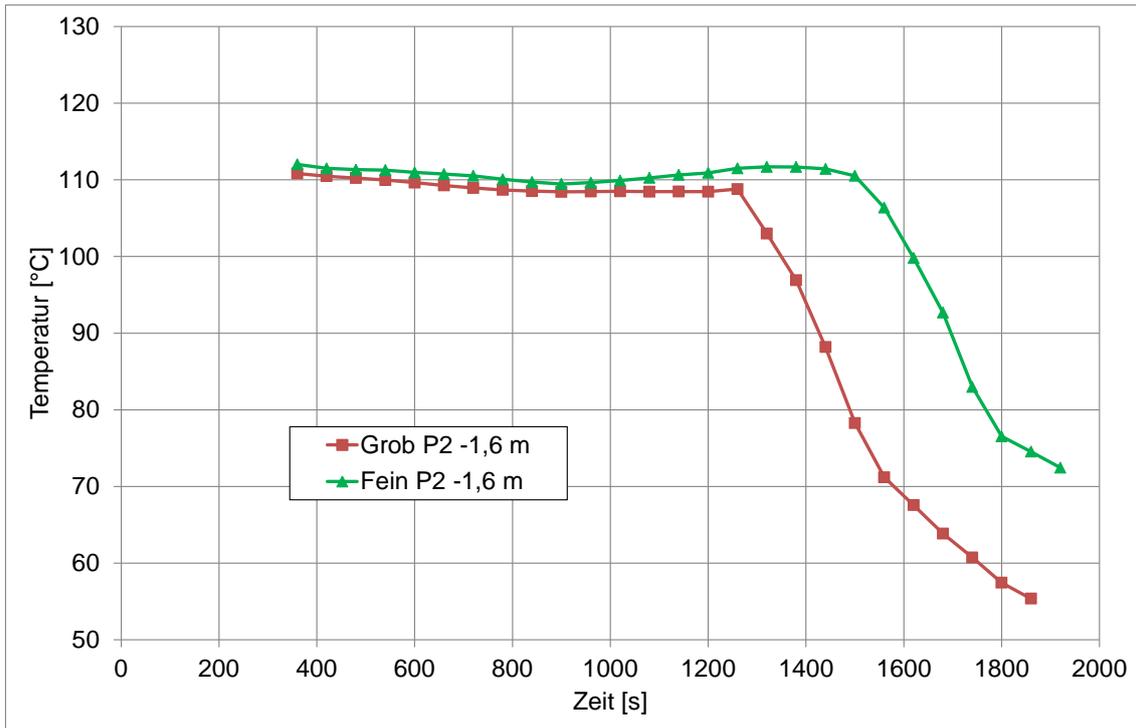


Abb. 3.96 CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1,6 m)

Eine Ursache für die unterschiedlichen Ergebnisse bei unterschiedlicher Gitterfeinheit liegt darin, dass sich – je nach Gitter – im Einlassbereich (bei den Quellen/Senken) unterschiedliche Geschwindigkeiten bilden. Dieses ist in Abb. 3.97 dargestellt. Hier sind die unterschiedlichen Geschwindigkeitsskalen zu beachten. Bei gleichem Massenstrom, aber unterschiedlicher Einlass-Fläche kommt es automatisch zu unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Diese haben dann unmittelbaren Einfluss auf die Verteilung bzw. Schichtung des Wassers mit unterschiedlichen Temperaturen. Theoretisch müsste die Fläche hier der realen Auftrefffläche des Wasserstrahls auf die Sumpfoberfläche im Störfall entsprechen, die jedoch in der Regel nicht bekannt sein wird. Dieses stellt einen Unsicherheitsfaktor bei den Sumpf-Berechnungen dar.

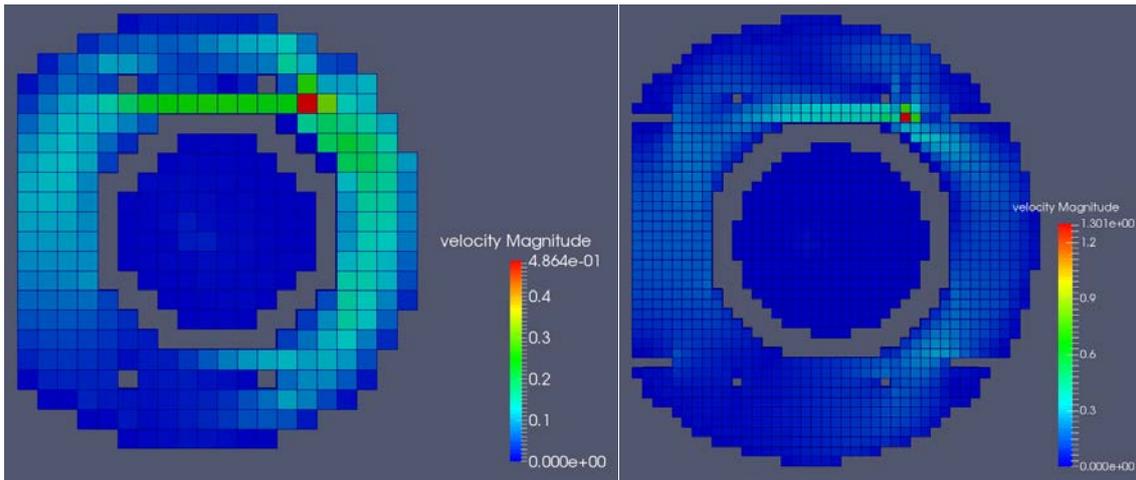


Abb. 3.97 CoPool-Gitterstudie: Die Gitterfeinheit beeinflusst die Geschwindigkeiten im Einlassbereich (links: $v_{\max} = 0,5$ m/s, rechts $v_{\max} = 1,3$ m/s)

3.2.5.2 Einfluss der Zeitschrittweite

Als weiterer Aspekt soll der Einfluss der Zeitschrittweite auf die Rechenzeiten und auch auf die Berechnungsergebnisse untersucht werden. Zunächst wird die Zeitschrittweite bei dem feinen Gitter variiert, später auch bei dem groben Gitter. Ausgehend vom ursprünglichen Datensatz mit einer maximalen Zeitschrittweite von 0,05 s wurde diese Zeitschrittweite auf 0,20 s in einer zweiten Rechnung erhöht. Dieses führt zu einer deutlichen Beschleunigung der Berechnungsdauer (siehe Tab. 3.6). Abb. 3.98 zeigt die Temperaturverteilung bei $t = 800$ s. Hier ist qualitativ kein Unterschied feststellbar.

Tab. 3.6 Berechnungsparameter für die Zeitschrittstudie (feines Gitter)

Rechnung	Gitter	Max. Zeitschritt	Berechnungsdauer für 500 s
Nr. 1	Fein	0,05 s	61,5 Stunden
Nr. 3	Fein	0,20 s	19,3 Stunden

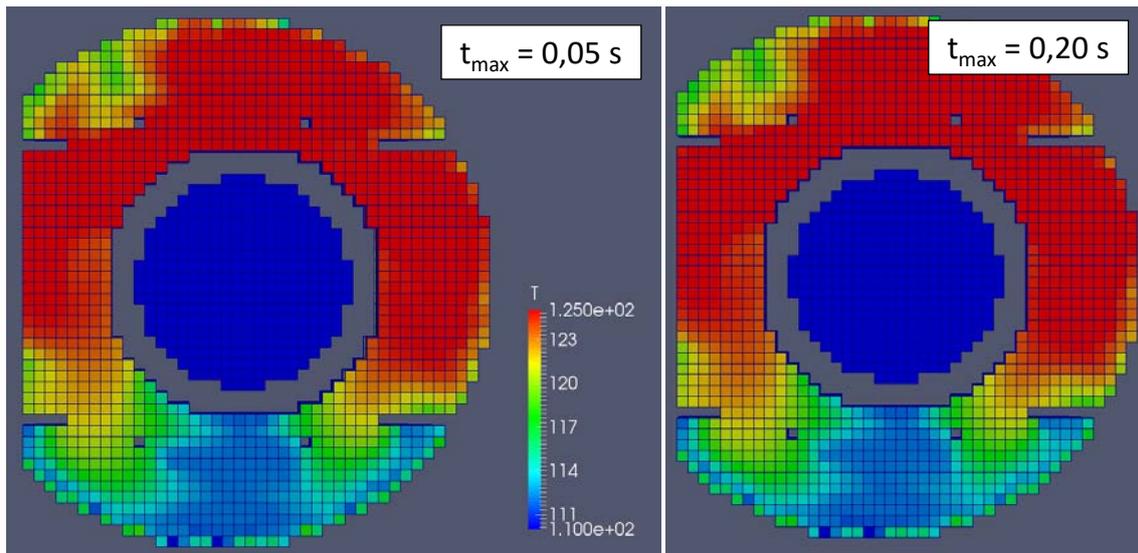


Abb. 3.98 CoPool-Zeitschrittweite: Vergleich der Berechnungen mit unterschiedlicher Zeitschrittweite bei $t = 800$ s (feines Gitter, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C)

In Abb. 3.99 und Abb. 3.100 werden die Temperaturen an den Probepunkte 1 und 2 quantitativ miteinander verglichen. Auch hier sieht man bis 900 s (Probepunkt 1) bzw. 1400 s (Probepunkt 2) keine Unterschiede zwischen den Temperaturen. Danach treten leichte Unterschiede zwischen den Temperaturverläufen auf. Diese Unterschiede sind jedoch nicht allzu groß. Insofern besteht hier bei dem feinen Gitter eine Möglichkeit, Rechenzeit zu sparen, wenn geringe numerische Ungenauigkeiten akzeptiert werden können.

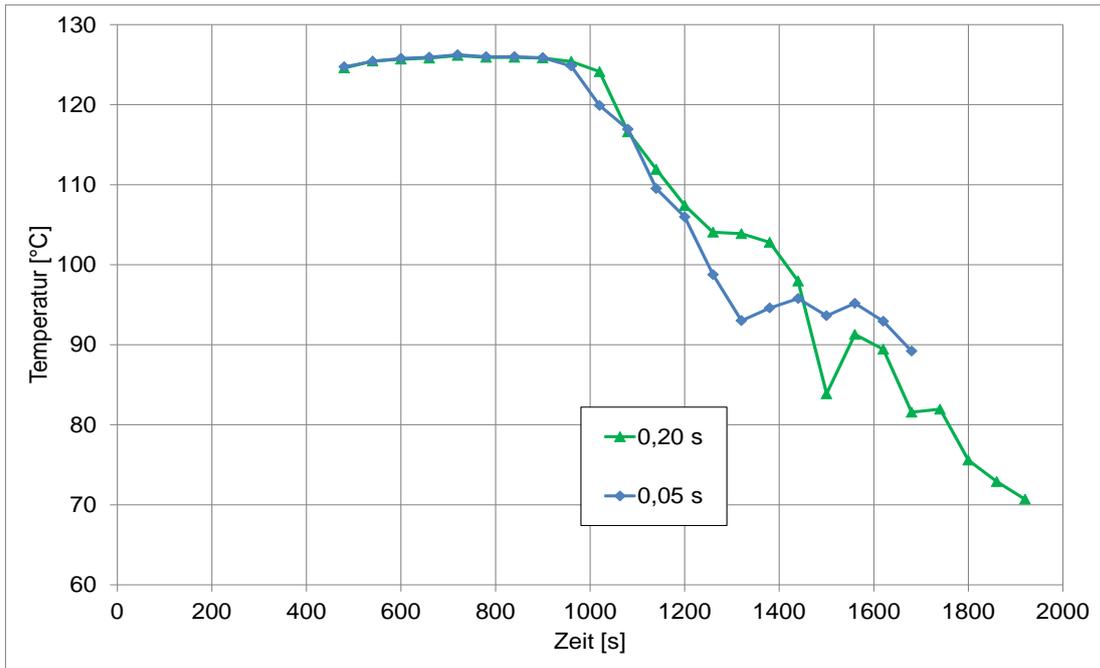


Abb. 3.99 CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m (feines Gitter)

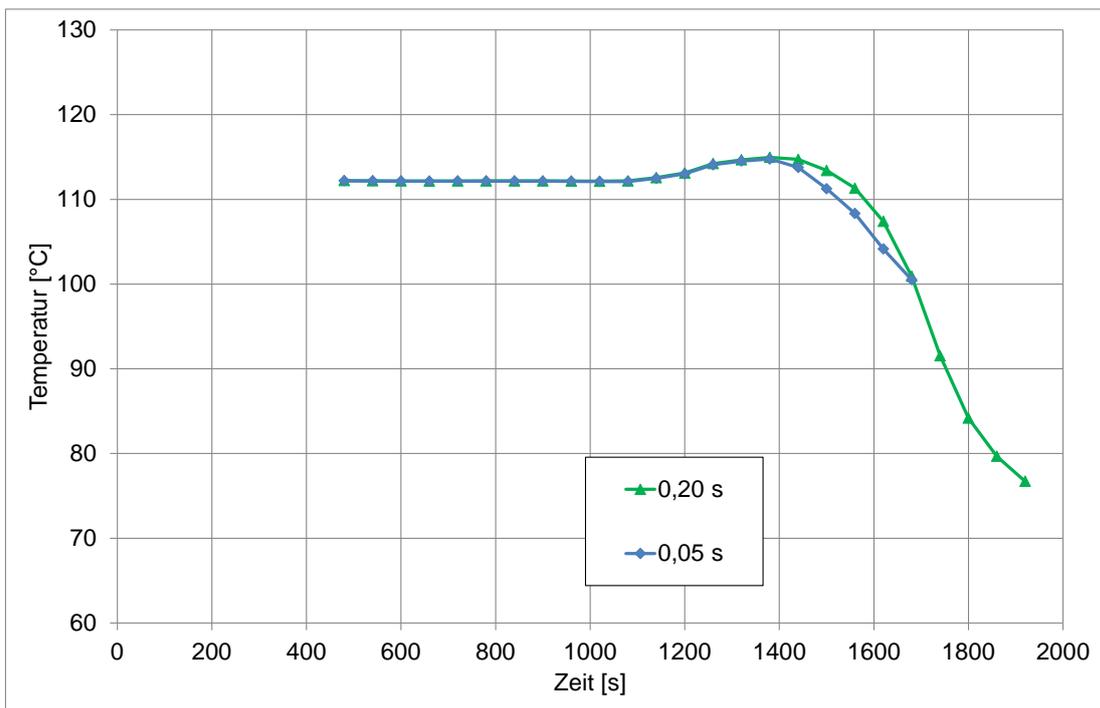


Abb. 3.100 CoPool Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m (feines Gitter)

Eine ähnliche Zeitschrittstudie wurde auch mit dem groben Gitter durchgeführt. Hier wurden drei Stufen für die maximale Zeitschrittweite gewählt (0,05 s / 0,10 s / 0,20 s, siehe auch Tab. 3.7). Abb. 3.101 zeigt die Temperaturverteilungen bei $t = 800$ s. Die

Berechnungen mit den Zeitschrittweiten 0,05 s und 0,10 s sehen sich noch relativ ähnlich, bei der Berechnung mit 0,20 s maximaler Zeitschrittweite sind deutlichere Unterschiede zu erkennen.

Tab. 3.7 Berechnungsparameter für die Zeitschrittstudie (grobes Gitter)

Rechnung	Gitter	Max. Zeitschritt	Berechnungsdauer für 500 s
Nr. 2	Grob	0,05 s	11,3 Stunden
Nr. 4	Grob	0,10 s	8,0 Stunden
Nr. 5	Grob	0,20 s	4,3 Stunden

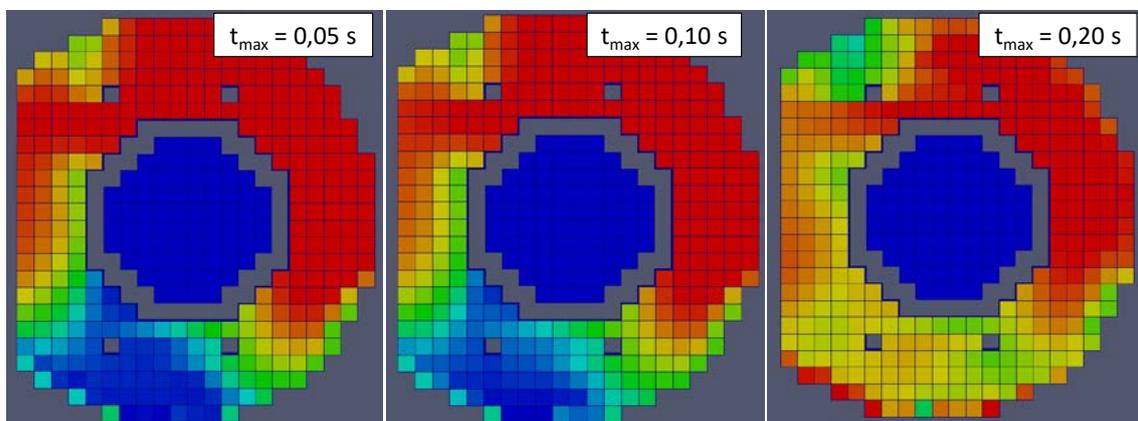


Abb. 3.101 CoPool-Zeitschrittweite: Vergleich der Berechnungen mit unterschiedlicher Zeitschrittweite bei $t = 800$ s (grobes Gitter, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C)

Deshalb wurden als weiteres wieder die Temperaturverläufe an den zwei Probepunkten ausgewertet (siehe Abb. 3.102 und Abb. 3.103). Auch hier zeigen sich, gerade im Zeitraum von 400 s bis 600 s, deutliche Unterschiede zwischen den Temperaturen. Nach 600 s nähern sich die Kurvenverläufe wieder an, es bleiben jedoch Unterschiede bestehen.

Insgesamt scheint die Variation der Zeitschrittweite bei dem groben Gitter einen deutlicheren Einfluss zu haben. Die deutlich schnelleren Rechenzeiten haben den Nachteil wesentlich größerer numerischer Fehler (insbesondere bei einer maximalen Zeitschrittweite von 0,20 s). Dieser Effekt scheint bei dem feinen Gitter nicht so stark zu sein. Hier kann ein größerer Zeitschritt zu einer beschleunigten Rechnung führen, ohne dass es zu zusätzlichen größeren numerischen Ungenauigkeiten kommt.

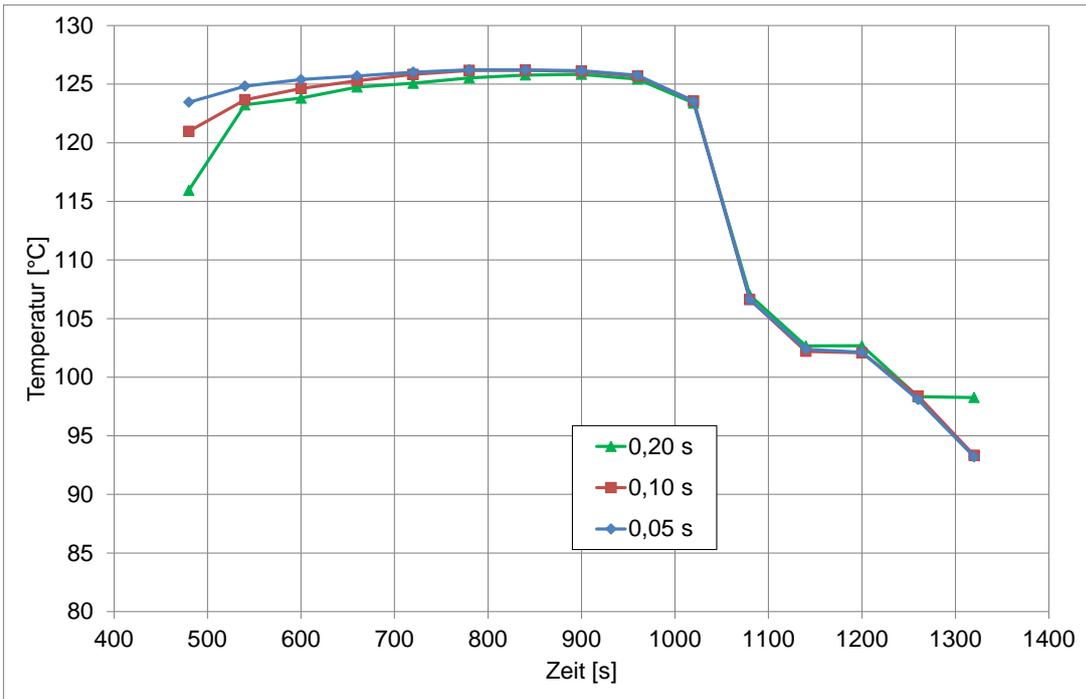


Abb. 3.102 CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m (grobes Gitter)

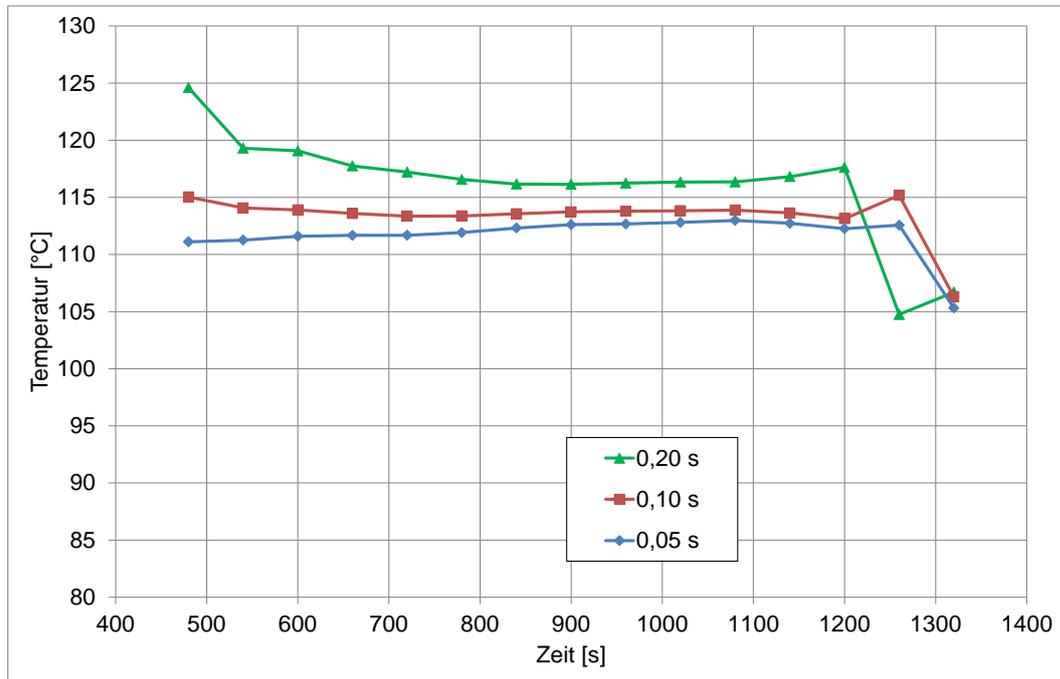


Abb. 3.103 CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m (grobes Gitter)

3.2.5.3 Einfluss der turbulenten Viskosität

Frühere Analysen haben gezeigt, dass die CoPool-Berechnungen sensitiv auf die Einstellung der turbulenten Viskosität sind [SSS17]. Darum soll dieser Parameter auch bei dieser Rechnung variiert werden. CoPool hat zwar kein eigenes Turbulenzmodell, es ist jedoch möglich, eine turbulente Viskosität anzugeben (getrennt nach vertikaler und horizontaler Richtung). Diese turbulente Viskosität wird auf die dynamische Viskosität des Fluiden addiert. In den bisherigen Rechnungen waren die Werte 0 Pas in horizontaler Richtung und 10 Pas in vertikaler Richtung eingestellt (dieses entsprach den Werten in dem übergebenen Beispieldatensatz). In CoPool-Analysen zu einem Experiment – der GES-Wanne – wird dieser Parameter in einem Bereich von 0 – 1 Pas sowohl für die horizontale als auch vertikale Richtung variiert [Fre12]. Aus dieser Parameterstudie wird aber keine Empfehlung abgeleitet, wie dieser Wert zu setzen ist. Grundsätzlich hat die turbulente Viskosität keinen festen Wert, sie ergibt sich vielmehr dynamisch aus der aktuell vorliegenden Strömung. Theoretisch kann dieser Wert mit Hilfe von Turbulenzmodellen berechnet werden. Dieses geschieht z. B. im SST-Modell von ANSYS CFX®. In der Berechnung der Sumpfstände mit CFX ergeben sich allerdings insgesamt relativ kleine Werte für die turbulente Viskosität mit $\eta_t < 0,001$ Pas. Aus diesem Grund wurden für die vorliegende CoPool-Parameterstudie neben dem bisherigen Wert 10 Pas auch die Werte 0,1 Pas und 0,001 Pas für die vertikale turbulente Viskosität gewählt (siehe Tab. 3.8). Auf die Rechenzeiten hat dieser Parameter nur bei der Rechnung mit 0,001 Pas einen geringen Einfluss.

Tab. 3.8 Berechnungsparameter für die Viskositätsstudie

Rechnung	Gitter	Vertikale turbulente Viskosität	Berechnungsdauer für 500 s
Nr. 3	Fein	10 Pas	19,3 Stunden
Nr. 6	Fein	0,1 Pas	19,3 Stunden
Nr. 7	Fein	0,001 Pas	20,5 Stunden

Abb. 3.104 zeigt einen qualitativen Vergleich der Berechnungsergebnisse mit unterschiedlicher vertikaler turbulenter Viskosität. Die Berechnungen mit 0,1 Pas und 0,01 Pas sehen sich recht ähnlich. Unterschiede sind beim Vergleich zur Rechnung mit 10 Pas zu erkennen.

Ein quantitativer Vergleich der Temperaturen an den Probepunkten findet in Abb. 3.105 bis Abb. 3.108 statt. Die Viskosität zeigt einen moderaten Einfluss auf die Temperaturverteilungen und Schichtungen. Die Berechnungsergebnisse für 0,1 Pas und 0,001 Pas

sind sich wieder relativ ähnlich, der Unterschied zur Rechnung mit 10 Pas ist wieder etwas deutlicher. Dieser Einfluss der turbulenten Viskosität ist jedoch je nach Position und Tiefe unterschiedlich, z. B. sinken am Probenpunkt 1 in einer Tiefe von -1,2 m die Temperaturen bei niedrigerer Viskosität langsamer ab als bei höherer Viskosität. Insgesamt kann aber kein klarer Trend benannt werden. Grundsätzlich sollte jedoch davon ausgegangen werden, dass eine niedrigere turbulente Viskosität eher der Realität entspricht.

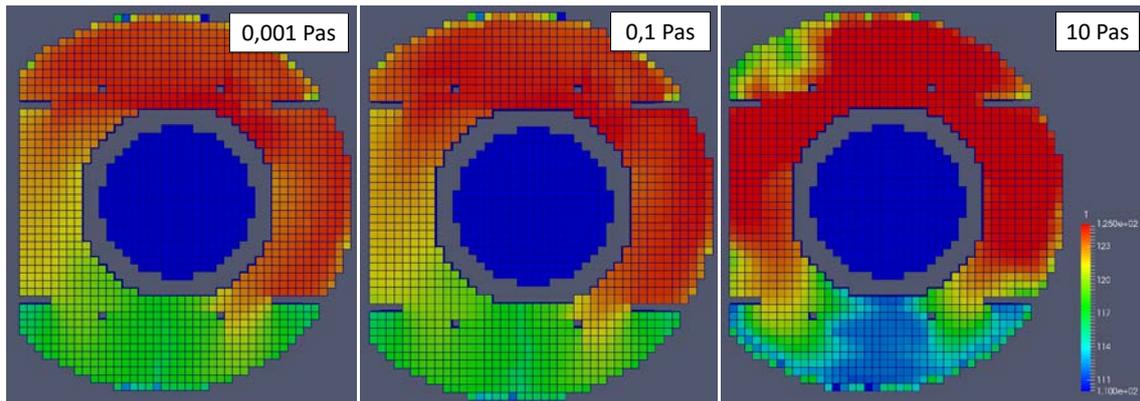


Abb. 3.104 CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: $t = 800$ s, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C

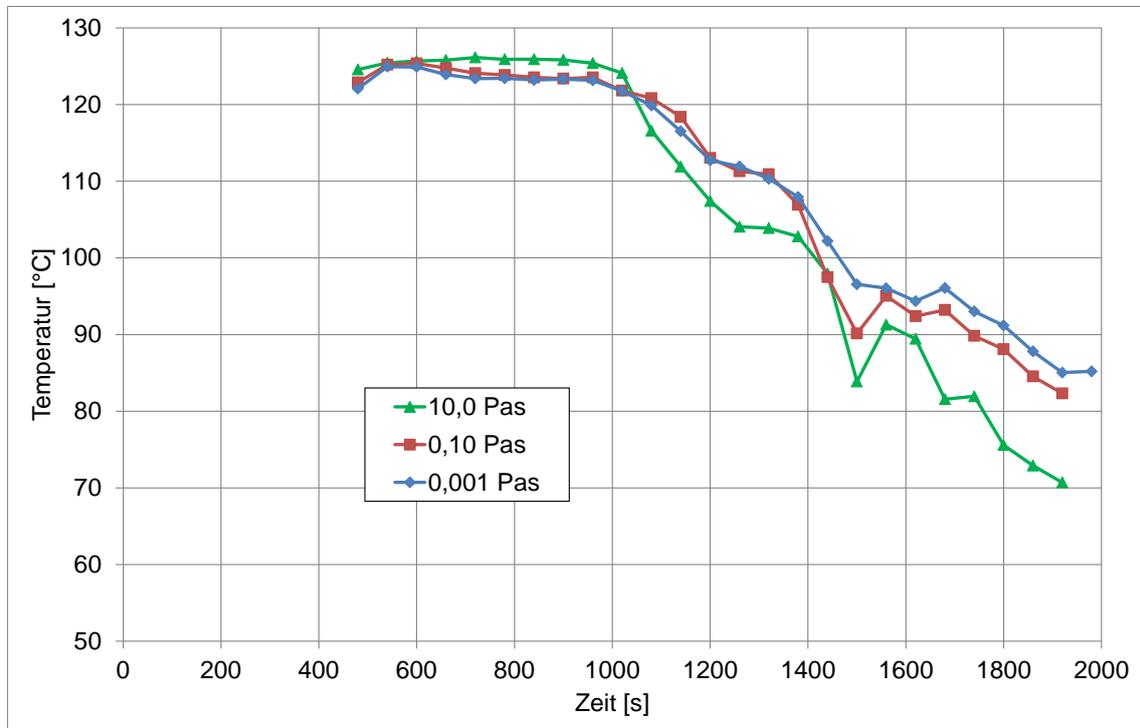


Abb. 3.105 CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m

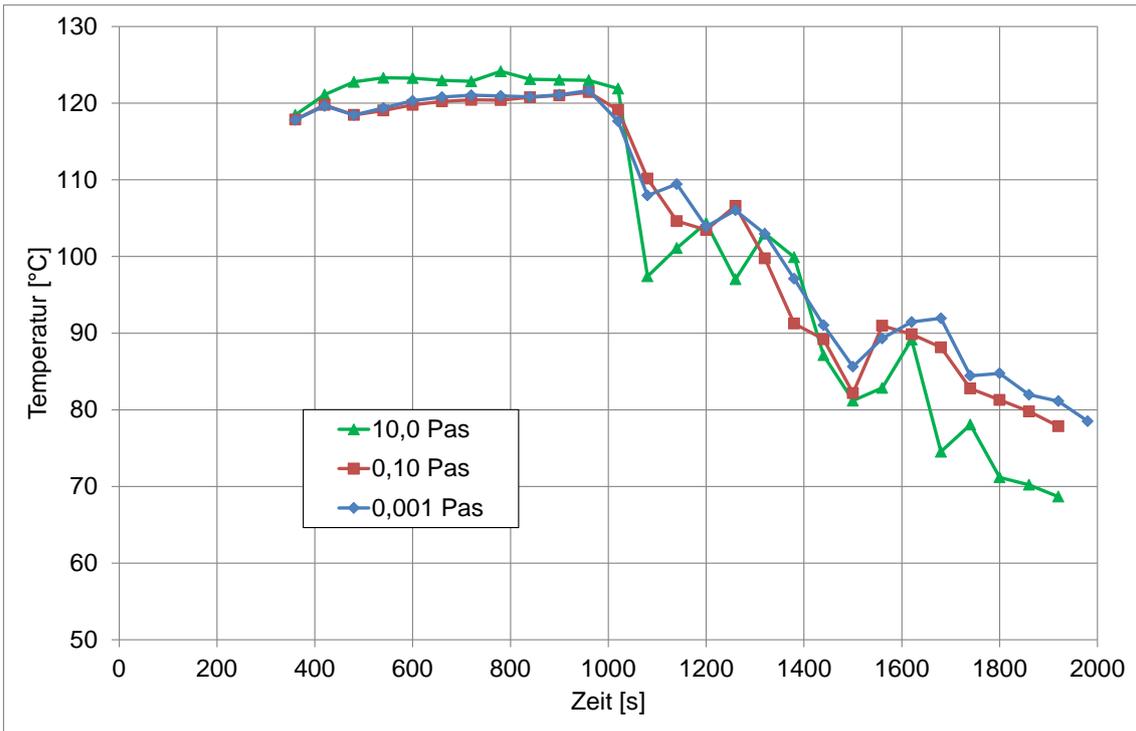


Abb. 3.106 CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,6 m

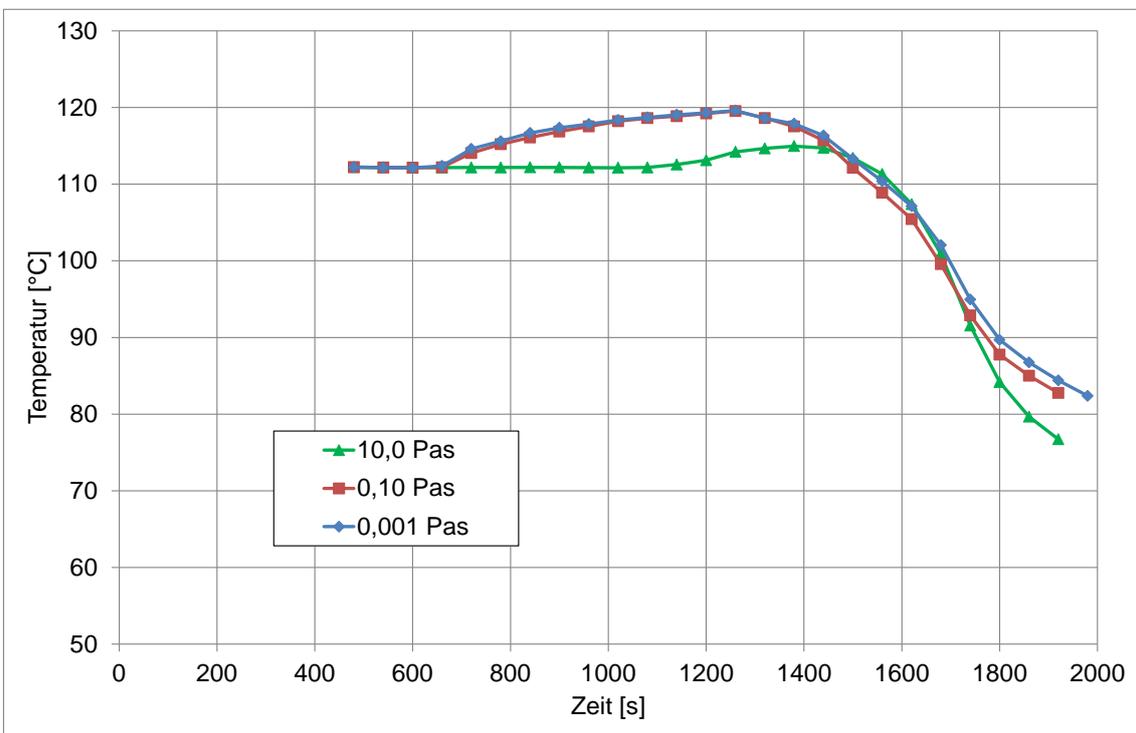


Abb. 3.107 CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m

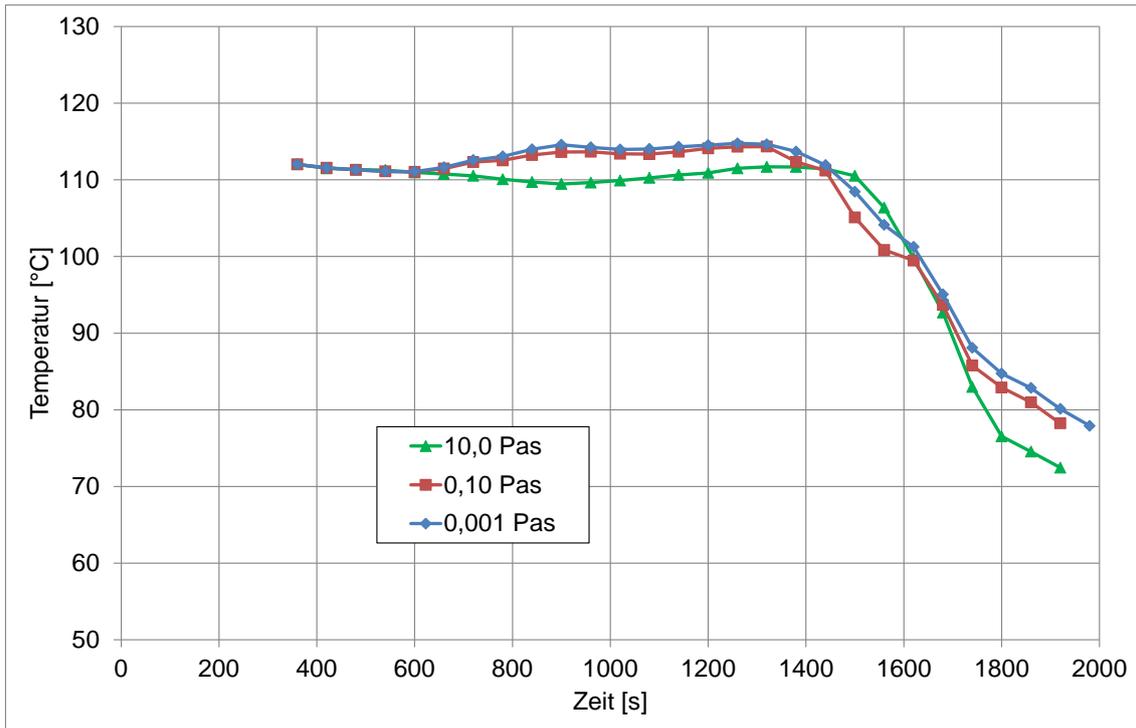


Abb. 3.108 CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,6 m

3.2.5.4 Vergleich CoPool mit CFX

Zur weiteren Absicherung der Berechnung sollen die CoPool-Ergebnisse mit einer CFX-Rechnung verglichen werden. Die CFX-Geometrie und Rechnung umfasst nur den Sumpfbereich, in den dann das Wasser eingespeist wird. Die Rechnung beginnt erst bei 309 s, da vorher auch noch kein CoPool-Sumpf besteht. Das Gitter hat insgesamt 489 604 (unstrukturierte) Elemente, ist also deutlich feiner als das CoPool Gitter (siehe Abb. 3.109). Die Einspeisestelle ist an derselben Position wie die Haupteinspeisung der CoPool-Rechnung (siehe Pfeil in der Abbildung). Sie hat einen rechteckigen Querschnitt von 0,5 m x 0,5 m, also so groß wie bei der CoPool-Rechnung mit feinem Gitter. Im Unterschied zu CoPool fällt hier das Wasser aber von oben auf den sich langsam füllenden Pool. Dazu kommt es im Einlaufbereich zu Verwirbelungen und einem Luftmitriss in das Wasser. Frühere Untersuchungen legen aber nahe, dass diese komplexen Strömungsverhältnisse aber auch von CFX im Detail nicht richtig wiedergegeben werden können. Hier gibt es also auch bei CFX noch Unsicherheiten. In CFX wird eine Multiphase-Rechnung (Luft / Wasser) mit einem SST-Turbulenzmodell berechnet. Das Schichtungsverhalten basiert auf dem Dichteunterschied von warmem und kaltem Wasser. Im Gegensatz zu CoPool rechnet CFX nicht mit einer Shallow-Water-Equation. An der Oberfläche des Wasserpools bilden sich Wellen.

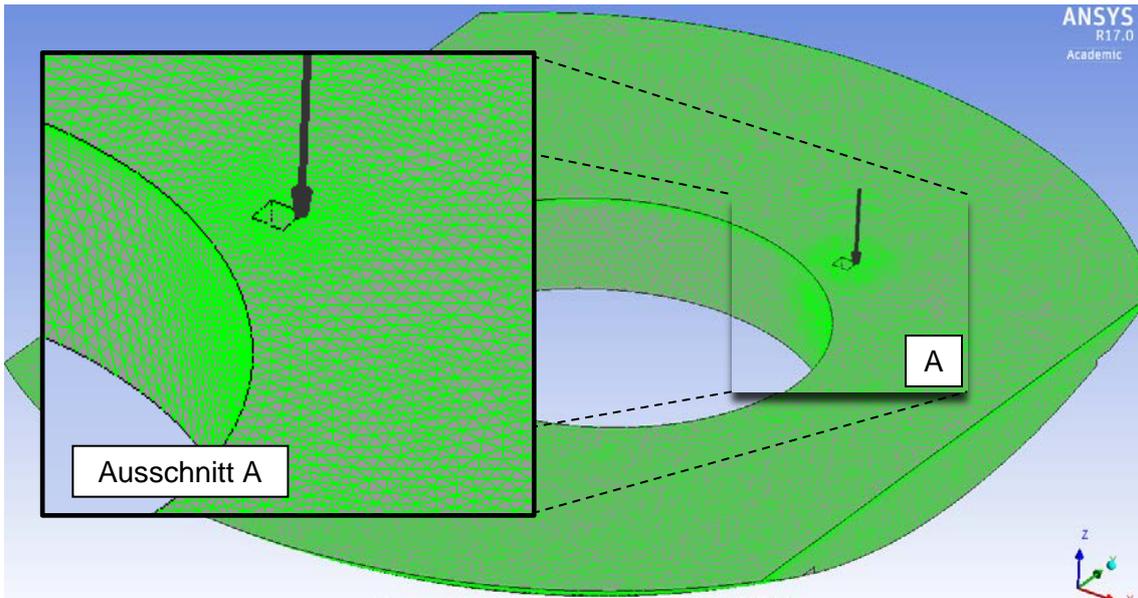


Abb. 3.109 CFX-Geometrie und Gitter

Für den Vergleich werden drei der bisherigen CoPool-Rechnungen mit unterschiedlicher Gitterfeinheit und unterschiedlicher vertikaler turbulenter Viskosität verwendet (siehe Abb. 3.104). Abb. 3.110 zeigt einen ersten qualitativen Vergleich von CoPool (Rechnung Nr. 7, feines Gitter, turbulente Viskosität 0,001 Pas) mit der CFX-Rechnung. Grob ist die Verteilung ähnlich, auch wenn die Ausbreitung von warmem Wasser im Detail etwas anders aussieht.

Tab. 3.9 Berechnungsparameter für den Vergleich mit CFX

Rechnung	Gitter	Vertikale turbulente Viskosität	Berechnungsdauer für 500 s
Nr. 2	Grob	10 Pas	11,3 Stunden
Nr. 3	Fein	10 Pas	19,3 Stunden
Nr. 7	Fein	0,001 Pas	20,5 Stunden
Nr. 8 (CFX)	Fein	Werte berechnet (ca. 0,001 Pas)	25,6 Stunden (6 CPUs)

In Abb. 3.111 bis Abb. 3.114 sind die Temperaturverläufe an den Probestellen dargestellt. Insgesamt passen die Werte der CoPool-Rechnung mit feinem Netz und niedriger vertikaler turbulenter Viskosität am besten zu den CFX-Werten. Dieses sollte auch die realistischste CoPool-Rechnung der Fall sein, da ein feines Netz für einen kleinen numerischen Fehler sorgt und die niedrige Viskosität eher den realen Bedingungen entspricht. Auch die CFX-Rechnung kann nicht alle Aspekte realistisch berechnen (Einströmung, Luftmitriss etc.). Von daher ist die Übereinstimmung der beiden Rechnungen gut.

Am weitesten von den CFX-Werten entfernt ist die CoPool-Rechnung mit grobem Gitter und hoher Viskosität.

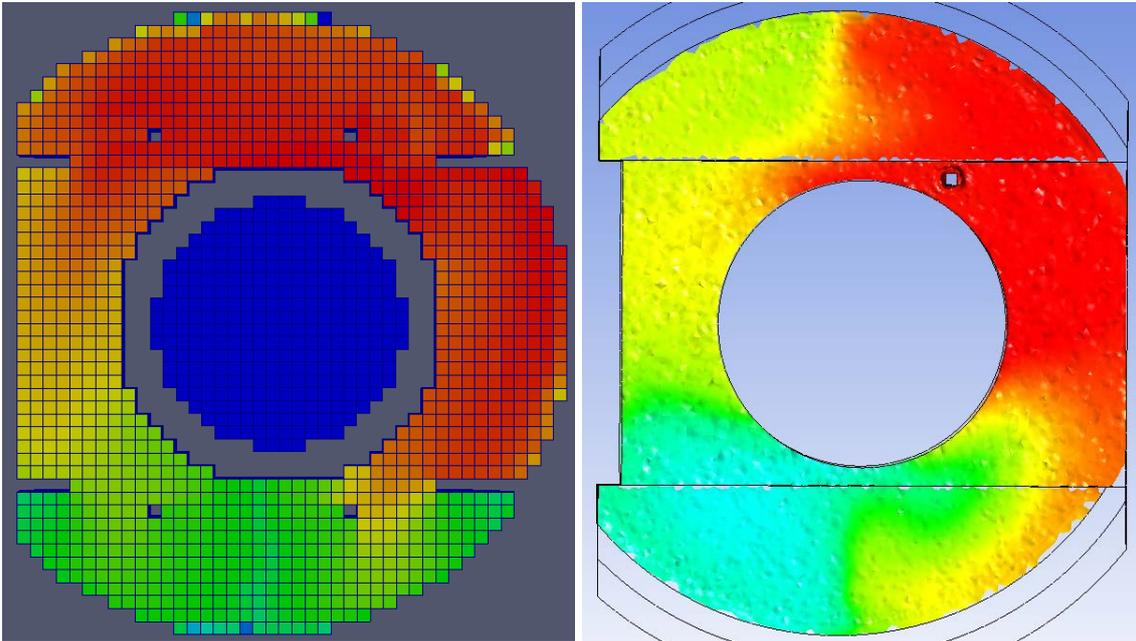


Abb. 3.110 Vergleich von CoPool- (links) und CFX-Ergebnissen (rechts) bei $t = 800$ s (Temperaturskala von 110 – 125 °C)

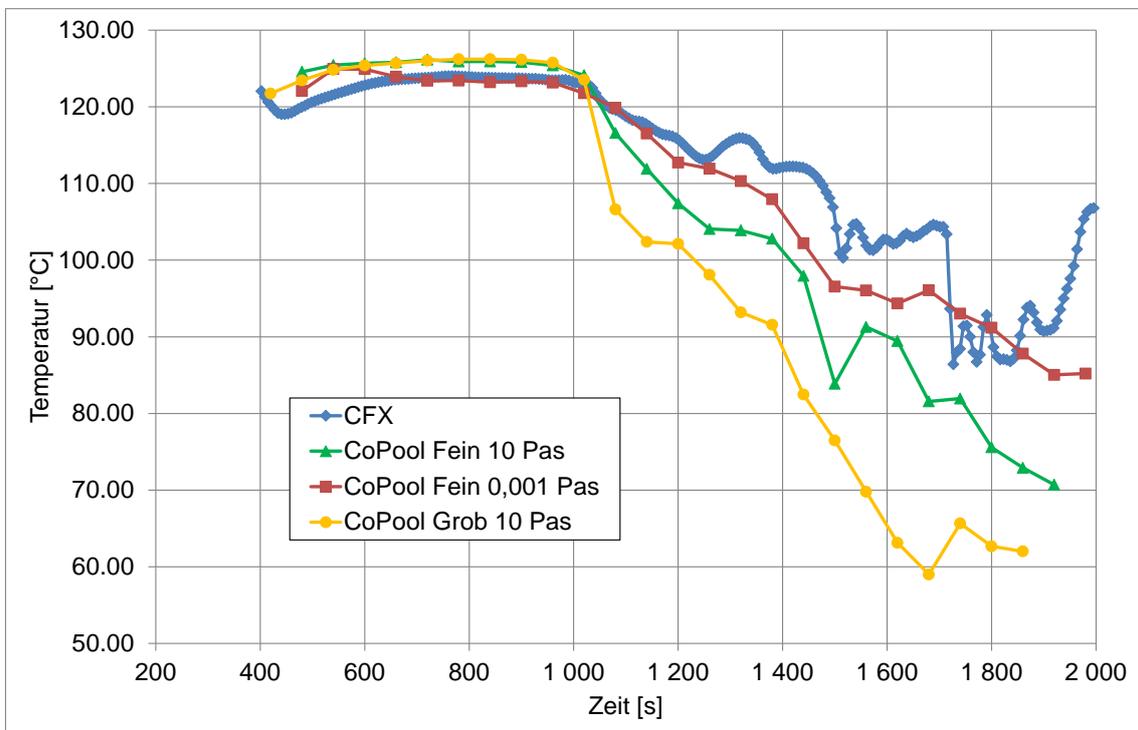


Abb. 3.111 CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1.2 m)

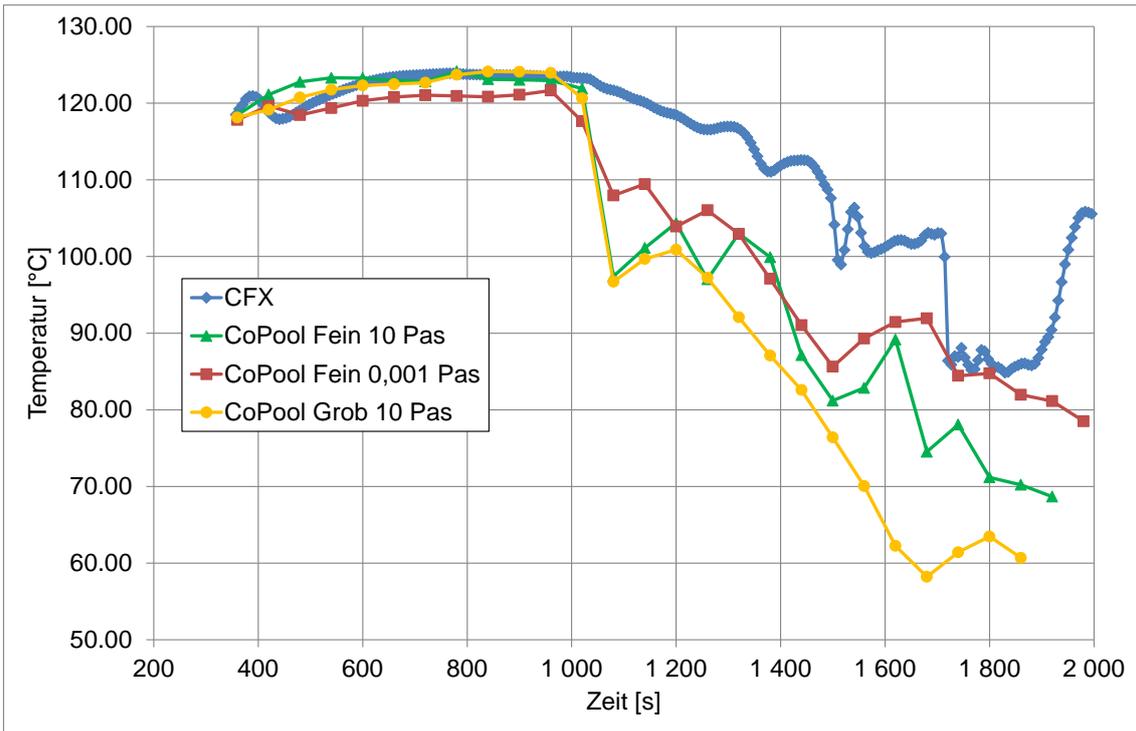


Abb. 3.112 CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1.6 m)

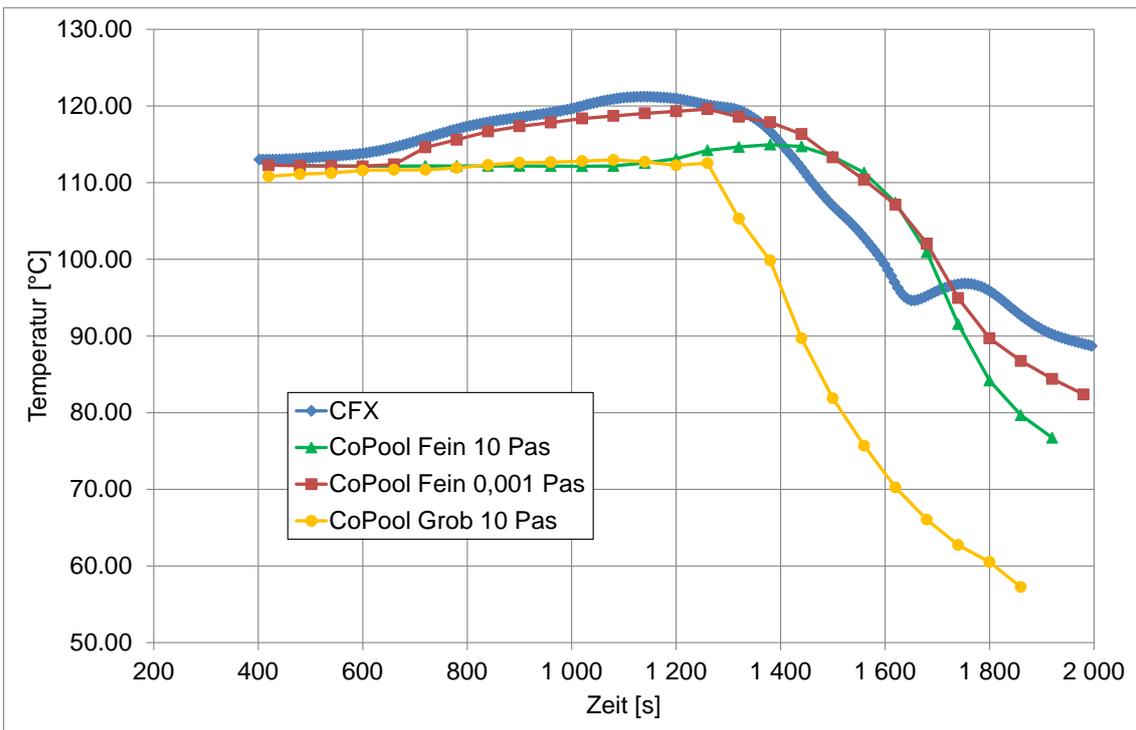


Abb. 3.113 CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1.2 m)

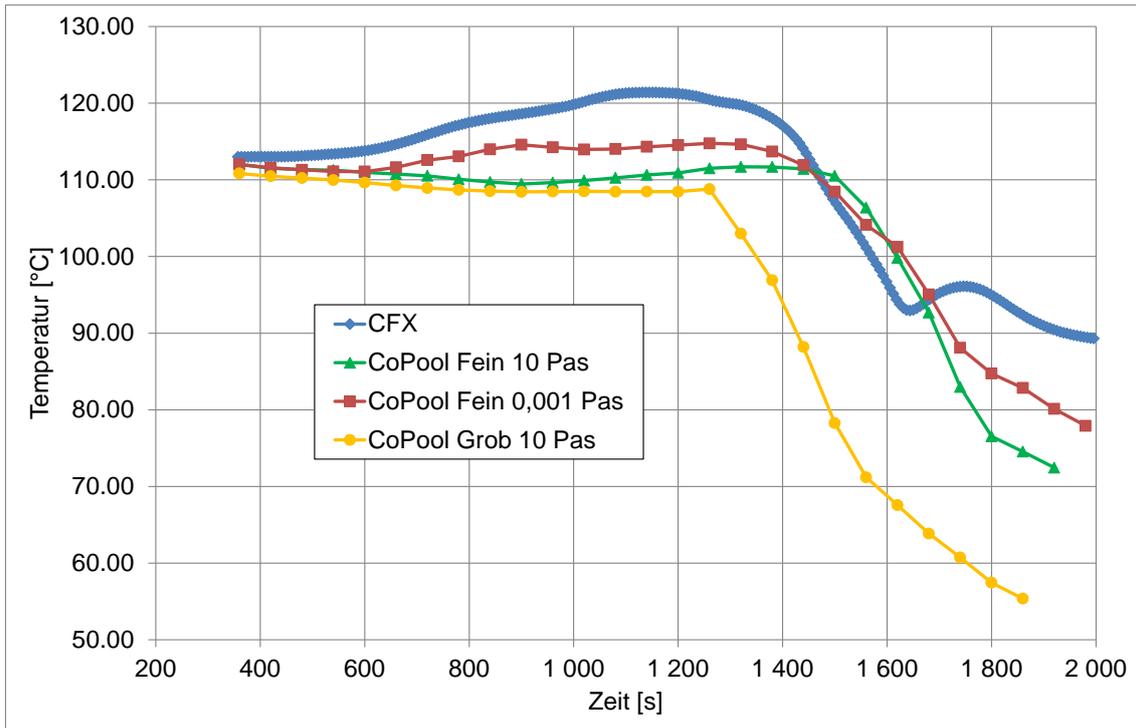


Abb. 3.114 CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1.6 m)

3.2.5.5 Fazit

In Tab. 3.10 sind noch einmal alle Rechnungen mit ihren Parametern und den Berechnungsdauern aufgeführt. Graphisch werden diese Zeiten dann auch noch in Abb. 3.115 dargestellt.

Insbesondere die Gitterfeinheit hat einen starken Einfluss auf die Rechenzeiten. Eine Halbierung der Seitenlänge von 1,0 m auf 0,5 m führt aber zu viermal mehr Elementen. In Abb. 3.116 ist dargestellt, wie sich die Berechnungszeit in Abhängigkeit von der Elementzahl verhält. Hier zeigt sich ein Proportionalitätsfaktor von etwas über 1. Dieses ist aber für CFD-Simulationen ein typischer Wert. Hier muss eine Abwägung getroffen werden zwischen Rechenzeiten und numerischer Genauigkeit. Die vorliegende Arbeit gibt einen ersten Hinweis zu dem Fehler, der bei einem größeren Gitter auftritt.

Die Zeitschrittstudie hat gezeigt, dass eine Vergrößerung der maximalen Zeitschrittweite zu deutlich schnelleren Rechenzeiten bei nur moderatem Einfluss auf die Berechnungsergebnisse führt. Auch hier kann die vorliegende Studie nur einen ersten Hinweis geben, im Zweifelsfall sollte eine Zeitschrittstudie durchgeführt werden, um zwischen Genauigkeit und Schnelligkeit abzuwägen. Damit zeigt CoPool sowohl beim Gitter wie auch bei den Zeitschritten CFD-typisches Verhalten.

Die Variation der turbulenten Viskosität hat nahezu keinen Einfluss auf die Rechenzeiten. Sie beeinflusst aber die Berechnungsergebnisse deutlich. Es kann davon ausgegangen werden, dass eine niedrige vertikale turbulente Viskosität von etwa 0,001 Pas am ehesten zu einem realistischen Ergebnis führt. Dafür sprechen unter anderem die Ergebnisse der Validierung an der GES-Wanne [Fre12], wie auch der Vergleich mit CFX-Rechnungen. Trotz bestehender Modellunterschiede zeigte sich sowohl in der CFX-Rechnung wie auch in der CoPool-Rechnung eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Berechnungsergebnisse.

Tab. 3.10 Überblick über die Parameterstudie

Rechnung	Max. Zeitschritt	Gitterfeinheit	Turbulente Viskosität	Berechnungsdauer für 500 s
Nr.1	0,05 s	Fein (0,5 x 0,5 x 0,2 m)	10 Pas	61,5 Stunden
Nr.2	0,05 s	Grob (1,0 x 1,0 x 0,2 m)	10 Pas	11,3 Stunden
Nr. 3	0,20 s	Fein (0,5 x 0,5 x 0,2 m)	10 Pas	19,3 Stunden
Nr. 4	0,10 s	Grob (1,0 x 1,0 x 0,2 m)	10 Pas	8,0 Stunden
Nr.5	0,20 s	Grob (1,0 x 1,0 x 0,2 m)	10 Pas	4,3 Stunden
Nr.6	0,20 s	Fein (0,5 x 0,5 x 0,2 m)	0,1 Pas	19,3 Stunden
Nr.7	0,20 s	Fein (0,5 x 0,5 x 0,2 m)	0,001 Pas	20,5 Stunden
Nr. 8	CFX	Fein	Werte berechnet (ca. 0,001 Pas)	25,6 Stunden (6 CPUs)

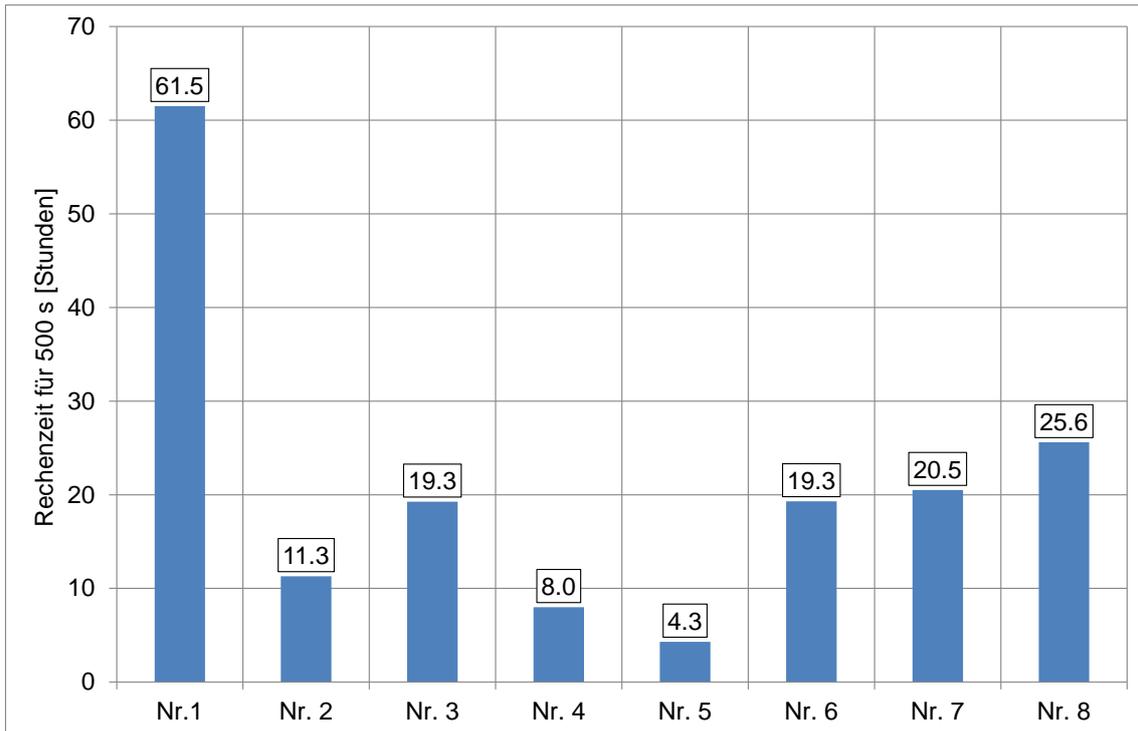


Abb. 3.115 CoPool: Vergleich der Rechenzeiten für die unterschiedlichen Simulationen

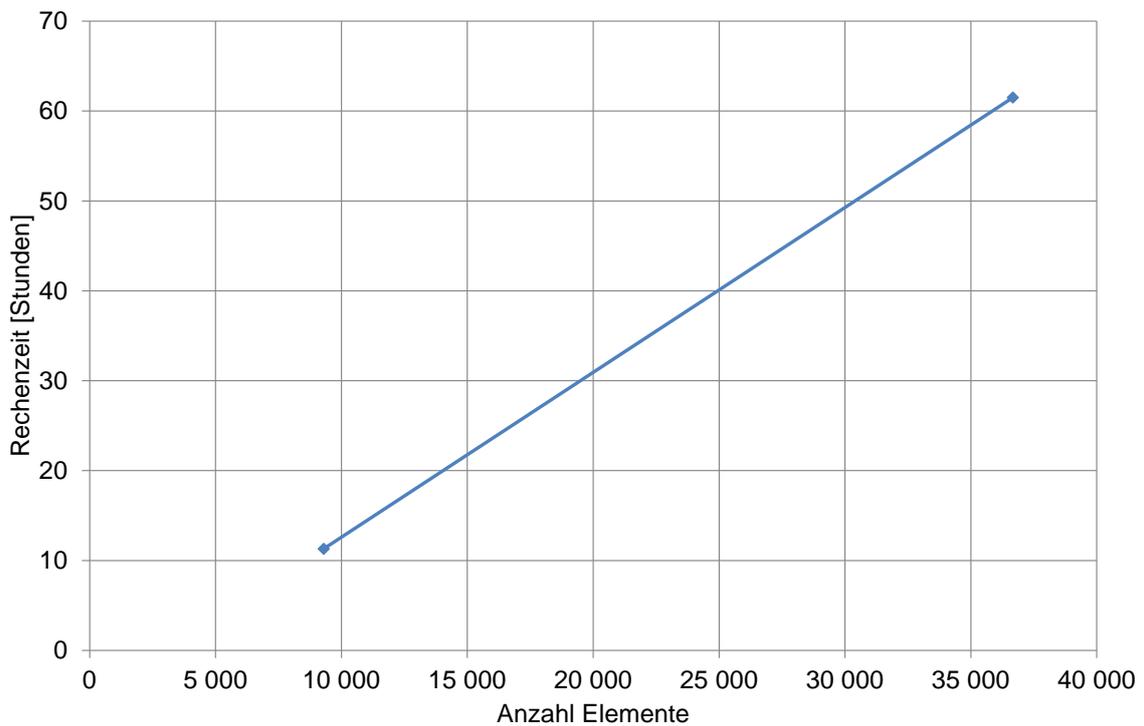


Abb. 3.116 CoPool: Abhängigkeit der Berechnungsdauer (für 500 s Problemzeit) von der Anzahl der Gitterelemente

4 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit COCOSYS

Zielsetzung der Arbeiten war es, die Auswirkungen der Unsicherheiten von einzelnen Eingabeparametern in ausgewählten Modellen von COCOSYS auf die Unsicherheit des Rechenergebnisses zu untersuchen. Dazu wird das GRS-Programm SUSANA /KLO 15/ verwendet. Mit Hilfe solcher Unsicherheitsanalysen erhält man zusätzliche Angaben darüber, welche der Unsicherheiten, z. B. individuelle Modellunsicherheiten im Rechenprogramm oder Rand- und Anfangsbedingungen, am meisten zur Ergebnisunsicherheit beitragen. Damit ist ein Bewertungskriterium für die Planung zukünftiger analytischer und experimenteller Forschungsaktivitäten zur effizienten Verbesserung der Modelle hinsichtlich der Aussagesicherheit von Rechenprogrammen gegeben. Zudem können wertvolle Anwenderempfehlungen für die Wahl einzelner Eingabeparameter abgeleitet werden.

Die nachfolgend dokumentierten Analysen konzentrierten sich einerseits auf das COCOSYS Modul CCI (ehemals MEDICIS) zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und andererseits auf die Modellierung der Iod-Chemie mittels COCOSYS AIM (Wiederholung einer SUSANA am Beispiel des Experimentes Phebus FPT-1).

4.1 COCOSYS Modul CCI zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung

Die vorliegende Untersuchung verfolgt das Hauptziel, eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (UaSA) mit dem CCI-Modul in COCOSYS für die Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in einer Reaktorgrube durchzuführen. Mit der Analyse sollten konsistente Ergebnisse für zwei verschiedene MCCI-Experimente erhalten werden, wobei z. B. grundsätzlich unterschiedliche Beheizungsverfahren der Schmelze eingesetzt werden. Die prototypische Simulation Nachzerfallsleistung der Spaltprodukte in einer Kernschmelze durch innere Beheizung der (Simulat-)Schmelze gilt als eine der anspruchsvollsten technischen Anforderungen in MCCI-Experimenten. Zurzeit sind verschiedene Beheizungsverfahren bekannt und drei davon wurden bereits in MCCI-Experimenten eingesetzt. Dies ist die direkte elektrische Beheizung, die elektromagnetische Induktionsheizung und die Beheizung durch chemische Reaktionen. Diese Beheizungstechniken zeichnen sich durch individuelle Vor- und Nachteile aus.

Im Rahmen dieser UaSA wird die GRS-Methode SUSA angewendet, die von der SUSA-Software /KLO 15/ unterstützt wird. Diese UaSA wurde in den folgenden zwei Arbeitsschritten durchgeführt:

- **Erster Arbeitsschritt:** UaSA für das 2-D MCCI-Experiment CCI-3 mit rein oxidischer Schmelze und mit direkter elektrischer Beheizung aus der OECD-CCI-Testreihe
- **Zweiter Arbeitsschritt:** UaSA für das 2-D MCCI-Experiment MOCKA5.7 mit geschichteter Schmelzekonfiguration (Oxid/Metall) aus der MOCKA-Testserie. Dieses Experiment wurde beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) mit Eisen- und Aluminiumoxidschmelzen (Beheizung durch chemische Reaktionen) sowie mit silikatischem Beton durchgeführt.

Zielsetzungen der UaSA waren:

- Ermittlung von Unsicherheitsaussagen hinsichtlich des (95% / 95%)-Toleranzintervalls für ausgewählte Rechenergebnisse des CCI-Modules in COCOSYS und
- Ermittlung unsicherer Eingabeparameter, die den größten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten Rechenergebnisse des CCI-Modules haben.

Die Ergebnisse der Analyse sind in /BAK 18/ ausführlich dokumentiert und werden nachfolgend zusammengefasst wiedergeben.

4.1.1 Randbedingungen der Unsicherheitsanalysen

Zu Beginn der UaSA wurde für jedes Experiment eine Liste mit potentiell unsicheren Parametern, Anfangs- und Randbedingungen sowie Modellparametern des CCI-Moduls in COCOSYS erstellt. Diese Liste enthält Daten zur Parameteridentifikation, Unsicherheitsbereiche sowie Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion, die auf Auswertungen des aktuellen Stands der Technik, empirischen Erkenntnissen aus früheren Validierungsarbeiten sowie Expertenschätzungen basieren. Enthalten sind neben den Unsicherheitsbereichen die Referenzwerte, die für die Referenzrechnung verwendet wurden, d. h. unter Verwendung der im CCI-Modul verfügbaren Standardwerte (defaults) für die Modellparameter und die Referenzwerte für die Anfangs- und Randbedingungen. Die Liste für jedes Experiment ist in einem GRS-Bericht dargestellt /BAK 18/. Variationen von Parameterwerten wurden von der SUSA-Software nach dem Zufallsprinzip und unter Verwendung der definierten Wertebereiche und Verteilungsfunktionen erzeugt. Die unsicheren Parameter, Anfangsbedingungen sowie Modellparameter des CCI-Moduls

Modellparameter wurden in fünf Gruppen unterteilt. Besondere Aufmerksamkeit galt der Festlegung der empirischen Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen Beton/Schmelze und der Betonzerstörungstemperatur, für die nach Maßgabe der Auswertung der aktuell verfügbaren Kenntnisse eine besondere Betrachtung erforderlich ist.

Für das erste MCCI-Experiment OECD CCI-3 ist darauf hinzuweisen, dass sich zu Beginn der trockenen Phase der Beton-Schmelze-Wechselwirkung eine Kruste an der Schmelzeoberfläche gebildet hatte. Vor der Wassereinspeisung in die Kaverne versagte die Kruste, indem eine Lanze in den Schmelzepool eingeführt wurde, damit das Wasser mit der darunterliegenden Schmelze in Kontakt kommen konnte.

Für das zweite Experiment wurden die Unsicherheitsbereiche und Wahrscheinlichkeitsverteilungen in enger Übereinstimmung mit den für das erste Experiment zugrunde gelegten Annahmen festgelegt, mit Ausnahme der Parameter, zu denen detaillierte Informationen für MOCKA-Experimente verfügbar sind.

Zusätzlich zu den potentiell unsicheren Parametern, ausgedrückt durch bedingte Verteilungen, wurden auch abhängige Modellparameterpaare identifiziert und ihre Abhängigkeit mittels Korrelationskoeffizienten quantifiziert. Für jedes Experiment der vorliegenden UaSA wurden jeweils 100 Rechnungen gemäß Empfehlung in /WLK 42/ mit dem CCI-Modul in COCOSYS durchgeführt /BAK 18/.

In den beiden Analysen wurden die folgenden relevanten CCI-Ergebnisgrößen (Code-Rechenergebnisse) für die Auswertung mit Hilfe der SUSA-Software ausgewählt:

- Erosionstiefe in axialer Richtung;
- Erosionstiefe in radialer Richtung;
- Volumen des erodierten Betons;
- Temperatur der Oxidschicht;
- Temperatur der Metallschicht;
- Krustendicke an der Schmelzeoberfläche.

4.1.2 Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen

Zur Auswertung der Gesamtunsicherheit der Rechenergebnisse, die mit dem CCI-Modul in COCOSYS erzielt wurden, wurden zweiseitige statistische Toleranzgrenzen (95%

Wahrscheinlichkeit / 95% Vertrauensniveau) verwendet. Die zeitlichen Verläufe des Unsicherheitsbereichs der ausgewählten Ergebnisgrößen als obere und untere Grenzkurven der statistischen Toleranzintervalle (95% / 95%) für das Experiment OECD CCI-3 sind in /BAK 18/ dargestellt.

Abb. 4.1 zeigt beispielsweise den Vergleich des zeitlichen Verlaufs der (95% / 95%) statistischen Toleranzgrenzen mit dem experimentellen Wert des Erosionsvolumens (blauer Punkt) für das Experiment OECD CCI-3 und mit der Referenzkurve (schwarze Kurve). Der maximale Wert des Erosionsvolumens laut Referenzrechnung beträgt $0,103 \text{ m}^3$ (103 Liter) während das nach dem Versuch abgeschätzte Erosionsvolumen bei $0,116 \text{ m}^3$ (116 Liter) liegt. Basierend auf der Unsicherheitsanalyse wird festgestellt, dass bei mindestens 95 % Vertrauensniveau mindestens 95 % der Ergebnisse für das erodierte Betonvolumen infolge des kombinierten Einflusses aller quantifizierten Unsicherheiten innerhalb des statistischen Toleranzintervalls zwischen $0,0086$ and $0,164 \text{ m}^3$ liegen, d. h. in der Größenordnung von etwa 9 bis 164 Liter. Es ist daher festzustellen, dass der Unsicherheitsbereich des maximalen Erosionsvolumens bei $0,103_{-0,094}^{+0,061} \text{ m}^3$ liegt, bezogen auf den berechneten Referenzwert.

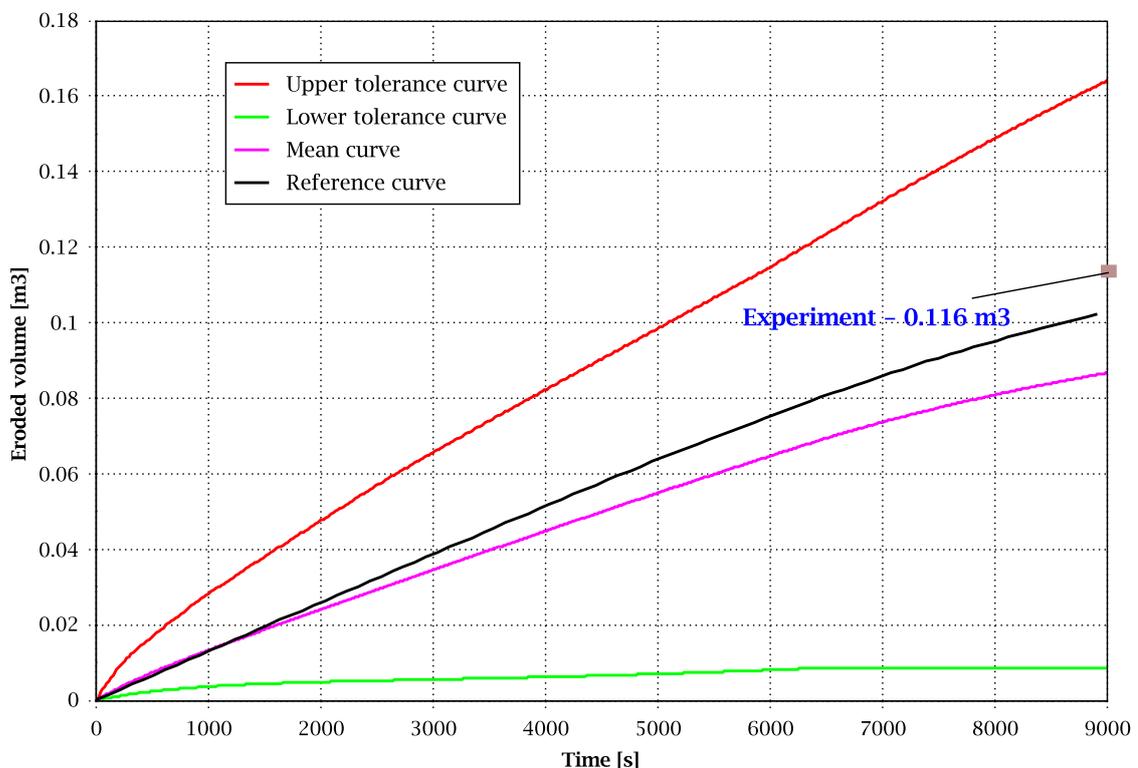


Abb. 4.1 UaSA zu OECD CCI-3: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit dem nach dem Versuch abgeschätzten Wert und mit der Referenzkurve für das Erosionsvolumen

Der zeitliche Verlauf der zweiseitigen Toleranzgrenzen (95% / 95%) des Erosionsvolumens für das Experiment MOCKA5.7 ist in Abb. 4.2 dargestellt. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass bei mindestens 95 % Vertrauensniveau mindestens 95 % der Ergebnisse für das erodierte Betonvolumen infolge des kombinierten Einflusses aller quantifizierten Unsicherheiten innerhalb des Toleranzintervalls zwischen $0,05 \text{ m}^3$ (50 Liter) und $0,16 \text{ m}^3$ (160 Liter) liegen. Das maximale Erosionsvolumen laut Referenzrechnung beträgt $0,062 \text{ m}^3$ (62 Liter). Das für das Experiment abgeschätzte Erosionsvolumen ist $0,054 \text{ m}^3$ (54 Liter). Abb. 4.2 zeigt, dass unter Berücksichtigung der ausgewählten unsicheren Parameter das (95% / 95%)-Toleranzintervall des maximalen Erosionsvolumens $0,062^{+0,1}_{-0,012} \text{ m}^3$ umfasst, verglichen mit dem Referenzwert.

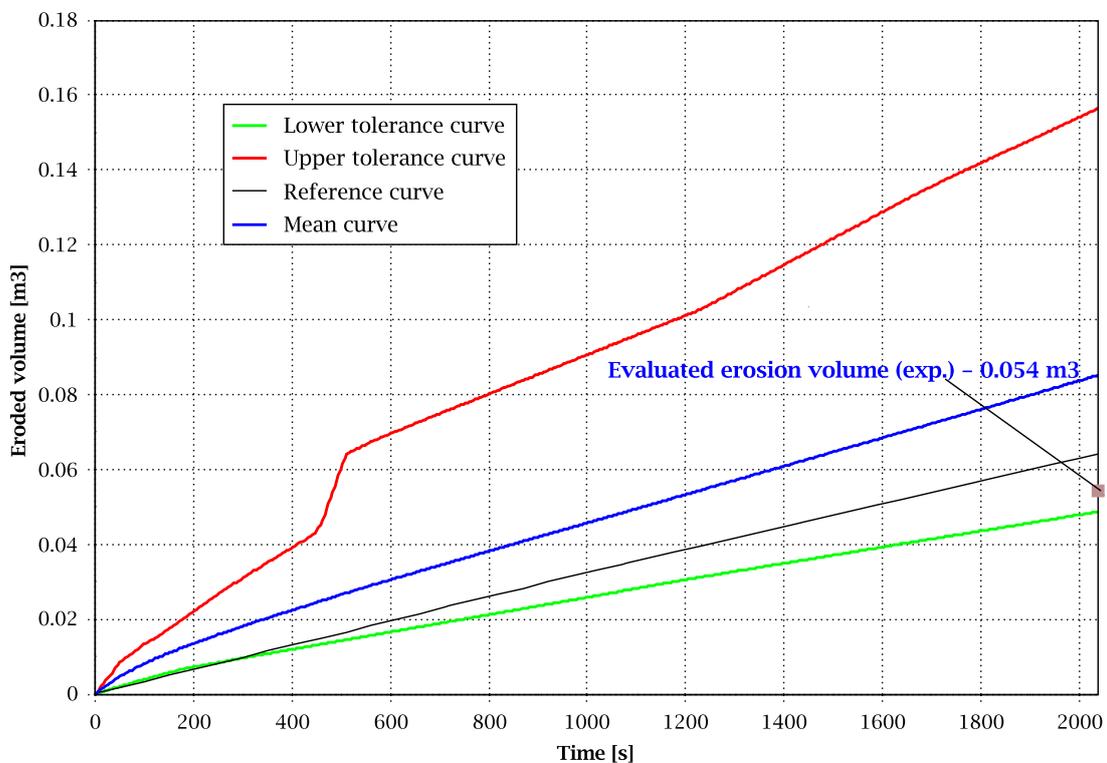


Abb. 4.2 UaSA zu MOCKA5.7: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit dem für den Versuch abgeschätzten Wert und mit der Referenzkurve für das Erosionsvolumen

Die zweiseitigen Toleranzgrenzen (95 %/95 %) der maximalen berechneten Oxidtemperatur innerhalb der untersuchten Zeitspanne von 9000 s für das Experiment OECD CCI-3 sind in Abb. 4.3 dargestellt. In Bezug auf die Oxidtemperatur wird festgestellt, dass das (95% / 95%)-Toleranzintervall zum Zeitpunkt 6400 s, d. h. kurz vor der Wassereinspeisung in die Kaverne, im Bereich von $1485 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $2035 \text{ }^\circ\text{C}$ liegt. Die maximale Variation der Schmelztemperatur (zwischen der unteren und oberen Toleranzgrenze) kurz vor

der Wassereinspeisung liegt in der Größenordnung von 550 °C. Dies bestätigt die Schlussfolgerungen aus früheren parametrischen Untersuchungen, die im Rahmen der internationalen Benchmark-Aktivitäten mit unterschiedlichen Rechenprogrammen durchgeführt wurden. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass zwischen der Referenz- und der Mittelwertkurve eine gute Übereinstimmung besteht, was darauf schließen lässt, dass der Unsicherheitsbereich symmetrisch um den Referenzwert verteilt ist.

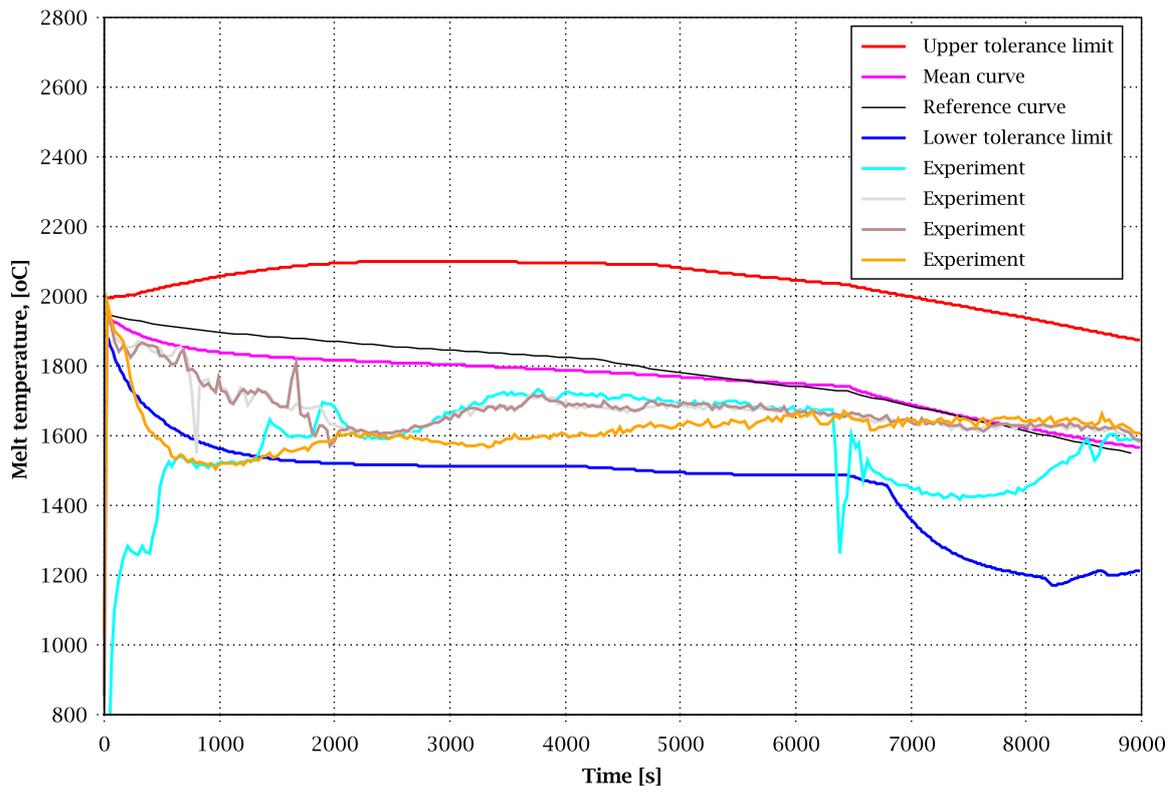


Abb. 4.3 UaSA zu OECD CCI-3: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit den für den Versuch gemessenen Werten und mit der Referenzkurve für die Oxidtemperatur

Abb. 4.4 zeigt die (95% / 95%) obere und untere zweiseitige Toleranzgrenze der Oxidtemperatur innerhalb des untersuchten Zeitbereichs von 2040 s für das Experiment MOCKA5.7. Das (95% / 95%) Toleranzintervall für die Oxidtemperatur liegt im Bereich von 1330 °C bis 1834 °C. Dies bedeutet, dass die maximale Variationsbandbreite bei 100 alternativen Verläufen der Oxidtemperatur in der Größenordnung von 500 °C liegt. Die Unsicherheitsbreite der Oxidschmelztemperatur beträgt $1790^{+44,0}_{-460,0}$ °C, bezogen auf den berechneten Referenzwert.

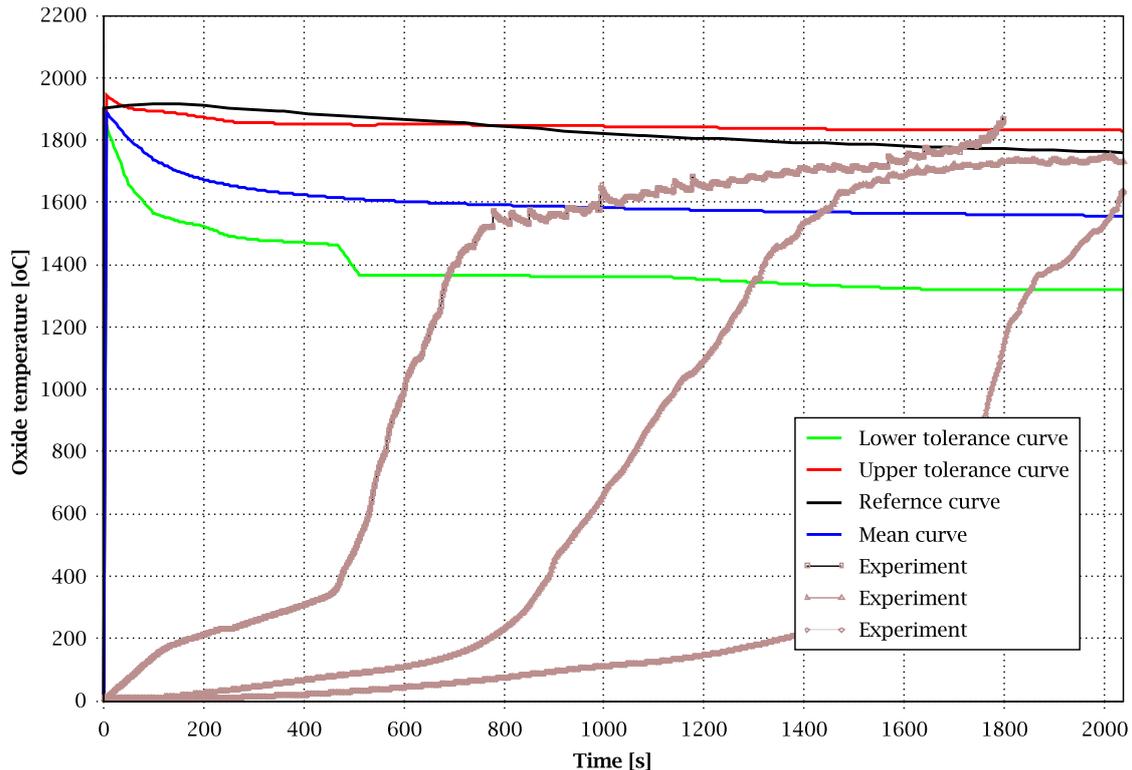


Abb. 4.4 UaSA zu MOCKA5.7: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit den im Versuch gemessenen Werten mit der Referenzkurve für die Temperatur der Oxidschicht

4.1.3 Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen

Für die Sensitivitätsanalyse wurden verschiedene Sensitivitätsmaße verwendet, inklusive der standardisierten Regressionskoeffizienten (SRC), um den Beitrag der einzelnen unsicheren Parameter zur Gesamtunsicherheit der ausgewählten Ergebnisgrößen zu bestimmen. Zusätzlich wurden auch die Korrelationsverhältnisse als Sensitivitätsmaß angegeben, die die Ergebnisse der anderen Sensitivitätsmaße bezüglich der wichtigsten unsicheren Eingabeparameter bestätigten. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zeigen eine hohe Aussagekraft der Sensitivitätsmaße, was sich im hohen Wert des Bestimmtheitsmaßes (R^2 -Wert) ausdrückt.

Basierend auf der Auswertung der Sensitivitätsmaße wurde festgestellt, dass die folgenden 5 Eingabeparameter den größten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten Ergebnisgrößen (COCOSYS-Rechenergebnisse) haben:

- Zerstörungsenthalpie des Betons;
- Zerstörungstemperatur des Betons;

- Effektiver Wärmeübergangskoeffizient für die axiale Richtung nach unten;
- Effektiver Wärmeübergangskoeffizient für die seitliche (radiale) Richtung;
- Effektiver Wärmeübergangskoeffizient für die axiale Richtung nach oben.

In den beiden Analysen wurde die berechnete Zeitspanne des entsprechenden Experiments in zwei Phasen unterteilt, um den zeitlichen Verlauf der Sensitivitätsmaße besser zu analysieren. Die erste Phase ist die "transiente Phase", die beim Experiment OECD CCI-3 ca. 1500 s dauert. Danach beginnt die „quasistationäre Phase“, die durch das Gleichgewicht zwischen den Wärmeverlusten aus der Schmelze und der inneren Leistung gekennzeichnet ist.

Abb. 4.5 zeigt den zeitlichen Verlauf der Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaß der unsicheren Parameter für das Erosionsvolumen in OECD CCI-3 (Arbeitsschritt 1). Das Sensitivitätsmaß zeigt, dass am Anfang der transienten Phase die Betonzerstörungstemperatur einen schwachen Einfluss auf das Erosionsvolumen hat (siehe Parameter №9). Während der quasistationären Phase nimmt jedoch der Beitrag dieses Parameters tendenziell zu, und diese Tendenz verstärkt sich noch mit der Zeit. Bei 6400 s, kurz vor Fluten der Schmelze mit Wasser, liefert Parameter 9, also die Betonzerstörungstemperatur, einen großen Beitrag zur Unsicherheit des Erosionsvolumens (siehe auch Abb. 4.6). Das Vorzeichen ist zu diesem Zeitpunkt negativ, d. h., dass zunehmende Werte der Zerstörungstemperatur abnehmende Werte des Erosionsvolumens zur Folge haben und umgekehrt.

Ferner wird gezeigt, dass der Gesamteinfluss (CC) der effektiven Wärmeübergangszahlen an den Grenzflächen zwischen Schmelze und Beton (Parameter №13, №14 und №15) in Bezug auf das erodierte Betonvolumen ein ziemlich ähnliches Verhalten wie der Parameter №9 aufweist. Abb. 4.5 zeigt, dass während der transienten Phase der Einfluss dieser Parameter, ausgedrückt durch den Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) bei positiven Werten beginnt. Während der quasistationären Phase wechselt der Einfluss der Parameter zu negativen Werten, die mit der Zeit tendenziell zunehmen. Der Hauptgrund dafür ist die Abhängigkeit (absichtlich definiert) der Parameter №13, №14 und №15 von dem Parameter №9 (Zerstörungstemperatur T_{dec}).

Eine ähnliche Tendenz lässt sich auch bei den Korrelationskoeffizienten für das Erosionsvolumen in MOCKA5.7 beobachten. Eine detaillierte Beschreibung der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für MOCKA5.7 ist in /BAK 18/ dargestellt.

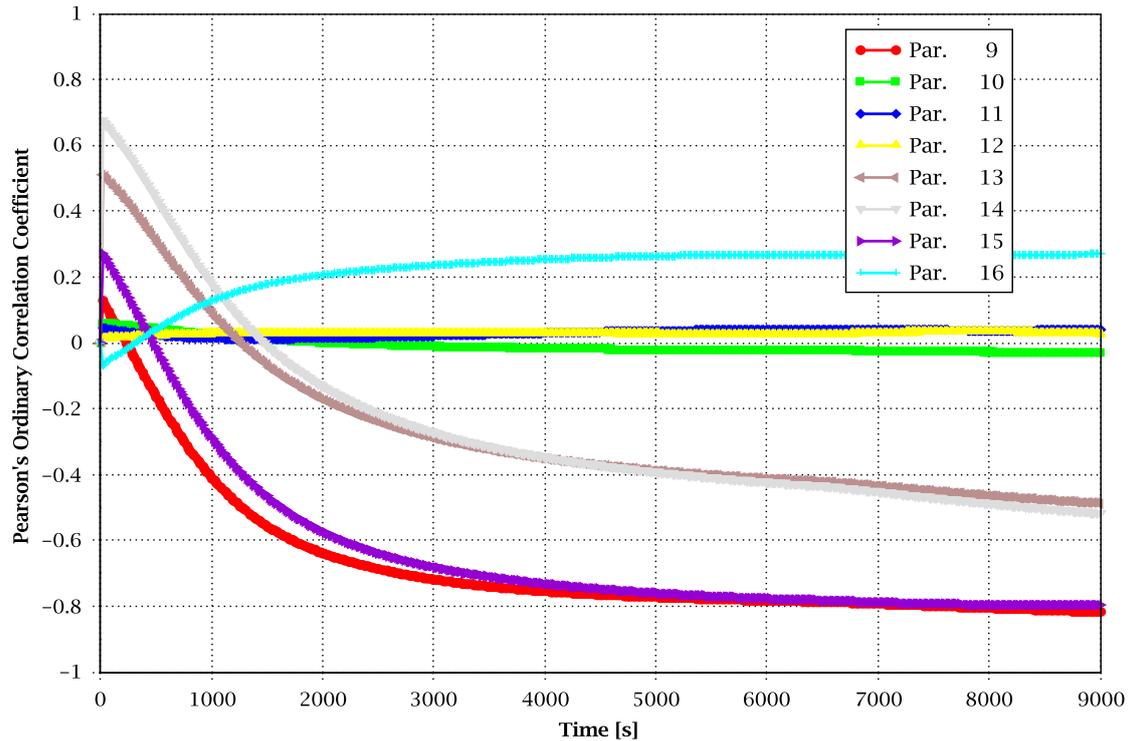


Abb. 4.5 UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der Parameter №9 – 16 für das Erosionsvolumen

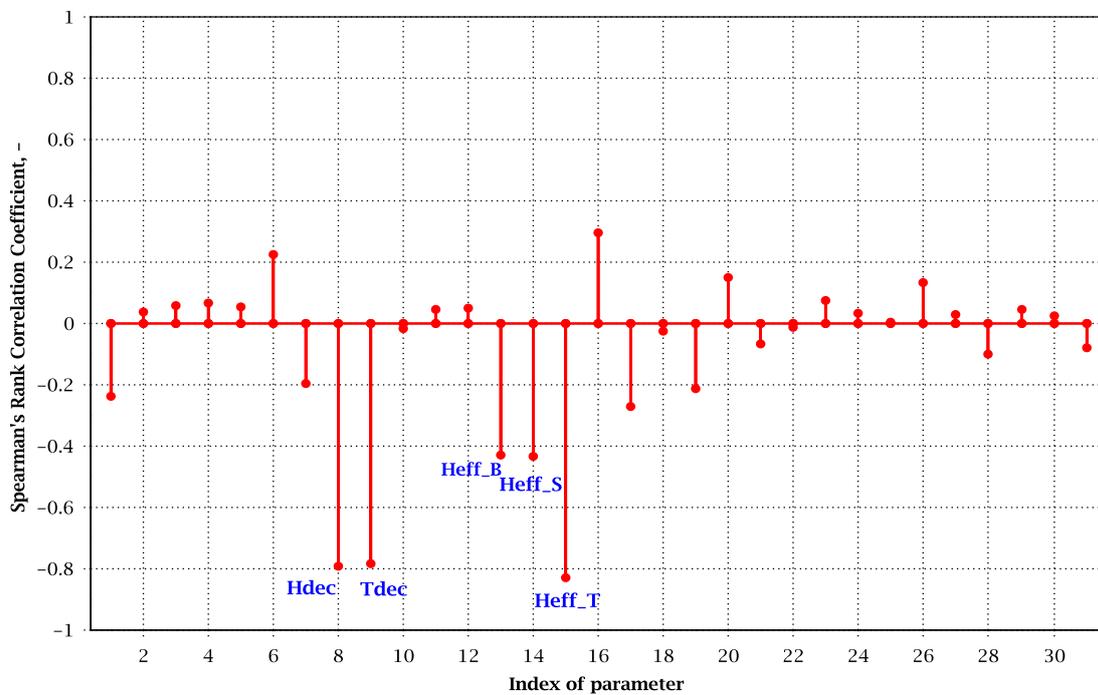


Abb. 4.6 UaSA zu OECD CCI-3: Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für das Erosionsvolumen bei 6400 s

Abb. 4.7 zeigt den zeitlichen Verlauf der standardisierten Rangregressionskoeffizienten (nach Pearson) für das Erosionsvolumen in OECD CCI-3. Die standardisierten Regressionskoeffizienten der Betonzerstörungstemperatur (Par. №9) zeigen ebenfalls einen relativ schwachen individuellen Einfluss (negatives Vorzeichen) der Sensitivitätsmaße auf die Betonerosionstiefe (in axialer Richtung) während der transienten Phase. Danach nimmt der individuelle Einfluss des Parameters mit der Zeit zu, d. h. der absolute Wert der Sensitivitätsmaße nimmt zu. Allerdings schwächt sich diese Tendenz während der quasistationären Phase ab. Das Vorzeichen des Sensitivitätsmaßes bleibt jedoch bis 6400 s negativ (siehe Abb. 4.8). Die Sensitivitätsmaße der Betonzerstörungsenthalpie (Par. №8) sind ähnlich wie diese der Betonzerstörungstemperatur (Par. №9), was auf die starke Abhängigkeit (absichtlich definiert) zwischen den beiden unsicheren Parametern zurückzuführen ist.

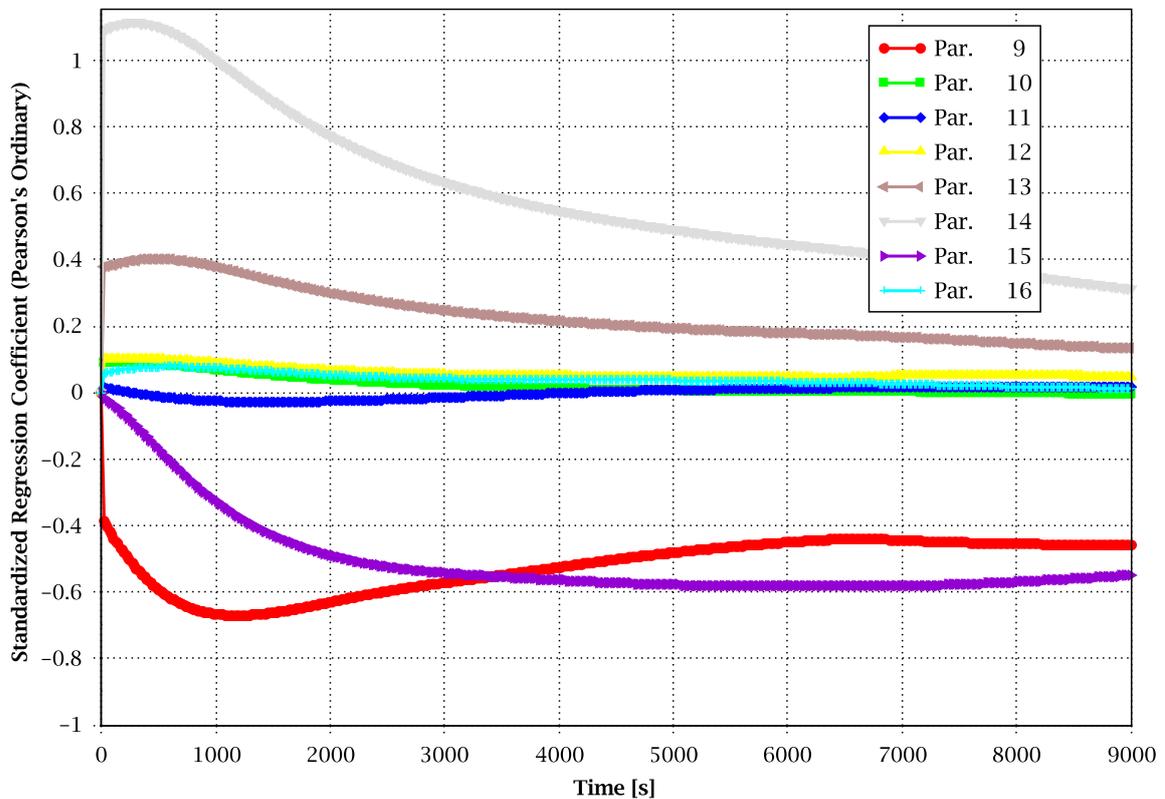


Abb. 4.7 UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße (Parameter №9 – 16) für das Erosionsvolumen

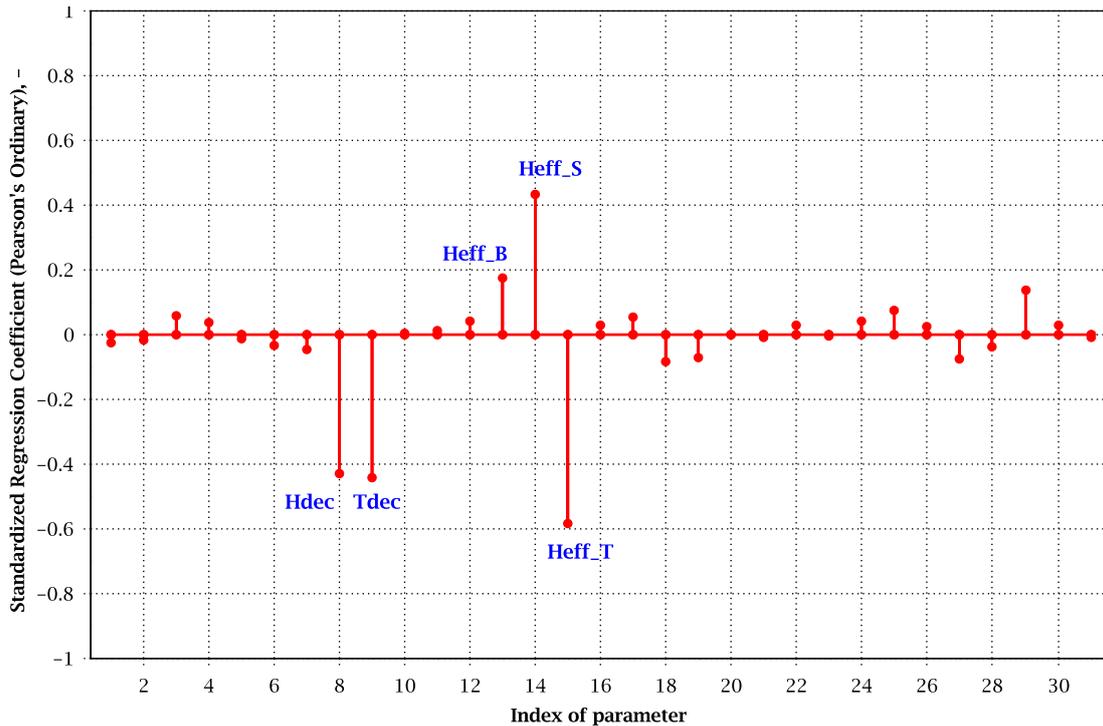


Abb. 4.8 UaSA zu OECD CCI-3: Standardisierte Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für das Erosionsvolumen bei 6400 s

Weiterhin wird auch festgestellt, dass während der transienten Phase die Betonzerstörungstemperatur (Parameter №9) einen schwachen individuellen Einfluss (SRC) auf die Oxidschmelztemperatur hat. Der zeitliche Verlauf der Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) für die Oxidtemperatur in OECD CCI-3 ist in Abb. 4.9 dargestellt. Die Abbildung zeigt jedoch, dass während der quasistationären Phase der individuelle Einfluss des Parameters №9 (positives Vorzeichen) auf die Oxidtemperatur tendenziell zunimmt. Dies ist plausibel, da eine höhere Zerstörungstemperatur eine höhere Oxidtemperatur zur Folge hat. Nach dem die Schmelze mit Wasser geflutet wird, nimmt der individuelle Einfluss des Parameters №9 mit der Zeit deutlich ab.

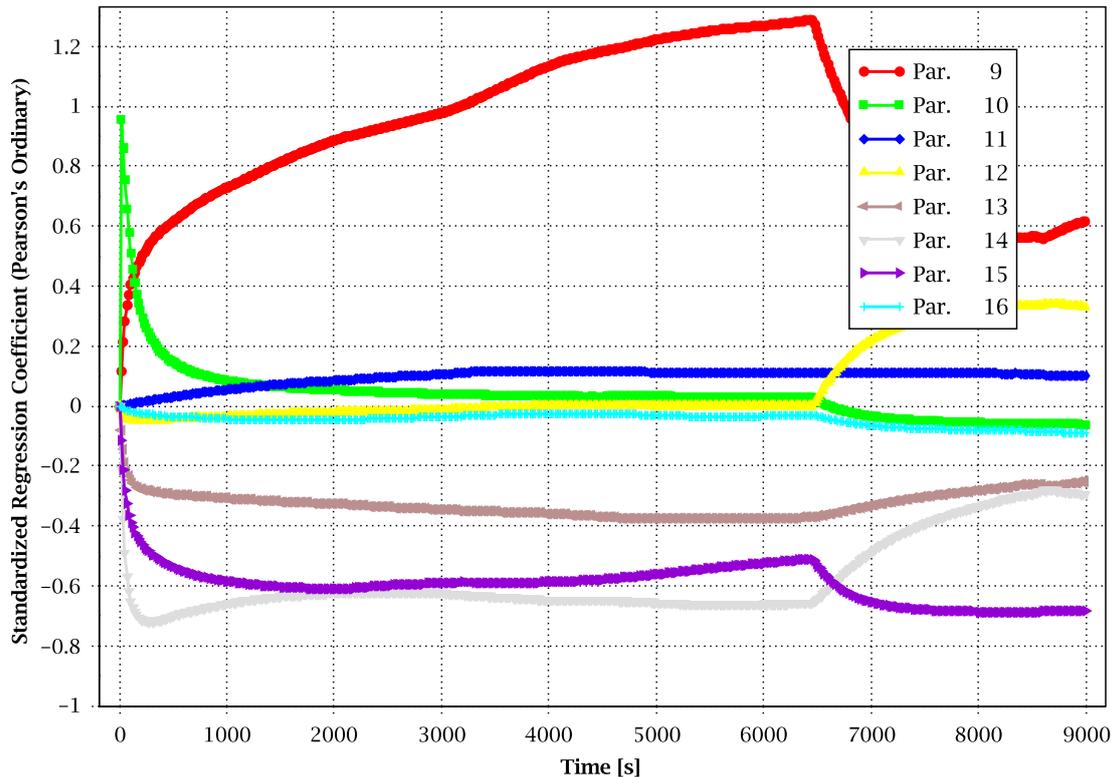


Abb. 4.9 UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße (Parameter №9 – 16) für die Schmelztemperatur

Abb. 4.10 zeigt, welche der spezifizierten unsicheren Parameter am meisten zur Unsicherheit der berechneten Oxidschmelztemperatur bei 6400 s für OECD CCI-3 beitragen. Aufgetragen sind die standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaß für die Oxidtemperatur. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass bei 6400 s die Betonzerstörungstemperatur (Parameter №9) den größten Beitrag zur Unsicherheit der Oxidtemperatur liefert. Das Vorzeichen ist wieder positiv, d. h. zunehmende Werte der Zerstörungstemperatur bewirken tendenziell höhere Oxidtemperaturen und umgekehrt.

Die standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson), d. h. der individuelle Unsicherheitsbeitrag (Abb. 4.9 und Abb. 4.10), bestätigen auch den starken negativen Einfluss der effektiven Wärmeübergangszahlen an den Grenzflächen zwischen Schmelze und Beton bzw. Schmelzeoberfläche (Parameter № 13, 14 und 15) bis zum Zeitpunkt der Wassereinspeisung in die Kaverne (6456 s).

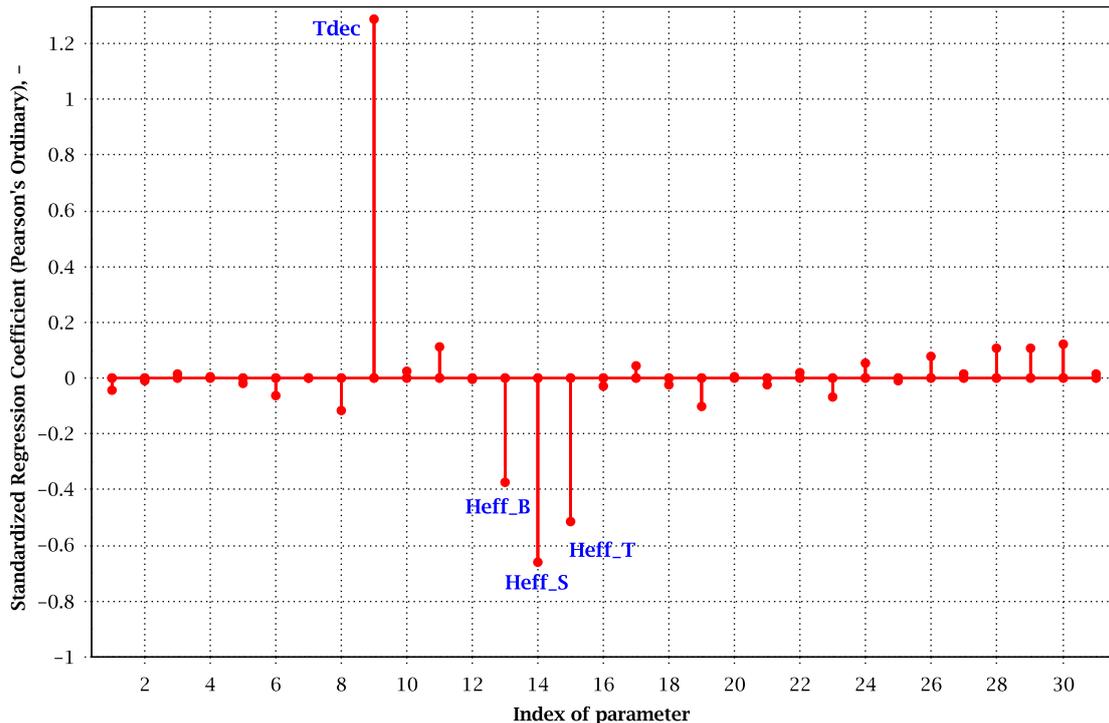


Abb. 4.10 UaSA zu OECD CCI-3: Standardisierte Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für die Oxidtemperatur bei 6400 s

Ähnliche Ergebnisse wurden auch bei der Auswertung der standardisierten Korrelationskoeffizienten hinsichtlich der Schmelztemperatur für MOCKA5.7 festgestellt. Die Sensitivitätsmaße zeigen, dass während der transienten Phase die effektiven Wärmeübergangszahlen an den Grenzflächen zwischen Schmelze und Beton einen starken negativen Einfluss auf die Ergebnisse der Schmelztemperatur haben. Während der quasistationären Phase nimmt der Einfluss dieser Parameter leicht ab, aber das Vorzeichen der Sensitivitätsmaße bleibt bis zum Ende der Rechnung negativ. Eine detaillierte Beschreibung der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für MOCKA5.7 ist in /BAK 18/ enthalten.

4.1.4 Schlussfolgerungen

Die Ergebnisse der UaSA-Analyse für OECD CCI-3 zeigen, dass die statistischen Toleranzintervalle und die Beiträge einzelner unsicherer Eingabeparameter zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse signifikant durch die Modellierung des experimentellen Artefakts von Krustenbildung an der Schmelzeoberfläche beeinflusst werden. Aus der vorliegenden UaSA-Analyse lässt sich auch schließen, dass die

Unsicherheitsbereiche der CCI-Modellierung effektiv durch die Verbesserung des Kenntnisstandes der Betonzerstörungstemperatur reduziert werden können, d. h. durch Eingrenzung des Wertebereichs dieses unsicheren Parameters. In diesem Zusammenhang ist zu berücksichtigen, dass die experimentellen Ergebnisse von MOCKA 5.7 stark auf die Anwendung einer im Vergleich zum bislang verwendeten Wert von 1500 K erhöhten Betonzerstörungstemperatur (ca. 1800 K) im CCI-Modul hindeuten.

- Basierend auf den Sensitivitätsanalysen wurde festgestellt, dass insgesamt 5 unsichere Eingabeparameter einen dominanten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse haben. Der Einfluss der übrigen Eingabeparameter wird als unwesentlich betrachtet (Korrelationskoeffizient $< |0,2|$) und kann daher vernachlässigt werden.
- Die Analyseergebnisse zeigen, dass die Beiträge der Betonzerstörungstemperatur und -enthalpie sowie der Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze (Betonwände und Schmelzeoberfläche) den größten Einfluss auf die ausgewählten Rechenergebnisse haben. Dabei wurde festgestellt, dass der Beitrag der unsicheren Eingabeparameter zur Unsicherheit der ausgewählten Ergebnisgrößen (Code-Rechenergebnisse) von den experimentellen Phasen, d. h. der transienten und quasistationären Phase, signifikant beeinflusst wird.
- Ein wichtiges Ergebnis der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse besteht darin, dass für jedes Experiment alle 100 Rechnungen mit breit angelegter Parametervariation ohne Programmabbruch durchgelaufen sind, was die Robustheit des CCI-Hauptmoduls von COCOSYS demonstriert.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die hier durchgeführten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen eine wichtige Grundlage für eine mögliche dritte UaSA darstellen, die sich auf die Anwendung der SUSA-Software für ein realistisches Unfallszenario in einer Druckwasserreaktoranlage konzentrieren soll.

4.2 COCOSYS AIM-Modul zum Iodverhalten in PHEBUS FPT1

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde zum Abschluss des Vorhabens mit der Wiederholung der Unsicherheits- und Sensitivitätsstudie (UaSA) zum Iodverhalten in PHEBUS FPT1, mit dem speziellen Ziel, NEWAFP zu testen, begonnen. Dazu musste zunächst in mehreren Anläufen eine Best-Estimate-Rechnung erstellt werden, die sich mit den Versuchsergebnissen gut vergleichen lässt. Dies gestaltete sich als schwierig, da in NEWAFP viele neue Iod-Modelle eingeflossen sind, die auch an vielen unterschiedlichen

Einzeltests entwickelt und validiert wurden, aber im Zusammenspiel erstmalig an einem komplexen Integralexperiment getestet wurden. Dabei fielen einige Einzelmodelle besonders auf, die zu einem deutlich von den Experimenten abweichenden Ergebnis führten; zu nennen ist u. a. das neue Silber/Iod-Modell in NEWAFP, das Iod/Stahl-Modell etc. Dies musste durch die Entwickler korrigiert werden.

In Vorbereitung auf die Unsicherheits- und Sensitivitätsstudie zum Iodverhalten in einem Reaktor-Containment mit NEWAFP wurde zunächst eine COCOSYS-AIM-Nachrechnung des PHEBUS-Versuchs FPT1 durchgeführt, deren Ergebnisse nachfolgend zusammengefasst sind. Die Rechnung umfasste neben allen wesentlichen Iodreaktionen auch die Wechselwirkung der Iodchemie mit der Thermohydraulik und dem Aerosolverhalten. Die wichtigsten Iod-Ergebnisvariablen sind die Konzentrationen der luftgetragenen Iod-Spezies I_2 , CH_3I , IO_x und CsI , die den potentiellen Quellterm aus der Anlage bilden.

Aufgrund der Erfahrung aus früheren Arbeiten zu PHEBUS wird das Iodverhalten in FPT1 in einer integralen Rechnung, also inklusive Thermohydraulik und Aerosolphysik, simuliert. Obwohl die Containmentatmosphäre relativ gut durch Naturkonvektion durchmischt war, wird eine Mehrraumrechnung durchgeführt. Die Mehrraum-Nodalisierung erlaubt, die Iodverteilung zwischen dem Condenser, der Behälterwand und dem Sumpf zu analysieren sowie lokale Konzentrationsunterschiede gasförmiger und abgelagerter Iodspezies zu bestimmen. Die Nodalisierung für die Rechnung mit NEWAFP ist angelehnt an die Nodalisierung, die ursprünglich für die UaSA PHEBUS FPT1 /WEB 11/ verwendet wurde.

Die Nodalisierung des PHEBUS-Containments hat 14 Zonen (Abb. 4.11). Zylindrische Zonen sind von kreisringförmigen Zonen umgeben, um die Naturkonvektion mit Gegenströmung vor allem im Bereich des Condensers gut abbilden zu können. Für Iod-Rechnungen konnten bisher zwei oder mehrere thermohydraulische Zonen zu einer sogenannten Iod-Zone zusammengefasst werden. In NEWAFP entfällt dies und die Iod-Nodalisierung umfasst daher genauso viele Zonen wie für die thermohydraulische Modellierung.

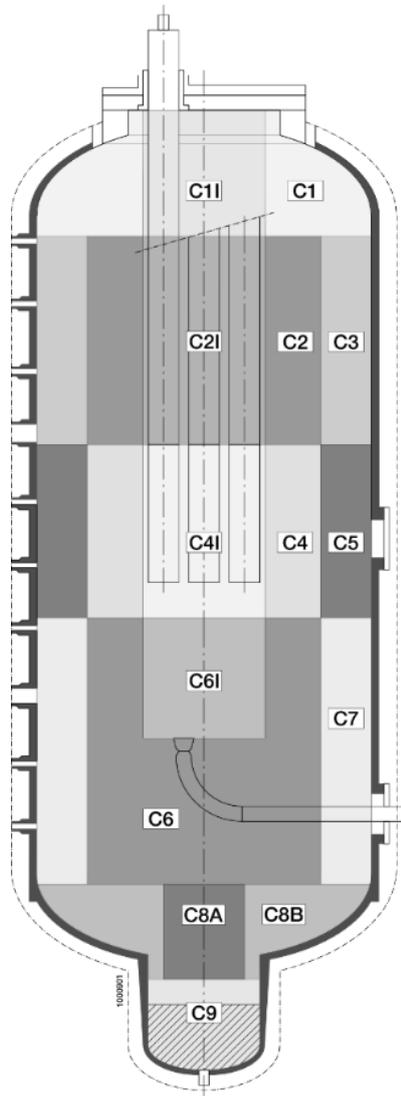


Abb. 4.11 UaSA zu FPT-1: COCOSYS-Nodalisierung des PHEBUS-Containments

Die Einspeisedaten für Dampf, Wasserstoff, CsI und andere SP-Aerosole in das Containment sind in Tab. 4.1 zusammengefasst. Es werden die Aerosolkomponenten CsI, Ag, IO_x, and GENAEROSOL simuliert. In GENAEROSOL sind alle anderen Komponenten, wie SP, Steuerstabmaterial sowie Bündel und Strukturmaterial zusammengefasst.

Die I₂-Einspeisung wird aufgrund einer Abschätzung von IRSN vorgegeben, da die Messung kein eindeutiges Ergebnis lieferte. Die Abschätzung ergab, dass 1,25 % des ins Containment freigesetzten Iods gasförmiges I₂ waren. Es konnte aber nicht geklärt werden, ob das I₂ tatsächlich aus dem Primärkreis und damit aus dem Kern stammt oder ob es erst im Containment gebildet wurde.

Tab. 4.1 Einspeisung von Gas, Iod und Aerosol ins Containment, PHEBUS FPT-1

Einspeisung	Zone	Einspeisezeit [s]	Masse [g]	MMD* [µm]	σ**	Anmerkungen
Dampf	C6I	0 – 18610	2,57·10 ⁴	-	-	
H ₂	C6I	8760 – 14460 und 15380 – 17320	0,101	-	-	Aus der Hüllrohr-Oxidation
N ₂	C6I	8200 – 35220	-1,82·10 ³	-	-	Abzug durch Probenahme
CsI	C6I	10500 – 17522	1,48	1,61	1,9	Aerosol, davon 0,72 g Iod
I ₂	C6I	10500 – 17523	9·10 ⁻³	-	-	Entspricht 1,25 % des gesamten Iods, das ins Containment freigesetzt wurde
Ag	C6I	11040 – 17150	31,9	1,61	1,9	Aerosol, 10 % AgO _x
IO _x	C6I	12810 – Ende der Rechnung	berechnet	0,2	2,0	IO _x berechnet von AIM; Aerosolparameter aus THAI-Experimenten
Restaerosol	C6I	10050 – 17550	75,5	1,61	1,9	Umfasst alle anderen Aerosole SP, Steuerstabmaterial, Bündel und Strukturmaterial etc.

für Aerosole * massengemittelter Median-Durchmesser, ** Standardabweichung

Zum Ende des Vorhabens ist es gelungen, die Best-Estimate-Rechnung zufriedenstellend durchzuführen und auszuwerten. Im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen und auch mit den COCOSYS-AFP-Rechnungen zeigen die COCOSYS-NEWAFP-Ergebnisse eine gute Übereinstimmung.

Abb. 4.12 zeigt die gemessenen I₂-Konzentrationen und die mit COCOSYS-AFP (Legende: AFP) und mit COCOSYS-NEWAFP (Legende: current) gerechneten gasförmigen I₂-Konzentrationen. Am Anfang des Versuchs (Konzentrationsspitze) ist ausschließlich das aus dem Primärkreis direkt eingespeiste I₂ im Containment vorhanden, das sind 1,25 % des gesamten freigesetzten Iods. Dieses lagert sich schnell auf den Oberflächen ab. Im weiteren Verlauf wird durch Radiolyse im Containmentsumpf neues I₂ gebildet, und es stellt sich mit den Abbaureaktionen in der Gasphase (I₂-Ablagerung, I₂/Ozon) ein Gleichgewicht ein. Nach dem Abwaschen des elliptischen Bodens steigt die Konzentration in der Gasphase wegen der höheren I⁻-Konzentration im Sumpf. Die alten und neuen

COCOSYS Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung. Dass die Ergebnisse der neuen Rechnung (blaue Kurve) etwas oberhalb und damit näher an den Messwerten liegen, ist den neuen Modellen in COCOSYS-AIM geschuldet. Die Rechenergebnisse zeigen allerdings auch, dass die Konzentration nach der Wash-Down-Phase (Beginn $t = 250000$ s; Dauer 21 min) auch mit NEWAFP weiterhin überschätzt wird.

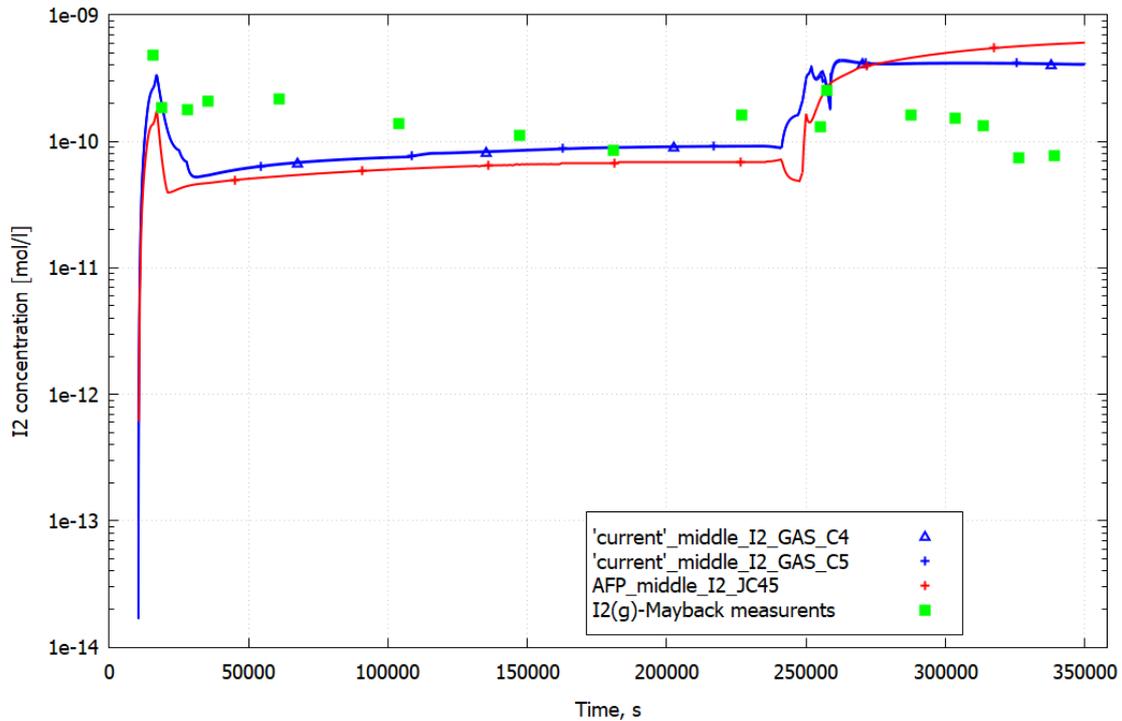


Abb. 4.12 UaSA zu FPT-1: I₂-Konzentration im Containment

Abb. 4.13 zeigt die IO_x-Konzentration und Csl-Konzentration im Containment. Es sind nur fünf Messwerte verfügbar. Insbesondere nach dem Abwaschen lässt sich der gerechnete Konzentrationsverlauf nicht überprüfen. Die gemessene und berechnete Csl-Aerosolkonzentration zeigt, dass sich das aus dem Primärkreis eingespeiste Csl schnell ablagert.

Der Verlauf der Organoiod-Konzentration ist in Abb. 4.14 dargestellt. Die Übereinstimmung der Rechen- mit den Messwerten ist generell gut, nur die gemessene Konzentrationsspitze am Anfang des Versuchs wird nicht wiedergegeben. Auch hier passen die Rechnung mit AFP und NEWAFP (Legende: current) sehr gut zusammen.

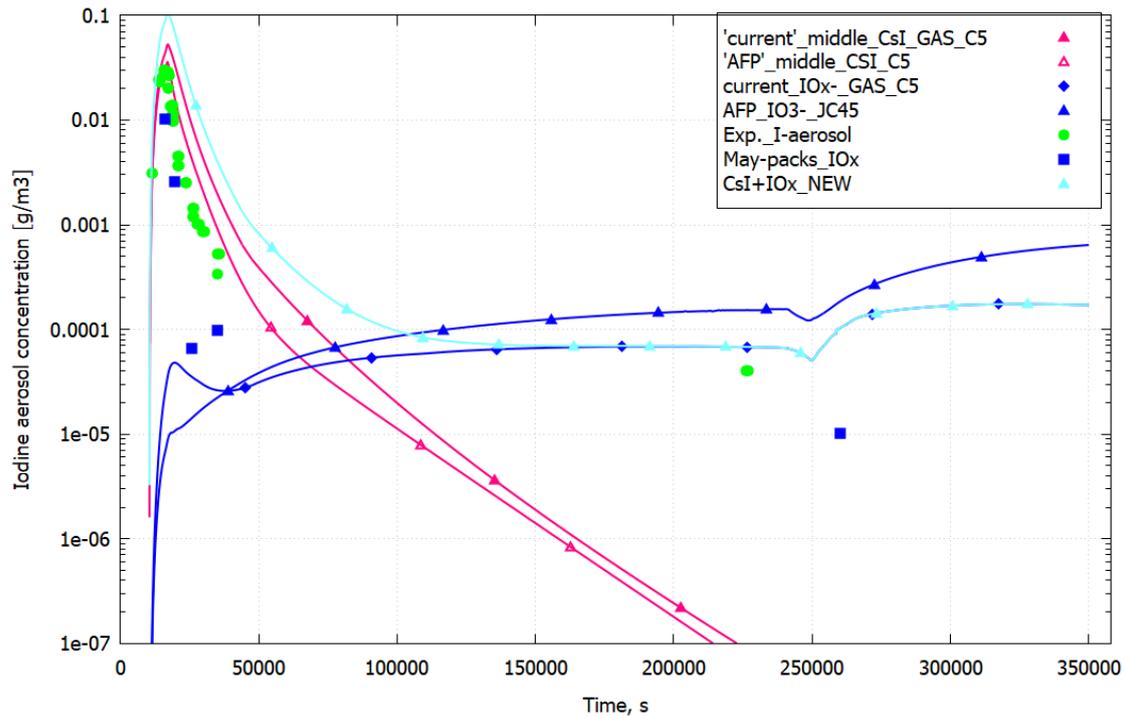


Abb. 4.13 UaSA zu FPT-1: Gemessene und berechnete CsI- und IO_x-Aerosolkonzentrationen

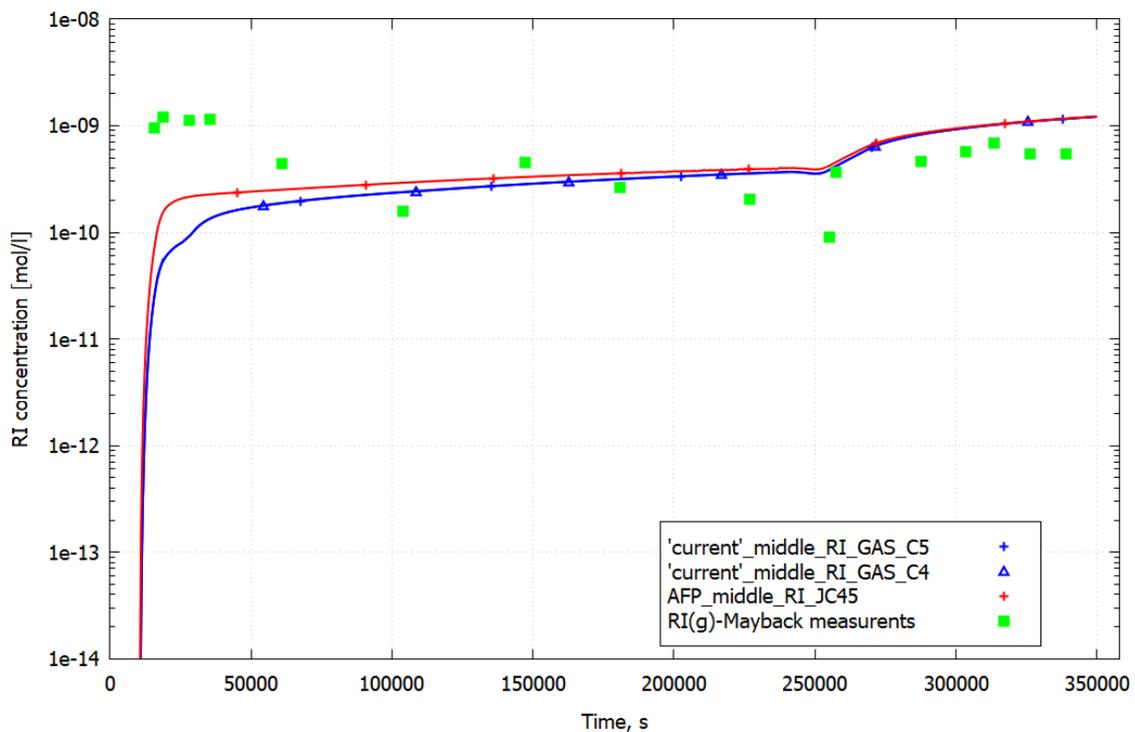


Abb. 4.14 UaSA zu FPT-1: Organoiod-Konzentration im Containment

Abgelagertes Iod wurde nur am nassen Kondensator gemessen (vgl. Abb. 4.15). Die Messung mit dem Online-Gammaspektrometer erfasst das gesamte Iod, das sich im

Wesentlichen aus abgelagertem CsI-Aerosol, physisorbiertem I_2 und chemisorbiertem Iod zusammensetzt. Das mit AIM berechnete abgelagerte Iod ist hauptsächlich CsI (Abb. 4.15). Die mit COCOSYS-NEWAFP berechneten abgelagerten CsI-Mengen werden im Vergleich mit den Messwerten, aber auch der COCOSYS-AFP-Rechnung deutlich überschätzt. Die Messung zeigt keine Änderung der gesamten Iodmenge am nassen Condenser. Eine mögliche Erklärung ist eine radiolytische Reaktion des abgelagerten CsI mit der Farbe. Durch die erhöhte $I_2(g)$ -Konzentration im Gas nach dem Abwaschen steigt die adsorbierte I_2 -Menge und in der Folge das chemisorbierte Iod am Condenser in der Folge an.

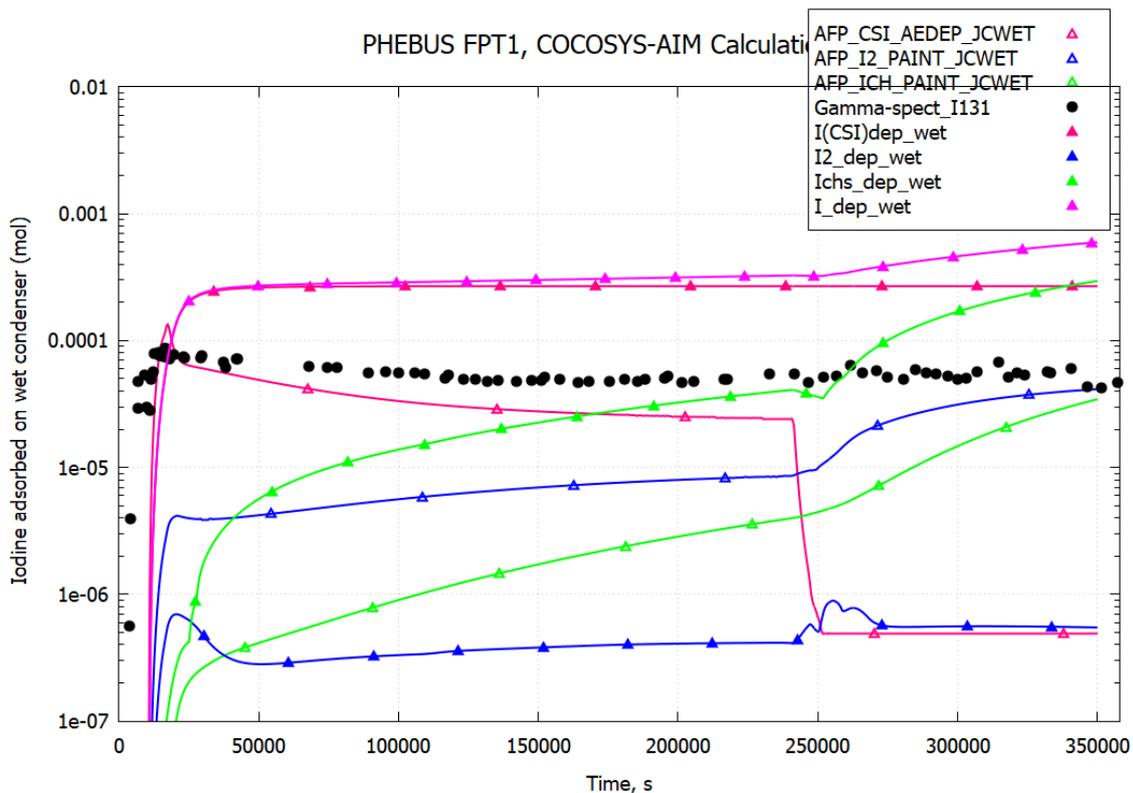


Abb. 4.15 UaSA zu FPT-1: Am nassen Kondensator abgelagertes Iod

Durch Hydrolyse und radiolytische Prozesse werden im Sumpf bei einem pH-Wert zwischen 4,55 und 5,77 die Spezies I_2 , IO_3^- , I^- und HOI gebildet. I_2 und I^- (Abb. 4.17) reagieren mit den Ag- bzw. AgO_x -Partikeln zu schwerlöslichem AgI (Abb. 4.16). Diese Reaktionen hängen unter anderem von der spezifischen Oberfläche der Ag-Partikel ab. Je größer die spezifische Oberfläche, desto schneller laufen die Reaktionen im Sumpf ab. Da sich die Modellierung von Silberiodid (AgI) in NEWAFP im Vergleich zu AFP grundlegend sowohl für die Atmosphäre als auch die Wasserphase geändert hat (vgl. /SPE 17/), ist die mit AFP berechnete AgI-Masse nicht mit der in NEWAFP errechneten

zu vergleichen. Allerdings ist festzuhalten, dass in der COCOSYS- Rechnung mit NEWAFP zu wenig AgI-Aerosol in den Sumpf eingetragen wird.

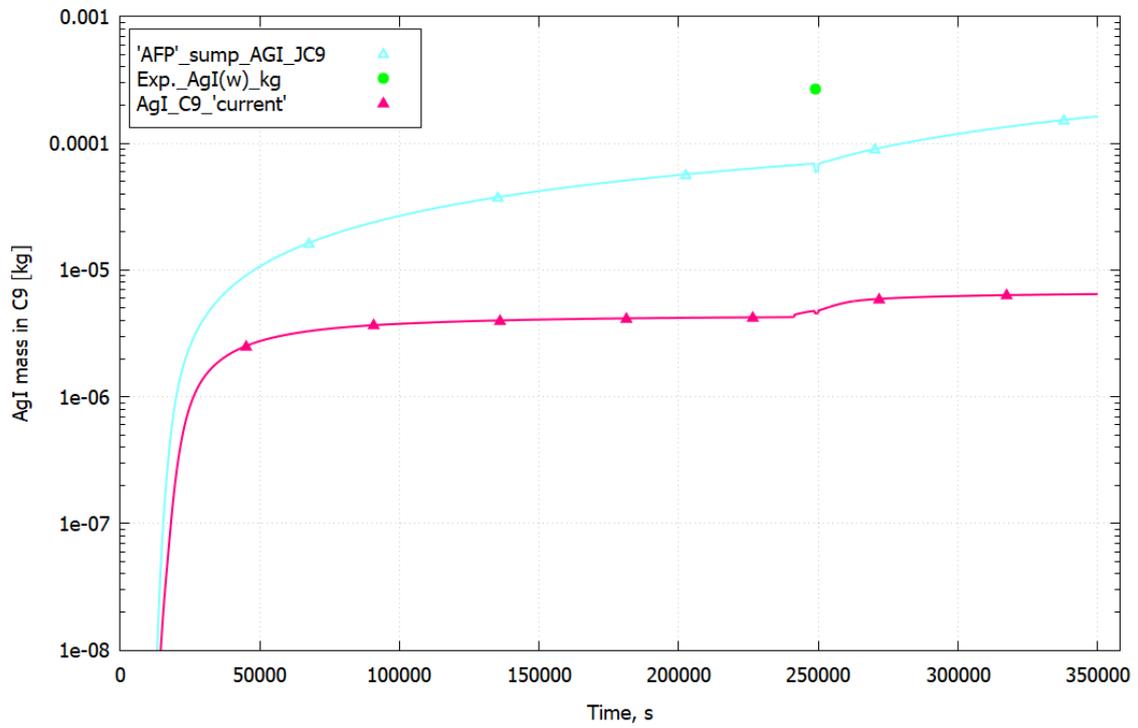


Abb. 4.16 UaSA zu FPT-1: AgI-Masse im Sumpf

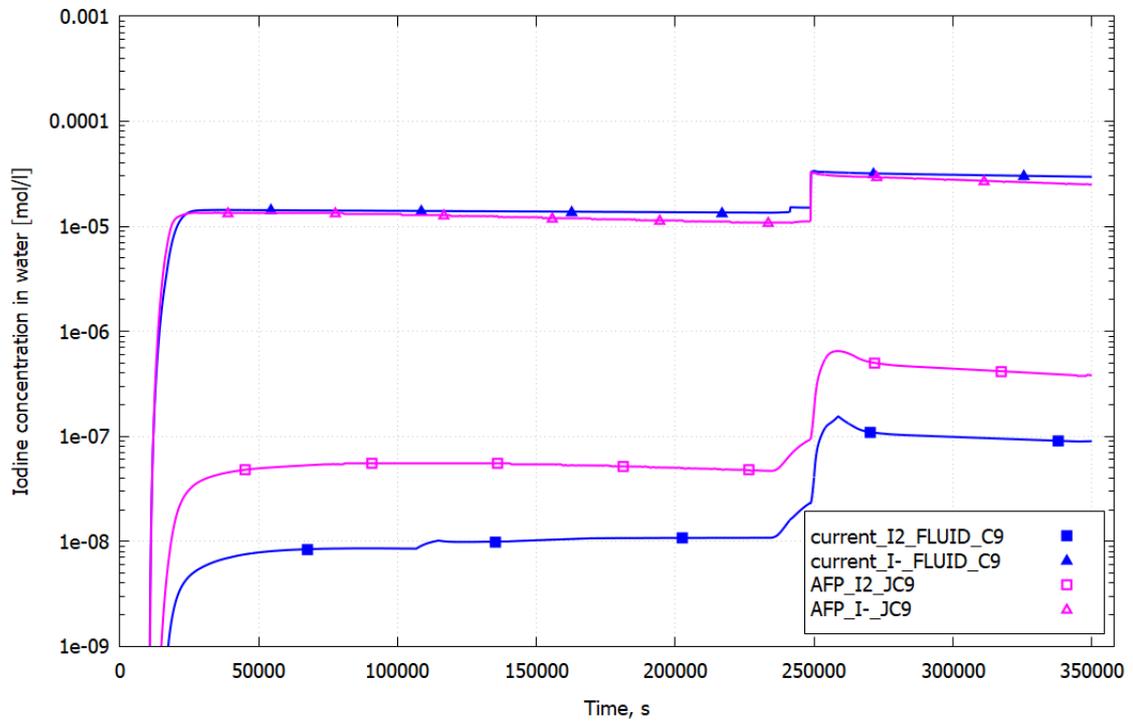


Abb. 4.17 UaSA zu FPT-1: Iod-Konzentration im Sumpf

5 Internationale Aktivitäten

Ein erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS wird aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen und aus weiteren Aktivitäten gezogen. Dazu zählen insbesondere Aktivitäten der OECD (z. B. WGAMA – Working Group on the Analysis and Management of Accident) als auch experimenteller OECD/NEA-Vorhaben (THAI – Thermohydraulik, Hydrogen, Aerosol and Iodine, BIP – Behaviour of Iodine Project und STEM – Source Term Evaluation and Mitigation). In OECD THAI-3 und STEM-2 ist die GRS auch in der Programme Review Group (PRG) vertreten, in OECD BIP-3 verwendet die GRS experimentelle Resultate aus diesem Projekt.

5.1 OECD THAI-3

Die Beteiligung der GRS am OECD-Projekt THAI-3 wurde im Rahmen des Vorhabens fortgesetzt. Die GRS war aktiv in der Programme Review Group (PRG) beteiligt und leitete die Analytical Working Group (AWG).

Im OECD-Projekt THAI-3 wurden Experimente zu 4 verschiedenen Themenkomplexen durchgeführt:

1. Rekombination von Wasserstoff durch passive autokatalytische Rekombinatoren (PAR) unter Gegenstrombedingungen,
2. Wiedereintrag von Spaltprodukten aus Wasserpools bei erhöhten Wassertemperaturen und mit Mitteln zur Veränderung der Oberflächenspannung des Wassers (surfactants),
3. Wasserstoffverbrennung in 2-Raum-Geometrie ohne und mit überlagerter Strömung,
4. Aerosol- und Iod-Wiederfreisetzung von Strukturen als Folge einer Wasserstoffverbrennung.

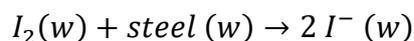
Die GRS beteiligte sich mit verschiedenen Analysen am Projekt und nahm aktiv an allen im Projektzeitraum organisierten Treffen der PRG und der AWG teil (Februar 2016, November 2016, Juni 2017, Januar 2018, Oktober 2018 und abschließend im Juni 2019).

Ein wesentlicher Teil der Arbeit und Diskussion in den letzten beiden Treffen betraf eine Ausarbeitung von Vorschlägen für ein zukünftiges OECD-THAI-Projekt, das in 2020 starten wird. Außerdem wurden für die abschließende Sitzung der AWG in 2019 Vorträge zu Analysen unter Anwendung von Erkenntnissen aus den ersten beiden OECD-THAI-Projekten zusammengestellt.

5.1.1 OECD THAI-3 Iod-32: Wiederfreisetzung von Iod aus siedendem Pool

Im Rahmen des OECD-Projektes THAI-3 ist ein Re-entrainment-Test zur Wiederfreisetzung von Iod aus einem siedenden Pool vorgesehen gewesen, der den Massentransfer von I_2 unter siedenden Bedingungen und hohen Temperaturen in der Anlage THAI+ untersuchen sollte. Der Massentransfer von I_2 zwischen Sumpf und Atmosphäre unter siedenden Bedingungen wird in COCOSYS/AIM gerechnet, sollte aber durch ein Experiment untersucht und validiert werden. Zunächst wurden dazu Auslegungsrechnungen durchgeführt um zu klären, ob nach der Iod-Einspeisung und einer entsprechenden Referenzphase bei nicht siedenden Bedingungen noch genügend Iod für die zweite Testphase unter siedenden Bedingungen enthalten ist und die Konzentration nicht unter der Nachweisgrenze liegt.

In COCOSYS/AIM ist eine Reaktion von I_2 in wässriger Lösung mit den Stahloberflächen modelliert, wobei Metalliodid produziert wird. Da das Metalliodid in Wasser löslich ist, werden keine Rückstände von Iod auf den Metalloberflächen in der Wasserphase modelliert. Das Modell in COCOSYS berücksichtigt die Konversion von I_2 zu I^- gemäß der Reaktion:



Außerdem gibt es kein zusätzliches Adsorptions-/Desorptions-Modell für I_2 in wässriger Lösung an eingetauchten Stahloberflächen in COCOSYS/AIM.

Der Austausch von flüchtigen Spezies zwischen Gas- und Wasserphase wird durch eine sogenannte Oberflächengrenzschicht mittels der Transportprozesse vollzogen. Das Massentransfer-Modell basiert auf der Zweifilmtheorie. Die Zweifilmtheorie ist ein Modell zur Beschreibung des Stoffdurchgangs durch eine Grenzfläche, also der Diffusion von flüchtigen Spezies durch eine Grenzschicht zwischen zwei dünnen Grenzflächen. Unter stationären Bedingungen wird nach einer bestimmten Zeit ein Gleichgewichtszustand zwischen Gas- und Wasserphase erreicht. Das Gleichgewicht für jede flüchtige Spezies wird durch den Partitionskoeffizienten beschrieben und ist das Verhältnis der

Konzentrationen im stationären Zustand in der Gas- und Wasserphase ($P = c_{w,EQ} / c_{g,EQ}$) (Abb. 5.1). P ist in COCOSYS/AIM als Funktion der Temperatur modelliert. Die Reaktionskonstante für den Massentransfer wird anhand der folgenden Gleichung berechnet:

$$\frac{1}{k_{tot}} = \frac{1}{k_w} + \frac{P(I_2)}{k_G}$$

k_w = wasserseitiger MTC (m/s)

k_G = gaseitiger MTC (m/s)

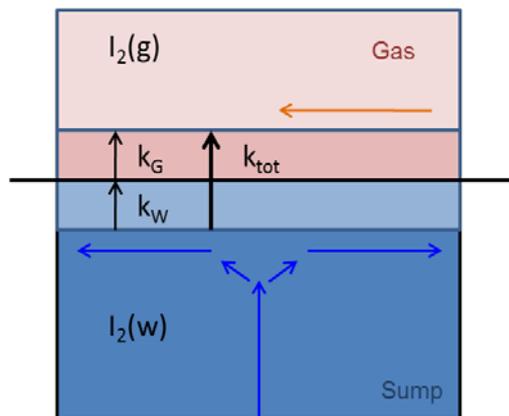


Abb. 5.1 Massentransfer-Modell für Iod in COCOSYS/AIM

Unter siedenden Bedingungen vergrößert sich die Grenzfläche zwischen Gas- und Wasserphase aufgrund der aufsteigenden Blasen. Des Weiteren wird der Massentransfer der flüchtigen Spezies durch das Sieden des Wassers beschleunigt. Die I_2 -Konzentrationsänderung im siedenden Wasser hängt von der Verdampfungsrate ab. Die Verdampfungsrate wird vom thermohydraulischen Modul in COCOSYS geliefert. Das Umschalten zwischen nicht-siedenden Bedingungen und siedenden Bedingungen in COCOSYS geschieht dann, wenn die Massentransferrate für siedende Bedingungen die für nicht-siedende Bedingungen übertrifft.

Das zunächst angedachte Test-Set-up und die Randbedingungen sahen wie nachfolgend beschrieben aus. Im PAD-Behälter der Anlage THAI+ soll sich der zu untersuchende Wasserpool befinden. Der THAI-Behälter (TTV) fungiert als Niederdruck-Gasreservoir zur Regulierung des PAD-Behälterdrucks. Die I_2 -Einspeisung ist in den PAD-Sumpf für 2 min ab dem Zeitpunkt $t = 0$ s angedacht. Der Startdruck soll bei 1,5 bar mit korrespondierender Sättigungstemperatur $T = 111,4$ °C liegen.

Die Testphasen der Auslegungsrechnung setzten sich wie folgt zusammen:

- 1. Testphase: Nicht siedend

- 2. Testphase: Siedend (Dampfeinspeisungsrate kleine und pH-Wert = 2)
- 3. Testphase: Siedend (Dampfeinspeisungsrate große und pH-Wert = 2)
- 4. Testphase: Siedend (Dampfeinspeisungsrate mittlere und pH-Wert = 9)

Die Anlage THAI+ ist in COCOSYS wie in Abb. 5.2 dargestellt nodalisiert.

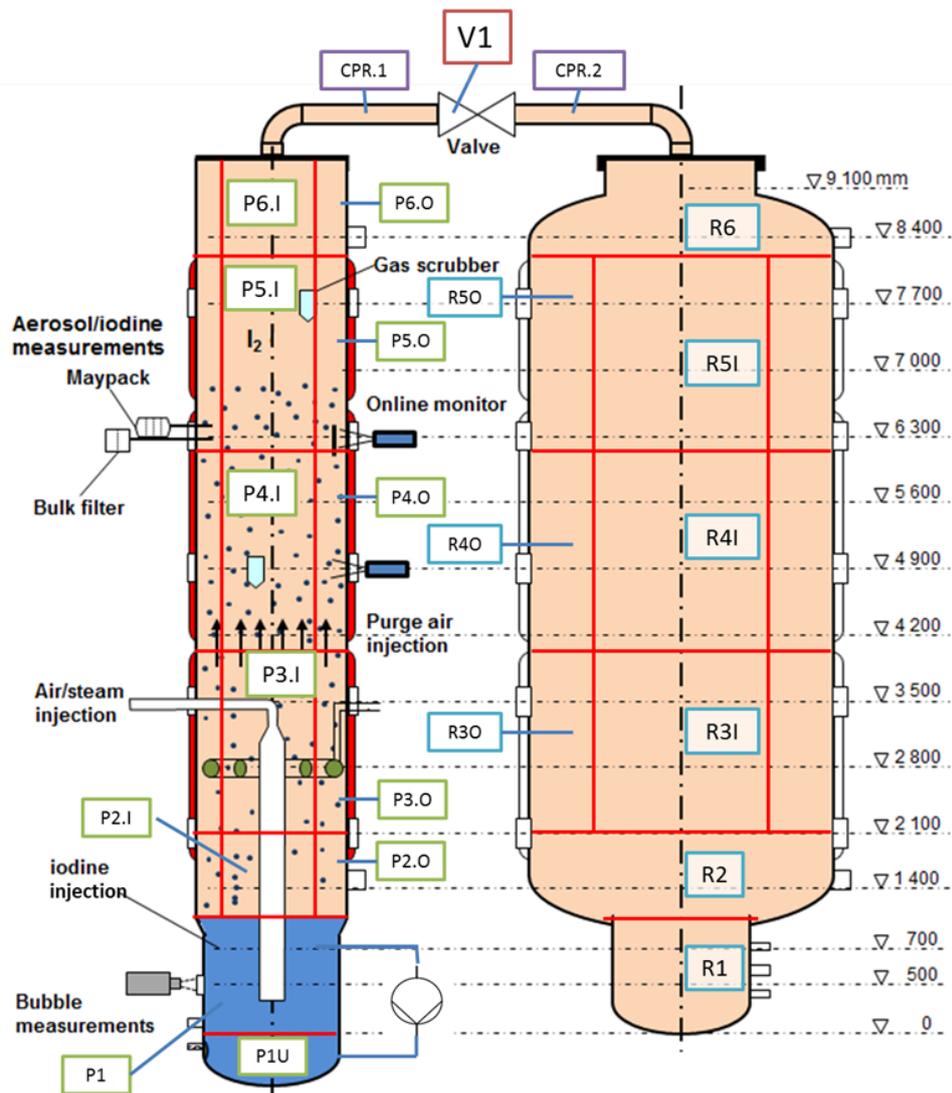


Abb. 5.2 OECD THAI-3, Iod-32: COCOSYS-Nodalisierung der Anlage THAI+ für die Auslegungsrechnung des Versuches

Der Sumpf im PAD-Behälter enthält deionisiertes Wasser und hat eine Poolgröße von 1 m³ und das Wasser wird (im Rechenmodell) mit einer Sumpfpumpe fortlaufend recirkuliert. Die Sumpftiefe beträgt 750 mm und hat ~4 m² eingetauchte Stahloberflächen. Das Gasvolumen im PAD beträgt 16,2 m³ und die an der Gasphase angrenzenden Stahloberflächen entsprechen ca. 45 m².

Die Dampfeinspeisung erfolgt nach dem folgenden Schema (Abb. 5.3).

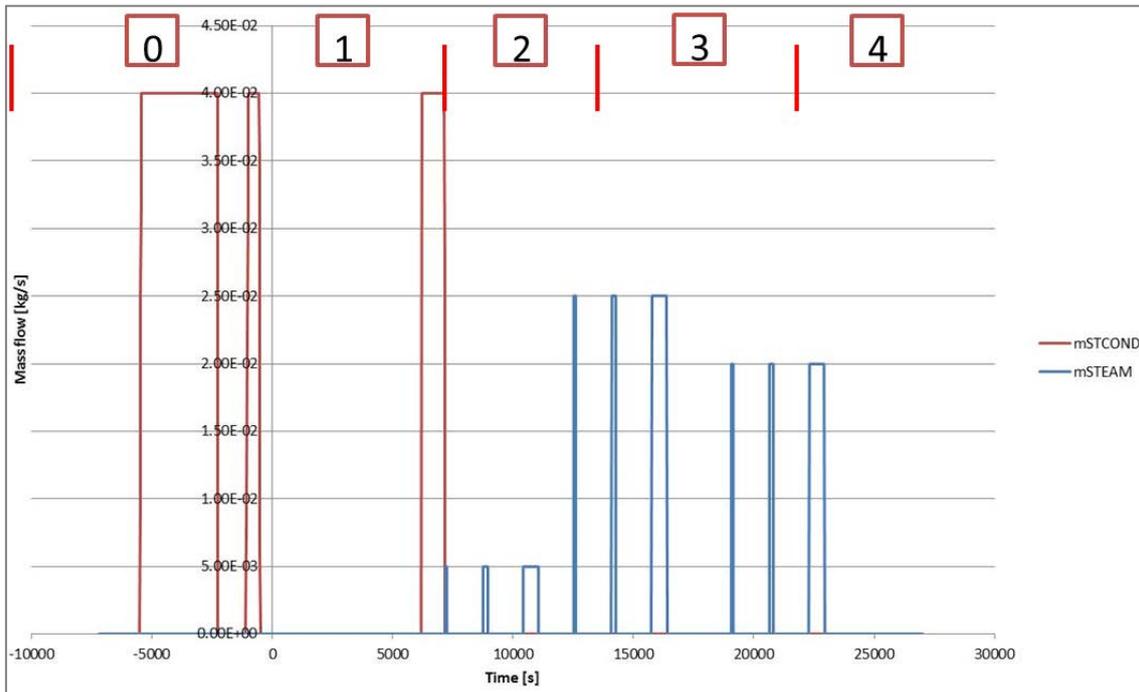


Abb. 5.3 OECD THAI-3, Iod-32: Für die Auslegungsrechnung angenommene Dampfeinspeisung in den PAD-Sumpf

In der initialen („0.“) Phase wird der Behälter konditioniert, um die thermohydraulischen Bedingungen in Sumpf und Atmosphäre herzustellen. Mit der Dampfeinspeisung in Phase 2, 3 und 4 siedet der Sumpf kurzzeitig. Um den Druck dabei annähernd stationär zu halten, wird in COCOSYS mit Hilfe eines druckregulierenden Ventils in den TTV druckentlastet (siehe Abb. 5.4).

Die entsprechenden Behältertemperaturen sind in Abb. 5.5 aufgezeigt. Die Behältertemperatur steigt stetig aufgrund der Dampfeinspeisung und der Behälterwandheizung (vgl. Abb. 5.5). Mit den zuvor beschriebenen Randbedingungen berechnet COCOSYS die Siederate wie in Abb. 5.6 zu sehen.

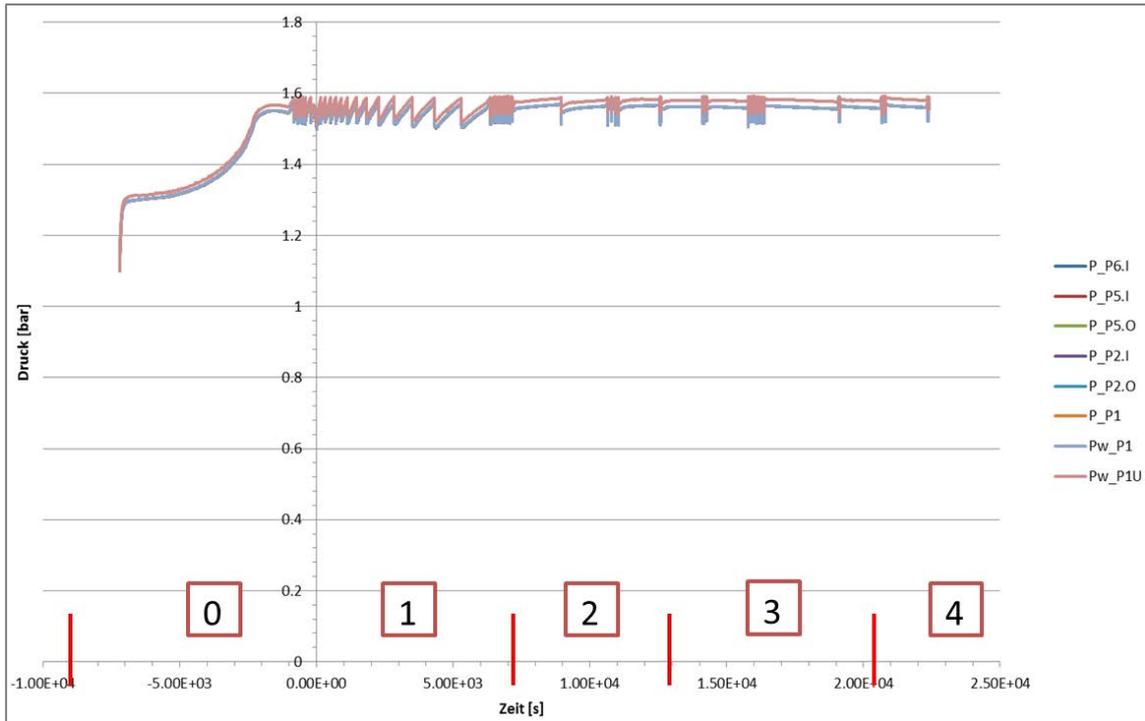


Abb. 5.4 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Druckverlauf im PAD-Behälter

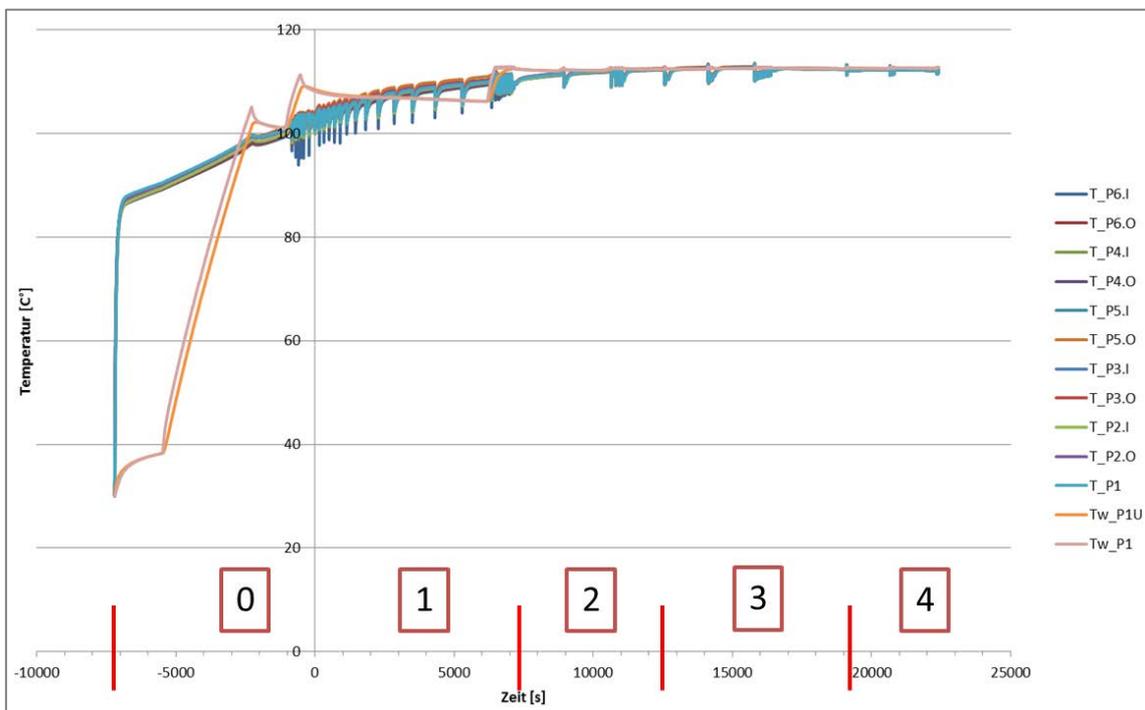


Abb. 5.5 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Temperaturverlauf in Wasser- und Gasphase im PAD-Behälter

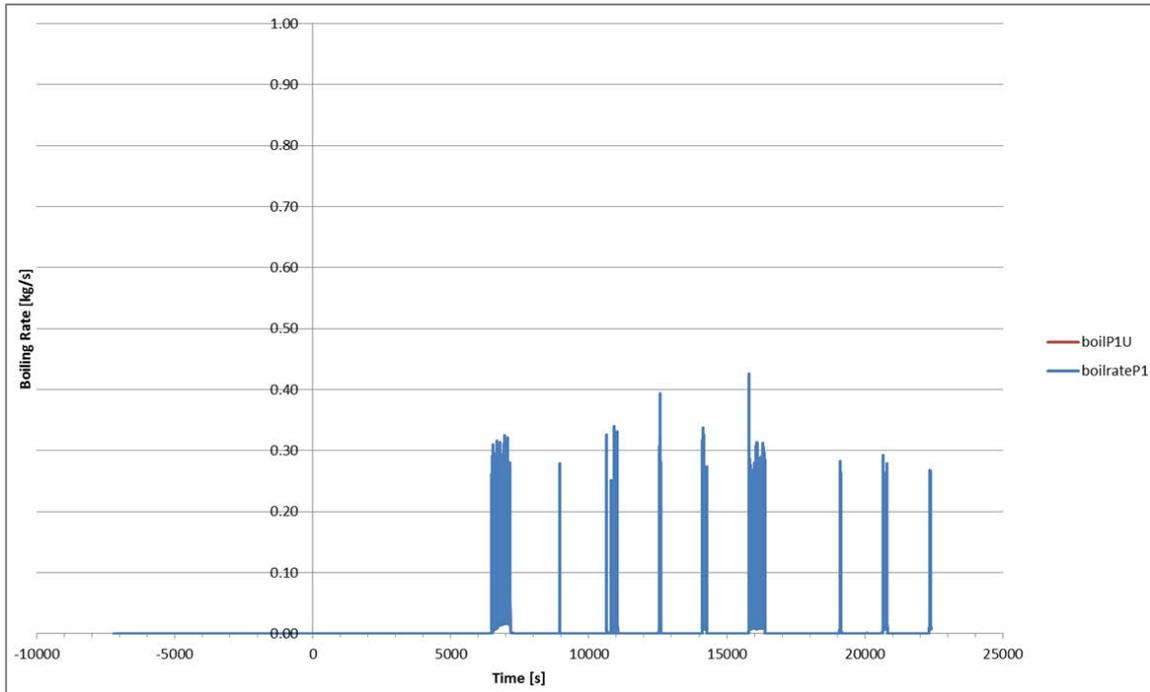


Abb. 5.6 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Siederate

Zum Zeitpunkt $t = 0$ s wird in der Auslegungsrechnung für 120 Sekunden insgesamt 1 g $I_2(w)$ in die Wasserphase eingespeist. Zunächst ruht der Sumpf in der 1. Phase und wird dann ab der 2. Versuchsphase durch Dampfeinspeisung und Druckentlastung zum Sieden gebracht. Die Speziation von Iod im Sumpf ist in Abb. 5.7 dargestellt.

Die $I_2(w)$ -Konzentration wird sehr schnell im Wasser abgebaut, aufgrund der schnellen I_2 /Stahl-Reaktion und entsprechend schnell wird die $I^- (w)$ -Konzentration aufgebaut. Die Detektionsgrenze liegt bei $1 \cdot 10^{-5}$ g/l und ist in Abb. 5.7 eingezeichnet. Bereits zu Beginn der 2. Versuchsphase und somit zu Beginn des Hauptteils des Versuchs Iod-32 ist die Konzentration nahe der Nachweisgrenze. Auch die $I_2(g)$ -Konzentrationen in der Gasphase im PAD-Behälter sind aufgrund der zuvor diskutierten niedrigen $I_2(w)$ -Konzentrationen sehr niedrig.

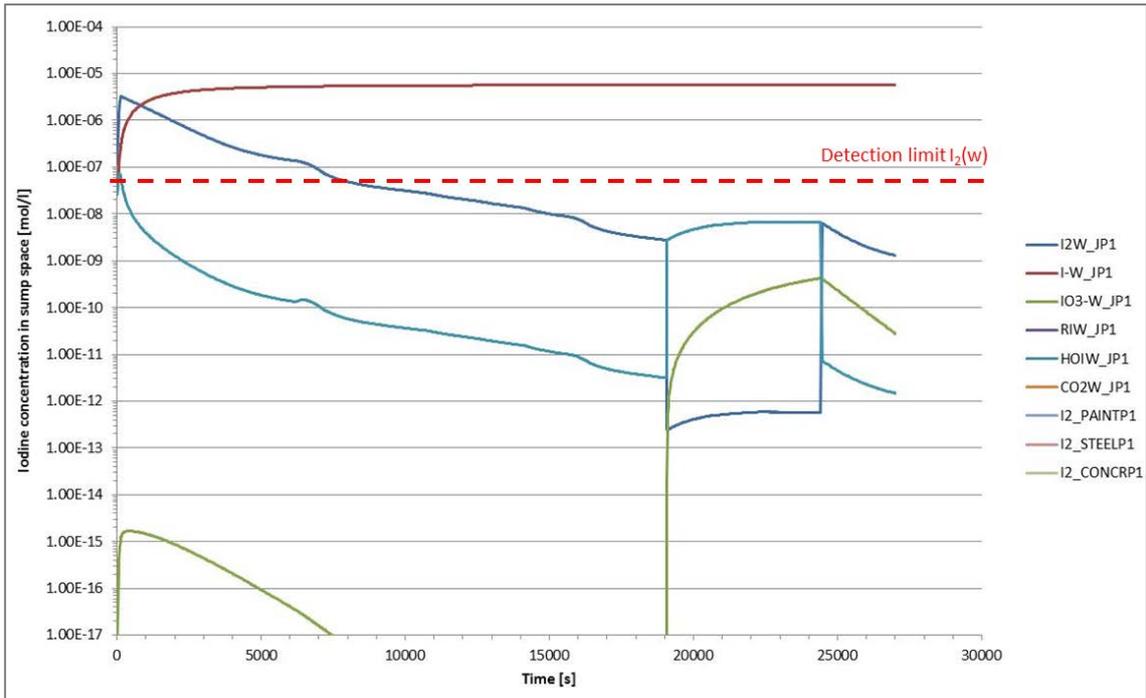


Abb. 5.7 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Iod-Speziation im PAD-Sumpf

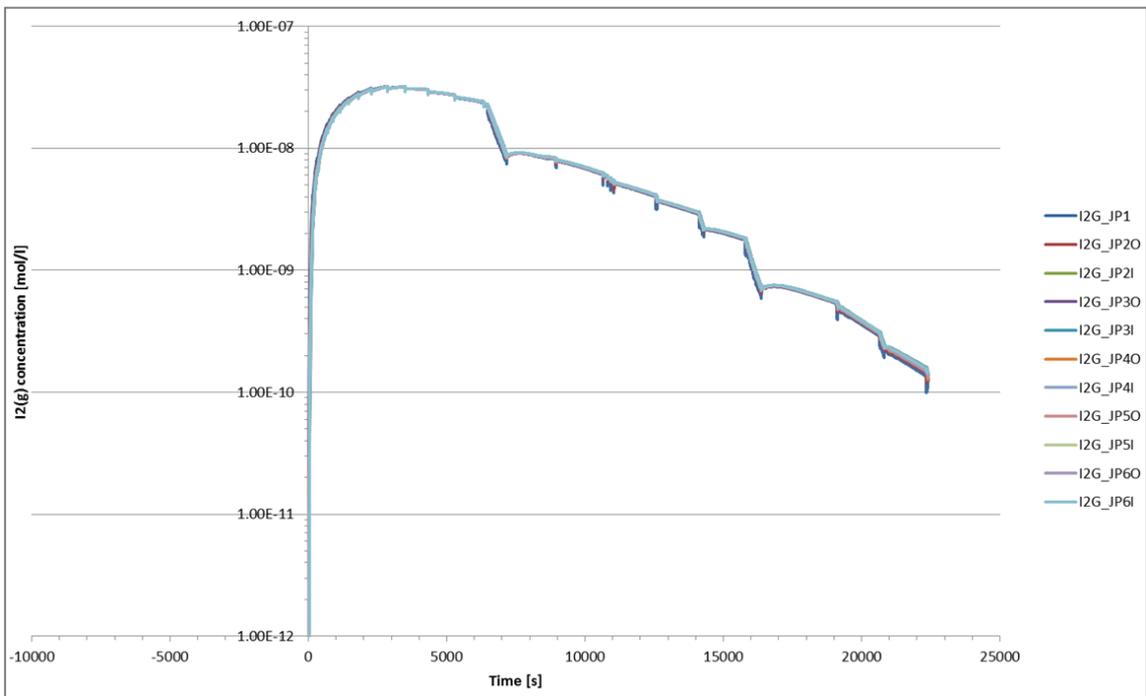


Abb. 5.8 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, $I_2(g)$ -Konzentrationsverteilung in der Gasphase

Die abgebildeten $I_2(g)$ -Konzentrations sprünge entstehen durch die PAD-Druckentlastung in den TTV. Aufgrund der niedrigen Konzentrationen in Gas- und Wasserphase ist die Versuchsfahrweise umgestellt worden. Der Versuch ist nun mit zwei I_2 -Einspeisungen bei $t = 0$ h und $t = 2,6$ h, mit jeweils 0,5 g für 1 Minute durchgeführt worden. Die thermohydraulischen Randbedingungen für den Versuch sind leicht abgeändert worden. Weiterhin sind nur noch 3 Versuchsphasen und eine 0. Versuchsphase, die Konditionierungsphase, durchgeführt worden. Die Ergebnisse dieser COCOSYS-Rechnung sind in Abb. 5.9 – Abb. 5.14 dargestellt. Da die Versuchsergebnisse den OECD-Projektpartnern vorbehalten sind, sind in den Diagrammen nur die Rechenergebnisse abgebildet. Generell kann gesagt werden, dass die Ergebnisse und natürlich besonders die I_2 -Konzentrationen in Gas- und Wasserphase, in guter Übereinstimmung mit den Messwerten liegen.

In Abb. 5.9 ist der Druckverlauf im PAD und THAI-Behälter dargestellt. Jeweils während des Druckentlastungsvorgangs nimmt der Druck im PAD-Behälter ab und im THAI-Behälter leicht zu. Durch die Dampfeinspeisung und das Sumpfsieden nimmt der Druck während dieser Phasen wieder leicht zu. Auch die Temperatur (vgl. Abb. 5.10) verhält sich entsprechend des Druckverlaufs. In Abb. 5.11 sind die mit COCOSYS berechneten Siederaten abgebildet.

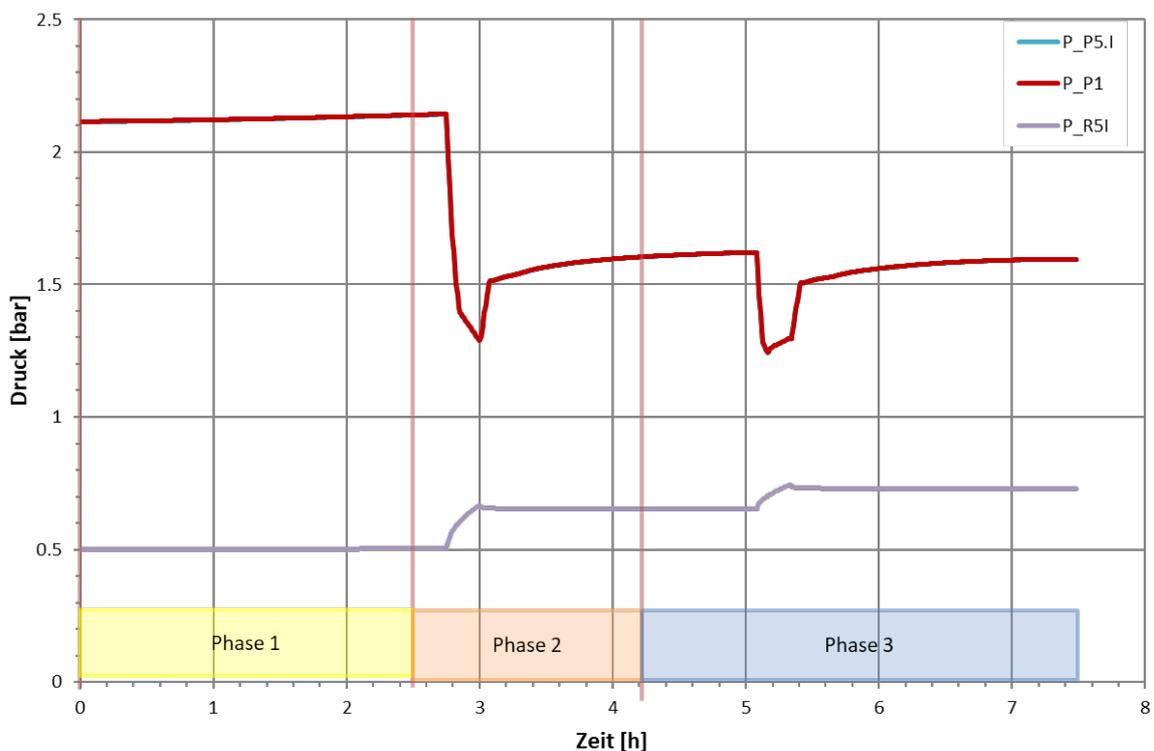


Abb. 5.9 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Druckverlauf im PAD

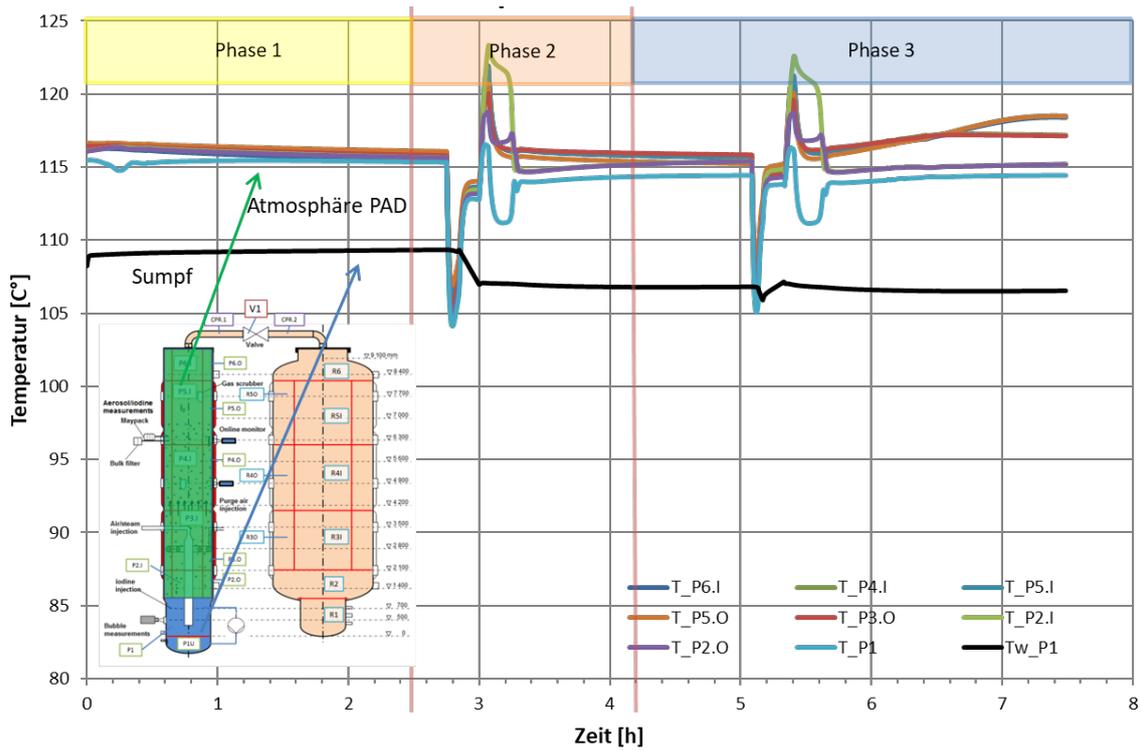


Abb. 5.10 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Temperaturverlauf im PAD

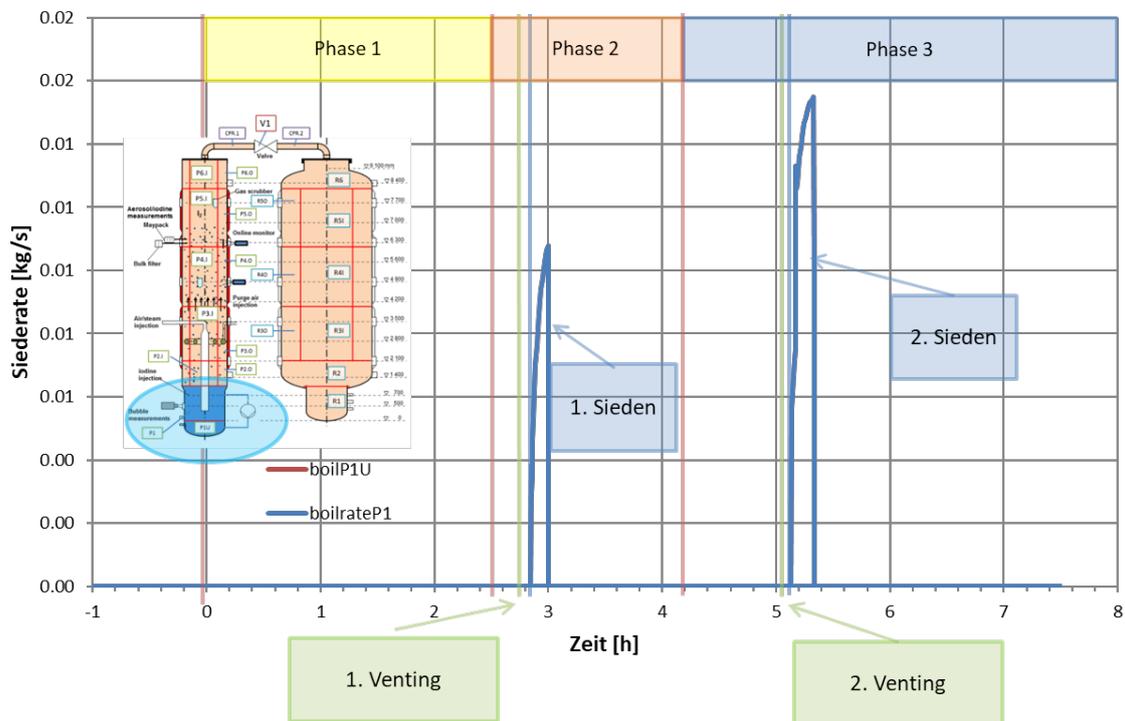


Abb. 5.11 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Siederate

In der COCOSYS-Rechnung ist zu sehen, dass die Iod-Konzentration in der Wasserphase (vgl. Abb. 5.12) nach der 1. Einspeisung annähernd konstant bleibt und nur ein kleiner Anteil in die Atmosphäre über den Massentransfer bei nicht siedenden Bedingungen freigesetzt wird (siehe Abb. 5.14). Nach der 2. Einspeisung wird die Iod-Masse durch das Sumpfsieden reduziert. In der 3. Phase wird kein Iod mehr durch Sumpfsieden in die Atmosphäre freigesetzt, da kein flüchtiges I_2 mehr im Sumpf vorhanden ist (vgl. Abb. 5.13). Die I_2 -Masse im Sumpf wird durch die schnelle I_2 /Stahl-Reaktion zu I^- abgebaut. Des Weiteren zeigt die COCOSYS-Rechnung, dass es ab der 2. Versuchsphase zu einer Stratifikation der Iod-Konzentration im PAD-Behälter kommt.

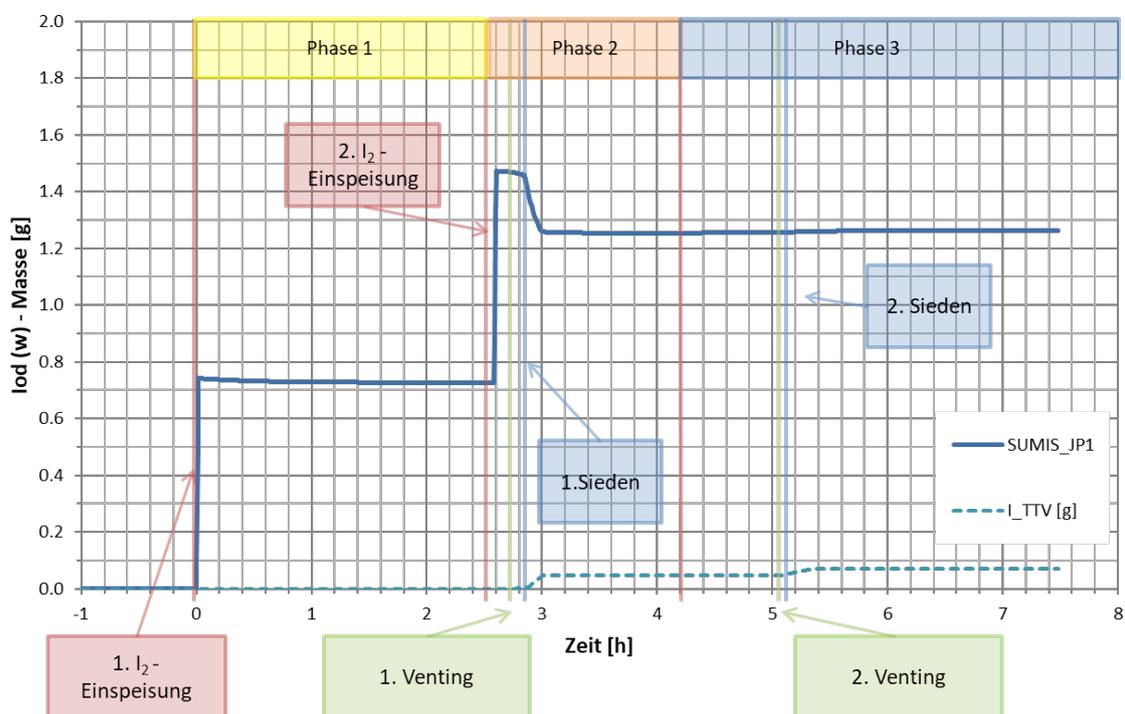


Abb. 5.12 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Masse an Iod in Sumpfwasser

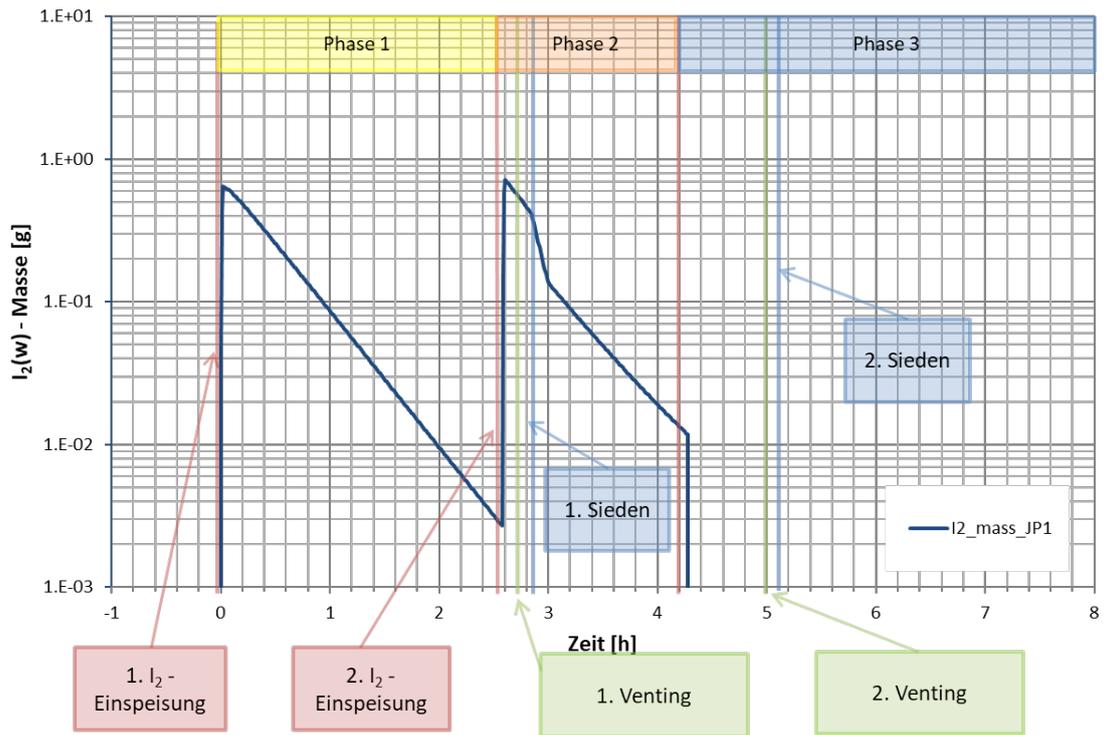


Abb. 5.13 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, $I_2(w)$ -Masse im PAD-Sumpf

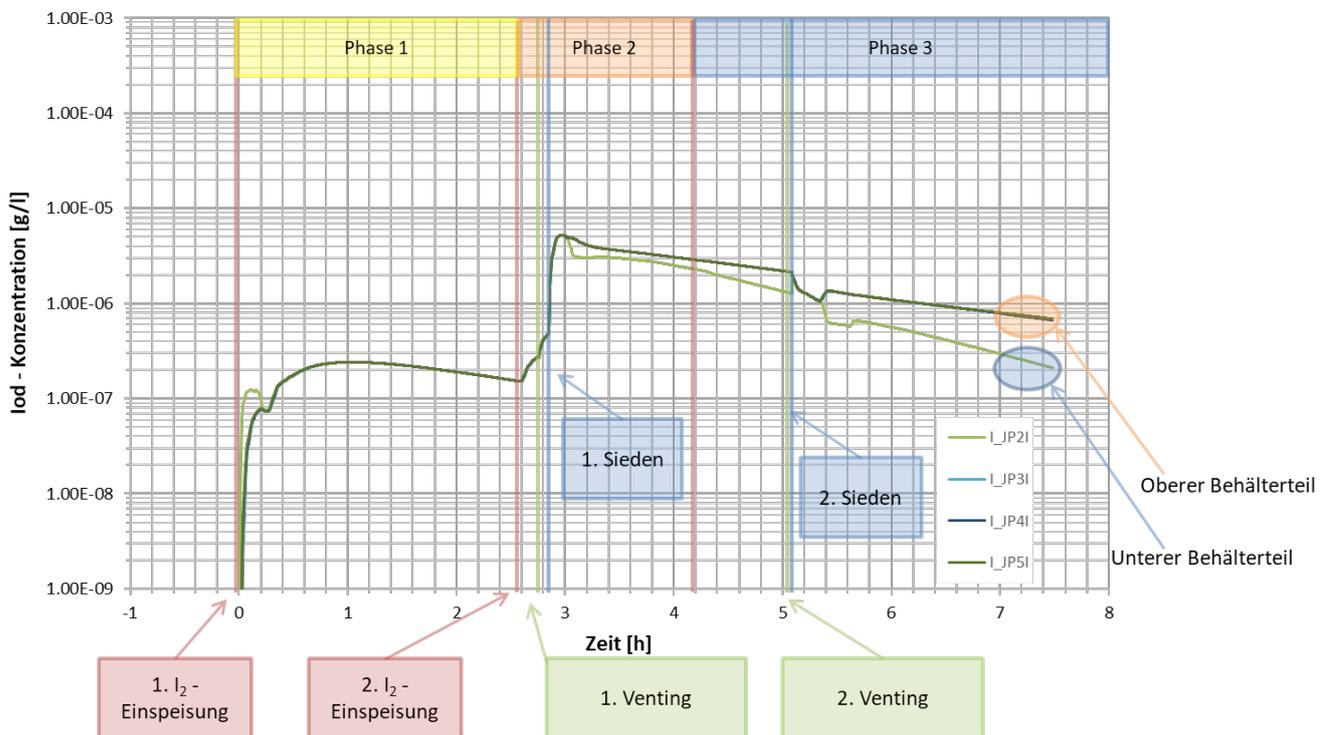


Abb. 5.14 OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Iod-Konzentration in der PAD-Atmosphäre

5.1.2 OECD THAI-3 Iod-34: Iod-Freisetzung durch Wasserstoffdeflagration

Im Rahmen des OECD-Programms THAI-3 ist ein Iod-Resuspensionsversuch mittels Wasserstoffdeflagration durchgeführt worden. Im Rahmen dieses Projekts wurden dazu Auslegungsrechnungen gemacht. Zunächst sollte die Fragestellung beantwortet werden, wieviel Iod sich auf den Farb- und Stahloberflächen bei einer unterschiedlichen Quadratmeteranzahl von Farboberflächen ablagert und schließlich auch, was quantitativ in der Rechnung nach der Deflagration an Iod von den Oberflächen wieder freigesetzt wird. Das Anlagenschema und die erstellte COCOSYS-Nodalisierung zeigt Abb. 5.15.

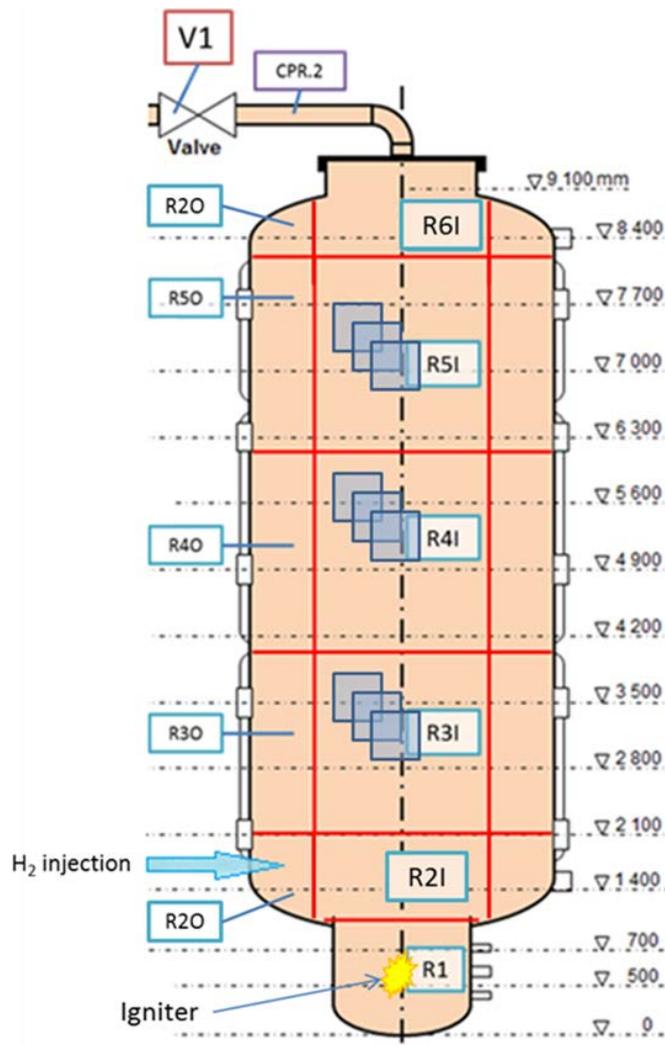


Abb. 5.15 OECD THAI-3 Iod-34: Anlagenschema und COCOSYS-Nodalisierung (rot)

Die drei durchgeführten Rechnungen unterscheiden sich in der Quadratmeteranzahl der eingesetzten Farbflächen, die zwischen 1 und 10 m² variieren. In Phase 1 wird der I₂-Abbau untersucht (Iod-Abbauphase) und in Phase 2 wird H₂ eingespeist und

anschließend gezündet (Deflagrationsphase). Die Randbedingungen in Phase 2 werden ähnlichen den Randbedingungen zum Test HD-22 modelliert. In einer zusätzlichen Rechnung wird der Einfluss der Farbplattendicke (15 mm und 1,5 mm) auf die Ergebnisse der Oberflächentemperatur in der Rechnung mit insgesamt 10 m² Farbe untersucht.

Die angenommenen Randbedingungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Startbedingungen in Phase 1 sind 1,5 bar, 40 % rh, 95 °C und kein Sumpf
- Einspeisung von 1 g I₂ zu Beginn der Phase 1
- Phase 2 beginnt bei 23400 s mit der Einspeisung von H₂ unter den Randbedingungen: ~ 10 % H₂, nach der H₂-Einspeisung ist der Behälterdruck bei 1,7 bar, ~ 40 – 50 % rh und 95 °C
- Zündung bei 32400 s und Ende der Rechnung bei 36000 s

Die Rechnung, in der am meisten I₂ auf den Farboberflächen adsorbiert ist, ist die Rechnung mit 10 m² Farbfläche. In ca. 4 Stunden ist zu erwarten, dass ca. 90 % des Iod-Inventars auf den Farbflächen abgelagert worden sind, wohingegen in der Rechnung mit 1 m² ist zu sehen, dass der quasi-stationäre Zustand erst und auch nur fast zu Beginn der Deflagration bei ca. 9 Stunden erreicht wird. Zu diesem Zeitpunkt sind lediglich ca. 45 % des Inventars auf den Farbflächen adsorbiert (vgl. Abb. 5.16 und Abb. 5.17).

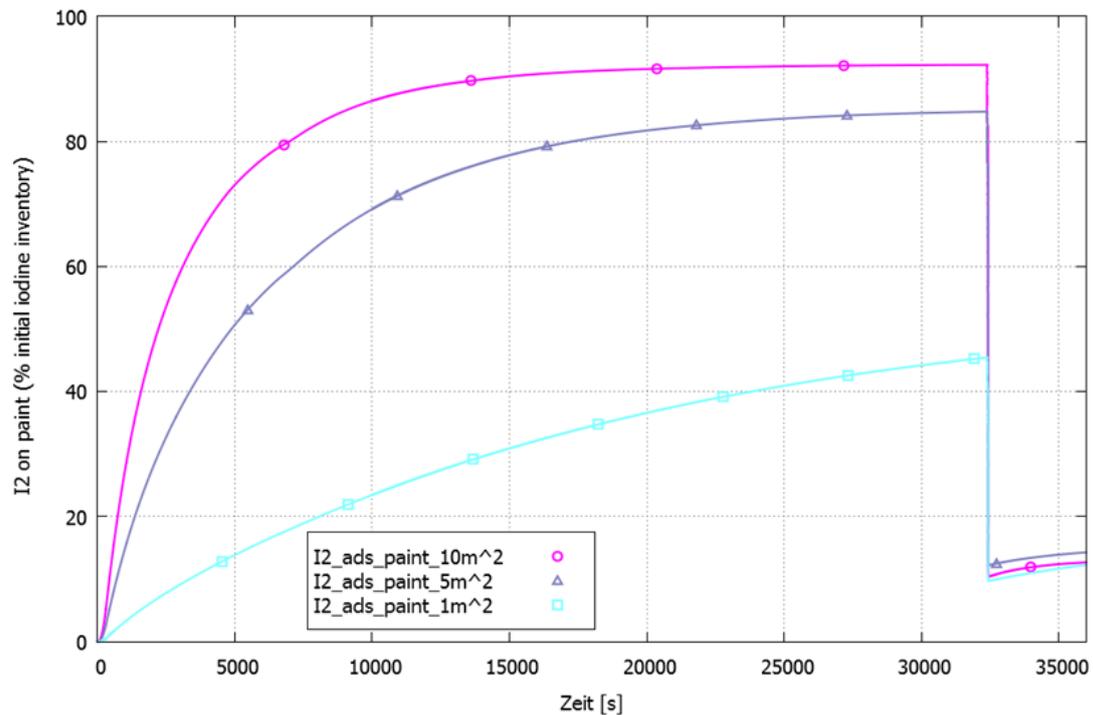


Abb. 5.16 OECD THAI-3, lod-34: COCOSYS-Rechnung der I₂-Ablagerung auf den Farbflächen

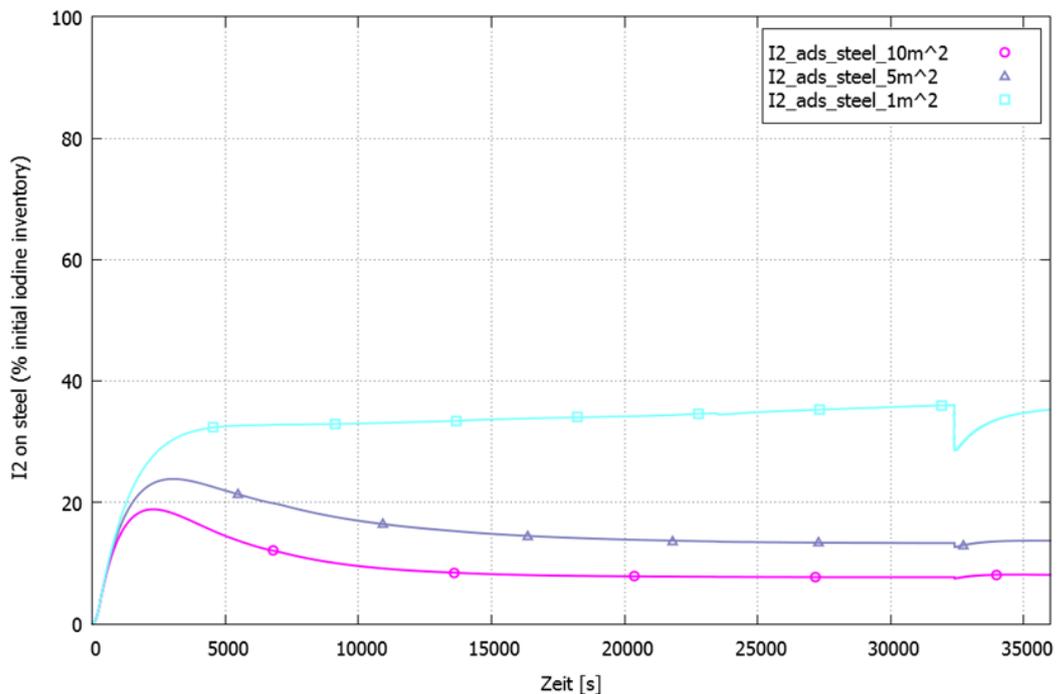


Abb. 5.17 OECD THAI-3, lod-34: COCOSYS-Rechnung der I₂-Ablagerung auf dem TTV-Stahl

Die Ablagerung von Iod auf dem Behälterstahl beträgt weniger als 10 % zum Ende der 1. Versuchsphase. Im Vergleich dazu befindet sich in der Rechnung mit 1 m² Farbe ca.

35 % auf dem Stahl zum selben Zeitpunkt. Auch ist die Menge an gasförmigem Iod bei ca. 9 Stunden unterschiedlich hoch: ~ 15 % bei 1 m² Farbfläche im Vergleich ca. 0 % bei 10 m² Farbfläche (vgl. Abb. 5.18). Im Fall mit der größeren Stahlfläche ist dann bereits ein stationärer Zustand erreicht.

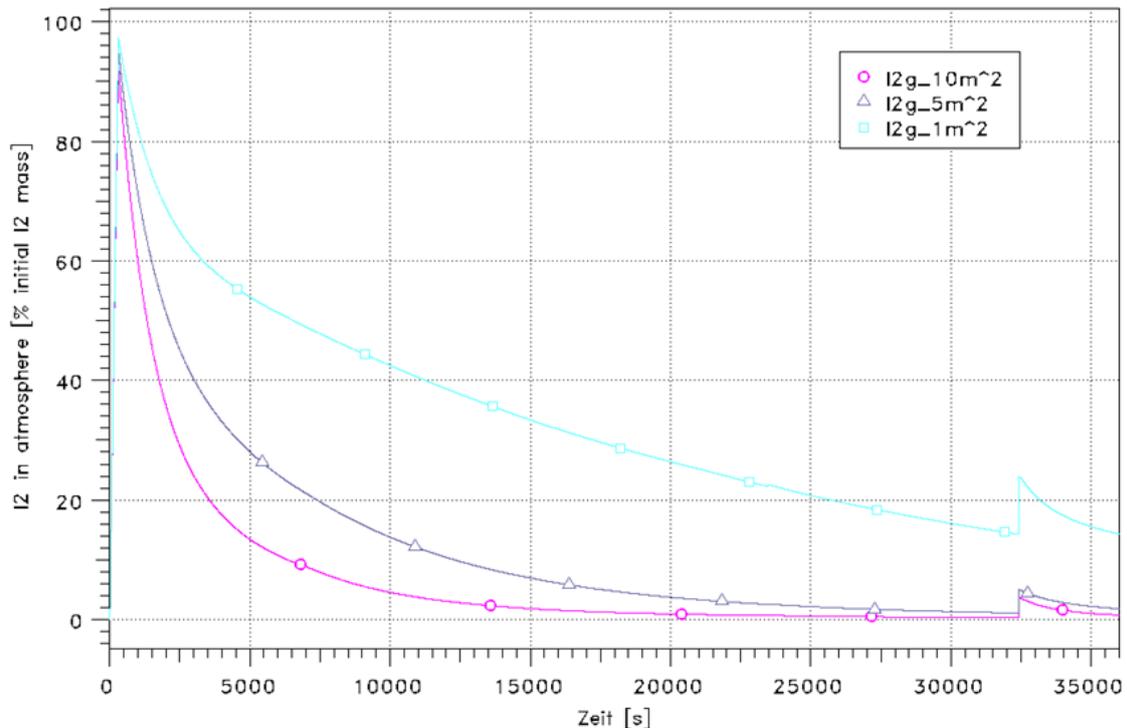


Abb. 5.18 OECD THAI-3, Iod-34: COCOSYS-Rechnung der I₂-Mengen in der Atmosphäre bezogen auf das I₂-Anfangsinventar

Nach heutigem Stand wird in COCOSYS/AIM die Resuspension und Freisetzung von RI von Oberflächen mit folgenden Reaktionsgleichungen beschrieben:

Freisetzung von Farbflächen:

- $I_2(dep, p, g) \xrightarrow{k(62)} I_2(g)$
- $I_{chs}(dep, p, g) \xrightarrow{k(77)} I_2(g)$
- $I_{chs}(dep, p, g) \xrightarrow{k(68)} CH_3I(g)$
(Thermal release of CH₃I)

Freisetzung von Stahlflächen:

- $I_2(dep, s, g) \xrightarrow{k(63)} I_2(g)$
- $I_{FeI_2}(dep, s, g) \xrightarrow{k(75)} I_2(g)$

Die COCOSYS-Modellierung beinhaltet nicht die Resuspension von chemisorbiertem Iod von Farb- oder Stahloberflächen ($k(77)$ und $k(75)$).

- $k(77) = 0$; da $BAS(77)$ zu null gesetzt ist und mit
- $k_i = BAS_i \exp \left[EAKT_i \left(\frac{T-298.15}{T \cdot R \cdot 298.15} \right) \right]$
- $k(75) = 0$; da $BAS(75)$ zu null gesetzt ist

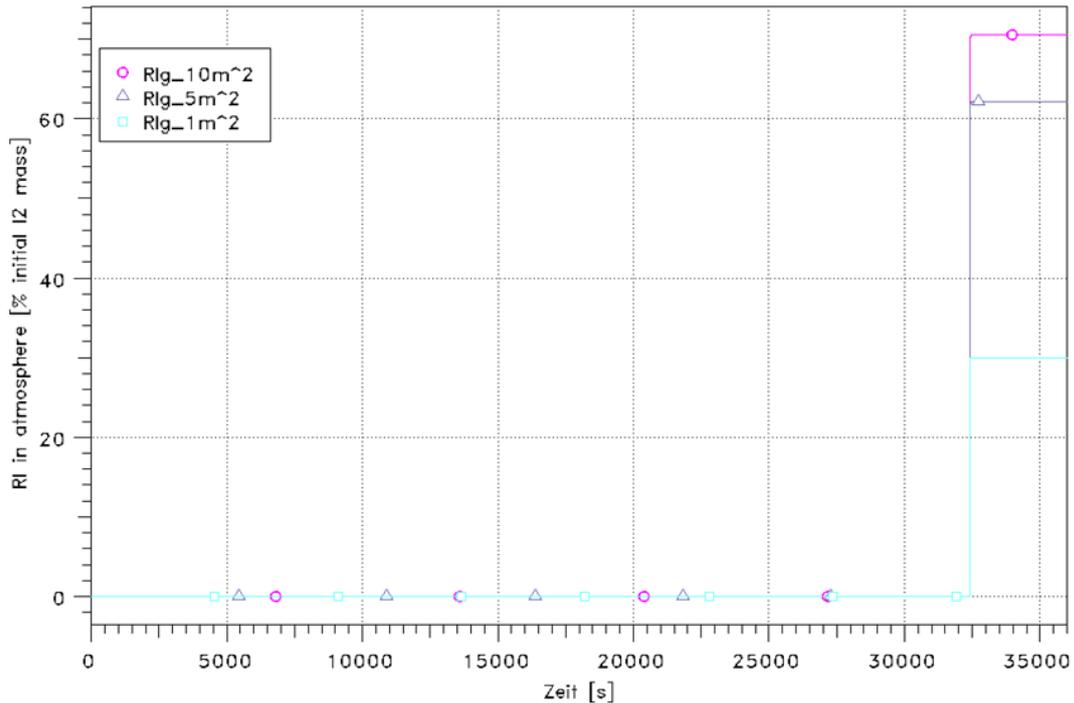


Abb. 5.19 OECD THAI-3, Iod-34: Vergleich der RI Mengen in der Atmosphäre bezogen auf das I₂-Anfangsinventar

Während der Wasserstoffdeflagration zeigen die Rechnungen einen moderaten Temperaturanstieg in den Behälterwänden wie auch auf den Farbblechen (15 mm Dicke, vgl. Abb. 5.21). Im Fall der Rechnung mit der Farbblechstärke von 1,5 mm ist der Temperaturanstieg durch die Deflagration signifikant höher (siehe Abb. 5.23). Der Temperaturanstieg in der Atmosphäre führt zu einer massiven RI-Freisetzung bedingt durch das in COCOSYS/AIM enthaltene thermische RI-Freisetzungsmodell.

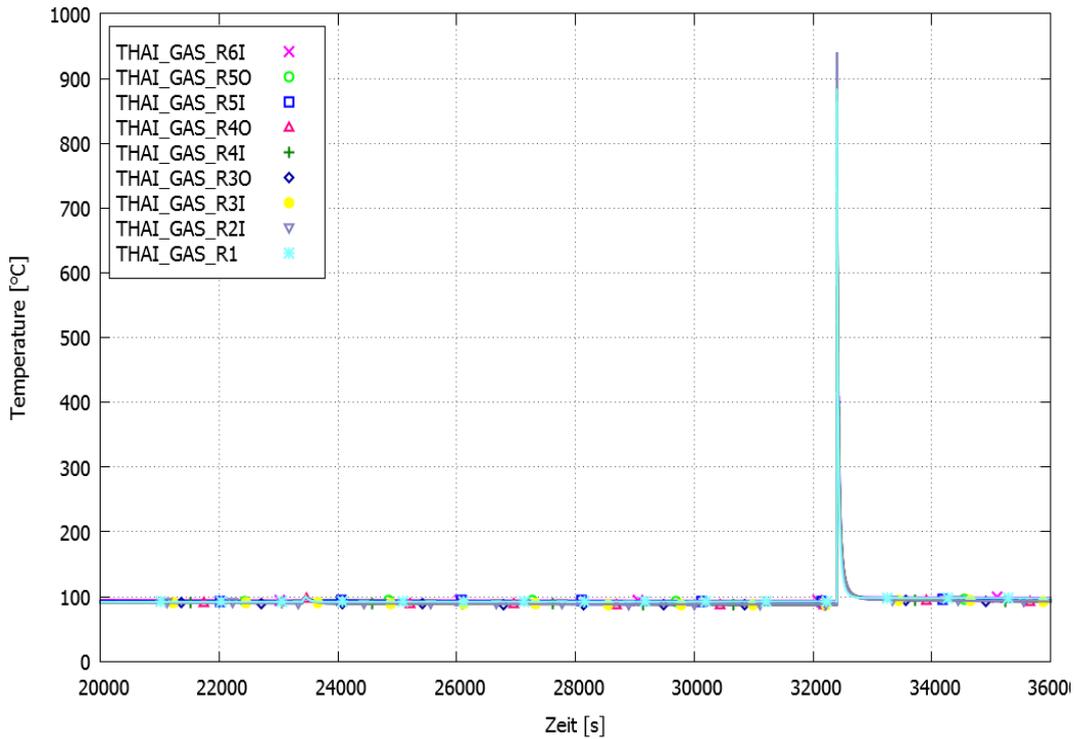


Abb. 5.20 OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Gasphase in Phase 1 und 2 im TTV

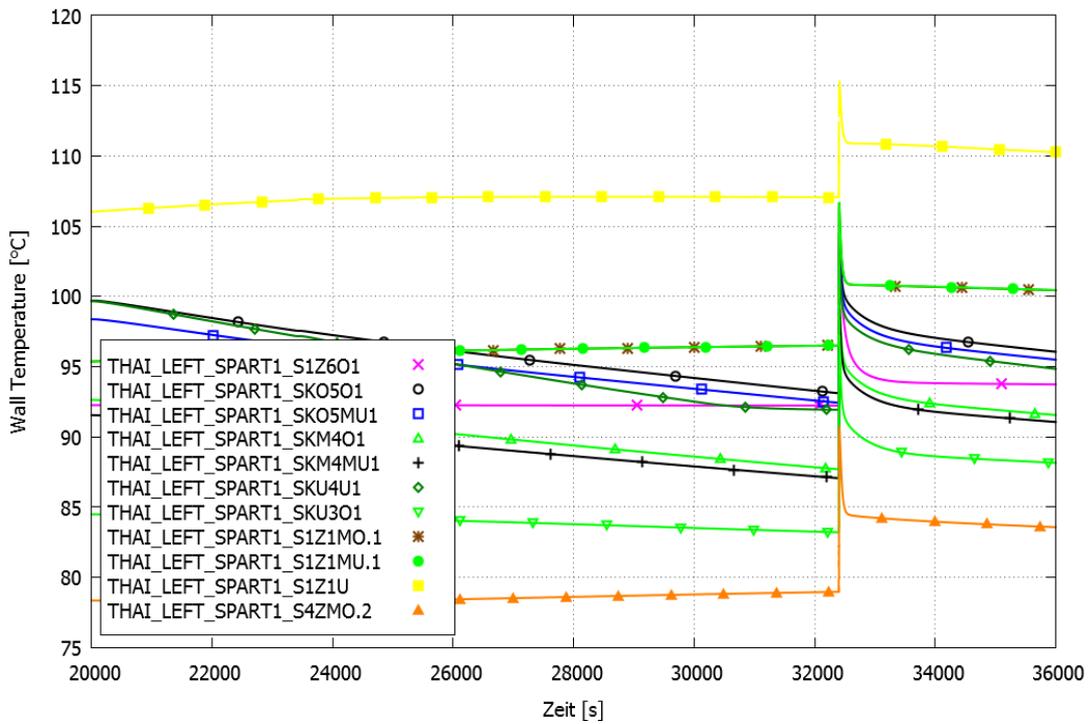


Abb. 5.21 OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der TTV-Behälterwände in Phase 1 und 2

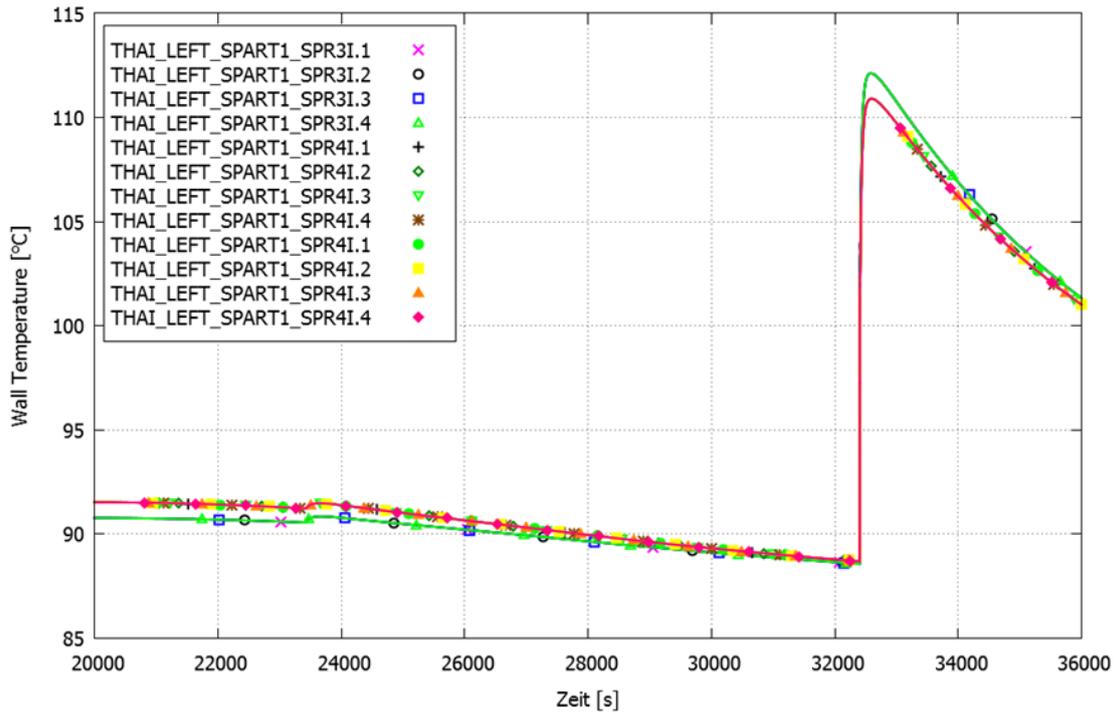


Abb. 5.22 OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Farbbleche mit einer Stärke von 15 mm in Phase 1 und 2 im TTV

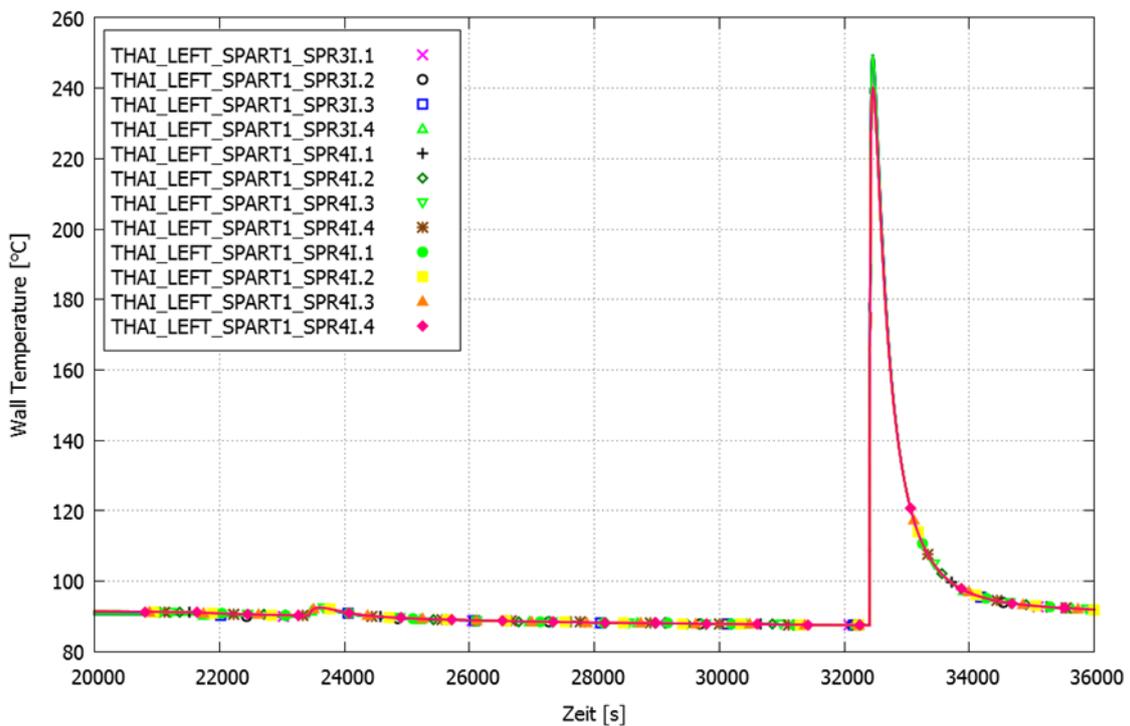


Abb. 5.23 OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Farbbleche mit einer Stärke von 1,5 mm in Phase 1 und 2 im TTV

In der aktuellen COCOSYS-Version wird zurzeit die Gasphasentemperatur benutzt, um die Reaktionskonstanten mit der Arrheniusgleichung zu berechnen. Im Fall der Resuspension von $I_2(g)$ und $RI(g)$ von abgelagertem Iod auf Oberflächen durch sehr hohe Temperaturen führt dies sehr wahrscheinlich zu unrealistischen Ergebnissen. Die Resuspensionmodelle in COCOSYS sind für sehr hohe Temperaturen über 140 °C für Farbflächen und 110 °C für Stahlflächen nicht validiert. Die thermische Freisetzung von RI von abgelagertem I_2 auf Farbe ist nicht validiert für Temperaturen oberhalb von 160 °C. Deshalb muss im Rahmen des COCOSYS-Entwicklungsvorhabens darüber diskutiert werden, wie damit zukünftig umgegangen werden soll. Denkbar wäre, dass eine Art mittlere Grenzschichttemperatur verwendet werden könnte. Abzuwarten ist auch, was die Versuchsergebnisse des Versuches Iod-34 ergeben, um ggf. daraus ein neues Modell abzuleiten.

5.1.3 OECD THAI-3, HD-49: H₂-Rekombinatorverhalten in Gegenströmung

In der Analytical Working Group (AWG) des OECD/NEA-Projekts THAI-3 ist ein blinder Benchmark für das Experiment HR-49 zum Verhalten eines Rekombinators (Passive Autocatalytic Recombiner – PAR) in Gegenströmung durchgeführt worden /FRE 18b/. Aufbauend auf den Erfahrungen aus dem Inbetriebnahmeversuch TH-27 ist der Rekombinatorversuch mit COCOSYS modelliert worden.

Das Rekombinatoremodell in COCOSYS berücksichtigt keinen Impulserhalt, weshalb die Gegenströmung in dem Modell keinen Einfluss hat. Die erzielten Ergebnisse sind an den Operating Agent Becker Technologies fristgerecht gesendet worden. Erste Vergleiche von Becker Technologies zeigen eine große Übereinstimmung der Ergebnisse mit dem Experiment, was darauf schließen lässt, dass Gegenströmungen nicht weiter modelliert werden müssen.

Die Ergebnisse der blinden und offenen Simulationen zum REKO-Benchmark HR-49 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Lediglich die blinden Simulationsergebnisse bei Verwendung der AREVA-Korrelation in MELCOR waren unbefriedigend. Letzteres konnte jedoch durch eine Modifikation der Korrelation in den offenen Nachrechnungen deutlich verbessert werden. Da das Experiment im Rahmen von OECD THAI-3 durchgeführt worden ist, kann erst nach Freigabe der experimentellen Daten die eingehende Analyse der Rechnungsergebnisse erfolgen. Die nachfolgenden Abbildungen sind in diesem Sinne als Überblick zu verstehen. Die Dokumentation des Vergleichs kann erst später erfolgen.

In Abb. 5.24 ist die THAI+-Anlage sowie das Schema des Versuchsaufbaus skizziert. Das Prinzip des Platten-Rekombinator, wie er in COCOSYS modelliert ist, ist Abb. 5.25 zu entnehmen. Die für den Versuch verwendete COCOSYS-Nodalisierung ist in Abb. 5.26 dargestellt. Sie basiert im Wesentlichen auf derjenigen, die auch für den Versuch THAI TH-27 verwendet worden ist, erweitert um die notwendigen Modifikationen spezifisch für HD-49. Die COCOSYS Rechnungsergebnisse sind in den Abb. 5.27 – Abb. 5.36 dargestellt.

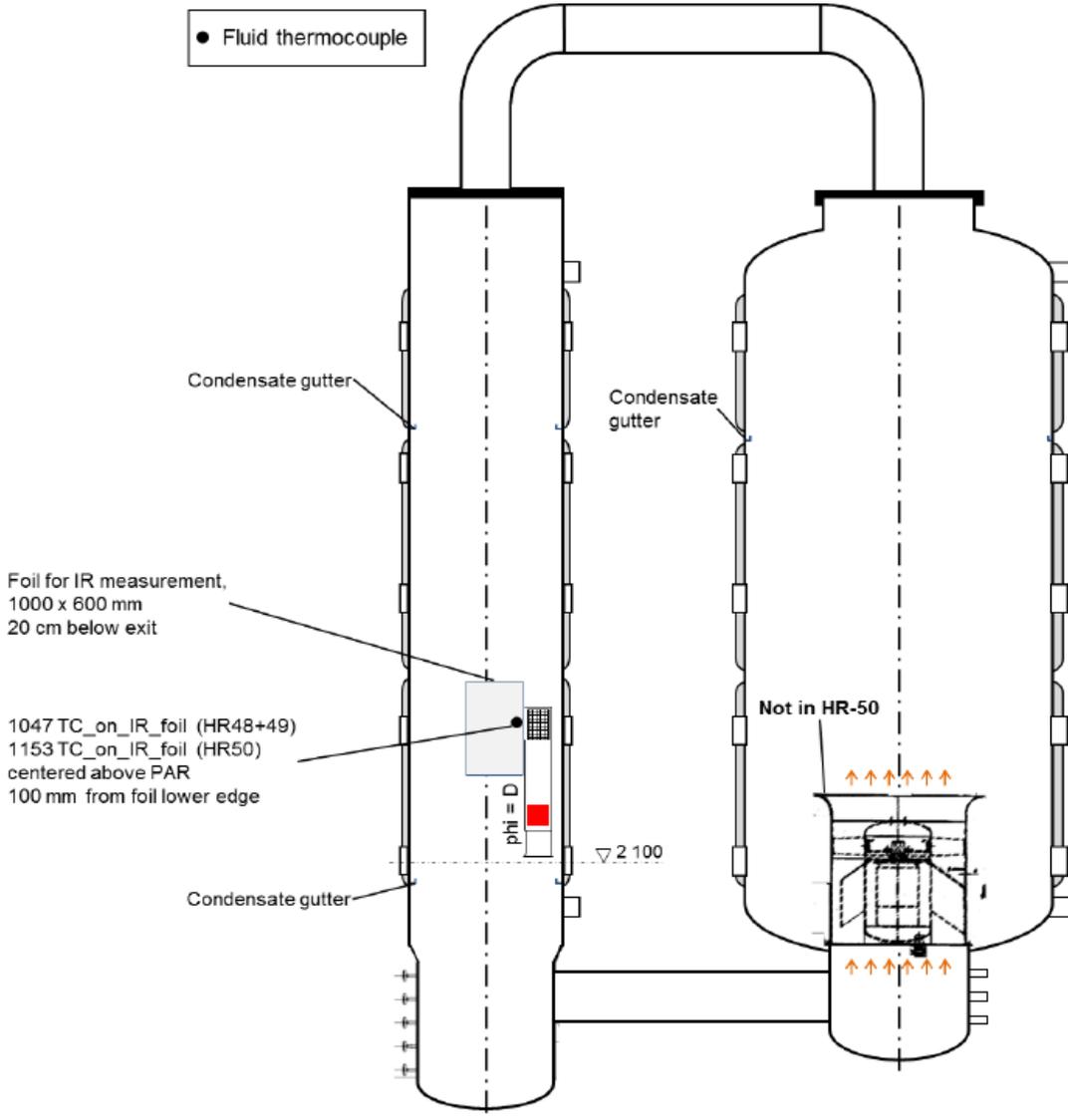


Abb. 5.24 OECD THAI-3, HR-49: THAI+-Versuchskonfiguration für das Experiment HR-49

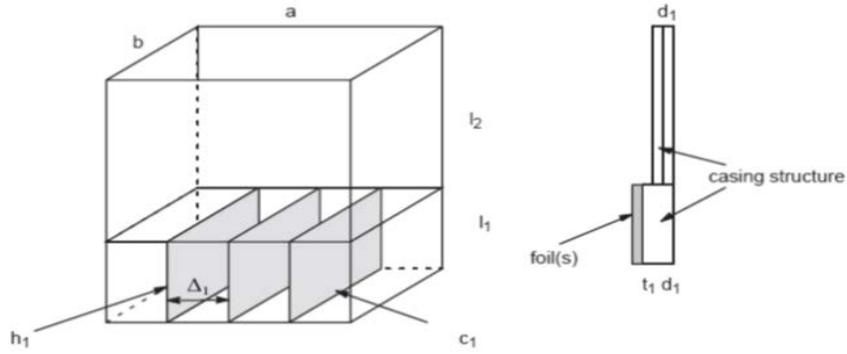


Abb. 5.25 Geometrie eines box-type Rekombinators

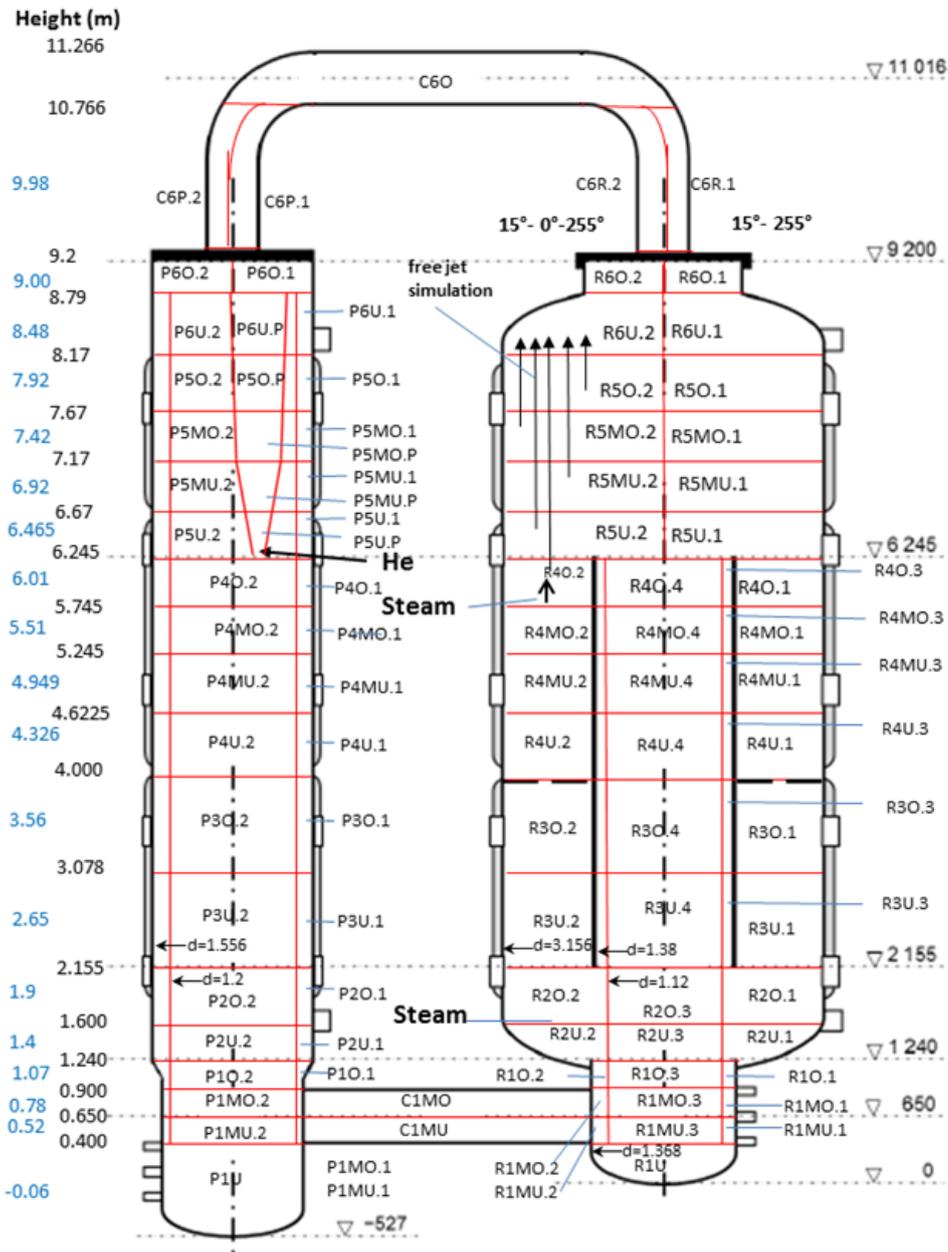


Abb. 5.26 OECD THAI-3, HR-49: COCOSYS-Nodalisierung

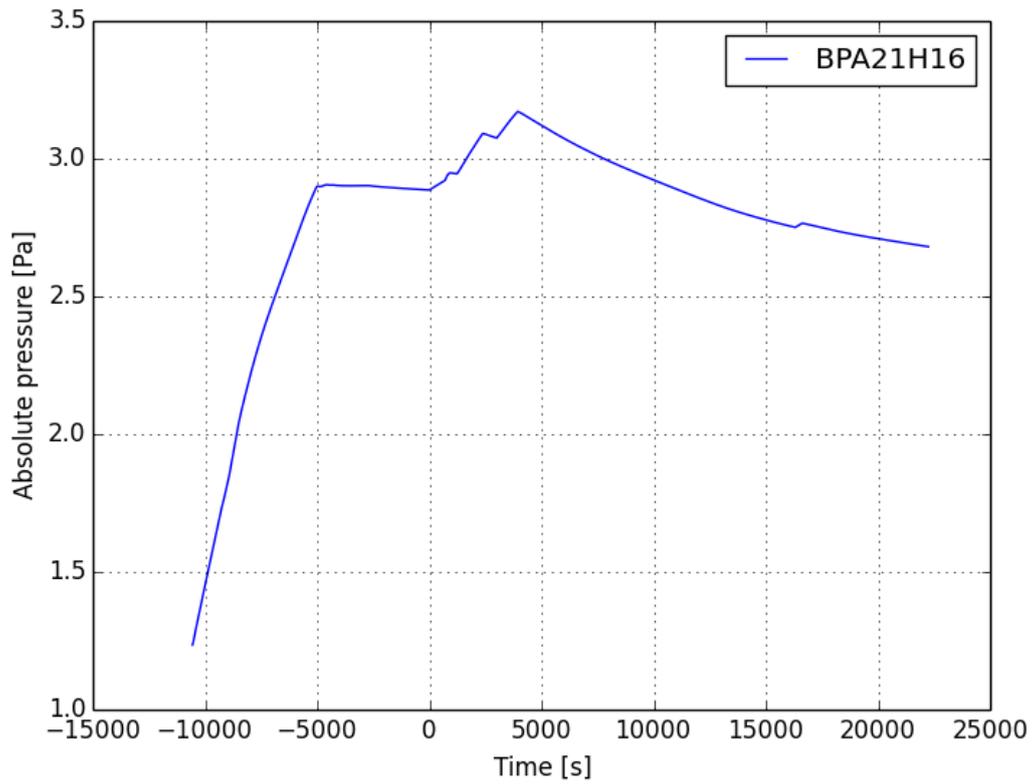


Abb. 5.27 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Druckverlauf

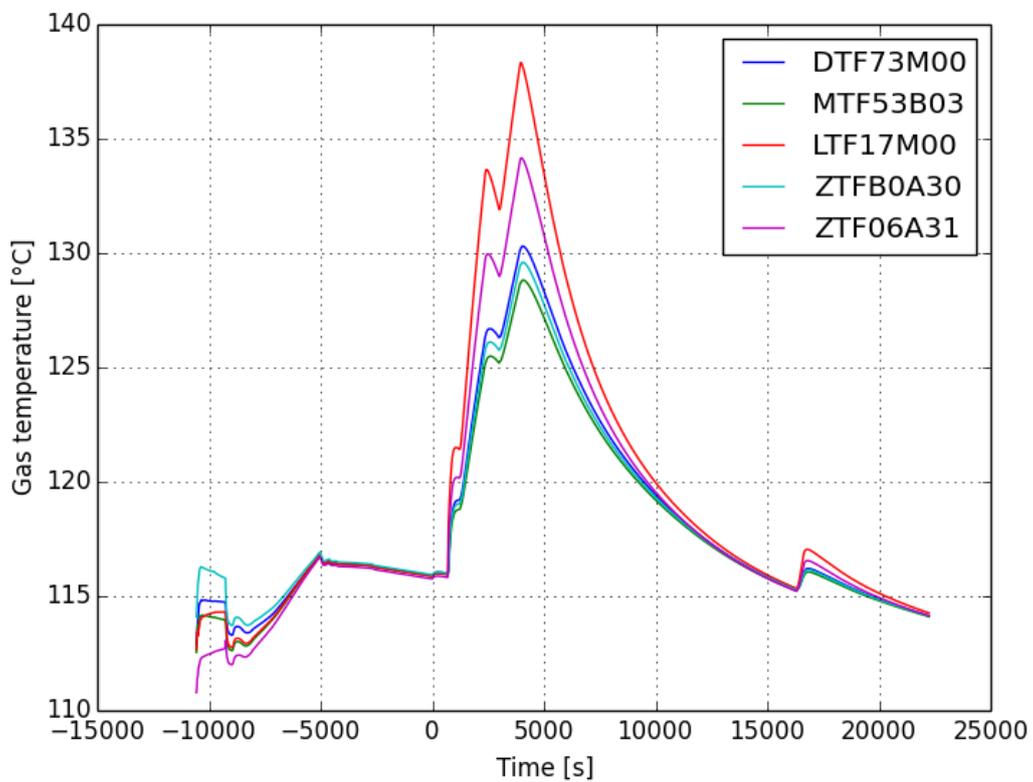


Abb. 5.28 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Atmosphärentemperatur

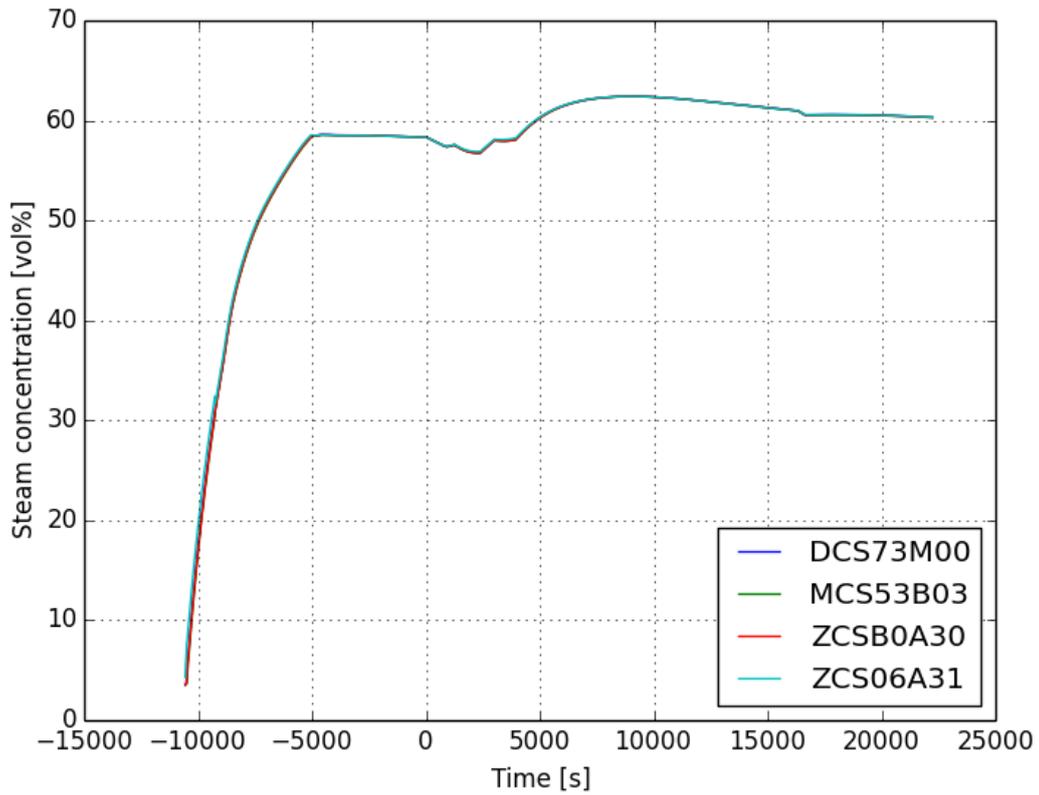


Abb. 5.29 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Dampfkonzentration

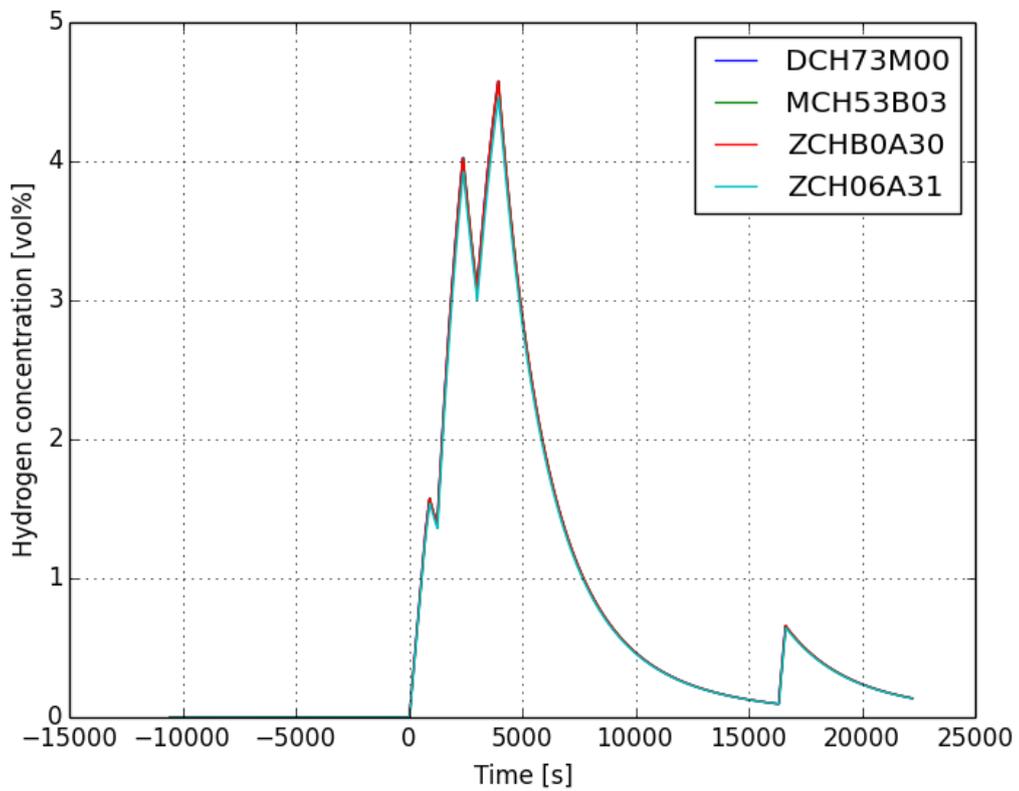


Abb. 5.30 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H₂-Konzentration

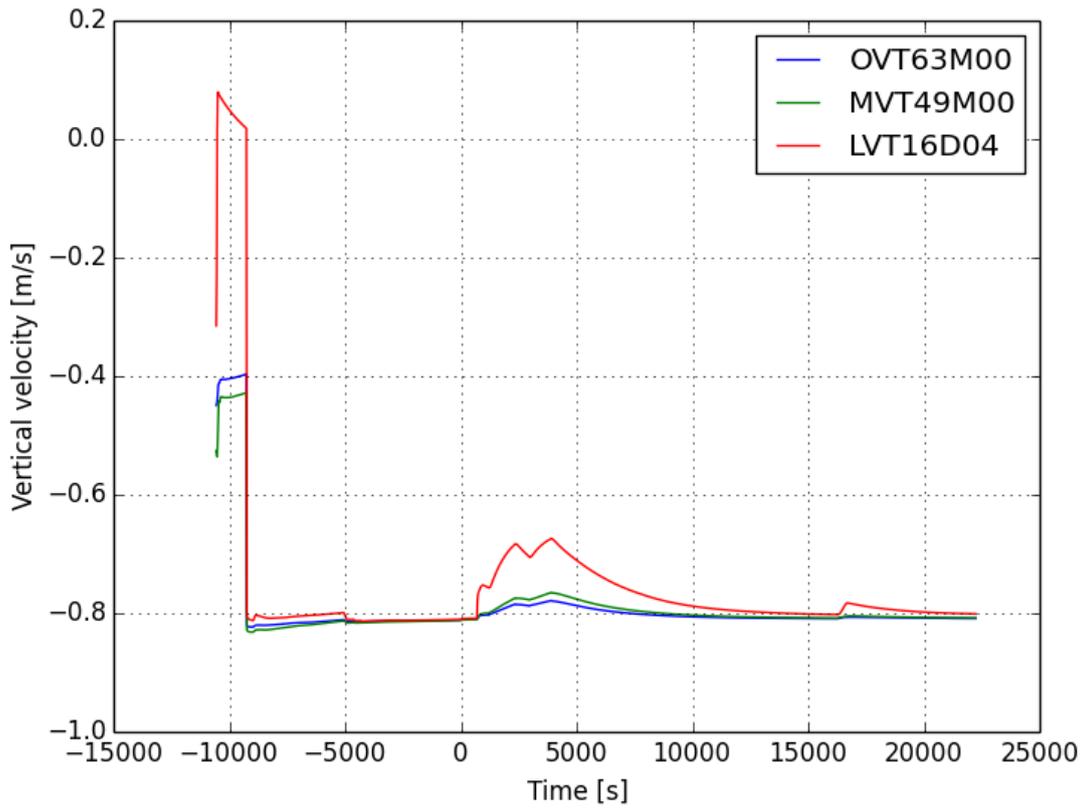


Abb. 5.31 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H₂-Konzentration

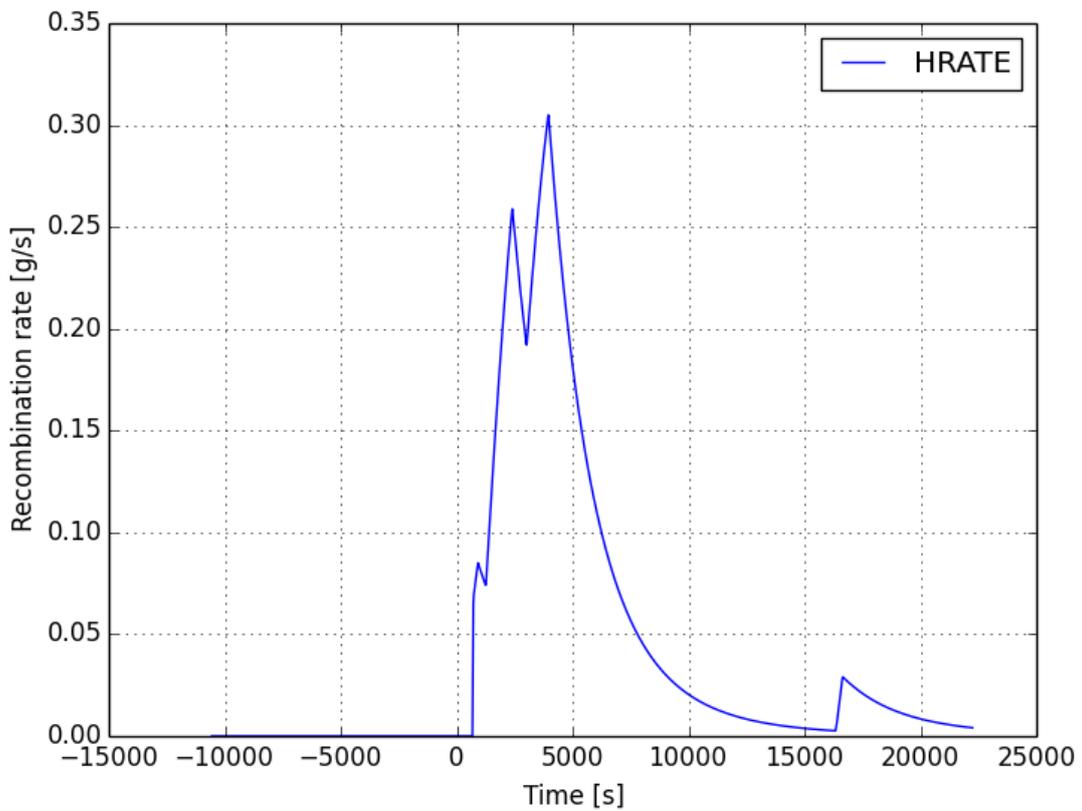


Abb. 5.32 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H₂-Rekombinationsrate

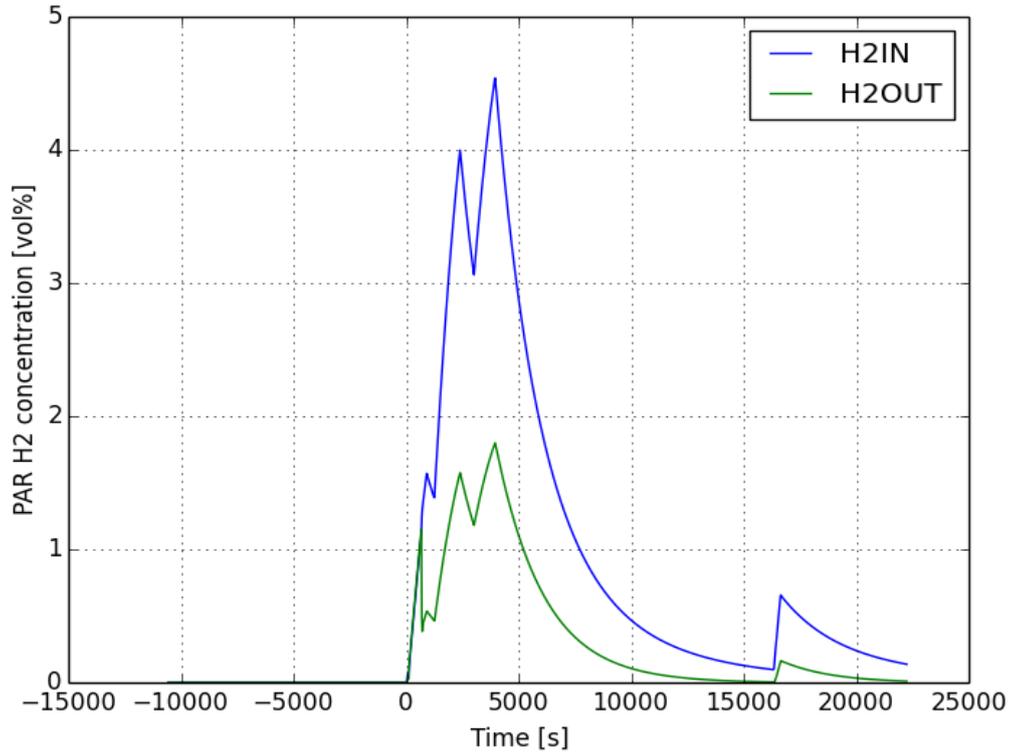


Abb. 5.33 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H₂-Konzentration am Eintritt und Austritt des Rekombinators

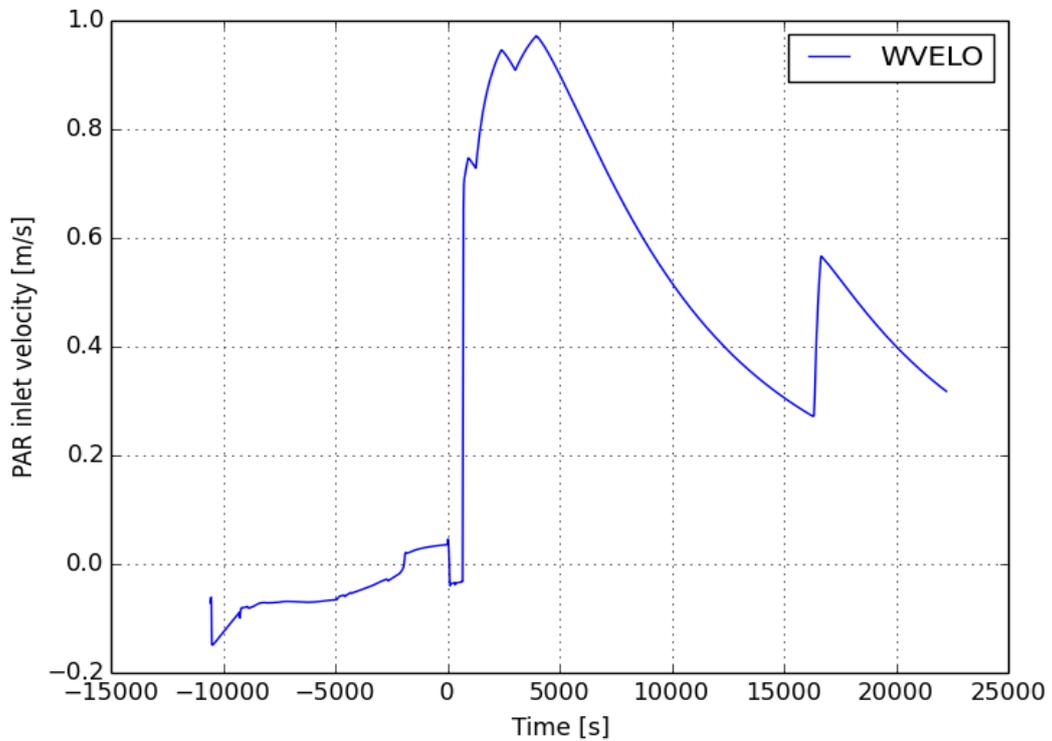


Abb. 5.34 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H₂-Konzentration am Eintritt und Austritt des Rekombinators

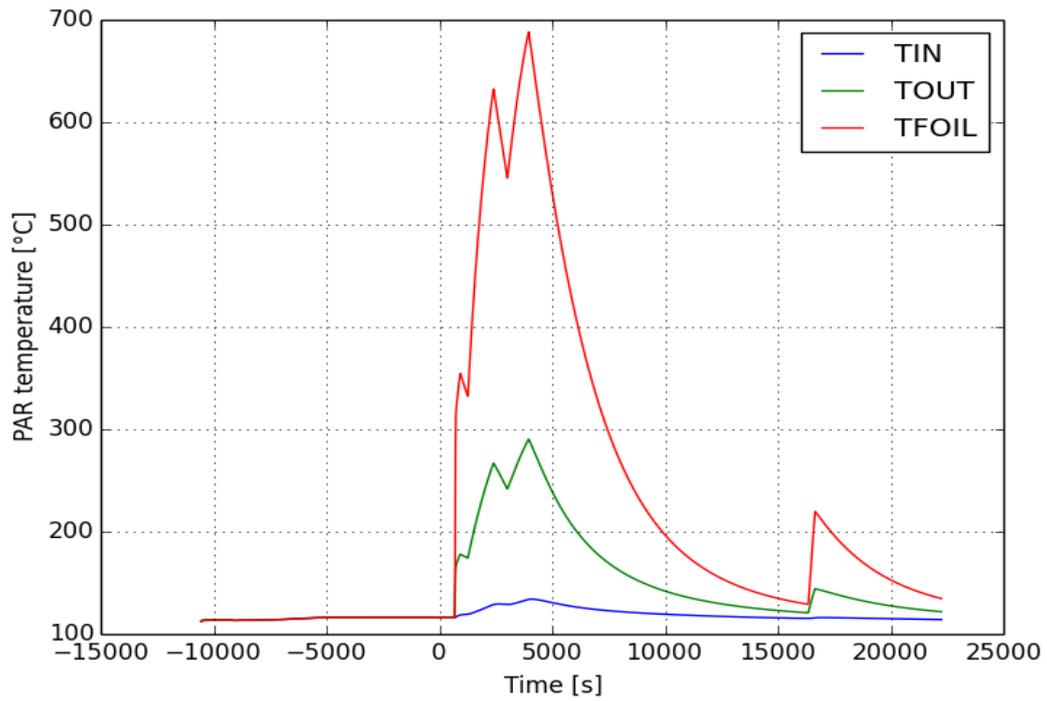


Abb. 5.35 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Temperatur am Eintritt, Austritt und im Rekombinator

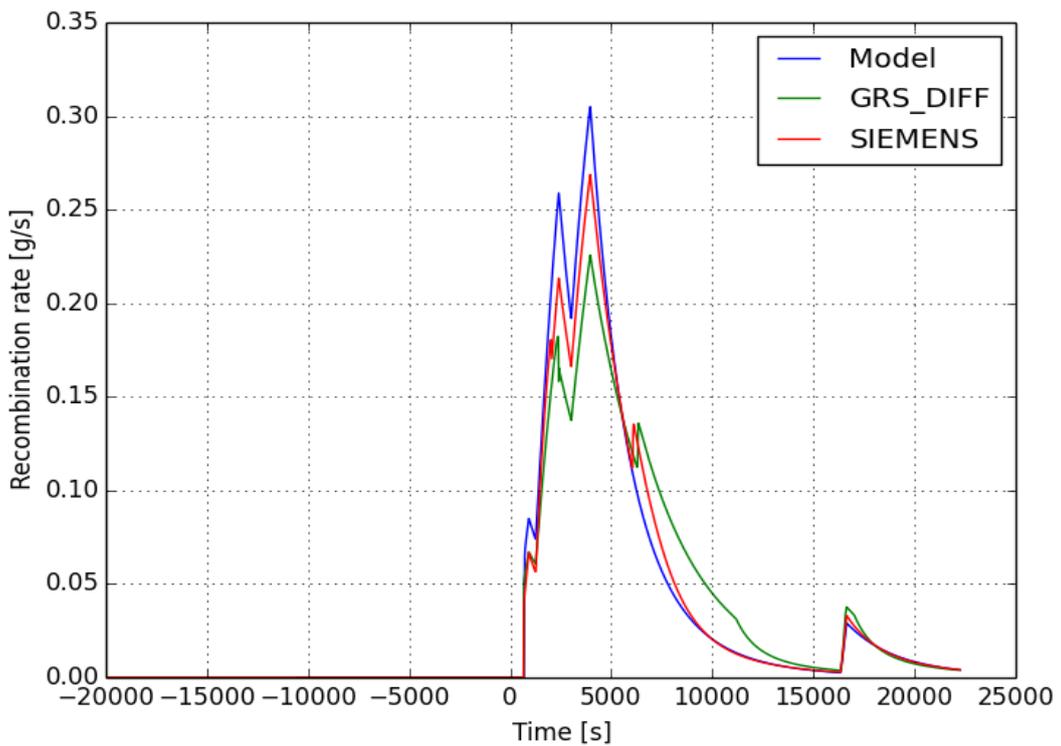


Abb. 5.36 OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Temperatur am Eintritt, Austritt und im Rekombinator

5.1.4 OECD THAI-3, HD-Versuchsserien: H₂-Verbrennungsversuche

Die mit der Kernaufheizung, Zerstörung und nach RDB-Versagen im Falle der Beton-Schmelze-Wechselwirkungen teilweise enormen Mengen an brennbarem H₂ und CO im Containment und dabei auftretenden Verbrennungen haben in der Aufarbeitung der Unfälle im japanischen Kernkraftwerk Dai-ichi nochmals deutlich an Aufmerksamkeit gewonnen. In der Vergangenheit sind in der THAI-Anlage sowie weiteren Versuchsständen (z. B. ENACEFF /OECD 12/) bereits diesbezüglich Experimente zur Verbrennung und zum Druckaufbau durchgeführt worden. Diese waren bei THAI bisher auf den einzelnen THAI-Behälter (TTV) beschränkt. Typische Verbrennungen im SB breiten sich aber in den komplexen Raumketten aus. Nach Erweiterung der THAI-Anlage um den zweiten Behälter (PAD – Parallel Attachable Drum) ermöglichen Experimente nun eine realistischere Abbildung solcher Verhältnisse. Die Daten sind für die Validierung sehr wertvoll, da das Verbrennungsmodell FRONT in COCOSYS bisher nur weitestgehend an eher eindimensionalen Experimenten getestet worden ist und erste Anwendungen in realen Anlagengeometrien noch Klärungsbedarf eröffneten.

5.1.4.1 Randbedingungen der OECD THAI-3, HD-Versuche

Im von OECD THAI-3 wurden in der THAI+-Versuchsanlage von Becker Technologies GmbH H₂-Verbrennungsversuche der Versuchsserie HD-40 bis HD-45 durchgeführt. Zielsetzung der Versuche war die Vertiefung der Kenntnisse zur Phänomenologie des Verbrennungsablaufs und die Bereitstellung experimenteller Daten in der 2-Behälter-Anlage. Als zusätzlicher Einfluss sollte das Vorliegen einer überlagerten Konvektionsströmung bereits bei Zündung untersucht werden, wie sie unter realistischen Bedingungen bei Störfällen in KKW erwartet werden.

In der Versuchsserie HD-40 – HD-42 wurden die Gaskonzentrationen als auch die Temperaturen in beiden Behältern unterschiedlich eingestellt. Eine umlaufende Strömung wurde erst mit den Versuchen HD-43 bis HD-45 realisiert. Dazu wurde im kleineren PAD-Behälter direkt über dem Sumpf ein Axialgebläse installiert, das aus dem PAD Luft ansaugt und über das untere Verbindungsrohr in den TTV-Behälter drückt und dort eine nach oben gerichtete Umlaufströmung induziert (Abb. 5.37). Aus der Zündzone kann sich dann die Flamme sowohl nach oben entgegen der Atmosphärenströmung als auch durch das untere Verbindungsrohr in Richtung PAD ausbreiten. Je nach Versuchsauslegung variieren der Zündort und die umlaufende Gasgeschwindigkeit. Im Versuch HD-

44 kamen die gleichen Randbedingungen zum Einsatz wie im Versuch HD-36 aus dem nationalen THAI-Programm.

Im Rahmen des nationalen Vorhabens THAI-V wurden Untersuchung von H₂-Verbrennungen in einer Mehrraum-Geometrie unter realitätsnahen Bedingungen wie z. B. Temperatur- und Konzentrationsgradienten und anfänglicher Naturkonvektionsströmung durchgeführt (Serie HD-36 bis HD-39). In den Versuchen HD-36 und HD-37 wurde im TTV unten bzw. im PAD unten gezündet (vgl. Abb. 5.38) und das homogen verteilte Wasserstoff-/Dampf-/Luft-Gemisch gezündet. Die H₂-Konzentration betrug 10 vol.% und die Dampfkonzentration 25 vol.% bei 90 °C Atmosphärentemperatur.

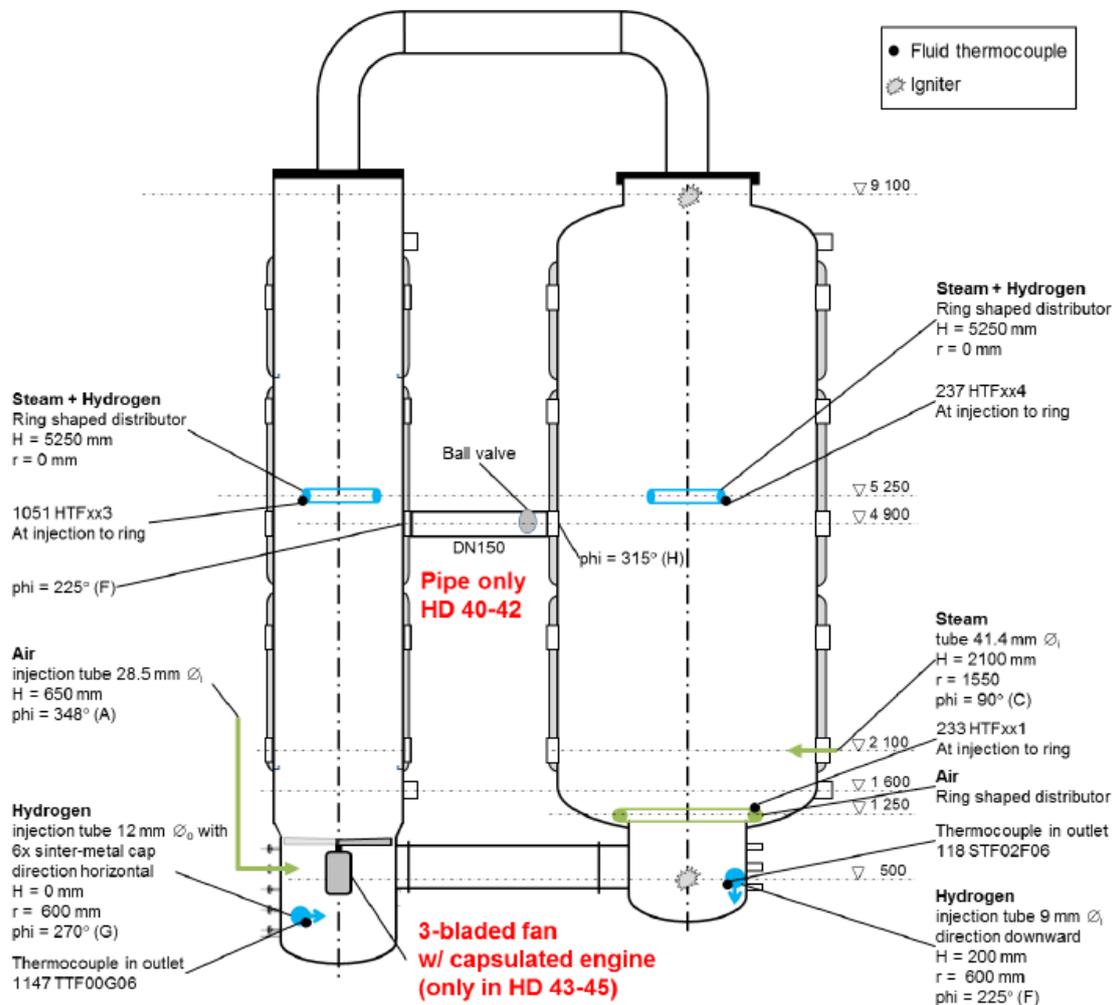


Abb. 5.37 OECD THAI-3, HD-Versuche: Versuchsaufbau der Anlage THAI+ für die H₂-Verbrennungsversuche HD-43 – HD-45 /FRE 19/

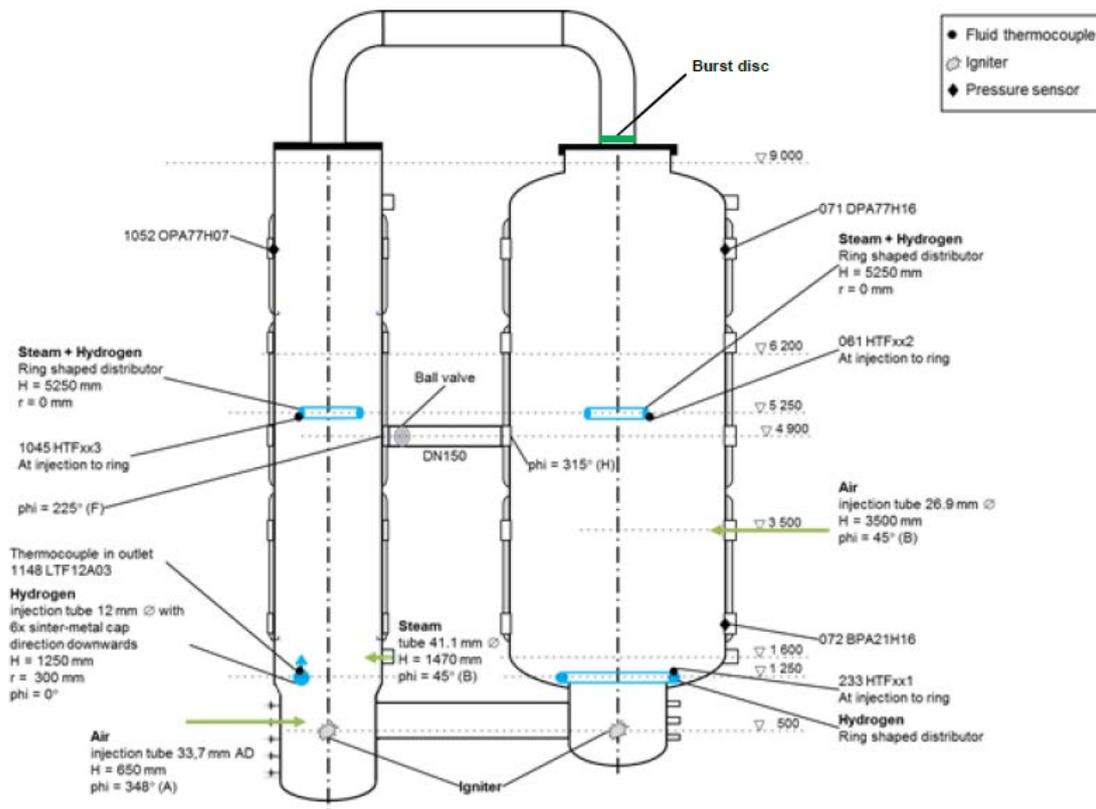


Abb. 5.38 Nationales THAI, HD-Versuche: Versuchsaufbau der Anlage THAI+ für die H₂-Verbrennungsversuche HD-36 – HD-39 /GUP 17/

5.1.4.2 COCOSYS-Datensatz für die Rechnungen zur H₂-Verbrennung

H₂-Verbrennungsvorgänge werden mit dem Modul FRONT in COCOSYS berechnet. Das FRONT-Modell wurde zunächst im Rahmen der ASTEC-Kooperation mit IRSN von der GRS entwickelt und nach Übernahme in COCOSYS umfangreich validiert und weiterentwickelt. Durchgeführte Parameterstudien und eine Unsicherheitsanalyse mit dem FRONT-Modul in ASTEC, deren Erkenntnisse auch für die in COCOSYS verwendete Version Gültigkeit hatten, zeigten noch maßgebliche Unsicherheiten bezüglich verschiedener Eingabeparameter auf, die z. B. die Verbrennungsgeschwindigkeit betreffen. Daher wurde eine kontinuierliche Überprüfung des Modellstandes anhand neuerer Versuche in der Konfiguration der Anlage THAI+ durchgeführt. Dazu bot sich die Beteiligung am Benchmark zum THAI-Versuch HD-44 an, der ähnlich des THAI-Versuches HD-36 ablief.

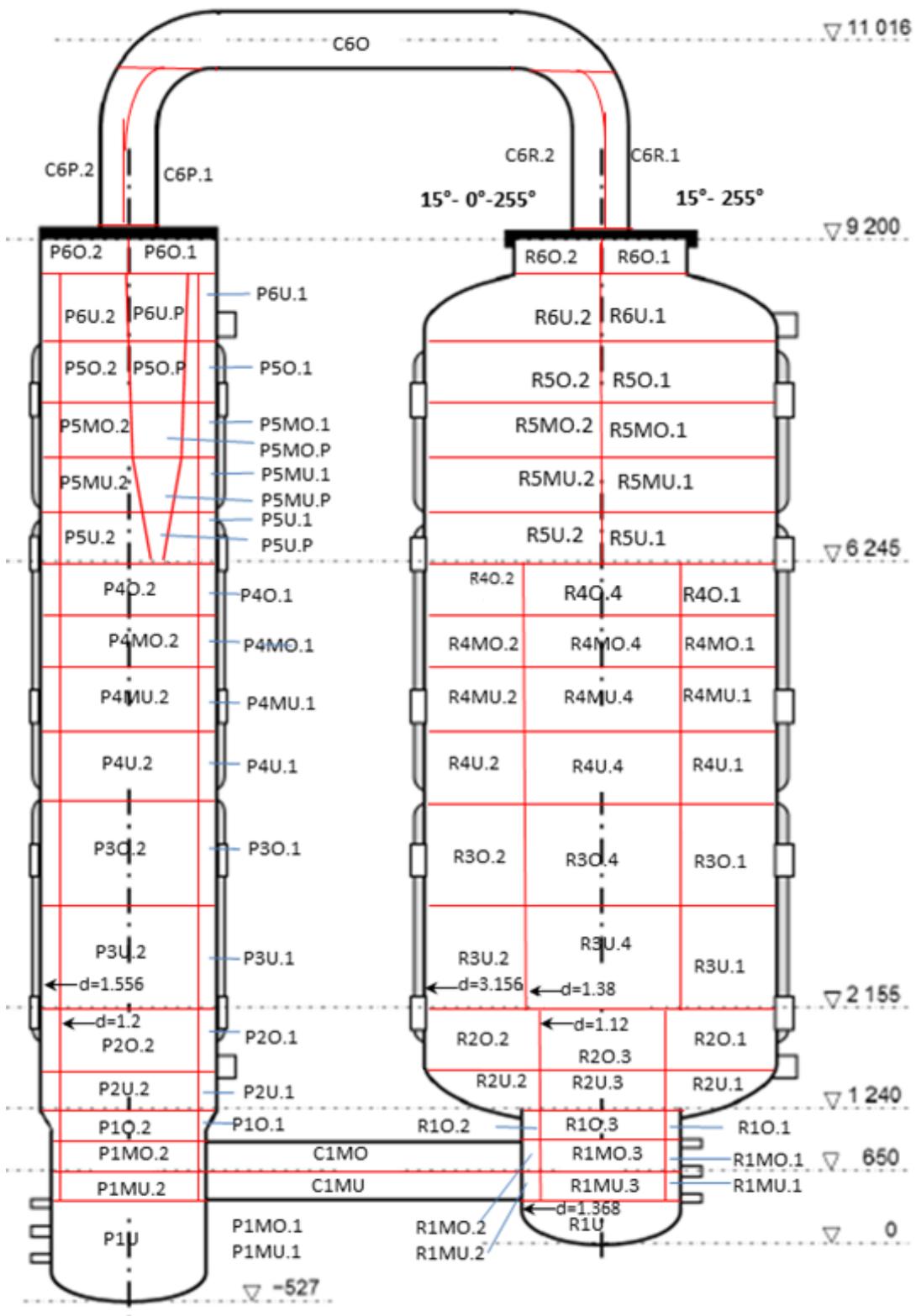


Abb. 5.39 THAI HD-36: Ursprüngliche COCOSYS-Nodalisierung aus TH-27

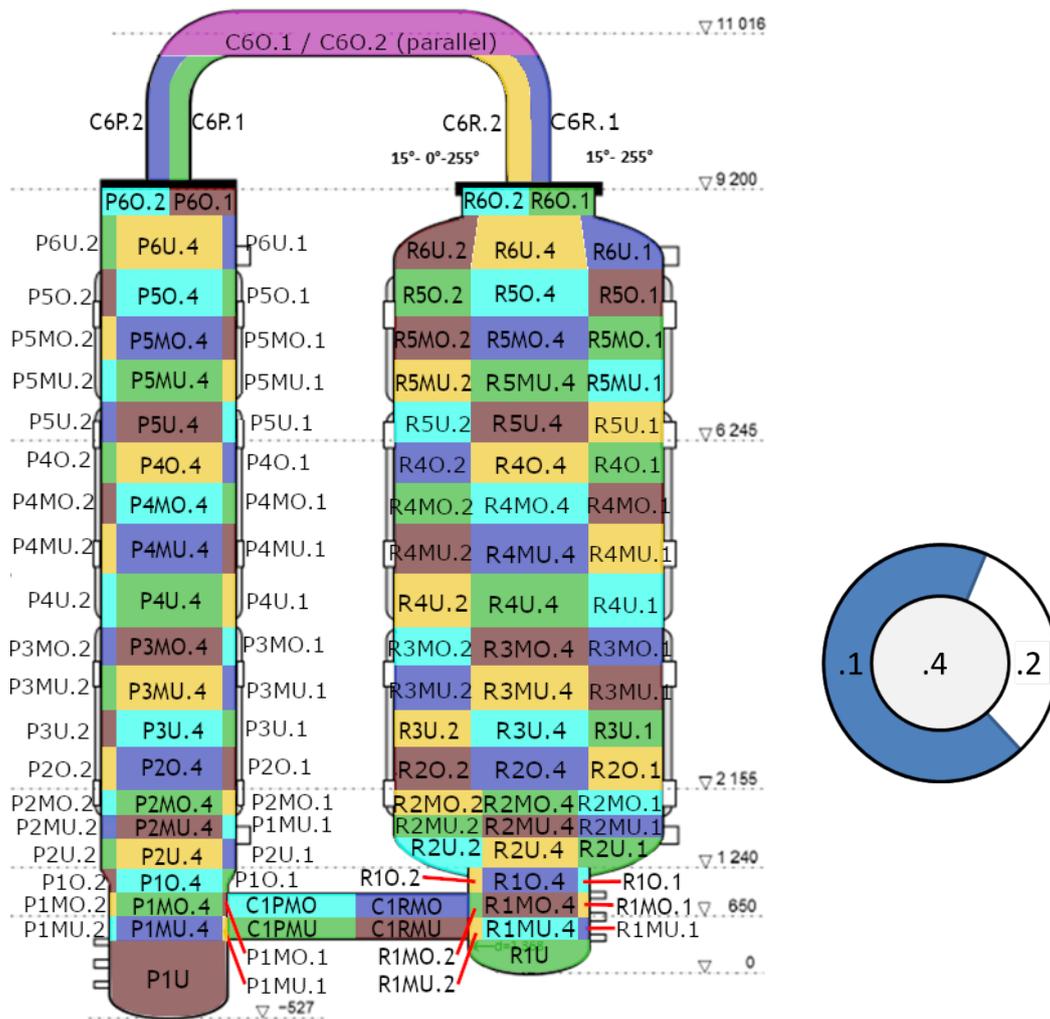


Abb. 5.40 THAI HD-36: Nodalisierungsschema der Anlage THAI+ (links) und schematische Darstellung der Zonen auf den meisten Ebenen in PAD und TTV (rechts)

Der COCOSYS-Datensatz zur Simulation von HD-44 basiert auf dem Datensatz zu TH-27 (einem thermohydraulischen Versuch), der in ersten Rechnungen zu HD-36 verwendet wurde (Abb. 5.39). Aus diesem ursprünglichen Datensatz wurden der Innenzylinder (Zonen R3U.4 – R4O.4), die Kondensatwannen im TTV und die Plumemodellierung entfernt und durch entsprechende Strömungsverbindungen und eine andere Zonenaufteilung ersetzt. Oberhalb dieser Ebene ändert sich die Nodalisierung dahingehend, dass es nur noch zwei Zonen pro Ebene innerhalb des TTV gibt. Die Nodalisierung, die letztendlich in den Rechnungen (sowohl blinde als auch offene) zu HD-44 (siehe nächstes Kapitel) und davor zur Nachrechnung von HD-36 benutzt wurde, ist in Abb. 5.40 dargestellt. Insgesamt besteht der Datensatz aus 130 Zonen in 23 Ebenen (+7 Zonen zur Simulation der Umgebung). Dabei besteht die unterste Ebene aus jeweils einer Zone zur Simulation des „Sumpfes“ des PAD bzw. TTV-Behälters.

Nach der Veröffentlichung der Ergebnisse zu HD-36 konnte die Nodalisierung weiter angepasst werden, um die Prozesse bei der H₂-Verbrennung besser abzubilden:

- Die Abbildung des unteren Verbindungsrohres durch zwei übereinanderliegende Zonen ergibt im Vergleich zu einer Zone eine leicht verzögerte Flammenpropagation durch das Rohr. Durch die feinere Unterteilung des Rohres in mehrere Zonen in Strömungsrichtung (vgl. Abb. 5.39 mit Abb. 5.40) kommt es zu einer schnelleren Zündung innerhalb der ersten Zone in dem Rohr und dies beschleunigt die weitere Ausbreitung der Flamme. Die Geschwindigkeit dabei ergibt sich im FRONT-Modell aus der Summe der Gasgeschwindigkeit und der Flammengeschwindigkeit, die sich wiederum aus der Turbulenz ergibt.
- Eine Abbildung des Innenvolumens im PAD oder TTV durch nur zwei Zonen je Ebene ergibt eine zu starke Nodalisierungsabhängigkeit des Verbrennungsvorganges, der durch die Einführung einer weiteren Zone je Ebene deutlich reduziert werden konnte (vgl. Abb. 5.40 rechts). In allen Ebenen sind beide Behälter durch eine zentrale zylinderförmige Zone sowie zwei Schalen zur Behälterwand hin, die das Verhältnis 1:2 haben, abgebildet. Bei Nodalisierungstests im PAD-Behälter (Innenzylinder + 2 x 50 % für die Schalen) ergab sich kein signifikanter Einfluss dieses Verhältnisses auf die Ergebnisse.
- Die Nodalisierung der unteren Bereiche in PAD und TTV wurde verfeinert, um eine bessere Übereinstimmung der Rechenergebnisse mit dem Experiment bzgl. der Flammenausbreitung im unteren Teil der Behälter zu erzielen.
- Um eine mögliche Gegenströmung im Bereich des oberen Rohrs in der Konditionierungsphase des Versuches HD-36 (also vor der Zündung) abbilden zu können, ist die Nodalisierung des oberen Rohres in zwei parallele Zonen verfeinert worden.

Aus den ersten Nachrechnungen von HD-36 ergab sich aus dem Vergleich der experimentellen Daten mit den Ergebnissen der Rechnungen auch die Notwendigkeit, die Parameter des FRONT-Modells neu einzustellen. Der maximal berechnete Druck nach der H₂-Verbrennung war zwar durchaus korrekt, ähnlich wie die Größenordnung der erreichten Temperaturen, der zeitliche Verlauf entsprach aber nicht den im Experiment beobachteten Abläufen. Die Parameter die in Nachrechnung zu HD-36 letztendlich zu den akzeptabelsten Ergebnissen geführt haben, sind in Tab. 5.1 im Vergleich zu den FRONT-Standardwerten angegeben. Es ist zu bemerken, dass die Parameter nicht extrem, aber dennoch in einigen Punkten deutlich von den Standardwerten abweichen. Dies insbesondere, um die Beschleunigung der Flammenfront in horizontaler Richtung in der

Verbindungsleitung beider Behälter zu erreichen. Für die Bestimmung der Standardwerte wurden Experimente herangezogen (HD-22 und ENACEF), die einen anderen Versuchsaufbau aufweisen. Beide Experimente hatten also keine größere horizontale Ausdehnung oder stärkere Wechselwirkung verschiedener Flammenfronten (über z. B. Druckaufbau).

Tab. 5.1 FRONT-Parameter verwendet in der Nachrechnung von THAI HD-36

Größe	Benutzt in HD-36	Standard Wert
COMO	EXPO	EXPO
REYFAC	1,0764	1,1
REYEXP	-0,13	-0,13
TURW	0,95	0,95
DTRL	0,00342	0,001
TURBLEN_H	0,0072	0,001

Für die Verbrennungsversuche mit umlaufender Strömung (HD-44) wurde ein Gebläse in die THAI-Anlage eingebaut. Generell können Gebläse in COCOSYS als Entnahmen aus einer Zone und Einspeisungen in einer anderen Zone abgebildet werden, z. B. für die großen Umluftsysteme im Containment. Die Strömung im System selbst wird dabei vernachlässigt ebenso wie ein möglicher Druckaufbau im System. Im THAI-Versuch HD-44 erzeugt das Gebläse einen fest vorgegebenen Volumenstrom, indem Luft oberhalb des Axiallüfters angesaugt wird und durch diesen in die Zone darunter gedrückt wird. Damit wird eine Druckdifferenz aufgebaut und die Strömung wird stark verwirbelt. Kommt es jetzt überlagert zu einer H₂-Verbrennung, so kann die Flamme entgegen der Strömung auch durch den Lüfter laufen. Dies sehr hohen Turbulenzen, die in einem Lump-Parameter-Code wie COCOSYS nicht aufgelöst bzw. berechnet werden können, verursachen aber eine sehr starke Beschleunigung der Flammenfront. Für die Simulation des Versuches HD-44 wurde eine Lösung aus verschiedenen Junctions und gesteuerten Ventilen gefunden, die den Lüfter und die relevanten Prozesse außer der Turbulenz hinreichend abbilden können.

5.1.4.3 THAI HD-36: H₂-Verbrennungsversuch

Der THAI-Versuch HD-36 wurde im nationalen THAI-Versuchsprogramm durchgeführt und den Teilnehmern des blinden THAI-Benchmarks HD-44 zur Vorbereitung der Analysen zur Verfügung gestellt. Die berechneten Druckverläufe sind in Abb. 5.41 bzw. Abb. 5.42 zu sehen und den Messwerten gegenübergestellt. Der Druckgradient wird

nicht ganz reproduziert, d. h. er fällt ein wenig zu steil aus, der Maximaldruck wurde aber gut wiedergegeben.

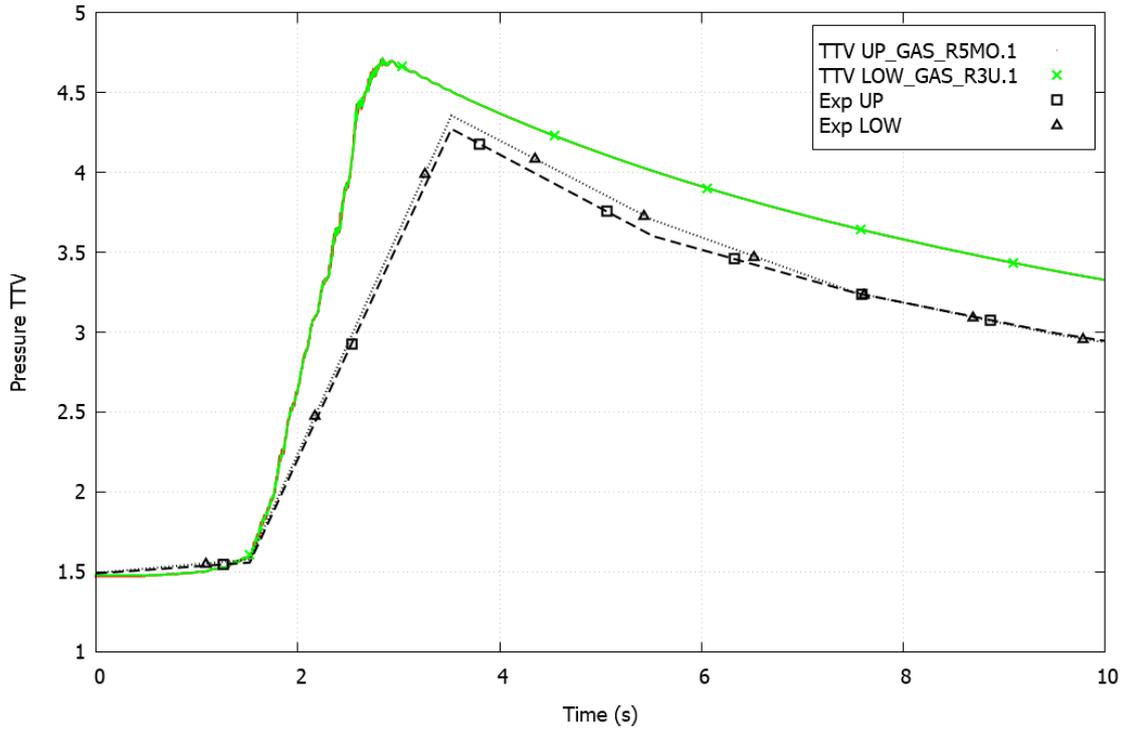


Abb. 5.41 THAI HD-36: Vergleich des Druckverlaufs im TTV-Behälter

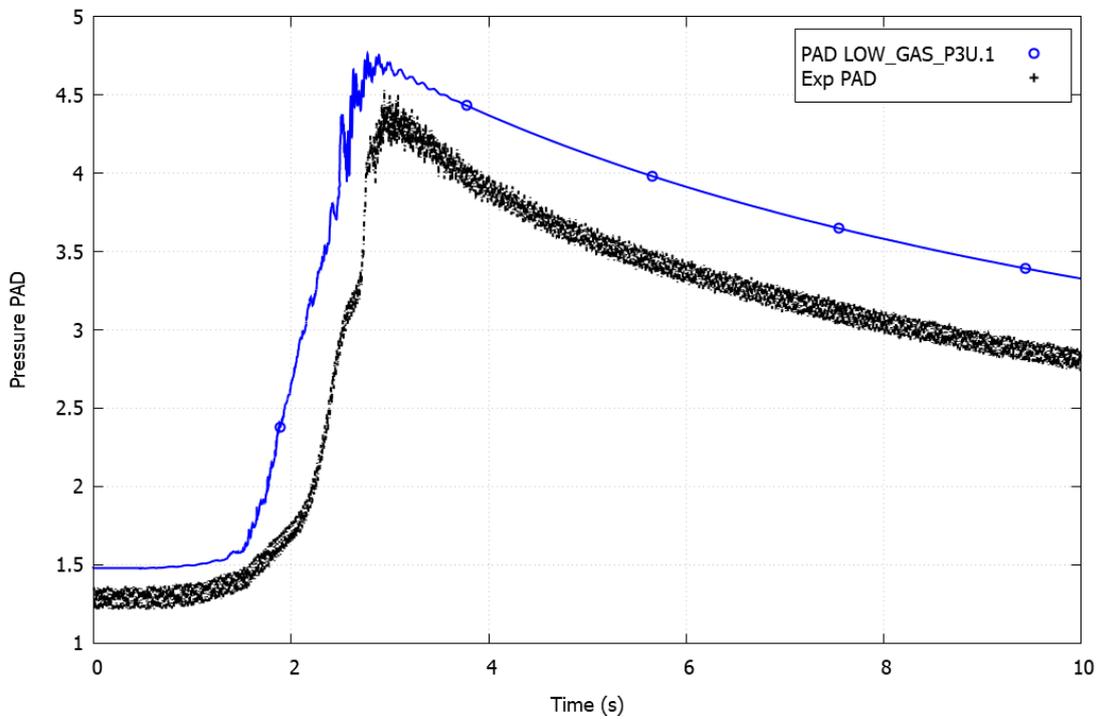


Abb. 5.42 THAI HD-36: Vergleich des Druckverlaufs im PAD-Behälter

Abb. 5.43 zeigt die Zündzeitpunkte der einzelnen Zonen im Vergleich zu den gemessenen Isochronen. Die Isochronen wurden über den Zeitpunkt des Temperaturanstieges von Becker Technologies ermittelt. Bei den Geschwindigkeiten der Verbrennung in diesem Experiment ist zumindest eine Aufheizung des Sensors aufgrund von Wärmestrahlung oder heißen Gasen ohne eine Interaktion mit der Flamme denkbar. COCOSYS Zonen, in denen keine Zündung errechnet wird, sind durchkreuzt markiert.

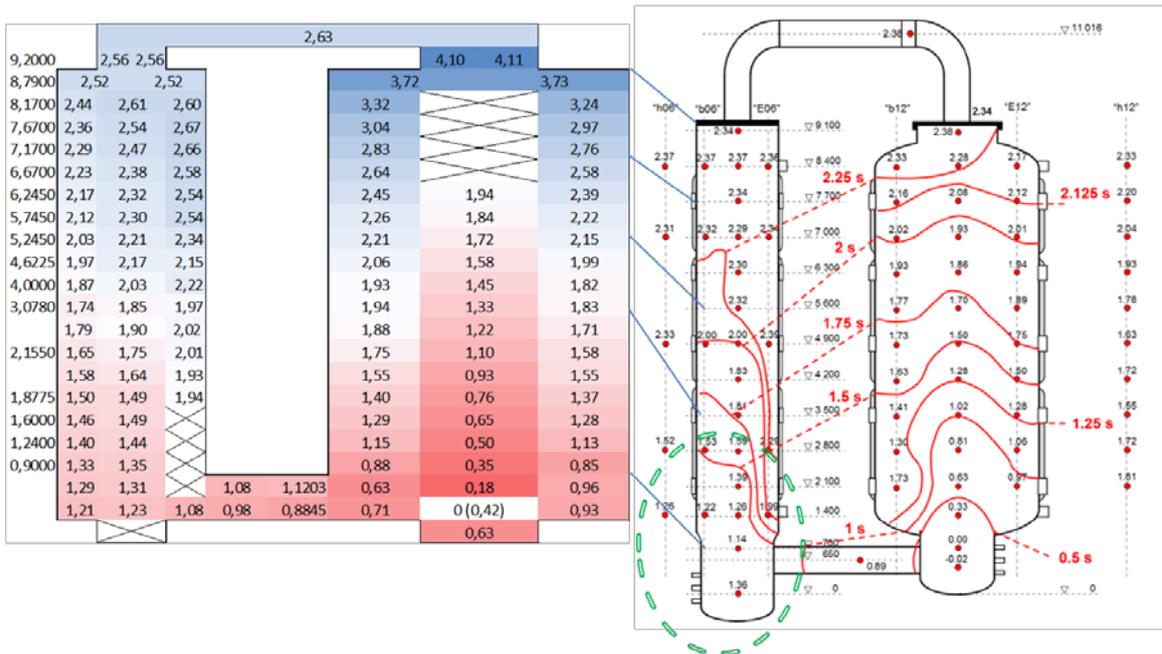


Abb. 5.43 THAI HD-36: Vergleich der Zündzeitpunkte in den Zonen (links) mit den experimentell bestimmten Isochronen (Quelle: Becker Technologies)

Anfänglich steigt die Flammenfront nur im TTV-Behälter nach oben. Im unteren Verbindungsrohr kommt es in der Simulation erst relativ spät nach ~ 1 s zu einer Entzündung. Auch die Propagation der Flamme von der Zündzone in die äußeren „Schalenzonen“ ist relativ langsam. Dies liegt an der sehr geringen Strömungsgeschwindigkeit in der Junction bei ruhender Strömung und der daraus modelltechnisch resultierenden geringen Turbulenzintensität. Erst mit dem Start der Verbrennung innerhalb des Rohrs beschleunigt die Flamme innerhalb des Rohrs. Nachdem die Flamme den PAD-Behälter erreicht hat, steigt sie dort schneller auf als im TTV-Behälter. Der Grund für diesen Unterschied kann nicht eindeutig bestimmt werden, da das FRONT-Modell der Thermohydraulik nachgeordnet ist, diese aber wiederum durch den Energieeintrag und die chemische Reaktion $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ beeinflusst wird. Konvektionsprozesse erzeugen im PAD-Behälter aufgrund der kleineren Geometrie höhere Strömungsgeschwindigkeiten als im TTV-Behälter. Auch können sich im TTV aufgrund der größeren Verbindungsflächen in

der Analyse einfacher interne Konvektionsprozesse ausbilden, während diese im PAD etwas weniger ausgeprägt sind.

Auffällig ist, dass es in der Rechnung nicht in allen Zonen zu einer Zündung kommt, dies ist in vielen der Rechnungen mit FRONT zu beobachten, der genaue Grund ist nicht wirklich eindeutig zu benennen. Eine mögliche Erklärung ist die Art, wie das FRONT-Modell die Verbrennung simuliert. In der „brennenden Zone“ werden brennbare Gase und der aus der Verbrennung entstehende Wasserdampf gemischt, und entsprechend der sich einstellenden Druckgradienten werden die Gase im jeweiligen Mischungsverhältnis in angrenzende Zonen transportiert. Realistischer wäre ein Ansatz mit Simulation einer Verbrennungsfront, bei dem klar zwischen verbranntem und nicht verbranntem Bereich in einer Zone unterschieden wird. Ein solche Anpassung wäre aber in dem Lumped-Parameter-Code nicht ohne erheblichen Aufwand möglich.

Eine weitere Limitierung hinsichtlich einer genauen Nachrechnung von Experimenten sind impulsgetriebene Prozesse, wie z. B. die starke Beschleunigung der Flamme im unteren Rohr und der anschließenden Interaktion der Flamme mit der Wand, welche in COCOSYS nicht berechnet werden. Strömungen werden in COCOSYS grundsätzlich nur durch Druckdifferenzen, Diffusion oder – je nach Nodalisierung – Dichteunterschiede initiiert.

Abb. 5.44 bis Abb. 5.49 zeigen die berechneten und gemessenen Temperaturen des Gases über verschiedene Höhen im PAD- bzw. TTV-Behälter. Es fällt auf, dass die berechnete Gastemperatur immer zu früh und zu stark ansteigt. Der deutlich stärkere Anstieg der Gastemperatur in den Zonen verursacht auch einen Transfer von deutlich heißerem Gas in noch nicht entzündete Zonen, so dass die Temperatur in diesen schon vor der Entzündung deutlich von den Messwerten abweicht. Abb. 5.50 zeigt die berechnete und gemessene Temperatur der Wandstruktur im oberen Bereich des PAD-Behälters. Hier ist deutlich eine umgekehrte Tendenz zu erkennen. Während sich die Wand im Experiment um ca. 40 °C erwärmt, ergibt sich in der Rechnung nur eine Aufheizung um ca. 17 °C.

Die Unterschiede können aus einer thermischen Trägheit der Sensoren einerseits resultieren, und andererseits aus der nicht berechneten Wärmestrahlung der Flamme an die Wand.

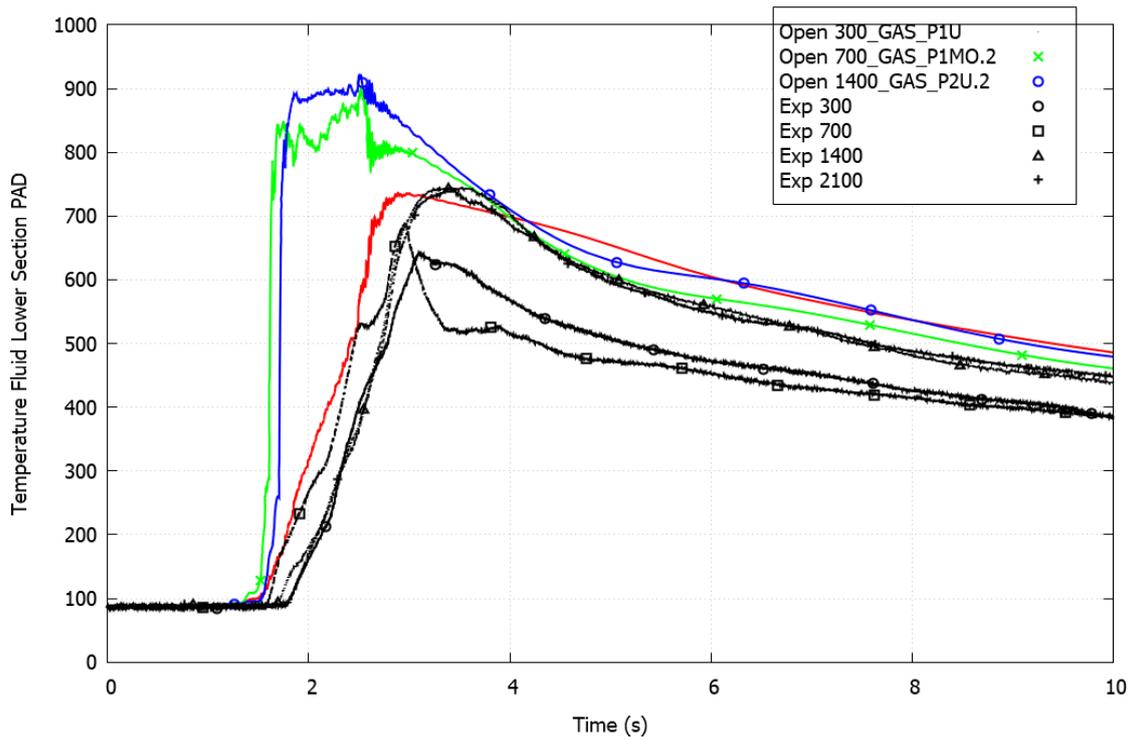


Abb. 5.44 THAI HD-36: Temperaturverlauf im unteren Bereich des PAD-Behälters

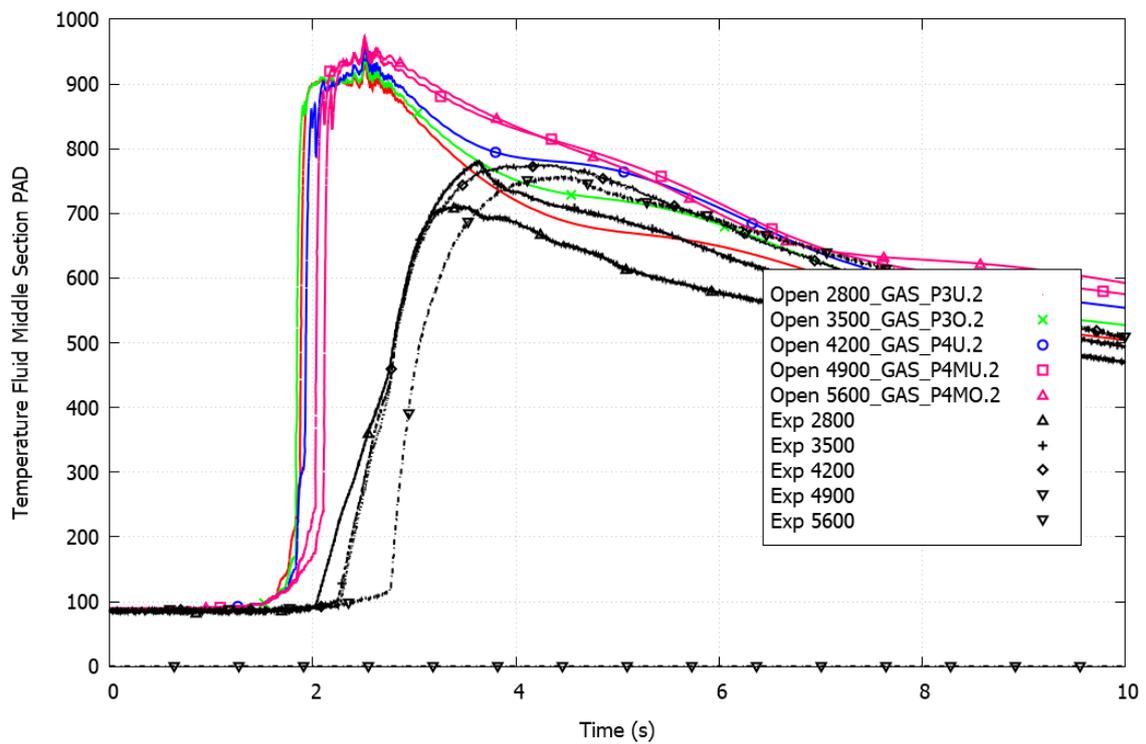


Abb. 5.45 THAI HD-36: Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters

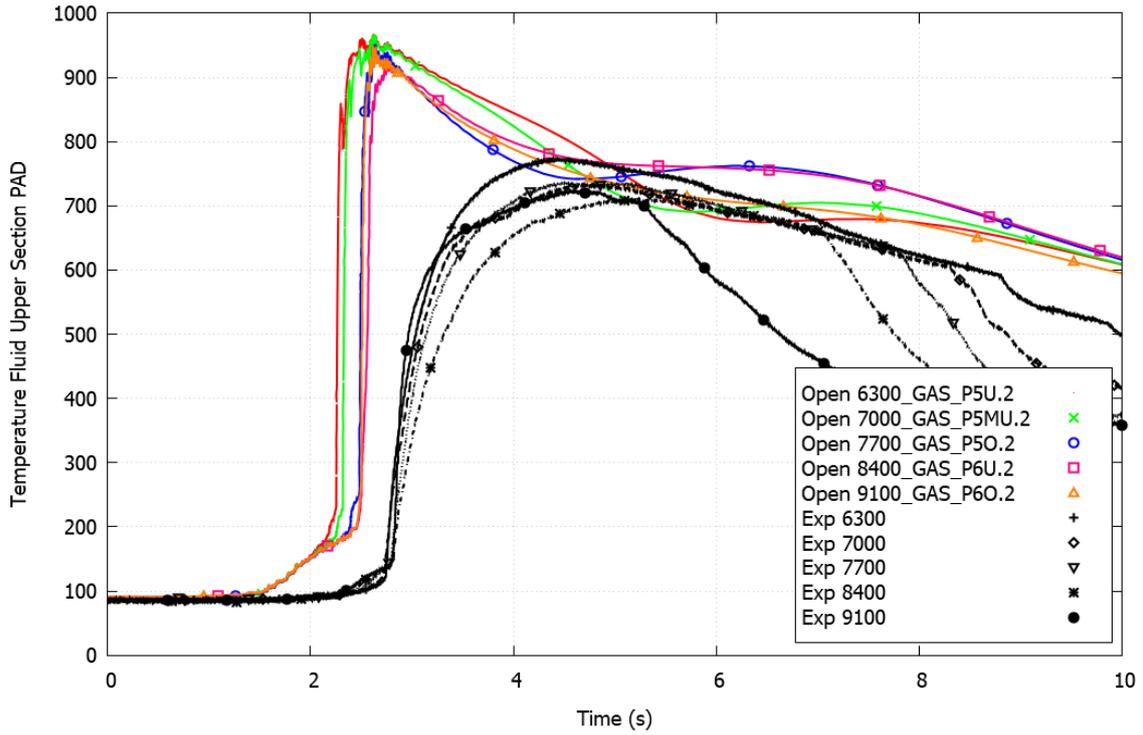


Abb. 5.46 THAI HD-36: Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters

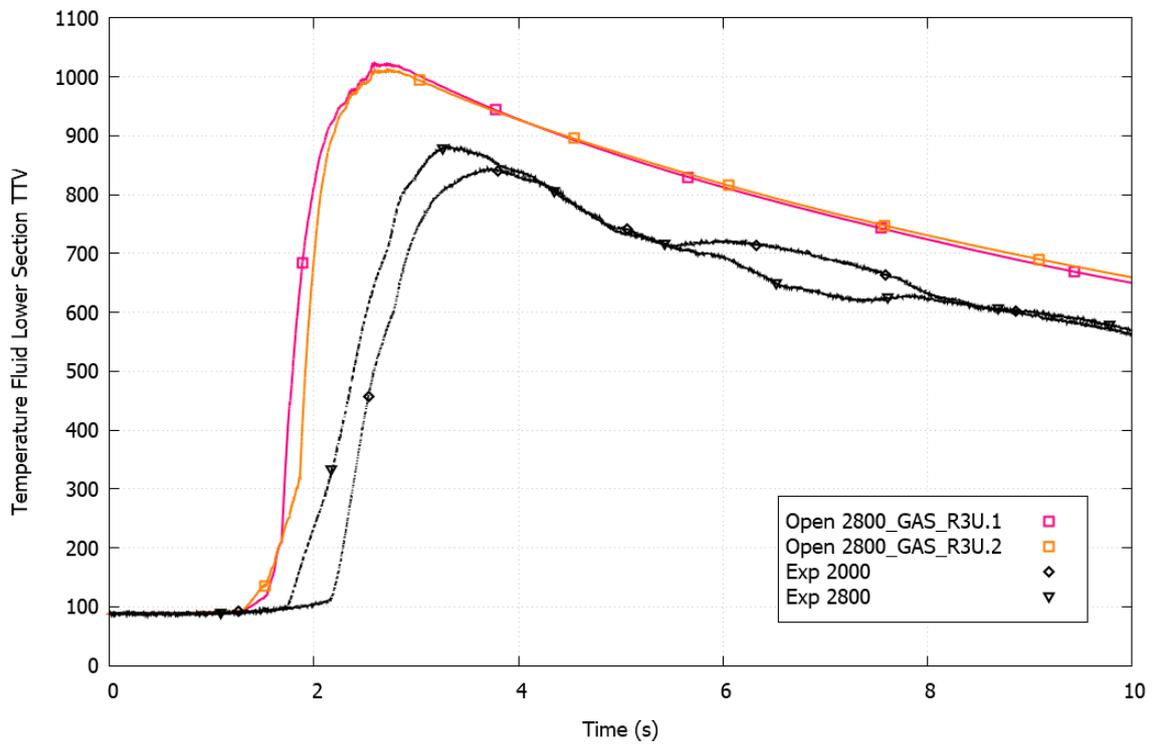


Abb. 5.47 THAI HD-36: Temperaturverlauf im unteren Bereich des TTV-Behälters

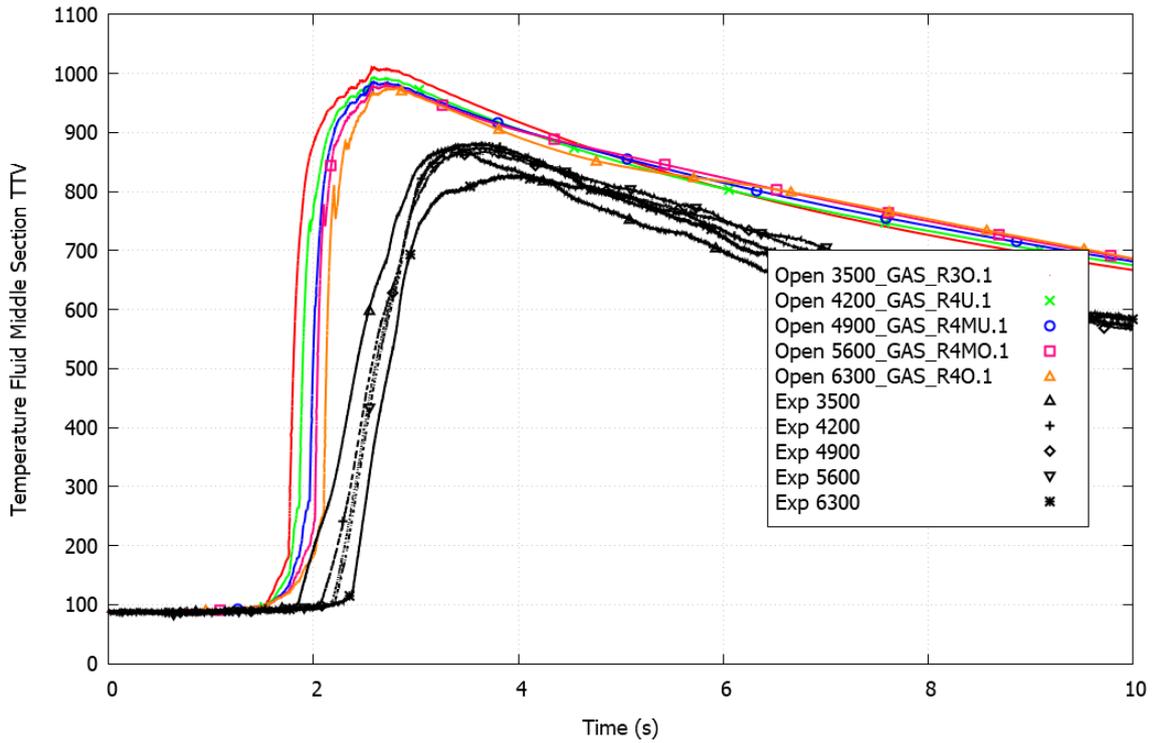


Abb. 5.48 THAI HD-36: Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters

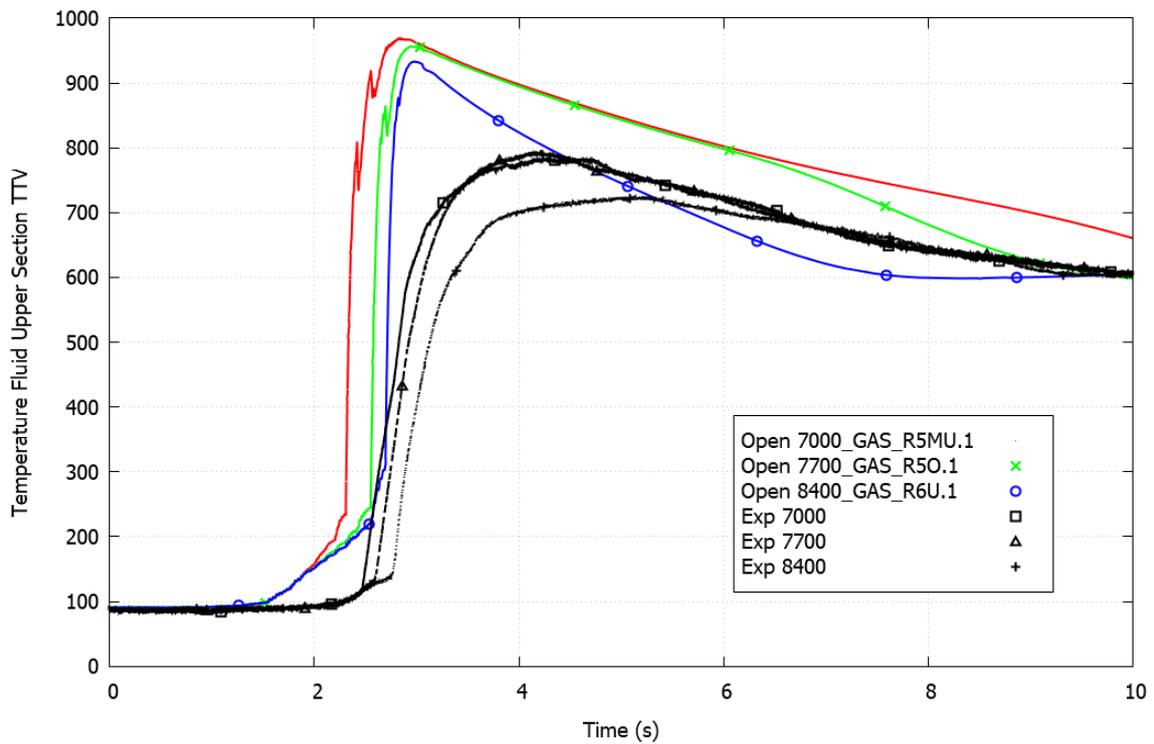


Abb. 5.49 THAI HD-36: Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters

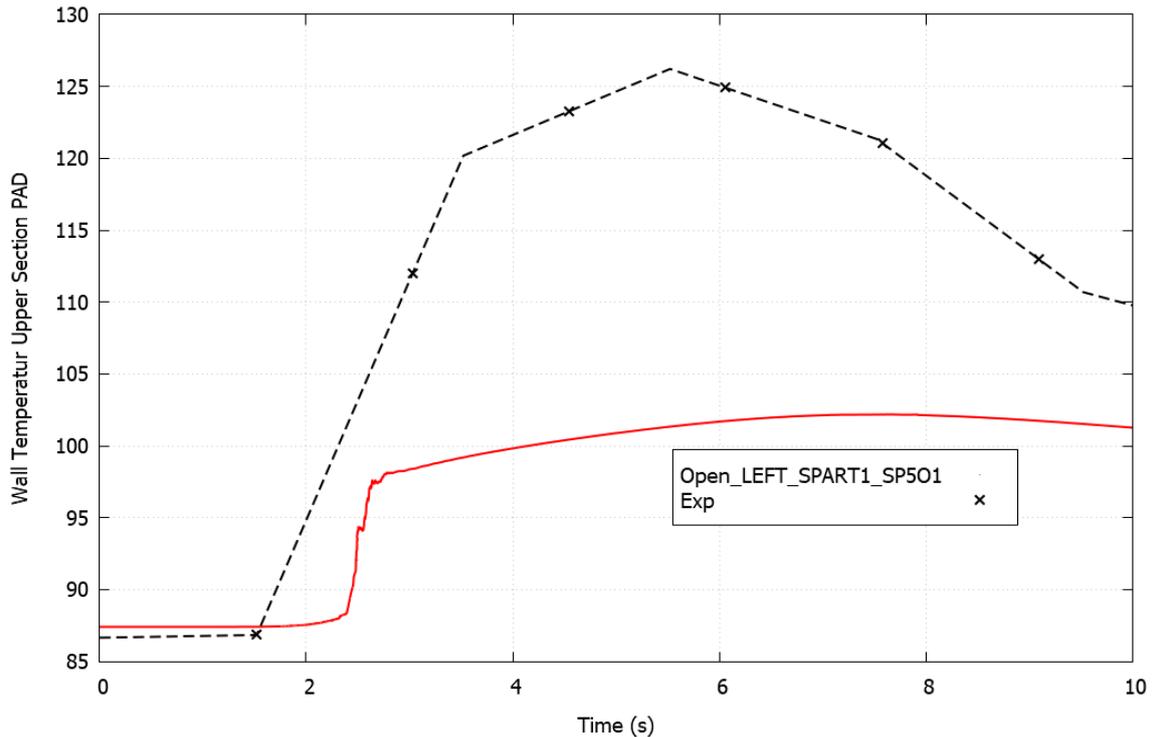


Abb. 5.50 THAI HD-36: Wandtemperatur im oberen Bereich des PAD-Behälters

5.1.4.4 OECD THAI-3, HD-44: H₂-Verbrennungsversuch

Im Rahmen des OECD THAI-3-Vorhabens wurde zu THAI HD-44 ein Benchmark durchgeführt, der in eine blinde und eine offene Phase unterteilt war. An diesem beteiligte sich die GRS mit COCOSYS-Rechnungen.

Blinde Vorausrechnungen zu OECD THAI-3, HD-44

Für die Rechnungen zu HD-44 musste der Datensatz um den Lüfter erweitert werden (siehe Seite 269), und die Randbedingungen (Gaszusammensetzung, Temperatur etc.) mussten angepasst werden. Neben der Nodalisierung haben die Parameter des FRONT-Modells den größten Einfluss auf die Ergebnisse einer Verbrennungsrechnung. Für die Nachrechnungen von HD-44 wurden zwei Rechnungen durchgeführt, einmal mit den Parametern, die in HD-36 verwendet wurden, und einmal mit den Standard-Werten. Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden hier vorgestellt.

Für die Rechnungen, die im Rahmen des blinden Benchmarks abgegeben wurden, wurden die Parameter, die für die Nachrechnung des Experiments HD-36 genutzt wurden, verwendet.

Blinde Vorausrechnungen zu OECD THAI-3, HD-44 mit Default-Parametern für FRONT

Die genauen Prozesse in dieser Verbrennungsrechnung werden in einem nachfolgenden Kapitel beschrieben, da in diesen offenen Rechnungen die Vorgänge am besten reproduziert wurden. Dort wird auch darauf eingegangen, warum die blinden Rechnungen die experimentellen Ergebnisse nicht gut reproduzieren. Mit den Standardwerten ergibt sich, wie in Abb. 5.51 bis Abb. 5.59 zu erkennen ist, ein Druckanstieg um ca. 2,8 bar in etwa 2,2 s. Die Zündung erfolgt bei 0,42 s, eine merkliche Veränderung im Druck ergibt sich erst ab ca. 1,2 s, dann ist aber eine anfänglich exponentielle Drucksteigerung berechnet worden. Die Temperaturen erreichen Werte bis fast 1000 °C.

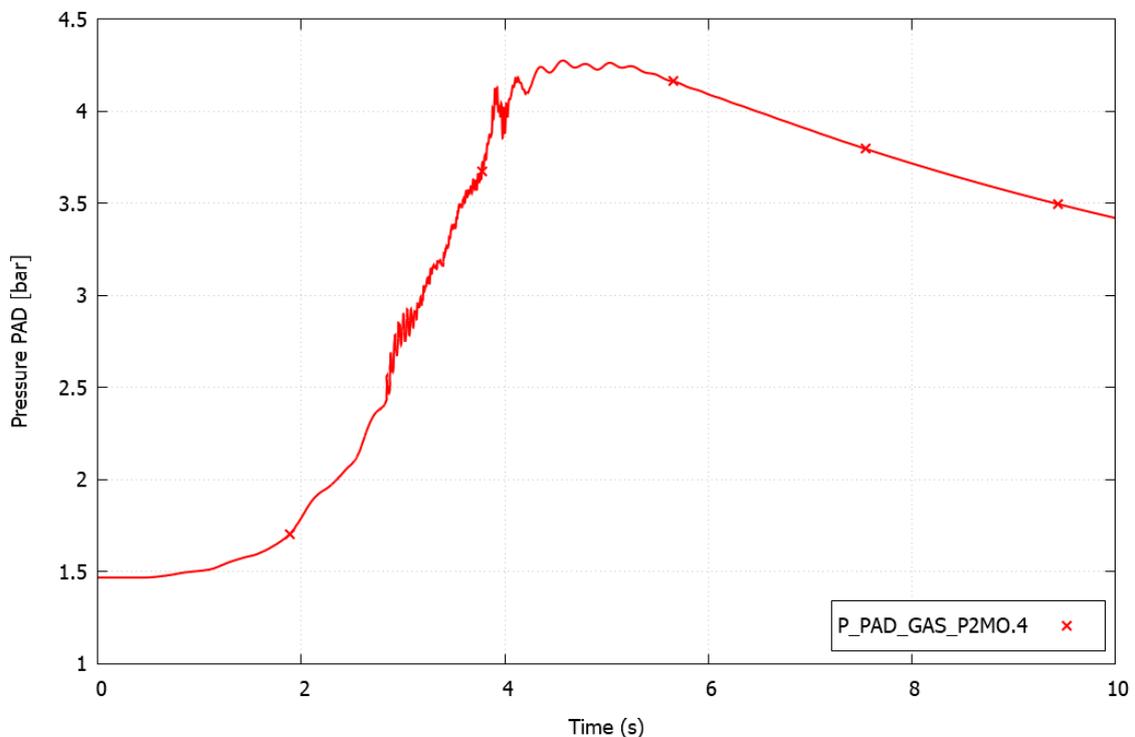


Abb. 5.51 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Druck im PAD-Behälter

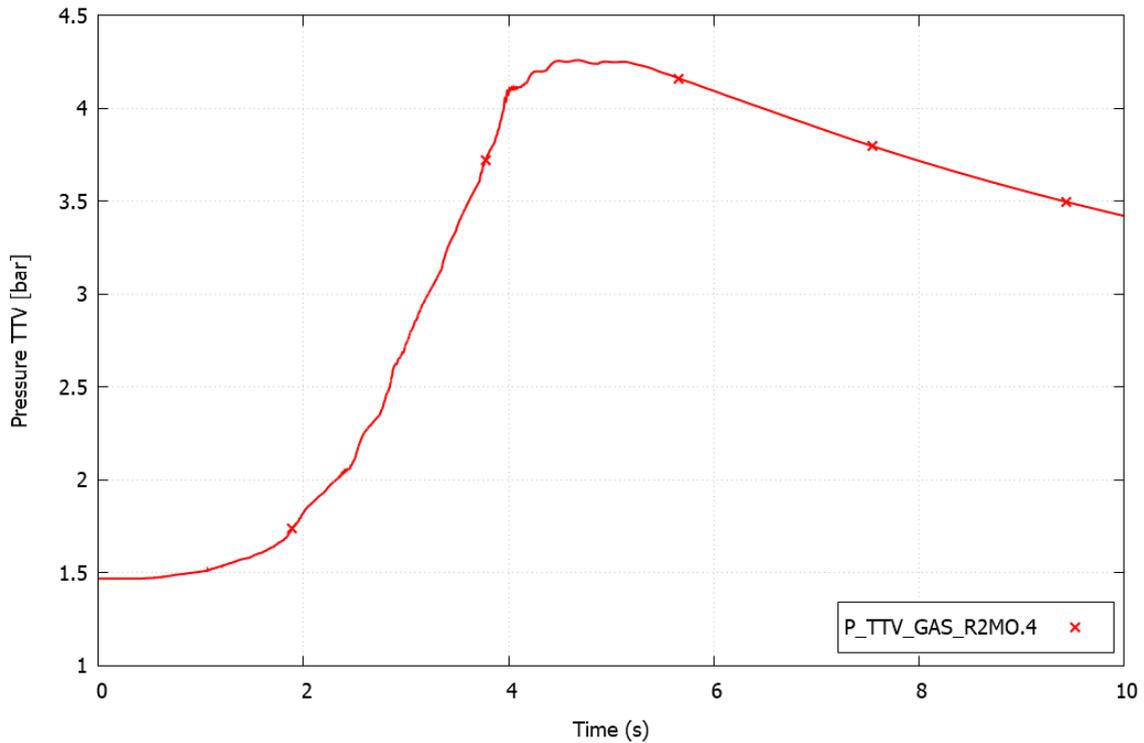


Abb. 5.52 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Druck im TTV-Behälter

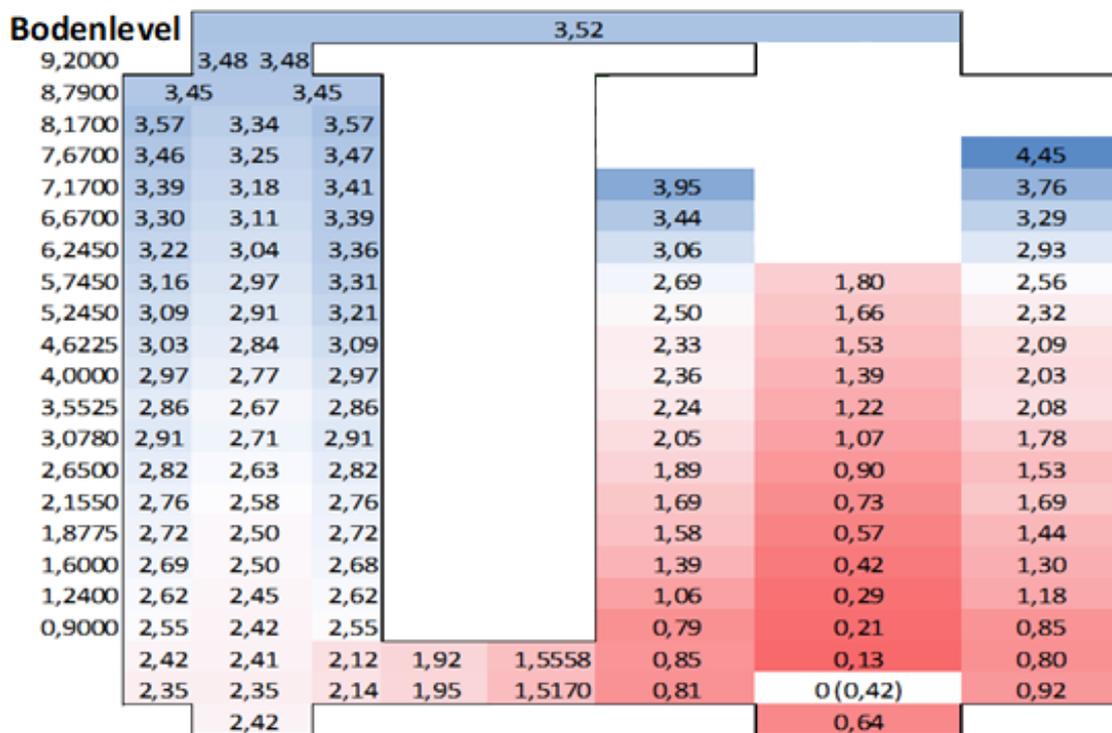


Abb. 5.53 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Zündzeitpunkte in den verschiedenen Höhen (weiße Zonen = Keine Zündung)

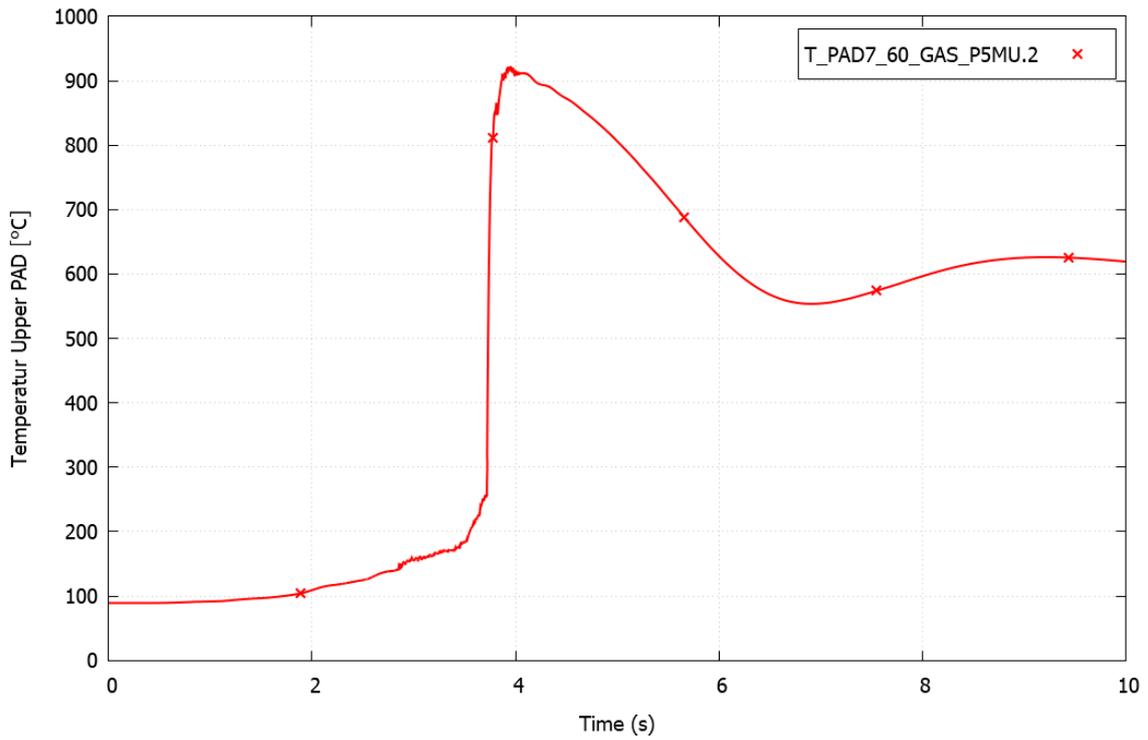


Abb. 5.54 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im oberen Teil des PAD-Behälters

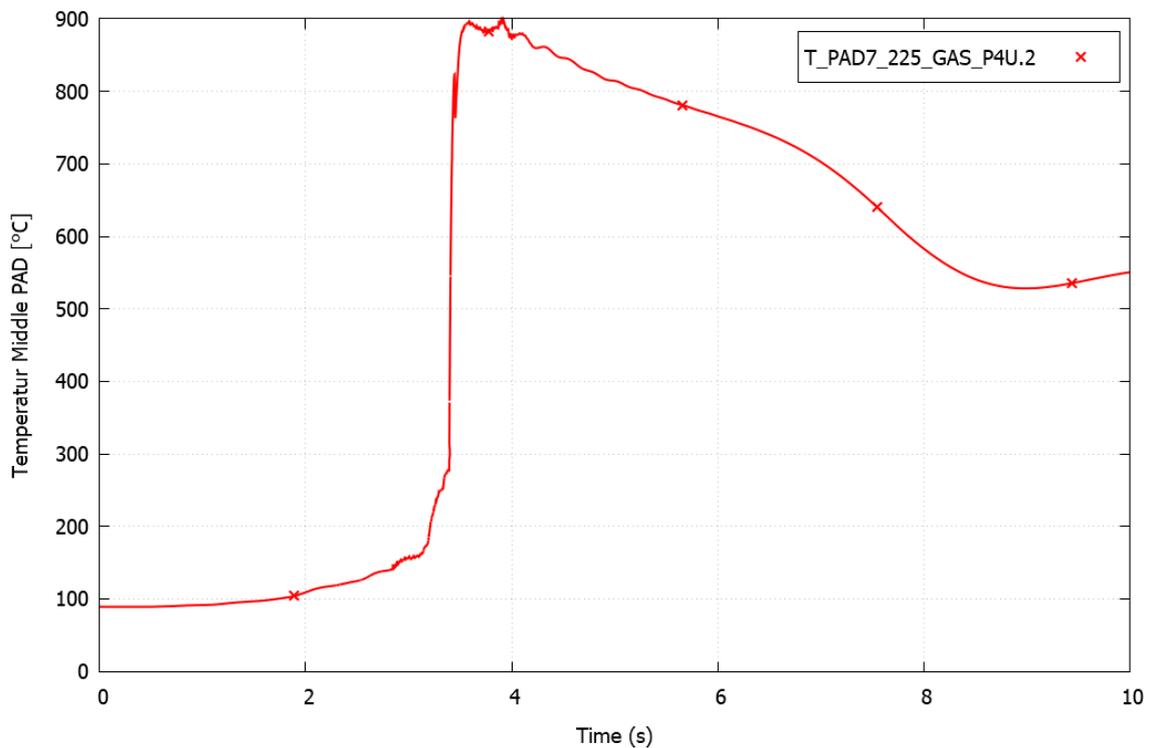


Abb. 5.55 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im unteren Teil des PAD-Behälters

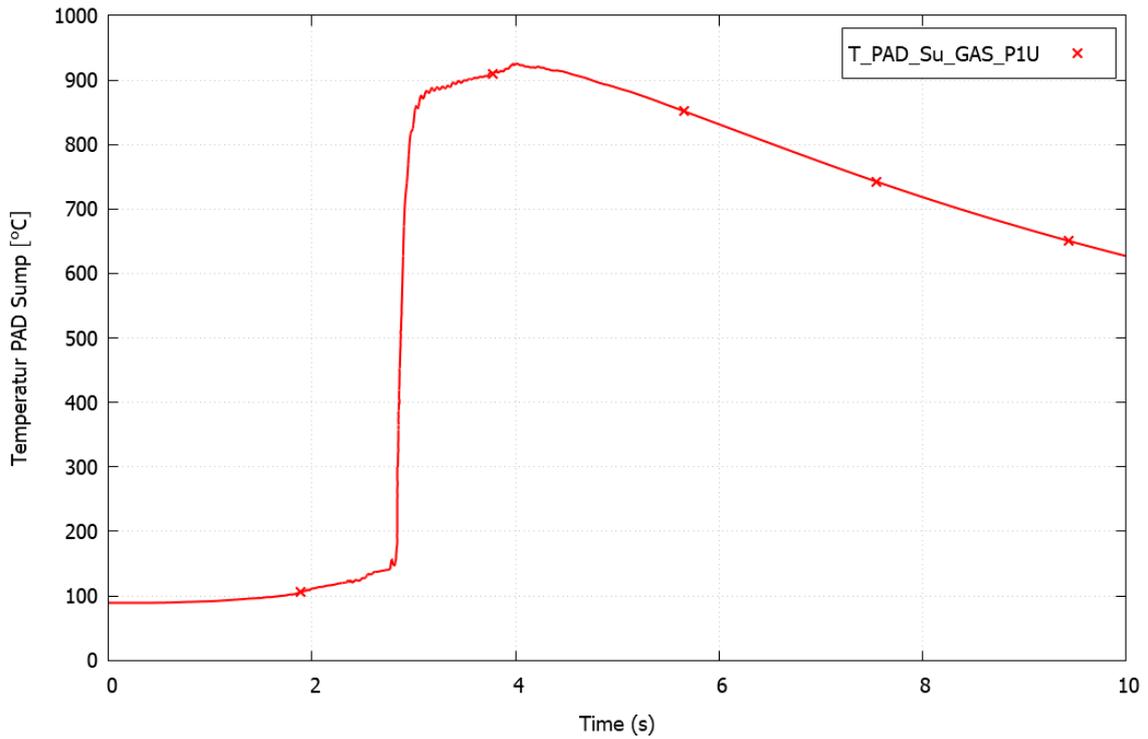


Abb. 5.56 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im Sumpf des PAD-Behälters

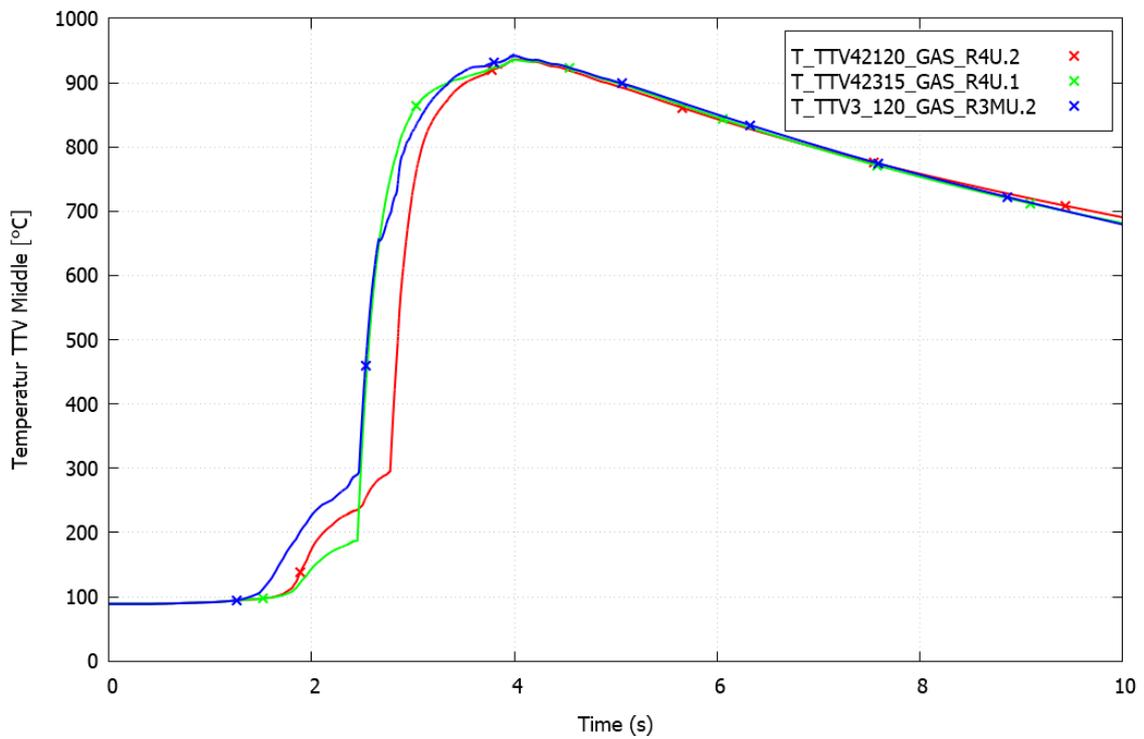


Abb. 5.57 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters

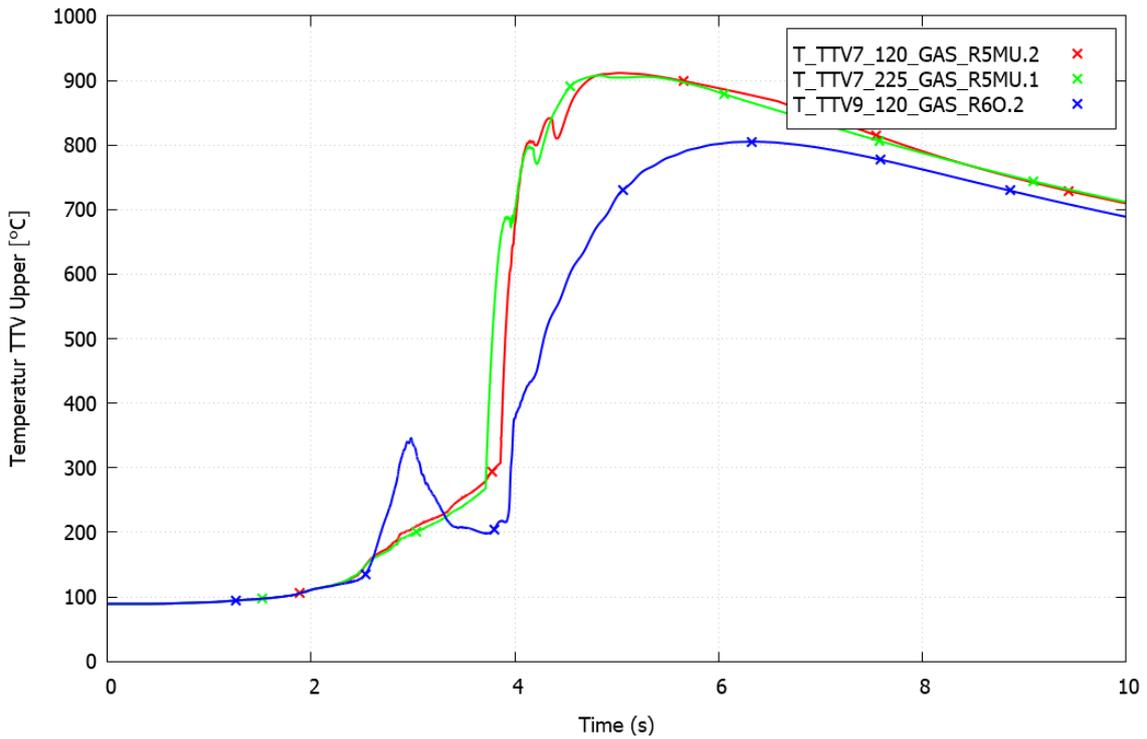


Abb. 5.58 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters

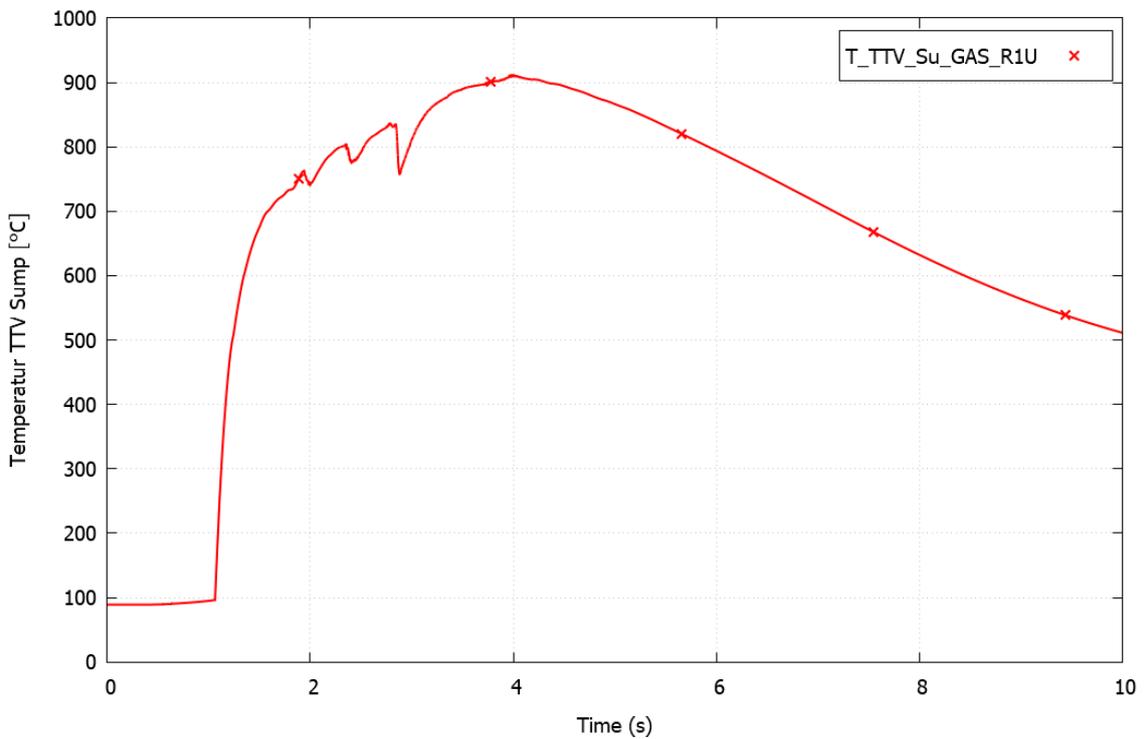


Abb. 5.59 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des TTV-Behälters

Blinde Vorausrechnungen zu OECD THAI-3, HD-44 mit FRONT-Parametern aus HD-36

Die genauen Prozesse in dieser Verbrennungsrechnung werden im nachfolgenden Kapitel beschrieben, da in diesen Rechnungen die Vorgänge am besten reproduziert wurden. Bei der Nachrechnung von HD-36 wurden die Parameter DTRL bzw. TURBLEN_H, die die minimale integrale Turbulenz bei der vertikalen bzw. horizontalen Flammenpropagation festlegen, auf Werte deutlich größer als der Standardwert 0,001 festgelegt. Daher ergeben sich in den Rechnungen deutlich ausgeprägtere Druckgradienten (siehe Abb. 5.60 und Abb. 5.61) sowie frühere Zündungen und dadurch wiederum frühere Temperaturanstiege. Sieht man sich die Zündzeitpunkte in den verschiedenen Zonen an (Abb. 5.62), so ergibt sich wie schon bei der Nachrechnung von HD-36 und der Rechnung mit den Standardwerten in FRONT ein Verlauf, bei dem es nicht in allen Zonen zu einer Zündung kommt. Ein Druckanstieg um ca. 2,8 bar findet in etwa 2,2 s statt. Die Zündung erfolgt bei 0,42 s, eine merkliche Veränderung im Druck ergibt sich erst ab ca. 1,2 s, dann ist aber eine anfänglich exponentielle Drucksteigerung berechnet worden. Die Abb. 5.63 zeigen Abb. 5.68 die Ergebnisse der Gas-Temperaturen, die wiederum Werte bis fast 1000 °C erreichen.

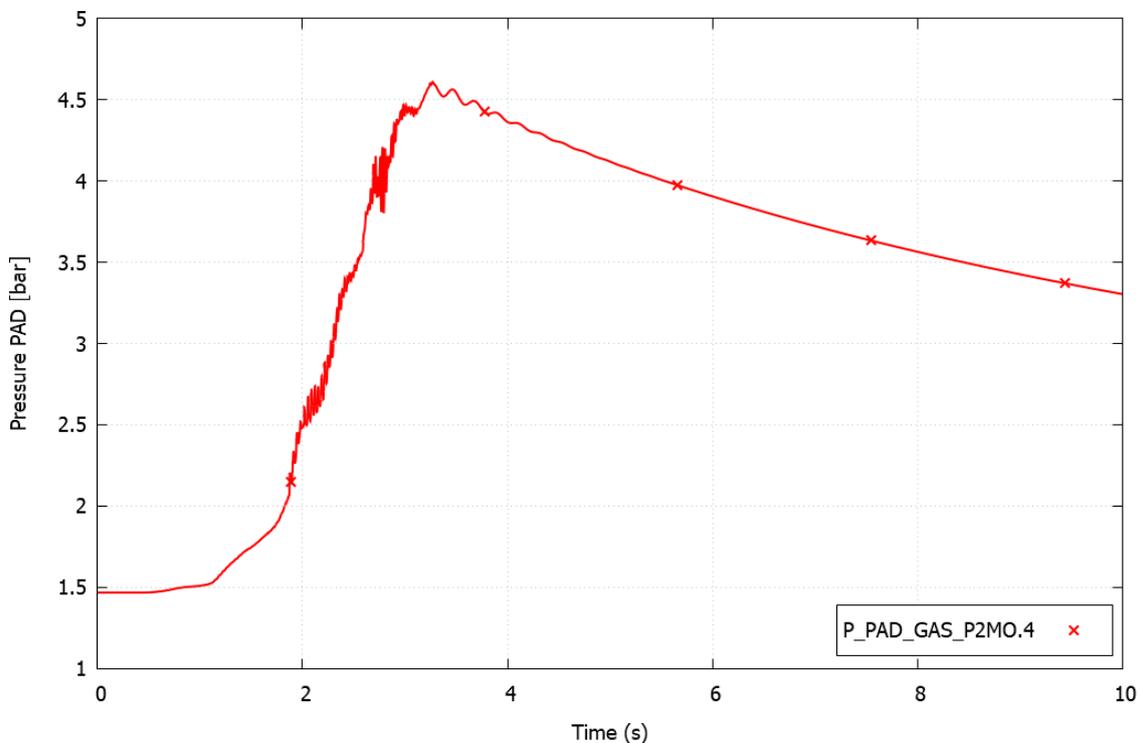


Abb. 5.60 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Druckverlauf im PAD-Behälter

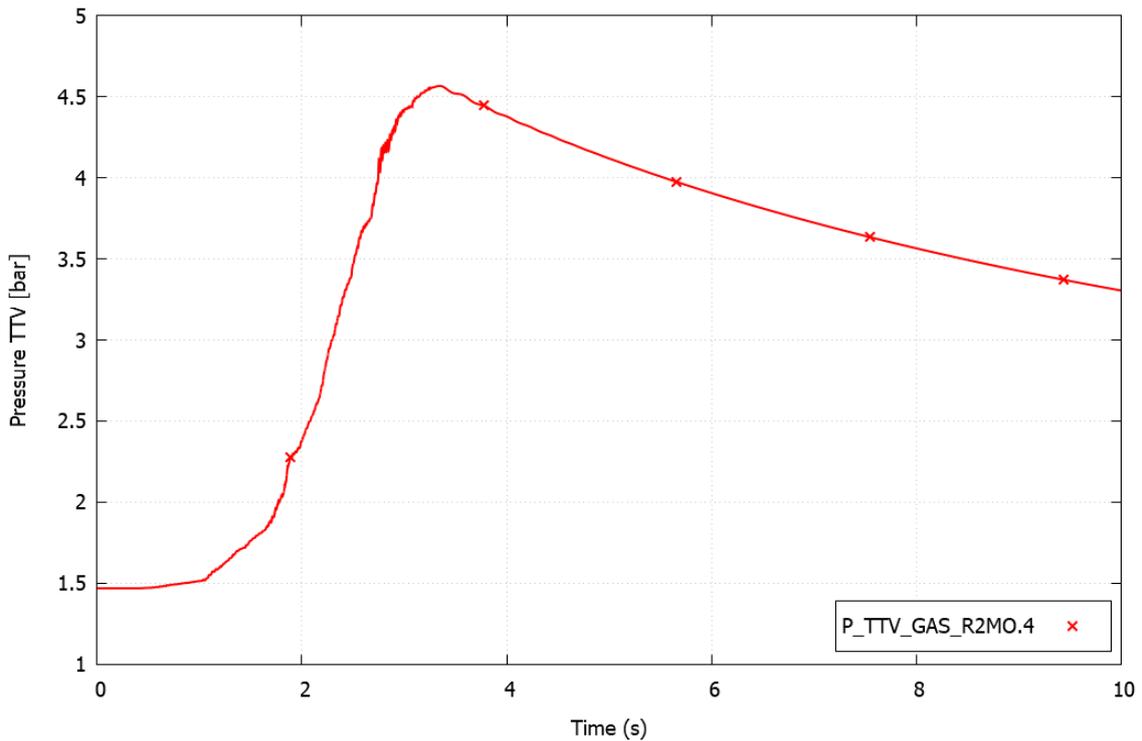


Abb. 5.61 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Druckverlauf im TTV-Behälter

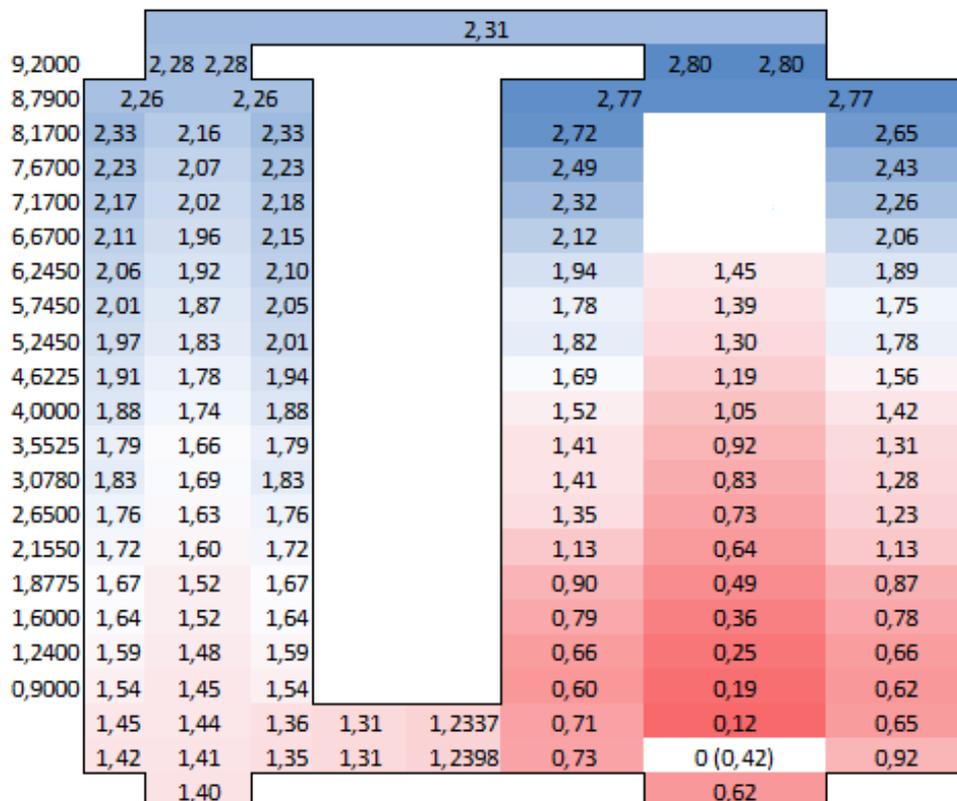


Abb. 5.62 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Zündzeitpunkte (weiße Zonen = keine Zündung)

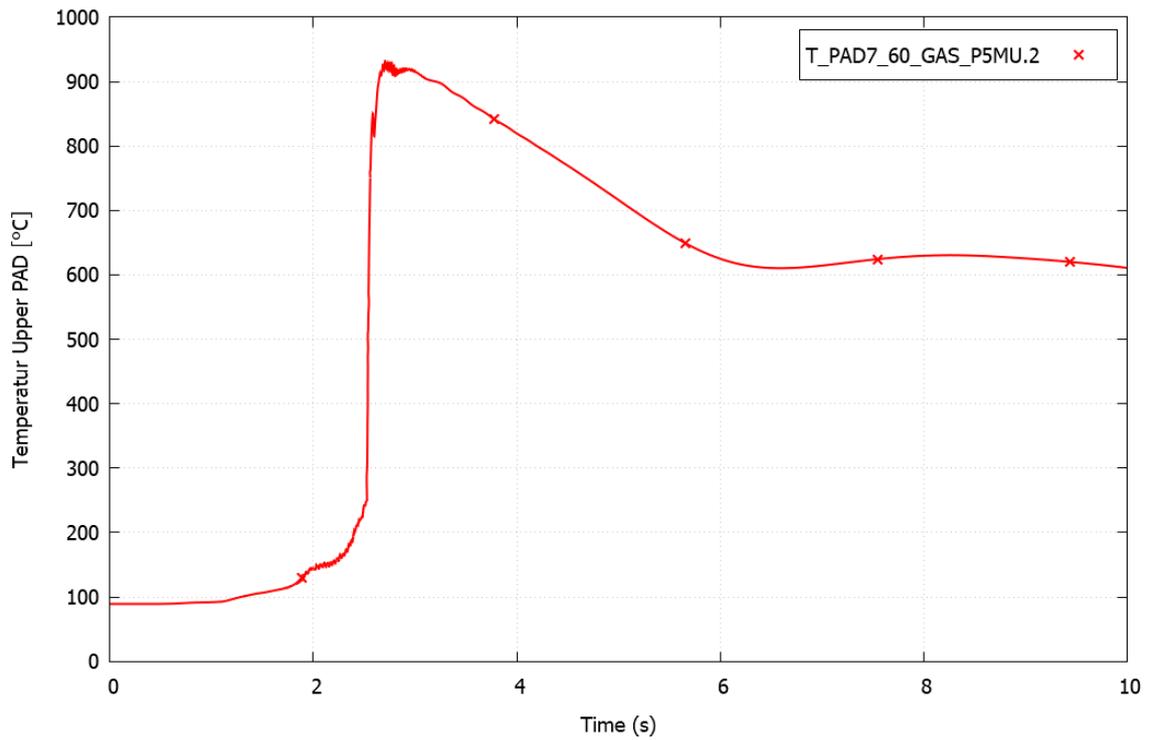


Abb. 5.63 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters

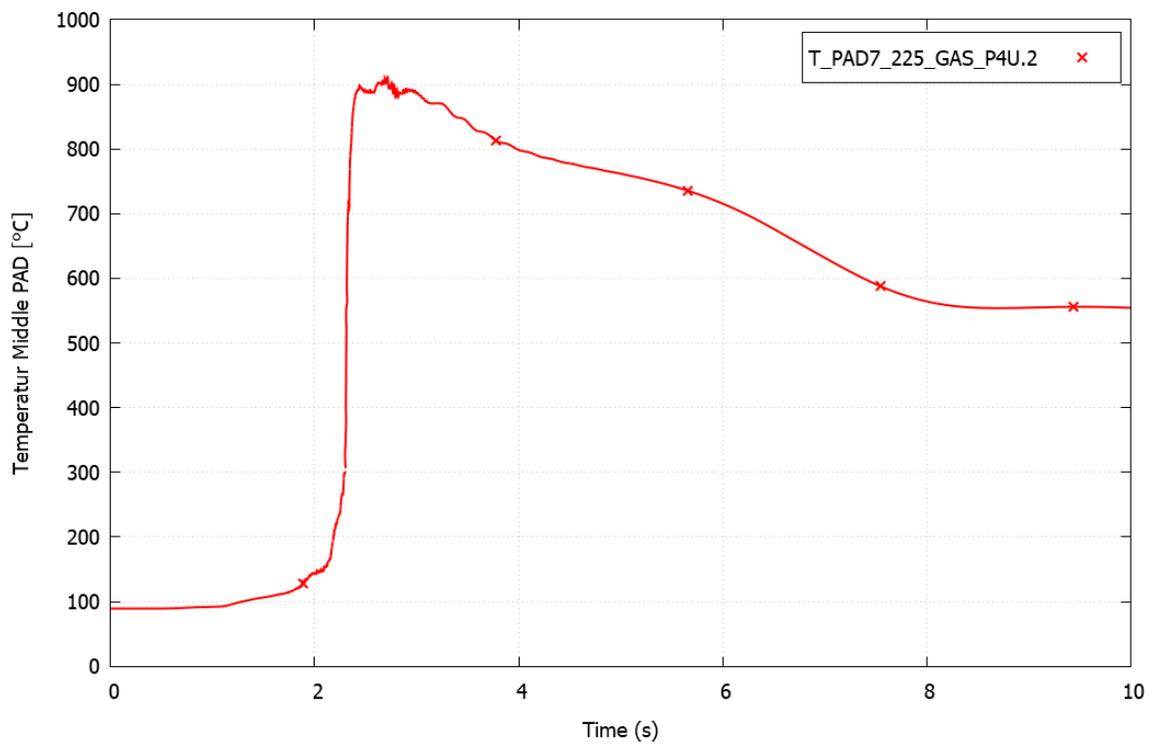


Abb. 5.64 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters

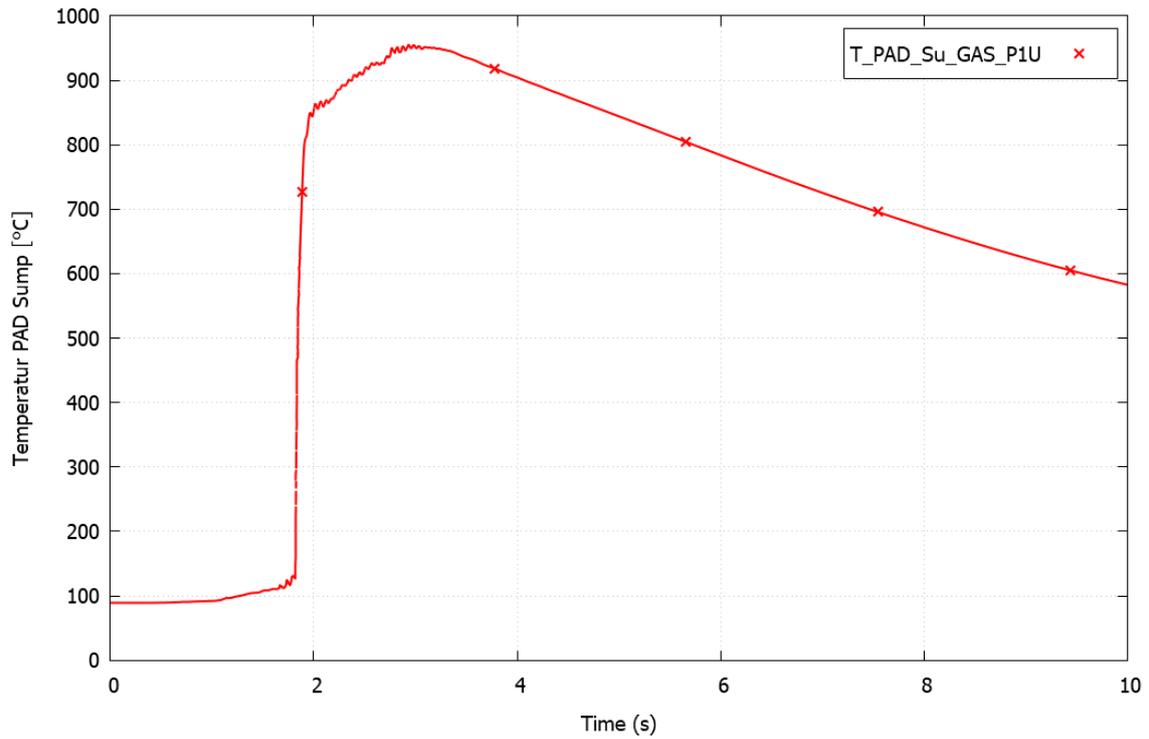


Abb. 5.65 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des PAD-Behälters

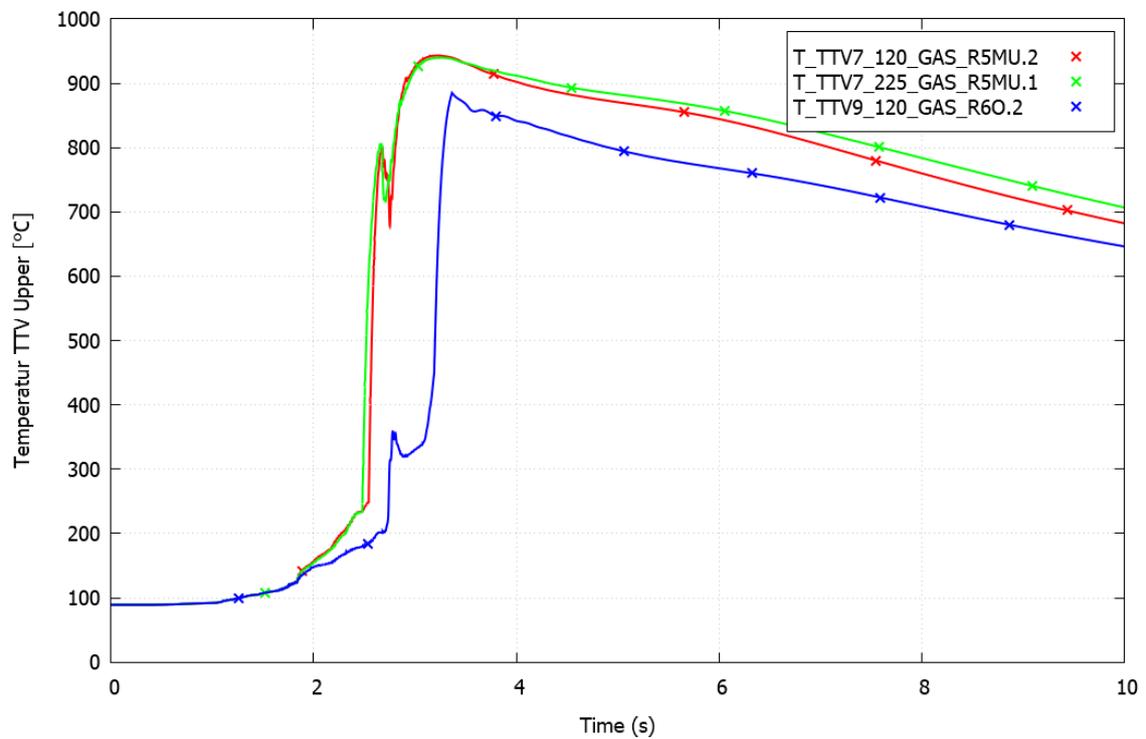


Abb. 5.66 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters

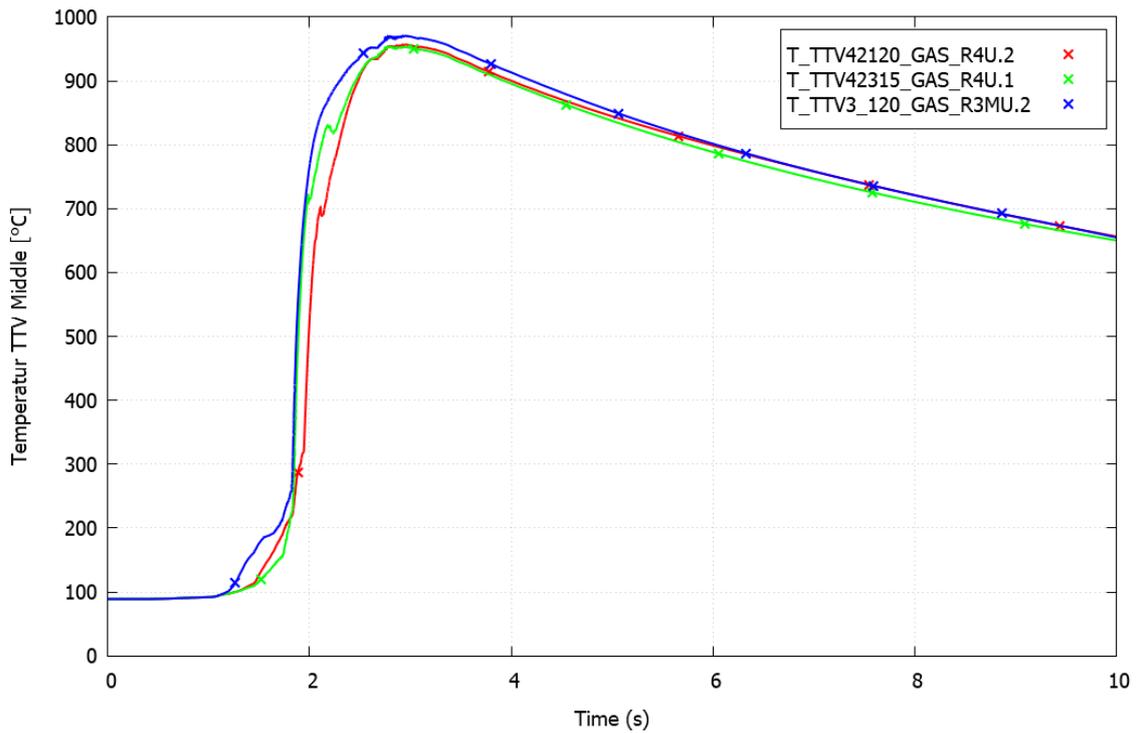


Abb. 5.67 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters

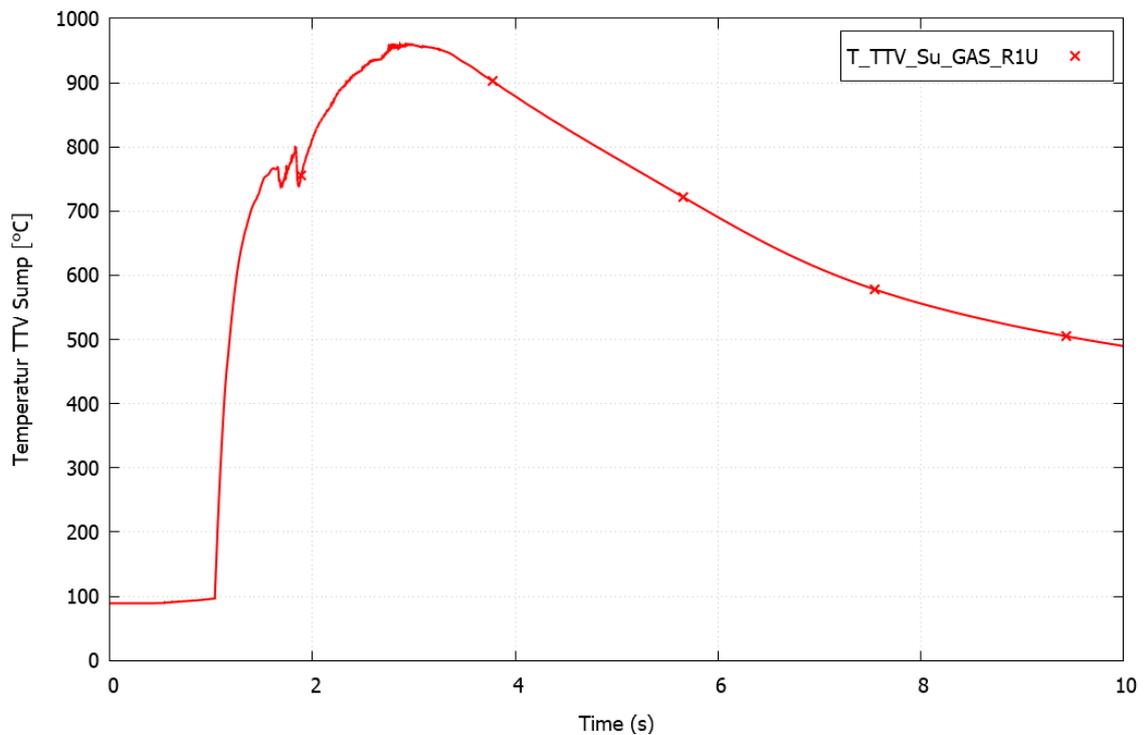


Abb. 5.68 OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des TTV-Behälters

Offene Nachrechnungen zu OECD THAI-3, HD-44

Ein Vergleich der veröffentlichten Ergebnisse des Experiments mit den Ergebnissen der Rechnungen hat gezeigt, dass der prinzipielle Verlauf des Verbrennungsvorgangs von den meisten Analysen richtig vorhergesagt wurde. Die Verbrennung geht beginnend am Zündpunkt unten im TTV durch beide Behälter und läuft im PAD schneller ab als im TTV-Behälter. Auch das obere Verbindungsrohr wird vom PAD aus „entzündet“. Dabei läuft die Flamme auch entgegen der durch das Gebläse aufgeprägten Strömung. Der Maximaldruck ist ähnlich dem vergleichbarer Experimente, wird aber deutlich früher erreicht.

Bei der Nachrechnung des Experiments zeigt sich deutlich, dass vor allem die Simulation des Lüfters und der durch diese verursachte Turbulenz in der blinden Rechnung falsch angegangen wurde bzw. wichtig ist. Sieht man sich die experimentellen Daten an, so stellt man fest, dass sich die Flamme sehr schnell nach der Zündung in das untere Verbindungsrohr und in den unteren Bereich des PAD-Behälters propagiert, deutlich schneller als z. B. im Versuch HD-36 ohne umlaufende Strömung. Dies lässt sich durch die hohe Turbulenz aufgrund der erzwungenen Konvektion am Ort der Zündung erklären. Herrscht dort eine hohe Strömungsgeschwindigkeit / Turbulenz, wird die Ausbreitung der Flamme deutlich begünstigt. Dies wird in der gegenwärtigen Implementierung des FRONT-Modells leider nicht berücksichtigt. Der Anwender kann aber über den Parameter FBURN die Verbrennungsdauer in der Zündzone beeinflussen. Hohe Werte erhöhen die Verbrennungszeit, geringe Werte beschleunigen das Ausbrennen der Zone. Nach einigen Variationen ergaben Werte im Bereich von ca. 0,01 – 0,02 die besten Ergebnisse – also eine um den Faktor 50 – 100 beschleunigte Verbrennung. Tab. 5.2 gibt die verwendeten Werte im Überblick an.

Tab. 5.2 FRONT-Parameter verwendet für Nachrechnungen von THAI HD-44 im Vergleich zu Standardwerten

Größe	Benutzt in HD-44	Benutzt in HD-36	Standardwert
COMO	EXPO	EXPO	EXPO
REYFAC	1,12	1,0764	1,1
REYEXP	-0,13	-0,13	-0,13
TURW	0,95	0,95	0,95
DTRL	0,001	0,00342	0,001
TURBLEN_H	0,015	0,0072	0,001
FBURN	0,011		1,0

Mit den angepassten Werten ergibt sich, wie in Abb. 5.69 und Abb. 5.70 zu erkennen ist, ein Druckanstieg um ca. 3,2 bar in etwa 1,2 s. Die Zündung erfolgt bei 0 s. Der Druckanstieg ist damit deutlich schneller als im Versuch HD-36 und kann sehr gut reproduziert werden.

Die starke Beschleunigung der Flamme sorgte für einen starken Druckanstieg unterhalb des Lüfters im PAD, so dass die Einführung druckabhängig öffnender Ventile parallel zum Lüfter in einigen Junctions notwendig wurde.

Abb. 5.71 oben zeigt die Zeitpunkte der Entzündung der einzelnen Zonen und die von Becker Technologies ermittelten Isochronen. Besonders die eingangs bereits erwähnte Beschleunigung der Verbrennung in der ersten Zone, in Kombination mit einer sehr hohen Turbulenz in den Rohren, sorgt für eine zügige Ausbreitung der Flamme in das untere Verbindungsrohr und durch das Rohr in den unteren Bereich des PAD-Zylinders.

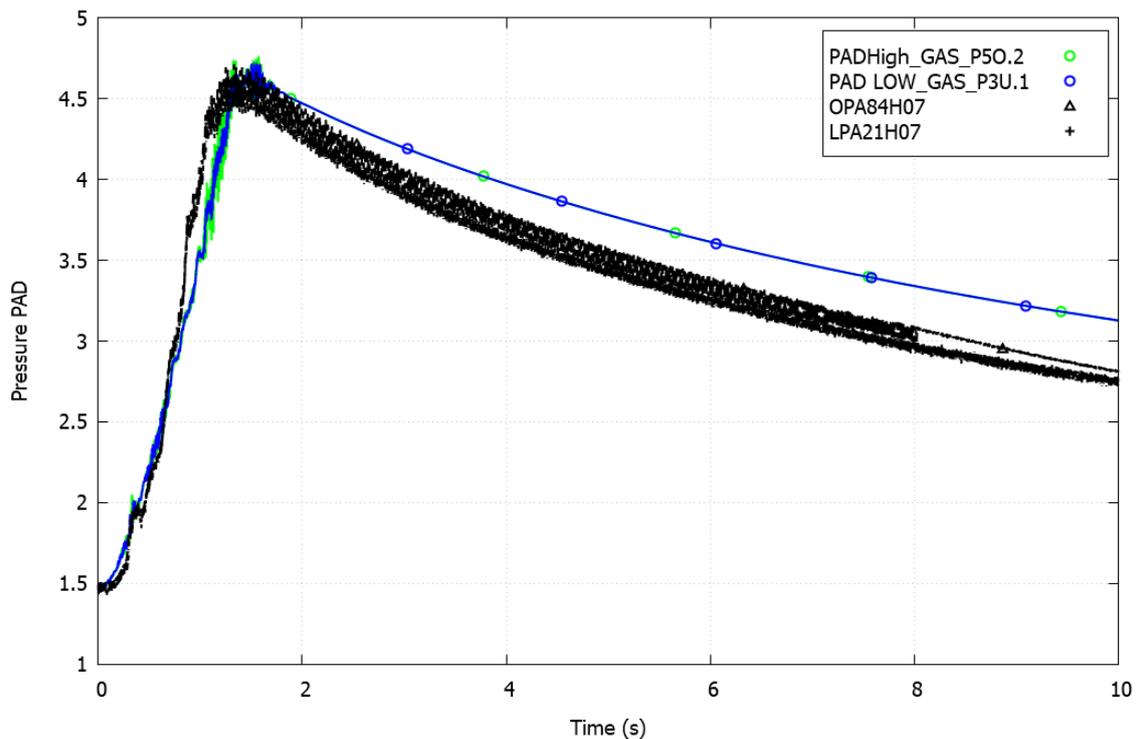


Abb. 5.69 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Druckentwicklung im PAD-Behälter

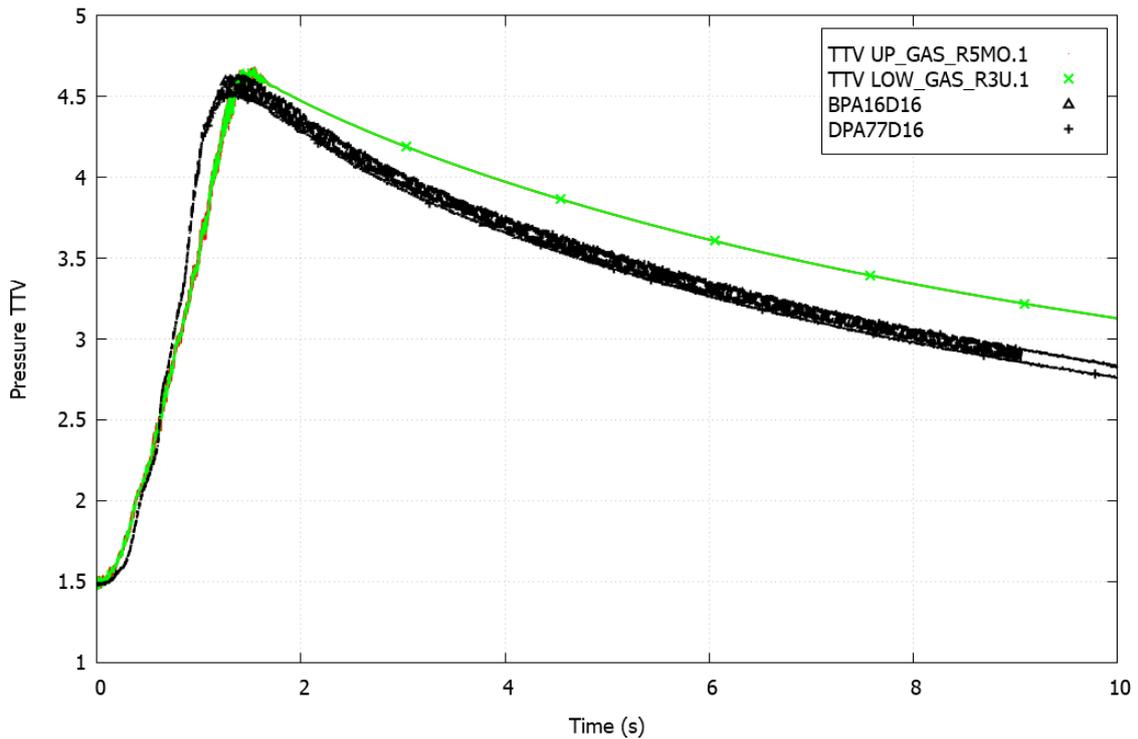


Abb. 5.70 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Druckentwicklung im TTV-Behälter

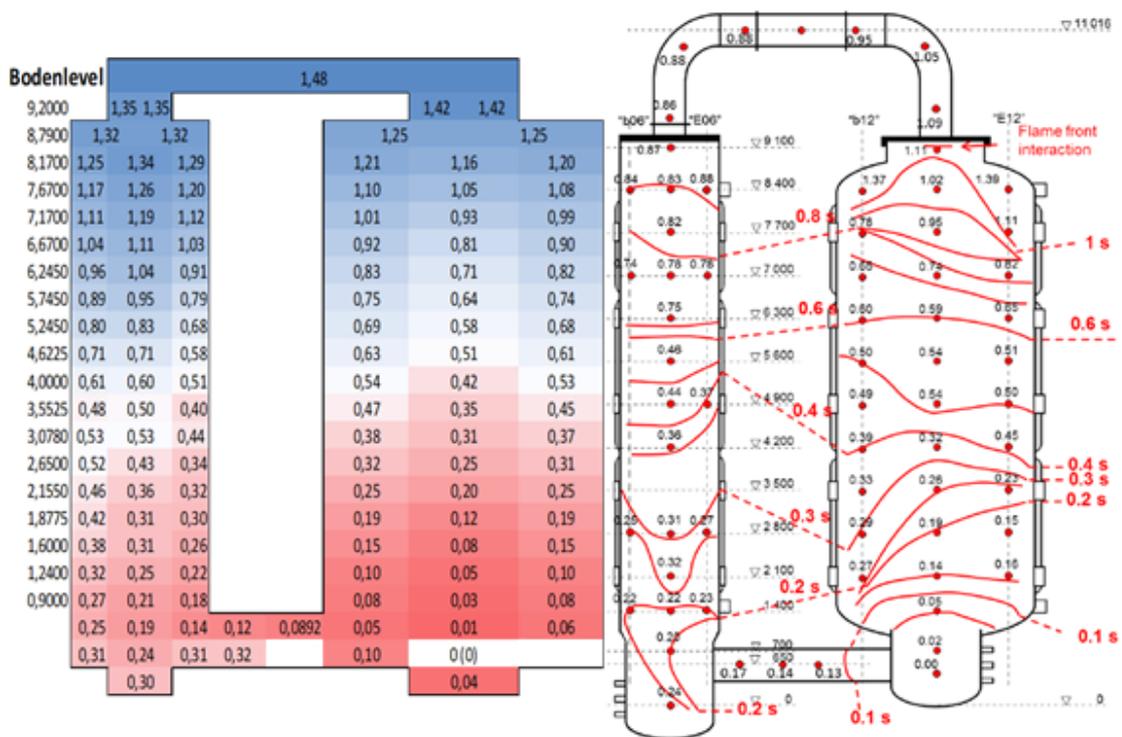


Abb. 5.71 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Zündzeitpunkte der einzelnen Zonen und die aus dem Experiment ermittelten Isochronen

Über weite Bereiche kann man von einer guten Übereinstimmung sprechen. Nur in den oberen Bereichen kommt es zu einer Diskrepanz zwischen den Isochronen und den Zündzeitpunkten, die im oberen Bereich des TTV-Behälters gering ist, aber schon relativ ausgeprägt im oberen Bereich des PAD-Behälters. Betrachtet man das gemessene Verhalten der Flamme im unteren Bereich des PAD-Behälters knapp oberhalb des Lüfters, so ist zu erkennen, dass im Außenbereich des Lüfters die Beschleunigung der Flamme besonders ausgeprägt ist. Gut zu erkennen ist, dass die Isochoren hier im Außenbereich teilweise fast 1 m höher liegen als im Zentrum des Zylinders. Es kann also vermutet werden, dass die höhere Turbulenz des Lüfters hier zu einer verstärkten Beschleunigung führt. Das kann in einem Lumped-Parameter-Code natürlich nicht aufgelöst werden. Die Flamme erfährt in den Rechnungen eine geringere Beschleunigung im PAD-Zylinder als im Experiment beobachtet wurde. Daher treffen in der Rechnung die Flammenfronten nicht wie im Experiment im oberen Bereich des TTV-Behälters, sondern im oberen Verbindungsrohr aufeinander.

Abb. 5.72 bis Abb. 5.77 zeigen die Temperaturverläufe in verschiedenen Höhen des PAD- bzw. TTV-Behälters. Wie schon diskutiert, ist auch in diesen Rechnungen der Temperaturanstieg zu hoch.

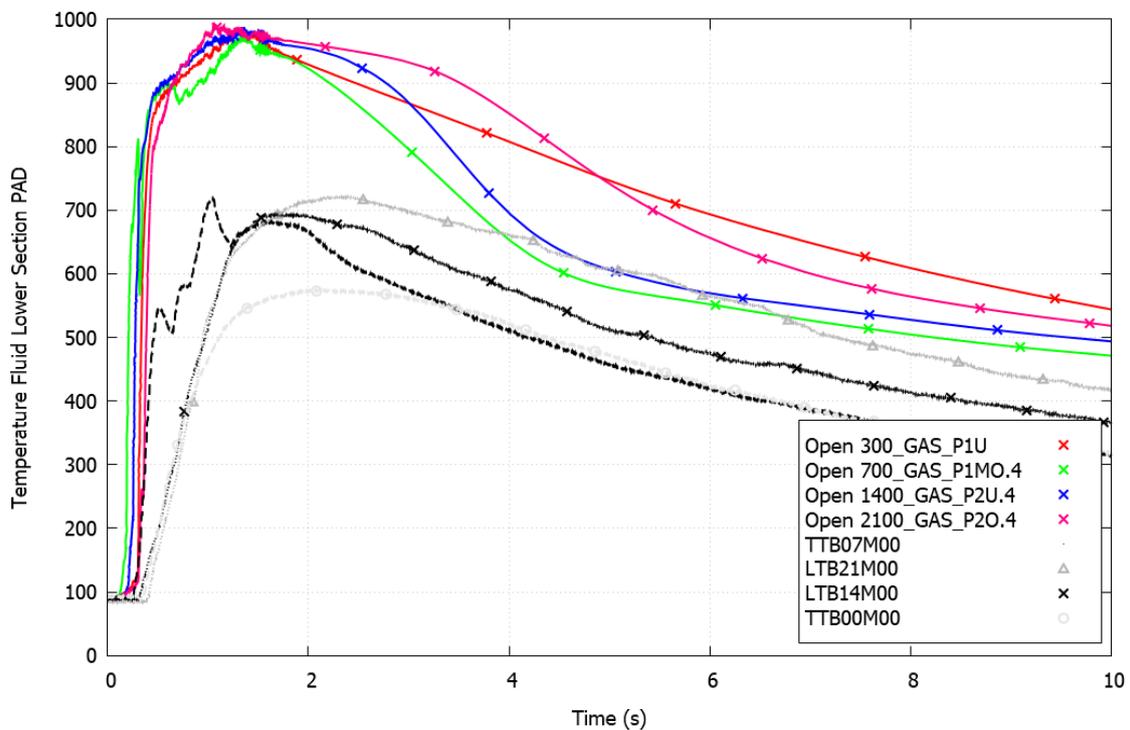


Abb. 5.72 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im unteren Bereich des PAD-Behälters

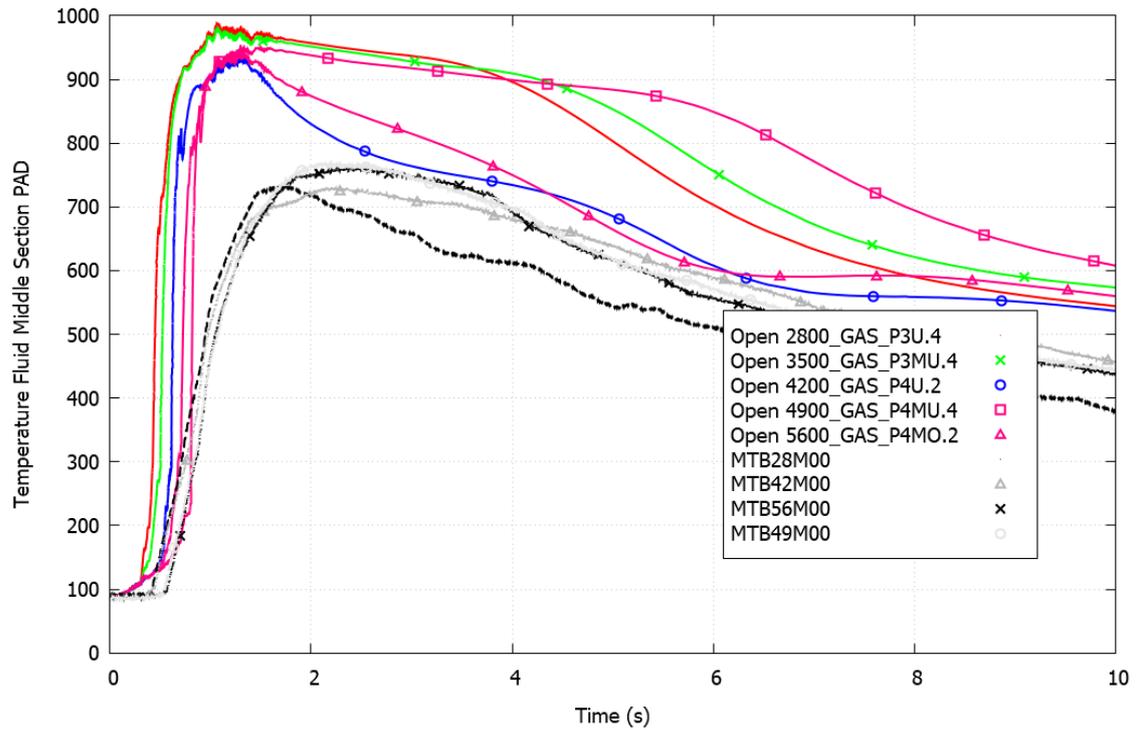


Abb. 5.73 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters

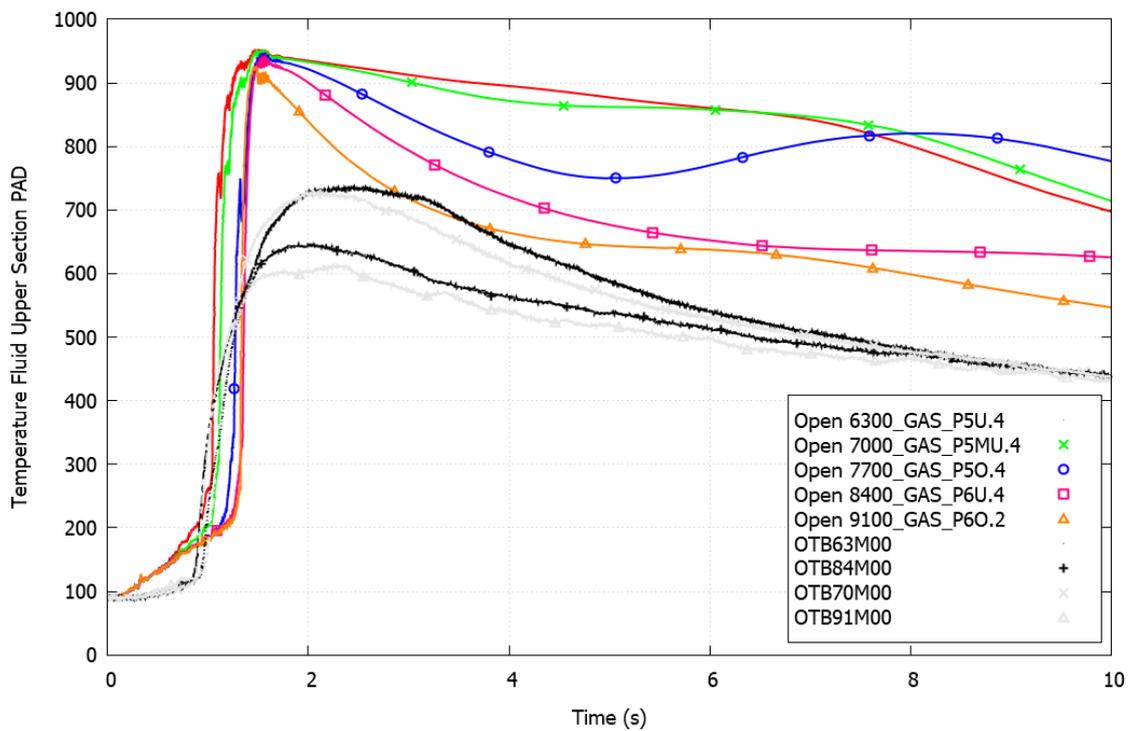


Abb. 5.74 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters

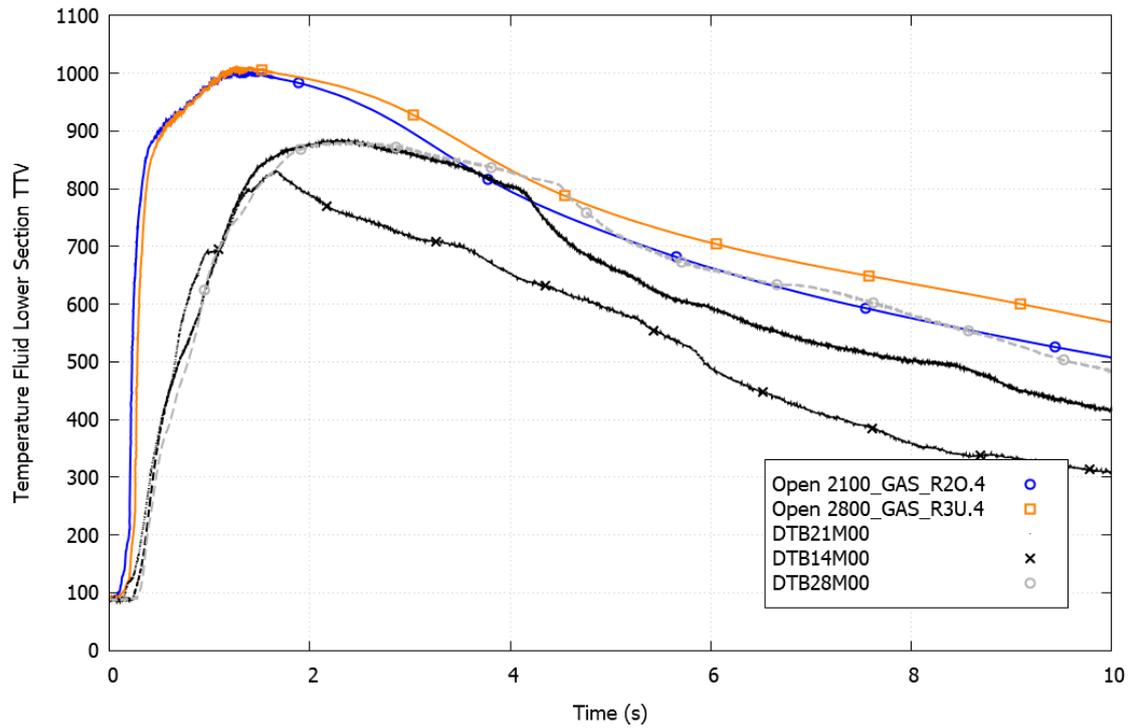


Abb. 5.75 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im unteren Bereich des TTV-Behälters

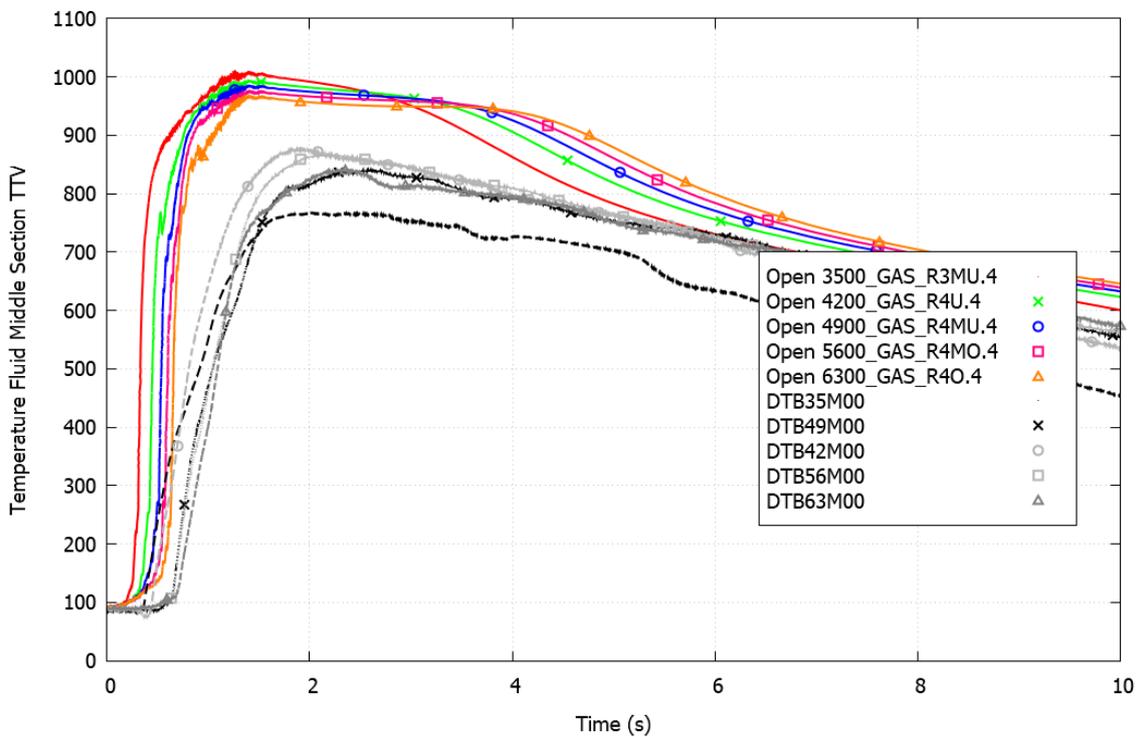


Abb. 5.76 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters

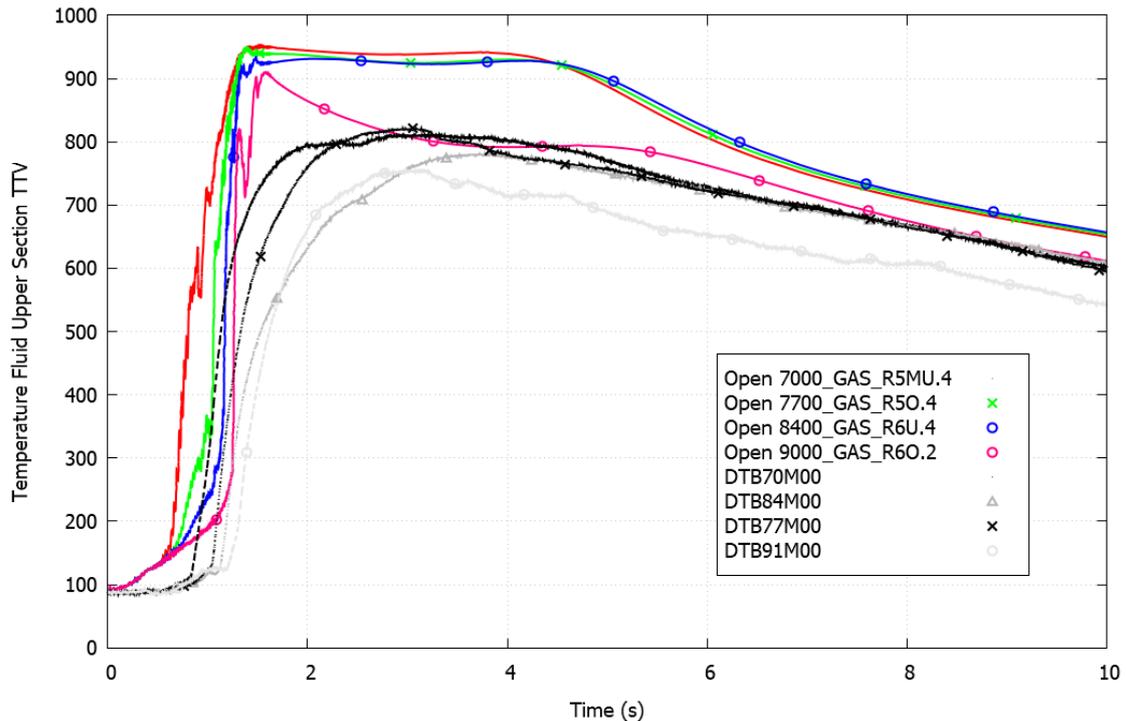


Abb. 5.77 OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters

5.1.4.5 OECD THAI-3, HD-40, HD-41 und HD-42: H₂-Verbrennungsversuche

Im Rahmen des OECD THAI-3 wurden weitere Versuche zur Verbrennung in Mehrraumgeometrie durchgeführt, allerdings noch ohne umlaufende Gasströmung und unter stratifizierten Randbedingungen. Um abschließend zu den hier vorgestellten Arbeiten einen Überblick über den gegenwärtigen Status des FRONT-Modells in COCOSYS zu gewinnen, wurden drei Versuche angerechnet und die berechneten Drücke mit den gemessenen Drücken verglichen. Es werden nur die Drücke gezeigt sowie die Flammenausbreitung beschrieben, da der maximale Druck und unter Umständen der Druckgradient für die sicherheitstechnische Bewertung am wichtigsten sind. Bei keiner der folgenden Rechnungen wurde versucht, das Ergebnis durch weiteres Anpassen der FRONT-Parameter zu verbessern. In jeder Rechnung wurden im Gegensatz zu den vorher beschriebenen Fällen die Standard-Parameter genutzt, da davon auszugehen ist, dass bei einer Störfallanalyse diese vom Anwender benutzt werden würden.

5.1.4.6 OECD THAI-3, HD-40: H₂-Verbrennungsversuch

THAI HD-40 beschreibt einen Versuch mit einer Stratifizierung der H₂- und der Dampf-Konzentration. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im oberen Behälterbereich 12 vol.%

und die Dampfkonzentration 47 vol.% bei 90 °C Atmosphärentemperatur. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im unteren Behälterbereich 6 vol.% und die Dampfkonzentration 3 vol.% bei 30 °C Atmosphärentemperatur. Die Zündung liegt in einem Bereich mit sehr niedrigen Wasserstoffkonzentrationen im unteren Bereich des TTV. Die Anfangsbedingungen wurden für jedes Höhenlevel im COCOSYS-Datensatz separat berechnet.

Den gemessenen Druckverlauf zeigt Abb. 5.78. Die Verbrennung läuft unter diesen Randbedingung sehr langsam ab, die Flammenfront steigt nur senkrecht nach oben und umfasst lediglich Teilbereiche des TTV. Auch kommt es erst im oberen Bereich des TTV-Behälters zu einer seitlichen Flammenpropagation. Es kommt zu keiner Verbrennung in den Rohren zwischen den beiden Behältern oder gar im PAD-Behälter (siehe Abb. 5.79). Dies kann damit zusammenhängen, dass das Kriterium für eine horizontale Flammenausbreitung nicht erreicht wird. Daher wird auch deutlich weniger Wasserstoff verbrannt als im Experiment, und der Energieeintrag ist stark reduziert. Der berechnete Druckaufbau (Abb. 5.80 und Abb. 5.81) liegt deutlich unterhalb des gemessenen Druckaufbaus. Während im Experiment ein Druckanstieg um ca. 2,4 bar beobachtet wurde, ergab sich in den Rechnungen nur ein Anstieg um 0,45 bar. Darüber hinaus ist der Druckgradient deutlich geringer.

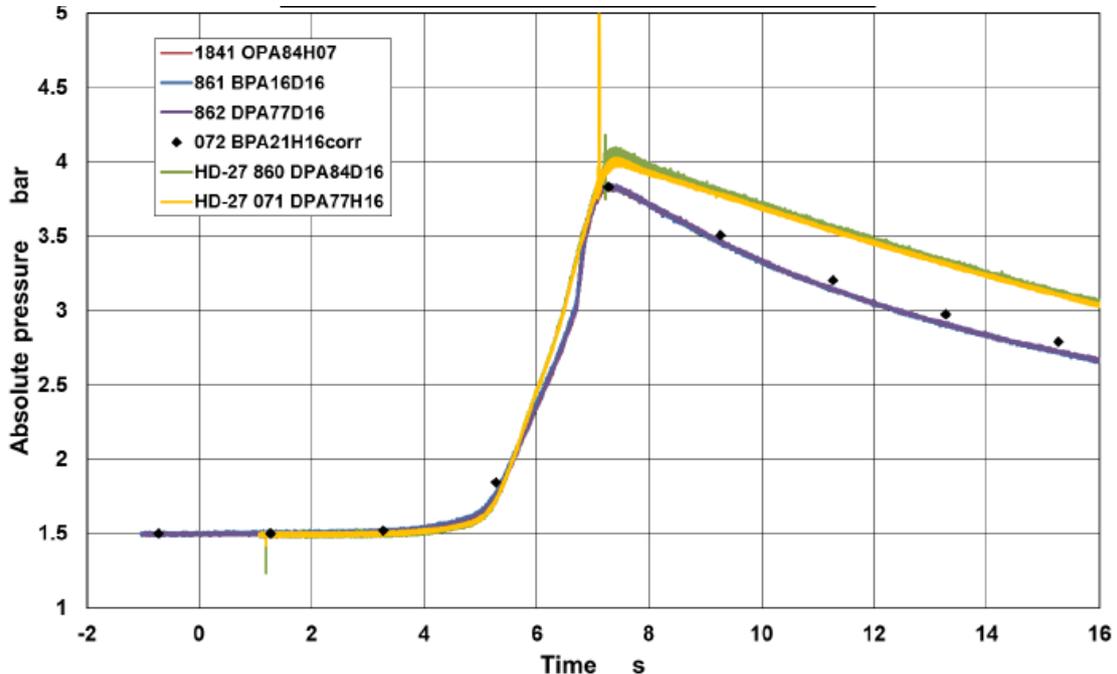


Abb. 5.78 THAI HD-40 und HD-27: gemessener Druckverlauf /FRE 19/

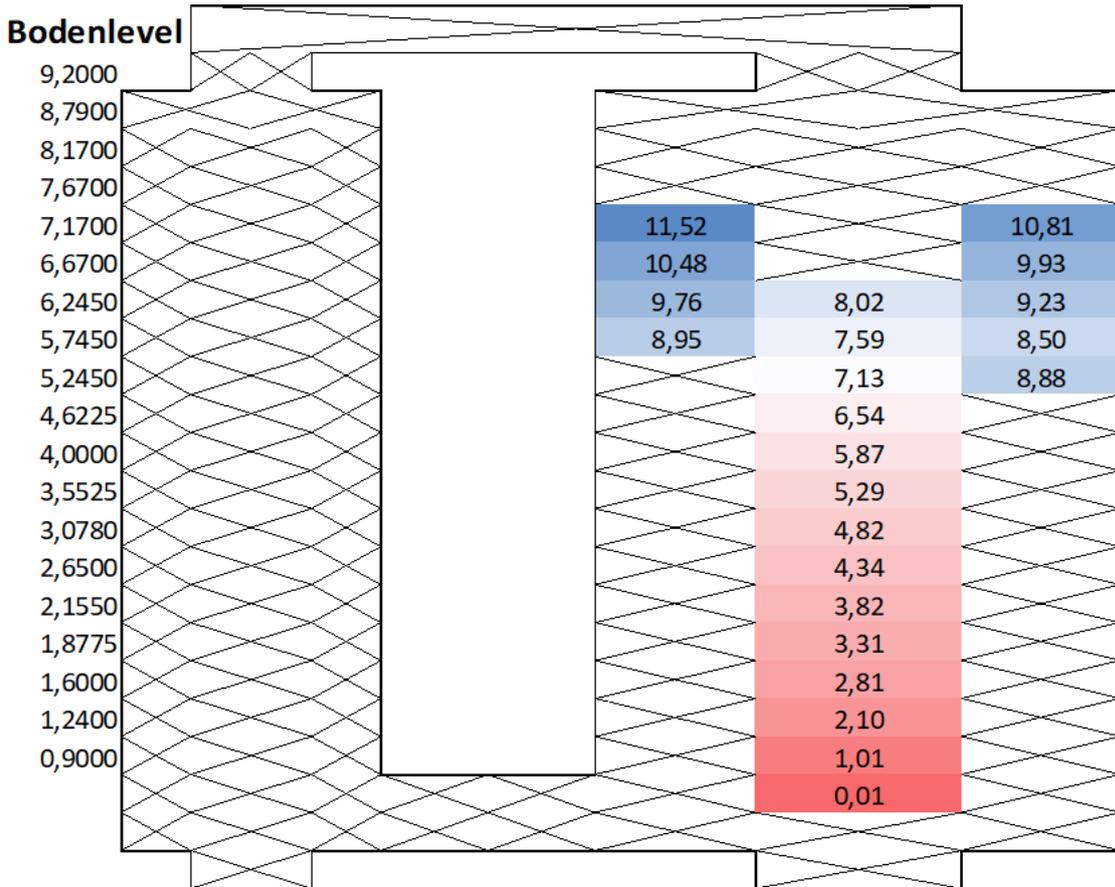


Abb. 5.79 OECD THAI-3, HD-40: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen (durchkreuzte Zonen = keine Zündung)

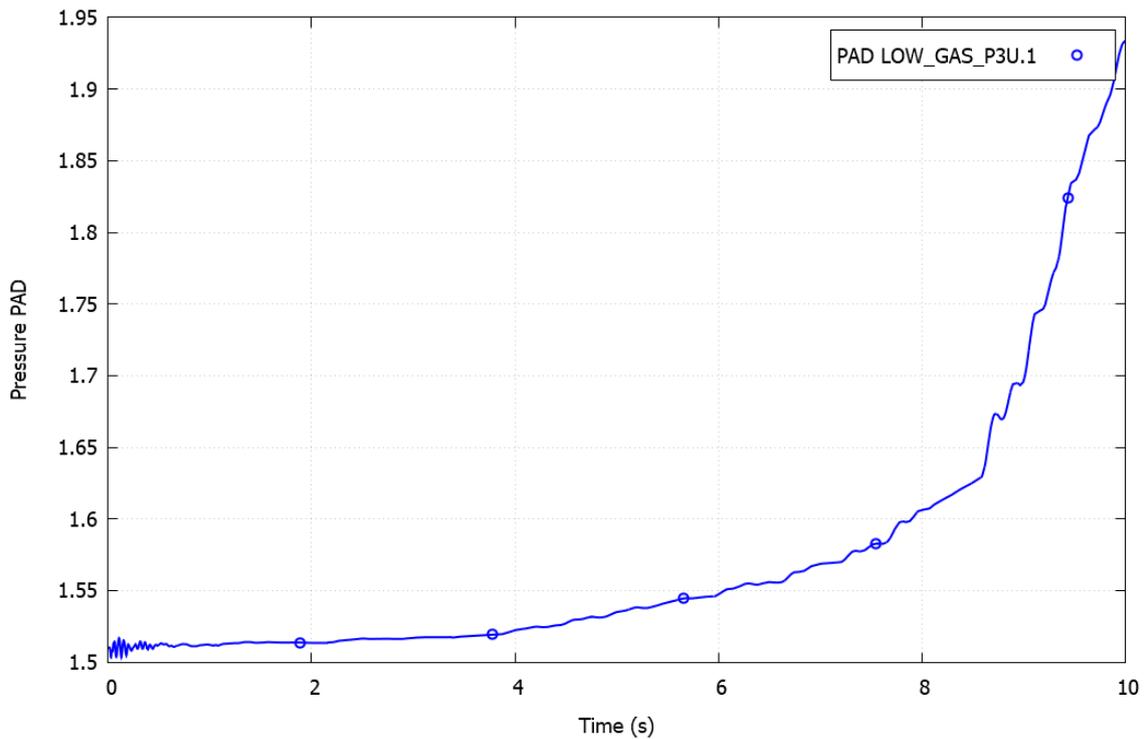


Abb. 5.80 OECD THAI-3, HD-40: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter

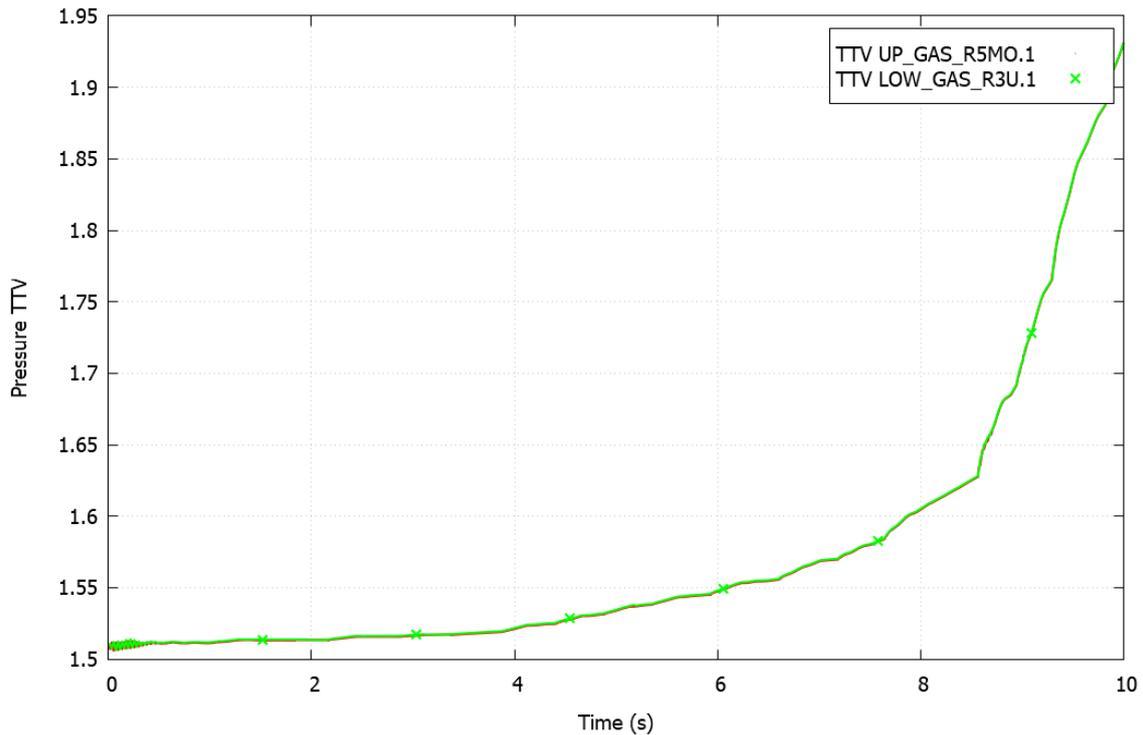


Abb. 5.81 OECD THAI-3, HD-40: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter

5.1.4.7 OECD THAI-3, HD-41: H₂-Verbrennungsversuch

THAI HD-41 beschreibt einen Versuch mit einer umgekehrten Stratifizierung im Vergleich zu HD-40. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im oberen Behälterbereich 6 vol.% und die Dampfkonzentration 47 vol.% bei 90 °C Atmosphärentemperatur. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im unteren Behälterbereich 12 vol.% und die Dampfkonzentration 3 vol.% bei 30 °C Atmosphärentemperatur. Die Zündung liegt in einem Bereich mit sehr hoher Wasserstoffkonzentration im unteren Bereich des TTV. Die Anfangsbedingungen wurden für jedes Höhenlevel im COCOSYS-Datensatz separat berechnet.

Das Experiment zeigt eine deutlich schnellere Verbrennung als in HD-40. Da die Zündung in einem Raumbereich mit einer hohen Wasserstoffkonzentration erfolgt, kommt es zur Flammenausbreitung durch die Verbindungsleitung in den PAD-Behälter (Abb. 5.83). Dies spiegelt sich auch in den Ergebnissen wider. Der berechnete Druck in PAD und TTV (Abb. 5.84, Abb. 5.85) übersteigt sogar den gemessenen Druck deutlich. Im Experiment werden ca. 3,7 bar absolut erreicht und in der Rechnung ein maximaler Druck von ca. 4,4 bar. Der Druckgradient konnte gut reproduziert werden. Der höhere Druck kann natürlich zu einem gewissen Teil durch die lineare Extrapolation der Gaszusammensetzung als Startbedingung für COCOSYS entstehen, wenn dadurch die Wasserstoffmenge etwas überschätzt oder die Wasserdampfmenge etwas unterschätzt wird.

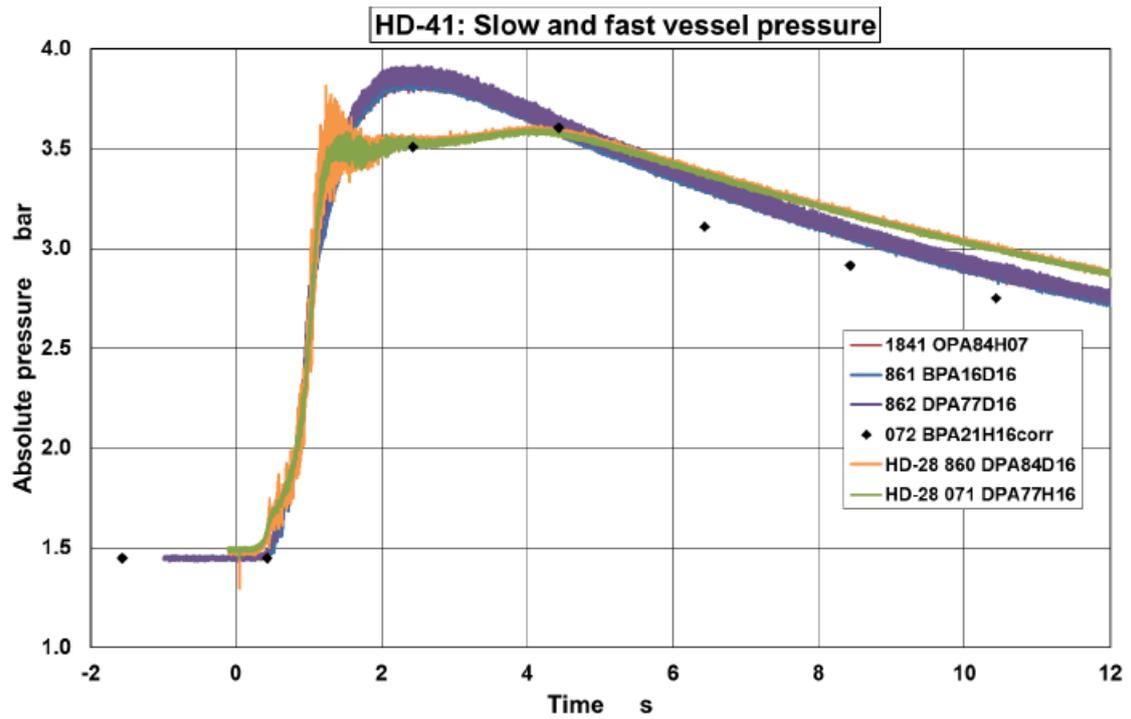


Abb. 5.82 OECD THAI-3, HD-41 und HD-28: gemessener Druckverlauf /FRE 19/

Bodenlevel	4,41							
9,2000	1,91	1,91						
8,7900	1,50	1,50						
8,1700	2,33	2,29	1,25					
7,6700	1,52	1,53	1,05	2,87	2,25			
7,1700	1,28	1,33	0,94	1,86	1,70			
6,6700	1,11	1,18	0,89	1,49	1,38			
6,2450	1,01	1,07	0,84	1,29	0,94	1,20		
5,7450	0,94	0,98	0,80	1,15	0,87	1,09		
5,2450	0,88	0,92	0,76	1,05	0,80	1,00		
4,6225	0,83	0,85	0,72	0,95	0,72	0,92		
4,0000	0,78	0,79	0,69	0,90	0,68	0,88		
3,5525	0,72	0,75	0,64	0,89	0,64	0,78		
3,0780	0,74	0,78	0,67	0,79	0,62	0,71		
2,6500	0,69	0,74	0,63	0,70	0,58	0,66		
2,1550	0,66	0,72	0,62	0,65	0,52	0,65		
1,8775	0,63	0,64	0,62	0,60	0,41	0,58		
1,6000	0,63	0,64	0,61	0,56	0,33	0,66		
1,2400	0,62	0,62	0,60	0,51	0,27	0,61		
0,9000	0,61	0,62	0,57	0,48	0,20	0,55		
	0,60	0,61	0,54	0,50	0,4665	0,38	0,10	0,53
	0,58	0,59	0,50	0,47	0,3820	0,32	0 (0,01)	0,39
		0,61					0,27	

Abb. 5.83 OECD THAI-3, HD-41: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen

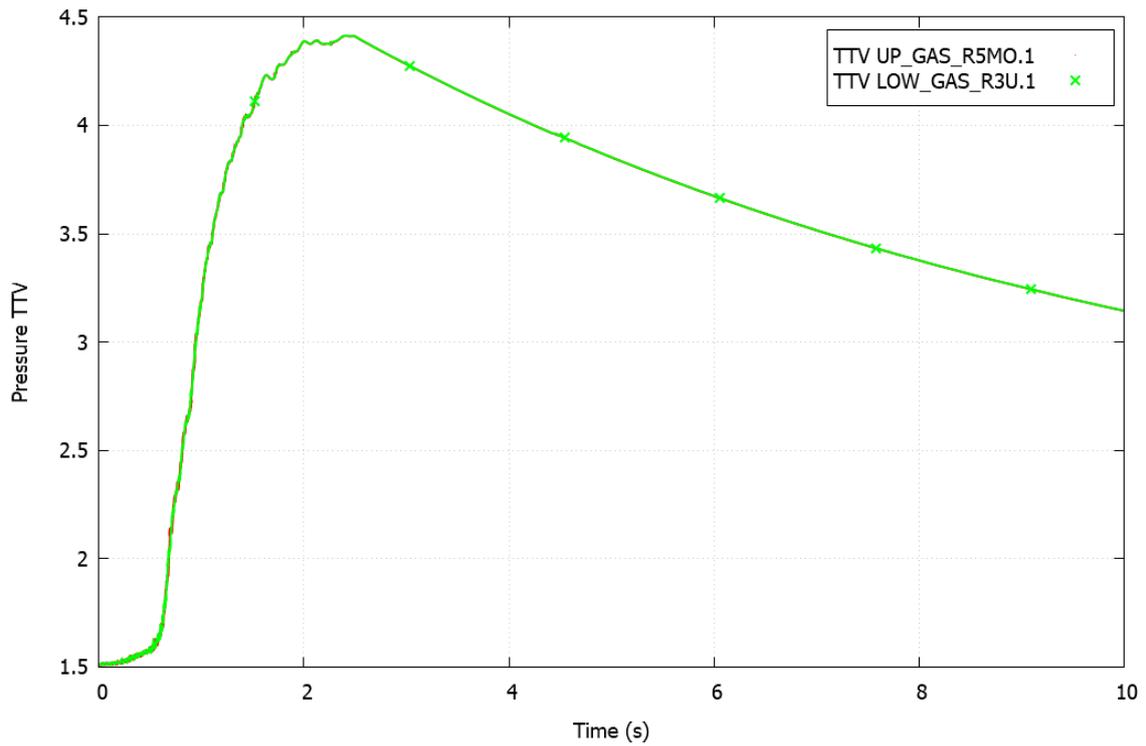


Abb. 5.84 OECD THAI-3, HD-41: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter

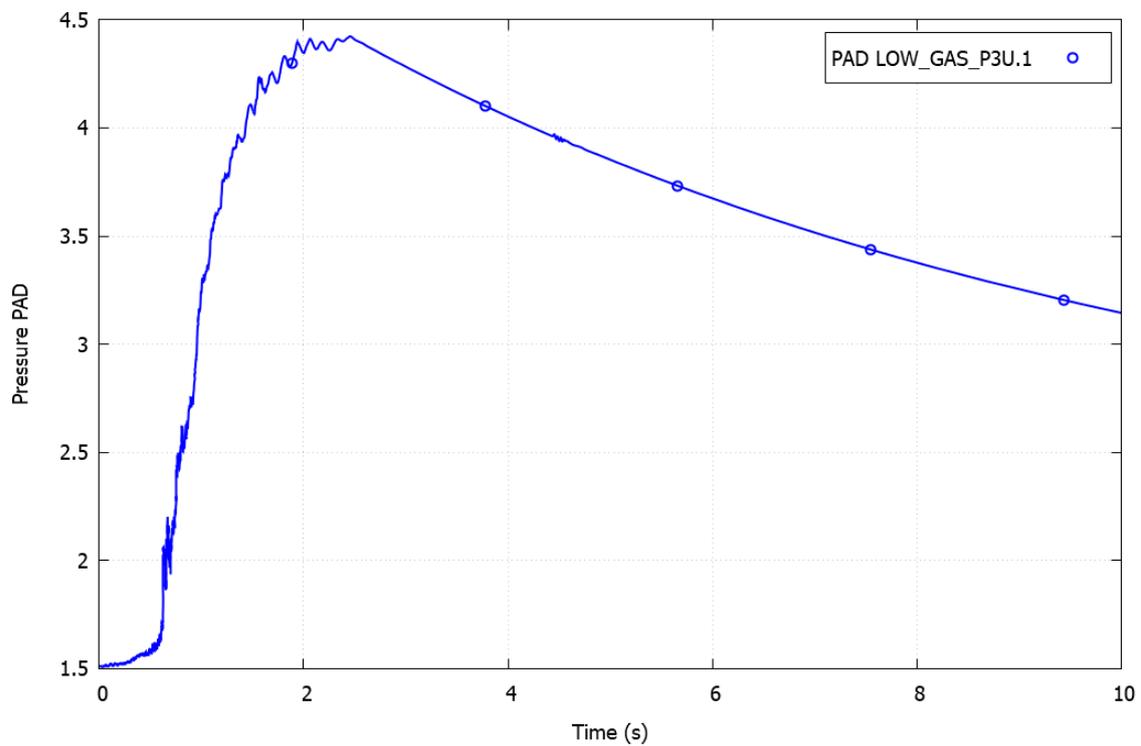


Abb. 5.85 OECD THAI-3, HD-41: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter

5.1.4.8 OECD THAI-3, HD-42: H₂-Verbrennungsversuch

In HD-42 ist der Wasserstoff gleichverteilt, die Dampfstratifikation bleibt erhalten. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im oberen Behälterbereich 10 vol.% und die Dampfkonzentration 47 vol.% bei 90 °C Atmosphärentemperatur. Die H₂-Konzentration betrug jeweils im unteren Behälterbereich 10 vol.% und die Dampfkonzentration 3 vol.% bei 30 °C Atmosphärentemperatur. Die Zündung liegt wieder in einem Bereich mit sehr hoher Wasserstoffkonzentration im unteren Bereich des TTV. Die Anfangsbedingungen wurden für jedes Höhenlevel im COCOSYS-Datensatz separat berechnet.

In diesem Fall wird der gemessene Druck (siehe Abb. 5.86) sehr gut reproduziert (siehe Abb. 5.88, Abb. 5.89). Auch das Druckmaximum von 4,5 bar absolut wird sehr gut getroffen, allerdings zu einem deutlich späteren Zeitpunkt. Die berechneten Zündzeitpunkte (Abb. 5.87) verdeutlichen dies.

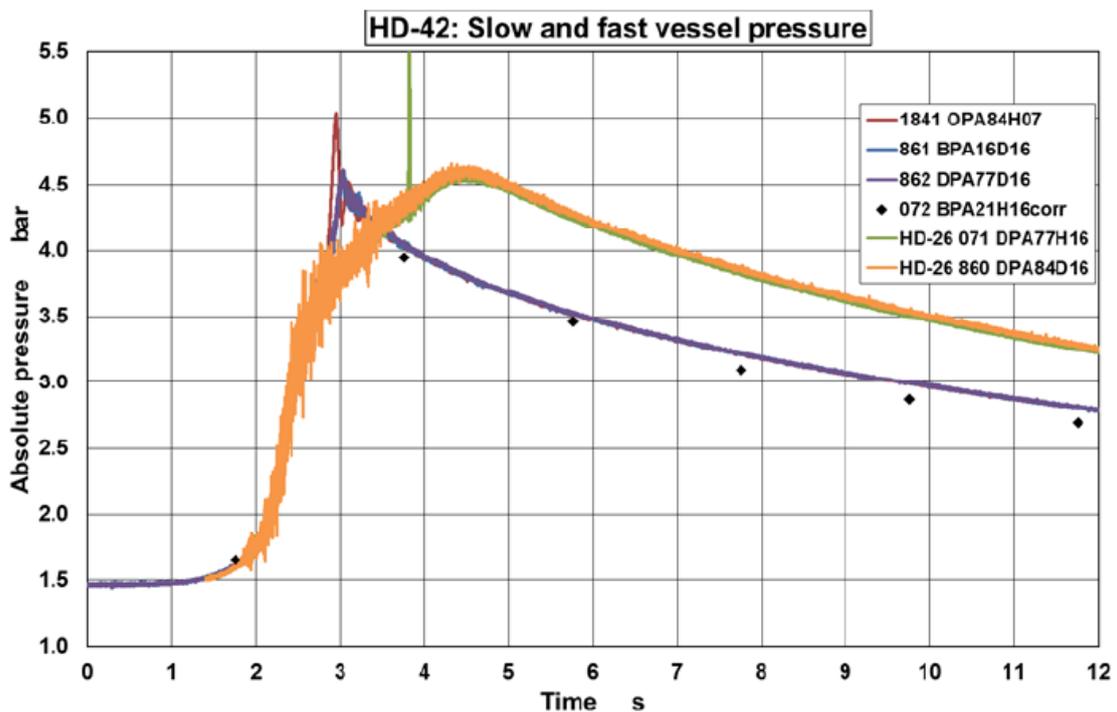


Abb. 5.86 OECD THAI-3, HD-42 und HD-26: gemessener Druckverlauf /FRE 19/

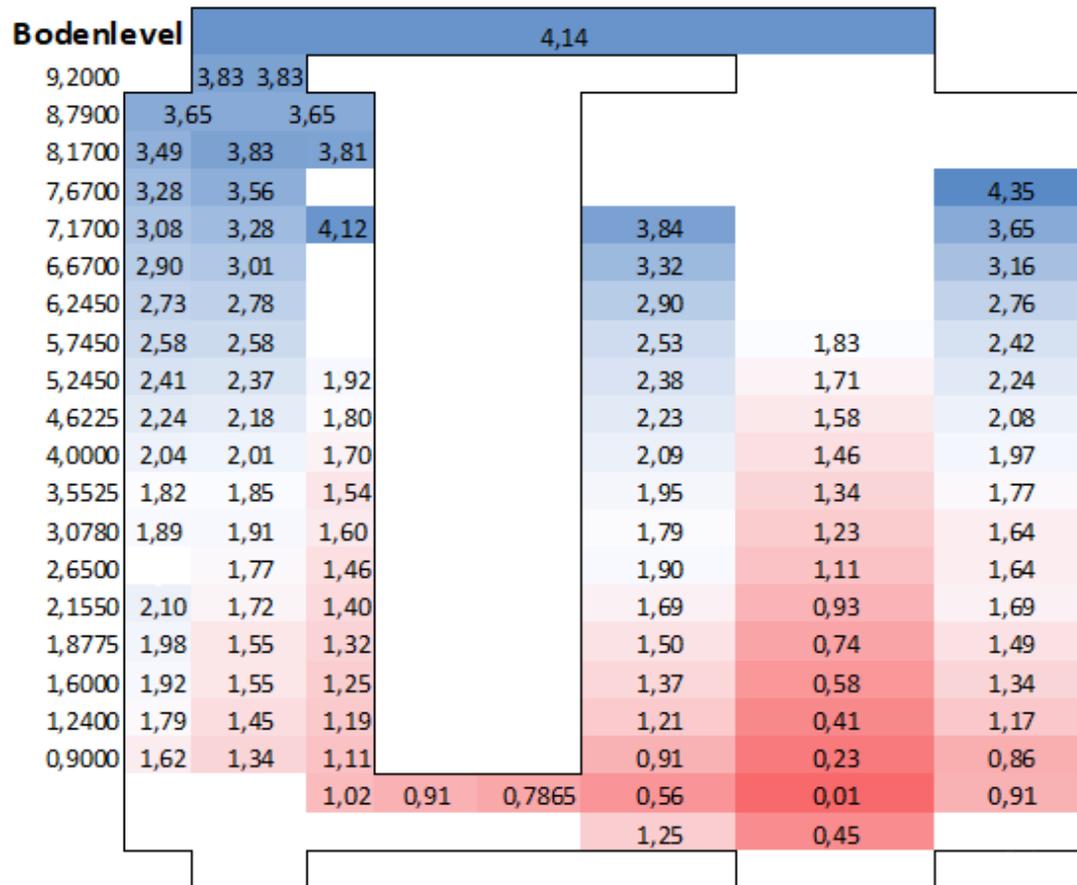


Abb. 5.87 OECD THAI-3, HD-42: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen

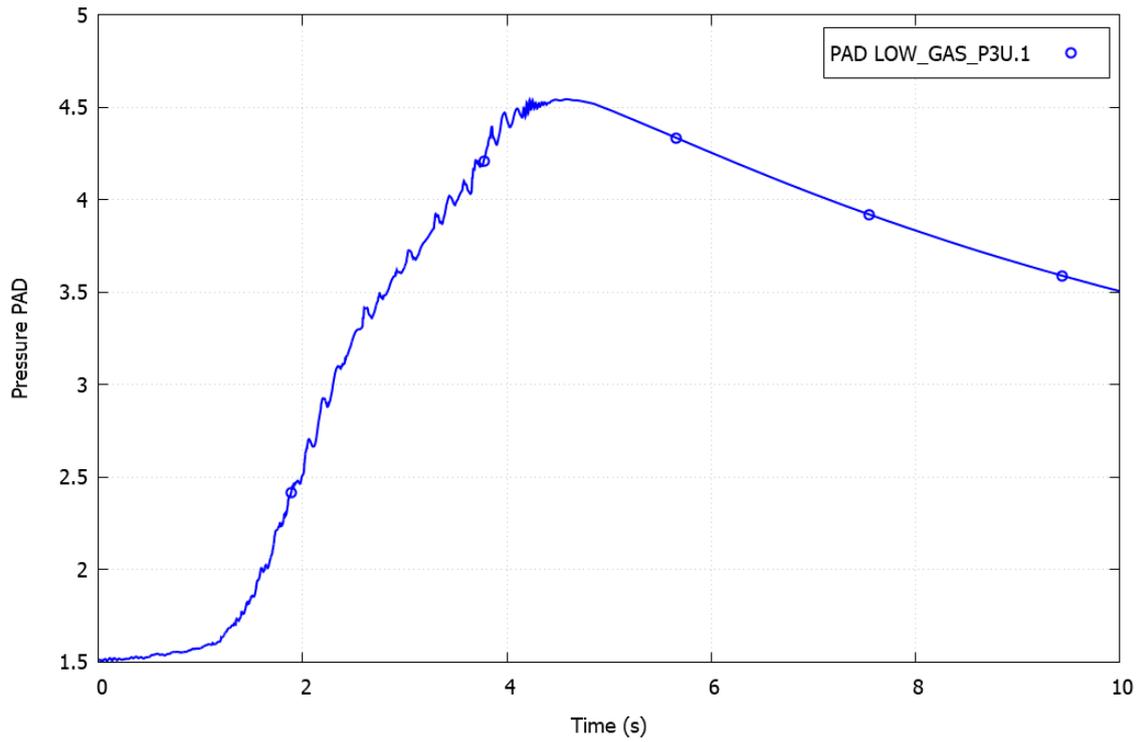


Abb. 5.88 OECD THAI-3, HD-42: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter

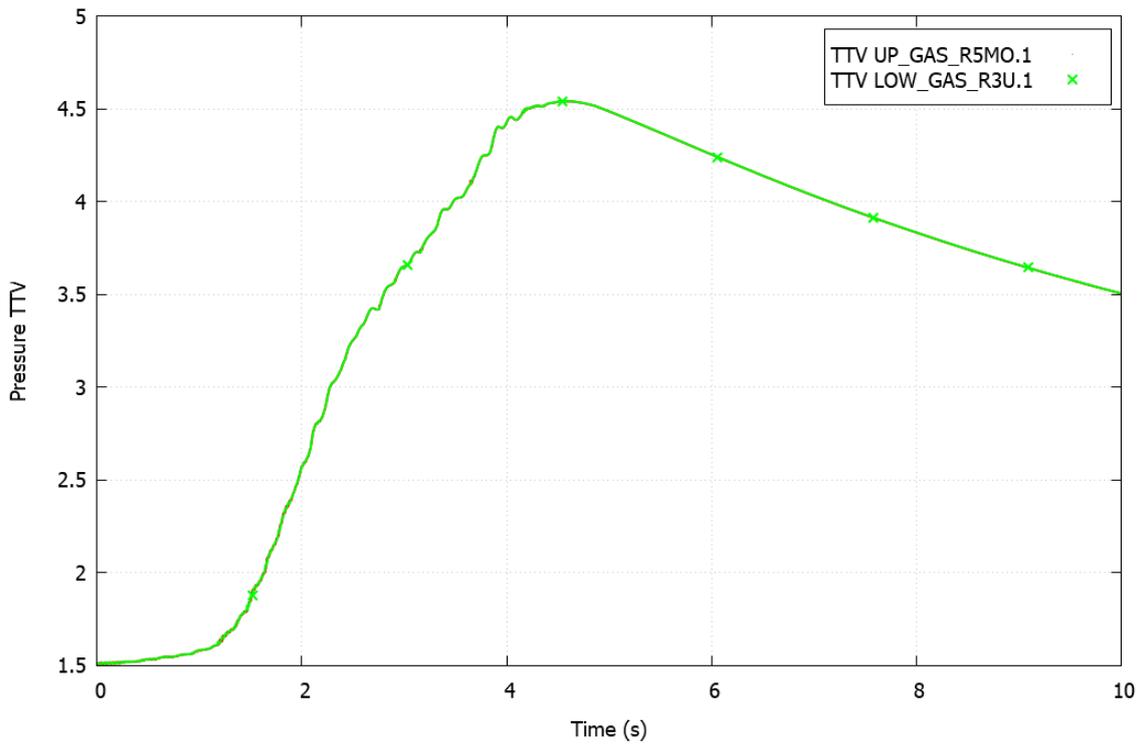


Abb. 5.89 OECD THAI-3, HD-42: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter

5.1.4.9 Fazit der H₂-Verbrennungsmodellierung

Bei Verwendung eines ausreichend feinen Datensatzes und mit angepassten FRONT-Parametern können die entsprechenden Prozesse bei der H₂-Verbrennung in den Versuchen THAI HD-44 und HD-36 in einer Mehrraumgeometrie mit und ohne umlaufende Grundströmung gut abgebildet werden. Die größten Probleme bei der Simulation von HD-44 ergaben sich nur zum Teil aus Prozessen der Wasserstoffverbrennung (Turbulenz im Zündbereich), ein größeres Problem stellte das für den Versuch ungeeignete Lüftermodell in COCOSYS dar. Dies Modell ist zur Simulation von Lüftungssystemen in Anlagen implementiert worden, und nicht für einen freistehenden einzelnen Lüfter, wie er in der Versuchsanlage eingesetzt wurde.

Die Anpassung der FRONT-Parameter (also Verwendung von Parametern abweichend zu empfohlenen Standardparametern) scheint erforderlich, da die Versuche in einer Mehrraumgeometrie durchgeführt wurden, während die Standardparameter ursprüngliche nur anhand von Experimenten, die in simpleren 1-Raum-Anlagen durchgeführt wurden, bestimmt werden konnten. Eine erneute Bestimmung der Parameter anhand der Experimente in der THAI+-Anlage erscheint hier sinnvoll.

Das FRONT-Modell sollte dahin gehend ertüchtigt werden, dass man für horizontale Verbindungen die entsprechenden Turbulenz-Parameter je Verbindung vorgeben kann; derzeit können die Parameter nur global vorgegeben werden. Auch wenn die Umlaufzahl der Gasströmung im Versuch HD-44 im Vergleich zu Unfallszenarien in Anlagen sehr hoch erscheint, sollte ein Modell implementiert werden, das die Verbrennung in Zonen bei einer hohen Durchströmung entsprechend beschleunigt.

Die weitergehende Validierung des FRONT-Modells anhand der Nachrechnung von den Versuchen THAI HD-40 bis HD-42 erfolgte unter Verwendung der Standard-Parameter, was auch beobachtete Abweichungen bedingen kann, wie die Rechnungen für HD-36 und HD-44 gezeigt haben. Dabei sind die Unterschiede für die Versuche HD-41 und HD-42 vertretbar. Bei HD-40 und Zündung bei niedriger H₂-Konzentration wurden deutlichere Abweichungen und wesentlich geringere Flammenausbreitung im Wesentlichen nur in aufwärtsgerichteter Richtung berechnet. Es wäre zu prüfen, ob die Kriterien in FRONT für horizontale Flammenausbreitung in diesem Fall gerade nicht erfüllt wurden. Damit würde der Energieeintrag deutlich unterschätzt. Ob dies für sicherheitstechnische Bewertungen von großer Bedeutung ist, muss diskutiert werden. Bei der Bewertung der

Anlagensicherheit sollten immer mehrere Rechnungen mit verschiedenen Randbedingungen durchgeführt werden.

5.2 OECD BIP-3

Im Rahmen des OECD-Projekts BIP-3 (Behaviour of Iodine Projekt) nahm die GRS als Mitglied der Programme Review Group an den regelmäßigen Arbeitssitzungen teil und führte Analysen zu ausgewählten BIP- und STEM-Versuchen durch. Im Rahmen des Vorhabens wurden folgende Themen bearbeitet:

In der Analytical Working Group im Projekt BIP-3 sind Rechnungen zu den Versuchen BIP2-RAD-EPICUR-A1 und LD3 STEM/EPICUR durchgeführt worden. In den Versuchen EPICUR-A1 und EPICUR LD3 werden mit Iod beladene Farbcoupons bestrahlt und die radiolytische Freisetzung von I_2 , RI und IO_x untersucht.

In der ersten Phase des Projekts wurde vereinbart, ein vereinfachtes Unfallszenario mit verschiedenen Modelloptionen zu betrachten, um den Einfluss radiolytischer Reaktionen auf die Organoiodbildung (RI) zu diskutieren. Hierzu sollten Parameterrechnungen durchgeführt werden. Zusätzlich wurde noch eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (UaSA) auf Basis der entsprechenden Arbeiten zum Versuch PHEBUS FPT1 /WEB 12/ durchgeführt. Hierzu wurde das GRS-Programm SUSA /KLO 16/ verwendet. Die Ergebnisse sind im Bericht /KLE 17a/ dokumentiert.

Das Unfallszenario wurde stark vereinfacht. Betrachtet wird ein Raum von 70000 m^3 mit einem Sumpfvolumen von 2000 m^3 und konstanten Temperaturen von $100 \text{ }^\circ\text{C}$. Es wird angenommen, dass bereits alle Aerosole abgelagert sind und eine Anfangskonzentration I^- von 10^{-5} mol/l und I_2 von $5 \cdot 10^{-9} \text{ mol/l}$ vorliegt. Weiterhin wird angenommen, dass zu Beginn bis 48 h der pH-Wert auf 9 gehalten wird und danach sich auf den Wert 5 ändert. Es wird eine Problemzeit bis 96 h betrachtet.

Im ersten Schritt wurde eine Parameterstudie durchgeführt. Im ersten Fall (Case 1) wurden die Reaktionen zur radiolytischen Bildung von RI ausgeschaltet, während im zweiten Fall Default-Werte verwendet wurden. Exemplarisch ist in Abb. 5.90 der Vergleich der Iodspezies in der Atmosphäre dargestellt. Die Berücksichtigung der radiolytischen RI-Bildung führt neben der höheren RI-Konzentration (grüne Linie) zu einer deutlich höheren Iodat-Konzentration (rote Linie). Durch die Freisetzung von RI kann dieses radiolytisch zersetzt werden und das gebildete I_2 kann über die Ozonreaktion zu Iodat IO_x

reagieren. Dadurch, dass nur ein Einraumvolumen betrachtet wird und überhitzte Randbedingungen herrschen, sinkt das Iodataerosol nur sehr langsam ab.

Zusätzlich wurde eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Die unsicheren Parameter basieren im Wesentlichen auf denen der UaSA zu PHEBUS FPT1. Da im vereinfachten Szenario einzelne Reaktionen nicht betrachtet wurden, konnte die Anzahl der unsicheren Parameter auf 56 reduziert werden. Ebenso wurden die thermodynamischen Randbedingungen und die Aerosoleigenschaften als nicht unsicher angenommen.

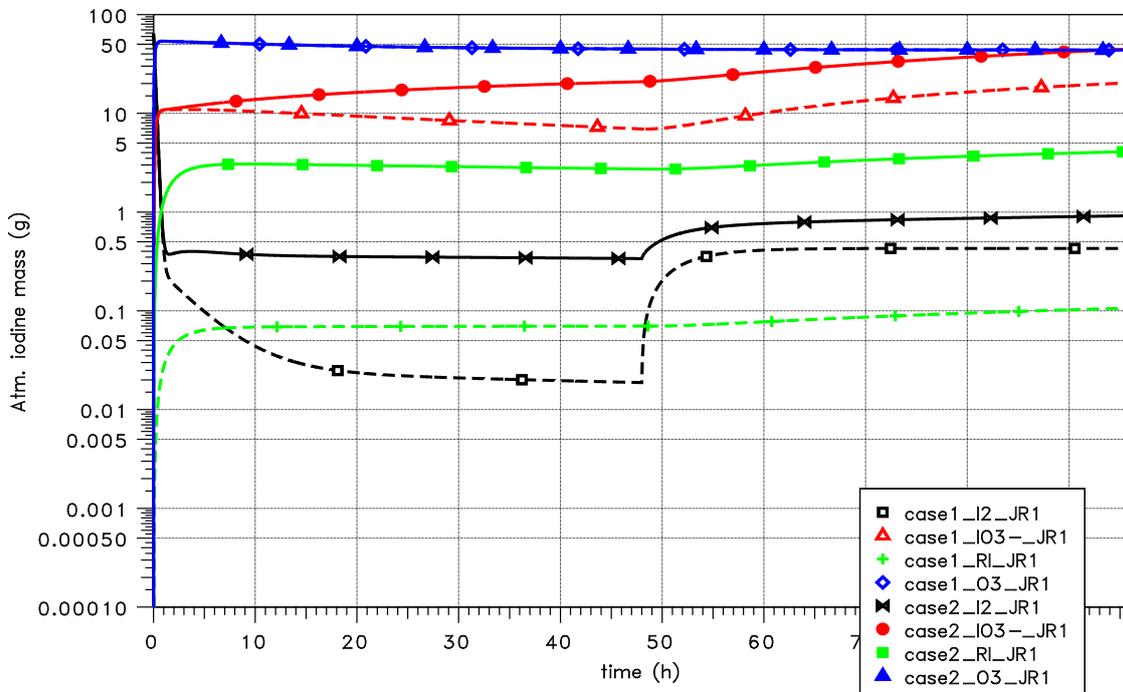


Abb. 5.90 OECD-BIP-3-Studie: Vergleich der Iod-Spezies in der Atmosphäre (ohne radiolytische RI-Bildung: gestrichelt; Default: durchgezogen)

Für die Auswertung wurde die Iod-Masse unter anderem nach verschiedenen Spezies gewichtet, da eine Filterung von RI schwieriger als die Filterung von IO_x ist. Die verwendeten Faktoren sind:

$$x = 0,001 \cdot M_{IO_x} + 0,01 \cdot M_{I_2} + 0,1 \cdot M_{RI}$$

Exemplarisch wird die gewichtete Iod-Masse in der Atmosphäre gezeigt (Abb. 5.91). Die Bandbreite der Ergebnisse geht über 2 Größenordnungen. Wie in der FPT1-Analyse sind

- Parameter 47: Iod-Farbe-Wechselwirkung (Reaktion 76)
- Parameter 54: die radiolytische RI-Bildung (Reaktion 66)
- und Parameter 43: die radiolytische Zersetzung von RI (Reaktion 65)

von erheblicher Bedeutung (Abb. 5.92).

In der Phase mit dem niedrigen pH-Wert von 5 nach 48 h gewinnt der wasserseitige Massentransferkoeffizient (Parameter 19) an Bedeutung.

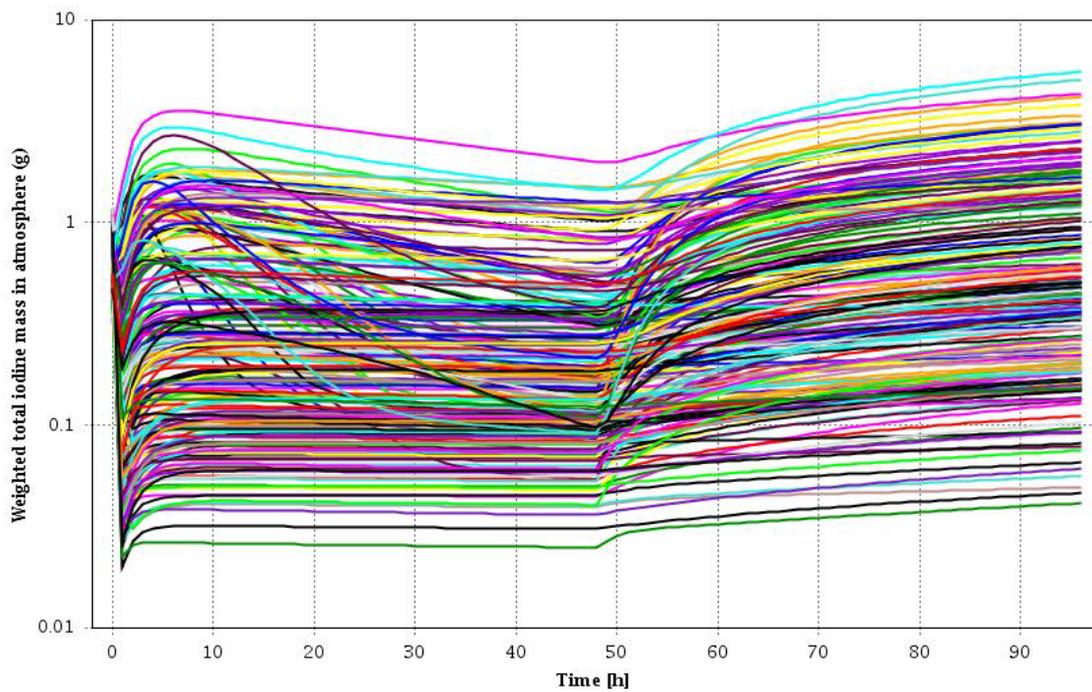


Abb. 5.91 OECD-BIP-3-Studie: Gewichtete Iod-Masse in der Luft – Verlauf der 208 Rechenläufe

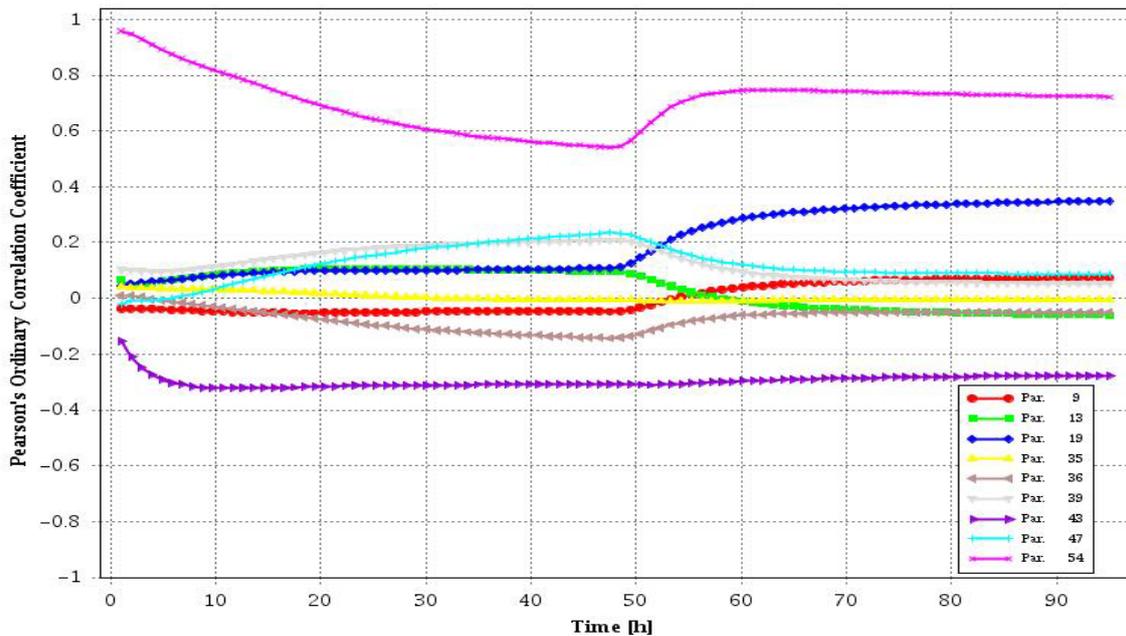


Abb. 5.92 OECD-BIP-3-Studie: Gewichtete Iod-Masse in der Luft – Sensitivitäten relevanter Parameter

5.3 OECD STEM-2

Im OECD-Projekt STEM-2 wird unter anderem das Verhalten von abgelagerten Iod-Aerosolen unter radiolytischen Randbedingungen untersucht. Dazu wurden schon in OECD STEM-1 Versuche in der EPICUR Anlage durchgeführt /LER 11/. Eine erste Validierung des neu strukturierten AFP-Moduls in COCOSYS anhand der Versuche AER-1 und AER-3 wurde bereits in /KLE 16/ versucht, ergab aber noch kein konsistentes Bild. Daher wurden in diesem Vorhaben die Arbeiten nochmals aufgegriffen.

Im Rahmen von STEM-2 hat die GRS auch an den Meetings der PRG und AWG teilgenommen. Es wurden Rechnungen zu den Versuchen AER08 STEM/EPICUR und eine Vergleichsstudie, eine sogenannte Comparison Exercise, zu dem Thema Iodat-Abbau aufgrund von Strahlung durchgeführt. Der Vergleichsstudie wurde eine vereinfachte Reaktorrechnung zugrunde gelegt. Die Ergebnisse wurden mit den Teilnehmern verglichen und diskutiert. Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse des Versuch AER08 STEM/EPICUR mit den von COCOSYS berechneten Ergebnissen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Die transiente Phase des Versuches kann sehr gut nachgerechnet werden. Die I_2 -Freisetzung wird leicht überschätzt, wohingegen die IO_x -Freisetzung leicht unterschätzt wird. Ein Vergleich der Rechnung und des Experimentes zeigt, dass die letzte Versuchsphase (post-irradiation phase) nicht richtig gerechnet wird und

deutlich zu wenig I_2 freigesetzt wird. Allerdings konnte bisher der Grund für diese hohe Freisetzung von I_2 durch den Wegfall der Strahlung noch nicht geklärt werden und somit die Modelle in dieser Hinsicht auch noch nicht weiterentwickelt werden.

Ein Vergleich der Ergebnisse der Vergleichsstudie mit den Ergebnissen der internationalen Teilnehmer hat gezeigt, dass der Einfluss des IO_x -Abbaus auf den Quellterm in den COCOSYS-Rechnungen keinen merklichen Unterschied macht. Die Ergebnisse der Partner allerdings zeigen auf, dass sich der Quellterm abhängig von der Betrachtung des IO_x -Abbaus deutlich unterscheidet. Diesem Unterschied muss anhand weiterer Analysen nachgegangen und er muss abschließend diskutiert werden.

Die Arbeiten zur Untersuchung der kinetischen Dekompositionsraten eines Mehrkomponentenaerosols „laer“, die im Rahmen der Analytical Working Group (AWG) des OECD-STEM-2-Projektes diskutiert werden, sind auch mit COCOSYS untersucht worden. Dazu wurden zwei Rechnungen des Versuches PHEBUS FPT1 mit NEWAFP durchgeführt, die allerdings aufgrund der Umstrukturierung von AFP noch deutliche Probleme aufgewiesen haben. Die zwei durchgeführten Rechnungen: 1. Rechnung ohne die Dekomposition eines abgelagerten und in der Atmosphäre suspendierten Multikomponentenaerosols „laer“ und 2. Rechnung mit der Dekomposition der abgelagerten und suspendierten Aerosole durch Strahlung, müssen aufgrund der nun behobenen Bugs im Programm, die durch die Umstrukturierung des AFP entstanden sind, im neuen Nachfolgevorhaben wiederholt werden. Im Rahmen der AWG STEM-2 sind alle Arbeitsergebnisse in /BOS 19a/ und /BOS 19b/ dokumentiert worden.

5.3.1 OECD STEM AER-Versuche

Von den insgesamt 12 durchgeführten Versuchen (Tab. 5.3, S. 328) werden im Folgenden 9 Versuche betrachtet. In diesen Versuchen wurde die Zersetzung von Csl und Iodat (IO_x) durch Strahlung untersucht. Da Iodat auch bei der Csl-Zersetzung und aufgrund der Iod-Ozon-Reaktion entsteht, werden zunächst die Versuche AER-7 /COL 14a/ und AER-8 /COL 15/ mit Iodat betrachtet.

5.3.1.1 Modellierung der Iodat-Zersetzung aufgrund von Strahlung

In COCOSYS werden Iodoxide unter dem Sammelbegriff IO_x betrachtet. Tatsächlich verhalten sich die Iodate wie z. B. I_2O_4 , I_4O_9 , HIO_3 unterschiedlich /COL 15/. Durch Hygroskopie wird bereits bei niedrigen Feuchten Wasser eingelagert und bei höheren

Temperaturen tritt teilweise eine thermische Zersetzung auf. Um diese Effekte abbilden zu können, wurden bezüglich der Iodatzeretzung folgende Reaktionen im AFP-Modul implementiert:

- Reaktion '*IOx transition (fw)*'

In den unten dargestellten Filtermessungen sind zwei Reaktionsgeschwindigkeiten sichtbar. Daher wird im Folgenden zwischen radiolytisch unsensiblen IO_x und sensiblen $IO_x(r)$ unterschieden und eine Transferreaktion von IO_x nach $IO_x(r)$ eingefügt. Diese Reaktion hängt von der Feuchte, Temperatur T , der Konzentration der abgelagerten Iodataerosole c_{IOx} sowie der Strukturoberfläche A ab.

$$r \sim f_{sat} k(T) A \cdot c_{IOx}$$

Ein Einfluss bzgl. einer Farboberfläche ist vorhanden, wird aber in diesem Modell nicht dargestellt, da die tatsächliche Quelle der erhöhten I_2 -Freisetzung im Versuch AER-9 nicht eindeutig ist /COL 15/.

- Reaktion '*IOx decomp (fw)*':

Diese Reaktion beschreibt die eigentliche radiolytische Zersetzung und ist schnelllaufend und somit für den anfänglichen Konzentrationsanstieg im Filter verantwortlich. Sie hängt vom Reduktionfaktor f_r ab, welcher die reduzierte freie Oberfläche beschreibt (spezifische Oberfläche S), der temperaturabhängigen Reaktionskonstanten $k(T)$ sowie der Dosisleistung D .

$$r \sim f_r S D k(T)$$

Die fehlende Abhängigkeit von der Aerosolkonzentration führt zu einem linearen Verlauf in den Filtermassen. Allerdings wird die Reaktion für niedrige Aerosolkonzentrationen gedämpft.

- Reaktionen '*IOx th-decomp (fw)*' und '*IOx thr-decomp (fw)*'

Bei hohen Temperaturen wird auch ohne Strahlung eine thermische Zersetzung beobachtet, welche in den obigen Reaktionen für beide Iodatanteile (IO_x und $IO_x(r)$) modelliert ist. Die Rate hängt hierbei von der Feuchte, der Temperatur, der Aerosolkonzentration c_{IOx} sowie der gesamten Aerosoloberfläche S_g ab, welche aber durch einen Reduktionsfaktor eingeschränkt wird.

$$r \sim f_r f_{sat} k(T) S_g \cdot c_{IOx}$$

5.3.1.2 Simulation der Experimente

Die betrachteten Versuche wurden im EPICUR-Versuchsstand durchgeführt /SIM 11/. Der prinzipielle Versuchsaufbau ist in Abb. 5.93 dargestellt. Über die Gaszufuhr auf der

linken Seite mit dem Dampferzeuger wird eine gewünschte Feuchte eingestellt. Für die Filterung wird dieser Gasstrom noch weiter verdünnt. Ein Teil dieses Gasstroms wird über eine Pumpe (re-injection pump in Abb. 5.93) wieder in den Versuchsbehälter (irradiation vessel in Abb. 5.93) zurückgeführt.

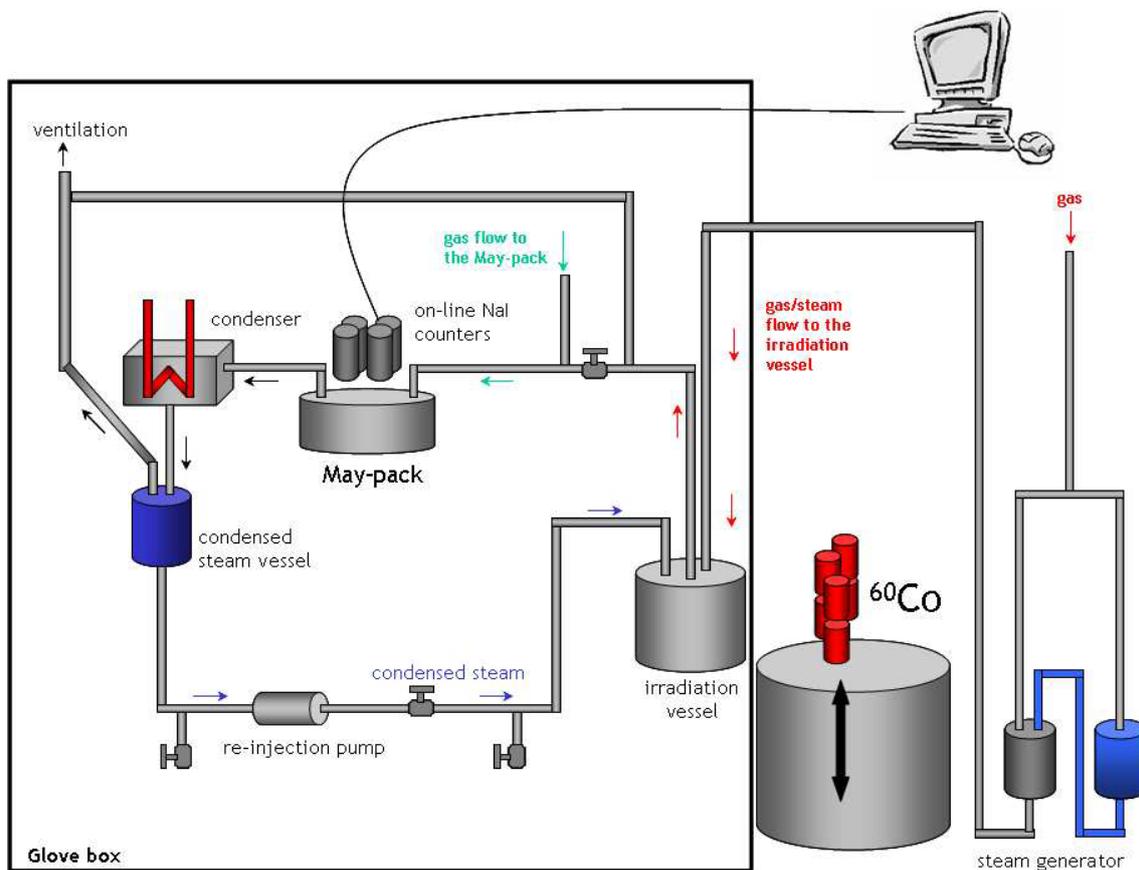


Abb. 5.93 Vereinfachte Darstellung der EPICUR-Versuchsanlage (aus /SIM 11/)

Wie schon in /KLE 16/, ist die verwendete COCOSYS-Nodalisierung deutlich einfacher und es wird nur ein einfacher Loop verwendet (Abb. 5.94). Im Gegensatz zu den früheren Rechnungen werden aber nun die Stahlflächen des Versuchsbehälters als reaktive Oberfläche und Ablagerungsfläche für Iodaerosole betrachtet. Die Rückführung wird in den experimentellen Ergebnissen nicht genau dargestellt. Daher wird in den COCOSYS-Rechnungen der Volumenstrom teilweise erhöht (Tab. 5.3, S. 328). Dies hat einen Einfluss auf die Ablagerung im Versuchsbehälter und die Reaktion mit der Stahloberfläche. Weitere Oberflächen (z. B. Rohrleitung, Filterhalterung usw.) werden nicht berücksichtigt.

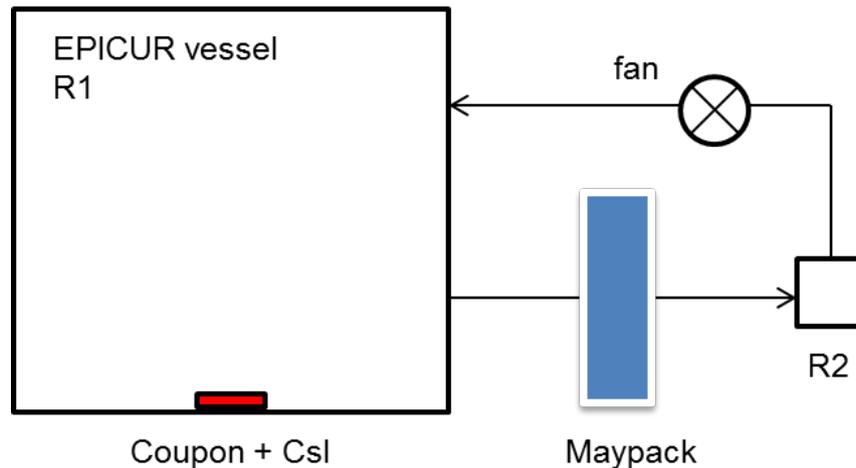


Abb. 5.94 COCOSYS-AIM-Nodalisation der EPICUR-Anlage für die AER-Versuche (aus /KLE 16/)

5.3.1.3 Nachrechnung des Versuchs AER-7

In dem Versuch AER-7 wurde IO_x auf einer Quarzoberfläche bei 80 °C und 50 % Feuchte verwendet. Die Dosisleistung betrug 3,7 kGy/h (Tab. 5.3 S. 328). Ein Vergleich zwischen Rechnung und Experiment ist in Abb. 5.95 und Abb. 5.96 dargestellt. Der Verlauf der gefilterten Iod-Mengen (I_2 und IO_x) wird gut wiedergegeben, insbesondere auch das Absinken der Freisetzungsrates bei ca. 12 h. Neben den gefilterten Mengen ist auch die korrekte Berechnung der Iod-Verteilung im gesamten Experiment wichtig. So wird auch die Iod-Ablagerung im Versuchsbehälter (IO_x -Aerosol, Ablagerung an Stahloberflächen) als auch die verbleibende Iod-Menge auf dem Filter gut wiedergegeben. Eine RI-Bildung wird in COCOSYS nicht berechnet, da dort kein organisches Material vorhanden ist. Die gemessenen RI-Mengen im Experiment werden auf Verschmutzungen und CO_2 sowie Methan-Anteile in der Luft zurückgeführt. Nach 30 h wird die Strahlenquelle entnommen. Der starke Anstieg in der gefilterten I_2 -Menge wird in COCOSYS nicht modelliert und simuliert. Die eigentlichen Ursachen sind auch nicht ganz klar. Dieser Effekt wird aber in mehreren Experimenten beobachtet.

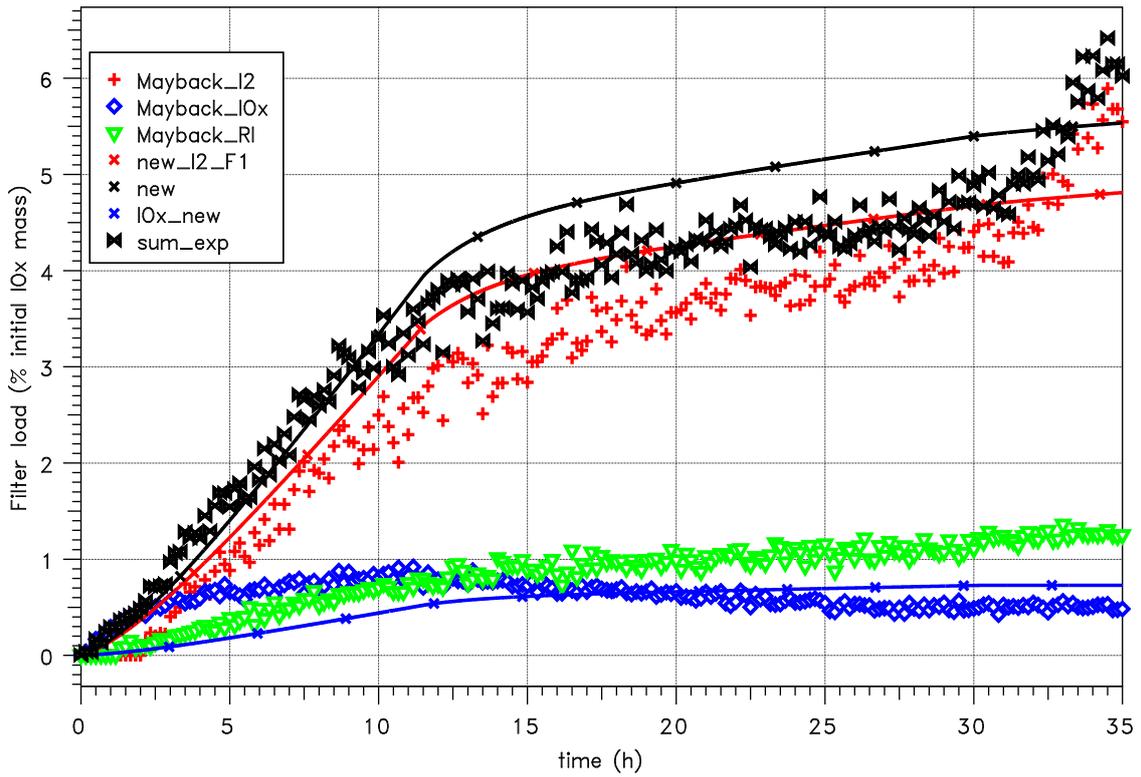


Abb. 5.95 OECD STEM, AER-7: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: I_2+IO_x , rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI)

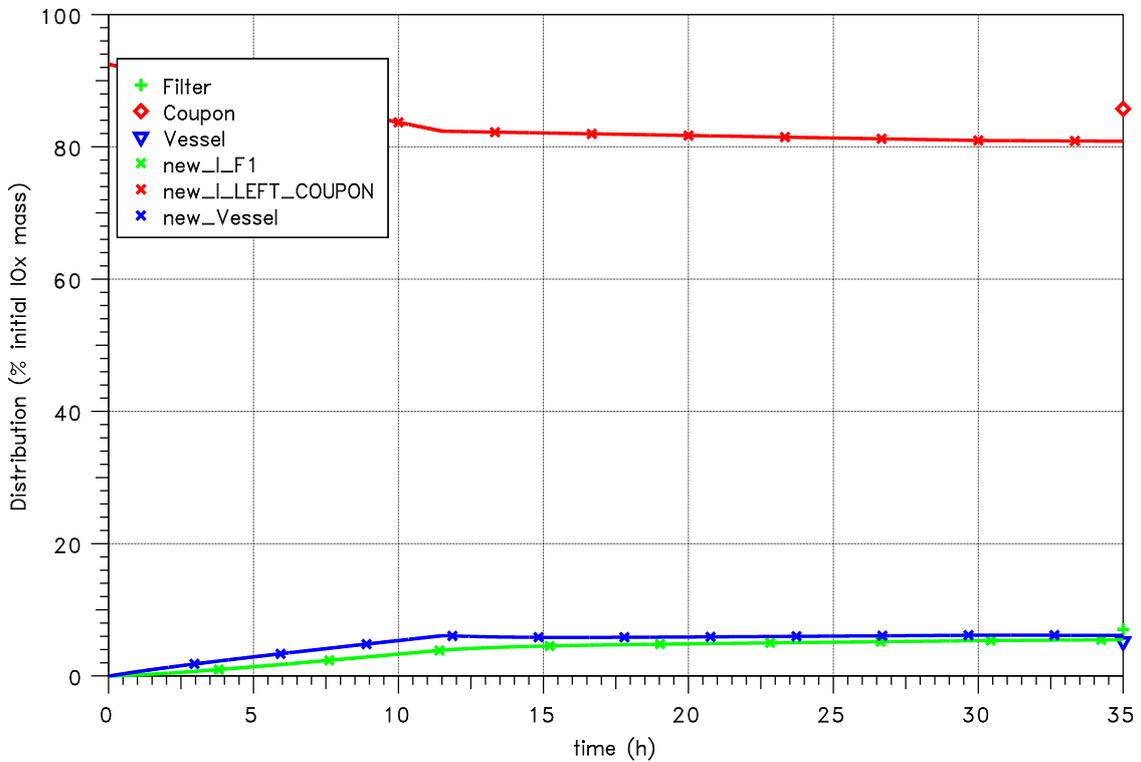


Abb. 5.96 OECD STEM, AER-7: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.4 Nachrechnung des Versuchs AER-8

Dieser Versuch wurde mit einer im Vergleich zu AER-7 höheren Temperatur von 120 °C durchgeführt. Laut /COL 15/ ist für einige Iodate eine thermische Zersetzung bereits möglich. Ebenso beginnt sich bei dieser Temperatur und Feuchte die Kristallstruktur aufzulösen und die Partikel werden sphärisch. Die thermische Zersetzung wird in COCOSYS durch eine separate Reaktion berücksichtigt. Dennoch ist anzumerken, dass die einzelnen Prozesse nur sehr vereinfacht abgebildet werden.

Von -8,5 h bis 0 h wird die thermische Zersetzung von Iodat gut nachgerechnet (Abb. 5.97). In der 30-stündigen Phase mit Strahlung wird der I₂-Anteil im Filter etwas unterschätzt und die Iodatanlagerung etwas überschätzt. Dennoch wird der Verlauf gut wiedergegeben, insbesondere auch die Änderung der Reaktionsgeschwindigkeit bei ca. 2,5 h. Wie in AER-7 wird der starke Anstieg nach der Bestrahlung nicht modelliert.

Aus diesem Grunde wird die verbleibende Iod-Masse auf dem Coupon auch um ca. 18 % überschätzt. Ebenso wird die verbleibende Iod-Menge im Versuchsbehälter um den Faktor 2 überschätzt.

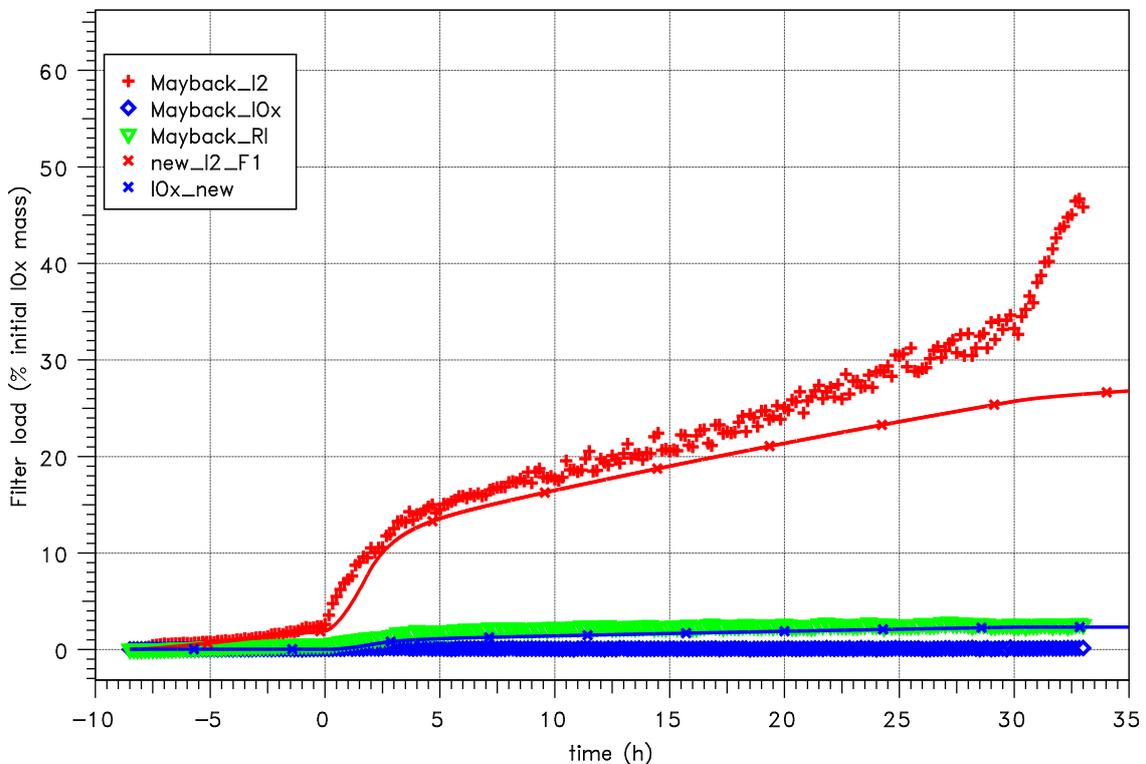


Abb. 5.97 OECD STEM, AER-8: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (rot: I₂, blau: IO_x, grün: RI)

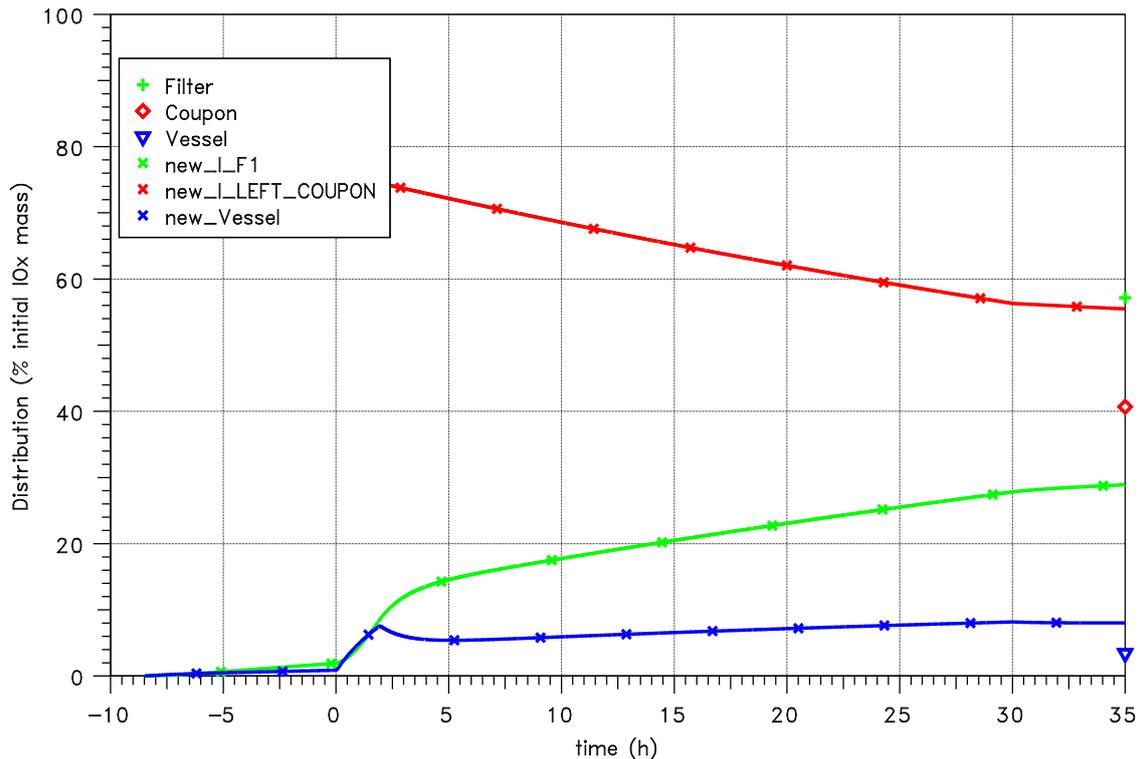


Abb. 5.98 OECD STEM, AER-8: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.5 Modellierung der CsI-Zersetzung aufgrund von Strahlung

Die in KLE 16/ dargestellte Modellierung der CsI-Zersetzung wurde weiter verbessert, um auch die anderen Versuche simulieren zu können. In der ursprünglichen Modellierung wurde im AER-1-Versuch die Ozon-Bildung um den Faktor 10 erhöht, um die gemessenen Iodatmengen im Filter zu erhalten. In den obigen Versuchen AER-7 und -8 ist dieses nicht notwendig. Hier wurden die Default-Werte für die Ozonbildung verwendet und die Iodatmengen eher überschätzt. Aufgrund des größeren Oberflächen-Volumen-Verhältnisses bei dieser kleinen Versuchsanlage ist eine höhere Ozonbildungsrate auch eher unwahrscheinlich. Daher wird im erweiterten Modell davon ausgegangen, dass die Iodatbildung bei der CsI-Zersetzung direkt an der Oberfläche stattfindet und daher eine zusätzliche Reaktion modelliert. Wie bei Iodat sind zwei Reaktionsgeschwindigkeiten zu beobachten, also ein steiler Anstieg in der Anfangsphase der Bestrahlung und ein schwächerer linearer Anstieg in der späteren Phase. Daher werden nun zwei Gruppen von CsI betrachtet, wobei CsI(r) durch Strahlung zersetzt werden kann. Folgende Reaktionen wurden eingeführt:

- Reaktion 'CsI transition (fw)'

Diese Reaktion hängt von der Feuchte, Strukturfläche A, der abgelagerten

Aerosolkonzentration c_{Csl} ab. Im Fall von Farboberflächen wird die Reaktion weiter reduziert (Faktor f_p).

$$r \sim f_p f_{sat} k A \cdot c_{Csl}$$

– Reaktion 'Csl decomp (fw)'

Im Versuch AER-9 zeigte sich, dass die Freisetzung von I_2 bei der Verwendung von Farbcoupons deutlich niedriger ist. Das freiwerdende I_2 wird möglicherweise von der Farbe direkt aufgenommen. Interessanterweise wird aber keine erhöhte RI-Bildung beobachtet. In der COCOSYS-Modellierung wird daher die I_2 -Bildung lediglich reduziert und nicht als physisorbiertes I_2 oder chemisorbiertes I_{chs} in der Farbe angelagert, um eine zusätzliche RI-Bildung zu vermeiden. Die Reaktion hängt von der Feuchte, der spezifischen Oberfläche S und der Dosisleistung D ab. Wie im Absatz darüber beschrieben, wird bei Farboberflächen die Rate zusätzlich eingeschränkt. Die spezifische Oberfläche S kann zusätzlich durch einen Faktor f_r eingeschränkt werden.

$$r \sim f_r f_p f_{sat} S D k$$

Die fehlende Abhängigkeit von der Aerosolkonzentration führt zu einem linearen Verlauf in den Filtermassen. Allerdings wird die Reaktion für niedrige Aerosolkonzentrationen gedämpft.

– Reaktion 'Csl to IOx dec(fw)'

Die Struktur der Reaktionsgleichung für die direkte Iodatbildung ist die Gleiche wie bei der I_2 -Bildung. Zusätzlich hängt die Reaktion noch von der vorliegenden Ozonkonzentration c_{O_3} ab. Die Form der Gleichung ist also:

$$r \sim f_r f_p f_{sat} S D k c_{O_3}$$

5.3.1.6 Nachrechnung des Versuchs AER-1

In dem AER-1-Versuch (/LER 08/) wurde auf Quarz abgelagertes Csl bei 80 °C und 20 % Luftfeuchte 30 Stunden lang bestrahlt. Wie bei Iodat sind zwei Reaktionsgeschwindigkeiten deutlich sichtbar (Abb. 5.99). Diese werden nun mit COCOSYS modelliert. Die Iodat-Anlagerung im Filter wird etwas überschätzt. Die Iod-Verteilung zum Ende des Experiments wird ebenfalls sehr gut wiedergegeben. Organoiod kann in der COCOSYS-Rechnung nicht auftreten.

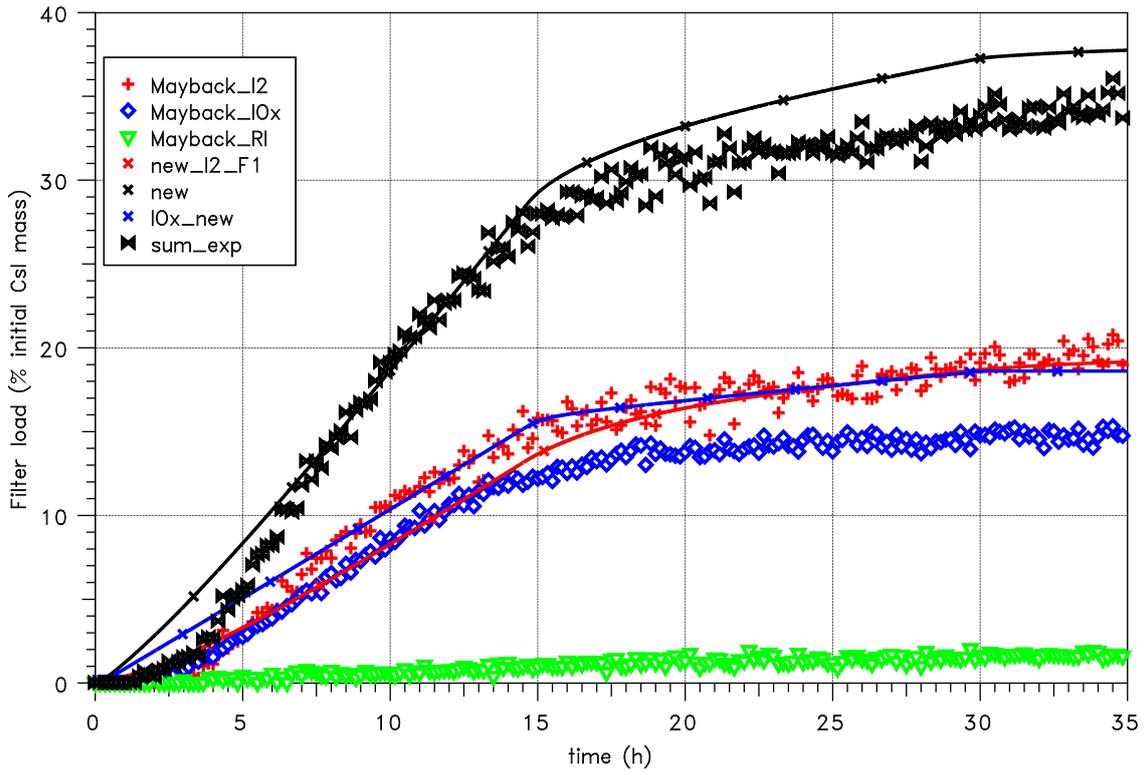


Abb. 5.99 OECD STEM, AER-1: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: I_2+IO_x , rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI)

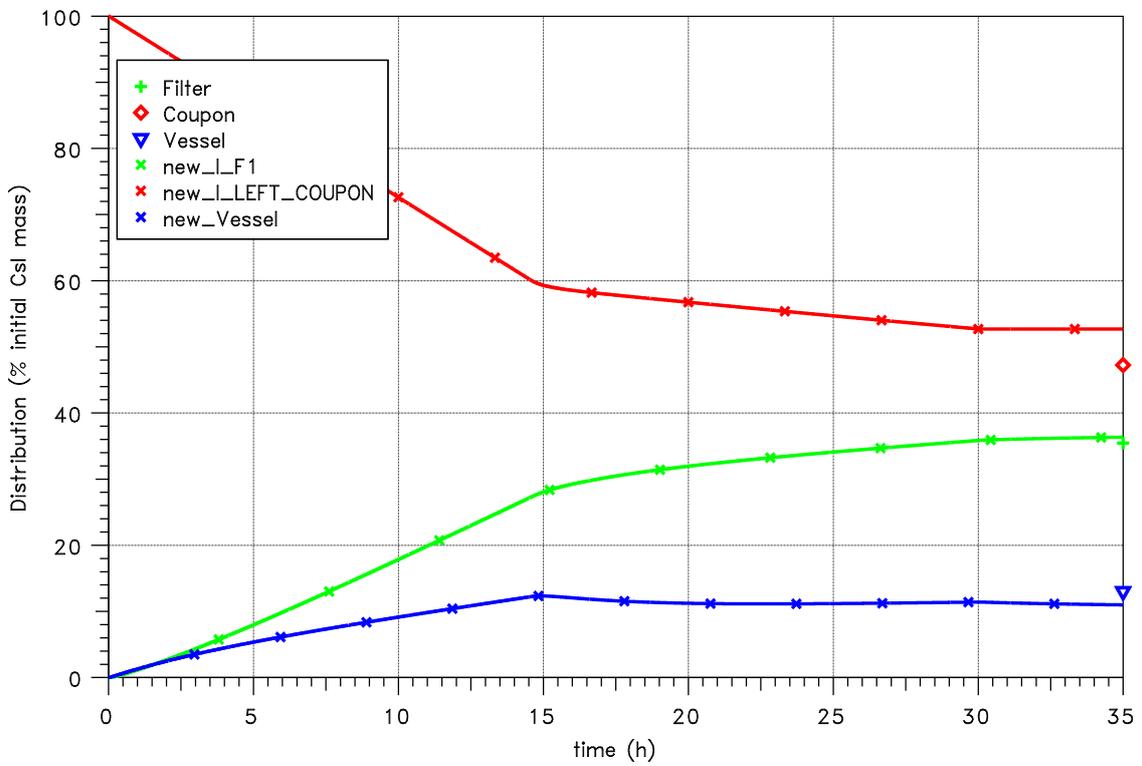


Abb. 5.100 OECD STEM, AER-1: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.7 Nachrechnung des Versuchs AER-2b

Im Vergleich zu AER-1 wurde in diesem Versuch die Feuchte auf 50 % erhöht. Alle weiteren Parameter sind praktisch gleich. Durch die erhöhte Feuchte sind die Freisetzungsteile nun deutlich höher. Dies wird im Modell durch die Feuchteabhängigkeit berücksichtigt. Hier wird eine lineare Abhängigkeit zwischen 14 % (RH0) und 50 % angenommen. Abb. 5.101 zeigt die gefilterten Iod-Anteile. Die anfängliche Verzögerung über ca. 6 h wird im Modell nicht erfasst. Ansonsten wird der Verlauf gut wiedergegeben. Im Experiment wird das gesamte Csl auf dem Filter umgesetzt (Abb. 5.102). Dies wird in der COCOSYS-Rechnung nicht ganz erreicht. Hier verbleiben noch ca. 18 % auf dem Filter (wobei abgelagerte Iodatmengen eingerechnet sind). In der COCOSYS-Rechnung werden ca. 38 % im Versuchsbehälter abgelagert. In der experimentellen Iodbilanz wurden nach dem Experiment nur noch 77 % des anfänglichen Iods erfasst. Insofern ist die Abweichung zwischen Rechnung und Experiment von ca. 18 % noch vertretbar.

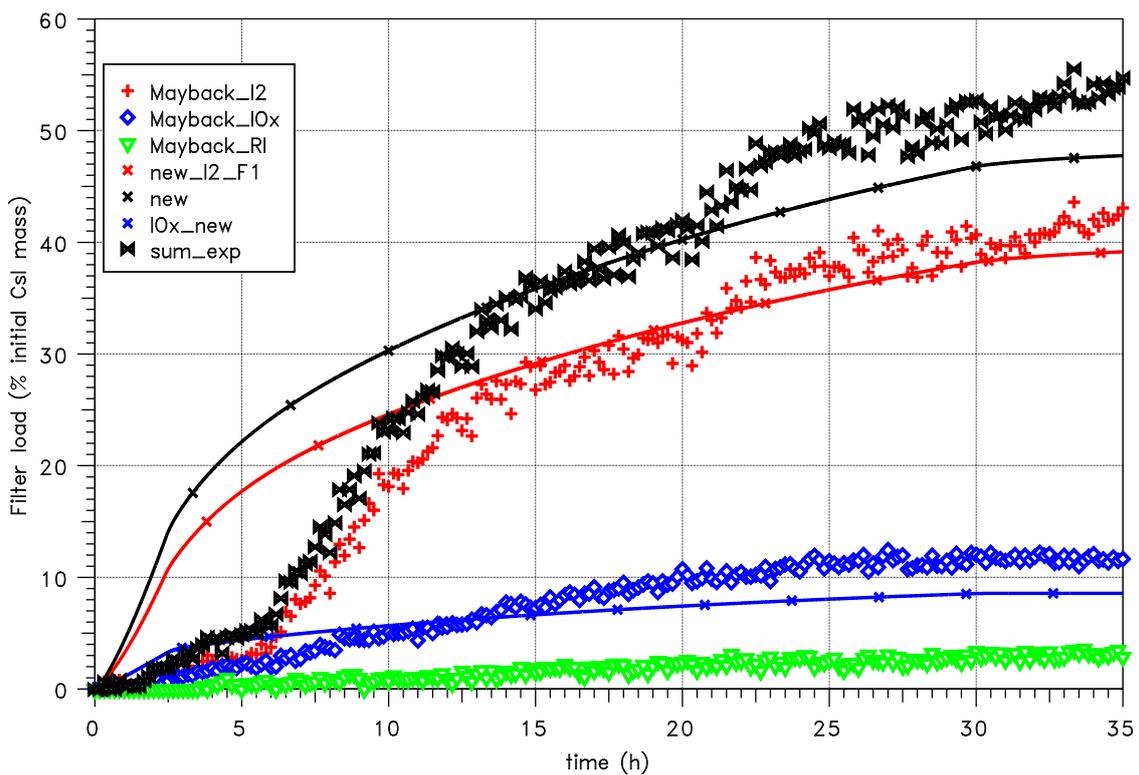


Abb. 5.101 OECD STEM, AER-2b: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: I_2+IO_x , rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI)

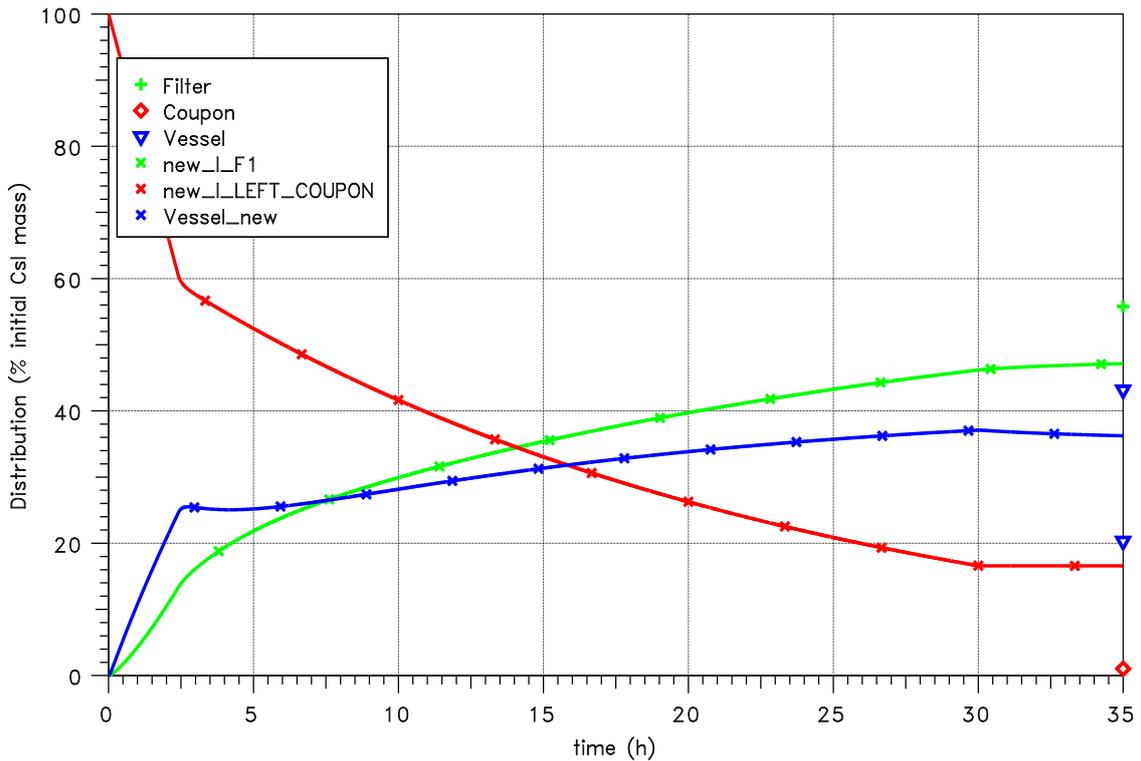


Abb. 5.102 OECD STEM, AER-2b: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.8 Nachrechnung des Versuchs AER-3

Im Vergleich zu AER-2 wurde ein Coupon mit EPOXY-Beschichtung gewählt. Die Iod-Freisetzung ist nun erheblich niedriger (Abb. 5.103). In dieser Rechnung wird die Freisetzung um 94 % reduziert (REDPAINT = 0,06). Der stark verzögerte Verlauf in der Freisetzung wird in der Rechnung nicht wiedergegeben. Die gefilterten Organoiod-Mengen entsprechen den experimentellen Werten. Diese liegen aber in der gleichen Größenordnung wie in den Versuchen ohne Farbbeschichtung. Die Verteilung der Iod-Mengen in der Versuchsanlage, Coupon sowie Filter stimmt gut mit den Messungen überein (Abb. 5.104).

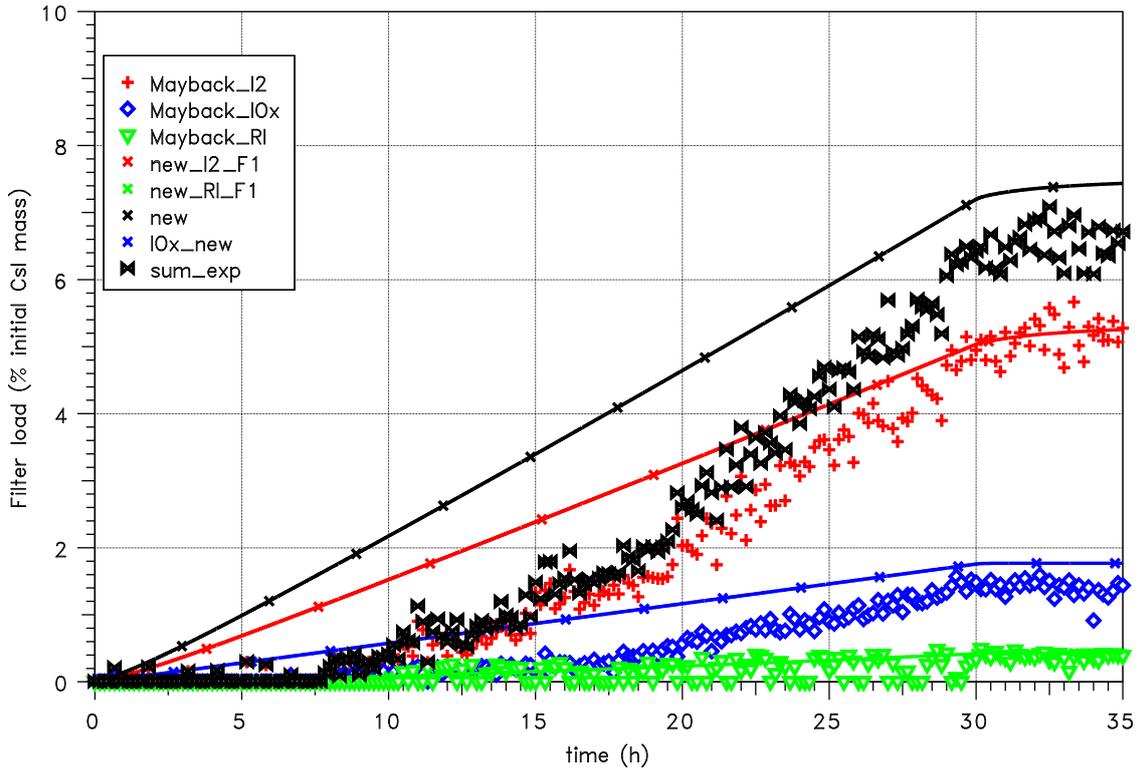


Abb. 5.103 OECD STEM, AER-3: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I₂, blau: IO_x, grün: RI)

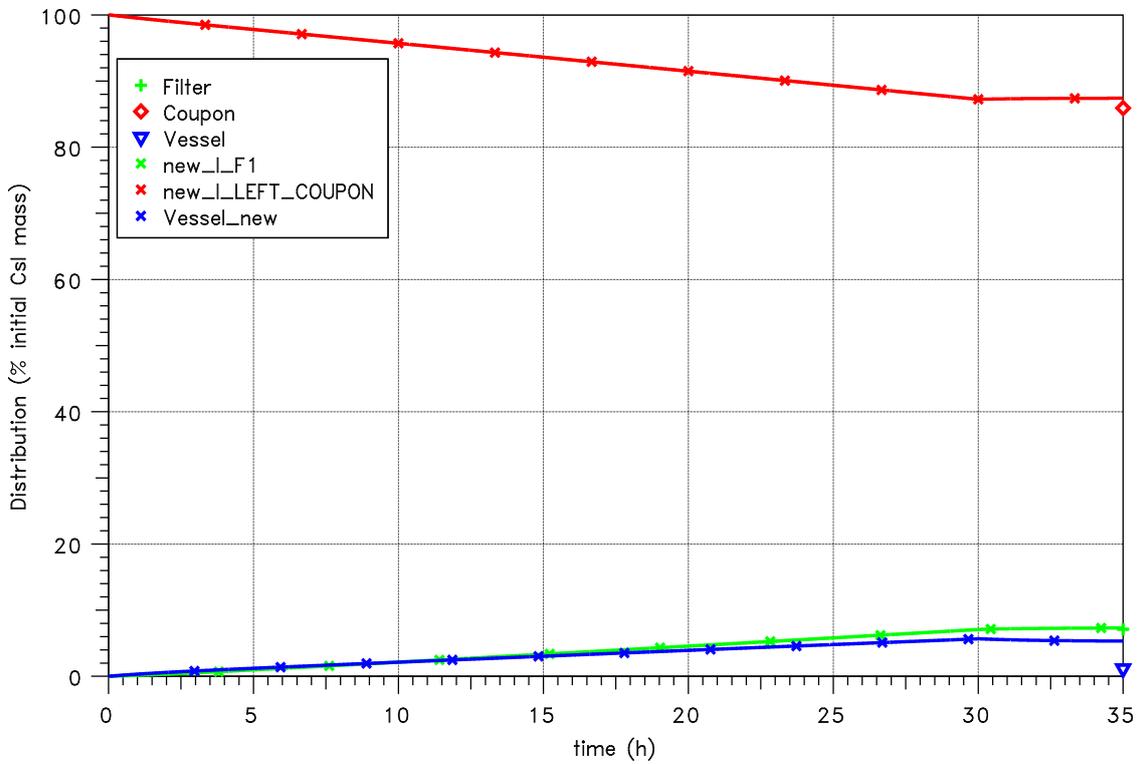


Abb. 5.104 OECD STEM, AER-3: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.9 Nachrechnung des Versuchs AER-4

Im Vergleich zu AER-3 wird dieser Versuch AER-4 mit einer höheren Dosisleistung von 3,9 kGy/h durchgeführt /COL 14b/. In diesem Versuch wird keine zeitliche Verzögerung in den Filtern gemessen (Abb. 5.105). Daher stimmen die Ergebnisse der COCOSYS-Rechnung und Messungen sehr gut überein. Da auch keine Änderung der Reaktionsgeschwindigkeit beobachtet wird, wurde in der COCOSYS-Eingabe der anfängliche Anteil von Csl(r) von 35 % auf 90 % erhöht. Diesbezüglich ist also die COCOSYS-Modellierung nicht adäquat. Auch hier wird für I₂ ein Anstieg nach der Bestrahlung gemessen, der im Modell nicht erfasst ist. Daher ist die Beladung auf dem Filter am Ende des Experiments auch geringer (Abb. 5.106). Die berechnete Ablagerung im Behälter ist mit 22 % im Vergleich zum Experiment höher. Allerdings ist die gemessene Iodbilanz auch nur zu 85 % erfüllt.

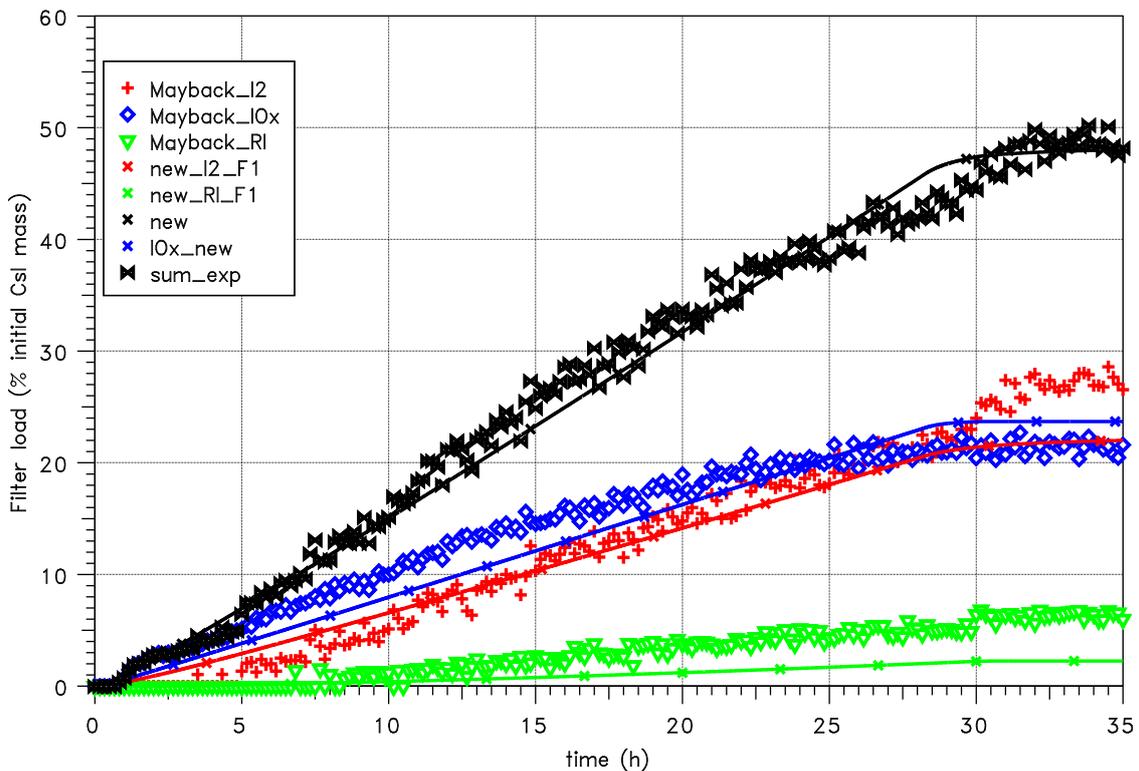


Abb. 5.105 OECD STEM, AER-4: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I₂, blau: IO_x, grün: RI)

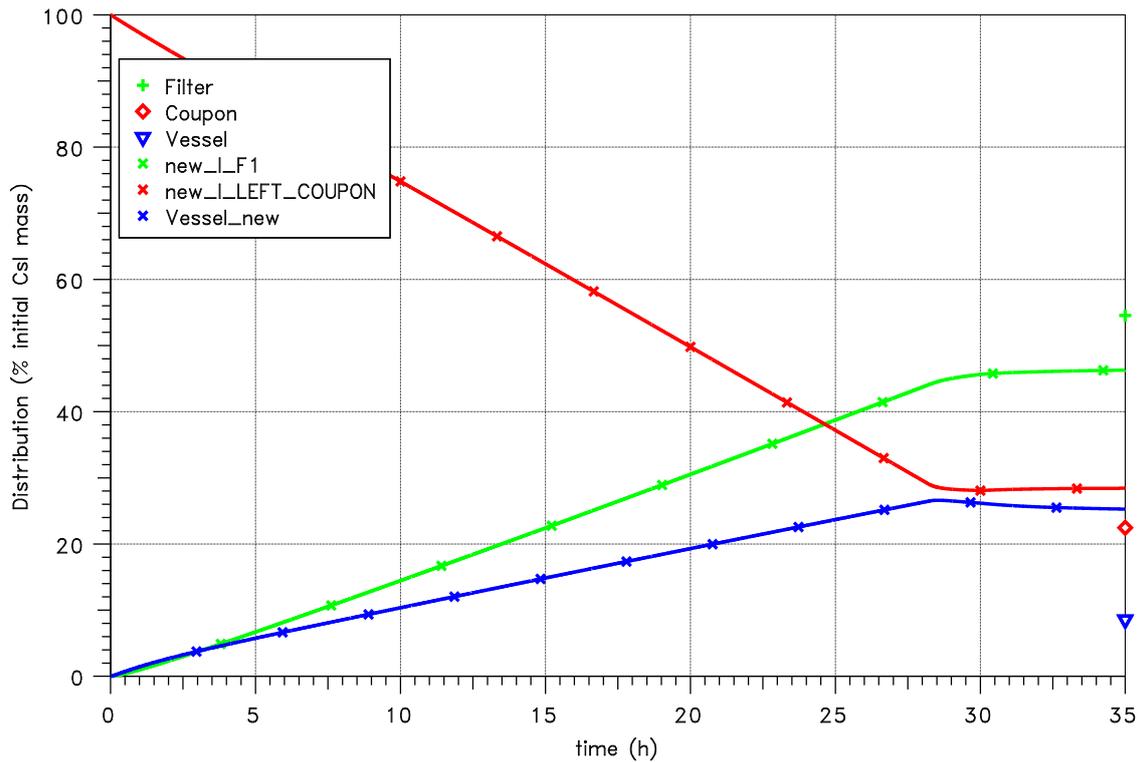


Abb. 5.106 OECD STEM, AER-4: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.10 Nachrechnung des Versuchs AER-5

In diesem Versuch AER-5 /COL 14b/ ist die anfängliche CsI-Ablagerung um den Faktor 24 niedriger. Die niedrige Konzentration führt zu relativ niedrigen Messwerten im Filter und daher zu entsprechenden Messungenauigkeiten. Auch hier ist die gemessene Iodbilanz nur zu 86 % erfüllt. Der anfängliche Anteil von CsI(r) wurde mit nur 5 % angenommen. Die gesamte Ablagerung im Filter wird in der COCOSYS-Rechnung nach Abb. 5.107 unterschätzt. Bezüglich der Messungen nach dem Experiment wird diese allerdings eher überschätzt (Abb. 5.108). Insofern bewegen sich die Ergebnisse im Rahmen der Messgenauigkeit. Größere Unterschiede werden auch bezüglich Iodat im Filter sichtbar. Hier wird praktisch kein Iodat gemessen.

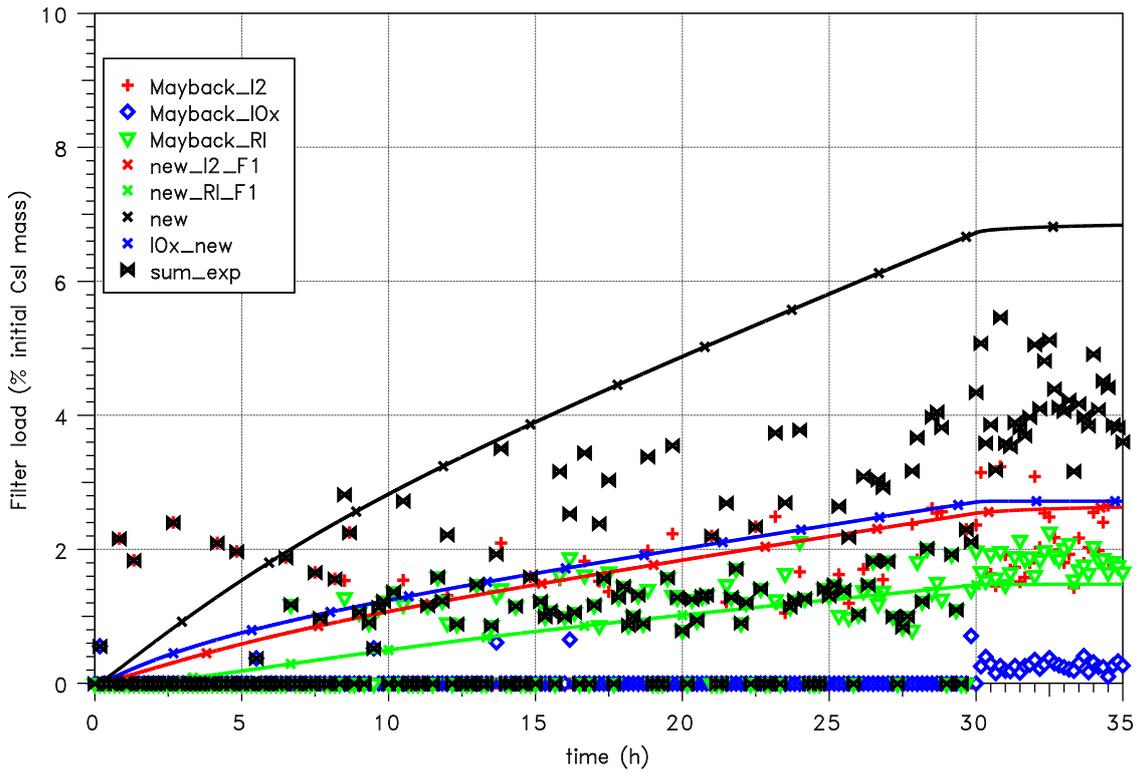


Abb. 5.107 OECD STEM, AER-5: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I₂, blau: IO_x, grün: RI)

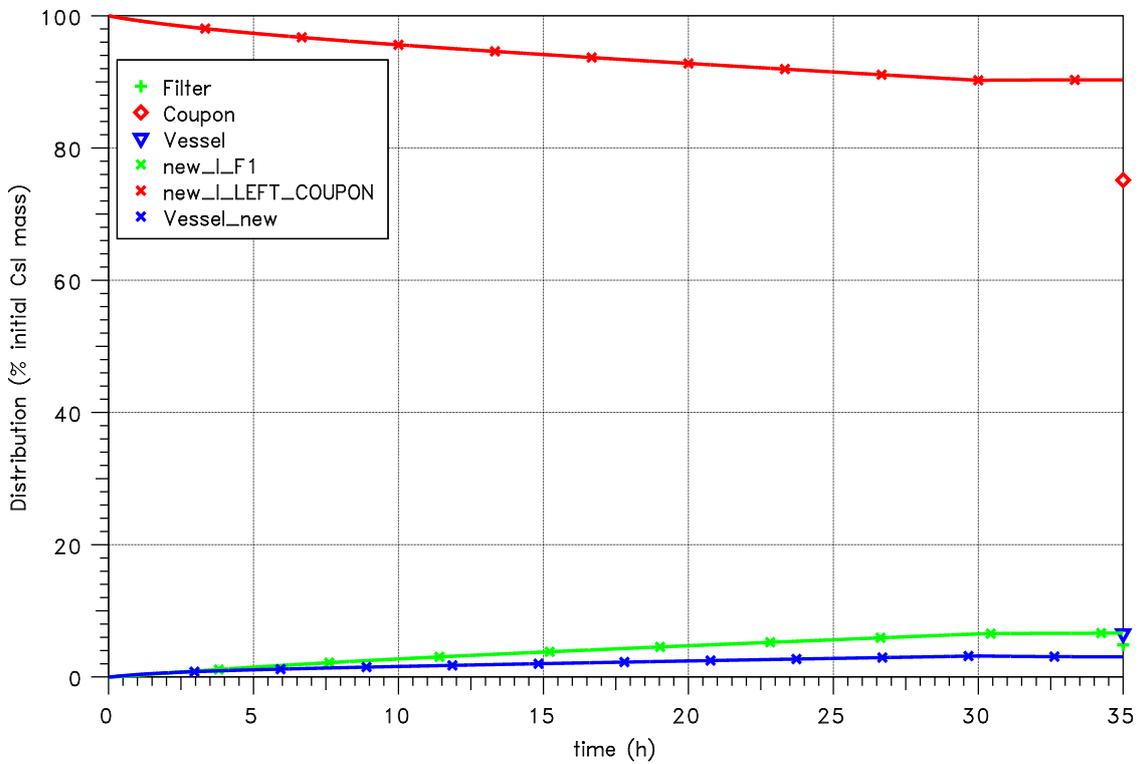


Abb. 5.108 OECD STEM, AER-5: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.11 Nachrechnung des Versuchs AER-6

Dieser Versuch AER-6 /COL 14b/ ist ähnlich zum Versuch AER-4. Hier wird allerdings der Effekt einer Stahloberfläche untersucht. In diesem Fall wird die Csl-Zersetzung nicht eingeschränkt. Im Experiment ist zu beobachten, dass die Iodat-Menge im Filter wieder abnimmt. Es ist möglich, dass I_2 zunächst im Quarzfilter aufgenommen und dann im Verlauf wieder abgegeben wird. Dies wird in COCOSYS nicht modelliert. Ansonsten stimmen die Rechenergebnisse gut mit den experimentellen Werten überein (Abb. 5.109 und Abb. 5.110).

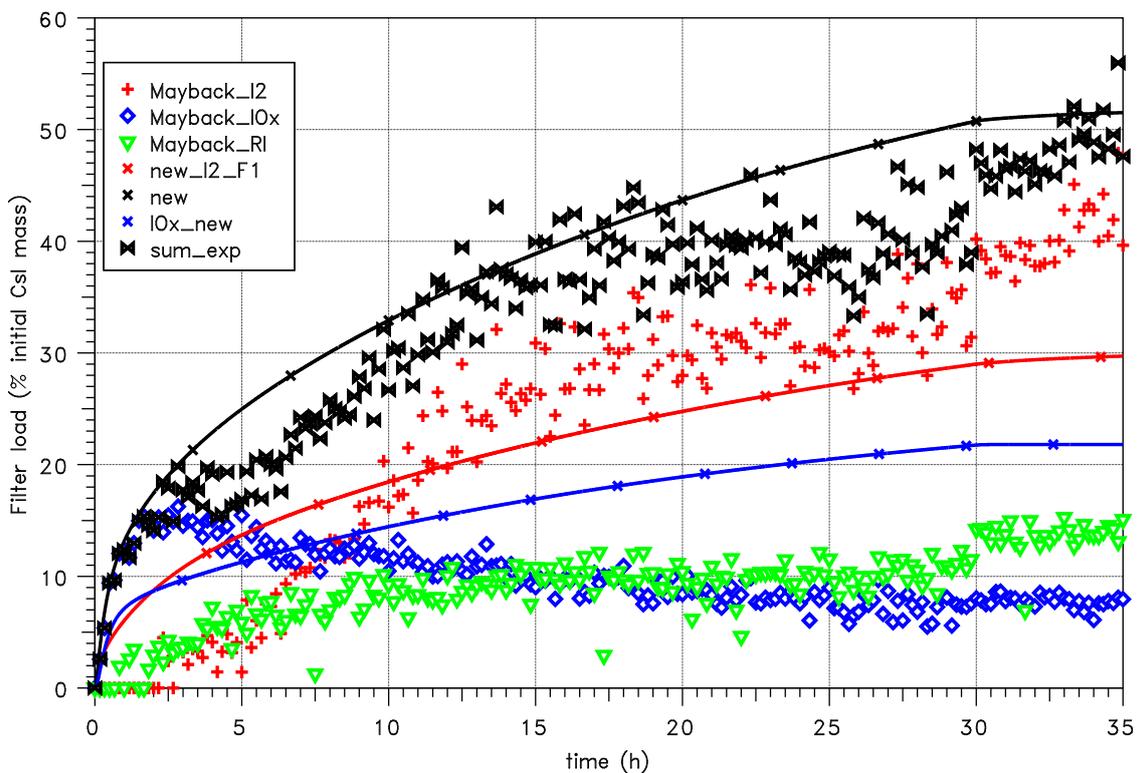


Abb. 5.109 OECD STEM, AER-6: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI)

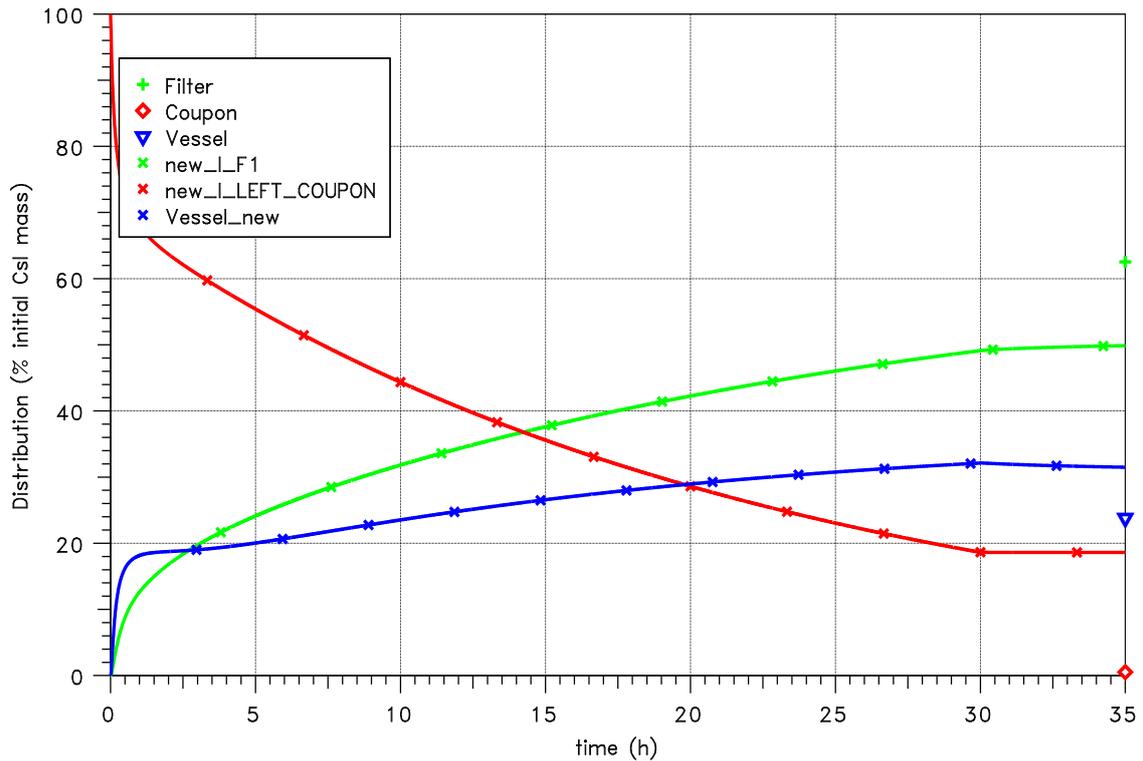


Abb. 5.110 OECD STEM, AER-6: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.12 Nachrechnung des Versuchs AER-11

Der Versuch AER-11 /COL 14c/ ist ähnlich zu AER-6, wurde aber mit einer höheren Temperatur von 120 °C durchgeführt. Im Experiment wurde kein aerosolförmiges Iodat gefiltert (Abb. 5.111). In der COCOSYS-Rechnung beträgt der Anteil ca. 10 %. Auch ist im Experiment die gefilterte RI-Menge mit 10 % relativ hoch. In COCOSYS kann dagegen kein RI auftreten. Die I₂-Freisetzung wird in COCOSYS überschätzt. Im Experiment werden 32 % des Iods in der Versuchsanlage abgelagert und die Iod-Bilanz ist mit nur 67 % sehr schlecht (Abb. 5.112). Daher werden die COCOSYS-Ergebnisse als zufriedenstellend betrachtet. Unter Umständen muss noch eine Temperaturabhängigkeit der Reaktionen eingeführt werden. Aber aufgrund der schlechten Datenlage wurde darauf verzichtet.

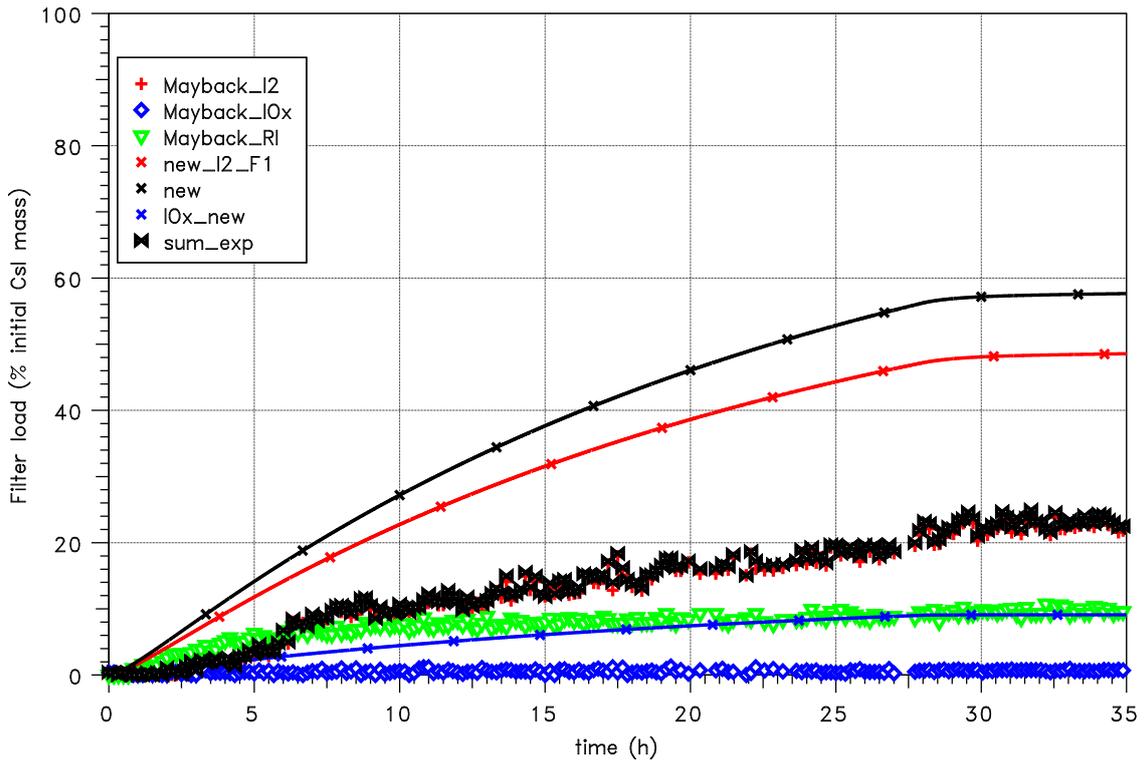


Abb. 5.111 OECD STEM, AER-11: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod-Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I₂, blau: IO_x, grün: RI)

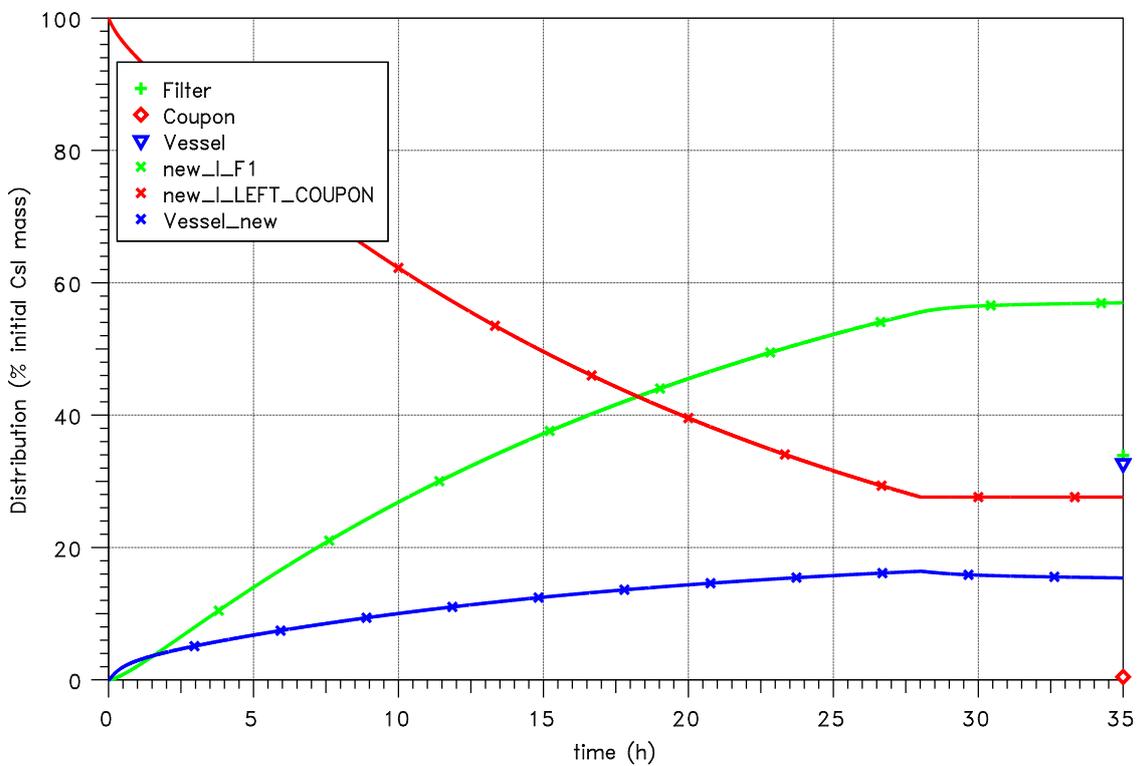


Abb. 5.112 OECD STEM, AER-11: Vergleich der Iod-Verteilung

5.3.1.13 Fazit

Wie die AER-Versuche in der EPICUR-Versuchsanlage zeigen, sind die Vorgänge im Zusammenhang zur Csl- bzw. Iodat-Zersetzung sehr komplex. Diese können durch eine integrale Betrachtungsweise, wie sie im AIM-Iod-Modul des neuen AFP-Moduls angewendet wird, nur sehr rudimentär wiedergegeben werden. Dies gilt insbesondere für die verzögerte Freisetzung sowie die mögliche I₂-Freisetzung nach der Bestrahlung. In einigen Reaktionen geht die spezifische Oberfläche der Aerosole ein. Diese wird in COCOSYS berechnet. Allerdings wird eine mögliche Änderung der Kristallstruktur bzw. eine Änderung der Größenverteilung in COCOSYS nicht modelliert.

Für die erweiterte Modellierung wurden fast alle AER-Versuche verwendet und die Modelle sowie Koeffizienten darauf angepasst. Im Vergleich zum Stand in RS1514 sind die Modellierung sowie die Ergebnisse nun deutlich besser. Diese Modelle, insbesondere bzgl. Iodat, werden im aktuellen OECD-Projekt STEM-2 verwendet.

Tab. 5.3 Überblick über die OECD STEM, AER-Versuche

Versuch	Material	Träger	Konzentration [mol/m ²]	Temperatur [°C]	Druck [bar]	Rel. Feuchte [%]	Dosisleistung [kGy/h]	FLOW Parameter	Csl(r)/IO _x (r) Anteil
AER-1	Csl	Quarz	6,1·10 ⁻³	80	1,7	20 %	1,2	1,5	35 %
AER-2b	Csl	Quarz	3,9·10 ⁻³	80	1,7	50 %	1,1	1,5	35 %
AER-3	Csl	Epoxy	6,6·10 ⁻³	80	1,7	50 %	1,1	1,5	35 %
AER-4	Csl	Epoxy	5,3·10 ⁻³	80	1,7	50 %	3,9	1,5	90 %
AER-5	Csl	Epoxy	2,2·10 ⁻⁴	80	1,7	50 %	3,9	1,5	5 %
AER-6	Csl	Stahl	7,4·10 ⁻⁵	80	1,7	50 %	3,7	1,5	35 %
AER-7	IO _x	Quarz	2,4·10 ⁻³	80	1,7	50 %	3,7	1,0	10 %
AER-8	IO _x	Quarz	3,7·10 ⁻³	120	3,5	50 %	3,3	1,0	10 %
AER-9 ⁴	IO _x	Epoxy	3,2·10 ⁻³	80	1,7	50 %	3,4		
AER-10 ⁵	IO _x	Quarz	1,8·10 ⁻³	80	1,7	50 %	3,1		
AER-11	Csl	Stahl	2,1·10 ⁻⁴	120	3,5	50 %	3,5	1,0	5 %
AER-12	CdI ₂	Quarz	1,2·10 ⁻³	80	1,7	50 %	3,1		

⁴ Die Quelle von I₂ in diesem Versuch kann auch durch eingelagertes I₂ in IO_x stammen. Dieses wird in COCOSYS nicht modelliert.

⁵ Dieser Versuch ist ein Wiederholungsversuch von AER-7.

5.4 CESAM-Projekt im 7. Rahmenprogramm der EU

Die GRS hat sich sowohl inhaltlich als auch in leitender Funktion an dem Projekt CESAM im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Kommission beteiligt. An diesem Projekt haben 19 internationale Partner teilgenommen. Ziel von CESAM war es, im Nachgang zu Fukushima weitere Verbesserungen am Code ASTEC zu erzielen, um die Verlässlichkeit von ASTEC für die Auswertung von Notfallmaßnahmen und beim Einsatz in Notfallzentren zu erhöhen. Im Rahmen der Projektlaufzeit von CESAM hat der Code ASTEC einen Versions-Sprung von der Version V2.0 hin zur Version V2.1 gemacht. Im Projekt beinhaltete das Arbeitspaket 20 (WP20) „Modelling assessment, improvement and validation (ASSES)“ die gezielte Validierung von Fragestellungen, die für Analysen der Fukushima-Unfälle relevant sind. In WP30 „Integration of models in ASTEC (INTEG)“ sind einzelne Modellverbesserungen in die neue ASTEC-Version V2.1 eingeflossen.

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

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

Der im Vorhaben RS1514 erstellte ICARE/CESAR-Basisdatensatzes für SWR wurde um zwei externe "recirculation Loops" erweitert, die ein typisches Merkmal der von den Partnern ausgewählten SWR-Referenzanlage sind. Der Datensatz wurde an den CESAM-Partner JRC übergeben, damit eine Implementierung in einen Gesamtanlagendatensatz zur Berechnung ausgewählter Szenarien erfolgt. Die Datensatzbeschreibung wurde um die Beschreibung der externen Loops ergänzt.

Die Einzelergebnisse sind in entsprechenden Berichten dokumentiert worden und in Tab. 5.4 aufgeführt.

Tab. 5.4 CESAM Arbeitsergebnisse während der Projektlaufzeit (beschränkte Zugänglichkeit über EU)

Arbeitsergebnis	Autoren, Herausgeber	Arbeitsergebnis	Veröffentlichungsdatum
3rd CESAM periodic workshop	Nowack, H., Hrsg. (GRS)	Report	04.05.2016
Interface package with atmospheric dispersion tools	Chevalier-Jabet, K. (IRSN)	Software	16.06.2016
Methodology accounting for the uncertain information provided by the plant instrumentation	Mabrouk, A. (IRSN)	Report	31.08.2016
Release of ASTEC V2.1rev1 version	Chatelard, P., Hrsg (IRSN)	Software	13.01.2017
Final CESAM workshop / Final CESAM periodic project meeting	Nowack, H., Hrsg. (GRS).	Report	29.03.2017
Set of final reference NPP ASTEC input decks	Chatelard, P., Hrsg. (IRSN)	Report	30.03.2017
Workshop on ASTEC capabilities for calculations of the Fukushima accidents, both in NPP and in SFP	Chatelard, P., Hrsg. (IRSN)	Report	21.04.2017
Synthesis of evaluation of the impact of SAM actions through ASTEC NPP calculations	Lombardo, C., Hrsg. (ENEA)	Report	30.05.2017
Final project report	Nowack, H., Hrsg. (GRS)	Report	31.05.2017
Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions	Buck, M., Hrsg. (IKE)	Report	31.05.2017
Progress report (third period)	Nowack, H., Hrsg. (GRS)	Report	31.05.2017

5.5 EU Projekt ALISA

In den letzten Jahren wurde das Thermo-Hydraulik-Hauptmodul (THY) von COCOSYS durch die GRS in Analysen zu Containments von Kernkraftwerken der Generation III+ angewendet, so z. B. zur Unterstützung der englischen Genehmigungsbehörde ONR im General Design Assessment für AP1000 oder in Untersuchungen zum chinesischen KKW-Typ CAP1400. Ein wesentliches Kennzeichen von KKW der Generation III+ ist die Nutzung von passiven Sicherheitssystemen. In AP1000 bzw. CAP1400 ist das u. a. das PCS – Passive Containment Cooling System (Abb. 5.113, S. 333). Im Fall von Stör- und Unfällen ist das PCS hierbei die ultimative Wärmesenke, durch die über mindestens 24 h Energie aus dem Containment abgeführt wird, um auch bei totalem Stromausfall den Druckaufbau auf Werte unterhalb des Auslegungswertes zu begrenzen.

In COCOSYS stehen ab Version V2.4 Modelle zur Verfügung, mit denen das PCS simuliert werden kann, d. h.

- das durch die Schwerkraftwirkung auf der Außenoberfläche des Stahlschalen-Containments herabfließende Wasser,
- die Aufheizung des Wasserfilms auf der Stahloberfläche bis hin zu seiner vollständigen Verdampfung aufgrund der durch die Stahlschale geleiteten Wärme sowie
- die Ausbildung einer durch den Kamineffekt hervorgerufenen Naturkonvektion durch den Ringspalt zwischen Stahlschale und Betonhülle, durch die das verdampfte Wasser in die Umgebung abströmt.

Bisher ist diese Simulation des PCS (siehe Abb. 5.113) nur sehr rudimentär validiert. Für Auslegungsbedingungen wurden von RWTH Aachen zur Large-Scale-Versuchsanlage von Westinghouse Nachrechnungen durchgeführt /BRO 11/. Aber weder die experimentellen Daten noch die COCOSYS-Ergebnisse sind bislang für die GRS verfügbar.

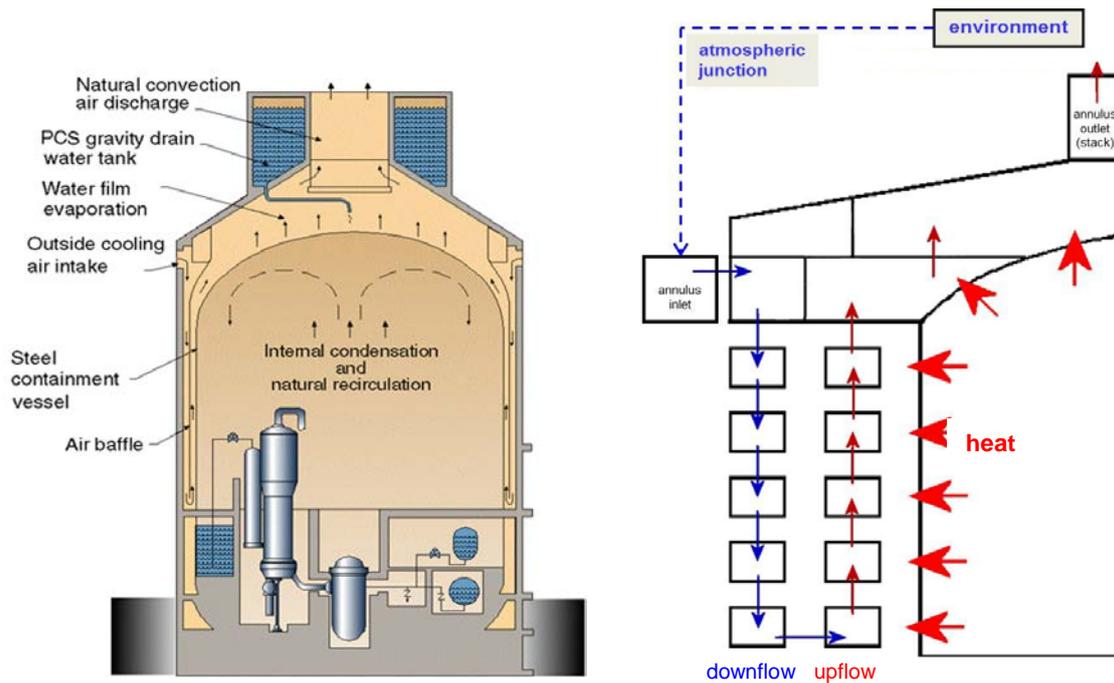


Abb. 5.113 AP1000-Containment, PCS (links) und Simulation des Kamineffekts mit COCOSYS (rechts)

Im Rahmen von Analysen zur Wirksamkeit des PCS in AP1000 wurden auch extreme Zustände angenommen, wie z. B. die Verstopfung der Eintrittsöffnung in den Ringspalt, was zu Filmsieden unter luftarmen Bedingungen sowie zum vollständigen Verdampfen des Wasserfilms und damit zur Austrocknung des unteren Bereiches der Stahlschale führt. Hierzu gibt es noch keine experimentelle Absicherung der COCOSYS-Modelle. Zudem traten in den Analysen unter diesen Bedingungen numerische Instabilitäten auf.

Zwischen 2014 und 2018 wurde von der Europäischen Union das ALISA-Projekt finanziert (**A**ccess to **L**arge **I**nfrastructures for **S**evere **A**ccidents), um Wissenschaftlern in Europa und China den Zugang zu existierenden Versuchsständen und experimentellen Ergebnissen zu ermöglichen und damit nationale und internationale Ressourcen zu bündeln /ZHA 12/. Im Dezember 2017 öffneten die im ALISA-Projekt beteiligten Partner das Projekt auch für weitere interessierte Firmen, so dass die GRS am 3. ALISA-Review-Meeting teilnehmen konnte /GAU 17a/. Durch die außerplanmäßige Beteiligung am Vorhaben bestand die Möglichkeit, Zugriff zu experimentellen Daten aus China für die Programmvalidierung von COCOSYS zu erhalten.

Während dieses Meetings stellte die GRS COCOSYS und seine Simulationsmöglichkeiten für das PCS sowie den Stand der entsprechenden Validierung vor /ARN 17/. Es wurde vereinbart, dass die Shanghai Jiao Tong University (SJTU) Ergebnisse zu zwei

Experimenten ihrer WAFT-Versuchsanlage zur Validierung von COCOSYS bereitstellt – einen Versuch unter Auslegungsbedingungen des PCS sowie ein Extremfall mit kompletter Verdampfung des Wasserfilms unter Luftarmut wie oben erwähnt. Voraussetzung für die GRS-Teilnahme an ALISA war, dass erzielte Ergebnisse gemeinsam mit SJTU veröffentlicht werden.

Zur Erstellung eines COCOSYS-Datensatzes für WAFT übermittelte SJTU Anfang 2018 verschiedene Unterlagen an die GRS. Weitere Details zur Versuchsanlage wurden per E-Mail abgefragt.⁶ Zugleich wurden dabei mit SJTU die für eine COCOSYS-Simulation erforderlichen Anfangs- und Randbedingungen sowie die für die Validierung von COCOSYS als erforderlich angesehenen Messdaten geklärt und in welcher Form diese von SJTU ermittelt werden. Es wird erwartet, dass die zwei dabei erstellten Listen in Zukunft vervollständigt und präzisiert werden.

Während des ALISA-Meetings /GAU 17a/ wurde mit SJTU eine Strategie für die Vorausrechnungen für 2 neue Versuche abgestimmt. Darin waren auch die Überprüfung und Absicherung des neuen COCOSYS-Datensatzes zur Modellierung des PCS anhand eines alten Experimentes vorgesehen. Da das ALISA-Projekt im Mai 2018 als vertragliche Basis der Zusammenarbeit endete, war es SJTU nicht mehr möglich, ohne großen formellen Aufwand experimentelle Daten an die GRS zu senden.

Mit dem COCOSYS-Datensatz wurden deshalb ohne die geplante Überprüfung blinde Vorausrechnungen zu 2 Versuchen durchgeführt. Die detaillierte Datensatzbeschreibung sowie die Ergebnisse der Rechnungen und eine Liste offener Fragen sind in einem separaten Bericht dokumentiert /ARN 18/.

Nach Auslaufen von ALISA gab es auf bilateraler Ebene weitere Kontakte zwischen SJTU und GRS. Diese haben aber bisher noch nicht dazu geführt, dass genügend Unterlagen zur Durchführung von weiteren COCOSYS-Rechnungen verfügbar sind. Die GRS setzt ihre Anstrengungen fort, um die Kontakte mit SJTU aufrechtzuerhalten und dadurch in der Validierung der PCS-Modellierung voranzukommen.

⁶ Po, H. (2018): AW: ALISA-WAFT: question concerning data from old WAFT experiment, E-Mail, 17.5.2018.

5.5.1 Kurzbeschreibung der WAFT-Versuchsanlage

Die WAFT-Anlage (**Water Film Test**, siehe Abb. 5.115) wird durch SJTU in China für Untersuchungen zum Massen- und Energieübergang an einer wassergekühlten Platte betrieben.

WAFT besteht aus einer Stahlplatte mit Glasabdeckung, die auf einem drehbaren Gestell montiert ist sowie Systemen zur Wasseraufheizung, Wasserver- und -entsorgung, zur Lufterwärmung und -Einspeisung (Lüfter) und einem Ölheizsystem zur rückseitigen Aufwärmung der Stahlplatte (Abb. 5.115, Abb. 5.115, S. 336).

Die Stahlplatte hat die Maße 5 m × 1,2 m × 0,019 m. Ihre Oberfläche ist mit einer speziellen Farbe versehen, wie sie zur Oberflächenbeschichtung in CAP1400-Anlagen verwendet wird. Die Glasabdeckung hat einen Abstand von 0,3 m, so dass ein rechteckiger Strömungskanal entsprechend dem Ringspalt in CAP1400 entsteht. Durch die untere Öffnung ist mit Hilfe eines Lüfters ein gewünschter Luftmassenstrom einstellbar. An der Rückseite der Platte sind in Querrichtung Kupferschlangen aufgelötet, durch die das Öl-System eine Heizleistung von max. 1 MW bereitstellt. Die Stahlplatte kann in einem Winkel von 0 bis 90° positioniert werden, wobei 90° dem senkrechten Wasserfilm auf der Außenseite der Containment-Schale in AP1000/CAP1400 entspricht. Der PCS-Wassermassenstrom wird gleichmäßig über die Breite der Platte verteilt und kann entsprechend skaliert (kg/m) werden. Beim Herablaufen über die beheizte Platte verdunstet das Wasser entsprechend Testbedingungen. Der nicht verdunstete Anteil wird in einem Auffangtank gesammelt. Wasser- und Lufttemperaturen bis 95 °C sind realisierbar.



Abb. 5.114 WAFT-Versuchsanlage, Seiten- und Vorderansicht der Stahlplatte /GAU 17b/

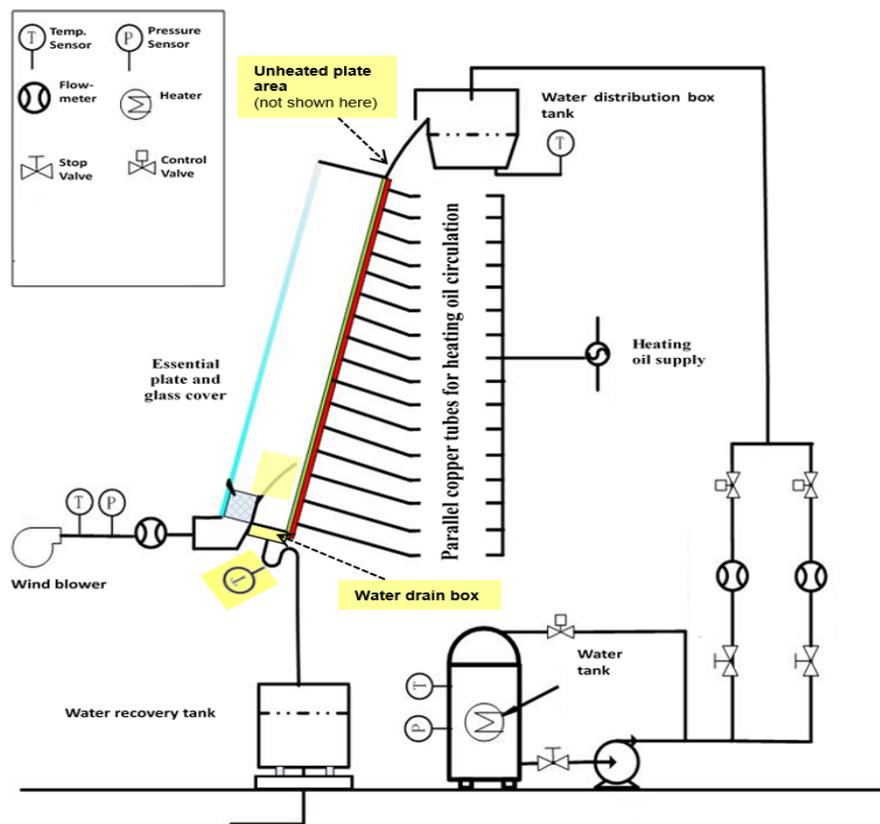


Abb. 5.115 WAFT-Versuchsanlage, System-Schema inklusive Messstellen /GAU 17b/

Messgrößen sind der PCS-Wassermassenstrom, Ein- und Auslauftemperaturen des Wassers, die Atmosphäregeschwindigkeit (Luft bzw. Dampf) im Strömungskanal, die Luftfeuchtigkeit, die Plattenoberflächentemperatur sowie lokale Wärmeströme an der Plattenoberfläche und die Wasserfilmdicke am unteren Ende der Platte. Aus der Wassermasse im Sammelbehälter wird ein mittlerer Verdampfungsmassenstrom bestimmt. Auf Basis der Energiebilanz an der Platte wird ein Vergleichswert zu den gemessenen Wärmeströmen ermittelt.

Bisher wurden an der Anlage nur stationäre "Evaporation Tests" durchgeführt. Dabei wird über den Lüfter ein aufwärts strömender Luftmassenstrom eingestellt. Durch die Wassereinspeisung stellt sich ein abwärts laufender Wasserfilm ein, der aufgrund der rückseitigen Beheizung der Platte verdampft. Der durch die bisherigen Experimente abgedeckte Parameterbereich ist in Tab. 5.5 aufgelistet.

Einige für die COCOSYS-Validierung hilfreiche Detailinformationen wie die Wasserfilmdicke entlang der Platte oder der Volumenstrom und lokale Temperaturen des Heizöls sind nicht verfügbar. In Diskussionen mit SJTU stellte sich auch heraus, dass in den Evaporation Tests die Oberflächentemperatur der Stahlplatte eine jeweils feste Randbedingung war (Steuergröße für die Ölheizung). Dies ist so in den COCOSYS-Rechnungen nicht umsetzbar, da die Oberflächentemperatur ein wesentliches dynamische Ergebnis in der PCS-Modellierung ist und sich jeweils aus Heizleistung und Kühlung durch den Wasserfilm (Verdampfung in Abhängigkeit von Wassermassenstrom und -temperatur) ergibt.

Tab. 5.5 WAFT, Bereich der experimentellen Parameter in den Evaporation-Tests /GAU 17b/

	Platten- Winkel [°]	Pl.-Ober- flächen- temp. [°C]	Luftge- schwin- digkeit [m/s]	Luft ein- trittstemp. [°C]	Wasser- massen- strom [kg/s]	Wasser- temp. [°C]	Wärme- strom [kW/m ²]
Möglicher Wertebereich	0 – 90		< 15	< 95	0,012 – 1,296	≤ 95	< 100
Evaporation Tests	5 – 90	60 – 100	0 – 8,5	Umgebung - 80	0,086 – 1,08	50 – 90	

Nach Aussage von SJTU hat sich in den bisherigen Experimenten immer ein voller Wasserfilm ausgebildet, d. h. kein Rinnsal (Rivulet), für das in COCOSYS auch ein Modell in Entwicklung ist.

5.5.2 Erstellung eines COCOSYS-Datensatzes

Zur Simulation von Experimenten an der WAFT-Versuchsanlage wurde unter Nutzung aller verfügbaren Unterlagen ein COCOSYS-Datensatz erstellt. Die entsprechende COCOSYS-Nodalisierung ist in Abb. 5.116, Seite 339 dargestellt. Sie umfasst 18 Zonen, 30 Verbindungen, 1 Lüftungssystem und 46 wärmeleitende Strukturen.

Die Unterteilung des Volumens zwischen Platte und Glashaube sowie der Stahlplatte wurde so gewählt, dass die Messstellen möglichst im Zentrum der Zonen bzw. Strukturen liegen. Um die Strömungsgeschwindigkeit in den Zonen korrekt abzubilden, wurde eine speziell für AP1000 implementierte Option zur Definition der durchströmten Querschnittsfläche verwendet. Aufgrund fehlender Detailinformationen sind das Ölheizsystem sowie die Wassertanks nur vereinfacht abgebildet. Insbesondere zur Rückseite der Platte fehlen Informationen, so dass für die entsprechenden Strukturen Annahmen getroffen wurden. Zwei große Umgebungszonen dienen als Quellezone der eingeblasenen Luft bzw. Zielzone des abströmenden Atmosphäremisches.

Mit Hilfe eines Pump-Systems wird das Wasser aus dem Wassertank an die Oberkante der Platte transportiert und hier über eine DRAIN_WALL-Verbindung auf die Breite der Platte verteilt (Abb. 5.117, S. 340). Dabei kann wie in Analysen zum AP1000 zwischen einem trockenen und benetzten Anteil der Oberfläche unterschieden werden; in den Evaporation-Tests war allerdings die gesamte Breite benetzt. Das Herabfließen des PCS-Wassers entlang der Oberfläche der Stahlplatte ist nicht durch Drainageverbindungen, sondern durch sogenannte Structure-Flow-Connections simuliert. Da das COCOSYS-Modell für die Simulation eines Wasserfilms eine senkrechte Wand voraussetzt – wie sie ja außer im Kuppelbereich der Stahlschale auch für das PCS zutrifft – sollte in den betrachteten Versuchen der Plattenwinkel 90° oder nahe 90° betragen.

Die Festlegung der Anfangs- und Randbedingungen der Versuchsanlage wie Temperatur, Druck, Luftfeuchte, PCS-Wassermassenstrom usw. erfolgt mit Hilfe von PARAMETER-Definitionen, so dass der Datensatz leicht an neue Test-Bedingungen angepasst werden kann.

Während in COCOSYS das transiente Verhalten der Anlage simuliert wird, bilden die WAFT-Evaporation-Tests den stationären Zustand des PCS ab. Es können also nur stationäre Ergebnisse verglichen werden.

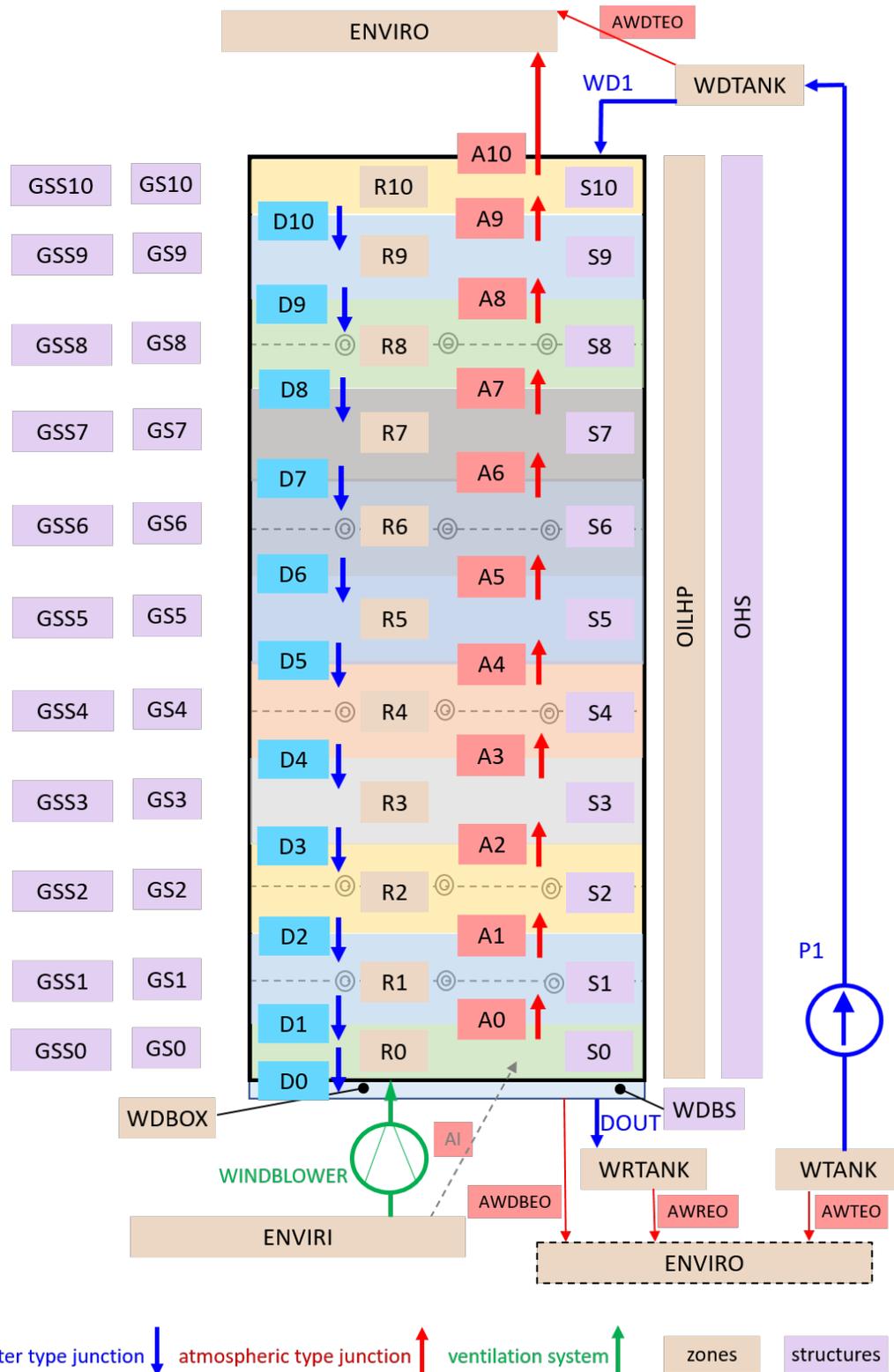


Abb. 5.116 WAFT-Versuchsanlage: COCOSYS-Nodalisierung

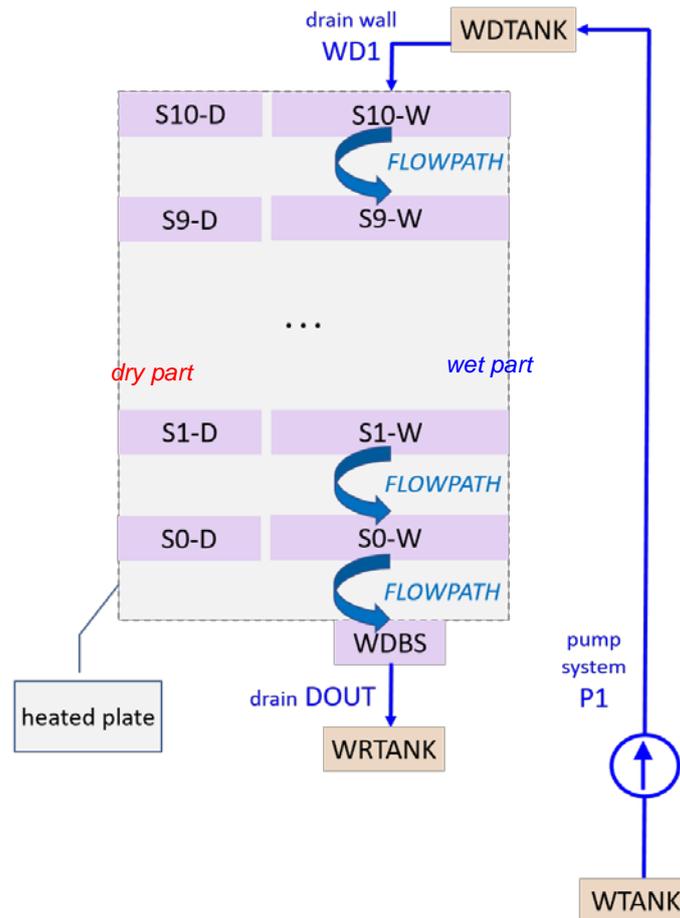


Abb. 5.117 WAFT-Versuchsanlage: COCOSYS-Nodalisierung für die PCS-Simulation und Strukturen der beheizten Platte

5.5.3 COCOSYS-Rechnungen

In den Rechnungen kam eine COCOSYS-Entwicklerversion zum Einsatz (V3.0dev, SVN Revision 7283).

Während der Datensatzerstellung wurden eine Reihe von Testrechnungen durchgeführt, mit denen z. B. Beheizung der Platte, die Simulation der Lufteinspeisung sowie des PCS-Wasser (d. h. alle Tanks und Wasserverbindungen) studiert und die COCOSYS-Ergebnisse auf Plausibilität untersucht wurden. Dabei wurden auch die Massen- und Energiebilanzen geprüft. Es ist aber logisch, dass diese Testrechnungen nicht die gleiche Aussage zur Qualität des Datensatzes liefern können wie die ursprünglich geplante Überprüfung anhand eines alten Experiments.

Mit dem "qualifizierten" Datensatz wurden anschließend blinde Vorausrechnungen unter zwei verschiedenen Randbedingungen durchgeführt – zu Auslegungs- und Extrem-

bedingungen. Die Ergebnisse wurden an SJTU übermittelt, um den Experimentatoren zu vermitteln, welche Versuche für die GRS von speziellem Interesse sind.

PCS unter Auslegungsbedingungen

Zweck dieser Rechnung ist die Festlegung von typischen "normalen" Randbedingungen, die der Auslegung des PCS in einer AP1000-Anlage entsprechen. Dies betrifft die (abgeschätzte) Heizleistung des Öls, die Lufteinspeisung sowie die Temperaturen des Wassers, der Luft und der Umgebung. Wie im KKW reduziert sich dabei der PCS-Massenstrom in 3 Schritten (Abb. 5.118). Während der PCS-Massenstrom entsprechend der Breite der Stahlplatte in WAFT realistisch skaliert ist, wurde die Zeitachse für den Massenstrom hier frei gewählt (0 – 3000 s). Damit soll wie in Analysen zum AP1000 in der letzten Phase eine vollständige Verdampfung des Wasserfilms im unteren Bereich der Platte auftreten.

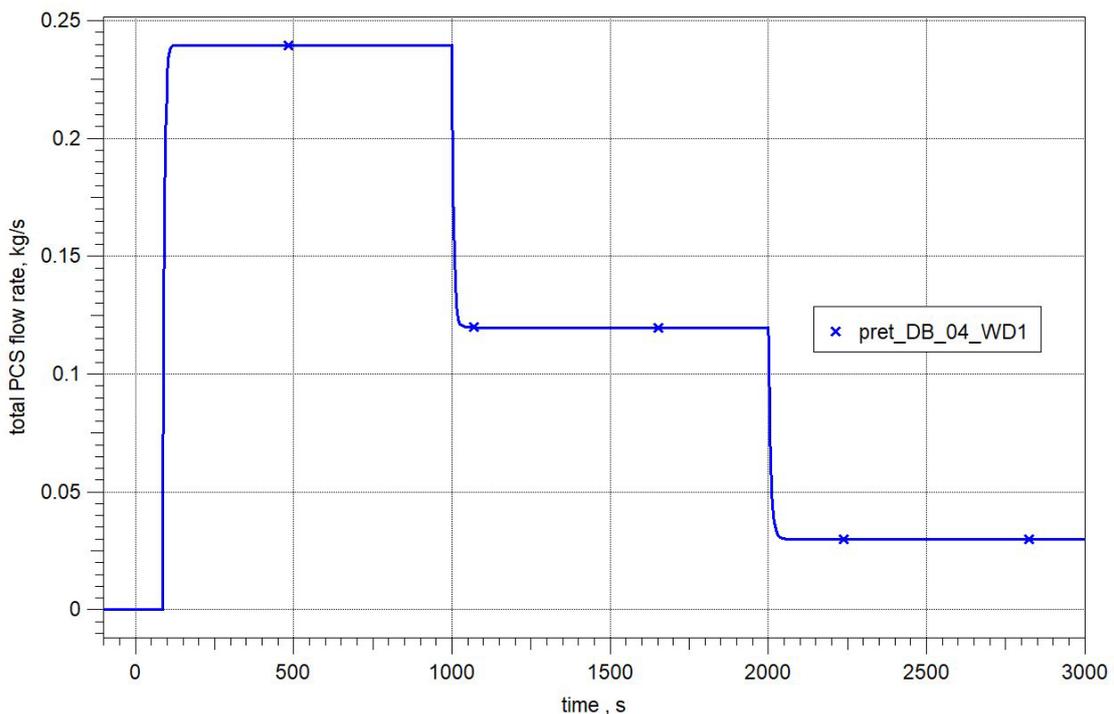


Abb. 5.118 WAFT, Auslegungsbedingungen, angenommene Zeitfunktion für den PCS-Massenstrom

Die unter diesen Randbedingungen von COCOSYS berechnete Dicke des Wasserfilms entlang der Platte (S10 – oben, S0 – unten, siehe Abb. 5.117) ist in Abb. 5.119 dargestellt. Entsprechend der angenommenen Funktion des PCS-Massenstromes reduziert sich die Dicke in 3 Stufen. In der niedrigsten Stufe verdampft ab 2000 s das Wasser im

Abschnitt S0 komplett und der Wasserfilm erreicht nicht mehr die Unterkante der Platte. Dadurch erhöht sich die Oberflächentemperatur des trockenen Abschnittes und die Wärmeabgabe über diesen Abschnitt wird kleiner. Bei gleichbleibender Heizleistung wird mehr Energie über die darüber liegenden Abschnitte übertragen, so dass diese bis einschließlich Struktur S5 stufenweise bis 3000 s ebenfalls trockenfallen.

Die Verdunstung/Verdampfung des PCS-Wassers hat Einfluss auf die Atmosphärgeschwindigkeit zwischen Stahlplatte und Glashaube – sie wächst von der durch den Lüfter aufgeprägten Geschwindigkeit von 3 m/s (Verbindung A0, siehe Abb. 5.116, S. 339) durch den steigenden Dampfanteil auf 3,2 m/s an (Verbindung A10). Im zeitlichen Verlauf erkennt man die zunehmende Verdampfung zwischen 1000 und 2000 s (dünnere Wasserfilm bewirkt erhöhte Wassertemperatur und damit erhöhte Verdampfung). Ab 2000 s fällt in der mittleren Verbindung A5 die Geschwindigkeit, da in den unteren Abschnitten mit der schrittweisen Austrocknung immer weniger Dampf entsteht. Weil sich die Verdampfung in den oberen Abschnitten erhöht, bleibt die Austrittsgeschwindigkeit in A10 nahezu konstant.

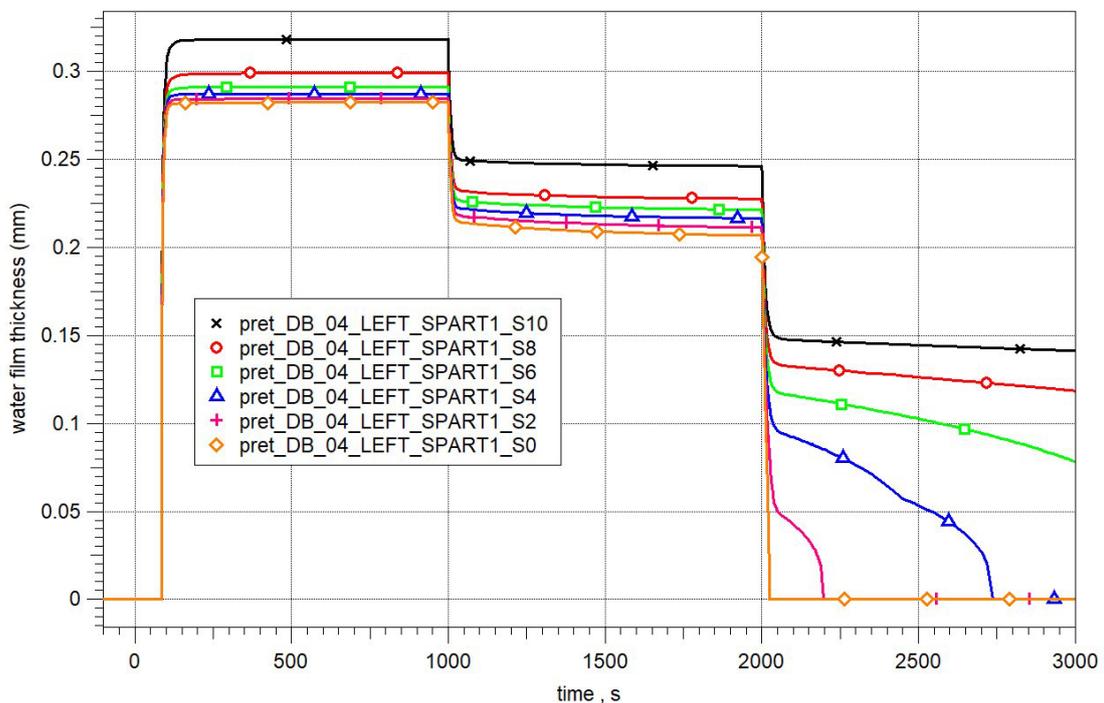


Abb. 5.119 WAFT, Auslegungsbedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilmdicke entlang der Plattenoberfläche

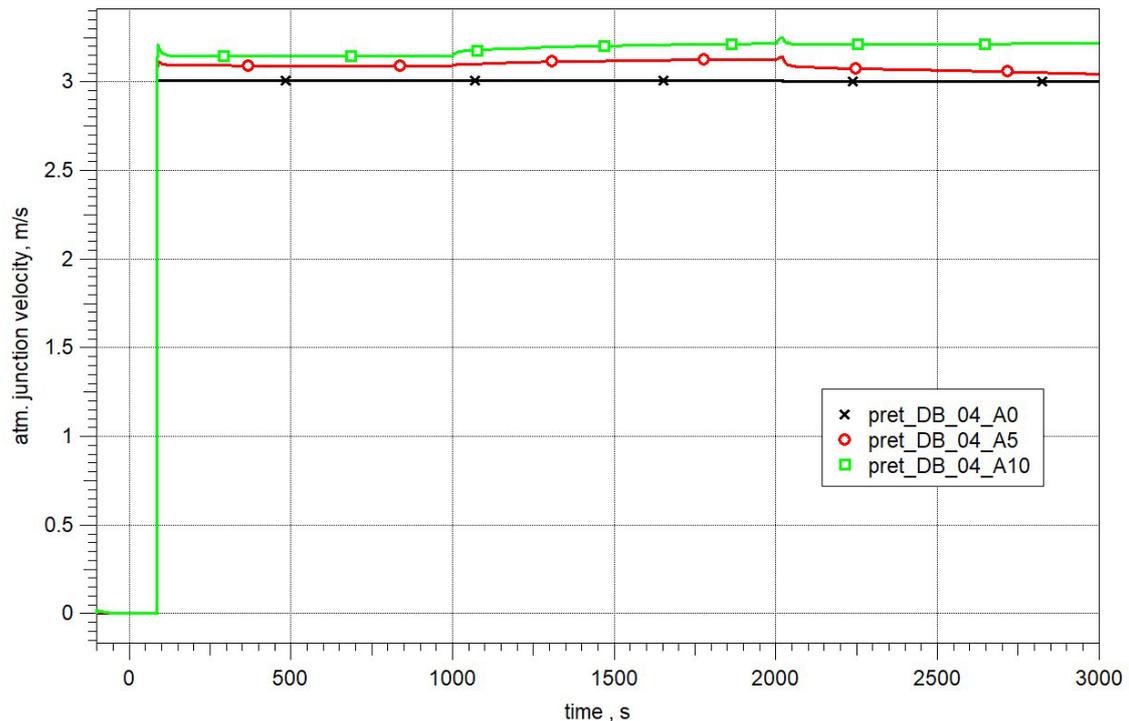


Abb. 5.120 WAFT, Auslegungsbedingungen, von COCOSYS berechnete Atmosphärendringgeschwindigkeiten im Strömungskanal

PCS unter Extrembedingungen

Das Ziel dieser Rechnung ist die Reproduzierung von "extremen" Randbedingungen, wie sie in Analysen zum Verhalten des PCS unter Annahme von zusätzlichen Systemausfällen bei AP1000 untersucht wurden. In der Rechnung wurde ab 2 100 s der Lüfter deaktiviert, was einer Verstopfung des Lufteinlasskanals im KKW entspricht (der Lufteinlass in WAFT ist allerdings nicht völlig dicht, so dass im Experiment immer etwas Luft angesaugt werden kann). Dadurch wird die im Ringspalt (hier Strömungskanal) befindliche Luft durch den entstehenden Dampf verdrängt, der wiederum durch den sich aufbauenden Gasdruck nach oben abströmt. In COCOSYS bedeutet das die Verdampfung des Wasserfilms bei ca. 1 bar Druck unter luftarmen Bedingungen. Um diesen Prozess zu beschleunigen, wurde bei konstantem PCS-Massenstrom die Heizleistung zusätzlich ab 1 100 s erhöht.

Der Verlauf der Filmdicken (Abb. 5.121) ist bis 1000 s ähnlich dem im Auslegungsfall (Abb. 5.119). Nach Erhöhung der Heizleistung nimmt die Filmdicke schnell ab und insbesondere nach Abschalten des Lüfters bei 2100 s sind jeweils kurz vor dem Trockenfallen der unteren Oberflächenabschnitte Instabilitäten zu sehen. Diese sind im Prinzip nicht kritisch (sie bewirken lediglich eine Erhöhung der Rechenzeit). Schaut man sich

aber die berechneten Temperaturen des Wasserfilms in Abb. 5.122 an, kann man erkennen, dass bereits vor Austrocknung eines Abschnittes die entsprechende Filmtemperatur über die Sättigungstemperatur steigt. Dies ist im Abschnitt S6 bei 3000 s recht gut sichtbar. Da sich der Druck im Strömungskanal nur wenig erhöht, sollte die Maximaltemperatur nicht signifikant über 100 °C steigen – die Filmtemperaturen der noch nassen Abschnitte S8 bis S10 erreichen nach 3000 s 103 °C. Dies zeigt einen Schwachpunkt des CO1-Wärmeübergangsmodells in COCOSYS für luftarme/luftfreie Bedingungen bei geringem Druck auf. Es ist damit nicht auszuschließen, dass COCOSYS auch bereits bei geringeren Temperaturen inkorrekte Ergebnisse liefert. Hier sei daran erinnert, dass die Wärmeabfuhr durch das PCS bei Störfällen die wesentliche Wärmesenke darstellt und signifikant für die Einhaltung des Auslegungsdruckes im Containment ist.

Zum Verständnis von Abb. 5.122 ist noch zu bemerken, dass bei Austrocknung des Wasserfilms die Filmtemperatur in der Ausgabe gleich der Plattenoberflächentemperatur gesetzt wird. Die genannten Instabilitäten sind auch in anderen Ergebnissen wie dem übertragenen Wärmestrom oder der Gasgeschwindigkeit im Strömungskanal sichtbar.

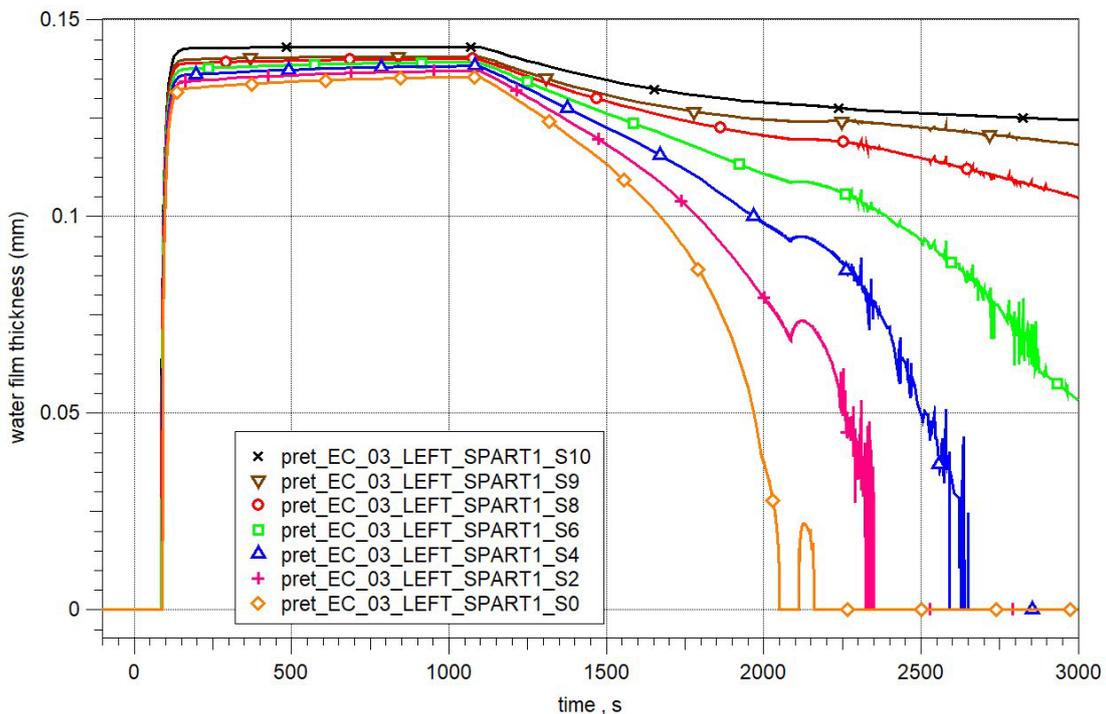


Abb. 5.121 WAFT, Extrembedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilmdicke entlang der Plattenoberfläche

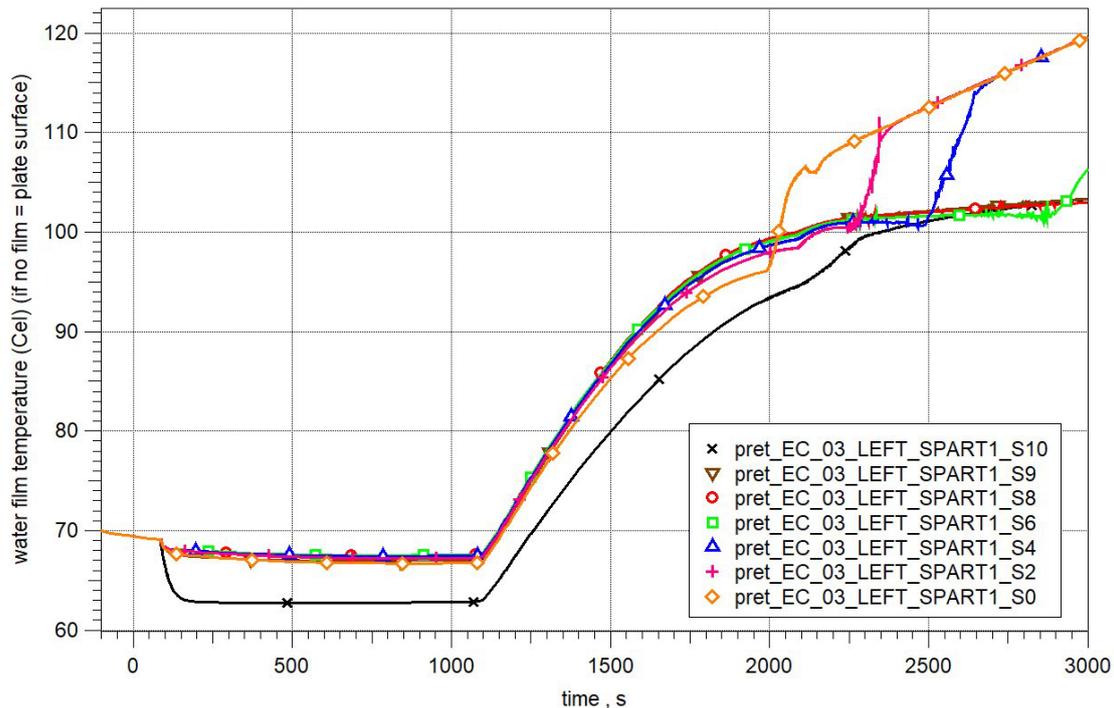


Abb. 5.122 WAFT, Extrembedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilm- bzw. Plattenoberflächentemperaturen

5.5.4 Fazit der Arbeiten zu WAFT

Im Rahmen der Teilnahme der GRS am ALISA-Projekt der EU ergaben sich Kontakte mit der Shanghai Jiao Tong University, wodurch die GRS an Informationen über die chinesische WAFT-Versuchsanlage gelangte. Mit WAFT wird das Verhalten des Passive-Containment-Cooling-Systems in AP1000- bzw. CAP1400-Anlagen untersucht. Da das ALISA-Projekt im Mai 2018 als vertragliche Basis der Zusammenarbeit endete, war es SJTU nicht mehr möglich, ohne großen formellen Aufwand experimentelle Daten an die GRS zu senden. Nach Auslaufen von ALISA setzt die GRS ihre Anstrengungen fort, um die Kontakte mit SJTU aufrechtzuerhalten und dadurch in der Validierung der PCS-Modellierung voranzukommen.

Auf Basis verfügbarer Unterlagen und bei SJTU nachgefragten weiteren Informationen wurde für die Simulation von Experimenten an der WAFT-Anlage ein COCOSYS-Datensatz erstellt und getestet. Entsprechend den vorliegenden Informationen zu AP1000 und CAP1400 wurden für zwei fiktive Szenarien orientierende COCOSYS-Rechnungen durchgeführt. Da der COCOSYS-Datensatz bisher noch nicht anhand eines alten Experimentes "qualifiziert" werden konnte, sind diese Vorausrechnungen

bisher nicht belastbar. Allerdings sind die Ergebnisse für "Auslegungsbedingungen" plausibel und entsprechen den für eine AP1000-Anlage berechneten Ergebnissen, die wiederum durch einen Code-zu-Code-Vergleich mit dem Westinghouse-Programm WGOthic abgesichert wurden.

Für Extrembedingungen wurde – analog zur Anwendung auf AP1000 – die Notwendigkeit der Verbesserung des CO1-Wärmeübergangsmodells in COCOSYS für luftarme/luftfreie Bedingungen bei geringem Druck aufgezeigt. Hierzu wird weiterhin versucht, neuere spezifische Experimente von SJTU zur Validierung zu erhalten. Ab Mitte 2018 war vorgesehen, dass SJTU die WAFT-Anlage für einen geplanten Umbau zeitweise stilllegt, durch den die Simulationsmöglichkeiten der Anlage erweitert werden sollen. Aktuelle Informationen dazu liegen der GRS zurzeit nicht vor.

In Auswertung der Datensatzerstellung sowie der COCOSYS-Rechnungen wurde eine Frageliste mit offenen Punkten zur Versuchsanlage bezüglich Konstruktion, Materialdaten, Instrumentierung und Versuchsdurchführung erstellt. Die Beantwortung dieser Fragen kann zur Eliminierung von Annahmen und damit zur Verbesserung des Datensatzes beitragen. Die Ergebnisse der COCOSYS-Analysen sowie die Liste mit Fragen wurden an SJTU übermittelt. Die bisher erzielten Ergebnisse werden für eine gemeinsame Veröffentlichung mit SJTU als nicht ausreichend betrachtet.

5.6 Internationales Vorhaben IPRESca

Im Rahmen des internationalen Vorhabens IPRESca (Integration of Pool scrubbing Research to Enhance Source-term Calculations) sollen die experimentellen Daten zur Freisetzung bzw. Rückhaltung von Spaltprodukten aus bzw. in einem Wasserpool erweitert und zudem diese Vorgänge vertieft untersucht werden. Der Zugang zu entsprechenden experimentellen Daten der Partner ist für die Ertüchtigung des COCOSYS-Modells (SPARC) wertvoll, da aktuell verfügbare Daten veraltet sind, nicht dem Stand der Technik entsprechen und das Modell konservative Ergebnisse liefert, die die Spaltprodukt-rückhaltung in Wasserpools unterschätzen. Die Ereignisse in Fukushima haben die Bedeutung dieser Modelle aufgezeigt und das verstärkte internationale Interesse an neuen experimentellen und analytischen Arbeiten hervorgerufen.

5.7 Veröffentlichung von Ergebnissen auf Konferenzen

Im Rahmen der Konferenz NURETH-17 wurde unter der Leitung von Becker Technologies ein gemeinsames Paper mit dem Titel „EXPERIMENTAL AND ANALYTICAL INVESTIGATIONS OF AEROSOL PROCESSES – WASH-OUT AND WASH-DOWN“ veröffentlicht, das auch später mit einer Erweiterung um dem Abwaschversuch AW-3 in der Fachzeitschrift *Nuclear Science and Engineering* veröffentlicht worden ist (/FRE 17a/, /FRE 18a/).

Der Artikel beinhaltet zum einen Ergebnisse, die durch die Nachrechnung des Laborversuchs AW-3 mit dem neuen AULA-Modell in COCOSYS erzielt wurden, das das Abwaschen von nicht-löslichen Aerosolen von typischen Containment-Strukturen berechnet, und zum anderen aus Nachrechnungen des AW-4-Tests, der den Abbau der luftgetragenen CsI-Aerosolkonzentration durch das Auswaschen durch ein für ein Kernkraftwerk typisches Sprühsystem untersucht. In /FRE 18a/ wurden die ersten Validierungsrechnungen mit dem neuen AULA-Modell an einem großen Integralversuch AW-3-Tests veröffentlicht, die im Rahmen dieses Projektes durchgeführt worden sind.

6 Regressionstesten & Validierungsmatrix

6.1 Regressionstesten

Neue bzw. geänderte Modelle können aufgrund der gegenseitigen Wechselwirkung und der zunehmenden Komplexität der Modellentwicklung auch eine unbeabsichtigte Auswirkung auf Rechenergebnisse von nicht unmittelbar betroffenen Modellen bzw. Phänomenen haben. Generell sind nachvollziehbare und konsistente Ergebnisse beim Übergang zu neueren COCOSYS-Versionen hinreichend nachzuweisen und zu dokumentieren. Um dies sicherzustellen, werden Regressionstests durchgeführt. Dazu werden ausgewählte Experimente und exemplarische Anlagenrechnungen mit demselben Datensatz aber unterschiedlichen Programmversionen wiederholt nachgerechnet. Die Basis für das Regressionstesten soll hinsichtlich der neuen Modelle erweitert werden. Durch wiederholte Abarbeitung der Regressionsmatrix kann somit auch der Entwicklungsfortschritt nachvollziehbar dokumentiert werden. Die ausgewählten Experimente werden dazu der sehr viel umfangreicheren Validierungsmatrix entnommen.

Im Verlaufe des Projekts wurde das Regressionstesten je nach Entwicklungsstand mit unterschiedlichen Versionen wiederholt. Zunächst wurde die Version COCOSYS V2.4v4 gegen die zu diesem Zeitpunkt offiziell freigegebene Version V2.3v9 getestet. Danach vor Freigabe die Version COCOSYS V2.5v5 gegen V2.4v4 und zuletzt die aktuell freigegebene Version COCOSYS 3.0.0 (Bestandteil des Programmsystems AC2 2019) gegen V2.5v5. Die Datensätze mussten teilweise an die jeweils geänderte Eingabe der jeweiligen aktuellen Version angepasst werden. Die Rechnungen wurden unter Microsoft Windows durchgeführt und ausgewertet. Der Regressionsbericht wurde erstellt. Die Versionen wurden auch an ausgewählten Datensätzen unter Linux getestet sowie für unterschiedliche Compilerversionen. Tab. 6.1 gibt einen Überblick über die im Regressionstesten behandelten Phänomene.

Der Vergleich der Ergebnisse für die ausgewählten Testfälle des Regressionstestens zeigte keine Auffälligkeiten, d. h. die vorgenommenen Änderungen hatten keine negativen Auswirkungen auf andere Modelle in der jeweils aktuellen Codeversion. Aufgefundene Abweichungen zwischen den bisherigen und den neuen Ergebnissen konnten erklärt werden und sind auf Modellverbesserungen zurückzuführen. Für das Verbrennungsmodul FRONT sind weitere Analysen hinsichtlich der Empfehlungen für die Eingabeparameter angeraten. Der Vergleich verschiedener Compilerversionen zeigt

ebenfalls keine negativen Auswirkungen. Auch der Vergleich von einzelnen Rechnungen unter Windows und Linux zeigt nur geringe aber akzeptable Abweichungen.

Tab. 6.1 Testfälle im COCOSYS-Regressionstesten (aktueller Stand COCOSYS 3.0.0 – V2.4v5)

Phänomen / Thema	Experiment / Anlage
Thermohydraulik	BMC F2
	HDR T31.5
	HDR E11.4
	THAI TH-7
	THAI TH-13
Sprühsysteme	HDR E11.1
	MISTRA MASP1
Aerosolverhalten	BMC VANAM-M3
	POSEIDON PA-20
	KAEVER test K148, K187
Iodchemie	THAI Iod-9
	THAI Iod-11
	PHEBUS RTF-1
Wasserstoffverbrennung	ENACCEF RUN 153
	BMC Hx23
MCCI	MOCKA 5.7
Druckabbausysteme	GKSS M1
	BC V-213 LB LOCA T1
	BC V-213 SLB-G02
Passive Systeme	PANDA BC4
Generische Anlagenrechenfälle	DWR-KONVOI
	SWR-72
	WWER 1000
	WWER 440 (Bubble Condenser)
	WWER 440 (Ice Condenser)
	RBMK-1500 (Ignalina-2 NPP)
	RBMK-1000 (Smolensk NPP)

6.2 Validierungsmatrix

Die Validierungsmatrix für COCOSYS ist historisch parallel zur Codeentwicklung gewachsen, sehr umfangreich und die Analysen sind häufig nicht mehr auf dem neuesten Stand, bzw. nur mit sehr alten Codeversionen durchgeführt worden. Im Hinblick auf die Qualitätssicherung der Codeentwicklung war eine Sichtung der Analysen, Archivierung sowie eine Überprüfung der Kompatibilität der zugehörigen Datensätze mit der aktuellen COCOSYS-Version notwendig. Daher wurden sukzessiv alte Fälle bzw. Datensätze aufbereitet und festgelegt, welche Fälle mit der aktuellen COCOSYS-Version wiederholt werden. Zudem wurden die verfügbaren Daten der Experimente (Messwerte, Versuchsbeschreibung etc.) archiviert.

Die folgende Tab. 6.2 stellt einen Überblick über den aktuellen Stand der Validierungsmatrix dar. Die Auflistung beschränkt sich auf die erfolgreiche Nachrechnung von Experimenten mit aktuellen COCOSYS-Versionen beginnend mit der Versionsnummer V2.0. Verweise auf ältere Rechnungen (V1.0 etc.) wurden zunächst danach beurteilt, inwiefern die Datensätze und Messwerte verfügbar waren. Die Aktualisierung der Datensätze ist meist mit einem deutlich höheren Aufwand verbunden. Zudem sind damals verwendete Instrumentierungen und Messwertaufnehmer häufig nicht dem heutigen technischen Stand entsprechend, so dass die Ungenauigkeiten größer sind.

Umfangreiche Validierungsarbeiten wurden in den zurückliegenden Jahren auch durch die Ruhr-Uni Bochum geleistet, so dass auch deren Arbeiten berücksichtigt worden sind. Auf mehreren bi-lateralen Arbeitstreffen wurden die eigenen Arbeiten und die Arbeiten der externen Validierung diskutiert und der Austausch von Informationen gefördert.

Tab. 6.2 Validierungsmatrix (Stand: 8-2019)

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
Thermohydraulik	Gas- und Temperaturverteilung (insbesondere Schichtung)	BMC	Rx4	V2.0	RUB	- Meist gute Ergebnisse
		HDR	E11.2 E11.4	V2.3/2.4 V3.0beta	GRS GRS	- Die Simulation der Auflösung von Schichtungen zeigt eine Abhängigkeit von der Nodalisierung
		THAI	TH1, TH2, TH7, TH9, TH10, TH13 (ISP-47), TH-27, TH29, HM2 HM1, TH-28	Dt. Dt.	GRS GRS GRS	- Schichtungsverhalten zwischen THAI und Anlagenrechnung ist unterschiedlich. Daher Überprüfung anhand eines „realistischen Szenarios“ in THAI.
		TOSQAN	Test 13 (ISP-47)	V2.4b/v3	GRS / BT	
		MISTRA	MASP1 (ISP-47)	V2.0	GRS	
		PANDA	T9, T9bis, T17	V2.4	GRS	
	Wärmeübergang	BMC	F2, VANAM-M3		GRS	- Überprüfung des neuen CO1-Modells erfolgt (RUB, GRS)
		THAI	TH9 TH23		GRS/RUB	- Validierung der Modelle im Hinblick auf Außenkühlung (AP1000) notwendig
	Kurzzeit	BMC	C13, D3, D6, D17			- Vergleichsrechnungen mit CFX (RS1190) zeigten Grenzen des LP-Konzepts
		HDR	T31.3, T31.5	V3.0	GRS	
	Plume/Jet	BMC	HYJET Jx2, Jx4, Jx8.1	V2.0/V2.3	RUB	- Modellentwicklung seitens RUB
		THAI	TH7, TH10, TH13, HM2	V3.0 beta		
	Brand	HDR	E41.7, E42.1, E42.2	V3.0 beta		- ältere Rechnungen sollten wiederholt werden

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
		NIST OSKAR DIVA	T1, T3 (Kerosin) ICFMP#5-T1, -T3 PRS1-SI-D1, -D3, -D6, PRS1-DI-D1, -D3, PRS1-LK-D1, -D2, -D4, PRS1-INT-D1, -D2, -D4, - D5, -D6 PRS2-VSP-D2, PRS2-FES-D1, - D2			<ul style="list-style-type: none"> - aktuell: Teilnahme an internationalen Projekten (z. B. OECD-PRISME2) - Brände sind PSA-relevant - Einraumversuche - Versuche mit offenen Verbindungstüren - Versuche mit „kleinen“ Verbindungen (Leckagen) - relativ gute Ergebnisse, Rückwandtemperaturen bei Schaltschrankbränden werden nur ungenau berechnet - Peatross&Beyler-Korrelation nicht anwendbar - Rückwirkung des Sprühsystems auf die Gasströmungen konnte noch nicht ausreichend berücksichtigt werden
	H ₂ -Verbrennung	BMC HDR NUPEC ENACEFF THAI	Ix2, Ix9, Hx26, Hx23 VANAM-M4 E12.3.2 B2-6, B8-3 Run 153, 158, 160 Run 765 HD-1R, -12, -20, -22, -30, -31, -32, -33, -34, -35, -38	V3.0 V2.1 V2.3?	GRS RUB RUB RUB	<ul style="list-style-type: none"> - keine Versuche inklusive Überlagerung mit anfänglicher Konvektion - Teilnahme an ISP-49 & SARNET FP7 - Verbrennungsversuche ohne Sprühen (z. B. HD-22) können mit dem FRONT-Modul unter Verwendung der im COCOSYS-Manual angegebenen Default-Parameter gut nachgerechnet werden

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
			HD-2R, HD-15, HD22, HD-24, HD-44	V2.4v3	GRS GRS GRS	
	H ₂ -Verbrennung mit Sprühen	THAI	HD-30 ^{*)} , HD-31, HD-32 HD-36		GRS RUB GRS	- Die Auswirkungen des Sprühsystems auf die H ₂ -Verbrennung können nur unzureichend mit FRONT simuliert werden
	Rekombinatoren	BMC HDR THAI	Gx4 E11.8.1 HR-02, -12, -17, -18, -19, -10, -21, -22, -23, -24, -25, -33, -35, HR-40, HR-41, HR-42 HR-49	V2.3 (NOH) V(SCZ) V2.4/V3.0 (NOH)	GRS RUB	- Überprüfung des neuen Rekombinatormodells erfolgt - keine Daten zum CO-Verhalten! - Modell mit „altem“ Arrhenius-Ansatz - gute Ergebnisse der blinden Rechnungen für Situationen mit Sauerstoffarmut - Plausibilitätsrechnungen mit dem neuen Rekomodell für NIS-Rekombinatoren
	Hydrodynamik	GKSS GKSS MARVIKEN THAI GES	M1 LBLOCA-1, SLB-G02 M19, M24 WH-20 GES-Wanne	3.0 3.0 V2.3 V3,0beta V3.0beta	GRS GRS RUB GRS (ARN) GRS	- Korrelation für Dampfdurchbruch basiert auf russischen Versuchsdaten - Wasseraufwurf-Versuche - (Dampfdurchbruch) - Rechnungen zeigen gute Ergebnisse im Vergleich zu den experimentellen Daten

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
						- Zonenflutenmodell
	Passive Systeme	PANDA	BC3, BC4, PC1 , ISP-42 (A, D, E, F)		GRS	- Gut - Entwicklung eines GEKO-Modells (RWTH)
	Sprühen	BMC	PACOS Px1.2/2.2	V2.3	RUB	- Thermohydraulik: gute Ergebnisse
		HDR	E11.1	V3.0	GRS	- Aerosolwaschen noch nicht validiert
MISTRA		MASP0, MASP1, MASP2	V2.3v13	GRS (ARN)		
PANDA		ST3_0_3	V2.4b	RUB		
Aerosol- und Spaltproduktverhalten	Aerosolverhalten	BMC	VANAM-M2* , -M3 , -M4 Versuche, ISP-44	V2.4 V3.0	RUB	- gut (bis auf Kelvin-Effekt (Stabilität))
		KAEVER	K123, K148, K187, K188	V3.0beta	GRS	
	Trockene Resuspension	THAI	AER-1, AER-3, AER-4	V2.3?	GRS	- Ermittlung der Strömungsverhältnisse ist für LP-Programme schwierig
		BMC	VANAM-M4		(NOH) RUB	
	Nasse Resuspension	THAI	TH-14 bis TH-17 (löslich) TH-25.1, .2, .3	V3.0 beta	GRS	- nur für Einzelblasen und transienter Bereich
		REVENT	REVENT	V2.4v3	RUB	
KWU		KWU	V2.4v4	RUB		
REST		REST	V2.4v4 V2.4v4	RUB RUB		

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
	Iodchemie	THAI	Iod-15, -17, -20, -32 Iod-6 bis Iod-24 Iod-25, Iod-26 Iod-27A, Iod-28, Iod-30, Iod-31 AW-3 (Teil 2) ACE3B, PHEBUS-3, PHEBUS-5, P9T1,	V3.0 beta	GRS RUB	<ul style="list-style-type: none"> - Einraumversuche: gute Ergebnisse mit neuem Iod/Farbe-Modell, Iod/Stahl-Modell noch nicht zufriedenstellend - I₂-Mehrraumverhalten ohne Farbe gut simuliert - Neues Iod-Farbemodell - Erste Überprüfung der Iod-Silber-Reaktion (bezüglich veränderlicher Silberoberfläche) Massentransfers im Allgemeinen gut verstanden - Noch Verbesserungsbedarf im Bereich radiolytischer Reaktionen - Verhalten von Ag-Aerosolen (Abwaschen) und Iod-Silber-Reaktion muss noch verbessert werden. - Erste Modellierung der Iod/Ag-Aerosol-Reaktion - Erste Modellierung der radiolytischen Zersetzung von CsI
		RTF RTF-ISP41	P10T1, P10T3 PT02, P1T1, PHEBUS-1	V3.0	?	
		CAIMAN	01/01, 01/03, 97/02	V2.4b	GRS	
		PHEBUS	FPT1, FPT2, FPT3 S1-3, S1-4, S1-5, 1-11	V2.4b/V3.0	GRS	
		EPICUR	AER01- AER12 (OECD STEM)	V3.0beta	GRS	
		BIP	G4	V3.0 beta (KLH)	GRS	
	Spaltproduktverhalten	PHEBUS	FPT1, FPT2, FPT3	V3.0 (BES) V2.4b	GRS GRS	<ul style="list-style-type: none"> - Validierungsbedarf im Bereich Abwaschen - gekoppelte Rechnungen für FPT1 & FTP3 durchgeführt

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
	Pool-Scrubbing	EPRI-II POSEIDON	Serie 2 PA-Serie	V2.1 V2.4 (NOH)	RUB GRS	- Noch erhebliche Unsicherheiten in der experimentellen Datenbasis und bei Anwendungsrechnungen
	Aerosol-Abwaschen	THAI	AW1, AW2, AW-3 (Teil 1), AW-3 (Labor)	V3.0b (KLH)	GRS	- Überprüfung anhand weiterer Versuche notwendig (Entwicklung des AULA-Modells)
	Auswaschen durch Sprühen	THAI	AW4	(BES)	GRS	- Beteiligung an der Auslegung der Versuche, keine konsistente Berechnung des Aerosolabbaus
	Ventingfilter	ACE	AA-19, AA-20	V3.0 b (KLH)	GRS	- gute Berechnung des partikelgrößen-spezifischen Dekontaminationsfaktors - Plugging-Modell teilweise überprüft
Ex-vessel Schmelzeverhalten	Erosion	BETA ANL-ACE ANL-MACE ANL OECD COMET VULCANO MOCKA	V1.8, V3.3, V5.1, V5.2 L1, L2, L5, L6, L7, L8 M3B, M4 CCI-2, -3, -4, -5 L1, L2, L3 VB-U5, -U6, VBES-05 3.1, 6.1, 5.7	V2.4v3 V3.0 V3.0 V3.0beta (BAK)	RUB GRS GRS GRS GRS	- gut für Experimente mit homogenem Oxid und kalkreichem Beton (CCI-2) - unsicher: 2D-Verhalten bei silikatischem Beton sowie bei geschichteten Pools (aktuelle Experimente) - gute Ergebnisse aber Unsicherheiten bei der Simulation der Thermitreaktion; Berücksichtigung der Armierung
	Verlagerung	KATS ECO-KATS COMAS	7, 14, 15, 17 1, V1 5a, EU2b, EU3a, EU4	LAVA (BAK)	GRS	- gut für viskose Ausbreitung (blinder Benchmark ECOKATS-1)

	Phänomen	Anlage	Versuch	Version	Institution	Bemerkungen
		VULCANO	VE-U7, VE-U8			- schlechter für Ausbreitung unter Trägheit (COMAS-5a)
	DCH	DISCO	D06 FH01, FH02, FH03 KH2 KH1 bis KH7 L04, L05	V2.4v5 (NOH)	GRS	- ausreichend mit einheitlichem Parameteransatz für verschiedene Versuchsgeometrien - H ₂ -Verbrennungen im Zusammenhang mit DCH untersucht - Anwendbarkeit des DCH-Modells auf reale Anlagen muss überprüft werden

7 Qualitätssicherung, User Support und Code Manuals

Da COCOSYS für sicherheitstechnische Fragestellungen verwendet wird, sind Qualitätssicherung und Dokumentation der Validierungsergebnisse ein essentieller Bestandteil der Codeentwicklung und -validierung. Die Arbeiten werden kontinuierlich fortgeführt. Ein besonderer Punkt ist die Bereitstellung von Nutzerhinweisen. Diese lassen sich u. a. direkt aus den im Rahmen dieses Vorhabens vorgeschlagenen Arbeitspunkten wie z. B. der Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse und den Anlagenrechnungen zusätzlich aber auch aus dem Informationsaustausch mit externen Anwendern ableiten.

7.1 COCOSYS User Support

Bei allgemeinen Fragestellungen und Auftreten von generellen Problemen in COCOSYS werden externe Nutzer intensiv unterstützt, damit deren spezifische Anwendungen erfolgreich durchgeführt werden können. Durch die externen Nutzer wird zum einen das Anwendungsspektrum der Codes erheblich erweitert, zum anderen besteht eine hohe Wahrscheinlichkeit dafür, dass Defizite in COCOSYS und ASTEC sowie in deren Dokumentation entdeckt und behoben werden können.

7.1.1 Probleme bei der Mittelung thermodynamischer Zustände für Iod-Compartments

Im Zusammenhang mit Rechnungen für Fukushima (OECD-BSAF-Vorhaben) sind Probleme bei der Mittelung thermodynamischer Zustände aufgetreten. Durch die versehentliche direkte Einspeisung in die Gasphase einer zum Torus gehörende Zone sind sehr hohe Temperaturen in dieser Gasphase aufgetreten, welche 1200 K überschritten. Bei der Berechnung des mittleren Gesamtdrucks über die mittleren Partialdrücke wird ab 1200 K ein Newton-Verfahren zur Berechnung des Dampfpartialdrucks verwendet, welches unter den gegebenen Randbedingungen negative Werte ergab. Dieses Problem wird nun abgefangen. In der Rechnung sollte allerdings darauf geachtet werden, dass die thermodynamischen Zustände der zu Compartments zusammengefassten Zonen nicht zu unterschiedlich sind.

7.1.2 Diskussion bezüglich der Wechselwirkung zwischen Iod und Sprühtröpfchen

Im Rahmen des Versuchsprogramms THAI-V wurde ein Iod/Sprühversuch durchgeführt /GUP 17/. Im Rahmen von Auslegungsrechnungen wurde festgestellt, dass unter den geplanten Randbedingungen die Wechselwirkung zwischen Iod und den Tröpfchen sehr gering ist. Daraufhin wurde das Modell näher untersucht. Die Wechselwirkung wird über den Partitionskoeffizienten P bestimmt, welcher unter den vorgegebenen Randbedingungen bei ca. 10 lag. Somit ergibt sich bei einem Volumenstrom \dot{V}_{spr} von ca. 1 l/s und einem Gesamtvolumen V der Anlage von ca. 90 m³ eine maximale „Luftwechsellzahl“ von ca. $L = P \cdot \frac{\dot{V}_{spr}}{V} \approx 1,1 \frac{10^{-4} \text{ l}}{\text{s}}$, ein offensichtlich sehr geringer Wert.

Das sehr einfache Modell zur Beschreibung der Wechselwirkung verwendet die Anfangsgeschwindigkeit des Tröpfchens. Diese kann sehr hoch liegen, so dass in dem vorliegenden Fall zusätzlich noch niedrigere Austauschraten berechnet wurden. Hier sollte im neuen AFP-Modul die Fallzeit der Tröpfchen direkt aus dem IVO-Modell verwendet werden (Ergänzung der Austauschgrößen zwischen THY und AFP).

Weiterhin wurde festgestellt, dass bei einem Eintauchen des Sprühkopfes unterhalb des Wasserspiegels, das IVO-Modell weiterhin Werte berechnet, obwohl in THY als auch in AFP das Sprühen nicht mehr verwendet wird. Dies führt bei Anwendern u. U. zu Irritationen.

7.1.3 Überprüfung des AC²-Gesamtsystems anhand eines angenommenen Unfalls in einer Anlage vom Typ KONVOI

Zielsetzung der Arbeiten ist die Überprüfung des AC²-Gesamtprogramms bei gekoppelten ATHLET/ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen anhand eines komplexeren Unfallablaufs. Als Auswertesoftware kommt dabei das GRS-Werkzeug ATLAS /VOG 18/ zur Anwendung. Zu Beginn der Arbeiten wurde ein Szenario, welches bereits im Vorhaben RS1504 /KLE 14/ untersucht wurde, wiederholt.

Der Kern im RDB wird in 4 Ringe eingeteilt. Die 4 Stränge werden einzeln abgebildet. Im Dampferzeuger wurden die U-Rohre in 3 Gruppen eingeteilt. Abgebildet werden die Dampferzeuger, Hauptkühlmittelpumpen sowie die Notkühlsysteme. Der Druckhalter ist über die Volumenausgleichleitung mit dem ersten Strang verbunden, in dessen heißseitigem Teil auch das Leck von 50 cm² angenommen wird (Abb. 7.1).

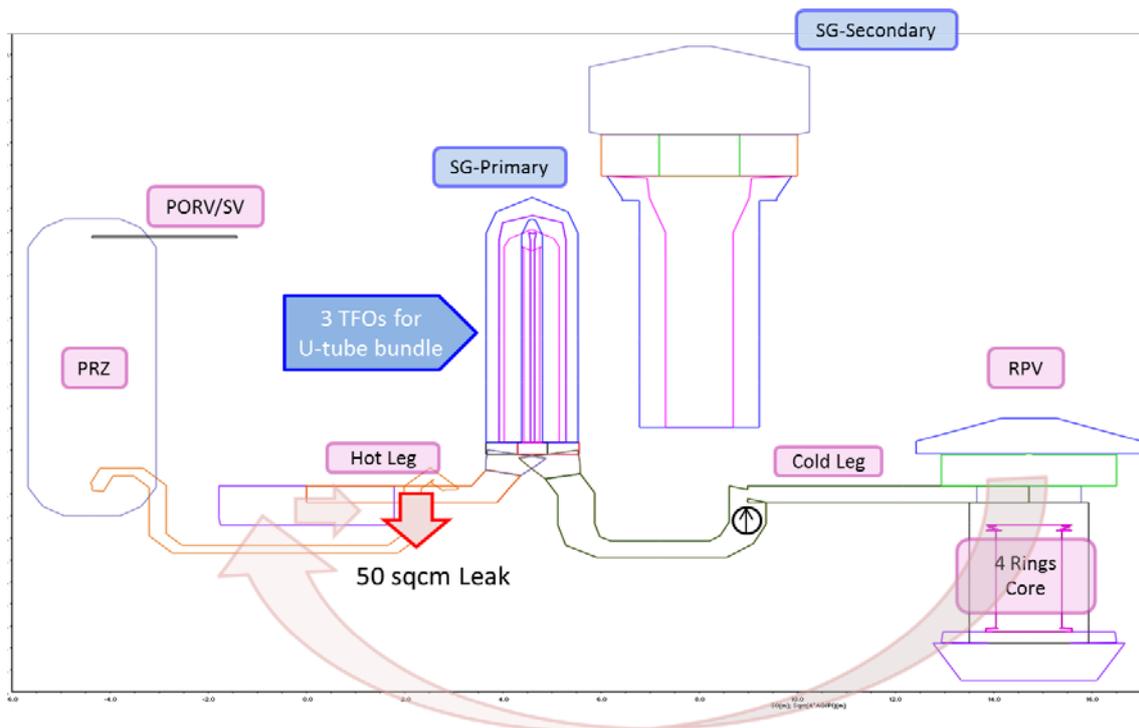


Abb. 7.1 Nodalisierung des ATHLET-CD-Datensatzes für KONVOI

Es wird ein Kerninventar zum Ende des Reaktorzyklus angenommen. Ebenso werden die Abbrände für jeden einzelnen Ring einzeln gemittelt (Fall EOC+ im Vorhaben RS1504).

Im COCOSYS-Datensatz wurden insgesamt 289 Kontrollvolumina (Zonen) definiert. Diese umfassen den SB, den Ringraum, das Maschinenhaus sowie die Umgebung. Sogenannte Plumezonen werden oberhalb der Dampferzeuger definiert, um auftriebsbehaftete Freistrahlen und eine damit verbundene mögliche Schichtung im SB simulieren zu können.

Die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS beinhaltet die Freisetzung über das Leck und Sicherheitsventile, die Wärmeabstrahlung der Reaktorkühlkreisläufe sowie die Freisetzung der Spaltprodukte (Aerosole, Iodspezies und Isotope). Dabei wird sichergestellt, dass konsistente Nuklidbibliotheken in ATHLET-CD und COCOSYS verwendet werden. Dies ist im Hinblick auf die hier durchgeführten Untersuchungen unbedingt notwendig. Ein Rücktransport von Spaltprodukten vom SB in den Kühlkreislauf kann bisher noch nicht simuliert werden, ist aber für die Untersuchungen hier auch nicht relevant.

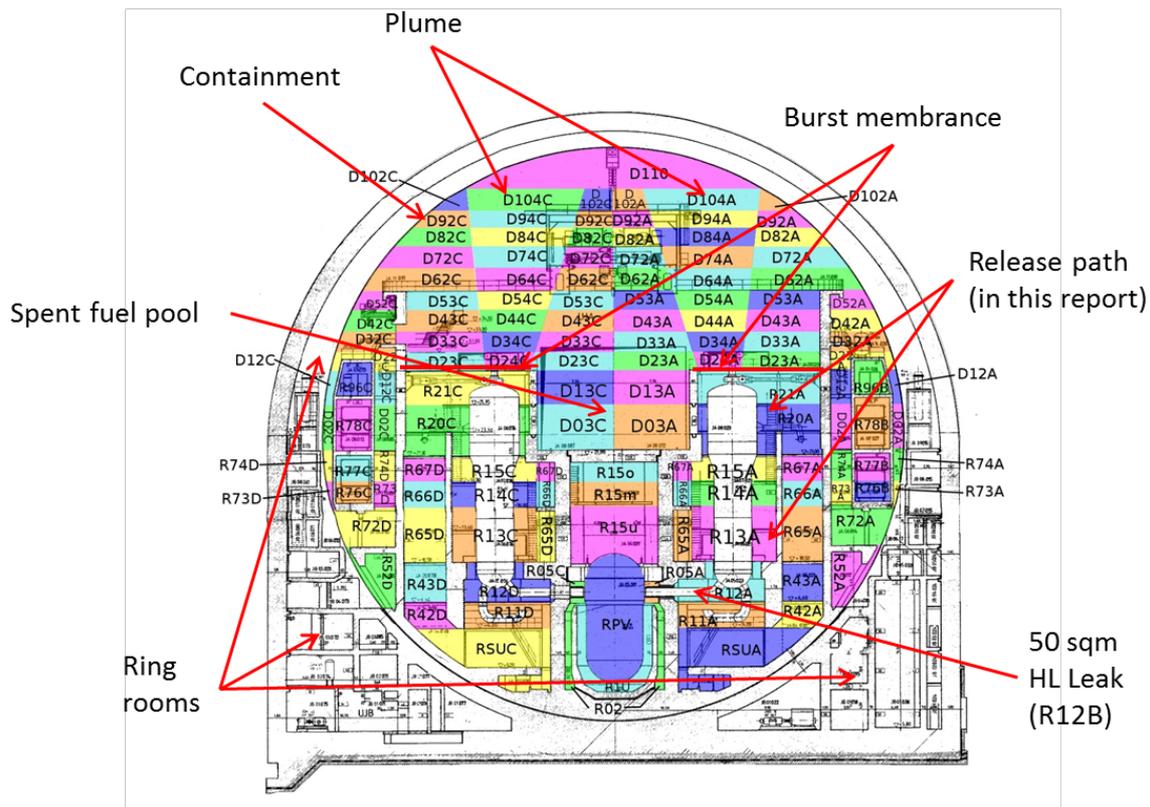


Abb. 7.2 COCOSYS Nodalisierung für KONVOI

In dem betrachteten Unfallszenario wird ein kleines Leck von 50 cm² im heißen Strang des Druckhalterloops angenommen. Das Speisewassersystem als auch alle Hoch- und Niederdruck-Notkühlsysteme, inklusive der Umschaltung auf Sumpfumwälzbetrieb, werden als ausgefallen angenommen. Das Reaktorschnellabschaltssystem und die heißseitigen Druckspeicher (DS) stehen zur Verfügung. Das Volumenregelsystem mit einem Massenstrom von 2 kg/s steht zwischen 0 s und 4000 s zur Verfügung. Das Abfahren der Dampferzeuger (DE) mit 100 K/h ist verfügbar. Das Notspeisewassersystem der DE mit umgerechnet 18 kg/s pro Loop reguliert den Wasserstand im Dampferzeuger, nachdem dieser zunächst abgefallen war. Hier wird angenommen, dass das System bei 8000 s ausfällt⁷. Im SB werden die vorhandenen katalytischen Rekombinatoren zum Abbau des Wasserstoffs berücksichtigt.

⁷ Diese Annahme wurde getroffen, um den Zeitverlauf des Unfalls abzukürzen.

7.1.3.1 Wiederholung der Rechnung mit der COCOSYS-Version V2.4v4

Um einen Ausgangspunkt zum Vergleich mit der ersten eingefrorenen AC²-Version (mit COCOSYS V2.4v4 und ATHLET-CD 3.1A) zu haben, wurde die Rechnung mit der COCOSYS V2.4v4 inklusive der darin enthaltenden Version ATHLET-CD 3.0A wiederholt. Ein erster Vergleich ergab, dass erhebliche Unterschiede in den erzielten Ergebnissen und denen aus dem Vorhaben RS1504 aufgetreten sind. Die Unterschiede sind ähnlich zu denen, wie sie auch zwischen den Fällen mit unterschiedlichen Kerninventaren zu Beginn (BOC+) und zum Ende (EOC+) aufgetreten sind. Daher wurde diese Rechnung eingehender analysiert.

Im Folgenden werden vier Rechnungen verglichen:

- **Fall A:** Rechnung mit V2.4v4 und optimierter Einstellung bzgl. Zeitsteuerung im Hinblick auf die Plotausgabe (schwarze Kurven)
Hinweis: Um einen Einbruch der Zeitschrittweiten zu vermeiden, wurden die Einstellungen IPLSTE (Anzahl der Zeitschritte bis zum nächsten Plot) und DPLSTE (max. Δt zweier Plotpunkte) optimiert. Zu beachten ist, dass COCOSYS die Zeitschrittweite so reduziert, dass der zeitliche Abstand zweier Plotzeitpunkte exakt erreicht wird. In diesem Fall werden die Einstellungen IPLSTE = 10 und DPLSTE = 80 s verwendet.
- **Fall B:** Rechnung mit V2.4v4 und identischer Einstellung bzgl. Zeitsteuerung (blaue Kurven)
Hinweis: In dieser Rechnung wird die Einstellung IPLSTE = 1000 und DPLSTE = 5 s verwendet. Gerade im Zusammenhang mit der maximalen Zeitschrittweite HMM = 4 s führt dies immer wieder zu einer Reduktion der Zeitschrittweiten.
- **Fall C:** Rechnung aus RS1504 mit V2.4v3+ (Revision 6040) (rote Kurven)
Hinweis: Hierbei wurde festgestellt, dass die Öffnung des Lecks in diesem Fall bei 420,136 s statt wie in den anderen Fällen bei 420,052 s erfolgt. Insofern unterscheiden sich die Ergebnisse in der Wiederholungsrechnung (siehe unten) etwas. Die Plotsteuerung entspricht der im Fall B).
- **Fall D:** Wiederholung der Rechnung aus RS1504 mit Revision 6040 (grüne Kurven). Die Plotsteuerung entspricht der im Fall B).

Alle neu durchgeführten Rechnungen wurden bis 30420 s durchgeführt. Zwischen ca. 24000 bis 28000 s trat in allen neu durchgeführten Rechnungen in ATHLET-CD ein Abbruch der Rechnung auf.

Erste Unterschiede zwischen den Rechnungen treten bei 8000 s auf. Zu diesem Zeitpunkt fällt das Notspeisewasser aus. Weitere deutliche Unterschiede treten bei ca. 20000 s auf. Ab ca. 22000 s treten Unterschiede in der Kernzerstörung auf mit entsprechenden Auswirkungen auf die Ergebnisse im SB (Abb. 7.8). In Abb. 7.3 wird der Druck im Reaktordruckbehälter (RDB) verglichen. Unterschiede in den Ergebnissen treten mit Beginn der Kernzerstörung und Bildung von Wasserstoff auf. Bezüglich des Wasserstandes im RDB sind erste Unterschiede schon bei ca. 8000 s zu beobachten (Abb. 7.4). Ursache sind Unterschiede beim Wasseraustrag über das Leck. Hierzu werden in den Abb. 7.5 bis Abb. 7.7 die Einspeiseraten in den SB dargestellt. Der Energieeintrag sowie die Dampfinspeisung sind weitgehend gleich. Unterschiede treten im Hinblick auf die Wassereinspeisung auf. Mit dem Ausschalten der Notspeisewassersysteme werden im Fall A ca. 5 m³ mehr Wasser in den SB freigesetzt, was in der Folge zu einem niedrigeren Wasserstand im RDB führt.

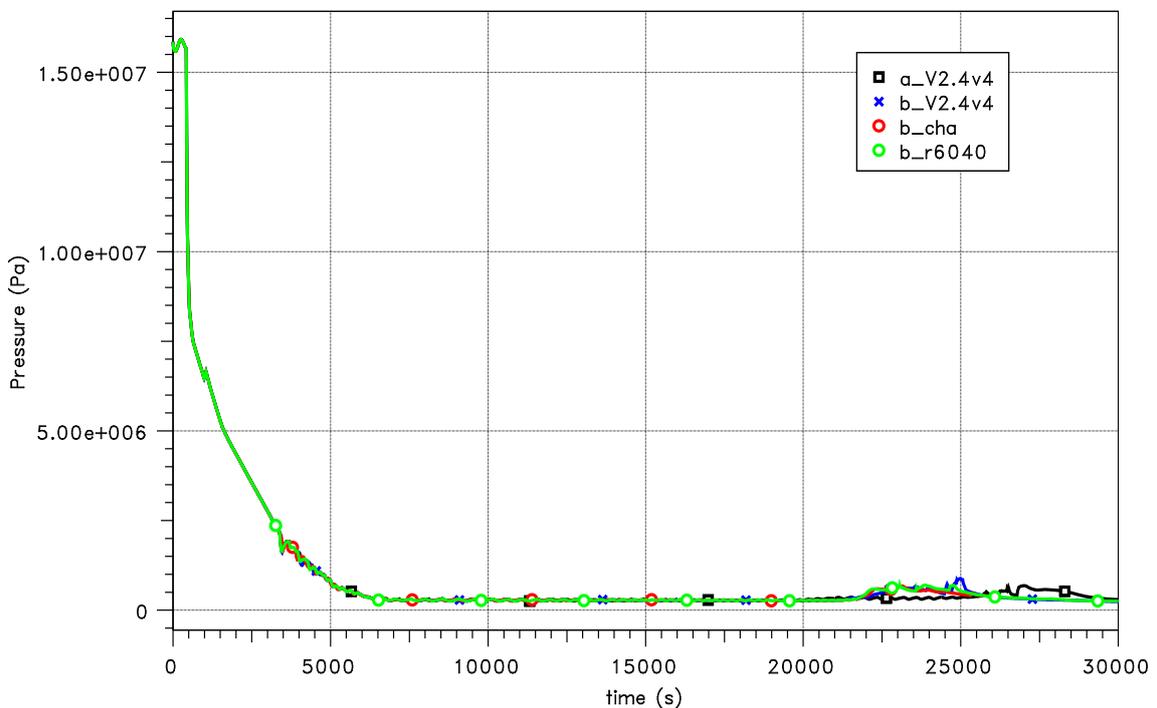


Abb. 7.3 AC²-Test: Druck im RDB für die 4 gerechneten Fälle (s. S. 363)

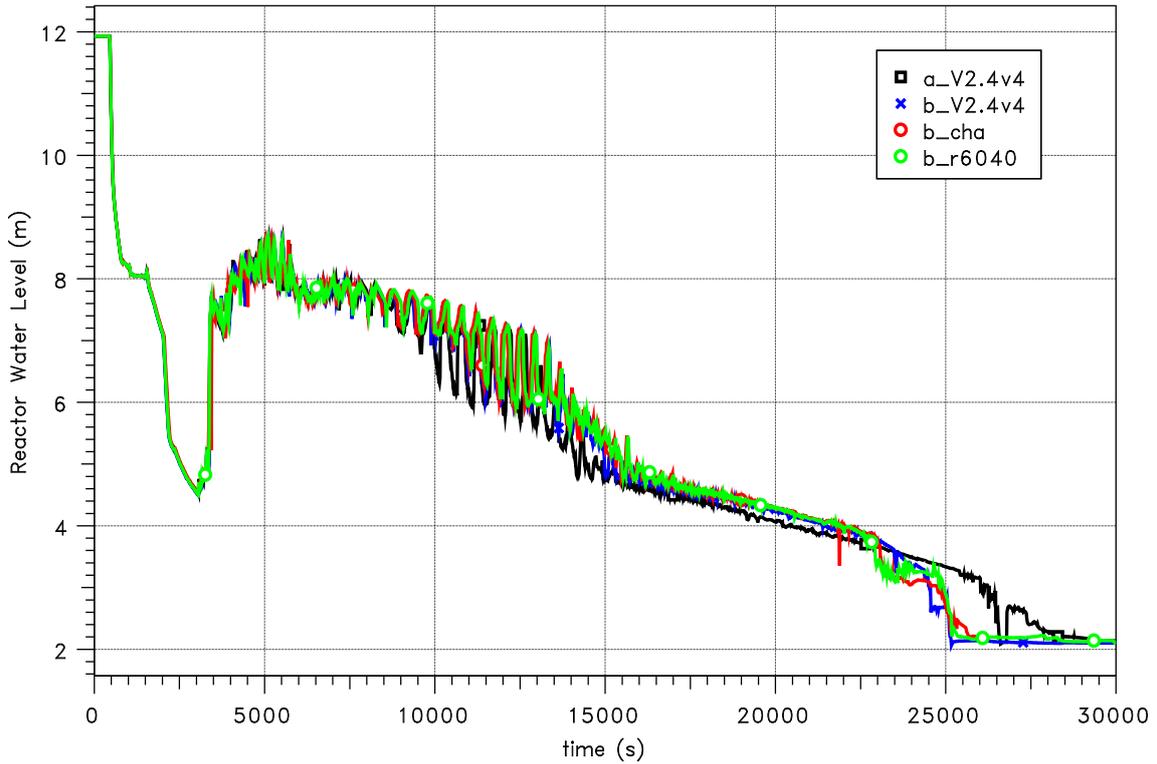


Abb. 7.4 AC²-Test: Wasserstand im RDB

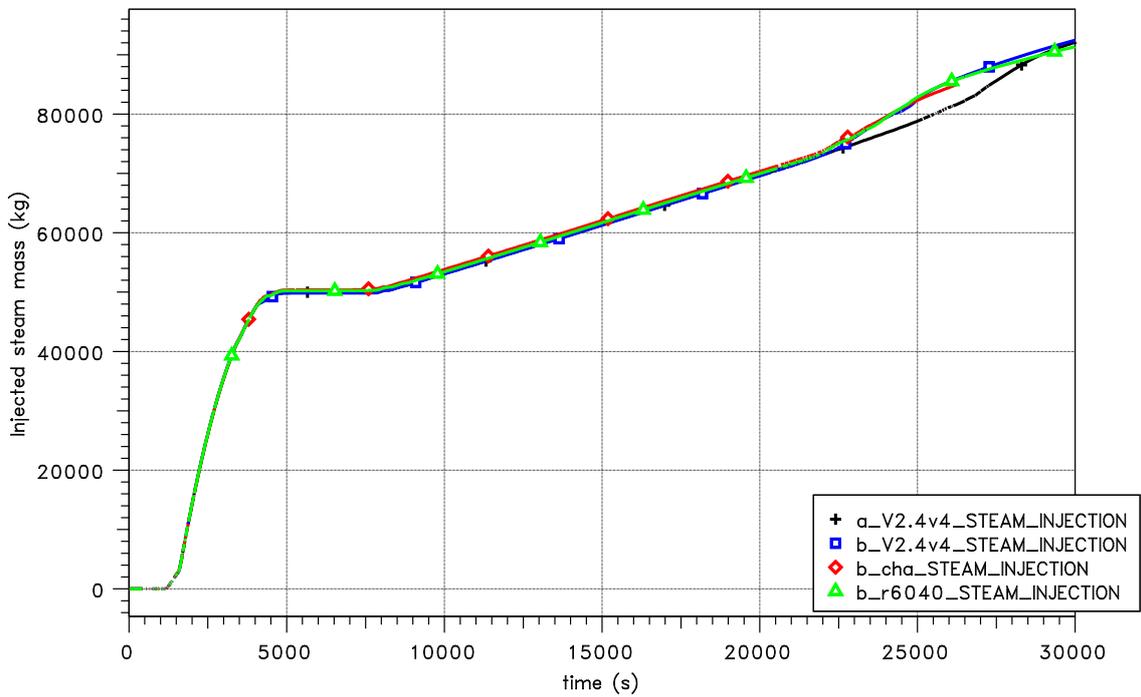


Abb. 7.5 AC²-Test: Integral eingespeiste Dampfmasse in das Containment

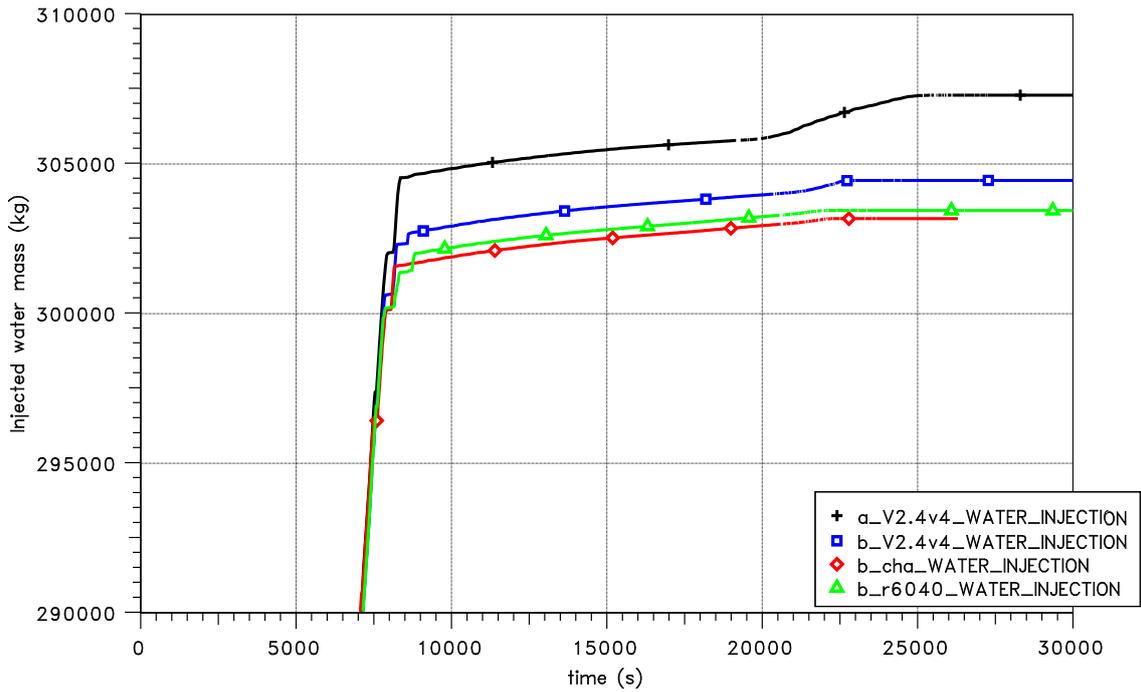


Abb. 7.6 AC²-Test: Integral eingespeiste Wassermasse in das Containment

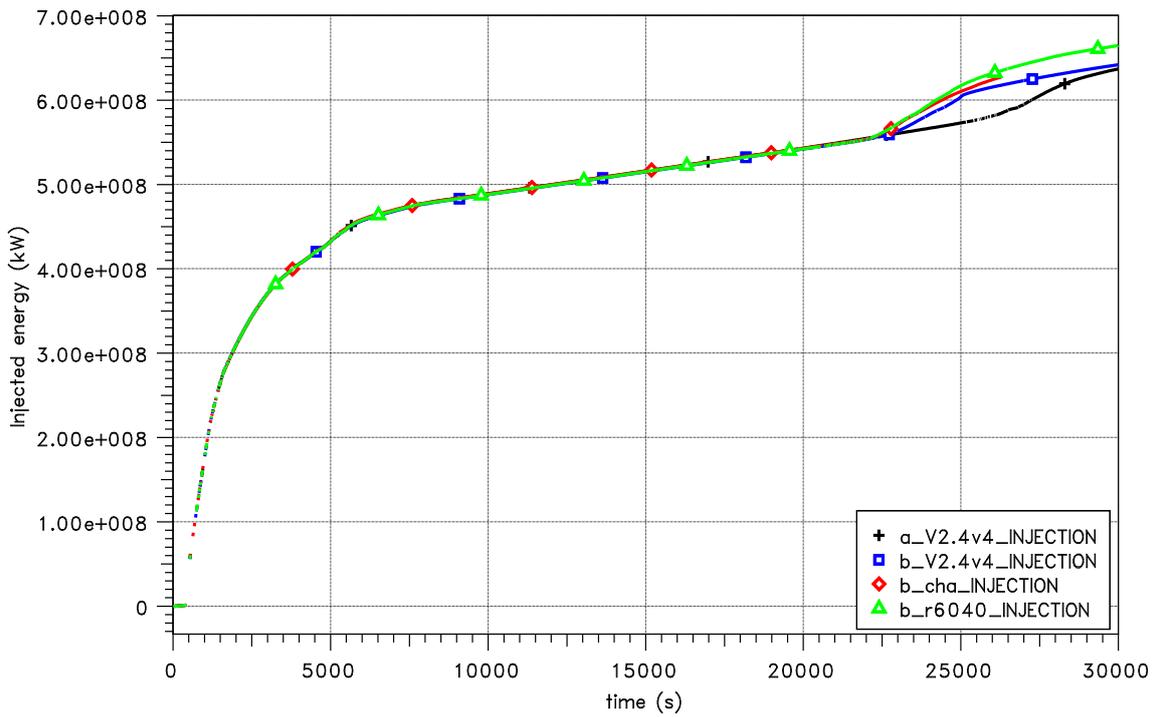


Abb. 7.7 AC²-Test: Integral Eingespeiste Energie in das Containment

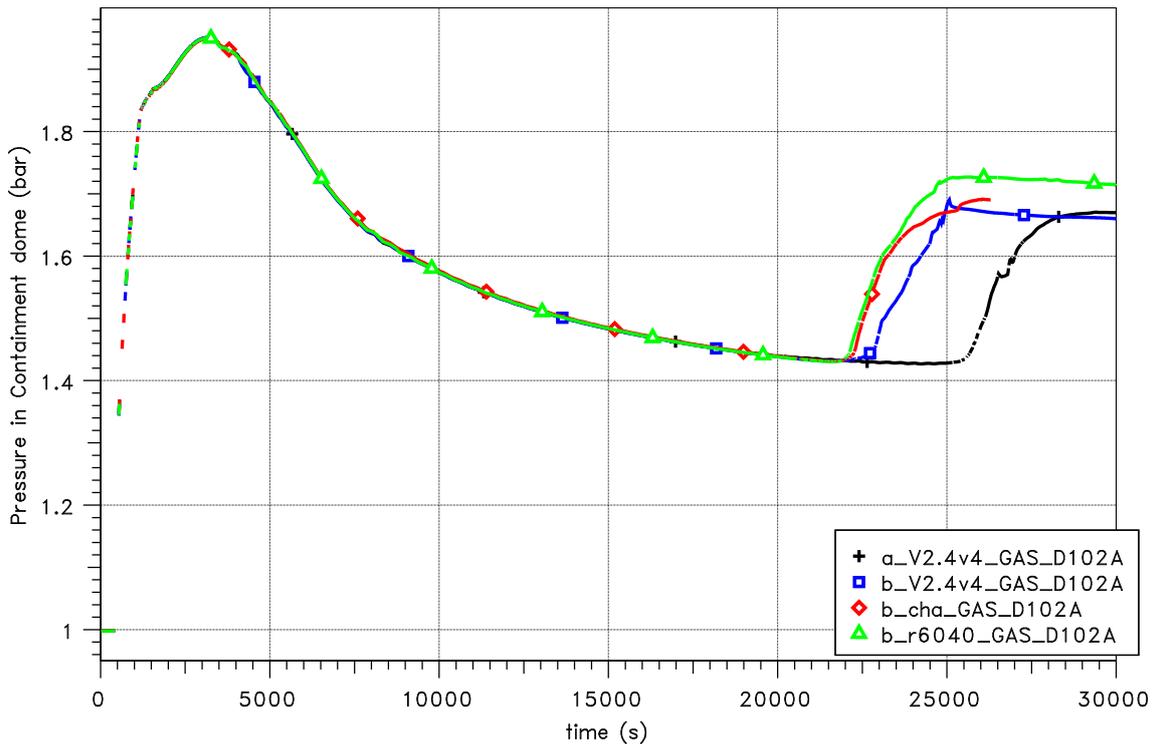


Abb. 7.8 AC²-Test: Druck im Sicherheitsbehälter

Um mögliche Ursachen für die Unterschiede in den Rechenergebnissen zu identifizieren, wurden die Ergebnisse auf der Sekundärseite sowie der Dampferzeuger genauer analysiert. Im Prinzip verhalten sich alle Loops gleich. Daher werden nur die Ergebnisse des dritten Loops dargestellt.

Die Abb. 7.9 bis Abb. 7.11 zeigen den Vergleich des Gesamtdrucks, der Dampftemperatur im Dom des DE sowie des Wasserstandes im DE. Der Gesamtdruck ist aufgrund des 100K/h-Abfahrens in allen Rechnungen gleich. Die Temperaturen im DE schwingen relativ stark sind aber im Niveau ungefähr gleich. Hier werden Unterschiede erst mit Beginn der Kernzerstörung beobachtet. Die Schwingungen sind eine Folge der Druckregulierung. Ähnliche Schwingungen werden beim Massenauswurf aus dem DE festgestellt (hier nicht dargestellt). In den Fällen A und B ist der Wasserstand im DE bei 20000 s ca. 30 cm höher. Obwohl die Randbedingungen sehr ähnlich sind, verhalten sich die übertragenen Wärmeströme wie unten dargestellt unterschiedlich. Durch die bessere Wärmeübertragung im Fall A fällt im weiteren Verlauf der Wasserstand im DE stärker (vergleiche schwarze und blaue Kurve). Die höhere Wärmeabfuhr führt zu einer stärkeren Wasserzufuhr von oben in den Kern und in der Folge zu einer Abkühlung der Hüllrohrtemperaturen.

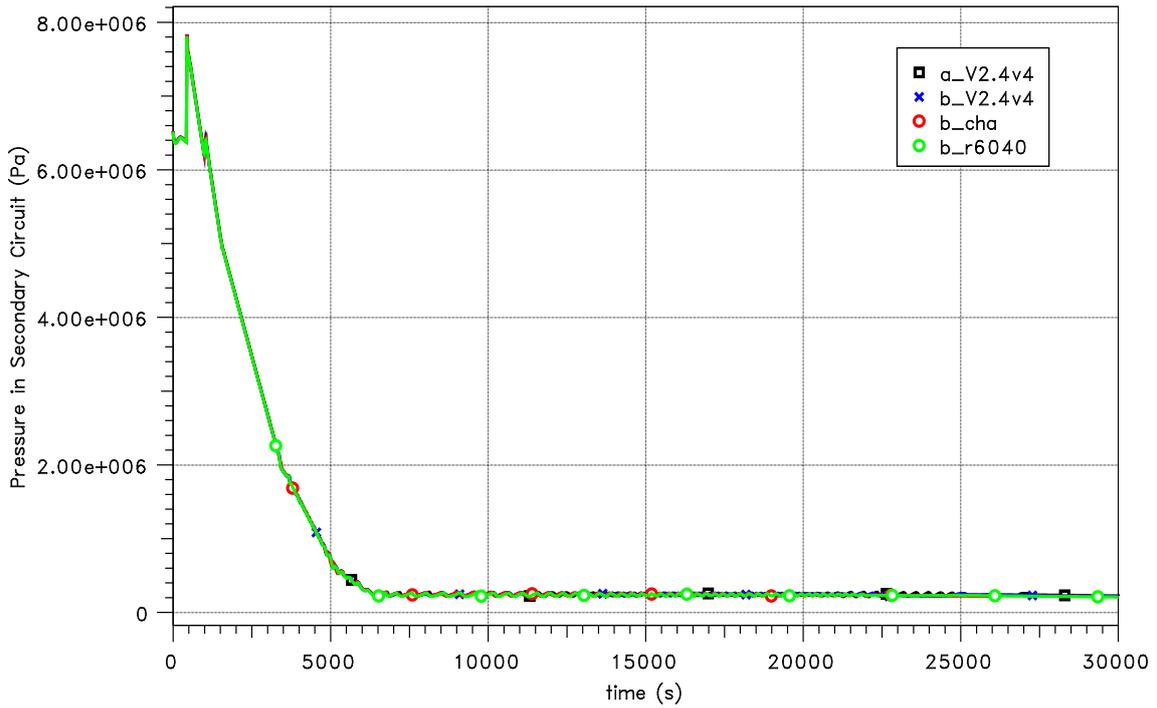


Abb. 7.9 AC²-Test: Druck im Dampferzeuger DE3

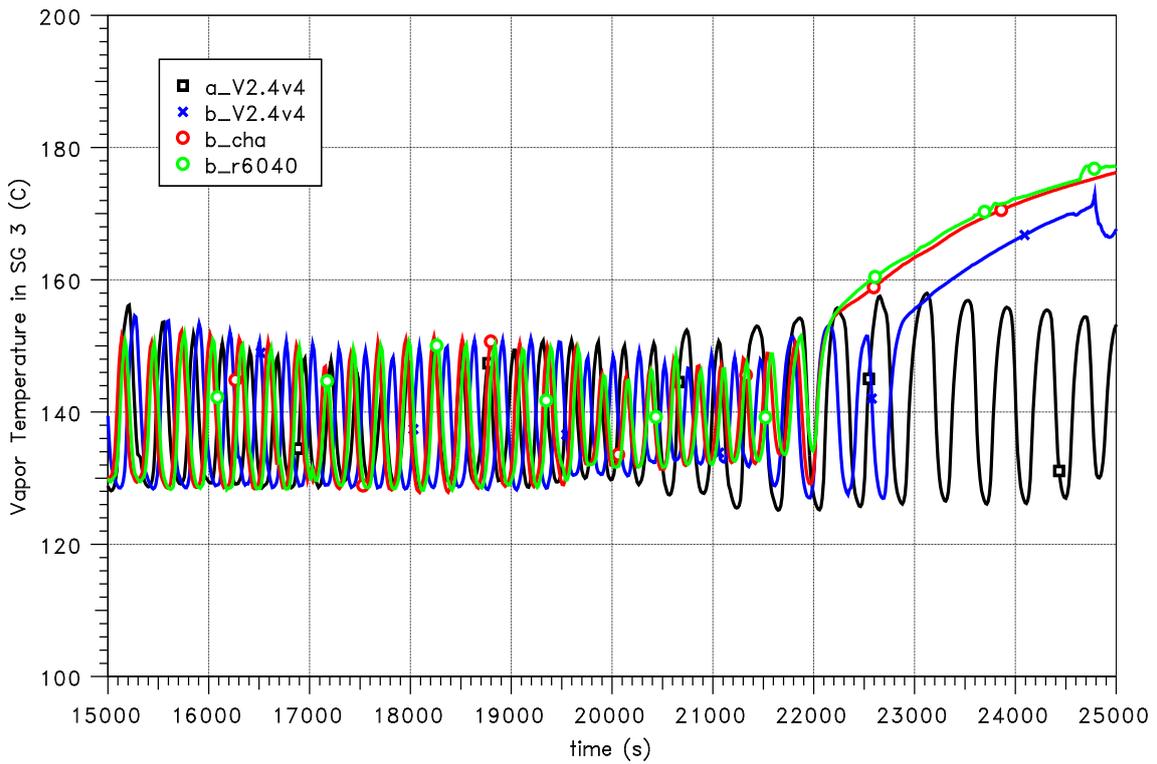


Abb. 7.10 AC²-Test: Dampftemperatur im Dom des DE3

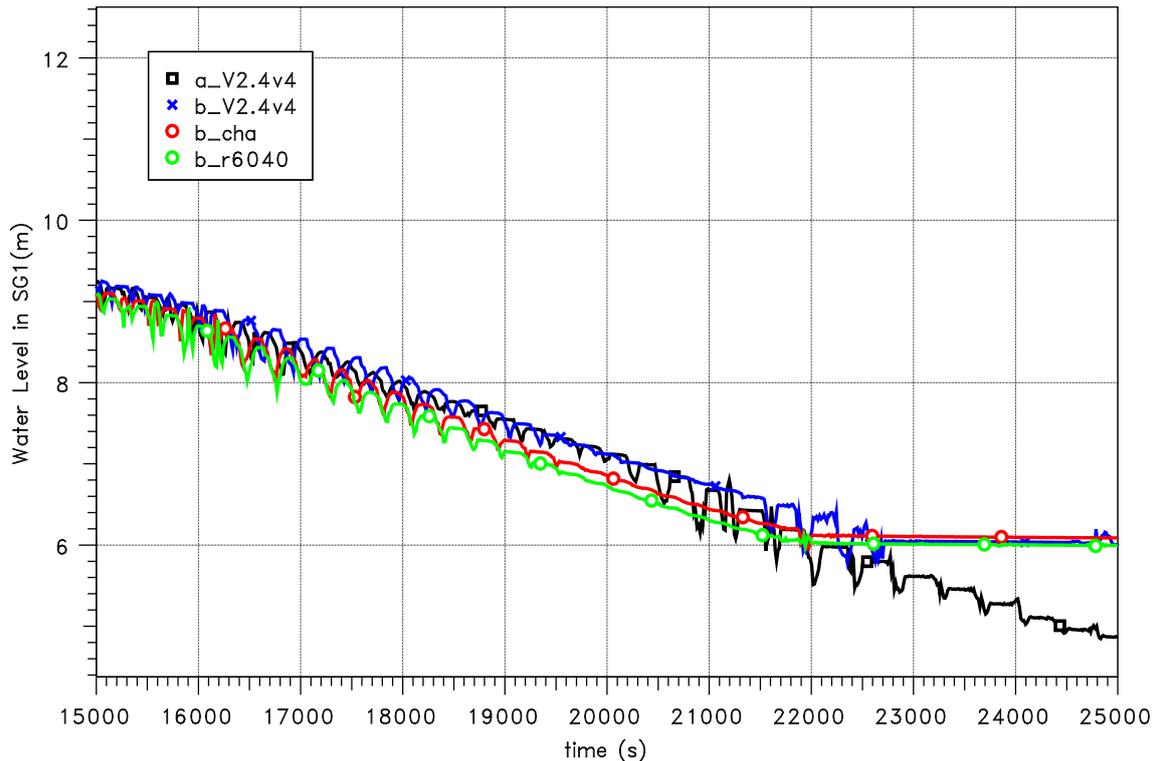


Abb. 7.11 AC²-Test: Wasserstand im DE3

Der Vergleich der berechneten Hüllrohrtemperaturen ist exemplarisch für den 10. Knoten für alle 4 Ringe in den Abb. 7.12 bis Abb. 7.15 dargestellt. Durch den etwas niedrigeren Wasserstand im RDB beginnt der Temperaturanstieg der Hüllrohre etwas früher. Die Zeitpunkte des Temperaturanstiegs sind für die Fälle B bis D praktisch gleich. Wie auch schon im Vorhaben RS1504 beobachtet und diskutiert, gibt es in den Fällen A und B einen Temperatureinbruch der Hüllrohrtemperaturen, wobei dieser im Fall B nur im ersten und vierten Ring beobachtet wird und der Einbruch nicht so stark ist. Insgesamt führt dies zu einer Verzögerung der Kernzerstörung. Obwohl sich die Fälle A und B sowie C und D nur minimal unterscheiden, gibt es erhebliche Unterschiede im Verlauf der Kernzerstörung.

Als Ursache für den Temperatureinbruch wurde der Wassereintrag in den Kern von oben identifiziert. Das heißt, in der entsprechenden Zeitphase liegt eine sogenannte Reflux-Situation in den heißseitigen Hauptkühlmittelleitungen vor. Im Reflux-Condenser-Betrieb erfolgt die Nachwärmeabfuhr über die Dampferzeuger durch Filmkondensation in den Wärmetauscherrohren. Das Kondensat fließt dann wieder in Gegenstrom zum aus dem Kern austretenden Gas/Dampfmassenstrom zum Kern zurück. Reflux-Condenser-Betriebsweisen sind sowohl für anlageninterne Notfallmaßnahmen als auch für die dabei auftretenden thermo- und fluiddynamischen Phänomene von besonderem Interesse.

Das Phänomen des CCFL (Counter Current Flow Limitation), das bei Reflux-Condensier-Betrieb auftreten kann, falls die Nachzerfallsleistung genügend groß ist, kann bei entsprechenden Abfahrgradienten schon früher auftreten. Zudem üben Inertgase einen starken Einfluss auf den Wärmeübertragungsprozess aus.

Für eine erste Analyse sind in den Abb. 7.16 bis Abb. 7.19 (vgl. Seite 373 f.) die Massenströme von Dampf (positiv) und Wasser (negativ) vergleichend gegenübergestellt. Deutlich ist zu sehen, dass der Wassereintrag und dementsprechend der Dampfaustrag im Fall A ab 20000 s höher ist und der Wassereintrag deutlich später stoppt. Der Fall B zeigt ein ähnliches, wenn auch deutlich weniger ausgeprägtes Verhalten.

Damit ein erhöhter Massenstrom möglich ist, muss dementsprechend der Wärmeaustausch in den Dampferzeugern höher sein. Dieses wird exemplarisch anhand des DE 3 aufgezeigt. Die Abb. 7.20 zeigt den totalen Wärmeübertrag der ersten Bündelgruppe im DE 3. Kurz vor 20000 s sind die Wärmeströme im Fall A höher und die Erhöhung dauert länger an. Der Fall B ist ebenfalls etwas höher als C und D, aber nicht so ausgeprägt. Obwohl die Wasserstände im DE im Fall A und B praktisch gleich sind, sind die berechneten Wärmeströme deutlich unterschiedlich.

In Abb. 7.21 und Abb. 7.22 (vgl. Seite 375) werden die Ergebnisse exemplarisch für den Knoten 6 der ersten Bündelgruppe verglichen. Hier treten ebenso deutliche Unterschiede auf. Dargestellt wird die Wärmeabfuhr aus dem anliegenden TFO, die Wärmeübergangskoeffizienten auf der linken und rechten Seite sowie die verwendeten Modelloptionen des Wärmeübergangs auf den jeweiligen Seiten. Im Fall A steigt der Wärmeübergangskoeffizient bei ca. 20000 s zeitweise auf sehr hohe Werte von $4000 \text{ W/m}^2\text{K}$, während in den anderen Fällen Werte von ca. $2500 \text{ W/m}^2\text{K}$ berechnet werden. Die Korrelationen zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten werden ausgehend von der Siedekurve unterschiedlichen Wärmeübergangsbereichen (Konvektions-sieden, Blasensieden, Filmsieden) zugeordnet, die durch das Strömungsregime und den enthalpiebezogenen Dampfgehalt charakterisiert sind. In den Auswertungen zeigt sich, dass in den Rechnungen zu gleichen Zeitpunkten unterschiedliche Regime und Korrelationen bestimmt werden. So wird im Fall A das Modell 26 (siehe Abb. 7.23) verwendet, während in den anderen Fällen die Option 16 verwendet wird.

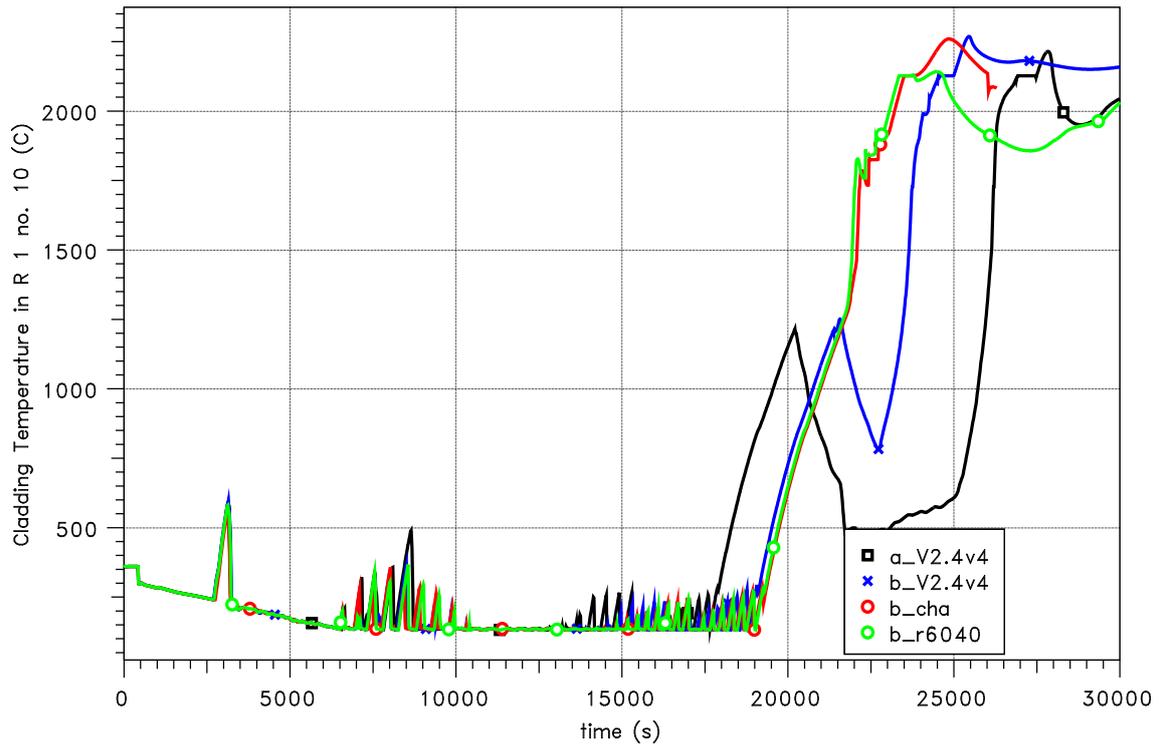


Abb. 7.12 AC²-Test: Hüllrohrtemperatur Ring 1 Knoten 10

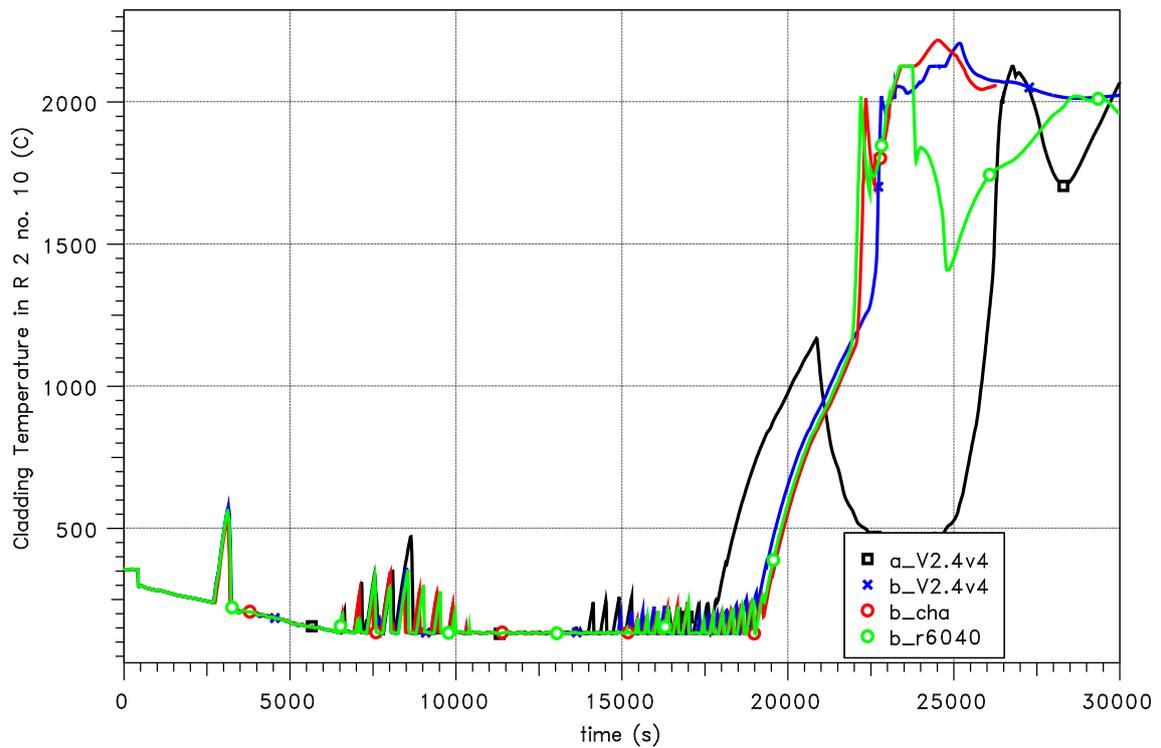


Abb. 7.13 AC²-Test: Hüllrohrtemperatur Ring 2 Knoten 10

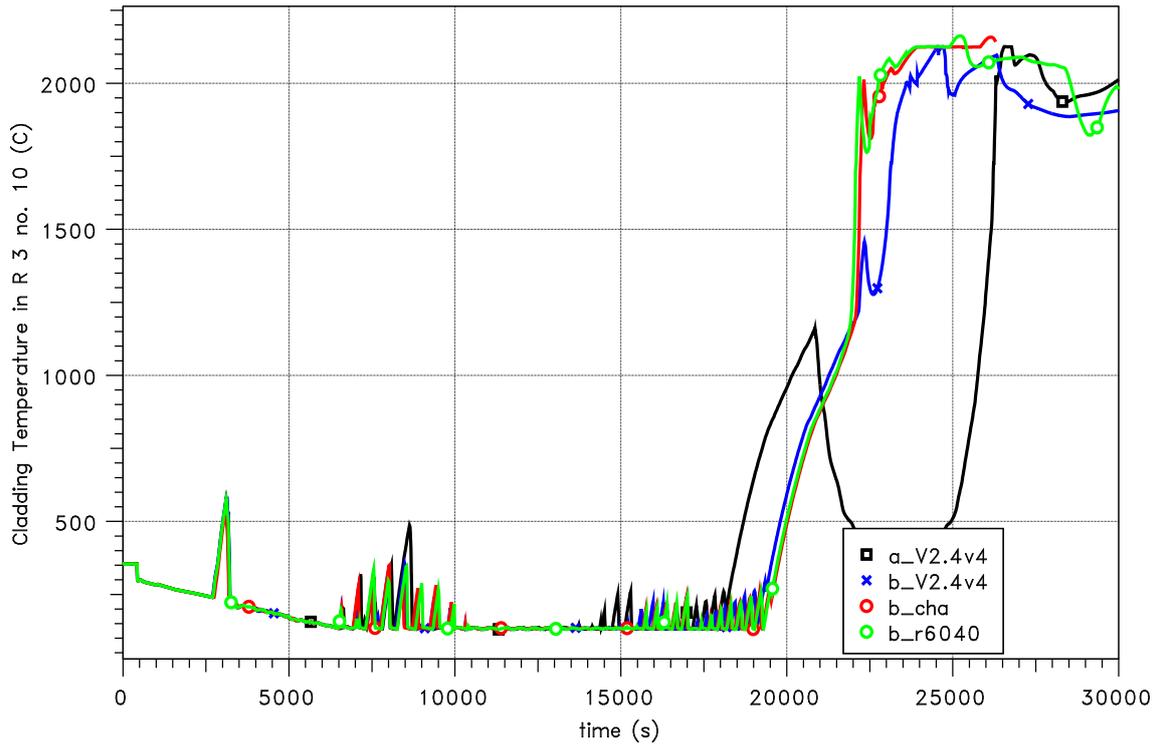


Abb. 7.14 AC²-Test: Hüllrohrtemperatur Ring 3 Knoten 10

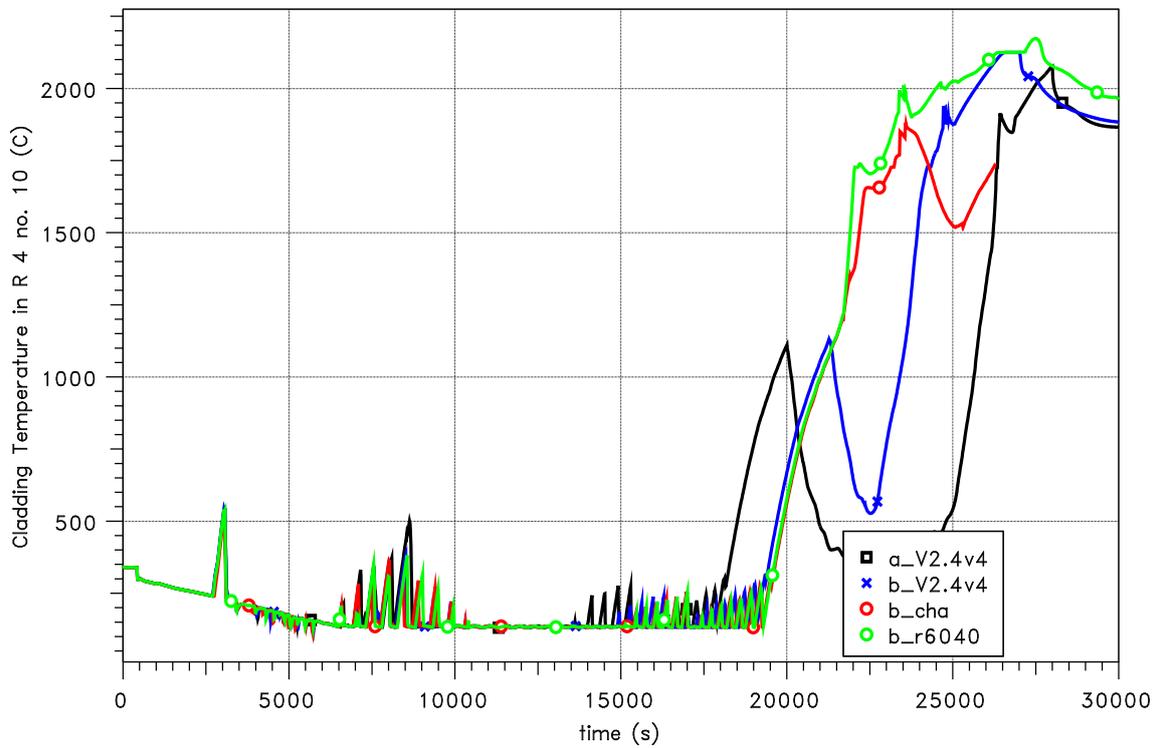


Abb. 7.15 AC²-Test: Hüllrohrtemperatur Ring 4 Knoten 10

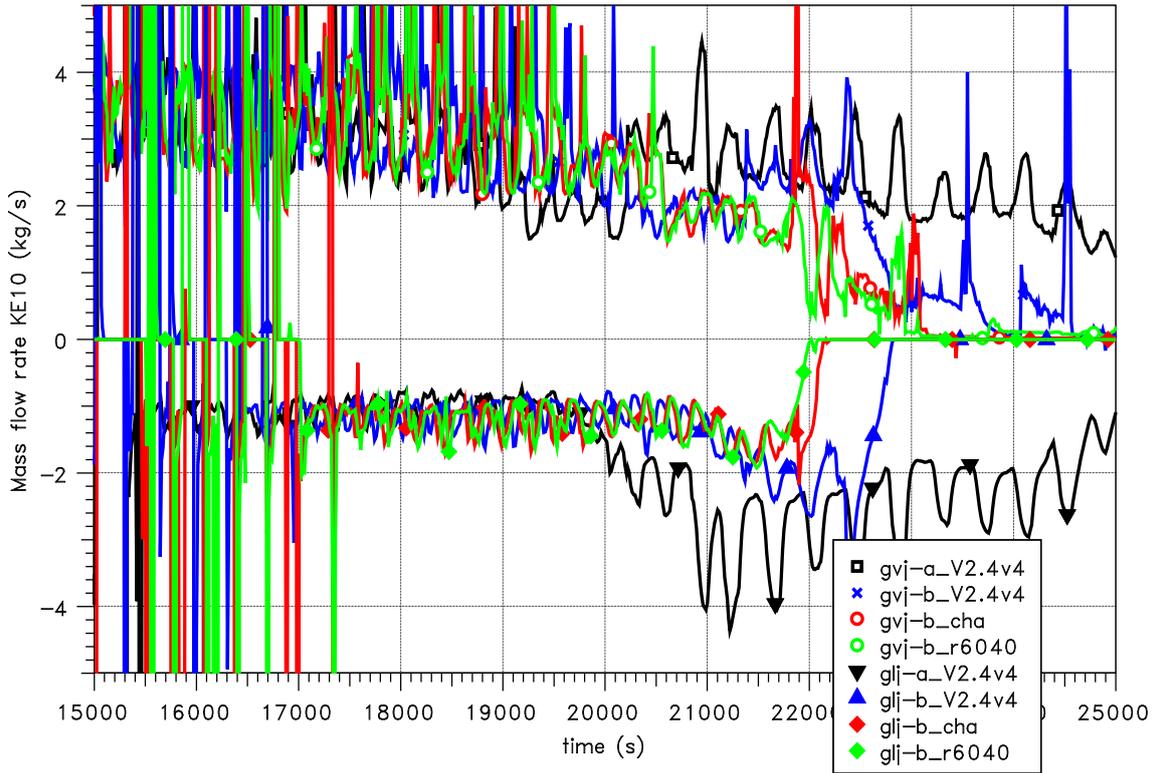


Abb. 7.16 AC²-Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 1

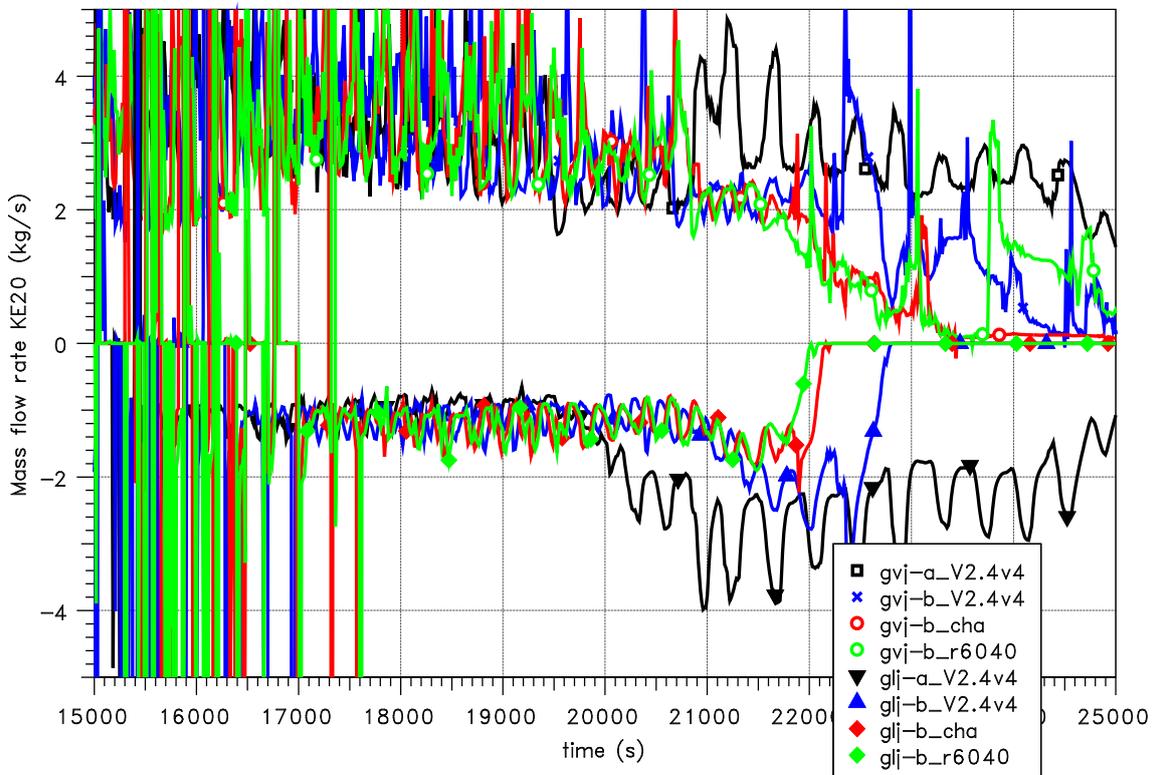


Abb. 7.17 AC²-Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 2

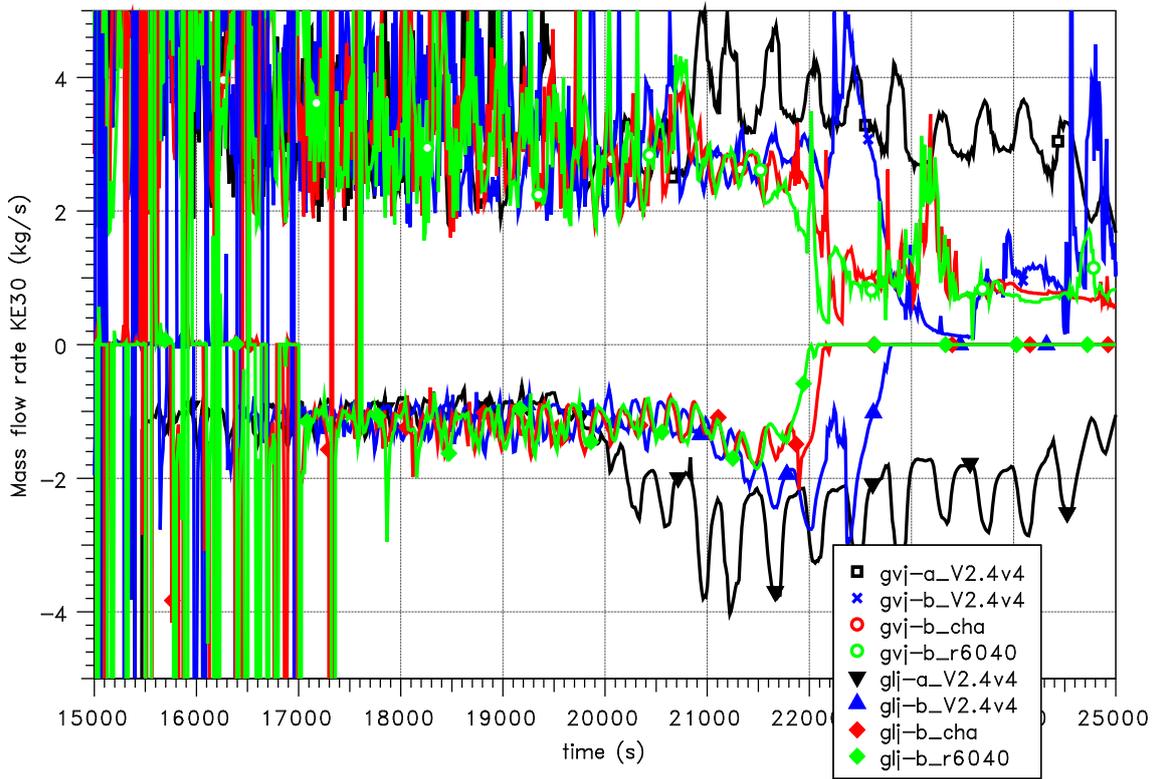


Abb. 7.18 AC²-Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 3

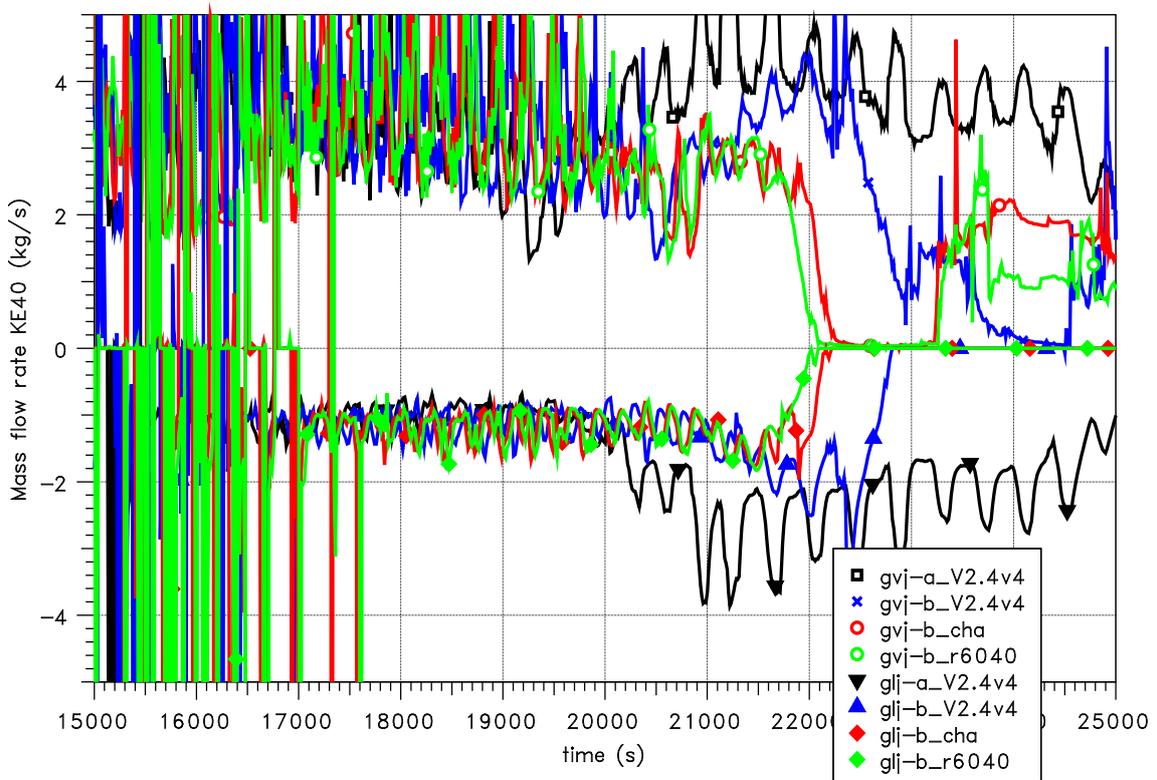


Abb. 7.19 AC²-Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 4

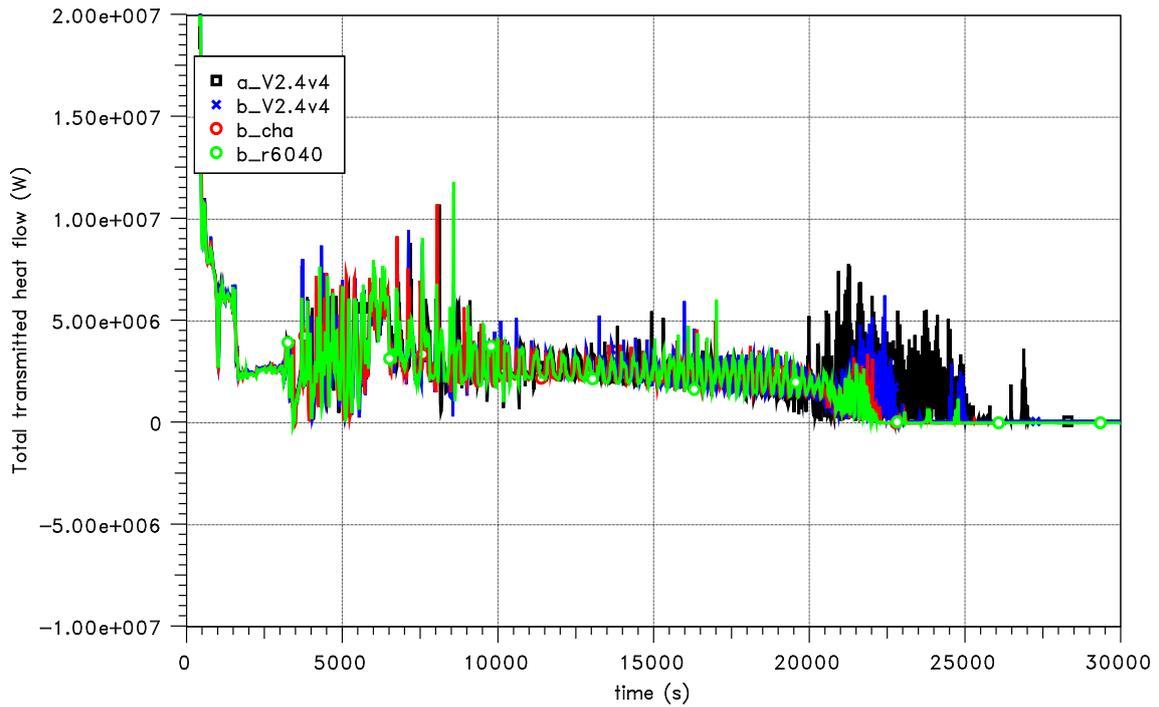


Abb. 7.20 AC²-Test: Totaler Wärmeübertrag über Heizrohre der Bündelgruppe 1 im DE3

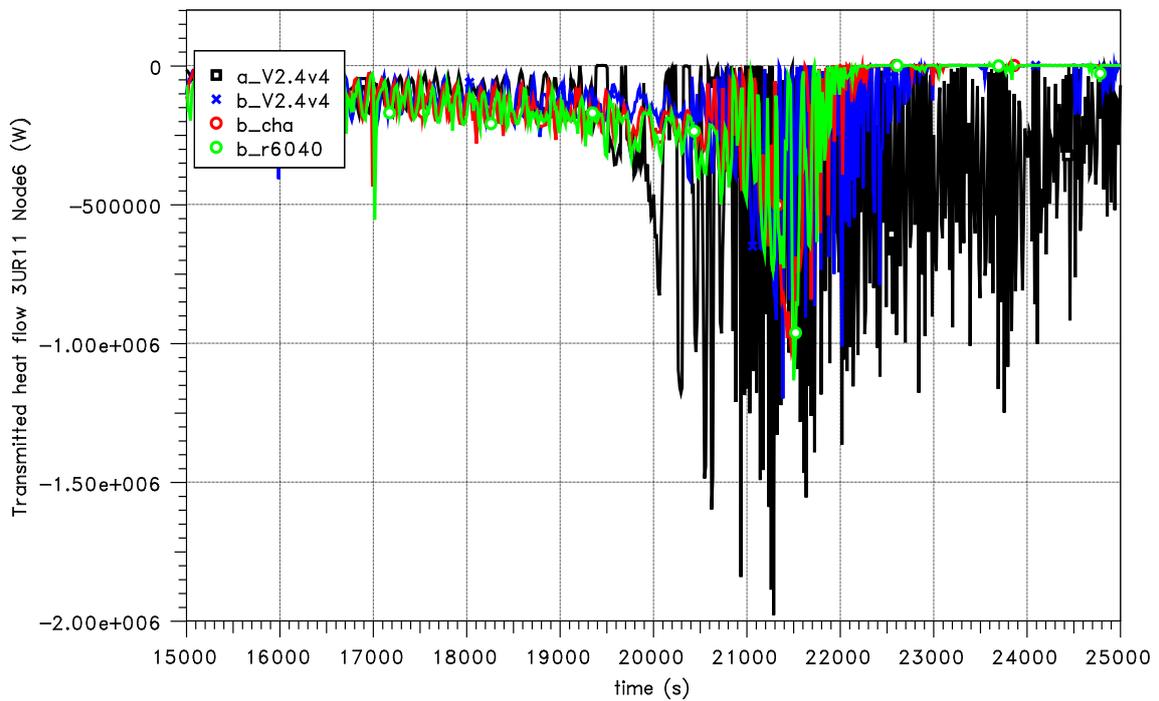


Abb. 7.21 AC²-Test: Wärmestrom über Heizrohr der Bündelgruppe 1, Knoten 6 im DE3

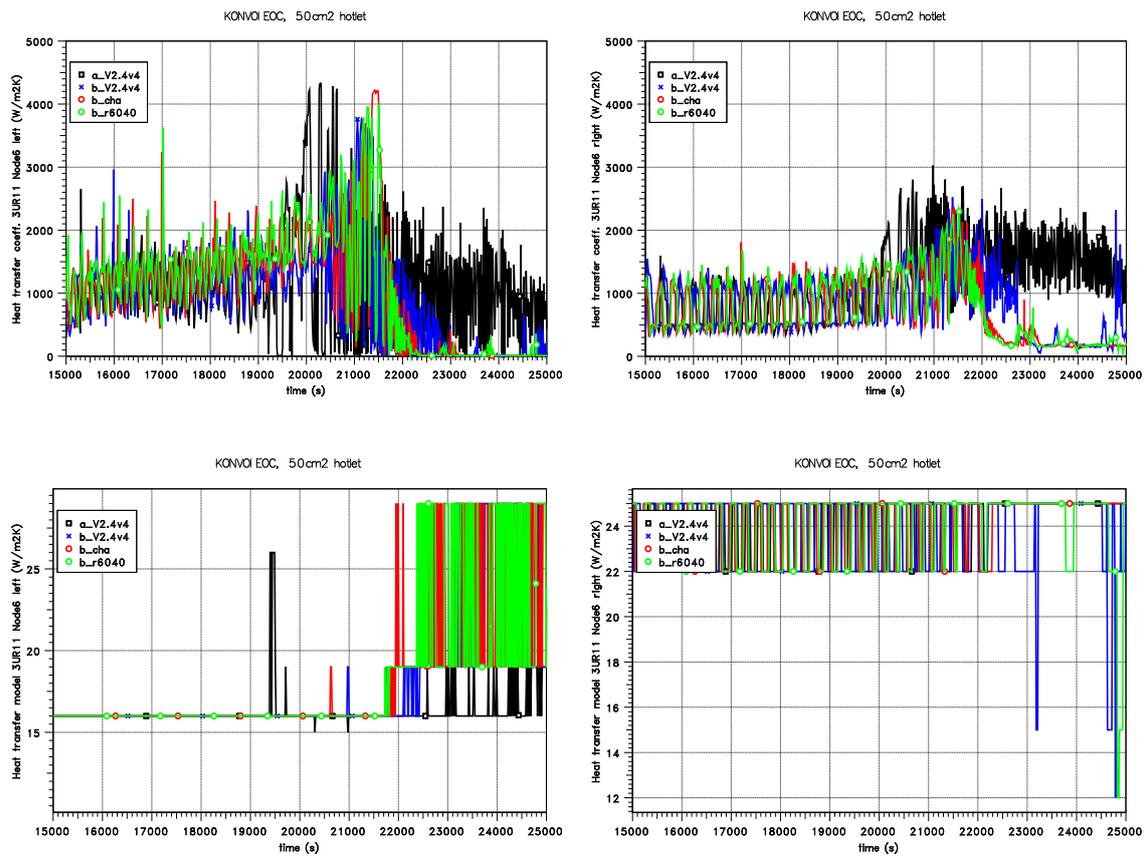


Abb. 7.22 AC²-Test: Vergleich der Wärmeübergangskoeffizienten und Modelloption

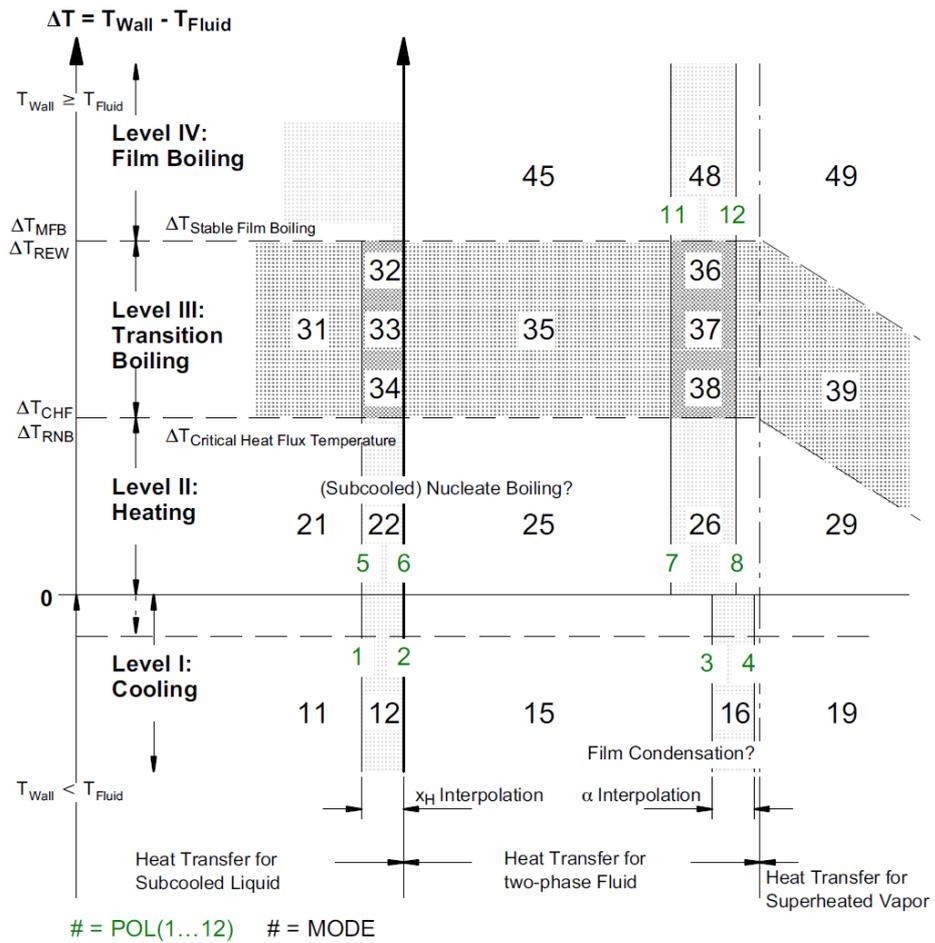


Abb. 7.23 AC²-Test: Modelloptionen von Wärmeübergangskorrelationen in ATHLET /ATH 16/

Der unterschiedliche Ablauf der Kernzerstörung hat natürlich auch erhebliche Auswirkungen auf die Wasserstoffbildung. Diese werden in Abb. 7.24 verglichen. Auffällig ist, dass die Fälle C und D sehr unterschiedliche Wasserstoffmengen berechnen.

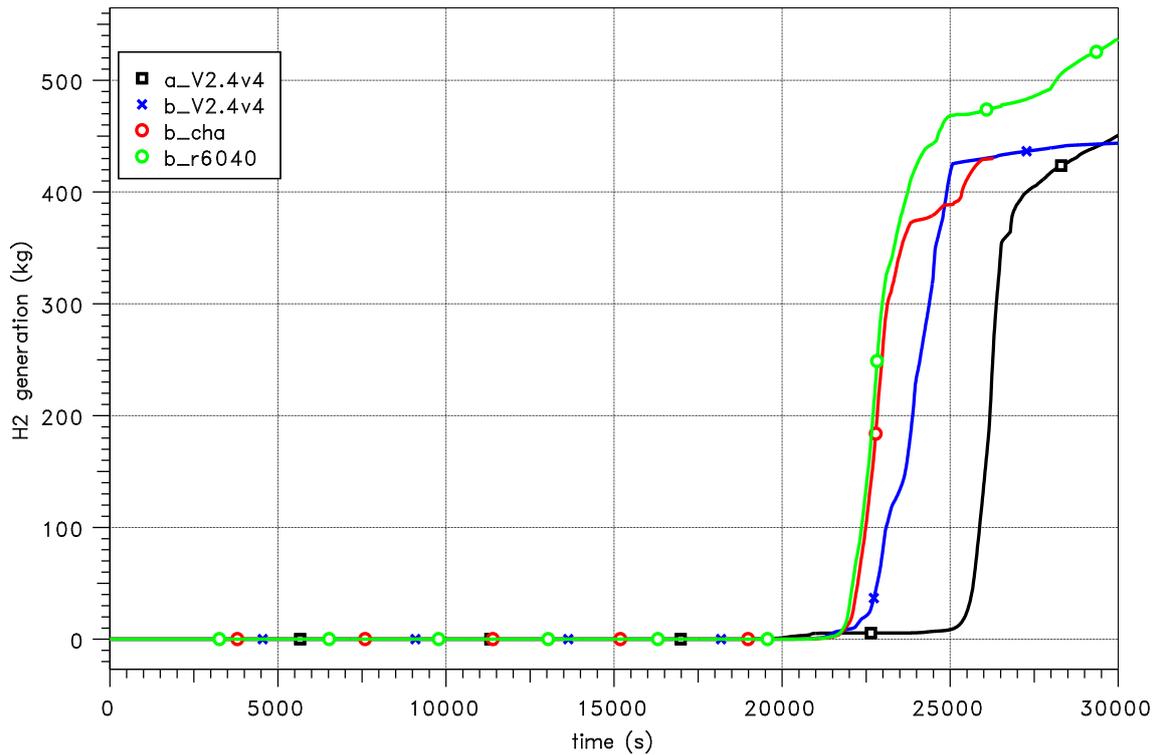


Abb. 7.24 AC²-Test: Vergleich der Wasserstoffbildung

Fazit

Um einen Ausgangspunkt für eine gekoppelte Rechnung mit dem neuen AC²-Programmsystem anhand eines Unfalls in einer Anlage vom Typ KONVOI zu erstellen, wurde eine Rechnung aus dem Vorhaben RS1504 wiederholt. Hierbei wurden erhebliche Unterschiede bei leicht unterschiedlichen Einstellungen bzgl. der Plotausgabe festgestellt und untersucht. Diese Änderungen im Datensatz haben in COCOSYS und somit über die Synchronisation auch in ATHLET-CD eine indirekte Auswirkung auf die Zeitschrittweite. Die in dieser Rechnung festgestellten Temperatureinbrüche der berechneten Hüllrohrtemperaturen wurden bereits im Vorhaben RS1504 beobachtet. Als wesentliche Ursache wurde der Wärmeübergang in den Dampferzeugern identifiziert. Die Rechenergebnisse sind sehr instabil und können daher mögliche Abhängigkeiten in Bezug auf die Zeitschrittweite aufweisen. Das Verhalten in den Rechnungen wird zukünftig mit der aktuellen Programmversion weiter untersucht.

7.2 Qualitätssicherung und Code Manuals

Für die korrekte Anwendung von COCOSYS ist ein Studium der sehr umfangreichen Dokumentation dringend angeraten. Eingabedatensätze können typischerweise einige

tausend bis zehntausend Zeilen enthalten. Zur besseren Lesbarkeit sind zudem meist entsprechende Kommentare eingepflegt. Damit insbesondere neue oder externe Anwender das Programm COCOSYS handhaben können, ist eine detaillierte und aktuelle Dokumentation erforderlich. Diese beinhaltet eine Beschreibung der zugrunde liegenden mathematisch, physikalischen Methoden, eine Beschreibung der Eingabegrößen und zunehmend auch Hilfestellungen zur Datensatzerstellung oder Fehlersuche in Form von Empfehlungen und Beispielen. Bezüglich COCOSYS wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

Das neue COCOSYS-User-Manual für die COCOSYS-Version 3.0 wurde komplett überarbeitet und vervollständigt, wobei die Arbeiten sowohl dem Entwicklungsvorhaben als auch dem Validierungsvorhaben zugeordnet werden. Das fast 1000-seitige Dokument steht mit Freigabe der Version AC² 2019 (7/2019⁸) als Bestandteil der COCOSYS-Dokumentation zusammen mit dem COCOSYS Reference Manual, dem COCOSYS Quality Assurance Handbook und dem COCOSYS Regression Testing Report zur Verfügung. Zeitgleich wurde mit der Überarbeitung der Dokumentation zum NEWAFP begonnen. Diese soll sukzessive, im Zuge der weitergeführten Entwicklung und Validierung, fortgeführt werden.

Neben der zentralen Sicherung der Eingabedaten wurde die Archivierung der experimentellen Daten (Berichte, Versuchsergebnisse) weiter fortgeführt. Im Sinne eines Wissensmanagementsystems sollen die Daten zentral gesammelt (z. B. analog zum Versionsverwaltungssystem für den Quellcode, CVS oder zukünftig GIT, jeweils versionsabhängig) und archiviert werden.

In 2018 wurde der üblicherweise zum Projektende durchgeführte COCOSYS-Workshop erstmalig als Bestandteil des neu geschaffenen AC²-Workshops organisiert. Dies hat neben organisatorischen Vorteilen insbesondere den, dass die zunehmend gekoppelten Anwendungen von externen Anwendern jetzt sowohl mit den in die ATHLET/-CD eingebundenen GRS-Mitarbeitern als auch mit den für COCOSYS verantwortlichen Mitarbeiter diskutiert werden können. Zudem wird ein besserer Gesamtüberblick über die Aktivitäten auch den Anwendern ermöglicht, die bisher nur ein Programm angewendet haben.

⁸ <https://www.grs.de/aktuelles/GRS-veroeffentlicht-neue-Version-des-Programmpaketes-AC2>

Schließlich wurde für die Dokumentation der Qualifizierung von COCOSYS die Überarbeitung des sogenannten Assessment Manual in Angriff genommen. Zukünftig wird das Manual auch Anwendungen des Gesamtpakets AC² beinhalten, um auch die Qualifizierung von gekoppelten Anwendungen und hier insbesondere mit Blick auf Analysen für ganze Anlagen zu dokumentieren.

8 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht fasst den aktuellen Stand der Validierung und Verifikation von COCOSYS als Modul des bei der GRS entwickelten Programmpakets AC² zusammen. Nachfolgend werden die wesentlichen Ergebnisse und Erkenntnisse, die im Rahmen dieses Vorhabens gewonnen worden sind, zusammengefasst.

Kopplung Iod-Chemie mit dem umstrukturierten AFP

Ein Schwerpunkt der Arbeiten betraf die Umstrukturierung des Moduls für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten AFP (zukünftig NEWAFP). In besonderem Maße mussten die Modelle für die Iodchemie in AIM überarbeitet, angepasst und einer Neuvalidierung unterzogen werden. Bezüglich der Iod/Stahl-Wechselwirkung unter trockenen Randbedingungen sind die Ergebnisse zwischen umstrukturiertem und ursprünglichem AFP/AIM gleich, so dass die Umstrukturierung erfolgreich durchgeführt wurde. Allein die experimentellen Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-18 sind teilweise zu hinterfragen. Zu beachten ist, dass die Nodalisierung mit nur einer Zone sehr einfach ist. Die Temperaturabhängigkeit der Iod/Stahl-Wechselwirkung wird somit nicht detailliert berücksichtigt. Diese könnte deutlich höher sein, als die Abhängigkeit von der Feuchte. Ebenso wird für die Berechnung der Reaktionskonstante, wie im ursprünglichen AFP-Modul auch, noch die Gastemperatur verwendet. Im neuen Modell ist es im Prinzip möglich, die von COCOSYS berechnete Oberflächentemperatur der jeweiligen Wandstruktur zu nehmen.

Zur Überprüfung des Iod-Farbe-Modells unter kondensierenden Bedingungen im neuen AFP-Modul wurde der THAI-Versuch Iod-21 wiederholt nachgerechnet. Die Modellierung unter kondensierenden Randbedingungen unterscheidet sich im neuen AFP-Modul erheblich von der ursprünglichen Version, da nun auch die Iodchemie im Wasserfilm sowie der Massentransfer zwischen Atmosphäre und Film simuliert werden. Ebenso werden nun die Flächenanteile (nass, trocken) durch COCOSYS berechnet. Die Ergebnisse zeigen zwar, dass alle maßgeblichen Phänomene jetzt berücksichtigt und Tendenzen teilweise besser getroffen werden, aber die Abweichungen teilweise noch erheblich sind und weiterer Untersuchungen bedürfen.

Das im Rahmen der Umstrukturierung von AFP neu implementierte Modell zur Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen einem Sprühsystem bzw. den Sprühtröpfchen und gasförmigem Iod wurde anhand des THAI-Versuches Iod-31 validiert. Die Auswertung der Ergebnisse der durchgeführten Nachrechnungen zeigen, dass mit dem neuen

Modell die gasförmige Iod-Konzentration im THAI-Behälter durch das Sprühen reduziert wird und das Iod in den Tropfen in den Sumpf transportiert wird; die Rechenergebnisse zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den Versuchsergebnissen.

Die THAI-Iodversuche unter kontrollierten thermohydraulischen Bedingungen in einer Mehrraumgeometrie stellen hohe Anforderungen an COCOSYS. Wesentliche Aspekte und ihre Wechselwirkungen bei einer Mehrraum-Modellierung konnten in COCOSYS modelliert und die Modelle validiert werden. Die Versuchsergebnisse zum Raumkettenversuch THAI Iod-33 bestätigen die mit COCOSYS-AFP/AIM vorhergesagten, sehr ausgeprägten Mehrraumeffekte auf die Ausbreitung und das Verhalten des Iods in der Containmentatmosphäre und in den Sümpfen. Der Modellierungsstand ist mit Blick auf Einzeleffekte als verstanden und validiert zu betrachten, bei Integralexperimenten sind die Wechselwirkungen weitestgehend bekannt, die für Lumped-Parameter-Programme typischen korrelativen Ansätze müssen aber noch besser aufeinander abgestimmt werden

Thermohydraulik-Modellvalidierung

Ein weiterer Arbeitspunkt beinhaltet die stetige Validierung von COCOSYS hinsichtlich thermohydraulischer Fragestellungen wie z. B. Schichtungsphänomene und Wasserstoffverbrennung. Die in COCOSYS verfügbaren Modelle werden auf Basis der Analysen bewertet und teils verbessert. Durch die enge Zusammenarbeit mit Becker Technologies im Rahmen der Begleitung der THAI-Experimente steht der GRS eine umfangreiche Datenbasis zu einer Vielzahl von Experimenten zur Verfügung. Neuere Experimente werden kontinuierlich für die COCOSYS-Validierung herangezogen und so die Validierungsmatrix aktuell gehalten und vervollständigt. Nachfolgend werden die erzielten Ergebnisse zu diesem Themengebiet zusammengefasst.

CO1-Modelloption zum Wärmeaustausch zwischen Atmosphäre und Strukturen

In COCOSYS steht mit der jetzt verfügbare Modelloption CO1 ein überarbeitetes Modell zur Berechnung des Wärmeaustausches zwischen Atmosphäre und festen Strukturen zur Verfügung, das insbesondere mit Blick auf die verwendeten dimensionslosen Kennzahlen und darin verwendeten charakteristischen Größen eine konsistente Beschreibung aller Wärmeübertragungsmechanismen ermöglicht. Obwohl es Unterschiede zu den bisher verwendeten Wärmeübergangsmodellen (FRC, FOC, CON, COD) im Vergleich zum CO1-Modell gibt, sind diese im Allgemeinen klein und akzeptabel. Dies zeigte

sich anhand der vergleichenden Analyse der Modelle für das THAI-Experiment TH-27. Im Rahmen der Erstellung neuer Datensätze wird bei Verfügbarkeit entsprechender Anlagendaten die Verwendung des CO1-Modells empfohlen, da das Modell wesentlich konsistenter aufgebaut ist und die realen Gegebenheiten besser wiedergibt, auch wenn der Effekt klein sein kann.

ATM_FULL-Modelloption für vollständig geflutete Zonen

Der neue Verbindungstyp ATM_FULL ermöglicht es, mit nur einem Verbindungstyp Gas- und Flüssigkeitsaustausch zwischen benachbarten oder übereinander angeordneten Zonen zu rechnen. Damit verbunden ist auch, dass Zonen vollständig mit Wasser gefüllt werden können und keine Gasphase mehr enthalten sein muss. Dies wurde erfolgreich an einer Beispielrechnung mit dem experimentellen Aufbau der „GES-Wanne“ demonstriert. Des Weiteren kann auch eine Temperaturschichtung (Stratifikation) besser berechnet werden. Dies wurde ebenfalls anhand einer Vergleichsrechnung mit einem Temperaturschichtungsexperiment an der „GES-Wanne“ nachgewiesen.

Wechselwirkung H₂-Verbrennung und Sprühsystemen

Die Verwendung des neuen Entrainment-Modells ermöglicht es, die von einem Sprühsystem durch die fallenden Sprühtropfen induzierte Atmosphärenbewegung und die damit verbundene verstärkte Verbrennung in der Anfangsphase zu berücksichtigen. Das Modell wurde anhand der Nachrechnung des THAI-Experimentes HD-30 einer Validierung unterzogen. Zwei gegenläufige Mechanismen konkurrieren miteinander. Einerseits die schon angesprochene verstärkte Atmosphärenbewegung, die tendenziell einen Verbrennungsvorgang verstärkt, andererseits die mit den Tröpfchen verbundene Abschwächung der Verbrennung. Letzteres kann auch mit den Entrainment-Modellen nicht hinreichend von COCOSYS simuliert werden. Weiterhin führt die zur Verwendung der Entrainment-Modelle notwendige spezifische Nodalisation zur Simulation des Sprühkegels zu signifikanten Veränderungen im Strömungsverhalten des Gases während der Verbrennung. Es werden in einzelnen Zonenverbindungen Strömungsgeschwindigkeiten von mehr als 200 m/s errechnet. Die Ursachen für diese hohen Geschwindigkeiten sind noch zu untersuchen. Dadurch, dass in COCOSYS gewünschte Strömungseffekte durch die Nodalisation erzeugt werden, kann es zu Konflikten zwischen den verschiedenen Anforderungen, die die zu untersuchenden Phänomene an die Nodalisation stellen, kommen. Hier sind weitere Analysen notwendig.

THAI-Inbetriebnahmeversuch TH-27

Die Beteiligung am TH-27-Benchmark zur Schichtungsbildung und Auflösung einer Leichtgaswolke kann als Bestätigung der sehr guten Qualität von COCOSYS gewertet werden. Insbesondere die blinde Vorausrechnung von Experimenten stellt die höchsten Anforderungen an das Programm. Bereits hier sind die charakteristischen Phasen ausgezeichnet prognostiziert worden. Weitere Verbesserungen konnten nach Freigabe der experimentellen Daten in der Nachanalyse erzielt werden. Es gilt die Erkenntnis, dass für eine korrekte Anwendung von COCOSYS, und dies gilt sicherlich für alle derartigen Programmsysteme, eine ausreichende Anwendererfahrung notwendig ist. Diesem Umstand trägt die GRS durch eine umfangreiche Dokumentation und Nutzerempfehlungen Rechnung, die gerade aus Analysen wie dieser abgeleitet werden.

Gekoppelte Rechnungen ATHLET/COCOSYS/CoPool

Da zukünftig vermehrt gekoppelte Anwendungen durchgeführt werden – umfangreiche Rechnungen sind bei der GRS, beginnend in 2011, für die Analyse der Unfälle in Japan vorgenommen worden und werden weitergeführt – ist eine stabile und konsistente Kopplung notwendig. Dem trägt die GRS auch durch Zusammenführung von ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS in das Programmpaket AC² Rechnung. Die Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS aufgrund der stetigen Weiterentwicklung wurde anhand entsprechender Testfälle bewertet. Hier waren zu Beginn Probleme schon in der In-Vessel-Kernzerstörungsphase identifiziert worden, die vorrangig bearbeitet worden sind. Dazu wurde das stark auf Korrelationen aufgebaute Modell der Kernverlagerung und anschließender Aufheizung der RDB-Wand mittels Parameteruntersuchungen hinsichtlich seiner Stabilität und Sensitivität analysiert. Mit Fortgang der Arbeiten wurde die Modellierung verbessert und die Analysen wurden durchgeführt. Das Modell erzeugt jetzt konsistente Ergebnisse.

Das von ITWM entwickelte Programm CoPool ist speziell für thermische Schichtungsphänomene in großen Wasserpools (Kondensationskammer beim SWR, Gebäudesumpf beim DWR) konzipiert. Der Entwicklungsstand ließ eine eingehende Analyse sowohl von CoPool als auch in der gekoppelten Version mit COCOSYS zu und wurde umfangreich bearbeitet. Im Vergleich zu den früheren Ergebnissen, ist der Vergleich zwischen ATHLET-COCOSYS (stand-alone) und ATHLET-COCOSYS-CoPool nun deutlich konsistenter. Wie zu erwarten, ist der Einfluss auf den Containmentdruck sehr gering, da das Gasvolumen sehr hoch ist. Um Instabilitäten im Rechenergebnis zu vermeiden,

musste die maximal mögliche Zeitschrittweite reduziert werden, was zu einer entsprechend längeren Rechenzeit von ca. 2 Wochen auf einem PC führte. Ebenso wurde das Gitter verfeinert (Faktor 4). Aktuell wird aber das CoPool-Programm weiter beschleunigt, so dass hier noch Verbesserungen zu erwarten sind. So wurde die mögliche Parallelisierung des SAMG-Lösers noch nicht genutzt. Der Einfluss der Zeitschrittweite auf ATHLET-Ergebnisse sollte weiter untersucht werden.

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (UaSA)

Die Ergebnisse der UaSA-Analyse für das OECD-Experiment CCI-3 zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung zeigen, dass die statistischen Toleranzintervalle und die Beiträge einzelner unsicherer Eingabeparameter zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse signifikant durch die Modellierung des experimentellen Artefakts von Krustenbildung an der Schmelzeoberfläche beeinflusst werden. Aus der vorliegenden UaSA-Analyse lässt sich auch schließen, dass die Unsicherheitsbereiche der CCI-Modellierung effektiv durch die Verbesserung des Kenntnisstandes der Betonzerstörungstemperatur reduziert werden können, d. h. durch Eingrenzung des Wertebereichs dieses unsicheren Parameters.

- Basierend auf den Sensitivitätsanalysen wurde festgestellt, dass insgesamt 5 unsichere Eingabeparameter einen dominanten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse haben. Der Einfluss der übrigen Eingabeparameter wird als unwesentlich betrachtet (Korrelationskoeffizient $< |0,2|$) und kann daher vernachlässigt werden.
- Die Analyseergebnisse zeigen, dass die Beiträge der Betonzerstörungstemperatur und -enthalpie sowie der Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze (Betonwände und Schmelzeoberfläche) den größten Einfluss auf die ausgewählten Rechenergebnisse haben. Dabei wurde festgestellt, dass der Beitrag der unsicheren Eingabeparameter zur Unsicherheit der ausgewählten Ergebnisgrößen (Code-Rechenergebnisse) von den experimentellen Phasen, d. h. der transienten und quasistationären Phase, signifikant beeinflusst wird.
- Ein wichtiges Ergebnis der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse besteht darin, dass für jedes Experiment alle 100 Rechnungen mit breit angelegter Parametervariation ohne Programmabbruch durchgelaufen sind, was die Robustheit des CCI-Hauptmoduls von COCOSYS demonstriert.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die hier durchgeführten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen eine wichtige Grundlage für eine mögliche dritte UaSA darstellen, die sich auf die Anwendung der SUSA-Software für ein realistisches Unfallszenario in einer Druckwasserreaktoranlage konzentrieren soll.

Internationale Aktivitäten

Die Beteiligung an internationalen Forschungsvorhaben seitens der OECD oder der EU versetzt die GRS in die Lage, den internationalen Stand des Wissens und der Technik aktiv mitzugestalten und ihre Programme im internationalen Rahmen zu testen und identifizierte Lücken in den Modellen zu identifizieren, auch anhand von begleitenden Analysen zu validieren.

OECD-Projekte THAI, BIP, STEM

Ein erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS wird aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen und aus weiteren Aktivitäten gezogen. Dazu zählen insbesondere Aktivitäten der OECD (z. B. WGAMA – Working Group on the Analysis and Management of Accident, THAI – Thermal-hydraulics, Hydrogen, Aerosols and Iodine, BIP – Behaviour of Iodine Project und STEM – Source Term Evaluation and Mitigation). Im Rahmen der Beteiligung hat die GRS erfolgreich an Auslegungs-, Voraus- und Nachrechnungen von Experimenten insbesondere zur Iodchemie teilgenommen. Diese betrafen die Freisetzung von Iod aus einem siedenden Pool (THAI Iod-32), sowie die Wiederfreisetzung von Iod infolge einer Wasserstoffverbrennung (THAI Iod-34). Eine Bewertung der Rechnungen kann erst nach Freigabe und Analyse der Ergebnisse erfolgen.

Zur Modellierung von Verbrennungsvorgängen wird in COCOSYS das FRONT-Modell verwendet, das die Verbrennung von zündfähigen Atmosphärenzusammensetzungen (Luft, Dampf, H₂, CO) und die Ausbreitung der Verbrennungsfront durch die Raumbereiche berechnet. Das Modell wurde im Rahmen der Beteiligung am Benchmark zum Experiment OECD-THAI HD-44 validiert, wobei es eine blinde und eine offene Nachrechnungsphase gab. Im Experiment wurde durch einen Lüfter eine Anfangsströmung in der Anlage induziert, um den Einfluss der Strömung auf die Verbrennung zu untersuchen. Bei Verwendung eines hinreichend feinen Datensatzes können die entsprechenden Prozesse der Verbrennungsexperimente und hier insbesondere der zeitliche Verlauf der Flammenfront durch die Anlage THAI+ gut abgebildet werden. Probleme bei der

Simulation des Experiments ergaben sich nur zum Teil aus der Modellierung der Wasserstoffverbrennung selbst (Turbulenz im Zündbereich), vielmehr stellte sich das für den Versuch verwendete Lüfter-Modell in COCOSYS als nur bedingt anwendbar dar. Dieses Modell ist zur Simulation von Lüftungssystemen, wie sie typischerweise in Containments von Kernkraftwerken installiert sind, kann die sehr spezielle Konfiguration des freistehenden einzelnen Lüfters in der THAI-Anlage nicht in vollem Umfang nachbilden.

EU-Projekt CESAM

Die Beteiligung an Vorhaben der EURATOM, dem Forschungs- und Ausbildungsprogramm der Europäischen Atomgemeinschaft, ist ein weiteres wichtiges Instrument bei der Einbindung der GRS in die internationale Forschungslandschaft. Im Rahmen des von der GRS koordinierten Vorhabens CESAM zur Weiterentwicklung und Anwendung von ASTEC konnte die GRS wichtige Beiträge zur Erreichung der angestrebten Ziele liefern. Diese bestanden insbesondere in der Erstellung eines Datensatzes für einen generischen Siedewasserreaktor (SWR), wodurch die ursprünglich auf Druckwasserreaktor-Anwendungen fokussierte Entwicklung von ASTEC auch auf SWR erweitert worden ist. Die Kooperation von IRSN und GRS zur Entwicklung von ASTEC ist mit Beendigung von CESAM in beiderseitigem Einvernehmen beendet worden. Die GRS wird ihre Aktivitäten zukünftig allein auf die Weiterentwicklung von AC² konzentrieren.

Regressionstesten & Validierungsmatrix COCOSYS

Die Arbeiten zum Regressionstesten und zur Validierungsmatrix sind eng verknüpft. Üblicherweise stellen die Experimente für das Regressionstesten einen Teilbereich der gesamten Validierungsmatrix dar. Ersteres wird zyklisch und weitestgehend automatisiert mit Fortgang der Entwicklung wiederholt durchlaufen, die Ergebnisse zweier aufeinanderfolgender Codeversionen untereinander und mit den experimentellen Daten verglichen, um schon während der Entwicklungsphase Inkonsistenzen und mögliche unbeabsichtigte Wechselwirkungen der Modelle zu identifizieren und frühzeitig die Qualität der Modellentwicklung zu bewerten. Die Validierungsmatrix hingegen ermöglicht in ihrer Gesamtheit einen Überblick über das Spektrum der untersuchten Phänomene und die dafür herangezogenen Experimente. Dabei vervollständigen zunehmend auch Aktivitäten externer Anwender die Matrix. Sie stellen ein zusätzliches Qualitätsmerkmal dar. Die Daten werden zentral gespeichert und stehen dann auch zukünftig für entsprechende Validierungsaktivitäten zur Verfügung.

Anwenderunterstützung & Qualitätssicherung COCOSYS

Zum Gesamtpaket Programmentwicklung und -validierung gehören auch die Dokumentation und die Anwenderunterstützung. Dazu werden die entsprechenden Dokumente kontinuierlich aktualisiert und vervollständigt und bei kommunizierten Problemen externer Anwender Unterstützung bei der Fehlersuche geboten. Zum Dokumentationspaket gehören das User-Manual, die Dokumentation zum Regressionstesten sowie das Handbuch zur Modellbeschreibung.

Zur fachlichen Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen hat das Managementsystem der GRS eine neue, übergeordnete Richtlinie für die Entwicklung, Verifizierung und Validierung von Computerprogrammen in der GRS erstellt. Details der Umsetzung dieser Richtlinie sind im QS-Plan des jeweiligen Softwareentwicklungsprojektes festgelegt. An ihr orientieren sich die jeweiligen Arbeiten im Rahmen der Entwicklung und Validierung. Das dazu erstellte Qualitätshandbuch vervollständigt die codebegleitende Dokumentation.

Abschließendes Fazit

Die im Rahmen des Forschungsvorhabens durchgeführten Validierungs- und Anwendungsrechnungen mit COCOSYS und dem deutsch-französischen Integralcode ASTEC im Rahmen des EU-Vorhabens CESAM haben einen signifikanten Beitrag zur weiteren Qualifizierung der Programme geleistet. Es zeigt sich, dass mit COCOSYS ein international als führend angesehenes Werkzeug für die Simulation schwerer Störfälle im Sicherheitseinschluss zur Verfügung steht. Dies betrifft insbesondere auch die Modellierung des Spalt- und Aerosolverhaltens und hier speziell der Iodchemie. Letztere stellt im internationalen Vergleich ein Alleinstellungsmerkmal von COCOSYS dar. Hier ist die Umstrukturierung des Moduls AFP und die Kopplung mit dem Iodmodul AIM so weit fortgeschritten, dass die Validierung einzelner Modelle an entsprechenden Experimenten durchgeführt werden konnte. Ebenso ist die Validierung neuer oder verbesserter Ansätze zur Modellierung thermohydraulischer Phänomene fortgeführt worden, sie entspricht dem aktuellen Stand der Technik und wurde eindrucksvoll z. B. bei der Beteiligung an Benchmark-Aktivitäten unter Nachweis gestellt.

Die im Rahmen der Beteiligung am EU-Projekt CESAM durchgeführten Validierungs- und vor allem Anwendungsrechnungen mit dem deutsch-französischen Integralcode ASTEC haben einen signifikanten Beitrag dazu geleistet, die Rolle von ASTEC als

Rückgrat der EU-geförderten Aktivitäten zu schweren Störfällen zu stärken. Hier konnte die GRS insbesondere mit der Erstellung eines Datensatzes für einen generischen SWR einen wichtigen Beitrag liefern. Dadurch ist die ursprünglich auf Druckwasserreaktor-Anwendungen fokussierte Entwicklung von ASTEC auch auf SWR erweitert worden. ASTEC wird heute bei IRSN allein weiterentwickelt.

Die Anwendungsrechnungen mit den gekoppelten Programmen ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS (letzteres auch gekoppelt mit dem ITWM-Programm CoPool) zeigen, dass die Anforderungen an die Modellierung sowie die Kopplung der Module untereinander deutlich höher sind als bei der Simulation von Experimenten. Auch hier konnte ein deutlicher Fortschritt erzielt werden. Es bedarf aber weiterhin intensiver Begleitung der Entwicklung.

Im Nachfolgevorhaben sollen die Aktivitäten nahtlos fortgesetzt werden. Neben der fortgesetzten Validierung bzw. Qualifizierung neu entwickelter oder verbesserter Modelle in COCOSYS betrifft dies zunehmend auch die Bewertung der Modellbasis bei Anwendungen auf innovative Systeme einschließlich neuer fortschrittlicher Reaktorkonzepte. Der gezielten Anwendung von COCOSYS im Rahmen gekoppelter Rechnungen mit AC² für generische Anlagenrechnungen wird weiterhin Rechnung getragen, um die Qualifizierung des Gesamtsystems AC² voranzutreiben und den Entwicklungsfortschritt zu dokumentieren. Weiterhin trägt die Mitarbeit in nationalen und internationalen versuchsbegleitenden Arbeitsgruppen insbesondere der OECD/NEA zur Qualifizierung bei. Dadurch leistet die GRS einen substantiellen Beitrag zur Gestaltung der Reaktorsicherheitsforschung, national wie international, und zur Aufnahme aktueller Fragestellungen für die Codeentwicklung und Validierung aller Programme in AC².

Literaturverzeichnis

- /ALL 03/ Allelein, H.-J. et al.: Fortsetzung der Validierung des Containment-Code-systems COCOSYS und des deutschfranzösischen Integralcodes ASTEC, Teil 2: Fortsetzung der COCOSYS Validierung, GRS-A-2961, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2003.
- /ALL 07/ Allelein, H.-J. et al.: Intensivierte Validierung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, GRS-A-3330, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2007.
- /ARN 16/ Arndt, S. et al.: Regression testing for COCOSYS V2.4v4, Rev. 1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Berlin, Juni 2016.
- /ARN 17/ Arndt, S.: COCOSYS validation by WAFT-ALISA tests – status of activities & preparation presentation at the ALISA 3rd Review Meeting, KIT Karlsruhe, October 10/11, 2017.
- /ARN 18/ Arndt, S.: Set-up of a COCOSYS input deck for the WAFT test facility, Technical Note GRS - V - RS 1544 - 1/2018, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Berlin, May 2018.
- /ARN 19/ Arndt, S. et al.: Regression testing for COCOSYS 3.0.0, Technical Report, Köln, 2019.
- /ATH 16/ ATHLET Models and Methods, GRS-P-1 / Vol. 3 Rev. 4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, März 2016.
- /BAK 18/ Bakalov, I., Spengler, C.: Uncertainty and sensitivity analysis of the MCCI module in COCOSYS, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, August 2018.

- /BAN 15/ Band, S., Kowalik, M., Sonnenkalb, M.: Sicherheits- und Risikofragen im Nachgang zu den nuklearen Stör- und Unfällen in Japan, Technischer Bericht zu thermohydraulischen Untersuchungen, GRS-A-3652, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2015.
- /BAN 18/ Band, S. et al.: Unfallablauf- und Quelltermanalysen zu den Ereignissen in Fukushima im Rahmen des OECD/NEA BSAF-Projektes Phase II, GRS 485, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2018.
- /BAN 19/ Band, S.: HD-44 blinde und offene Nachrechnungen und HD-36 Nachrechnung, Technische Notiz, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2019.
- /BES 18/ Beck, S., Klein-Heßling, W.: Der I2/Spray-Effekt in Iod-31, Technische Notiz, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, August 2018.
- /BOS 19a/ Bosland, L. et al.: Recommendations from BIP-3 and STEM-2 Analytical Working Groups (AWG), AWG BIP-3 und STEM-2, Januar 2019.
- /BOS 19b/ Bosland L. et al.: Results of the STEM-2 Analytical Work Group (AWG), AWG STEM-2, Januar 2019.
- /BRO 11/ Broxtermann, P.: Simulation of AP1000's passive containment cooling with the German containment code system COCOSYS, 20. International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovenia, September 2011.
- /COL 14a/ Colombani, J. et al.: AER-7 STEM/EPICUR test report, Formation and release of volatile iodine species from iodine oxide aerosols under radiation, STEM No. 15, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), January 2014.
- /COL 14b/ Colombani, J. et al.: AER-4, AER-5 and AER-6 STEM/EPICUR test report, Formation and release of volatile iodine species from CsI aerosols under radiation, PLEIADE PSN-RES/SEREX/2013-00616, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), January 2014.

- /COL 14c/ Colombani, J. et al.: AER-11 STEM/EPICUR test report, Formation and release of volatile iodine species from Csl aerosols under radiation, STEM No. 16, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), Juli 2014.
- /COL 15/ Colombani, J. et al.: AER-8, AER-9 and AER-10 STEM/EPICUR test report, Formation and release of volatile iodine species from iodine oxide aerosols under radiation, STEM No. 21, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), April 2015.
- /EVA 97/ Evans, G. J. et al.: Iodine behavior in Containment – Interfacial Transfer of iodine in Containment, ACEX TR-B-05, July 1997.
- /FRE 15/ Freitag, M. et.al.: Auslegungsbericht für doppelblinde Simulationen des THAI-Versuchs TH-27, Inbetriebnahmetest der THAI+ Anlage: Teil 1 Naturkonvektion mit Dampfeinspeisung und Kondensation, Becker Technologies, Frankfurt, 2015.
- /FRE 16/ Freitag, M.: Vergleichsbericht zum Inbetriebnahmeversuch der Zwei-Behälter-Konfiguration, Versuch TH-27, Becker Technologies, Frankfurt, 2016.
- /FRE 17a/ Freitag, M. et al.: Benchmark exercise TH-27 on natural convection with steam injection and condensation inside the extended THAI-facility, in: Proceedings 8th European Review Meeting on Severe Accident Research – ERMSAR-2017, Warsaw, P, May 2017.
- /FRE 17b/ Freitag, M. et al.: Untersuchung von thermohydraulischen Phänomenen bei Kernschmelzszenarien in einem DWR-SHB, Versuch TH-29, Technical Report 1501455-TR-TH29, Becker Technologies, Frankfurt, 2017.
- /FRE 17c/ Freitag, M. et al.: Experimental and Analytical Investigations of Aerosol Processes - Wash-out and Wash-down, 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor. Thermal Hydraulics. (NURETH-17). Xi'an, China. 3 – 8 September 2017.

- /FRE 18a/ Freitag, M. et al.: Experimental and Analytical Investigations of Aerosol Processes – Wash-Out and Wash-Down, Nuclear Science and Engineering, 193:1-2, 198-210, DOI: 10.1080/00295639.2018.1479091, Juli 2018.
- /FRE 18b/ Freitag, M., Sonnenkalb, M.: Comparison Report for Blind and Open Simulations of HR-49 Passive autocatalytic recombiner operation under counter current flow conditions (Test ID HR-49), Reactor Safety Research Project 150 1516, OECD-NEA THAI-3 Project, 150 1516-CR-HR-49, Becker Technologies GmbH, May 2018.
- /FRE 19/ Freitag, M. et al.: Hydrogen combustion and flame propagation in two-compartment system (Test series HD-40 – HD-45), Reactor Safety Research Project 150 1516 OECD-NEA THAI-3 Project Technical Report, 2019.
- /FUN 16/ Funke, F. et al.: Iodine Washout from Containment Atmosphere by Spray Test ID: Iod-31, Technical Report, Feb. 2016.
- /GAU 17a/ Gaus-Liu, X. et al.: Access to Large Infrastructures for Severe Accidents (ALISA project) ALISA-MGT-M04 - Minutes of the 3rd ALISA Review Meeting KIT, Karlsruhe, October 10-12, 2017.
- /GAU 17b/ Gaus-Liu, X. et al.: The Progress of ALISA Project: Access to Large Infrastructures for Severe Accidents in Europe and in China, 8th Conference on Severe Accident research (ERMSAR 2017), Warsaw, May 2017.
- /GES 10/ Grieme, S., Fischer, K.: Versuche zur mehrdimensionalen Temperaturmessung bei Kalt- und Warmwassereinspeisung in eine Stahlwanne, GES Technischer Bericht Nr. 9/12, GES, Januar 2010.
- /GRS 15/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: COCOSYS V2.4 User's Manual, Köln, 2015.

- /GRS 18/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Managementhandbuch, Kap. 4.4 QM-Richtlinie Programmentwicklung, Maßnahmen zur Qualitätssicherung bei der Erstellung von Computerprogrammen in der GRS, Anlage zum QM-Handbuch, Köln, 2018.
- /GUP 17/ Gupta, S. et al.: Ein- und Mehrraumversuche zum Spaltprodukt- und Wasserstoff-Verhalten im Sicherheitsbehälter – THAI-V. Becker Technologies GmbH, Abschlussbericht 1501455-FR, Frankfurt, April 2017.
- /HÖH 10/ Höhne, M., Weber, G.: Extension of the AIM-3 iodine steel model, Technical Note, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, April 2010.
- /KER 98/ Kersting, E., Löffler, H.: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu schweren Störfällen in SWR, Band 1: Zusammenfassung, probabilistisches Konzept, integrale Unfallablaufanalysen, GRS-A-2519, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 1998.
- /KLE 10/ Klein-Heßling, W. et al.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie generische Anwendungen mit diesen Rechenprogrammen, GRS-A-3489, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Dezember 2012.
- /KLE 12/ Klein-Heßling, W. et al.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum Iodverhalten, GRS-A-3691, Abschlussbericht RS1190, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Dezember 2012.
- /KLE 14/ Klein-Heßling, W. et al.: Analyse kernzerstörungs- und quelltermrelevanter Prozesse mit ASTEC und ATHLET-CD/COCOSYS, GRS-351, Abschlussbericht RS1504, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, November 2014.
- /KLE 16/ Klein-Heßling, W. et al.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Durchführung von Anwendungsrechnungen, GRS-407, Abschlussbericht RS1514, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Mai 2016.

- /KLE 17a/ Klein-Heßling, W.: Parametric Study on a Simple Accident Scenario to investigate the Influence on Organic Iodine Formation, GRS - V – RS 1544 - 1/2017, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Januar 2017.
- /KLE 17b/ Klein-Hessling, W. et al.: Application of a coupled CFD/LP code approach for containment simulations of a Konvoi type PWR plant, 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, NURETH 2017, Xi'an, China, 3-8 September 2017.
- /KLO 15/ Kloos, M., Chester, F.: Weiterentwicklung des Analysewerkzeugs SUSAs für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen im Rahmen einer fortschrittlichen PSA, GRS – 371, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, 2015.
- /KLO 16/ Kloos, M.: SUSAs Version 4.0, User's Guide and Tutorial, GRS-P-5, Rev. 2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, September 2016.
- /KRÖ 18/ Krönung, D.: Validierung Zonenfluten mit COCOSYS, Technische Notiz, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, April 2018.
- /LAN 08/ Langrock, G. et al.: Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-18 (IS-2), Versuchsprogramm zum Spaltprodukt- und Wasserstoffverhalten im Containment, THAI Phase III National 1, AREVA NP NTCR-G/2007/de/0425A, AREVA NP GmbH, Erlangen, Juli 2008.
- /LAN 09/ Langrock, G. et al.: Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-21, Versuchsprogramm zum Spaltprodukt- und Wasserstoffverhalten im Containment, THAI Phase III National 1, AREVA NP NTCR-G/2009/de/0207A, Erlangen, März 2009.
- /LAN 12/ Langrock, G. et al.: Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-24, Versuchsprogramm zu quelltermrelevanten Phänomenen im Containment sowie zur weiteren Entwicklung und Validierung von Rechenmodellen, THAI IV, AREVA NP PTCC-G/2012/en/0247A, Erlangen, November 2012.

- /LER 08/ Leroy, O. et al.: AER 1, AER 2b, AER 3 STEM/EPICUR tests report, Formation and release of volatile iodine species from CsI aerosols under radiation, STEM No. 9, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), August 2008.
- /LER 11/ Leroy, O.: EPICUR test proposal for the study of Iodine Aerosol Stability under radiation, STEM No. 4, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), November 2011.
- /LUT 11/ Luther, W.: Weiterentwicklung des Rechenprogrammes ATHLET-CD, Vorhabensangebot RS1505, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2011.
- /OECD 12/ OECD-NEA: ISP-49 Hydrogen Combustion, Report NEA/CSNI/R(2011)9, OECD-NEA, Paris, France (2012).
- /REI 14/ Reinke, N. et al.: Comparative Analysis of Severe Accidents in a KONVOI PWR with ATHLET-CD/COCOSYS and ASTEC, GRS-A-3768, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Köln, November 2014.
- /RIS 15/ Risken, T.: Modellierung des Sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitrisse zur Analyse seines Einflusses auf die Gasverteilung in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken mit dem Code COCOSYS. Bochum: Ruhr-Universität Bochum, 2015.
- /SIM 11/ Simondi-Teisseire, B.: Description of the STEM/EPICUR program facility, STEM No. 5, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), December 2011.
- /SON 06/ Sonnenkalb, M., Neu, K.: Kopplung von ATHLET und COCOSYS für SWR der Baulinie 69 (KKP-1) und SWR der Baulinie 72 (KRB), Bericht zum Vorhaben SR 2459, GRS-A-3326, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, September 2006.

- /SPE 12/ Spengler, C. et al.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, GRS-A-3654, Abschlussbericht RS1185, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2012.
- /SPE 14/ Spengler, C. et al.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, GRS-358, Abschlussbericht RS1508, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2014.
- /SPE 17/ Spengler, C. et al.: Weiterentwicklung von Modellen für Stör- oder Unfallabläufe im Sicherheitsbehälter, GRS-483, Abschlussbericht RS1532, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Oktober 2017.
- /VAR 14/ Vargaftik, N. B., Touloukian, Y. S. (Hrsg.): Handbook of physical properties of liquids and gases, Pure substances and mixtures. 2. Aufl., 758 S., ISBN 978-3-642-52506-3, Springer: Berlin, 2014.
- /VDI 10/ Verein Deutscher Ingenieure: VDI Heat Atlas. VDI-Buch, 2. Aufl., ISBN 978-3-540-77876-9, DOI 10.1007/978-3-540-77877-6, Springer-Verlag Berlin Heidelberg: Berlin, 2010.
- /VOG 18/ Voggenberger, T. et al.: ATLAS 5.1 User's Manual V 1.01, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, 2018.
- /WEB 11/ Weber, G.: Ein neues Abwaschmodell für unlösliche Aerosole (AULA) GRS-TN, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, 2011.
- /WEB 12/ G. Weber et al.: Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchung der COCOSYS/AIM-Ergebnisse zum Iodverhalten im PHEBUS-Versuch FPT1, GRS-A-3676, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, Juli 2012.
- /WLK 42/ Wilks, S. S.: Statistical prediction with special reference to problem of tolerance limits Annals of Mathematical Statistics, vol. 13, no.4, pp 400-409, Princeton, September 1942.

- /WOL 11/ Wolff, H.: Wissenschaftlich-technische Zusammenarbeit mit TSO und atomrechtlichen Behörden zur nuklearen Sicherheit von KKW sowie zur Einschätzung nuklearer Risiken in Osteuropa und anderen Regionen (Vorhaben 3608101512 -INT Ost), Abschlussbericht; GRS-A-3603, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Berlin, 2011.
- /WOL 14/ Wolff, H.: Wissenschaftlich-technische Zusammenarbeit mit den Technical Safety Organisations und atomrechtlichen Behörden zur nuklearen Sicherheit von Kernkraftwerken sowie Einschätzung nuklearer Risiken in Osteuropa und anderen Regionen, GRS-Bericht zum Vorhaben 3611I0151, GRS-359, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Berlin, 2014.
- /ZHA 12/ Zhang, S. et al.: ALISA Project. Access to Large Infrastructures for Severe Accidents in Europe and in China ERMSAR 2012 conference, Cologne, Germany, March 21 – 23, 2012.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Struktur des Programmsystems AC ² mit dem Containmentprogramm COCOSYS und seinen Modulen	7
Abb. 1.2	Struktur von ASTEC V2.1	9
Abb. 2.1	THAI Iod-18: Versuchsaufbau und Instrumentierung	13
Abb. 2.2	THAI Iod-18: Vergleich des Gesamtdrucks	14
Abb. 2.3	THAI Iod-18: Vergleich der Atmosphärentemperatur	15
Abb. 2.4	THAI Iod-18: Vergleich der Wandtemperaturen	15
Abb. 2.5	THAI Iod-18: Vergleich der relativen Feuchten	16
Abb. 2.6	THAI Iod-18: Vergleich der I ₂ -Gaskonzentrationen (log. Darstellung).....	17
Abb. 2.7	THAI Iod-18: Vergleich I ₂ -Gaskonzentrationen (lineare Darstellung).....	17
Abb. 2.8	THAI Iod-18: Vergleich der Iod-Ablagerung auf Stahl /LAN 08/.....	18
Abb. 2.9	THAI Iod-18: Gesamte Iod-Flächenbelegung (Proben 1 – 9: kleine Stahlcoupons, Proben 10 – 15: große Stahlcoupons)	19
Abb. 2.10	THAI Iod-18: Vergleich des nicht-löslichen Iod-Anteils im Modell Fel2_f	19
Abb. 2.11	THAI Iod-21: Anlagenschema und COCOSYS-Nodalisierung (blau).....	21
Abb. 2.12	THAI Iod-21: Vergleich der I ₂ -Konzentration in der Atmosphäre von R1.....	22
Abb. 2.13	THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung an den gekühlten Farbflächen.....	23
Abb. 2.14	THAI Iod-21: Darstellung der ‚nassen‘ Fläche (umstrukturiertes AFP)	23
Abb. 2.15	THAI Iod-21: Darstellung der Filmdicke an den gekühlten Farbflächen (NEWAFP)	24
Abb. 2.16	THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung an der nicht gekühlten Farbfläche im oberen Teil des Behälters.....	24
Abb. 2.17	THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Ablagerung am gekühlten Stahlcoupon.....	26
Abb. 2.18	THAI Iod-21 Vergleich der Iod-Masse im Sumpf R1.....	26

Abb. 2.19	THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Verteilung	27
Abb. 2.20	THAI Iod-21: Vergleich der Iod-Verteilung nach 5 h und 27 h	27
Abb. 2.21	COCOSYS-Nodalierungsschema für THAI Iod-24.....	28
Abb. 2.22	THAI Iod-24: Vergleich der I ₂ -Konzentration im Gas oberhalb des Sumpfes	29
Abb. 2.23	THAI Iod-24: Vergleich der abgelagerten Iod-Menge auf der Farbfläche bei hoher Kondensationsrate (1,25 g/m ² s)	30
Abb. 2.24	THAI Iod-24: Vergleich der abgelagerten Iod-Menge auf der Farbfläche bei niedriger Kondensationsrate (0,15 g/m ² s).....	30
Abb. 2.25	THAI Iod-24: Vergleich der gesamten Iod-Menge in den Auffangbehältern bei hoher Kondensationsrate (1,25 g/m ² s)	31
Abb. 2.26	THAI Iod-24: Vergleich der gesamten Iod-Menge in den Auffangbehältern bei hoher Kondensationsrate (0,15 g/m ² s)	32
Abb. 2.27	THAI Iod-24: Vergleich der chemischen Zusammensetzung im Wasserfilm (Wand mit geringerer Kondensationsrate)	32
Abb. 2.28	Konzeption des Sprühmodells im NEWAFP-Modul /SPE 17/	35
Abb. 2.29	THAI Iod-31: Testkonfiguration mit Details zum Sprühwasser-Set-up und zur Iod-Einspeisung /FUN 16/	36
Abb. 2.30	COCOSYS-Nodalierungsschema der THAI+ Anlage.....	37
Abb. 2.31	THAI Iod-31: Druckverlauf im PAD- und TTV-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse	39
Abb. 2.32	THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R3 der COCOSYS-Analyse.....	39
Abb. 2.33	THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Sumpf während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse	40
Abb. 2.34	THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im PAD-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R2 der COCOSYS-Analyse.....	40
Abb. 2.35	THAI Iod-31: Verlauf der Temperatur im TTV-Behälter während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zu Raum R1 der COCOSYS-Analyse.....	41
Abb. 2.36	THAI Iod-31: Massendurchsatz der Sprühtropfen während der 3 Versuchsphasen im Vergleich zur COCOSYS-Analyse	41

Abb. 2.37	THAI Iod-31: Gasförmige I ₂ -Konzentration im PAD-Behälter (#26)	43
Abb. 2.38	THAI Iod-31: Gasförmige I ₂ -Konzentration im PAD-Behälter (#28)	44
Abb. 2.39	THAI Iod-31: Iod-Masse im PAD-Sumpf (#26)	45
Abb. 2.40	THAI Iod-31: Iod-Masse im PAD-Sumpf (#28)	46
Abb. 2.41	THAI Iod-31: Abgelagerte Iod-Masse auf dem Stahl im PAD- und TTV-Behälter (#26)	48
Abb. 2.42	THAI Iod-31: Abgelagerte Iod-Masse auf dem Stahl im PAD- und TTV-Behälter (#28)	49
Abb. 2.43	THAI Iod-31: Konzentrationen der Iod-Spezies im PAD-Sumpf (#26)	49
Abb. 2.44	THAI Iod-31: Konzentrationen der Iod-Spezies im PAD-Sumpf (#28)	50
Abb. 2.45	THAI Iod-33: Anlagenschema und COCOSYS-Nodalisierung (rote Linien) für die Auslegungsrechnung.....	51
Abb. 2.46	THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung des I ₂ (g)-Konzentrationsverlaufs im TTV	53
Abb. 2.47	THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung des I ₂ (g)-Konzentrationsverlaufs im PAD berechnet	53
Abb. 2.48	THAI Iod-33: COCOSYS-Ergebnisse der Auslegungsrechnung der abgelagerten Iod-Konzentration auf den Farbzwichenblechen im TTV.....	54
Abb. 2.49	Versuchsanlage THAI+ /GUP 17/ (links) und COCOSYS-Nodalisierung für den Versuch TH-27 (rechts)	57
Abb. 2.50	Anlage THAI+ mit Abbildung von Kondensatrinnen /GUP 17/	58
Abb. 2.51	THAI TH-27: Energieaustausch zur Umgebung	59
Abb. 2.52	THAI TH-27: Energieänderung in den Strukturen.....	60
Abb. 2.53	THAI TH-27: Energieänderung in Zonen.....	60
Abb. 2.54	THAI TH-27: Integrale Dampfmasse in den Zonen	61
Abb. 2.55	THAI TH-27: Integrale Wassermasse in den Zonen.....	61
Abb. 2.56	THAI TH-27: Geschwindigkeiten in den Verbindungen VPC_6O1 und VPC_6O2 aus dem PAD in die obere Verbindungsleitung	62
Abb. 2.57	THAI TH-27: Geschwindigkeiten in den Verbindungen VPC_1MO und VPC_1MU aus dem PAD in die untere Verbindungsleitung	63

Abb. 2.58	Schematische Darstellung der Versuchsanlage GES-Wanne /GES 10/.....	65
Abb. 2.59	Vertikaler Schnitt durch die Versuchsanlage GES-Wanne /GES 10/.....	65
Abb. 2.60	Schematische Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Draufsicht) der Versuchsanlage GES-Wanne und Darstellung der oberen Zonenanordnung	66
Abb. 2.61	Schematische Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Seitenansicht) der Versuchsanlage GES-Wanne.....	66
Abb. 2.62	GES-Wanne: Wassermasse in den unteren Zonen „l1“ bis „l9“	69
Abb. 2.63	GES-Wanne: Gasvolumen in den unteren Zonen „l1“ bis „l9“.....	70
Abb. 2.64	GES-Wanne: Wassermasse in den oberen Zonen „u1“ bis „u9“.....	70
Abb. 2.65	GES-Wanne: Temperaturentwicklung in oberen (tux) und unteren (lux) Zonen bei Beheizung einer oberen Zone	72
Abb. 2.66	GES-Wanne: Temperaturentwicklung in oberen (tux) und unteren (lux) Zonen bei Beheizung einer oberen Zone und begrenzter Konvektion.....	73
Abb. 2.67	GES-Wanne: gemittelttes vertikales Temperaturprofil in Experiment und COCOSYS-Rechnung	75
Abb. 2.68	GES-Wanne: berechneter Wassertransport durch vertikale Verbindungen in COCOSYS.....	76
Abb. 2.69	Konfiguration der THAI, HD-Versuche mit Sprühen	78
Abb. 2.70	COCOSYS-Nodalisierung für Rechnungen ohne Entrainment-Modell (links) und mit Entrainment-Modell (rechts).....	79
Abb. 2.71	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Druckverlauf im THAI-Behälter.....	80
Abb. 2.72	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O.....	81
Abb. 2.73	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I	82
Abb. 2.74	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I	82
Abb. 2.75	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I	83

Abb. 2.76	THAI HD-30, Testrechnung ohne Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I	83
Abb. 2.77	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Freigesetzte Verbrennungsenergie	84
Abb. 2.78	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Druckverlauf im THAI-Behälter, Vergleich Experiment und COCOSYS-Rechnungen	85
Abb. 2.79	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O	86
Abb. 2.80	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I	87
Abb. 2.81	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I	87
Abb. 2.82	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I	88
Abb. 2.83	THAI HD-7, Testrechnung mit Verbrennung: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I	88
Abb. 2.84	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Freigesetzte Verbrennungsenergie	89
Abb. 2.85	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: THAI HD-30: Druckverlauf im THAI-Behälter	90
Abb. 2.86	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Temperaturverlauf in den Zonen R6I und R6O	91
Abb. 2.87	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R9I und R10I	92
Abb. 2.88	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R7I und R8I	92
Abb. 2.89	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R5I und R6I	93
Abb. 2.90	THAI HD-30, Testrechnung mit Verbrennung und Sprühen: Gasgeschwindigkeit (VELO) in der Verbindung zwischen R3I und R4I	93

Abb. 2.91	THAI+ Versuchsanlage /FRE 15/	96
Abb. 2.92	THAI+ in der Konfiguration des Versuchs TH-27 mit Einspeisestellen von Dampf und Helium sowie Heiz-/Kühlmänteln und Messstellen	97
Abb. 2.93	THAI TH-27: Schema der elektrischen Wandheizung des THAI-Behälters	97
Abb. 2.94	THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung Ansicht mit Jet für obere Dampfeinspeisung in TTV.....	101
Abb. 2.95	THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung; Ansicht mit Plume für untere Dampfeinspeisung in TTV.....	102
Abb. 2.96	THAI TH-27: COCOSYS-Nodalisierung (Querschnitt).....	103
Abb. 2.97	Querschnitt THAI+, Draufsicht (TTV links, PAD, rechts) /FRE 15/.....	103
Abb. 2.98	THAI TH-27 Benchmark: Druckverlauf im PAD während der Versuchszeit (doppeltblinde Rechnungen) /FRE 17a/.....	106
Abb. 2.99	THAI TH-27 Benchmark: Dampfeinspeisung während der Versuchszeit (doppeltblinde Rechnungen) /FRE 17a/.....	106
Abb. 2.100	THAI TH-27 Benchmark: Druckverlauf im PAD während der Versuchszeit (blinde Rechnungen) /FRE 17a/	107
Abb. 2.101	THAI TH-27 Benchmark: Dampfeinspeisung während der Versuchszeit (blinde Rechnungen) /FRE 17a/	107
Abb. 2.102	THAI TH-27 Benchmark: Heliumkonzentration im oberen Verbindungsrohr (doppeltblinde (gepunktete) und blinde (durchgezogene) Rechnungen) /FRE 17a/	108
Abb. 2.103	THAI TH-27: Druckverlauf für doppeltblinde (grün), blinde (blau) und offene (rot) GRS-COCOSYS-Rechnung /FRE 17a/	109
Abb. 2.104	THAI TH-27: Heliumkonzentration für doppeltblinde (grün), blinde (blau) und offene (rot) GRS-COCOSYS-Rechnung /FRE 17a/.....	110
Abb. 3.1	ATHLET-Nodalisierung DWR KONVOI, HL: Heißer Strang, CL: Kalter Strang, DE: Dampferzeuger, RDB: Reaktordruckbehälter, DH: Druckhalter	114
Abb. 3.2	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Verlauf des Unfalls (Standardwerte für Gesamtschmelzmasse und Masse keramischer Schmelze).....	117
Abb. 3.3	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Schmelzmassen (gesamt und keramisch)	118

Abb. 3.4	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Vergleich verschiedener Rechnungen mit gleicher AIDA auslösende Masse keramischer Schmelze aber verschiedene auslösende Gesamtschmelzmassen	119
Abb. 3.5	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: H ₂ -Erzeugung im Kern, H ₂ -Massenstrom durch das Leck in den SB.....	120
Abb. 3.6	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: Vergleich verschiedener Rechnungen mit gleicher AIDA auslösenden Schmelze gesamtmasse aber verschiedene auslösende keramische Schmelzmassen	121
Abb. 3.7	ATHLET-CD/COCOSYS DWR KONVOI: H ₂ -Erzeugung im Kern und H ₂ -Massenstrom durch das Leck in den SB.....	121
Abb. 3.8	COCOSYS: Nodalisierung für den Sumpfbereich des DWR KONVOI /KLE 16/.....	123
Abb. 3.9	CoPool: Wandelemente (Compounds) für den Sumpfbereich des DWR KONVOI /KLE 16/.....	123
Abb. 3.10	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Primär- und Sekundärkreis	125
Abb. 3.11	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der RDB-Temperatur.....	126
Abb. 3.12	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes im Dampferzeuger (Strang 2)	126
Abb. 3.13	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Ergebnisse der Temperaturverteilung im Sumpf bei 1290 s, 1530 s und 3 600 s.....	127
Abb. 3.14	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Containmentdrucks.....	128
Abb. 3.15	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Temperaturen im Dombereich	129
Abb. 3.16	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Wasservolumina in RSUA und RSUC.....	130
Abb. 3.17	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpfwasserstände in RSUA und RSUC.....	130
Abb. 3.18	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpftemperaturen in RSUA und RSUC.....	131
Abb. 3.19	SWR-72: Lage und Zuordnung der S&E-Ventile in der Kondensationskammer	133

Abb. 3.20	Darstellung der mit CoPool gekoppelten COCOSYS-Zonen (farbig).....	134
Abb. 3.21	CoPool: Aufbau und Gitter des Datensatzes für eine SWR-72-Anlage...	135
Abb. 3.22	CoPool: Geschwindigkeitsverteilung in der KoKa nach ca. 10 s durch numerische Instabilitäten	136
Abb. 3.23	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Reaktorkühlkreislauf	138
Abb. 3.24	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Containment: Druckkammer (R10) und KoKa (K14)	138
Abb. 3.25	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes in der KoKa	139
Abb. 3.26	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der mittleren Wassertemperatur und der Wasseroberflächentemperatur in der Kondensationskammer	140
Abb. 3.27	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Druckentlastung durch das 2. S&E-Ventil	140
Abb. 3.28	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Massenstrom TH-Pumpen	141
Abb. 3.29	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Wassermassenstrom durch den Überlauf in die Kondensationskammer.....	141
Abb. 3.30	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Ein- und Auslasstemperaturen des TH-Systems.....	142
Abb. 3.31	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der relativen Wasserstände.....	143
Abb. 3.32	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der mittleren Wassertemperaturen und Darstellung der Wasseroberflächentemperaturen (gestrichelt)	144
Abb. 3.33	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Temperaturverteilung bei 500 s, 1500 s und 2700 s.....	145
Abb. 3.34	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Energiebilanzen	146
Abb. 3.35	CoPool: Ausgabe der zugehörigen Unterräume und Höhenkoten der Zone BAS45	148
Abb. 3.36	CoPool, Test 01: Wandtemperatur bei 500 s	151
Abb. 3.37	CoPool, Test 01: Vergleich Gas- und Wandoberflächentemperatur	151

Abb. 3.38	CoPool, Test 01: Vergleich der Temperaturprofile in der Seitenwand (oben) und im Boden (unten) bei 500 s.....	152
Abb. 3.39	CoPool, Test 01: Temperaturdifferenz zwischen Stand-alone-Rechnung und CoPool-Rechnung	153
Abb. 3.40	CoPool, Test 07: Diagonaler Schnitt der Temperaturverteilung im Pool bei 300 s (Lösungsschema: links konservativ, rechts gemischt)	154
Abb. 3.41	CoPool, Test 07: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlasstemperatur (gestrichelte Kurven)	155
Abb. 3.42	CoPool, Test 07: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur.....	156
Abb. 3.43	CoPool, Test 07: Vergleich der Atmosphärentemperatur	156
Abb. 3.44	CoPool, Test 07: Vergleich der Wasserstände.....	157
Abb. 3.45	CoPool, Test 07: Vergleich der Energiebilanz.....	157
Abb. 3.46	CoPool, Test 07b: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlasstemperaturen (gestrichelte und gepunktete Kurven)	159
Abb. 3.47	CoPool, Test 07b: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur.....	159
Abb. 3.48	CoPool, Test 07b: Vergleich der Temperaturprofile bei 135 s und 140 s (linke Seite: konservatives Schema, rechte Seite: gemischtes Schema)	160
Abb. 3.49	CoPool, Test 07b: Vergleich der Wasserstände.....	160
Abb. 3.50	CoPool, Test 07b: Vergleich der Energiebilanz.....	161
Abb. 3.51	CoPool, Test 07c: Vergleich der mittleren Pooltemperatur; Pumpeinlasstemperaturen (gestrichelte und gepunktete Kurven)	162
Abb. 3.52	CoPool, Test 07c: Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur.....	163
Abb. 3.53	CoPool, Test 07c: Vergleich der Temperaturprofile bei 135 s und 140 s (linke Seite: konservatives Schema, rechte Seite: gemischtes Schema)	163
Abb. 3.54	CoPool, Test 07c: Vergleich der Energiebilanz	164
Abb. 3.55	CoPool Test 17: Vergleich des Gesamtdrucks.....	165

Abb. 3.56	CoPool, Test 17: Vergleich der mittleren Pooltemperatur und Pooloberflächentemperatur.....	166
Abb. 3.57	CoPool, Test 17: Vergleich der Siederate im Pool	166
Abb. 3.58	CoPool, THAI, Testfall A: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur.....	168
Abb. 3.59	CoPool, THAI, Testfall A: Vergleich der inneren Energien	169
Abb. 3.60	CoPool, THAI, Testfall A: Temperaturverteilung im Sumpf bei 1000 s ...	169
Abb. 3.61	CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur.....	170
Abb. 3.62	CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der inneren Energien	171
Abb. 3.63	CoPool, THAI, Testfall B: Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten bei 300 s (links: konservative Methode, rechts: gemischte Methode).....	171
Abb. 3.64	CoPool, THAI, Testfall C: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur	172
Abb. 3.65	CoPool, THAI, Testfall C: Vergleich der inneren Energien	173
Abb. 3.66	CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur	174
Abb. 3.67	CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der mittleren Wandoberflächentemperatur (oberhalb des Sumpfes).....	175
Abb. 3.68	CoPool, THAI, Testfall D: Temperaturdifferenz $T_{coc}-T_{cpl}$ zwischen stand-alone und gekoppelt mit konservativem Lösungsschema.....	175
Abb. 3.69	CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich des Wärmestroms in die Wand (oberhalb des Sumpfes).....	176
Abb. 3.70	CoPool, THAI, Testfall D: Temperaturverteilung im Fluid und den Wänden bei 1000 s.....	177
Abb. 3.71	CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der Wärmeströme an den Wänden im Sumpfbereich (oberer zylindrischer Bereich).....	177
Abb. 3.72	CoPool, THAI, Testfall D: Vergleich der Wärmeströme an den Wänden im Sumpfbereich (schalenförmiger Boden)	178
Abb. 3.73	CoPool, THAI, Testfall E: Temperaturverteilung im PAD nach 20000 s.....	179
Abb. 3.74	CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der Gastemperatur oberhalb des Sumpfes	180
Abb. 3.75	CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der mittleren Wandoberflächentemperatur oberhalb des Sumpfes	180

Abb. 3.76	CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der mittleren Sumpftemperatur.....	181
Abb. 3.77	CoPool, THAI, Testfall E: Vergleich der Energiebilanz.....	182
Abb. 3.78	CoPool, THAI TH-27: Gitteraufbau original (oben) und modifiziert (unten).....	184
Abb. 3.79	CoPool, THAI TH-27: Vergleich des Gesamtdrucks.....	185
Abb. 3.80	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wasserstände im TTV und PAD	185
Abb. 3.81	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wassermassen im Sumpf des TTV und PAD	186
Abb. 3.82	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der gesamten Dampfeinspeisung und der Gesamtwassermasse in den unteren Sümpfen des TTV und PAD.....	186
Abb. 3.83	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Temperaturen im PAD-Sumpf.....	187
Abb. 3.84	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wandoberflächentemperaturen im PAD Sumpf.....	188
Abb. 3.85	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Energieströme (oben) und Energiebilanz (unten) im PAD Sumpf (bis 80000 s).....	189
Abb. 3.86	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Temperaturen im TTV-Sumpf.....	190
Abb. 3.87	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der Wandoberflächentemperaturen im TTV-Sumpf	191
Abb. 3.88	CoPool, THAI TH-27: Vergleich der He-Konzentrationen in den Verbindungsleitungen	191
Abb. 3.89	CoPool-Gitterstudie: links grobes Gitter 1,0 m x 1,0 m, rechts feines Gitter 0,5 m x 0,5 m).....	193
Abb. 3.90	CoPool-Gitterstudie: Vergleich der Ergebnisse mit unterschiedlicher Gitterfeinheit (Temperaturen auf einer Skala von 110 °C – 125 °C).....	194
Abb. 3.91	CoPool-Gitterstudie: Probepunkte 1 und 2 im Sumpf.....	195
Abb. 3.92	CoPool-Gitterstudie: Füllstandsverlauf (Bodenhöhe -1,8 m)	196
Abb. 3.93	CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe - 1,2 m)	196
Abb. 3.94	CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe - 1,6 m)	197

Abb. 3.95	CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe - 1,2 m)	197
Abb. 3.96	CoPool-Gitterstudie: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe - 1,6 m)	198
Abb. 3.97	CoPool-Gitterstudie: Die Gitterfeinheit beeinflusst die Geschwindigkeiten im Einlassbereich (links: $v_{\max} = 0,5$ m/s, rechts $v_{\max} = 1,3$ m/s)	199
Abb. 3.98	CoPool-Zeitschrittweite: Vergleich der Berechnungen mit unterschiedlicher Zeitschrittweite bei $t = 800$ s (feines Gitter, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C).....	200
Abb. 3.99	CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m (feines Gitter)	201
Abb. 3.100	CoPool Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m (feines Gitter)	201
Abb. 3.101	CoPool-Zeitschrittweite: Vergleich der Berechnungen mit unterschiedlicher Zeitschrittweite bei $t = 800$ s (grobes Gitter, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C).....	202
Abb. 3.102	CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m (grobes Gitter)	203
Abb. 3.103	CoPool-Zeitschrittweite: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m (grobes Gitter)	203
Abb. 3.104	CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: $t = 800$ s, Temperaturskala von 110 °C bis 125 °C.....	205
Abb. 3.105	CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,2 m.....	205
Abb. 3.106	CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 1, in Höhe -1,6 m.....	206
Abb. 3.107	CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,2 m.....	206
Abb. 3.108	CoPool, Einfluss der vertikalen turbulenten Viskosität: Temperaturverlauf bei Probenpunkt 2, in Höhe -1,6 m.....	207
Abb. 3.109	CFX-Geometrie und Gitter	208
Abb. 3.110	Vergleich von CoPool- (links) und CFX-Ergebnissen (rechts) bei $t = 800$ s (Temperaturskala von $110 - 125$ °C)	209

Abb. 3.111	CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1.2 m)	209
Abb. 3.112	CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 1 (Höhe -1.6 m)	210
Abb. 3.113	CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1.2 m)	210
Abb. 3.114	CoPool – CFX: Temperaturverlauf am Probenpunkt 2 (Höhe -1.6 m)	211
Abb. 3.115	CoPool: Vergleich der Rechenzeiten für die unterschiedlichen Simulationen.....	213
Abb. 3.116	CoPool: Abhängigkeit der Berechnungsdauer (für 500 s Problemzeit) von der Anzahl der Gitterelemente	213
Abb. 4.1	UaSA zu OECD CCI-3: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit dem nach dem Versuch abgeschätzten Wert und mit der Referenzkurve für das Erosionsvolumen	218
Abb. 4.2	UaSA zu MOCKA5.7: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit dem für den Versuch abgeschätzten Wert und mit der Referenzkurve für das Erosionsvolumen	219
Abb. 4.3	UaSA zu OECD CCI-3: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit den für den Versuch gemessenen Werten und mit der Referenzkurve für die Oxidtemperatur.....	220
Abb. 4.4	UaSA zu MOCKA5.7: Vergleich des zeitlichen Verlaufs des berechneten (95% / 95%)-Toleranzintervalls mit den im Versuch gemessenen Werten mit der Referenzkurve für die Temperatur der Oxidschicht.....	221
Abb. 4.5	UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der Parameter №9 – 16 für das Erosionsvolumen	223
Abb. 4.6	UaSA zu OECD CCI-3: Korrelationskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für das Erosionsvolumen bei 6400 s.....	223
Abb. 4.7	UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße (Parameter №9 – 16) für das Erosionsvolumen	224
Abb. 4.8	UaSA zu OECD CCI-3: Standardisierte Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für das Erosionsvolumen bei 6400 s	225

Abb. 4.9	UaSA zu OECD CCI-3: Zeitlicher Verlauf der standardisierten Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße (Parameter №9 – 16) für die Schmelzetemperatur.....	226
Abb. 4.10	UaSA zu OECD CCI-3: Standardisierte Regressionskoeffizienten (nach Pearson) als Sensitivitätsmaße der 31 unsicheren Parameter für die Oxidtemperatur bei 6400 s.....	227
Abb. 4.11	UaSA zu FPT-1: COCOSYS-Nodalisierung des PHEBUS-Containments	230
Abb. 4.12	UaSA zu FPT-1: I ₂ -Konzentration im Containment.....	232
Abb. 4.13	UaSA zu FPT-1: Gemessene und berechnete CsI- und IO _x -Aerosolkonzentrationen	233
Abb. 4.14	UaSA zu FPT-1: Organoiod-Konzentration im Containment	233
Abb. 4.15	UaSA zu FPT-1: Am nassen Kondensator abgelagertes Iod.....	234
Abb. 4.16	UaSA zu FPT-1: AgI-Masse im Sumpf.....	235
Abb. 4.17	UaSA zu FPT-1: Iod-Konzentration im Sumpf.....	235
Abb. 5.1	Massentransfer-Modell für Iod in COCOSYS/AIM.....	239
Abb. 5.2	OECD THAI-3, Iod-32: COCOSYS-Nodalisierung der Anlage THAI+ für die Auslegungsrechnung des Versuches	240
Abb. 5.3	OECD THAI-3, Iod-32: Für die Auslegungsrechnung angenommene Dampfeinspeisung in den PAD-Sumpf.....	241
Abb. 5.4	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Druckverlauf im PAD-Behälter	242
Abb. 5.5	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Temperaturverlauf in Wasser- und Gasphase im PAD-Behälter	242
Abb. 5.6	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Siederate.....	243
Abb. 5.7	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Iod-Speziation im PAD-Sumpf	244
Abb. 5.8	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, I ₂ (g)-Konzentrationsverteilung in der Gasphase.....	244
Abb. 5.9	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Druckverlauf im PAD	245
Abb. 5.10	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Temperaturverlauf im PAD	246

Abb. 5.11	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Siederate.....	246
Abb. 5.12	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Masse an Iod in Sumpfwasser.....	247
Abb. 5.13	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, I ₂ (w)-Masse im PAD- Sumpf.....	248
Abb. 5.14	OECD THAI-3, Iod-32: Auslegungsrechnung, Iod-Konzentration in der PAD-Atmosphäre.....	248
Abb. 5.15	OECD THAI-3 Iod-34: Anlagenschema und COCOSYS- Nodalisierung (rot).....	249
Abb. 5.16	OECD THAI-3, Iod-34: COCOSYS-Rechnung der I ₂ -Ablagerung auf den Farbflächen.....	251
Abb. 5.17	OECD THAI-3, Iod-34: COCOSYS-Rechnung der I ₂ -Ablagerung auf dem TTV-Stahl.....	251
Abb. 5.18	OECD THAI-3, Iod-34: COCOSYS-Rechnung der I ₂ -Mengen in der Atmosphäre bezogen auf das I ₂ -Anfangsinventar.....	252
Abb. 5.19	OECD THAI-3, Iod-34: Vergleich der RI Mengen in der Atmosphäre bezogen auf das I ₂ -Anfangsinventar.....	253
Abb. 5.20	OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Gasphase in Phase 1 und 2 im TTV.....	254
Abb. 5.21	OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der TTV-Behälterwände in Phase 1 und 2.....	254
Abb. 5.22	OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Farbbleche mit einer Stärke von 15 mm in Phase 1 und 2 im TTV.....	255
Abb. 5.23	OECD THAI-3, Iod-34: Temperaturverlauf der Farbbleche mit einer Stärke von 1,5 mm in Phase 1 und 2 im TTV.....	255
Abb. 5.24	OECD THAI-3, HR-49: THAI+-Versuchskonfiguration für das Experiment HR-49.....	257
Abb. 5.25	Geometrie eines box-type Rekombinators.....	258
Abb. 5.26	OECD THAI-3, HR-49: COCOSYS-Nodalisierung.....	258
Abb. 5.27	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Druckverlauf.....	259
Abb. 5.28	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Atmosphärentemperatur.....	259
Abb. 5.29	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Dampfkonzentration.....	260

Abb. 5.30	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H ₂ -Konzentration	260
Abb. 5.31	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H ₂ -Konzentration	261
Abb. 5.32	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H ₂ -Rekombinationsrate.....	261
Abb. 5.33	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H ₂ -Konzentration am Eintritt und Austritt des Rekombinators.....	262
Abb. 5.34	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-H ₂ -Konzentration am Eintritt und Austritt des Rekombinators.....	262
Abb. 5.35	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Temperatur am Eintritt, Austritt und im Rekombinator.....	263
Abb. 5.36	OECD THAI-3, HD-49: COCOSYS-Temperatur am Eintritt, Austritt und im Rekombinator.....	263
Abb. 5.37	OECD THAI-3, HD-Versuche: Versuchsaufbau der Anlage THAI+ für die H ₂ -Verbrennungsversuche HD-43 – HD-45 /FRE 19/.....	265
Abb. 5.38	Nationales THAI, HD-Versuche: Versuchsaufbau der Anlage THAI+ für die H ₂ -Verbrennungsversuche HD-36 – HD-39 /GUP 17/	266
Abb. 5.39	THAI HD-36: Ursprüngliche COCOSYS-Nodalisierung aus TH-27	267
Abb. 5.40	THAI HD-36: Nodalisierungsschema der Anlage THAI+ (links) und schematische Darstellung der Zonen auf den meisten Ebenen in PAD und TTV (rechts)	268
Abb. 5.41	THAI HD-36: Vergleich des Druckverlaufs im TTV-Behälter	271
Abb. 5.42	THAI HD-36: Vergleich des Druckverlaufs im PAD-Behälter.....	271
Abb. 5.43	THAI HD-36: Vergleich der Zündzeitpunkte in den Zonen (links) mit den experimentell bestimmten Isochoren (Quelle: Becker Technologies).....	272
Abb. 5.44	THAI HD-36: Temperaturverlauf im unteren Bereich des PAD-Behälters	274
Abb. 5.45	THAI HD-36: Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters	274
Abb. 5.46	THAI HD-36: Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters	275
Abb. 5.47	THAI HD-36: Temperaturverlauf im unteren Bereich des TTV-Behälters	275

Abb. 5.48	THAI HD-36: Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters	276
Abb. 5.49	THAI HD-36: Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters	276
Abb. 5.50	THAI HD-36: Wandtemperatur im oberen Bereich des PAD-Behälters ..	277
Abb. 5.51	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Druck im PAD-Behälter	278
Abb. 5.52	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Druck im TTV-Behälter.....	279
Abb. 5.53	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Zündzeitpunkte in den verschiedenen Höhen (weiße Zonen = Keine Zündung)	279
Abb. 5.54	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im oberen Teil des PAD-Behälters.....	280
Abb. 5.55	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im unteren Teil des PAD-Behälters.....	280
Abb. 5.56	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im Sumpf des PAD-Behälters	281
Abb. 5.57	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters	281
Abb. 5.58	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters	282
Abb. 5.59	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Standard-Werte), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des TTV-Behälters	282
Abb. 5.60	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Druckverlauf im PAD-Behälter	283
Abb. 5.61	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Druckverlauf im TTV-Behälter.....	284
Abb. 5.62	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Zündzeitpunkte (weiße Zonen = keine Zündung)	284
Abb. 5.63	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters....	285

Abb. 5.64	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters	285
Abb. 5.65	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des PAD-Behälters	286
Abb. 5.66	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters	286
Abb. 5.67	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters	287
Abb. 5.68	OECD THAI-3, HD-44: blinde COCOSYS-Rechnung (Parameter wie in HD-36), Temperaturverlauf im Sumpfbereich des TTV-Behälters.....	287
Abb. 5.69	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Druckentwicklung im PAD-Behälter	289
Abb. 5.70	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Druckentwicklung im TTV-Behälter	290
Abb. 5.71	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Zündzeitpunkte der einzelnen Zonen und die aus dem Experiment ermittelten Isochronen	290
Abb. 5.72	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im unteren Bereich des PAD-Behälters.....	291
Abb. 5.73	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im mittleren Bereich des PAD-Behälters	292
Abb. 5.74	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im oberen Bereich des PAD-Behälters.....	292
Abb. 5.75	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im unteren Bereich des TTV-Behälters	293
Abb. 5.76	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im mittleren Bereich des TTV-Behälters.....	293
Abb. 5.77	OECD THAI-3, HD-44: offene COCOSYS-Rechnung; Temperaturverlauf im oberen Bereich des TTV-Behälters	294
Abb. 5.78	THAI HD-40 und HD-27: gemessener Druckverlauf /FRE 19/.....	295
Abb. 5.79	OECD THAI-3, HD-40: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen (durchkreuzte Zonen = keine Zündung)	296

Abb. 5.80	OECD THAI-3, HD-40: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter	296
Abb. 5.81	OECD THAI-3, HD-40: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter.....	297
Abb. 5.82	OECD THAI-3, HD-41 und HD-28: gemessener Druckverlauf /FRE 19/	298
Abb. 5.83	OECD THAI-3, HD-41: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen	299
Abb. 5.84	OECD THAI-3, HD-41: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter.....	300
Abb. 5.85	OECD THAI-3, HD-41: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter	300
Abb. 5.86	OECD THAI-3, HD-42 und HD-26: gemessener Druckverlauf /FRE 19/	301
Abb. 5.87	OECD THAI-3, HD-42: berechnete Zündzeitpunkte in verschiedenen Zonen	302
Abb. 5.88	OECD THAI-3, HD-42: berechneter Druckverlauf im PAD-Behälter	303
Abb. 5.89	OECD THAI-3, HD-42: berechneter Druckverlauf im TTV-Behälter.....	303
Abb. 5.90	OECD-BIP-3-Studie: Vergleich der Iod-Spezies in der Atmosphäre (ohne radiolytische RI-Bildung: gestrichelt; Default: durchgezogen)	306
Abb. 5.91	OECD-BIP-3-Studie: Gewichtete Iod-Masse in der Luft – Verlauf der 208 Rechenläufe.....	307
Abb. 5.92	OECD-BIP-3-Studie: Gewichtete Iod-Masse in der Luft – Sensitivitäten relevanter Parameter	308
Abb. 5.93	Vereinfachte Darstellung der EPICUR-Versuchsanlage (aus /SIM 11/)	311
Abb. 5.94	COCOSYS-AIM-Nodalisierung der EPICUR-Anlage für die AER- Versuche (aus /KLE 16/)	312
Abb. 5.95	OECD STEM, AER-7: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: I ₂ +IO _x , rot: I ₂ , blau: IO _x , grün: RI)	313
Abb. 5.96	OECD STEM, AER-7: Vergleich der Iod-Verteilung	313
Abb. 5.97	OECD STEM, AER-8: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (rot: I ₂ , blau: IO _x , grün: RI)	314
Abb. 5.98	OECD STEM, AER-8: Vergleich der Iod-Verteilung	315
Abb. 5.99	OECD STEM, AER-1: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: I ₂ +IO _x , rot: I ₂ , blau: IO _x , grün: RI)	317

Abb. 5.100	OECD STEM, AER-1: Vergleich der Iod-Verteilung	317
Abb. 5.101	OECD STEM, AER-2b: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: I_2+IO_x , rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	318
Abb. 5.102	OECD STEM, AER-2b: Vergleich der Iod-Verteilung	319
Abb. 5.103	OECD STEM, AER-3: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	320
Abb. 5.104	OECD STEM, AER-3: Vergleich der Iod-Verteilung	320
Abb. 5.105	OECD STEM, AER-4: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	321
Abb. 5.106	OECD STEM, AER-4: Vergleich der Iod-Verteilung	322
Abb. 5.107	OECD STEM, AER-5: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	323
Abb. 5.108	OECD STEM, AER-5: Vergleich der Iod-Verteilung	323
Abb. 5.109	OECD STEM, AER-6: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	324
Abb. 5.110	OECD STEM, AER-6: Vergleich der Iod-Verteilung	325
Abb. 5.111	OECD STEM, AER-11: Vergleich der am Filter abgelagerten Iod- Anteile (schwarz: Gesamt, rot: I_2 , blau: IO_x , grün: RI).....	326
Abb. 5.112	OECD STEM, AER-11: Vergleich der Iod-Verteilung	326
Abb. 5.113	AP1000-Containment, PCS (links) und Simulation des Kamineffekts mit COCOSYS (rechts)	333
Abb. 5.114	WAFT-Versuchsanlage, Seiten- und Vorderansicht der Stahlplatte /GAU 17b/.....	336
Abb. 5.115	WAFT-Versuchsanlage, System-Schema inklusive Messstellen /GAU 17b/.....	336
Abb. 5.116	WAFT-Versuchsanlage: COCOSYS-Nodalisierung	339
Abb. 5.117	WAFT-Versuchsanlage: COCOSYS-Nodalisierung für die PCS- Simulation und Strukturen der beheizten Platte	340
Abb. 5.118	WAFT, Auslegungsbedingungen, angenommene Zeitfunktion für den PCS-Massenstrom.....	341
Abb. 5.119	WAFT, Auslegungsbedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilmdicke entlang der Plattenoberfläche	342

Abb. 5.120	WAFT, Auslegungsbedingungen, von COCOSYS berechnete Atmosphärgeschwindigkeiten im Strömungskanal	343
Abb. 5.121	WAFT, Extrembedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilmdicke entlang der Plattenoberfläche	344
Abb. 5.122	WAFT, Extrembedingungen, von COCOSYS berechnete Wasserfilm- bzw. Plattenoberflächentemperaturen.....	345
Abb. 7.1	Nodalisierung des ATHLET-CD-Datensatzes für KONVOI.....	361
Abb. 7.2	COCOSYS Nodalisierung für KONVOI	362
Abb. 7.3	AC ² -Test: Druck im RDB für die 4 gerechneten Fälle (s. S. 363).....	364
Abb. 7.4	AC ² -Test: Wasserstand im RDB	365
Abb. 7.5	AC ² -Test: Integral eingespeiste Dampfmasse in das Containment	365
Abb. 7.6	AC ² -Test: Integral eingespeiste Wassermasse in das Containment.....	366
Abb. 7.7	AC ² -Test: Integral Eingespeiste Energie in das Containment.....	366
Abb. 7.8	AC ² -Test: Druck im Sicherheitsbehälter	367
Abb. 7.9	AC ² -Test: Druck im Dampferzeuger DE3	368
Abb. 7.10	AC ² -Test: Dampftemperatur im Dom des DE3	368
Abb. 7.11	AC ² -Test: Wasserstand im DE3	369
Abb. 7.12	AC ² -Test: Hüllrohrtemperatur Ring 1 Knoten 10	371
Abb. 7.13	AC ² -Test: Hüllrohrtemperatur Ring 2 Knoten 10	371
Abb. 7.14	AC ² -Test: Hüllrohrtemperatur Ring 3 Knoten 10	372
Abb. 7.15	AC ² -Test: Hüllrohrtemperatur Ring 4 Knoten 10	372
Abb. 7.16	AC ² -Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 1	373
Abb. 7.17	AC ² -Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 2.....	373
Abb. 7.18	AC ² -Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 3.....	374
Abb. 7.19	AC ² -Test: Dampf- und Wassermassenstrom Oberkante Ring 4.....	374
Abb. 7.20	AC ² -Test: Totaler Wärmeübertrag über Heizrohre der Bündelgruppe 1 im DE3.....	375
Abb. 7.21	AC ² -Test: Wärmestrom über Heizrohr der Bündelgruppe 1, Knoten 6 im DE3.....	375

Abb. 7.22	AC ² -Test: Vergleich der Wärmeübergangskoeffizienten und Modelloption	376
Abb. 7.23	AC ² -Test: Modelloptionen von Wärmeübergangskorrelationen in ATHLET /ATH 16/	377
Abb. 7.24	AC ² -Test: Vergleich der Wasserstoffbildung	378

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Koeffizienten der Iod/Stahl-Wechselwirkung	14
Tab. 2.2	Vergleich der Eigenschaften beider Aerosol-Sprühmodelle SPE 17.....	34
Tab. 2.3	In Rechnung #26 und #28 verwendete KMTWAS und KMTGAS Inputwerte.....	42
Tab. 2.4	Eingabedaten für vertikale Verbindungen	67
Tab. 2.5	Eingabedaten für horizontale Verbindungen	68
Tab. 2.6	Höhen der Temperaturmessfühler in der GES-Wanne und Zuordnung zu COCOSYS-Zonen.....	74
Tab. 2.7	THAI HD-30 Startbedingungen	78
Tab. 2.8	Fahrweise des Versuches THAI TH-27	98
Tab. 2.9	THAI TH-27 Benchmark: Teilnehmer und Simulationsprogramme.....	104
Tab. 2.10	THAI TH-27 Benchmark: Simulationsprogramme	105
Tab. 3.1	Gewählte Kombinationen aus gesamter und keramischer Schmelzmasse (Rechnung 2 mit den Standardwerten).....	114
Tab. 3.2	Anfangsbedingungen.....	115
Tab. 3.3	ATHLET/COCOSYS: charakteristische Ereignisse des Leckstörfalls	124
Tab. 3.4	SWR-72: Ereignisablauf 250 cm ² in der Speisewasserleitung.....	137
Tab. 3.5	Berechnungsparameter für die Gitterstudie.....	192
Tab. 3.6	Berechnungsparameter für die Zeitschrittstudie (feines Gitter).....	199
Tab. 3.7	Berechnungsparameter für die Zeitschrittstudie (grobes Gitter)	202
Tab. 3.8	Berechnungsparameter für die Viskositätsstudie	204
Tab. 3.9	Berechnungsparameter für den Vergleich mit CFX	208
Tab. 3.10	Überblick über die Parameterstudie.....	212
Tab. 4.1	Einspeisung von Gas, Iod und Aerosol ins Containment, PHEBUS FPT-1	231
Tab. 5.1	FRONT-Parameter verwendet in der Nachrechnung von THAI HD-36...	270

Tab. 5.2	FRONT-Parameter verwendet für Nachrechnungen von THAI HD-44 im Vergleich zu Standardwerten	288
Tab. 5.3	Überblick über die OECD STEM, AER-Versuche.....	328
Tab. 5.4	CESAM Arbeitsergebnisse während der Projektlaufzeit (beschränkte Zugänglichkeit über EU)	331
Tab. 5.5	WAFT, Bereich der experimentellen Parameter in den Evaporation- Tests /GAU 17b/	337
Tab. 6.1	Testfälle im COCOSYS-Regressionstesten (aktueller Stand COCOSYS 3.0.0 – V2.4v5).....	350
Tab. 6.2	Validierungsmatrix (Stand: 8-2019).....	352

**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