

**Gezielte Validierung von
COCOSYS und ASTEC
sowie Durchführung von
Anwendungsrechnungen**

Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Durchführung von Anwendungsrechnungen

Walter Klein-Heßling
Siegfried Arndt
Ivan Bakalov
Sara Beck
Dominic Krönung
Holger Nowack
Nils Reinke
Siegfried Schwarz
Claus Spengler
Martin Sonnenkalb
Gunter Weber

Mai 2016

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1514 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, Validierung, Iodchemie, Schmelze-Beton-Wechselwirkung

Kurzfassung

Der Bericht enthält die Ergebnisse des vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) geförderten Vorhabens RS1514 zur Validierung des Systemcodes COCOSYS (Containment Code System) der GRS und des deutsch-französischen Integralcodes ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code). Diese Analysewerkzeuge werden u. a. für die Bewertung von Stör- und Unfallabläufen in Kernkraftwerken und zur Ableitung von Maßnahmen eines anlageninternen Notfallschutzes entwickelt und angewendet.

COCOSYS wird für umfassende Simulationen schwerer Störfälle (Unfälle) in einem Sicherheitsbehälter (Containment) eines Leichtwasserreaktors (LWR) sowie die analytische Begleitung von Experimenten entwickelt und validiert. Zielsetzung ist die Simulation aller wichtigen Vorgänge und Bedingungen im Containment im Verlauf von Unfällen. Der Anwendungsbereich schließt auch Auslegungsstörfälle der Anlagen mit ein. Dabei sollen die wesentlichen Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Phänomenen bei Stör- und Unfällen berücksichtigt werden.

Die Thermohydraulik in COCOSYS gilt als weitgehend validiert. Durch die Erweiterung der THAI-Anlage (maßgeblich zur Codevalidierung genutzt) um einen zusätzlichen Behälter (PAD) ergibt sich die Möglichkeit, weitere sogenannte doppelt-blinde Rechnungen zu den Inbetriebnahmeversuchen durchzuführen und die Prognosefähigkeit von COCOSYS zu überprüfen. Weitere zur Validierung genutzte Versuche bzw. Themen betreffen die Simulation des Dampfdurchbruchs bei siedenden Wasservorlagen, wofür ebenfalls erfolgreich doppelt-blinde Rechnungen durchgeführt wurden, und die Simulation einer Wasserstoffverbrennung in Kombination mit Sprühen. Beim zweiten Thema zeigten sich die Grenzen des derzeitigen Wasserstoffverbrennungsmodells FRONT auf.

In Bezug auf das Aerosolverhalten ergaben Validierungsarbeiten Nutzerhinweise für Simulationen der sogenannten nassen Resuspension nicht-löslicher Aerosole. Grundlage hierfür ist der THAI-Versuch TH-25. Da eine detaillierte Simulation aufgrund des komplexen Sachverhalts kaum möglich ist, werden Vorschläge zur oberen Abschätzung einzelner Modellparameter und für eine verbesserte Modellierung gegeben.

Das Aerosolwaschmodell (Aerosolabbau durch Sprühen) in COCOSYS wurde anhand des THAI-Versuchs AW-4 erstmals validiert. Dieser Versuch wurde intensiv

seitens der GRS begleitet. Dargestellt werden die Ergebnisse der durchgeführten Auslegungsrechnungen sowie der Nachrechnung. In den bisher durchgeführten Rechnungen ist der Aerosolabbau in der „trockenen“ Phase (vor dem Sprühen) zu niedrig, während dieser in der Sprühphase überschätzt wird (Faktor 1,5 bis 2). Hier sind zukünftig noch Verbesserungen notwendig.

Zur Berechnung des Iodverhaltens im Sicherheitsbehälter wird das Iodmodell AIM in COCOSYS verwendet, dessen Validierung auf Basis der nun vorhandenen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse weiter fortgeführt wurde. Im Rahmen des COCOSYS-Entwicklungsvorhabens RS1532 wurde es basierend auf den Erkenntnissen aus den THAI-Iodversuchen Iod-27a bis Iod-30 überarbeitet. Die Validierungsergebnisse zu den genannten Versuchen und den weiteren THAI-Versuchen Iod-15, -17 und -20 zeigen nun deutlich bessere Ergebnisse. Allerdings sollte auf dieser Basis das Iod/Stahl-Modell erneut angepasst werden, da beide Prozesse (Iod/Stahl und Iod/Farbe) in Bezug auf den $I_2(g)$ -Abbau in Konkurrenz stehen. Ein weiteres Thema ist die Iod/Silber-Reaktion sowie das Verhalten von Silberpartikeln. Hier wurden das Verhalten der Silberpartikel und die Reaktion im Sumpf (THAI AW-3) und in der Atmosphäre (THAI Iod-26) untersucht. Es wurden Hinweise für die Modellierung dieser Reaktionen im neuen AFP-Hauptmodul entwickelt.

Erstmals wurde das AULA-Modell im neuen AFP anhand der Laborexperimente zum Aerosolabwaschen überprüft. Aufgrund dieser Untersuchungen wurde das Modell noch um einen weiteren Abwaschprozess erweitert. Teilweise besteht aber noch Verbesserungsbedarf.

Radiolytische Iodreaktionen spielen für die Berechnung des Quellterms eine erhebliche Rolle. Die Modellierung der Gasphasen-Reaktionen in AIM ist in den letzten Jahren systematisch verbessert worden. Es wurde daher anhand der Versuche CAIMAN 97/02 und RTF P10 T2 überprüft, ob die Parametereinstellungen des Radiolysemodells nach wie vor gültig sind oder ob Korrekturen, insbesondere der pH-Abhängigkeit und/oder der Dosisleistung, erforderlich sind. Im Ergebnis wird eine weitere punktuelle Verbesserung/Überprüfung des Radiolysemodells empfohlen. In dem umstrukturierten AFP-Hauptmodul wurde kürzlich die Zersetzung von Csl und IOx durch Strahlung implementiert. In diesem Vorhaben wurde das Modell erstmals anhand von OECD STEM AER-1 erfolgreich überprüft. Zur Festlegung der Feuchteabhängigkeit (bzw. des Dampfgehalts) sind noch weitere Analysen notwendig.

In dem COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1532 wird das AFP Hauptmodul in COCOSYS komplett neu strukturiert. Erste erfolgreiche Validierungsrechnungen anhand VANAM M3 zum Aerosolverhalten und OECD BIP G4 zum Iod/Farbe-Verhalten zeigen gute Ergebnisse.

Ein weiterer Themenkomplex in COCOSYS betrifft die Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Das Modul MEDICIS im CCI-Hauptmodul berechnet diese Vorgänge. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden Experimente an der MOCKA-Anlage mit COCOSYS nachgerechnet. Zielsetzung ist es, die Wechselwirkung einer oxidischen und metallischen Simulatschmelze mit Beton inklusive Armierung in geschichteter Schmelzekonfiguration zu untersuchen. Zwei Versuche am KIT, die von der GRS intensiv begleitet werden, wurden nachgerechnet, wobei auch die spezifische Heizmethode der Schmelze im Experiment berücksichtigt wurde. Der Code lieferte zufriedenstellende Ergebnisse, wobei zukünftige MOCKA-Experimente weiter mit COCOSYS begleitet werden sollten.

Im Rahmen des 7. Framework Programme EURATOM der Europäischen Kommission wird das Projekt CESAM (Code for European Severe Accident Management) mit 18 Partnern und mit der GRS als Koordinator durchgeführt. Das Ziel von CESAM ist es, ASTEC speziell im Hinblick auf die Simulation von Notfallmaßnahmen in verschiedenen Kernkraftwerken weiterzuentwickeln. Dabei sollen besonders Unfallphänomene berücksichtigt werden, die in Fukushima Daiichi eine Rolle gespielt haben. Außerdem werden generische Referenzdatensätze für typische in Europa betriebene Kernkraftwerke erstellt und Unfallszenarien inklusive Berücksichtigung von Notfallmaßnahmen mit diesen Datensätzen analysiert. Arbeiten im Zusammenhang mit diesem Projekt RS1514 betreffen die Bewertung der Modelle zur Simulation des Kernverhaltens in SWR mit der neuen ICARE/CESAR Kopplung in ASTEC V2.1 und die Erstellung eines SWR Eingabedatensatzes dafür.

Einen weiteren Schwerpunkt des Vorhabens bilden die Anwendungsrechnungen von COCOSYS für generische Anlagen unter Verwendung neuer Modelloptionen bzw. Kopplungen. Dies betrifft Anwendungsrechnungen mit Simulation des vollständigen Flutens von Zonenvolumina in DWR und der Kopplung von COCOSYS und CoPool zur mehrdimensionalen Berechnung der Zustände in Wasserpools auch am Beispiel eines DWR KONVOI. Darüber hinaus wurde die Verwendung des DCH-Modells zum Schmelzeaustrag aus dem RDB unter erhöhtem Druck erweitert angewendet, d. h. das DCH-Modell wurde erstmals für einen detaillierten generischen EPR-Datensatz ver-

wendet. In allen Rechnungen traten zum Teil noch erhebliche Probleme auf, welche teilweise im Rahmen dieses Vorhabens gelöst werden konnten. Dies zeigt die Bedeutung solcher Anwendungsrechnungen für die Verifizierung des Codes auf, da hier die Anforderung an die Modelle meistens erheblich höher ist, als in Nachrechnungen kleinskaliger Experimente.

Durch die Einbindung der GRS in internationale Projekte (z. B. im OECD Rahmen) entstehen Synergieeffekte, welche für die Entwicklung und Validierung des COCOSYS-Programms sehr positiv sind. Die GRS beteiligte sich an mehreren experimentellen OECD Projekten (z. B. THAI2, BIP, STEM) als Mitglied in der Project Review Group und konnte so aktiv Einfluss auf die Experimente und deren Durchführung nehmen, um den größten Nutzen für die Codevalidierung daraus ziehen zu können. So zeigt sich im internationalen Vergleich, dass COCOSYS eine Spitzenstellung unter den Containment-Programmen einnimmt und auch für Lizenzrechnungen bei einzelnen Partnern eingesetzt wird.

Abstract

The report contains the results gained within a project sponsored by the Federal Ministry of Economics and Technology (BMWi) on further validation of the GRS code system COCOSYS (Containment Code System) and the Franco-German ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) integral code. The tools are provided e.g. for the assessment of accident and severe accident sequences and for the development of accident management measures in nuclear power plants.

COCOSYS is being developed and validated for the comprehensive simulation of severe accidents in a light-water reactor (LWR) containment as well as the analytical monitoring of experiments. The general objective is the simulation of all relevant processes and conditions in the containment during the process of a severe accident. The application range includes design basis accidents. This is to include also the consideration of all relevant interactions between the various phenomena during accidents and severe accidents.

The thermal hydraulic part in COCOSYS is assumed to be validated to a large extent. After the extension of the THAI facility (largely used for code validation) with an additional vessel (PAD) there is a possibility to conduct so-called double blind calculations of the commissioning tests to further prove the prognosis capability of COCOSYS. Additional experiments used for the validation have been the simulation of steam break through experiments in a boiling water pool, where double blind calculations have been performed as well, and the simulation of THAI experiments on hydrogen combustion in combination with spray. For the second topic the application limits of the current hydrogen combustion model FRONT are reached.

Related to aerosol behaviour validation work resulted in user advices for the simulation of wet resuspension of non-soluble aerosols. Basis is the THAI experiment TH-25. As a detailed simulation is still not possible due to the sophisticated conditions, upper conservative limits for selected model parameter (resuspension rate) have been proposed together with suggestions for model extensions.

The aerosol washout model in COCOSYS AFP has been validated according to the THAI AW-4 test for the first time. This experiment has been intensively attended by GRS. The results of the design and post calculations are presented. The aerosol concentration decrease is too low in the dry phase before spraying. During spray the de-

crease is somewhat too large (factor between 1.5 and 2). Further improvements are necessary.

For the calculation of the iodine behavior in the containment the model AIM is used in COCOSYS. Within the scope of the project the iodine model has been further investigated based on the existing uncertainty and sensitivity study. One main point is the validation of the iodine-paint reaction model, which has been improved within the COCOSYS developing project RS1532 according to the experience gained from THAI lod-27a to lod-30 test results. The new simulations show now much better results for the above mentioned experiments and the tests THAI lod-15, -17 and -20. However, the linked iodine-steel reaction model should be adjusted again, because both reactions (iodine-paint and iodine-steel) are in competition to the I₂(g) depletion. An additional topic is the iodine silver reaction and the silver aerosol behavior as well. The behavior of the silver particles inside a sump (THAI AW-3) and in the atmosphere (THAI lod-26) has been investigated. Hints for modelling of these reactions inside the new AFP have been developed.

For the first time, the AULA model inside the new AFP has been validated on the laboratory tests related to aerosol wash down. Based on these investigations the model has been further extended with an additional wash down process. However, further improvements are needed partially.

Radiolytic iodine reactions play an important role for source term calculations. In the last years the modelling of gas phase reactions in AIM has been improved systematically. Simulating the CAIMAN 97/02 and RTF P10 T2 tests it has been checked, if the radiolytic modelling is still adequate or if further improvements especially on the pH or dose rate dependency are needed. As a result partially improvements are recommended. In the new AFP module additional reactions to simulate the CsI and IO_x decomposition have been implemented recently. These reactions have been validated successfully at first on the OECD STEM AER-1 test. To determine the dependency on humidity or steam content further analyses are required.

Within the COCOSYS developing project RS1532 the AFP main module is going on to be restructured completely. First successful validation has been conducted on the aerosol experiment VANAM M3 and on iodine/paint experiment OECD BIP G4.

Another topic of COCOSYS is the simulation of molten core concrete interaction (MCCI) in the cavity of the containment. The module MEDICIS is used for such analyses. Within the scope of this project MOCKA experiments performed at KIT have been simulated with COCOSYS. Objective is to investigate the interaction of oxide and metallic melt (simulate) with concrete including reinforcement in a stratified melt configuration. Two MOCKA experiments, attended by GRS, have been simulated considering the special heating method of the melt used in the experiment.

The objective of the project CESAM (Code for European Severe Accident Management) within the 7th framework of EURATOM programme with 18 partners and the coordinator GRS is to further develop the European ASTEC code with regard to the simulation of severe accidents and severe accident measures (SAM). Especially, severe accident phenomena related to the Fukushima Daiichi accidents should be considered. Furthermore, reference input files for relevant European types of reactors should be set up and accident scenarios including SAM will be conducted. Working packages related to the RS1514 project are the evaluation of a BWR core model using the new ICARE/CESAR coupling in ASTEC V2.1 and the creation of a respective BWR input file together with partners.

Another main point of the validation project is the performance of plant applications using the new COCOSYS models and code couplings. These are the model extensions related to complete flooding of zone volumes and the coupling of ATHLET/COCOSYS with CoPool for 3D simulation of water pools. These two models/options have been tested for a scenario in a German PWR KONVOI plant type. The COCOSYS DCH model for melt release from RPV under elevated pressure has been used for a generic EPR plant type first time. In all of these applications partially severe problems occurred. The problems have already been solved partially within this project. This shows the essential significance of such plant applications, because the request on models is much larger compared to COCOSYS application for small scale experiments.

Through the international involvement of GRS within the framework of e.g. OECD projects synergetic effects emerge, which prove to be positive for the development and validation of COCOSYS. The GRS is involved in numerous OECD projects (e.g. THAI2, BIP, STEM) as a member of the project review group. This allows to actively interfere with experimentalists and to contribute to the definition of experiments to gain maximum profit for our own code validation processes. In the international community

COCOSYS has a leading position under containment codes and is used in licensing processes as well.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Validierung von COCOSYS-Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten.....	7
2.1	Thermohydraulik.....	7
2.1.1	Doppelt-blinde Simulation des THAI-Versuches zur Inbetriebnahme von THAI+	7
2.1.2	Begleitung der THAI-Versuche zum Dampfdurchbruch durch eine Wasservorlage.....	17
2.1.3	Begleitung der THAI-Versuche zur H ₂ -Deflagration mit und ohne Sprühen.....	34
2.1.4	Begleitung der geplanten THAI-Versuche zum Rekombinatorverhalten mit Gegenströmung	49
2.2	Aerosolverhalten.....	49
2.2.1	Schlussfolgerungen aus THAI-Versuchen zur nassen Resuspension mit nicht-löslichem Material.....	50
2.2.2	Begleitung der THAI-Versuche zum Aerosol auswaschen durch Sprühen.....	54
2.3	Iodverhalten.....	61
2.3.1	Begleitung der THAI-Iod-Einraumversuche zur Validierung des neuen Iod/Farbe-Modells.....	63
2.3.2	Begleitung der THAI-Iod-Mehrraumversuche zur Validierung des neuen Iod/Farbe-Modells	69
2.3.3	Begleitung der THAI-Versuche zum Aerosol abwaschen sowie zur Iod/Silber-Reaktion im Sumpf	91
2.3.4	Begleitung der Laborversuche im THAI-Programm.....	98
2.3.5	Begleitung der geplanten THAI-Versuche zum Sprühen mit kontaminiertem Wasser	105
2.3.6	Begleitung der THAI-Versuche zur Ablagerung von Iod auf reaktivem Ag-Aerosol und nichtreaktivem SnO ₂ -Aerosol.....	106
2.3.7	Validierung des Modells zur Radiolyse im Sumpf an Versuchen aus CAIMAN und RTF	111

2.3.8	Begleitung der AER-Versuche des OECD Programms STEM zur radiolytischen Csl- und IOx-Zersetzung	118
2.4	Erste Validierung des umstrukturierten AFP-Moduls	130
2.4.1	Validierung anhand des Aerosolversuchs VANAM M3	130
2.4.2	Validierung anhand des Iodversuchs BIP1-G4	135
2.5	Core Concrete Interaction (CCI)	137
2.5.1	Großmaßstäbliche MCCI-Versuche MOCKA bei KIT	137
2.5.2	Randbedingungen für COCOSYS MEDICIS	140
2.5.3	Ergebnisse der Nachrechnung von MOCKA6.1	142
2.5.4	Ergebnisse der Nachrechnung von MOCKA3.1	143
2.5.5	Schlussfolgerungen	145
3	COCOSYS und ASTEC Anwendung	147
3.1	Arbeiten zu ASTEC im EU-Vorhaben CESAM	147
3.1.1	Fachliche Koordination	148
3.1.2	Bewertung der Modelle zur Simulation des Kernverhaltens in SWR mit der neuen CESAR/ICARE-Kopplung in ASTEC V2.1	149
3.1.3	Bereitstellung von ASTEC-Quelltermdaten an RODOS	149
3.1.4	Erstellung eines SWR-Eingabedatensatzes für ASTEC V2.1 mit der neuen CESAR/ICARE-Kopplung	150
3.1.5	Modellbewertung (Assessment) zu Core Concrete Interaction – MEDICIS	154
3.2	Arbeiten zu COCOSYS – Testen des Modells zum Fluten von Zonen sowie der Kopplung mit CoPool am Beispiel eines DWR	158
3.2.1	Ergebnisse der Tests des Modells zum Fluten von Zonen	159
3.2.2	Ergebnisse der Tests gekoppelter Rechnungen von ATHLET-CD/COCOSYS mit CoPool	168
3.2.3	Auswertung der Rechenergebnisse im Hinblick auf den Containment-Sumpf	182
3.3	Arbeiten zu COCOSYS – Erprobung der Modellkette zum Schmelzeaustrag aus dem RDB unter erhöhtem Druck (DCH) am Beispiel des EPR	183

3.3.1	Simulation des DCH-Vorganges in COCOSYS.....	183
3.3.2	Überblick über DCH-Versuche DISCO-H bei KIT.....	186
3.3.3	Wiederholungsrechnung eines DISCO-Experiments für DWR KONVOI	188
3.3.4	Rechnung zum DCH mit einer einfachen Nodalisierung des EPR- Containments	190
3.3.5	Rechnung zum DCH mit einer detaillierten Nodalisierung des EPR- Containments	191
3.3.6	Zusammenfassung	198
4	Querschnittsaufgaben.....	201
4.1	Mitarbeit in OECD Projekten.....	201
4.1.1	Arbeiten in der Programme Review Group des STEM-Projekts	201
4.1.2	Arbeiten in der Programme Review Group und Leitung der Analytical Working Group des OECD THAI-2-Projektes.....	202
4.1.3	Mitarbeit in OECD-Arbeitsgruppen (WGAMA).....	203
4.2	Mitarbeit in SARNET2 und NUGENIA.....	211
4.2.1	Abschließende Arbeiten in SARNET2.....	211
4.2.2	Mitarbeit in NUGENIA.....	219
4.3	Qualitätssicherung und Konfiguration des COCOSYS- Programmsystems.....	220
4.3.1	Durchführung von Regressionstests mit COCOSYS.....	220
4.3.2	Ergänzung der Dokumentation	227
4.3.3	COCOSYS-User-Support	229
4.3.4	COCOSYS-Website.....	241
4.3.5	COCOSYS Users Workshop	242
4.3.6	ASTEC User Club Meetings	243
5	Zusammenfassung	245
5.1	Validierung von COCOSYS-Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten	245
5.1.1	Thermohydraulik.....	245

5.1.2	Aerosolverhalten.....	246
5.1.3	Iodverhalten.....	247
5.1.4	Umstrukturiertes AFP-Hauptmodul	251
5.1.5	Core Concrete Interaction (CCI)	252
5.2	COCOSYS und ASTEC Anwendung	252
5.2.1	ASTEC: EU-Vorhaben CESAM.....	252
5.2.2	COCOSYS: Überflutung von Zonen und Kopplung mit CoPool.....	253
5.2.3	COCOSYS: Erprobung der Ex-Vessel-Modellkette	254
5.3	Querschnittsaufgaben.....	255
5.4	Fazit.....	256
	Literaturverzeichnis.....	257
	Abbildungsverzeichnis.....	267
	Tabellenverzeichnis.....	277

1 Einleitung

Umfassende Sicherheitsanalysen von Stör- und Unfallabläufen für Kernkraftwerke erfordern den Einsatz von Rechenprogrammen, die entsprechend dem jeweils aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik eine möglichst realitätsnahe Simulation – sog. Best-Estimate-Analysen – der Abläufe und sich einstellenden Zustände erlauben. Diese Forderung wird sowohl für Auslegungsstörfälle als auch für auslegungsüberschreitende Ereignisse erhoben. Dabei stehen Analysen zur Beherrschung von Störfällen, zur Ableitung von Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes und zur Ermittlung des Quellterms aus der Anlage in die Umgebung im Mittelpunkt des Interesses. Solche umfassenden Best-Estimate-Analysen erfordern Analysewerkzeuge, welche nicht nur in der Lage sind, wichtige Einzelphänomene realitätsnah zu beschreiben, sondern insbesondere auch ihre Wechselwirkungen untereinander und das Gesamtverhalten der Anlage. Hierzu werden weltweit unterschiedliche Rechenprogramme entwickelt und anhand verfügbarer Experimente validiert. Dabei handelt es sich sowohl um mechanistische Detailcodes zur Modellierung von Einzeleffekten, um Codesysteme auf mechanistischer Basis, die auch Wechselwirkungen zwischen Phänomenen simulieren, als auch um Integralcodes zur (vereinfachten) Simulation des Gesamtablaufs.

Zur Erfüllung dieser Aufgabe entwickelt und validiert die GRS seit etwa einem Jahrzehnt den Systemcode COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem). Mit COCOSYS sollen die wichtigen Einzelphänomene und deren Wechselwirkung untereinander auf mechanistischer Basis simuliert werden können und Aussagen über das Gesamtverhalten des Sicherheitseinschlusses bei Auslegungsstörfällen und schweren Störfällen (Unfällen) ermöglicht werden.

Das Programmsystem COCOSYS ist in mehrere sogenannte Hauptmodule aufgeteilt (Abb. 1.1) und kann mit weiteren Programmen (ATHLET-CD, LAVA, CoPool, ATLAS) gekoppelt werden. In diesem Bericht werden die Ergebnisse des Vorhabens RS1514 dargestellt. Wesentliche Zielsetzung des Vorhabens war die Validierung des COCOSYS-Programms als auch die Überprüfung des Gesamtsystems, d. h. der Simulationskette mit ATHLET-CD oder CoPool, anhand von generischen Anlagenrechnungen. Weiterhin beteiligt sich die GRS am EU-Vorhaben CESAM (**C**ode for **E**uropean **S**evere **A**ccident **M**anagement), wobei dieses Vorhaben auch seitens der GRS koordiniert wird.

Die Gliederung des Vorhabens orientiert sich im Wesentlichen an der Projektstruktur, wobei im Laufe der Bearbeitung ursprünglich geplante Arbeitspunkte aufgrund veränderter Rahmenbedingungen entfallen sind bzw. durch andere Arbeitspunkte ersetzt wurden. Dies war bedingt z. B. durch die nicht rechtzeitige Verfügbarkeit der ASTEC V2.1 Version und punktuelle Änderungen im experimentellen Versuchsprogramm THAI bei Becker Technologies.

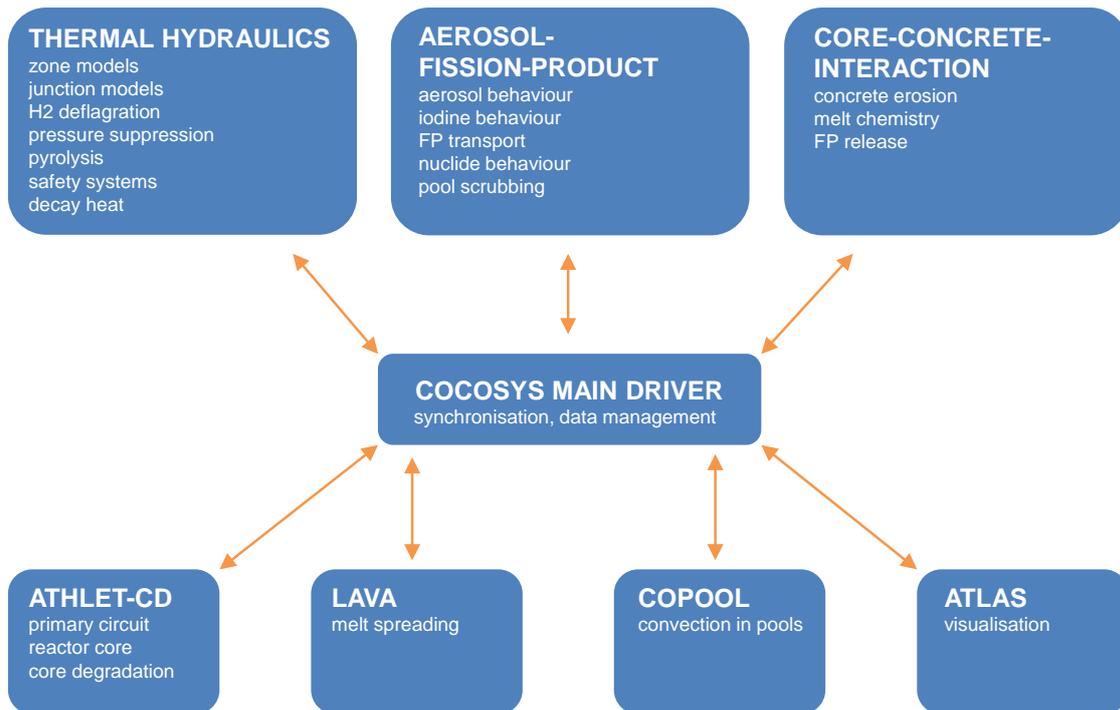


Abb. 1.1 Struktur von COCOSYS

Im Kapitel 2 werden die Ergebnisse in Bezug auf die Validierung des COCOSYS-Programms dargestellt. Hier wurden Arbeiten zur Thermohydraulik und zum Aerosol- und Iodverhalten durchgeführt.

Durch die Erweiterung der THAI-Anlage mit einem zusätzlichen Behälter (PAD genannt), welcher oben und unten mit dem anderen Behälter verbunden ist, können sogenannte doppelt-blinde Rechnungen der Inbetriebnahmeversuche durchgeführt werden, um die Prognosefähigkeit von COCOSYS zu überprüfen. Da die experimentellen Ergebnisse noch nicht vorliegen, werden in diesem Bericht nur die Nodalisierung der Gesamtanlage für diese Rechnungen sowie exemplarische Ergebnisse der Rechnungen beschrieben. Die Arbeiten werden dann im Anschlussvorhaben weitergeführt.

Im experimentellen Vorhaben THAI V bei Becker Technologies wurde der Effekt des Dampfdurchbruchs bei siedenden Randbedingungen in einem Wasserpool (SWR-spezifisch) untersucht. Diese Versuche wurden analytisch begleitet. Dabei hat sich die GRS an der Auslegung der Versuche beteiligt und doppelt-blinde Rechnungen, Nachrechnungen sowie Parameterstudien durchgeführt. Ziel ist es, die in COCOSYS implementierte Korrelation zum Dampfdurchbruch zu überprüfen, welche anhand russischer Experimente abgeleitet wurde.

In diesem Vorhaben wurden erstmals Rechnungen mit dem FRONT Modell in COCOSYS zu Wasserstoffverbrennungen in Kombination mit Sprühen durchgeführt. Sprühtropfen können einerseits die Verbrennung beschleunigen, andererseits führen sie auch zu einer Abschwächung. Insofern sind solche Versuche von sicherheitstechnischer Bedeutung, da Sprühsysteme unter anderem im SWR zum Einsatz kommen. Die Rechnungen haben gezeigt, dass der vergleichsweise einfache Ansatz in FRONT nicht in der Lage ist, insbesondere die Abschwächung der H₂-Verbrennung zu erfassen. Hier sind weitere Modellüberlegungen erforderlich.

Für die Simulation einer langfristigen Freisetzung von Spaltprodukten aus einer siedenden Wasservorlage (Sumpf im DWR oder Kondensationskammer im SWR) spielt die Modellierung der sogenannten nassen Resuspension von Aerosolen/Spaltprodukten eine Rolle. Bisher wurde die nasse Resuspension von löslichen Spaltprodukten untersucht. Das Verhalten von nicht-löslichen Spaltprodukten ist dazu unterschiedlich. Daher wurden die Ergebnisse des Experiments THAI TH-25 ausgewertet und Nutzerhinweise sowie Empfehlungen für eine verbesserte Modellierung in COCOSYS gegeben.

In diesem Vorhaben wurde erstmals eine Validierung zum Phänomen Aerosolwaschen aus der Atmosphäre durch Sprühen mit COCOSYS durchgeführt. Für die Untersuchungen wurde der von Becker Technologies durchgeführte Versuch AW-4 herangezogen. Das Ziel des Versuches ist es, die Abnahme der Aerosolkonzentration durch ein reaktortypisches Sprühsystem mit polydispersem Tropfenspektrum zu untersuchen. Dargestellt werden die Ergebnisse der durchgeführten Auslegungsrechnungen sowie der Nachrechnung.

Zur Berechnung des Iodverhaltens im Sicherheitsbehälter wird das Iodmodell AIM in COCOSYS verwendet. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse des Iodmodells AIM in COCOSYS anhand des PHEBUS FPT1

Versuchs wurde die Validierung des Iodmodells fortgesetzt. Die GRS beteiligte sich an der Auslegung der Versuche THAI Iod-27 bis -30 unter Verwendung des bisher implementierten Iod/Farbe-Modells. Es zeigte sich, dass die Iodablagerung auf Farbe unter den gegebenen thermodynamischen Randbedingungen erheblich überschätzt wurde und somit in den Versuchen die erwarteten Konzentrationsunterschiede für I_2 nicht beobachtet wurden. Mit dem im COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1532 verbesserten Modell wurden die Rechnungen wiederholt und deutlich bessere Ergebnisse erzielt.

Wie in dieser Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bestätigt wurde, spielt die Iod/Silber-Reaktion eine wichtige Rolle. Ergebnisse zeigen, dass das Modell noch mit erheblichen Unsicherheiten behaftet ist. Dies gilt insbesondere für die effektive reaktive Oberfläche der im Sumpf suspendierten bzw. auf dem Sumpfboden abgelagerten Silberpartikel. Anhand des THAI-Versuchs AW-3 Teil 2 wurden entsprechende Analysen durchgeführt, die den Einfluss der zeitlich veränderlichen effektiven Silberoberfläche bestätigen.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde das Abwaschmodell AULA zum Abwaschen von Aerosolen von Strukturen mit Kondensat durch Vergleiche anhand der Laborversuche zu AW-3 überprüft und das Modell erweitert. In diesem Bericht werden die Ergebnisse zum Test 4 exemplarisch dargestellt.

In der THAI-Anlage wurde die Reaktion von elementarem Iod I_2 an Aerosolen untersucht (Iod-25, Iod-26). Hier zeigt sich, dass reaktive Aerosole, wie zum Beispiel Silber, eine deutliche Senke für I_2 darstellen. In diesem Bericht werden die Ergebnisse der Vorausrechnung zu Iod-26 dargestellt und Hinweise zur Modellierung gegeben.

Radiolytische Iodreaktionen haben einen erheblichen Einfluss auf die flüchtigen und somit quelltermrelevanten Iodspezies $I_{2(g)}$ und RI. $I_{2(g)}$ hängt nicht nur von der radiolytischen I_2 -Bildung im Sumpf, sondern auch vom I_2 -Verhalten in der Gasphase mit Adsorption an Oberfläche, radiolytischer IOx-Bildung etc. ab. Die Modellierung der Gasphasen-Reaktionen in AIM ist in den letzten Jahren systematisch verbessert worden. Anhand von Nachrechnungen eines CAIMAN und eines RTF Versuchs, wurde überprüft, ob die Einstellung und Modellierung der radiolytischen Reaktionen weiter optimiert werden müssen.

Im Rahmen des COCOSYS-Entwicklungsvorhabens RS1532 wird das AFP-Hauptmodul umstrukturiert. Dies ist noch nicht abgeschlossen. Die Umstrukturierung

umfasst neben einer programmtechnischen Umstellung auch eine deutliche Erweiterung verschiedener Konzepte, wie z. B. die Bilanzierung der Spaltprodukte im Wasserfilm auf einer Wandoberfläche. Es ist daher erforderlich, dieses neue Modul anhand relevanter Versuche erneut zu validieren. Hierzu wurden zunächst der Aerosolversuch VANAM M3 und ein Iod/Farbe-Versuch aus dem OECD BIP-1 Programm ausgewählt. Die Ergebnisse sind vielversprechend.

Ein weiterer Themenkomplex in COCOSYS betrifft die Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Das Modell MEDICIS im CCI-Hauptmodul berechnet die Vorgänge. Zur Validierung wurden im Rahmen dieses Vorhabens Experimente an der MOCKA-Anlage bei KIT mit COCOSYS nachgerechnet. Besonderes Merkmal dieser Versuche ist die Heizmethode der Schmelze durch die Zufuhr eines reaktiven Stoffstroms, wodurch es möglich ist, Betonstrukturen mit einer Armierung zu verwenden. Der Code lieferte zufriedenstellende Ergebnisse.

Ein Schwerpunkt des geplanten Vorhabens ist die Durchführung von generischen Anwendungsrechnungen unter Verwendung neuer Modelloptionen bzw. Kopplungen in COCOSYS. Zurzeit werden in COCOSYS zentrale Modelle modifiziert bzw. erweitert. Hier sind das vollständige Fluten von Zonen, die Umstrukturierung des AFP-Moduls, Umstellung des Datentransfers im COCOSYS-Treiber, Einsatz von MEDICIS und die Anbindung neuer Module wie CoPool und REKO DIREKT zu nennen. Die Arbeiten hierzu werden in Kapitel 3 dargestellt. Aufgrund der höheren Komplexität der Analysen und zum Teil im Vergleich zum Experiment extremeren Randbedingungen sind solche Analysen erforderlich, um die Möglichkeiten von COCOSYS aufzuzeigen bzw. auch noch vorhandene Schwachstellen zu identifizieren und abzustellen. In diesem Vorhaben wurde erstmals das Fluten der Zonen sowie die Anbindung von CoPool zur 3D-Simulation der Zustände in Wasserpools für eine deutsche Anlage vom Typ KONVOI getestet. Verwendet wird dabei der gekoppelte ATHLET-CD/COCOSYS-Datensatz mit einem sehr detaillierten Datensatz für das Containment. Die Modelle zum Ex-Vessel Schmelzeverhalten wurden anhand eines EPR-Datensatzes überprüft. Alle diese Anwendungsrechnungen zeigen, dass noch weiterer Entwicklungsbedarf besteht, wobei einzelne Probleme bereits im Rahmen dieses Vorhabens gelöst wurden.

Auf Basis des EU-Calls zum Thema „Impact of the nuclear accident in Japan on Severe Accident Management“ hat die GRS zusammen mit IRSN das EU-Vorhaben CESAM (**C**ode for **E**uropean **S**evere **A**ccidents **M**anagement) initiiert, bei dem die GRS die Koordination übernommen hat. Ziel dieses Vorhabens ist es, im Hinblick auf die Un-

fallabläufe in Fukushima notwendige Modellerweiterungen in ASTEC zu ermitteln und die durch IRSN implementierten Modellergänzungen für Siedewasserreaktoren zu testen. Weiterhin wird mit anderen europäischen Partnern eine Datenbasis verschiedener Datensätze für ASTEC für europäische Anlagentypen aufgebaut. In diesem Bericht wird der aktuelle Stand der Arbeiten dargestellt, soweit diese Aktivitäten im Rahmen dieses Vorhabens begleitet wurden.

Internationale Aktivitäten, zum Beispiel die Beteiligung an OECD Projekten, haben eine hohe Bedeutung und bringen zusätzliche Erkenntnisse, die in die Codevalidierung einfließen. Wesentliche Ergebnisse der vielfältigen Querschnittsarbeiten sind in Kapitel 4 dargestellt. Die GRS ist an zahlreichen experimentellen OECD-Projekten (THAI, BIP, STEM) intensiv beteiligt. Zusätzlich beteiligte sich die GRS im Rahmen dieses Vorhabens an den WGAMA-Arbeitsgruppen zum Thema „Status zum gefilterten Venting des Sicherheitsbehälters“ und „Anwendung von schnelllaufenden Notfalltools“. Durch den Erfahrungsaustausch sowie den Vergleich mit anderen Programmsystemen wird die Qualität von COCOSYS verbessert. Der Stellenwert von COCOSYS lässt sich gut an der Verbreitung des Programmsystems sowie dem Einsatzbereich ablesen. Dadurch, dass das Programm für die Genehmigung eingesetzt wird, ist es notwendig, die Qualität des Programms sicherzustellen und weiter nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik zu verbessern.

Kapitel 5 fasst die gewonnenen Erkenntnisse des Vorhabens zusammen.

2 Validierung von COCOSYS-Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten

2.1 Thermohydraulik

Die Thermohydraulik in COCOSYS gilt als weitgehend validiert. Allerdings bietet die Erweiterung der THAI-Anlage mit einem zusätzlichen Behälter (PAD) zur Versuchsanlage THAI+ erneut die Möglichkeit, sogenannte „doppelt-blinde“ Rechnungen durchzuführen. Die doppelt-blinde Simulation des THAI-Versuches TH-27 (Inbetriebnahmeversuch) hat einen hohen Stellenwert für die Validierung, da vorher keine Versuche zu THAI+ durchgeführt wurden, an denen man sich orientieren konnte (siehe Kap. 2.1.1).

Mit den Analysen zum Thema des Dampfdurchbruchs durch eine Wasservorlage unter siedenden Randbedingungen wird die in COCOSYS anhand von russischen Experimenten implementierte Korrelation überprüft (siehe Kap. 2.1.2). Dieser Vorgang ist für schwere Störfälle in KKW des Typs Siedewasserreaktor (SWR-72 – KKW Gundremmingen, Mark I – z. B. KKW Fukushima), in RBMK-1000 Anlagen bzw. für Anlagen mit Druckabbausystemen (WWER-440/213) von Bedeutung.

Die Verwendbarkeit des vergleichsweise einfachen H₂-Verbrennungsmodells FRONT in COCOSYS soll anhand von THAI-Versuchen mit Wasserstoffverbrennung in Kombination mit Sprühen untersucht werden (siehe Kap. 2.1.3).

Die im laufenden THAI-Vorhaben geplanten Versuche zum Rekombinatorverhalten in Gegenströmung wurden begleitet, d. h. es wurden in einer ersten Diskussionsrunde die Versuche inhaltlich mit vorbereitet (siehe Kap. 2.1.4).

2.1.1 Doppelt-blinde Simulation des THAI-Versuches zur Inbetriebnahme von THAI+

Zum Zeitpunkt der Berichtserstellung sind die experimentellen Ergebnisse des Inbetriebnahmeversuchs TH-27 noch nicht freigegeben. In diesem Bericht werden einzelne COCOSYS-Ergebnisse der doppelt-blinde Rechnung dargestellt, die auf den spezifizierten Versuchsrandbedingungen aufbauen. Da es bei der Durchführung des Versuches vereinzelt Abweichungen zum spezifizierten Versuchsablauf gab, wurden auch noch blinde Rechnungen zu TH-27 durchgeführt, die auf den tatsächlichen Versuchs-

randbedingungen beruhen. Die Abweichungen der Ergebnisse waren gering. Ein detaillierter Vergleich aller Ergebnisse erfolgt im Nachfolgevorhaben, wenn die experimentellen Ergebnisse vorliegen.

2.1.1.1 Versuch TH-27

Die erweiterte Anlage THAI+ /FRE 15/ besteht aus dem ursprünglichen THAI-Behälter und dem dazu parallel geschalteten Behälter PAD (Abb. 2.1). Die Behälter sind oben und unten mit je einer Rohrleitung DN 500 verbunden. Der THAI-Behälter hat ein freies Volumen von 59 m³, PAD von 18 m³. Beide Behälter haben zur Temperaturreglung Heiz-Kühlmäntel (Abb. 2.2) durch die Thermoöl fließen kann. Für die restlichen Wandflächen ist der THAI-Behälter mit einer regelbaren elektrischen Beheizung ausgestattet (Abb. 2.3). Die Behälter sowie die Rohrleitungen sind mit Mineralfaserwolle isoliert.

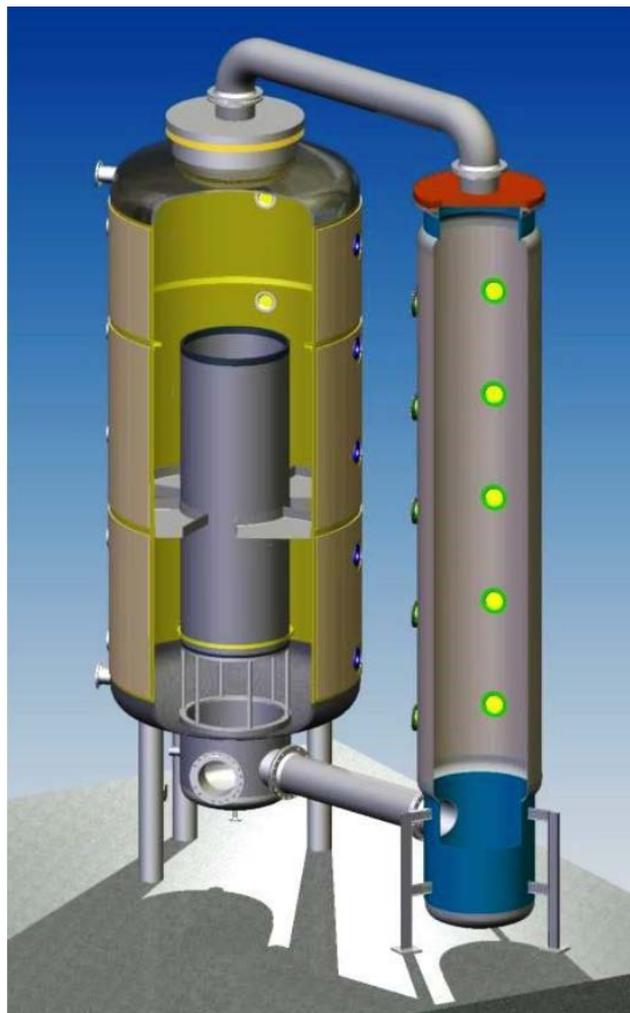


Abb. 2.1 THAI+ Versuchsanlage /FRE 15/

Im Versuch TH-27 befanden sich im THAI-Behälter der Innenzylinder und die Kondensatwannen. Die spezifizierte Fahrweise des Versuchs wird anhand von Tab. 2.1 und Abb. 2.2 bis Abb. 2.6 erläutert.

Tab. 2.1 Fahrweise des Inbetriebnahmeversuchs TH-27

Zeit (h)	Fahrweise des Versuchs
0 – 0,5	THAI, obere Dampfeinspeisung (35 g/s) bei 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 mit dem unteren Heiz-Kühlmantel
30 – 36	PAD, Wärmeabzug von 6 kW mit dem mittleren Heiz-Kühlmantel
32 – 36	PAD, Wärmeabzug von 4 kW mit dem oberen Heiz-Kühlmantel
34	PAD, Heliumeinspeisung (1 g/s, Masse = 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

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.

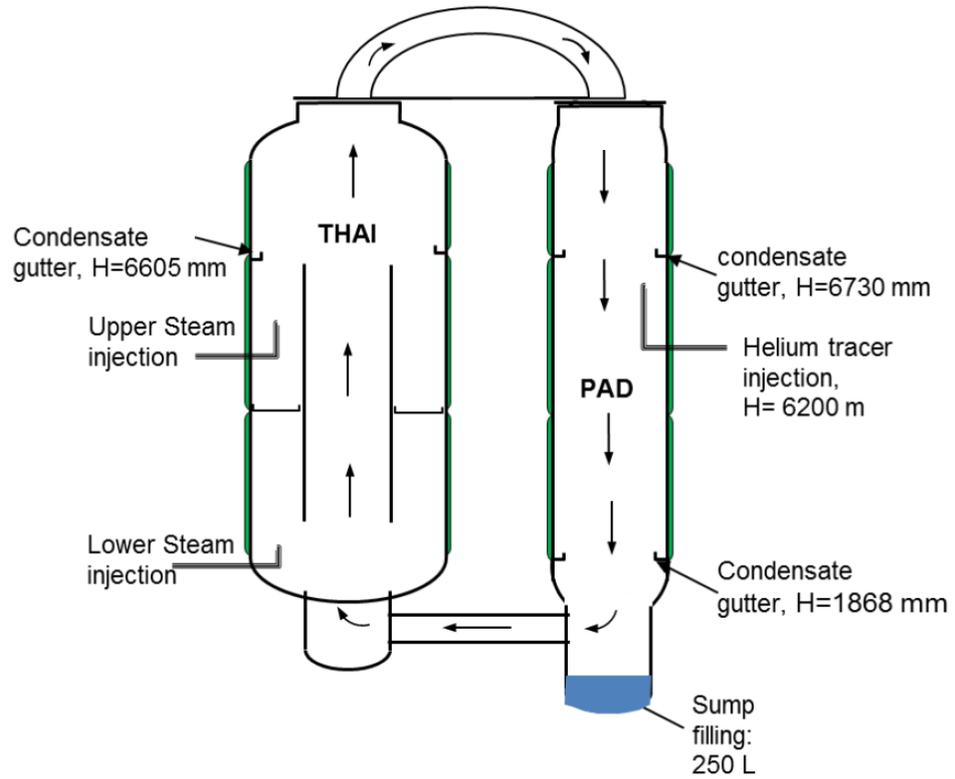


Abb. 2.2 THAI+ in der Konfiguration des Versuchs TH-27, mit Einspeisestellen von Dampf und Helium sowie Heiz- und Kühlmänteln (grün)

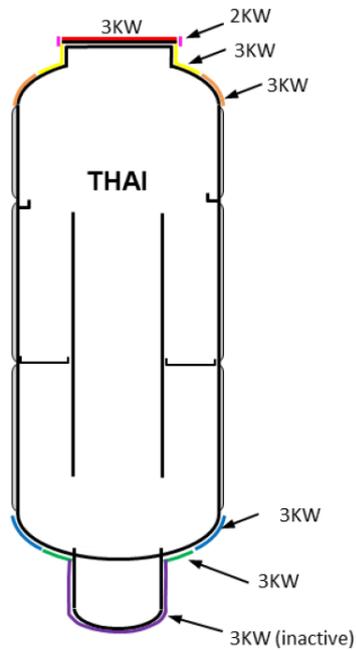


Abb. 2.3 TH-27, Elektrische Wandheizung des THAI-Behälters

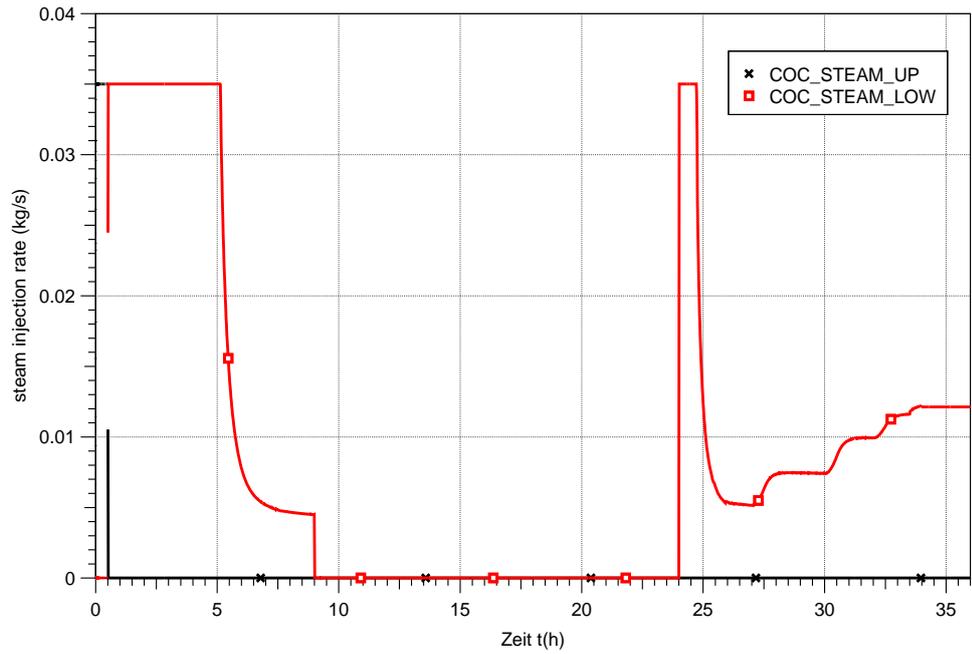


Abb. 2.4 TH-27, Dampfeinspeisung in den THAI-Behälter (COCOSYS-Ergebnis)

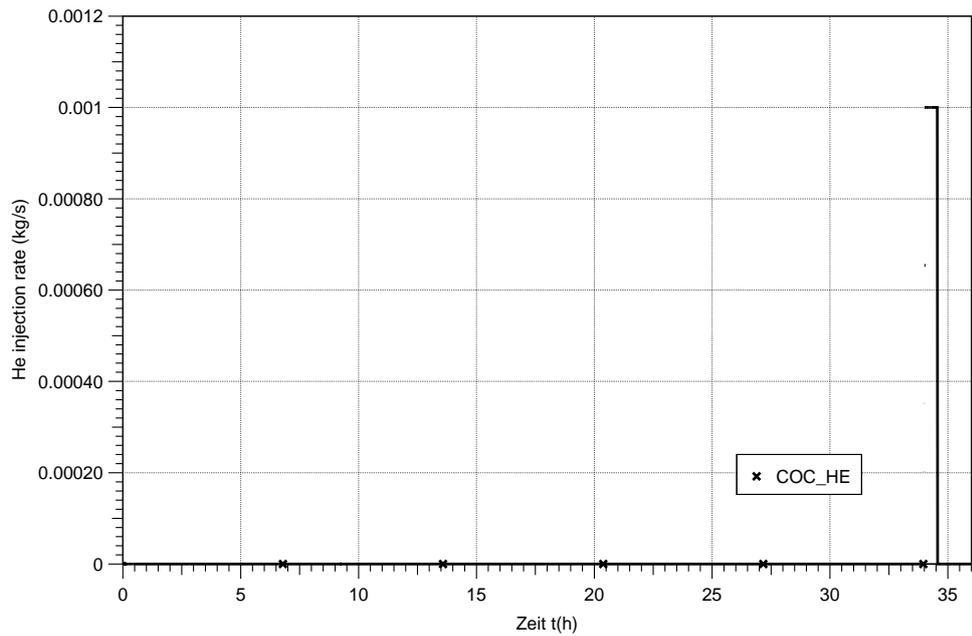


Abb. 2.5 TH-27, Heliumeispeisung in den PAD

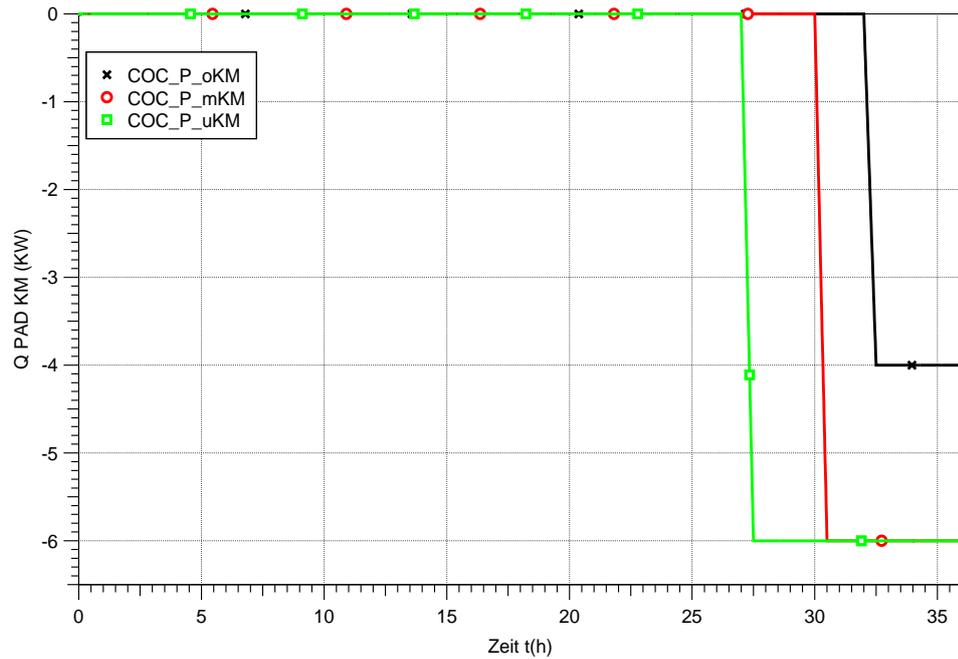


Abb. 2.6 TH-27, Wärmeabzug durch die Heiz- und Kühlmäntel des PAD

2.1.1.2 COCOSYS-Modellierung

Die COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Abb. 2.7 bis Abb. 2.9, unterteilt das freie Volumen von THAI+ in 109 Zonen. Zusätzlich vorhanden sind die Umgebungszone sowie 5 Zonen zur Bilanzierung des Kondensatabzuges aus der Anlage und eine Zone für den Atmosphärenabzug der Heliumkonzentrationsmessungen. Der THAI-Behälter ist in Umfangsrichtung in 3 Segmente unterteilt (Abb. 2.9 und Abb. 2.10):

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

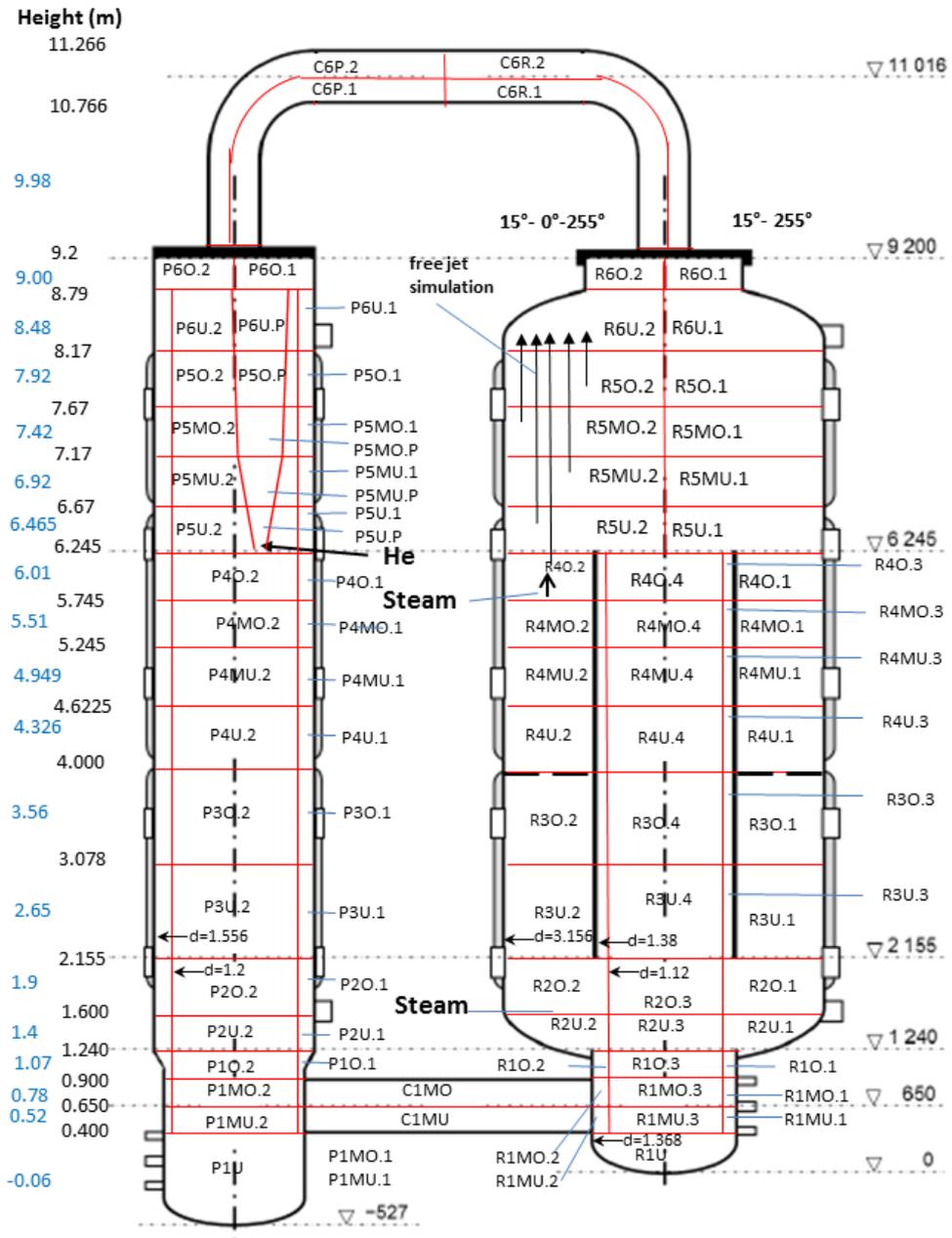


Abb. 2.7 COCOSYS-Nodalisation zu TH-27

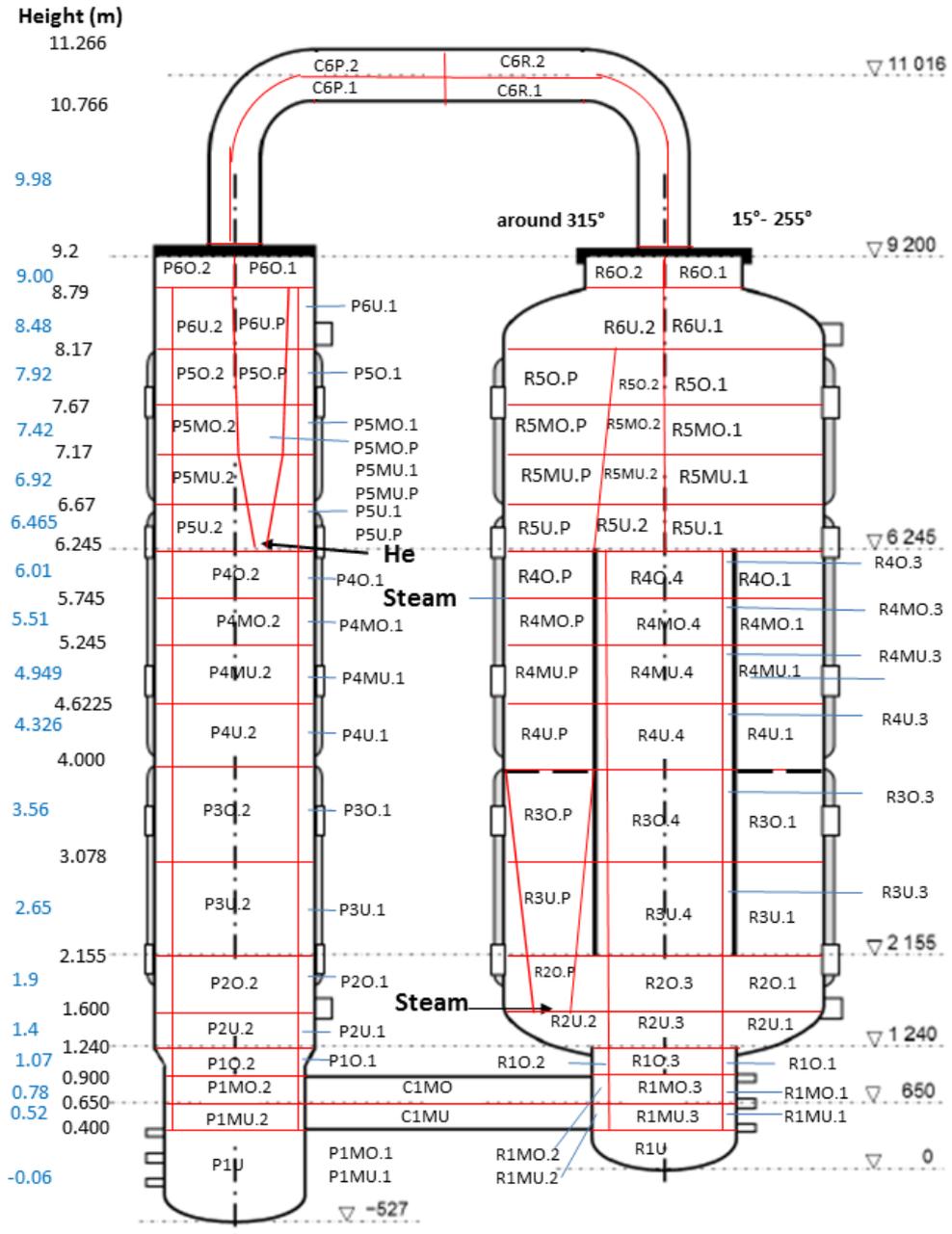


Abb. 2.8 COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Plume für untere Dampfeinspeisung

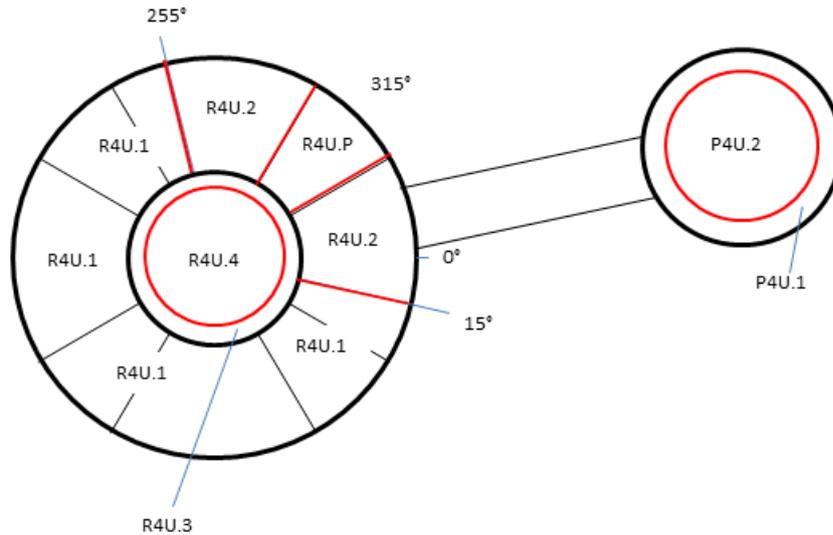


Abb. 2.9 COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Querschnitt

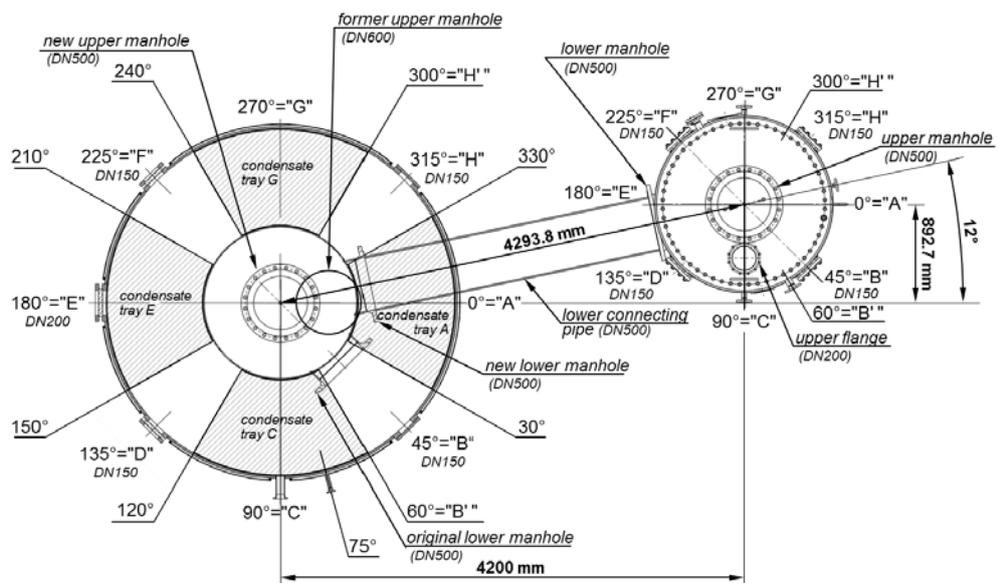


Abb. 2.10 Querschnitt THAI+ /FRE 15/

Die Hintergrundinformationen zur Simulation von Einspeisungen, die entweder einen Freistrahler oder eine Plume erzeugen, sind im COCOSYS Users Manual dokumentiert. 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 Atmosphären-

renmitrisses 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 ($d = 0,15 \text{ m}$) 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 $d = 0,3 \text{ m}$ eine Geschwindigkeit von 0,5 bis 0,75 m/s. Bei $d = 0,4 \text{ m}$ hat sie eine Geschwindigkeit von 0,24 bis 0,37 m/s. Dann wird die Strömung hauptsächlich aufwärts gerichtet sein. Die Atmosphäre bestehend aus eingespeistem Dampf und beigemischter Atmosphäre wird plumeförmig aufwärts steigen. 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 Plumeströmungsfläche 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 vom PAD wird mit Hilfe von Tabellen vorgegeben (negative Wärmeeinspeisung, siehe Abb. 2.6). 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.

Als ein Ergebnisbeispiel der doppelt-blinden COCOSYS-Rechnung ist der berechnete Druckverlauf in Abb. 2.11 dargestellt. Weitere Rechenergebnisse werden in einem folgenden Bericht veröffentlicht, wenn die experimentellen Ergebnisse vorliegen.

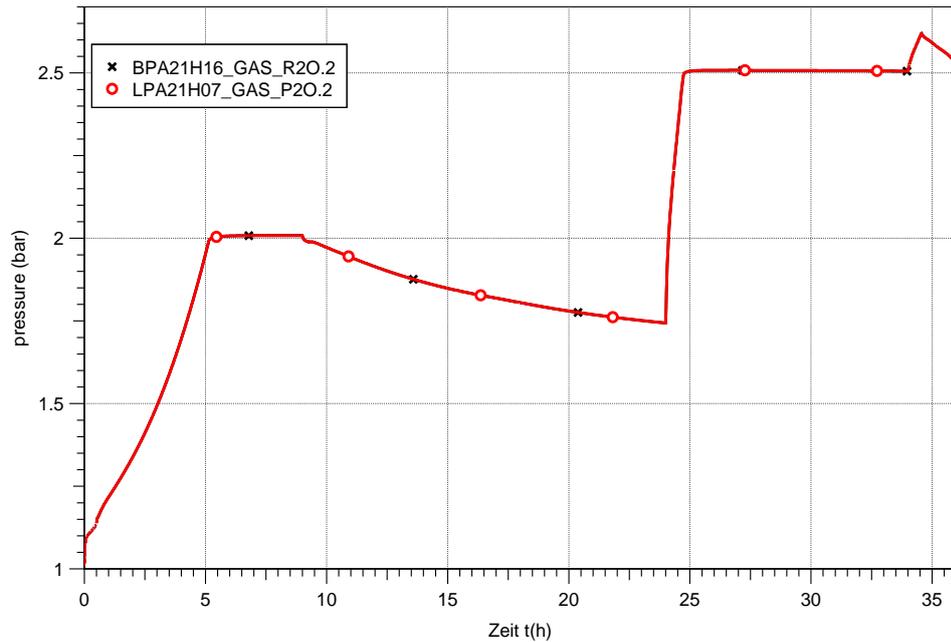


Abb. 2.11 TH-27, Druckverlauf (COCOSYS-Ergebnis)

2.1.2 Begleitung der THAI-Versuche zum Dampfdurchbruch durch eine Wasservorlage

Im Rahmen des THAI-V Versuchsprogramms wurden von Becker Technologies im November 2014 an der THAI-Anlage die Tests WH-20 bis WH-23 zur experimentellen Untersuchung des Effekts des Dampfdurchbruchs durch eine Wasservorlage unter siedenden Randbedingungen durchgeführt /FRE 14a/. Dieser Vorgang ist für schwere Störfälle in KKW des Typs Siedewasserreaktor (SWR-72 – KKW Gundremmingen, Mark I – z. B. KKW Fukushima) und in RBMK-1000 Anlagen bzw. für Anlagen mit Druckabbausystemen (WWER-440/213) von Bedeutung.

Die GRS unterstützte Becker Technologies in der Vorbereitung, d. h. in der Auslegung und Fahrweise der WH-Versuche durch COCOSYS-Rechnungen. Zum Versuch WH-20 wurde zudem eine doppelt-blinde Rechnung durchgeführt und dokumentiert. Vor Bekanntgabe der exakten Versuchsrandbedingungen und der Fahrweise der Anlage konnte so die Prognosefähigkeit der Modelle in COCOSYS überprüft werden.

Nach Freigabe der Ergebnisse wurde eine offene Nachrechnung zum Versuch WH-20 durchgeführt und mit den Ergebnissen der doppelt-blinden Vorausrechnung verglichen. Zu speziellen Annahmen und Modellparametern erfolgten Variantenrechnungen zur

Klärung aufgetretener Fragen. Die Ergebnisse sind im Folgenden zusammenfassend dargestellt. Details können dem Bericht /ARN 16/ entnommen werden.

2.1.2.1 THAI-Versuche WH-20 bis WH-23

Schwerpunkt der Experimente war die Bestimmung des Beginns der unvollständigen Kondensation bei Einleiten von Dampf bzw. eines Dampf/Luft-Gemisches unter Wasser, d. h. der Wassertemperatur beim Dampfbruch an der Oberfläche des inneren Pools. In den Versuchen wurde mit tief liegender Einspeisung gearbeitet, d. h. der Pool ist durchmischt. Somit kann keine Temperaturschichtung und damit kein "lokales Sieden" wie in /IAE 14/ bei der Verwendung von Spargern in Mark I Containments auftreten.

Für die Berechnung des Dampfbruches durch eine Wasservorlage gibt es in COCOSYS eine aus russischen Experimenten für vertikal eintauchende Kondensationsrohre abgeleitete Korrelation von Chasanov/Smirnova /CHA 87/, die anhand der Experimente auf Gültigkeit für SWR-72 Anlagen überprüft werden sollte.

Der THAI-Behälter hat eine Höhe von 9,2 m, einen Durchmesser von 3,2 m und ein Volumen von 59 m³. Für die WH-Versuchsserie wurden die Einbauten aus dem Behälter entfernt und ein zylindrischer Teil, der innere Pool, installiert (Abb. 2.12). In den Versuchen wird Dampf bzw. ein Dampf/Luftgemisch durch ein horizontales Sintermetallrohr in den inneren Pool eingespeist. Der Heizmantel (rot markiert in Abb. 2.12) wird mit Öl auf einer vorgegebenen Temperatur gehalten. Alle anderen Außenwände sind ebenfalls isoliert und werden elektrisch beheizt, um Kondensation zu verhindern. Der innere Poolbereich (grün markiert) ist an der Außenseite isoliert, aber nicht beheizt. Anfallendes Kondensat wird aus dem THAI-Behälter abgezogen. Weitere Details inklusive der Messstellen sind in /ARN 14/, /FRE 14a/ zu finden.

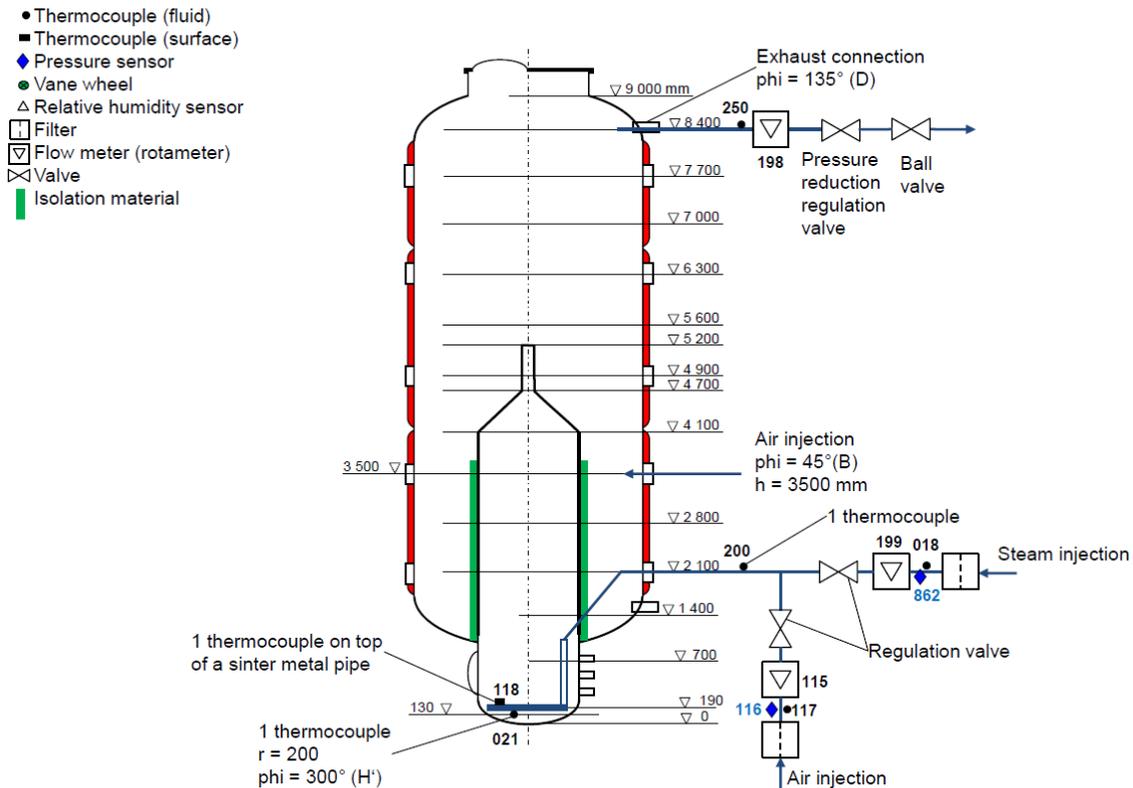


Abb. 2.12 THAI, WH-Versuchsserie, Konfiguration des Versuchsstands /FRE 14a/

Die Randbedingungen für die Experimente WH-20 bis WH-23 sind in Tab. 2.2 aufgelistet.

Tab. 2.2 Versuchsrandbedingungen für die WH-Experimente /FRE 14a/

Testparameter	WH-20	WH-21	WH-22	WH-23
Poolhöhe, [m]	3,7	3,7	3,7	1,2
Wassertemperatur, [°C]	70	70	70	70
Absoluter Behälterdruck, [bar]	1,5	1,5	1,5	1,5
Wandtemperatur, [°C]	115	115	115	115
Dampfmassenstrom, [g/s]	100	90	50	100
Luftmassenstrom, [g/s]	0	10	0	0
Froude-Zahl	1,5 E-5	1,2 E-5	3,75 E-6	5 E-5

Die Experimente wurden in drei Versuchsphasen durchgeführt /FRE 14a/. Die Phase 1 diente der Generierung der thermohydraulischen Anfangsbedingung (Konditionierung). Während der Hauptversuchsphase (Phase 2) heizte sich der Pool durch Kondensation des eingespeisten Dampfes kontinuierlich auf, bis es zur unvollständigen Kondensation

kommt und Dampf durch die Wasseroberfläche hindurchbricht. In der dritten Versuchsphase wurde die Dampffreisetzungsrates untersucht, die sich durch das Aufsieden einer unterkühlten Wasservorlage durch Druckabsenkung (Venting) ergibt.

2.1.2.2 COCOSYS-Datensatz

Der COCOSYS-Datensatz ist im Prinzip der gleiche Datensatz wie er in den blinden Vorausrechnungen verwendet wurde und in /ARN 14/ detailliert beschrieben ist. Es wurde lediglich eine weitere Hilfsverbindung zu Modellierung des Wasserabflusses aus dem inneren Pool (Zone R1) während der Konditionierungsphase aufgenommen sowie die Modellierung der Außenwand des THAI-Behälters leicht modifiziert (Vorgabe der Temperaturrandbedingung und Vernachlässigung der äußeren Isolationsschicht, mögliches Kondensat an den oberen Strukturen wird direkt in den Sumpf geleitet).

Abb. 2.13 zeigt die aktuelle Nodalisierung inklusive wesentlicher geometrischer Parameter. Die Nodalisierung umfasst 7 Zonen, 9 Verbindungen (gegenüber 8 in den Vorausrechnungen) und 15 wärmeleitende Strukturen (Abb. 2.14). Auf Basis des Versuchsberichtes /FRE 14a/ sowie nach Diskussion mit Becker Technologies wurden einige Daten leicht modifiziert (rot geschrieben in Abb. 2.13). Zur Vereinfachung der Modellierung der Druckregulierung und des Ventings ist das Abblaseventil aus R3 in die Umgebung (Abb. 2.14 links) durch 2 identische Verbindungen V3E (Öffnung nur während Druckregulierung) und V3EL (Venting) abgebildet, wird aber der Einfachheit meist nur als „V3E“ bezeichnet.

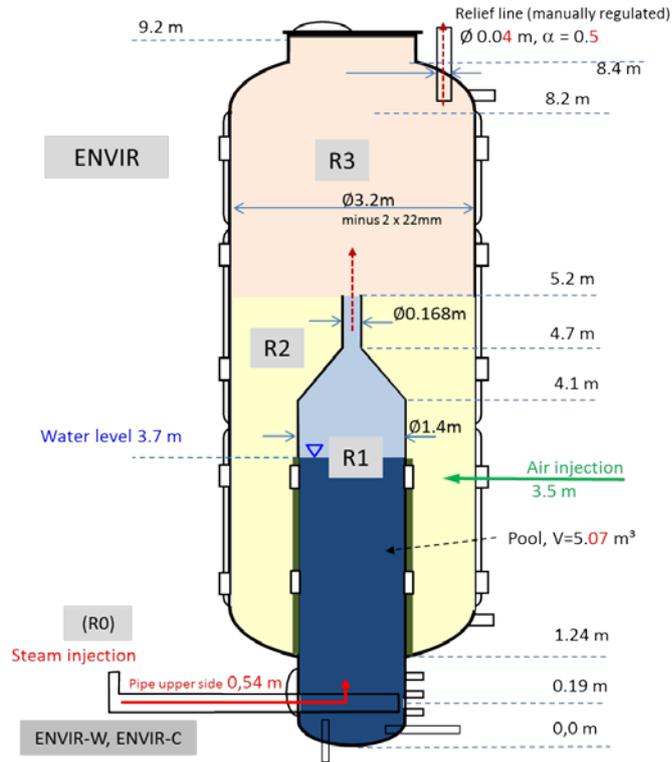


Abb. 2.13 WH-20, COCOSYS-Nodalisierung

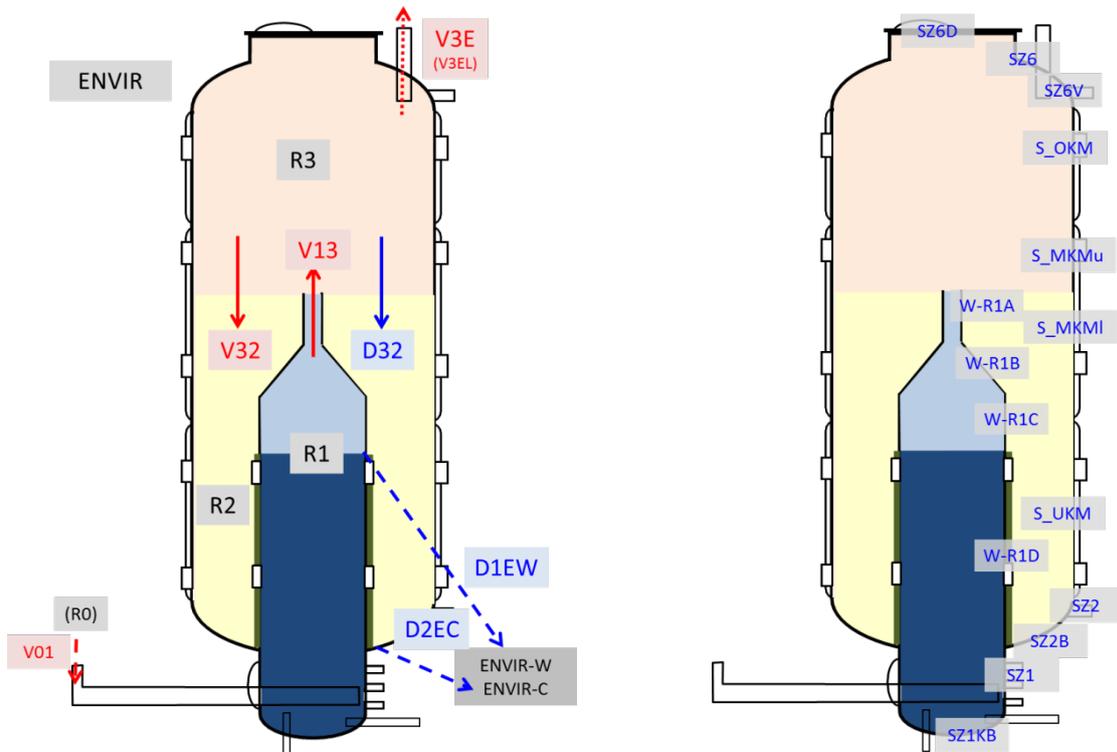


Abb. 2.14 WH-20, COCOSYS-Nodalisierung, Verbindungen (linke Graphik) und Strukturen (rechte Graphik)

Die in der blinden Vorausrechnung und in der offenen Nachrechnung verwendeten Anfangs- und Randbedingungen des Versuchs WH-20 sind in Tab. 2.3 gegenübergestellt. Für die Nachrechnung angepasste Bedingungen sind dabei in grün geschrieben.

Tab. 2.3 Anfangs- und Randbedingungen des Versuchs WH-20, Vergleich der Voraus- und Nachrechnung

Anfangs- und Randbedingung /Referenz/ (Name des COCOSYS-Datensatzes)	doppelt-blinde Vorausrechnung /ARN 14/ (WH20_db_07.inp)	offene Nachrechnung /FRE 14a/ (WH20_pt_26.inp)
Beginn der COCOSYS-Simulation, s kurz vor Ende der Phase 1 – Konditionierung	-730	-800
Beginn Phase 2, s Hauptversuchsphase	0	0
Beginn Phase 3, s Venting	7 500	7 763
Ende der COCOSYS-Simulation, s	10 000	10 000
<hr/>		
THAI-Behälterdruck, bar	1,5	1,508
Atmosphärentemperatur im THAI-Behälter, °C	115	R3: 115 R2: 104
Atmosphärentemperatur im Bereich über dem inneren Pool, °C	102 (Annahme)	106
Wassertemperatur im inneren Pool, °C	70	70,3
relative Luftfeuchte im THAI-Behälter, %	5 (Annahme)	0,01
relative Luftfeuchte im Bereich über dem inneren Pool, %	80 (Annahme)	14
Wasserhöhenstand im inneren Pool, m (ergibt sich aus Geometrie & Wasservolumen)	3,7 (aus Geometrie und 5,3 m³ Wasservolumen)	3,7 (aus 5,07 m³ bei 70,3°C → 4956 kg)
Wandtemperaturen – Heizmantel, °C	115	114,5
Wandtemperaturen – oberer Klöpperboden, °C	115	117
Abblase-Ventil Ø, m Kontraktionskoeffizient	0,05 0,77	0,04 0,5
<hr/>		
Dampfeinspeisung, g/s	94,5 (1,87 bar, 138,7 °C)	~100 (~6,7 bar, ~164 °C)
Zeit, s	0 – 7 020	0 – 7 115
Manuelle Regelung der Abblaseleitung, s Druckregelung, bar	2 660 – 5 280 (Annahme) 1,5 – 1,52	3 671 – 5 341 1,48 – 1,53

Anfangs- und Randbedingung /Referenz/ (Name des COCOSYS-Datensatzes)	doppelt-blinde Vorausrechnung /ARN 14/ (WH20_db_07.inp)	offene Nachrechnung /FRE 14a/ (WH20_pt_26.inp)
Lufteinspeisung, g/s (Parameter) Zeit, s	43 (20 °C, 4 bar) 5 580 – 7021	43 (~20 °C, ~5 bar) 5 569 – 7 325
Öffnen der Abblaseleitung, s	7 500 – 7 650	7 763 – 8 135

Während in der blinden Vorausrechnung die Simulation der Regelung/Öffnung der Abblaseleitung sowie der Luftpfeispeisung zeit- und parameterabhängig simuliert sind (siehe Kapitel 2.2 in /ARN 14/), wurden in der Nachrechnung die Zeitpunkte aus dem Experiment direkt verwendet unabhängig davon, ob der entsprechende Sollwert erreicht oder überschritten ist. Dies wirkt sich z. T. recht deutlich auf die berechneten Ergebnisse aus, z. B. im Druckverlauf der Nachrechnung zwischen 7 000 und 7 800 s (siehe Abb. 2.19). Der Vergleich der in den blinden („DB“ – double blind) und offenen („PT“ – post test) COCOSYS-Rechnungen verwendeten mit den im Experiment realisierten Dampf- und Luftmasseneinspeisungen ist in Abb. 2.15 und Abb. 2.16 dargestellt. Die Schwingungen in den Einspeisungen im Experiment sind in der COCOSYS-Nachrechnung exakt berücksichtigt. Im Vergleich zur Vorausrechnung sind die eingespeisten Massen im Experiment etwas höher, Start- und Endzeitpunkte stimmen gut überein.

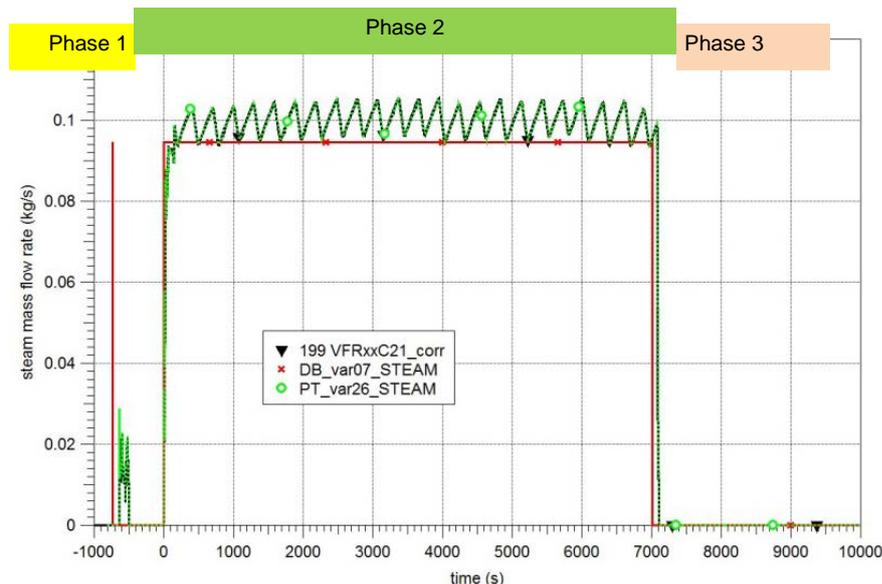


Abb. 2.15 WH-20, angenommene und realisierte Dampfeinspeisung, Massenstrom

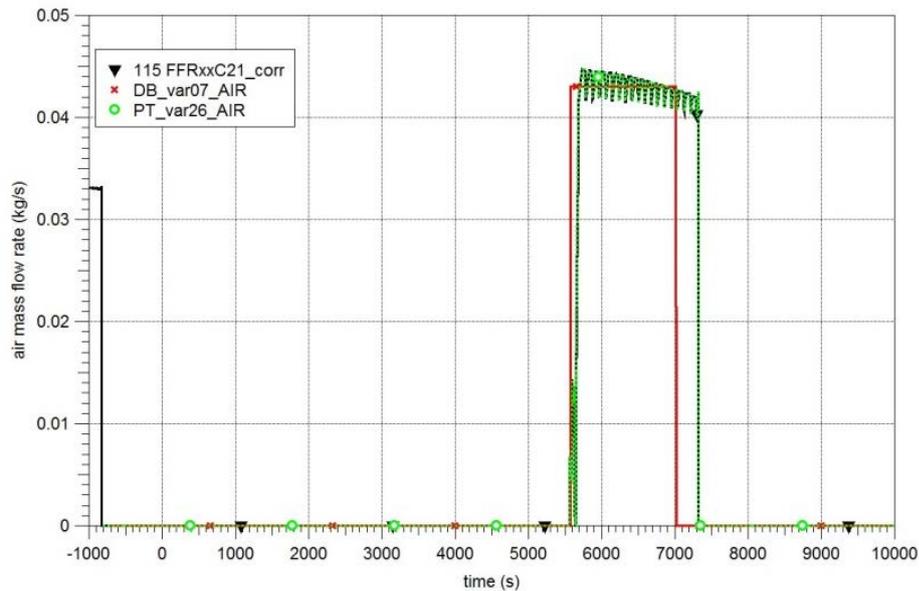


Abb. 2.16 WH-20, angenommene und realisierte Luftspeisung, Massenstrom

2.1.2.3 COCOSYS-Nachrechnung des Versuches WH-20

Zum Versuch WH-20 wurde eine doppelt-blinde Rechnung erstellt (in den folgenden Bildern rote Linien, mit „DB“ bezeichnet) /ARN 14/. Nach Freigabe der Versuchsrandbedingungen und Ergebnisse (schwarze und graue Linien mit Namen der Messstellen) wurden offene COCOSYS-Nachrechnungen durchgeführt (grüne Linien, „PT“ benannt), die im Folgenden beschrieben und diskutiert werden. Der Vergleich der blinden und offenen Rechnungen lässt auch eine Bewertung der Prognosefähigkeit von COCOSYS zu.

In den Nachrechnungen kam die COCOSYS-Anwenderversion V2.4v3 inklusive Fehlerkorrekturen (SVN Revision 6259, Stand 31. August 2015) zur Anwendung. Die Zeitachsen der folgenden Bilder beginnen zum Ende der Versuchsphase 1, wobei der Beginn der Hauptversuchsphase (Phase 2) mit stationärer Einspeisung von Dampf als Zeitpunkt 0 s definiert ist.

Der Schwerpunkt des Experiments liegt in der Untersuchung des Effekts des Dampfdurchbruchs durch eine Wasservorlage unter siedenden Randbedingungen. Damit kommt der Temperatur des Wassers im inneren Pool R1 eine entscheidende Bedeutung zu. In Abb. 2.17 sind die Ergebnisse der COCOSYS-Voraus-

und -Nachrechnung den experimentellen Daten gegenübergestellt. Zusätzlich sind im Bild die Versuchsphasen und wesentliche Phänomene markiert.

Für die Wassertemperatur liegen verteilt über den Pool für eine große Anzahl von Messstellen experimentelle Daten vor. Diese zeigen, dass der Pool aufgrund der tief liegenden Einspeisung gut durchmischt ist. Damit ist die Modellierung des Pools durch eine COCOSYS-Zone gerechtfertigt.

Mit Beginn der (relativ konstanten) Dampfeinspeisung (Abb. 2.12) steigt die Pooltemperatur in R1 Abb. 2.17 linear an. Nach Erreichen der Temperatur von 112 – 113 °C beginnt ab etwa 3 600 s der Dampfdurchbruch und die Wassertemperatur bleibt konstant. Nach 5 000 s wird die Wassertemperatur vom Zustand des Abblaseventils und damit des Behälterdruckes bestimmt. Hierbei ist die 3. Versuchsphase interessant, in der das Aufsieden der unterkühlten Wasservorlage durch Druckabsenkung erfolgt.

Bereits die doppelt-blinde Vorausrechnung liefert gute Ergebnisse – sowohl die berechneten Temperaturen als auch die Temperaturgradienten in den transienten Phasen werden gut berechnet. Der geringere Temperaturanstieg zwischen 0 und 3 700 s ist Konsequenz der geringer als im Experiment angenommenen Dampfeinspeisung (siehe Abb. 2.15).

Die Nachrechnung stimmt sehr gut mit den experimentellen Temperaturen überein. Hier muss bemerkt werden, dass insbesondere der Temperaturabfall während des Ventings sehr stark von der Modellierung des Öffnungszustandes des Abblaseventils (Fläche und Ausflusszahl) abhängt. Da das Abblaseventil manuell geregelt wurde, liegen keine Daten dazu vor. Deshalb wurden die entsprechenden COCOSYS-Eingabewerte anhand des experimentellen Druckabfalls während des Ventings justiert.

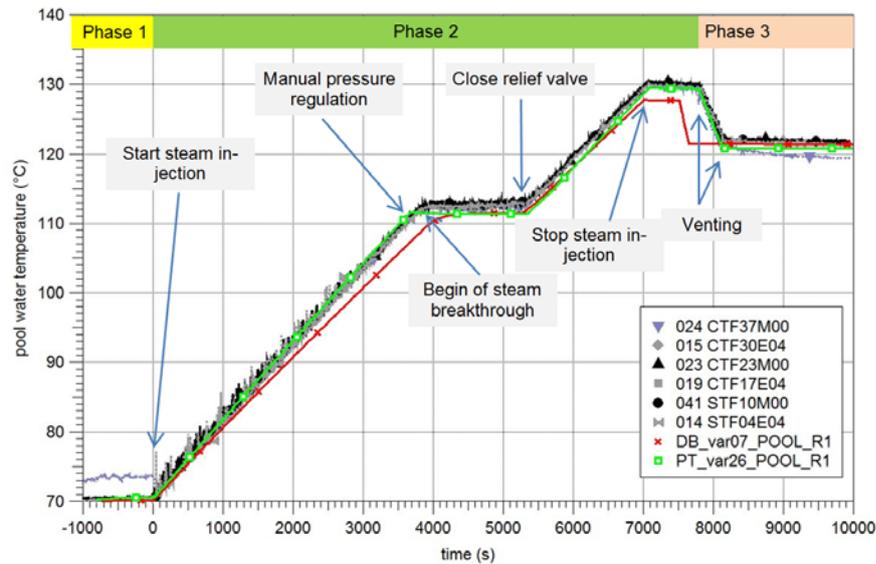


Abb. 2.17 WH-20, Wassertemperatur im Pool der Zone R1

Der Zeitpunkt des Beginns des Dampfdurchbruches in den Rechnungen entspricht dem im Experiment, d. h. das Modell von Chasanov/Smirnova liefert eine korrekte „Durchbruchstemperatur“, wobei im Versuch der Übergang kontinuierlicher als in der Rechnung erfolgt.

Zum durchbrechenden Dampfmassenstrom an der Pooloberfläche gibt es keinen direkten Messwert. Es kann angenommen werden, dass der Dampfmassenstrom gleich dem aus dem inneren Zylinder freiwerdenden Massenstrom ist (Verbindung V13). Dies ist in /FRE 14a/ diskutiert – inklusive einer Bewertung des aus der gemessenen Geschwindigkeit berechneten Massenstromes. Die berechneten Geschwindigkeiten in der

Verbindung V13 vom inneren Zylinder in den THAI-Behälter sind in

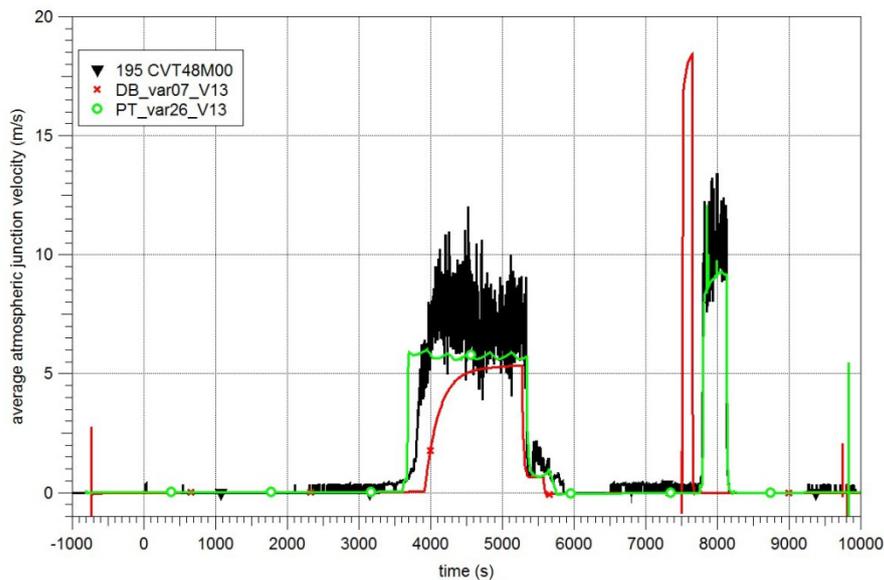


Abb. 2.18 mit dem experimentellen Verlauf verglichen. Diese Geschwindigkeit korreliert mit der Dampfreisetzung an der Pooloberfläche, da die Dampfansammlung im kleinen Gasvolumen von R1 über dem Pool vernachlässigt werden kann. Der Geschwindigkeitssensor hat einen minimalen Ansprechwert von 0,4 m/s und misst laut Versuchsbericht /FRE 14a/ die maximale Geschwindigkeit v_{\max} in der Mitte des Verbindungsrohres, so dass die mittlere Geschwindigkeit in der Verbindung etwa als $0,8 \cdot v_{\max}$ angenommen werden kann. Die nachgerechnete Geschwindigkeit in der Verbindung V13 entspricht dem Messwert, z. B. während der Phase des Dampfdurchbruches von $\sim 5,5$ m/s gegenüber $\sim 7 \cdot 0,8 = 5,6$ m/s.

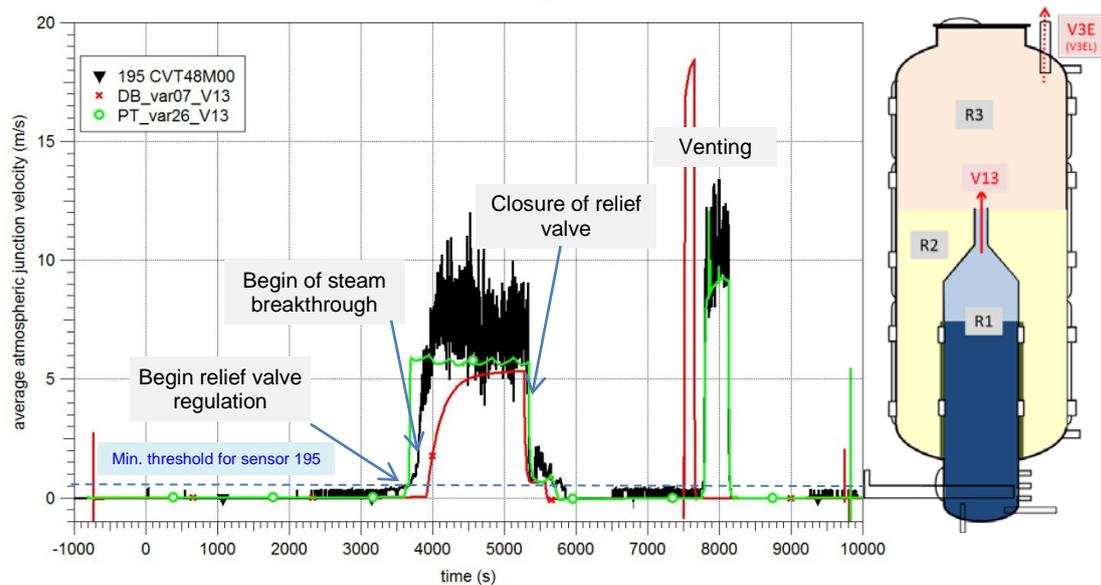


Abb. 2.18 WH-20, Gasgeschwindigkeiten in der Verbindung V13

In der Nachrechnung wird mit Beginn der Druckregulierung (dabei fällt der Druck von 1,59 auf 1,51 bar) ein im Vergleich zum Experiment zu schneller Anstieg der Geschwindigkeit berechnet. Der reale Anstieg ist kontinuierlicher und beruht im Wesentlichen auf dem beginnenden Dampfdurchbruch. Wesentliche Verläufe (Gradienten) der experimentellen Geschwindigkeit werden in der Nachrechnung reproduziert, wie z. B. der leichte Abfall während der Phase des Dampfdurchbruches oder das Verhalten beim Venting. Besonderes Augenmerk soll hier auf den starken Geschwindigkeitsabfall beim Schließen des Abblaseventils und den anschließenden Zeitbereich bis zum Beginn der Luftspeisung gerichtet werden (ca. 5 300 – 5 500 s). Das im experimentellen Verlauf deutlich sichtbare lokale Maximum wird von COCOSYS bereits in der Vorausrechnung vorhergesagt. Die doppelt-blinde Vorausrechnung liefert unter Berücksichtigung der angenommenen geringeren Dampfeinspeisung und des größeren Querschnittes der Abblaseleitung gute Geschwindigkeiten.

Abb. 2.19 zeigt den Vergleich von gemessenem und berechnetem Druckverlauf im THAI-Behälter. Die Graphik beginnt zum Ende der Konditionierungsphase (Druckaufbau durch Luftspeisung auf 1,51 bar und anschließender Ruhephase bei geschlossenem Abblaseventil und aktiver Wandheizung). Die Dampfeinspeisung (Abb. 2.15) in den inneren Pool beginnt bei 0 s. Der Dampf kondensiert im Wasser und die Pooltemperatur steigt an, aber der Druck bleibt konstant. Nach 3 670 s wird das Abblaseventil geöffnet und manuell entsprechend 1,5 bar Soll-Druck geregelt. Kurz danach beginnt der Dampfdurchbruch, da die Pooltemperatur die Sättigungstemperatur erreicht. Der

Druck wird weiterhin auf ~1,5 bar geregelt, aber Temperaturen (Abb. 2.21) und Feuchte (Abb. 2.20) im Behälter steigen an.

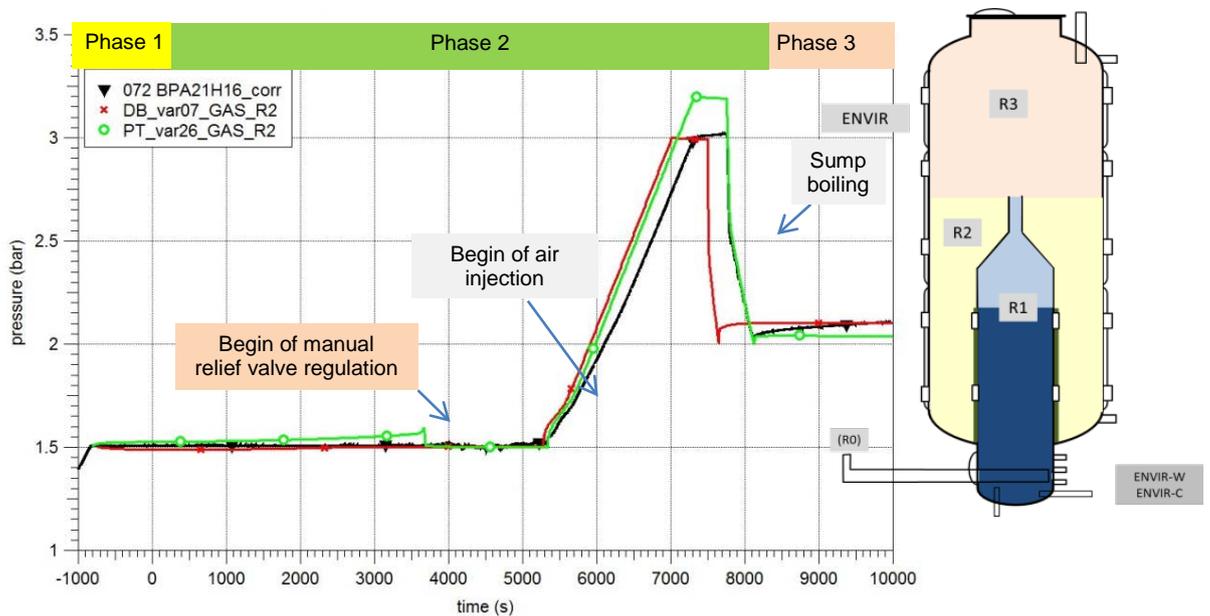


Abb. 2.19 WH-20, Druckverlauf

Nach 5 341 s wird das Abblaseventil geschlossen, was zum Druckanstieg führt bei abnehmendem Dampfdurchbruch. Mit Beginn der zusätzlichen Lufteinspeisung ab 5 569 s (Abb. 2.16, signifikanter Massenstrom erst ab ~5 700 s) endet die Dampffreisetzung vom Pool, aber trotzdem wird der Gradient des Druckanstieges größer (linearer Gradient entsprechend Lufteinspeisung). Bei Erreichen von 3 bar wird nach 7 000 s die Dampfeinspeisung beendet und der Druck bildet ein Plateau aus. Die Lufteinspeisung läuft bis 7 325 s weiter, so dass es noch einen kleinen Druckgradienten gibt. Auch danach ist der Druck nicht vollständig konstant – wahrscheinlich wird vom inneren Pool noch Dampf frei (abgeleitet aus dem sichtbaren leichten Abfall der Pooltemperatur).

Das Venting wird nach 7 760 s durch Öffnen des Abblaseventils eingeleitet und der Druck fällt schnell ab. In Abb. 2.19 ist sichtbar, dass der Druckabfall nach 7 797 s seinen Gradienten ändert. Zu diesem Zeitpunkt ist der Druck soweit gefallen (2,54 bar), dass die Sättigungstemperatur zum Gesamtdruck kleiner als die Pooltemperatur wird. Der Pool kocht auf und verdampft spontan, was dem Druckabfall entgegenwirkt.

Nach Erreichen von 2 bar wird das Abblaseventil wieder geschlossen. Sofort nach dem Schließen steigt der Druck um ~0,05 bar an und danach mit geringem Gradienten wei-

ter und erreicht nach 10 000 s etwa 2,1 bar. Durch das Venting ist der Dampfgehalt der Atmosphäre übersättigt, sodass es zu Kondensation kommt. Das Kondensat verdampft nach dem Venting wieder und verursacht den genannten Druckanstieg.

In der doppelt-blinden Vorausrechnung wird der Druckverlauf für alle Versuchsphasen sehr gut vorhergesagt. Lediglich die Zeitpunkte für das Erreichen von 3 bar sowie den Beginn des Ventings sind etwas früher. Die offene Nachrechnung sieht auf den ersten Blick schlechter aus. Ursache ist die geänderte Simulation des Abblaseventils – anstatt wie in der Vorausrechnung durch Druckdifferenzen gesteuert, sind in der Nachrechnung die exakten Zeitpunkte aus dem Experiment verwendet worden. So hat z. B. der berechnete höhere Druckgradient zwischen 5 700 und 7 300 s zur Folge, dass der Druck auf 3,2 bar ansteigt anstatt wie im Experiment bei 3 bar bleibt. Der Druckverlauf während des Ventings stimmt sehr gut mit dem Experiment überein. Hier ist noch einmal darauf hingewiesen, dass dieser Verlauf direkt von der Modellierung des Öffnungszustandes des Abblaseventils abhängt, wozu aber durch die manuelle Öffnung keine exakten Daten vorliegen und die COCOSYS-Eingabewerte anhand des experimentellen Druckabfalls justiert wurden.

Die Analyse der Rechnungen offenbart zurzeit in der Nachrechnung noch zwei unge löste Fragen: den leichten Druckanstieg ab 0 s bis zum Beginn der manuellen Druckregelung um $\sim 0,06$ bar und den zu hohen Druckgradienten zwischen 5 700 und 7 300 s. Beide Fragen waren Gegenstand von Variantenrechnungen, sind aber bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht gelöst.

In aktuellen Rechnungen mit dem GOTHIC Programm erhält Becker Technologies /FRE 15a/ im Zeitbereich 0 s bis zum Beginn der manuellen Druckregelung ebenfalls einen Druckanstieg, der dabei mit bis zu 1,61 bar sogar noch ausgeprägter als in COCOSYS ist, das COCOSYS-Ergebnis also untermauert.

Der Verlauf der relativen Luftfeuchten in der Versuchsanlage ist in Abb. 2.20 dargestellt. Er ist bestimmt durch die Dampffreisetzung vom inneren Pool, wodurch in den anfänglich im Wesentlichen mit Luft gefüllten Zonen die Feuchte während der Verdunstungsphase leicht und mit Beginn des Dampfdurchbruches stark ansteigt. Während der späteren Lufteinspeisung ist in den Messwerten die Verringerung der Feuchte in R1 und R3 nicht sichtbar, was nach Aussagen von Becker Technologies darauf zurückzuführen ist, dass die Feuchtesensoren längere Zeit benötigen um abzutrocknen, nachdem sie einmal Sättigungsbedingungen ausgesetzt waren /ARN 15/.

Die Versuchsergebnisse sind in der COCOSYS-Nachrechnung gut reproduziert, wobei aufgrund des 3-Zonenmodells lokale Effekte nicht simuliert werden können (Konvektion, Effekte im Grenzbereich zwischen R2 und R3 oder im Strömungsbereich aus dem inneren Zylinder R1 zum offenen Abblaseventil in R3). Sichtbar ist der Anstieg der Feuchte in R1 durch die Aufwärmung des Poolwassers und der damit verbundenen Verdunstung an der Oberfläche. Mit Beginn des Dampfdurchbruches springt die Feuchte im inneren Zylinder R1 auf 100 % und durch starke Überströmung in R3 erreicht sie auch hier schnell 100 %. Da das Abblaseventil geöffnet ist, strömt der Dampf in die Umgebung, so dass die Feuchte im unteren Bereich des Behälters (R2) sich nur wenig erhöht. Aufgrund des 3-Zonen Modells ist R2 ein echter Sackraum und der Anstieg der Feuchte wird unterschätzt. Das Schließen des Abblaseventils, die Luftein- speisung und das Venting sind im Feuchteverlauf deutlich sichtbar.

In der blinden Vorausrechnung wurde der Anfangszustand in R1 mit zu hoher Feuchte angenommen. Ansonsten war die Qualität der Vorausrechnung bereits gut.

Exemplarisch sind in Abb. 2.21 berechnete Atmosphärentemperaturen in Zone R3 mit den experimentellen Werten verglichen. Die gemessenen Verläufe sind in beiden COCOSYS-Rechnungen gut reproduziert und die wesentlichen Prozesse während des Experiments spiegeln sich klar wider. Aufgrund des einfachen 3-Zonenmodells kann die Temperaturschichtung in den Zonen nicht reproduziert werden. Außerdem liegen die Temperaturen in R2 näher an denen in R3 als im Experiment. Generell werden in der Zeit bis zum Dampfdurchbruch die Temperaturen in R2 und R3 um bis zu 5 K überschätzt.

Weitere Ergebnisse können in /ARN 16/ nachgelesen werden.

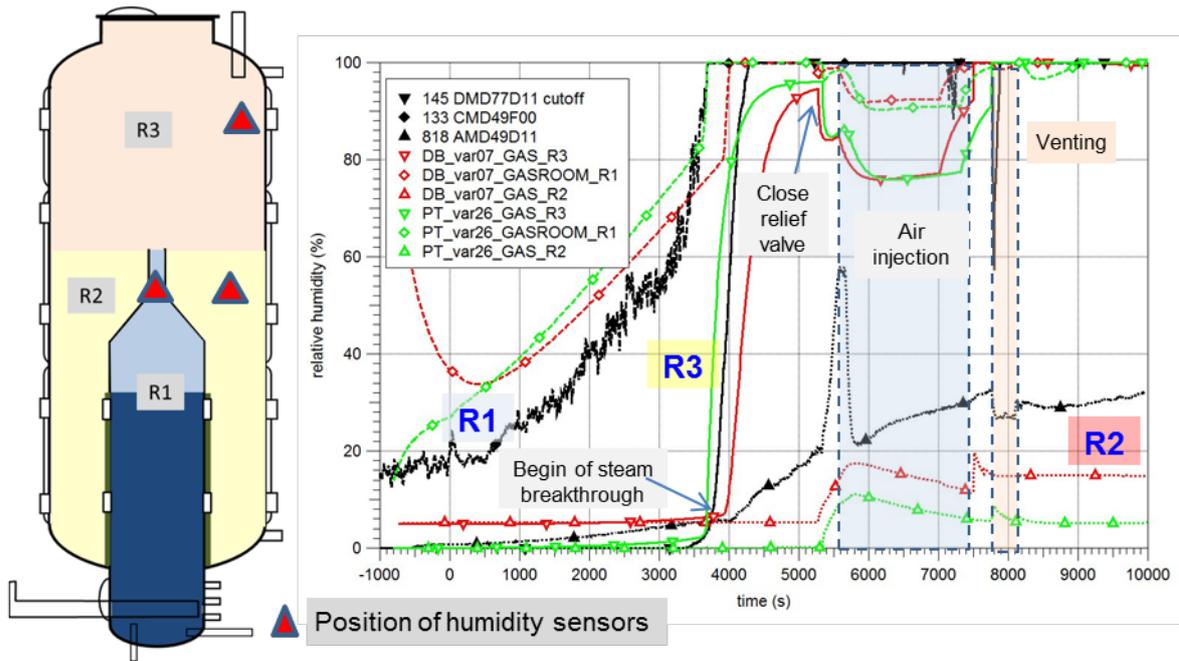


Abb. 2.20 WH-20, Verlauf der relativen Luftfeuchte

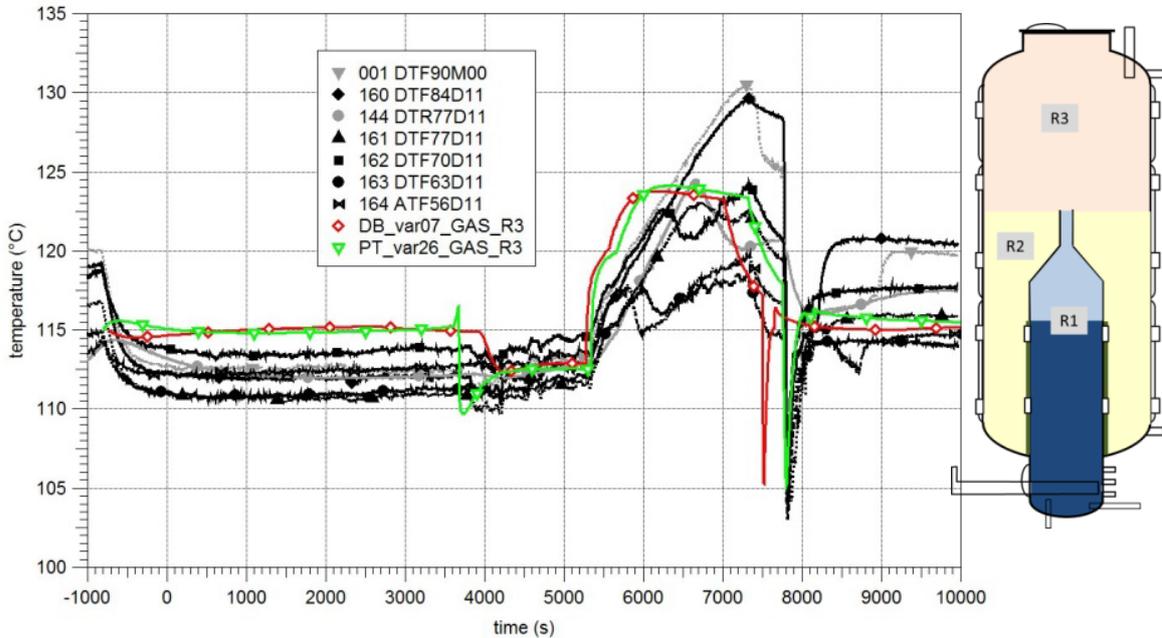


Abb. 2.21 WH-20, Atmosphärentemperaturen im oberen Teil des Behälters, Zone R3

Zur Analyse spezieller Effekte und Fragestellungen wurde eine Vielzahl von Variantenrechnungen durchgeführt. Wichtige Varianten sind in Tab. 2.4 aufgelistet, inklusive

markierter doppelt-blinder Voraus- und offener Nachrechnung. Sie dienen u. a. der Untersuchung der zurzeit in der Nachrechnung noch zwei ungelösten Fragen zum leichten Druckanstieg ab 0 s bis zum Beginn der manuellen Druckregelung um ~0,06 bar und dem zu hohen Druckgradient zwischen 5 700 und 7 300 s (Abb. 2.19). Die Ergebnisse sind in /ARN 16/ dokumentiert. Sie zeigten keinen oder einen vernachlässigbaren Einfluss, d. h. sie beantworten beide Fragen nicht überzeugend und müssen deshalb als noch offen betrachtet werden.

Auf Basis der Variantenrechnungen konnte festgestellt werden, dass mit und ohne Anwendung des Modells von Chasanov/Smirnova keine signifikanten Auswirkungen auf die Simulation des Versuches WH-20 zu sehen sind.

Tab. 2.4 COCOSYS-Variantenrechnungen zum Versuch WH-20

Variante	Erläuterung
07 (WH20_db_07.inp)	Basisvariante der doppelt-blinden Vorausrechnung (double blind DB)
26 (WH20_pt_26.inp)	Basisvariante der offenen Nachrechnung (post test PT)
26_noChSm (WH20_pt_26_LBNDIN=F.inp)	wie 26, aber ohne Aktivierung des Modells von Chasanov/Smirnova zur unvollständigen Kondensation
26_V3E	wie 26, aber verzögerte Öffnung (Fläche) des Abblaseventils in der Druckregulierung
26_AirInj	wie 26, aber nur 87 % Luftspeisung zwischen 5 569 s und 7 325 s
27	wie 26, aber mit geändertem Wärmeübergangsmodell für Außenwände („FRC+FOC+COD“ anstatt „CO1“)
28	wie 26, aber zusätzliche Unterteilung von R2 und R3 in jeweils eine untere und obere Zone (z. B. R2 → R2U und R2L)
30	wie 26, aber zusätzliche Modellierung des Volumens und der Oberflächen des Kondensatbehälters inklusive Leitungen (Zonen COLL-W und COLL-R), der Wasserdrainage aus R1 und der Kondensatdrainage aus R2 mit Geometrie und Drainageverläufen von Becker Technologies
31	wie 30, aber zusätzliche Unterteilung des Gasvolumens von R1 in kleinen unteren Teil nahe der Wasseroberfläche und obere Zone R1GAS

2.1.2.4 Schlussfolgerungen

Mit Blick auf den Schwerpunkt des Experiments WH-20 und seiner Nachrechnung, d. h. der Simulation des Dampfdurchbruches durch einen gesättigten Pool, zeigen die COCOSYS-Rechnungen gute Ergebnisse im Vergleich zu den experimentellen Verläufe. Unter Berücksichtigung der vom Experiment abweichenden Randbedingungen (Dampfeinspeisung) lieferte bereits die doppelt-blinde Vorausrechnung eine gute Voraussage für den experimentellen Verlauf, d. h. sie zeigt die gute Prognosefähigkeit von COCOSYS.

Zwei Fragen zum leichten Druckanstieg ab 0 s bis zum Beginn der manuellen Druckregelung um $\sim 0,06$ bar und dem zu hohen Druckgradient zwischen 5 700 und 7 300 s sind gegenwärtig noch ungelöst und sollten weiter verfolgt werden, insbesondere wenn Becker Technologies neue Informationen zu Messwerten bereitstellen sollte.

Da die Anwendung des im DRASYS Zonenmodell verfügbaren Chasanov/Smirnova-Modells keine signifikanten Auswirkungen auf die Simulation des Versuches WH-20 hat, ist die Übernahme in das Nichtgleichgewichts-Zonenmodell nicht erforderlich.

Es wird die Nachrechnung des Versuches WH-23 empfohlen, da dieser mit einer geringeren Eintauchtiefe durchgeführt wurde (siehe Tab. 2.2) und damit die Aussagen zum Dampfdurchbruch und zur Anwendung des Modells von Chasanov/Smirnova überprüft werden können.

2.1.3 Begleitung der THAI-Versuche zur H₂-Deflagration mit und ohne Sprühen

2.1.3.1 Vorgehensweise

Das Verbrennungsmodell FRONT in COCOSYS wurde an den THAI-Versuchen mit Wasserstoffverbrennung und Sprühen (HD-Versuche) validiert /GUP 14/. Vorbereitend wurde eine Validierung an dem Sprühtest ohne Verbrennung durchgeführt /GUP 12/ (s. Tab. 2.5 „nur Spray“). Es wurde die COCOSYS-Version 2.4v1 verwendet. Dann wurden die Versuche mit Verbrennung und ohne Sprühen (HD-7 und HD-22) gerechnet, anschließend die Versuche mit Verbrennung und Sprühen (HD-30 und HD-31). Die umfangreichen Rechnungen und Untersuchungen ergaben Unzulänglichkeiten bei

der Berechnung der Verbrennung. Deshalb wurden die Arbeiten zeitweise unterbrochen. Später wurden Verbrennungsrechnungen mit der neuen verbesserten COCOSYS-Entwickler-Version 3.0dev (Rev. 6041) wiederholt. Deren Ergebnisse sind hier dokumentiert.

2.1.3.2 THAI HD-Versuche

In den hier beschriebenen HD-Versuchen erfolgte die Zündung in Bodennähe des THAI-Behälters (Abb. 2.22). Die Ausbreitung der Flammfront wurde mit schnellen Thermoelementen gemessen. Die Sprühdüse war in einer Höhe von 7,4 m angebracht. Der Sprühkegel hatte einen Winkel von 30°.

Die Tabelle Tab. 2.5 zeigt die nominalen Start- und Randbedingungen der Versuche. Die tatsächlichen Werte wichen geringfügig ab.

Bei den Versuchen ohne Sprühen, verläuft die Verbrennung zunächst sehr langsam. Zwar wird fast unmittelbar mit dem Start des Zünders in dessen unmittelbarer Nähe ein Temperaturanstieg detektiert (Tab. 2.6), jedoch tritt ein merklicher Druckanstieg erst nach ein bis zwei Sekunden auf.

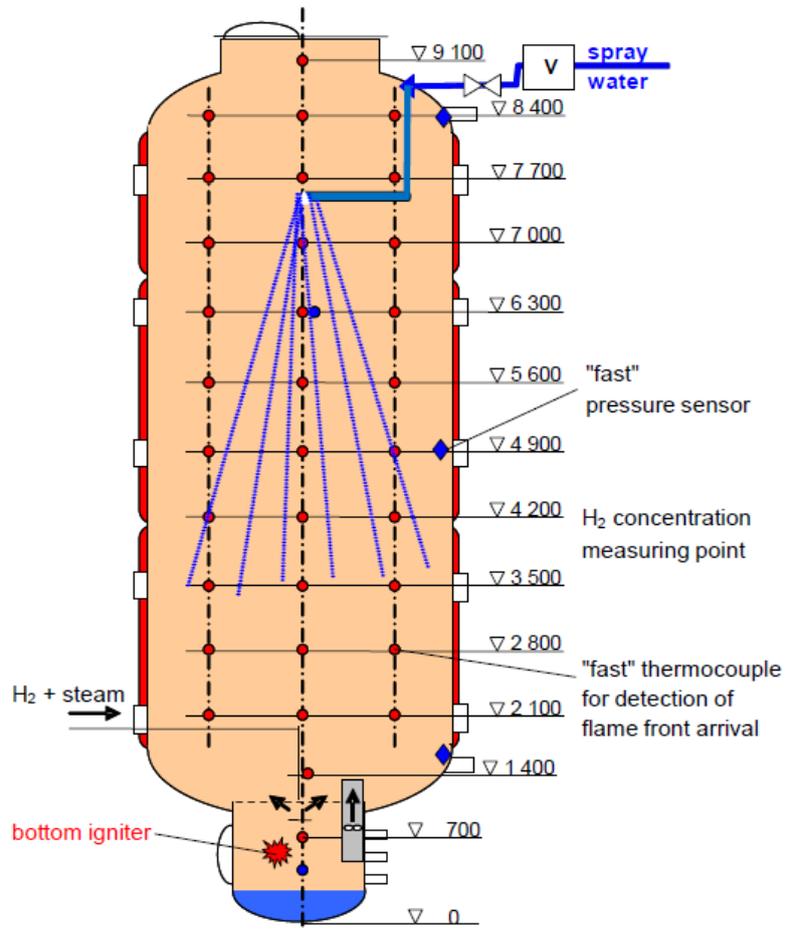


Abb. 2.22 Konfiguration der THAI-HD-Versuche mit Sprühen

Tab. 2.5 THAI-Versuche, Nominalwerte

	Druck (bar)	Temperatur (°C)	Dampf (vol %)	Wasserstoff (vol %)	Sprührate (kg/s)	Sprüh- temperatur (°C)
nur Spray	1,5	90	25	0	1	20
HD-7	1,5	20	0	10	-	-
HD-30	1,5	20	0	10	1	20
HD-22	1,5	20	25	10	-	-
HD-31	1,5	90	25	10	1	20
HD-32	1,5	90	25	7,5	1	90
HD-32.1	1,5	90	25	10	1	90

Tab. 2.6 Detektion des ersten Temperaturanstiegs nach der Zündung

	Zünder an ^{*)}	Temperaturanstieg	Thermoelement
HD-7	0,996 s	0,996 s	STB07M00
HD-22	1,615 s	1,627 s	STB07M00
HD-30	0 s	0,152 s	STB05M00
HD-31	0 s	0,231 s	STB07M00
HD-32	0 s	~0,6 s	STB05M00

* Zeiten gemäß experimenteller Daten

Bei den Versuchen mit Sprühen steigt der Druck zunächst viel schneller an als bei den Versuchen ohne Sprühen. Vermutlich erzeugen die Sprühtropfen eine Turbulenz, die die Verbrennung zuerst beschleunigt. Dann wird die Verbrennung aber langsamer als im Fall ohne Sprühen. Dies könnte von der Verdampfung der Sprühtropfen und der daraus resultierenden höheren Dampfkonzentration verursacht sein.

Nach Angaben des Experimentators ist die Verbrennung nahezu vollständig in den Versuchen ohne Sprühen, in den Versuchen mit Sprühen aber unvollständig. Nur für HD-30 ist diesbezüglich eine Überprüfung anhand der experimentellen Daten möglich; diese ergibt für einen Druck von 1,5 bar eine Restwasserstoffkonzentration von 4,7 vol.%. Für die anderen Versuche liefern die Versuchsergebnisse diesbezüglich keine brauchbaren Informationen.

2.1.3.3 COCOSYS-Modellierung

Die COCOSYS-Nodalisierung (Abb. 2.23) unterteilt den THAI-Behälter virtuell in einen zylindrischen Innenbereich und einen Außenbereich. Die geodätischen Höhen der Zonenmittelpunkte entsprechen den Positionen der Thermoelemente in der THAI-Versuchsanlage (Abb. 2.22). Es wurde das Nichtgleichgewichtsmodell verwendet und mit der JUNCTION_INST-Option, zur Stabilisierung der Rechnung, gerechnet. Die Stahlwände werden berücksichtigt, inklusive Thermoöl und Isolierung nach außen.

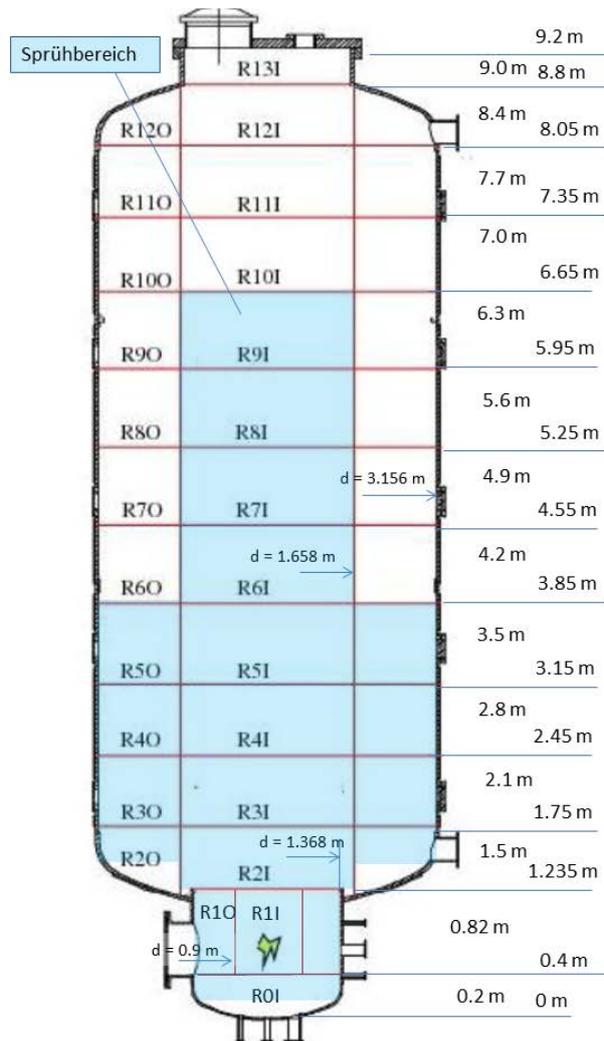


Abb. 2.23 COCOSYS-Nodalisierung THAI HD-Versuche

Der Sprühkegel ist vereinfacht durch Sprühpfade abgebildet. Dabei fallen im oberen Teil alle Sprühtropfen durch den Innenbereich, also von Zone R9I bis Zone R6I. Danach erfolgt eine Aufteilung zu je zur Hälfte in den Innen- und Außenbereich. Der mittlere Anfangsdurchmesser der Sprühtropfen wurde mit $6 \cdot 10^{-4}$ m angenommen. Es wurde das IVO-Sprühmodell verwendet.

2.1.3.4 Berechnung der Verbrennung mit dem COCOSYS-FRONT-Modul

Das FRONT-Modul besteht aus dem Verbrennungsteil (COMB), welcher in der Zone gerechnet wird, und der eigentlichen Berechnung der Flammenausbreitung (FRONT), welche in den Verbindungen zwischen den Zonen berechnet wird. Eine detaillierte Be-

schreibung wird in /KLE 15/ gegeben. Hier wird nur auf die wichtigsten Gleichungen eingegangen.

Für die Verbrennung gibt es die Optionen EXPO und LINEAR. Mit EXPO ist die Brennrate (r_{H_2}) bei Sauerstoffüberschuss entsprechend des COMB-Modells programmiert.

$$r_{H_2} = -\beta m_{H_2} = \frac{m'_{H_2}}{\Delta t} \quad (2.1)$$

$$\Delta t = \frac{V}{S_L A_f} \quad (2.2)$$

m_{H_2} ist die aktuelle H_2 Masse, m'_{H_2} ist die H_2 Masse, die insgesamt (bei unvollständiger Verbrennung) verbrennen kann, V ist das Zonenvolumen, A_f die Fläche der Flammfront, S_L die laminare Flammgeschwindigkeit gemäß der Liu-McFarlane-Gleichung (siehe /KLE 15/), welche auf Basis des Gaszustandes vor der Zündung berechnet wird.

Die turbulente Flammfrontgeschwindigkeit V_t setzt sich aus der laminaren Geschwindigkeit V_l und einem turbulenten Anteil zusammen.

$$V_t = V_l(1 + \sigma) \quad (2.3)$$

Die laminare Flammfrontgeschwindigkeit wird mit der Liu-McFarlane-Korrelation berechnet, in die Gastemperatur T , der Druck (p) und der volumetrische Dampfanteil x_{H_2O} eingehen. In den Koeffizienten B , K , L geht der volumetrische Wasserstoffanteil ein.

$$V_l = B T^K \exp(L x_{H_2O}) \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^{0.2} \quad (2.4)$$

In die Berechnung des turbulenten Anteils geht die Turbulenzintensität u' ein.

$$u' = C V_g Re^n \quad (2.5)$$

Dabei sind V_g die Gasgeschwindigkeit in der Verbindung und Re die Reynoldszahl. C und n sind die COCOSYS-Input-Größen REYFAC und REYEXP.

Die Brennrate in den Zonen wurde mit EXPO berechnet. Bis auf den Eingabeparameter REYFAC wurden für das FRONT-Modul die im User-Manual vorgeschlagenen Default-Werte verwendet (Tab. 2.7).

Tab. 2.7 Gewählte Parameter für das FRONT-Modul

Parameter	Wert	Kommentar
REYFAC	1,4	Konstante „C“ bei Berechnung der Turbulenzintensität (s. Manual Gleichung 7-23)
REYEXP	-0,13	Exponent „n“ bei Berechnung der Turbulenzintensität (s. Manual Gleichung 7-23)
TURW	0,95	„Turbulence decay“ Koeffizient
IZENT	3	Siehe Erklärung unten
DEF_TURLEN (m)	0,001	Minimale Länge der Turbulenz-Eddies
TURLEN_H	0,001	Minimale Länge der Turbulenz-Eddies (horizontal)
FBURN	1,0	Faktor zur Modifizierung der Brenndauer in der Zündzone
O2OUT	0,0	Untere O ₂ -Konzentration, bei der die Verbrennung aufhört

IZENT = 3 bedeutet: Zur Berechnung der laminaren Flammfrontgeschwindigkeit werden für die Liu-McFarlane-Korrelation die aktuellen Werte der Zone mit der höheren H₂-Konzentration genommen. Für die Gastemperatur wird der Wert für das unverbrannte Gas zu Beginn der Zündung in dieser Zone genommen.

2.1.3.5 COCOSYS-Ergebnisse

2.1.3.5.1 THAI-Sprühtest ohne Zündung

Zur Überprüfung des Sprühmodells wurde zuerst der Sprühtest ohne Wasserstoffverbrennung gerechnet. Die Ausgangszustände waren 1,5 bar, 90 °C und eine relative Feuchte von 53 %, was einem Dampfvolumenanteil von 25 % entspricht. Gesprüht wird von 0 bis 160 s mit einer Rate von 1 kg/s und einer Sprühwassertemperatur von 20 °C.

Die Sprühtropfen kondensieren Dampf und verringern die Atmosphärentemperatur. Beides bewirkt eine Absenkung des Atmosphärendrucks, der von COCOSYS gut beschrieben wird (Abb. 2.24). Nach Beendigung des Sprühvorgangs steigt der Druck wieder an, weil Wärme von den Wänden in die Atmosphäre geht.

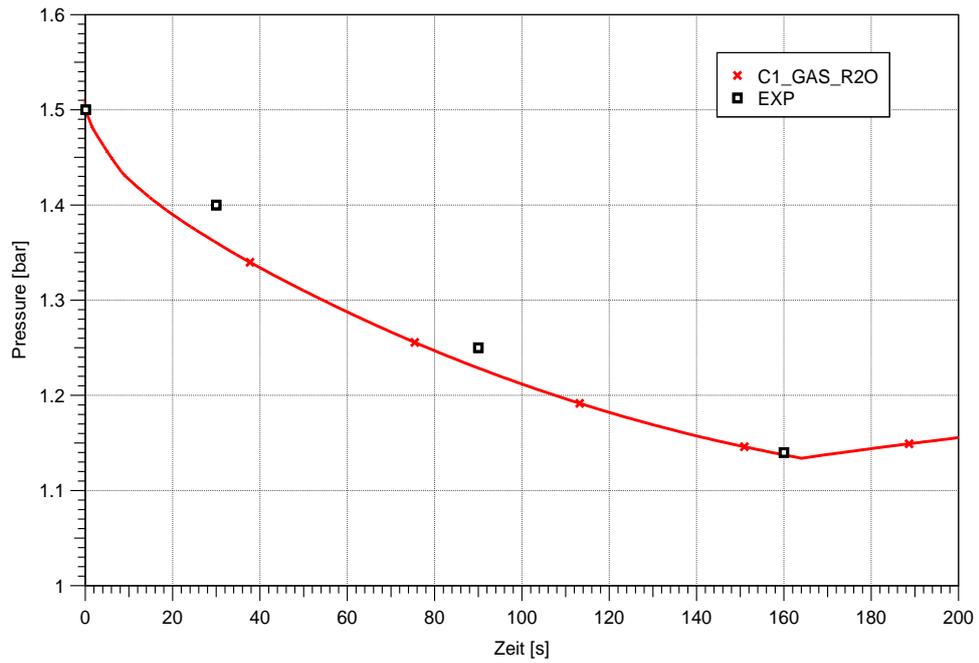


Abb. 2.24 THAI-Sprühetest ohne Verbrennung, Druckverlauf

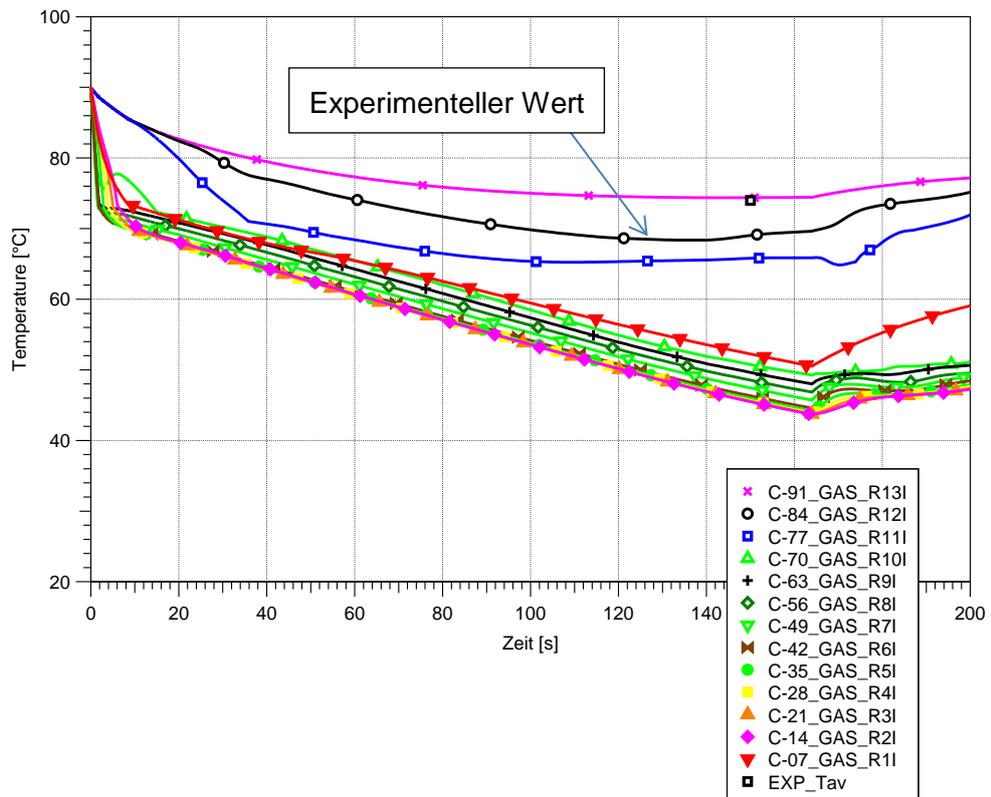


Abb. 2.25 THAI-Sprühetest ohne Verbrennung, COCOSYS, örtliche Atmosphärentemperaturen im Innenbereich

COCOSYS gibt qualitativ den gemessenen Temperaturverlauf wieder. So bleiben die Atmosphärentemperaturen oberhalb der Sprühdüse höher als unterhalb (Abb. 2.25). Jedoch wird die Temperaturabsenkung stark überschätzt. Während bei 160 s die mittlere Atmosphärentemperatur im Experiment 72,5 °C beträgt, liegt sie in der Rechnung bei 54 °C.

Das Zusammenspiel von Druck- und Temperaturabsenkung wurde detailliert untersucht. Die gesamte Druckabsenkung beträgt 0,34 bar. In der Rechnung verringert die Dampfkondensation den Dampfpartialdruck um 0,22 bar und die Temperaturabsenkung den Luftpartialdruck um 0,12 bar. Im Experiment hingegen wird mehr Dampf kondensiert, dafür aber die Temperatur weniger stark abgesenkt. Demnach müssen im Experiment in der Sprühphase überhitzte Atmosphärenzustände geherrscht haben, während COCOSYS Sättigung berechnet. Leider ist keine Feuchtemessung vorhanden, die eine zusätzliche Bestätigung liefert.

2.1.3.5.2 Versuche HD-7: H₂-Verbrennung ohne Sprühen und HD-30: H₂-Verbrennung mit Sprühen

Der Versuch HD-7 hat eine Anfangstemperatur von etwa 20 °C und keinen Dampf. Er wurde ohne Sprühen gefahren. Mit dem im Manual vorgeschlagenen REYFAC von 1,1 ergab sich ein zu langsamer Druckanstieg (Abb. 2.26). Deshalb wurde für die Berechnung aller Versuche RYEFAC = 1,4 (blaue Kurve) verwendet.

Wenn die Flammfront die Thermoelemente erreicht, steigen deren Temperatursignale stark an (Abb. 2.27). Entsprechende Temperaturanstiege werden in den COCOSYS-Zonen berechnet (Abb. 2.28). Aus den örtlichen Brennleistungen (Abb. 2.29) ist ebenfalls zu erkennen, wie die Flammfront im Behälter von unten nach oben wandert.

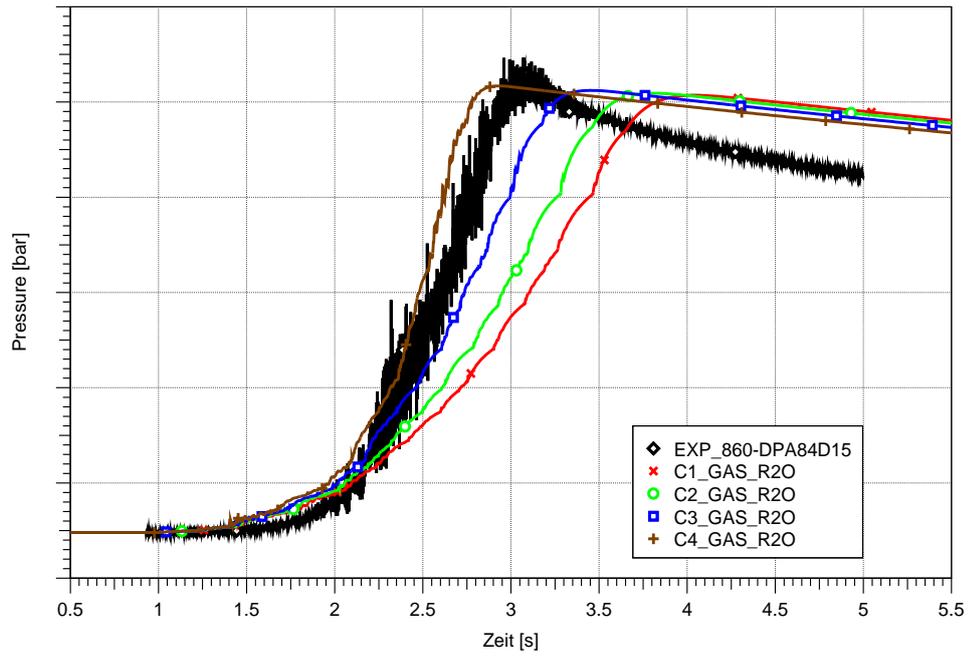


Abb. 2.26 HD-7, Druckverlauf Experiment und COCOSYS mit REYFAC von 1,1 – 1,6

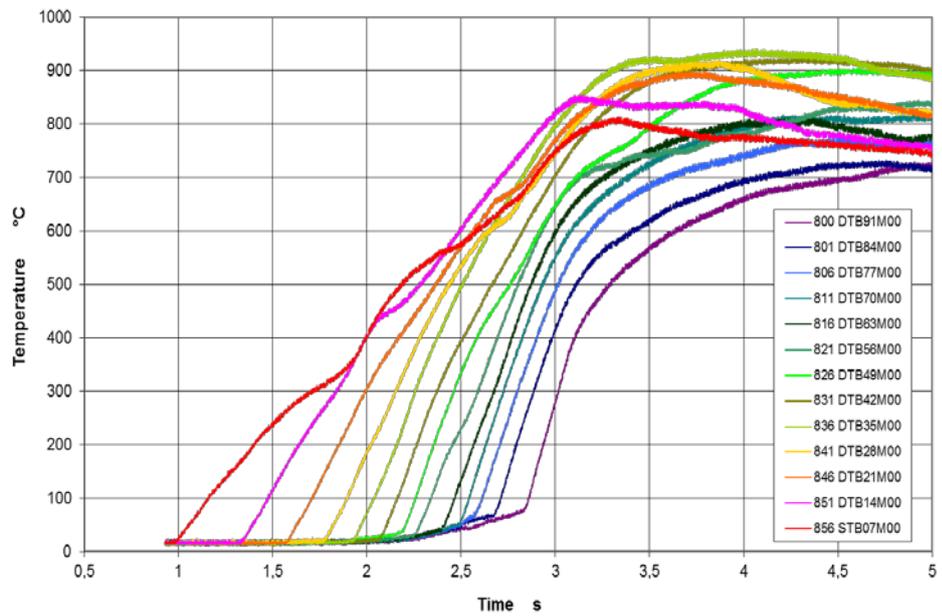


Abb. 2.27 HD-7, Temperaturen entlang der Mittellinie des Behälters

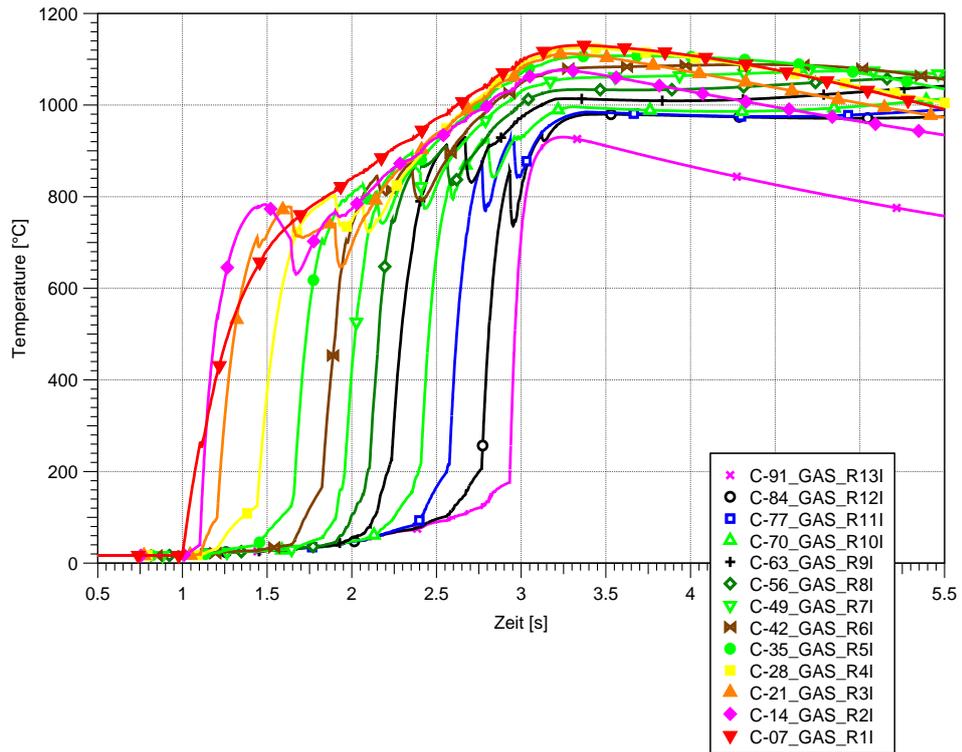


Abb. 2.28 HD-7, COCOSYS Temperaturen Innenbereich

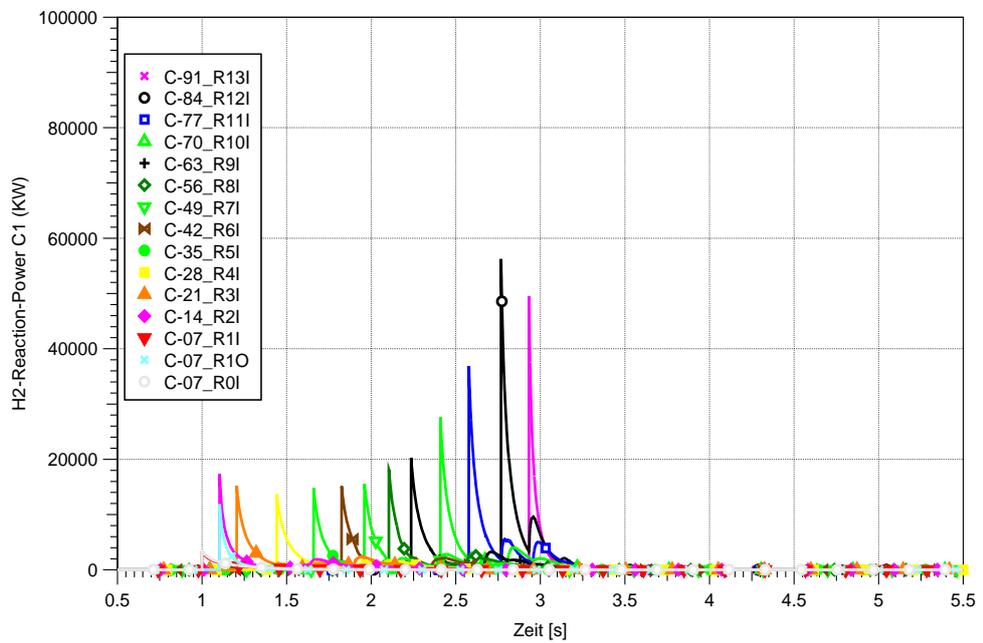


Abb. 2.29 HD-7, COCOSYS örtliche Brennleistungen Innenbereich

Der Versuch HD-30 wurde mit Sprühen gefahren. Er hatte wie HD-7 eine Starttemperatur von etwa 20 °C und keinen Dampf. Die Sprühtropfen verursachen Atmosphärenbewegungen und Turbulenzen. Deshalb kommt der Brennvorgang schneller in Gang als bei HD-7, was anfangs an einem schnelleren Druckanstieg zu sehen ist (vergleiche experimentelle Kurven in Abb. 2.30). Dann schwächen die Sprühtropfen jedoch die Verbrennung ab und der Druckanstieg wird bedeutend langsamer.

In der COCOSYS-Rechnung zu HD-30 wird in der Anfangsphase die von den Sprühtropfen verursachte Atmosphärenbewegung nicht simuliert. Somit wird der Brennvorgang und als Folge der Druckanstieg nicht verstärkt. Stattdessen zeigt die HD-30-Rechnung in der Anfangsphase einen langsameren Druckanstieg als die HD-7-Rechnung, was auf die Wirkung der Sprühtröpfchen zurückzuführen ist. Die anschließende im Experiment beobachtete starke Abschwächung der Verbrennung wird ebenfalls nicht erfasst. In den Rechnungen zu beiden Versuchen werden etwa 10^5 kJ durch die Verbrennung freigesetzt.

In einer Parameterrechnung zu HD-30 wurde mit einem Gebläse künstlich eine Atmosphärenbewegung von etwa 1 m/s im unteren Behälterbereich erzeugt. Dies führt in der Anfangsphase zu einer schnelleren Verbrennung und einem dementsprechend stärkeren Druckanstieg als in der Rechnung mit ruhender Atmosphäre (Abb. 2.31). Die anschließende starke Abschwächung der Verbrennung wird aber auch nicht erfasst.

Im Modell kann eine Abschwächung der Verbrennung nur durch eine Verdampfung der Sprühtröpfchen bewirkt werden. Damit würde sich die aktuelle H_2 -Masse in Gl. (2.1) und damit die Brennrates verringern. Die Brenndauer würde sich aber verlängern. In die Berechnung der Flammfrontgeschwindigkeit hingegen gehen nur die Werte der Zielzone ein. Hier hat aber noch keine Verbrennung und somit Verdampfung der Tröpfchen stattgefunden. Einströmender Dampf könnte aber die H_2 -Konzentration verringern, womit eine geringere Flammfrontgeschwindigkeit ausgerechnet würde.

Während im HD-7-Experiment ein geordneter sukzessiver Anstieg der Temperatursignale gemessen wurde (Abb. 2.27), steigen die Temperatursignale im HD-30-Experiment „ungeordneter“ und zu weniger hohen Werten an (Abb. 2.32). Die HD-30-Rechnung hingegen zeigt gleichermaßen wie die HD-7-Rechnung einen geordneten Temperaturanstieg, allerdings mit bis zu 200 K niedrigeren örtlichen Temperaturen. Wie bereits beschrieben, wird eine Wirkung der Sprühtröpfchen berechnet, jedoch unterschätzt.

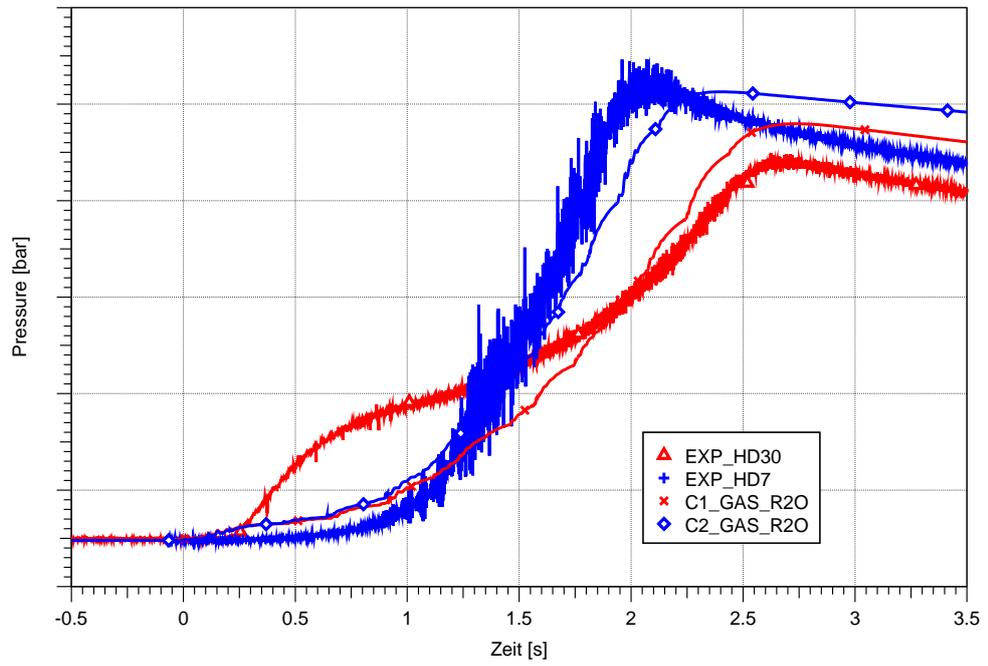


Abb. 2.30 Vergleich HD-30 mit HD-7, Druckverläufe Experiment und COCOSYS

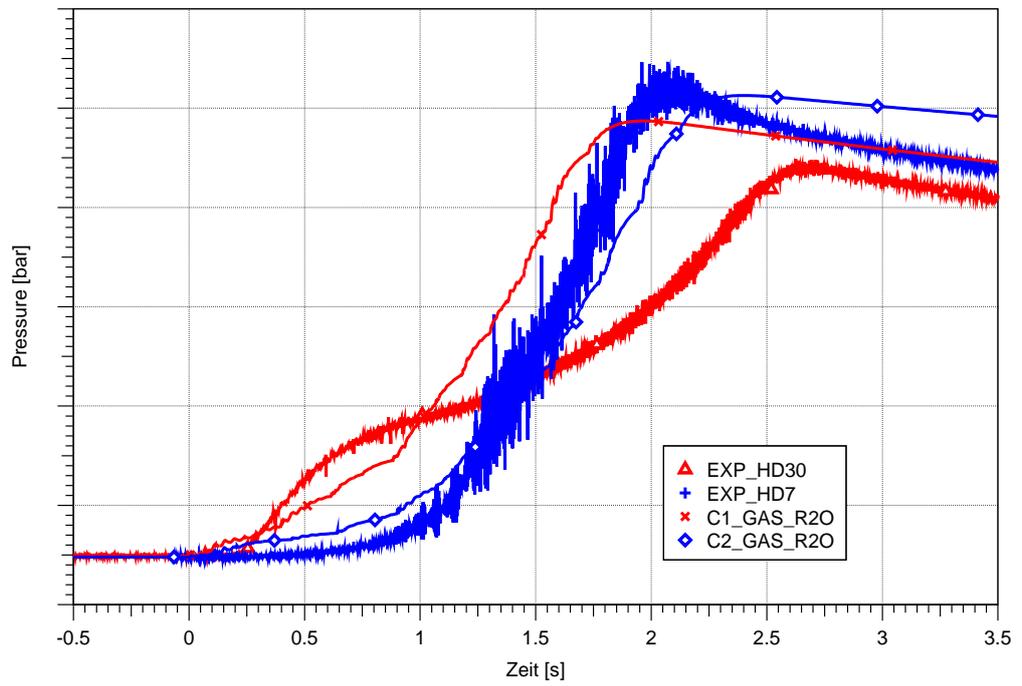


Abb. 2.31 Vergleich HD-30 mit HD-7, Druckverläufe Experiment und COCOSYS, Parameterrechnung zu HD30 mit Atmosphärenbewegung

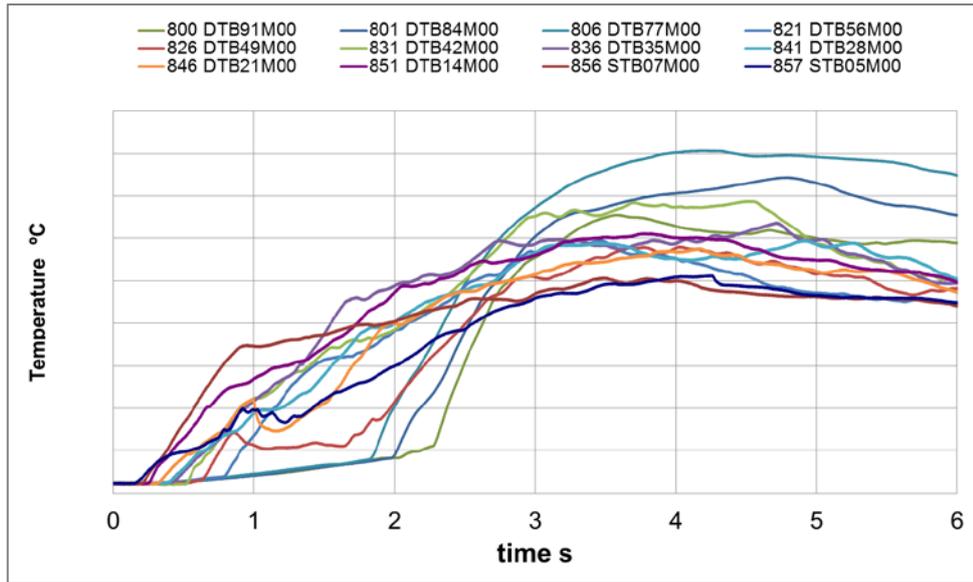


Abb. 2.32 HD-30, Temperaturen entlang der Mittellinie des Behälters

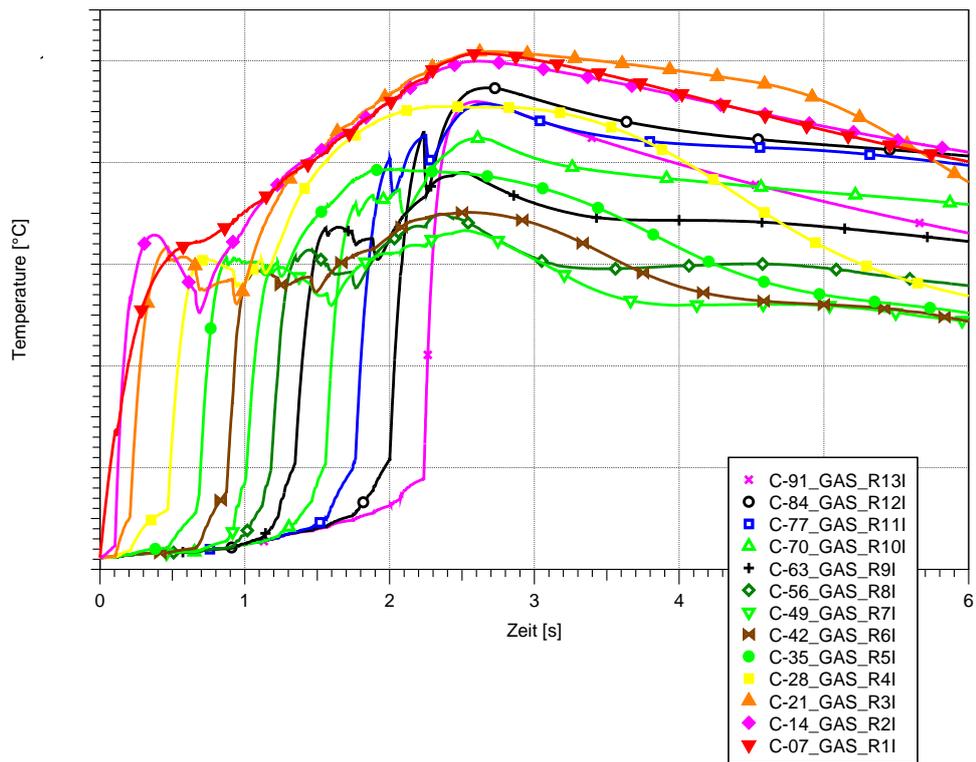


Abb. 2.33 HD-30, COCOSYS Temperaturen Innenbereich

2.1.3.5.3 Versuche HD-22: H₂-Verbrennung ohne Sprühen und HD-31/HD-32: H₂-Verbrennung mit Sprühen

Der Versuch HD-22 wurde mit einer Anfangstemperatur von etwa 90 °C, mit einer Dampfkonzentration von etwa 25 Vol% und ohne Sprühen gefahren. Mit REYFAC von 1,4 wurde der experimentelle Druckverlauf wiedergegeben (Abb. 2.34).

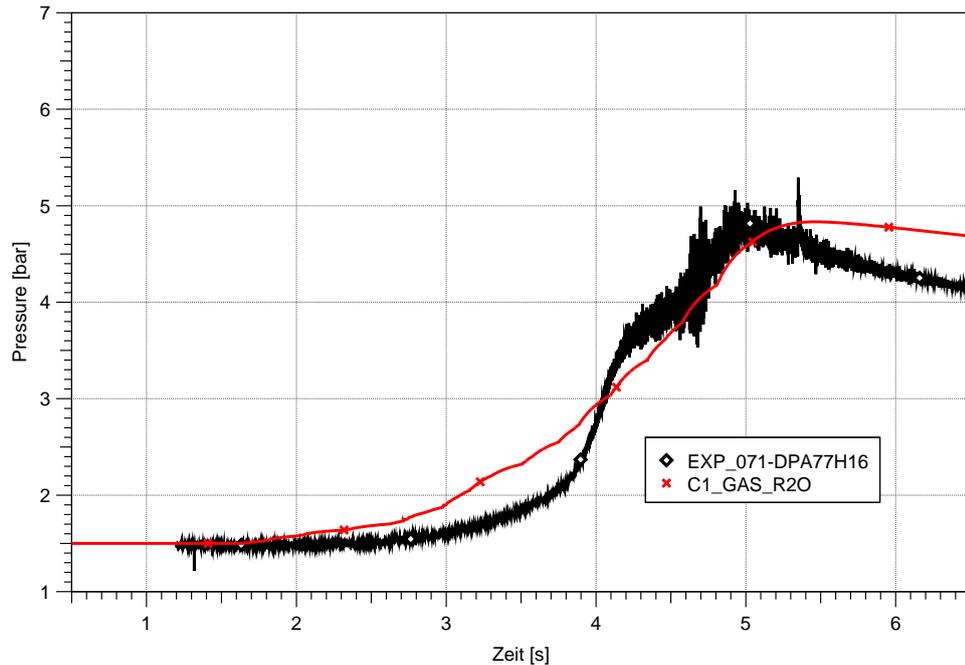


Abb. 2.34 HD-22, Druckverlauf Experiment und COCOSYS

Auf eine Wiederholung der Rechnung zu HD-31 und HD-32 und Aufbereitung der experimentellen Daten zum Vergleich mit den Rechnungen wurde verzichtet, da zu erwarten ist, dass gleichermaßen wie in den HD-30-Rechnungen die Wirkung der Sprühtröpfchen unterschätzt wird.

2.1.3.6 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

Die Rechnung zum reinen Sprühversuch gibt die experimentelle Druckabsenkung gut wieder. Sie überschätzt aber die Temperaturabsenkung. Daraus kann geschlossen werden, dass in der Rechnung die Verringerung des Dampfpartialdrucks aufgrund von Kondensation etwas unterschätzt wird, dafür aber die Verringerung des Luftpartialdrucks aufgrund der Temperaturabsenkung überschätzt wird.

Die Verbrennungsversuche ohne Sprühen (HD-7 und HD-22) können mit dem FRONT-Modul unter Verwendung der im COCOSYS-Manual angegebenen Default-Parameter gut nachgerechnet werden. Nur REYFAC wurde von 1,1 (*Default*) auf 1,4 erhöht.

Bei Verbrennungsversuchen mit Sprühen simuliert COCOSYS nicht die von den Sprühtropfen verursachte Atmosphärenbewegung, die in der Anfangsphase des Experiments eine verstärkte Verbrennung bewirkt. Des Weiteren unterschätzt COCOSYS sehr stark die Abschwächung der Verbrennung durch die Sprühtropfen. Dies zeigt die gegenwärtigen Anwendungsgrenzen des Modells auf.

2.1.4 Begleitung der geplanten THAI-Versuche zum Rekombinatorverhalten mit Gegenströmung

Erste Diskussionen zu den geplanten Versuchen zum Verhalten von Rekombinatoren in Gegenströmung (HR43 – HR45) in der neuen THAI+ Anlage haben im 3. Quartal 2015 stattgefunden. Mögliche Versuchsaufbauten, die Versuchsfahrweise und die thermalhydraulischen Randbedingungen wurden neben den Zielen der Versuche diskutiert. Vorgeschlagen wurde, dass die Untersuchungen zum Verhalten von Rekombinatoren in Gegenströmung in drei Einzelversuchen durchgeführt werden sollen:

1. Reko in Gegenströmung mit einer Geschwindigkeit von ca. - 0.5 m/s im PAD (PAR in PAD)
2. Reko in Co-Strömung mit einer Geschwindigkeit von ca. + 0.5 m/s im PAD (PAR in PAD) durch Umkehr der Gebläse-richtung
3. Wechselwirkung zweier Rekombinatoren (PAR in THAI und PAR in PAD) ohne den Einsatz des aktiven Gebläses.

In Absprache mit dem Experimentator sind Auslegungsrechnungen nicht vorgesehen. Die Versuche werden in 2016 bei Becker Technologies durchgeführt. Nachrechnungen der Versuche zur Modellvalidierung werden im Nachfolgevorhaben zu RS1514 durchgeführt.

2.2 Aerosolverhalten

Auf die Fortsetzung der Validierung von Einzelmodellen in COCOSYS und insbesondere der Aerosolmodelle wird nachfolgend eingegangen.

Im Projekt THAI-IV wurden Aerosolveruche zur nassen Resuspension durchgeführt. Dabei wurden in Ergänzung zu den Versuchen TH-14 bis TH-17 nicht-lösliche Aerosole verwendet. Die Auslegung der Versuche mit COCOSYS erfolgte im COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1185 /SPE 12/. In diesem Vorhaben wurden die Ergebnisse ausgewertet und Empfehlungen zur Simulation der nassen Resuspension gegeben (siehe Kap. 2.2.1).

Im Rahmen des Vorhabens wurde erstmals das neue Modell zum Auswaschen von Aerosolen aus der Atmosphäre durch Sprühen validiert. Hierzu wurden Versuche in der THAI-Anlage durchgeführt und nachgerechnet (siehe Kap. 2.2.2).

Auf die Umstrukturierung des Aerosol- und Spaltproduktmoduls AFP und die erforderliche grundlegende Überprüfung der Validierung bezüglich des Aerosolverhaltens wird in Kap. 2.4 eingegangen.

2.2.1 Schlussfolgerungen aus THAI-Versuchen zur nassen Resuspension mit nicht-löslichem Material

Analysen schwerer Störfälle in DWR zeigen die zu erwartenden Mengen unlöslicher Aerosole, die aus dem Reaktorkreislauf in das Containment freigesetzt werden können. Das sind u. a. die Elemente Ag, In, U und andere Aktiniden Sn, Zr sowie weitere unlösliche Spaltprodukt-Verbindungen. Für eine deutsche Anlage vom Typ KONVOI werden ca. 700 kg freigesetzte unlösliche Spaltprodukte erwartet. Spaltprodukte in löslichen Aerosolverbindungen bestehen im Wesentlichen aus Cs-Verbindungen. Bei einer kompletten Cs-Freisetzung aus dem Kerninventar beträgt die lösliche Aerosolmasse ca. 350 kg. Beide Werte hängen stark vom Abbrandzustand des Kerns zum möglichen Zeitpunkt des Unfalleintritts ab.

Die nasse Resuspension von unlöslichem Aerosolmaterial aus einer Wasservorlage im Sicherheitsbehälter unterscheidet sich von der mit löslichem Material vor allem durch eine potentiell höhere Freisetzungsrates und durch größere Partikel /WEB 12/. Bei löslichem Material ist die Größe der eingetrockneten Partikel durch die Konzentration im Tropfen bestimmt. Bei unlöslichem Material hängt dagegen die Partikelgröße des freigesetzten Aerosols von der Größe der im Sumpf suspendierten Partikel (Hydrosol) ab. Sind die Partikel größer als die Tröpfchen, werden sie gar nicht erst freigesetzt. Kleine Partikel wiederum können wegen der Anreicherung an der Sumpfoberfläche überproportional stark freigesetzt werden.

Zur Berechnung der Resuspension von Spaltprodukten aus einem siedenden Sumpf stehen in COCOSYS zwei Optionen zu Verfügung, das sogenannte RUB-Modell, das auf THAI-Versuchen basiert, und vom Anwender vorgebbare Resuspensionsfaktoren.

Auf Basis der THAI-Versuche TH-14 bis TH-17 mit löslichem Aerosol wurde von RUB eine Korrelation für den Tropfendurchmesser und die freigesetzte Tropfenvolumenrate als Funktion der Leerrohrgeschwindigkeit entwickelt und in COCOSYS implementiert /DAP 09/. Die Ergebnisse der genannten THAI-Versuche TH-14 bis TH-17 werden vom RUB-Modell gut wiedergegeben. Auffällig am RUB-Modell sind die Unstetigkeit beim Übergang der Strömungsregime und die nicht direkte Abhängigkeit des Entrainments von der Leerrohrgeschwindigkeit. Wegen des speziellen Aufbaus der Korrelation – die Koeffizienten sind nicht wie in vergleichbaren Modellen dimensionslos – muss ihre Gültigkeit vor einer Übertragung auf andere geometrische Verhältnisse überprüft werden. Bei Vorgabe des Anreicherungs-faktors (AF) ist die Korrelation prinzipiell auch für die Resuspension von unlöslichen Aerosolen einsetzbar.

In COCOSYS kann derzeit im zweiten Modell nur ein allgemeiner Resuspensionsanteil für alle Aerosole vorgegeben werden. Die Resuspension von Aerosolen wird durch den sogenannten Entrainmentfaktor E im COCOSYS-Modell beschrieben. Dieser ist das Verhältnis des Massenstroms der freigesetzten Tropfen über dem Pool \dot{m}_{Tr} zu dem Gasmassenstrom \dot{m}_G (meist Dampf), der an der Sumpfoberfläche austritt.

$$\text{Entrainment: } E = \dot{m}_{Tr} / \dot{m}_G \quad (2.6)$$

Der Anreicherungs-faktor AF ist das Verhältnis der Konzentration der resuspendierten Substanz bzw. Radioaktivität im Tropfen c_{Tr} zur Konzentration/Radioaktivität im Sumpfwasser c_W .

$$\text{Anreicherungs-faktor: } AF = c_{Tr} / c_W \quad (2.7)$$

- Bei $AF < 1$ ist die Substanz in Tropfen abgereichert, d. h. die Konzentration im Tropfen ist niedriger als im Sumpf.
- Bei $AF > 1$ ist sie höher und die Substanz ist angereichert.

Die Konzentrationsänderung beim Tropfenmitriss wird im Resuspensionsanteil berücksichtigt.

$$\text{Resuspensionsanteil: } R = E \cdot AF \quad (2.8)$$

Für lösliches Material sind Entrainment und Resuspensionsanteil gleich. Für unlösliches Material kann $AF < 1$ oder ≥ 1 sein, je nach den involvierten Prozessen:

- $AF < 1$ ist z. B. gegeben, wenn sich ein Teil der im Wasser suspendierten Partikel auf den Sumpfboden abgesetzt hat oder wenn Partikel zu groß sind, um mit den kleinen Tröpfchen (etwa $1 \mu\text{m}$ anzahlgemittelt) resuspendiert zu werden.
- $AF > 1$ ist gegeben, wenn die Partikel beim Sieden an die Sumpfoberfläche transportiert werden und sich dort anreichern („Aufschwimmen“).

In den REST-Versuchen /BUN 92/ wurden lösliche und unlösliche Aerosole unter gleichen Bedingungen gemessen. Der ermittelte Anreicherungsfaktor mit unlöslichem Material ($D_{50} = 0,65 \mu\text{m}$ und $\sigma = 1,7$) betrug grob:

$$AF \approx 20 \quad (2.9)$$

Im THAI Resuspensionsversuch TH-25 (Abb. 2.35) mit unlöslichem Aerosolmaterial aus einem siedendem Sumpf wurde fast immer eine deutliche Abreicherung des Materials in den Tröpfchen gemessen:

$$AF \approx 0,1 - 0,4 \quad (2.10)$$

Im TH-25-Versuch wurden zwei unabhängige Methoden zur Messung der Aerosolkonzentration in der Atmosphäre eingesetzt, Gaswäscher mit anschließender chemischer Analyse sowie ein Scanning Mobility Particle Sizer (SMPS). Mit letzterem wurden bis zu $1\frac{1}{2}$ Größenordnungen höhere Konzentrationen gemessen als mit den Gaswäschern. Entsprechend größer sind auch die daraus ermittelten Resuspensionsanteile für das unlösliche Aerosol. Dennoch bleiben sie noch deutlich unter den REST-Werten. Die aus den Gaswäscher-Messwerten abgeleiteten Resuspensionsanteile für unlösliche CaCO_3 -Partikel sind in Abb. 2.35 wiedergegeben. Die unsicheren SMPS-Werte sind nicht eingetragen.

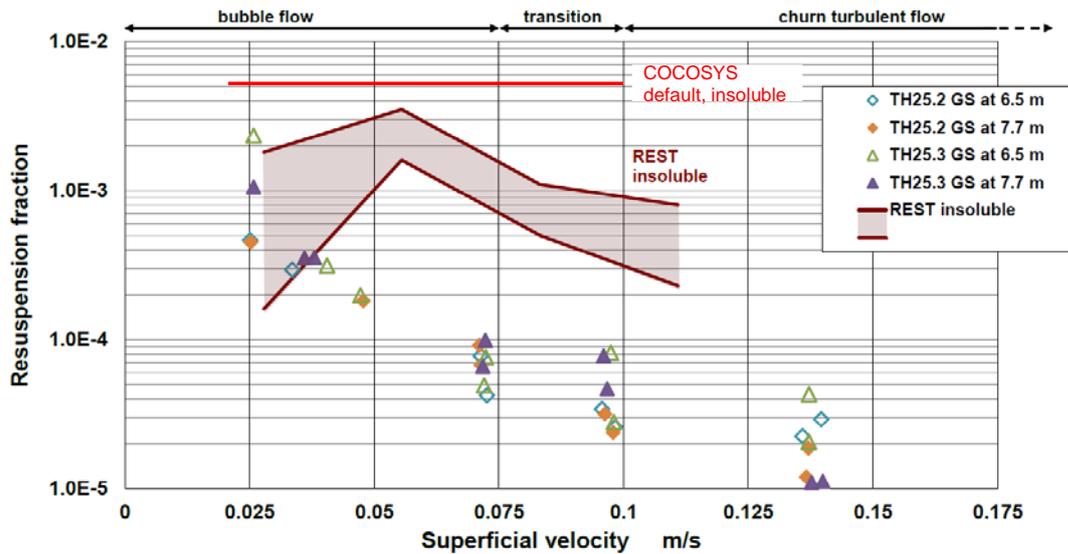


Abb. 2.35 TH-25, Resuspension von CaCO_3 -Partikeln aus dem siedenden Sumpf mit Gaswäschern gemessen; die SMPS-Messwerte liegen deutlich höher (nicht eingezeichnet)

Die Gründe für die Unterschiede sind nicht genau bekannt. Ein Agglomerieren der Partikel in TH-25 und ein Absinken auf den Sumpfboden kann nicht ausgeschlossen werden. Auch waren die in der Serie TH-25.3 eingesetzten CaCO_3 -Partikel mit einem $\text{MMD} = 0,9 \mu\text{m}$ relativ groß und wurden von den an der Sumpfoberfläche freigesetzten Tropfen nur teilweise „mitgenommen“. Weiterhin war die Konzentration des resuspendierten Aerosols in der Behälteratmosphäre mit $1,0\text{E}-7$ bis $1,0\text{E}-6 \text{ g/l}$ ziemlich niedrig und die Messunsicherheit entsprechend hoch /SCH 13/.

Eine Nachrechnung des Versuchs TH-25 mit COCOSYS erschien nicht möglich, da (1) derzeit keines der beiden Modelle geeignet erscheint und (2) die Messergebnisse, insbesondere die Anreicherungs-faktoren, zu unsicher sind. Alles in allem lassen sich keine neuen belastbaren Resuspensionsanteile für unlösliche Spaltprodukt-Aerosole aus dem Versuch TH-25 ableiten. Bisher bekannte Werte, wie die aus den REST-Versuchen, werden grob bestätigt.

Für die laufende Umstrukturierung des AFP-Moduls in COCOSYS wird in Bezug auf die nasse Resuspension empfohlen, aerosolspezifische Werte für den Entrainmentfaktor bzw. den Resuspensionsanteil vorzusehen und eine mögliche aerosolgrößen-spezifische Ablagerung von Spaltprodukten zu berücksichtigen. Bisher wird die Aerosolab-lagerung im Sumpf auf Basis eines mittleren Aerosoldurchmessers berechnet.

2.2.2 Begleitung der THAI-Versuche zum Aerosol auswaschen durch Sprühen

2.2.2.1 Versuch AW-4

Nachfolgend werden die ersten Nachrechnungen zum Aerosol auswaschen durch Sprühen mit dem im COCOSYS eingebauten Auswaschmodell vorgestellt. Für die Untersuchungen wurde der von Becker Technologies durchgeführte Versuch AW-4 herangezogen /SCH 15/. Ziel des Versuches ist es, die Abnahme der luftgetragenen Aerosolkonzentration durch ein reaktortypisches Sprühsystem mit polydispersem Tropfenspektrum zu untersuchen. Der Versuchsaufbau sieht eine Csl-Aerosol Einspeisung und ein Sprühsystem im oberen THAI-Behälter-Bereich vor (siehe Abb. 2.36). Im Versuch wurden die Partikelgrößen durch einen Impaktor auf zwei verschiedenen Höhen und zu unterschiedlichen Zeitpunkten bestimmt. Die Csl-Konzentration wurde durch Filter- und Laserabsorptionsmessungen gemessen.

Der Versuch AW-4 gliedert sich in zwei Teile (Phase A und B). Phase A untersucht den trockenen Csl-Aerosolabbau. In Phase B wird der Csl-Aerosolabbau unter Einfluss des Sprühsystems betrachtet. Dabei waren sowohl die thermohydraulischen Randbedingungen sowie die Probeentnahmezeitpunkte in Phase A und Phase B aufeinander abgestimmt.

Die Anfangs- und Randbedingungen des Versuchs sehen wie folgt aus. Um eine überhitzte Atmosphäre für den Zeitpunkt vor der Aerosoleinspeisung zu erreichen, wurden die Behälterwände auf eine Ausgangstemperatur von 90 °C erhitzt. Der Behälterdeckel wurde allerdings nur auf 80 °C aufgeheizt, damit sich eine natürliche Konvektion ausbildet, die zu einer guten Durchmischung des Csl-Aerosols beiträgt. Der Ausgangsdruck nach der Konditionierungsphase betrug ca. 1,5 bar und die durchschnittliche relative Feuchte (rF) ca. 50 %. Der Sprühkegel des Sprühsystems hat eine Sprühabdeckung von ca. 30° und in Phase B werden zwei Sprühphasen von jeweils 40 s durchgeführt.

2.2.2.2 COCOSYS-Modell

In Abb. 2.36 ist die für die Rechnungen (Auslegungs- und Nachrechnung) verwendete Nodalisierung dargestellt.

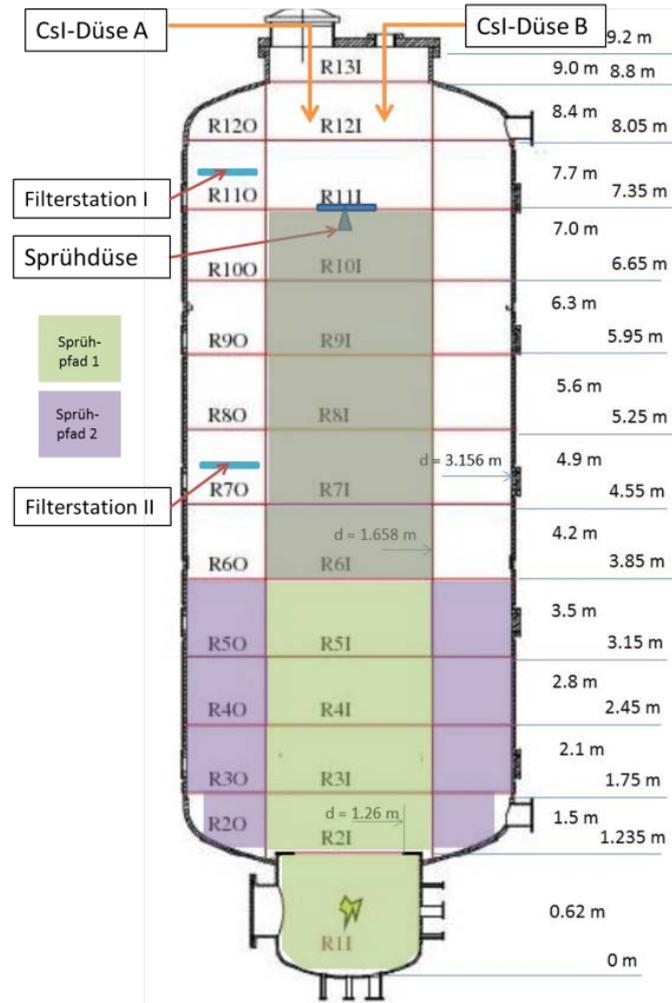


Abb. 2.36 COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Behälters für den Versuch AW-4

Für die Auslegungsrechnung bzw. Nachrechnung mit COCOSYS V3.0dev werden folgende Annahmen getroffen:

- Das Sprühmodell in COCOSYS berücksichtigt eine monodisperse Tropfenverteilung.
- Der Sprühkegel wird durch zwei Sprühpfade in COCOSYS abgebildet.
- Die Sprühtropfen haben einen Sauter Mean Diameter von 525,5 μm .
- Das atmosphärische Entrainment wurde nicht berücksichtigt.
- Csl-Aerosol wird mit einem Mass Medium Diameter (MMD) von 1 μm und einer Geometrischenstandardabweichung (GSD) von 1,82 in der Auslegungsrechnung und einem MMD von 1,75 μm und einer GSD von 1,82 in der Nachrechnung eingespeist.

2.2.2.3 Ergebnisse der Auslegungsrechnung des Versuchs

Die Ergebnisse der Auslegungsrechnung sind in Abb. 2.37 – Abb. 2.39 anhand der berechneten Temperatur-, Druck- und Konzentrationsverläufe in den Räumen R12I bzw R11O und R2O dargestellt. In der Auslegungsrechnung wurde eine MMD = 1 µm und eine GSD = 1,82 angenommen. Außerdem wurde eine Csl Anfangskonzentration von 2 g/m³ abgeschätzt. Die Sprühphasen (2 x 40 s) haben einen deutlichen Einfluss auf die Thermohydraulik im Behälter sowie die Änderung der Aerosolkonzentration. Während der Sprühphasen kommt es zur Temperatur- und Druckabsenkung. Nach der Sprühphase stabilisieren sich die Temperaturen wieder auf einem Wert der ca. 2 °C unterhalb des Anfangswerts liegt. Der Druck hingegen steigt nach den Sprühphasen auf einen höheren Druck an, da die eingespeisten kalten Sprühtropfen in der Auslegungsrechnung auf der Bodenkalotte auftreffen und dort verdampfen und somit zu der Druckerhöhung beitragen. Der Einfluss des Sprühens auf die Aerosolkonzentration (vgl. Abb. 2.39) zeigt eine Abnahme der Csl-Konzentration um einen Faktor 3 bis 4. Bereits in der Auslegungsrechnung ist auffällig, dass der trockene Aerosolabbau in der Phase vor dem Sprühvorgang zu langsam abläuft.

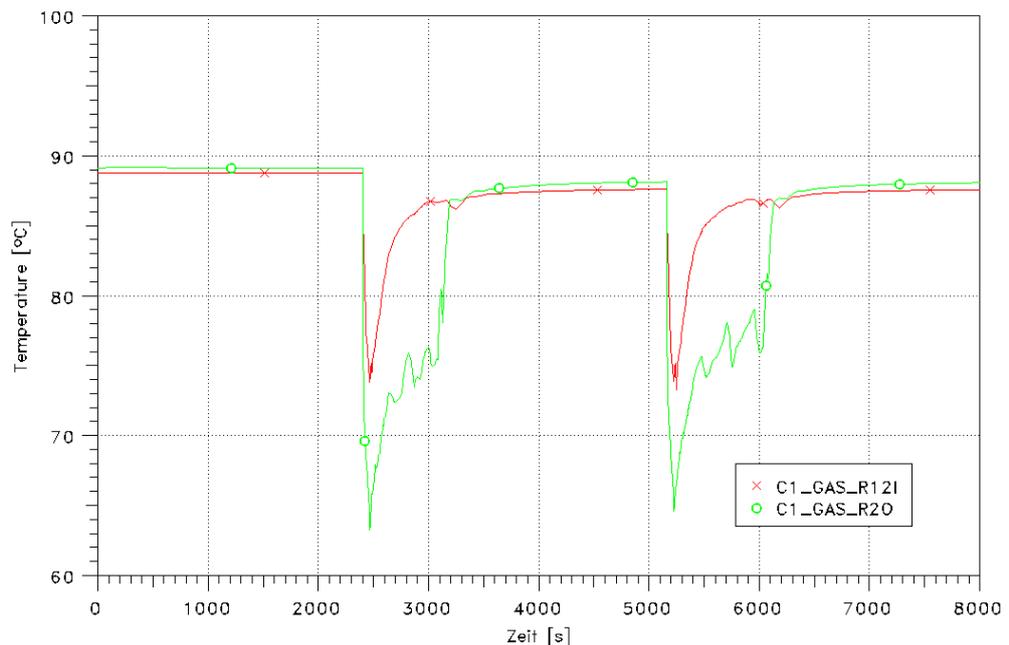


Abb. 2.37 AW-4, Temperaturverlauf der Auslegungsrechnung in den Räumen R12I und R2O

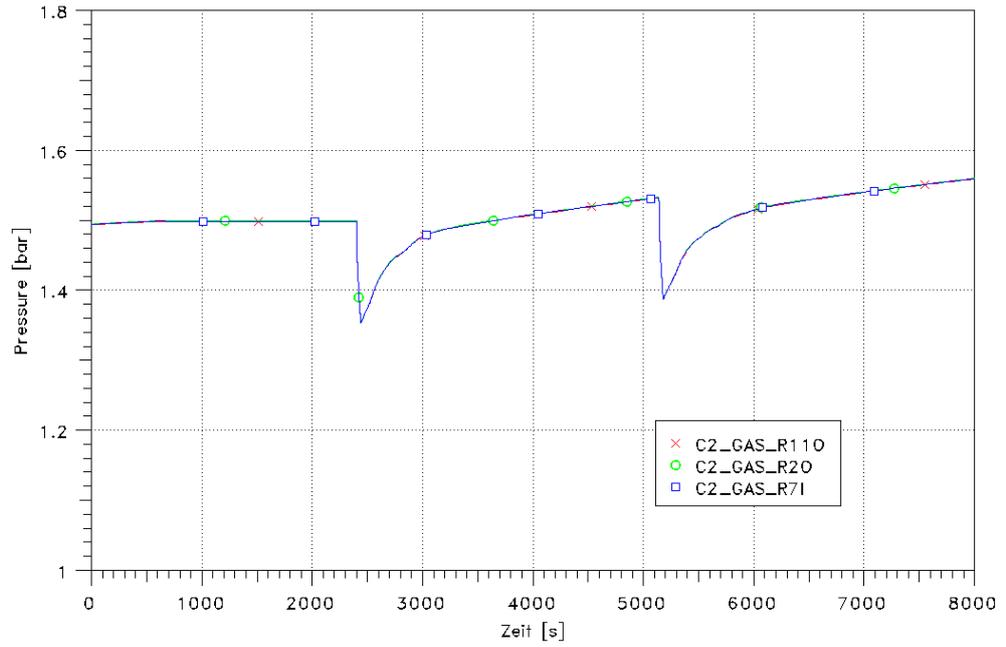


Abb. 2.38 AW-4, Druckverlauf der Auslegungsrechnung in den Räumen R110 und R20

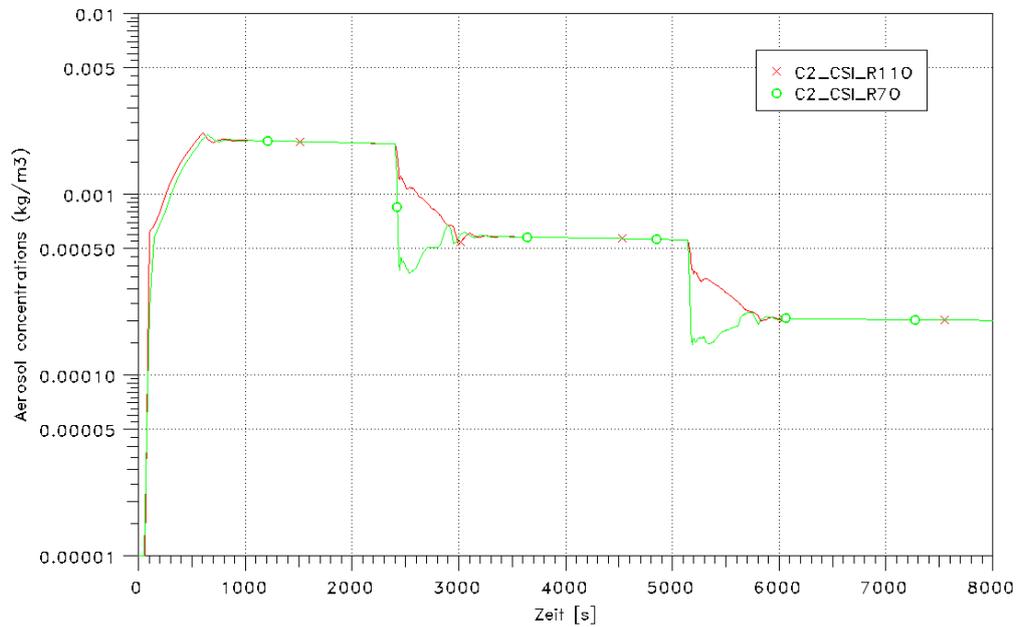


Abb. 2.39 AW-4, Verlauf der Csl-Aerosolkonzentration der Auslegungsrechnung in den Räumen R110 und R20

2.2.2.4 Ergebnisse der Nachrechnung des Versuchs

Für die Nachrechnungen des Versuches wurde eine geänderte Csl-Anfangskonzentration (1.2 g/m^3 statt 2 g/m^3) verwendet, da diese in der Auslegungsrechnung überschätzt wurde (vgl. Abb. 2.39 und Abb. 2.43). In Abb. 2.40 – Abb. 2.42 sind die berechneten Gastemperaturen, Drücke und relativen Feuchten den experimentellen Daten gegenübergestellt. Die Auswertung zeigt, dass die thermohydraulischen Zustände des Versuchs mit sehr guter Übereinstimmung nachgerechnet werden. Die Auswertung des Behälterdrucks hat ergeben, dass es zu einer Druckabsenkung nicht nur während der Sprühphase sondern auch nach der Sprühphase kommt, d. h. der Druck stabilisiert sich nach der Sprühphase auf einem niedrigeren Druckniveau als der Druckwert vor dem Sprühen. Das liegt daran, dass die Sprühtropfen im Versuch nicht auf die Bodenkalotte auftreffen und dort verdampfen. Aus diesem Grund wurde der Sprühpfad in der Nachrechnung dahingegen verändert, dass die Tropfen nicht mehr auf die Bodenkalotte auftreffen, und es somit auch in der Rechnung nicht mehr zu einem Verdampfen der Sprühtropfen kommt. Der Vergleich der Messergebnisse der relativen Feuchte rF mit den berechneten Ergebnissen (vgl. Abb. 2.42) ergibt eine Abweichung während der Sprühphase. In der Rechnung steigt die rF während des Sprühens an, wohingegen die Messwerte den Abfall der rF durch das Sprühen dokumentieren. Dies bedarf einer Überprüfung.

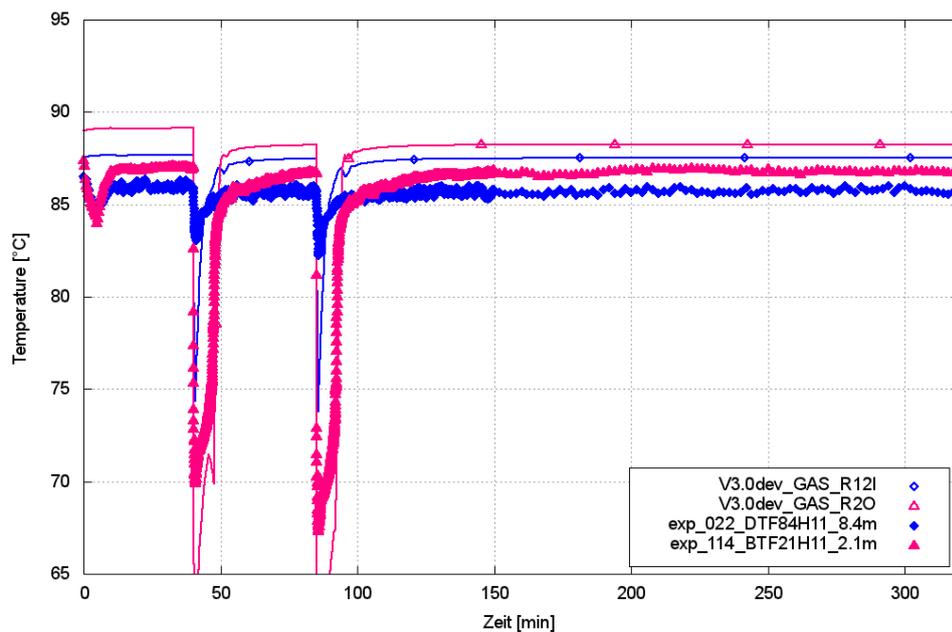


Abb. 2.40 AW-4, Gemessene und berechnete Gastemperatur in den Räumen R12I und R2O

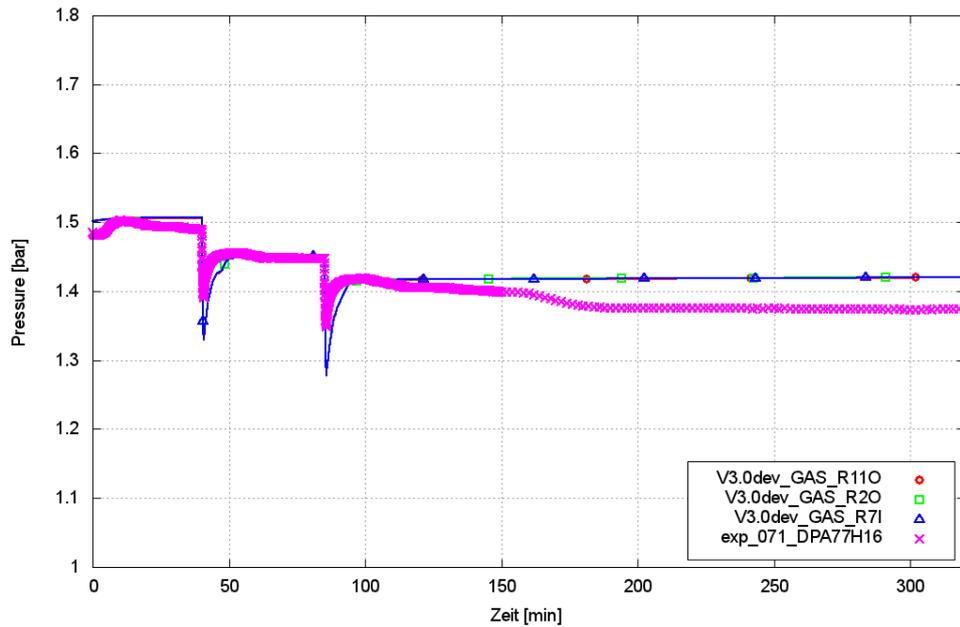


Abb. 2.41 AW-4, Gemessener und berechneter Druckverlauf in den Räumen R110 und R20

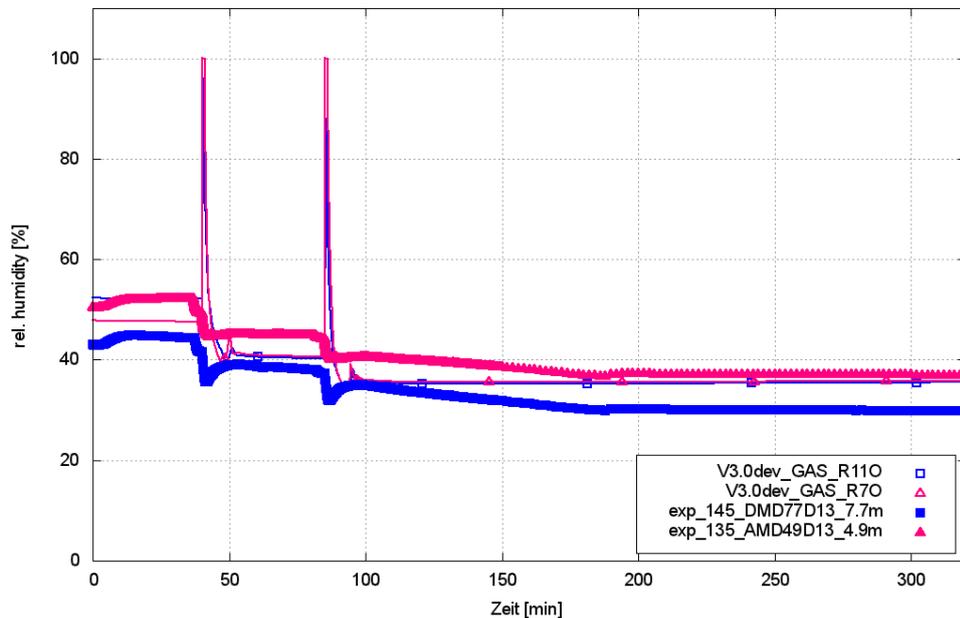


Abb. 2.42 AW-4, Gemessene und berechnete relative Feuchte in den Räumen R110 und R70

In Abb. 2.43 werden die gemessenen Csl-Aerosolkonzentrationen mit den in COCOSYS berechneten verglichen. Festzuhalten ist, dass die Berechnung des Auswaschens der Csl-Aerosole prinzipiell zufriedenstellend ist. Allerdings ist darauf hinzuweisen, dass der trockene Csl-Aerosolabbau, wie bereits in der Auslegungsrechnung

festgestellt wurde, vor der ersten Sprühphase stark unterschätzt wird. Eine Anpassung an die durch Impaktormessung bestimmte massengewichtete Partikelgröße und die dazugehörige geometrische Standardabweichung sowie eine Erhöhung der in COCOSYS verwendeten Aerosoldichte zeigten keine deutliche Verbesserung des trockenen Aerosolabbaus. Weiterhin wird zu wenig Aerosol in der ersten trockenen Phase ($t: 0 - 40 \text{ min}$) durch Ablagerung abgebaut. Dieser Fehler hat dementsprechend Auswirkungen auf die Auswaschrategie des Csl-Aerosols durch Sprühen. Nach der ersten Sprühphase liegt die berechnete Aerosolkonzentration ca. einen Faktor $1,5 - 2$ oberhalb der gemessenen Aerosolkonzentration. Daraus lässt sich ableiten, dass in COCOSYS die Csl-Aerosole zu stark ausgewaschen werden.

Die in Abb. 2.44 gegenübergestellten berechneten und mit einem Impaktor gemessenen massengewichteten Partikelgrößen lassen nur eine indirekte Überprüfung der Verschiebung der Größenklassenverteilung durch Auswaschen zu. Zu erwarten ist, dass durch das Sprühen vorrangig große und mittlere Partikelgrößen ausgewaschen werden, so dass nach dem Sprühen anteilig mehr kleinere Partikel vorhanden sind. Dies lässt sich durch die Betrachtung der massengewichteten Partikelgröße über der Zeit alleine nicht ableiten, jedoch, dass die Partikel nach den Sprühphasen ($t = 40,6 \text{ min}$ und $t = 85,6 \text{ min}$) kleiner sind und somit davon auszugehen ist, dass die größeren Partikel zu Gunsten der kleineren ausgewaschen werden. Ein genauer Vergleich der berechneten Partikelgrößenverteilung über der Zeit mit den gemessenen kumulierten Massenanteilen der verschiedenen Größenverteilungen muss noch angestellt werden.

Zu erwarten ist, dass durch eine starke Optimierung der Aerosolrechnung (weitere Erhöhung der Csl-Dichte und der massengewichteten Partikelgröße (MMD) der Primärpartikel) diese Abweichungen behoben werden kann. Zeigt sich, dass durch diese Korrektur der unterschätzte Aerosolabbau nicht verbessert werden kann, muss eine weitere Abklärung stattfinden.

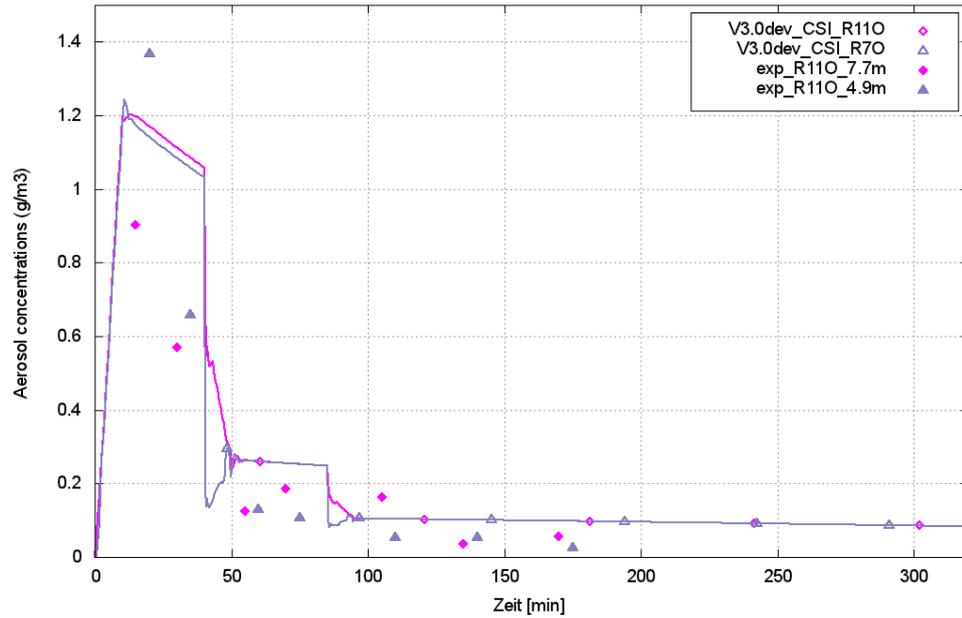


Abb. 2.43 AW-4, Gemessene und berechnete Csl-Aerosolkonzentration in den Räumen R110 und R70

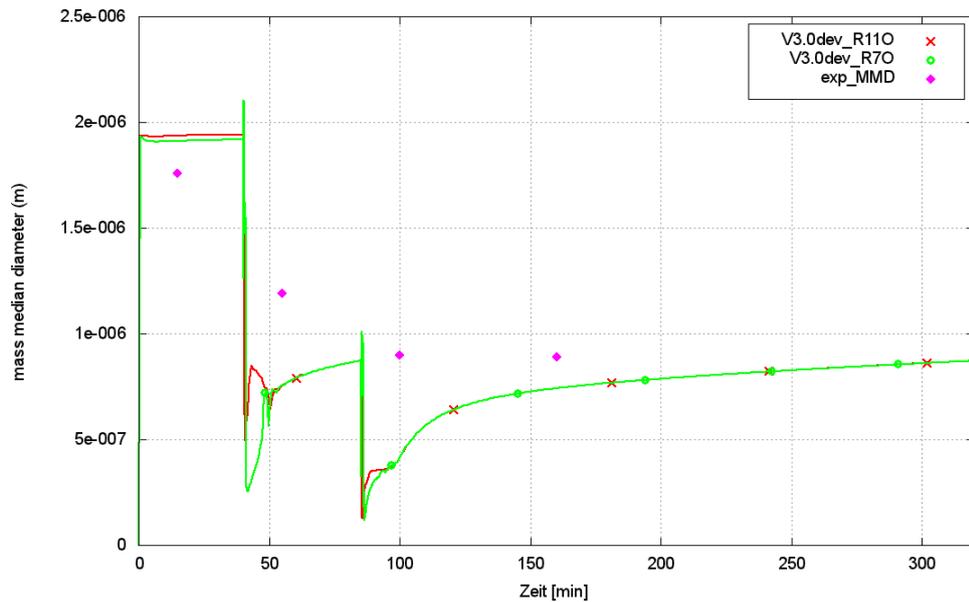


Abb. 2.44 AW-4, Gemessener und mit COCOSYS berechneter MMD

2.3 Iodverhalten

Die Schwerpunkte der Validierung des Iodmodells AIM im Vorläufervorhaben RS1190 /KLE 12/ waren die Überprüfung von Einzelmodellen, die meist anhand von THAI-

Versuchen erfolgte, die Rechnungen von I₂-Mehrraumversuchen (Kopplung Thermohydraulik mit Iodchemie) und die Analyse der integralen PHEBUS FP Tests. Weiter wurde eine Unsicherheits- und Sensitivitätsstudie zum Iodverhalten anhand des PHEBUS-Versuchs FPT1 durchgeführt /WEB 12a/. Die wichtigsten Iod-Ergebnisgrößen sind die Konzentrationen der quelltermrelevanten Iodspezies in der Gasphase (I₂, RI, Csl, IO_x). Ihre Unsicherheit beträgt im Mittel etwa eine Größenordnung, wobei sie für die aerosolförmigen Spezies deutlich kleiner und für die flüchtigen Spezies (I₂, RI) größer ist. Von den berücksichtigten unsicheren 93 Parametern tragen nur 5 Parameter bzw. Einzelmodelle wesentlich zur Unsicherheit des Iodergebnisses bei:

- Iod/Silber-Reaktion im Sumpf,
- Radiolytische I₂-Bildung aus I⁻ im Sumpf inklusive pH-Abhängigkeit und Bildung aus IO_x(w),
- I₂-Ablagerung auf trockener Farbe und auf Farbe bei Wandkondensation,
- Radiolytische RI-Bildung aus physisorbiertem Iod auf Farbe,
- I₂-Freisetzung aus dem Kühlkreislauf ins Containment (Eingabegröße in COCOSYS-AIM).

Basierend auf diesem Kenntnisstand wurde die Validierung des Iodmodells AIM fortgesetzt. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf dem neuen Iod/Farbe-Modell. Hier wurden Analysen anhand von OECD-BIP Versuchen sowie an THAI-Mehrraumversuchen durchgeführt. Das neue Modell wurde anhand von Ergebnissen aus den THAI-Einraumversuchen Iod-15, Iod-17 und Iod-20 validiert (Kapitel 2.3.1) und dabei die Eigenschaften der deutschen GEHOPON-Farbe berücksichtigt. In den BIP-Versuchen wurde keine deutsche Farbe verwendet, so dass daraus nur allgemeine Erkenntnisse abgeleitet werden konnten. Zur Validierung wurden anschließend die THAI-Mehrraumversuche Iod-27a, Iod-28 und Iod-30 nachgerechnet (Kapitel 2.3.2).

Ebenso wurde das Verhalten des Silberaerosols in Bezug auf Abwaschen von Wänden und Böden und in Bezug auf die Iod/Silber-Reaktion untersucht (siehe Kap. 2.3.3 und 2.3.4).

Am Sprühmodell in COCOSYS wurden bisher vor allem die thermohydraulischen Teile (Kondensation an den Tropfen) validiert. Das Auswaschen von Aerosolen ist wenig und das Auswaschen von Iod noch gar nicht überprüft. Ist das Sprühwasser mit flüchtigem

Iod kontaminiert, wie dies im EPR der Fall ist, kann dieses beim Sprühen in die Atmosphäre freigesetzt werden. Auch dieser Prozess soll untersucht werden (siehe Kap. 2.3.5).

Zur I₂/Aerosol-Reaktion wurden im THAI-Programm zwei Versuche durchgeführt, der erste mit inaktivem Aerosol (SnO₂) und der zweite mit aktivem Silberaerosol, das schnell mit gasförmigem I₂ reagiert. Inaktives Material bindet I₂ nur lose (Physisorption) und I₂ kann wieder freigesetzt werden. Reaktives Material bindet I₂ dagegen dauerhaft (Chemisorption). Die Ablagerungsprozesse wurden im COCOSYS-Entwicklungsvorhaben neu modelliert und sollen anhand der Versuche validiert werden (siehe Kap. 2.3.6).

Weitere Untersuchungen wurden für radiolytische Reaktionen im Sumpf vorgenommen (siehe Kap. 2.3.7). Hierzu gehört auch die Zersetzung von abgelagertem Csl durch Strahlung, welches im Rahmen von OECD-STEM untersucht wurde (siehe Kap. 2.3.8).

2.3.1 Begleitung der THAI-Iod-Einraumversuche zur Validierung des neuen Iod/Farbe-Modells

Mit dem bisherigen Iod/Farbe-Modell für trockene Bedingungen in COCOSYS-AIM konnten viele BIP-Versuche und die THAI-Mehrraumversuche mit Farbe hinsichtlich der Aerosolablagerung auf mit (Dekontaminations-)Farbe bedeckten Wänden und Böden im Containment nicht zufriedenstellend nachgerechnet werden. Das Modell wurde daher unter Verwendung von BIP-Daten grundlegend überarbeitet /BEC 15/. Das neue Modell wurde aus dem bisherigen 2-Stufen-Modell, in dem zuerst die Physisorption und daraus die Chemisorption von I₂ gerechnet werden, entwickelt. Die Adsorption von molekularem Iod (I₂) aus der Atmosphäre wird für beide Iodspezies jetzt in einem Schritt parallel gerechnet. Die wesentlichen Eigenschaften des Modells sind im Einzelnen:

- Die Chemisorptionsrate ist nicht mehr von der Menge des physisorbierten I₂ auf der Farbe abhängig.
- Der überwiegende Teil des Iods wird chemisorbiert und nur ein kleiner Anteil physisorbiert. Die Anteile stehen in einem festen Verhältnis.

- Die Chemisorptionsgeschwindigkeit hängt von der relativen Feuchte (Dampfdichte) in der Atmosphäre ab. Bei kleiner absoluter Feuchte geht die Chemisorption stark zurück.
- Die Speicherkapazität von chemisorbiertem Iod auf der Farbe ist beschränkt. Wird diese erreicht, wird kein weiteres Iod aufgenommen.
- Organoiod kann radiolytisch nur noch aus chemisorbiertem Iod gebildet werden. Die Bildung aus physisorbiertem I_2 wie im bisherigen Modell wurde eliminiert.

2.3.1.1 Versuch Iod-15

Der für die Nachrechnung verwendete Einraumversuch THAI Iod-15 wurde bei 1,25 bar, 102 °C und 43 % relative Luftfeuchte (rF%) durchgeführt. Während des Versuches wurde gasförmiges Iod ($I_2(g)$) eingespeist und der Iodabbau aufgrund von Ablagerungsprozessen auf Farb- und Stahloberflächen gemessen. In Abb. 2.45 werden die im Versuch gemessenen $I_2(g)$ -Konzentrationen in der Gasphase den berechneten Simulationsergebnissen in den ausgewählten Iod-Compartments gegenübergestellt. In den ersten drei Stunden wird der Iodabbau in der Gasphase von der Chemisorption des Iods auf der Farbe bestimmt. Danach stellt sich ein Gleichgewicht zwischen Adsorption auf Farbe und Desorption vom Stahl und der gasgetragenen Iod-Konzentration in der Atmosphäre ein.

Die Ablagerung von Iod auf Farbe ist ein zur Iodablagerung auf dem Stahl konkurrierender Prozess. Da die Ablagerung von Iod auf der Farbe deutlich schneller ist, dominiert zunächst dieser Ablagerungsprozess den Abbau von Iod in der Gasphase. Der Abbau der Iod-Konzentration in der Gasphase um zwei Größenordnungen wird von dem neuen Modell mit guter Übereinstimmung zu den Messwerten nachgerechnet. Allerdings sinkt die $I_2(g)$ -Konzentration in der Rechnung bei $t > 5$ h um eine Größenordnung unterhalb der gemessenen Konzentration. Dies ist unter anderem darauf zurückzuführen, dass die Iod/Stahl-Reaktionskonstanten, insbesondere die Desorptionsrate in COCOSYS-AIM-3, nicht auf das neue I_2 /Farbe-Modell abgestimmt sind und somit der Gleichgewichtszustand zwischen der I_2 -Desorption vom Stahl und der Chemisorption auf Farbe bei den vorliegenden niedrigen $I_2(g)$ -Konzentrationen nicht getroffen wird.

In der Rechnung ist die Desorption zu niedrig. Die Frage bleibt also offen, ob die in /PEL 10/ für das Iod/Stahl-Modell eingestellten Parameter im Zusammenspiel mit Far-

be gültig sind. Des Weiteren stellt sich die Frage, ob die Iod/Stahl-default-Werte für die Stahloberflächen in THAI für die Versuche nach THAI Iod-11 angepasst werden müssten, da sich im Laufe der Zeit die I_2 -Adsorptionsgeschwindigkeit der THAI-Stahloberfläche verringert hat. Die sogenannte Passivierung des Behälterstahls ist im Kapitel 2.3.2 näher beschrieben. Zu berücksichtigen ist weiter, dass die mit den Gaswäschern gemessenen I_2 -Konzentrationen auch Organoiod und I_2 abgelagert auf den natürlichen Aerosolpartikeln im Containment beinhalten. Die Größe dieser Beiträge lässt sich schwer abschätzen. Die tatsächliche I_2 -Konzentration im Gas dürfte daher etwas unter den Messwerten liegen.

In Abb. 2.46 ist die mit Szintillationsdetektoren gemessene Iodbelastung auf den Farbcoupons mit der in COCOSYS berechneten gegenübergestellt. Die berechnete abgelagerte Iodmasse wird in der Rechnung leicht überschätzt. Leider gibt es nur einen Messpunkt. Außerdem ist zu sehen, dass bereits nach einer Stunde die maximale Beladung erreicht ist und die Konzentration sich im Laufe der Rechnung nicht weiter verändert. Die gesamte abgelagerte Menge wird durch den chemisorbierten Anteil bestimmt, der physisorbierte Anteil ist um mehr als eine Größenordnung kleiner und nimmt im Verlauf der Rechnung deutlich ab.

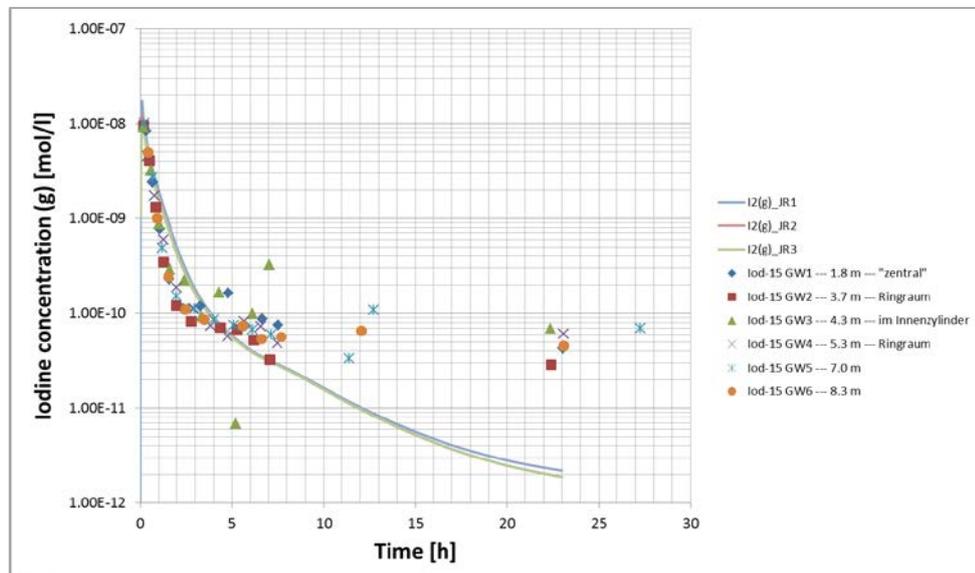


Abb. 2.45 Iod-15, I_2 Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung berechnet mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen

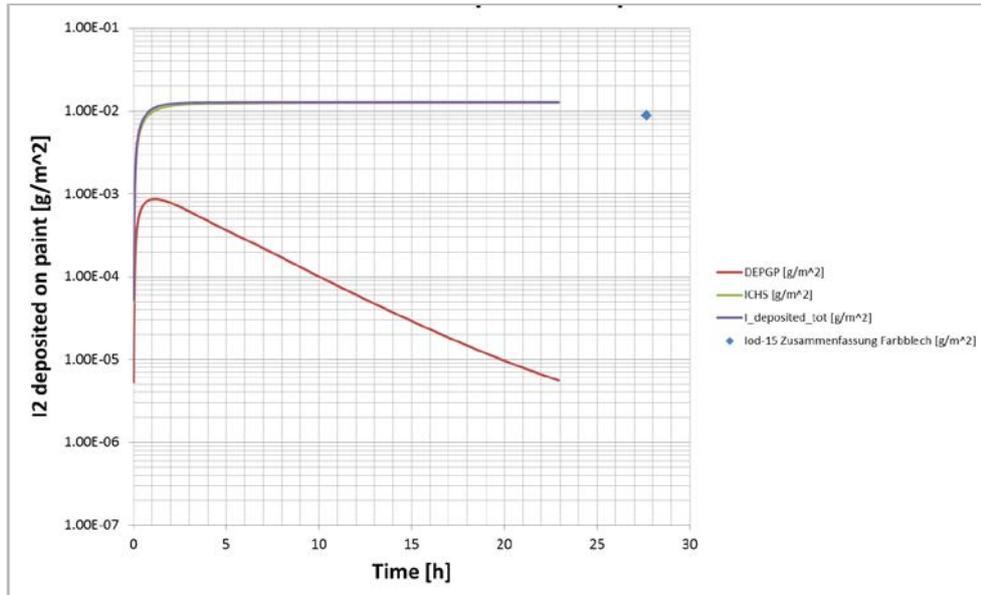


Abb. 2.46 Iod-15, Berechnete Iodablagerung auf dem Farbcoupon im Vergleich mit dem gemessenen Ergebnis

2.3.1.2 Versuch Iod-17

Die Versuche Iod-17 sowie Iod-20 (Kap. 2.3.1.3) setzen sich aus verschiedenen Phasen mit unterschiedlichen thermohydraulischen Bedingungen zusammen. In der ersten Versuchsphase starten die Versuche mit einer hohen relativen Feuchte (rF), nach einer Ablagerungsphase wird in beiden Versuchen die Temperatur erhöht und somit die relative Feuchte abgesenkt.

Die Ausgangstemperatur in Iod-17 ist 76 °C mit einer relativen Feuchte rF von 66 %. In Abb. 2.47 ist die $I_2(g)$ -Konzentration in der Gasphase dargestellt. In den ersten 5 Stunden fällt die $I_2(g)$ -Konzentration in der Atmosphäre um ca. 2,5 Größenordnungen ab. Der Vergleich mit den Messwerten zeigt, dass die Rechnung in guter Übereinstimmung dazu ist. Nach der Iod-Einspeisung ($t \sim 4,5$ h) wird die Temperatur auf 120 °C erhöht. Aus diesem Grund erhöht sich die Iod-Konzentration in der Gasphase wieder um ca. eine halbe Größenordnung, da bei einer Temperaturerhöhung das auf dem Stahl und auf der Farbe befindliche physisorbierte Iod resuspendiert wird. Bei $t = 9$ h hat der Versuchsbehälter die Temperatur 120 °C und die relative Feuchte rF von 18 % erreicht und die I_2 -Konzentration in der Gasphase nimmt wieder ab. In der späten Phase wird die $I_2(g)$ -Konzentration in der Rechnung unterschätzt. Auch die mit COCOSYS-AIM berechnete Beladung der Farbe stimmt mit den Messwerten gut überein (Abb. 2.48).

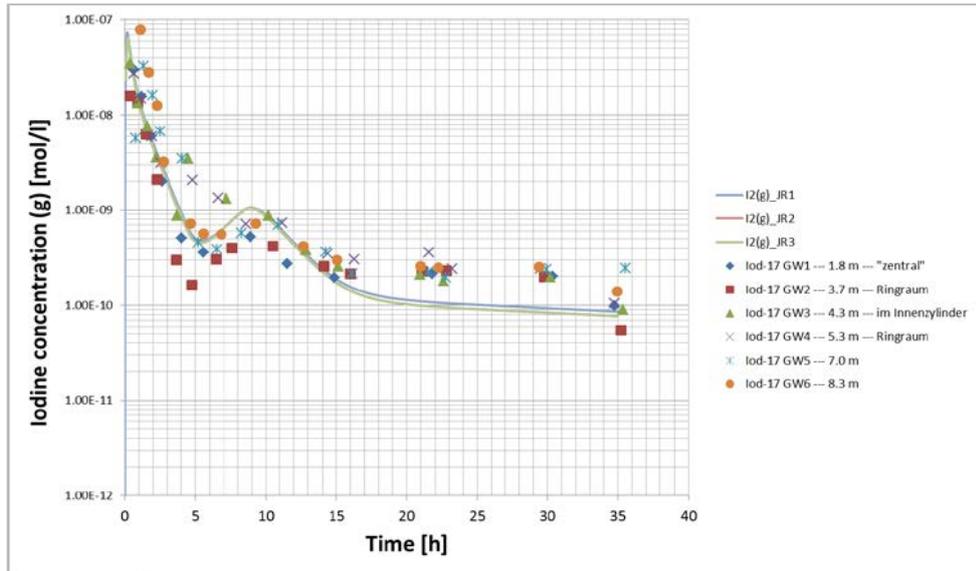


Abb. 2.47 Iod-17, I₂ Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung berechnet mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen

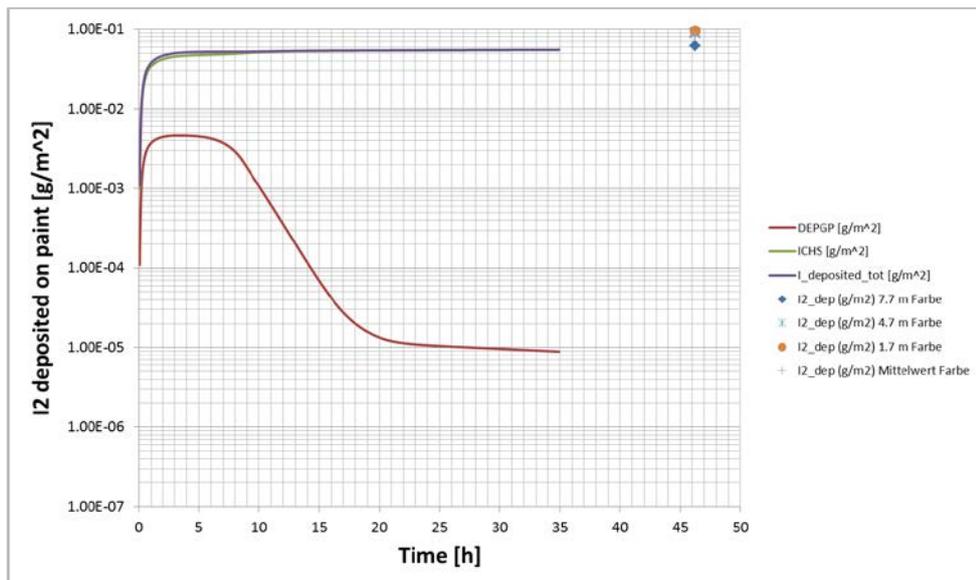


Abb. 2.48 Iod-17, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupons im Vergleich mit den Messwerten

2.3.1.3 Versuch Iod-20

Der THAI-Versuch Iod-20 hatte im Vergleich zu Iod-17 bereits eine höhere Ausgangstemperatur von 100 °C und eine höhere relative Feuchte rF von 73 %. Nach drei Stun-

den wurden die Farboberflächen auf 140 °C aufgeheizt. Nach weiteren drei Stunden wurden dann auch die Stahloberflächen auf 130 °C aufgeheizt. In der späten Versuchsphase ($t > 9$ h) erreicht die Behälteratmosphäre eine Temperatur von 130 °C und eine relative Feuchte rF von 31 %.

Die Nachrechnung des Versuches zeigt, dass in der von der Chemisorption von Iod auf Farbe dominierten Phase, bis $t = 4$ h die Ergebnisse sehr gut mit den Versuchsdaten übereinstimmen (vgl. Abb. 2.49). Allerdings nimmt dann im Folgenden (in der späten Versuchsphase), ähnlich wie bei der Nachrechnung von Iod-15, die I_2 -Konzentration in der Gasphase zu viel ab und liegt genau eine Größenordnung unterhalb der Messwerte. Auch hier wird vermutet, dass bei den sehr niedrigen Konzentrationen in der Gasphase in der Rechnung zu wenig wiederfreisetzbare (physisorbiertes) I_2 am Behälterstahl vorhanden ist.

Wie in Abb. 2.50 dargestellt, stimmt die berechnete Iodbelastung auf der Farbe recht gut mit den einzigen Messwerten bei $t = 46$ h überein. Die abgelagerte Iodmasse auf dem Farbcoupon wird in der Rechnung um einen Faktor 2 unterschätzt (siehe Abb. 2.50). Der kleine physisorbierte Anteil geht bis $t = 10$ h weitere 3 Größenordnungen zurück. D. h., auch hier wird die Vermutung gestützt, dass der Behälterstahl in der Rechnung zu viel Iod in Konkurrenz zur Farbe bindet.

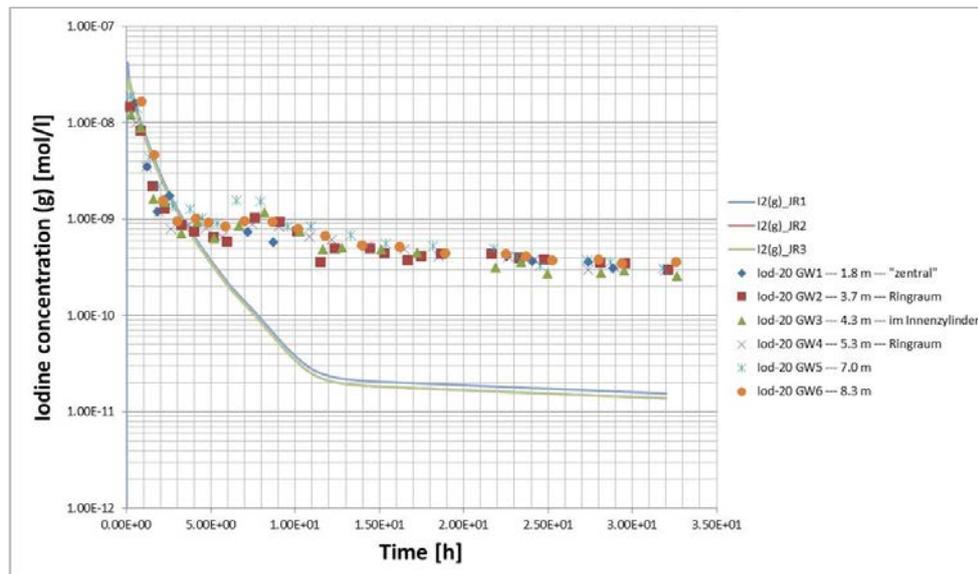


Abb. 2.49 Iod-20, I_2 Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen

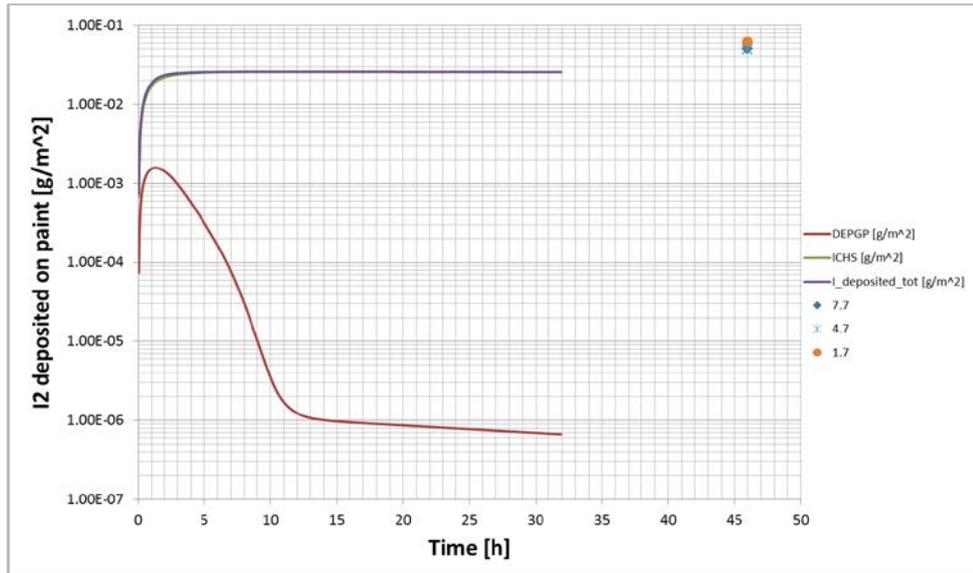


Abb. 2.50 Iod-20, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupons im Vergleich mit den Messwerten

2.3.1.4 Schlussfolgerungen

Die durchgeführten Validierungsarbeiten zu den THAI-Einraumversuchen Iod-15, Iod-17 und Iod-20 demonstrieren, dass sich diese und ähnliche Versuche mit dem neuen Iod/Farbe-Modell gut simulieren und interpretieren lassen. Die Messergebnisse konnten überwiegend zufriedenstellend nachgerechnet werden. Allerdings zeigen die Rechnungen auch, dass das Iod/Stahl-Modell im Zusammenspiel mit dem neuen Iod/Farbe-Modell noch nicht zufriedenstellend eingestellt ist. Die $I_2(g)$ -Konzentrationen in den Einraumversuchen Iod-15 und Iod-20 wurden in der Gleichgewichtsphase bei geringer Iodkonzentration zu niedrig berechnet.

2.3.2 Begleitung der THAI-Iod-Mehrraumversuche zur Validierung des neuen Iod/Farbe-Modells

2.3.2.1 Iodmehrraumversuch Iod-27a

In einem Reaktorcontainment sind nahezu alle Oberflächen mit einem Dekontaminationsanstrich (Farbe) versehen. I_2 -Ablagerungsvorgänge auf Farbe laufen dabei viel schneller ab als auf Stahl. In den THAI-Versuchen Iod-27 und Iod-28 wurde die Ausbreitung von gasförmigem I_2 in einer 5-Raum-Geometrie mit Farboberflächen gemes-

sen (Abb. 2.51). Das Ziel war, den Einfluss der I_2 /Farbe-Reaktion auf den I_2 -Transport in der Mehrraumgeometrie zu untersuchen.

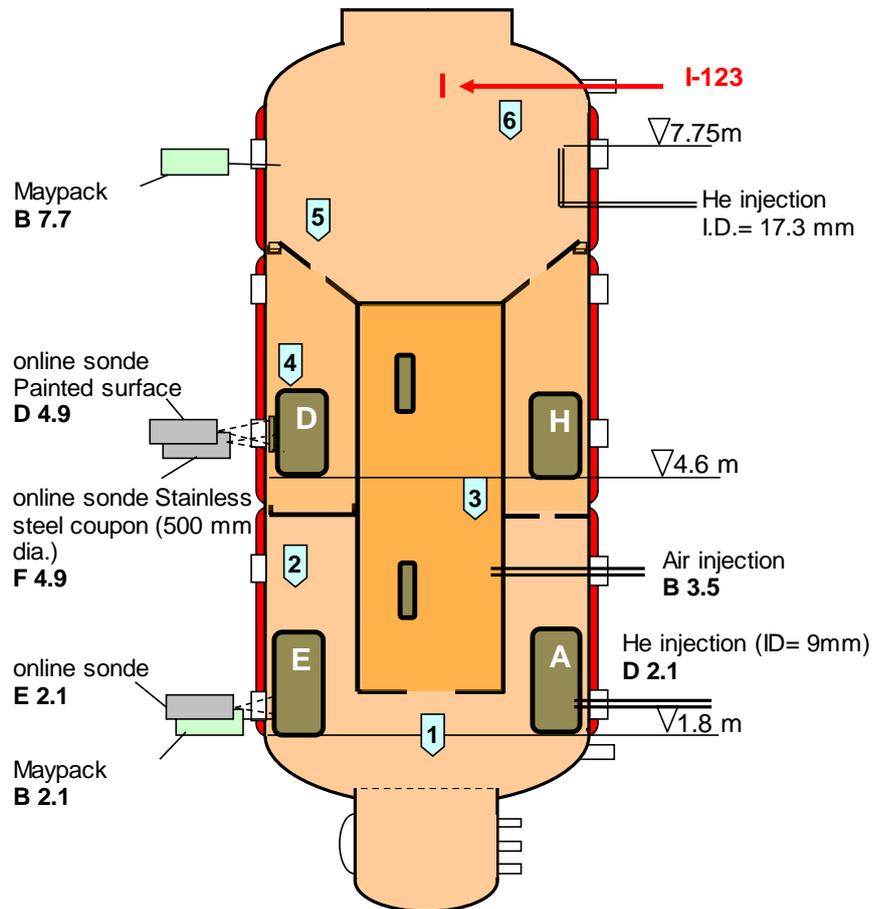


Abb. 2.51 THAI-Behälter in 5-Raum-Konfiguration mit Farbflächen (braun) für den Versuch Iod-27a /GUP 13/

In Iod-27 hatte die Behälteratmosphäre eine geringe Feuchte und im Versuch Iod-28 eine moderate bis hohe Feuchte. Für beide Versuche wurde ein deutlich ausgeprägter Mehrraum-Effekt als in den alten Iod/Stahl-Mehrraumversuchen erwartet. Die Auslegungsrechnungen zu Iod-27 und Iod-28 sind in /KLE 12/ beschrieben. Die endgültige Vorausrechnung von Iod-27 ist in /BEC 15/ wiedergegeben.

Mit COCOSYS wurden von der GRS aber auch von Becker Technologies Vorausrechnungen zu Iod-27 und Iod-28 gemacht. Ziel war die Optimierung der Größe und Verteilung der Farbflächen im THAI-Behälter und die Fahrweise der Versuche. Um den Einfluss der großen Stahloberfläche (158 m^2) gegenüber der Farbfläche (ca. 10 m^2) zu minimieren, wurde eine geringe relative Feuchte, wie in Iod-10, vorgeschlagen. In Iod-10 war der Behälter mit Raumluft gefüllt und aufgeheizt worden. Die Feuchte be-

trug in der Durchmischungsphase 7 %. Die verwendete Nodalisierung ist in Abb. 2.52 dargestellt.

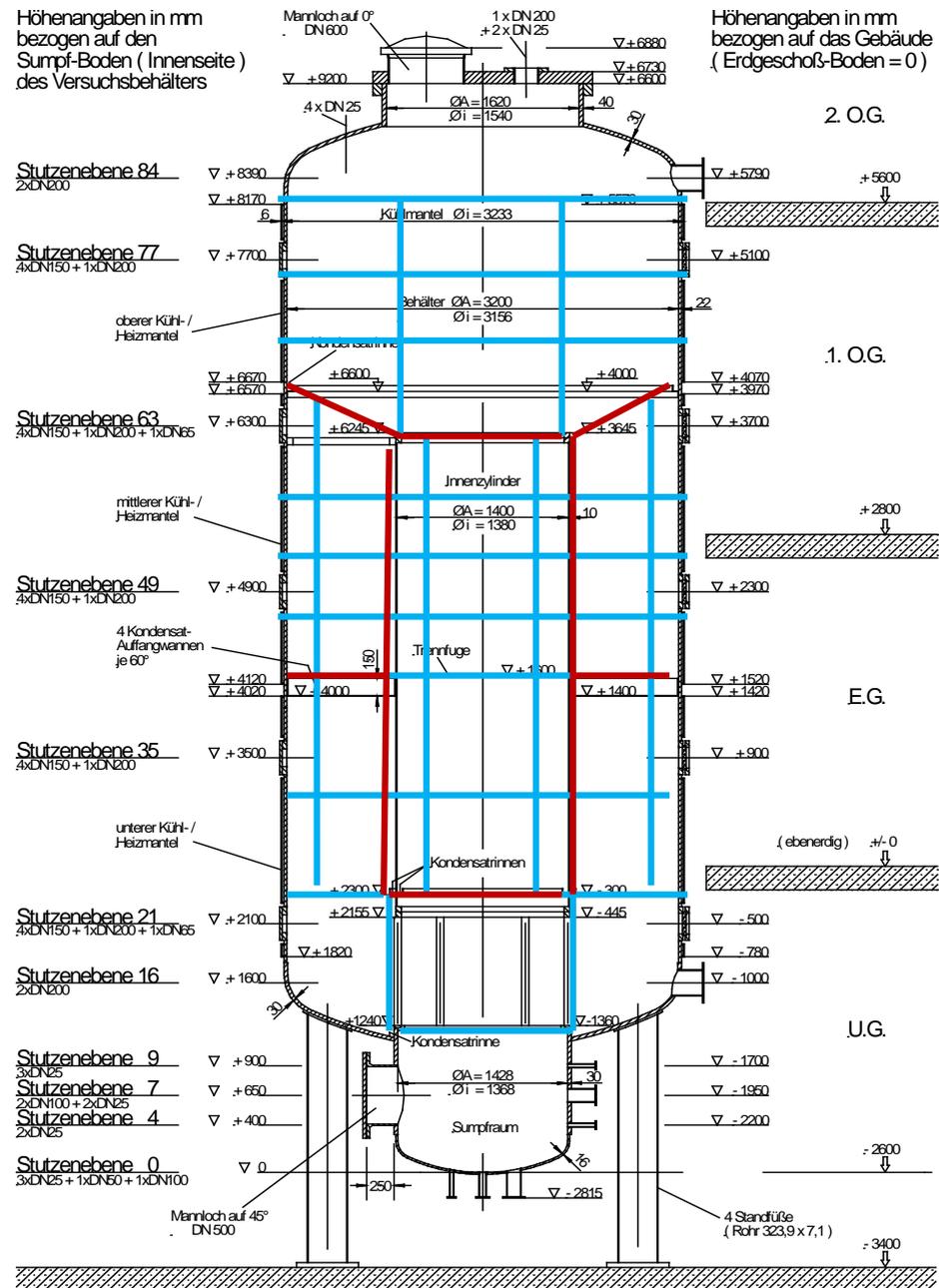


Abb. 2.52 COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Behälter mit 5-Raum-Konfiguration

Der Versuch Iod-27 wurde plangemäß in der KW 51, 2012 begonnen, musste aber wegen eines kleinen Lecks in einer Messleitung 3 Stunden nach der I₂-Einspeisung abgebrochen werden. Der Versuch wurde am 18. und 19.2.2013 als Iod-27a nach klei-

neren Korrekturen an der Fahrweise erneut durchgeführt. Behältergeometrie, Fahrweise sowie die thermohydraulischen und die Iod-Ergebnisse des Versuches sind ausführlich in /GUP 13/ beschrieben.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der COCOSYS-AIM-Vorausrechnung mit den Messergebnissen von Iod-27a verglichen.

In Abb. 2.53 sind die gemessenen und vorausgerechneten $I_2(g)$ -Konzentrationen dargestellt. Zwei wesentliche Abweichungen fallen sofort auf:

- Die zeitliche Abnahme der $I_2(g)$ -Konzentration mit der Zeit ist im Versuch deutlich geringer als vorausgerechnet, d. h. es wird weniger I_2 an Oberflächen chemisorbiert als in der Rechnung (vgl. Abb. 2.53 und Abb. 2.54).
- Im Versuch ist während der Durchmischungsphase für $t > 6,5$ h die $I_2(g)$ -Konzentration in den einzelnen Räumen fast gleich groß, d. h. I_2 ist homogen in den Räumen verteilt und es gibt keinen Mehrraumeffekt mehr. In der Vorausrechnung unterscheiden sich die $I_2(g)$ -Konzentrationen durchgehend mindestens um einen Faktor 20 (vgl. Abb. 2.53 und Abb. 2.54).

Das Hauptziel von Iod-27a, die gegenüber Iod-10 erwarteten größeren I_2 -Konzentrationsunterschiede in Gegenwart von Farboberfläche zu zeigen, konnte somit nicht erreicht werden.

Für dieses unerwartete I_2 -Ausbreitungsverhalten in Iod-27a konnten drei Gründe identifiziert werden, die die Versuchsbedingungen aber auch die Modellierung betreffen /WEB 14a/:

- Die Atmosphäre war extrem trocken ($rF < 1$ % in der durchmischten Phase). Dies führte zu einer unerwartet geringen I_2 -Ablagerung auf der Farbe.
- Der starke Einfluss der relativen Feuchte auf die I_2 /Farbe-Reaktion war nicht bekannt und war daher nicht in AIM modelliert.
- Die in einem THAI-Mehrraumversuch erstmals eingesetzte Bodenheizung verstärkte die atmosphärische Durchmischung gegenüber der in früheren Versuchen verwendeten Sumpfheizung deutlich.

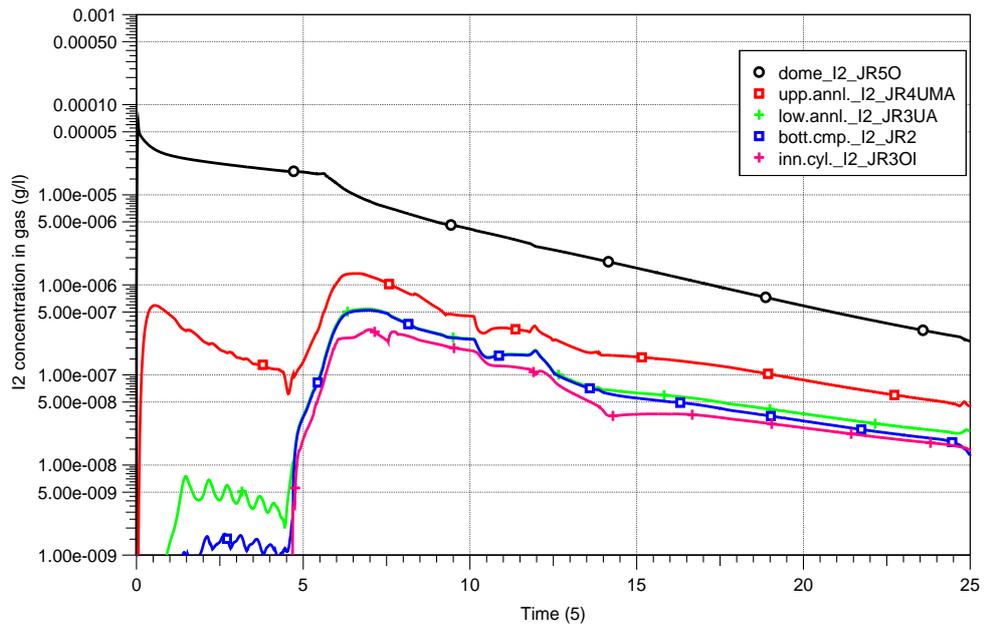


Abb. 2.53 Iod-27a, Vorausgerechnete I₂(g)-Konzentration

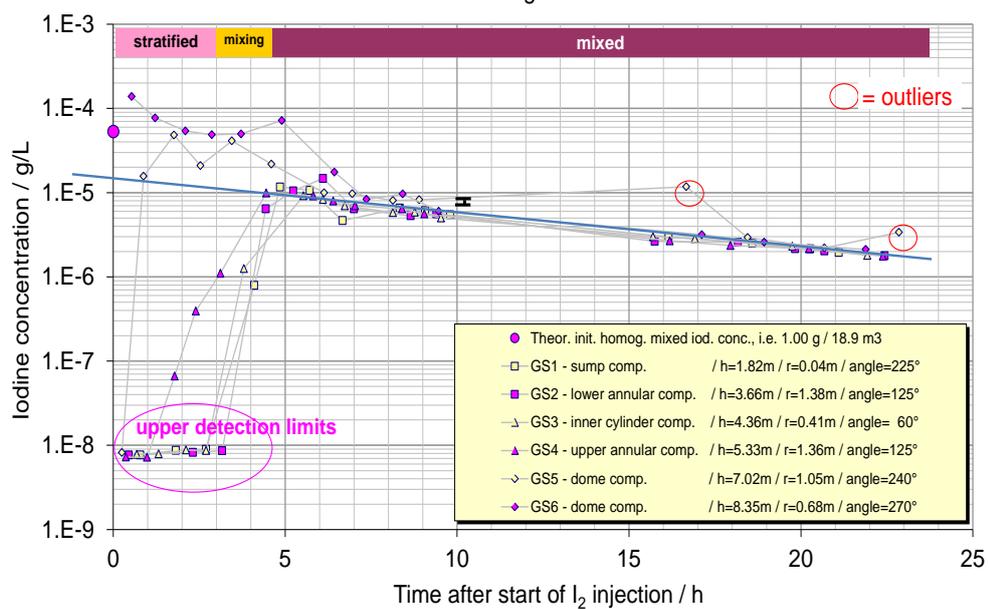


Abb. 2.54 Iod-27a, Gemessene I₂(g)-Konzentration

Dieses schlechte Simulationsergebnis und jene für Iod-28 und Iod-30 waren der entscheidende Anlass zu einer grundlegenden Überarbeitung des I₂/Farbe-Modells in AIM-3. Dazu wurde neben THAI-Versuchen auch Tests aus dem OECD BIP-Programm herangezogen. Anders als im alten Modell ist im neuen der Großteil des abgelagerten Iods auf der Farbe sofort chemisorbiert. Die Chemisorptionsrate hat bei hoher absoluter Feuchte bzw. Dampfdichte der Atmosphäre ein Maximum und geht bei geringen

Dampfdichten stark zurück. Die Physisorption von I_2 auf der Farbe spielt nur noch eine untergeordnete Rolle. Das neue Modell und die Validierungsarbeit sind in /BEC 15/ ausführlich beschrieben.

Die $I_2(g)$ -Konzentration der Nachrechnung von Iod-27a mit dem neuen Modell ist unter Berücksichtigung der Bodenheizung deutlich homogener, allerdings dauert die Durchmischung etwas länger als im Experiment. Das gilt insbesondere für den als Totraum gestalteten Innenzylinder (Rechenzone JR4OI in Abb. 2.55). Möglicherweise war der Innenzylinder im Bereich des oberen Decks nicht gasdicht abgeschlossen, was im Experiment zu der unerwartet raschen Durchmischung geführt haben könnte. Des Weiteren wird die $I_2(g)$ -Konzentration in der Spätphase leicht überschätzt.

In Abb. 2.56 ist die berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupons den Messwerten gegenübergestellt. Die Messwerte erreichen bereits nach 4 h ihre maximale Beladung, in der Rechnung findet die Ablagerung des Iods wegen der inhomogenen $I_2(g)$ -Verteilung verzögert und langsamer statt. Im Zeitbereich $t = 4 - 14$ h wird die atmosphärische Durchmischung der unteren Räume stark unterschätzt und daher die $I_2(g)$ -Konzentrationen zu niedrig berechnet. Die Diskrepanz zwischen berechneter und gemessener Iod-Beladung auf der Farbe hat somit nichts unmittelbar mit dem neuen Iod/Farbe-Modell zu tun, sondern ist eine Folge der unterschätzten I_2 -Konzentration am Ort der Coupon-Messung. Die gerechnete und die gemessene Iodbeladung der Farbflächen am Versuchsende stimmen gut überein.

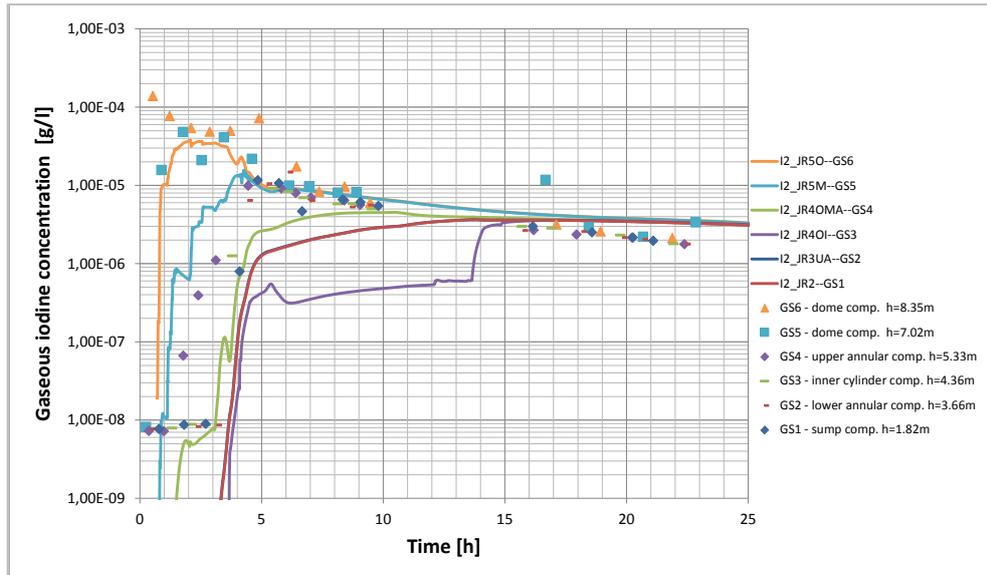


Abb. 2.55 Iod-27a, Berechnete und gemessene $I_2(g)$ -Konzentrationen. Die Rechnung wurde mit dem neuen Iod/Farbe-Modell durchgeführt

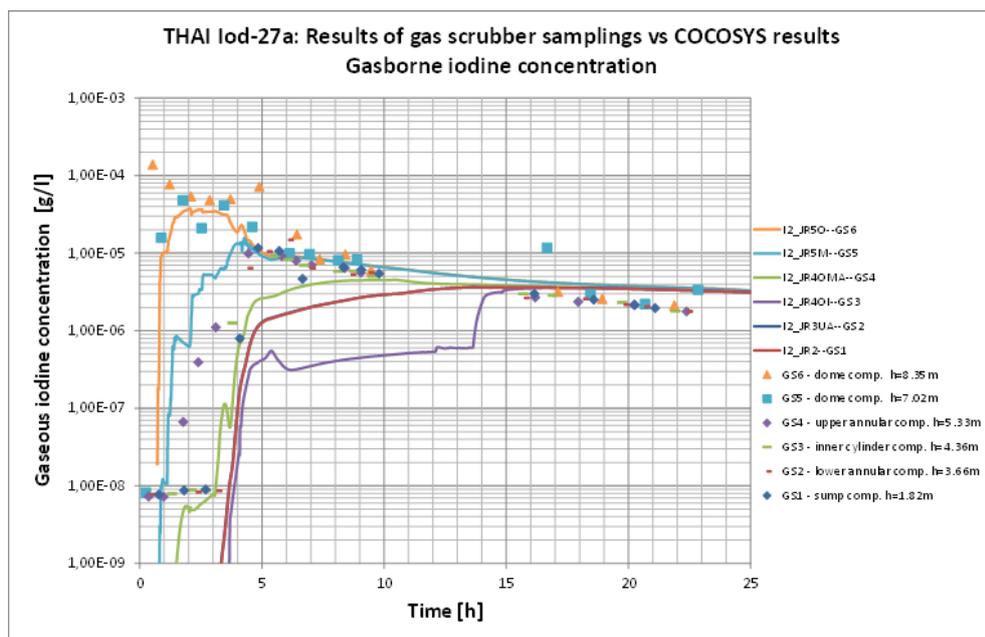


Abb. 2.56 Iod-27a, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupon im Vergleich mit den Messwerten

2.3.2.2 Iodmehrraumversuch Iod-28

Im THAI-Versuch Iod-28 wurde die Ausbreitung von gasförmigem I_2 in einer 5-Raum-Geometrie in Gegenwart von Farboberflächen gemessen. Die Konfiguration des Behäl-

ters und die Anordnung der Farbflächen ist die gleiche wie in Iod-27a (Abb. 2.51). Vorausrechnungen mit COCOSYS-AIM ließen erwarten, dass die Inhomogenität der I₂-Verteilung in diesen neuen Versuchen mit Farbflächen noch stärker als in den früheren Versuchen mit reinen Stahl-Oberflächen werden würde.

Im Versuch Iod-27a konnte allerdings der Einfluss der Farbe auf die I₂-Ausbreitung wegen der extrem trockenen Atmosphäre ($rh < 1\%$) und der Verwendung der Bodenheizung nicht gezeigt werden. Als Konsequenz daraus wurden zusammen mit den Experimentatoren von Becker Technologies und AREVA auf dem THAI-Treffen im Februar 2014 die Rahmenbedingungen für die weiteren zwei Mehrraum-Versuche mit Farbe wie folgt festgelegt.

Iod-28 wird mit möglichst hoher Feuchte aber ohne Wandkondensation gefahren. Die Fahrweise soll sich eng an die des Iod-11 halten. Die Bodenheizung wird nicht eingesetzt. Der Sumpf ist mit Wasser gefüllt und wird, wie in Iod-11, mit der Sumpfheizung beheizt.

Der „komplexe“ Versuch Iod-30 hat die gleiche Fahrweise wie Iod-28. Zusätzlich wird in der Durchmischungsphase ein Silberaerosol in einer kurzen Periode in die Kuppel eingespeist. Die Einspeisung orientiert sich an dem Iod/Ag-Aerosol-Versuch Iod-26.

2.3.2.2.1 Basisrechnung mit 10 m² Farbe

Größe und Verteilung der Farbflächen wurden in dieser Rechnung für Iod-28 gleich wie in Iod-27a angenommen (Tab. 2.8). Die Farbe ist auf 4 Farbtrommeln, von denen 2 im unteren und 2 im oberen Ringraum stehen, sowie auf 2 Farbplatten im Innenzylinder verteilt. Das Farbfläche/Volumen-Verhältnis liegt zwischen 0,2 und 0,28. Alle Farbflächen zusammen sind 10,36 m² groß, das sind ca. 8 % der gesamten Behälteroberfläche in den Räumen außer der Kuppel, der Rest ist Stahl. In der Kuppel befindet sich keine Farbe.

Bei den nur 40 cm weiten Farbtrommeln besteht die Gefahr, dass bei schwacher Konvektion und geringem Luftwechsel in der Trommel an der Innenseite der Trommel weniger I₂ als an der Außenseite abgelagert wird. Dies könnte die Interpretation der Messergebnisse erschweren. Diese Problematik wurde daher in zwei separaten Rechnungen untersucht. Für die sogenannte Basisrechnung zu Iod-28 mit 10 m² Farbe wurde

der Datensatz der Rechnung ohne Farbe mit den in Tab. 2.8 beschriebenen Farbflächen erweitert.

Tab. 2.8 Farbflächen in Iod-27a, Iod-28 und Iod-30 /GUP 13/

Position	Form	Anzahl	Dimension	Gesamte Oberfläche
Oberer Ringraum	Hohle Farbtrommel	2	H = 0,75 m, Durchmesser außen: 457,2 mm innen: 400,6 mm	4,04 m ²
Unterer Ringraum	Hohle Farbtrommel	2	H = 0,95 m, Durchmesser außen: 457,2 mm innen: 400,6 mm	5,12 m ² (innen 2,56 m ²)
Innenzylinder	Farbplatten	2	Dicke 1,5 mm; Höhe 500 mm Breite 600 mm	1,2 m ²

Den ausgeprägten Einfluss der Farbe auf die berechnete I₂(g)-Konzentrationen zeigt die Basisrechnung mit 10 m² Farbe (Abb. 2.57). Während der Farbe-Effekt in der Kuppel moderat ist (Faktor 0,5), ist die Reduktion der I₂-Konzentration durch Farbe in den unteren Räumen deutlich ausgeprägter (bis Faktor 0,06). Dieser Unterschied in den lokalen Konzentrationen sollte bei sonst gleichen Versuchsbedingungen in Iod-28 mit Farbe gegenüber Iod-11 gut messbar sein.

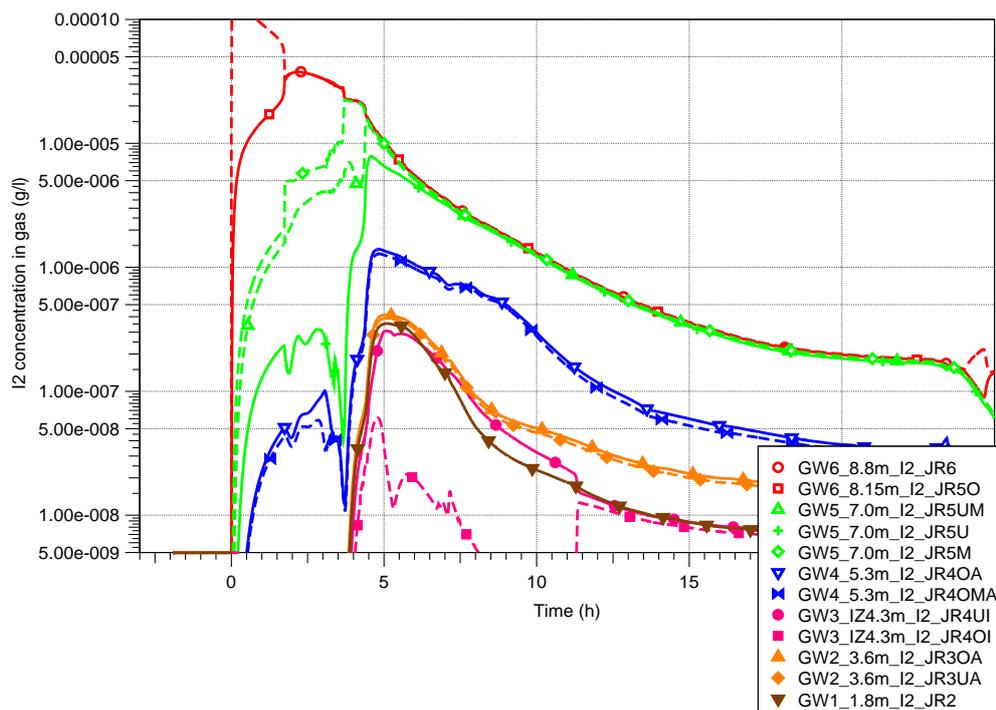


Abb. 2.57 Iod-28 Auslegung, 10 m² Farbe: Gerechnete I₂(g)-Konzentration

Wesentlich für eine starke Ablagerung von I₂ auf Farbe ist eine hinreichend hohe relative Feuchte der Behälteratmosphäre. Aus Messungen im Rahmen von OECD BIP lässt sich schließen, dass nur bei relativer Feuchte $rF > 40\%$ mit einer ausgeprägten I₂/Farbe-Reaktion zu rechnen ist. In der Rechnung zu Iod-28 fällt die relative Feuchte vorübergehend und lokal unter 20% und wird dann ähnlich wie in Iod-11 durch die vorgegebene Dampfeinspeisung wieder angehoben (Abb. 2.58). Der rF -Verlauf weicht an einigen Stellen vom gemessenen Verlauf in Iod-11 deutlich ab. Es ist aber allgemein bekannt, dass die berechnete Feuchte generell unsicher ist und sich nicht zur Spezifizierung der Dampfeinspeisung eignet. Im Prinzip können durch eine stärkere Dampfeinspeisung höhere Feuchten als in Iod-11 eingestellt werden, solange es nicht zu Kondensation an der Behälterwand kommt.

Die beiden He-Einspeisungen werden wie in Iod-27a durchgeführt. Die erste Einspeisung erfolgt vor der Iod-Einspeisung in den Dom, die zweite am Beginn der Durchmischungsphase in den Sumpfraum. Etwa 3,5 h nach der zweiten Einspeisung ist das He im ganzen Behälter mit Ausnahme des Innenzylinders gut durchmischt. Da das Leichtgas He die Naturkonvektion verstärkt, sind die atmosphärischen Strömungsgeschwindigkeiten nicht repräsentativ für den Rest der durchmischten Phase. Während und kurz nach der He-Einspeisung ($t = 3$ bis 7,1 h) sind die atmosphärischen Strömungsge-

schwindigkeiten deutlich höher als danach. Diese und andere Einzelheiten der Basisrechnung und weiterer Auslegungsrechnungen sind in /WEB 14a/ beschrieben.

Moderate Strömungsgeschwindigkeiten in der durchmischten Phase sind eine notwendige Voraussetzung für eine langanhaltende inhomogene $I_2(g)$ -Verteilung im Behälter. Die allgemeinen Zusammenhänge zwischen der atmosphärischen Geschwindigkeit, der Iod-Ablagerung auf Stahl und Farbe und der resultierenden $I_2(g)$ -Verteilung wurden anhand eines einfachen 2-Raum-Modells zusätzlich untersucht /WEB 14a/.

Die Gasgeschwindigkeiten durch die Öffnungen des unteren Decks sind maßgeblich für den Luftwechsel im Inneren der beiden Farbtrommeln, die im oberen Ringraum über den Öffnungen platziert sind. Die Geschwindigkeiten sind in der Regel $> 0,05$ m/s und sorgen für einen ausreichend hohen Luftwechsel in der Trommel. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Innenseiten der oberen Farbtrommeln für die I_2 -Ablagerung für den ganzen Versuch uneingeschränkt wirksam sind (Abb. 2.59).

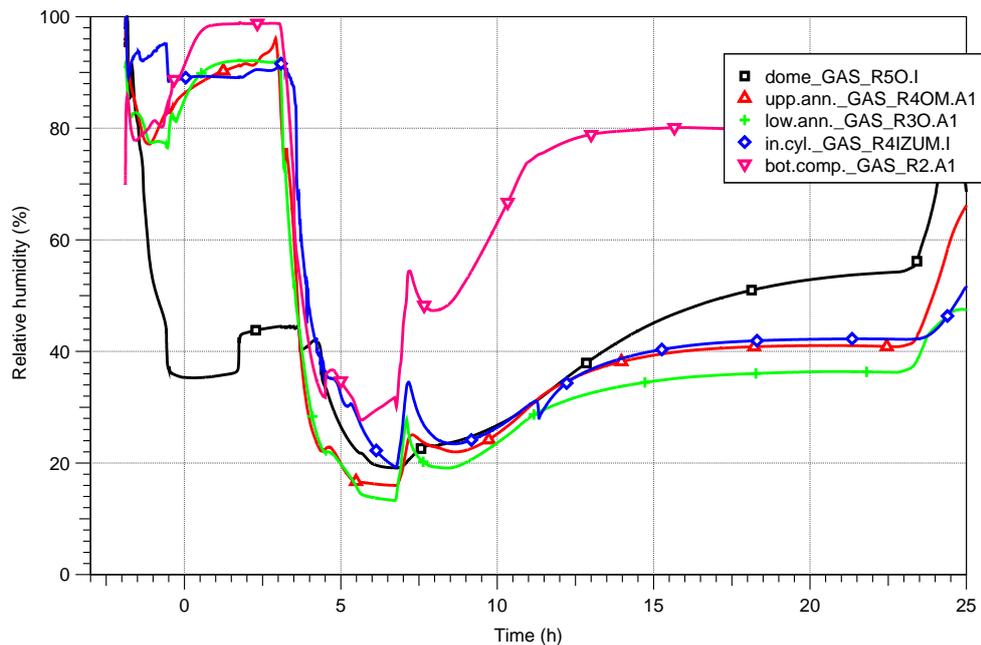


Abb. 2.58 Iod-28 Auslegung, 10 m^2 Farbe: Gerechnete relative Feuchte

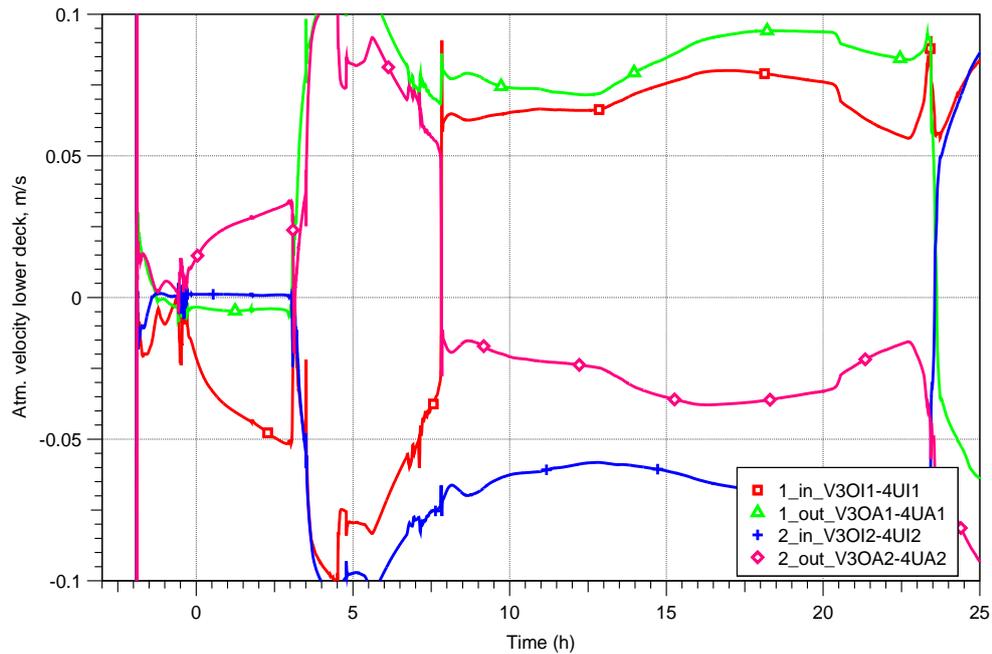


Abb. 2.59 Iod-28 Auslegung, 10 m² Farbe: Gerechnete atmosphärische Strömungsgeschwindigkeit durch das untere Deck

Schwieriger ist die Situation an den Trommeln im unteren Ringraum, wo die Gasgeschwindigkeiten wesentlich geringer sind. Darauf wird in einer detaillierten Rechnung nachfolgend näher eingegangen.

2.3.2.2.2 Detaillierte Rechnung

Um das Ausmaß der Iodablagerung auf den innenliegenden Farbflächen der Trommeln im unteren Ringraum zu untersuchen, wurde eine detaillierte Rechnung durchgeführt. Die beiden unteren Trommeln wurden als eigene Rechenzone abgebildet und strömungstechnisch an die umliegenden Zonen gekoppelt. Dabei wurde auch Gegenströmung in der Trommel zugelassen (Abb. 2.60).

Die berechnete Konvektionsgeschwindigkeit durch die Trommel ist niedrig und liegt teilweise unter 2,5 cm/s (Abb. 2.61). Der Luftwechsel in der Trommel ist daher nicht stark genug um abgelagertes I₂ in der Atmosphäre schnell auszugleichen. Die Konzentration des abgelagerten Iods ist auf der Innenseite der Trommeln daher um einen Faktor 0,33 bis 0,38 niedriger als auf der Außenseite. Die entsprechende „effektive“ Farbfläche verringert sich daher auf insgesamt 7,8 m². Damit wurde die COCOSYS-AIM-Rechnung wiederholt. Etwas überraschend sind die Ergebnisse dieser Rechnung mit 7,8 m² Farbfläche jener mit 10 m² Farbe sehr ähnlich. Nur im unteren Ringraum ist

die $I_2(g)$ -Konzentration in der Rechnung mit der modellierten Farbtrommel um einen Faktor 1,5 höher. Die schlechte „Belüftung“ der unteren Farbzylinder dürfte daher keinen großen Einfluss auf den Mehrraumeffekt der I_2 -Ausbreitung haben.

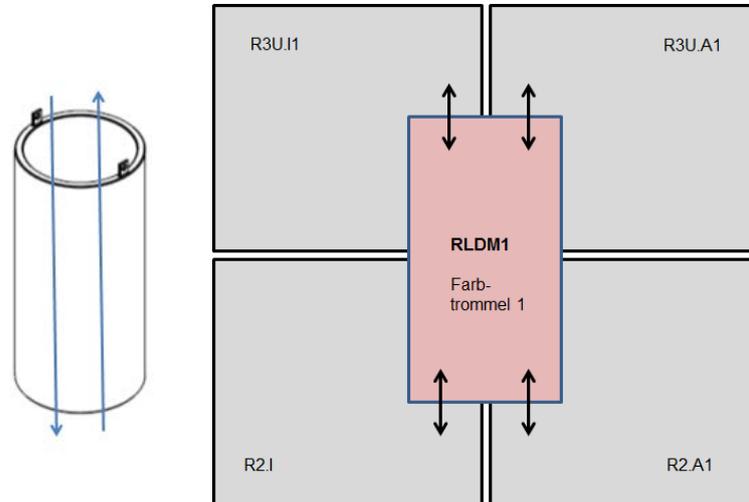


Abb. 2.60 Nodalisierung des unteren Ringraums mit Farbtrommel 1 (schematisch)

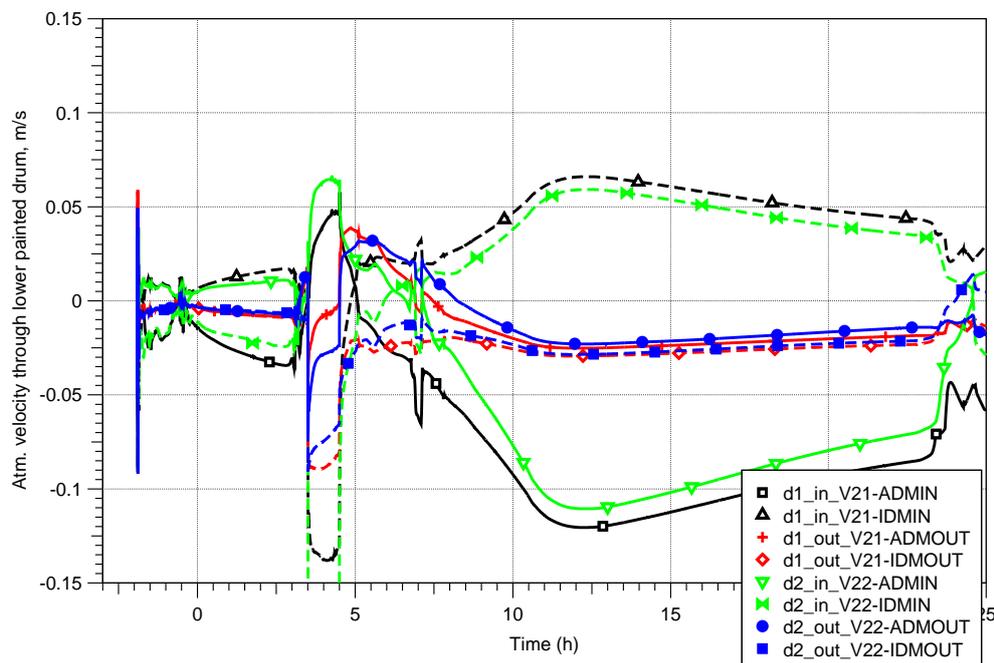


Abb. 2.61 Iod-28 Auslegung, untere Farbtrommeln modelliert: Gerechnete atmosphärische Geschwindigkeit durch die Trommeln

Im Juni 2014 wurde Iod-28 gefahren. Der Vergleich der Messwerte zeigte, dass die Auslegung der thermohydraulischen Fahrweise jener des Iod-11 sehr ähnlich ist. Die

Reproduktion der Verhältnisse des 10 Jahre alten Iod-11 ist gut gelungen. Kleinere Abweichungen betreffen die etwas geringere Feuchte in Iod-28 (40 bis 50 % in der durchmischten Phase) und die etwas stärkere atmosphärische Durchmischung der unteren Räume. Diese Abweichungen haben aber keine wesentlichen Auswirkungen auf das experimentelle Ergebnis, das dadurch gekennzeichnet ist, dass praktisch kein Einfluss der Farbflächen auf das I_2 -Ausbreitungsverhalten in der Mehrraumgeometrie zu erkennen ist. Die I_2 -Ablagerung auf der Farbe ist deutlich geringer als erwartet. Neben den unzureichenden Rechenergebnissen für Iod-27a und Iod-30 war dies der entscheidende Anstoß zu dem radikalen Umbau des I_2 /Farbe-Modells im Iodmodell AIM-3 /BEC 15/. Weiter hatte die gemessene Passivierung des THAI-Behälterstahls einen Einfluss auf das Ausbreitungsverhalten von I_2 in den Mehrraumversuchen.

2.3.2.2.3 Passivierung des Behälterstahls

Neben dem unzureichenden Iod/Stahl-Modell trägt auch die in den letzten zehn Jahren (seit Iod-11 etc.) zugenommene Passivierung des THAI-Behälterstahls zu der Diskrepanz zwischen Vorausrechnung und Messergebnis für Iod-28 bei. Unter Passivierung wird die Entstehung einer Schutzschicht auf dem Stahl verstanden, welche die Physisorption und die Chemisorption von molekularem Iod (I_2) verlangsamt. Durch die Passivierung wird das Gleichgewicht zwischen gasförmigem $I_2(g)$ und dem am Stahl physisorbierten I_2 zu größeren $I_2(g)$ -Konzentrationen hin verschoben. Die Gründe für die Iod-Passivierung des THAI-Stahls sind nicht genau bekannt, hängen aber möglicherweise mit Reinigungsarbeiten zusammen.

Erstmals wurde die Passivierung von THAI-Stahl im Rahmen des OECD BIP-Projekts gemessen. Im Versuch G-1 wurde auf zwei 316Ti-Stahlcoupons ein deutlich unterschiedliches I_2 -Adsorptionsverhalten festgestellt. Die geringere Beladung wurde als Folge einer Oberflächenpassivierung interpretiert /GLO 10/.

Die teilweise Passivierung der Stahloberfläche hat auf die räumliche Verteilung des I_2 zwei wesentliche Auswirkungen:

- Der Abbau des $I_2(g)$ im Behälter verlangsamt sich, da die am Stahl abgelagerte und chemisorbierte Iod-Menge geringer wird.
- Die $I_2(g)$ -Konzentrationsunterschiede (Mehrraum-Effekt) zwischen den Räumen werden kleiner. Die Behälteratmosphäre scheint besser durchmischt. Tatsächlich

wird dieser Effekt durch die reduzierte I_2 -Physisorption (Speicherung) am Stahl hervorgerufen.

Die Nachrechnung des Iod-28 mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und unter Berücksichtigung der Passivierung zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten (Abb. 2.62). Allerdings liegen die berechneten $I_2(g)$ -Konzentrationen zwischen $t = 6 - 10$ h einen Faktor 2 – 3 unterhalb und ab $t > 17$ h den gleichen Faktor oberhalb der Messwerte. Die Abweichungen sind im Wesentlichen auf Ungenauigkeiten in der thermohydraulischen Rechnung (Feuchte, Strömungen etc.) und das noch nicht exakt angepasste neue Iod/Stahl-Modell zurückzuführen.

Der lokale Iodabbau insbesondere in den Kuppel-Räumen wird in sehr guter Übereinstimmung mit den Messwerten gerechnet. Der I_2 -Abbau in den Räumen unterhalb der Kuppel ist in der Rechnung etwas zu groß und die I_2 -Konzentrationen werden unterschätzt. Bereits zu Beginn der Durchmischungsphase sind die $I_2(g)$ -Konzentrationen in den unteren Räumen höher als die gemessenen Werte, d. h. in der Zeit $t = 6 - 10$ h ist die Durchmischung stärker als gerechnet. Der temporär stärkere Abbau von $I_2(g)$ in der Rechnung zwischen $t = 10 - 15$ h ist auf die Zunahme der absoluten Feuchte nach der Dampfeinspeisung zurückzuführen (Abb. 2.63).

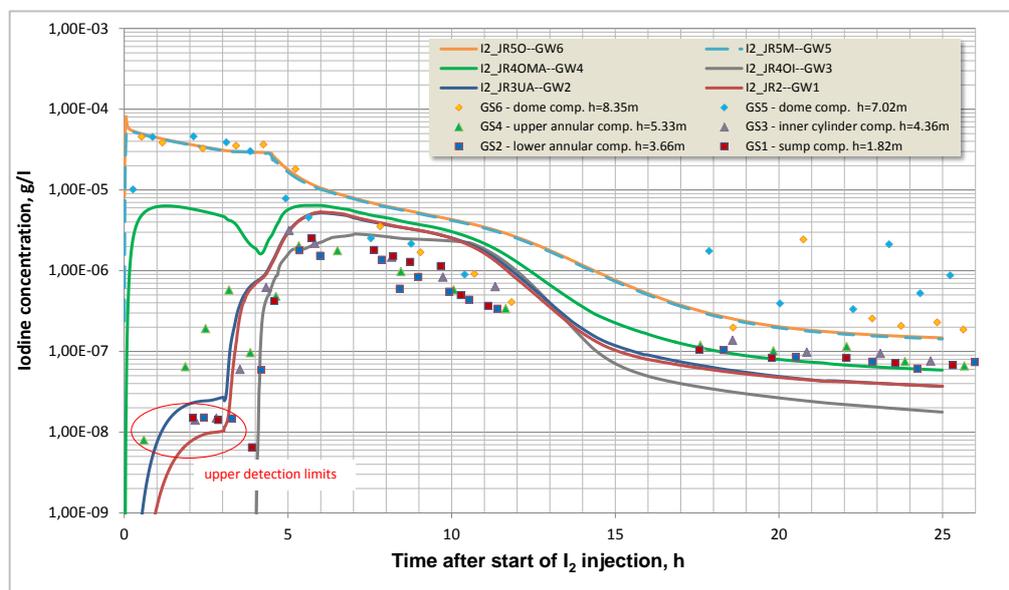


Abb. 2.62 Iod-28, I_2 -Konzentration in der Gasphase; Vergleich der Ergebnisse der AIM-3-Rechnung mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und Berücksichtigung der Stahl-Passivierung mit Messergebnissen

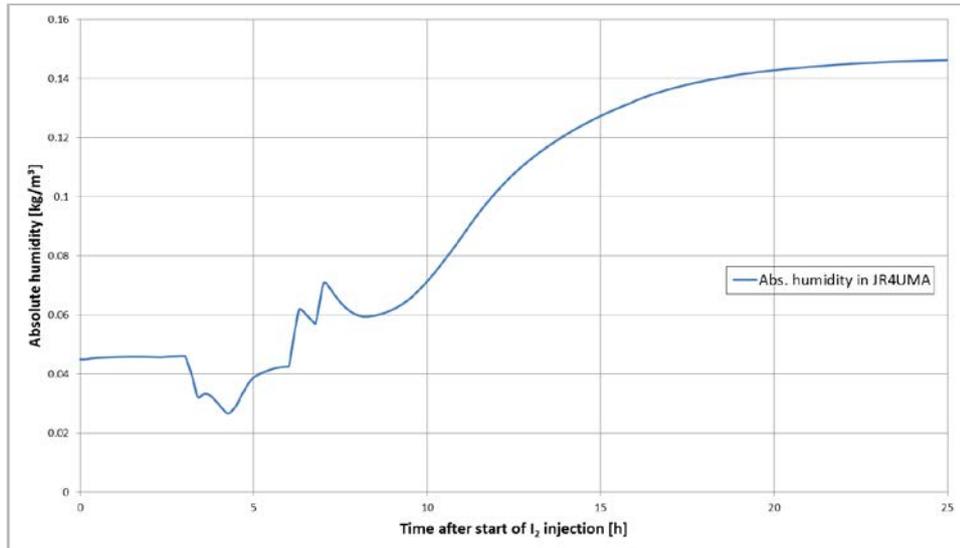


Abb. 2.63 Iod-28, berechnete absolute Feuchte im Ringraum H = 4,9 m

Die gemessene Iodbelastung auf den beiden Farbe-Coupons wird bis zu einem Faktor 7 überschätzt (Abb. 2.64). Der Hauptgrund dafür ist die zu hoch berechnete I₂(g)-Konzentration im Zeitbereich t = 6 – 10 h. In einer Rechnung, die hier nicht weiter beschrieben wird, wurde nur die I₂(g)-Konzentration um den Faktor 3 reduziert. Dabei verringerte sich die Diskrepanz auf einen Faktor 2,2 (für H = 4,9 m im Behälter) bzw. einen Faktor 3,4 (für H = 2,1 m).

Weitere mögliche Gründe für die Überschätzung der Iodbelastung sind: (1) lokale Effekte, insbesondere eine inhomogene Passivierung des Behälterstahls, (2) eine unzureichende Belüftung des Luftspalts zwischen Farb-Coupon und Fenster und dadurch reduzierte Iodbelastung am Coupon. Ein Erreichen der Aufnahmekapazität der Farbe für chemisorbiertes Iod (Parameter MAX_ICHS im neuen Modell) ist dagegen wenig wahrscheinlich, da dann MAX_ICHS um den extrem kleinen Wert von 4,0E-5 mol/m² liegen müsste.

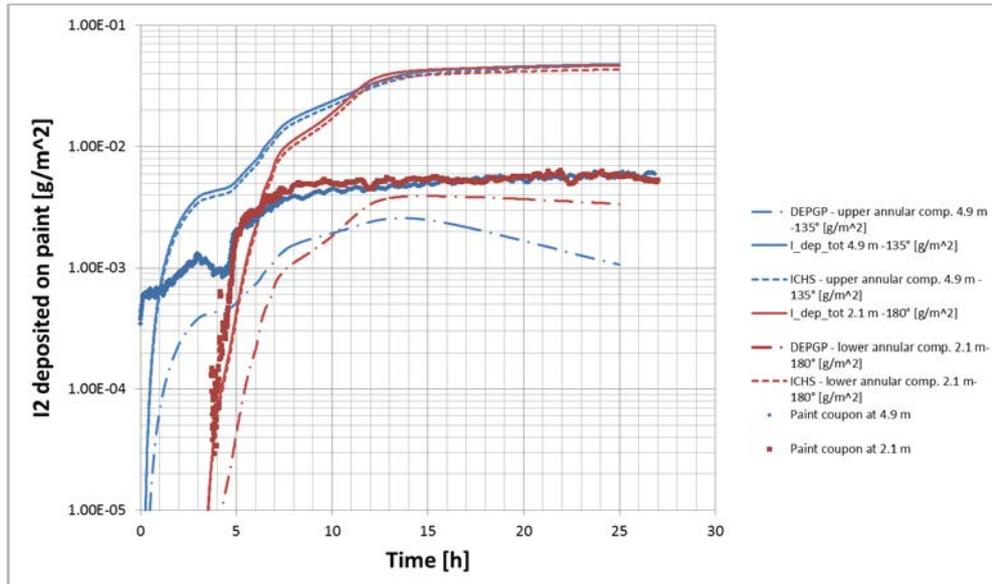


Abb. 2.64 Iod-28, berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupon im Vergleich mit den Messwerten

Insgesamt können die Messergebnisse des Iod-28 mit dem neuen I₂/Farbe-Modell und unter Berücksichtigung der Passivierung des Behälterstahls gut nachgerechnet werden. Der mäßige, aber durchaus vorhandene Einfluss der Farbflächen auf den Mehrraumeffekt der I₂-Verteilung wurde durch die Passivierung weitgehend kompensiert. Auch waren die relative Feuchte mit 40 – 60 % in den relevanten Versuchsphasen und Räumen und damit die I₂-Chemisorption auf Farbe nicht sehr hoch. Aus diesen Gründen konnte die bisher erwartete Zunahme des Mehrraumeffekts gegenüber den Mehrraumversuchen mit reiner Stahloberfläche nicht beobachtet werden. Dies bedeutet aber nicht, dass in einem Reaktorcontainment, welches im Wesentlichen nur Farbflächen enthält, keine Mehrraumeffekte bei der I₂-Ausbreitung eintreten können.

2.3.2.3 Mehrraumversuch Iod-30 mit Silberaerosol

Im THAI-Mehrraumversuch mit Farbe, Iod-28, war wie schon in Iod-27a zu wenig Iod auf den Farbflächen abgeschieden worden, obwohl die Feuchte in der Atmosphäre jetzt deutlich höher war. Die genauen Gründe für die schwache I₂/Farbe-Reaktion sind nicht bekannt. Nach Diskussion mit den Experimentatoren schienen zwei Varianten am wahrscheinlichsten:

- Vergiftung der Farbflächen durch Helium. Helium wurde als Tracer und zur Unterstützung der Konvektion bisher in allen Iod-Mehrraumversuchen eingesetzt.

- Die I₂-Chemisorption auf Farbe wird vor allem bei geringer Atmosphärenfeuchte von AIM überschätzt.

2.3.2.3.1 Auslegungsrechnung

Um in Iod-30 nach Möglichkeit eine bessere I₂/Farbe-Reaktion als in Iod-28 zu erreichen und zusätzlich Informationen über die I₂/Farbe-Reaktion zu erhalten, wurden zusammen mit den Experimentatoren die folgenden Maßnahmen beschlossen:

- **Keine Helium-Einspeisung.** Dies gilt sowohl für die kurze Einspeisung von Helium in die Kuppel als auch für die spätere, starke He-Einspeisung in den unteren Ringraum (in Iod-27a: 1 Nm³ bzw. ca. 12 Nm³).
- **Verlegen des Farbcoupons** von 2,1 m (unterer Ringraum) auf 7,7 m (Kuppel). I₂ wird in die Kuppel eingespeist und seine I₂-Konzentration ist dort während des ganzen Versuchs am höchsten. Außer in der 3 Stunden langen, geschichteten Phase ist die Kuppel mit dem Rest des Behälters atmosphärisch gut durchmischt.
- **Freisetzung von 30 g Silber-Aerosol** bei t = 7,5 h innerhalb von 2 min in den oberen Teil der Kuppel (8,4 m; wie I₂-Einspeisung).

Das Konzentrationsverhältnis zwischen Silber und I₂ sollte aus Gründen der Übertragbarkeit auf den Reaktorfall um 300 liegen. Tab. 2.9 zeigt das Verhältnis für die Bedingungen im THAI-Behälter.

Tab. 2.9 Konzentrationsverhältnis Ag/I₂ in Kuppel bei einer Ag-Aerosolfreisetzung von 30 g

Parameter	Wert
Maximale Ag-Konzentration in der Kuppel, g/m ³	1 g/m ³
I ₂ -Konzentration in der Kuppel, g/m ³	4E-3 g/m ³
Konzentrations-Verhältnis Ag/I ₂	250

Insgesamt verstärkt das Weglassen der He-Einspeisung die I₂(g)-Konzentrationsunterschiede etwas, vor allem zu Beginn der durchmischten Versuchsphase. Abb. 2.65 zeigt die I₂(g)-Verteilung im Behälter bei optimaler I₂/Farbe-Reaktion und I₂/Ag-Aerosol-Reaktion /WEB 14b/, /WEB 14c/. In der Kuppel nimmt die Konzentration vergleichswei-

se wenig ab, da dort außer einem Farbcoupon keine größeren Farbflächen installiert sind. Auch wird auf Stahl physisorbiertes I_2 teilweise resuspendiert.

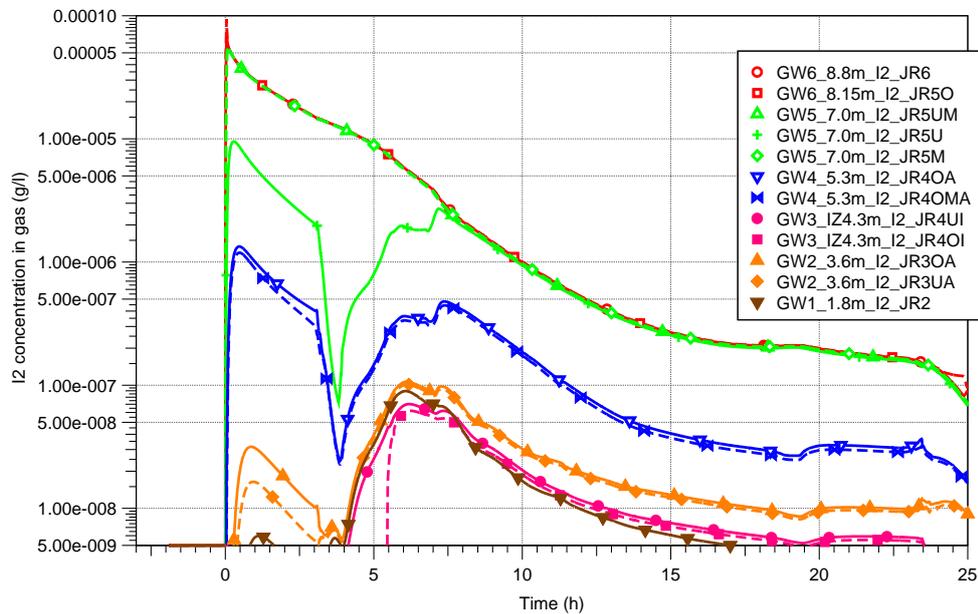


Abb. 2.65 Iod-30 Auslegung, $I_2(g)$; keine He-Einspeisung, Einspeisung Ag-Aerosol bei $t = 7,5$ h

Abb. 2.66 zeigt die vorausgerechnete Iodbeladung auf dem Farbcoupon und der Stahlwand in der Kuppel und im oberen Ringraum. Ohne Ag-Aerosol ist die Iodbeladung auf Farbe etwa 100-mal so groß wie auf Stahl. Da die I_2 -Einspeisung in die Kuppel erfolgt, ist die Beladung der Farb- und Stahlflächen dort auch etwa 100-mal größer als auf den entsprechenden Flächen im unteren Ringraum. Die Beladung des Farbcoupons im unteren Ringraum auf $H = 4,9$ m wird etwas unterschätzt (vgl. Abb. 2.69).

Abb. 2.67 zeigt die Verteilung des eingespeisten Ag-Aerosols. Für etwa $2 \frac{1}{2}$ Stunden ist die Konzentration in der Kuppel deutlich höher als in den unteren Räumen. Erst danach gleichen sich die Konzentrationen an. Als Abscheideprozess wurde nur Sedimentation gerechnet.

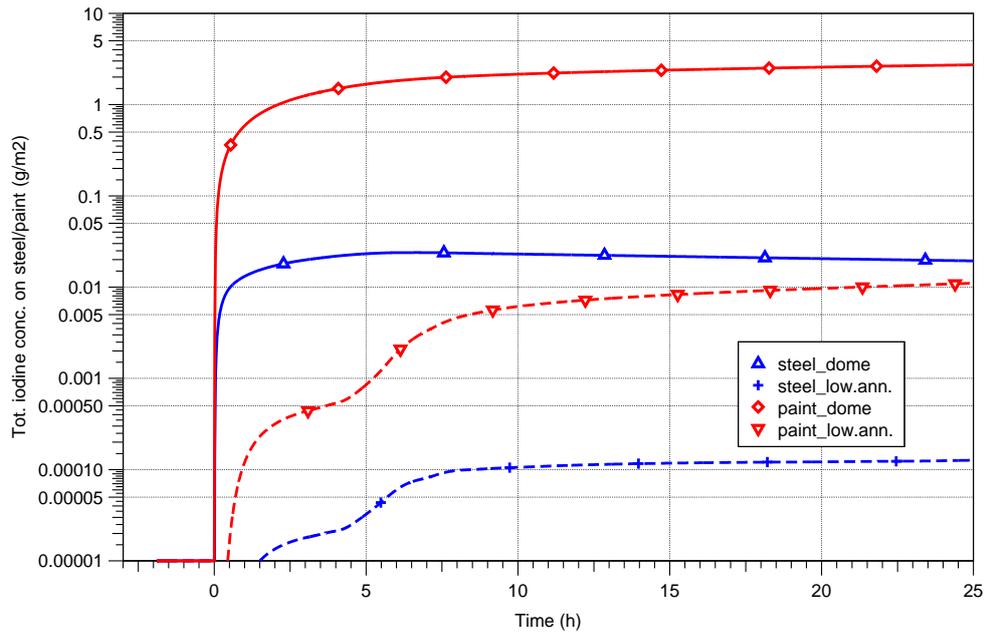


Abb. 2.66 Iod-30 Auslegung, Iodbelastung mit Farbe und Stahl in der Kuppel und im unteren Ringraum; paint_dome = Farbcoupon in der Kuppel

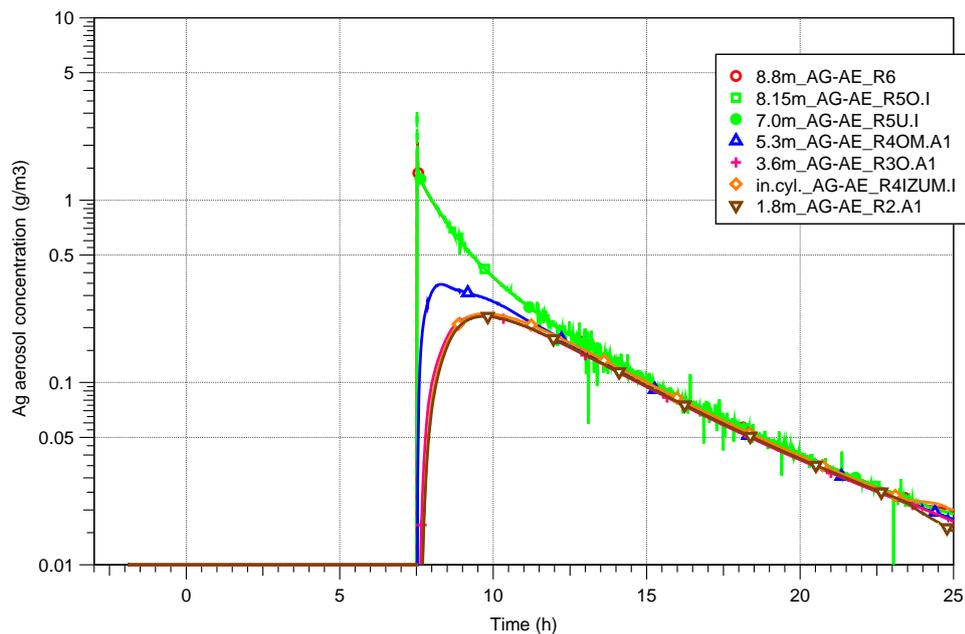


Abb. 2.67 Iod-30 Auslegung, Silber-Aerosolkonzentration

Die I_2/Ag -Aerosol-Reaktion wurde hier nicht im Detail gerechnet, da in COCOSYS-AIM derzeit ein entsprechendes Modell nicht zur Verfügung steht. Sie wurde nur pauschal berücksichtigt, indem die gesamte Oberfläche aller Ag-Partikel zeitlich variabel vorgegeben wurde. Mit der Aerosoleinspeisung geht die $I_2(g)$ -Konzentration rasch zurück.

Das auf der Partikeloberfläche gebildete AgI wird gemeinsam mit dem Aerosol abgebaut.

Im eigentlichen Versuch Iod-30 wurde die Einspeisung von Ag-Aerosol auf $t = 10$ h nach hinten gelegt. Die anderen Änderungen gegenüber Iod-28, also ohne Helium-Einspeisung und Verlegen des Farbcoupons von 2,1 m (unterer Ringraum) auf 7,7 m (Kuppel), blieben wie geplant /FUN 15/.

2.3.2.3.2 Nachrechnung

Iod-30 wurde mit COCOSYS-AIM unter Verwendung des neuen Iod/Farbe-Modells nachgerechnet /BEC 15/. Die Passivierung des Behälterstahls wurde durch eine Erhöhung der I_2 -Desorptionsrate von Stahl um den Faktor 7 berücksichtigt. In Abb. 2.68 sind die gerechneten und gemessenen $I_2(g)$ -Konzentrationen wiedergegeben. Deutlich erkennt man die Zunahme des Iod-Abbaus durch das eingespeiste Ag-Aerosol ab $t = 10$ h. Ab diesem Zeitpunkt ist das Iod im Behälter vorwiegend aerosolgebunden. Nachdem sich die grobe Fraktion des Aerosols abgesetzt hat, sind nur noch kleine Partikel luftgetragen, die langsam sedimentieren. Dies ist der Grund dafür, dass das aerosolgebundene Iod ab $t > 16$ h nur noch langsam abgebaut wird.

Die gemessene $I_2(g)$ -Konzentration in der Kuppel hat einige Ausreißer, die jeweils um einen Faktor von ca. 10 höher als der allgemeine Verlauf liegen (Abb. 2.68). Der Grund für diese Messausreißer ist bislang nicht bekannt. Die Silberpartikel breiten sich mit Atmosphärenströmung im Behälter aus. Eine starke Iod/Silber-Reaktion findet in Räumen mit hoher Ag-Konzentration und I_2 -Konzentration statt. Mit COCOSYS wird die Reaktion bisher nicht gekoppelt gerechnet, sondern das Ag-Aerosolverhalten wird vorausgerechnet und die relevanten Parameter (Oberfläche der Silberpartikel) werden der Iodrechnung übergeben. Dies könnte eine mögliche Fehlerquelle in der Berechnung der I_2 -Konzentration in der Atmosphäre sein und die etwas zu starke Abnahme der $I_2(g)$ -Konzentration bei $t > 12$ h erklären. In der zukünftigen COCOSYS-Version mit dem umstrukturierten AFP-Modul wird es möglich sein, die Reaktion von Iod mit Silber direkt zu berechnen.

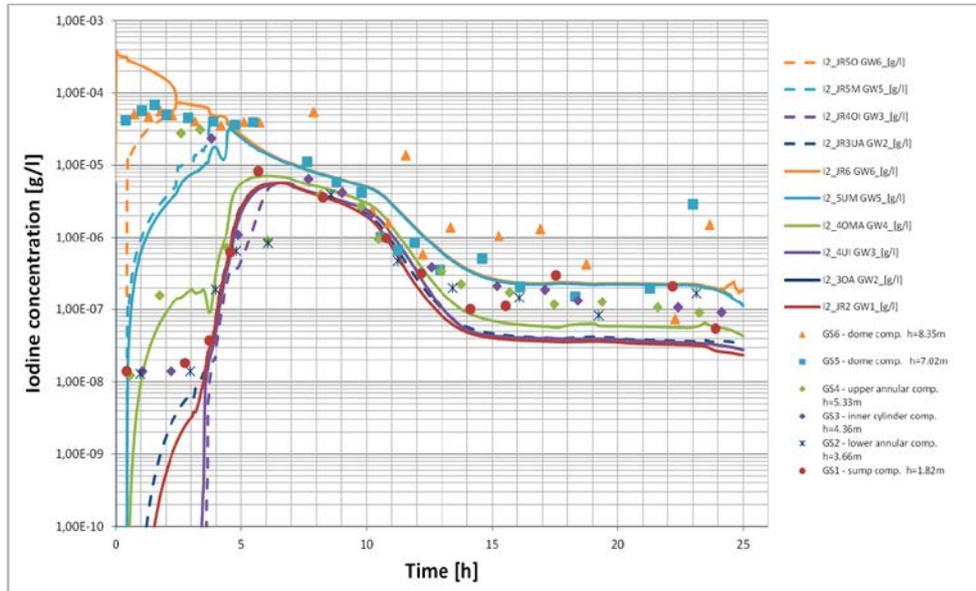


Abb. 2.68 Iod-30, gemessene und nachgerechnete I₂-Konzentration in der Gasphase

In Abb. 2.69 sind die berechnete und gemessene Iodablagerung gegenübergestellt. Die berechnete Ablagerung wird zum Ende der Rechnung um einen Faktor 2,5 überschätzt.

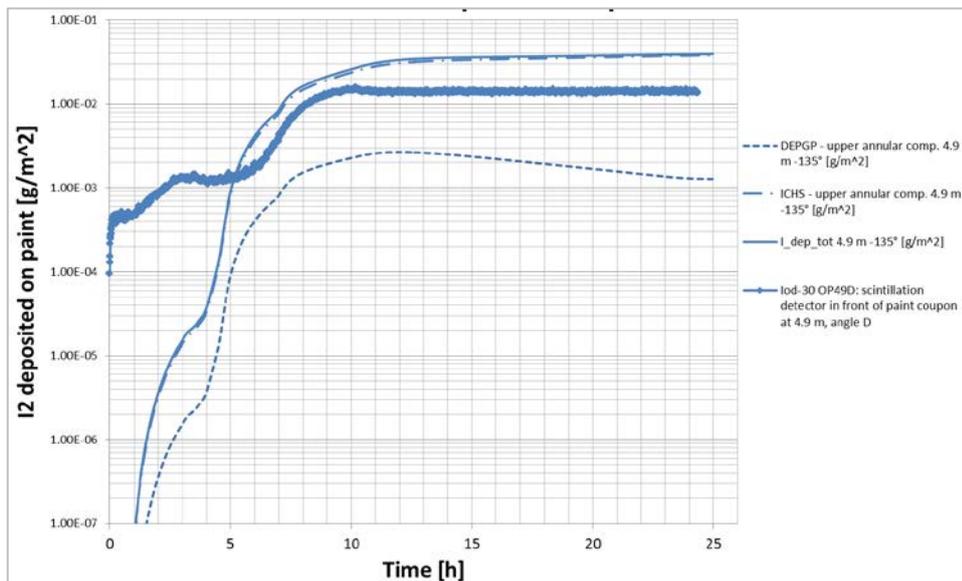


Abb. 2.69 Iod-30, Berechnete Iodablagerung auf dem Farbcoupon im Vergleich mit dem experimentell gemessenen Ergebnis bei H = 4,9 m

Mit dem neuen Iod/Farbe-Modell konnte die Ausbreitung des luftgetragenen Iods in der Mehrraumgeometrie gut nachgerechnet werden. Die Reaktion von I₂ mit den Ag-

Partikeln wurde mit einem alleinstehenden Modell gerechnet. Dieses muss noch in COCOSYS-AIM integriert werden. Wegen der vergleichsweise schwachen I_2 /Farbe-Reaktion und der Passivierung des Behälterstahls ist der Mehrraumeffekt auf die I_2 -Ausbreitung (Konzentrationsunterschiede) gering. Er nimmt nur in der durchmischten Phase ab $t > 15$ h während des langsamen Abbaus der kleinen Silberpartikel etwas zu. Der Grund dafür ist das kleinere O/V-Verhältnis in den unteren Räumen und die etwas höhere Abscheidung der Ag-Partikel als in der Kuppel.

Im Reaktorfall sind deutlich größere Ag-Partikel ($MMD = 2 - 3 \mu m$) als in Iod-30 ($MMD = 0,7 \mu m$) zu erwarten. Der Abbau des aerosolgebundenen Iods würde daher schneller als in Iod-30 gemessen erfolgen.

2.3.3 Begleitung der THAI-Versuche zum Aerosolabwaschen sowie zur Iod/Silber-Reaktion im Sumpf

Im dritten THAI-Abwaschversuch AW-3 wurden zwei Aufgabenstellungen untersucht: (1) das Abwaschen von abgelagertem Ag-Aerosol in einen Sumpf und (2) die Reaktion der Ag-Partikel mit gelöstem I_2 im Sumpf. Aus praktischen Gründen wurden die beiden Themen in zwei getrennten Versuchsteilen gemessen.

Teil 1 von AW-3, das Abwaschen des unlöslichen Ag-Aerosol durch Rivulets von Wänden und dem Boden des Behälters in den Sumpf, kann mit COCOSYS derzeit nicht mit der erforderlichen Genauigkeit gerechnet werden. Das Erosionsmodell AULA wurde vor kurzem in die neue COCOSYS-Version 3.0 mit umstrukturiertem AFP-Modul integriert. Hierzu wurden erste Validierungsrechnungen zu den Laborversuchen AW-3 LAB durchgeführt (Kap. 2.3.4.1). Die analytischen Arbeiten zu AW-3 beschränken sich daher hier auf den Teil 2, in dem die I_2 /Ag-Reaktion im Sumpf bei unterschiedlicher Ag-Partikel-Verteilung gemessen wurde.

Im Reaktorfall sind die I_2 /Ag-Reaktion und die I-/AgOx-Reaktion im Sumpf wesentliche Senken für flüchtiges Iod. Sie können auch den potentiellen Iod-Quellterm aus der Anlage entscheidend reduzieren. Voraussetzung ist, dass genügend viel des auf den Containmentoberflächen abgelagerten Ag-Aerosols in den Sumpf abgewaschen wird. Solange die Ag-Partikel dort im Schwebезustand (suspendiert) sind, reagieren sie mit dem gelösten Iod schnell zu unlöslichem AgI, das sich als Film auf den Partikeln bildet. Zwei Reaktionen sind möglich.



In AW-3 wurde die I-/AgO_x-Reaktion aus Gründen der Übersichtlichkeit des Versuches praktisch ausgeschaltet.

In einem gut durchmischten und nicht siedenden Reaktorsumpf mit einem typischen Füllstand von 2 m sedimentieren 3 µm Partikel in einem Tag vollständig auf den Sumpfboden und 10 µm Partikel in 2,5 Stunden (Abb. 2.70). Die konvektive Bewegung des Wassers am Sumpfboden ist in der Regel nicht stark genug um abgelagerte Partikel wieder aufzuwirbeln. Eine Ausnahme stellen flache Sümpfe dar, die entweder siedend oder einen starken Kondensat-Eintrag haben.

Die auf den Sumpfboden abgesunkenen Partikel reagieren wegen der reduzierten reaktiven Oberfläche nur langsam mit dem gelösten Iod. Dieser Effekt wurde in AW-3 Teil 2 näher untersucht.

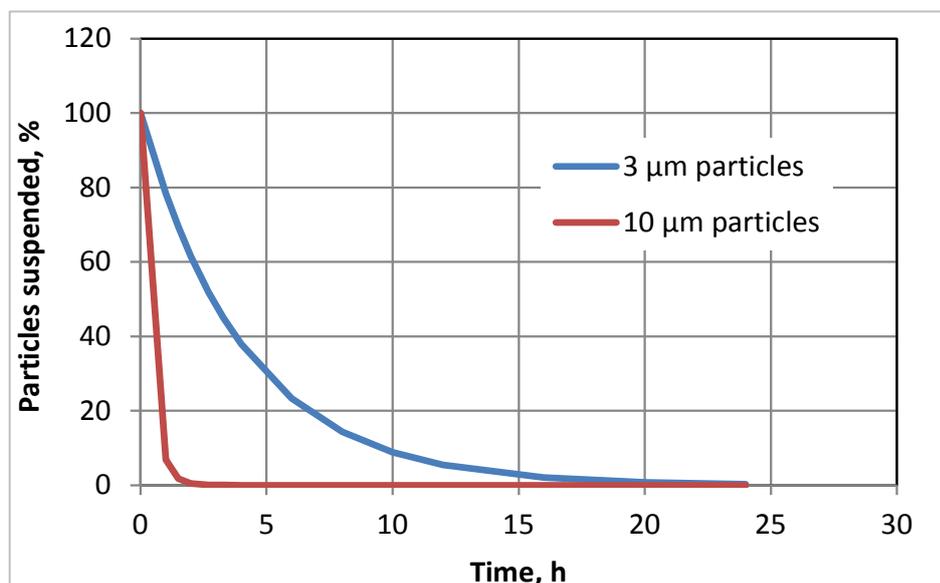


Abb. 2.70 Absetzen von Ag-Partikeln in einem gut durchmischten Reaktorsumpf

2.3.3.1 Auslegungsrechnung

Zum Versuch wurden Auslegungs- bzw. Voraussrechnungen und eine Nachrechnung mit COCOSYS-AIM durchgeführt. Die Versuchsbedingungen der Voraussrechnung ba-

sieren auf dem Testprotokoll /GUP 14a/, weichen aber in einigen Punkten davon ab. Insgesamt wurden vier Fälle gerechnet, die die erwarteten Zustände im Sumpf großzünftig abdecken:

Fall 1: Reines Ag-Aerosol (kein AgOx) homogen im Sumpf suspendiert.

Fall 2: Reines Ag-Aerosol komplett am Sumpfboden abgelagert.

Fall 3: 90 % Ag- und 10 % AgOx-Aerosol homogen im Sumpf suspendiert.

Fall 4: 90 % Ag- und 10 % AgOx-Aerosol komplett am Sumpfboden abgelagert.

In der Rechnung wurde die Ag-Konzentration im Sumpf vorgegeben. Die vier Fälle wurden wie folgt simuliert:

Fall 1: Die homogene Verteilung der Ag-Partikel wird im Test durch den Betrieb der Zirkulationspumpe erzielt. Die gesamte Oberfläche der Ag-Partikel ist wirksam. Die spezifische Oberfläche des Ag-Aerosols wird mit $0,8 \text{ m}^2/\text{g}$ abgeschätzt. (Herstellerangabe BET = $2,5 \text{ m}^2/\text{g}$ im Originalzustand /GUP 14a/). Die berechnete Ag-Konzentration im Sumpf beträgt $0,05 \text{ g/l}$ und die maximale I_2 -Konzentration $1,67\text{E}-3 \text{ g/l}$. Die I-Konzentration ist mit $1\text{E}-5 \text{ g/l}$ verschwindend klein. Wegen der großen spezifischen Ag-Partikeloberfläche wird die I_2 -Konzentration zügig abgebaut (Abb. 2.71). Alles I_2 reagiert zu AgI. Nach 6 h ($t = 31,5 \text{ h}$) liegt die $\text{I}_2(\text{w})$ -Konzentration bei $1\text{E}-6 \text{ g/l}$. Wegen des großen Ag-Überschusses ist der Abbau der Ag-Konzentration in der Rechnung kaum erkennbar.

Fall 2: Im stagnierenden Sumpf beträgt die Ag-Beladung in der Rechnung am Boden $30 \text{ g} / 1,5 \text{ m}^2 = 20 \text{ g/m}^2$. Die Sedimentationsrate der Ag-Partikel im Sumpf liegt bei $0,5 \text{ m/h}$. Ein vollständiges Absetzen des Aerosols erfordert daher Zeit ($> 3 \text{ h}$). Die Oberfläche der abgelagerten Partikel ist nur sehr eingeschränkt wirksam und der Wasseraustausch über dem Sumpfboden ist gering. Als wirksame spezifische Oberfläche wird der Defaultwert in AIM von $5,7\text{E}-3 \text{ m}^2/\text{g}$ angesetzt. I_2 reagiert nur langsam zu AgI (Abb. 2.72). Nach 15 Stunden ($t = 40 \text{ h}$) ist es gerade mal die Hälfte der eingespeisten Menge. AgI wird entsprechend langsam aufgebaut.

Fall 3: Das Ergebnis ist ähnlich wie in Fall 1, d. h. 10 % AgOx haben keinen merklichen Einfluss.

Fall 4: Das Ergebnis ist ähnlich wie in Fall 2, d. h. 10 % AgOx haben auch hier keinen merklichen Einfluss.

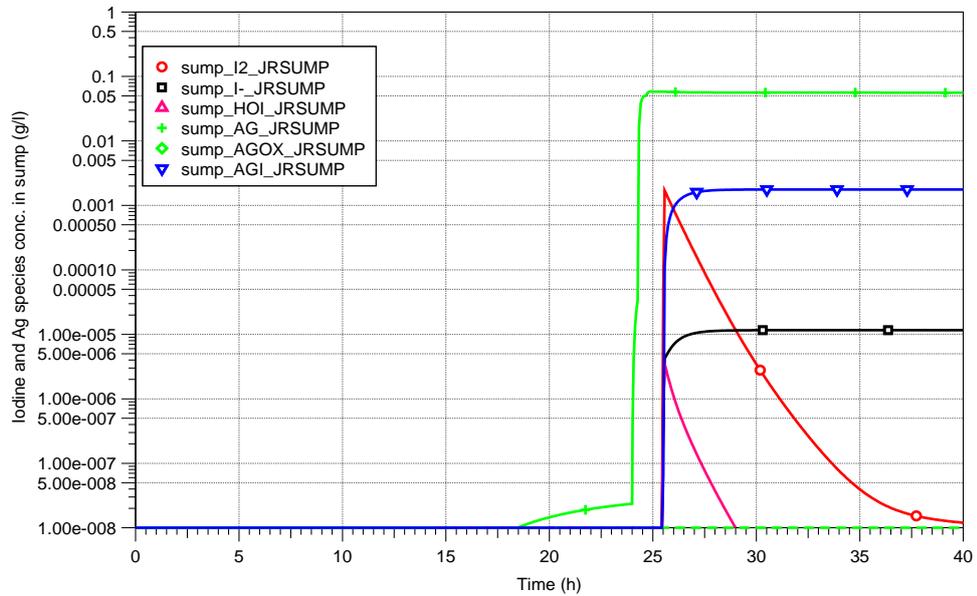


Abb. 2.71 AW-3, Fall 1: Ag-Partikel homogen verteilt im Hauptsumpf: Spezies-Konzentrationen (I_2 = rot)

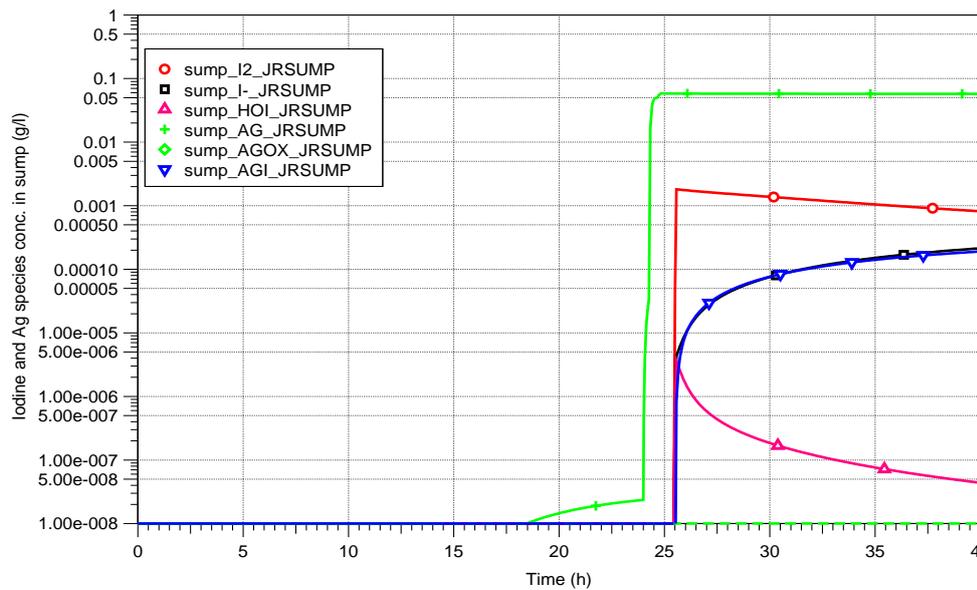


Abb. 2.72 AW-3, Fall 2: Ag-Partikel abgelagert im Hauptsumpf: Iod- und Ag-Spezies (I_2 = rot)

Anhand der Ergebnisse der Auslegungsrechnungen ließen sich folgende für die Versuchsdurchführung relevanten Schlüsse ziehen:

- Die I_2 -Einspeisung muss nach dem Abwaschen bzw. Absetzen des Ag-Aerosols erfolgen. Andernfalls würde eine Auswertung des Tests erschwert oder gar unmöglich gemacht werden, da ein Teil des $I_2(w)$ an der Sumpfwand zu $I^-(w)$ reduziert wird.
- Der Einfluss der wirksamen spezifischen Ag-Partikeloberfläche ist deutlich. Damit sollte der I_2 -Konzentrationsunterschied zwischen durchmischtem und stagnierendem Sumpf gut messbar sein.
- In der Rechnung spielt die $I^-/AgOx$ -Reaktion wegen der niedrigen I^- -Konzentration keine Rolle. Diese wird vor allem durch einen niedrigen pH-Wert erreicht.

Zu Beginn des Versuches wurden 30 g Ag-Aerosol am Boden des Sumpfes deponiert und dieser dann mit 500 l Wasser aufgefüllt und auf pH = 2 eingestellt. Dann wurden 0,68 g I_2 in den Sumpf geleitet. Den gemessenen Verlauf der I_2 -Konzentration im Sumpf zeigt Abb. 2.73 auf Seite 97. In der Phase 3.1 mit abgesetztem Ag-Aerosol war die I_2/Ag -Reaktion ziemlich langsam. In Phase 3.2 wurden die Partikel durch die Zirkulationspumpe aufgewirbelt und zusätzlich 8,2 g frisches Aerosol eingespeist. Die I_2/Ag -Reaktion verlief jetzt schnell und die I_2 -Masse fiel rasch von 0,28 g unter die Nachweisgrenze des Detektors von ca. $5E-3$ g.

Die Anfangs- und Randbedingungen der COCOSYS-AIM-Auslegungsrechnung weichen in einigen Punkten von den Bedingungen im eigentlichen Versuch ab, so war z. B. am Beginn der stagnierenden Phase ca. 1 g Ag-Partikel nicht am Sumpfboden abgelagert sondern aus technischen Gründen im Wasser suspendiert. Die Resultate der Rechnungen können daher nicht direkt mit den Messergebnissen verglichen werden. Der wesentliche Effekt wird aber qualitativ gut vorausgesagt (Abb. 2.72). In der Versuchsphase 3.1, in der die meisten Ag-Partikeln am Sumpfboden liegen, reagiert $I_2(w)$ nur sehr langsam mit dem Silber.

2.3.3.2 Modell zur Bestimmung der reaktiven Ag-Oberfläche

In AIM-3 ist die Kinetik der I_2/Ag -Reaktion bisher mit einer konstanten effektiven Oberfläche der Partikel $A_{Ag,tot}$ modelliert, d. h. eine Veränderung der reaktiven Ag-Oberfläche konnte in der Rechnung nicht berücksichtigt werden.

$$\frac{d I_2(w)}{dt} = - \frac{1}{\frac{1}{k_w} + \frac{1}{k_{28} \cdot A_{G_{sus}}}} \cdot I_2(w) \cdot \frac{A_{Ag,tot}}{V} \quad (2.13)$$

- $A_{Ag,tot}$ - gesamte reaktive Oberfläche aller Ag-Partikel, m²
 $I_2(w)$ - I₂-Konzentration im Sumpf, mol/l
 $A_{G_{sus}}$ - Ag-Konzentration im Sumpf, mol/l
 k_w - wasserseitiger I₂-Massentransfer-Koeffizient, m/s
 k_{28} - I₂/Ag-Reaktionskonstante, = 0,2 m·l·mol⁻¹·s⁻¹
 V - Sumpfvolumen, m³

In dem erweiterten, neuen Modell wird für $A_{Ag,tot}$ zwischen den Beiträgen der suspendierten und der abgelagerten Partikel unterschieden

$$A_{Ag,tot} = A_{Ag,sus} + A_{Ag,dep} \quad (2.14)$$

- $A_{Ag,sus}$ - reaktive Oberfläche aller suspendierten Ag-Partikel, m²
 $A_{Ag,dep}$ - reaktive Oberfläche aller abgelagerten Ag-Partikel, m²

Die Berechnung der beiden reaktiven Oberflächenteile in Abhängigkeit der Ablagerung der Ag-Partikel ist in /WEB 15/ näher beschrieben.

2.3.3.3 Nachrechnung

Mit dem erweiterten Modell wurde der Versuch AW-3 Teil 2 nachgerechnet. In der Phase 3.1 wurde auch die geringe (1 g), aber wirksame Menge an suspendierten Ag-Partikeln berücksichtigt. Für den anfänglich zügigen I₂(w)-Abbau in dieser Phase sind die suspendierten Partikeln verantwortlich, die sich langsam absetzen. Für t > 2 h tragen nur noch die abgesetzten Partikeln zur I₂/Ag-Reaktion bei. Die Rechnung gibt den Verlauf von I₂(w) und Agl(w) für t > 2 h gut wieder. Davor wird I₂(w) unter- und Agl(w) überschätzt. Dies liegt daran, dass die Ag-Sedimentation in AIM nicht detailliert gerechnet werden konnte. Mit der neuen Version inklusive umstrukturiertem AFP wird die Wechselwirkung zwischen Aerosolen und Iod uneingeschränkt simuliert werden können.

Die I₂/Ag-Reaktionskonstante, die vom wasserseitigen I₂-Massentransferkoeffizient dominiert wird, wird unter den Versuchsbedingungen etwas unterschätzt. Dies ist in der Rechnung an dem zu langsamen I₂(w)-Abbau zu Beginn der Phase 3.2 zu erkennen.

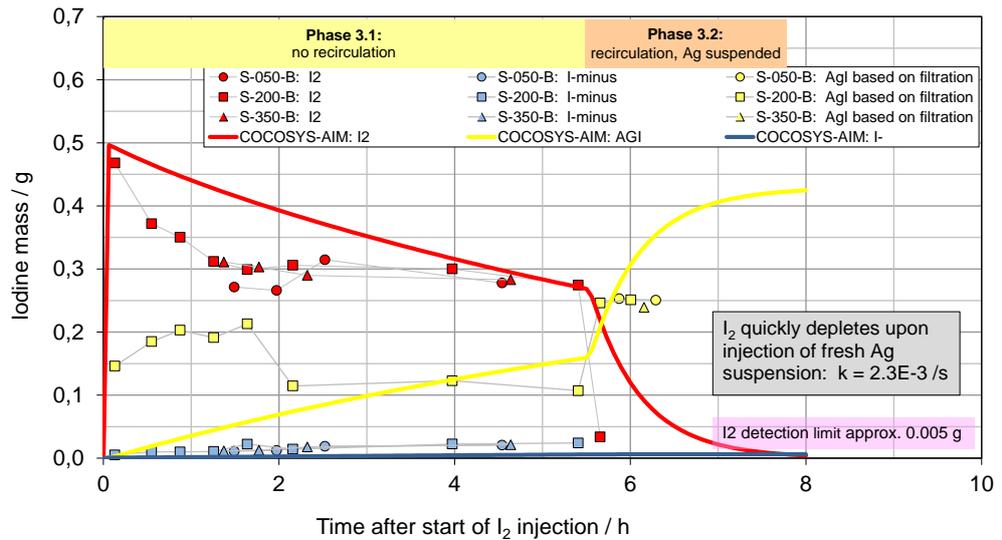


Abb. 2.73 AW-3, gemessene und nachgerechnete Iodspezies im Sumpf bei abgelagerten (Phase 3.1) und suspendierten Ag-Partikeln (Phase 3.2)

2.3.3.4 Schlussfolgerungen

AW-3 bestätigt klar die vorhergesagte Reduktion der reaktiven Silberfläche, wenn die Aerosolpartikel teilweise oder alle auf den Sumpfboden abgelagert werden. In Reaktorrechnungen muss dies berücksichtigt werden. Bei einer Nichtberücksichtigung würde die I_2 -Konzentration im Sumpf und in der Atmosphäre sowie der Iod-Quellterm aus der Anlage deutlich zu gering berechnet werden.

In der aktuellen COCOSYS-Version werden die Sumpfbereiche als gut durchmischte betrachtet. Konzentrationsunterschiede für I_2 , Ag-Partikel etc. können nicht weiter aufgelöst werden. Mit dem neuen COCOSYS-Modul CoPool lassen sich schon jetzt Temperaturverteilungen und lokale Strömungen in einem Reaktorsumpf simulieren. Im Prinzip wäre es möglich, CoPool um den Transport von löslichen und unlöslichen Spaltprodukten zu erweitern. Dann wäre es möglich, die Verteilung der Iod- und Silber-Spezies in einem Reaktorsumpf detaillierter zu rechnen. Weiter könnte unter Verwendung des Erosions-Modells AULA auch die Aufwirbelung von Ag-Partikeln vom Sumpfboden simuliert werden, wie sie z. B. in flachen siedenden Sumpfen auftreten kann.

2.3.4 Begleitung der Laborversuche im THAI-Programm

2.3.4.1 Aerosol-Abwaschversuche mit Ag – AW-3 Lab-Test

Das Abwaschverhalten von unlöslichen Aerosolen (nicht-lösliche Silberaerosole) wurde unter dem Einfluss verschiedener Neigungswinkel im Rahmen von Laborversuchen von Becker Technologies untersucht. In Abb. 2.74 ist der Versuchsaufbau exemplarisch skizziert. Um den Versuch mit COCOSYS AULA /WEB 15/ nachrechnen zu können, wurde die Nodalisierung aus Abb. 2.75 gewählt. Dabei wird über eine Drain-Wall-Verbindung ein Massenstrom Wasser auf eine geneigte Struktur gebracht. Der entsprechende Wasserstrom wird mithilfe eines Tanks und einer Pumpe genau auf den Versuchswert eingestellt. Das Wasser fließt in Rivulets entlang der Struktur und gelangt schließlich in den Sumpf von R1. Dort werden die abgewaschenen Mengen schließlich wie im Versuch bilanziert und ausgewertet.

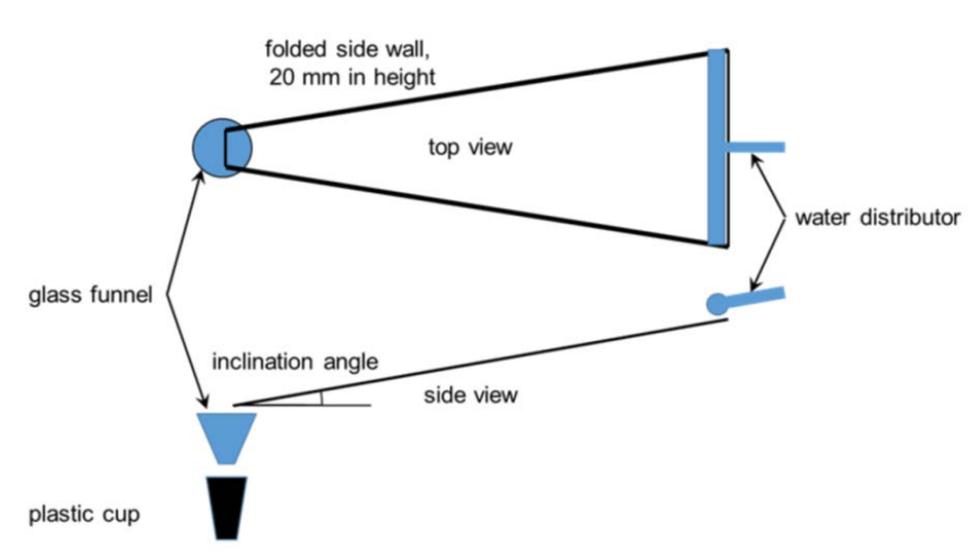


Abb. 2.74 Versuchsaufbau des AW-3 Lab-Tests /LAU 14/

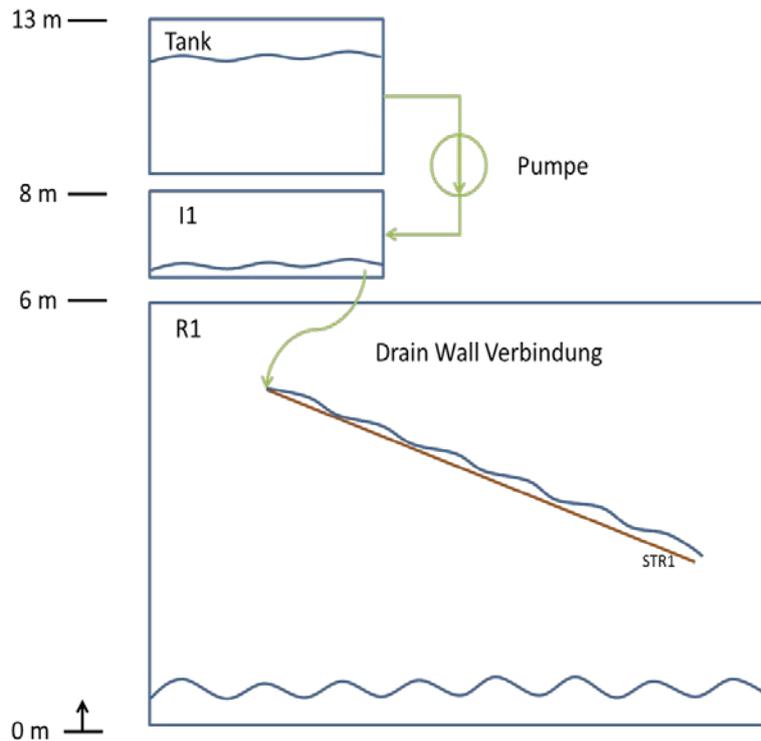


Abb. 2.75 COCOSYS-Nodalisierung der AW-3 Lab-Tests

Tab. 2.10 Test Matrix /LAU 14/ (ausgewählte Versuche sind gelb markiert)

Test Nr.	Aerosolbelastung (beabsichtigt/erreicht) [g/m ²]	Aerosol SMD [µm]	Plattenoberfläche [-]	Neigungswinkel [°]	Wassermassenstrom [g/s]
1	11 / 11,5	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	2	1,3
2	50 / 67,4	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	2	11
3	30 / 26,4	1,5 – 2,5	Dekont.-Farbe	2	11
4	30 / 27	1,5 – 2,5	Dekont.-Farbe	20	11
5	11 / 8,5	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	20	11
6	2,5 / 0,5	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	90	12
7	9 / 4,8	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	90	12
8	5 / 0,6	1,5 – 2,5	Dekont.-Farbe	90	12
9	50 / 66,4	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	2	1,3
10	9 / 4,8	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	90	1,5
11	30 / 26,7	1,5 – 2,5	Edelstahl	10	12
12	11 / 10,2	0,7 – 1,2	Edelstahl	10	11
13	5 / 0,6	1,5 – 2,5	Edelstahl	90	12
14	2 / 0,5	0,7 – 1,2	Edelstahl	90	1,3
15	50 / 68,6	0,7 – 1,2	Dekont.-Farbe	2	Rivuletttest

Für die ersten Nachrechnungen mit dem neuen COCOSYS-Modell AULA, welches in dem umstrukturierten AFP-Hauptmodul implementiert wurde, wurden drei Versuche mit unterschiedlichen Neigungswinkeln verwendet (siehe Tab. 2.10). Neben den unterschiedlichen Neigungswinkeln lagen außerdem auch noch unterschiedliche Aerosolbelastungsmengen auf den Stahlblechen sowie unterschiedliche Wassermassenströme vor. Die Versuchsergebnisse haben gezeigt, dass in allen Versuchen zunächst ein anfänglich schnelles Abwaschen der abgelagerten Aerosole stattfindet, welches schließlich in ein langsames und lange andauerndes Abwaschen übergeht. Des Weiteren verdeutlichen die Versuche, dass durch die Entstehung von zeitlich stabilen Rivulets nur ein Teil der Bleche benetzt wird und die Rivuletbreite abhängig vom Neigungswinkel ist.

Erste Nachrechnungen mit dem neuen Abwaschmodell haben Unstimmigkeiten zwischen den experimentellen Daten und den mit COCOSYS berechneten Ergebnissen gezeigt. Aus diesem Grund und anhand der Auswertung der Versuchsdaten ist die Überlegung aufgekommen, dass sich nach einer kurzen exponentiellen Abwaschphase eine langsame lineare Abwaschphase anschließt. Aus diesem Grund wurde das Modell um einen weiteren Abwaschpfad, bezeichnet als „Rivulet Mixing Option“, erweitert. Dieser Pfad beschreibt einen Mitriss von Aerosolen an den seitlichen Kanten der Rivulets aufgrund von Turbulenzen bzw. einer seitlichen Verschiebung der Rivulets. Der resultierende Beitrag ist

$$r = M_{dep} \frac{v_{riv} h}{A} \quad (2.15)$$

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

Die Form der Gleichung führt zu einem linearen Term in der Abwaschrates, so wie er auch in den Experimenten beobachtet wurde. Die im AULA-Modell resultierende Abwaschrates k_E führt dagegen zu einem exponentiellen Abfall der abgelagerten Aerosolmasse.

$$r = k_E c_{Ae} = \begin{cases} k_{E,0} \frac{(u_*^2 - u_{*,c}^2)}{u_{*,c}^2} c_{Ae} & u_* > u_{*,c} \\ 0 & u_* \leq u_{*,c} \end{cases} \quad (2.16)$$

c_{Ae} ist die abgelagerte Aerosolmasse.

Beide Prozesse laufen gleichzeitig ab, jedoch dominiert in der ersten Phase das exponentielle Abwaschen und in der zweiten Phase, nachdem die Rivulets die Oberfläche abgewaschen haben, ist das lineare Abwaschen der Grund, warum in der späteren Phase die Aerosolmenge im Sumpf weiter ansteigt. Das heißt, zu Beginn werden am meisten Aerosole abgewaschen und im nächsten Zeitintervall werden die Hälfte oder sogar deutlich weniger als die Hälfte in den Sumpf gespült.

Abhängig von dieser exponentiell abgewaschenen Menge lässt sich mithilfe der Anfangsbeladung die abgewaschene Fläche bestimmen, d. h. die Fläche, die von einem Rivulet freigewaschen wurde. Dies sind nun die Eingabegröße WET_FRACTION (Flächenanteil, welcher im Versuch von einem Rivulet überdeckt wurde) und auch FILM_FRACTION (Flächenanteil der Rivuletoberfläche bzw. Filmoberfläche). In den Rechnungen wurden beide Werte gleichgesetzt.

Sofern die kritische Schergeschwindigkeit des Films an der Oberfläche überschritten wird (d. h. $u_* > u_{*,c}$) werden langfristig alle Aerosole unterhalb des Rivulets abgewaschen. Die Versuchsdaten zeigen aber, dass die auf Basis der anfänglich abgewaschenen Aerosolmengen (exponentielle Phase) bestimmte Filmfläche bzw. nasse Fläche deutlich zu gering ist. Die sogenannte Rivuletgeschwindigkeit v_{riv} wird entsprechend des linearen Anstiegs ermittelt.

2.3.4.2 Ergebnisse der Nachrechnung von AW-3 Lab-Test 4

Die mit diesem Modell erzielten Ergebnisse werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt. Exemplarisch ist hierfür der AW-3 Lab-Test 4 ausgewählt worden. In AW-3 Lab-Test 4 wird eine Aerosolbeladung von 27 g/m^2 auf dem mit Dekontaminationsfarbe beschichteten Stahlblech erzielt. Der Wassermassenstrom beträgt 11 g/s und der Neigungswinkel des Bleches 20° . Für die Berechnung wird eine WET_FRACTION und FILM_FRACTION von $0,0781$ und eine RIV_MIX_VEL von $8,5888\text{E-}05 \text{ m/s}$ verwendet. Mit der neuen Erweiterung im AULA-Modell kann der AW-3 Lab-Test 4 mit der Ag Partikeldichte von $\rho = 5\,000 \text{ kg/m}^3$ berechnet werden. Die Abwaschkonstante des AULA-Modells wurde auf $K_{E,0} = 0,025 \text{ 1/s}$ gesetzt.

In Abb. 2.76 und Abb. 2.77 werden zum einen die gemessene und berechnete Erosionsrate und zum anderen die gemessene und berechnete kumulierte Ag-

Aerosolmasse im Sumpf dargestellt. Die Versuchsdaten werden mit sehr guter Übereinstimmung nachgerechnet.

In Abb. 2.78 und Abb. 2.79 sind die von Becker Technologies berechneten Filmgeschwindigkeiten und Filmdicke den mit COCOSYS berechneten gegenübergestellt. Dort zeigen sich deutliche Abweichungen, die darauf zurückzuführen sind, dass der für die Berechnung herangezogene Flächenanteil der nassen bzw. Filmfläche (WET_FRACTION, FILM_FRACTION) nur 17 % der tatsächlichen Filmoberfläche entspricht. Durch die Verkleinerung des Filmflächenanteils wird die Filmgeschwindigkeit und -dicke entsprechend erhöht. Berechnungen mit den tatsächlichen Filmflächenanteilen ergeben allerdings zu geringe Filmgeschwindigkeiten und dadurch auch zu geringen Schergeschwindigkeiten und es findet kein Abwaschen statt.

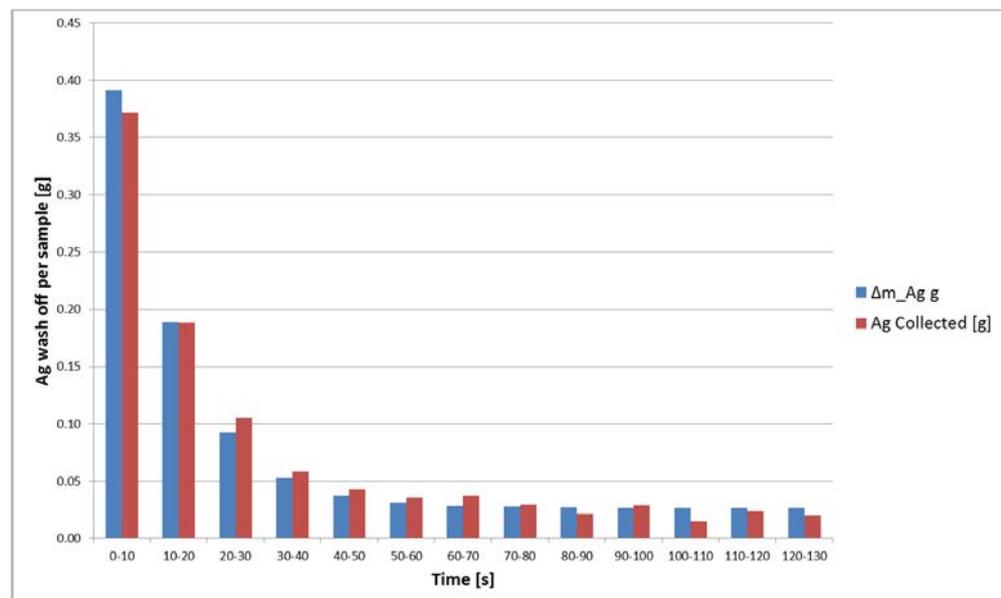


Abb. 2.76 AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate

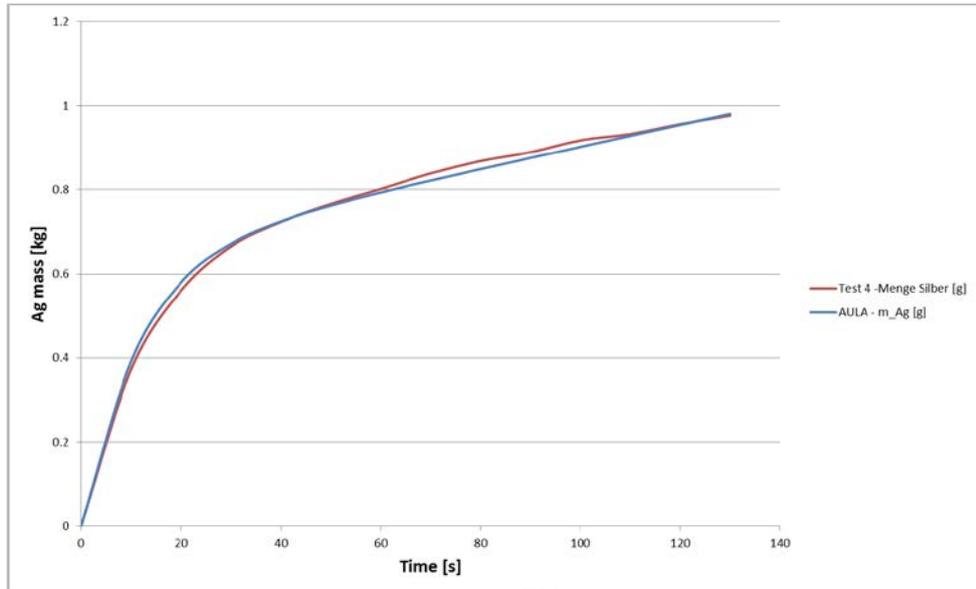


Abb. 2.77 AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Silbermasse in der Wasservorlage

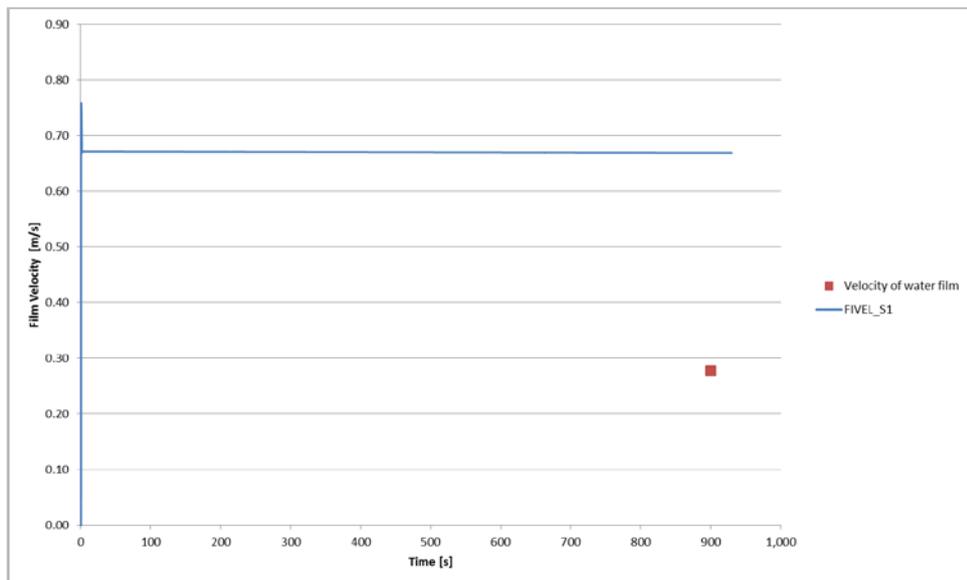


Abb. 2.78 AW-3 Lab-Test 4, aus den Versuchsdaten entnommene und mit COCOSYS berechnete Filmgeschwindigkeit

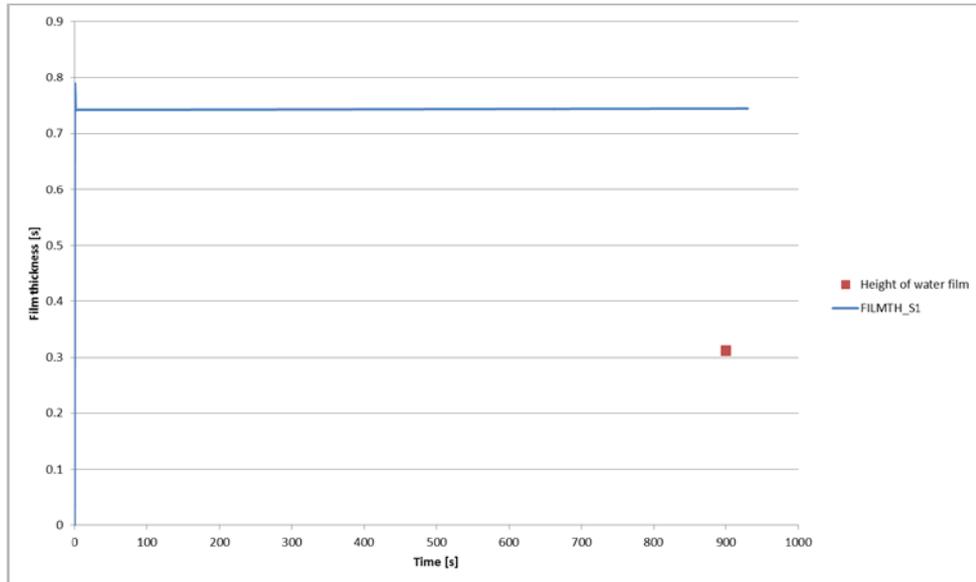


Abb. 2.79 AW-3 Lab-Test 4, aus den Versuchsdaten entnommene und mit COCOSYS berechnete Filmdicke

Insgesamt zeigen die Nachrechnungen der Versuche mit dem neuen erweiterten AULA-Modell gute Ergebnisse und bestätigen, dass das theoretische Konzept des AULA-Modells zutreffend ist. Allerdings gibt es in der derzeitigen Modellform noch Defizite, die noch behoben werden müssen. Zu nennen ist u. a. die abweichende Vorgabe der Flächenanteile des Films, die erheblich von den tatsächlich im Experiment bestimmten Flächenanteilen abweicht. Werden die im Experiment bestimmten Filmflächenanteile verwendet, wird in der Rechnung kein Silberaerosol in den Sumpf abgewaschen. Des Weiteren muss diskutiert werden, ob unterschiedliche $K_{E,0}$ Werte für unterschiedliche Plattenneigungswinkel gelten und wie groß der Eingabewert RIV_MIX_VEL, der experimentell bestimmt werden muss, ist.

Die noch ausstehenden Arbeiten werden im aktuellen COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1532 ausgeführt.

2.3.4.3 Laborversuche zur Iod/Silber-Reaktion

Im nationalen Programm THAI IV waren ursprünglich Laborversuche mit detaillierten Untersuchungen zu den Reaktionen I_2/Ag -Partikel und $I-/AgOx$ -Partikel im Sumpfwasser vorgesehen. Schwerpunkte der Arbeit sollten (1) die Bestimmung der spezifischen Oberfläche der Partikel und (2) das Sedimentationsverhalten der Ag- bzw. AgOx-Partikel im Sumpf sein.

Punkt (1) wurde prinzipiell im Abwaschversuch AW-3 Teil 2 geklärt (s. Kap. 2.3.3). Dabei zeigte sich, dass die am Sumpfboden abgelagerten Silberpartikel eine stark reduzierte reaktive Oberfläche haben. Diese muss bei der Bestimmung der mittleren spezifischen Oberfläche in jedem Kontrollvolumen separat berücksichtigt werden.

Das in Punkt (2) angesprochene Sedimentationsverhalten von Aerosolpartikeln im Sumpf ist hinlänglich bekannt und wird durch die Stoke'sche Gleichung gut beschrieben. Die größte Unsicherheit betrifft die Form der Partikel. Die im Rahmen des Versuchs AW-3 Teil 2 in großem Umfang angefertigten Elektronenmikroskop-Aufnahmen zeigen, dass die Ag-Partikel sehr kompakt sind. Die Stokes'sche Gleichung kann daher ohne Korrekturen (Formfaktoren) angewendet werden.

Aus diesen Gründen wurden die ursprünglich geplanten Laborversuche nicht durchgeführt und damit sind auch die analytischen Arbeiten dazu hinfällig.

2.3.5 Begleitung der geplanten THAI-Versuche zum Sprühen mit kontaminiertem Wasser

Der Versuch zum Sprühen mit kontaminiertem Wasser (Iod-31) ist für das erste Quartal 2016 von Becker Technologies in der THAI-Anlage vorgesehen. Dazu fand Ende November 2015 ein Treffen zur Spezifikation des Versuchs statt. Erste Auslegungsrechnungen sind im Nachfolgevorhaben geplant. Vorgesehen ist, dass der Versuch in drei Phasen gegliedert ist:

- Phase 1: Iod-Einspeisung in die Gasatmosphäre, Ausbreitung des Iods durch Strömung und Messung der Iod-Konzentrationen in der Doppelanlage.
- Phase 2: Rezirkulationssprühen: Sprühen mit kontaminiertem Sumpfwasser aus dem PAD in den Gasraum des PAD.
- Phase 3: Frischwassersprühen: Sprühen von Frischwasser in mehreren Etappen mit zwischenzeitlicher Messung der Aerosolbeladung.

Ziel der Voraussrechnung ist es, die benötigte Sprühwassermenge, die zu einer deutlichen Reduktion der I_2 -Konzentration in der Atmosphäre führt, abzuschätzen.

Die Arbeiten werden im Nachfolgevorhaben zu RS1514 fortgesetzt.

2.3.6 Begleitung der THAI-Versuche zur Ablagerung von Iod auf reaktivem Ag-Aerosol und nichtreaktivem SnO₂-Aerosol

Unfallanalysen zeigen, dass bei einem Reaktorunfall in einem DWR große Mengen nicht löslicher Aerosole (Größenordnung 1 000 kg) und etwas geringere Mengen an Silberaerosol (Größenordnung 300 kg) ins Containment freigesetzt werden können. Gasförmiges I₂ kann sich auch auf den Aerosolpartikeln anlagern. Dieser Prozess kann den Transport und das Verhalten von flüchtigem Iod stark beeinflussen. Physisorbiertes I₂ kann chemisch mit dem Aerosolmaterial reagieren, wobei nicht-flüchtige Iodspezies gebildet werden (z. B. AgI). Abgelagertes Iod wird mit den Aerosolpartikeln zusammen transportiert, mit ihnen abgelagert und unter Umständen auch resuspendiert. In einem Reaktorcontainment steht die Ablagerung von I₂(g) auf den Aerosolpartikeln in Konkurrenz zur I₂-Ablagerung auf den Farbflächen.

Um derartige Vorgänge näher zu untersuchen, wurden die beiden Iod/Aerosol-Versuche Iod-25 und Iod-26 im Rahmen des Projekts OECD THAI2 durchgeführt /FUN 12/, /FUN 13/. In Iod-25 wurde die Anlagerung von gasförmigem molekularem Iod I₂(g) an ein chemisch nicht-iodreaktives SnO₂-Aerosol und in Iod-26 an ein reaktives Ag-Aerosol gemessen. Da der Anlagerungsprozess in COCOSYS-AIM noch nicht im Detail modelliert ist, wurden beide Versuche unter Verwendung von Modellvereinfachungen voraus- und Iod-25 auch nachgerechnet. Die Rechnungen sind im Abschlussbericht /KLE 12/ beschrieben.

Es ist geplant, Iod-26 mit der neuen Programmversion COCOSYS 3.0 mit dem umstrukturierten Modul AFP nachzurechnen, sobald die erforderliche Modellierung zur Verfügung steht. Es wird daher hier die Vorausrechnung mit den Messergebnissen von Iod-26 verglichen. Dann werden Schlussfolgerungen aus allen Rechnungen für die Modellierung des I₂/Aerosol-Prozesses in COCOSYS-AIM gezogen.

2.3.6.1 Vorausrechnung Iod-26

In Abb. 2.80 sind die vorausgerechneten und in Abb. 2.81 die gemessenen Konzentrationen von I₂ im Gas und von aerosolgebundenem Iod wiedergegeben.

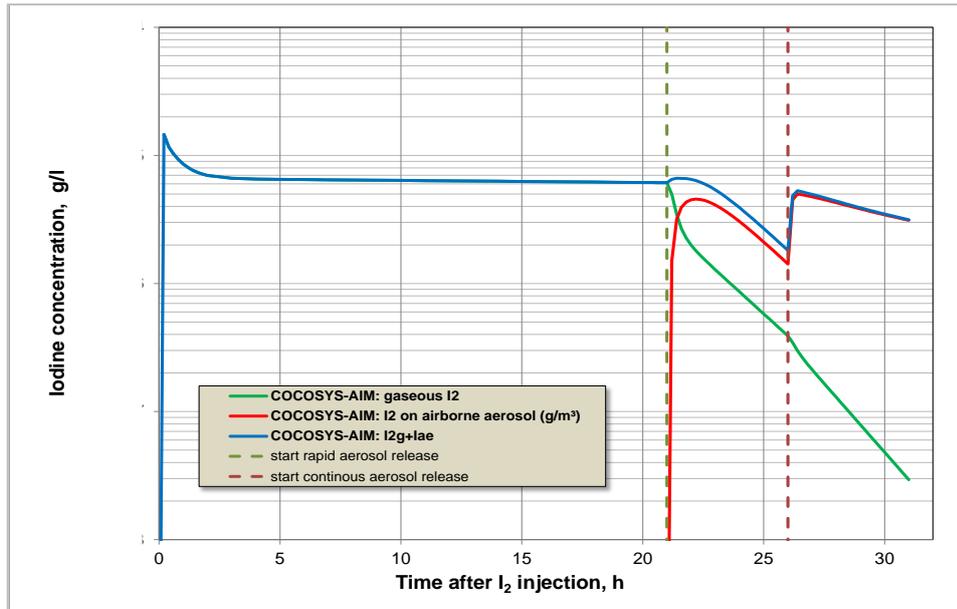


Abb. 2.80 Iod-26, vorausgerechnete Konzentrationen von $I_2(g)$ und aerosolgebundenem Iod

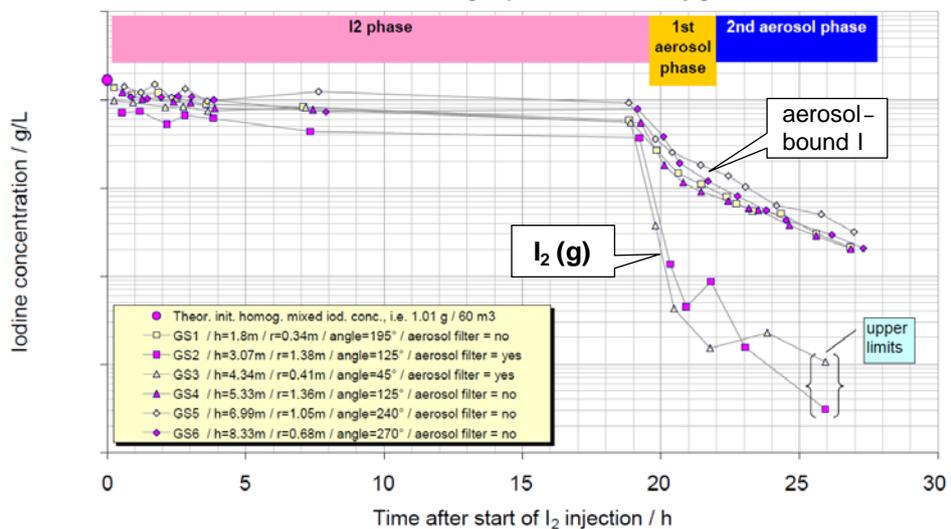


Abb. 2.81 Iod-26, gemessene Konzentrationen von $I_2(g)$ und aerosolgebundenem Iod

Nach der stoßartigen Aerosoleinspeisung fällt die Konzentration von aerosolgebundenem Iod (rot) mit dem gleichen Trend wie das Aerosol ab. Zu Beginn der kontinuierlichen Aerosoleinspeisung ($t = 26$ h) steigt sie sprunghaft um einen Faktor 2,5 an. Dieser Anstieg wird in der Rechnung durch Resuspension von Iod aus abgelagerten Aerosolpartikeln hervorgerufen. Diese Wiederfreisetzung ist nicht korrekt, da das abgelagerte I_2 bereits chemisorbiert, d. h. fest an die Partikel gebunden ist, was auch so gemessen wurde (Abb. 2.81). Danach wird die Konzentration des aerosolgebundenen Iods

weiterhin unterschätzt, da in der Rechnung immer noch I₂ vom Behälterboden resuspendiert wird. Die Konzentration des gasförmigen I₂ in der Atmosphäre (grün) nimmt dagegen schnell und in grober Übereinstimmung mit der Messung ab. In der ersten Aerosolphase wird die Abnahme unterschätzt und in der zweiten überschätzt. Die letzten Messpunkte liegen unterhalb der Nachweisgrenze.

In der Tab. 2.11 sind die Unterschiede bei der Anlagerung von I₂ an nicht-reaktive und reaktive Aerosole zusammengefasst. Die Aufnahme von I₂ durch reaktive Aerosole, z. B. Silber, ist viel stärker als durch nicht-reaktive. Daher ist der Einfluss von Ag-Aerosolen auf I₂-Verhalten und Quellterm deutlich stärker als der von Aerosolen aus nicht-reaktivem Material.

Tab. 2.11 Unterschied in der I₂/Aerosol-Reaktion zwischen nicht-reaktiven und reaktiven nuklearen Aerosolen

	Nicht-reaktive Aerosole (z. B. SnO ₂)	Reaktive Aerosole (z. B. Ag)
Max. Konzentration in THAI, [1300 MWe KONVOI]	2 g/m ³ [ca. 14 g/m ³]	1.2 g/m ³ [ca. 4 g/m ³]
Max. I ₂ (g) Konzentration in THAI, [KONVOI]	1 E-2 g/m ³ [3 E-3 g/m ³]	
Reaktion mit Aerosol	Physisorption von I ₂ bis Sättigung	Chemisorption (z. B. AgI)
I ₂ (g) Abnahme durch Reaktion	gering (in Iod-25 ca. 55 %)	signifikant (in Iod-26 ca. 99,9 %)
Aerosolgebundenes Iod	wiederaufsetzbar	fixiert
Mischung aus iodbeladenen und frischen Partikeln	I ₂ -Umverteilung zwischen Partikeln	keine Umverteilung
Iod auf Aerosolpartikeln am Boden	teilweise wiederaufsetzbar	fixiert

Die Modellierung der I₂-Physisorption auf eine Schar von nicht-reaktiven Partikeln ist wesentlich aufwendiger als die Modellierung der Chemisorption auf eine reaktive Partikelschar. Physisorbiertes, d. h. leicht gebundenes Iod wird bei geänderten Bedingungen (z. B. Temperaturanstieg, sinkender I₂(g)-Konzentration oder Freisetzung eines

frischen Aerosols) von den Partikeln wieder freigesetzt bzw. auf diesen umverteilt werden.

Nukleare Aerosole sind Mischagrossole, deren Partikel (Aggregate) aus Hunderten von Primärpartikeln von ca. 0,1 µm Durchmesser aus Silber und nicht-reaktivem Material bestehen. Da die I₂/Ag-Reaktion nur an Ag-Oberflächen stattfindet, spielt die Porosität der Aggregate eine Rolle (Abb. 2.82).

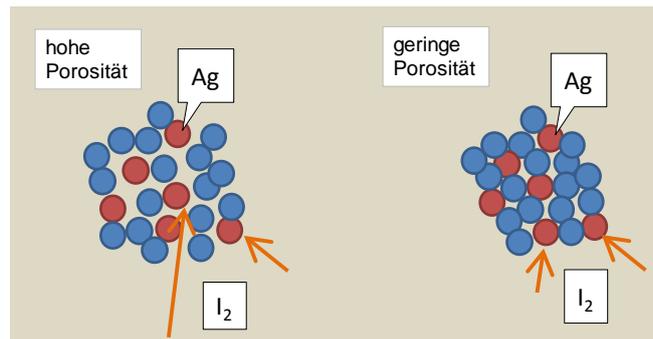


Abb. 2.82 Reaktive Oberfläche bei Ag-Mischpartikeln mit hoher und geringer Porosität

Bei hoher Porosität kann I₂ tief ins Innere der Aggregate diffundieren und auch dort mit Ag reagieren. Die spezifische Ag-Oberfläche dieser porösen Mischpartikel S_{high} ist nahe jener der (isolierten) Silberpartikel in den Aggregaten.

$$S_{\text{high}} \sim \frac{1}{D_{\text{Ag}} \cdot \rho_{\text{Ag}}} \quad (2.17)$$

D_{Ag} - mittlerer Durchmesser der Ag-Partikel im Mischagrosol, m

ρ_{Ag} - mittlere Dichte der Ag-Partikel, kg/m³

Bei kompakten Partikeln mit geringer Porosität ist nur die Reaktion auf der Oberfläche des Aggregats möglich. Die spezifische Ag-Oberfläche S_{low} ist proportional zum Konzentrationsverhältnis c_{Ag}/c_{tot}.

$$S_{\text{low}} \sim \frac{c_{\text{Ag}}}{D_{\text{tot}} \cdot \rho_{\text{tot}} \cdot c_{\text{tot}}} \quad (2.18)$$

c_{Ag}, c_{tot} - Ag- bzw. gesamte Aerosolkonzentration, g/m³

D_{tot} - mittlerer Durchmesser der Mischpartikel, m

ρ_{tot} - mittlere Dichte der Mischpartikel, kg/m^3

S_{high} und S_{low} können entweder anhand theoretischer Überlegungen abgeschätzt oder aus einem Test mit Misch aerosolen ähnlich Iod-26 gewonnen werden.

Die THAI-Versuche Iod-25 und Iod-26 wurden in trockener Atmosphäre durchgeführt. Bei nassen Bedingungen mit Kondensation auf den Aerosolpartikeln wird I_2 durch Massentransfer in den Tröpfchen angereichert, bis ein Konzentrationsgleichgewicht mit $\text{I}_2(\text{g})$ erreicht ist. Reaktive Ag- und AgOx-Partikel reagieren im Tröpfchen mit den gelösten Spezies wie in einem Sumpf. Die Geschwindigkeit der I_2/Ag -Reaktion in den Tröpfchen ist vergleichbar mit jener auf Partikeln in trockener Atmosphäre. D. h., die Reaktion bei Volumen Kondensation kann näherungsweise durch die Reaktion bei trockener Atmosphäre ersetzt werden. Eine Bilanzierung des Iods in luftgetragendem Kondensat ist nicht erforderlich.

Auf luftgetragenen Silberpartikeln bildet sich bei der Reaktion mit I_2 ein dünner Film aus AgI. Werden diese Partikel in den Sumpf abgewaschen, kann der AgI-Film die Iod/Silber-Reaktion im Sumpfwasser beeinträchtigen. Die Reaktion ist in Unfallrechnungen eine wichtige Senke für flüchtiges Iod im Containment. Gewöhnlich werden frische Partikel angenommen. Die Wirkung von AgI-Filmen auf die Iod/Silber-Reaktion sollte daher näher untersucht werden.

2.3.6.2 Schlussfolgerungen

Die beiden THAI-Versuche zur I_2 /Aerosol-Reaktion haben bestätigt, dass I_2 auf nicht-reaktiven Aerosolen vorwiegend physisorbiert und auf reaktiven Partikeln (z. B. Ag) in erster Linie chemisorbiert wird. Unter gleichen Bedingungen ist die Iodbelastung auf reaktiven Partikeln wesentlich höher.

In einem Containment sind die meisten Oberflächen mit einem Dekontaminationsanstrich versehen. Die I_2 -Ablagerung am Aerosol steht daher in Konkurrenz zur Ablagerung von I_2 auf der Farbe. Die $\text{I}_2(\text{g})$ -Konzentration im Gleichgewicht mit der Farbe an den Wänden ist daher geringer (1 bis 2 Größenordnungen) als die Anfangskonzentration in den THAI-Versuchen.

Die Modellierung der Reaktion auf nicht-reaktiven Aerosolen ist in COCOSYS-AIM nicht notwendig, da der Effekt auf die $\text{I}_2(\text{g})$ -Konzentration gering ist und der Modellierungsaufwand zur Erfassung der permanenten Umverteilung des I_2 auf den Partikeln

groß wäre. In COCOSYS-AIM wird daher nur die Reaktion von I₂ mit Ag-Partikeln simuliert.

Bei Mischaerosolen sind die Silber-Partikel in den Agglomeraten verteilt. Nur die für I₂ zugänglichen Ag-Oberflächen sind wirksam. Bei hoher Porosität der Agglomerate sind auch Ag-Oberflächen im Inneren wirksam. Bei kompakten Partikeln nur die an der Agglomerat-Oberfläche. Dies muss bei der Modellierung berücksichtigt werden.

2.3.7 Validierung des Modells zur Radiolyse im Sumpf an Versuchen aus CAIMAN und RTF

Bei einem Reaktorunfall ist neben der direkten Freisetzung aus dem Primärkreis in der frühen Unfallphase die Radiolyse im Sumpf die Hauptquelle für molekulares Iod (I₂) im Containment in der späten Unfallphase. I₂ wird im Sumpf aus gelösten Iodid (I⁻) und Iodat (IO₃⁻) gebildet. In AIM sind die beiden komplexen Reaktionen vereinfacht beschreiben.



mit $A = (\text{H}^+)^{N20} \cdot D_S$



mit $B = (\text{H}^+)^{N29} \cdot D_S$

k(i) sind die konstanten Raten für die Hin- und Rückreaktionen in AIM. γ steht symbolisch für radioaktive Strahlung.

Die beiden Terme A und B beschreiben die Abhängigkeit der Hinreaktionen vom pH-Wert (Wasserstoffionenkonzentration H⁺) und von der Dosisleistung im Sumpf (D_S). Die H⁺-Abhängigkeit ist wegen N20 = 0,2 und N29 = 0,2 nicht linear und relativ schwach vom pH-Wert abhängig. In einer früheren AIM-Version betrug die pH-Abhängigkeit bei-

der Reaktionen 0,5, wurde aber wegen einer systematischen Überschätzung der I₂-Konzentration (I₂(g)) in der Gasphase reduziert.

I₂(g) hängt nicht nur von der radiolytischen I₂-Bildung im Sumpf, sondern auch vom I₂-Verhalten in der Gasphase mit Adsorption an Oberfläche, radiolytischer IO_x-Bildung etc. ab. Die Modellierung der Gasphasen-Reaktionen in AIM ist in den letzten Jahren systematisch verbessert worden. Es war daher zu überprüfen, ob die Einstellungen des Radiolysemodells nach wie vor optimal sind oder ob Korrekturen, insbesondere an der pH-Abhängigkeit und/oder der Dosisleistung erforderlich sind. Dazu wurden die zwei schon früher mit COCOSYS-AIM gerechneten Versuche

- CAIMAN 97/02 und
- RTF P10 T2

ausgewählt. Im CAIMAN-Versuch ist der pH-Wert niedrig, während er im RTF-Versuch hoch ist.

2.3.7.1 Iodversuch CAIMAN 97/02

Der französische Iodversuch CAIMAN 97/02 war bereits Gegenstand des internationalen Standardproblems ISP-41 /BAL 04/. Die Versuchsbedingungen sind denen in einem Reaktorcontainment während eines schweren Reaktorunfalls ähnlich. Der CAIMAN-Behälter hatte ein Volumen von 300 l mit einem Sumpf von 3,3 l. Alle Wände waren aus rostfreiem Stahl. In der Gasphase und im Sumpf befanden sich je ein mit Ripolin-Farbe beschichteter Coupon, 18,4 dm² bzw. 0,82 dm² groß. Der Druck war 1,9 bar und die Temperatur in Gas- und Wasserphase betrug ca. 100 °C. Zu Versuchsbeginn bei pH = 5 wurde im Sumpf eine I⁻-Konzentration von 1E-5 mol/l eingestellt. Dann wurde der Sumpf mit einer Dosisleistung von 1 kGy/h bestrahlt. In der Gasphase herrschte keine Strahlung. Über den ganzen Versuchsverlauf wurden die Konzentrationen der relevanten Iodspezies in der Gasphase und teilweise in der Wasserphase gemessen.

Im Rahmen des ISP-41 wurden unter anderen „optimierte“ Rechnungen durchgeführt. In Abb. 2.83 ist die mit COCOSYS-AIM bestimmte I₂-Konzentration im Sumpf und der Atmosphäre wiedergegeben /WEB 03/. Die Nachrechnung des CAIMAN-97/02-Versuchs mit der aktuellen Entwicklerversion COCOSYS V3.0dev und AIM3 zeigen eine passable Übereinstimmung mit den gemessenen I₂- und RI-Konzentrationen in der

Gasphase (Abb. 2.84). Dies legt nahe, dass auch die I^- , IO_3^- und RI-Konzentrationen in der Wasserphase gut simuliert werden. Messwerte liegen keine vor. Die Konzentrationen der flüchtigen Iodspezies in der Gasphase werden wesentlich von den Konzentrationen in der Wasserphase bestimmt.

Ab dem Zeitpunkt $t > 25$ h übersteigt die RI-Konzentration die gemessenen Werte und liegt am Versuchsende um einen Faktor 2 höher. Die $I_2(g)$ -Konzentration wird während der gesamten Rechnung leicht unterschätzt. Es wird entweder zu wenig I_2 durch die Radiolyse gebildet und/oder zu viel I_2 auf der Farbe im Gas und/oder in der Wasserphase gebunden.

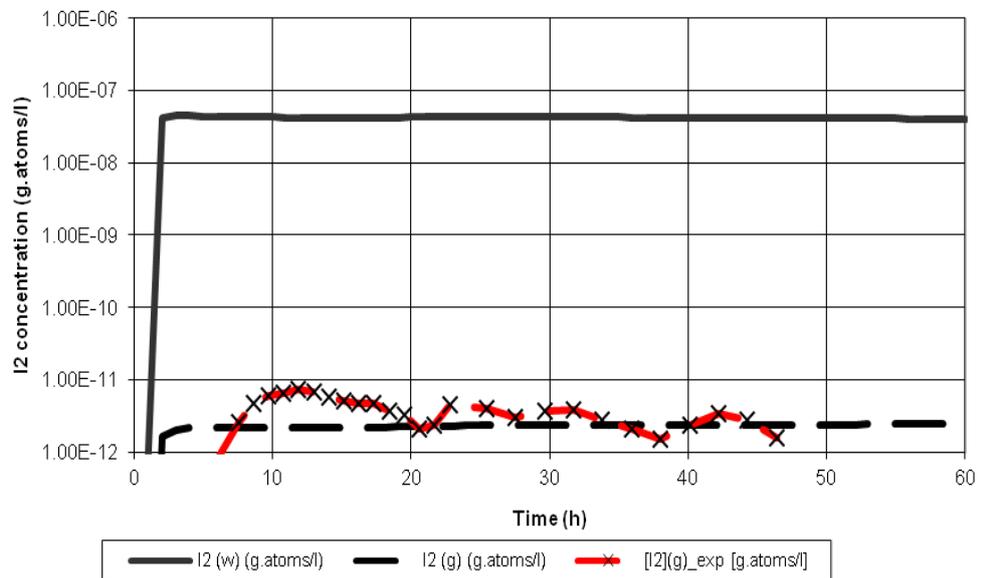


Abb. 2.83 ISP-41 Follow Up, Phase 2: Mit COCOSYS-AIM gerechnete I_2 -Konzentration im Sumpf und in der Gasphase des Versuchs CAIMAN 97/02. I_2 im Sumpf wurde nicht gemessen

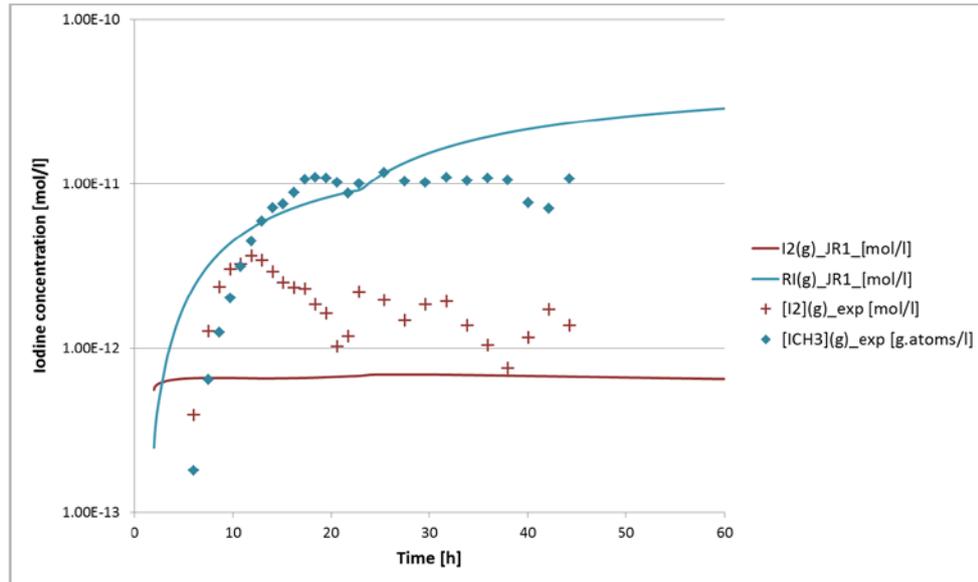


Abb. 2.84 CAIMAN 97/02, mit COCOSYS-AIM3 gerechnete I₂-Konzentration in der Gasphase des Versuchs

2.3.7.2 Iodversuch RTF P10 T2

Im kanadischen RTF-Test P10 T2 wurden die Freisetzung und das Verhalten von flüchtigen Iodspezies (I₂, Organoiod) aus einer bestrahlten wässrigen I⁻-Lösung im farbbeschichteten Behälter untersucht. Der RTF-Behälter hatte ein Gasvolumen von 311 l und 28 l Sumpfvolumen. Der ganze Behälter war mit Amerlock-Farbe beschichtet. Zusätzlich waren je 6 Farbcoupons im Gasraum und im Sumpf platziert. Die Temperatur betrug einheitlich 25 °C. Die Dosisleistung im Gas und im Sumpf betrug jeweils 0,61 kGy/h. Der Sumpf war anfangs auf pH = 10 eingestellt und sank nach dem Aufheben der Kontrolle bei t = 45 h auf pH = 7,2. Vor Versuchsende bei t = 210 h wurde er wieder auf pH = 10 angehoben. Im Verlauf der gemessenen Iodspezies-Konzentrationen sind die pH-Stufen deutlich zu erkennen (Abb. 2.85). Bei Versuchsbeginn wurde die I⁻-Konzentration im Sumpf auf 8,9E-6 mol/l durch Zugabe von CsI eingestellt.

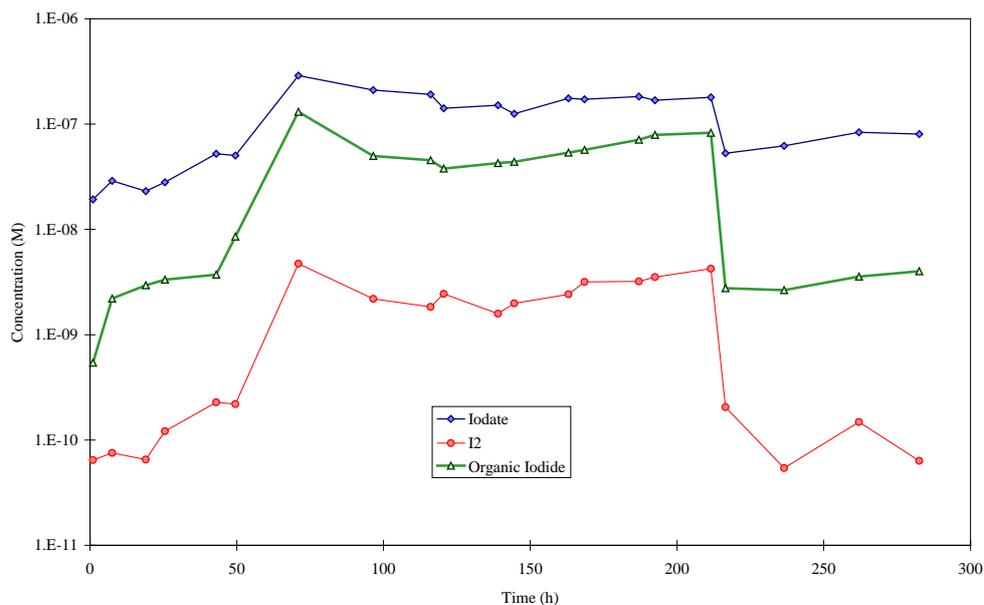


Abb. 2.85 RTF P10 T2, gemessene Iodspezies-Konzentrationen in Sumpf /GLO 10a/

Ein Vergleich der in /KLE 12/ diskutierten Rechenergebnisse mit den in Abb. 2.86 und Abb. 2.87 dargestellten und mit der COCOSYS-V3.0dev-Version berechneten Ergebnisse, sowie der Vergleich mit den Messwerten, zeigt den unterschätzten Abbau der $I^-(w)$ Konzentration im Vergleich mit den Messwerten. Daher ist davon auszugehen, dass nach wie vor der Iodidabbau durch die Radiolysereaktion



unterschätzt wird.

Eine weitere bestimmende Reaktion für den Iodidabbau ist die Absorption auf Farbe. Die starken Abweichungen zu den Messwerten könnten auch darauf zurückzuführen sein, dass im Experiment die frische Farbe Amerlock verwendet worden ist, welche eine sehr hohe Reaktivität aufweist. Dies erklärt auch, dass die Messwerte von $RI(w)$ weit über den gemessenen $I_2(w)$ -Konzentrationen in Abb. 2.87 liegen. Durch die frische Farbe kommt es zu einer besonders starken Bildung von RI. $I_2(w)$ lagert sich auf der frischen Farbe ab und wird in chemisorbiertes Iod umgewandelt. Aus dem physisorbierten Iod ($I_2(dep,p,w)$ und $I^-(dep,p,w)$) sowie dem chemisorbierten Iod wird schließlich unter Einfluss von Strahlung das $RI(w)$ gebildet.

Die Summe der Iodmengen der beiden flüchtigen Spezies $I_2(g)$ und $RI(g)$ stimmt mit der gemessenen Gesamtmenge des gasförmigen Iods recht gut überein. Messtechnisch nicht erfasst wurde das IO_x -Aerosol, das bei der $I_2(g)$ /Ozon-Reaktion entsteht. Die IO_x -Konzentration ist in der Größe der $I_2(g)$ -Konzentration zu erwarten.

Da die Reaktionsparameter in COCOSYS für die deutsche Farbe GEHOPON mit einem Farbalter von 15 Jahren gelten, fällt die Bildung von $RI(w)$ und somit der Abbau von $I_2(w)$ deutlich schwächer aus und die $I_2(w)$ -Konzentration liegt aus diesem Grund auch oberhalb der $RI(w)$ -Konzentration. Dadurch, dass die I_2 -Konzentration in der Wasserphase in der Rechnung deutlich höher liegt als im Experiment, wird auch in der Gasphase die $I_2(g)$ -Konzentration deutlich überschätzt. Obwohl die RI -Konzentration in der Wasserphase im Vergleich zum Experiment zu gering ist, zeigt der Vergleich in der Gasphase eine gute Übereinstimmung der $RI(g)$ -Konzentration.

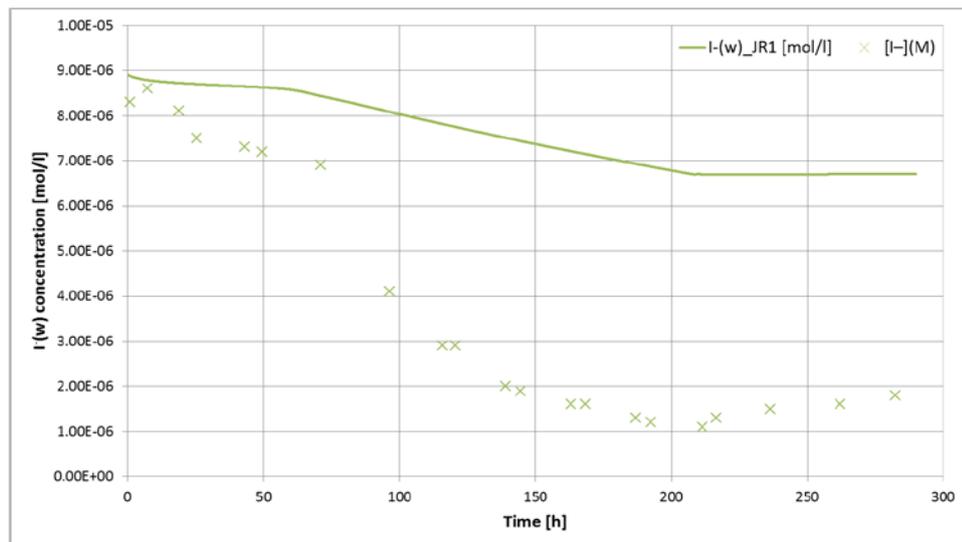


Abb. 2.86 RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen $I(w)$ -Konzentration mit dem Ergebnis der COCOSYS-V3.0dev-Rechnung

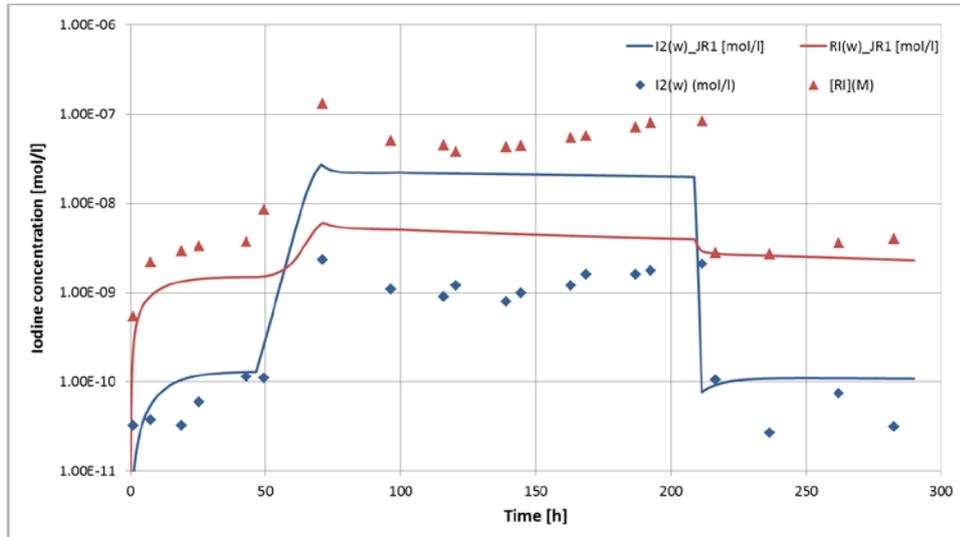


Abb. 2.87 RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen I₂(w)- und RI(w)-Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS-AIM3-Rechnung

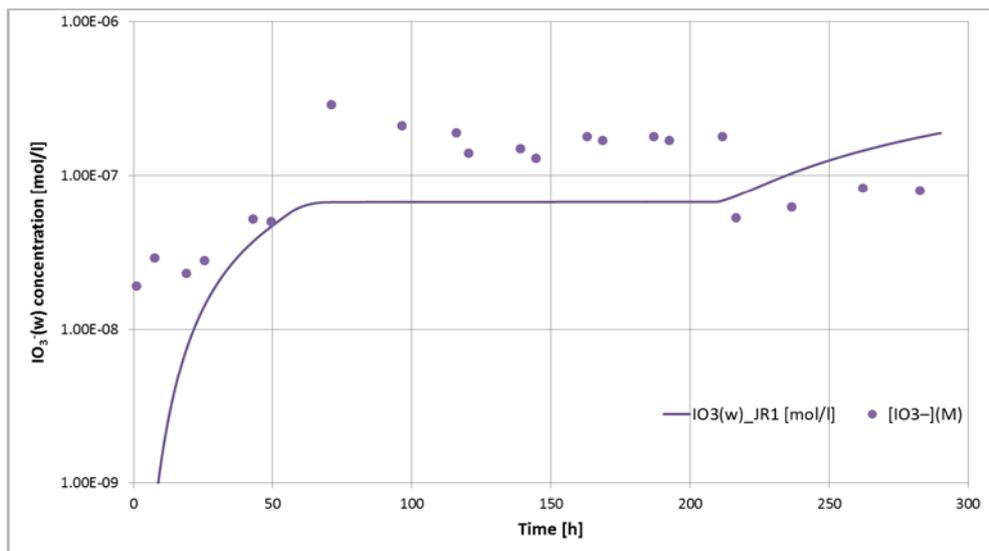


Abb. 2.88 RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen IO₃⁻(w)-Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS-AIM3-Rechnung

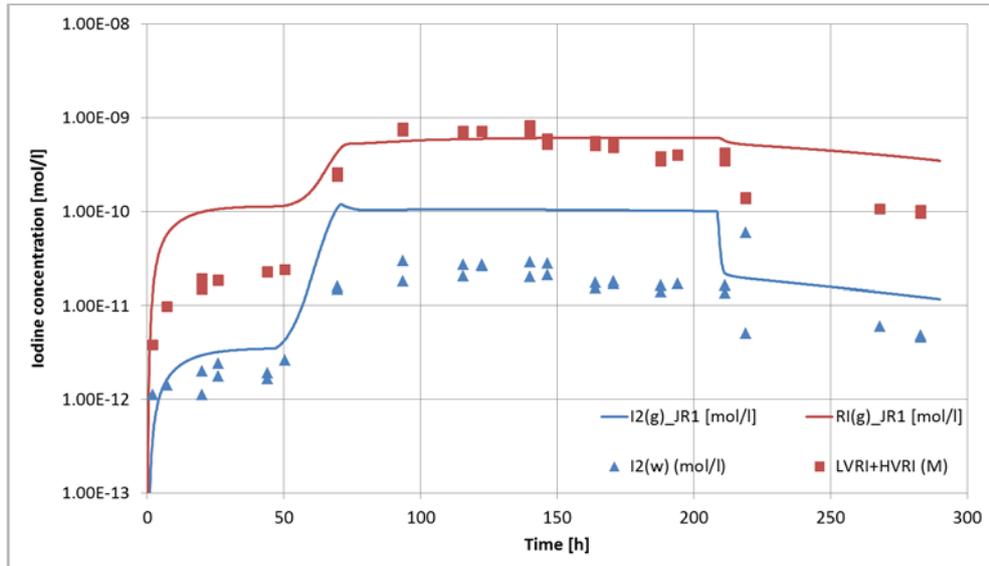


Abb. 2.89 RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen $I_2(g)$ - und $RI(g)$ -Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS-AIM3-Rechnung

2.3.7.3 Fazit

Die Ergebnisse der neuen Rechnungen zeigen, dass in der Entwicklerversion von COCOSYS die Radiolysereaktionen in der Wasserphase schon relativ gut modelliert sind. Bei der Analyse der Experimente spielen allerdings auch andere Effekte, wie z. B. der Massentransfer an der Sumpfoberfläche, eine große Rolle. Dies ist ein Grund für die teilweise deutliche Abweichung der gerechneten Iodkonzentrationen von den Messwerten. Da jedoch auch durch eine Modellweiterentwicklung der Radiolysemodelle deutlich genauere $I(w)$ -, $IO_3^-(w)$ - und $I_2(w)$ -Konzentrationen erwartet werden, sollte eine punktuelle Weiterentwicklung der Radiolysemodelle in zukünftigen Vorhaben durchgeführt werden.

2.3.8 Begleitung der AER-Versuche des OECD Programms STEM zur radiolytischen CsI - und IOx -Zersetzung

2.3.8.1 Hintergründe zur radiolytischen CsI - und IOx -Zersetzung

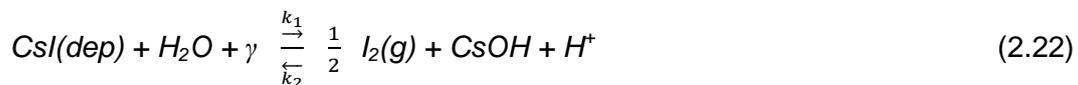
Bei einem Reaktorunfall wird erwartet, dass Iod zu einem großen Teil als CsI -Aerosol bei der Kernzerstörung aus dem Primärkreislauf in das Containment freigesetzt wird. Das IOx -Aerosol entsteht in der Gasphase bei der Oxidation von molekularem Iod $I_2(g)$

mit dem Radiolyseprodukt Ozon. Im Reaktorfall ist die IOx-Menge viel geringer als die des Csl. Unter Unfallbedingungen macht der Csl-Anteil am gesamten Aerosol im Containment etwa 3 % aus (ca. 30 kg Csl und ca. 1 000 kg gesamtes Aerosol), da das Iodinventar im Kern begrenzt ist. Beide Aerosole lagern sich im Containment auf Böden und an Wänden ab, von wo sie teilweise mit dem ablaufenden Kondensat in den Sumpf gewaschen werden. Das nicht abgewaschene, trockene Csl und IOx wird durch radioaktive Strahlung langsam zersetzt. Dabei wird flüchtiges I₂(g) frei, das den Iod-Quellterm im Containment und aus der Anlage vergrößert.

Im Rahmen des OECD-Projekts STEM wurde in den AER-Tests, die in der EPICUR-Anlage durchgeführt wurden, die radiolytische Zersetzung von abgelagerten Csl- und IOx-Aerosolen durch radioaktive Bestrahlung untersucht.

2.3.8.1.1 Radiolytische Zersetzung von Csl-Aerosol

In COCOSYS-AIM ist die radiolytische Zersetzung von Csl-Aerosolen aufgrund der Erkenntnisse und Daten aus STEM modelliert /SPE 14/.



Die kinetische Gleichung für die I₂-Konzentration ist

$$\frac{I_2(g)}{dt} = (rh - rh_0) k_1 DL(g) Csl(dep) R_{dep} \frac{A_{Csl,tot}}{V \cdot 1000} \quad (2.23)$$

Csl, I₂ - Konzentrationen in mol/m² bzw. mol/l

rh - relative Feuchte, %

rh₀ - rF-Schwelle, darunter keine Zersetzung

V - Volumen der Gasphase, l

DL - Dosisleistung in kGy/h

A_{Csl,tot} - gesamte effektive Oberfläche der abgelagerten Csl-Partikel, m²

R_{dep} - Reduktionsfaktor für starke Csl-Beladungen

k₁ - Reaktionsgeschwindigkeit, 1/(s·kGy/h)

Mit dem Reduktionsfaktor wird die Verringerung der Csl-Zersetzung in Gegenwart großer Mengen anderer Aerosole (weitere Spaltprodukte, Strukturmaterialien, Regelstabmaterial etc.), wie diese im Reaktorfall zu erwarten sind, berücksichtigt. Die Reduktion

kommt durch Abschirmung von radioaktiver Strahlung, durch Rückreaktion von entstandenem I₂, durch die in der Aerosolschicht gebremste Dampfdiffusion etc. zustande. In R_{dep} sind diese die Csl-Zersetzung mindernden Prozesse pauschal zusammengefasst.

Die gesamte Oberfläche der Csl-Partikel im abgelagerten Zustand wird aus deren spezifischer Oberfläche berechnet.

$$A_{Csl,tot} = S_{Csl} \cdot m_{dep,Csl} \quad (2.24)$$

S_{Csl} - spezifische Oberfläche des luftgetragenen Csl-Aerosols

m_{dep,Csl} - abgelagerte Csl-Masse in Iod-Kontrollvolumen, kg/m³

Für kompakte, kugelförmige 1 µm Csl-Partikel mit der Dichte von 5,67E3 kg/m³ ist die spezifische Oberfläche 1,06 m²/g und für 3 µm Partikel 0,35 m²/g. Bei flockenförmigen Agglomeraten ist die spezifische Oberfläche größer.

Bei der Abschätzung des Reduktionsfaktors kann man sich an der mittleren Flächenbelastung b_{dep,tot} orientieren

$$b_{dep,tot} = \frac{m_{dep,tot}}{A_{dep}} \quad (2.25)$$

m_{dep,tot} - abgelagerte Aerosolmasse, kg

A_{dep} - Ablagerungsfläche, m²

Im Reaktorcontainment z. B. eines DWR KONVOI ist die Csl-Menge durch die Menge an Iod im Kern bestimmt (ca. 30 – 40 kg). Die mittlere Beladung kann daher rund mit 6 g/m² bei 7 000 m² Bodenfläche angenommen werden. Dies entspricht etwa einem Monolayer an Csl-Partikeln. Allerdings wird auch bis zu 1 000 kg an Aerosol anderer Materialien freigesetzt. Die gesamte Aerosol-Flächenbelastung beträgt daher 1 040 / 7 000 ≈ 150 g/m² und ist somit viel höher als die reine Csl-Beladung. Der Reduktionsfaktor für die Oberfläche ist daher grob R_{dep} < 0,5 (Abschätzung für Reaktorfall).

In den AER-Versuchen aus dem OECD STEM Projekt betrug die Csl-Beladung 1,4 g/m². Hier ist die I₂-Freisetzung weitgehend ungehemmt.

Alternativ kann die gesamte Oberfläche der Csl-Partikel A_{tot} auch aus der Partikelgrößenverteilung des Csl-Aerosols berechnet werden. Der oberflächengemittelte oder Sauter-Durchmesser ist definiert als

$$SMD = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{d_i}} \quad (2.26)$$

$$SMD = \frac{c_{tot}}{\sum \frac{c_i}{d_i}} \quad (2.27)$$

- SMD - Sauter Durchmesser der Partikelgrößenverteilung, m
 x_i - Massenanteil der Partikel in Klasse i
 c_i - Aerosolkonzentration in Klasse i, kg/m³
 c_{tot} - gesamte Aerosolkonzentration, kg/m³
 d_i - mittlerer Durchmesser der Partikel in Klasse i, m

Für kugelförmige Partikel gilt weiter

$$SMD = \frac{6}{S \cdot \rho} \quad (2.28)$$

mit

$$S = \frac{A_{tot}}{c_{tot} \cdot V} \quad (2.29)$$

- S - spezifische Oberfläche der luftgetragenen Aerosolpartikel, m²/kg
 ρ - Dichte des Aerosolmaterials, kg/m³
 A_{tot} - Oberfläche aller Partikel, m²
V - Kontrollvolumen, m³

Die gesamte Oberfläche der Partikel lässt sich somit wie folgt berechnen

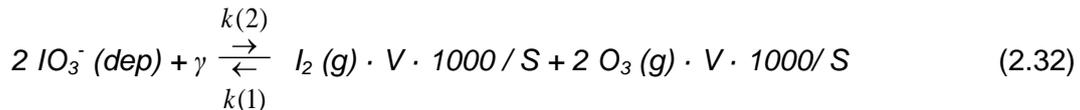
$$A_{tot} = \frac{6 \cdot V}{\rho} \sum \frac{c_i}{d_i} \quad (2.30)$$

Die mittlere Partikelgröße einer Klasse ist DSECM (COCOSYS, Subroutine media.f). Unter Einführung der effektiven Partikeldichte und Berücksichtigung der Größenverteilung wird die gesamte Oberfläche der Csl-Partikel zu

$$A_{CsI,tot} = \frac{6 \cdot V}{\rho_{CsI,eff}} \sum \frac{c_{CsI,i}}{DSECM(i)} \quad (2.31)$$

2.3.8.1.2 Radiolytische Zersetzung von IOx-Aerosol

Die radiolytische Zersetzung abgelagerter IOx-Aerosole wird formal wie die Rückreaktion der IOx-Bildung in der Atmosphäre modelliert /WEB 09/.



k(2) - Reaktionskonstante für radiolytische Zersetzung von IO₃⁻

k(1) - Reaktionskonstante für radiolytische IOx-Bildung

Die Rechnungen der AER-Versuche zur IOx-Zersetzung wurden zurückgestellt, da im ähnlichen Modell für die radiolytische Csl-Zersetzung größere Schwächen aufgetreten sind, die auch das ähnlich aufgebaute IOx-Modell betreffen (Details s. unten).

2.3.8.2 Versuche AER mit Csl-Aerosol

Mit der aktuellen COCOSYS-Version wurden die Versuche AER-1 und AER-3 nachgerechnet. Die wesentlichen Anfangs- und Randbedingungen sind in Tab. 2.12 zusammengestellt.

Tab. 2.12 Bedingungen in den zwei nachgerechneten AER-Tests

Bedingungen	AER-1	AER-3
Versuchsziel	Erkundung	Farbe
Aerosol	Csl	Csl
Coupon-Oberfläche	Quarzglas	Farbe (Ripulin)
Konzentration (mol I /m ²)	6x10 ⁻³	10 ⁻²
Temperatur (°C)	80	80
Relative Feuchte (%)	20	50 ^{*)}
Dosisleistung (kGy/h)	~ 1,5	1,1 ± 0,1

Bedingungen	AER-1	AER-3
Bestrahlungszeitraum (h)	30	30

¹⁾ Bei 80° C und rF ≈ 60 % beginnt CsI durch hygroskopische Wasseraufnahme flüssig zu werden.

Abb. 2.90 zeigt die einfache Nodalisierung der Versuchseinrichtung mit dem Reaktionsgefäß, dem Zirkulationsloop und dem Maypack-Filter.

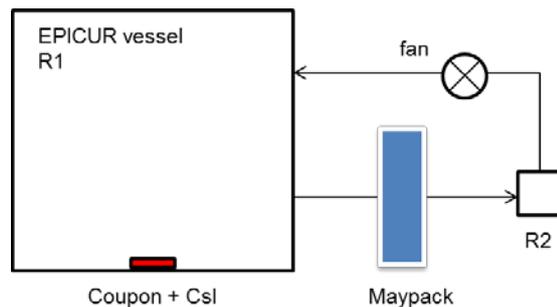


Abb. 2.90 COCOSYS-AIM-Nodalisierung der EPICUR-Anlage für die AER-Versuche

2.3.8.2.1 Ergebnisse der Nachrechnung von AER-1

Für die Rechnung zu AER-1 wurden die folgenden Reaktionen und Parameter gewählt (Auszug aus dem Eingabedatensatz):

```
'CsI decomp (fw)'  T
BAS 7,41D-07      @ default
EX 0.
REDFAC 0,75      @ defaut Reaktorfall 0,5
@
@ Iod-Ozon Reaktion
@
'lode_Ozone (fw)'  T
BAS 2.5D4        @ default 2,4D3
'O3_formation (bw)' T
BAS 1 1.00D-9    @ default 4,7E-11
BAS 4 1.00D-06   @ Stahl default 1,46E-5; hier Quarz
```

Für die CsI-Zersetzung ('CsI decomp (fw)') wurde der Defaultwert für die Reaktionsgeschwindigkeit, wie er aus den AER-Versuchen abgeleitet wurde (BAS = 7,41E-7 1/(s·kGy/h)), verwendet. Der Defaultwert für den Reduktionsfaktor REDFAC ist im Reaktorfall 0,5 und wurde hier auf 0,75 angehoben, da die Aerosolschicht vergleichsweise dünn ist und kein Mischaerosol vorliegt. Das Couponmaterial Quarzglas ist nicht als

Wandmaterial in COCOSYS-AIM modelliert. In der Rechnung wurde daher Stahl mit einer reduzierten O_3 -Zeretzungsrate angesetzt.

Ein Teil des entstehenden I_2 wird im Behälter sofort in IOx umgewandelt. Die ersten Rechnungen zu AER-1 zeigten, dass diese Reaktion deutlich zu gering ausfällt. Es wurde daher die Ozonproduktion in den folgenden Rechnungen stark (ca. Faktor 20) angehoben.

Die gerechneten Massenanteile von I_2 und IOx auf dem Maypack-Filter sind in Abb. 2.91 wiedergegeben. Sie stimmen recht gut mit den Messwerten überein, nur die Verzögerung des Einsetzens der I_2 -Freisetzung wird nicht erfasst. Diese Verzögerung kommt durch die langsame Diffusion von Wasserdampf in die Aerosolschicht und die ebenfalls langsame Diffusion von I_2 aus der Schicht ins Gas zustande. Beide Prozesse sind in dem einfachen Modell nicht erfasst. Die RI-Produktion war im Versuch niedrig und in der Rechnung ausgeschaltet.

Abb. 2.92 zeigt die gerechnete Abnahme der CsI-Masse und die entsprechende Zunahme von CsOH.

In Abb. 2.93 sind die gerechneten Konzentrationen im Gas von I_2 , IOx und Ozon dargestellt. Die Bestrahlung endet bei $t = 30$ h und die zwei Gase sowie das Aerosol werden durch die Rezirkulation schnell herausgefiltert bzw. lagern sich an den Behälteroberflächen ab.

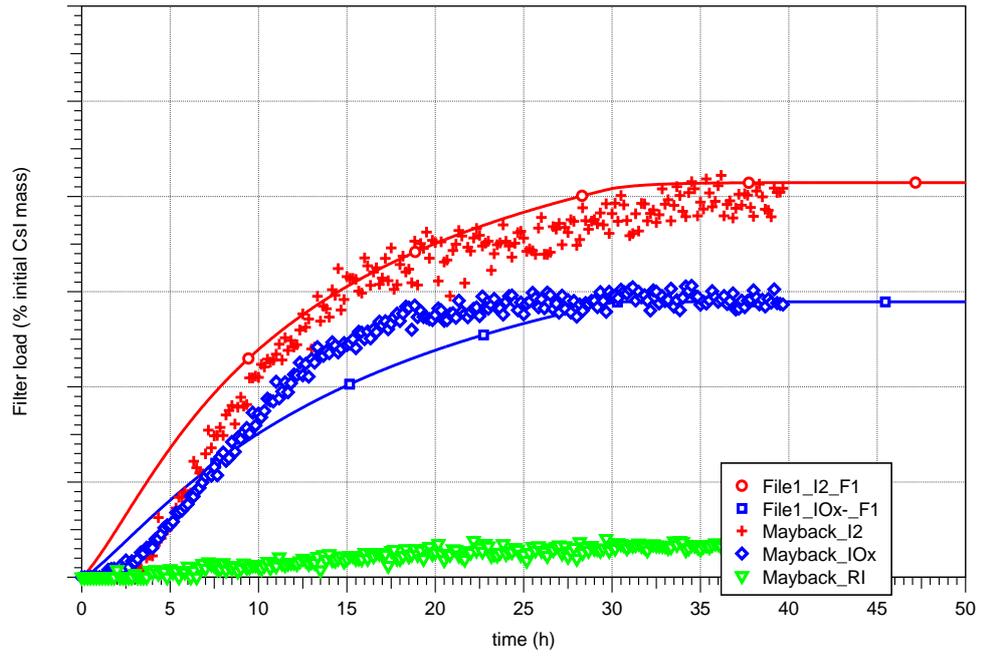


Abb. 2.91 STEM AER-1, gemessene und gerechnete I₂- und IOx-Anteile, die am Filter abgeschieden wurden

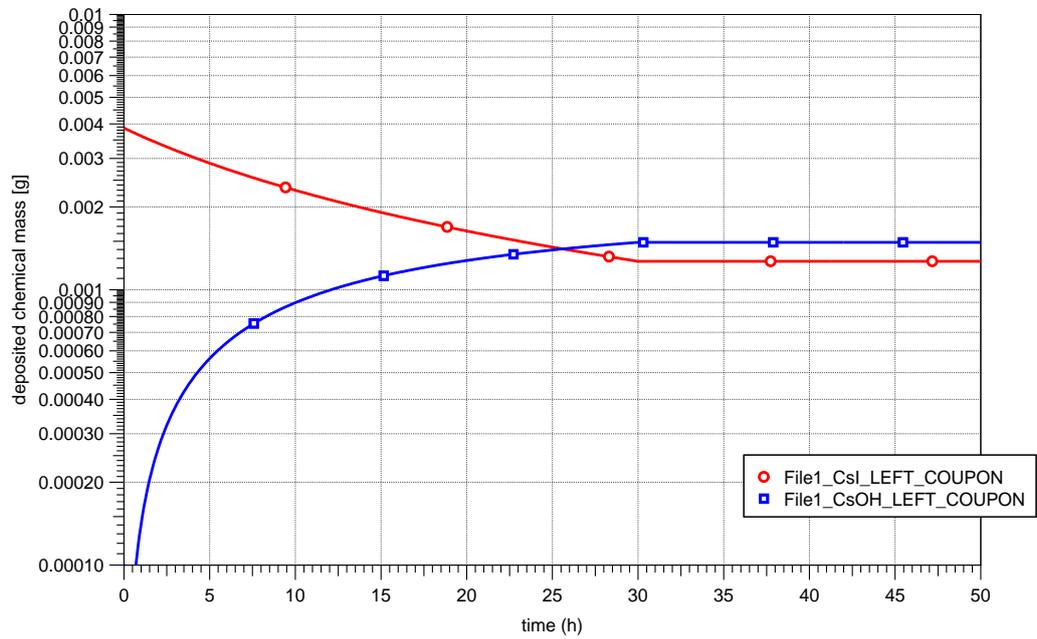


Abb. 2.92 STEM AER-1, CsI- und CsOH-Mengen am Coupon

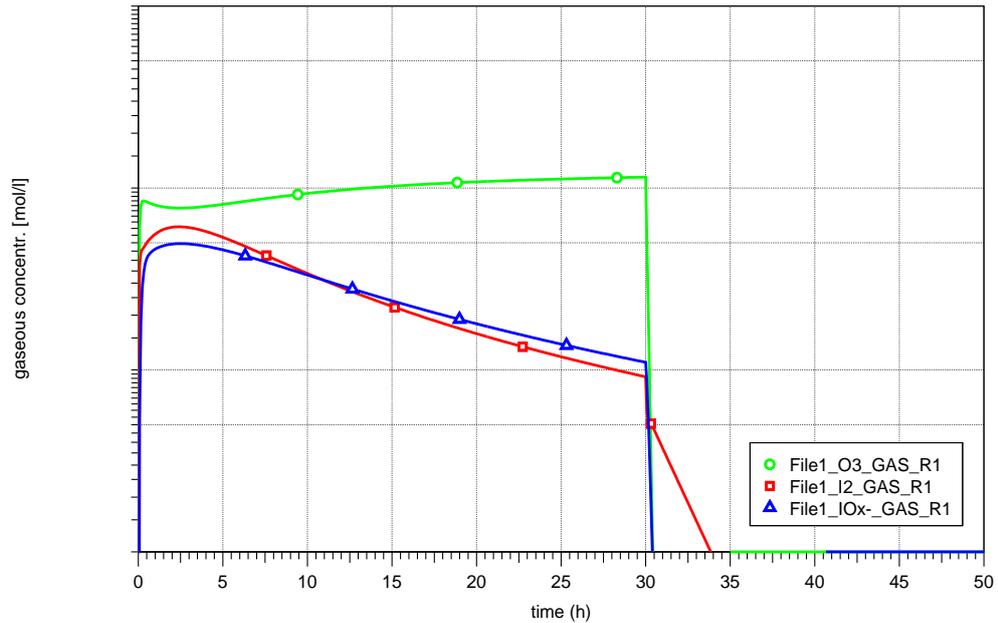


Abb. 2.93 STEM AER-1, gemessene und gerechnete I₂- und IOx-Konzentration in der Gasphase

2.3.8.2.2 Ergebnisse der Nachrechnung von AER-3

Die wesentlichen zwei Änderungen in AER-3 gegenüber AER-1 sind der Farbanstrich des Coupons (statt Quarzglas) und die höhere relative Feuchte (Tab. 2.12). Der dominante Prozess im Versuch ist die unmittelbare Chemisorption von I₂ auf dem darunterliegenden Farbanstrich (Abb. 2.94). Er ist nicht modelliert. Auch die mit dem Faktor $(rh - rh_0)$ modellierte Feuchteabhängigkeit stellte sich als zu stark heraus.

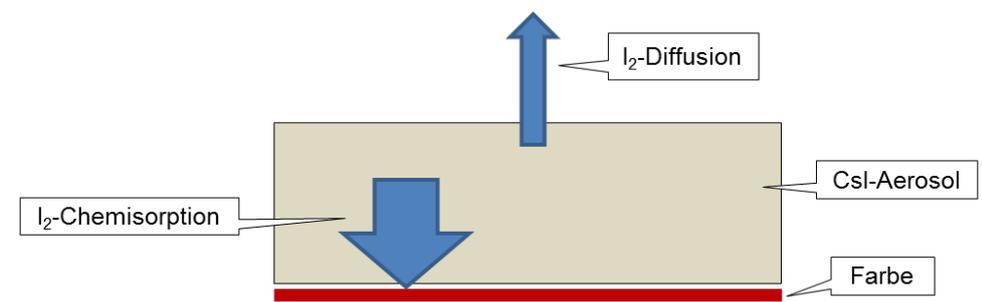


Abb. 2.94 Verhalten von freigesetztem I₂ in der Aerosolschicht in Gegenwart von Farbe

Um eine einigermaßen passable Übereinstimmung mit den Messergebnissen zu erreichen, mussten die folgenden Änderungen am Modell vorgenommen werden:

- Eliminierung der starken Feuchteabhängigkeit. Im Modell ist die Csl-Zersetzungsrate proportional $(rh - rh_0)$, wobei rh_0 der Schwellenwert (12 % rF) ist. Laut Modell sollte daher die Rate in AER-3 4,75-mal stärker als in AER-1 sein. Dies ist hier und in weiteren AER-Versuchen nicht der Fall. Der Feuchtefaktor wurde daher von ursprünglich $50 - 12 = 38$ auf 8, wie in AER-1, gesenkt.
- In AER-3 wird nur ca. 1/10 des freigesetzten I_2 in den Gasraum freigesetzt. 9/10 werden von der Farbe chemisorbiert. In der Rechnung wurde dies durch eine zusätzliche Reduktion des Faktors REDFAC um den rein empirischen Quotienten 0,1 berücksichtigt.
- Mit dem Modell können die I_2 -Transportvorgänge im Csl-Partikelbett über der Farboberfläche derzeit nicht abgebildet werden. Ebenso lässt sich der verzögerte Start der I_2 -Freisetzung ins Gas (in AER-3 ca. 7 h) derzeit nicht simulieren (Abb. 2.95).

Der gesamte Reduktionsfaktor ist somit $REDFAC = 0,75 / 4,75 / 10 = 1,6E-2$. Der Quotient 4,75 kompensiert den zu starken Feuchteinfluss und 10 berücksichtigt die Chemisorption auf Farbe. Die berechneten Anstiege der I_2 - und IOx-Konzentrationen stimmen jetzt sehr gut mit der Messung überein (Abb. 2.95). Organoiod (RI) ist nicht simuliert.

In der Rechnung wurde die geringe I_2 -Freisetzung infolge Chemisorption durch eine Reduktion der Csl-Zersetzung berücksichtigt. Diese Vereinfachung beschreibt die Realität nur teilweise. Die berechnete umgesetzte Csl-Menge ist daher um etwa einen Faktor 10 zu niedrig, d. h. im Versuch muss etwa ebenso viel Csl zersetzt worden sein wie im Test AER-1 und somit mehr als die Hälfte des (Abb. 2.96). Aus demselben Grund fällt auch die Abnahme der I_2 - und IOx-Konzentrationen im Gas bis $t = 30$ h zu gering aus (Abb. 2.97).

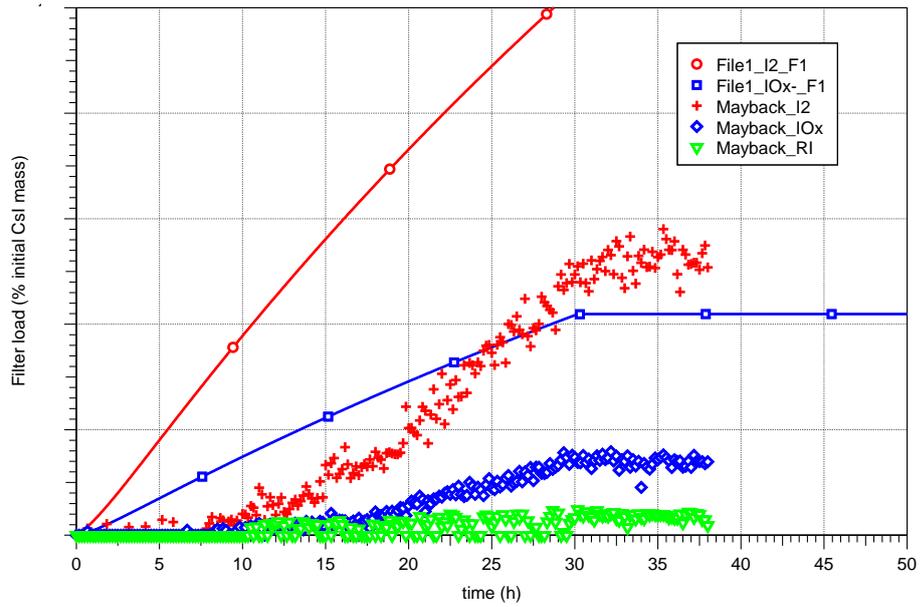


Abb. 2.95 STEM AER-3, gemessene und gerechnete I₂- und IOx-Anteile, die am Filter abgeschieden wurden

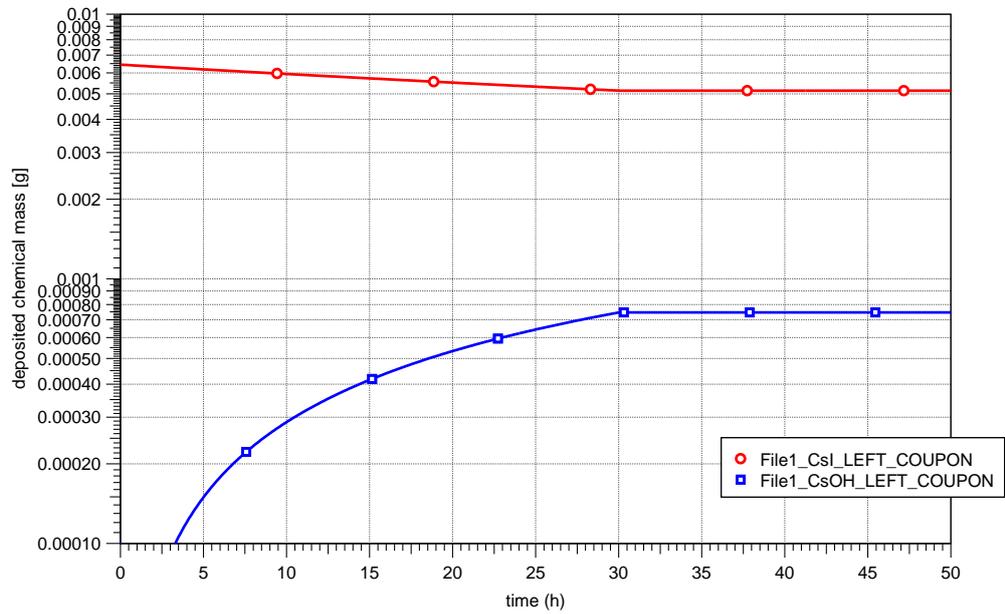


Abb. 2.96 STEM AER-3, CsI- und CsOH-Mengen am Coupon

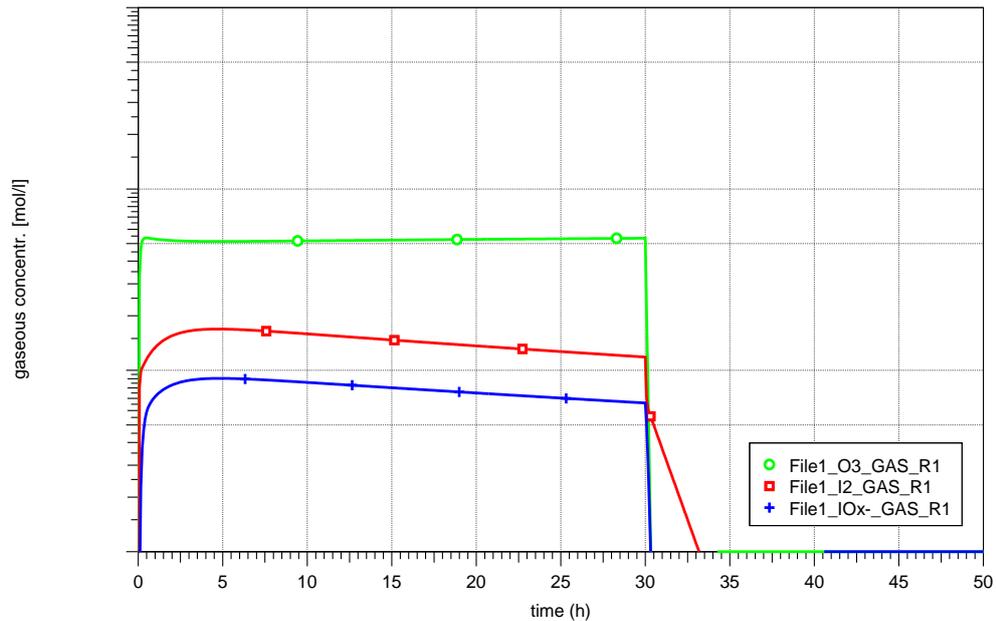


Abb. 2.97 STEM AER-3, gemessene und gerechnete I_2 - und IOx-Konzentration in der Gasphase

2.3.8.3 Schlussfolgerungen

Das neue AIM-Modell für die radiolytische Csl-Zersetzung liefert für den Basisversuch STEM AER-1 mit niedriger Feuchte und Quarzglas als Aerosolträgermaterial gute Ergebnisse. Bei der Nachrechnung von AER-3 mit höherer Feuchte und Farbe als Träger wird aber die I_2 - und die IOx-Freisetzung sehr stark überschätzt. Für eine adäquate Simulation sind folgende Verbesserungen am Modell erforderlich:

- Die Feuchteabhängigkeit muss stark reduziert oder ganz eliminiert werden.
- Die I_2 -Transportvorgänge in der Csl-Partikelschicht mit der schnellen Chemisorption von I_2 auf dem darunterliegenden Farbanstrich müssen modelliert werden.

Diese Ergänzungen am Modell sind insbesondere im Hinblick auf Reaktorrechnungen erforderlich, da in diesen Anwendungsfällen die Feuchte in der Containmentatmosphäre hoch ist und ein Großteil der Wände mit Farbe beschichtet ist.

2.4 Erste Validierung des umstrukturierten AFP-Moduls

In dem COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1532 wird das AFP-Hauptmodul in COCOSYS komplett neu strukturiert. Die umfangreichen programmtechnischen Änderungen und Erweiterungen erfordern neben Verifikationsrechnungen, in denen der korrekte Programmablauf überprüft wird, auch erneute Validierungsrechnungen. Im Rahmen des Vorhabens wurden daher erstmals eine Aerosolrechnung und eine Iodrechnung zur Validierung des umstrukturierten AFP-Hauptmoduls wiederholt. Dabei ist zu beachten, dass die Umstrukturierung des AFP-Hauptmoduls noch nicht abgeschlossen ist. Ausgewählt wurde VANAM M3 zum Aerosolverhalten und OECD-BIP1-G4 in Bezug auf das Verhalten von Iod an Farbe.

2.4.1 Validierung anhand des Aerosolversuchs VANAM M3

Für eine erste Validierung des Aerosolverhaltens des umstrukturierten AFP-Moduls wurde der Aerosolversuch VANAM M3 ausgewählt. Die in dem Battelle Modellcontainment durchgeführten VANAM-Experimente (Versuche zum Verhalten von Kernschmelzunfall-Aerosolen in einer Mehrraumgeometrie) wurden für die Untersuchung von Atmosphären- und Aerosolverhalten während eines schweren Störfalls durchgeführt. In dem für die Validierung ausgewählten Versuch VANAM M3 wurde das Abbauverhalten des hygroskopischen Aerosols NaOH unter trockenen und nassen Bedingungen untersucht. Die Modellcontainment-Geometrie ist in Abb. 2.98 zu sehen und stellt vereinfacht ein Containment eines Druckwasserreaktors dar (vgl. /SCH 99/).

Der Versuch ist in verschiedene Phasen aufgeteilt (vgl. /SCH 99/). Zunächst wird in den Raum R5 Dampf eingespeist, dies stellt das Ausdampfen des Primärkreises über den Quenchtank dar, danach folgt eine Phase ohne Einspeisung und anschließend erfolgt eine weitere Dampfeinspeisung in Raum R3. Die Dampfeinspeisung in R3 entspricht dem Kontakt der Schmelze mit dem Sumpf. Nach der ersten Dampfeinspeisung in R5 (oberer Dampferzeugerraum) werden 2,21 kg Aerosol in das Modellcontainment eingebracht. In der nachfolgenden Phase findet der sogenannte trockene Aerosolabbau statt. Danach wird erneut 0,7 kg NaOH-Aerosol in einem Dampf-Luft-Gemisch eingespeist. In der letzten Phase folgt nun der sogenannte nasse Aerosolabbau unter erneuter Dampfeinspeisung. Die gemessenen NaOH-Konzentrationen sind in Abb. 2.99 aus /SCH 99/ dargestellt.

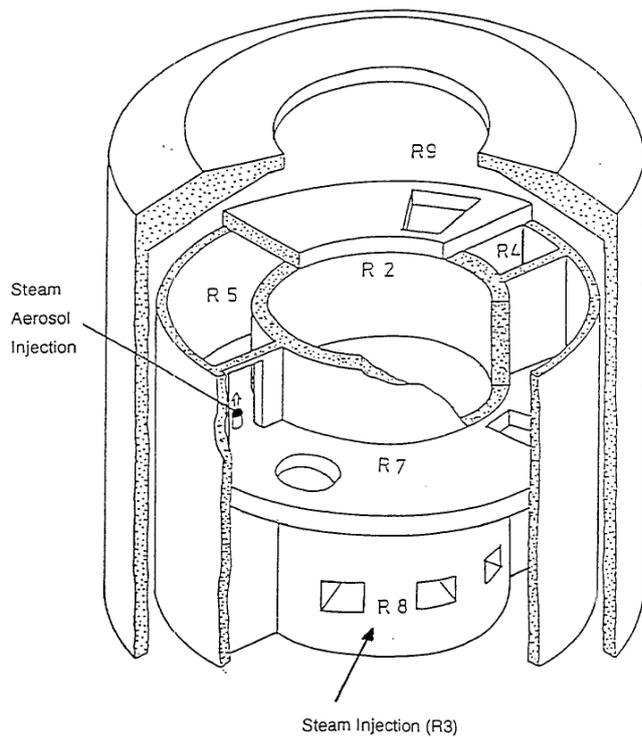


Abb. 2.98 Battelle Modellcontainment /SCH 99/

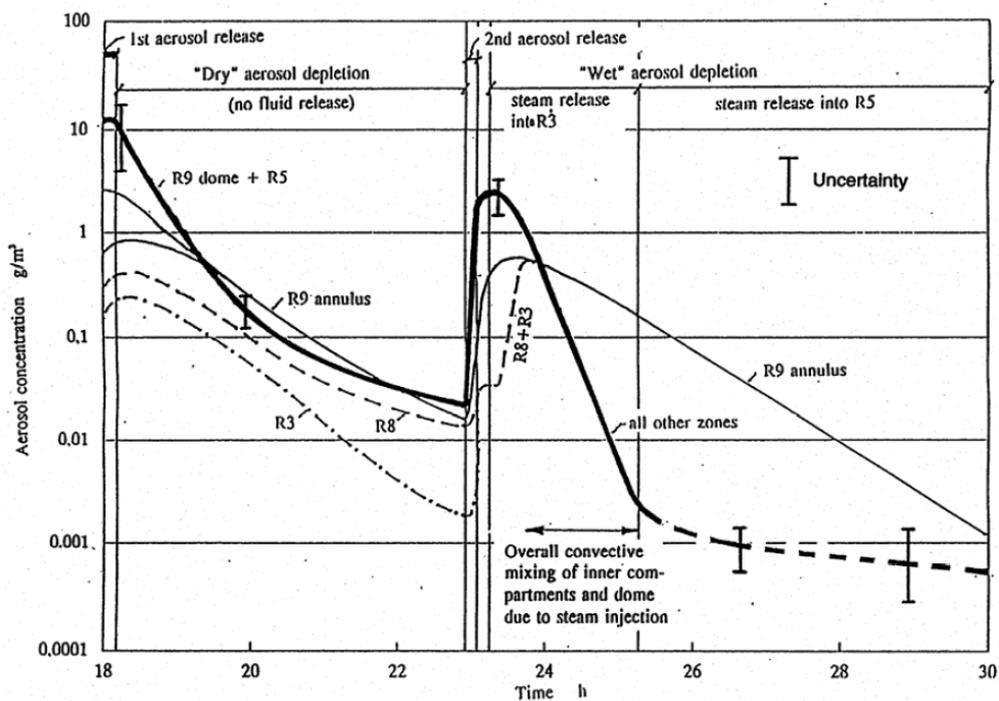


Abb. 2.99 VAMAM M3, gemessene NaOH-Konzentrationen /SCH 99/

Für die Validierung des umstrukturierten AFP-Moduls wird der basierend auf den in /SCH 99/ verwendete (siehe Abb. 2.100) und für Regressionstests qualifizierte Datensatz herangezogen.

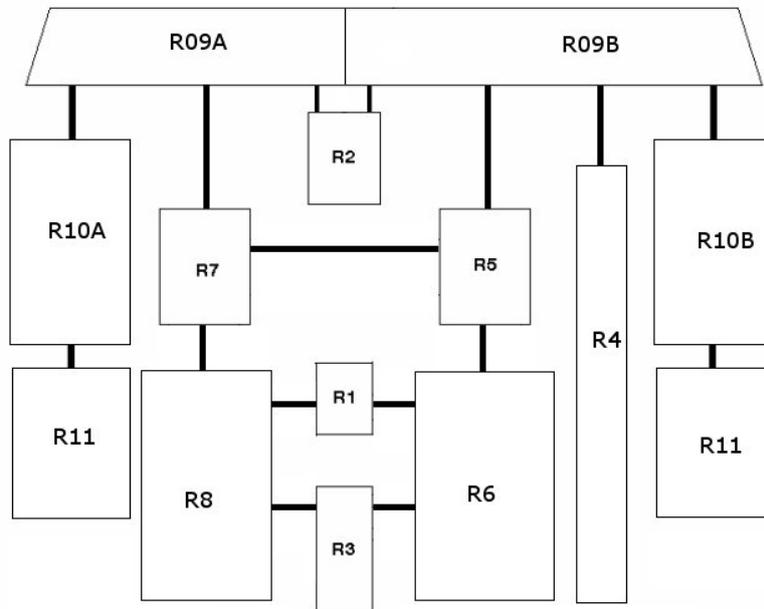


Abb. 2.100 COCOSYS-Nodalisierung VANAM M3

In den nachfolgenden Abbildungen (Abb. 2.101 – Abb. 2.103) sind die experimentell ermittelten NaOH-Konzentrationen in den verschiedenen Räumen R8, R9A und R10A im Vergleich mit den NaOH-Konzentrationen, die mit verschiedenen Programmversionen berechnet wurden, dargestellt. Die Ergebnisse der Rechnung sind in den Abb. 2.101 – Abb. 2.103 als blaue Kurve mit der Bezeichnung (V2.4v3+_org) dargestellt. Dieser Datensatz wurde für die weiteren Vergleichsrechnungen für verschiedene Fälle angepasst:

1. für das neue Wärmeübergangsmodell CO1 (grüne Kurve V2.4v3+_co1),
2. für die Entwicklerversion V3.0dev_r6380_afp unter Verwendung des alten AFP (pinke Kurve) und
3. für das umstrukturierte AFP V3.0dev_r6380_nafp (orange Kurve).

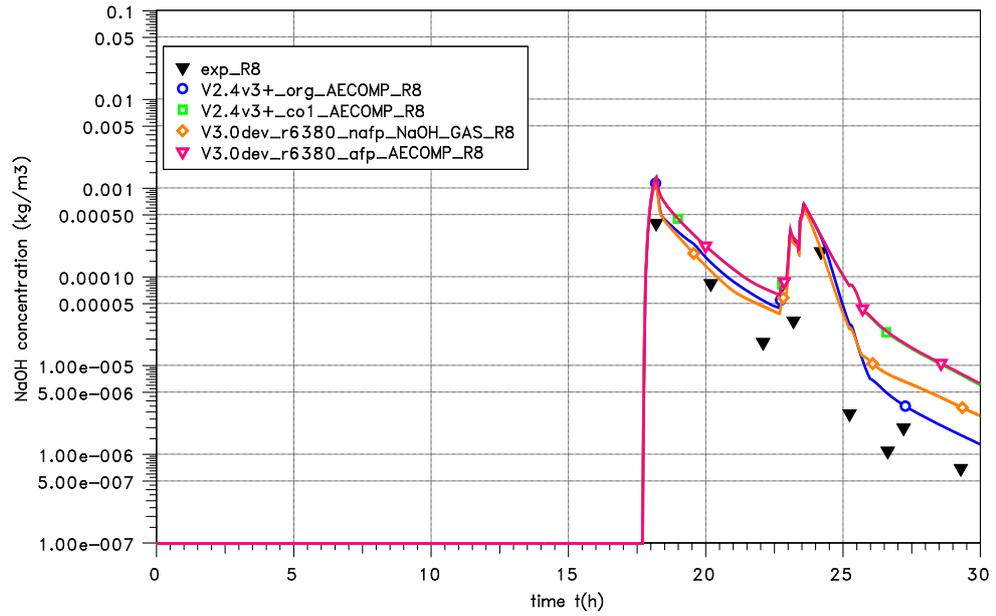


Abb. 2.101 Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R8 mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen

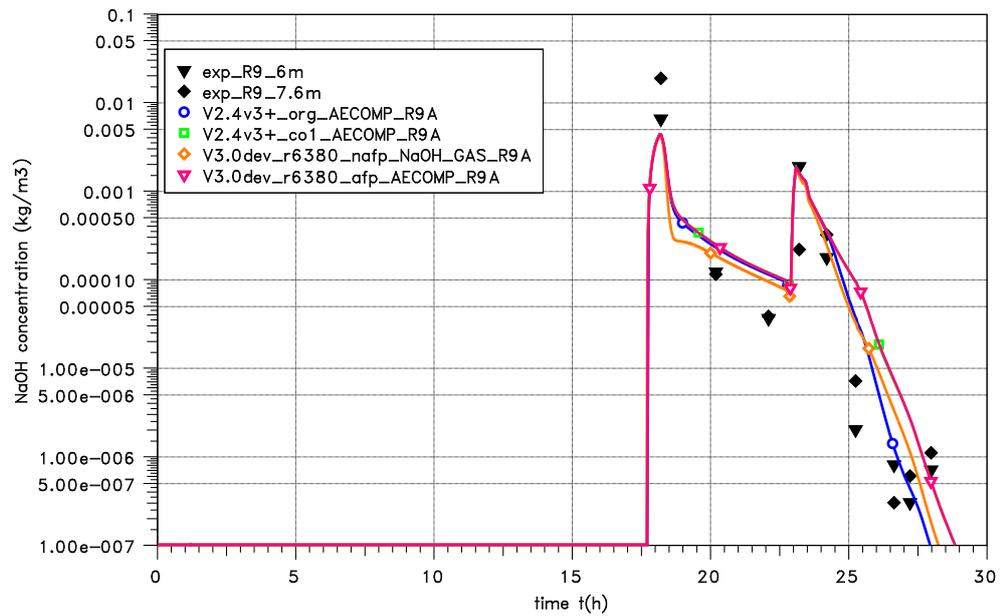


Abb. 2.102 Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R9A mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen

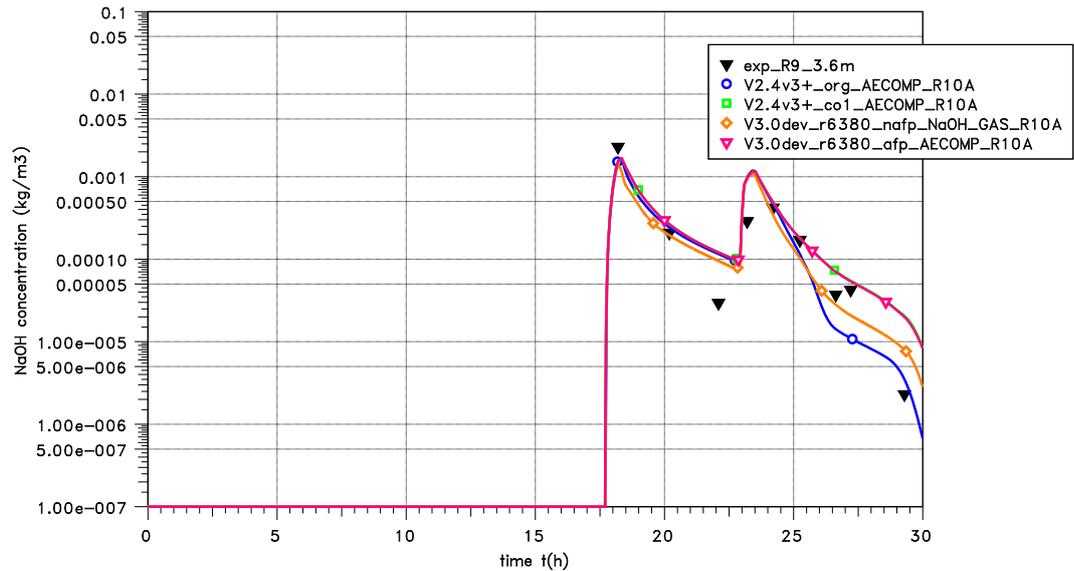


Abb. 2.103 Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R10A mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen

In Abb. 2.101 sind die mit den verschiedenen COCOSYS-Programmversionen (V2.4v3+_org, V2.4v3+_co1, V3.0dev_r6380_afp und V3.0dev_r6380_nafp) berechneten NaOH-Konzentrationen in Raum R8 den experimentell gemessenen Daten gegenübergestellt. Die blaue Kurve (V2.4v3+_org) zeigt den NaOH-Konzentrationsverlauf mit der bisher qualifizierten COCOSYS-Version V2.4. Die berechnete Aerosolkonzentration ist in guter Übereinstimmung mit den Messwerten. Durch die Verwendung eines neuen Wärmeübergangsmodells CO1 in COCOSYS (V2.4v3+_co1 und V3.0dev_r6380_afp) verringert sich der nasse Aerosolabbau ($t > 24$ h) und die berechneten Aerosolkonzentrationen liegen am Versuchsende ca. um einen Faktor 5 höher als die ohne CO1-Modell berechnete NaOH-Konzentration. Der Vergleich zwischen der mit der neuen AFP berechneten NaOH-Konzentration auch unter Verwendung des neuen CO1-Wärmeübergangsmodells mit den Ergebnissen der alten AFP Versionen bestätigt, dass die Konzentrationsunterschiede während der nassen Aerosolabbau-phase nicht der Umstrukturierung des AFPs geschuldet sind, sondern vielmehr an dem verwendeten Wärmeübergangsmodell CO1 liegen. Die mit dem umstrukturierten AFP berechnete NaOH-Konzentration zeigt eine gute Übereinstimmung sowohl mit dem ursprünglich mit COCOSYS berechneten Konzentrationsverlauf (V2.v3+_org) als auch mit den Messwerten, auch in der Phase des nassen Aerosolabbaus. Am Versuchsende liegt die mit dem neuen AFP berechnete NaOH-Konzentration nur um einen Faktor 2 höher als die mit der Version 2.4v3+ berechnete Konzentration.

Die Konzentrationsunterschiede des NaOH Aerosols sind innerhalb der verschiedenen Programmversionen für den Raum R9A (Dom) nicht stark ausgeprägt (vgl. Abb. 2.102). Auch im Dom ist festzustellen, dass die mit dem neuen CO1-Modell und alten AFP berechneten Programmversionen oberhalb der mit dem alten Wärmeübergangsmodell berechneten NaOH-Konzentration liegen, allerdings am Versuchsende in sehr guter Übereinstimmung mit den Messwerten liegen. Die Ergebnisse mit dem umstrukturierten AFP ergeben im Dom ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung sowohl mit den Messwerten als auch mit den V2.4v3+_org berechneten Werten.

In Abb. 2.103 zeigt sich für den Raum R10A, wie auch für Abb. 2.101 bereits diskutiert, eine Abweichung zwischen den Ergebnissen der mit V2.4v3+_org berechneten und der mit dem neuen CO1-Modell und alten AFP berechneten NaOH-Konzentrationen. Ebenfalls weist die mit dem umstrukturierten AFP berechnete Aerosolkonzentration eine gute Übereinstimmung mit den ursprünglich berechneten Ergebnissen auf, d. h. der mit V3.0dev_r6380_nafp berechnete NaOH-Konzentrationsverlauf liegt genau zwischen den mit V2.4v3+_org und V2.4v3+_co1/V3.0dev_r6380_afp berechneten Konzentrationsverläufen.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass das umstrukturierte AFP für den Versuch VANAM M3 in sehr guter Übereinstimmung die Konzentrationsverläufe im Vergleich mit der ursprünglichen Programmversion wiedergibt und die Unterschiede der Ergebnisse u. a. auf die Verwendung des neuen Wärmeübergangsmodells zurückzuführen sind.

2.4.2 Validierung anhand des Iodversuchs BIP1-G4

Das Iodmodul AIM ist ein Bestandteil des AFP-Moduls und wird im Rahmen der Umstrukturierung des neuen AFP ebenfalls umgestellt. In diesem Vorhaben wurde das zurzeit vorhandene, umstrukturierte AIM-Modul erstmals an einem Versuch validiert. Dazu wurde in einem ersten Schritt ein einfacher Einraumversuch aus dem OECD-BIP1-Programm ausgewählt. Der Versuch G4 ist ein Labortest, in dem das Ablagerungs- und Resuspensionsverhalten von gasförmigem molekularem Iod ($I_2(g)$) unter Einfluss einer konstanten relativen Feuchte auf mit Ripolin beschichteten Coupon-Farboberflächen untersucht wurde (siehe Abb. 2.104, /BEC 15/). Der Versuch G-4 wird mit einer relativen Feuchte von 70 % und einer Temperatur von 70 °C durchgeführt.

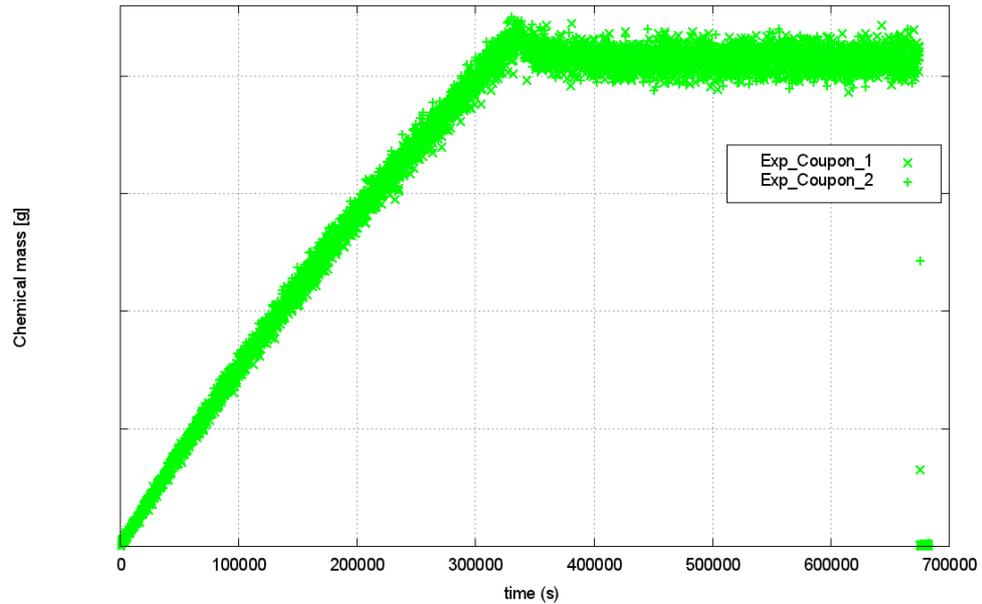


Abb. 2.104 BIP1-G4, Auf dem Farbcoupon (Ripolin, gealtert) gemessene abgelagerte Iodmasse

In der ersten Versuchsphase, der sogenannten Beladungsphase, wird ein Farbcoupon von einem $I_2(g)$ /Luft-Gemisch überströmt. Nach $t \sim 330\,000$ s ist die erste Versuchsphase zu Ende und die „Wartephase“ beginnt. Nach dieser Wartephase von ca. $6\,500$ s beginnt die „Spülphase“, in der der Farbcoupon von reiner Luft überströmt wird. Bereits in der „Wartephase“ und zu Beginn der „Spülphase“ wird die auf dem Coupon physisorbierte Menge wieder in die Atmosphäre freigesetzt. Das auf dem Farbcoupon verbleibende Iod ist chemisorbiertes Iod und wird nicht mehr von der Oberfläche freigesetzt.

In Abb. 2.105 sind die Simulationsergebnisse, die für den Versuch G-4 mit verschiedenen Programmversionen erhalten wurden (V2.4v3+_r6276, V3.0dev_r6380 mit altem AFP, V3.0dev_r6380 mit neuem AFP), dargestellt. Der Vergleich soll zeigen, dass sich durch die Umstrukturierung des AFP-Moduls die Rechenergebnisse im Vergleich mit der qualifizierten Programmversion V2.4v3+ und der COCOSYS-Programmversion V3.0dev nicht geändert haben. In Abb. 2.105 ist zum einen die physisorbierte I_2 -Masse auf der Farbe (schwarze Kurven) und zum anderen die chemisorbierte Iodmenge auf der Farbe (rote Kurven) abgebildet. Die jeweiligen Ablagerungsmengen für I2_PAINT und ICH_PAINT bzw. Ichs_Left (V3.0dev_r6380-nafp) werden mit exakter Übereinstimmung von den verschiedenen Programmversionen berechnet.

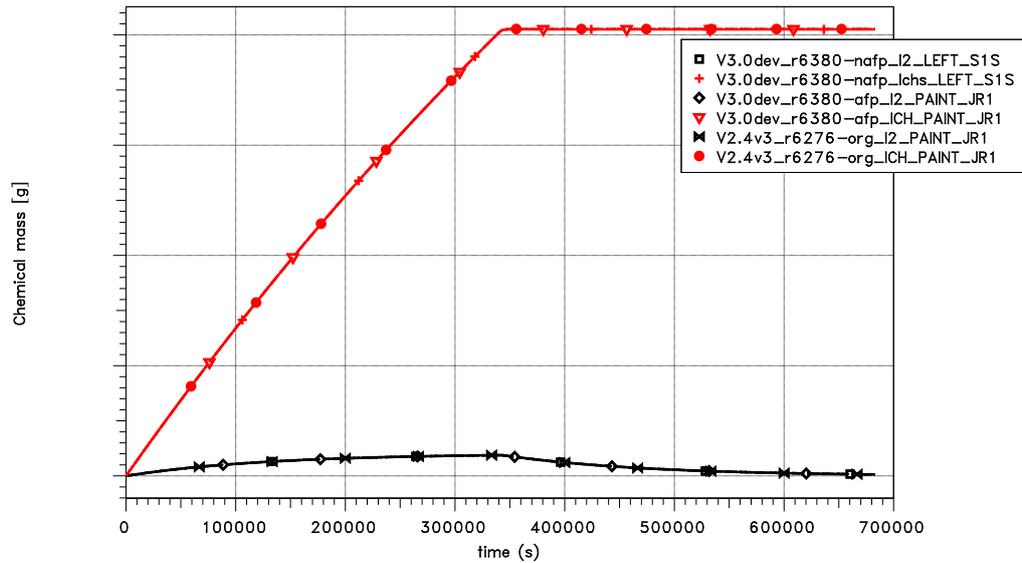


Abb. 2.105 BIP1 – G-4, mit COCOSYS berechnete physisorbierte und chemisorbierte Iodmenge auf der Farbe Ripolin

Die bis zu diesem Zeitpunkt abgeschlossene Integration des Iodmoduls AIM in das neue AFP-Modul ist gelungen und die ersten Testrechnungen zeigen keine Abweichungen.

2.5 Core Concrete Interaction (CCI)

2.5.1 Großmaßstäbliche MCCI-Versuche MOCKA bei KIT

Das Modell MEDICIS ist für die Simulation der physikalischen und chemischen Vorgänge bei der Wechselwirkung einer Kernschmelze mit Betonstrukturen im Sicherheitsbehälter (im Fall eines Kernschmelzunfalls mit RDB-Versagen) zuständig. Diese Wechselwirkungen werden in der Reaktorsicherheitsforschung als MCCI (**M**olten **C**orium **C**oncrete **I**nteraction) bezeichnet und das Modul in COCOSYS übergeordnet als CCI-Modul.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden Experimente an der MOCKA-Anlage bei KIT mit COCOSYS MEDICIS nachgerechnet. Dazu wurden MCCI-Experimente aus der MOCKA-Versuchsserie /FOI 13/, /FOI 14a/, /FOI 14b/, die zurzeit beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführt werden, mit der Zielsetzung ausgewählt, die Wechselwirkung einer oxidischen und metallischen Simulatschmelze mit Beton in geschichteter Konfiguration zu untersuchen. Besonderes Merkmal dieser Versuche ist die

Heizungsmethode durch die Zufuhr eines reaktiven Stoffstroms. Dadurch ist es möglich, Betonstrukturen mit einer Armierung zu verwenden. Für die Interpretation der Versuche und die Diskussion zur Auslegung weiterer Versuche ist es sinnvoll, verschiedene Experimente der MOCKA-Serie zu simulieren. Entsprechend des Änderungsantrages wurde daher auf die Simulation von kleinskaligen Versuchen verzichtet.

In den MOCKA-Versuchen wird mit einer Thermitreaktion (auf Eisen-Aluminium-Basis) in einem zylindrischen Tiegel mit einem Durchmesser von ca. 25 cm, bestehend aus Bodenfläche und anfänglich 70 cm hohen Seitenwänden aus Beton, eine oxidische (Al_2O_3 , CaO) und metallische (Fe, Zr) Schmelze erzeugt, die im weiteren Verlauf mit dem Boden und den Seitenflächen wechselwirkt. Dabei stellt sich durch die Dichteunterschiede zwischen Oxid und Metall eine stabile Schichtung mit einer unten liegenden Metallschicht und einer oben liegenden Oxidschicht ein, was in einem wirklichen Reaktorszenario als typisch für den späteren Verlauf der Wechselwirkung nach beträchtlicher Anreicherung der Oxidschmelze mit erschmolzenem Beton in der Reaktorgrube gilt.

Durch Einbringung von vorportionierten Paketen mit chemisch reaktiven Stoffen (Thermit- und Zirkonimpulver) über eine Zufuhreinrichtung (s. Abb. 2.106) wird der Schmelze kontinuierlich Wärme (und Stoff) zugeführt. Diese Wärmezufuhr soll die innere Beheizung einer Kernschmelze aufgrund von Nachzerfallswärme simulieren.



Abb. 2.106 MOCKA-Anlage mit Versuchstiegel (links im Bild), in dem die Wechselwirkung der Schmelze mit Betonstrukturen stattfindet, sowie der Zufuhreinrichtung für chemisch reaktives Material (portioniertes Thermit-Pulver auf Fe/Al-Basis, Zr). Bildquelle: KIT

Der Vorteil dieser Heizmethode gegenüber anderen bislang verfügbaren Experimenten (OECD-CCI, BETA, COMET, VULCANO, AREVA) liegt darin, dass ein großer Anteil der Reaktionswärme in der oben liegenden oxidischen Schmelze freigesetzt wird, so dass signifikante Betonerosion durch die Oxidschmelze als auch – im unteren Bereich des Tiegels – durch die Metallschmelze beobachtet wird. Bislang wurden zur Validierung der Modelle entweder rein oxidische Experimente (ohne Schichtung) betrachtet (z. B. OECD-CCI) oder geschichtete Experimente, bei denen durch Induktion hauptsächlich die Metallschmelze beheizt wurde und bei denen man auch nur Erosion im Wesentlichen durch die Metallschmelze beobachten konnte (z. B. BETA, COMET).

Ein weiterer Vorteil der Beheizungsart ist, dass die Einbringung der Wärme auf den Bereich der Schmelze eingegrenzt wird und man (im Unterschied zu Experimenten mit induktiver Beheizung bzw. direkter Stromheizung) den Beton mit einer Armierung ausstatten kann (siehe Abb. 2.107), um den Einfluss der Armierung auf die Wechselwirkung zu untersuchen und die Übertragbarkeit der Experimente auf die Realität zu erhöhen.



Abb. 2.107 Ansicht der Armierung in Boden-/Seitenwänden des Tiegels vor dem Eingießen des Betons (Ansicht von unten). Bildquelle: KIT

Allerdings bringt die Heizmethode in MOCKA auch zusätzliche Komplexität in die Problemstellung ein:

- Die Nachführung von Wärme bedingt hier die Nachführung von zusätzlicher Stoffmasse. Diese lässt das Volumen der Schmelze bis zum Überlaufen des Tiegels anschwellen. In einer Höhe von mehr als 70 cm über dem anfänglichen Bodenniveau des Tiegels sind die Seitenwände des Tiegels aus diesem Grund mit einem keramischen Schutzmaterial (ZrO_2) versehen, das das Aufschmelzen der Seitenwand bzw. des oberen Tiegelrandes verhindert.
- Tatsächliches Niveau der Wärmeleistungsfreisetzung und deren Lokalisierung innerhalb der beiden Schichten werden durch chemische Reaktionsprozesse bestimmt. Da der Einfluss der Wärmeleistung auf die Wechselwirkung groß ist, ergeben sich gesteigerte Anforderungen an die Simulation der beteiligten chemischen Reaktionen sowie der Transportvorgänge von Reaktionspartnern und -produkten innerhalb der Schmelze.

2.5.2 Randbedingungen für COCOSYS MEDICIS

Für die Simulation der Versuche wurde in MEDICIS die Modelloption zur Verwendung von effektiven Wärmeübergangszahlen an den Grenzflächen zwischen Schmelze und Beton bzw. zwischen den Schmelzeschichten verwendet. Diese Modelloption wurde von der GRS in das Modell MEDICIS eingebracht, da andere, mechanistische Beschreibungen aufgrund der Komplexität der beteiligten Phänomene bei MCCI bislang nicht eindeutig abgesichert werden konnten.

Aus der MOCKA-Versuchsserie wurden zwei Experimente ausgewählt:

- MOCKA6.1 – Wechselwirkung einer unteren Metallschicht (anfänglich: Fe, Zr) und einer oben liegenden Oxidschicht (anfänglich: Al_2O_3 , CaO) mit Betonstrukturen (Boden, Seitenwände) aus Kalk-/Sandstein (LCS)-Beton.
- MOCKA3.1 – Wechselwirkung einer unteren Metallschicht (anfänglich: Fe, Zr) und einer oben liegenden Oxidschicht (anfänglich: Al_2O_3 , CaO) mit Betonstrukturen (Boden, Seitenwände) aus silikatischem Beton, der ca. 6 Gew.-% Armierung (Fe) enthält.

Die unterschiedlichen Zusammensetzungen des Betons werden in Tab. 2.13 verglichen.

Tab. 2.13 Chemische Zusammensetzung des LCS-Betons in MOCKA6.1 im Vergleich zum silikatischen Beton mit 6 Gew.% Fe in MOCKA3.1

Betonbestandteile	MOCKA6.1 Massenanteil [-]	MOCKA3.1 Massenanteil [-]
SiO ₂	0,288	0,6608
CO ₂	0,218	0,0227
Al ₂ O ₃	0,136	0,0630
CaO	0,296	0,1250
H ₂ O	0,062	0,0685
Fe	-	0,06

Da die Simulation der konkreten Versuchsführung bei den MOCKA-Experimenten (mit der Wärmezufuhr über chemische Reaktionen mit nachgeführten Stoffen) „Neuland“ in der Anwendung von MCCI-Simulationscodes ist, waren zunächst einige Untersuchungen im Hinblick auf eine realistische und konsistente Simulation der experimentellen Randbedingungen nötig. Beispielsweise musste die rechnerisch simulierte Wärmeleitung durch chemische Reaktionen aufgrund von Einspeisetabellen für die Materialien Eisen(II,III)-Oxid (Fe₃O₄), Aluminium, Zirkonium mit Abschätzungen der Experimentatoren bei KIT abgeglichen werden. Hier wurde z. B. ein fehlerhafter Stoffwert in der Stoffwertedatenbank MDB von MEDICIS identifiziert und korrigiert. Ferner mussten geeignete Randbedingungen in MEDICIS erprobt werden, um das Überlaufen von Schmelze im experimentellen Tiegel sowie die Auskleidung des oberen Tiegelbereichs mit einem keramisch-inerten Material zu berücksichtigen.

Für die betrachteten Experimente wurden dann verschiedene Variationsrechnungen durchgeführt, bei denen u. a. die Verteilung der Wärmeübergangskoeffizienten in der Metallschmelze am Boden sowie an den seitlichen Grenzflächen zum Beton hin variiert wurden, um Best-Estimate-Parameterkonfigurationen mit akzeptabler Übereinstimmung zu experimentellen Daten zu finden. Hierbei ist es besonders wichtig, die erdichten Volumina in Experiment und Rechnung miteinander zu vergleichen, da dies Hinweise auf die Gesamtwärmebilanz liefert. Nachfolgend sind die Ergebnisse der letzten aktuellen Nachrechnung wiedergegeben, die neuere Erkenntnisse auch zur Schmelzetemperatur nutzen. Weitere Details sind in /BAK 14/ dokumentiert.

2.5.3 Ergebnisse der Nachrechnung von MOCKA6.1

In neueren MOCKA-Versuchen (MOCKA7.1) wurde die Schmelztemperatur mit ca. 1 550 – 1 600 °C gemessen und liegt damit deutlich niedriger als die bisher berechneten 1 850 °C bzw. hier ca. 1 700 °C für die aktuelle Rechnung. Für die nachfolgend diskutierten Ergebnisse wurden diese Werte zum Vergleich genutzt.

Ohne Armierung im Beton können zwischen Oxid und Beton Wärmeübergangszahlen oberhalb eines Bereiches verwendet werden, wie sie in rein oxidischen Experimenten (z. B. OECD-CCI) beobachtet wurden. Für die Nachrechnung von MOCKA6.1 wurden zunächst 300 W/m² und dann 1 000 W/m² (siehe Abb. 2.108) angesetzt, wobei vermutlich die höhere Wärmeleitfähigkeit von Al₂O₃ gegenüber realistischen Coriumschmelzen eine Rolle spielt. Mit diesem auf 1 000 W/m² erhöhten Wärmeübergangskoeffizient vom Oxid an die seitliche Grenzfläche konnte eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erzielt werden, da mit dem niedrigeren Wert das erodierete Volumen unterschätzt wurde. Der Einfluss ist deutlich in Abb. 2.108 zu sehen.

Zwischen Metall und Beton müssen tendenziell höhere Wärmeübergangszahlen im Bereich von ~500 – 1 000 W/m²K als im Oxid verwendet werden, was aufgrund der besseren Wärmetransporteigenschaften von Fe gegenüber der oxidischen Schmelze auch plausibel ist und schon in der Vergangenheit bei der Validierung von COMET- bzw. BETA-Experimenten zur Verwendung kam. Dabei muss eine mögliche nicht-isotrope Erosion mit einem entsprechenden Verhältnis von seitlichem zu axialem Wärmeübergangskoeffizienten im Input vorgegeben werden.

Die aktuellen Ergebnisse (Abb. 2.108) unter Verwendung dieser empirisch ermittelten effektiven Wärmeübergangszahlen zeigen generell eine akzeptable Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (Tab. 2.14). Weitere Ergebnisse der Nachrechnung zu den MOCKA6.1-Versuchen werden in Kap. 3.1.5 zusammen mit den Arbeiten zu ASTEC MEDICIS diskutiert.

Tab. 2.14 MEDICIS-Rechenergebnisse für MOCKA6.1 (mit LCS-Beton) unter Verwendung von angepassten Wärmeübergangskoeffizienten

Parameter	Experiment	MEDICIS
Erodiertes Betonvolumen durch die Metallschicht (l)	~ 17...18	33
Erodiertes Betonvolumen durch die Oxidschicht (l)	~ 84	86
Gesamtes erodiertes Volumen (l)	~ 101...102	119
Seitenwand-Erosion durch die Oxid-Schicht (cm)	~ 12...15	15,1
Seitenwand-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 9...12	9,6
Axiale-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 4	5,0

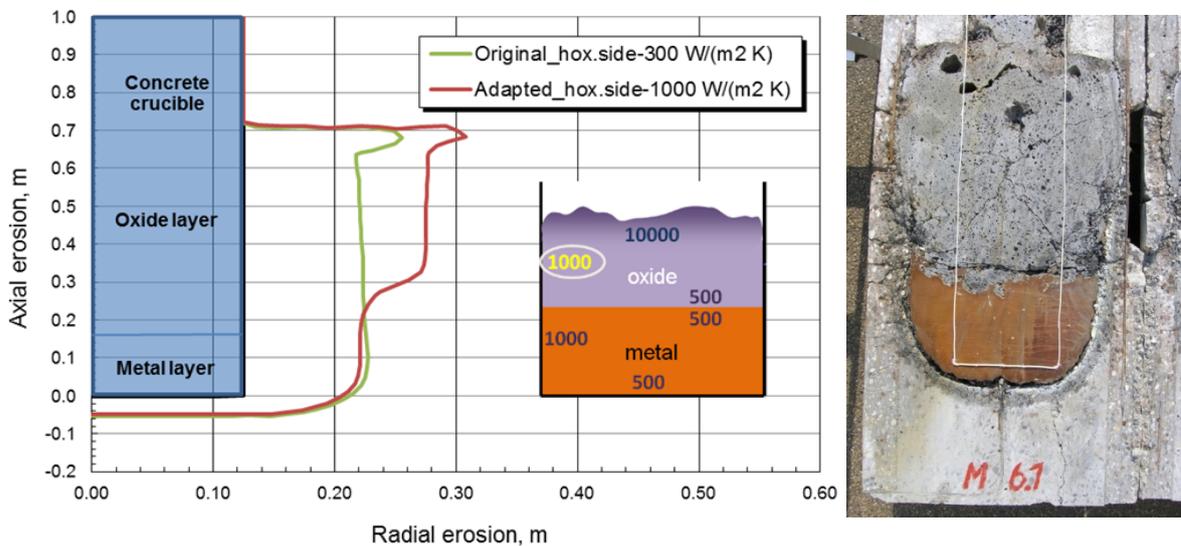


Abb. 2.108 MOCKA6.1, qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation der Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von 300 W/m²K auf 1 000 W/m²K

2.5.4 Ergebnisse der Nachrechnung von MOCKA3.1

Die oben diskutierten Versuche MOCKA6.1 mit LCS-Beton z. B. zeigen eine ausgedehnte seitliche Erosion im Vergleich zur axialen Erosion. MOCKA-Versuche mit silikatischem Beton **ohne** Armierung zeigen dagegen eine ausgeprägte axiale Erosion. MOCKA-Versuche mit silikatischem Beton **mit** Armierung, wie nachfolgend am Beispiel von MOCKA3.1 diskutiert, zeigen wiederum eine eher isotrope Erosion. Die Ursache für den Einfluss des Betontyps bzw. der Armierung auf das 2D-Erosionsverhalten ist

noch nicht geklärt. Dabei ist zu berücksichtigen, dass verbleibende Unsicherheiten bei den experimentellen Randbedingungen noch beträchtlich sind.

Wie auch für MOCKA6.1 wurde der verwendete Wärmeübergangskoeffizient vom Oxid an die seitliche Grenzfläche von 300 W/m²K auf 1 000 W/m²K erhöht. Außerdem wurde für die Wärmeübertragungskoeffizienten vom Metall an die Wand axial und radial jetzt 1 600 W/m²K verwendet. Dabei ist zu berücksichtigen, dass aufgrund der jetzt vorhandenen Armierung des Betons auch eine höhere Temperatur für die Betonzerstörung eingesetzt wurde. Diese wurde jetzt auf den Schmelzpunkt von Fe (1 809 K) festgelegt. In Rechnungen für Experimente ohne Armierung im Beton wurden bislang niedrigere Werte im Bereich 1 500 K – 1 700 K, hier 1 573 K verwendet.

Die Ergebnisse (Abb. 2.109) für MOCKA3.1 mit silikatischem Beton inkl. 6 Gew.-% Armierung unter Verwendung empirischer, effektiver Wärmeübergangszahlen zeigen generell akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten (Tab. 2.15). Das erodierte Betonvolumen wurde um ca. 20 % unterschätzt. Die berechnete Schmelzetemperatur liegt jetzt bei ca. 1 750 °C und damit immer noch etwas oberhalb der in MOCKA7.1 gemessenen Werte von 1 550 – 1 600 °C.

Tab. 2.15 MEDICIS-Rechenergebnisse für MOCKA3.1 (mit silikatischem Beton inkl. 6 Gew.-% Armierung) unter Verwendung einer aufgrund der Armierung erhöhten Schnittstellentemperatur für die Betonzerstörung

Parameter	Experiment	MEDICIS
Erodiertes Betonvolumen durch die Metallschicht (l)	~ 11,5	9,1
Erodiertes Betonvolumen durch die Oxidschicht (l)	~ 30,0	26,3
Gesamtes erodiertes Volumen (l)	~ 41,5	35,4
Seitenwand-Erosion durch die Oxid-Schicht (cm)	~ 7,0	6,0
Seitenwand-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 7,5.....9,5	~4,5
Axiale-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 7,5	3,7

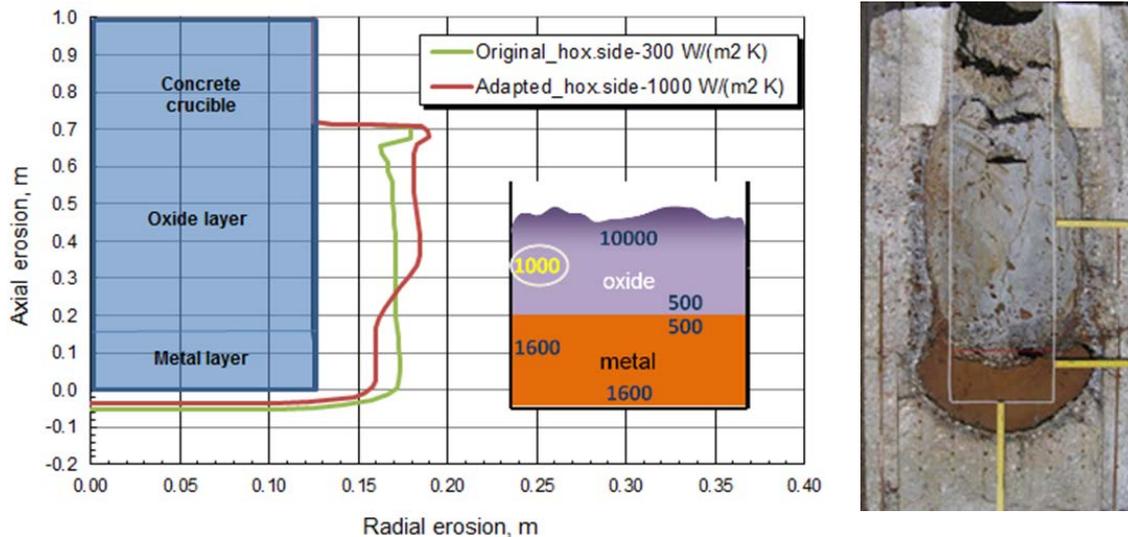


Abb. 2.109 MOCKA3.1, Qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation des Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von $300 \text{ W/m}^2\text{K}$ auf $1\,000 \text{ W/m}^2\text{K}$

2.5.5 Schlussfolgerungen

Die vorlaufenden Arbeiten zur MEDICIS-Validierung sind ausführlich in einem separaten Bericht dokumentiert /BAK 14/. Die Erkenntnisse daraus sind zusammenfassend:

- Die interne Leistungsfreisetzung in der Schmelze hängt stark von der Anwesenheit von Metallen und Sauerstoff ab. Eine detaillierte Simulation der im Experiment erfolgten Zugabe von Materialien ist für eine erfolgreiche Nachrechnung des Experiments unerlässlich.
- Der Materialtransport zwischen den beiden Phasen ist ein weiterer offener Punkt. Im Experiment wurde z. B. Zr zum oberen oxidischen Layer hinzugefügt, was bei Oxidation exotherm reagiert und Wärme produziert. Die Qualität der Nachrechnung mit MEDICIS in Bezug auf die Betonerosion hängt stark von dem Wärmetransport zwischen den beiden Schmelzeschichten (Metall und Oxid) ab. In MEDICIS konnten gute Ergebnisse erzielt werden, wenn an der Phasengrenzfläche zwischen Metallen und Oxiden ein reduzierter Wärmeübergangskoeffizient von $500 \text{ W/m}^2\text{K}$ eingesetzt wird. Dies spiegelt den verlangsamten Massentransport von oben nach unten in den MOCKA-Versuchen wieder und führt zu einer besseren Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

- Ferner ist der Wärmeübergangskoeffizient vom Oxid nach oben an die Atmosphäre mit $10\,000\text{ W/m}^2\text{K}$ deutlich höher, als in anderen 2D-MCCI-Experimenten. Dieser Fakt ist mit den hohen Wärmeverlusten vom Schmelzpool zu erklären, insbesondere in Phasen der Zufuhr von Material im Experiment.
- Letztlich hat sich gezeigt, dass auch eine Erhöhung des seitlichen Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von ursprünglich $300\text{ W/m}^2\text{K}$ auf $1\,000\text{ W/m}^2\text{K}$ eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment bringt.
- Aus den Nachrechnungen der MOCKA-Versuche ohne und mit Armierung ergab sich, dass für die Simulation von MCCI-Prozessen eine höhere Zerstörungstemperatur des Betons angesetzt werden muss, wenn Armierung im Beton vorhanden ist. Anstatt der bisher verwendeten Zerstörungstemperatur von $1\,573\text{ K}$ ($1\,300\text{ °C}$) ist eine Temperatur von mindestens $1\,809\text{ K}$ ($1\,536\text{ °C}$) anzusetzen, die der Schmelztemperatur von Fe entspricht.

Der jetzt erreichte Stand der Validierung von MEDICIS anhand der neuen MOCKA-Versuche lässt noch Punkte offen, weil u. a. bei den für die Nachrechnung verwendeten Versuchen keine Temperaturmessungen der Schmelze vorliegen. Diese sind für spätere MOCKA-Versuche geplant. Aus diesem Grund sollte die hier erarbeitete Empfehlung für die 2D-Verteilung von Wärmeübergangskoeffizienten später erneut überprüft werden, sobald verlässliche Temperaturmessungen aus MOCKA-Experimenten dazu verfügbar sind.

3 COCOSYS und ASTEC Anwendung

3.1 Arbeiten zu ASTEC im EU-Vorhaben CESAM

Das EU-Projekt CESAM (Code for European Severe Accident Management) wird im Rahmen des 7. Framework Programme EURATOM der Europäischen Kommission durchgeführt und läuft von April 2013 bis Ende März 2017. Die Ziele von CESAM sind, ASTEC speziell im Hinblick auf die Simulation von Notfallmaßnahmen in KKW weiterzuentwickeln. Dabei sollen besonders Phänomene berücksichtigt werden, die in den Unfällen in Fukushima Daiichi eine Rolle gespielt haben, also z. B. spezifisch für SWR sind. In diesem Zusammenhang werden zukünftige Modellerweiterungen diskutiert. Ein weiterer Punkt betrifft die Fortsetzung der Validierung von ASTEC durch eine breite Nutzergemeinschaft und hier insbesondere die Validierung der neuen Version ASTEC V2.1. Außerdem werden generische Referenzdatensätze für maßgebliche in Europa betriebene KKW erstellt und Störfallszenarien inklusive Berücksichtigung von Notfallmaßnahmen mit diesen Datensätzen beispielhaft analysiert. Dies soll zukünftigen Codenutzern Unterstützung bei der Codeanwendung geben. Insgesamt sind 19 Partner aus 11 europäischen Ländern, die Europäische Kommission über das Joint Research Center, sowie aus Indien beteiligt. Die GRS nimmt in CESAM die Aufgaben des Koordinators wahr und leitet damit sowohl die fachliche als auch die finanziell-administrative Abwicklung des Projekts.

Die Arbeiten der GRS im EU-Projekt CESAM werden über die laufenden vom BMWi geförderten COCOSYS-Vorhaben zur Codeentwicklung (EP, RS1508 bzw. RS1532) und zur Codevalidierung (VP, RS1514 und RS1544) abgewickelt. Ein Überblick der getätigten Arbeiten der GRS ist in Tab. 3.1 aufgelistet. Details der bisher geleisteten Arbeiten mit Bezug zum COCOYS-Validierungsvorhaben (VP) werden nachfolgend zusammengefasst.

Tab. 3.1 Überblick CESAM-Themen der GRS und Aufteilung auf Projekte

CESAM Work Package	Projekt	Aufgabe
WP12	VP	Fachliche Koordination.
WP20	EP	Bewertung und Validierung von ASTEC Modellen zu MCCI, Pool Scrubbing und Druckentlastungssystemen.

CESAM Work Package	Projekt	Aufgabe
	VP	Bewertung der Modelle zur Simulation des Kernverhaltens in SWR mit der neuen ICARE/CESAR Kopplung in ASTEC V2.1.
WP30	EP	Modellierung und Dokumentation von in CESAM als relevant beurteilten Phänomenen, hauptsächlich Modellierung von Rekombinatoren und des DCH Phänomens in ASTEC CPA.
	VP	Bereitstellung von ASTEC Quelltermdaten an RODOS.
WP40	VP	Erstellung eines SWR Eingabedatensatzes für ICARE/CESAR mit ASTEC V2.1.

3.1.1 Fachliche Koordination

Die fachliche Koordination umfasst die Abstimmung der Arbeit von 19 CESAM-Partnern, die Vorbereitung und Durchführung der ca. halbjährlichen Technical Coordination Meetings der beteiligten Work Package Leiter sowie der Steering Committee Meetings und des jährlichen ASTEC Users Workshops, der gleichzeitig zur Präsentation des erreichten Arbeitsstandes dient. Darüber hinaus erfolgt auch die Qualitätssicherung der im Projekt erstellten Dokumente.

Die fachlichen Arbeiten laufen weitestgehend planmäßig. Zur Überprüfung des Arbeitsfortschritts der einzelnen Partner sind auf Beschluss des Steering Committees halbjährliche Berichte des Arbeitsfortschritts eingeführt worden, welche durch den Koordinator fachlich geprüft werden. Der Fortschritt der Arbeiten wurde zum Ablauf der jeweiligen Projektperioden gegenüber der Europäische Kommission in Progress Reports dargestellt. Nach Ablauf der zweiten Projekt-Periode Ende September 2015 wurde der 2. Progress Report erstellt und durch die Europäische Kommission genehmigt. Die Progress Reports und Berichte des laufenden EU-Vorhabens sind derzeit nur den Projektteilnehmern zugänglich. Die Arbeiten werden im Nachfolgevorhaben RS1544 abgeschlossen.

3.1.2 Bewertung der Modelle zur Simulation des Kernverhaltens in SWR mit der neuen CESAR/ICARE-Kopplung in ASTEC V2.1

Im Laufe des CESAM-Projekts werden im Wesentlichen zwei unterschiedliche ASTEC-Serien benutzt. Zum Projektstart ist die Validierung und Datensatzerstellung der Partner mit der Version V2.0 gestartet worden. Im Laufe des Projekts hat IRSN verschiedene Versionen der neuen V2.1-Reihe veröffentlicht. In der zweiten Projekthälfte werden daher die Arbeiten verstärkt auf diese neue Codereihe ausgerichtet. Die neue ASTEC-Version V2.1 ist die erste Version, die eine konsistente Beschreibung der Geometrie eines SWR-Reaktorkerns ermöglicht. Des Weiteren ist die Kopplung der für die Kernmodellierung relevanten Module ICARE und CESAR in der neuen Version umgestellt worden. Daher besteht für die Erstellung eines Datensatzes für einen SWR-Reaktorkern keinerlei Erfahrung außerhalb von IRSN.

Die GRS-Arbeiten zur Bewertung und Validierung von ASTEC Modellen im WP20 (siehe Kap. 3.1.5) und der Beitrag zur Erstellung eines SWR-Beispieldatensatzes im WP40 (siehe Kap. 0) stellen daher die Grundlage für die Bewertung der neuen Modellierungsmöglichkeiten dar. Die Erfahrungen, die bei der SWR-Datensatzerstellung gewonnen werden, basieren auch auf Erfahrungen der GRS in der Anwendung von ATHLET-CD/COCOSYS für SWR und werden im WP40 eingespeist. Schlussfolgerungen über die Anwendbarkeit und eventuelle Defizite werden an IRSN, als den ICARE/CESAR-Entwickler, weitergegeben.

3.1.3 Bereitstellung von ASTEC-Quelltermdaten an RODOS

Im WP30 sind Arbeiten von IRSN und GRS zur Weiterentwicklung von ASTEC angesiedelt, aber auch Arbeiten zur Ankopplung von ASTEC an Notfalltools. IRSN arbeitet an einem „Interface package with atmospheric dispersion tools“ zur Bereitstellung von Quelltermdaten an Codes zur Simulation der Ausbreitung von radioaktiven Stoffen in der Umgebung eines Kraftwerks. Dazu ist eine Ausgabe der Daten in Form des offenen internationalen IRIX-Formats vorgesehen. Dieser IRSN-Arbeitspunkt ist derzeit noch nicht beendet und wird erst im Laufe der ersten Hälfte 2016 abgeschlossen. GRS trägt im Rahmen des Vorhabens dazu bei zu testen, ob diese neue Datenausgabe auch für das beim BfS betriebene Notfalltool RODOS verfügbar gemacht werden kann. Da das geplante Ausgabemodul von ASTEC noch nicht vorhanden ist, konnte ein Test bisher nicht erfolgen.

Darüber hinaus ist ein eigenes Modul entwickelt worden, das die relevanten Daten aus einer ASTEC-Ausgabedatei ausliest und in eine RODOS-Datei ausgibt, die bisher noch ein anderes (altes) Datenformat nutzt. Sowohl IRIX als auch das alte RODOS-Format sind XML-Formate. Die Ausgabe erfolgt mit dem freien FORTRAN Modul FoX (<https://github.com/andreww/fox>).

Ziel ist es ferner, die Ausgabe ähnlich für Ergebnisse von COCOSYS zum Quellterm verwenden zu können.

Die Implementierung für ASTEC ist durchgeführt worden. Offen ist noch ein Test inwieweit RODOS die erstellten Daten verwenden kann. Weiterführende Tests mit dem selbst erstellten Modul als auch das Testen der IRSN ASTEC-Erweiterung sind bis zum Projektende von CESAM im Nachfolgevorhaben RS1544 noch durchzuführen.

3.1.4 Erstellung eines SWR-Eingabedatensatzes für ASTEC V2.1 mit der neuen CESAR/ICARE-Kopplung

Nach Diskussion der an der Erstellung eines SWR-Referenzdatensatzes für ASTEC beteiligten Partner wurde beschlossen, aus den unterschiedlichen Reaktorlinien in Europa (SWR-72, SWR Mark I) ein gemeinsames generisches Modell zu erstellen. In der Diskussion unter den Partnern der SWR-Gruppe fiel die Wahl nach längerer Diskussion auf einen zu Fukushima Daiichi ähnlichen Datensatz für einen GE SWR 4 mit Mark I Containment. Die GRS hat dabei die Aufgabe übernommen, den Reaktorkern und den Reaktorkühlkreislauf mit den Modulen ICARE und CESAR zu modellieren. Diese Aufgabe ist die erstmalige Anwendung der neuen Kopplung der Module ICARE und CESAR in ASTEC V2.1 zur realistischen Simulation der Geometrie eines SWR-Kerns außerhalb von IRSN. Die unterschiedlichen Aufgaben der einzelnen Partner für den integralen SWR-Referenzdatensatz sind in folgender Tabelle aufgeführt.

Tab. 3.2 Aufgabenverteilung in der SWR-Gruppe in CESAM

Partner	Aufgabenbeschreibung
GRS	Modellierung des Reaktorkerns und des Reaktorkühlkreislaufs inklusive Schnittstelle für Einbindung von Notfallmaßnahmen
CIEMAT	Modellierung des Mark I Containments inklusive Containment relevanter Notfallmaßnahmen
LEI	Simulation der Reaktorgrube und der Schmelze-Beton-Wechselwirkung mit dem ASTEC Modul MEDICIS

Partner	Aufgabenbeschreibung
VTT	Analyse und Modellierung der Spaltproduktverteilung und -freisetzung im Datensatz
JRC	Integration der einzelnen Moduldatensätze zu einem kompletten ASTEC-Anlagendatensatz

Da die ICARE/CESAR-Kopplung mit der ASTEC Version V2.1 vollständig neu umgesetzt worden ist und im ICARE auch erstmalig neue Modelle zur Simulation einer SWR-Kerngeometrie vorhanden sind, sind die GRS-Arbeiten mit der während des Projekts schrittweise veröffentlichten ASTEC-Version V2.1 durchgeführt worden.

Im Folgenden werden zunächst die erstellte Kernmodellierung mit ICARE und dann die Modellierung des Reaktorkühlkreislaufs mit CESAR erläutert. Die thermische Leistung des Reaktors beträgt 2 381 MW. Die verwendete axiale Leistungsverteilung ist in der Grafik Abb. 3.1 dargestellt. Die Nachzerfallswärme wird zurzeit nicht mit dem ASTEC-Modul ISODOP berechnet, sondern über Tabellen vorgegeben.

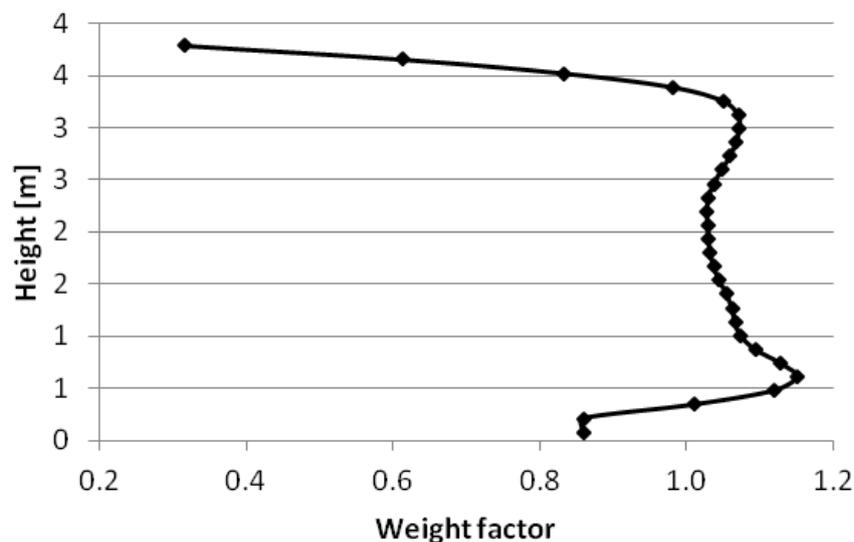


Abb. 3.1 Axiale Leistungsverteilung des SWR

Der betrachtete SWR-Kern besteht aus 548 Brennelementen. Eine schematische Zeichnung der ICARE-Nodalisierung ist in Abb. 3.2 dargestellt. Der Reaktorkern wird im erstellten Datensatz in 5 radiale Ringe unterteilt. Der äußere Ring modelliert den Downcomer und die vier inneren Ringe den Reaktorkern. Die Brennelemente des SWR werden innerhalb dieser Ringe modelliert. Von innen nach außen sind 4, 80, 224 und 240 Brennelemente enthalten. Einige ausgewählte Brennelemente sind als kleine

Kästchen in der Abbildung dargestellt. Im vierten Ring von innen sind keine Brennelemente dargestellt, diese sind aber auch dort vorhanden. Im Datensatz werden ein zentraler Steuerstab und zwischen den verschiedenen Kernringen jeweils 20, 56 und 60 Steuerstäbe modelliert, die in der Abbildung als rote Kreise dargestellt werden. Die eigentlich kreuzförmige Steuerstabgeometrie kann in der verwendeten ASTEC-Version nicht modelliert werden, stattdessen werden zylindrische Elemente in den Kern eingesetzt. Dabei werden die Anzahl und die Masse der Steuerstäbe realistisch beibehalten, wodurch die Oberfläche der modellierten Steuerstäbe zu gering ist.

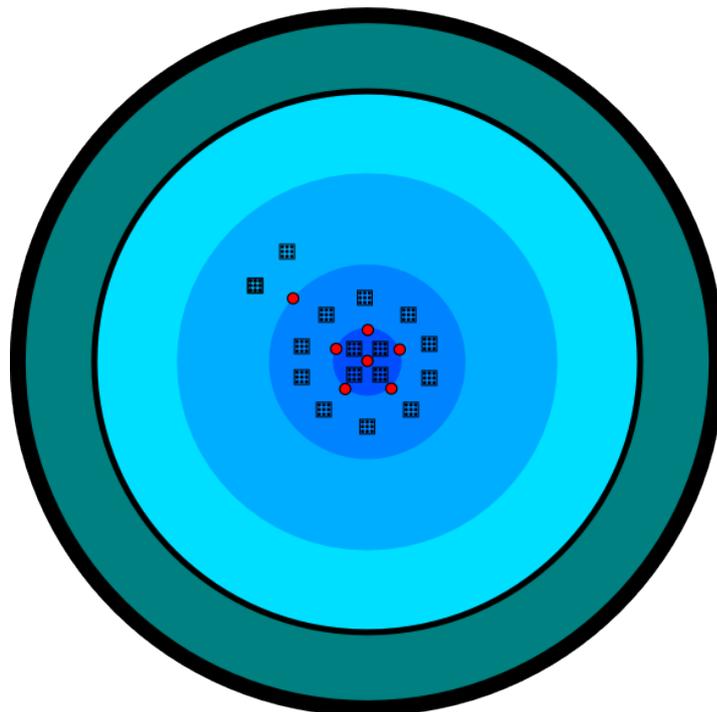


Abb. 3.2 Schematische Modellierung der SWR-Kerngeometrie mit Downcomer (äußerster Ring)

In der neuen ASTEC-Version V2.1 erfolgt die Schnittstelle zwischen ICARE und CESAR an den Strukturoberflächen der Kerneinbauten und Brennstäbe. Dadurch wird das Wasser- und Dampfverhalten in den Fluidkanälen innerhalb des Reaktordruckbehälters vom CESAR-Modul berechnet. Die Aufheizung, Zerstörung und der Transport von Strukturmaterialien des Kerns bis zur Umlagerung in das untere Plenum und dem Versagen des Druckbehälters werden von ICARE berechnet.

Der erstellte Datensatz simuliert zwei getrennte Schleifen für den Reaktorkühlkreislauf. Der schematische Aufbau des simulierten Reaktorkühlkreislaufs ist in Abb. 3.3 für den Kreislauf „A“ dargestellt. Im Datensatz für den Reaktor umfassen die nötigen Eingaben

für CESAR den Separator (SEP) und das obere Plenum (UPPHEAD) auf der „heißen Seite“ am Ausgang aus dem Kern sowie das obere Ende des Downcomers (DCTOP) auf der „kalten Seite“ mit der Rückströmung von Wasser zum Kern. An den Separator schließt die Frischdampfleitung (MSL_A) an. Speisewasser wird über die Speisewasserleitung (FW_A) in den Downcomer geleitet. Alle Volumen außer dem Separator werden als Standard-Zweiphasenvolumen vom Typ 0 ohne Wasserlevel simuliert. Der Separator (SEP) wird als ein Zweiphasenvolumen vom Typ 1 mit Berücksichtigung eines Wasserstands simuliert, wodurch am oberen Ende nur Dampf in das obere Plenum (UP_HEAD) abgegeben wird. Das Wasser strömt zurück in den oberen Bereich des Downcomers (DC_TOP).

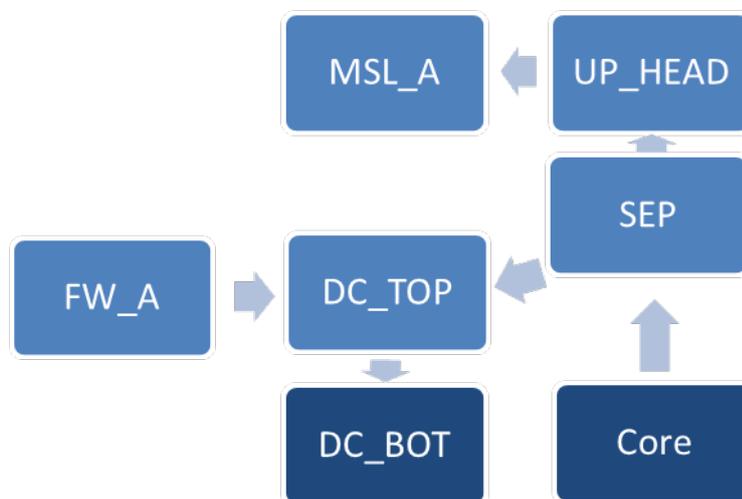


Abb. 3.3 Schematische Modellierung des SWR-Reaktorkühlkreislaufs in ASTEC

Während der Frischdampf an ein virtuelles Volumen vom sogenannten Typ „USER“ abgegeben wird, wird Speisewasser druckunabhängig in die Speisewasserleitung über die Speisewasserpumpen „FW_A“ und „FW_B“ eingespeist. Die interne Rezirkulationspumpe „ZUP“ befindet sich im Datensatz zwischen Separator (SEP) und oberem Downcomer (DC_TOP), wohingegen sie sich in der Realität z. B. im SWR-72 als interne Pumpe am unteren Ende des Downcomers (DC_BOT) bzw. dem Übergang zum unteren Plenum bzw. Kern (Core) befindet. Bei GE SWR4 gäbe es sogar externe Pumpenloops mit internen Jetpumpen. Derzeit kann keine dieser Pumpen in ASTEC realitätsnah simuliert werden. Das Einbinden an einer anderen Stelle war nötig, um numerische Schwierigkeiten in ASTEC in der Stationärrechnung zu vermeiden. Hier sind weitere Verbesserungen der Modellierung in ASTEC in Zukunft erforderlich, auch wenn die Pumpe in einem Störfallablauf i. d. R. rasch nach Ereigniseintritt abgeschaltet

wird. Die eingestellte „Umwälzzahl“ des Kühlmittels durch den Kern ist definiert als Verhältnis des Wasserstroms vom Separator über den Downcomer zurück in den Kern zum Speisewassermassenstrom. Das hier eingestellte Verhältnis beträgt 7,5.

Mit dem erstellten Datensatz ist erfolgreich eine stationäre Rechnung erstellt worden. Aufbauend auf diese stationäre Rechnung sind erste einfache Testrechnungen durchgeführt worden. Dabei auftretende Probleme sind an den ICARE/CESAR-Entwickler IRSN kommuniziert worden und konnten daraufhin teilweise gelöst werden. Im Rahmen von CESAM wurde der SWR-Datensatz im November 2015 inklusive einer Beschreibung an den Partner JRC zur Integration in das Gesamtmodell übergeben. Mit diesem integralen Datensatz werden bis zum Projektende von CESAM Störfallszenarien exemplarisch gerechnet, die in Abstimmung mit den anderen SWR-Partnern durchgeführt werden. Die Durchführung dieser Rechnung erfolgt im Anschlussvorhaben RS1544. Die Ergebnisse werden in den CESAM-Validierungsbericht zur ASTEC-Version V2.1 einfließen, der zum Projektende von CESAM erstellt wird.

3.1.5 Modellbewertung (Assessment) zu Core Concrete Interaction – MEDICIS

Im Rahmen einer beantragten Vorhabensänderung zum RS1514 wurde der gesondert geplante Arbeitspunkt zur Validierung von ASTEC MEDICIS in das CESAM Arbeitspaket verschoben und dort zusätzlich in das Vorhaben CESAM eingebracht. Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der Anwendung von ASTEC MEDICIS zu dem Versuch MOCKA6.1 dargestellt. Die Anwendung von COCOSYS MEDICIS wurde im Kap. 2.5 besprochen und wird zum Vergleich mit herangezogen. Weitere Arbeiten zur Modellbewertung werden zurzeit noch fortgeführt.

Die MOCKA-Experimente zur Wechselwirkung einer oxidischen und metallischen Simulatschmelze mit Beton in geschichteter Konfiguration, die zurzeit beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführt werden, stellen eine wichtige Ergänzung der Datenbasis zu MCCI dar. Wie bereits in Kap. 2.5 ausgeführt, besteht eine neue generische Problemstellung in der Simulation von den MOCKA-Experimenten mit dem MCCI-Modul MEDICIS in der realistischen Simulation der Beheizung der Schmelze, die im Experiment durch die Zufuhr von chemisch reaktiven Stoffströmen zur Schmelze erfolgt, und nicht induktiv wie in anderen Versuchen aus dem OECD-CCI-Programm. Mit MEDICIS kann nur eine Annäherung an die wirklichen Vorgänge erfolgen, da im Experiment ein Teil der Oxidschmelze über den Tiegelrand überläuft bzw. herausgespritzt

wird und so aus dem Tiegel verloren geht, was so direkt im Code nicht simuliert werden kann. Zur Annäherung an die wirklichen Vorgänge wurden daher verschiedene Hypothesen für die Eingabedatensätze in MEDICIS aufgestellt und in internationalen Fachgruppen diskutiert (CESAM, NUGENIA, ERMSAR). Ein wichtiger Arbeitsschritt war hierbei die Überprüfung der Konsistenz zwischen Rechnungen mit ASTEC MEDICIS und COCOSYS MEDICIS. Zu diesem Zwecke wurde das Experiment MOCKA 6.1 herangezogen und eingehend mit ASTEC MEDICIS analysiert /BAK 15/.

In ersten Rechnungen zeigten sich geringe Abweichungen zwischen ASTEC und COCOSYS, die sich sehr gut an der integralen Leistungsabgabe aus der Schmelze an den Betontiegel aufzeigen lassen (Abb. 3.4). Nach eingehender Analyse konnten die Unterschiede in den Rechnungen auf unterschiedliche Stoffdaten der beteiligten Stoffe zurückgeführt werden, so dass nach Abgleich der Stoffdaten in COCOSYS nur noch minimale Unterschiede zwischen ASTEC und COCOSYS bestehen (Abb. 3.5). Diese Unterschiede sind auf unterschiedliche Schnittstellen zwischen MEDICIS und der Umgebung im Containment zurückzuführen. In COCOSYS wird die Umgebung thermohydraulisch modelliert und Wärmeübergänge zwischen der Umgebung und MEDICIS werden durch COCOSYS berechnet. In ASTEC dagegen wurde für die Rechnungen MEDICIS im Stand-Alone-Modus angewandt ohne Anbindung an das Containmentmodul CPA.

Der Anstieg der Erosionsleistung mit der Zeit hängt modellseitig mit der Verfügbarkeit der chemischen Reaktionspartner (Zr, Al, H₂O, CO₂) in den beiden Schmelzeschichten zusammen. Hierbei gibt es eine Rückkopplung der Freisetzung von Gasen aus der Zerstörung des Betons auf die Erosionsrate (Leistungen in Abb. 3.4 und Abb. 3.5), da die zugeführten Stoffe zu größeren Anteilen umgewandelt werden, bis ein maximaler Umsatz von 100 % erfolgt. Die Experimentatoren gehen von einem Umsatz der Reaktionen von 100 % zu nahezu jedem Zeitpunkt während der gesamten Versuchszeit von ca. 2 200 s aus. Analysen zeigen, dass dies mit einer längeren Verweildauer der Metalle in der oben liegenden, sauerstoffreichen Oxidschicht in besserer Übereinstimmung gerechnet werden kann, als mit dem Standard-Modell in MEDICIS, bei dem unoxidierte Metalle umgehend in die unten liegende Metallschicht überführt werden.

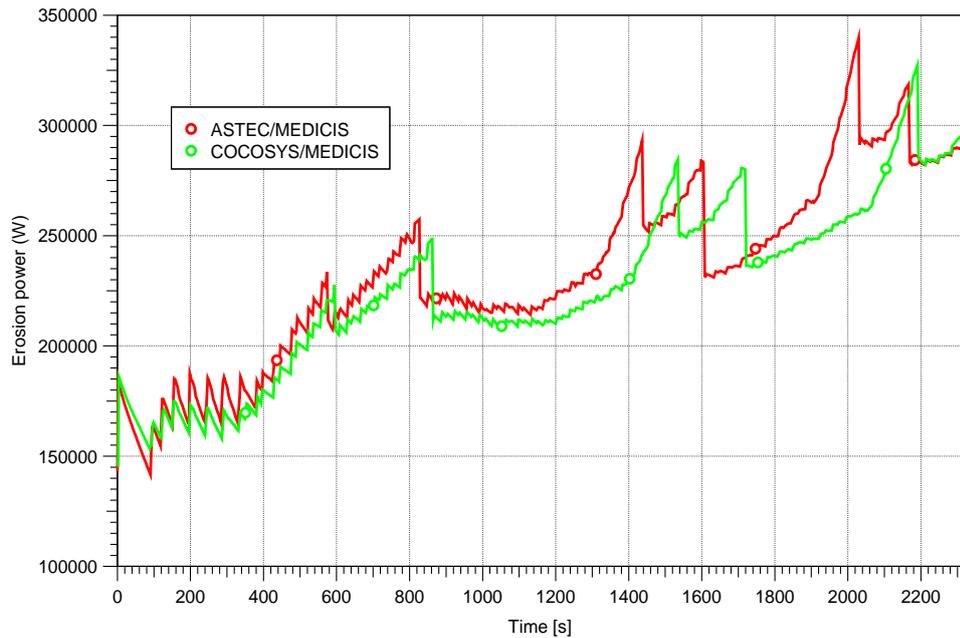


Abb. 3.4 MOCKA 6.1, Vergleich der berechneten Leistungen für die Betonerosion vor Abgleich von Stoffdaten mit MEDICIS in ASTEC und COCOSYS

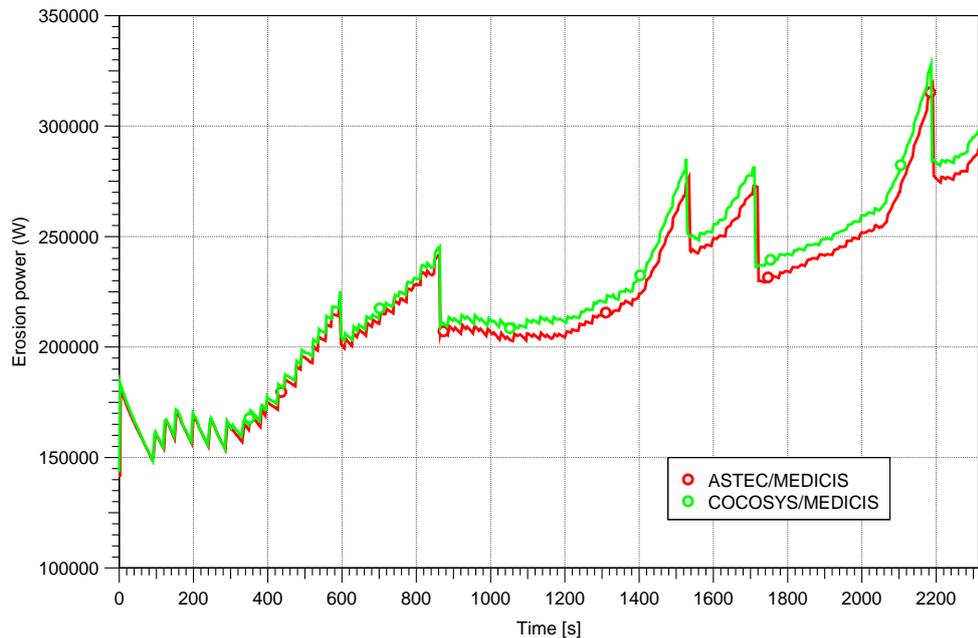


Abb. 3.5 MOCKA 6.1, Vergleich der berechneten Leistungen für die Betonerosion nach Abgleich von Stoffdaten mit MEDICIS in ASTEC und COCOSYS

In den durchgeführten Analysen zeigt sich, dass zwischen den MEDICIS-Versionen in ASTEC und COCOSYS hinreichend Konsistenz besteht, nachdem die fehlerhaften Stoffdaten behoben waren, so dass alle Schlussfolgerungen aus der COCOSYS

MEDICIS Validierung auch auf ASTEC MEDICIS übertragen werden können (siehe Kap. 2.5). Zum Vergleich zeigt Abb. 3.6 die mit ASTEC MEDICIS errechnete Erosionskontur für den Versuch MOCKA6.1, die sehr ähnlich zu den Ergebnissen von COCOSYS MEDICIS (Abb. 2.108) ist. Tab. 3.3 zeigt den Vergleich der MEDICIS-Rechenergebnisse unter Verwendung von angepassten Wärmeübergangskoeffizienten von 1 000 W/m²K vom Oxid an den Beton.

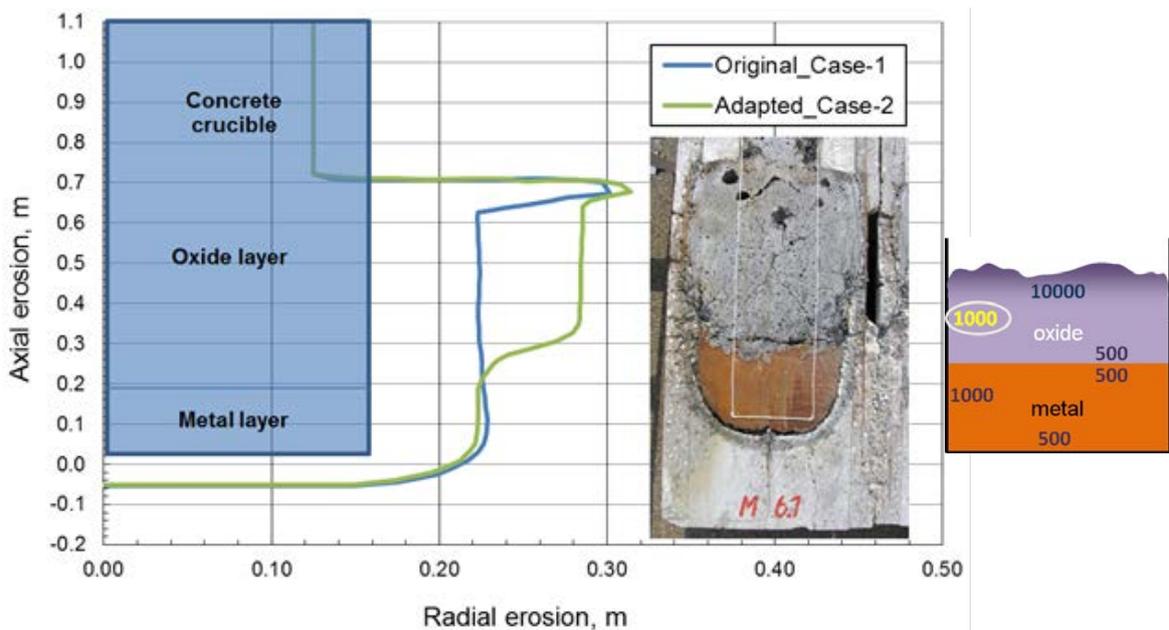


Abb. 3.6 MOCKA 6.1, qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation der Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von 300 W/m²K (original case) auf 1 000 W/m²K (adapted case)

Tab. 3.3 Vergleich von MEDICIS-Rechenergebnissen für MOCKA6.1 (mit LCS-Beton) unter Verwendung von angepassten Wärmeübergangskoeffizienten

Parameter	Experiment	COCOSYS MEDICIS	ASTEC MEDICIS
Erodiertes Betonvolumen durch die Metallschicht (l)	~ 17...18	33	33
Erodiertes Betonvolumen durch die Oxidschicht (l)	~ 84	86	92
Gesamtes erodiertes Volumen (l)	~ 101...102	119	125
Seitenwand-Erosion durch die Oxid-Schicht (cm)	~ 12...15	15,1	15,9
Seitenwand-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 9...12	9,6	9,8
Axiale-Erosion durch die Metall-Schicht (cm)	~ 4	5,0	5,0

Da die MOCKA-Experimente bei KIT noch nicht abgeschlossen sind, kann auch abschließend noch keine endgültige Empfehlung für entsprechende Best-Estimate-Eingabedatensätze ausgesprochen werden. Weitere entwicklungsnahe Arbeiten in CESAM hierzu werden im Vorhaben der COCOSYS-Weiterentwicklung (RS1532) durchgeführt.

3.2 Arbeiten zu COCOSYS – Testen des Modells zum Fluten von Zonen sowie der Kopplung mit CoPool am Beispiel eines DWR

Für eine genauere Simulation der thermohydraulischen Zustände im Containmentsumpf oder in anderen großen Wasserpools im Containment wie der Kondensationskammer in einem SWR wurde in COCOSYS die Möglichkeit geschaffen, Zonen vollständig mit Wasser zu fluten. Darüber hinaus wurde COCOSYS mit dem vereinfachten CFD Programm CoPool gekoppelt, das in zwei Vorhaben beim ITWM in Kaiserslautern in Zusammenarbeit mit Becker Technologies und unterstützt durch die GRS entwickelt wurde /ILI 15/.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden erste Testrechnungen anhand eines angenommenen Störfalls in einer deutschen DWR-Anlage vom Typ KONVOI durchgeführt. Das angenommene Szenario ist in den folgenden dargestellten Rechnungen gleich. Die wesentlichen Merkmale 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-CD-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 den folgenden Kapiteln wird dieser nur in Bezug auf den Containmentsumpf näher beschrieben.

Hier ist ferner zu beachten, dass die Containmentdatensätze für die Rechnungen zum Zonenfluten (Kap. 3.2.1) und der ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung (Kap. 3.2.2) unterschiedlich sind (siehe Abb. 3.7 und Abb. 3.8). In den Rechnungen zum Zonenfluten ist der Containment-Sumpf in vier Sektoren A bis D aufgeteilt. Ebenso sind die Bereiche der Sumpfsiebe in separate Zonen (RS6.. und RS5..) aufgeteilt. In den Rechnungen zu CoPool ist der Containment-Sumpf nur in 2 Sektoren/Zonen (RSUA und RSUC) aufgeteilt. Ebenso wurden für diese Rechnungen die Strukturflächen anhand des CoPool-Datensatzes angepasst.

3.2.1 Ergebnisse der Tests des Modells zum Fluten von Zonen

In der COCOSYS V3.0 (Entwickler-)Version ist es möglich, Zonen vollständig zu fluten. Bisher wurden Zonenvolumina über eine Wasserstandstabelle so „verformt“ bzw. axial verlängert, dass während der ganzen Rechnung noch ein restliches Gasvolumen in der Zone vorhanden war (vgl. Abb. 3.9). Alternativ konnten auch Drainageverbindungen zwischen den Zonen geschlossen werden. Beide „Konstruktionen“ sind teilweise kritisch. Im ersten Fall besteht auch für geflutete Zonen immer ein Kontakt zur restlichen Atmosphäre (über die Sumpfoberfläche). Dies führt bei Siedezuständen in tiefer gelegenen Zonen zu einem direkten Dampfeintrag in die Atmosphäre des Containments oberhalb des Sumpfes (vgl. Abb. 3.9). Im zweiten Fall wird eine mögliche Konvektion

innerhalb des Sumpfes unterbunden. Allerdings ist zu beachten, dass durch die in COCOSYS vorhandenen Verbindungstypen sowieso nur eine sehr unzureichende Simulation einer Konvektion zwischen mit Wasser gefüllten Zonen möglich ist. Mit der Entwicklung von CoPool und dessen Anbindung an COCOSYS steht dafür zukünftig ein realistischeres 3D-Modell zur Verfügung (Kap. 3.2.2).

Um mögliche Temperaturunterschiede im Sumpf besser abbilden zu können, wurde eine verfeinerte Nodalisierung des Sumpfes in der COCOSYS-Rechnung verwendet (Abb. 3.7 und Abb. 3.8). Mit der Verwendung der ATM_FULL Verbindungstypen zwischen den Zonen RS5.. ↔ RS6.., RS6.. ↔ RS7.., RS7.. ↔ RS8.. sowie zwischen den Sektoren entfällt die Notwendigkeit, die Zonenvolumina künstlich mit Hilfe einer Wasserstandstabelle „nach oben“ hin zu verformen. In der Vergleichsrechnung unter Verwendung von atmosphärischen Verbindungen vom Typ ATMOS_JUN und Sumpfausgleichsverbindungen (SUMP_BAL) wurde diese spezielle Form angewendet (Abb. 3.9).

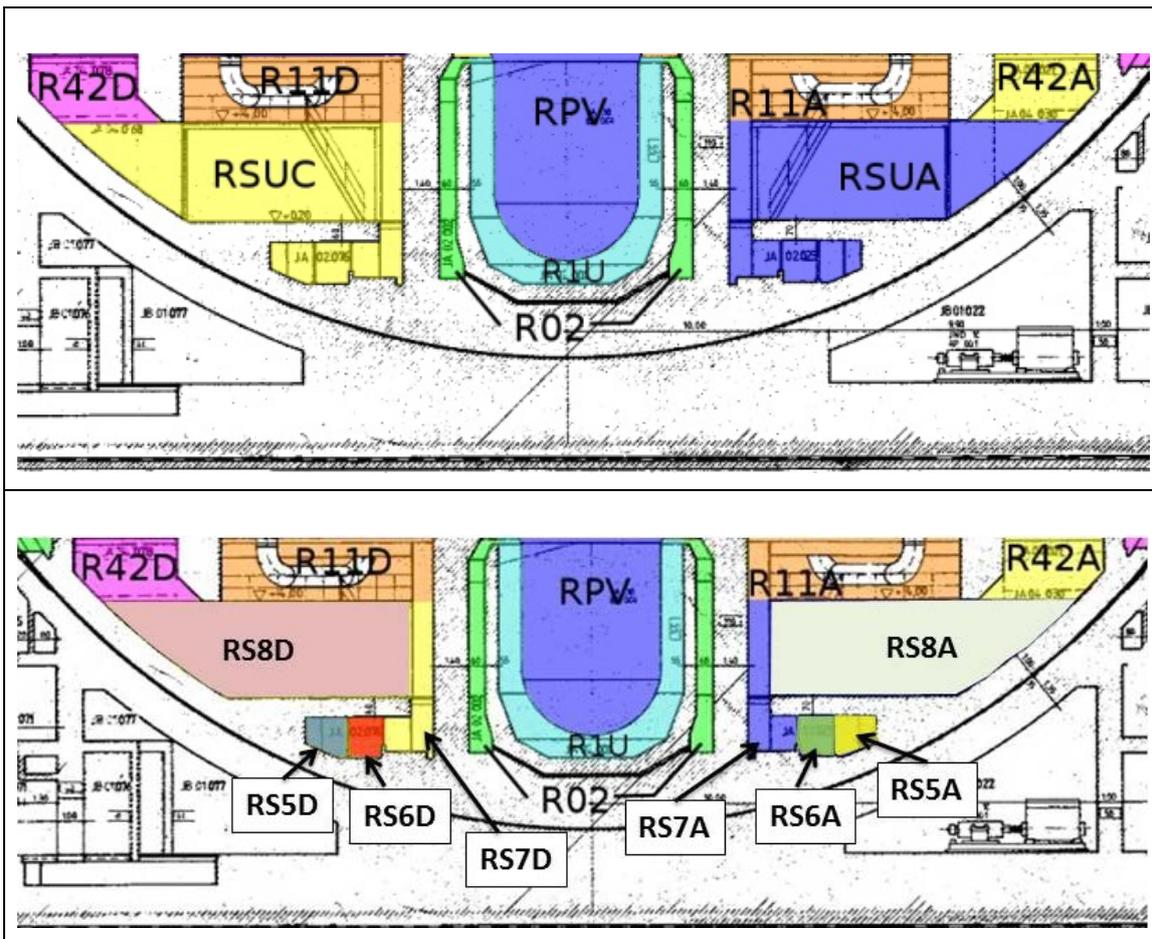


Abb. 3.7 Schnitt B-B des Containmentsumpfes (oben einfache COCOSYS-Nodalisierung; unten verfeinerte COCOSYS-Nodalisierung)

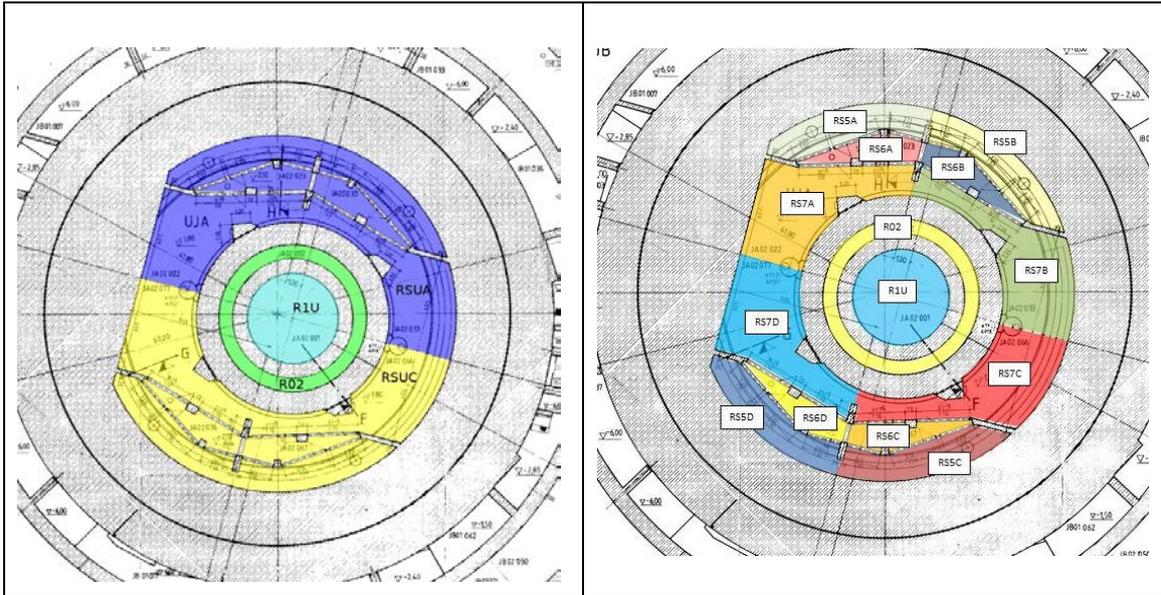


Abb. 3.8 Höhenkote -1,5 des Containmentsumpfes (links einfache COCOSYS-Nodalisation; rechts verfeinerte COCOSYS-Nodalisation)

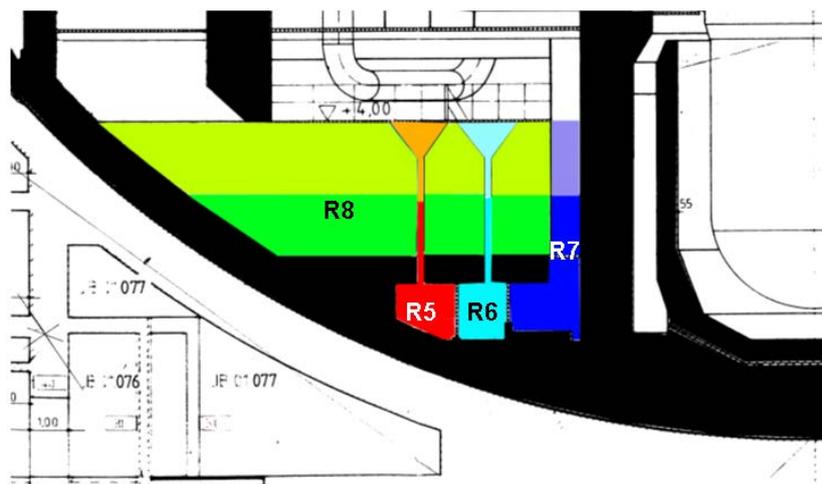


Abb. 3.9 „Axiale Erweiterung“ der Zonenvolumina R5 und R6 zur Vermeidung des vollständigen Flutens in einer COCOSYS-Nodalisation

Nachfolgend werden erste Rechenergebnisse dargestellt. In der Tab. 3.4 sind die wesentlichen Ereignisse für ein unterstelltes Szenario in einer DWR-Anlage vom Typ KONVOI aufgelistet. Die Zeitpunkte beziehen sich auf den Beginn des Störfalls, der sich an eine 400 s (Rechnung zum Zonenfluten) bzw. 100 s (Rechnung mit CoPool) lange Stationärrechnung anschließt.

Tab. 3.4 Berechnete Ereignisse

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	2 319 s

Kurz nach dem Öffnen des unterstellten Lecks im heißen Strang der Hauptkühlmittelleitung von 200 cm² nach 400 s wird RESA und TUSA ausgelöst. Die HD-Einspeisung (3 von 4) beginnt weitere ca. 14 s später. Bei 508 s ist der Druck im Primärkreis soweit abgesunken, dass Wasser aus den kaltseitigen Druckspeichern (4 von 4) fließt. Ab 815 s starten die Niederdruckpumpen. Auch hier wird angenommen, dass die Pumpe vom vierten Strang ausfällt und der Kühler im ND-Notkühlsystem vom ersten Strang wird als ausgefallen angenommen. Über die Notkühlsysteme gelangt Wasser aus den 3 Flutbecken in den Primärkreis und über das Leck in den Containmentsumpf. Der Wasserstand steigt dann entsprechend über die Höhe der Zwischendecke (Kote 0,2 m). Der Sumpfumwälzbetrieb startet bei 2 319 s, nachdem die Flutbecken leer sind. Dabei wird angenommen, dass nur noch der Strang 1 zur Verfügung steht. Aufgrund der fehlenden Kühlung des angesaugten Wassers steigt die Temperatur im Kern moderat an. Der moderate Anstieg ist durch die vorhandene sekundärseitige Wärmeabfuhr bedingt.

In der zum Vergleich herangezogenen Rechnung ohne das Modell zum Zonenfluten (schwarze Kurven in nachfolgenden Plots) startet das Szenario bei ~400 s nach Ende der Stationärrechnung. Aufgrund von Stabilitätsproblemen stoppt die Rechnung mit Verwendung der ATM_FULL Verbindungen (blaue Kurven in den Plots) derzeit bei ca. 1 400 s. Das ist der Zeitpunkt, wenn der Wasserstand die Unterkante der Zwischendecke bei -0,5 m erreicht und die Gaszonenteile ausgeschaltet werden. Zu Beginn werden die wesentlichen Ergebnisse des Kühlkreislaufes d. h. der ATHLET-CD-Rechnung verglichen.

In Abb. 3.10 bis Abb. 3.12 werden die Drücke im Primärkreis und Sekundärkreis, die Temperatur im RDB sowie die Füllstände im Dampferzeuger dargestellt. Wie zu erwarten sind die Ergebnisse fast gleich.

Auch für den Containmentdruck (Abb. 3.13) und die Temperatur im Dombereich (Abb. 3.14), die mit COCOSYS berechnet werden, werden sehr ähnliche Ergebnisse erzielt. Dagegen sind die Sumpftemperaturen in den Raumbereichen RS5A bis RS5D sowie entsprechend in RS6 und RS7 mit Verwendung der ATM_FULL Verbindungen (des neuen Modells) niedriger (Abb. 3.15 bis Abb. 3.17). Ebenso sind die Temperaturunterschiede zwischen den Sektoren höher. Dabei hat der Sektor B (Lage des Lecks) die höchste Temperatur.

In Abb. 3.18 werden die absoluten Wasserstände im Containment verglichen. Hier ist zu beachten, dass die Wasserstandtabellen etwas angepasst wurden und sich dadurch kleinere Unterschiede ergeben können. Die Wasserstände in RS5, RS6 und RS7 sind praktisch gleich. Der von RS8 liegt auf Höhe des Zwischenbodens (bei 0,2 m). Das ist der Zeitpunkt des Rechnungsabbruches. Die Ursachen für die niedrigeren Temperaturen sowie den Absturz der Rechnung müssen noch im Detail im Nachfolgevorhaben untersucht werden. Die Arbeiten zur Modellentwicklung waren zum Zeitpunkt dieses Tests noch nicht abgeschlossen.

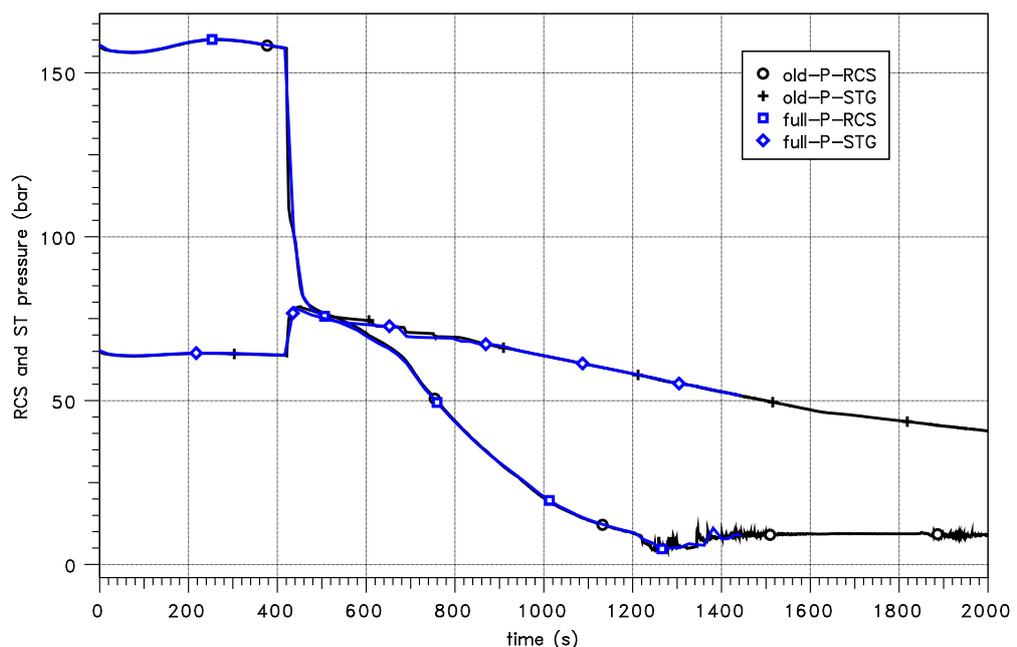


Abb. 3.10 Fluten: Vergleich der Drücke im Primär- und Sekundärkreis

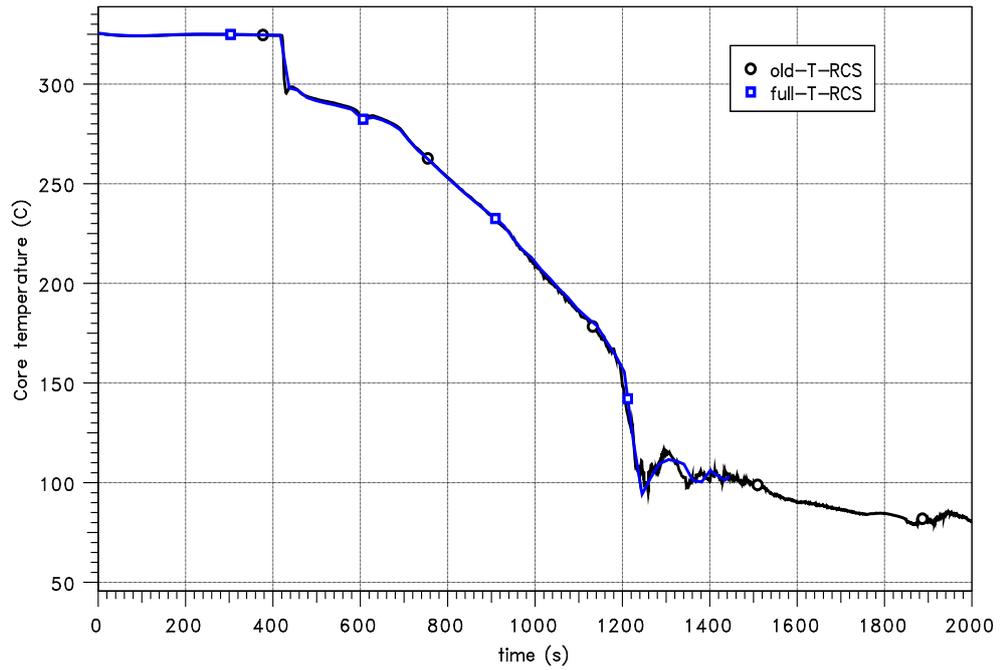


Abb. 3.11 Fluten: Vergleich der Temperatur im RDB

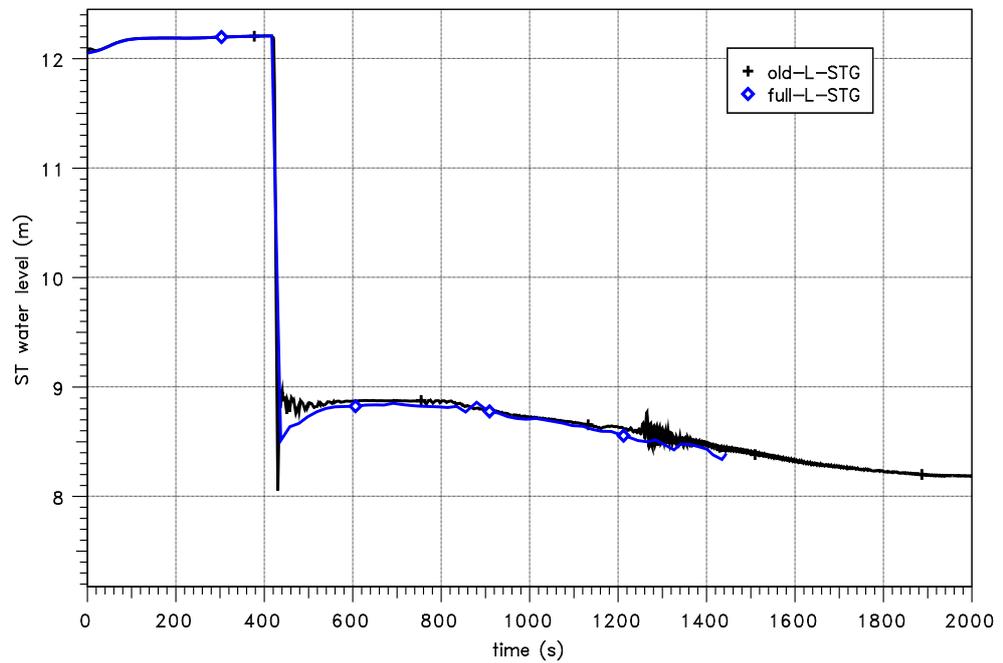


Abb. 3.12 Fluten: Vergleich der Dampferzeuger-Füllstände

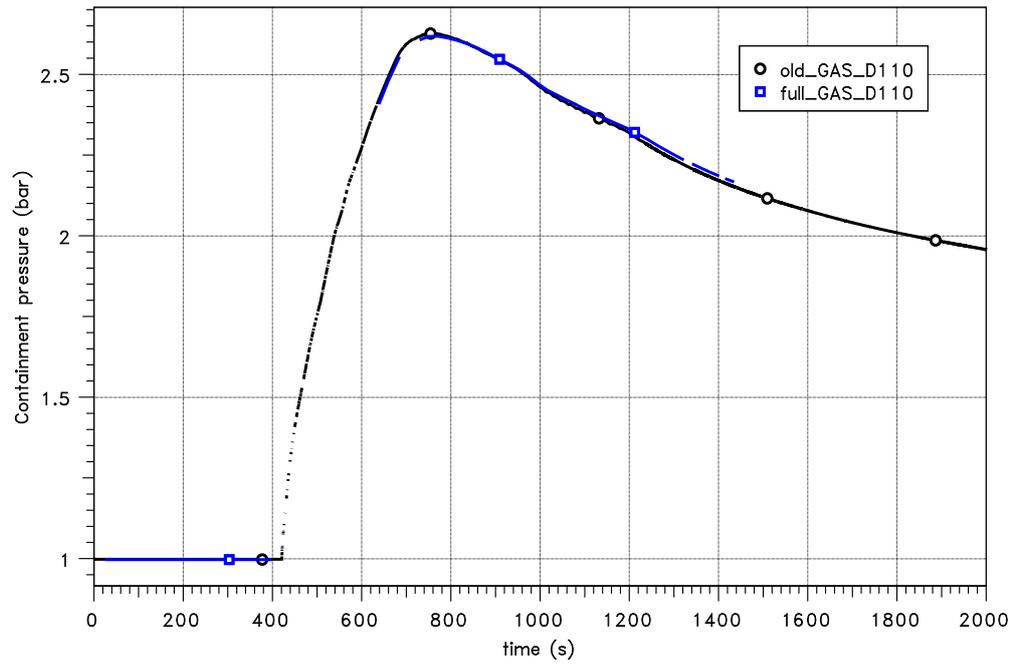


Abb. 3.13 Fluten: Vergleich des Containmentdrucks

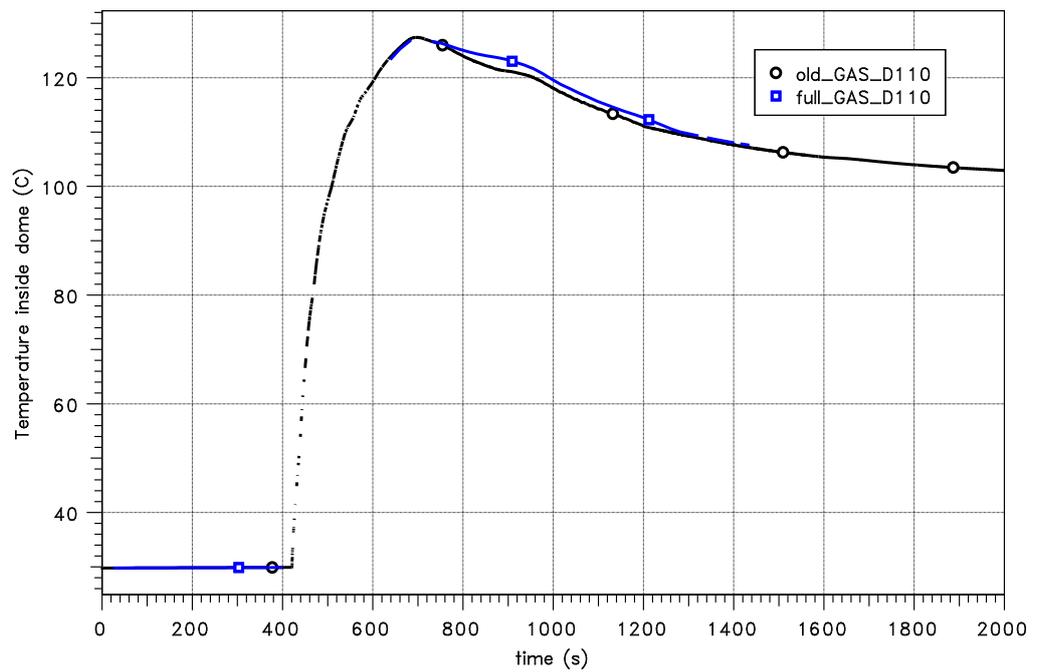


Abb. 3.14 Fluten: Vergleich der Temperatur im Dombereich

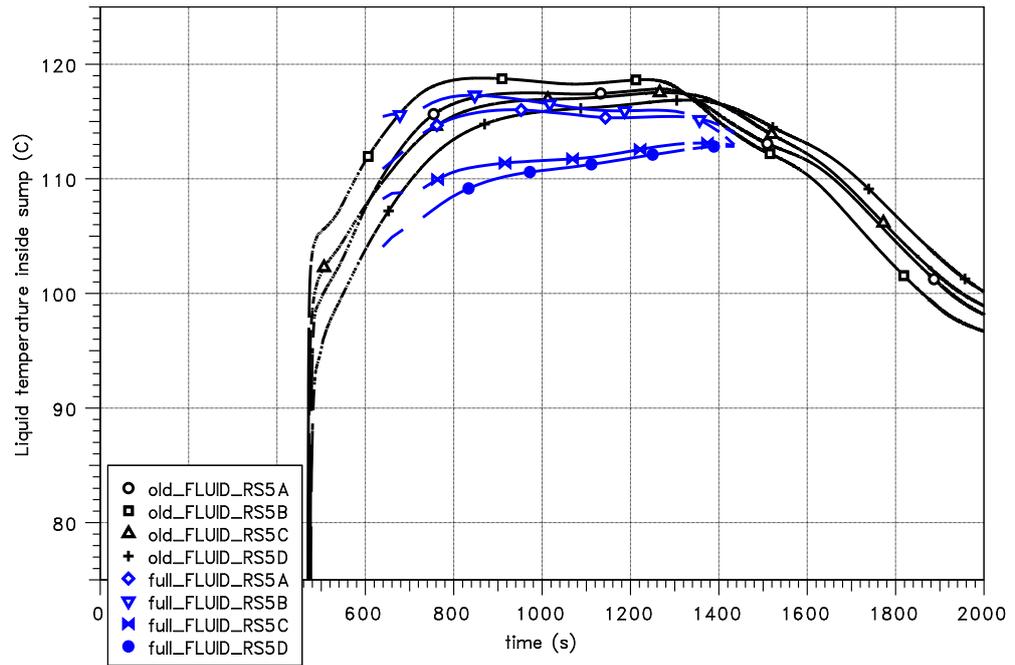


Abb. 3.15 Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS5A bis RS5D

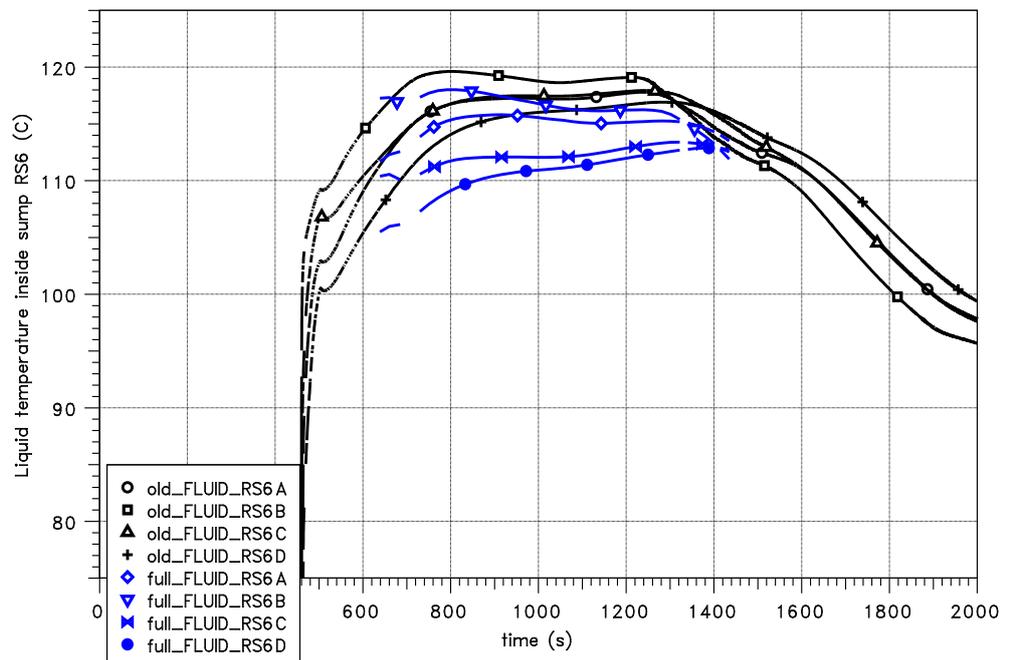


Abb. 3.16 Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS6A bis RS6D

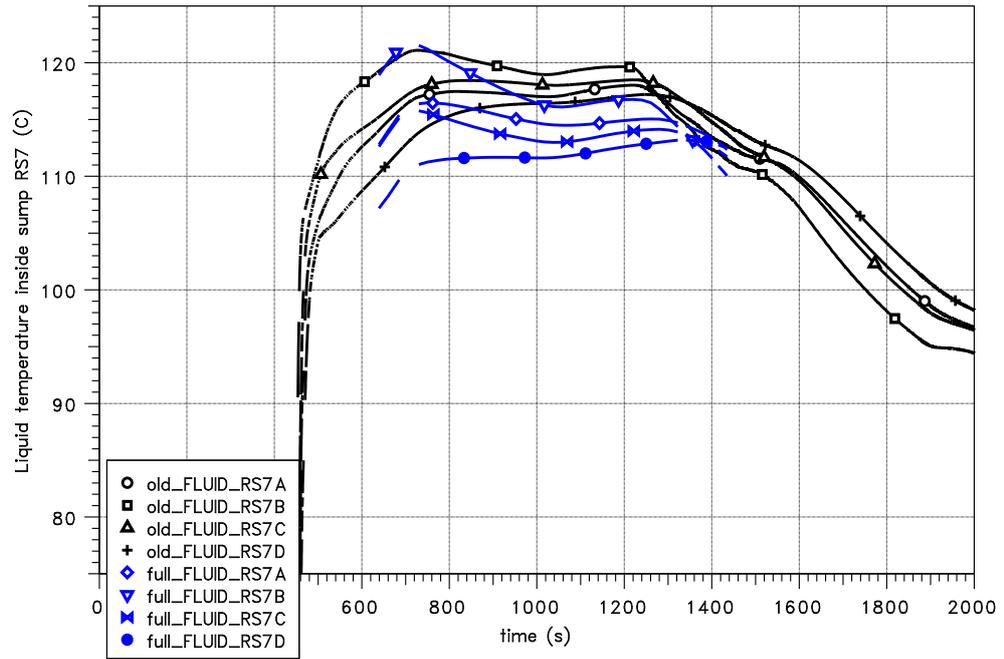


Abb. 3.17 Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS7A bis RS7D

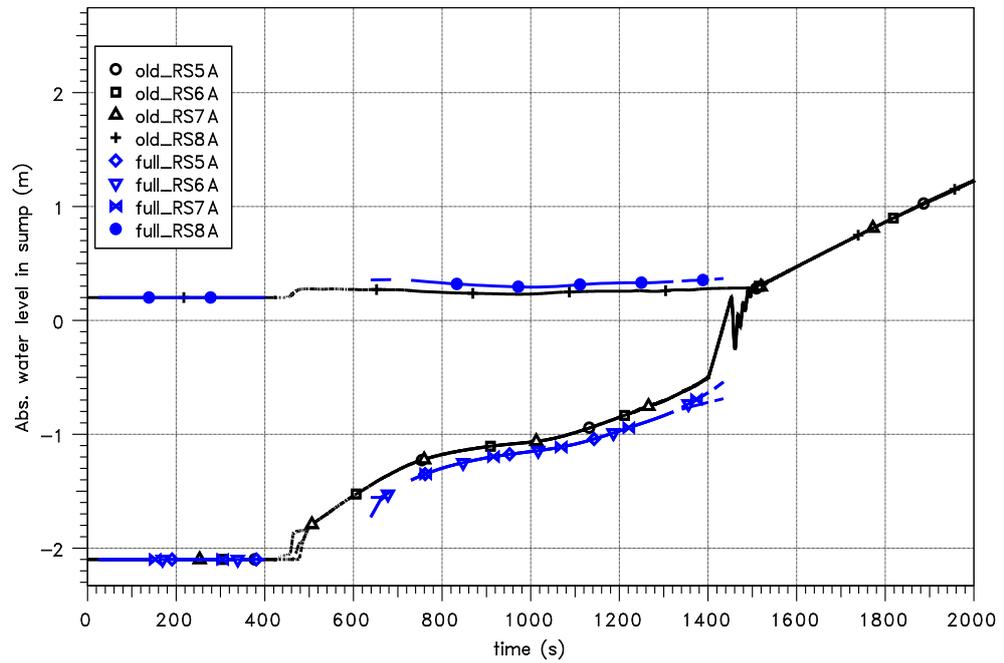


Abb. 3.18 Fluten: Vergleich der absoluten Wasserstände im Sumpf in RS5A bis RS8A

3.2.2 Ergebnisse der Tests gekoppelter Rechnungen von ATHLET-CD/COCOSYS mit CoPool

In diesem Abschnitt werden die ersten Ergebnisse der durchgeführten gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnung mit CoPool dargestellt. Zunächst wird die Erstellung des CoPool-Datensatzes für eine DWR-Anlage vom Typ KONVOI beschrieben und danach werden einzelne Ergebnisse dargestellt. Es wurde bewusst versucht, die komplexe Geometrie des Sumpfes im DWR detailliert mit CoPool gekoppelt an COCOSYS abzubilden, um die Möglichkeiten und ggf. Grenzen der derzeitigen CoPool-Version aufzuzeigen. Einfachere Validierungsbeispiele an der GES-Wanne, der Zittauer Strömungswanne, der THAI-Anlage sowie eine exemplarische Anwendung für einen SWR-72 sind im Abschlussbericht des CoPool-Vorhabens enthalten /ILI 15/.

Als Ergebnis der Anwendung auf DWR KONVOI werden Verbesserungsvorschläge für CoPool aufgezeigt, die im nächsten CoPool-Vorhaben bei ITWM umgesetzt werden sollen.

3.2.2.1 Erstellung eines CoPool-Datensatzes für eine KONVOI-Anlage

Die Erstellung eines CoPool-Datensatzes erfolgt in mehreren Schritten. Der Datensatz wird im XML-Format geschrieben. Zuerst wird ein hinreichend großes kartesisches Fluidgitter erzeugt. Dabei wird nur der Teil der KONVOI-Anlage betrachtet, welcher für die detaillierte Sumpf-Simulation von Bedeutung ist. Prinzipiell ist es möglich, das Gitter in einzelnen Abschnitten (jeweils in x-, y- oder z-Richtung) zu verfeinern. In der hier dargestellten Rechnung sind alle Fluidzellen gleich groß. Die Größe einer Gitterzelle ist 1 m · 1 m · 0,2 m. Im zweiten Schritt werden die Wände mit jeweils eigenem Gitter erzeugt (sogenannte Voxel-Compounds). Insgesamt wurden 6 verschiedene Wandelemente erzeugt (Abb. 3.19). Diese sind:

1. die Bodenplatte,
2. Zylinder unterhalb der Schale,
3. Schale (im unteren Bereich aus Beton),
4. die zylinderförmige Bodenplatte im Containmentsumpf,
5. der biologische Schild,
6. die inneren Wandstrukturen.

Die Wandstrukturen werden auf Basis von Grundelementen (Quader, Zylinder und Kugel) erzeugt. Dabei ist es möglich, Elemente zu erzeugen und wieder zu entfernen. So wird der biologische Schild (Element 5) als Vollzylinder erzeugt und ein „innerer“ Zylinder wieder ausgeschnitten. Ebenso wurde mit den relativ komplexen inneren Wandstrukturen (Element 6) verfahren.

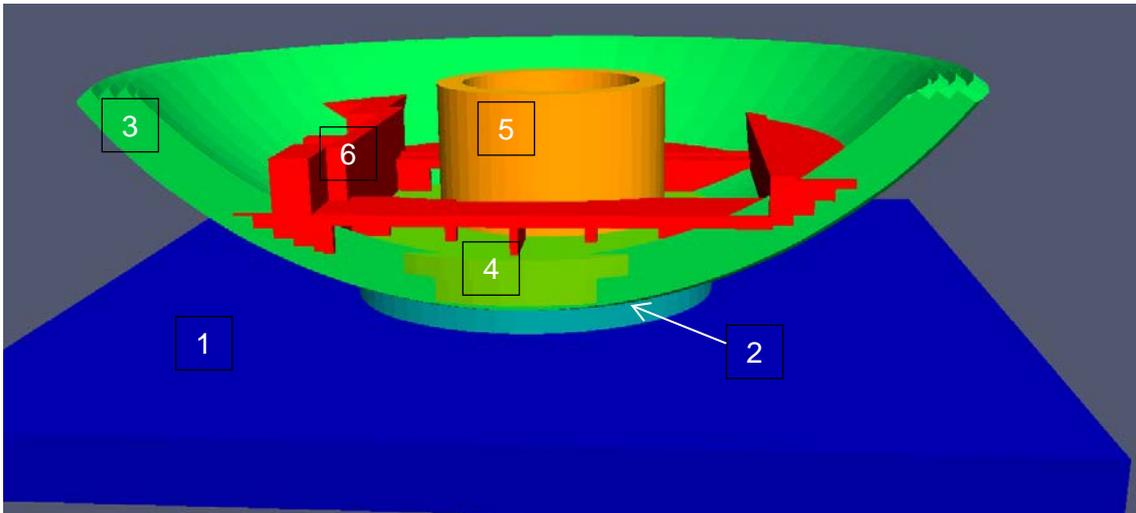


Abb. 3.19 Wandelemente (Compounds) im CoPool-Datensatz für den Sumpfbereich des DWR KONVOI

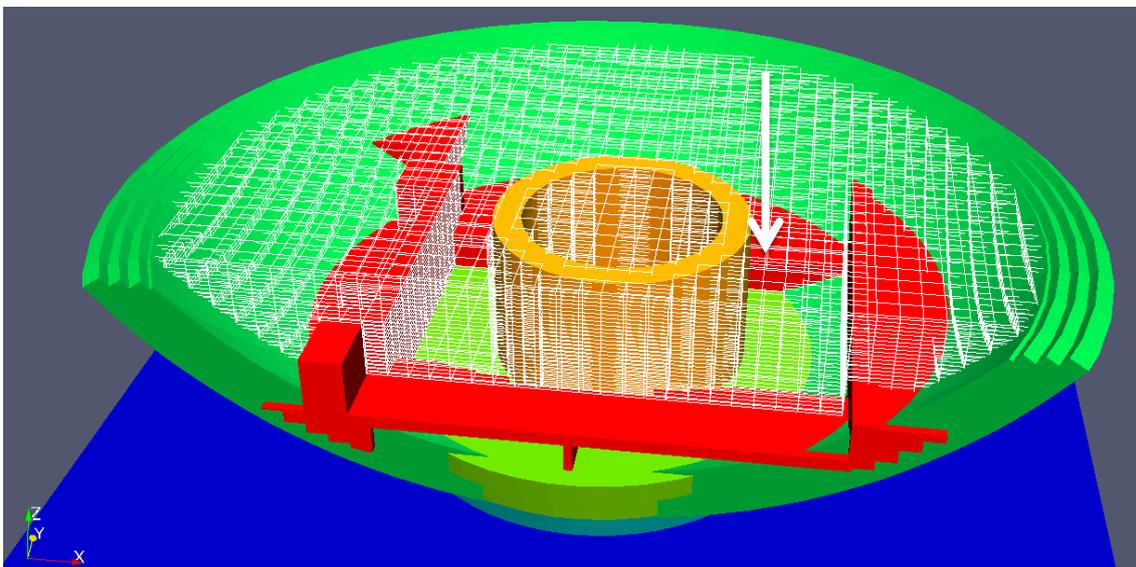


Abb. 3.20 Wandelemente mit „resultierendem“ Fluidgitter im CoPool-Datensatz für DWR KONVOI

Bei der endgültigen Gittererzeugung werden dort, wo sich Wandelemente befinden, die entsprechenden Fluidzellen ausgeschnitten (Abb. 3.20 oben). Jede Wand besitzt ein eigenes Gitter, welches erheblich feiner ist, um die Wärmeleitung in den Wandstrukturen hinreichend genau berechnen zu können. Mit den vorliegenden Informationen berechnet CoPool sogenannte Unterräume. In jedem Unterraum kann ein Wasserstand berechnet werden. Ebenso müssen den Senken und Quellen (Wasserezufuhr und -abfuhr) die jeweiligen Unterräume zugeordnet werden. Unabhängig von der genauen Lage einer Einspeisung wird der entsprechende Unterraum „von unten“ aufgefüllt.

Für die Höhen der einzelnen Wandelemente ist zu beachten, dass ein höher liegender Unterraum nur mit zwei darunterliegenden Unterräumen verbunden werden kann. Daher müssen sich die Höhenquoten der Oberkanten der einzelnen Elemente unterscheiden. Die von CoPool generierten Unterräume sind in Abb. 3.22 dargestellt.

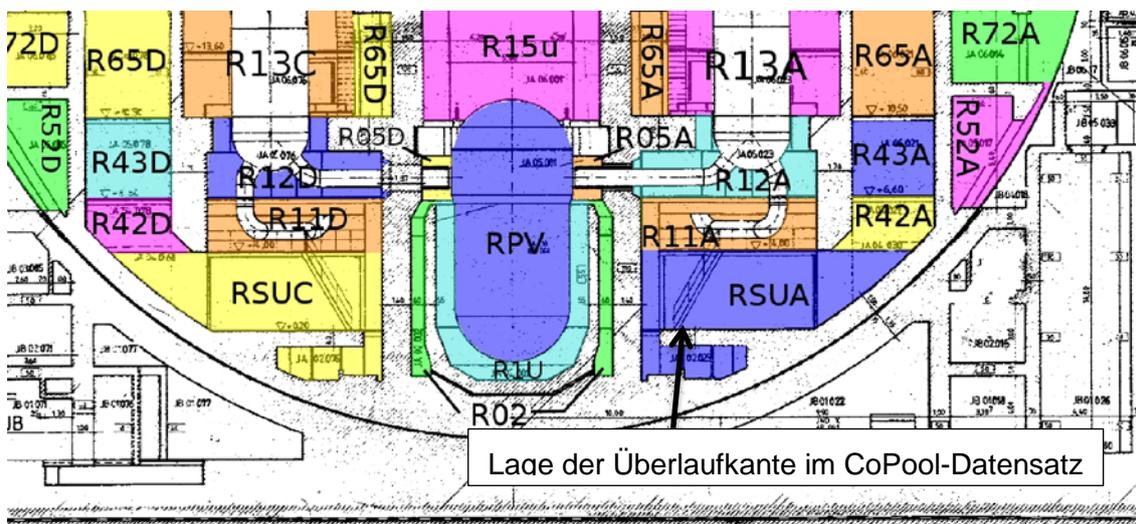


Abb. 3.21 Ausschnitt des COCOSYS-Datensatzes (Schnitt y-z-Ebene)

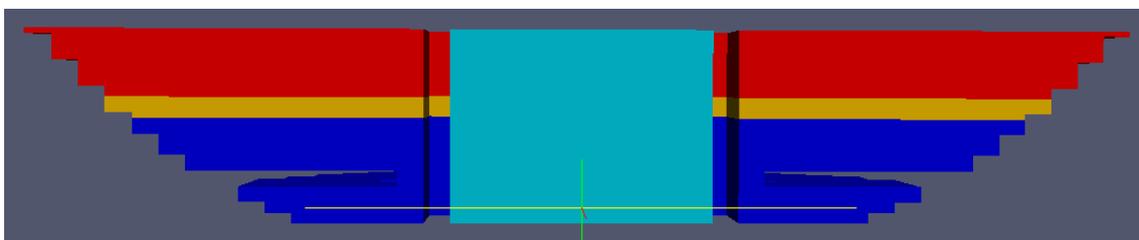


Abb. 3.22 Unterräume im CoPool-Datensatz

Für gekoppelte COCOSYS/CoPool-Rechnungen müssen die relevanten COCOSYS-Zonen mit den zugehörigen Fluidzellen in CoPool verknüpft werden. Dieses erfolgt bei der Datensatzerstellung in mehreren Schritten.

Im ersten Schritt wird für die Zuordnung von Fluidzellen zu COCOSYS-Zonen ein übergeordnetes Gitter verwendet, welches hinreichend fein sein muss. Dabei werden Bereiche, welche durch Wände separiert sind, von CoPool automatisch in separate Zonen aufgeteilt. Für die Aufteilung wurde ein kartesisches Koordinatensystem verwendet. In der x-Richtung werden 2 Zellen verwendet und in der y-Richtung 4 Zellen. Dies ist notwendig, um die separaten Zonen für R80A, R80D und R90B, R90C zu erzeugen. In z-Richtung ist nur eine Zelle notwendig. Durch diesen Mechanismus werden 60 Zonen erzeugt, welche dann händisch zu den tatsächlichen COCOSYS-Zonen (hier 13) zugeordnet werden müssen. Die Lage der einzelnen Zonen kann visualisiert werden. In der zu bearbeitenden Datei „CorrFluidZones.xml“ werden dann auch die Anfangsrandbedingungen (Starttemperatur und Wasserstand) sowie die Schnittstellen für die Sumpfoberfläche (Wärmeaustausch und Kondensation bzw. Verdampfung) definiert (Abb. 3.23).

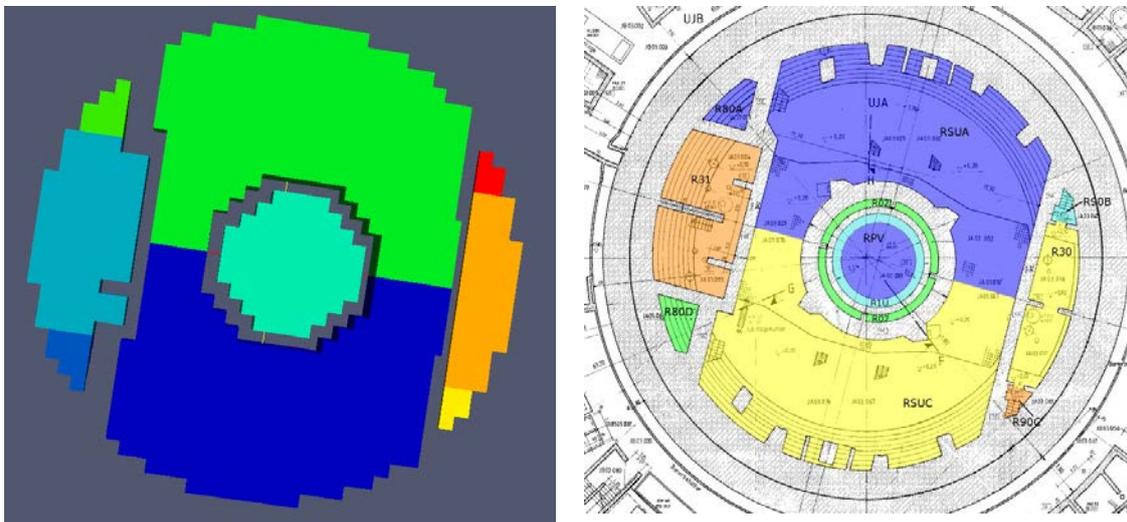


Abb. 3.23 Zonendarstellung in CoPool (links) und im COCOSYS-Datensatz (rechts)

Die Zuordnung von Wandoberflächen in CoPool und COCOSYS erfolgt ähnlich wie bei den Zonenvolumina. Im ersten Schritt berechnet CoPool unterschieden nach Wandelementen, deren Ausrichtung und des anliegenden Zonenvolumina automatisch eine Liste von Wandoberflächen. Diese müssen wieder händisch den COCOSYS-Wandoberflächen zugeordnet werden, wobei auch hier wieder eine Zusammenfassung

möglich ist. In dem vorliegenden Datensatz wurden automatisch 88 Wandoberflächen erzeugt (Abb. 3.24). Diese wurden dann zu 33 Wandoberflächen zusammengefasst und den COCOSYS-Wandstrukturen (unterschieden nach linker bzw. rechter Seite) zugeordnet. Dieser Schritt ist bei schon bestehendem COCOSYS-Datensatz deutlich schwieriger, weil hier schon Strukturen unter anderen Gesichtspunkten zusammengefasst wurden und somit eine Zuordnung teilweise nur bedingt möglich ist. Für diese Rechnung wurde der COCOSYS-Datensatz auf die Möglichkeiten in CoPool angepasst. Da teilweise Wandstrukturen in CoPool nur vereinfacht dargestellt sind bzw. Stahlstrukturen wie Gitterroste noch nicht gesondert abgebildet wurden, sollte der COCOSYS-Datensatz nur für diese Untersuchungen verwendet werden.

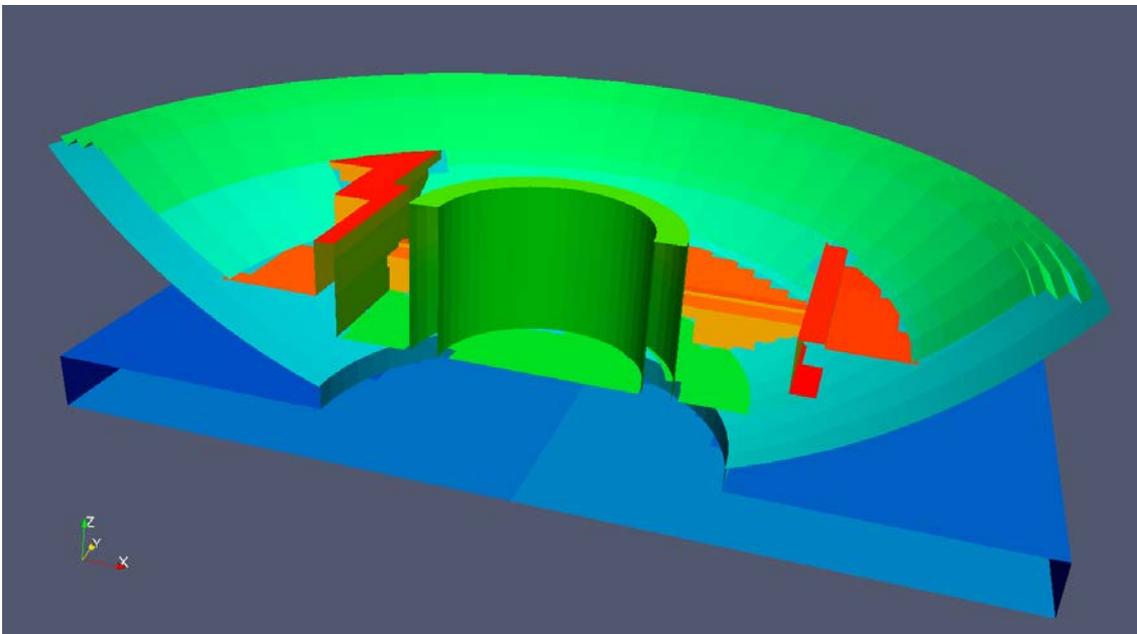


Abb. 3.24 Von CoPool erzeugte Wandoberflächen (vor der Zusammenfassung)

Im abschließenden Schritt muss die Kopplung zwischen COCOSYS und CoPool realisiert werden. Die möglichen Schnittstellen zwischen COCOSYS und CoPool sind im COCOSYS Reference Manual dargestellt (siehe auch Abb. 3.25).

Folgende Daten werden von CoPool nach COCOSYS übergeben:

- mittlere Sumpftemperatur,
- mittlere Sumpfoberflächentemperatur,
- Volumenaustausch zwischen den Sumpfen, um in COCOSYS die entsprechenden Spaltprodukte zu transportieren,

- Wandoberflächen unter- und oberhalb des Sumpfwasserspiegels,
- Mittlere Wandoberflächentemperaturen unter- und oberhalb des Sumpfwasserspiegels und
- Wärmestrom in Wandoberflächen unterhalb des Sumpfwasserspiegels.

Daten, welche von COCOSYS nach CoPool übergeben werden, sind:

- Druck- und Temperaturrandbedingung an der Sumpfoberfläche,
- Wärmeaustausch an der Sumpfoberfläche sowie Kondensation bzw. Verdampfung,
- mittlerer Wärmestrom an Wandoberflächen oberhalb des Wasserspiegels,
- Wandkondensationsrate (als Linienquelle in den zugehörigen Sumpf),
- Quellen und Senken durch Drainageverbindungen, Einspeisungen an der Sumpfoberfläche sowie Quellen und Senken im Sumpf. Bei Einspeisung von Dampf (z. B. über Kondensationsrohre) wird dieser in Wasser umgerechnet. Ebenso können Impulswechselwirkungen berücksichtigt werden.

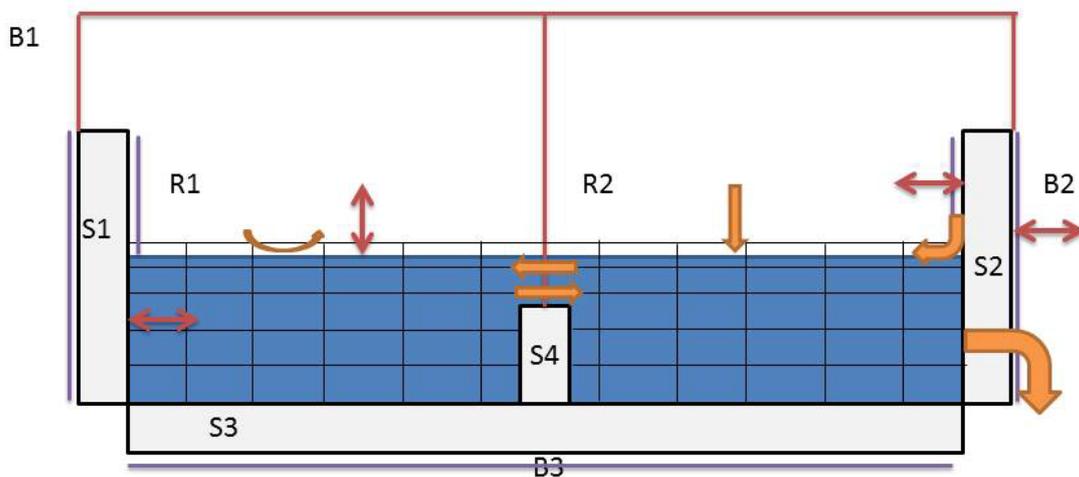


Abb. 3.25 Konzept der Kopplung zwischen COCOSYS und CoPool

Zunächst wird für jede Zone und jede Wandoberfläche ein Interface für den entsprechenden Austausch an der Sumpfoberfläche bzw. Wandoberfläche definiert. Für jede Drainageverbindung, welche in einer Zone endet bzw. beginnt, die mit CoPool „berechnet“ wird, muss eine Schnittstelle im CoPool-Datensatz definiert werden. Hier wird dann die genaue Lage definiert, da diese Information bisher im COCOSYS-Datensatz

nicht benötigt wird. Die Zuordnung erfolgt über den Namen der Verbindung. Hier wird eine Liste in COCOSYS automatisch generiert. In Zusammenhang mit gekoppelten Rechnungen mit ATHLET/COCOSYS und CoPool werden nun auch Interface-Verbindungen vom Typ INTF_JSYS und INTF_JUN berücksichtigt.

Für den detaillierten Datensatz wurden 81 solcher Schnittstellen erzeugt. Die meisten sind davon Drainageverbindungen von den oberen Zonen in den Containmentsumpf bzw. deren umliegende Zonen. Vier von diesen Verbindungen gehören zu den Anschlussleitungen für den Sumpfumwälzbetrieb der ND-Notkühlsysteme, welche über das THY-Hauptmodul und den COCOSYS-Treiber an ATHLET bzw. ATHLET-CD angebunden sind.

Für die Übertragung eines Strömungsaustausches zwischen den Sumpfbzonen, welche mit CoPool berechnet werden, wurden zusätzlich 8 Sump-Balance-Verbindungen definiert.

COCOSYS-seitig sind nur wenige Änderungen im Datensatz notwendig. Hier muss die Zeitsteuerung für die gekoppelte ATHLET/COCOSYS/CoPool-Rechnung festgelegt werden. Sie sieht wie folgt aus:

```
@
K----- MAIN
@      DTRULE
      MIN_CmC
@      MODULE  LEVEL  RULE  STEPS
      ATH      1     OTCY
      THY      2     OTCY
      CPL      3     OTCY
```

Der Synchronisationszeitschritt basiert auf CoPool (MIN_CmC), da hier der Rechenzeitbedarf am höchsten ist und so der Zeitschritt von CoPool nicht durch die Kopplung reduziert wird. In der Rechenschleife rechnet zunächst ATHLET gefolgt von COCOSYS THY, CoPool und schließlich COCOSYS AFP (notwendig für den Bortransport mit dem Kühlmittel).

Schließlich muss noch eine Liste der Zonen, dessen Sümpfe durch CoPool berechnet werden, definiert werden.

3.2.2.2 Erste Rechenergebnisse für DWR KONVOI

In diesem Abschnitt werden erste Ergebnisse und der Vergleich der Rechnung mit (blaue Kurven) und ohne (schwarze Kurven) CoPool dargestellt. Die charakteristischen Zeitpunkte des Szenarios können aus der Tab. 3.4 entnommen werden. Die Rechnung wurde bis 3600 s durchgeführt.

Zunächst werden einzelne Ergebnisse in Bezug auf den Kühlkreislauf sowie der Sekundärseite dargestellt. Dies sind die Drücke im Primär- und Sekundärkreis (Abb. 3.26), die Temperatur im RDB (Abb. 3.27) sowie der Wasserstand im Dampferzeuger (Abb. 3.28), ein Ergebnis von ATHLET. Wie zu erwarten, sind die Unterschiede in den Rechenergebnissen relativ gering. 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.

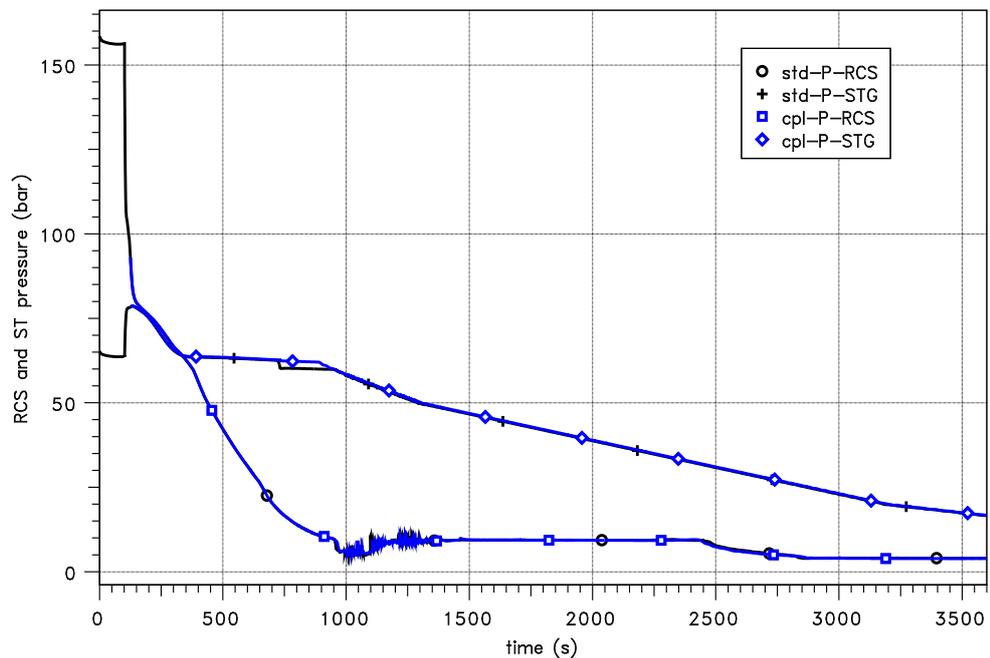


Abb. 3.26 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Primär- und Sekundärkreis

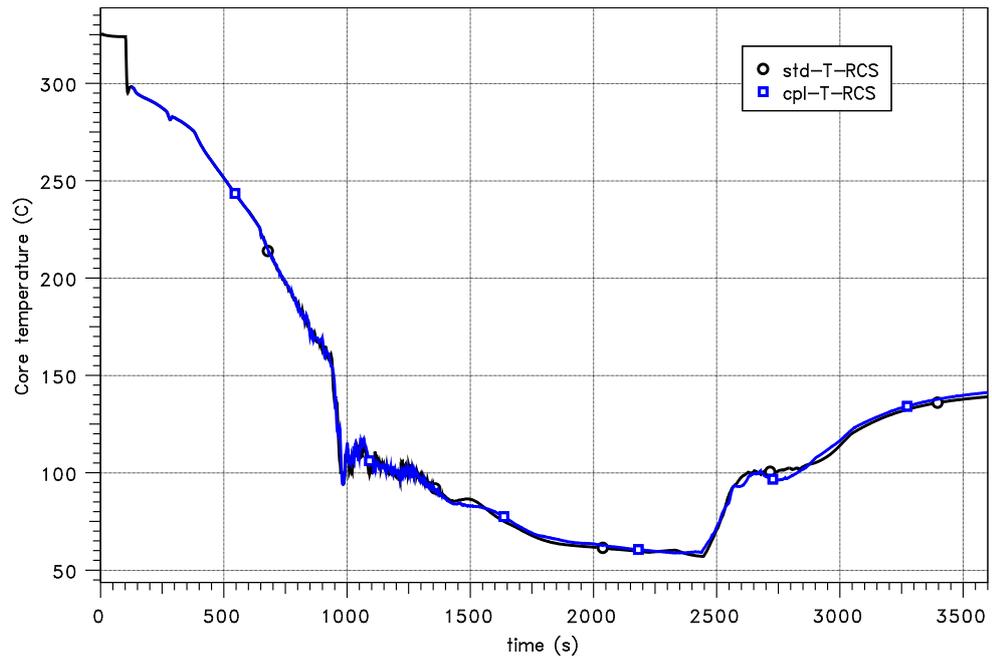


Abb. 3.27 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der RDB-Temperatur

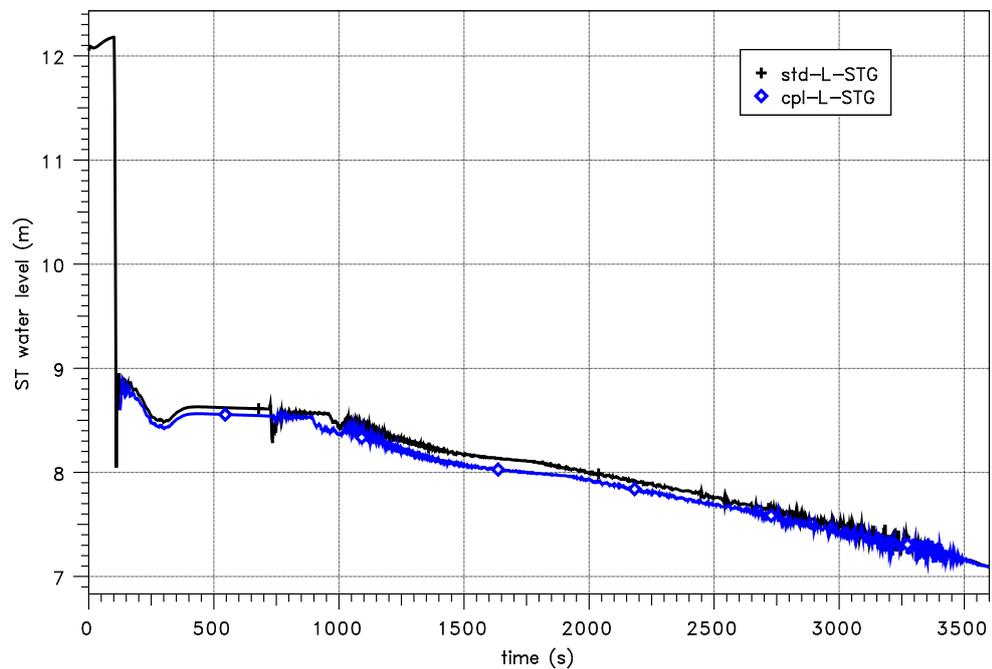


Abb. 3.28 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes im Dampferzeuger (Strang 2)

In Abb. 3.29 werden die Temperaturverteilungen im Containmentsumpf für die Zeiten 1 300 s, 2 500 s und 3 600 s nach Störfallbeginn gezeigt. Im ersten Bild bei 1 300 s ist im Sektor B (oben rechts) der Einfluss der Notkühlung erkennbar. Das etwas kältere Wasser sammelt sich im unteren Bereich um den Sektor B. Im späteren Zeitverlauf bei ca. 2 500 kurz nach Beginn der Sumpfumwälzung mit der Entnahme aus dem Sektor A (links oben) ist eine Temperaturschichtung deutlich zu erkennen. 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 deutlich vorhanden.

Im Folgenden werden erste einzelne Ergebnisse des Containmentverhaltens diskutiert. Wie aus den Abb. 3.30 und Abb. 3.31 zu erkennen ist, ist der Energieinhalt im Containment etwas geringer. So beträgt die Druckdifferenz ca. 0,15 bar. Ebenso sind die Temperaturen ca. 10 K niedriger. Hier sollte das Verhalten der von CoPool berechneten Wandstrukturen, welche mit der Atmosphäre verknüpft sind, weiter untersucht werden. Möglicherweise muss die Schichteinteilung dieser Wandstrukturen in Richtung des Wärmetransportes noch verbessert werden.

Das Wasservolumen im Sumpf wird in CoPool berechnet und an COCOSYS übertragen. Hier ist die Übereinstimmung in der Anfangsphase relativ gut (Abb. 3.32). Im weiteren Verlauf werden die Unterschiede größer. Eine Ursache ist, dass COCOSYS eine temperaturabhängige Dichte des Wassers berücksichtigt, während in CoPool eine lineare Abhängigkeit verwendet wird. Hier sollte die Abstimmung der Stoffwerte für Wasser (z. B. Referenztemperatur) im Datensatz noch verbessert werden. Entsprechendes gilt auch für den Wasserstand in den Sumpfbereichen (Abb. 3.33). Hier ist zu beachten, dass die Kote des Bodens in beiden Rechnungen unterschiedlich ist. Obwohl in CoPool keine Füllstandskurve hinterlegt ist, ist die Übereinstimmung zwischen CoPool und COCOSYS noch vergleichsweise gut.

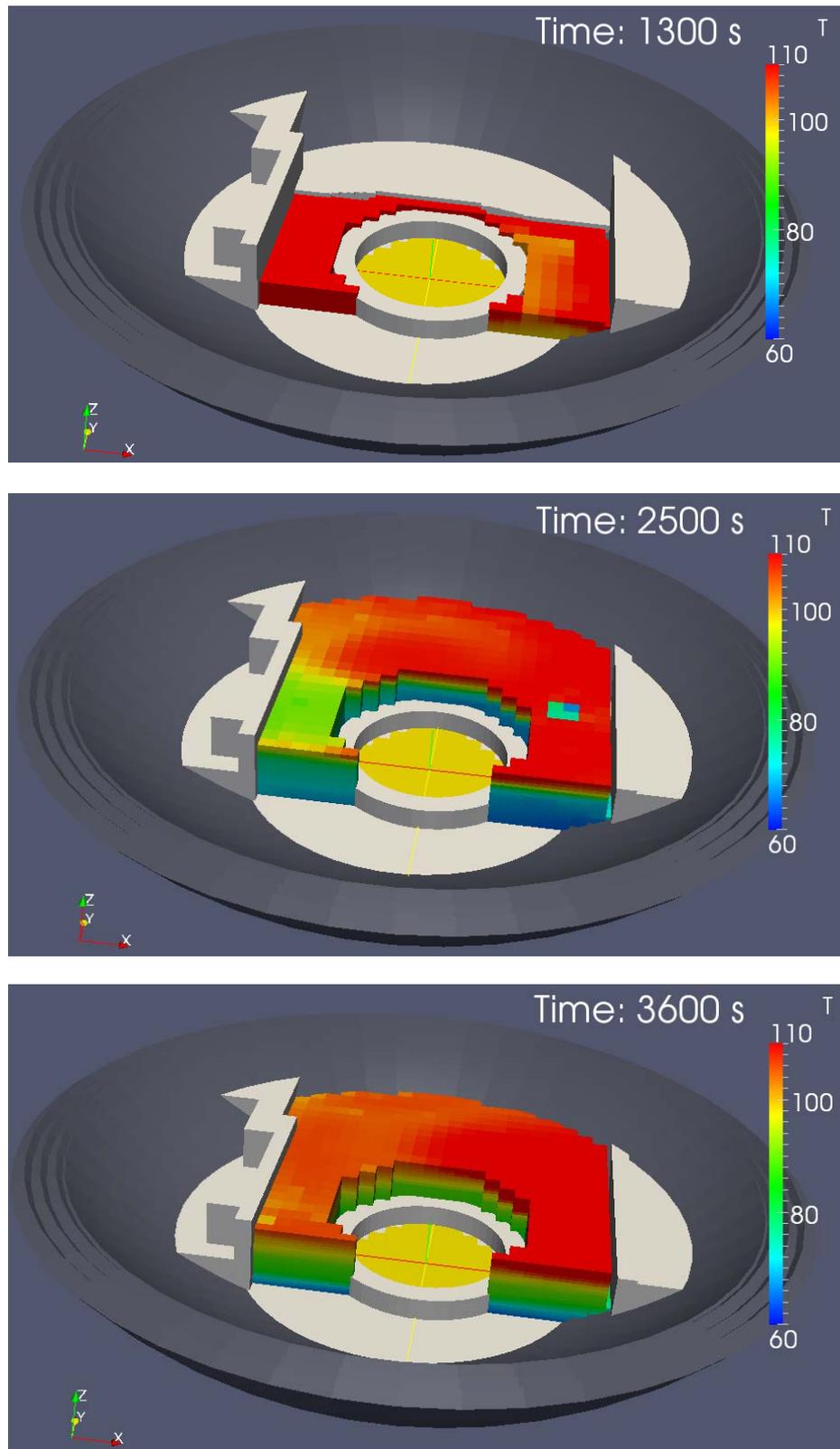


Abb. 3.29 Temperaturverteilung im Sumpf bei 1 300 s, 2 500 s und 3 600 s

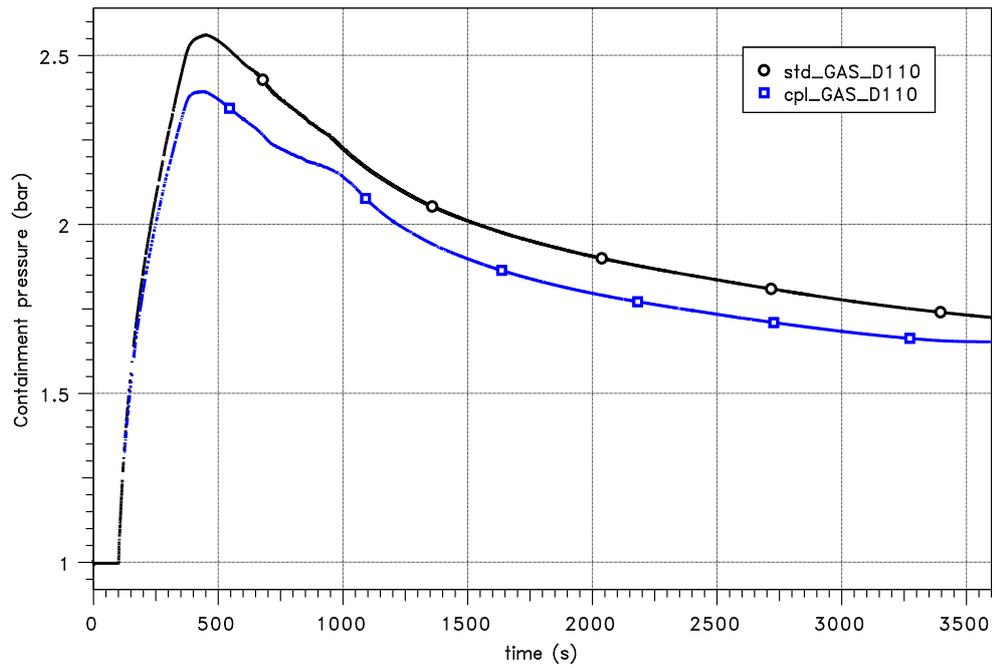


Abb. 3.30 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Containmentdrucks

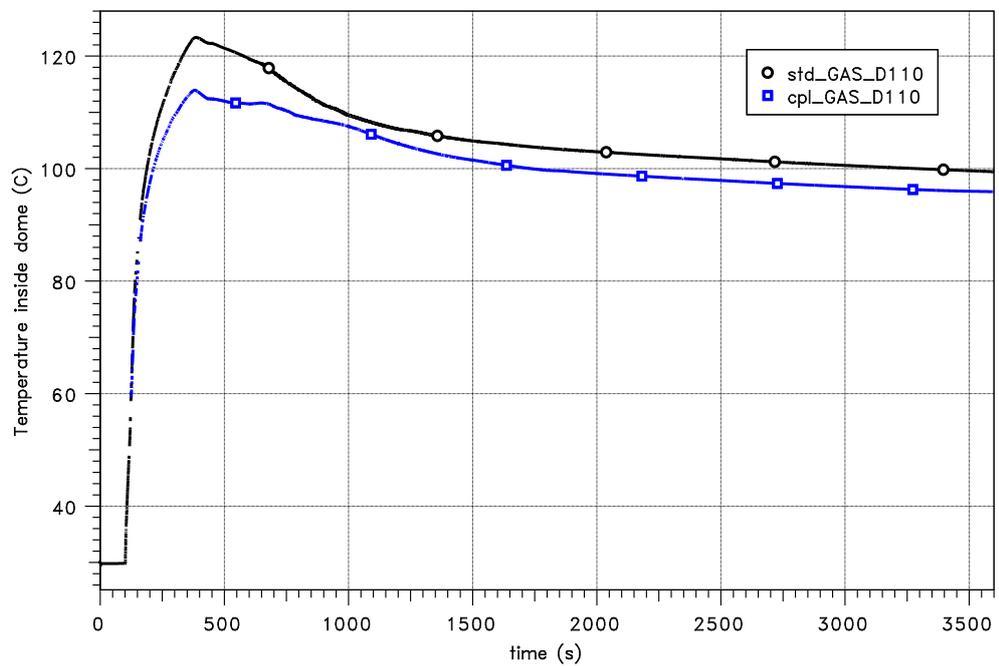


Abb. 3.31 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Temperaturen im Dombereich

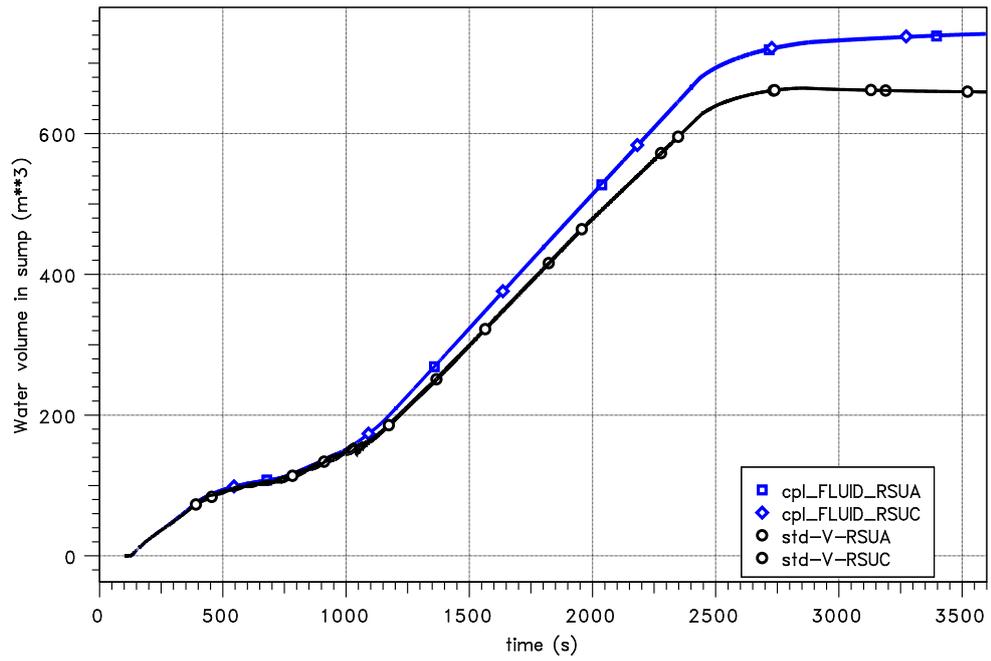


Abb. 3.32 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Wasservolumina in RSUA und RSUC

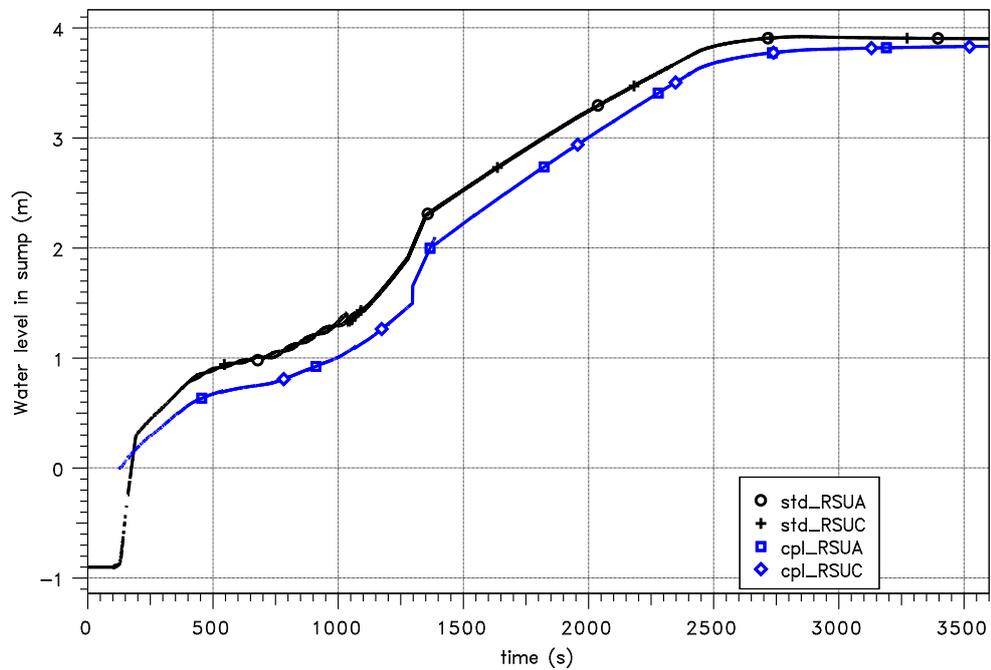


Abb. 3.33 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpfwasserstände in RSUA und RSUC

In Abb. 3.34 ist ein Vergleich der Sumpftemperaturen dargestellt. Die von CoPool berechneten mittleren Sumpftemperaturen (blaue Kurven) sind im Vergleich zur Stand-Alone-Rechnung (schwarze Kurven) ca. 10 K höher. Eingezeichnet sind auch einzelne Monitorpunkte aus den 4 Sektoren. Diese befinden sich ca. 0,7 m über dem Sumpfboden, d. h. nach ca. 400 s wechseln die Werte von den Atmosphärentemperaturen (berechnet von COCOSYS als Randbedingung für CoPool) zu den Sumpftemperaturen. Die Temperaturunterschiede in den Sektoren betragen maximal ca. 20 K. Nach Beginn der Notkühlung sammelt sich das kältere Wasser im unteren Bereich der Sektoren B und C (grüne und pinke 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).

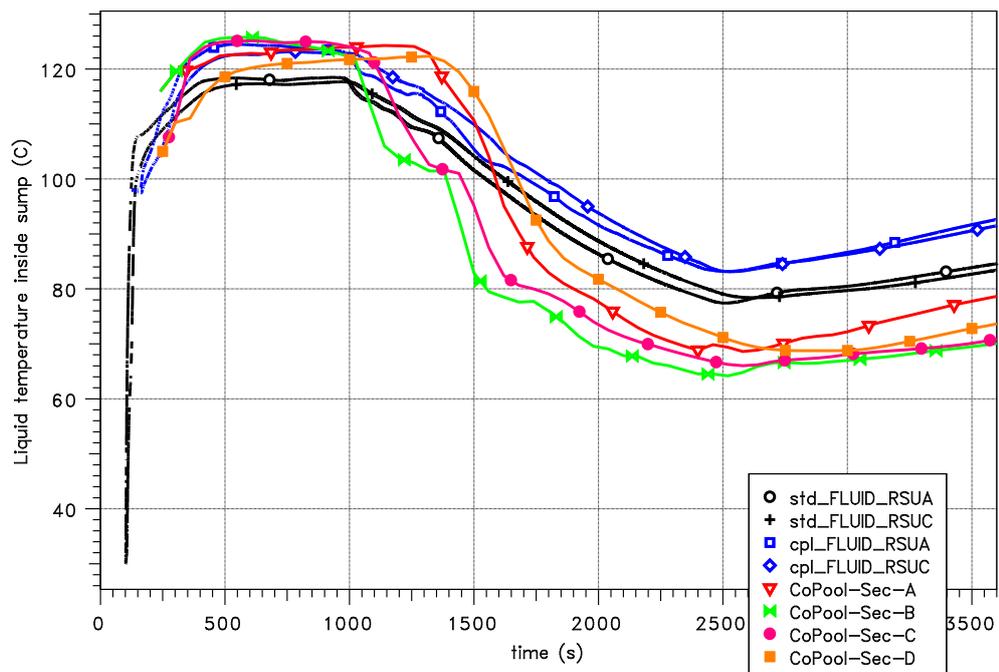


Abb. 3.34 ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpftemperaturen in RSUA und RSUC

Die Tests und Anwendungsrechnungen auch für weitere Anlagentypen werden im Nachfolgevorhaben sowie im nachfolgenden neuen CoPool-Vorhaben fortgeführt.

3.2.3 Auswertung der Rechenergebnisse im Hinblick auf den Containment-Sumpf

In den Rechnungen mit Verwendung des neuen ATM_FULL Verbindungstyps in COCOSYS sowie der gekoppelten Codes ATHLET/COCOSYS mit CoPool ist ein erster Vergleich zu den bisherigen Ergebnissen durchgeführt worden. Im Folgenden wird auf noch notwendige Verbesserungen hingewiesen:

Fluten von Zonen

- Unter komplexen Randbedingungen (hier die Zwischendecke und Einteilung in mehreren Sektoren sowie Zwischenbereiche treten noch Stabilitätsprobleme auf. Insbesondere beim Fluten. Ebenso sind die Rechenzeiten dadurch deutlich länger.
- Die Anbindung zu den Wärmeleitungsmodellen ist noch nicht vollständig. Dies gilt zum Beispiel für die Wand-Wand-Strahlung. Einzelne Programmabbrüche wurden diesbezüglich behoben.
- Die Anbindung zum Aerosolmodell (sowohl das alte wie auch das umstrukturierte) ist ebenfalls nicht vollständig. In dieser Rechnung wurde das „alte“ AFP-Hauptmodul zur Simulation des Bortransports verwendet.

Kopplung mit CoPool

- Die Handhabung insbesondere im Zusammenhang mit Wandstrukturen ist sehr aufwändig. Ebenfalls ist es schwierig bzw. aufwändig, einen solchen bereits gekoppelten Datensatz zu modifizieren.
- Es ist notwendig, eine Fehlerkontrolle im Löser von CoPool zu implementieren. Zu niedrige Zeitschritte führen zu instabilen Resultaten.
- Fehlermeldungen in CoPool (insbesondere bei gekoppelten Rechnungen) sollten weiter verbessert werden.
- Die Berechnung der mittleren Sumpfoberflächentemperatur in CoPool muss noch verbessert werden (wurde in der gekoppelten Rechnung hier nicht verwendet).
- Die Rechenergebnisse zeigen eine deutliche Temperaturschichtung im Sumpf.

Insgesamt zeigt sich, dass komplexe Anwendungsrechnungen eine hohe Anforderung an die Programme stellt. Somit sind solche Rechnungen elementar für die Qualifizierung neuer Modelle, auch wenn der Aufwand zur Durchführung teilweise erheblich ist.

Die Arbeiten werden im Nachfolgevorhaben RS1544 sowie im neuen CoPool-Vorhaben voraussichtlich ab Mitte 2016 fortgeführt.

3.3 Arbeiten zu COCOSYS – Erprobung der Modellkette zum Schmelzeaustrag aus dem RDB unter erhöhtem Druck (DCH) am Beispiel des EPR

In zurückliegenden COCOSYS-Entwicklungsvorhaben wurde zur Simulation der Vorgänge beim Schmelzeaustrag ins Containment unter hohem Druck im RDB (Direct Containment Heating – DCH) in COCOSYS ein spezielles Modell zur Verfügung gestellt /SPE 08/. Im Vorhaben RS1185 /SPE 12/ wurde eine Korrelation entwickelt, mithilfe derer der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in andere Bereiche des Sicherheitsbehälters mit dem DCH-Modell in COCOSYS berechnet werden kann. Das Modell wurde anhand von Experimenten in der DISCO-Anlage beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) erfolgreich überprüft. Eine Anwendung auf reale Anlagen erfolgte bisher nicht.

Die im Projekt durchgeführten Rechnungen haben zum Ziel, das DCH-Modell erstmalig auf eine reale Reaktorgeometrie abzubilden. Um dieses Ziel zu erreichen, sind die Arbeiten in drei Stufen durchgeführt worden. Zunächst ist ein DISCO-Versuch berechnet worden, um zu zeigen, dass frühere Validierungsergebnisse des DCH-Modells auch noch mit der heute im Code vorhandenen Version erzielt werden können. Danach ist das Modell auf eine sehr einfache Nodalisierung eines EPR-artigen Containments angewendet worden. Im letzten Schritt ist ein real erstellter EPR-Datensatz um die Modellierung mit DCH-Phänomen ergänzt worden. Dazu ist ein von der GRS in einem früheren Vorhaben erstellter Datensatz verwendet worden /ALL 99/.

3.3.1 Simulation des DCH-Vorganges in COCOSYS

In /SPE 12/ wird das DCH-Modell in COCOSYS zusammenfassend wie folgt beschrieben. Die zentrale Fragestellung bei der Modellierung des Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube bezieht sich auf das Entrainment, d. h. die Aufwirbelung und Dispersion von nach RDB-Versagen zunächst am Boden der Reaktorgrube (Cavity) abgelagerter Schmelze durch die Gasströmung in der Reaktorgrube. Als Quelle für die aufgewirbelte Schmelze berücksichtigt das Modell den Mitriss von Schmelze am Boden der Reaktorgrube, d. h. nur im unteren Bereich der Reaktorgrube gibt es im Modell eine Quelle

für die atmosphärisch getragene Schmelzemasse m_{atm} (Abb. 3.35). Entsprechend der Annahmen im Modell wird Schmelze zunächst einphasig aus dem RDB freigesetzt und in der Reaktorgrube (lower cavity, Abb. 3.35) am Boden abgelagert. Mit Beginn der zweiphasigen Ausströmung aus dem RDB wird auf dem Boden der Reaktorgrube abgelagerte Schmelze durch die Gasströmung aufgewirbelt und zunächst in den oberen Bereich der Reaktorgrube (upper cavity, Abb. 3.35) mitgerissen (entrainment). Dort ist abhängig von der Konstruktion der Reaktorgrube und den vorhandenen Abströmwegen in den Sicherheitsbehälter ein Austrag nach oben in den Reaktorraum oder entlang der Hauptkühlmittelleitungen in angrenzende Seitenräume der Anlage möglich. Die Ablagerung von Schmelze (deposition), die in allen COCOSYS-Zonen simuliert wird, wird auf den Einfluss von Schwerkraft mit der Erdbeschleunigung g zurückgeführt.

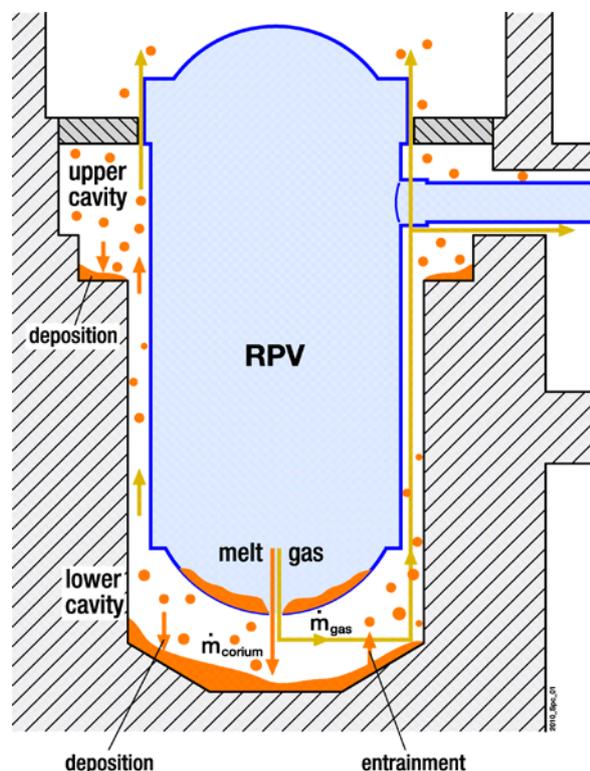


Abb. 3.35 Schematische Darstellung der simulierten Phänomene bezüglich des Transports von Gas und Schmelze in einer Reaktorgrube; Annahme: zentrales RDB-Versagen am tiefsten Punkt /SPE 12/

Die Rechnung bzw. i. d. R. auch Experimente enden, wenn der Ausströmvorgang aus dem RDB beendet ist. Eine weitere Umlagerung der in den einzelnen Räumen abgelagerten Schmelze z. B. durch Abfließen entlang von Wänden oder in tiefere Räume oder eine sich anschließende lokale Schmelze-Beton-Wechselwirkung wird derzeit in

COCOSYS nicht berechnet und wurde auch in den einschlägigen Experimenten nicht untersucht. Weitere Details zur DCH-Modellierung in COCOSYS sind in /SPE 12/ enthalten.

Die Hauptarbeit in diesem Punkt im Vorhaben stellte die Herstellung der Ablauffähigkeit der verwendeten COCOSYS-Entwicklerversion mit dem DCH-Modell in der Anwendung für reale Anlagen dar. Folgende Aufstellung listet die notwendigen Änderungen am Quellcode auf:

1. Zunächst sind die Differentialgleichungen für das DCH-Modell ausgeschaltet worden, solange das DCH-Modell nicht läuft, um Rechenzeit zu sparen. Dazu ist die Ausgabegröße DCHSTA eingeführt worden.
2. Aufgrund der hohen Temperaturen während des DCH-Vorgangs, bedingt durch die ausgetragenen heißen Schmelzepartikel und ggf. auftretende exotherme Oxidationsreaktionen von Metallpartikeln, die in COCOSYS-Rechnungen ohne den DCH-Vorgang so nicht auftreten, traten an verschiedenen Stellen Überläufe von Gleitkommazahlen auf. An mehreren Stellen im Code sind daher maximal mögliche Exponenten für die Exponentialfunktion abgefangen worden.
3. Das Kriterium zum Abschalten des Gaszonenteils von Nichtgleichgewichtszonen musste von Gasmassen auf freies Gasvolumen umgestellt werden. Wegen eines hohen Anteils von leichtem Wasserstoff bei gleichzeitig niedriger Dichte aufgrund der hohen Temperaturen beim DCH ist das Massenkriterium unterschritten worden, ohne dass Wasser in der Zone vorhanden war. Die Modellierung des Abschaltkriteriums ist nicht abgeschlossen und muss auf die Situation beim DCH Rücksicht nehmen.
4. Für das beim Versagen des RDB zur Reaktorgrube auftretende Leck sind im Code an verschiedenen Stellen minimale Flächen definiert. Diese mussten vereinheitlicht werden, da sonst Abstürze auftraten. Dazu ist die Konstante RPV_MIN_AREA eingeführt worden.
5. Die Temperaturdifferenz zwischen der Schmelze und Strukturen im Containment ist aufgrund eines falsch belegten Feldes HSTEMP falsch berechnet worden. Dieses führte zu einem stetigen Anstieg der eingetragenen Energie und zu hohen Temperaturen in einigen Zonen, die auch zu Code-Abstürzen führte. In der korrigierten Version wird nun das Feld HSTAPX mit angenäherten Strukturtemperaturen anstatt von HSTEMP verwendet.

6. Das Öffnen des Lecks im RDB-Boden wurde aufgrund einer stark schwankenden Funktion berechnet, die zu numerischen Problemen in der FEBE führt. Diese Funktion ist durch das Umstellen auf Druckdifferenzen geglättet worden, was zu einem wesentlich besseren Verhalten führt. Allerdings treten weiterhin Probleme auf, wenn die Druckdifferenz zwischen RDB und Reaktorgrube umschlägt.

Bei den durchgeführten Arbeiten sind ungleiche Ergebnisse mit der FEBE bei unterschiedlicher Benutzung der IFTRIX-Option aufgetreten. Dieses Problem zeigt, dass die DCH-Differentialgleichungen entweder nicht hinreichend stetig sind oder aber die Objekt-Objekt-Kopplungen im IFTRIX-Paket nicht korrekt implementiert sind. Die durchgeführten Variationsrechnungen lassen aber nur geringe Abweichungen erkennen. Die Probleme der FEBE sollten im COCOSYS-Entwicklungsvorhaben behandelt werden.

3.3.2 Überblick über DCH-Versuche DISCO-H bei KIT

Die bekannten Experimente zum Austrag von Schmelze aus dem RDB unter hohem Druck und DCH sind zumeist integrale Experimente (Beispiel: DISCO-H beim KIT, Abb. 3.36). Der Versuchsstand DISCO-H modelliert den Reaktordruckbehälter, die Reaktorgrube, die Reaktorräume und den Sicherheitsbehälter eines Reaktors mit ca. 1200 MWe im Maßstab 1:18. Modelliert wurden in verschiedenen Experimenten danach der EPR, der französische Reaktor P'4 mit 1300 MWe, ein VVER-1000 sowie später ein DWR KONVOI /SPE 08/. Dabei weicht der Maßstab je nach Anlage vom genannten Verhältnis leicht ab. Die Auswirkungen des DCH-Vorgangs auf das Containment sind stark abhängig vom Design der Reaktoranlage bzw. Reaktorgrube und den vorhandenen Abströmwegen der Schmelzepartikel aus der Reaktorgrube und dem Druck beim RDB-Versagen, der im Bereich zwischen 0,5 MPa und 2,5 MPa variieren kann.

Die Ausström- und Dispersionsprozesse, die Wärmeübergangsprozesse von der Schmelze an die Atmosphäre und an die Strukturen sowie die chemischen Prozesse werden mit Eisen-Aluminiumoxid-Schmelzen (ca. 10,6 kg) und Dampf modelliert. Neben dem effizienten Wärmeübergang von den Schmelzetropfen an das Gas tragen die exotherme Metall-Sauerstoffreaktion sowie die Wasserstoffverbrennung zur Erhöhung des Druckes und der Temperatur im Sicherheitsbehälter bei /MEY 04/, /SPE 08/. Der Vorgang des Entrainments, d. h. des Schmelzemitrisse vom Boden der Grube wurde hier nicht isoliert beobachtet bzw. gemessen, sondern es wurde nur das integrale Ergebnis aller beteiligten Phänomene gemessen, insbesondere der integrale Austrag von

Schmelze aus der Reaktorgrube in angrenzende Compartments und den Dom des Containments für verschiedene Anlagentypen. Insofern liegen auch keine gesicherten Erkenntnisse vor, an welchen Stellen in der Grube die Schmelze verbleibt.

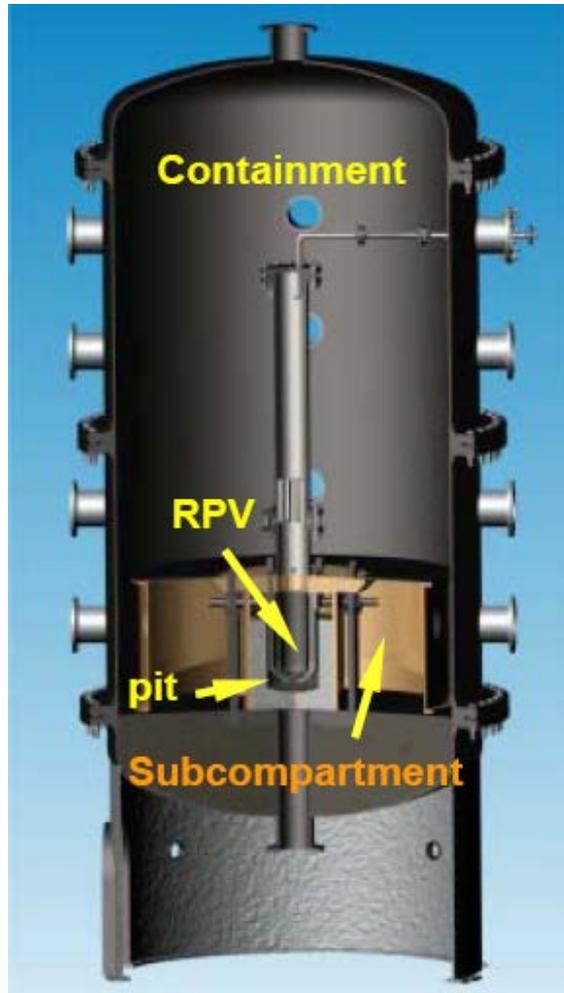


Abb. 3.36 Schnitt durch die DISCO-H Anlage bei KIT für DCH-Experimente /MEY 04/

Abb. 3.37 zeigt einen Überblick über generelle Ergebnisse von DCH-Experimenten bei KIT zu EPR, P'4 und VVER-1000 sowie Erkenntnisse zu Westinghouse-Anlagen aus den 80er und 90er Jahren aus Experimenten in den USA. In diesen Experimenten wurde ein Versagen des RDB an der tiefsten Stelle des RDB-Bodens angenommen, was zu maximalen Belastungen des Containments durch DCH führt. Der Druck im RDB war etwas unterschiedlich (EPR: 1,25 MPa, P'4: 1,98 MPa, VVER-1000: 2,18 MPa). Neuere Untersuchungen wurden dann auch für DWR KONVOI durchgeführt /MEY 11/, /SPE 08/, /SPE 12/.

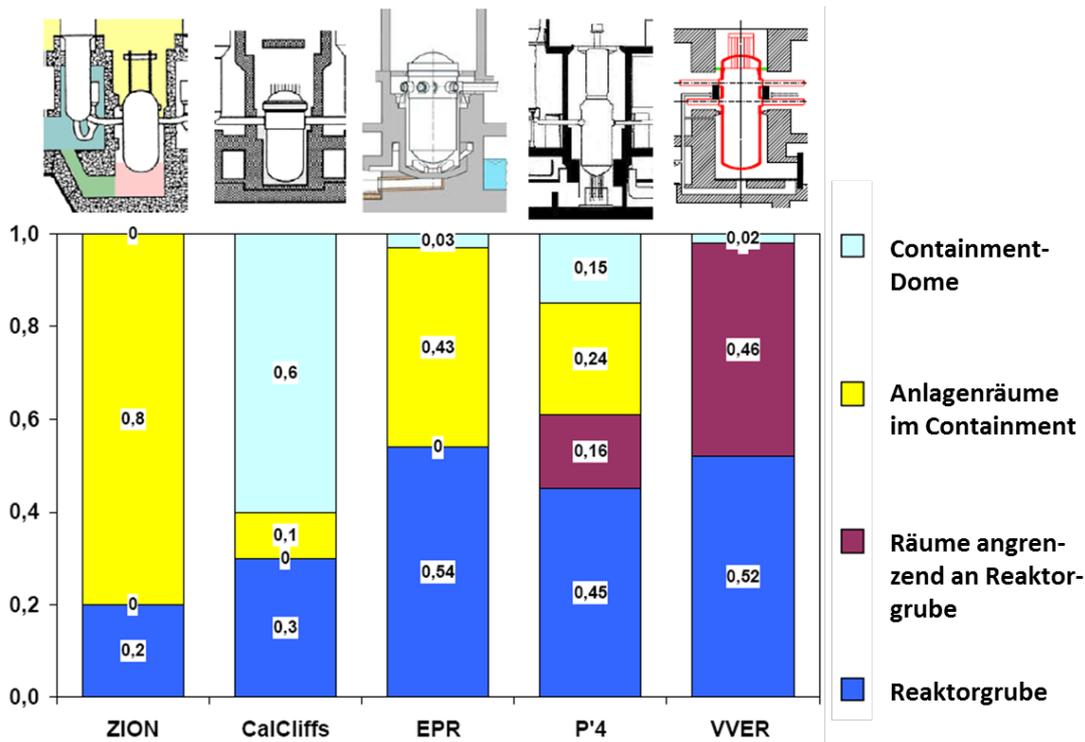


Abb. 3.37 Überblick über ausgewählte Ergebnisse von DCH-Experimenten bei KIT /SPE 08/ im Vergleich zu Experimenten für Westinghouse-Anlagen

3.3.3 Wiederholungsrechnung eines DISCO-Experiments für DWR KONVOI

Zunächst ist ein bereits gerechneter Datensatz zu dem DISCO-Versuch KH02 neu gerechnet worden, um die Vergleichbarkeit mit vorangegangenen Versionen zu gewährleisten. Der Versuch KH02 ist am KIT /MEY 11/ durchgeführt worden und untersucht den Austrag einer heißen Schmelze bei 20 bar in einer DWR KONVOI-typischen Geometrie. Das Leck am RDB wurde zentral am tiefsten Punkt des RDB angenommen, um eine maximal mögliche Belastung des Containments durch DCH zu analysieren, und der Durchmesser des Lecks beträgt 56 mm. Erwartet wird für reale Anlagen ohne Boddurchführungen im RDB eher ein seitliches Versagen am RDB-Boden, was zu geringeren Belastungen führt, wie Experimente bei KIT bestätigen.

Ergebnisse zu dem betrachteten Fall sind bereits im Abschlussbericht zu RS1185 /SPE 12/ mit der damaligen COCOSYS-Version dargestellt worden. Dort wird für den Versuch KH02 eine Verteilung berechnet, bei der 41 % der Schmelze in der Reaktorgrube (CAVITY) verbleiben, 52 % gelangen in das angrenzende Subcompartment

ment (Subcom1) und lediglich 7 % gelangen in den oberen Containment-Bereich (Contain) der DISCO-Anlage.

Die Verteilung der Schmelze in der neu durchgeführten Rechnung ist in Abb. 3.38 dargestellt. Das Versagen des RDB erfolgt bei 2 s. Die blaue Linie zeigt den Schmelzeanteil im unteren Plenum des RDB. Innerhalb der ersten 0,1 s nach RDB-Versagen wird Schmelze aus dem RDB nur in die Grube verlagert (grüne Kurve), da bis zu diesem Zeitpunkt nur Schmelze durch die Verbindung zwischen RDB und Grube transportiert wird. Danach wird ein zweiphasiges Ausströmen von Schmelze und Gas, das hauptsächlich aus Wasserdampf besteht, aus dem RDB berechnet. Ab diesem Zeitpunkt wird ein Mitriss von vorher in der Grube abgelagerter Schmelze durch die darüber strömende Atmosphäre in angrenzende Räume (hellblaue und rote Kurve) berechnet. Somit wird innerhalb von etwa 0,25 s die gesamte Schmelze (~10 kg) aus dem RDB in die Reaktorgrube verlagert.

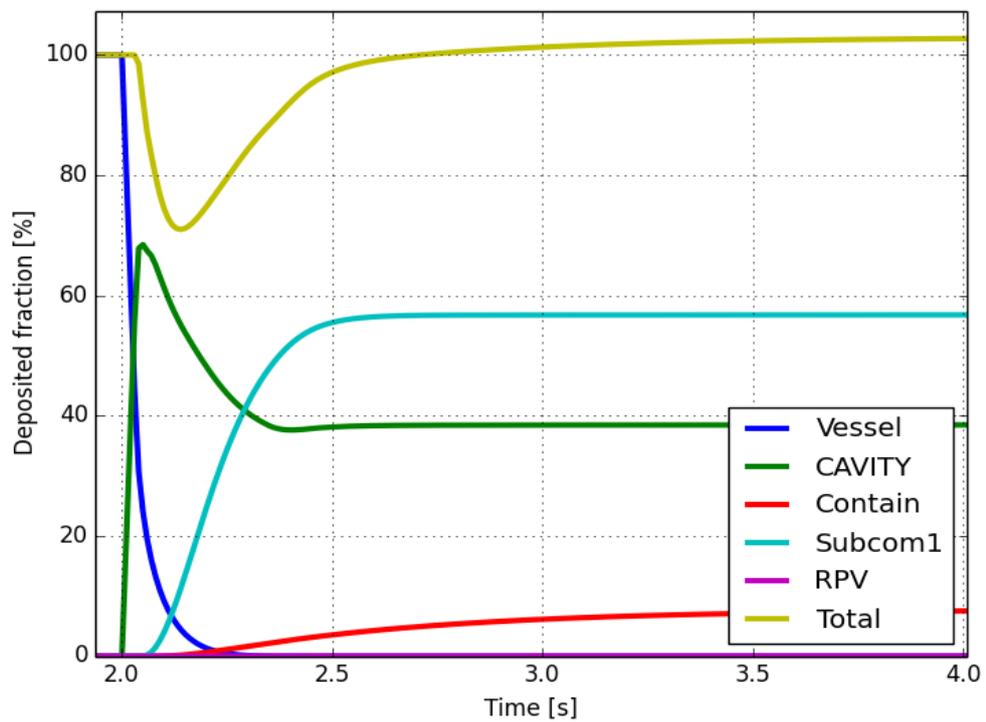


Abb. 3.38 Schmelzeverteilung im DISCO-Versuch KH02

Die gelbe Linie zeigt die gesamte abgelagerte Masse im Datensatz. Etwa 0,1 s nach RDB-Versagen nimmt der Prozentsatz ab, da zu diesem Zeitpunkt Schmelze in die Atmosphäre eingetragen bzw. mitgerissen wird. Nach etwa 0,7 s hat sich wieder eine Masse von 100 % der Ausgangsmasse abgelagert, dieser Wert steigt allerdings im

Folgenden auf 103 %. Diese Differenz stammt aus der Reaktion von metallischer Schmelze mit dem Luftsauerstoff, der mit einer Massenzunahme einhergeht.

In einer dritten Phase strömt, nachdem die Schmelze aus dem RDB transportiert worden ist, nur noch Atmosphäre durch die zugehörige Verbindung. Dieser Zeitraum ist in der vorliegenden Rechnung sehr kurz und in der Grafik nicht zu erkennen.

In der neuen Rechnung verbleiben 38,5 % Schmelze in der Reaktorgrube (CAVITY), 56,8 % gelangen in das angrenzende Subcompartment (Subcom1) und lediglich 7,7 % gelangen ins Containment (Contain). Damit liefert die neue Rechnung vergleichbare Ergebnisse wie die in /SPE 12/ beschriebene frühere Rechnung des gleichen Versuchs.

3.3.4 Rechnung zum DCH mit einer einfachen Nodalisierung des EPR-Containments

Auf dem Weg zu einer kompletten Anlagenrechnung wird zunächst ein einfacher EPR-artiger Datensatz mit RDB und vier Containmentzonen simuliert. Als Druck werden 5 bar im RDB angenommen, da bei diesem Druck bereits DCH auftreten kann. In der Rechnung wird eine Schmelzemasse von 70 000 kg im RDB angenommen und in die Reaktorgrube freigesetzt. Diese Schmelzemasse entspricht grob der skalierten Schmelzemasse aus den DISCO-Versuchen /MEY 04/. Die Ausströmung der Schmelze erfolgt ab 2 s in ein Containment mit einem angenommenen Umgebungsdruck von 1 bar. Der angenommene Leckdurchmesser am RDB-Boden beträgt 356 mm. Die Schmelzerverteilung für diesen Rechenfall ist in Abb. 3.39 dargestellt.

Anders als in dem betrachteten DISCO-Experiment tritt die Schmelze wegen der deutlich größeren Masse nicht in einem Bruchteil einer Sekunde aus, sondern über einen Zeitraum von mehr als 20 s. Der Schmelzeaustrag ist dabei zunächst einphasig aus dem RDB, d. h. das Modell berechnet während dieser Zeit keinen Schmelzemitriss aus der Grube, da kein Gasaustrag aus dem RDB erfolgt. Mit der Ausströmung von Gasen aus dem RDB beginnt der Schmelzemitriss in benachbarte Räume ab 22 s, der bei ca. 30 s wieder beendet ist.

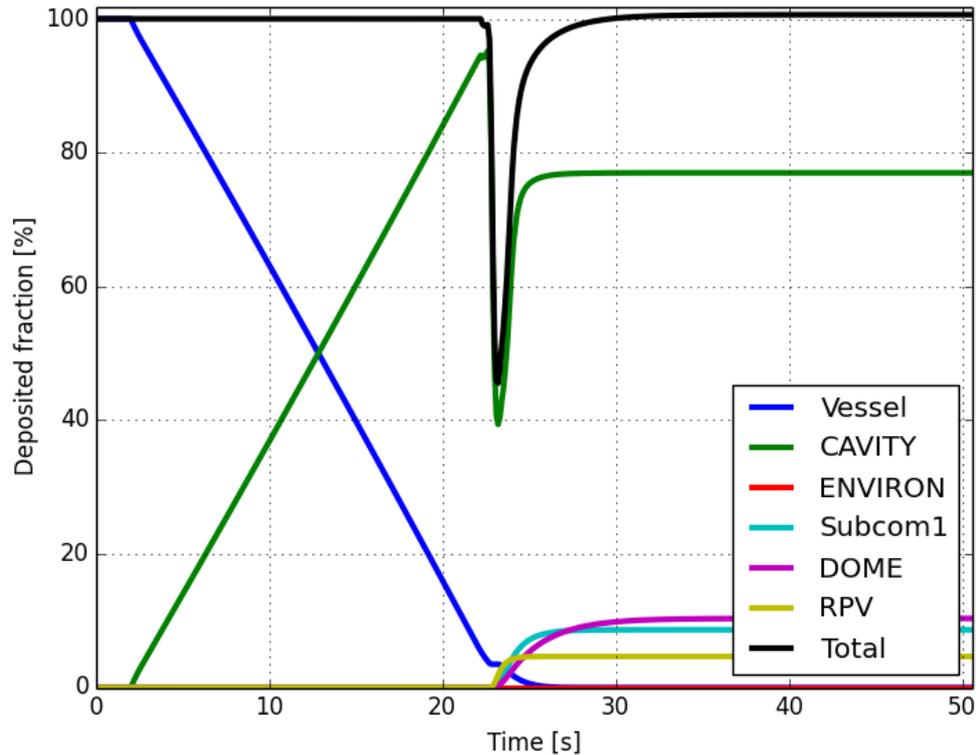


Abb. 3.39 Schmelzeverteilung im einfachen EPR-Datensatz

Bei diesem betrachteten Szenario verbleiben 77 % der Schmelze in der Reaktorgrube, 9 % lagern sich in den Anlagenräumen (Subcom1) ab und 10 % werden in das äußere Containment (DOME) weitertransportiert. Damit ist die Rückhaltung in der Grube in dieser einfachen Modellierung höher als sie für den EPR bei den DISCO-H Versuchen berechnet wurde. Auffällig bzw. unklar ist, wieso etwa 5 % der Masse nach der Freisetzung aus dem RDB in die Grube wieder in den RDB zurückgelangen (grünelbe Kurve) und sich dort erneut ablagern.

3.3.5 Rechnung zum DCH mit einer detaillierten Nodalisierung des EPR-Containments

Die darauf aufbauende Analyse des DCH-Phänomens in einer realen Anlagengeometrie erfolgt an einem EPR-Datensatz für COCOSYS, der in der GRS bereits Ende der neunziger Jahre im Projekt RS 979 /ALL 99/ erstellt worden ist. Im Abschnitt 4.3 des genannten Berichts wird ein Large Break LOCA Szenario mit diesem Datensatz beschrieben. Für die hier gezeigte Analyse ist kein komplettes Szenario gerechnet worden; insbesondere gelten die unterstellten Bedingungen nicht für genanntes großes Leck. Ausgehend von einem RDB-Versagen bei 5 bar in einem Containment mit 1 bar

Umgebungsdruck wird untersucht, welchen Einfluss das DCH-Modell bei der Benutzung einer realen Anlagengeometrie zeigt. Auch hier wurde pessimistisch unterstellt, dass der RDB zentral an der tiefsten Stelle versagt.

Der vorhandene Datensatz umfasst 85 Zonen. An dieser Stelle werden nur die relevanten Bilder für die DCH-Modellierung erläutert.

Abb. 3.40 zeigt das EPR-Containment im Bereich des Flutbeckens – englisch: In-Containment Refueling Water Storage Tank (IRWST). Die Schmelze wird während des DCH-Vorgangs in die Reaktorgrube RA3 ausgetragen. Es gibt zunächst keine direkte Verbindung in die Flutbeckenzonen RA14 und RA15 und die Schmelzeausbreitzzone RA16, da die Reaktorgrube mit einem Stopfen zum Ausbreitungsraum verschlossen ist, der durch die einsetzende Betonerosion aufgeschmolzen wird.

Wie in Abb. 3.41 dargestellt, ist der obere Teil der Reaktorgrube radial in RA1 und RA2 aufgeteilt. Der RDB ist in der Mitte als RA37 dargestellt. Für die Berechnung der in der Grube auftretenden Zonengeschwindigkeiten ist die Definition der Cavityzonen wichtig. In der durchgeführten Rechnung wird nur RA3 als Cavityzone definiert, d. h. der untere Teil der gesamten Reaktorgrube. Alternativ könnten auch die darüber angeordneten Zonen RA1 und RA2 mit zur Reaktorgrube gezählt werden. Eine Analyse des Einflusses ist nicht durchgeführt worden.

Die Freisetzungspfade aus den oberen Zonen der Grube RA1 und RA2 gehen nur entlang der Hauptkühlmittelleitungen (Abb. 3.42). Eine weitere Ausbreitung entlang des RDB in den Reaktorraum wird nicht berücksichtigt.

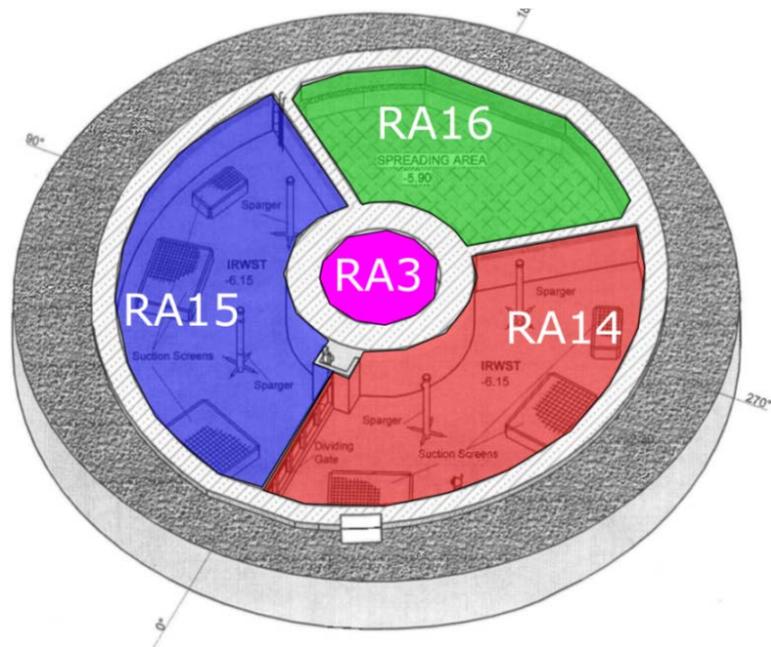


Abb. 3.40 Schnitt durch den EPR im Flutbeckenbereich (RA14, RA15) mit unterem Bereich der Reaktorgrube (RA3)

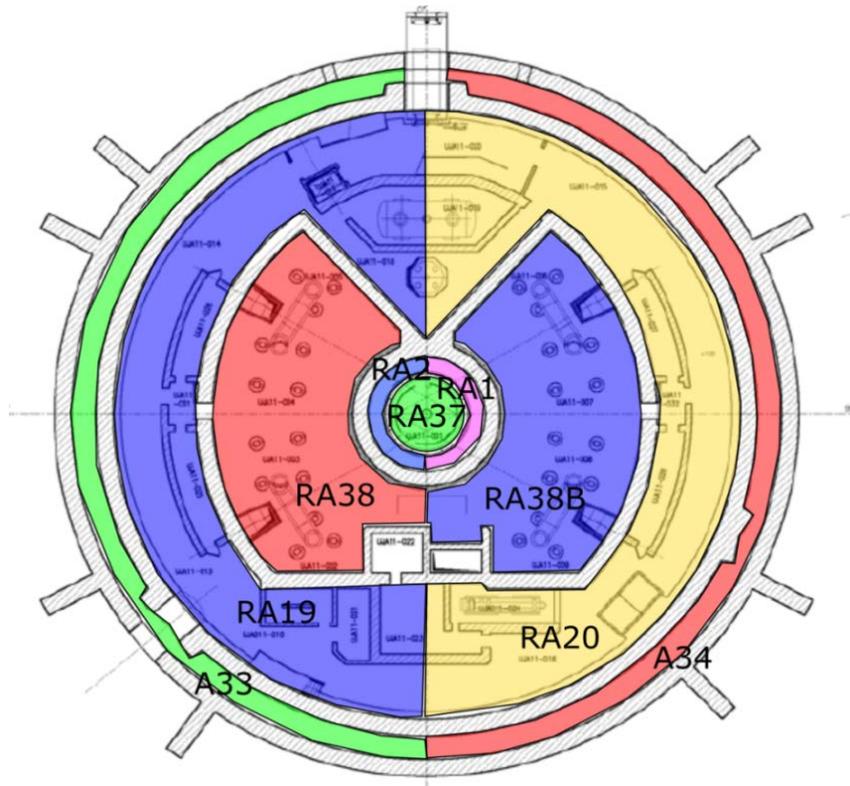


Abb. 3.41 Schnitt durch den EPR auf Höhe 1,5 m oberhalb des Flutbeckenbereiches mit oberem Bereich der Reaktorgrube (RA1 und RA2) und RDB (RA37)

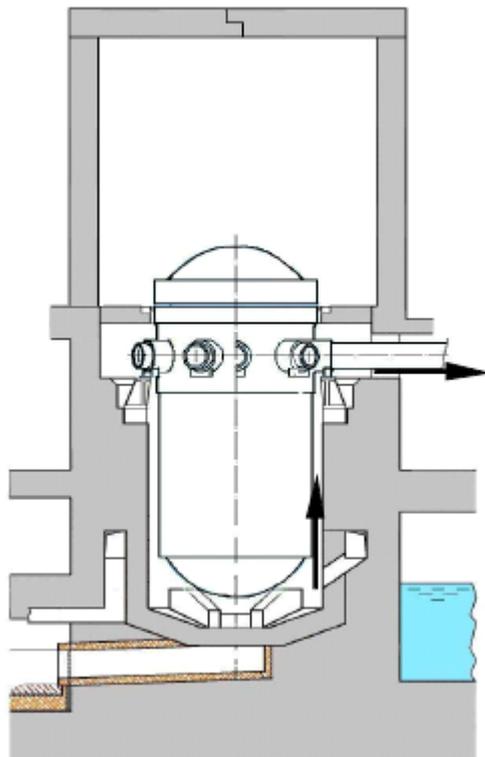


Abb. 3.42 Schnitt durch den EPR mit Angabe des für DCH modellierten Freisetzungspfades aus der Reaktorgrube in die unteren Anlagenräume

Die Schmelzeverteilung während und nach dem DCH-Vorgang für diesen komplexeren Rechenfall ist in Abb. 3.43 dargestellt. In der Abbildung werden unter der Bezeichnung CAVITY die Zonen RA1, RA2 und RA3 zusammengefasst, Subcom1 umfasst in Analogie zu den DISCO-Experimenten die internen Anlagenräume des Containments und in DOME sind alle Zonen der Kuppel bzw. des oberen Containments enthalten.

Im Vergleich zu dem einfachen EPR-Rechenfall tritt die Schmelze mit etwa 10 s Dauer beginnend bei 9 600 s im Unfallablauf auch zunächst einphasig aber schneller aus dem RDB aus. Das Modell berechnet während dieser Zeit keinen Schmelzemitriss und die abgelagerte Masse in der Grube (grüne Kurve CAVITY = RA3) steigt annähernd linear an. Danach folgt ein zweiphasiger Austritt von Schmelze und Gasen aus dem RDB über einen Zeitraum von etwa 3 s und damit beginnt das Entrainment. Dieses Verhalten wird deutlich, da die in der Grube abgelagerte Masse zu diesem Zeitbereich nicht stetig zunimmt und gleichzeitig die abgelagerte Masse (schwarze Kurve = Total) unter 100 % sinkt, also ein Teil der Schmelze luftgetragen ist. Darauf folgt ab 9 612 s ein einphasiger Austritt von Gasen, der dann das in der Grube abgelagerte Material zu größeren Teilen mitreißt. In der Spitze ist etwa die Hälfte des Schmelzmaterials luft-

getragen. Innerhalb von weiteren etwa 2 – 3 s (bis 9 615 s) lagert sich aber beinahe die gesamte mitgerissene Schmelzemasse in den oberen Bereichen der Grube (CAVITY) und in den angrenzenden Containmentzonen (Subcom1) wieder ab. In der betrachteten Rechnung verbleiben insgesamt 68,5 % der Schmelze in der Reaktorgrube (RA1 - RA3), 30,8 % lagern sich in den Anlagenräumen (Subcom1) ab und nur 0,7 % werden in das obere Containment (DOME) weitertransportiert. Während also ein ähnlich hoher Anteil der Schmelze in der Reaktorgrube zurückbleibt wie in der Rechnung zur einfachen Geometrie, führt die feinere Unterteilung zu einer verstärkten Rückhaltung innerhalb der inneren Anlagenräume. Im Vergleich zu den DISCO-H Versuchen für den EPR verbleibt bei einem ebenfalls (pessimistisch) angenommenen zentralen Versagen des RDB bei 5 bar ein größerer Anteil der Schmelze in der Grube.

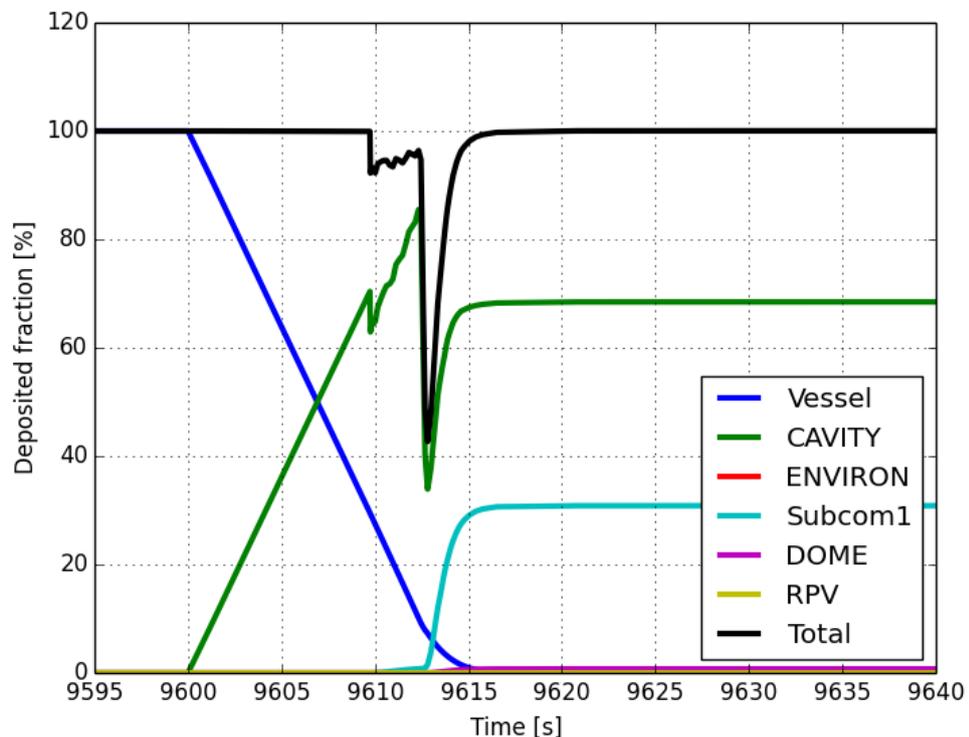


Abb. 3.43 Schmelzeverteilung im detaillierten EPR-Datensatz

Eine nähere Auswertung der in der Grube (CAVITY) verbleibenden 68,5 % der Schmelze zeigt, dass kein Material auf dem Boden der Reaktorgrube (RA3) verbleibt, sondern alles in die angrenzenden getrennt simulierten oberen Bereiche der Grube (RA1 und RA2) weitergetragen wird. Abb. 3.44 zeigt, dass zunächst ein großer Anteil der Schmelze auf dem Boden in der Reaktorgrube RA3 abgelagert wurde und dann durch die Gasströmung aus dem RDB beim DCH in die angrenzenden Räume RA1 und RA2 zu gleichen Teilen abgetragen wird. Ein Großteil dieser Masse wird dort ab-

gelagert, da es dort zu einer 90° Strömungsumlenkung kommt, bevor die Schmelzepartikel vorbei an den Hauptkühlmitteleitungen durch sehr enge Querschnitte in die Anlagenträume abtransportiert werden können. Der begrenzende Faktor für das DCH-Phänomen und den Austrag in das Containment ist in der durchgeführten Rechnung also nicht der begrenzte Mitriss von der Bodenfläche in der Reaktorgrube (RA3), sondern die Ablagerung innerhalb der ersten angrenzenden Zonen RA1 und RA2, die noch zur Reaktorgrube gehören. Eine weitere Umverteilung der Schmelze nach Abschluss des DCH-Vorgangs wird nicht berechnet.

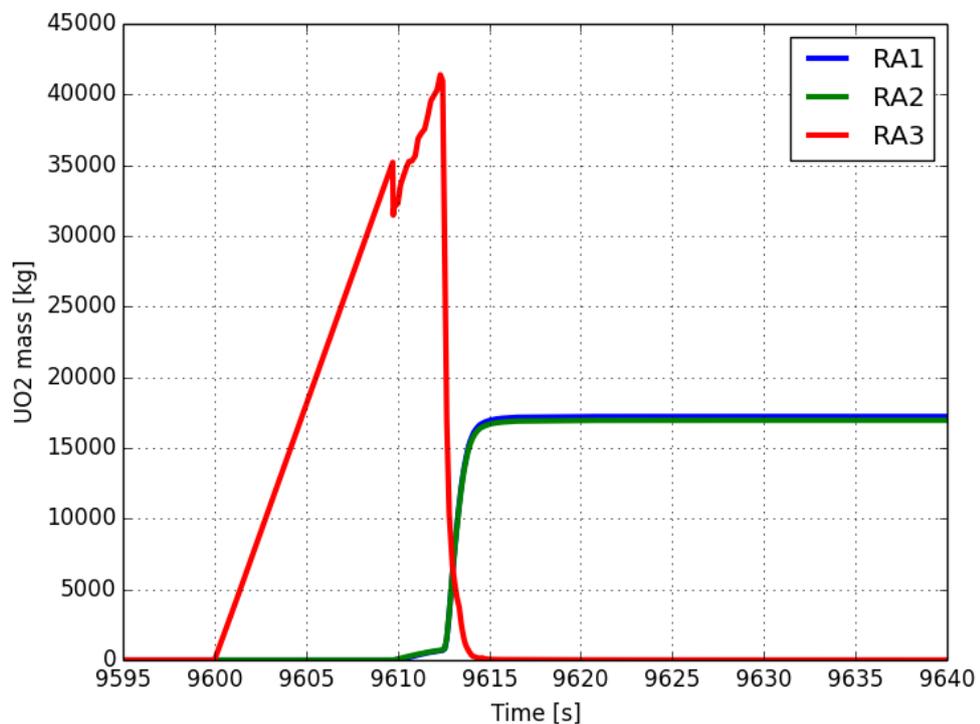


Abb. 3.44 Abgelagerte Schmelze (Massenverteilung) in der Grube (Räume RA1 – RA3) im detaillierten EPR-Datensatz

Um die Rechenzeit für das DCH-Modell zu minimieren, werden die benötigten Differentialgleichungen nur während des DCH-Vorgangs gelöst. Um den Zustand des Modells sichtbar zu machen, ist die Ausgabegröße DCHSTA eingeführt worden. Abb. 3.45 zeigt den Status für die Zone RA3, die innerhalb der Grube das Material aus dem RDB erhält, und eine nachfolgende Zone RA2. Die Targetzone hat während des DCH-Vorgangs den Statuswert 2, alle anderen Zonen den Wert 1. Vor dem Start des DCH-Modells und nachdem ein hinreichend kleiner Teil der Schmelze noch luftgetragen ist, ist der Wert in allen Zonen 0, was bedeutet, dass keine DCH-Differentialgleichungen gelöst werden.

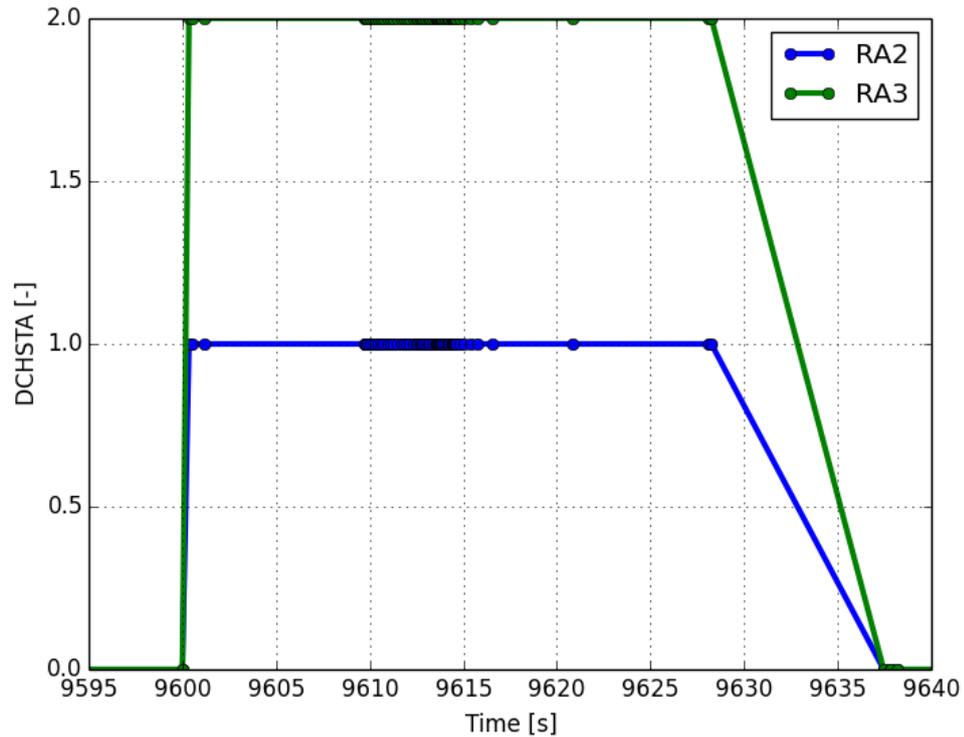


Abb. 3.45 Status des DCH-Modells

Die durchgeführten Rechnungen zeigten, dass die Verbindung zwischen dem RDB und der Reaktorgrube mit einer instationären Verbindung starke unphysikalische Schwankungen aufweist, wie an der grünen Linie in Abb. 3.46 zu sehen ist. Daher ist für die vorliegende Rechnung die neu entwickelte instationär-kompressible Verbindung INST_COMP benutzt worden. Diese liefert ein stetigeres Verhalten ohne Auftreten von negativen Geschwindigkeiten in entgegengesetzte Richtung. Außerdem benötigt diese Gleichung auch weniger Zeitschritte wie an der Anzahl der Punkte in der Grafik zu erkennen ist. Dieses Verhalten erklärt sich damit, dass die instationäre Gleichung kritische Strömungen zwangsweise auf die kritische Strömungsgeschwindigkeit limitiert, während die neue instationär-kompressible Gleichung die Begrenzung auf die kritische Strömung direkt berechnet.

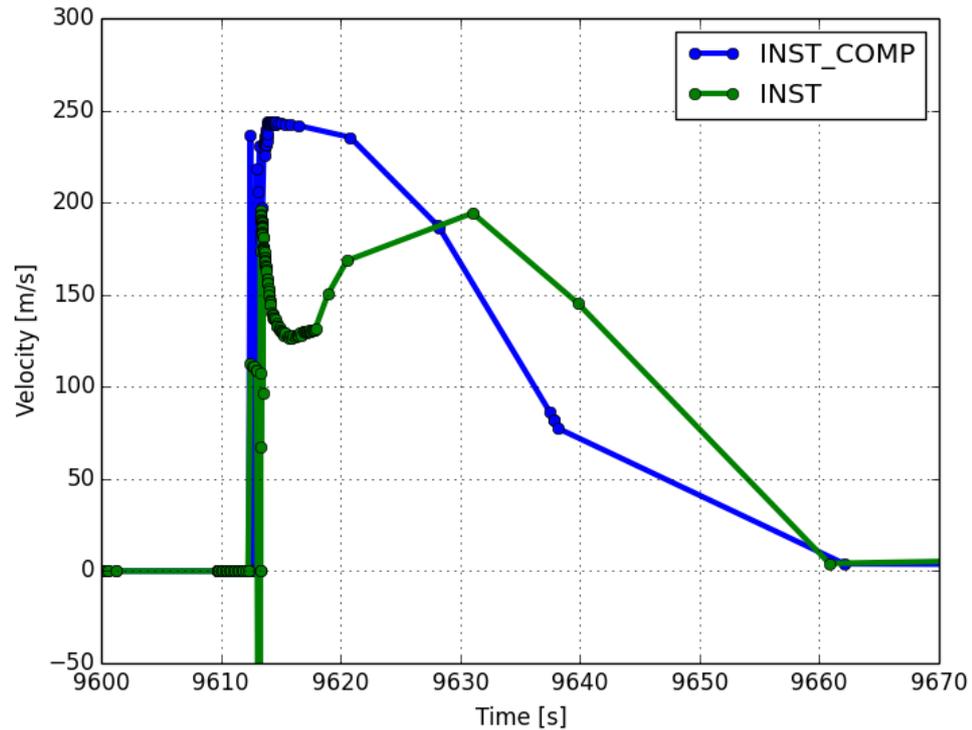


Abb. 3.46 Vergleich instationär-kompressible und instationäre Verbindung

3.3.6 Zusammenfassung

Die durchgeführten Arbeiten waren keine reine Validierungsarbeit für das DCH-Modell, sondern erforderten wegen der angestrebten Anwendung für ein realitätsnahes Anlagenszenario zunächst eine stärkere Änderung des Quelltextes in der aktuellen COCOSYS-Entwicklerversion.

Die im Vergleich zum vorangegangenen Entwicklungsprojekt plausible Nachrechnung des DISCO-Experiments KH02 zeigt, dass keine wesentlich unterschiedlichen Ergebnisse aufgrund der durchgeführten Modelländerungen auftreten, allerdings die Stabilität des DCH-Modells für komplexe Anlagenrechnungen stark verbessert worden ist.

Die durchgeführten EPR-Betrachtungen mit Versagen des RDB an der tiefsten, zentralen Stelle ergeben, dass etwa 2/3 der Schmelze in den oberen Zonen der Reaktorgrube vor der Passage entlang an den Hauptkühlmittelleitungen verbleiben. Die hauptsächlich Rückhaltung erfolgt allerdings nicht aufgrund eines Verbleibs auf dem Boden in der Reaktorgrube (RA3), sondern durch eine schnell ablaufende erneute Ablagerung innerhalb der oberen Zonen der Reaktorgrube (RA1 und RA2) durch die Umlenkung der Strömung hin zu den engen Öffnungen entlang der Hauptkühlmittelleitungen. Die

detaillierte Rechnung zeigt im Vergleich zu der einfachen Geometrie, dass die Nodalisierung für die Schmelzeverteilung einen entscheidenden Einfluss hat.

Im Hinblick auf die vollständige und durchgängige Simulation der Phänomene zu DCH und der sich anschließenden Schmelze-Beton-Wechselwirkung und einer möglichen späteren Schmelzeausbreitung aus der Reaktorgrube z. B. in den Sumpf zeigte sich, dass die Kopplungen der einzelnen Module in der Ex-Vessel-Modellkette in COCOSYS noch nicht ausreichend implementiert sind. Der starke Arbeitsaufwand für die eingangs beschriebenen Codeanpassungen ermöglichte es im Projekt nicht, vorgesehene Anbindung z. B. eines MCCI-Modells für den EPR-Datensatz zu realisieren. Letztlich bleiben nachfolgend beschriebene Punkte offen, die in einem späteren Vorhaben durchzuführen sind:

- Übertragung der nach RDB-Versagen und Schmelzeaustrag verbleibenden Schmelze (Masse, Temperatur, Zusammensetzung) in der Kaverne als Anfangsbedingung für das MEDICIS Modul in CCI zur Berechnung der nachfolgenden Betonerosion in der Kaverne,
- Übertragung der Schmelze(-ausströmung) bei Durchbruch der Kaverne in Folge der Erosion als Randbedingung für LAVA zur Berechnung einer möglichen Schmelzeausbreitung in angrenzende Räume, wie z. B. den Sumpf im DWR-Containment,
- Übertragung der dann ausgebreiteten Schmelze (Masse, Temperatur) zurück an ein zweites CCI-Modul zur ggf. fortgesetzten Erosionsberechnung mit MEDICIS.

Zurzeit wird im Rahmen des COCOSYS-Entwicklungsvorhabens RS1532 die Möglichkeit mehrerer paralleler CCI-Hauptmodule realisiert.

4 Querschnittsaufgaben

4.1 Mitarbeit in OECD Projekten

Ein erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS wird aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch im Rahmen der nationalen und internationalen 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 – Review Group, BIP – Behaviour of Iodine Project und STEM – Source Term Evaluation and Mitigation). Bezüglich OECD-BIP2 ist die GRS nicht unmittelbar an der Programme Review Group beteiligt, verwendet aber experimentelle Resultate aus diesem Projekt.

4.1.1 Arbeiten in der Programme Review Group des STEM-Projekts

Im Rahmen des OECD-STEM-Projekts nahm die GRS als Mitglied der Programme Review Group an den regelmäßigen Arbeitssitzungen teil und führte Analysen zu ausgewählten STEM-Versuchen durch. Im Rahmen des Vorhabens wurden drei Themen bearbeitet:

- AER-Tests (Aerosol) in der EPICUR-Anlage zur Stabilität von CsI und IO_x-Aerosolen unter radioaktiver Bestrahlung.
- LD-Tests (Long Duration) in der EPICUR-Anlage zur Organoiodfreisetzung aus I₂-beladenen Farbcoupons bei langer Bestrahlung.
- START-Tests zum Transport von gasförmigem Ruthenium (RuO₄).

Schwerpunkt der analytischen Arbeit der GRS lag auf der Entwicklung eines Modells zur Berechnung der radiolytischen Zersetzung von CsI und IO_x /SPE 14/ und die Validierung an ausgewählten AER-Tests (2.3.8.1).

Das I₂/Farbe-Modell in COCOSYS-AIM wurde jüngst grundlegend überarbeitet. Zur Validierung wurden bisher nur THAI-Versuche, die alle ohne Strahlung sind, gerechnet (vgl. Kapitel 2.3.2, 2.3.2.2 und 2.3.2.3). Die LD-Tests wurden mit französischer Ripolin-Farbe durchgeführt. Sie eignen sich nur für eine qualitative Überprüfung der mit dem neuen I₂/Farbe-Modell gerechneten Organoiodfreisetzung aus deutscher GEHOPON-Farbe.

Für den Transport von RuO₄ existiert in COCOSYS noch kein Modell. Der Einbau eines solchen ist in dem umstrukturierten AFP-Hauptmodul geplant.

4.1.2 Arbeiten in der Programme Review Group und Leitung der Analytical Working Group des OECD THAI-2-Projektes

Die Beteiligung der GRS am OECD THAI-2-Projekt 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 THAI-2 Projekt wurden Experimente zum Verhalten von Wasserstoff (Deflagration während Wassersprühens, H₂-Beseitigung durch passive autokatalytische Rekombinatoren (PAR)), zur Wechselwirkung von molekularem Iod mit reaktiven und nicht-reaktiven Aerosol-Partikeln zur Bewertung derselben für den radiologischen Quellterm, und zur Quantifizierung der Freisetzung von gasförmigem Iod aus einem verdampfenden Wasserstrahl (Simulation eines Dampferzeuger-Heizrohr-Bruchs während der Reaktor-Abschaltung) durchgeführt. Hauptziel der Experimente ist – neben der Aufklärung von unfalltypischen Phänomenen – die Bereitstellung von Daten zur Validierung von Lumped-Parameter- und CFD-Rechenmodellen /NEA 15/.

Die GRS beteiligte sich mit verschiedenen Analysen mit COCOSYS und CFX am Projekt und nahm aktiv an den im Projektzeitraum organisierten drei Treffen im April 2013, im November 2013 und abschließend im November 2014 teil.

Als Leiter der Analytical Working Group (AWG) bereitete die GRS zusammen mit dem "Operating Agent" jeweils den entsprechenden Teil des Meetings vor.

Ein wesentlicher Teil der Arbeit und Diskussion in den letzten beiden Treffen betraf eine Ausarbeitung von Vorschlägen für ein zukünftiges OECD THAI-3-Projekt, das in 2016 starten wird. Außerdem wurden für die abschließende Sitzung der AWG in 2014 Vorträge zu Analysen unter Anwendung von Erkenntnissen aus den ersten beiden OECD THAI-Projekten zusammengestellt.

Am 18./19. November 2014 fand in Frankfurt das OECD THAI-2-Abschlussmeeting statt, zu dem neben den Projektpartnern auch weitere interessierte Experten eingeladen waren. Die GRS hat das Meeting in Zusammenarbeit mit Becker Technologies inhaltlich vorbereitet und selbst durch 3 Vorträge zum Erfolg des Meetings beigetragen. In den jeweiligen fachlichen Sessionen wurden die wesentlichen Erkenntnisse aus den

Versuchsserien zu "Iodine depletion on Aerosols", "Gaseous Iodine Release from a Flashing Jet", "PAR Test series under oxygen starved conditions", and "Hydrogen Deflagration During Spray Operation" vorgetragen und analytische Ergebnisse der Partner präsentiert. Die GRS trug zu den folgenden vier Themen vor: "Conclusions Drawn for Iod-25 and Iod-26-Experiments on Iodine Deposition on Aerosols", "Application of Detailed Plate Type PAR model of GRS on NIS type PAR and Validation using OECD THAI Results", "Use of THAI Iodine Tests for COCOSYS-AIM Development and Validation – An Overview", and "Modelling and Code Application Needs for the Development of PAR Concepts for PWR Reactors".

Die GRS nutzte diese Ergebnisse für die Weiterentwicklung und Validierung von COCOSYS, wie im Bericht an verschiedenen Stellen dargestellt wurde. Die Partner des abschließenden OECD THAI-2-Meetings äußerten ihre positiven Erwartungen für eine Fortsetzung des experimentellen Programms und dankten für die qualitativ sehr hochwertigen Ergebnisse. Aus der sich ergebenden Diskussion heraus wurden auf dem Meeting letztlich folgende Themen für ein Nachfolgevorhaben zusammengetragen:

- Topic 1: PAR performance under counter – current flow conditions
- Topic 2: Hydrogen combustion and flame propagation in two-compartment system
- Topic 3: Fission product release from water pool at elevated temperature
- Topic 4: Resuspension of fission product deposits due to hydrogen combustion replacing another Topic: PAR performance and ignition potential during spray operation.

4.1.3 Mitarbeit in OECD-Arbeitsgruppen (WGAMA)

4.1.3.1 Erstellung eines State of the Art Reports on Filtered Containment Venting

Die OECD Arbeitsgruppe WGAMA – Working Group on the Analysis and Management of Accident – führte drei Aktivitäten durch, an denen sich die GRS beteiligt hat. Eine ist die Erstellung eines Statusberichtes zur Implementierung eines Systems der gefilterten Druckentlastung des SHB (Ventingsystem). Für den Bericht wurde der deutsche Beitrag zur Beschreibung des Standes der Implementierung von gefilterten Ventingsysteme-

men in deutschen DWR und SWR-72 sowie die geltenden Regeln (RSK-Empfehlungen) ausgearbeitet. Als Verantwortlicher für diese Beitragserstellung wurden die Arbeiten gemäß der Vorgaben der Arbeitsgruppe koordiniert und Beiträge von AREVA und LRST/FZJ der Ausarbeitung der GRS zugefügt. Danach wurde die Endredaktion des Statusberichtes mit durchgeführt und die Änderungen der Partner insbesondere im Teil mit Zuständigkeit GRS eingearbeitet. Die Beteiligung an dieser OECD Arbeitsgruppe wurde mit der Fertigstellung des Statusberichtes beendet. Der Statusbericht wurde im Juni 2014 durch die CSNI freigegeben /NEA14/.

4.1.3.2 Internationaler Benchmark von Fast Running Tools

Die GRS beteiligte sich an dem Projekt „International benchmarking project on fast-running software tools used to model fission product releases during accidents at nuclear power plants“. Im Fall von Unfällen in kerntechnischen Anlagen sind Werkzeuge zur schnellen Bestimmung des austretenden Quellterms und der radiologischen Folgen notwendig. Weltweit werden solche Programme verwendet. Allerdings wurde bisher noch nie ein Vergleich dieser Tools durchgeführt. In diesem Projekt wurde daher anhand verschiedener Szenarien in verschiedenen Anlagen ein Benchmark durchgeführt. Dabei werden (ähnlich wie im Fall von Fukushima) nur rudimentäre Randbedingungen und wenige Anlagendaten vorgegeben, da neben den berechneten Quelltermen sowie der radiologischen Konsequenzen auch die praktische Handhabung verglichen werden soll. Durch den Benchmark werden die Vor- und Nachteile der einzelnen Programme sowie der noch notwendige Entwicklungsbedarf aufgezeigt.

In diesem Benchmark verwendete die GRS das Programm ASTRID zur vereinfachten aber immer noch deterministischen Berechnung des Quellterms. Dieses Programm wurde im Rahmen des 6. EU-Forschungsprogramms unter der Koordination von IRSN entwickelt /HER 05/. Zur Simulation des Kerns und des Kühlkreislaufes wird das Modul PROCESS verwendet. Das Containmentverhalten wird mit den COCOSYS-Hauptmodulen THY und AFP in teilweise etwas vereinfachter Form simuliert. Das Programm ist in die ASTRID Nutzeroberfläche eingebunden. ASTRID wurde später noch im Rahmen einer Notfallübung für eine SWR-69 Anlage verwendet /LOE 08/. Es wird betont, dass ASTRID zurzeit weder bei IRSN und GRS weiter entwickelt wird. Aufgrund der bei der Verwendung von ASTRID notwendigen Datenmengen (Randbedingungen und Anlagendaten) ist es fraglich, ob ASTRID für die schnelle Berechnung des Quellterms für einen Unfall in einer ausländischen Anlage wirklich sinnvoll ist.

Trotz der zu erwartenden Probleme bei der Verwendung von ASTRID im Rahmen dieses Benchmarks, nahm die GRS teil, um Informationen hinsichtlich der anderen Programme zu erhalten und zukünftige Lösungsansätze zu finden.

Das Projekt ist nun abgeschlossen. Die Ergebnisse sind in /NEA 15/ dokumentiert.

Die ASTRID-Programmversion ist direkt mit der COCOSYS-Entwicklung verknüpft, da über sogenannte Präprozessor-Anweisungen die ASTRID-Variante extrahiert wird. Daher musste vorab aufgrund der zwischenzeitlichen COCOSYS-Entwicklung das ASTRID-Workspace aktualisiert werden. Ebenso wurden aufgrund der strukturellen Programmänderungen im Hinblick auf das Fluten von Zonen einzelne Unterprogramme entsprechend angepasst. Die ASTRID-Nutzeroberfläche wurde nun auf Windows7 32bit installiert. Das dabei verwendete Datenbankprogramm Firebird 1.5 ist unter Windows7 nicht ablauffähig, so dass nun die Version 2.5.2 verwendet wird. Ebenso wurde festgestellt, dass eine Installation unter 64bit nicht ablauffähig ist. Die grundsätzliche Abauffähigkeit wurde anhand von zwei Anlagendatensätzen (KONVOI, franz. P'4) überprüft.

Insgesamt sollten im Rahmen des Benchmarks fünf verschiedene Szenarien für fünf verschiedene Anlagen durchgeführt werden. Folgende Anlagen werden beim Benchmark betrachtet: Peach Bottom (SWR), Surry (DWR), Oskarshamn (SWR), franz. DWR 1300, Pt. Lepreau (PHDR). Der Aufwand für die Datensatzerstellung ist bei ASTRID sehr hoch, insbesondere wenn kein entsprechender Datensatz als Vorlage vorhanden ist. Wegen des hohen Aufwandes beteiligte sich die GRS nur für den Fall des franz. DWR 1300, da hier ein generischer ASTEC-Datensatz vorliegt.

Als Vorlage wurde ein entsprechender ASTEC-Datensatz verwendet. Mit Hilfe des Umsetzungsprogramms AST2COC wurde aus den ASTEC-Containmentdaten ein COCOSYS-Datensatz erstellt. Allerdings müssen einzelne Eingabegrößen händisch übertragen bzw. erstellt werden. Dazu zählen insbesondere die Ablagerungsflächen für Aerosole (wegen unterschiedlichem Konzept in ASTEC), die Schnittstelle zum PROCESS-Modul für die Simulation des Kerns und des Kühlkreislaufes, die Eingabe bzgl. Iodchemie, Eingabe für Filter und die Eingabe für die vereinfachte Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Zur Beschleunigung der Rechnung wurden einzelne Zonen zusammengefasst. Insgesamt wurde der vorhandene ASTEC-Containmentdatensatz von 25 auf 15 Zonen reduziert. Ebenso wurden die Wandstrukturen von 106 auf 65 reduziert. Für eine weitere Reduzierung wäre eine Überprüfung

mit einer Referenzrechnung notwendig, worauf hier aufgrund des notwendigen Aufwandes verzichtet wurde.

Entsprechend der Spezifikation des Benchmarks wurden 3 Rechnungen durchgeführt. Die Tabelle Tab. 4.1 zeigt die rudimentären Informationen, welche zu den Zeiten 1 h, 6 h und 24 h nach Beginn des Unfalls zur Verfügung stehen. Die durchgeführten Rechnungen unterscheiden sich nur geringfügig. In der ersten Rechnung wird von einem SBO-Szenario + Leck ausgegangen, so dass auch das 100 K/h-Abfahren nicht zur Verfügung steht. In den beiden anderen Rechnungen steht das System zur Verfügung. Diese unterscheiden sich im Wesentlichen in Bezug auf den Zeitpunkt der gefilterten Druckentlastung.

Tab. 4.1 Verfügbare Informationen zum Unfallablauf (Auszug)

	1 h	6 h	24 h
Reactor name	Golfech		
Reactor design	1300 P'4 – 4 Loops PWR with a double large dry containment		
Thermal power	3817MWt		
Brief description of the accident	Power state Large break LOCA with failure of safety functions and containment venting: 12 inch break in the Reactor Coolant System Total failure of all safety systems (in-vessel water injection, sprays)"		
Reactor shutdown (Yes/No)	yes	yes	yes
If yes, time of reactor shut down	0 h	0 h	0 h
Power Available (Yes/No)		Yes	Yes
If yes, time the core is uncovered/heat sinks lost		10 min	10 min
Core temperature		>2 000 K	>2 000 K
Containment pressure			< 5 bar
Containment failed (Yes/No)			No
If no, venting status (e.g. has venting started, flow rate)			"Venting to start when containment pressure reaches 5 bar. Planned at 1.5 days"

Während des zweiten Treffens wurden Ergebnisse der ASTEC-Referenzrechnung dargestellt /VEI 13/. Im Vergleich zu ASTEC ist in ASTRID der Unfallablauf langsamer, so dass das RDB Versagen 1,25 Stunden später auftritt (Tab. 4.2). Der Zeitpunkt der gefilterten Druckentlastung ist ungefähr gleich. Allerdings wurden hier die Koeffizienten bezüglich der Wärmefreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung angepasst. ASTRID verwendet hier eine vereinfachte Korrelation /SPE 04/. Die Koeffizienten wurden für eine deutsche KONVOI-Anlage ermittelt und müssten für den franz. DWR 1300 angepasst werden. Weiterhin berechnet die Korrelation keine Aerosol- und Spaltproduktfreisetzung. Hier wurden sehr vereinfachte Annahmen getroffen und die Freisetzung über eine Einspeisetabelle definiert.

In Abb. 4.1 werden der Gesamtdruck sowie die Partialdrücke (Dampf, N₂, O₂, H₂, CO, CO₂) zwischen ASTEC (oben) und ASTRID (unten) verglichen. Das Niveau des Gesamtdrucks sowie der einzelnen Partialdrücke sind vergleichbar. Die Druckspitze in der ASTRID-Rechnung beim RDB-Versagen wird in ASTEC nicht berechnet. Aufgrund der katalytischen Rekombinatoren ist nach circa einem Tag der Sauerstoff im Containment verbraucht. Allerdings ist die H₂-Freisetzung in der ASTRID-Rechnung deutlich niedriger. So werden im PROCESS-MODUL von ASTRID nur 218 kg H₂ bei der Kernzerstörung freigesetzt.

In Abb. 4.2 werden die berechneten Quellterme für die Isotope I-131, Xe-133, Kr-87, Te-132 und Cs-137 verglichen. Der Verlauf für Xe-133 und Kr-87 ist in beiden Rechnungen gleich, die Ergebnisse in ASTEC sind allerdings etwas höher. Deutlich zu sehen ist die Erhöhung der Freisetzung zu Beginn des Ventings. Die Freisetzung von Te-132 und Cs-137 liegt in ASTEC bei 10¹⁵ Bq bzw. 6·10¹³ Bq. Die entsprechenden Werte bei ASTRID sind 2·10¹⁴ Bq bzw. 3·10¹² Bq, also ca. eine Größenordnung niedriger. Aufgrund des Filters (mit einem Filterfaktor von 1 000 für Aerosole) steigt die Freisetzung beim Venten praktisch nicht mehr an. Ein wesentlicher Unterschied betrifft die Iodfreisetzung. Hier wird in der Abbildung der ASTEC-Rechnung offensichtlich nur der aerosolförmige Anteil dargestellt. In der ASTRID-Rechnung besteht die Iodfreisetzung nach dem Venten im Wesentlichen aus organischen Iodverbindungen mit einem Anteil von über 99 %, da die anderen Iodspezies erheblich besser ausgefiltert werden können.

Bezüglich der Auswertung ist zu beachten, dass in der ASTRID-Rechnung die zeitliche Veränderung des Nuklidspektrums nicht berücksichtigt wird und bei der Erstellung der RODOS-Ausgabedatei nur teilweise. Im Hinblick auf den Source Term unterscheiden

sich die verschiedenen Rechenfälle nur geringfügig, obwohl das Versagen des Reaktordruckbehälters im Fall 1 h ca. eine Stunde früher berechnet wird (Abb. 4.3).

Tab. 4.2 Vergleich der charakteristischen Zeitpunkte

Event	ASTEC	ASTRID (1 h)	ASTRID (6 h)	ASTRID (24 h)
Beginn der Kernzerstörung	120 s			
Beginn der Zirkonoxidation	600 s	1 023 s	1 355 s	1 059 s
Beginn der Spaltproduktfreisetzung	800 s	1 920 s	2 460 s	1 980 s
Schmelzeverlagerungen im Kern		3 693 s	3 955 s	3 849 s
Poolbildung im Kern		6 269 s	6 650 s	6 654 s
Erste Verlagerung ins untere Plenum	2 000 s	6 696 s	7 092 s	7 088 s
Poolbildung im unteren Plenum		10 308 s	15 112 s	14 647 s
RDB Versagen, Beginn MCCI	1 h 45 s	3 h 02 s	4 h 16 s	4 h 12 s
Ende der Verlagerung in Kaverne	5 h 20 s			
U5 Start Venting	1,69 d	1,52 d	1,61 d	1,5 d
U5 Stop Venting	2 d			

*) angepasst durch Erhöhung der Wärmefreisetzung während MCCI

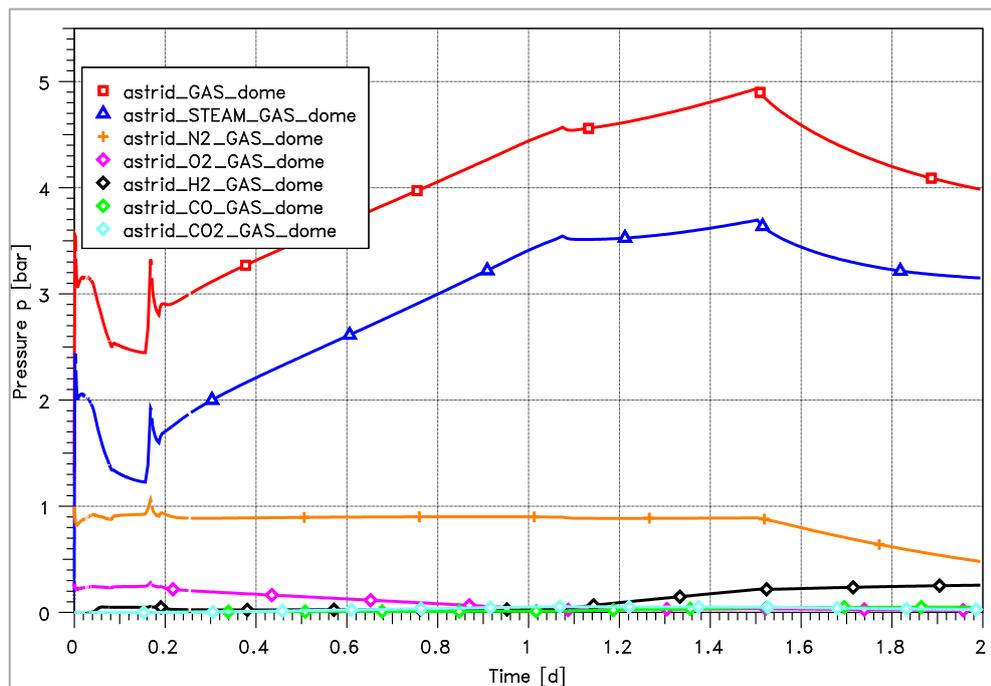
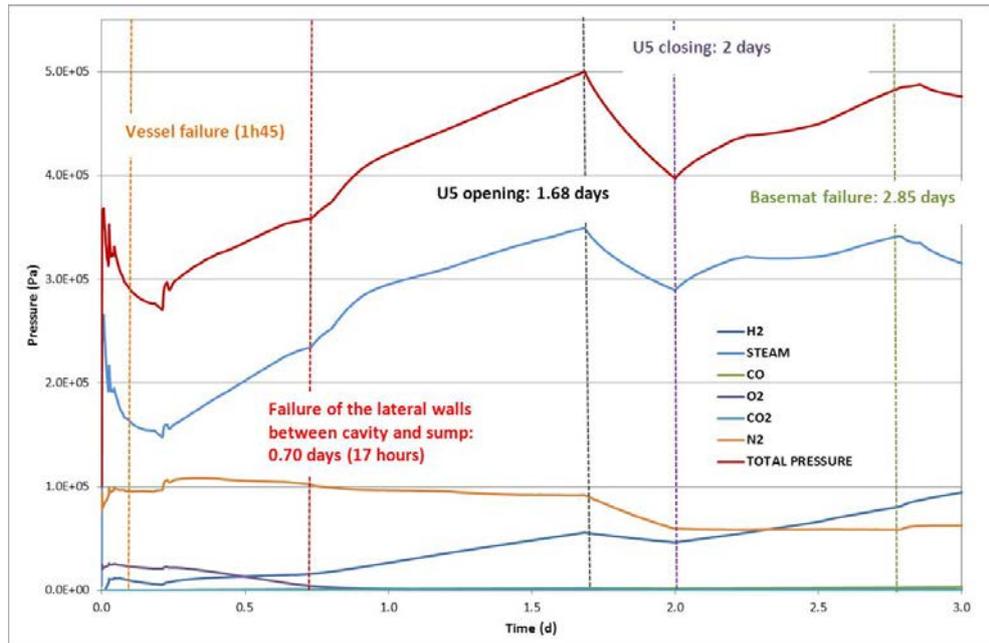


Abb. 4.1 Vergleich der berechneten Drücke, oben ASTEC aus /VEI 13/, unten ASTRID

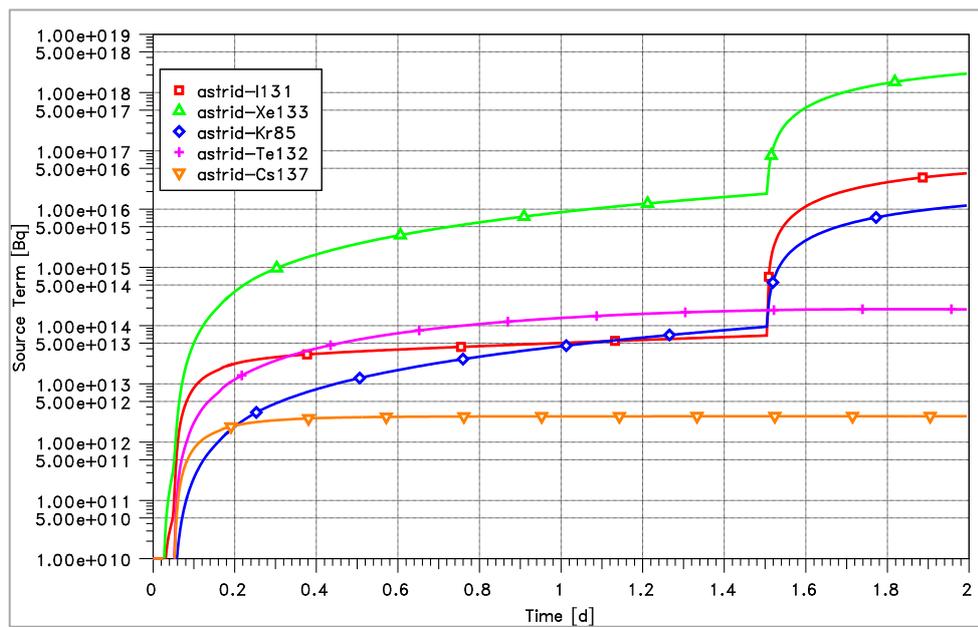
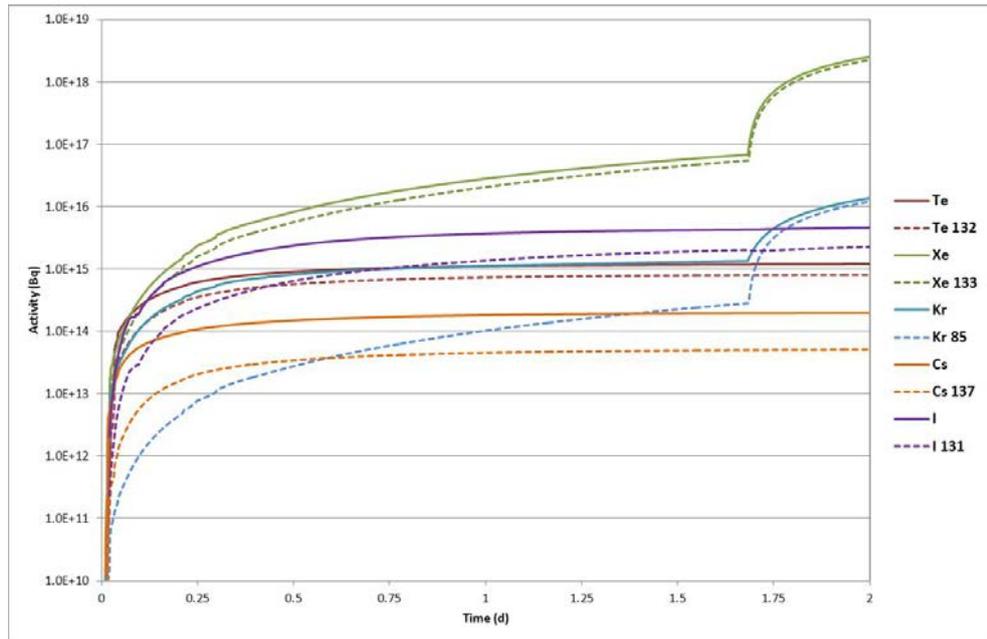


Abb. 4.2 Vergleich der Quellterme (I-131, Xe-133, Kr- 87, Te-132, Cs-137), oben ASTEC aus /VEI 13/, unten ASTRID

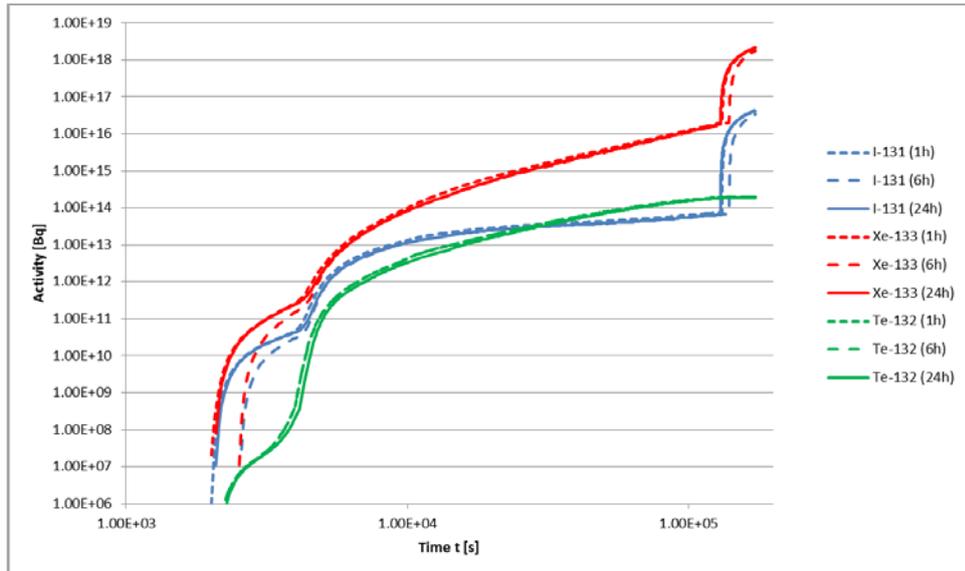


Abb. 4.3 Vergleich einzelner Freisetzungsraten (Quellterm) für die drei Rechenfälle

4.2 Mitarbeit in SARNET2 und NUGENIA

In diesem Kapitel werden die abschließenden Aktivitäten zum EU-Vorhaben SARNET2 und im Rahmen von NUGENIA dargestellt.

4.2.1 Abschließende Arbeiten in SARNET2

Das EU-Vorhaben SARNET2 im 7. Rahmenprogramm wurde im März 2013 abgeschlossen. Somit wurden in diesem Validierungsvorhaben nur noch abschließende Arbeiten zu SARNET2 durchgeführt. Dabei war die GRS hier in den SARNET2-Arbeitspunkten WP1.3 (SARP), WP6 (MCCI), WP7 (Containment) und WP8 (Iodchemie) beteiligt, wobei für WP7 im Rahmen dieses Vorhabens keine Aktivitäten mehr anstanden.

4.2.1.1 WP1.3 – SARP

Die Evaluierung der sogenannten „Severe Accident Research Priorities (SARP)“ wurde in SARNET2 fortgeführt. Zielsetzung war es, die Forschung zu optimieren und relevante Schwerpunkte zu ermitteln. Neben den Ergebnissen von SARNET FP6 flossen auch die Ergebnisse des EU-ASAMPSA2-Projekts sowie weitere internationale Ergebnisse

z. B. aus OECD-Projekten in die Evaluierung ein. Durch die Unfälle in Fukushima im Jahr 2011 gewann die Forschung im Bereich schwerer Störfälle erneut an Bedeutung.

Die SARP-Gruppe bestehend aus 12 Organisationen (IRSN, AREVA, CEA, EDF, KIT, GRS, JSI, KTH, PSI, RUB, TUS und VTT) erstellte den abschließenden Bericht /KLH 13/.

Die abschließend erzielten Ergebnisse wurden während der ERMSAR-Konferenz in Avignon im Jahr 2013 dargestellt /KLH 13b/. Ebenso wurden die Ergebnisse in Annals of Nuclear Energy im Jahr 2014 veröffentlicht /KLH 14/.

Die Prioritäten der zukünftigen Themen (Tab. 4.3) wurden nach den Stufen (H: hoch, M: mittel, L: niedrig, CL: geschlossen) eingeteilt. Dabei ist zu beachten, dass die Themen nach dem jeweiligen Anlagentyp unterschieden werden müssen. Beispiele hierfür sind insbesondere das Schmelzverhalten im unteren Plenum eines Siedewasserreaktors und Konzepte zur Schmelzerückhaltung.

Tab. 4.3 Review der ERI-Issues (Prioritätenliste) aus SARP-Bericht /KLH 13/

SARP No.	Topic	Explanation	ERI No.	Original status	Revised status
1	Phenomena during in-vessel accident progression				
1.1	Hydrogen generation during re-flooding of <i>slightly</i> degraded cores	Rapid generation of hydrogen; improve knowledge about the magnitude of hydrogen generation.	1.1a	M	L (→ 4.1)
1.2	Hydrogen generation during re-flooding of <i>strongly</i> degraded cores	Rapid generation of hydrogen due to oxidation of metals; improve knowledge about the magnitude of hydrogen generation.	1.1b	M	M (→ 4.2)
1.3	Core coolability during re-flooding and thermal-hydraulics within particulate debris	Termination of the accident by re-flooding of the core while maintaining RCS integrity. Increase predictability of core cooling during re-flooding.	1.2	H	H
1.4	Corium behaviour in lower head	Improve predictability of corium behaviour and the thermal loading on RPV lower head to assess RPV integrity. BWR: Consideration of specific BWR boundary conditions.	1.3a	M	H (→ 1.5)

SARP No.	Topic	Explanation	ERI No.	Original status	Revised status
1.5	Integrity of RPV due to external vessel cooling	Improve data base for critical heat flux and external cooling conditions to evaluate and design AM strategies of external vessel cooling for in-vessel melt retention.	1.4	M	H (→ 1.4; 1.7)
1.6	FCI incl. steam explosion in stratified situation	Investigate the risk of weakened vessel failure during re-flooding of a molten pool in the lower head.	3.3	CL	L
1.7	RPV vessel failure mode	Improve predictability of mode and location of RPV failure to characterise the corium release into the containment. L for PWR, H for BWR, especially failure of penetrations.	1.6	L	L for PWR H for BWR (→ 1.5; 2.2)
1.8	Integrity of RCS, especially integrity of SGT in HP scenarios	Improve predictability of heat distribution in the RCS to quantify the risk of RCS failure and possible containment bypass. The effect has an influence on accident progress. There is a link to FP transport (e.g. iodine flashing).	1.5	CL	M
2	Phenomena that could lead to early containment (or reactor building) failure				
2.1	Hydrogen mixing, combustion / detonation	Identify the risk of hydrogen accumulation leading to deflagration / detonation and to identify counter-measures.	3.4	H	H
2.2	Melt relocation into water and particulate formation	Determine characteristics of jet fragmentation during melt relocation into water in RPV and cavity, debris bed formation and debris coolability towards maintenance of vessel and containment integrity respectively.	3.1	H	H (→ 1.7)
2.3	FCI incl. steam explosion: melt into water, in-vessel and ex-vessel	Increase the knowledge of parameters affecting steam explosion energetic during corium relocation into water and determine the risk of vessel or containment failure.	3.2	H	CL in-vessel H ex-vessel

SARP No.	Topic	Explanation	ERI No.	Original status	Revised status
2.4	Direct containment heating	Increase the knowledge of parameters affecting the pressure build-up due to DCH and determine the risk of containment failure.	4.1	M	M
2.5	Long term loss of heat removal from wetwell in a BWR	In Fukushima the heat removal from the wetwell was lost after the Tsunami. The heat released by steam from the RCS heated the wetwell water to saturation. In addition, non-condensable gases from core degradation led to containment over-pressure.	-	-	M
3	Phenomena that could lead to late containment failure				
3.1	MCCI: molten pool configuration and concrete ablation	Improve predictability of axial versus radial ablation up to late phase MCCI to determine basement material failure time and loss of containment integrity.	2.1	H	M oxidic melt H metallic melt
3.2	Ex-Vessel corium coolability, top flooding	Increase the knowledge of cooling mechanisms by top flooding the corium pool to demonstrate termination of accident progression and maintenance of containment integrity.	2.2	H	H
3.3	Ex-Vessel corium catcher: corium ceramics interaction and properties	Demonstrate the efficiency of specific corium catcher designs by improving the predictability of the corium interaction with corium catcher materials.	2.3	CL	L *) bilateral projects
3.4	Ex-Vessel corium catcher: coolability and water bottom injection	Demonstrate the efficiency of water bottom injection to cool corium pool and its impact on containment pressurisation.	2.4	CL	L *) bilateral projects
3.5	External corium catcher device	Improve predictability of corium catcher devices to maintain their integrity.	1.3b	L	L *) bilateral projects

SARP No.	Topic	Explanation	ERI No.	Original status	Revised status
3.6	Dynamic and static behaviour of containment, crack formation and leakage at penetrations	Estimate the behaviour penetrations, sealing, hatches and so on leading to leakages of fission products to the environment. Here, aging and severe accident conditions have to be considered.	3.5	L	M
4	Phenomena of release and transport of fission products				
4.1	Core re-flooding impact on source term (early phase)	Characterize and quantify the FP release during core re-flooding in early phase of core degradation (more or less intact core geometry)	5.5a	L	L (→ 1.1)
4.2	Core re-flooding impact on source term (late phase)	Characterize and quantify the FP release during core re-flooding in late phase of core degradation (with highly degraded core; loss of geometry)	5.5b	L	M (→ 1.2)
4.3	Oxidizing environment impact on source term	Quantify the source term, in particular for Ru, under oxidation conditions / air ingress for HBU and MOX.	5.1	H	H
4.4	RCS high temperature chemistry impact on source term	Improve predictability of iodine species exiting RCS to provide the best estimate of the source into the containment.	5.2	H	H
4.5	Containment chemistry impact on source term	Improve the predictability of iodine chemistry in the containment to reduce the uncertainty in iodine source term.	5.4	H	M
4.6	Aerosol behaviour impact on source term	Quantify the source term for aerosol retention in the secondary side of steam generator and leakage through cracks in the containment wall as well as the source into the containment due to re-volatilization in RCS.	5.3	L	L

SARP No.	Topic	Explanation	ERI No.	Original status	Revised status
4.7	Existing and innovative Filtered Containment Venting Systems	Re-evaluation of the efficiency of the implemented filters accounting for progresses in source term evaluations and volarisation of the R&D on source term evaluation to propose innovative filtering devices.	-	-	H
4.8	Pool scrubbing under different conditions	Estimation of Pool Scrubbing efficiency under different (e.g. boiling) conditions inside the pool.	-	-	M
5	Phenomena in spent fuel pool storages				
5.1	FA behavior inside spent fuel pools under LOCA with & without dewatering	Assembly scale experiments to study the thermal-hydraulic conditions representative for different conditions: oxidation with air and/or steam.	-	-	H
5.2	Spent fuel pool scenarios	Thermal hydraulics of SFP accidents, physic-chemical and mechanical behaviour of claddings under air and air/steam mixtures, zirconium fire risks, release of fission products, possibility of mitigation.	-	-	H
6	New Topics				
6.1	Effect of impurities in water on core degradation, chemistry and FCI	Effect of injection of water not prepared for RCS and containment (e.g. "hard" water, salt water, river water) on long term cooling and fission product behaviour.	-	-	M
6.2	Instrumentation for severe accidents	Development and qualification of specific instrumentation for SA conditions.	-	-	H
6.3	MCCI aerosol effect on chemistry	Effect of MCCI aerosols on iodine gaseous concentration chemistry in the sump.	-	-	L
6.4	Thermodynamic and thermo-physical Databases	Improvement of the thermodynamic and thermo-physical database for corium and fission products.	-	-	M

4.2.1.2 WP6 – MCCI

In SARNET2 WP6 „MCCI“ wurde an einer Konsolidierung des Europäischen Status des Verständnisses der Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) unter trockenen Bedingungen mitgewirkt. Zum einen wurden in Form von zwei Konferenzbeiträgen auf der ERMSAR 2013 in Avignon institutsübergreifende Konsenspositionen zu den Themen „Übertragbarkeit von MCCI von Experimenten auf reale Anlagen“ /SPE 13/ sowie zum Verständnis der Anisotropie von MCCI in 2D-Konfigurationen /CRA 13b/ erarbeitet und präsentiert. Zum anderen wurde der in WP6.1 "Effect of the concrete nature on 2D ablation profiles (ABPROF)" angefertigte State-of-the-Art (SOAR) Bericht zu MCCI unter trockenen Bedingungen fertiggestellt /CRA 13a/. Die Mitarbeit an diesem Bericht umfasste eigene fachliche Beiträge sowie auch die Endredaktion des Berichtes gemeinsam mit dem französischen Partner IRSN. Dieser SARNET2-SOAR-Bericht zu trockenem MCCI dient als wesentliche Grundlage für den zurzeit für die WGAMA angefertigten SOAR der OECD/NEA zu MCCI.

Wesentliche Erkenntnisse zu MCCI, die aus diesen Arbeiten hervorgegangen sind und in den Beiträgen bzw. im SARNET2-SOAR dokumentiert sind, werden nachfolgend zusammengefasst:

- Die französischen CLARA-Experimente lassen eine Erklärung des beobachteten 2D-Charakters in MCCI-Experimenten (isotrope/anisotrope Erosion in Abhängigkeit von dem Betontyp) durch mögliche Richtungspräferenzen des Wärmeübergangs bei rein gasgetriebener Konvektion in einer homogenen Flüssigkeit nicht zu.
- Die Ursache für die unter bestimmten Bedingungen beobachtbare anisotrope Erosion wird vielmehr unmittelbar einer Struktur zugeschrieben, die sich an der Schnittstelle zwischen Schmelze und Beton ausformt (Ansammlung von Feststoffen oder Kruste/viskose Grenzschicht) und als Widerstand für den Wärmetransport wirkt. Diese Struktur kann sich an vertikalen Wänden anders ausbilden als an horizontalen Wänden. Die Mechanismen hierfür sind nicht eindeutig identifiziert und verstanden.
- Der effektive Wärmeübergang zwischen oxidischer Schmelze und Beton liegt in der Größenordnung von wenigen $100 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ ($\sim 300 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$) wenn als Zerstörungstemperatur für den Beton ein Wert von ca. 1500 K verwendet wird.
- Zur Nachrechnung von verfügbaren MCCI-Experimenten reicht die Annahme von empirischen, zeitlich konstanten Wärmeübergangskoeffizienten aus, die aber an

horizontalen und vertikalen Grenzflächen unterschiedlich groß gewählt werden müssen, um einer etwaigen Anisotropie der Erosion Rechnung zu tragen.

- Theoretische Ansätze zeigen, dass die zeitliche Konstanz der Wärmeübergänge durch physikalische Effekte erklärt werden kann, in diesem Fall durch die einander entgegenwirkenden Einflüsse der Abkühlung der Schmelze und der Beimischung von Beton auf die lokale Viskosität. Aus den Experimenten können jedoch keine eindeutigen Beweise hierfür abgeleitet werden.
- Da langlaufende MCCI-Experimente wie z. B. CCI-2 eine Betonbeimischung bis zu ca. 60 Gew.-% im Verlauf des Versuchs aufweisen, ist die Extrapolation auf den Anlagenfall bis zu dieser Zusammensetzung der Schmelze experimentell abgesichert, nicht aber darüber hinaus. Das entspricht in etwa einem realen Zeitraum von 1,5 Tagen in einem Anlagenszenario.
- Sofern keine transienten Bedingungen vorliegen (wie z. B. rasche Leistungsänderungen, zeitlich befristete chemische Reaktionen) tendieren MCCI-Systeme zu einem quasi-stationären Zustand, bei dem der Hauptanteil der innen freigesetzten Leistung in Betonerosion umgesetzt wird oder durch Abstrahlung von der Oberfläche und Wärmeleitung in den Beton aus dem System verloren geht. Die Temperatur der Schmelze wird dann maßgeblich durch die aktuellen Werte von Wärmeleistung, Größe der Oberfläche des Schmelzepools, Betonzerstörungstemperatur und Wärmeübergangskoeffizient bestimmt.
- In Experimenten mit oxidischen Schmelzen wird der anfängliche Zeitraum von ca. 30 min zu Beginn eines Experimentes als Inkubationszeitraum angesehen – eine transiente Phase, während derer das System sich auf einen stationären Zustand hin bewegt. Oxidische Experimente, die insgesamt nur ca. 30 min laufen, sind schwierig für eine Validierung heranzuziehen, da sie vermutlich große transiente Einflüsse aufweisen.

4.2.1.3 WP8 – Source Term

Im Zusammenhang mit SARNET-2 WP8 sowie zum Thema Iodverhalten wurden in verschiedenen Veröffentlichungen bzw. auf verschiedenen Konferenzen die erzielten Ergebnisse dargestellt und diskutiert:

NED Veröffentlichung

Zusammen mit den internationalen Partnern des SARNET-2 THAI-Benchmarks wurden in der Zeitschrift „Nuclear Engineering and Design“ die Ergebnisse des Benchmarks zum Iodtransport in einer Mehrraumgeometrie veröffentlicht /WEB 13a/. Die eingereichten Rechnungen wurden kritisch diskutiert und die notwendige Weiterentwicklung der Codes aufgezeigt.

NUTHOS-10

Für die NUTHOS-10 Conference wurde ein Papier zu den Ergebnissen der Unsicherheits- und Sensitivitätsstudie zum Iodverhalten im Containment und zur Berechnung des Iod-Quellterms mit COCOSYS-AIM erstellt und vorgetragen /WEB 14a/. Die Studie war bereits im Vorläufervorhaben durchgeführt worden.

NUGENIA-SARNET Iodine Workshop

Auf dem NUGENIA-SARNET Iodine Workshop 2015 wurden neu entwickelte COCOSYS-AIM-Modelle zum Abwaschen von Iod und Silber in einem Containment vorgestellt /WEB 15/. Die Modelle betreffen die "nasse" I₂-Ablagerung auf der Containmentwand, das Abwaschen von Silberpartikeln von Strukturen (AULA-Modell) und die Iod/Silber-Reaktion im Reaktorsumpf.

4.2.2 Mitarbeit in NUGENIA

Nach dem Abschluss des EU-Projekts SARNET2 im 7. Rahmenprogramm wurde das SARNET-Netzwerk als TA2 in das NUGENIA-Netzwerk (www.nugenia.org) eingegliedert. Insofern werden die internationalen Aktivitäten und Abstimmungen im NUGENIA-Rahmen gebündelt. Im Frühjahr 2014 fand das NUGENIA Annual Meeting in Madrid statt. Hier wurden Projektvorschläge auch zum Thema "Schwere Störfälle" der GRS und anderer Organisationen vorgestellt. Diese sollten dann für das EU Horizon 2020-Rahmenprogramm eingereicht werden. Über das NUGENIA-Sekretariat beteiligte sich die GRS im NUGENIA Executive Komitee, wo strategische und administrative Entscheidungen hinsichtlich des internationalen Netzwerks getroffen werden.

4.3 Qualitätssicherung und Konfiguration des COCOSYS- Programmsystems

4.3.1 Durchführung von Regressionstests mit COCOSYS

Zur Qualitätssicherung ist für COCOSYS in den vergangenen Jahren ein Verfahren zum Regressionstesten etabliert worden, um Fehler bei der fortschreitenden Entwicklung des Codes frühzeitig zu entdecken und den Modellierungsfortschritt zwischen verschiedenen Programmversionen kontinuierlich zu bewerten und zu dokumentieren. Durch die Komplexität der Modellentwicklung kann eine wenn auch unbeabsichtigte Wechselwirkung von nicht unmittelbar betroffenen Modellen bzw. Phänomenen mit Auswirkung auf Rechenergebnisse a priori nicht ausgeschlossen werden. Deshalb werden Experimentnachrechnungen und Anlagenszenarien mit unterschiedlichen Codeversionen und identischen Datensätzen nachgerechnet. Aus dem Vergleich der Ergebnisse beider Codeversionen und zusätzlich mit experimentellen Ergebnissen werden Rückschlüsse auf den Modellierungsfortschritt gezogen. Dieses Vorgehen erlaubt das systematische Auffinden von Programmierfehlern und unbeabsichtigten Nebeneffekten, die bei der Weiterentwicklung einzelner Teilmodelle auftreten können.

Für das Regressionstesten wird ein Teil der Experimente genutzt, die auch zur Validierung von COCOSYS herangezogen werden. Neben Experimenten, die gut geeignet sind, den Überblick über das entsprechende Themenfeld darzulegen und speziell Einzeleffekte oder ein abgegrenztes Spektrum von Phänomenen zu untersuchen, werden zusätzlich auch einzelne, ausgewählte Anlagenszenarien gerechnet. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass sich der Modellfortschritt bei Einzeleffekt-Modellen in den zugehörigen Experimentnachrechnungen isoliert überprüfen lässt, während mit den Anlagenrechnungen das Zusammenspiel vieler implementierter Modelle untersucht werden kann. Das Regressionstesten ist aber von der Validierung abzugrenzen. Während die Validierung tendenziell die Bewertung neuer Modelle im Focus hat und diese idealerweise durch Nachrechnung speziell dafür verfügbarer Experimente im Detail bewertet, wird beim Regressionstesten die Validierung als Grundvoraussetzung unterstellt. Vielmehr soll dort der Fortschritt der Entwicklung im Vergleich mit früheren Entwicklungsphasen dokumentiert werden. Insbesondere muss aber auch sichergestellt werden, dass diese oftmals sehr begrenzten Modellverbesserungen keine negativen Nebeneffekte haben. Beispielsweise ist hier die Rechnung zum Versuch THAI TH-10 zu nennen. Hier wurde die Kopplung zwischen AFP und THY in Bezug auf den Übertrag der

Nebelablagerungsrate zum Thermohydraulikmodul korrigiert. Dadurch glichen sich die Dichteunterschiede über die Höhe an, wodurch dann im Gegensatz zum Experiment und der vorherigen Rechnung sich die Schichtung aufgelöst hat /KLE 12/. Eine Lösung dieses Problems steht noch aus.

Die generelle Vorgehensweise ist dadurch charakterisiert, dass vor jeder offiziellen Freigabe einer neuen COCOSYS-Version die festgelegte Regressionsmatrix durchlaufen wird. In /BAK 15/ sind die Testfälle ausführlich dargelegt. Aktuell wurde vor der offiziellen Freigabe die COCOSYS-V2.4-Entwicklerversion mit der vorhergehenden Anwenderversion (V2.3v9) verglichen. Aufgrund von Korrekturen wurde teilweise auch die Version V2.3v24 verwendet.

Zielsetzung dabei war es, unterschiedliche Ergebnisse im Vergleich zu der Version V2.3 zu identifizieren und zu klären. Eine Freigabe der Anwenderversion V2.4 erfolgt im engen zeitlichen Bezug zum Abschluss des aktuellen Vorhabens.

Schließlich ist im Zuge der Verfügbarkeit neuer Versionen mit der für die Erstellung der ausführbaren Version verwendeten Entwicklungsumgebungen (INTEL©) auch in diesem Zusammenhang zu prüfen, ob auffällige Unterschiede auftreten, die z. B. durch geänderte Compileroptionen die Rechnungsergebnisse beeinflussen. Aktuell wurde deshalb auch die INTEL Visual Fortran Compiler Version 11 gegen die Version 14 getestet.

Nachfolgende Tab. 4.4 gibt einen Überblick über die Rechenfälle, die derzeit für das Regressionstesten ausgewählt sind. Dabei werden die Rechnungen sukzessiv mittels eines Python-Skriptes gestartet, und nach Abschluss der Rechnungen werden die Ergebnisplots automatisch erstellt. Durch die Verlinkung in ein Microsoft Word© Dokument wird die Dokumentation mit der aktuellen Testkampagne gewährleistet. Eine ausführliche Dokumentation zum Regressionstesten wird mit COCOSYS V2.4v4 zusammen ausgeliefert /BAK 15/.

Tab. 4.4 Rechnungen zum Regressions-Testen

Thema	Versuch	Status
Thermohydraulik	BMC F2	✓
	HDR T31.5	✓
	HDR E11.4	✓
	THAI TH7	✓
	THAI TH-10	✓
	THAI TH-13	✓
Druckabbausysteme	GKSS M1	✓
	EREC BC V-213 LB LOCA T1	✓
	EREC BC-V213 SLB-G02	✓
Sprühsysteme	HDR E11.1	✓
	MISTRA MASP1	✓
Passive Systeme	PANDA BC4	✓
Aerosolverhalten	BMC VANAM-M3	✓
	Poseidon PA20	✓
	KAEVER K148	✓
	KAEVER K187	✓
Iod-Chemie	THAI Iod11	✓
	THAI Iod 9	✓
	PHEBUS RTF 1	✓
Betonschmelze-Wechselwirkung	ACE L6	✓
Typische KKW Testfälle	KONVOI	✓
	SWR-72	✓
	WWER 1000	✓
	WWER 440/213	✓
	WWER 440 Ice Condensor	✓
	RBMK-1500	✓
	RBMK-1000	✓

Die für das Regressionstesten herangezogenen Versionen V2.3 und V2.4 beinhalten neben zahlreichen Modelländerungen auch eine Reihe von Änderungen hinsichtlich der Eingabestruktur. Das führte dazu, dass einige der alten Datensätze (V2.3) zunächst nicht lauffähig waren. Die eigentlich automatisierte Python-Prozedur zur Abarbeitung der Datensätze aus einem Basisverzeichnis für verschiedene Versionen konnte in diesem Fall nur in der Hälfte der Fälle genutzt werden. In allen anderen Fällen

mussten die Basisdatensätze an die aktuelle Entwicklerversion angepasst werden, wobei der Modifikationsbedarf aber meist gering war. In einigen Fällen musste zuerst eine teils aufwendigere Analyse des Datensatzes bzw. der Rechnung durchgeführt werden, um einen erfolgreichen Durchlauf mit der neuen COCOSYS-Version zu gewährleisten. Hier ist zukünftig zu klären, ob diesbezüglich eine Art Update-Guide notwendig ist oder die Ausgabe von Warnungen durch COCOSYS eine akzeptable Lösung wäre. Zumindest sollte die Historie der Datensätze gespeichert und dokumentiert werden, um auch zukünftig flexibel und automatisch beliebige Versionen vergleichen zu können.

Der zu jedem Regressionstesten erzeugte Bericht wird als lebendiges Dokument weitergeschrieben. Zur Beurteilung der aus den Rechnungen gewonnenen Ergebnisse ist es notwendig, zu jedem Testfall verschiedene charakteristische Parameter zu bestimmen. Im Falle von Experimenten werden zusätzlich zu dem Vergleich von zwei unterschiedlichen Code-Versionen Vergleiche mit Messergebnissen herangezogen. Auf diese Weise können die erzielten Ergebnisse bewertet und unerwünschte Nebeneffekte bei der Codeentwicklung frühzeitig entdeckt werden. Nachfolgend werden beispielhaft ausgewählte Ergebnisse aus /BAK 15/ gezeigt.

4.3.1.1 Thermohydraulik- und Aerosolvalidierung an VANAM-M3 im Battelle-Modell-Containment (BMC)

Das Experiment VANAM-M3, seinerzeit Gegenstand des Internationalen Standard-Problems 37 (ISP37), wurde im rotationssymmetrischen Battelle-Modell-Containment mit einem freien Volumen von 626 m^3 durchgeführt. Die experimentelle Fahrweise orientierte sich an einem Kernschmelzszenario 'Abblasen am Druckhalter mit anschließender Primärkreisdruckentlastung (ND*)'. Nach einer längeren Aufheizphase von ca. 17 h schloss sich eine Versuchsphase mit abwechselnden Einspeisungen und Ablagerungen von Aerosolen an. Das Simulationsmodell für die COCOSYS-Rechnung umfasst eine einfache 15-Zonennodalisierung mit 28 Atmosphärenverbindungen und 53 wärmeleitenden Wandstrukturen.

Als Beispiel werden nachfolgend die Ergebnisse zur Aerosolkonzentration im inneren Ringraum R8 vorgestellt. Der Vergleich der Verläufe der Aerosolkonzentrationen wird beispielhaft in Abb. 4.4 für diesen Raum gezeigt. Schwarze Dreieck-Symbole repräsentieren das Experiment, die blaue Kurve (mit Kreis-Symbol) die Ergebnisse der Vorläuferversion V2.3 und die rote Kurve (Kreuz-Symbol) diejenigen der Entwicklerversion

V2.4. Die Kondensation des Dampfes auf den hygroskopischen NaOH-Aerosolpartikeln führt zu einer schnellen Konzentrationsabnahme nach dem Ende der Einspeisephase nach 18,2 h und nach 24,1 h. Insbesondere nach 18,2 h erfolgt die Ablagerung in Raum R8 langsamer als gemessen, was auf den deutlich überhitzt berechneten Zonenzustand zurückzuführen ist. Hierbei lagert sich bei geringer berechneter Feuchte weniger Kondensat an den Partikeln an, die folglich langsamer schwerer werden und langsamer abregnen. Die Ergebnisse zeigen keine wesentlichen Unterschiede, die aktuelle Entwicklerversion liegt aber gegen Ende deutlich näher an den experimentellen Werten. Die maßgeblichen Werte für die relative Feuchte sind der Abb. 4.5 zu entnehmen. Trotz leicht verbesserter Werte sind die Abweichungen noch deutlich erkennbar. Dazu muss allerdings angemerkt werden, dass einerseits COCOSYS keine Werte für die relative Feuchte größer als 100 % berechnen kann und andererseits die Messwertaufnehmer durch anhaftendes Kondensat nur unrealistisch hohe Werte anzeigen, so dass allein aus diesen Gründen die Werte nicht in Übereinstimmung zu bringen sind.

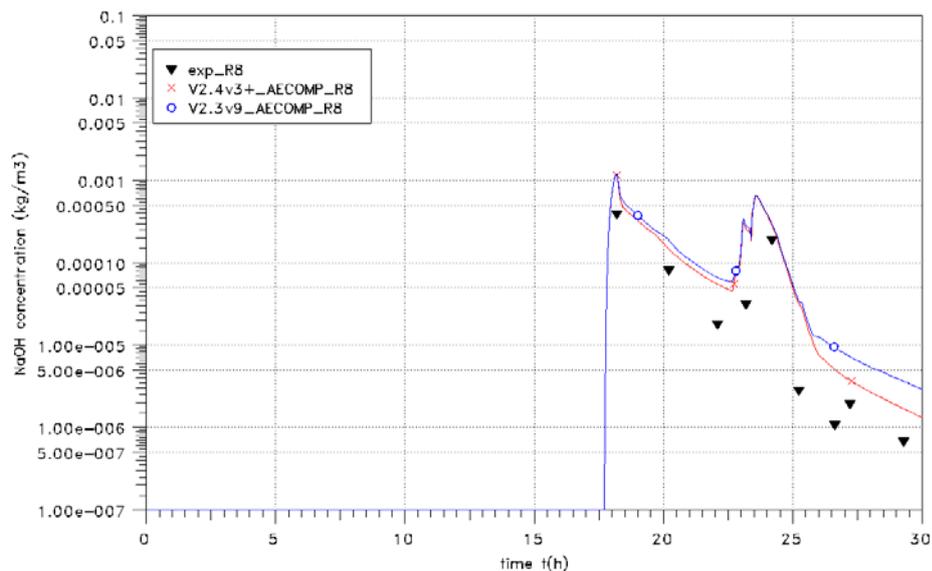


Abb. 4.4 BMC VANAM-M3; Aerosol-Konzentration im Raum 8; Vergleich der COCOSYS-Rechnungen (V2.4 rot, V2.3 blau) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)

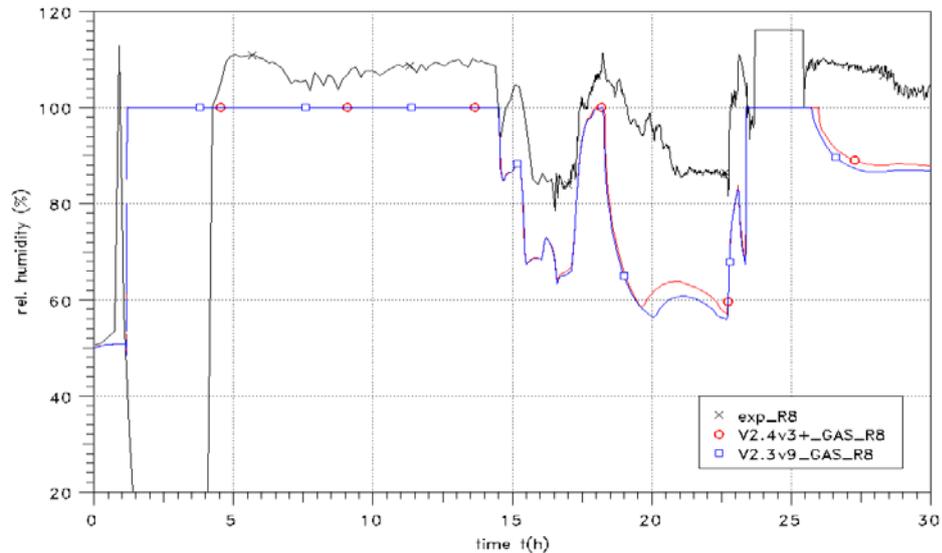


Abb. 4.5 BMC VANAM-M3; Relative Feuchte im Raum 8; Vergleich der COCOSYS-Rechnungen (V2.4 rot, V2.3 blau) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)

4.3.1.2 Modellierung von Iod-Phänomenen anhand des Experiments Iod-9 in der THAI-Anlage

In den THAI-Iod-Mehrraumversuchen wurde der vorhergesagte starke Einfluss der Thermohydraulik auf das Ausbreitungsverhalten von molekularem Iod (I_2) untersucht. Als ein Beispiel werden die Ergebnisse der Rechnungen zu THAI-Sumpfvorversuch Iod-9 präsentiert. In diesem Experiment wurde gasförmiges I_2 in den mit Stahloberflächen ausgekleideten THAI-Versuchsbehälter (60 m^3) eingespeist und die Ablagerung ohne Einfluss von radioaktiven Strahlungsquellen oder Ventilationssystemen gemessen. Eine genaue Kenntnis der Iod/Stahl-Reaktionen ist für die präzise Auswertung von Iodversuchen – insbesondere in Stahlbehältern – unumgänglich. Zu Beginn des Versuches lag ein thermisch geschichteter Behältersumpf vor, der 4 h nach der Iodeinspeisung durch Umwälzpumpen homogenisiert wurde. 24,5 h nach der Iodeinspeisung wurde Dampf in den Behälter eingespeist, um das I_2 aus dem Gas und von den Wänden zu spülen. Das Wandkondensat wurde aufgefangen und in externe Behälter abgeführt.

Die Abb. 4.6 zeigt den Konzentrationsverlauf des eingespeisten $I_2(g)$ während der trockenen Versuchsphase, der in der COCOSYS-Rechnung zutreffend wiedergegeben wird. Der wichtigste Abbaumechanismus für $I_2(g)$ stellt in diesem Versuch die Ablage-

rung an den (zunächst trockenen) Stahloberflächen dar. Grundsätzlich bewährt sich das erweiterte Iod/Stahl-Modell auch bei der Validierung des THAI-Iod-9-Versuches, nur ergeben sich im Vergleich mit den experimentellen Messwerten bezüglich des Ablagerungsverlaufes Unterschiede, die Gegenstand weiterer Untersuchungen sind. Mit Beginn der Dampfeinspeisung wird das gasförmige $I_2(g)$ vermehrt mit den Kondensat-tröpfchen an die Wände und dann in den Sumpf abgewaschen. Offenbar wird das „Herauswaschen“ von Iod aus der Gasphase in diesem Versuch überschätzt. Andererseits sind auch die in dieser Phase gemessenen konstanten $I_2(g)$ -Konzentrationen zu hinterfragen, da diese Konstanz angesichts der über mehrere Stunden anhaltenden Dampfkondensation kaum möglich erscheint. Ebenfalls überschätzt wird das Herabwaschen des an den Stahloberflächen abgelagerten Iods. Unbefriedigend hierbei ist, dass dieser Prozess bisher in AIM-3 mit denselben Abwaschkonstanten für physisorbiertes wie chemisorbiertes Iod modelliert ist. Diese Modelle werden im Rahmen der aktuellen AFP-Umstrukturierung komplett überarbeitet und die Auswirkungen im Rahmen der nächsten Testkampagne überprüft. COCOSYS-AIM-Rechnungen zu den THAI-Versuchen mit Wandkondensation (THAI Iod-9, Iod-21) zeigten zudem, dass diese Modelle zum I_2 -Transport mit dem Kondensat noch unzureichend sind. Auch hier werden aktuelle Entwicklungsarbeiten in zukünftigen Regressionstests Aufschluss über den Entwicklungsfortschritt geben.

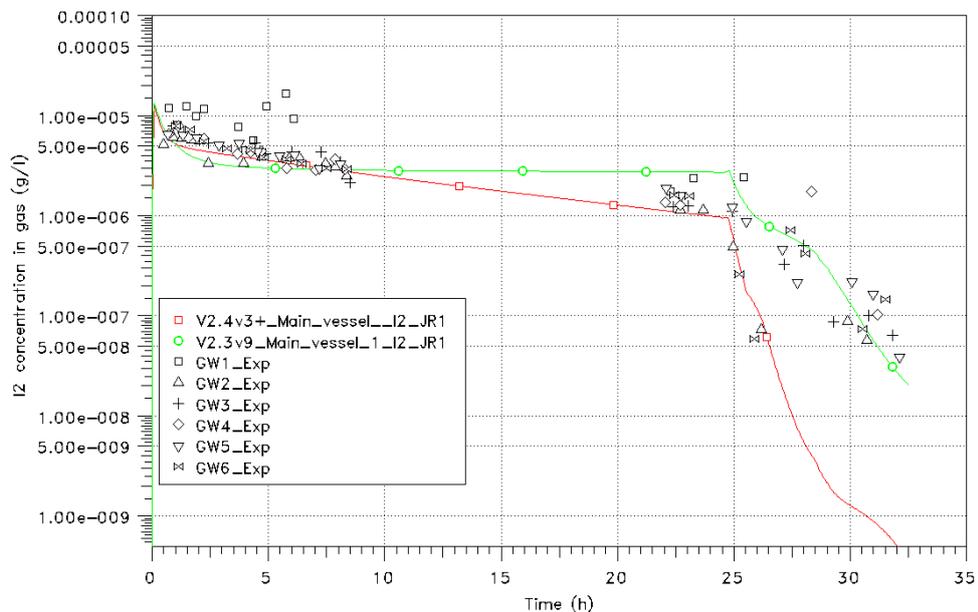


Abb. 4.6 THAI Iod-9; I_2 -Konzentration in der Gasphase; Vergleich der COCOSYS-Rechnung (V2.4 rot, V2.3 grün) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)

Die Beispiele zeigen die Eignung des Regressionstestens als ein Mittel zur Qualitätssicherung während der weiteren Entwicklung von COCOSYS und ermöglichen mithin eine lückenlose kontinuierliche Dokumentation des Entwicklungsfortschritts.

Die im Regressionstesten behandelten Experimente decken aktuell schon ein umfassendes Spektrum an Containmentphänomenen ab. Dies betrifft die Themen Thermohydraulik, Sprühsysteme, Aerosolverhalten, Iodchemie, Schmelze-Beton-Wechselwirkung, Druckabbausysteme sowie typische Anlagenrechenfälle zur vollständigen Analyse aller wechselwirkenden Phänomene. Es ist notwendig, die Matrix der behandelten Rechenfälle an die zukünftigen Entwicklungs- und Validierungsarbeiten in COCOSYS anzupassen. Dazu werden jeweils weitere im Rahmen der fortschreitenden Entwicklung implementierte Modelle über entsprechende Experimente berücksichtigt, soweit verfügbar. Zu erwähnen wären hier die noch nicht abgeschlossenen Entwicklungen zur Wasserstoffverbrennung, zum Abwaschen oder auch zum Zonenfluten. Nach eingehender Validierung werden die entsprechenden Datensätze für das Regressionstesten ausgewählt, die geeigneten experimentellen Daten verfügbar gemacht und die grafische Auswertung und Dokumentation vorbereitet.

Die Anlagenanwendungstests konzentrieren sich naturgemäß auf die Beurteilung der Modellentwicklung im Containment. Derzeit sind die Rechnungen auf COCOSYS beschränkt. Zukünftig sind evtl. auch gekoppelte ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen denkbar, wobei auch dann Containmentphänomene prioritär bewertet werden. Denkbar ist aber auch eine weiterreichende Prozedur unter Einbeziehung von Kühlkreislaufphänomenen und deren Rückwirkung auf einzelne Containmentmodelle.

4.3.2 Ergänzung der Dokumentation

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde die COCOSYS-Dokumentation weiter ergänzt. Bezüglich der Dokumentation wird zwischen der aktuellen Anwenderversion V2.4 und der Entwicklerversion V3.0 unterschieden. Sofern sich die Eingabe bzw. Modellierung in der Entwicklerversion ändert, werden entsprechende Kapitel übertragen und ergänzt. Dies betrifft insbesondere Themen zum umstrukturierten Hauptmodul AFP.

Folgende Dokumente stehen dem Anwender zur Verfügung:

- Beschreibung der COCOSYS-Implementierung
Diese wurde insbesondere für die Implementierung unter LINUX aktualisiert.

- COCOSYS-Nutzerhandbuch
Diese wurde nun vervollständigt und umfasst ca. 950 Seiten. Hier wurde insbesondere die Eingabe des CCI-Moduls beschrieben, welche nun auf eine Keyword-Struktur (wie bei den anderen Modulen auch) umgestellt wurde.
Für die Entwicklerversion wurden die Eingabe des neuen AFP-Moduls sowie die neuen Kopplungsmöglichkeiten mit REKODIREKT und CoPOOL beschrieben.
- COCOSYS-Programmbeschreibung
In Bezug auf die Anwenderversion ist die Umstellung von QuickSilver auf MS-Word noch nicht vollständig. Allerdings sind die Modelländerungen gegenüber der V1.2 Version beschrieben. In Bezug auf die Entwicklerversion sind Modelländerungen sowie programmtechnische Änderungen beschrieben.
- Bericht des COCOSYS-Regressionstestens
Der Bericht wird zurzeit überarbeitet und ergänzt. Die Freigabe erfolgt nach dem Einfrieren der Version V2.4v4.
- COCOSYS Assessment Manual
Dieser Bericht mit der zugehörigen Validierungsmatrix ist das zentrale Dokument, um die Fähigkeiten aber auch die Grenzen von COCOSYS aufzuzeigen. Hier müssen allerdings noch einzelne Rechenergebnisse aktualisiert werden.

Mit der aktuellen COCOSYS-Version V2.4 ist es bei gekoppelten Rechnungen mit ATHLET-CD und COCOSYS notwendig, einige Randbedingungen zu beachten. Insbesondere durch die Tatsache, dass in dem derzeitigen SOPHAEROS Modul in ATHLET-CD nur ein Transportpfad definiert werden kann, müssen für die verschiedenen Szenarien mit unterschiedlichen Freisetzungsorten (Bruchlagen) die Eingabedaten für SOPHAEROS entsprechend angepasst werden. Dazu gehört auch der Eingabeparameter ISOP, welcher formal die SOPHAEROS-OUTLET-Nummer mit dem entsprechenden DISCHARGE verbindet. Eine fehlerhafte Eingabe führt dazu, dass keine Spaltprodukte aus dem Kühlkreislauf in den Sicherheitsbehälter transportiert werden; allerdings werden Aerosolkomponenten und Iodspezies übertragen. Dies kann zu sehr hohen Aerosolkonzentrationen in dem entsprechenden Raumbereich führen. In der Folge sind dann die Aerosol- und Iodbilanzen fehlerhaft. Zurzeit wird eine neue SOPHAEROS-Version in ATHLET-CD implementiert und somit die Eingabe ISOP überflüssig. Daher wurde jetzt auf eine Programmverbesserung verzichtet und nur ein spezieller Hinweis in dem COCOSYS User Manual bezüglich ISOP ergänzt.

4.3.3 COCOSYS-User-Support

Im Rahmen des Vorhabens wurde für generelle Probleme mit dem COCOSYS-Programm ein User-Support durchgeführt. Nachfolgend beschriebene Themen / Probleme wurden bearbeitet.

4.3.3.1 Verbesserungen und Untersuchungen im Zusammenhang mit Rechnungen zum Fukushima-Szenario

Im Rahmen des OECD-BSAF-Vorhabens werden gekoppelte ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen für die Blöcke 2 und 3 in Fukushima Daiichi durchgeführt. Wie schon bei den Rechnungen für einen SWR-69 für ein ähnliches Szenario, traten im Pool Scrubbing Modul SPARC bei siedenden Randbedingungen Probleme auf. So funktionierte die erste Abschätzung der mittleren Blasentemperatur nicht korrekt. Hier traten Temperaturen im Bereich $< 0\text{ }^{\circ}\text{C}$ auf. Diese Temperaturabschätzung wird nun begrenzt. Ebenso funktionierte die Iteration der Partikeldurchmesser in einer Blase nicht richtig, da teilweise die Iteration nicht erfolgreich beendet wurde („Endlosschleife“). Die Anzahl der Iterationsschritte wurde auf 30 begrenzt. Die Probleme wurden somit beseitigt, wobei allerdings die Auswirkungen auf die Simulationsergebnisse nicht im Einzelnen untersucht wurden. Für den Versuch POSEIDON-PA20 sind die Ergebnisse gleich (Abb. 4.7). Allerdings dürfte dieser Versuch hierfür nicht repräsentativ sein.

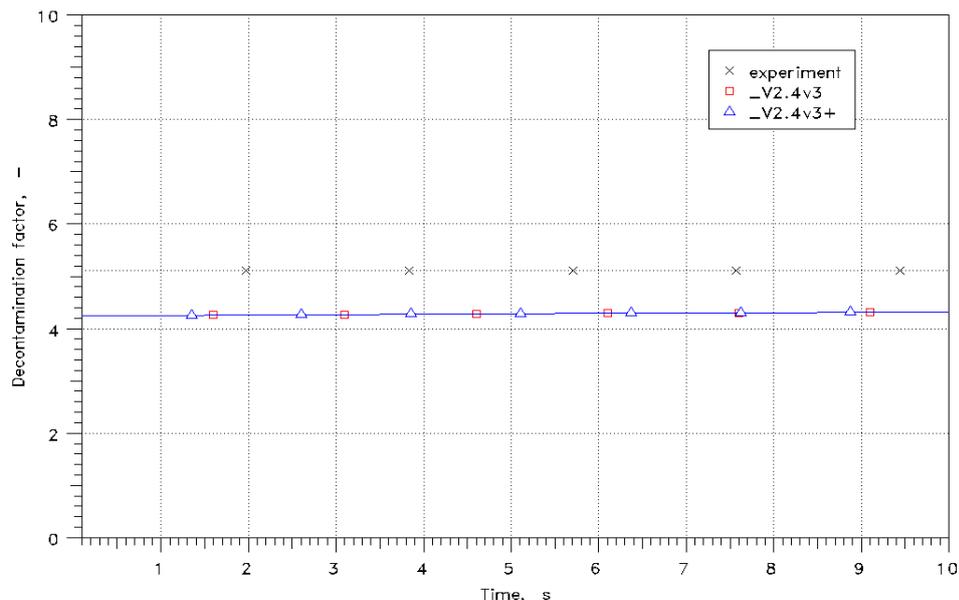


Abb. 4.7 Überprüfung der Änderungen anhand von POSEIDON PA-20

4.3.3.2 Unterschiedliche Größenklassenverteilung im Print Output

Im Rahmen von gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen (Vorhaben RS1504) wurde festgestellt, dass für einzelne Zonen die dargestellte Größenverteilung der Aerosole in der AFP-spezifischen Ausgabe und in der COCOSYS-Ausgabe unterschiedlich ist. Eine Untersuchung ergab, dass der erste Ausdruck in der AFP-Ausgabe bei Beginn einer Rechnung bzw. Restartrechnung vor dem Integrationszeitschritt und in der COCOSYS-Ausgabe erst nach dem Integrationszeitschritt vorliegt. Daher trat bei einzelnen Zonen ein entsprechender Unterschied auf. Zusätzlich wurde in diesem Zusammenhang der Printoutput in der COCOSYS-Ausgabe verbessert, da im Fall einer hohen Anzahl von Objekten (> 999) die Formatierung der Nummerierung nicht ausreichend war.

4.3.3.3 Fehler in Ag-Massenbilanz

Für die Silberoxidbildung (Reaktion 73) werden die Reaktionskoeffizienten entsprechend einer vorgegebenen Größe B_{73} anhand der Gleichung

$$E_{73} = \frac{R \cdot \ln\left(\frac{B_{73}}{k_{7390}}\right)}{\left(\frac{1}{363.15} - \frac{1}{298.15}\right)} \quad (4.1)$$

berechnet. Wurde für B_{73} der Wert 0 vorgegeben, wurde dieser intern auf 10^{-25} modifiziert. In der Folge führte dies zu einem Massenbilanzfehler für Silber und ein Ausschalten dieser Reaktion war nicht möglich. Das COCOSYS-Programm wurde entsprechend modifiziert. Wird nun der Wert 0 für B_{73} vorgegeben, wird der resultierende Reaktionskoeffizient k_{73} ebenfalls auf den Wert 0 gesetzt und somit die Reaktion ausgeschaltet. Die Änderungen wurden anhand eines Testbeispiels überprüft.

4.3.3.4 Fehlerhafte Berechnung der mittleren Kondensationsrate (ACOND) im Iodmodul AIM

Im Zusammenhang mit Untersuchungen zum Venturiwäscher wurde anhand eines einfachen Datensatzes für einen deutschen DWR festgestellt, dass die Berechnung der mittleren Kondensationsrate ACOND fehlerhaft ist. Diese Rate wird als Kriterium verwendet, um den Satz der Reaktionskoeffizienten unter trockenen bzw. nassen Rand-

bedingungen automatisch auszuwählen. In der fehlerhaften Berechnung wurden sogenannte adiabate Flächen mit einbezogen und führten zu einer Unterschätzung der mittleren Kondensationsrate, so dass eher trockene Verhältnisse angenommen wurden. Dies führte dann zu höheren Iodkonzentrationen in der Atmosphäre.

4.3.3.5 Implementation des von KIT entwickelten Rivulet-Modells

Im KIT wurde ein detailliertes Modell zur Simulation von Rivulets (Wasserrinnsalen) entlang von vertikalen oder geneigten Wandstrukturen entwickelt. Dieses Modell ist speziell für die Simulation des sogenannten Passive Containment Cooling Systems (PCCS) geeignet. Dieses System wird zum Beispiel beim AP1000 verwendet. Zur Überprüfung der Implementation wurden einzelne Testrechnungen wiederholt. Die Ergebnisse sind konsistent zu den Rechenergebnissen, welche bei der Entwicklung des Modells erzeugt wurden.

4.3.3.6 Verdampfung von überhitztem Wasser an der Sumpfoberfläche

In den COCOSYS-Zonenmodellen mit einer möglichen freien Wasseroberfläche (NONEQUILIB, DRASYS, VORTEX) wird neben der Verdunstung durch Konvektion bei niedrigen Wassertemperaturen auch die Verdampfung von überhitztem Wasser berücksichtigt. Diese Verdampfung tritt auf, wenn der Gesamtdruck in der Atmosphäre über der Wasseroberfläche sinkt (z. B. beim Containment-Venting) oder sehr viel Energie in einen kleinen Sumpf eingebracht wird (z. B. Kernschmelze nach RDB-Versagen in der mit Wasser gefüllten Reaktorgrube).

Mit der Version V2.4 wird den COCOSYS-Anwendern erstmals das neue CCI-Hauptmodul verfügbar gemacht, in dem mit MEDICIS die Beton-Schmelze-Wechselwirkung simuliert werden kann. Hierbei tritt der oben genannte Fall der Verdampfung von überhitztem Wasser entweder zu Beginn des MCCl auf, wenn Kernschmelze auf den Boden einer mit Wasser bedeckten Reaktorgrube fällt (Dampfexplosionen können zurzeit nicht simuliert werden) oder wenn in einer späteren Phase die Kernschmelze geflutet wird. In verschiedenen Anwendungsrechnungen (z. B. GRS mit ATHLET-CD/COCOSYS in Simulationen für Fukushima-ähnliche Szenarien in deutschen SWR oder in gemeinsamen COCOSYS-Analysen mit der armenischen TSO für WWER-440/270 /NRS 14/) kam es dabei zu extrem langen Rechenzeiten im THY-Hauptmodul und somit praktisch zum Stopp der Rechnung.

- **Beispiel KKW Armenien-2**

In den NRSC-Rechnungen zum KKW Armenien-2 zeigte sich, dass durch den von MEDICIS berechneten Energieeintrag in das die Kernschmelze überdeckende Wasser unrealistische hohe Wassertemperaturen berechnet wurden, z. T. über die kritische Temperatur hinaus – siehe die mit "TAU=1.0" bezeichnete Kurve in Abb. 4.8. Dies führte zur sehr starken Reduzierung der Integrationsschrittweite (kleiner 10^{-5} Sekunden) oder sogar zu Programmabstürzen.

Die Analyse ergab, dass der von COCOSYS berechnete Verdampfungsmassenstrom GBOIL zu gering ist, d. h. von MEDICIS wird mehr Energie in das Wasser eingebracht als durch die Verdampfung freigesetzt. Im Modell wird bisher angenommen, dass die überschüssige Energie innerhalb von 1 s als Dampf entweicht (Zeitkonstante TAU = 1,0 s). Zwar stellt die Einspeisung einer solch hohen Energie in wenig Wasser (z. B. 17 MW in ~70 kg, siehe Abb. 4.9 und Abb. 4.10) einen Extremfall dar, trotzdem wird eine derart starke Wasserüberhitzung als unrealistisch eingeschätzt.

Eine generelle Verringerung von TAU auf ~0,001 s zur Beschleunigung der Energiefreisetzung löst zwar dieses Problem (mit Beginn des MCCI werden damit sinnvolle Wassertemperaturen berechnet), hat aber in der WWER-440/270-Rechnung in der Anfangsphase des Störfalles Instabilitäten bei der Verdampfung und damit lange Rechenzeiten zur Folge. Auf die Parameterverläufe in der Anfangsphase hatte die Änderung von TAU keinen relevanten Einfluss, d. h. außer den genannten Schwingungen im berechneten Verdampfungsmassenstrom GBOIL. Mit beiden Werten von TAU wird in dieser Phase eine realistische Wassertemperatur berechnet, d. h. sie liegt nur minimal über der Sättigungstemperatur zum Gesamtdruck der Atmosphäre über dem Wasser.

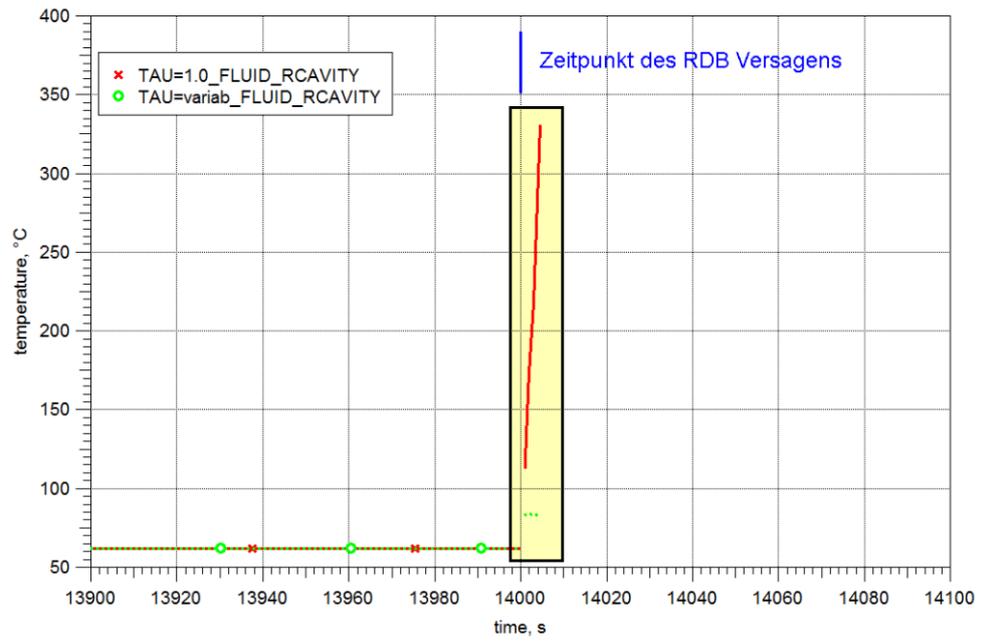


Abb. 4.8 THY+CCI, WWER-440/270, Wassertemperatur in der Reaktorgrube

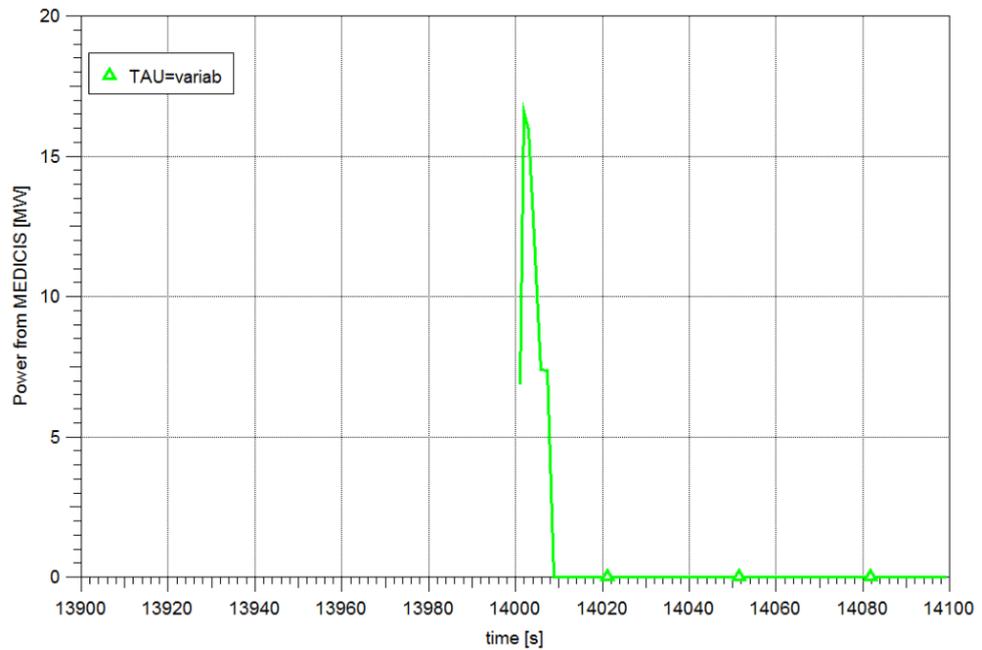


Abb. 4.9 THY+CCI, WWER-440/270, Energieeintrag in das Wasser über der Kernschmelze

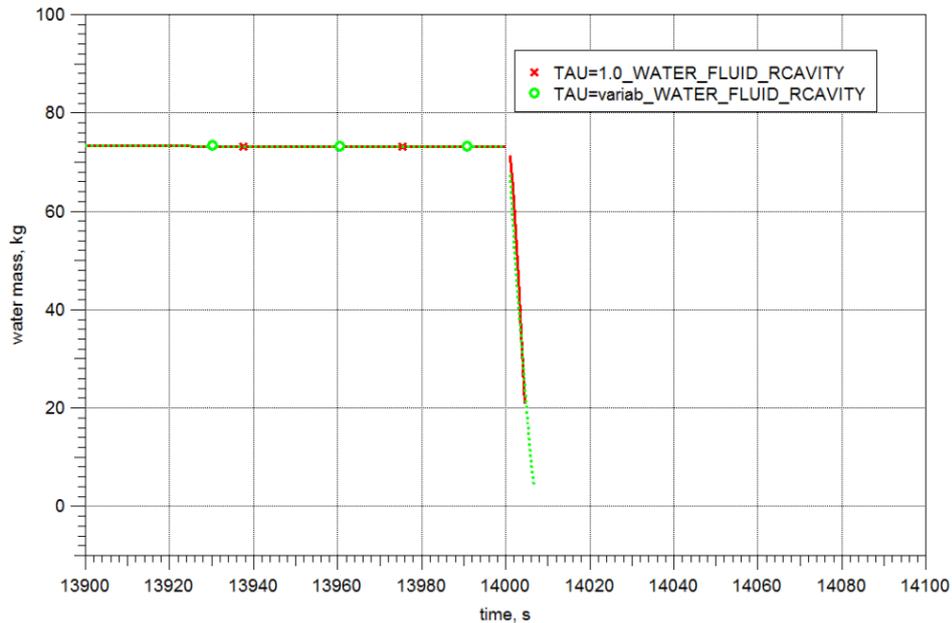


Abb. 4.10 THY+CCI, WWER-440/270, Wassermasse über der Kernschmelze

- **Modelverbesserungen**

Leider gibt es zurzeit keine Versuche, die eine Bewertung/Validierung von TAU und damit GBOIL zulassen. Hierzu können später evtl. die gegenwärtig an der THAI-Anlage laufenden WH-Versuche Aussagen liefern (siehe Kapitel 2.1.2). Um einerseits Standardrechnungen nicht zu beeinflussen (inklusive aller bisherigen Validierungsrechnungen), andererseits aber auch Rechnungen mit der neuen Kopplung zu MEDICIS lauffähig zu machen, werden als Lösungsansatz folgende Annahmen bzgl. TAU getroffen:

- $(T_{\text{Wasser}} - T_{\text{Sättigung}}) < 1 \text{ K}$: TAU = 1,0
- $1 \text{ K} < (T_{\text{Wasser}} - T_{\text{Sättigung}}) < 3 \text{ K}$: Verringerung von 1,0 auf 0,0012 nach der Boltzmann Funktion, deren Parameter mit dem Programm ORIGIN ermittelt wurden (siehe Abb. 4.11):

$$TAU = \frac{A1-A2}{1+e^{\left(\frac{(T_w-T_s)-x_0}{dx}\right)}} + A2$$
- $(T_{\text{Wasser}} - T_{\text{Sättigung}}) > 3 \text{ K}$: TAU = 0,0012

Damit wird praktisch nur eine geringe Wasserüberhitzung erreicht.

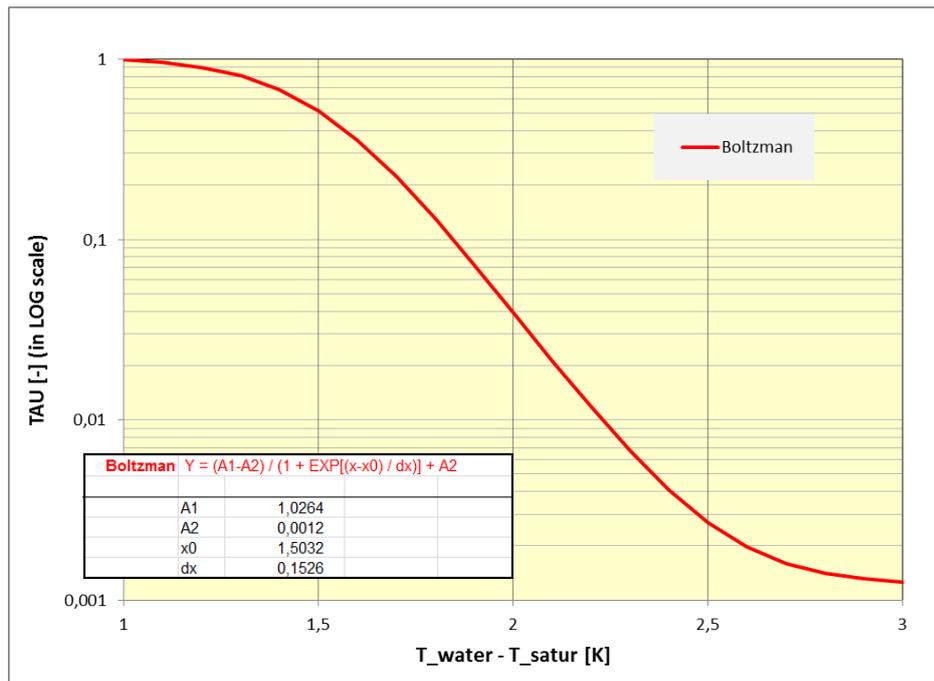


Abb. 4.11 THY, TAU als Funktion von ($T_{\text{Wasser}} - T_{\text{Sättigung}}$) im Bereich 1 bis 3 K Wasserüberhitzung

Mit dieser Änderung wurden die in Abb. 4.8 und Abb. 4.10 (oben) dargestellten Kurven (Legende "TAU=variab") berechnet. Es ist sichtbar, dass jetzt auch die Wassertemperatur zu Beginn des MCCI Prozesses (14 000 s) im sinnvollen Bereich liegt (Abb. 4.8). Nach 7 s ist das Wasser in der Reaktorgrube vollständig verdampft (in Abb. 4.10 ist der Nullpunkt aufgrund des Umschaltvorganges nicht sichtbar), weshalb die Linie für die Wassertemperatur in Abb. 4.8 endet.

Die Ergebnisse sind physikalisch plausibel und die Rechenzeit liegt in üblichen Größenordnungen, so dass diese Änderung jetzt Analysen zum Unfallszenario mit Kernschmelze für das KKW Armenien-2 unter Anwendung der Hauptmodule THY und CCI ermöglicht.

- **Überprüfung der Modelländerungen an einer Analyse für SWR-72**

Zur Überprüfung des Einflusses der Änderung bzgl. TAU auf COCOSYS-Standardrechenfälle wurde das für das Regressionstesten erstellte Instrumentarium genutzt /BAK 15/ und damit die Ergebnisse relevanter Datensätze verglichen. Ein signifikanter Einfluss auf die physikalischen Ergebnisse war nicht festzustellen – bis auf den SWR-72 Anlagendatensatz.

Mit dem SWR-72-Datensatz wird in einer THY Stand-Alone-Rechnung ein Störfall mit Kernversagen und MCCI durch einen einfachen Massen- und Energieeintrag simuliert (MCCI Beginn nach 3 200 s). Innerhalb von 24 Stunden wird das Containment zweimal druckentlastet. Dabei kommt es jeweils zur Überhitzung des Wassers in der Kondensationskammer (Zonen K21 und K22 in Abb. 4.12). In der späteren Störfallphase läuft Wasser aus der Kondensationskammer in die Zonen R19 und R20, wo es auf heißen Bodenstrukturen aufgewärmt und verdampft wird. Auf beide Vorgänge hat die Definition von TAU wesentlichen Einfluss.

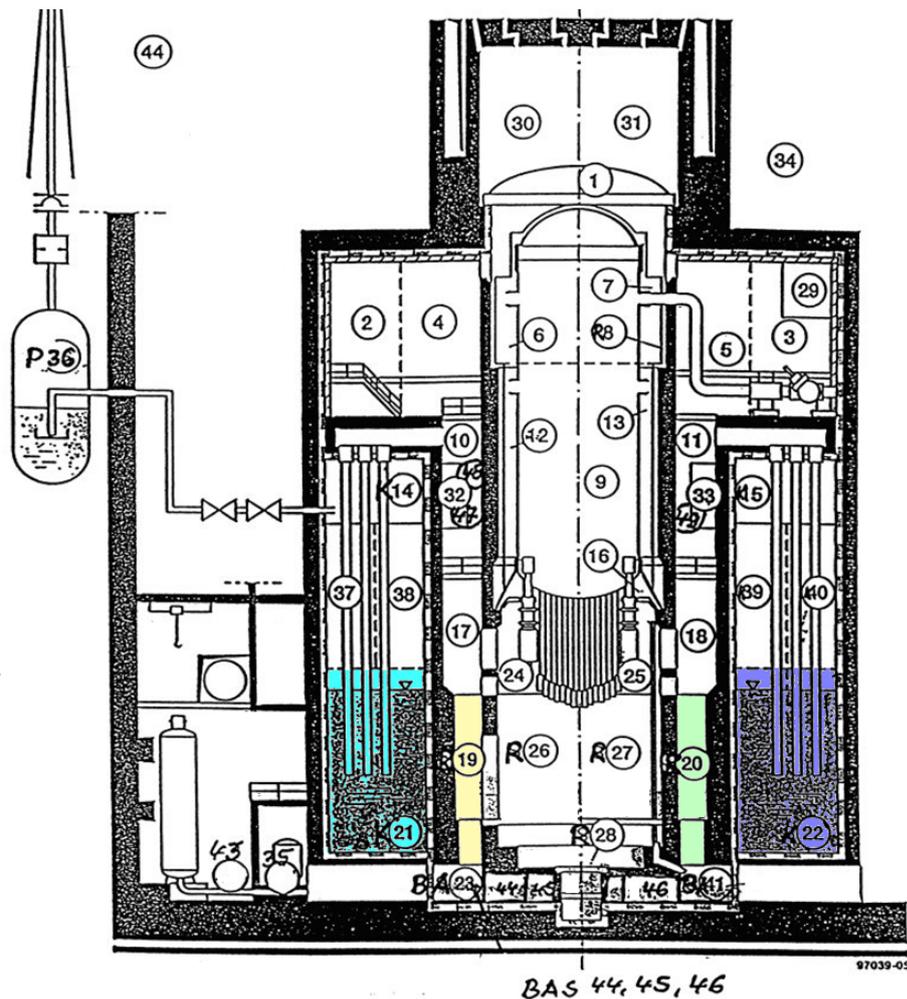


Abb. 4.12 SWR-72 Nodalisierung

Basierend auf den Erfahrungen von NRSC zum KKW Armenien-2 wurden die berechneten Wassertemperaturen genauer geprüft. Für das Wasser in der Kondensationskammer sind keine Besonderheiten festzustellen (Abb. 4.15, Variante "TAU=1.0"); anders sieht es für die Räumen R19 und R20 aus (Abb. 4.17, "TAU=1.0"). Für die Wassertemperaturen werden dort in zwei Zeitintervallen starke Schwingungen berechnet.

Diese sind auf die wiederholte Ansammlung von Wasser im Sumpf (FLUID Zonenteil) und dessen nachfolgende Verdampfung auf den heißen Bodenstrukturen zurückzuführen. Dabei werden von COCOSYS jeweils kurzzeitig Wassertemperaturen von bis zu 330°C und damit weit über der Sättigungstemperatur ermittelt (grün dargestellte Kurven "TAU=variab_ZPTS" in Abb. 4.17). Völlig unrealistisch ist allerdings die für Zone R19 zwischen 42 000 und 48 000 s berechnete Temperatur (rote Kurve "TAU=1.0_FLUID_R19").

Die oben dargestellte Änderung bzgl. der Zeitkonstante TAU in der Verdampfungsbe-
rechnung führt auch hier aufgrund der schnelleren Verdampfung bei stärkerer Über-
schreitung der Sättigungstemperatur des Wassers zu plausibleren Ergebnissen. Aller-
dings hat dies zur Folge, dass die Zyklen von Wasseransammlung und nachfolgender
Verdampfung auf dem Boden der Zonen wesentlich kürzer wurden (höhere Zyklusfre-
quenz), wodurch sich die benötigte Rechenzeit beträchtlich erhöht. Deshalb wurde die
Modellierung der Wasseransammlung in Nichtgleichgewichtszonen vor dem Generie-
ren eines Sumpfzonenteils verändert. Werden Bodenstrukturen (Typ BOTTOM) simu-
liert, wird eintretendes Wasser (über Einspeisungen, Wand- oder Bodendrainage oder
Pumpensysteme) als Wasserfilm auf der Struktur angenommen. Solange dieses Was-
ser auf den heißen Bodenstrukturen vollständig verdampft, kann kein FLUID-Zonenteil
entstehen. Diese Modellierung ist allerdings nur in Verbindung mit dem neuen CO1-
Wärmeübergangsmodell möglich. Sie machte zugleich entsprechende Änderungen am
SWR-72-Datensatz erforderlich. Im Ergebnis der Modell- und Datensatzänderungen
reduzierte sich die Frequenz der Wasseransammlung und Wiederverdampfung wieder
auf Werte wie mit $TAU = 1,0$. Dieser zyklische Prozess ist jetzt zeitversetzt bzw. in der
Anfangsphase zwischen 7 000 und 10 000 s ganz entfallen.

Repräsentative Ergebnisse aus den Rechnungen zum SWR-72 mit alter und neuer
Modellierung der Verdampfung (inklusive Änderungen am Datensatz bzgl. CO1-
Wärmeübergangsmodell für BOTTOM-Strukturen in Zonen R19 und R20) sind in
Abb. 4.13 bis Abb. 4.17 dargestellt. Der Druckverlauf und die Atmosphärentemperatu-
ren sind nur unwesentlich verändert. Die berechneten Wassertemperaturen insbeson-
dere in den Druckkammerzonen R19 und R20 sind jetzt plausibler.

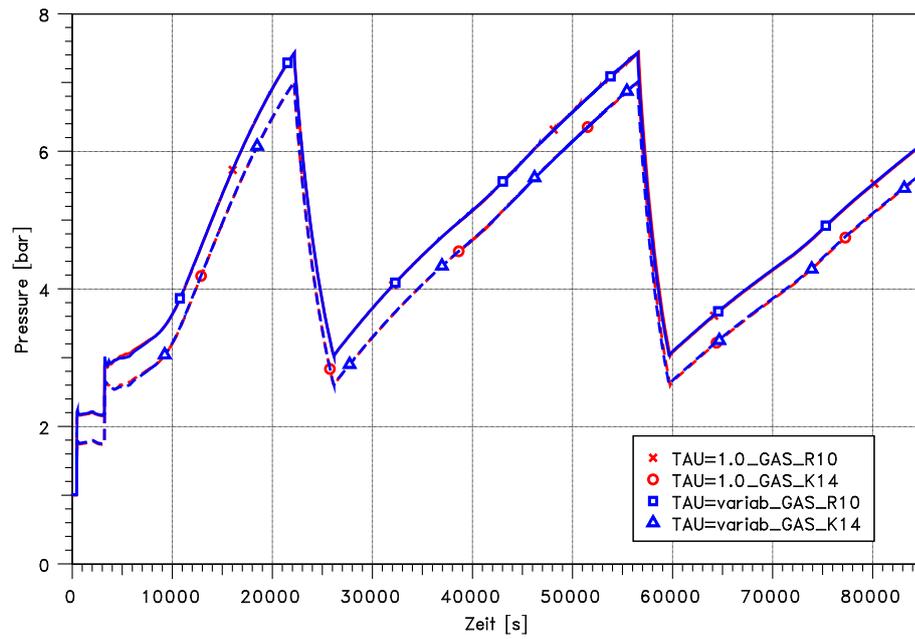


Abb. 4.13 COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Druckverlauf

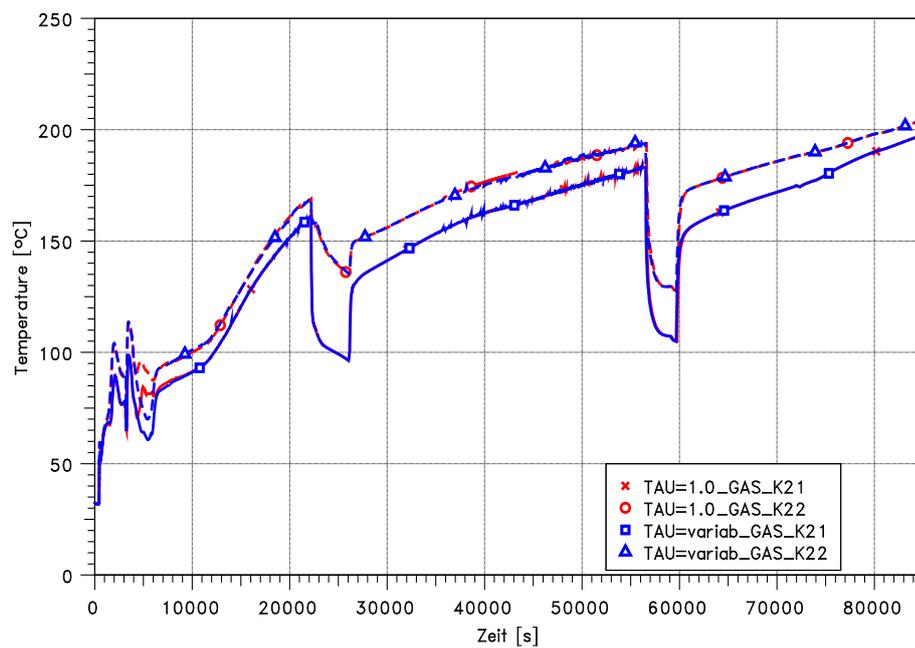


Abb. 4.14 COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Atmosphärentemperaturen in der Kondensationskammer, Zonen K21 und K22

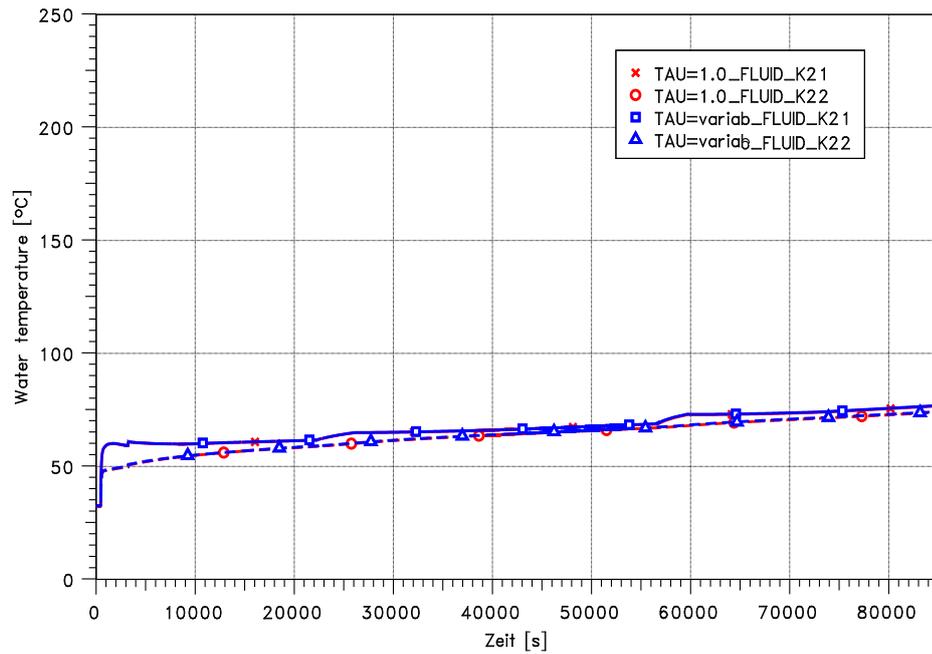


Abb. 4.15 COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Wassertemperaturen in der Kondensationskammer, Zonen K21 und K22

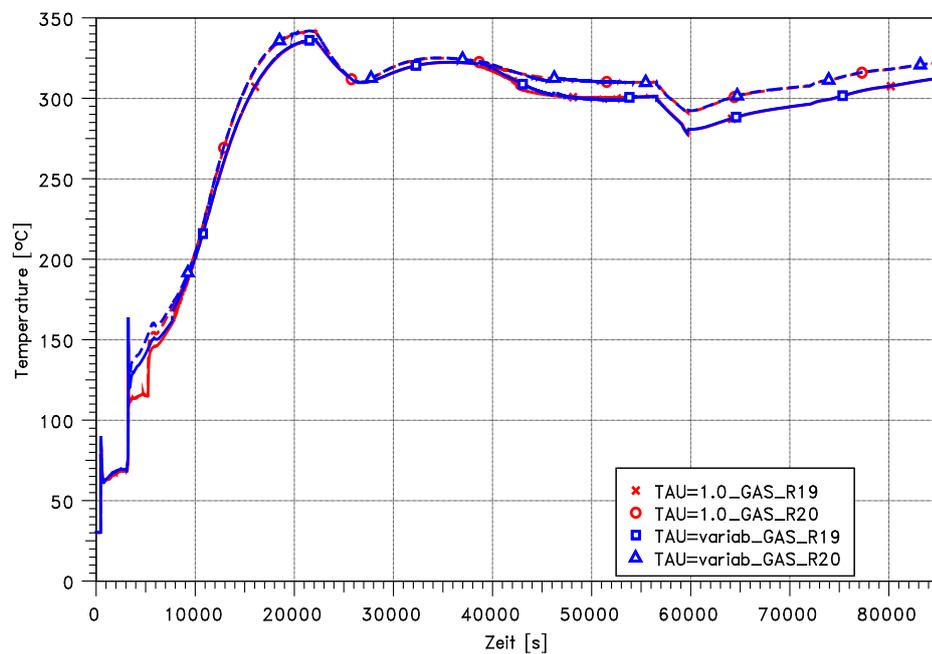


Abb. 4.16 COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Atmosphärentemperaturen in der Druckkammer, Zonen R19 und R20

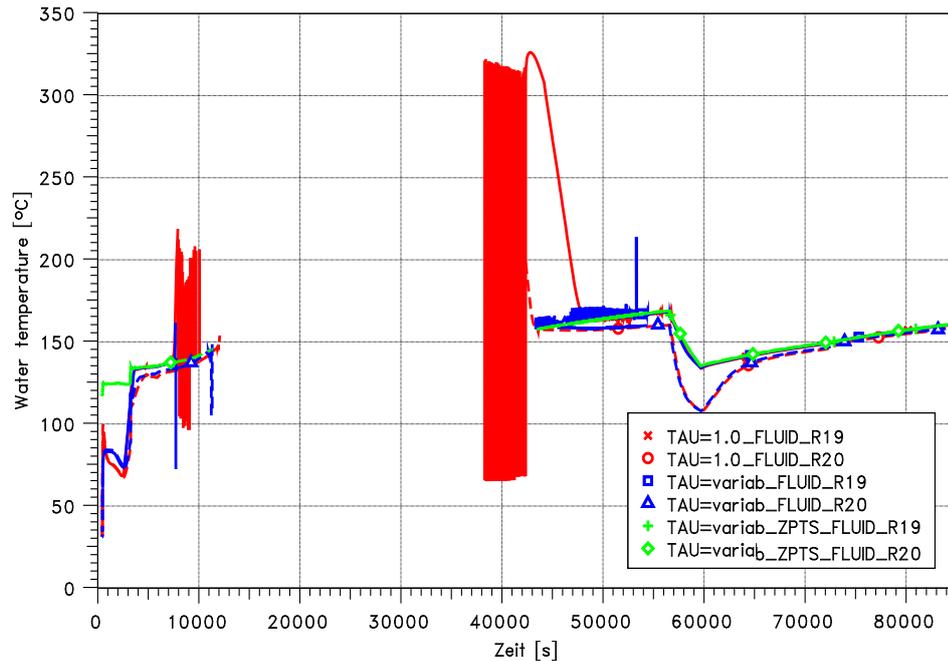


Abb. 4.17 COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Wassertemperaturen in der Druckkammer, Zonen R19 und R20

Abschließend sei erwähnt, dass mit der aktuellen COCOSYS-Version V2.4 für den SWR-72-Anlagendatensatz im Vergleich zur Vorgängerversion V2.3 abweichende Parameterverläufe berechnet werden, die nicht auf die hier genannten Modelländerungen zurückzuführen sind. Auf diese Abweichungen wird hier nicht eingegangen, da dies Gegenstand des neuen Berichtes zum Regressionstesten zur Version V2.4 sein wird /BAK 15/.

4.3.3.7 Unterstützung zur Durchführung gekoppelter ATHLET-CD/COCOSYS-Datensätze für eine deutsche DWR-Anlage

Im Rahmen des Vorhabens RS1504 wurden ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen für eine DWR-Anlage vom Typ KONVOI durchgeführt. Hierbei wurden bei einer genauen Analyse der Ergebnisse noch erhebliche Probleme in der Modellkette festgestellt /CHA 14/. Da die Arbeiten zur Beseitigung der Probleme über den Rahmen des Vorhabens RS1504 hinausgingen, wurden diese teilweise in diesem Vorhaben im Sinne von Anwendungsrechnungen und Erfahrungsrückfluss durchgeführt.

Es wurden folgende Szenarien betrachtet:

- 50 cm² Leck im heißen Strang mit Ausfall aller Notkühlsysteme und der sekundärseitigen Wärmeabfuhr und
- Ausfall der Speisewasserversorgung mit gleichzeitigem Ausfall der An- und Abfahrpumpen sowie der Notspeisepumpen.

In Bezug auf die ATHLET-CD/COCOSYS Kopplung wurden u. a. folgende Probleme identifiziert:

- Der Transfer der Spaltprodukte (Isotope) von ATHLET-CD nach COCOSYS ist weitgehend konsistent. Allerdings wurde festgestellt, dass das Strukturmaterial Eisen (Fe) nicht übertragen wird sowie die Übertragung von Cadmium nicht konsistent ist. Da bei der Übertragung die von ATHLET-CD berechneten Isotopenspektren verwendet werden, treten bei Strukturmaterialien eventuelle Inkonsistenzen auf. Diese wurden nun behoben.
- Für Silber (Ag) wurde eine unrealistisch hohe Nachzerfallswärme berechnet. Grund dafür ist ein nicht sinnvolles Isotopenspektrum an der Leckstelle. Hier besteht noch Verbesserungsbedarf in der Schnittstelle zwischen SOPHAEROS und FIPISO in ATHLET-CD. Da zurzeit die SOPHAEROS Version in ATHLET-CD ausgetauscht wird, wurde als Zwischenlösung die Nachzerfallsleistung von Silber nicht mehr betrachtet (Freisetzung als stabiles Isotop). Allerdings können die Probleme auch bei anderen Isotopen auftreten.

Weitere Probleme wurden in einem Technischen Fachbericht /CHA 14/ dokumentiert.

4.3.4 COCOSYS-Website

Jeder Organisation, welche COCOSYS anwendet, steht für den Informationsaustausch sowie für die Weitergabe neuer Programmversionen ein personalisierter Zugang zur Verfügung. Da die Werkzeuge bezüglich des Quickplace-Servers seitens IBM nicht mehr gewartet werden bzw. zur Verfügung stehen, wird nun eine von der GRS eingerichtete Cloud verwendet. Im Rahmen des Vorhabens wurde die GRS-Cloud für COCOSYS-Zwecke eingerichtet. Die Cloud bietet dabei:

- den Zugang zu Programmversionen (u. U. über einen Link),
- Programmdokumentation,

- die sogenannte Bug-Liste, welche nun über TeamForge exportiert wird und
- Vorträge des COCOSYS-Workshops.

Über Änderungen auf den Seiten der Cloud können sich Nutzer informieren. In dringenden Fällen ist dieses aber auch schon direkt beim Hochladen neuer Inhalte möglich.

4.3.5 COCOSYS Users Workshop

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde vom 28. – 30. September 2015 in der GRS Berlin der 5. COCOSYS User Workshop durchgeführt. Das Ziel dieses Workshops, der in regelmäßigen Abständen stattfindet, ist der Informationsaustausch zwischen internen und externen COCOSYS-Anwendern. Die gewonnenen Erkenntnisse fließen dann in zukünftige COCOSYS-Entwicklungen ein. Dabei werden insbesondere auch Anforderungen der Nutzer aus der Codeanwendung auf reale Anlagen berücksichtigt.

Drei Tage haben externe COCOSYS-Anwender und Entwickler sowie GRS-Mitarbeiter ihre Arbeiten mit COCOSYS vorgestellt und über zukünftige Anforderungen an die Code Entwicklung diskutiert. Insgesamt fanden sich in der GRS Berlin 24 Teilnehmer ein, von denen 13 Externe von TSOs und Universitäten waren. Die Veranstaltung war in drei Sitzungen gegliedert: Status der aktuellen COCOSYS-Anwenderversion V2.4, Status der COCOSYS-Validierung und neue COCOSYS-Entwicklungen (COCOSYS V3.0).

Die Teilnehmer aus Armenien, Bulgarien, Deutschland, Litauen, Tschechien und der Ukraine haben eine vielfältige Mischung ihrer Arbeiten mit Schwerpunkt im Bereich von Anwendungsrechnungen für verschiedene Experimente und KKW präsentiert. Die Arbeiten umfassen zwei unterschiedliche Themenfelder, wie einerseits die Wasserstoffverteilung und Spaltproduktverteilung im Containment und den Einsatz von katalytischen Rekombinatoren zum Wasserstoffabbau während eines schweren Störfalls, und andererseits die Ankopplung von detaillierten Codes an COCOSYS zur Erweiterung des Anwendungsbereichs. Das sind neben ATHLET/ATHLET-CD zur Simulation des gesamten Anlagenverhaltens vor allem dreidimensionale Programme wie CoPool, zur detaillierten Simulation des Sumpfes im Containment, oder ANSYS CFX zur detaillierten Simulation der Gasverteilung in ausgewählten Raumbereichen.

Im Anschluss an die Vorträge und auch in den Pausen wurden angeregte und interessante Diskussionen zu den präsentierten Themen geführt. Generell wurde deutlich, dass COCOSYS national und international einen hohen Stellenwert genießt und dass die vorgesehene Weiterentwicklung und die Nutzerunterstützung durch die GRS einen hohen Stellenwert haben.

4.3.6 **ASTEC User Club Meetings**

Der 2. CESAM Technical Workshop ist gleichzeitig als 6. ASTEC Users' Club Meeting durchgeführt worden. Dieses Meeting fand vom 23. – 26. Februar 2015 in Bologna statt und wurde vor Ort vom CESAM-Partner ENEA durchgeführt. Die fachliche Planung wurde von der GRS als CESAM-Koordinator geleitet. Die GRS war mit drei Vorträgen zu den Themen Pool Scrubbing und gefilterte Druckentlastung, Anlagenrechnungen mit ASTEC zu KONVOI-Reaktoren sowie Schmelze-Beton-Wechselwirkung mit ASTEC MEDICIS vertreten.

Der 2. CESAM Technical Workshop wurde wieder mit dem dann 7. ASTEC Users' Club Meeting zusammengelegt. Dieses Treffen wurde im Zeitraum vom 29. Februar – 3. März 2016 in Alkmaar, Niederlande vom JRC-IET in Petten organisiert. Auch dieses Meeting wurde von der GRS technisch betreut.

Der 4. und letzte CESAM Technical Workshop ist beim KIT in Karlsruhe im März 2017 geplant. Ob dieses Treffen wieder als ASTEC Users' Club Meeting durchgeführt wird, wird auf dem kommenden CESAM Steering Committee diskutiert werden.

5 Zusammenfassung

Im Vorhaben RS1514 wurden Beiträge zur Verbesserung des Programms COCOSYS durch den Fortgang der Arbeiten zur Validierung einzelner oder mehrerer Modelle anhand geeigneter Experimente und die Überprüfung anhand von Anwendungsbeispielen für Druckwasserreaktoren erreicht. Darüber hinaus erfolgte die Beteiligung am EU-Projekt CESAM (Code for European Severe Accident Management) im Rahmen des 7. Framework Programme EURATOM sowie an weiteren OECD Projekten und Aktivitäten. Auf wesentliche Ergebnisse wird nachfolgend mit Bezug zu den 4 Arbeitspaketen des Vorhabens eingegangen.

5.1 Validierung von COCOSYS-Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten

5.1.1 Thermohydraulik

Mit der Erweiterung der THAI-Anlage um einen zusätzlichen Behälter (PAD) zur Versuchsanlage THAI+ ergibt sich erneut die Möglichkeit, sogenannte „doppelt-blinde“ Rechnungen der Inbetriebnahmeversuche, ohne vorherige Kenntnis der Anlageneigenschaften, durchzuführen. Die in diesem Vorhaben durchgeführte doppelt-blinde Simulation des THAI-Versuches TH-27 hat einen hohen Stellenwert für die Validierung, da hiermit die Prognosefähigkeit von COCOSYS überprüft werden kann. Dargestellt werden die Erstellung des COCOSYS-Datensatzes sowie exemplarische Ergebnisse. Die Auswertung der Rechnung erfolgt nach Freigabe der experimentellen Daten im Nachfolgevorhaben.

Im Rahmen des THAI-V-Versuchsprogramms sind von Becker Technologies im November 2014 an der THAI-Anlage die Tests WH-20 bis WH-23 zur experimentellen Untersuchung des Effekts des Dampfdurchbruchs durch eine Wasservorlage unter siedenden Randbedingungen durchgeführt worden. Dieser Vorgang ist für schwere Störfälle in KKW des Typs Siedewasserreaktor (SWR-72 – KKW Gundremmingen, Mark I – z. B. KKW Fukushima, RBMK-1000) bzw. für Anlagen mit Druckabbausystemen (WWER-440/213) von Bedeutung.

Diese Tests sind von der GRS intensiv begleitet worden. Die durchgeführten doppelt-blinden Rechnungen und Nachrechnungen werden in diesem Bericht dargestellt. Unter

Berücksichtigung der vom Experiment abweichenden Randbedingungen (Dampfeinspeisung) lieferte bereits die doppelt-blinde Vorausrechnung eine gute Voraussage für den experimentellen Verlauf, d. h. sie zeigt die gute Prognosefähigkeit von COCOSYS. Punktuelle Fragestellungen sollten noch geklärt werden (anfänglicher Druckanstieg, Druckgradient während der Lufteinspeisung). Mit diesem Versuch wurde die russische Chasanov/Smirnova-Korrelation erfolgreich überprüft, allerdings werden hierdurch auch keine signifikanten Auswirkungen beobachtet.

In diesem Vorhaben ist COCOSYS an den THAI-HD-Versuchen mit Wasserstoffverbrennung und Sprühen validiert worden. Im ersten Schritt sind die einzelnen Effekte (Wasserstoffverbrennung anhand THAI HD-7 und HD-22 sowie Sprühen ohne Verbrennung an einem Sprühtest) erfolgreich getestet worden. Für den Sprühversuch wird der Druckverlauf richtig berechnet, allerdings wird der Temperaturabfall überschätzt. Im Versuch traten dagegen überhitzte Bedingungen mit höheren Temperaturen auf. Für die Rechnungen der Wasserstoffverbrennungen wurde die Konstante REYFAC von 1,1 auf 1,4 erhöht und damit wurden gute Ergebnisse erzielt.

Bei Verbrennungsversuchen mit Sprühen simuliert COCOSYS nicht die von den Sprühtropfen verursachte Atmosphärenbewegung, die in der Anfangsphase des Experiments eine verstärkte Verbrennung bewirkt. Des Weiteren unterschätzt COCOSYS sehr stark die Abschwächung der Verbrennung durch die Sprühtropfen. Der erste Punkt könnte durch die Berücksichtigung des Luftentrainments (RUB-Modell) verbessert werden. Aufgrund der Konzeption des FRONT-Modells kann eine Abschwächung der Verbrennung durch die Sprühtropfen nicht berücksichtigt werden. Somit zeigen die Rechnungen die derzeit vorhandenen Grenzen des FRONT-Modells in COCOSYS auf. Für diese Themenstellung wird daher die Durchführung von CFD-Rechnungen empfohlen.

5.1.2 Aerosolverhalten

Im Zusammenhang mit dem Aerosolverhalten sind die Themen nasse Resuspension und das Auswaschen von Aerosolen aus der Gasphase durch Sprühen untersucht worden.

Die nasse Resuspension (Freisetzung von Spaltprodukten aus einer siedenden Wasservorlage) von unlöslichem Aerosolmaterial unterscheidet sich von der mit löslichem

Material vor allem durch eine potentiell höhere Freisetzungsrates und durch größere Partikel. Bei löslichem Material ist die Größe der eingetrockneten Partikel durch die Konzentration im Tropfen bestimmt. Bei unlöslichem Material hängt dagegen die Partikelgröße des freigesetzten Aerosols von der Größe der im Sumpf suspendierten Partikel (Hydrosol) ab. Sind die Partikel größer als die Tröpfchen, werden sie gar nicht erst freigesetzt. Kleine Partikel wiederum können wegen der Anreicherung an der Sumpfoberfläche überproportional stark freigesetzt werden.

Die gemessenen Freisetzungen im THAI-Versuch TH-25 liegen etwas niedriger im Vergleich zu den REST-Versuchen. Aufgrund der erheblichen Komplexität dieses Phänomens wird vorgeschlagen, eine konstante Entrainmentrate von $5 \cdot 10^{-3}$ für unlösliche Aerosole im Modell zu verwenden. Da im umstrukturierten AFP-Modell nun auch die Größenverteilung der Aerosole im Sumpf berechnet wird, ergeben sich hier neue Möglichkeiten für die Modellierung der nassen Resuspension. Entsprechende Vorschläge werden in diesem Bericht dargestellt.

In diesem Vorhaben ist erstmals das in COCOSYS implementierte Auswaschmodell zur Simulation der Wechselwirkung zwischen Aerosolen und Sprühtropfen validiert worden. Für die Untersuchungen wurde der von Becker Technologies durchgeführte Versuch AW-4 herangezogen. Das Ziel des Versuches ist es, die Abnahme der Aerosolkonzentration durch ein reaktortypisches Sprühsystem mit polydispersem Tropfenspektrum zu untersuchen. Dieser Versuch ist intensiv seitens der GRS begleitet worden. Dargestellt werden die Ergebnisse der durchgeführten Auslegungsrechnungen sowie der Nachrechnung. In den bisher durchgeführten Rechnungen ist der Aerosolabbau in der „trockenen“ Phase (vor dem Sprühen) zu niedrig, während dieser in der Sprühphase überschätzt wird (Faktor 1,5 bis 2). Hier sind zukünftig noch Verbesserungen notwendig. Durch das Auswaschen verschiebt sich, wie im Experiment beobachtet, die Größenverteilung hin zu kleineren Aerosolen.

5.1.3 Iodverhalten

Basierend auf den Ergebnissen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Iodmodelle anhand des PHEBUS-Versuchs FPT1 ist die Validierung des Iodmodells AIM fortgesetzt worden. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf dem neuen Iod/Farbe-Modell. Hier sind Analysen anhand von OECD-BIP-Versuchen sowie THAI-Mehrraumversuchen durchgeführt worden. Ebenso ist das Verhalten des Silberaerosols in Bezug auf Abwa-

schen von Wänden und Böden und in Bezug auf die Iod/Silber-Reaktion untersucht worden. Weitere Untersuchungen sind für radiolytische Reaktionen vorgenommen worden. Hierzu gehört auch die Zersetzung von abgelagertem CsI durch Strahlung, welches im Rahmen von OECD-STEM untersucht wurde.

Mit dem bisherigen Iod/Farbe-Modell für trockene Bedingungen in COCOSYS-AIM konnten viele BIP-Versuche und die THAI-Mehrraumversuche Iod-27a bis Iod-30 mit Farbe noch nicht zufriedenstellend nachgerechnet werden. Das Modell ist daher im Entwicklungsvorhaben unter Verwendung von BIP-Daten und THAI-Einraumversuchen grundlegend überarbeitet worden. Dabei ist das bisherige 2-Stufen-Modell, in dem zuerst die Physisorption und daraus die Chemisorption von I_2 gerechnet werden, durch ein „paralleles Modell“ ersetzt worden, in dem beide Reaktionen von molekularem Iod (I_2) aus der Atmosphäre in physisorbiertem und chemisorbiertem Iod parallel ablaufen.

Das neue Modell wurde schließlich anhand von Ergebnissen aus den THAI-Einraumversuchen Iod-15, Iod-17 und Iod-20 an die Eigenschaften der deutschen GEHOPON-Farbe angepasst. Zur Validierung wurden anschließend die THAI-Iodversuche Iod-27a, Iod-28 und Iod-30 erneut nachgerechnet.

Die durchgeführten Validierungsarbeiten zu den THAI-Einraumversuchen Iod-15, Iod-17 und Iod-20 demonstrieren, dass sich diese und ähnliche Versuche mit dem neuen Iod/Farbe-Modell gut simulieren und interpretieren lassen. Die Messergebnisse konnten überwiegend zufriedenstellend nachgerechnet werden. Allerdings zeigen die Rechnungen auch, dass das Iod/Stahl-Modell im Zusammenspiel mit dem neuen Iod/Farbe-Modell nicht zufriedenstellend eingestellt ist. Die $I_2(g)$ -Konzentrationen in den Einraumversuchen Iod-15 und Iod-20 wurden in der Gleichgewichtsphase bei geringer Iodkonzentration zu niedrig berechnet.

In diesem Bericht sind zunächst die Ergebnisse der Vorausrechnungen zu THAI Iod-27a bis Iod-30 mit dem alten Iod/Farbe-Modell dargestellt worden. Der starke Einfluss der Feuchte auf die Iod/Farbe-Wechselwirkung war bisher nicht bekannt und daher im Modell nicht berücksichtigt. Diese Rechnungen überschätzen daher die Iod-Ablagerung auf Farbe und berechneten eine deutliche Iodschichtung, welche dann im Experiment so nicht aufgetreten ist. Mit dem neuen Iod/Farbe-Modell wurden diese Rechnungen wiederholt. Anders als im alten Modell ist im neuen der Großteil des abgelagerten Iods auf der Farbe sofort chemisorbiert. Die Chemisorptionsrate hat bei hoher absoluter Feuchte bzw. Dampfdichte der Atmosphäre ein Maximum und geht bei geringen

Dampfdichten stark zurück. Die Physisorption von I_2 auf der Farbe spielt nur noch eine untergeordnete Rolle.

Die $I_2(g)$ -Konzentration der Nachrechnung von Iod-27a mit dem neuen Modell ist unter Berücksichtigung der Bodenheizung deutlich homogener, allerdings dauert die Durchmischung etwas länger als im Experiment. Die gerechnete und die gemessene Iodbelastung der Farbflächen am Versuchsende stimmen gut überein.

Neben dem unzureichenden Iod/Stahl-Modell trägt auch die in den letzten zehn Jahren (seit Iod-11 etc.) zugenommene Passivierung des THAI-Behälterstahls zu der Diskrepanz zwischen Vorausschätzung und Messergebnis für Iod-28 bei. Unter Passivierung wird die Entstehung einer Schutzschicht auf dem Stahl verstanden, welche die Physisorption und die Chemisorption von molekularem Iod (I_2) verlangsamt. Durch die Passivierung wird das Gleichgewicht zwischen gasförmigem $I_2(g)$ und dem am Stahl physisorbierten I_2 zu größeren $I_2(g)$ -Konzentrationen hin verschoben.

Die Nachrechnung des Versuchs Iod-28 mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und unter Berücksichtigung der Passivierung zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen sind im Wesentlichen auf Ungenauigkeiten in der thermohydraulischen Rechnung (Feuchte, Strömungen etc.) und das noch nicht exakt angepasste neue Iod/Stahl-Modell zurückzuführen.

Auch der Versuchs Iod-30 wurde mit COCOSYS-AIM unter Verwendung des neuen Iod/Farbe-Modells nachgerechnet. Die Passivierung des Behälterstahls wurde durch eine Erhöhung der I_2 -Desorptionsrate von Stahl um den Faktor 7 berücksichtigt. Mit dem neuen Iod/Farbe-Modell konnte die Ausbreitung des luftgetragenen Iods in der Mehrraumgeometrie gut nachgerechnet werden. Die Reaktion von I_2 mit den Ag-Partikeln wurde mit einem alleinstehenden Modell gerechnet. Dieses muss noch in COCOSYS-AIM integriert werden. Wegen der vergleichsweise schwachen I_2 /Farbe-Reaktion und der Passivierung des Behälterstahls ist der Mehrraumeffekt auf die I_2 -Ausbreitung (Konzentrationsunterschiede) gering. In der zukünftigen COCOSYS-Version mit dem umstrukturierten AFP-Modul wird es möglich sein, die Reaktion von Iod mit Silber direkt zu berechnen.

Anhand des THAI-Versuchs AW-3 wurde die Iod/Silber-Reaktion im Sumpf untersucht. Wie schon in der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zur Iodmodellierung diskutiert wurde, hängt diese Reaktion erheblich von der reaktiven Oberfläche der Silberpartikel

ab. AW-3 bestätigt klar die vorhergesagte Reduktion der reaktiven Silberfläche, wenn die Aerosolpartikel teilweise oder alle auf den Sumpfboden abgelagert werden. In Reaktorrechnungen muss dies berücksichtigt werden. Bei einer Nichtberücksichtigung würde die I_2 -Konzentration im Sumpf und in der Atmosphäre sowie der Iod-Quellterm aus der Anlage deutlich zu gering berechnet werden.

Anhand der THAI-Laborversuche zu AW-3 wurde erstmals das AULA-Abwaschmodell im neuen AFP-Hauptmodul validiert. Die Versuchsergebnisse haben gezeigt, dass in allen Versuchen zunächst ein anfänglich schnelles Abwaschen der abgelagerten Aerosole stattfindet, welches schließlich in ein langsames und lange andauerndes Abwaschen übergeht. Des Weiteren verdeutlichen die Versuche, dass durch die Entstehung von zeitlich stabilen Rivulets nur ein Teil der Bleche benetzt wird und die Rivuletbreite abhängig vom Neigungswinkel ist. Aufgrund des langzeitigen (linearen) Abwaschverhaltens wurde das Modell um einen weiteren Abwaschpfad, bezeichnet als „Rivulet Mixing Option“, erweitert. Dieser Pfad beschreibt einen Mitriss von Aerosolen an den seitlichen Kanten der Rivulets aufgrund von Turbulenzen bzw. einer seitlichen Verschiebung der Rivulets. Insgesamt zeigen die Nachrechnungen der Versuche mit dem neuen erweiterten AULA-Modell gute Ergebnisse und bestätigen, dass das theoretische Konzept des AULA-Modells zutreffend ist. Allerdings gibt es in der derzeitigen Modellform noch Defizite, die noch behoben werden müssen. Zu nennen ist u. a. die abweichende Vorgabe der Flächenanteile des Films, welche erheblich von den tatsächlich im Experiment bestimmten Flächenanteilen abweicht. Zusätzlich müssen die Eingabewerte der Aerosolabwaschrates $k_{E,0}$ und der Rivulet-Mixing-Geschwindigkeit v_{riv} noch für andere Fälle überprüft werden. Hinsichtlich der Rivuletflächen (hier noch ein Eingabewert) bietet es sich an, das von KIT entwickelte Rivuletmodell in COCOSYS auch für den Fall der Wandkondensation zu erweitern.

Im THAI-Versuch Iod-26 mit reaktivem Silberaerosol konnte der merkliche Einfluss auf die $I_2(g)$ -Konzentration gezeigt werden. Der Anlagerungs-/Reaktionsprozess ist bisher noch nicht modelliert. Es ist geplant, Iod-26 mit der neuen Programmversion COCOSYS 3.0 mit dem umstrukturierten Modul AFP nachzurechnen, sobald die erforderliche Modellierung zur Verfügung steht. Aus der durchgeführten Vorausrechnung sind Schlussfolgerungen für die notwendige Modellentwicklung, insbesondere für die effektive reaktive Oberfläche, gezogen worden, die in diesem Bericht dargestellt sind.

Radiolytische Iodreaktionen spielen für die Berechnung des Quellterms eine erhebliche Rolle. $I_2(g)$ hängt nicht nur von der radiolytischen I_2 -Bildung im Sumpf, sondern auch

vom I_2 -Verhalten in der Gasphase mit Adsorption an Oberfläche, radiolytischer IOx-Bildung etc. ab. Die Modellierung der Gasphasen-Reaktionen in AIM ist in den letzten Jahren systematisch verbessert worden. Es wurde daher anhand der Versuche CAIMAN 97/02 und RTF P10 T2 überprüft, ob die Einstellungen des Radiolysemodells nach wie vor optimal sind oder ob Korrekturen, insbesondere an der pH-Abhängigkeit und/oder der Dosisleitung, erforderlich sind. Die Ergebnisse der neuen Rechnungen zeigen, dass in der Entwicklerversion von COCOSYS die Radiolysereaktionen in der Wasserphase schon relativ gut modelliert sind. Bei der Analyse der Experimente spielen allerdings auch andere Effekte, wie z. B. der Massentransfer an der Sumpfoberfläche, eine große Rolle. Dies ist ein Grund für die teilweise deutliche Abweichung der gerechneten Iodkonzentrationen von den Messwerten. Eine weitere punktuelle Verbesserung/Überprüfung des Radiolysemodells wird empfohlen.

5.1.4 Umstrukturiertes AFP-Hauptmodul

In dem COCOSYS-Entwicklungsvorhaben RS1532 wird das AFP-Hauptmodul in COCOSYS komplett neu strukturiert. Die umfangreichen programmtechnischen Änderungen und Erweiterungen erfordern neben Verifikationsrechnungen, in denen der korrekte Programmablauf überprüft wird, auch erneute Validierungsrechnungen. Erste erfolgreiche Validierungsrechnungen anhand VANAM M3 zum Aerosolverhalten und OECD BIP G4 zum Iod/Farbe-Verhalten zeigen gute Ergebnisse. In Bezug auf die Rechnung für VANAM M3 ist gezeigt worden, dass der Einfluss des neuen CO1-Wärmeübergangsmodells für das Aerosolverhalten erheblich ist. So wird die Aerosolablagerung in der trockenen Phase unterschätzt.

In dem umstrukturieren AFP-Hauptmodul wurden auch bereits Modelle zur Beschreibung der Zersetzung vom abgelagerten CsI und IOx durch Strahlung implementiert. In diesem Vorhaben wurde das Modell erstmals anhand von Versuchen aus OECD-STEM (AER-1 und AER-3) überprüft. Bei der Nachrechnung von AER-3 mit höherer Feuchte und Farbe als Träger werden aber die I_2 - und die IOx-Freisetzung sehr stark überschätzt. Für eine adäquate Simulation sind noch Verbesserungen am Modell erforderlich.

5.1.5 Core Concrete Interaction (CCI)

Ein weiterer Themenkomplex in COCOSYS betrifft die Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Das Modell MEDICIS im CCI-Hauptmodul berechnet diese Vorgänge. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden 2 Experimente an der MOCKA-Anlage (MOCKA3.1 und MOCKA6.1) mit COCOSYS nachgerechnet. Besonderes Merkmal dieser Versuche ist die Heizungsmethode der Schmelze durch die Zufuhr eines reaktiven Stoffstroms. Dadurch ist es erstmals möglich, Betonstrukturen mit einer Armierung für die Grube zu verwenden, wie sie unter Reaktorbedingungen typisch sind. Zielsetzung ist es, die Wechselwirkung einer oxidischen und metallischen Simulatschmelze mit Beton in geschichteter Schmelzekonfiguration zu untersuchen. Da bei silikatischem Beton die Armierung einen Einfluss auf das Erosionsverhalten hat, war es sinnvoll, entgegen der ersten Aufgabenbeschreibung des Vorhabens mehrere der MOCKA-Versuche zu analysieren und diese intensiv zu begleiten. Die Ursache für den Einfluss des Betontyps bzw. der Armierung auf das 2D-Erosionsverhalten ist noch nicht abschließend geklärt. Dabei ist zu berücksichtigen, dass verbleibende Unsicherheiten bei den experimentellen Randbedingungen noch beträchtlich sind. Hier lässt der jetzt erreichte Stand der Validierung noch Punkte offen, weil u. a. bei den für die Nachrechnung verwendeten Versuchen keine Temperaturmessungen der Schmelze vorliegen. Diese sind für spätere MOCKA-Versuche geplant. Aus diesem Grund sollte die hier erarbeitete Empfehlung für die 2D-Verteilung von Wärmeübergangskoeffizienten von der Schmelze an die umgebenden Betonstrukturen (siehe Kap. 2.5.5) überprüft werden, sobald verlässliche Temperaturmessungen in MOCKA-Experimenten verfügbar sind.

5.2 COCOSYS und ASTEC Anwendung

5.2.1 ASTEC: EU-Vorhaben CESAM

Das Projekt CESAM (Code for European Severe Accident Management) mit 19 Partnern wird im Rahmen des 7. Framework Programme EURATOM der Europäischen Kommission durchgeführt und läuft von April 2013 bis Ende März 2017. Das Ziel von CESAM ist es, ASTEC speziell im Hinblick auf die Simulation von Notfallmaßnahmen in verschiedenen KKW weiterzuentwickeln. Dabei sollen besonders Phänomene berücksichtigt werden, die in den Unfällen in Fukushima Daiichi eine Rolle gespielt haben. Außerdem werden generische Referenzdatensätze für wesentliche in Europa be-

triebene Kernkraftwerkstypen erstellt und Störfallszenarien inklusive Berücksichtigung von Notfallmaßnahmen mit diesen Datensätzen analysiert. Die GRS nimmt in CESAM die Aufgaben des Koordinators wahr und leitet damit sowohl die fachliche als auch die finanziell-administrative Abwicklung des Projekts. Einzelne Arbeitspakete (WP) sind über das Vorhaben RS1514 kofinanziert worden. Dazu gehören die Bewertung der Modelle zur Simulation des Kernverhaltens in SWR mit der neuen ICARE/CESAR-Kopplung in ASTEC V2.1 und die Erstellung eines SWR-Eingabedatensatzes dafür.

Im Laufe des Projekts hat IRSN verschiedene Versionen der neuen ASTEC-V2.1-Reihe speziell für CESAM-Partner veröffentlicht. In der zweiten Projekthälfte wurden daher die Arbeiten verstärkt auf diese neue Codereihe ausgerichtet. Die neue ASTEC-Version V2.1 ist die erste Version, die eine konsistente Beschreibung der Geometrie eines SWR-Reaktorkerns ermöglicht. Des Weiteren ist die Kopplung der für die Kernmodellierung relevanten Module ICARE und CESAR in der neuen Version umgestellt worden. Daher besteht für die Erstellung eines Datensatzes für einen SWR-Reaktorkern keinerlei Erfahrung außerhalb von IRSN. Der SWR-Datensatz für eine Anlage vom Typ GE BWR 4 wurde erstellt und dokumentiert. Einzelne Testrechnungen wurden erfolgreich durchgeführt. Erste Erfahrungen mit dem neuen ASTEC V2.1 für einen SWR-Datensatz werden dann im Rahmen der Bewertung an die IRSN-Entwickler weitergegeben. Die Schnittstelle zu RODOS wurde weitgehend erstellt, konnte aber noch nicht getestet werden.

5.2.2 COCOSYS: Überflutung von Zonen und Kopplung mit CoPool

Für eine genauere Simulation der thermohydraulischen Zustände im Containmentsumpf wurde die Möglichkeit geschaffen, Zonen vollständig mit Wasser zu fluten und COCOSYS mit dem vereinfachten CFD-Programm CoPool zu koppeln. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden erste Testrechnungen anhand eines angenommenen Störfalls in einer deutschen DWR-Anlage vom Typ KONVOI durchgeführt. Betrachtet wurde ein 200 cm² heißseitiges Leck mit Ausfall mehrerer Notkühlsysteme. Für beide Modelloptionen (ATM_FULLL und Kopplung mit CoPool) wurde der Datensatz angepasst sowie ein CoPool-Datensatz für KONVOI erstellt. In beiden komplexen Rechenfällen traten noch erhebliche Probleme auf, die bei einfacheren Tests nicht bemerkt wurden. Diese wurden teilweise behoben.

In Bezug auf das Zonenfluten muss die Stabilität des Programms noch weiter verbessert werden. Ebenso arbeiten noch nicht alle Modelle (z. B. aus AFP) mit der neuen Modelloption zusammen.

Die Datensatzerstellung, insbesondere im Hinblick auf die Kopplung von Wandelementen zwischen CoPool und COCOSYS, ist relativ aufwändig, da die Anforderungen bzgl. der Definition von Wandoberflächen sowie deren Zusammenfassung teilweise unterschiedlich sind. Die in CoPool berechneten Temperaturen im Sumpf zeigen eine deutliche Schichtung. Es ist notwendig, in CoPool eine Fehlerkontrolle im Löser zu implementieren. Das Verhalten der Wandtemperaturen oberhalb des Wasserspiegels ist noch weiter zu untersuchen, da der berechnete Gesamtdruck in der gekoppelten Rechnung etwas niedriger ist.

Insgesamt zeigt sich, dass komplexe Anwendungsrechnungen eine hohe Anforderung an die Programme stellt. Somit sind solche Rechnungen elementar für die Qualifizierung neuer Modelle, auch wenn der Aufwand zur Durchführung teilweise erheblich ist. Die Arbeiten sollen daher auch in einem Nachfolgevorhaben von RS1514 fortgeführt werden.

5.2.3 COCOSYS: Erprobung der Ex-Vessel-Modellkette

Vor dem Beginn dieser Arbeiten ist das COCOSYS-DCH-Modell zur Simulation des Schmelzeaustrags aus dem RDB unter erhöhtem Systemdruck nur benutzt worden, um Experimente wie in der Karlsruher DISCO-Anlage zu berechnen. Die hier durchgeführten Rechnungen haben zum Ziel, das DCH-Modell erstmalig auf eine reale Reaktorgeometrie abzubilden. Bei der Anwendung auf einen generischen EPR-Datensatz musste zunächst eine Reihe programmtechnischer Probleme (wie z. B. Ein- und Ausschalten der Differentialgleichungen bzgl. DCH, Behebung der Instabilitäten für den Schmelzeausfluss) gelöst werden.

Die durchgeführten EPR-Betrachtungen ergeben unter der pessimistischen Annahme eines RDB-Versagens am tiefsten Punkt der Bodenkalotte, dass etwa 2/3 der aus dem RDB ausgetragenen Schmelze in den Zonen der Reaktorgrube vor der Passage entlang an den Hauptkühlmittelleitungen in den Sicherheitsbehälter verbleiben, 1/3 wird in angrenzende Räume ausgetragen. Die hauptsächliche Rückhaltung erfolgt allerdings nicht aufgrund eines Verbleibs der Schmelze auf dem Boden in der Reaktorgrube, sondern durch eine schnell ablaufende erneute Ablagerung innerhalb der oberen Zo-

nen der Reaktorgrube. Die detaillierte Rechnung zeigt im Vergleich zu der einfachen Geometrie, dass die Nodalisierung für die Schmelzeverteilung einen entscheidenden Einfluss hat.

5.3 Querschnittsaufgaben

Viele Arbeiten bezüglich der Validierung von COCOSYS werden im Zusammenhang von internationalen Projekten durchgeführt. Hierzu zählen insbesondere:

- das OECD-THAI-2-Projekt; hier leitet die GRS die Programme Review Group (PRG)
- Mitarbeit in der WGAMA-Gruppe der OECD, hier zu den Themen: „Status zur gefilterten Druckentlastung des Sicherheitsbehälters“ und zur „Anwendung von schnell laufenden Notfalltools“.
- Abschluss des SARNET2-Projekts, hier insbesondere die SARP-Aktivitäten zur Bestimmung zukünftiger Forschungsschwerpunkte.

Gerade durch den internationalen Austausch können Synergieeffekte genutzt werden, wodurch die Stellung von COCOSYS deutlich verbessert wird.

Um mit Programmen wie COCOSYS und ASTEC belastbare sicherheitstechnische Aussagen machen zu können, ist neben einer ausführlichen Dokumentation der Validierungsrechnungen und der bei Anwendungsrechnungen erzielten Ergebnisse das Aufzeigen von Unsicherheiten und Modelldefiziten unerlässlich. So steht dem Nutzer eine Reihe von Dokumenten zur Unterstützung der COCOSYS-Anwendung zur Verfügung. Offen ist allerdings noch die Fertigstellung/Umstellung des Program Reference Manuals. COCOSYS wird unter TeamForge[®] und SVN[®] konfiguriert. Der Informationsaustausch erfolgt unter anderem über die GRS Cloud. Durch die externen Nutzer wird zum einen das Anwendungsspektrum der Codes erheblich erweitert, zum anderen besteht eine hohe Wahrscheinlichkeit dafür, dass Defizite in COCOSYS sowie in deren Dokumentation entdeckt und behoben werden können. Im Vorhabenzeitraum wurde der fünfte COCOSYS User Workshop durchgeführt. Die Regressionstests als Bestandteil der Qualitätssicherung wurden fortgeführt.

Im Rahmen des Vorhabens wurde für generelle Probleme mit dem COCOSYS-Programm ein User-Support durchgeführt. Hier zeigt sich, dass der Aufwand relativ

hoch ist, da häufig auch Fragen und Probleme im Zusammenhang mit gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen für komplexe Anlagenszenarien auftreten und die Klärung eine vertiefte Analyse erfordert. Es ist daher notwendig, zur Qualitätssicherung vertieft komplexe Anlagenszenarien zu betrachten.

5.4 Fazit

Die in diesem Vorhaben durchgeführten Validierungs- und Anwendungsrechnungen insbesondere mit COCOSYS haben einen signifikanten Beitrag zur weiteren Qualifizierung des Programms geleistet. Mit den in diesem Bericht dokumentierten Arbeiten zu Validierung und Anwendung wird gezeigt, dass mit COCOSYS ein international als führend angesehenes Werkzeug für die Simulation schwerer Störfälle im Sicherheitseinschluss zur Verfügung steht. Für einzelne Punkte besteht noch Verbesserungsbedarf. Insbesondere Anwendungsrechnungen sollten vertieft betrachtet werden. Ebenso wurden Grenzen wie bei der Simulation der Wasserstoffverbrennung in Kombination mit Sprühen aufgezeigt. Hier ergeben sich wichtige Hinweise für den COCOSYS-Anwender. Die Bedeutung von COCOSYS für sicherheitstechnische Untersuchungen in realen Reaktoranlagen nimmt mit jedem Schritt seiner weiteren Entwicklung und Validierung weiter zu, was sich anhand der zahlreichen Anwendungen zeigt.

Literaturverzeichnis

- /ALL 99/ Allelein, H. J.: Entwicklung und Verifikation eines Containment-Code-Systems (COCOSYS) und eines deutsch-französischen Integralcodes (ASTECC) Verifikation, Validierung und Anwendung der COCOSYS-Ausgangsversion. GRS-A-2737, Abschlussbericht RS 979 Teil 2, Oktober 1999.
- /ARN 14/ Arndt, S.: Doppelt-blinde COCOSYS-Rechnungen zum THAI Versuch WH-20, Technische Notiz GRS-V-RS 1514-1/2014, Juli 2014.
- /ARN 15/ Arndt, S.: COCOSYS Voraus- und Nachrechnungen zum THAI Versuch WH20. Vortrag auf dem 5. COCOSYS User Workshop, GRS Berlin, September 2015
- /ARN 16/ Arndt, S.: COCOSYS-Nachrechnung des THAI-V Versuches WH-20, Technische Notiz GRS-V-RS 1514-1/2016, Januar 2016.
- /BAK 14/ Bakalov, I., Spengler, C.: Validation of the CCI Module COCOSYS-MEDICIS against MOCKA Experiments, GRS-V-RS 1514-2/2016, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2014.
- /BAK 15/ Bakalov, I., Band, S., Arndt, S., Nowack, H., Reinke, N.: Regression Testing for COCOSYS V2.4, in Arbeit, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2016.
- /BAL 04/ Ball, J., Marchand, C.: International Standard Problem N°41, Follow Up Exercise: Phase2 - Iodine Code Comparison Exercise against CAIMAN and RTF Experiments, NEA/CSNI/R(2004)16.
- /BEC 15/ Beck, S., Weber, G.: Das neue Iod/Farbe-Modell in AIM-3 für trockene Bedingungen und die Validierung an THAI-Versuchen, GRS - V – RS 1532 - 1/2015 (Sept. 2015).
- /BUN 92/ Bunz, H., M. Koyro, B. Propheter, W. Schöck, M. Wagner-Ambts: Resuspension of fission products from sump water, CEC, JRC, EUR 14635 EN (Nov. 1992).

- /CHA 87/ Chasanov, A. L., Smirnova, L. L.: Bedingungen für die Beendigung der vollständigen Dampfkondensation im Wasser des Nasskondensators, (Übersetzung aus dem Russischen), Arbeiten des WTI 1987, Seiten 27 - 33 (in Russisch), UDK 621.039.587.001.5.
- /CHA 14/ Chan, H.-W.: Analyses of Influences of Core Inventories on Fission Product Distribution in a Primary Circuit and in a Containment During a Severe Accident in a KONVOI Type PWR simulated by ATHLET-CD and COCOSYS Coupling Version, GRS-A-3769, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH.
- /CRA 13a/ Cranga, M., Spengler, C. et al.: State Of the Art Report on MCCI in Dry Conditions: Analysis of Experiments and Modeling. Coordinated by M. Cranga and C. Spengler, SARNET2- D6.3 (Deliverable D6.3), PSN-RES/SAG/2013-00076, IRSN Cadarache, 2013.
- /CRA 13b/ Cranga, M., Spengler, C. et al.: Towards an European Consensus on Possible Causes of MCCI Ablation Anisotropy in an Oxidic Pool, ERMSAR-2013 Avignon, France, 2013.
- /DAP 09/ Dapper, M.: Modellierung der nassen Resuspension und Analyse des Einflusses auf den Quellterm bei Kühlmittelverluststörfällen, LEE-23, Ruhr-Universität Bochum, 2009
- /FOI 13/ Foit, J. J.: MCCI on LCS concrete with and without rebars, 7th conference on Severe Accident Research (ERMSAR-2015), Marseille (France), March, 2013.
- /FOI 14a/ Foit, J.J., Fischer, M., Journeau, Ch., Langrock, G.: Experiments on MCCI with oxide and steel, 6-th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2013) France, October 2013.
- /FOI 14b/ Foit, J.J.: MCCI of a Metal and Oxide Melt with Reinforced Siliceous Concrete in MOCKA Experiments, 22th International Conference on Nuclear Engineering, Prague, July 7-11, 2014.

- /FRE 14a/ Freitag, M., Gupta, S., Schmidt, E., von Laufenberg, B., Colombet, M.: Unvollständige Kondensation von Dampf und Dampf-Luftgemisch in Wasser erhöhter Temperatur, Test ID: WH 20-23, Fachbericht Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben Nr. 1501455: Ein- und Mehrraumversuche zum Spaltprodukt- und Wasserstoffverhalten im Sicherheitsbehälter, (THAI V), Berichts-Nr. 1501455 – FB/TR – WH20-23 (inklusive experimentelle Ergebnisse in Form von Excel-Sheets), Becker Technologies GmbH, Eschborn, November 2014.
- /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, 2015.
- /FRE 15a/ Freitag, M. (Becker Technologies GmbH): E-Mail vom 14.10.2015 "AW: Feuchte in WH20 und Druckanstieg" an GRS.
- /FUN 12/ Funke, F., Gupta, S., Balewski, B., Weber, G.: Deposition of molecular iodine on aerosol particles, Iod-25 (Test using non-reactive aerosol SnO₂), Becker Technologies, Report No. 150 1420–Iod-25-FR, July 2012.
- /FUN 13/ Funke, F., Langrock, G., Dorsch, T., Gupta, S., von Laufenberg, B., Kühnel, A., Weber, G.: Deposition of molecular iodine on aerosol particles Iod-26 (Test using reactive aerosol Ag), Becker Technologies, Report No. 150 1420–Iod-26-FR, Nov. 2013.
- /FUN 15/ Funke, F., Langrock, G., Gupta, S., Schmidt, E., von Laufenberg, B., Kühnel, A., Colombet, M., Freitag, M., Weber, G.: Multi-Compartment Iodine Test with Decontamination Paint and Aerosol at High Humidity Test ID: Iod-30, Becker Technologies Report No. 1501455–TR-Iod-30, Oct. 2013.
- /GLO 10/ Glowa, G.A., Moore, C.J. and Boulianne, D.: Behaviour of Iodine Project: Data Report for Iodine Adsorption Studies (Year 2), Atomic Energy of Canada Limited Report, 153-126530-440-011 (2010).

- /GLO 10a/ Glowa, G.A.: Radioiodine Test Facility P9T2 Test Report, AECL 153-126530-440-012 Revision 0 (Oct. 2010).
- /GUP 12/ Gupta, S. et al.: Hydrogen Combustion During Spray Operation Tests HD-30 to HD-35, 3rd THAI PRG and MB meeting, 19-21 November 2012, Paris.
- /GUP 13/ Gupta, S., von Laufenberg, B., Kühnel, A., Funke, F., Langrock, G., Weber, G.: Multi-compartment Iodine Test - Test ID: Iod 27A, Becker Techn. Report No.1501361–TR-Iod-27A (Entwurf, September 2013).
- /GUP 14/ Gupta S. et al.: Hydrogen Combustion During Spray Operation Tests HD-30 to HD-35, Report No. 1501420-TR-HD-30-35, November 2014.
- /GUP 14a/ Gupta, S.: Test protocol AW-3, Becker Technologies, 1. 8. 2014.
- /GUP 15/ Gupta, S., Schmidt, E., von Laufenberg, B., Kühnel, A., Funke, F., Langrock, G.: Wash-down behavior of Silver Aerosols and Silver Iodine Reaction in a Sump, Test AW3, Becker Technologies Report No. 1501455 – FB/TR – AW3, Draft, Feb. 2015.
- /HER 05/ Herviou, K. et al.: Development of a Methodology and of a Computer Tool for Source Term Estimation in case of Nuclear Emergency in a Light Water Reactor (ASTRID), Contract FIKR-CT-2001-00171, Report ASTRID/04.39, January 2005.
- /IAE 14/ IAE – The Institute of Applied Energy: IAE Progress on Best Estimate Analyses, Vortrag auf dem OECD/NEA BSAF PRG Meeting ('Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station'), Tokyo, 24-26 June 2014.
- /ILI 15/ Iliiev, O., Steiner, K., Zemitis, A.: Kopplung des Containment Pool-Modells CoPool an COCOSYS, Abschlussbericht zum Vorhaben 1501443, Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Juli 2015.

- /KLE 12/ Klein-Heßling, W., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Reinke, N., Weber, G., Schwarz, S., Arndt, S., Nowack, H., Bakalov, I., Pelzer, M.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum Iodverhalten, Abschlussbericht RS1190, GRS-A-3691 (Dez. 2012).
- /KLH 13/ Klein-Heßling, W. et al.: Evaluation of Severe Accident Research Priorities and Pro-posed Research Activities (Status 2013), SARNET2-MANAG-D1.5, 2013.
- /KLH 13b/ Klein-Heßling, W. et al.: Conclusions on Severe Accident Research Priorities, 6th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2013), Avignon, France, 2 – 4 October, 2013.
- /KLH 14/ Klein-Heßling, W. et al.: Conclusions on severe accident research priorities, Annals of Nuclear Energy, <http://authors.elsevier.com/sd/article/S0306454914003466>, Aug. 2014.
- /KLE 15/ Klein-Hessling, W. et al.: COCOSYS V2.4 User's Manual, 28/05/2015.
- /LAU 14/ von Laufenberg, B.; Colombet, M.; Freitag, M.: Ergebnisse der Laborversuche zum Abwaschverhalten von unlöslichen Aerosolen, Bericht-Nr. /Report No.: 1501455–TR–AW3-LAB, Juli 2014.
- /LOE 08/ Löffler, H. et al.: Erhöhung der Zuverlässigkeit der RODOS-Ergebnisse für eine SWR-Anlage, GRS-A-3455, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Oktober 2008.
- /MEY 04/ Meyer, L., Albrecht, G., Wilhelm, D.: Melt Dispersion and Direct Containment Heating (DCH) Experiments in the DISCO-H Test Facility, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6988, Mai 2004.
- /MEY 11/ Meyer, L., Albrecht, G., Kirstahler, M., Schwall, M., Wachter, E., Gaus-Liu, X.: Melt Dispersion and Direct Containment Heating (DCH) Experiments for KONVOI Reactors, Institut für Kern- und Energietechnik, Programm Nukleare Sicherheitsforschung, KIT Scientific Publishing 7567, DOI: [10.5445/KSP/1000020292](https://doi.org/10.5445/KSP/1000020292), 2011.

- /NEA 14/ OECD-NEA: OECD/NEA/CSNI Status Report on Filtered Containment Venting, NEA/CSNI/R(2014)7, 02-Jul-2014.
- /NEA 15/ OECD-NEA: Benchmarking of Fast-Running Software Tools Used to Model Releases During Nuclear Accidents, NEA/CSNI/R(2015)19, [http://www.oecd.org/officialdocuments/publicdisplaydocumentpdf/?cote=NEA/CSNI/R\(2015\)19&docLanguage=En](http://www.oecd.org/officialdocuments/publicdisplaydocumentpdf/?cote=NEA/CSNI/R(2015)19&docLanguage=En) .
- /NEA 15a/ OECD-NEA THAI-2 Project: S. Gupta, G. Poss, M. Freitag, E. Schmidt, M. Colombet, B. von Laufenberg, A. Kühnel, G. Langer, F. Funke, G. Langrock, G. Weber: Aerosol and Iodine Issues and Hydrogen Mitigation Under Accidental Conditions in Water Cooled Reactors, (Final Report, Restricted Version), Becker Technologies GmbH, Eschborn, Germany, April 2015, Report No. 1501420-FR-1.
- /NRS 14/ Hovhannisyanyan, H., Malakyan, Ts.: Investigation of ANPP accident localization system response to a severe accident scenario with focus on hydrogen behavior, Task C1-C3, Report no. RT-GRS-01/12–C1-C3-001, NRSC Yerevan, February 2014.
- /PEL 10/ Pelzer, M.: COCOSYS AIM-3 Validation – Revision: I2(g) interaction with dry painted surfaces, Technische Notiz GRS, Dezember 2010.
- /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, November 2014.
- /SCH 99/ Schwarz, S.: Verifikation und Validierung von COCOSYS an dem Experiment VANAM M3, GRS – A – 2686 (Feb. 1999).
- /SCH 13/ Schmidt-Naujok, E. W., Balewski, B., Freitag, M., Gupta, S.: Wet resuspension of insoluble material from a boiling sump Test ID: TH-25, 1501361–TR–TH-25, Becker Technologies, June 2013.
- /SCH 15/ E. Schmidt et al.: Aerosol Sprühversuch mit Csl-Aerosol, Technischer Fachbericht, Becker Technologies, Dezember 2015.

- /SPE 04/ Spengler, C.: Evaluation of Approximative Correlations for Basic MCCI Phenomena for Use in the Fast-Running Containment Code ASTRID, Technische Notiz, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2004.
- /SPE 08/ Spengler, C., Meyer, L., Meignen, R.: Investigations of Direct Containment Heating (DCH) in European Reactors: Database of Integral Tests and Progress in Modeling, Paper presented at ERMSAR-2008, Nesseber, Vigo Hotel, Bulgaria, September 23-25, 2008.
- /SPE 12/ Spengler, C., Arndt, J., Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eckel, J., Klein-Hessling, W., Nowack, H., Pelzer, M., Reinke, N., Sievers, J., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht des Vorhabens RS1185, GRS-A-3654, August 2012.
- /SPE 13/ Spengler, C., Fargette, A., Foit, J., Agethen, K., Cranga, M.: Transposition of 2D Molten Corium-Concrete Interactions (MCCI) from Experiment to Reactor, ERMSAR-2013 Avignon, France, 2013.
- /SPE 14/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eckel, J., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht RS1508, GRS-358, Oktober 2014.
- /VEI 13/ Veilly, E.: PWR 1300 LB LOCA severe accident and containment venting ASTEC calculation", Vortrag während des 2. Treffens: WGAMA/WPNEM Task Group on international benchmarking of fast-running software tools used to model fission product releases during accidents at nuclear power plants, 17. – 18. Oktober 2013, Paris.
- /WEB 03/ Weber, G.: ISP-41 Follow Up/Phase 2 Accompanying Report on Final Optimized COCOSYS Calculations, GRS TN-WEG-04/2003, August 2003.
- /WEB 05/ Weber, G.: Weiterentwicklung und Validierung des Iodmodells AIM in COCOSYS, GRS-A-3299, Juli 2005.

- /WEB 09/ Weber, G., Funke, F.: Description of the Iodine Model AIM-3 in COCOSYS, GRS-A-3508, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2009.
- /WEB 11/ Weber, G.: Ein neues Abwaschmodell für unlösliche Aerosole (AULA), TN-WEG-01/2011, August 2011.
- /WEB 12/ Weber, G.: Auslegungsrechnungen zu den nassen Resuspensionsversuchen mit unlöslichem Aerosol in der THAI-Anlage, GRS-V-RS1185-1/2012, 28. März 2012.
- /WEB 12a/ Weber, G., Krzykacz-Hausmann, B., Funke, F.: Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchung der COCOSYS-AIM-Ergebnisse zum Iodverhalten im PHEBUS-Versuch FPT1, GRS-A-3676, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Juli 2012.
- /WEB 13/ Weber, G.: Modeling of the first EPICUR AER tests with COCOSYS-AIM OECD STEM PRG Meeting at the NEA Headquarters, Paris-Issy, March 14, 2013.
- /WEB 13a/ Weber, G., Herranz, L.E., Bendiab, M., Fontanet, J., Funke, F., Gonfiotti, B., Ivanov, I., Krajewski, S., Manfredini, A., Paci, S., Pelzer, M., Sevón, T.: Thermal-hydraulic–iodine chemistry coupling: Insights gained from the SARNET benchmark on the THAI experiments Iod-11 and Iod-12, Nuclear Engineering and Design 265 (2013) 95– 107.
- /WEB 14/ Weber, G.: Nachrechnung und Interpretation des THAI-Mehrraumversuchs mit Farbe Iod-27a, GRS Technische Notiz, 24.1.2014.
- /WEB 14a/ Weber, G.: COCOSYS-AIM-Auslegungsrechnungen zu den Mehrraumversuchen mit Farbe THAI Iod-28 und Iod-30, GRS Technische Notiz, 7.4.2014.
- /WEB 14b/ Weber, G.: Neue COCOSYS-AIM-Auslegungsrechnung zu Iod-30, GRS Technische Notiz, 7.7.2015.

- /WEB 14c/ Weber, G.: Further COCOSYS-AIM design calculation on Iod-30, GRS Technische Notiz, 16.7.2015.
- /WEB 14d/ Weber, G.: Conclusions drawn for Iod-25 and Iod-26 experiments on iodine deposition on aerosols, OECD THAI-2 Final Seminar, Welcome Hotel, Frankfurt/M., 18./19. Nov. 2014.
- /WEB 14e/ Weber, G., Funke, F., Krzykacz-Hausmann, B., Klein-Hessling, W.: Uncertainty and Sensitivity Analysis on the Iodine Model in the Containment Code COCOSYS, The 10th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-10), Okinawa, Japan, 14. – 18. Dezember 2014.
- /WEB 15/ Weber, G., Funke, F., Klein-Hessling, W., Gupta, S.: Iodine and silver wash-down modelling in COCOSYS-AIM by use of THAI results, Proceedings of the International OECD-NEA/NUGENIA-SARNET Workshop on the Progress in Iodine Behaviour for NPP Accident Analysis and Management, Marseille (France), 30.03.-01.04.2015.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Struktur von COCOSYS.....	2
Abb. 2.1	THAI+ Versuchsanlage /FRE 15/	8
Abb. 2.2	THAI+ in der Konfiguration des Versuchs TH-27, mit Einspeisestellen von Dampf und Helium sowie Heiz- und Kühlmänteln (grün)	10
Abb. 2.3	TH-27, Elektrische Wandheizung des THAI-Behälters.....	10
Abb. 2.4	TH-27, Dampfeinspeisung in den THAI-Behälter (COCOSYS- Ergebnis)	11
Abb. 2.5	TH-27, Heliumeinspeisung in den PAD.....	11
Abb. 2.6	TH-27, Wärmeabzug durch die Heiz- und Kühlmäntel des PAD	12
Abb. 2.7	COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27	13
Abb. 2.8	COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Plume für untere Dampfeinspeisung	14
Abb. 2.9	COCOSYS-Nodalisierung zu TH-27, Querschnitt	15
Abb. 2.10	Querschnitt THAI+ /FRE 15/	15
Abb. 2.11	TH-27, Druckverlauf (COCOSYS-Ergebnis).....	17
Abb. 2.12	THAI, WH-Versuchsserie, Konfiguration des Versuchsstands /FRE 14a/	19
Abb. 2.13	WH-20, COCOSYS-Nodalisierung.....	21
Abb. 2.14	WH-20, COCOSYS-Nodalisierung, Verbindungen (linke Graphik) und Strukturen (rechte Graphik).....	21
Abb. 2.15	WH-20, angenommene und realisierte Dampfeinspeisung, Massenstrom	23
Abb. 2.16	WH-20, angenommene und realisierte Lufteinspeisung, Massenstrom	24
Abb. 2.17	WH-20, Wassertemperatur im Pool der Zone R1	26
Abb. 2.18	WH-20, Gasgeschwindigkeiten in der Verbindung V13.....	28
Abb. 2.19	WH-20, Druckverlauf	29
Abb. 2.20	WH-20, Verlauf der relativen Luftfeuchte	32

Abb. 2.21	WH-20, Atmosphärentemperaturen im oberen Teil des Behälters, Zone R3.....	32
Abb. 2.22	Konfiguration der THAI-HD-Versuche mit Sprühen	36
Abb. 2.23	COCOSYS-Nodalisierung THAI HD-Versuche.....	38
Abb. 2.24	THAI-Sprühtest ohne Verbrennung, Druckverlauf	41
Abb. 2.25	THAI-Sprühtest ohne Verbrennung, COCOSYS, örtliche Atmosphärentemperaturen im Innenbereich	41
Abb. 2.26	HD-7, Druckverlauf Experiment und COCOSYS mit REYFAC von 1,1 – 1,6	43
Abb. 2.27	HD-7, Temperaturen entlang der Mittellinie des Behälters	43
Abb. 2.28	HD-7, COCOSYS Temperaturen Innenbereich.....	44
Abb. 2.29	HD-7, COCOSYS örtliche Brennleistungen Innenbereich	44
Abb. 2.30	Vergleich HD-30 mit HD-7, Druckverläufe Experiment und COCOSYS.....	46
Abb. 2.31	Vergleich HD-30 mit HD-7, Druckverläufe Experiment und COCOSYS, Parameterrechnung zu HD30 mit Atmosphärenbewegung	46
Abb. 2.32	HD-30, Temperaturen entlang der Mittellinie des Behälters	47
Abb. 2.33	HD-30, COCOSYS Temperaturen Innenbereich.....	47
Abb. 2.34	HD-22, Druckverlauf Experiment und COCOSYS.....	48
Abb. 2.35	TH-25, Resuspension von CaCO ₃ -Partikeln aus dem siedenden Sumpf mit Gaswäschern gemessen; die SMPS-Messwerte liegen deutlich höher (nicht eingezeichnet).....	53
Abb. 2.36	COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Behälters für den Versuch AW-4	55
Abb. 2.37	AW-4, Temperaturverlauf der Auslegungsrechnung in den Räumen R12I und R2O.....	56
Abb. 2.38	AW-4, Druckverlauf der Auslegungsrechnung in den Räumen R11O und R2O	57
Abb. 2.39	AW-4, Verlauf der Csl-Aerosolkonzentration der Auslegungsrechnung in den Räumen R11O und R2O.....	57

Abb. 2.40	AW-4, Gemessene und berechnete Gastemperatur in den Räumen R12I und R2O.....	58
Abb. 2.41	AW-4, Gemessener und berechneter Druckverlauf in den Räumen R11O und R2O.....	59
Abb. 2.42	AW-4, Gemessene und berechnete relative Feuchte in den Räumen R11O und R7O.....	59
Abb. 2.43	AW-4, Gemessene und berechnete Csl-Aerosolkonzentration in den Räumen R11O und R7O.....	61
Abb. 2.44	AW-4, Gemessener und mit COCOSYS berechneter MMD.....	61
Abb. 2.45	Iod-15, I ₂ Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung berechnet mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen	65
Abb. 2.46	Iod-15, Berechnete Iodablagerung auf dem Farbcoupon im Vergleich mit dem gemessenen Ergebnis.....	66
Abb. 2.47	Iod-17, I ₂ Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung berechnet mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen	67
Abb. 2.48	Iod-17, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupons im Vergleich mit den Messwerten.....	67
Abb. 2.49	Iod-20, I ₂ Konzentration in der Gasphase in mol/l; Ergebnisse der AIM-3 Rechnung mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen	68
Abb. 2.50	Iod-20, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupons im Vergleich mit den Messwerten.....	69
Abb. 2.51	THAI-Behälter in 5-Raum-Konfiguration mit Farbflächen (braun) für den Versuch Iod-27a /GUP 13/.....	70
Abb. 2.52	COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Behälter mit 5-Raum-Konfiguration	71
Abb. 2.53	Iod-27a, Vorausgerechnete I ₂ (g)-Konzentration	73
Abb. 2.54	Iod-27a, Gemessene I ₂ (g)-Konzentration.....	73
Abb. 2.55	Iod-27a, Berechnete und gemessene I ₂ (g)-Konzentrationen. Die Rechnung wurde mit dem neuen Iod/Farbe-Modell durchgeführt.....	75
Abb. 2.56	Iod-27a, Berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupon im Vergleich mit den Messwerten.....	75

Abb. 2.57	Iod-28 Auslegung, 10 m ² Farbe: Gerechnete I ₂ (g)-Konzentration	78
Abb. 2.58	Iod-28 Auslegung, 10 m ² Farbe: Gerechnete relative Feuchte.....	79
Abb. 2.59	Iod-28 Auslegung, 10 m ² Farbe: Gerechnete atmosphärische Strömungsgeschwindigkeit durch das untere Deck.....	80
Abb. 2.60	Nodalisierung des unteren Ringraums mit Farbtrommel 1 (schematisch)	81
Abb. 2.61	Iod-28 Auslegung, untere Farbtrommeln modelliert: Gerechnete atmosphärische Geschwindigkeit durch die Trommeln	81
Abb. 2.62	Iod-28, I ₂ -Konzentration in der Gasphase; Vergleich der Ergebnisse der AIM-3-Rechnung mit dem neuen Iod/Farbe-Modell und Berücksichtigung der Stahl-Passivierung mit Messergebnissen.....	83
Abb. 2.63	Iod-28, berechnete absolute Feuchte im Ringraum H = 4,9 m	84
Abb. 2.64	Iod-28, berechnete Iodablagerung auf den Farbcoupon im Vergleich mit den Messwerten.....	85
Abb. 2.65	Iod-30 Auslegung, I ₂ (g); keine He-Einspeisung, Einspeisung Ag- Aerosol bei t = 7,5 h.....	87
Abb. 2.66	Iod-30 Auslegung, Iodbelastung mit Farbe und Stahl in der Kuppel und im unteren Ringraum; paint_dome = Farbcoupon in der Kuppel	88
Abb. 2.67	Iod-30 Auslegung, Silber-Aerosolkonzentration	88
Abb. 2.68	Iod-30, gemessene und nachgerechnete I ₂ -Konzentration in der Gasphase	90
Abb. 2.69	Iod-30, Berechnete Iodablagerung auf dem Farbcoupon im Vergleich mit dem experimentell gemessenen Ergebnis bei H = 4,9 m	90
Abb. 2.70	Absetzen von Ag-Partikeln in einem gut durchmischten Reaktorsumpf	92
Abb. 2.71	AW-3, Fall 1: Ag-Partikel homogen verteilt im Hauptsumpf: Spezies- Konzentrationen (I ₂ = rot).....	94
Abb. 2.72	AW-3, Fall 2: Ag-Partikel abgelagert im Hauptsumpf: Iod- und Ag- Spezies (I ₂ = rot).....	94
Abb. 2.73	AW-3, gemessene und nachgerechnete Iodspezies im Sumpf bei abgelagerten (Phase 3.1) und suspendierten Ag-Partikeln (Phase 3.2)	97

Abb. 2.74	Versuchsaufbau des AW-3 Lab-Tests /LAU 14/.....	98
Abb. 2.75	COCOSYS-Nodalisierung der AW-3 Lab-Tests	99
Abb. 2.76	AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate.....	102
Abb. 2.77	AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Silbermasse in der Wasservorlage.....	103
Abb. 2.78	AW-3 Lab-Test 4, aus den Versuchsdaten entnommene und mit COCOSYS berechnete Filmgeschwindigkeit	103
Abb. 2.79	AW-3 Lab-Test 4, aus den Versuchsdaten entnommene und mit COCOSYS berechnete Filmdicke	104
Abb. 2.80	Iod-26, vorausgerechnete Konzentrationen von I ₂ (g) und aerosolgebundenem Iod	107
Abb. 2.81	Iod-26, gemessene Konzentrationen von I ₂ (g) und aerosolgebundenem Iod	107
Abb. 2.82	Reaktive Oberfläche bei Ag-Mischpartikeln mit hoher und geringer Porosität	109
Abb. 2.83	ISP-41 Follow Up, Phase 2: Mit COCOSYS-AIM gerechnete I ₂ - Konzentration im Sumpf und in der Gasphase des Versuchs CAIMAN 97/02. I ₂ im Sumpf wurde nicht gemessen	113
Abb. 2.84	CAIMAN 97/02, mit COCOSYS-AIM3 gerechnete I ₂ -Konzentration in der Gasphase des Versuchs.....	114
Abb. 2.85	RTF P10 T2, gemessene Iodspezies-Konzentrationen in Sumpf /GLO 10a/.....	115
Abb. 2.86	RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen I(w)-Konzentration mit dem Ergebnis der COCOSYS-V3.0dev-Rechnung	116
Abb. 2.87	RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen I ₂ (w)- und RI(w)- Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS- AIM3-Rechnung.....	117
Abb. 2.88	RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen IO ₃ ⁻ (w)-Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS-AIM3-Rechnung.....	117
Abb. 2.89	RTF P10 T2, Vergleich der gemessenen I ₂ (g)- und RI(g)- Konzentrationen mit den Ergebnissen der aktuellen COCOSYS- AIM3-Rechnung.....	118

Abb. 2.90	COCOSYS-AIM-Nodalisierung der EPICUR-Anlage für die AER-Versuche	123
Abb. 2.91	STEM AER-1, gemessene und gerechnete I ₂ - und IOx-Anteile, die am Filter abgeschieden wurden	125
Abb. 2.92	STEM AER-1, Csl- und CsOH-Mengen am Coupon	125
Abb. 2.93	STEM AER-1, gemessene und gerechnete I ₂ - und IOx-Konzentration in der Gasphase.....	126
Abb. 2.94	Verhalten von freigesetztem I ₂ in der Aerosolschicht in Gegenwart von Farbe	126
Abb. 2.95	STEM AER-3, gemessene und gerechnete I ₂ - und IOx-Anteile, die am Filter abgeschieden wurden	128
Abb. 2.96	STEM AER-3, Csl- und CsOH-Mengen am Coupon	128
Abb. 2.97	STEM AER-3, gemessene und gerechnete I ₂ - und IOx-Konzentration in der Gasphase.....	129
Abb. 2.98	Battelle Modellcontainment /SCH 99/.....	131
Abb. 2.99	VAMAM M3, gemessene NaOH-Konzentrationen /SCH 99/	131
Abb. 2.100	COCOSYS-Nodalisierung VANAM M3	132
Abb. 2.101	Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R8 mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen.....	133
Abb. 2.102	Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R9A mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen	133
Abb. 2.103	Vergleich der in VANAM M3 gemessenen NaOH-Konzentration in R10A mit denen in COCOSYS berechneten NaOH-Konzentrationen	134
Abb. 2.104	BIP1-G4, Auf dem Farbcoupon (Ripolin, gealtert) gemessene abgelagerte Iodmasse	136
Abb. 2.105	BIP1 – G-4, mit COCOSYS berechnete physisorbierte und chemisorbierte Iodmenge auf der Farbe Ripolin	137
Abb. 2.106	MOCKA-Anlage mit Versuchstiegel (links im Bild), in dem die Wechselwirkung der Schmelze mit Betonstrukturen stattfindet, sowie der Zuführungseinrichtung für chemisch reaktives Material (portioniertes Thermit-Pulver auf Fe/Al-Basis, Zr). Bildquelle: KIT	138
Abb. 2.107	Ansicht der Armierung in Boden-/Seitenwänden des Tiegels vor dem Eingießen des Betons (Ansicht von unten). Bildquelle: KIT.....	139

Abb. 2.108	MOCKA6.1, qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation der Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von 300 W/m ² K auf 1 000 W/m ² K	143
Abb. 2.109	MOCKA3.1, Qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation des Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von 300 W/m ² K auf 1 000 W/m ² K	145
Abb. 3.1	Axiale Leistungsverteilung des SWR	151
Abb. 3.2	Schematische Modellierung der SWR-Kerngeometrie mit Downcomer (äußerster Ring).....	152
Abb. 3.3	Schematische Modellierung des SWR-Reaktorkühlkreislaufs in ASTEC	153
Abb. 3.4	MOCKA 6.1, Vergleich der berechneten Leistungen für die Betonerosion vor Abgleich von Stoffdaten mit MEDICIS in ASTEC und COCOSYS.....	156
Abb. 3.5	MOCKA 6.1, Vergleich der berechneten Leistungen für die Betonerosion nach Abgleich von Stoffdaten mit MEDICIS in ASTEC und COCOSYS.....	156
Abb. 3.6	MOCKA 6.1, qualitativer Vergleich von errechneter Erosionskontur (links) mit dem Experiment (rechts, in einem anderen Maßstab) mit Variation der Wärmeübergangskoeffizienten vom Oxid an den Beton von 300 W/m ² K (original case) auf 1 000 W/m ² K (adapted case).....	157
Abb. 3.7	Schnitt B-B des Containmentsumpfes (oben einfache COCOSYS-Nodalisation; unten verfeinerte COCOSYS-Nodalisation).....	160
Abb. 3.8	Höhenkote -1,5 des Containmentsumpfes (links einfache COCOSYS-Nodalisation; rechts verfeinerte COCOSYS-Nodalisation)	161
Abb. 3.9	„Axiale Erweiterung“ der Zonenvolumina R5 und R6 zur Vermeidung des vollständigen Flutens in einer COCOSYS-Nodalisation	161
Abb. 3.10	Fluten: Vergleich der Drücke im Primär- und Sekundärkreis.....	163
Abb. 3.11	Fluten: Vergleich der Temperatur im RDB	164
Abb. 3.12	Fluten: Vergleich der Dampferzeuger-Füllstände.....	164
Abb. 3.13	Fluten: Vergleich des Containmentdrucks.....	165
Abb. 3.14	Fluten: Vergleich der Temperatur im Dombereich.....	165

Abb. 3.15	Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS5A bis RS5D.....	166
Abb. 3.16	Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS6A bis RS6D.....	166
Abb. 3.17	Fluten: Vergleich der Sumpftemperaturen in RS7A bis RS7D.....	167
Abb. 3.18	Fluten: Vergleich der absoluten Wasserstände im Sumpf in RS5A bis RS8A	167
Abb. 3.19	Wandelemente (Compounds) im CoPool-Datensatz für den Sumpfbereich des DWR KONVOI.....	169
Abb. 3.20	Wandelemente mit „resultierendem“ Fluidgitter im CoPool-Datensatz für DWR KONVOI	169
Abb. 3.21	Ausschnitt des COCOSYS-Datensatzes (Schnitt y-z-Ebene).....	170
Abb. 3.22	Unterräume im CoPool-Datensatz	170
Abb. 3.23	Zonendarstellung in CoPool (links) und im COCOSYS-Datensatz (rechts)	171
Abb. 3.24	Von CoPool erzeugte Wandoberflächen (vor der Zusammenfassung)	172
Abb. 3.25	Konzept der Kopplung zwischen COCOSYS und CoPool.....	173
Abb. 3.26	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Drucks im Primär- und Sekundärkreis	175
Abb. 3.27	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der RDB- Temperatur	176
Abb. 3.28	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Wasserstandes im Dampferzeuger (Strang 2)	176
Abb. 3.29	Temperaturverteilung im Sumpf bei 1 300 s, 2 500 s und 3 600 s.....	178
Abb. 3.30	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich des Containmentdrucks.....	179
Abb. 3.31	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Temperaturen im Dombereich	179
Abb. 3.32	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Wasservolumina in RSUA und RSUC.....	180
Abb. 3.33	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpfwasserstände in RSUA und RSUC.....	180

Abb. 3.34	ATHLET/COCOSYS/CoPool-Kopplung: Vergleich der Sumpftemperaturen in RSUA und RSUC.....	181
Abb. 3.35	Schematische Darstellung der simulierten Phänomene bezüglich des Transports von Gas und Schmelze in einer Reaktorgrube; Annahme: zentrales RDB-Versagen am tiefsten Punkt /SPE 12/	184
Abb. 3.36	Schnitt durch die DISCO-H Anlage bei KIT für DCH-Experimente /MEY 04/.....	187
Abb. 3.37	Überblick über ausgewählte Ergebnisse von DCH-Experimenten bei KIT /SPE 08/ im Vergleich zu Experimenten für Westinghouse-Anlagen	188
Abb. 3.38	Schmelzeverteilung im DISCO-Versuch KH02.....	189
Abb. 3.39	Schmelzeverteilung im einfachen EPR-Datensatz	191
Abb. 3.40	Schnitt durch den EPR im Flutbeckenbereich (RA14, RA15) mit unterem Bereich der Reaktorgrube (RA3).....	193
Abb. 3.41	Schnitt durch den EPR auf Höhe 1,5 m oberhalb des Flutbeckenbereiches mit oberem Bereich der Reaktorgrube (RA1 und RA2) und RDB (RA37).....	193
Abb. 3.42	Schnitt durch den EPR mit Angabe des für DCH modellierten Freisetzungspfades aus der Reaktorgrube in die unteren Anlagenräume	194
Abb. 3.43	Schmelzeverteilung im detaillierten EPR-Datensatz	195
Abb. 3.44	Abgelagerte Schmelze (Massenverteilung) in der Grube (Räume RA1 – RA3) im detaillierten EPR-Datensatz	196
Abb. 3.45	Status des DCH-Modells.....	197
Abb. 3.46	Vergleich instationär-kompressible und instationäre Verbindung	198
Abb. 4.1	Vergleich der berechneten Drücke, oben ASTEC aus /VEI 13/, unten ASTRID	209
Abb. 4.2	Vergleich der Quellterme (I-131, Xe-133, Kr- 87, Te-132, Cs-137), oben ASTEC aus /VEI 13/, unten ASTRID.....	210
Abb. 4.3	Vergleich einzelner Freisetzungsraten (Quellterm) für die drei Rechenfälle.....	211
Abb. 4.4	BMC VANAM-M3; Aerosol-Konzentration im Raum 8; Vergleich der COCOSYS-Rechnungen (V2.4 rot, V2.3 blau) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)	224

Abb. 4.5	BMC VANAM-M3; Relative Feuchte im Raum 8; Vergleich der COCOSYS-Rechnungen (V2.4 rot, V2.3 blau) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)	225
Abb. 4.6	THAI Iod-9; I ₂ -Konzentration in der Gasphase; Vergleich der COCOSYS-Rechnung (V2.4 rot, V2.3 grün) mit experimentellen Messwerten (schwarze Symbole)	226
Abb. 4.7	Überprüfung der Änderungen anhand von POSEIDON PA-20.....	229
Abb. 4.8	THY+CCI, WWER-440/270, Wassertemperatur in der Reaktorgrube	233
Abb. 4.9	THY+CCI, WWER-440/270, Energieeintrag in das Wasser über der Kernschmelze.....	233
Abb. 4.10	THY+CCI, WWER-440/270, Wassermasse über der Kernschmelze.....	234
Abb. 4.11	THY, TAU als Funktion von (T _{Wasser} – T _{Sättigung}) im Bereich 1 bis 3 K Wasserüberhitzung.....	235
Abb. 4.12	SWR-72 Nodalisierung	236
Abb. 4.13	COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Druckverlauf	238
Abb. 4.14	COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Atmosphärentemperaturen in der Kondensationskammer, Zonen K21 und K22.....	238
Abb. 4.15	COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Wassertemperaturen in der Kondensationskammer, Zonen K21 und K22.....	239
Abb. 4.16	COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Atmosphärentemperaturen in der Druckkammer, Zonen R19 und R20.....	239
Abb. 4.17	COCOSYS, Regressionstesten, SWR-72, Wassertemperaturen in der Druckkammer, Zonen R19 und R20	240

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Fahrweise des Inbetriebnahmeversuchs TH-27	9
Tab. 2.2	Versuchsrandbedingungen für die WH-Experimente /FRE 14a/.....	19
Tab. 2.3	Anfangs- und Randbedingungen des Versuchs WH-20, Vergleich der Voraus- und Nachrechnung	22
Tab. 2.4	COCOSYS-Variantenrechnungen zum Versuch WH-20	33
Tab. 2.5	THAI-Versuche, Nominalwerte.....	36
Tab. 2.6	Detektion des ersten Temperaturanstiegs nach der Zündung	37
Tab. 2.7	Gewählte Parameter für das FRONT-Modul	40
Tab. 2.8	Farbflächen in Iod-27a, Iod-28 und Iod-30 /GUP 13/.....	77
Tab. 2.9	Konzentrationsverhältnis Ag/I ₂ in Kuppel bei einer Ag- Aerosolfreisetzung von 30 g	86
Tab. 2.10	Test Matrix /LAU 14/ (ausgewählte Versuche sind gelb markiert)	99
Tab. 2.11	Unterschied in der I ₂ /Aerosol-Reaktion zwischen nicht-reaktiven und reaktiven nuklearen Aerosolen.....	108
Tab. 2.12	Bedingungen in den zwei nachgerechneten AER-Tests.....	122
Tab. 2.13	Chemische Zusammensetzung des LCS-Betons in MOCKA6.1 im Vergleich zum silikatischen Beton mit 6 Gew.% Fe in MOCKA3.1	141
Tab. 2.14	MEDICIS-Rechenergebnisse für MOCKA6.1 (mit LCS-Beton) unter Verwendung von angepassten Wärmeübergangskoeffizienten.....	143
Tab. 2.15	MEDICIS-Rechenergebnisse für MOCKA3.1 (mit silikatischem Beton inkl. 6 Gew.-% Armierung) unter Verwendung einer aufgrund der Armierung erhöhten Schnittstellentemperatur für die Betonzerstörung	144
Tab. 3.1	Überblick CESAM-Themen der GRS und Aufteilung auf Projekte.....	147
Tab. 3.2	Aufgabenverteilung in der SWR-Gruppe in CESAM.....	150
Tab. 3.3	Vergleich von MEDICIS-Rechenergebnissen für MOCKA6.1 (mit LCS-Beton) unter Verwendung von angepassten Wärmeübergangskoeffizienten	158
Tab. 3.4	Berechnete Ereignisse.....	162

Tab. 4.1	Verfügbare Informationen zum Unfallablauf (Auszug).....	206
Tab. 4.2	Vergleich der charakteristischen Zeitpunkte.....	208
Tab. 4.3	Review der ERI-Issues (Prioritätenliste) aus SARP-Bericht /KLH 13/....	212
Tab. 4.4	Rechnungen zum Regressions-Testen.....	222

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
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

ISBN 978-3-944161-89-1