

**Weiterentwicklung des  
Rechenprogramms  
ATHLET-CD**

## Weiterentwicklung des Rechenprogramms ATHLET-CD

Abschlussbericht

Sebastian Weber  
Henrique Austregesilo  
Christine Bals  
Sebastian Band  
Thorsten Hollands  
Carsten Köllein  
Liviusz Lovasz  
Peter Pandazis  
Johann-Dietrich Schubert  
Martin Sonnenkalb

Oktober 2016

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMWi unter dem Kennzeichen RS1505 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.

**Hinweis:**

Teile der experimentellen Daten, die im Vorhaben RS1505 verwendet wurden, sind restriktiv und dürfen daher nicht im Rahmen dieses Berichts veröffentlicht werden.

**Deskriptoren:**

ATHLET-CD, Auslegungsüberschreitendes Ereignis, Fukushima, Kernzerstörung, Unteres Plenum, Spaltproduktverhalten

## Kurzfassung

Im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) wird das Rechenprogrammsystem ATHLET-CD für Sicherheitsanalysen von Kernkraftwerken mit Druck- und Siedewasserreaktoren und für die Bewertung von anlageninternen Notfallschutzmaßnahmen entwickelt. Das Ziel ist, ein weitgehend mechanistisches Analysewerkzeug zur möglichst realistischen Simulation von schweren Störfällen in wassergekühlten Kernreaktoren bereitzustellen.

Mit der Weiterentwicklung wird die Leistungsfähigkeit des Programmsystems wesentlich erhöht, so dass realistische Analysen von auslegungsüberschreitenden Unfällen sowie die Simulation fortgeschrittener Kernzerstörung mit erweitertem Modellumfang in angemessener Rechenzeit durchgeführt werden können.

ATHLET-CD basiert auf den thermohydraulischen Modellen von ATHLET. ATHLET enthält unter anderem ein 6-Gleichungsmodell, Modelle zur Simulation nicht kondensierender Gase und Modelle zur Verfolgung von Borkonzentrationen, sowie zusätzliche Komponenten- und Prozessmodelle zur vollständigen Anlagensimulation. Es gestattet Rechnungen im Bereich von überkritischen Drücken. Die Strömungsbilder werden durch eine mechanistische Modellierung auf der Basis einer Transportgleichung für die Zwischenphasenfläche berechnet.

Auf der Grundlage der ATHLET-Modelle ist es möglich, die Anfangs- und Randbedingungen für die Berechnung von schweren Störfällen mit ATHLET-CD direkt aus vorangegangenen Transienten abzuleiten. In ATHLET-CD ist die jeweils aktuelle Version von ATHLET vollständig eingebunden.

ATHLET-CD enthält Module zur Simulation der Brennstab- und Steuerelementzerstörung in Druck- und Siedewasserreaktoren, zur Simulation eines Partikelbetts mit Schmelzebildung sowie Module zur Freisetzung und des Transports von Spaltprodukten und Aerosolen im Kühlkreislauf, einschließlich des Nachzerfalls der Nuklidinventare und chemischer Reaktionen in der Gasphase. Im Rahmen des Vorhabens RS1505 wurden die folgenden Modelle weiterentwickelt bzw. neu implementiert:

- Oxidation in Dampf- und Luftatmosphäre
- Prozesse im unteren Plenum

- Schmelzeverhalten
- Schmelzeaustritt aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen
- Berechnung des Nuklidinventars
- Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Kern
- Transport von Spaltprodukten im Kühlkreislauf

Mit diesen neuen Modellen und den Modellverbesserungen konnte die Qualität der Nachrechnungen von Transienten, Störfällen und Unfallabläufen in Kernreaktoren und von Versuchen wesentlich gesteigert werden. Außerdem konnte insgesamt die Robustheit von ATHLET-CD verbessert werden.

Während des Berichtszeitraums wurden vier Versionen freigegeben bzw. eingefroren. So wurde im Oktober 2012 die Version ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C eingefroren und als Entwicklerversion freigegeben. Wesentliche Neuerungen in der Version ATHLET-CD 2.2C waren das Modul AIDA, das die Simulation der Spätphase bei Verlagerungen von Schmelze ins untere Plenum ermöglicht sowie die Modellierung der Nitridbildung bei Lufteinbruch. Im August 2013 erfolgte dann die Freigabe der Version ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A. Im Vergleich zur Version 2.2C wurden weitere Erweiterungen und Verbesserungen durchgeführt, wie z. B. generelle Verbesserungen der Stabilität und Verbesserungen bei der Simulation von Oxidationseffekten. Im Gegensatz zur Entwicklerversion 2.2C ist die Version 3.0A eine offizielle Release-Version, die für die Weitergabe an alle lizenzierten Anwender von ATHLET-CD vorgesehen ist. Dadurch ist es dem Anwender jetzt möglich den kompletten Unfallablauf von der frühen Phase bis hin zum möglichen Versagen des Reaktordruckbehälters nach Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum zu simulieren. Im Dezember 2014 wurde die Version ATHLET-CD Mod 3.0 Mod B als Entwicklerversion freigegeben. Die wichtigste Neuerung war hierbei das neu implementierte Spätphasenmodell LHEAD. Im März 2016 wurde schließlich die Version ATHLET-CD 3.1A eingefroren. Mit dieser Version kann nun auch der Austritt von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen simuliert werden.

Weiterhin erfolgte im Rahmen des Vorhabens die Teilnahme am internationalen Projekt „Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Dai-ichi NPS“ (BSAF) der OECD/NEA. In diesem Projekt wurden die Unfallabläufe in den Blöcken 1 bis 3 am Standort Fukushima mit verschiedenen Programmsystemen simuliert und analysiert.

Die GRS beteiligte sich dabei mit Unfallanalysen für die baugleichen Blöcke 2 und 3 mit der gekoppelten Codeversion ATHLET-CD/COCOSYS. Die Simulationen lieferten Ergebnisse, die die meisten Aspekte der Unfälle für die ersten Tage schlüssig erklären. Wesentliche bekannte Phänomene schwerer Unfälle wie die Kernaufheizung und die Wasserstofferzeugung konnten mit plausiblen Ergebnissen nachgerechnet werden und stehen in prinzipiell guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Partner des BSAF-Projektes, die mit anderen Codes erzeugt wurden.



## **Abstract**

In the framework of the reactor safety research program sponsored by the German Federal Ministry for Economic Affairs and Energy (BMWi), the computer code system ATHLET/ATHLET-CD has been further developed as an analysis tool for the simulation of accidents in nuclear power plants with pressurized and boiling water reactors as well as for the evaluation of accident management procedures. The main objective was to provide a mechanistic analysis tool for best estimate calculations of transients, accidents, and severe accidents with core degradation in light water reactors.

With the continued development, the capability of the code system has been largely improved, allowing best estimate calculations of design and beyond design base accidents, and the simulation of advanced core degradation with enhanced model extent in a reasonable calculation time.

ATHLET comprises inter alia a 6-equation model, models for the simulation of non-condensable gases and tracking of boron concentration, as well as additional component and process models for the complete system simulation. Among numerous model improvements, the code application has been extended to super critical pressures. The mechanistic description of the dynamic development of flow regimes on the basis of a transport equation for the interface area has been further developed.

This ATHLET version is completely integrated in ATHLET-CD. ATHLET-CD further comprises dedicated models for the simulation of fuel and control assembly degradation for both pressurized and boiling water reactors, debris bed with melting in the core region, as well as fission product and aerosol release and transport in the cooling system, inclusive of decay of nuclide inventories and of chemical reactions in the gas phase. The continued development also concerned the modelling of absorber material release, of melting, melt relocation and freezing, and the interaction with the wall of the reactor pressure vessel.

The following models were newly developed or improved in the frame of this project:

- Oxidation in steam and air atmosphere
- Processes in the lower plenum
- Melt behaviour

- Melt relocation into containment after failure of reactor pressure vessel
- Calculation of the nuclide inventory
- Release of fission products from the core
- Transport of fission products in the primary circuit

As a result of these improvements the quality of calculations of experiments as well as postulated reactor transients and accidents has been advanced considerably. Furthermore, the general robustness of the code has been improved.

During the reporting period four versions of ATHLET-CD were released and frozen respectively. In October 2012 the version ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C was released as a frozen development version. Main improvements were the module AIDA, which allows the simulation of the late phase effects after relocation of melt into the lower plenum, the modelling of the nitride formation in case of air ingress and the new version ATHLET 3.0A. In August 2013 the version ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A was released. In comparison to the version 2.2C further extensions and improvements were performed, e. g. general improvements of the code robustness or improvements concerning the simulation of oxidation effects. In contrast to the development version 2.2C the version 3.0A is an official release version, which is available to all licensed users of ATHLET-CD. With the new version the users are able to simulate a complete severe accident sequence from the early phase until the possible failure of the reactor pressure vessel after the relocation of melt into the lower plenum. In December 2014 the development version ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle B was released. In March 2016 ATHLET-CD 3.1A was frozen. With this version the release of melt from the reactor pressure vessel can be simulated after the failure of the vessel.

Furthermore, GRS participated in the international OECD/NEA project “Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Dai-ichi NPS” (BSAF). Using different codes the accidents in the units 1 to 3 at Fukushima were simulated and analysed in this project. In this framework, GRS performed analyses of the units 2 and 3 using the coupled version of ATHLET-CD/COCOSYS. The simulations could reproduce the most important aspects of the accident sequences and are in good agreement with the calculations of other participants.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
1.1	<b>Aufgabenstellung .....</b>	<b>1</b>
1.2	<b>Planung und Ablauf der Arbeiten .....</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Weiterentwicklung der Modelle zur Kernzerstörung.....</b>	<b>5</b>
2.1	<b>Erweiterung des Modells zur Oxidation von geschmolzenem Material.....</b>	<b>5</b>
2.2	<b>Einbau eines Modells zur Berechnung der axialen Verlagerungsgeschwindigkeit der Schmelze im Kern .....</b>	<b>27</b>
2.3	<b>Einbau eines Modells zur radialen Schmelzeverteilung .....</b>	<b>27</b>
2.3.1	Grundsätzliche Überlegungen und Modellierung .....	28
2.3.2	Überprüfung des Modells.....	31
2.3.3	Zusammenfassung .....	40
2.4	<b>Anwendung der 3D-Modellierung von ATHLET auf ATHLET-CD .....</b>	<b>41</b>
2.4.1	Erweiterung des Datensatzes zur Simulation des Unfalls von TMI-2.....	41
2.4.2	Simulationsergebnisse.....	43
2.5	<b>Erweiterungen in AIDA.....</b>	<b>46</b>
2.5.1	Entwicklung eines impliziten Lösungsverfahrens zur Berechnung der Wärmeleitung in der Wand des unteren Plenums .....	46
2.5.2	Untersuchung der Wand-Nodalisierung des unteren Plenums.....	60
2.6	<b>Erweiterungen bei der Berechnung des Nuklidinventars .....</b>	<b>63</b>
2.6.1	Wiederholter Aufruf von OREST .....	63
2.6.2	FIPISO.....	65
2.7	<b>Weiterentwicklung der Modelle zum Spaltproduktverhalten .....</b>	<b>66</b>
2.7.1	Modellierung der Spaltproduktfreisetzung.....	66

2.7.2	Modellierung des Spaltprodukttransports.....	72
<b>2.8</b>	<b>Erweiterung der MEWA-Einbindung.....</b>	<b>99</b>
<b>3</b>	<b>Erhöhung der Rechenstabilität.....</b>	<b>103</b>
<b>3.1</b>	<b>Einbau einer stabilisierten Schnittstelle für externe Modelle .....</b>	<b>103</b>
<b>3.2</b>	<b>Einbau einer Überwachung der numerischen Stabilität .....</b>	<b>103</b>
<b>3.3</b>	<b>Durchgehende Analyse und Korrektur von numerischen Instabilitäten .....</b>	<b>107</b>
<b>3.4</b>	<b>Parallelisierung auf Modulebene .....</b>	<b>108</b>
<b>3.5</b>	<b>I/O-Einheiten Manager .....</b>	<b>110</b>
<b>4</b>	<b>Anlagen- und prozessspezifische Erweiterungen.....</b>	<b>113</b>
<b>4.1</b>	<b>Erstellung anlagenspezifischer Verlagerungsmodelle .....</b>	<b>113</b>
<b>4.2</b>	<b>Erstellung spezieller Modelle für Brennelementlagerbecken .....</b>	<b>114</b>
4.2.1	Simulation des Ignition-Tests im Rahmen des Sandia Fuel Projects.....	114
4.2.2	Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS für Brennelementlagerbecken .....	116
<b>4.3</b>	<b>Modellierung des Austritts von Schmelze nach Versagen des Reaktordruckbehälters.....</b>	<b>119</b>
4.3.1	Modellierung .....	120
4.3.2	Testrechnungen.....	121
<b>4.4</b>	<b>Überprüfung und Modifikation von Modellen für neue Reaktorkonzepte.....</b>	<b>124</b>
<b>4.5</b>	<b>Erweiterung der Modellierung des Wärmeübergangs an der äußeren Reaktordruckbehälterwand .....</b>	<b>125</b>
4.5.1	RPI-Modell.....	126

4.5.2	Untersuchungen zur Außenwandkühlung .....	128
<b>5</b>	<b>Querschnittsaufgaben.....</b>	<b>131</b>
<b>5.1</b>	<b>Analytische Begleitung experimenteller Programme.....</b>	<b>131</b>
<b>5.2</b>	<b>Unterstützung der Programmvalidierung und -anwendung .....</b>	<b>138</b>
<b>5.3</b>	<b>Programmpflege und -optimierung .....</b>	<b>139</b>
<b>5.4</b>	<b>Ergänzung und Pflege der Programmdokumentation.....</b>	<b>140</b>
<b>5.5</b>	<b>Qualitätssicherung und Freigabe neuer Programmversionen .....</b>	<b>141</b>
5.5.1	Freigabe von ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C.....	142
5.5.2	Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A.....	142
5.5.3	Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle B.....	144
5.5.4	Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A.....	144
<b>5.6</b>	<b>Unterstützung bei der Implementierung von SWR Modellen in ASTEC .....</b>	<b>145</b>
<b>6</b>	<b>Fukushima.....</b>	<b>147</b>
<b>6.1</b>	<b>Beteiligung am OECD BSAF Projekt und den Projektmeetings .....</b>	<b>147</b>
6.1.1	Erstellte Datensätze und Randbedingungen der Analysen .....	149
6.1.2	Best Estimate Rechnungen für Fukushima Dai-ichi Block 2.....	159
6.1.3	Best Estimate Rechnungen für Fukushima Dai-ichi Block 3.....	169
6.1.4	Fazit und erforderliche Modellerweiterungen für Siedewasserreaktoren	180
<b>6.2</b>	<b>Modellierung der radialen Schmelzeausbreitung in Siedewasserreaktoren.....</b>	<b>182</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick.....</b>	<b>191</b>
	<b>Literatur.....</b>	<b>193</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>201</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>207</b>



# 1 Einleitung

## 1.1 Aufgabenstellung

Von der GRS werden zur Simulation von Prozessen im Kühlkreislauf die Rechenprogramme ATHLET (Analyse der Thermo-Hydraulik von Lecks und Transienten) für Transienten und Störfälle ohne Kernschäden und ATHLET-CD (Core Degradation) für Unfälle mit Kernzerstörung entwickelt. ATHLET-CD ist somit integraler Bestandteil des Systems von GRS-Rechenprogrammen zur Analyse des Stör- und Unfallverhaltens von Leichtwasserreaktoren. Es arbeitet in direkter Kopplung mit dem Thermohydraulik-Programm ATHLET und ermöglicht dem Anwender so die Nutzung vorhandener Datensätze für die Berechnung von Auslegungsstörfällen. Die Ergebnisse von ATHLET-CD sind im Weiteren wesentliche Eingabedaten für die Anwendung des Containment-Codesystems COCOSYS. Mittels der Programmkette



ist der Anwender in der Lage, eine komplette Analyse eines Störfalls durchzuführen. Das Spektrum reicht dabei vom Auslegungsstörfall über ein Kernversagen mit Freisetzung von Spaltprodukten bis zum Versagen des Reaktordruckbehälters und der Analyse der Prozesse im Containment. Ziel der Modellierung ist vor allem die Beschreibung des zeitlichen Ablaufs der Kernzerstörung und des Zeitpunkts des Druckbehälterversagens, um daraus Zeiträume für die Einleitung von anlageninternen Notfallschutzmaßnahmen erkennen zu können. Ein weiteres Ziel ist die realistische Bestimmung des Quellterms im Sicherheitsbehälter als Randbedingung für den Containment-Code COCOSYS bzw. des Quellterms in die Umgebung bei einem Störfall mit Containment-Bypass. Die Weiterentwicklung von ATHLET-CD liefert deshalb einen wichtigen Beitrag zur Anwendbarkeit der gekoppelten GRS-Rechenprogramme.

Die Aufgabenstellung dieses Vorhabens ist, das Rechenprogramm ATHLET-CD zu erweitern, so dass umfassende Analysen für schwere Störfälle in Kernkraftwerken entsprechend dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik durchgeführt werden können.

## 1.2 Planung und Ablauf der Arbeiten

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

1. Kernzerstörung
2. Rechenstabilität
3. Anlagenspezifische Erweiterung
4. Querschnittsaufgaben
5. Fukushima

Ein zentraler Punkt bei der Simulation von schweren Unfallabläufen sind die Vorgänge im Reaktorkern. Diese haben maßgebliche Auswirkungen auf alle weiteren Vorgänge in der Anlage. Ziel des ersten Arbeitspunktes im Rahmen dieses Projekts ist es daher die Modellierung der Kernzerstörungsphänomene zu verbessern und zu erweitern. Schwerpunkte sind hierbei die Oxidation und Verlagerung von Schmelze, die Vorgänge im unteren Plenum sowie die Freisetzung und der Transport von Spaltprodukten.

Ein weiterer essentieller Punkt bei der Durchführung einer Simulation ist die Stabilität des Rechenprogramms. Gerade die komplexen physikalischen Vorgänge während der Kernzerstörung führen zu hohen numerischen Anforderungen und erfordern ein hohes Maß an Stabilität. Die Verbesserung der Stabilität von ATHLET-CD bei gleichzeitiger Verbesserung der Rechengeschwindigkeit ist daher ein weiteres Ziel dieses Vorhabens. Dazu soll außerdem die Kopplung zu externen Programmen bzw. Modulen verbessert werden. Des Weiteren sollen die Möglichkeiten von Parallelisierungen geprüft und ggf. eingebaut werden.

Im Arbeitspunkt 3 sollen anlagenspezifische Erweiterungen durchgeführt werden. Hierbei sind besonders Verbesserungen in Hinblick auf die Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum sowie auf Vorgänge bei Unfällen in Brennelementlagerbecken vorgesehen.

Im vierten Arbeitspunkt geht es um weitere wichtige Aufgaben wie z. B. der Unterstützung bei der Durchführung von Versuchen und bei der Anwendung von ATHLET-CD. Die Verbesserung und Erweiterung des Simulationsprogramms erfordert außerdem ei-

ne ständige Pflege des Programms sowie eine fortwährende Anpassung der Dokumentation. Wichtig ist in diesem Zusammenhang natürlich auch die Qualitätssicherung.

Um die Unfallabläufe am japanischen Kernkraftwerkstandort Fukushima I infolge des Tsunamis am 11. März 2011 analysieren zu können, sind Arbeiten im Arbeitspunkt 5 vorgesehen. Die GRS beteiligt sich im Rahmen dieses Vorhabens am von der OECD/NEA in Zusammenarbeit mit Japan und anderen Ländern initiierten internationalen Projekt „Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Dai-ichi NPS“ (BSAF). Neben der Durchführung der Simulation und der Teilnahme an internationalen Projekt-treffen sind auch einige zusätzliche Entwicklungsarbeiten für ATHLET-CD notwendig. Besonders die Ausbreitung und Verlagerung von Schmelze in Siedewasserreaktoren erfordert einen besonderen Arbeitsaufwand.

Alle hier aufgeführten Arbeiten sollen zu einer Verbesserung von ATHLET-CD führen, so dass zuverlässige Simulationen von schweren Störfällen durchgeführt werden können. Augenmerk soll hierbei auch auf die gekoppelte Rechnung mit dem Containment-Code COCOSYS gelegt werden, damit die Simulation und Analyse einer kompletten Unfallsequenz einer Anlage möglich ist. Die Erweiterung der bereits vorhandenen Modelle sowie die Verbesserung der numerischen Stabilität sind hierbei von zentraler Bedeutung.



## 2 Weiterentwicklung der Modelle zur Kernzerstörung

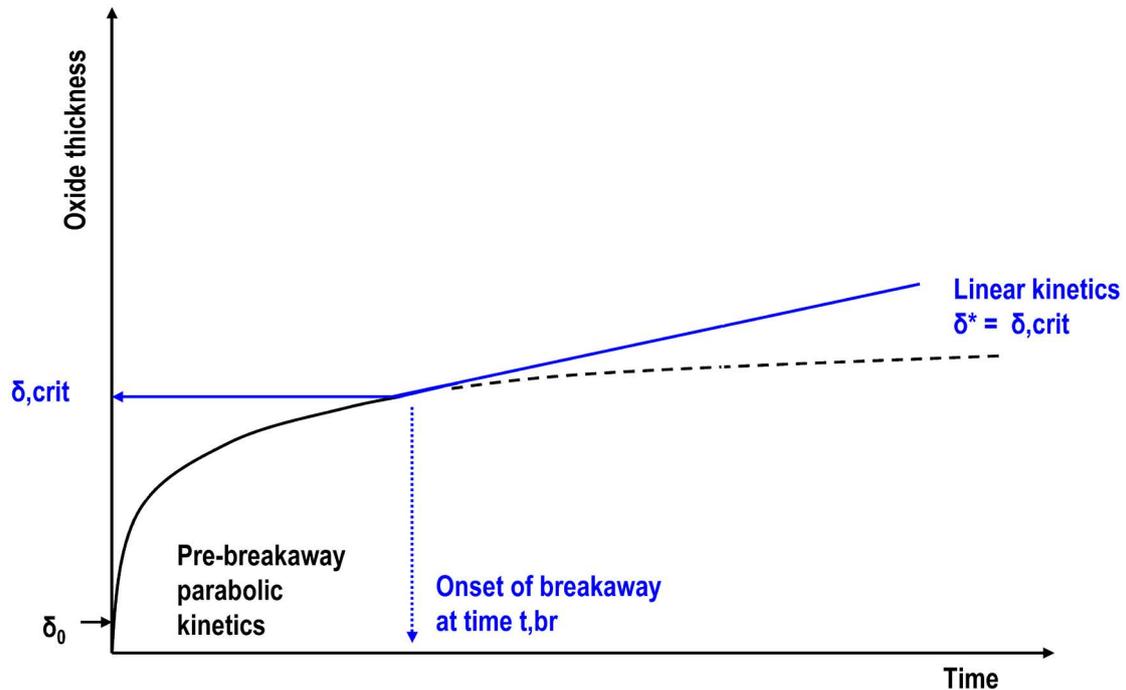
### 2.1 Erweiterung des Modells zur Oxidation von geschmolzenem Material

Bei Nachrechnungen von Versuchen der QUENCH-Serie (KIT Karlsruhe) und auch weiteren Integralversuchen (z. B. PARAMETER SF4) wurde mehrfach festgestellt, dass in ATHLET-CD ebenso wie in anderen Systemcodes die Wasserstofferzeugung durch die Oxidation in der Schmelze unterschätzt wird. Die Modellierung der Schmelzeoxidation in ATHLET-CD sollte daher im Hinblick auf die Möglichkeit des Einbaus der Modellierung von Veshchunov /VES 02/ überprüft werden.

#### Modellierung der Schmelzeoxidation in ATHLET-CD

Die parabolische Kinetik bewirkt, dass die Geschwindigkeit des Anwachsens der Oxidschicht durch die bereits bestehende Oxidschicht immer mehr abgebremst wird, da die Diffusion des Sauerstoffs an den Ort der Reaktion mit zunehmender Oxidschichtdicke erschwert wird. Ab einem bestimmten Zeitpunkt der Oxidation verläuft die Kinetik, wie die experimentellen Daten zeigen, nicht mehr parabolisch, sondern linear, da die dicker werdende Oxidschicht wegen der mechanischen Eigenschaften von  $ZrO_2$  (Sprödigkeit: Auftreten von Rissen, Abblättern) die Diffusion nicht mehr zunehmend behindert. In ATHLET-CD wird der Übergang von parabolischer zur linearen Kinetik nach Erreichen einer bestimmten Oxidschichtdicke ( $\delta_{crit}$ ), bei Erfüllung einer weiteren Temperaturbedingung vollzogen, indem die im Nenner stehende, bereits vorhandene Schichtdicke ab der Grenzsichtdicke als konstant betrachtet wird.

Die mit dieser Modellierung im Feststoffbereich berechneten Oxidschichtdicken und Wasserstofferzeugungsraten stimmen bei den durchgeführten Verifikationsrechnungen in der Regel gut mit den Versuchsdaten überein.



**Abb. 2.1** Übergang von parabolischer zu linearer Reaktionskinetik

Nach Erreichen der Schmelztemperatur (TAM, empfohlener Eingabewert 2033 K für  $\beta$ -Zry bzw. 2250 K für  $\alpha$ -Zry) wird die Oxidation weiterhin wie vorher für den Feststoff berechnet, bis die während des Aufschmelzprozesses zugeführte Wärme zu einer Temperaturerhöhung  $\Delta T = T_{PS} - TAM$  führt, bei der die noch vorhandene metallische Zirkonmasse als geschmolzen angenommen werden kann:  $m_{l,Zr} = m \cdot c_p \cdot \Delta T / \Delta h_{Zr}$ . Ab diesem Zeitpunkt (KZR = 1 gesetzt) wird Oxidation der Schmelze berechnet, wobei die gleiche Modellierung benutzt wird, jedoch mit der Oberfläche der Schmelzesträhne.

Ab dem Zeitpunkt des Hüllrohrversagens ( $T \geq TALLOW$  bzw.  $T \geq TALHIG$ , abhängig von bereits vorhandener Oxidschichtdicke; empfohlene Werte 2300 bzw. 2500 K) wird in dem betreffenden Segment keine Oxidation mehr berechnet, da angenommen wird, dass sich die Schmelzesträhne nach unten verlagert hat. Außerdem wird das über der Versagensstelle vorhandene Hüllrohr mit  $T > TAM$  als geschmolzen und verlagert betrachtet und liefert keinen Beitrag zur Oxidation mehr.

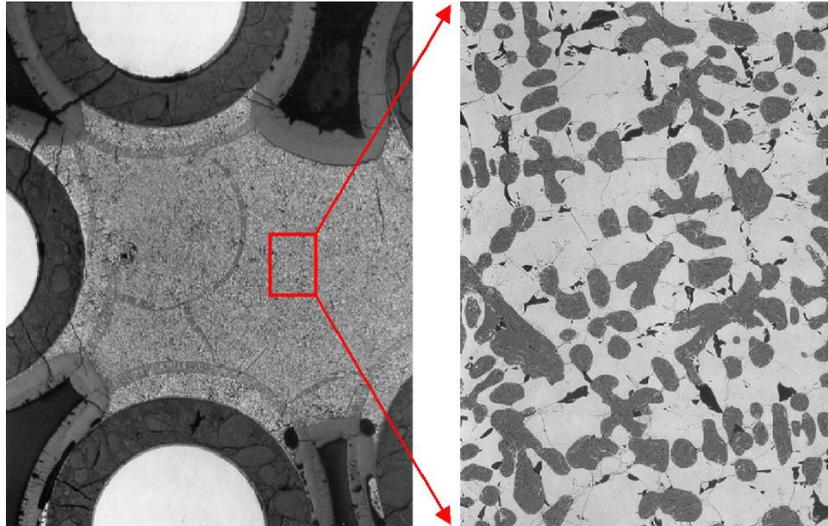
### Modell der Schmelzeoxidation von Veshchunov

Die Modellierung von Veshchunov /VES 02/, /VES 05/, die im Rahmen des europäischen COLOSS-Projektes erstellt wurde, betrachtet die Oxidation von U-O-Zr Mischungen. Die Beziehungen wurden hergeleitet aus Nachuntersuchungen der Schmel-

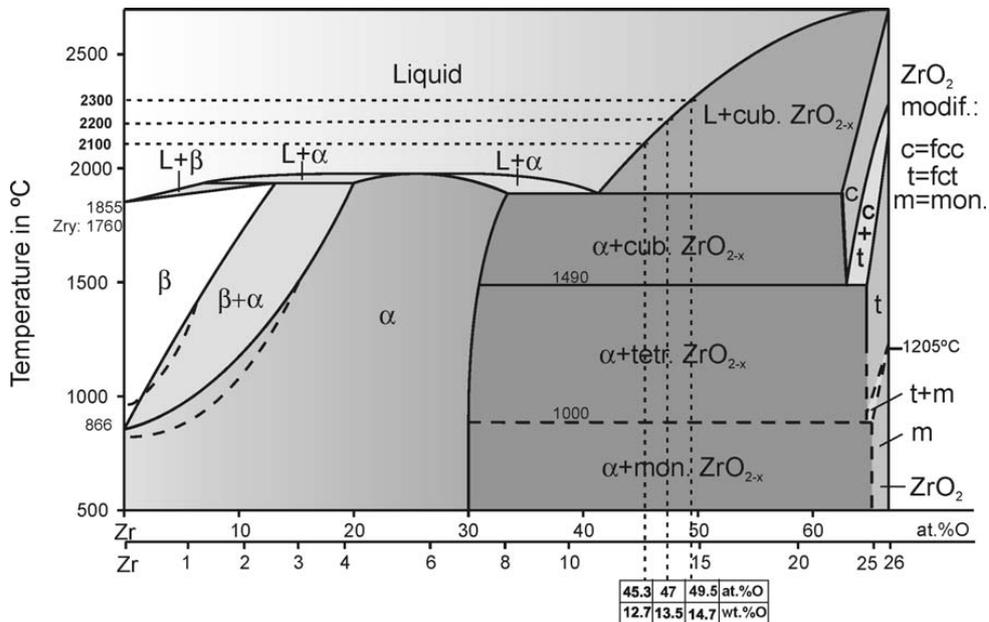
ze, die in den CORA und QUENCH-Bündelexperimenten aufgetreten ist. Außerdem wurden Ergebnisse aus Einzeleffekttests des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK, jetzt Karlsruher Institut für Technologie, KIT) für die Modellierung herangezogen, bei denen die Auflösung von  $ZrO_2$ -Tiegeln durch flüssiges Zirkaloy untersucht wurde. Diese Einzelversuche wurden insbesondere für die Ermittlung des langfristigen Verhaltens der Schmelze-Oxidation konzipiert. Auf dieser Basis wurde ein neues Modell der Dampfoxidation von flüssigen Zr-O und U-Zr-O-Mischungen entwickelt, um die intensive Wasserstofffreisetzung während der Abkühlung der aufgeheizten Stäbe zu erklären.

Die Auswertung der Elektronenmikroskop-Gefügebilder der erstarrten Schmelze zeigen, dass außer dem üblicherweise betrachteten Wachstum einer peripheren Oxidschicht an den Stabhüllrohren eine umfangreiche Ablagerung von keramischen Partikeln im Schmelzebett vorzufinden ist. Diese Verteilung (Oberfläche!) führt zu einer erhöhten Oxidation im Vergleich mit den Standard-Mechanismen und kann somit die in den Experimenten beobachtete erhöhte Wasserstoffproduktion aus der Schmelzeoxidation erklären. Das Erscheinungsbild der verfestigten Zr-O Schmelzen aus den QUENCH- und CORA-Tests (s. Abb. 2.2) ist sehr ähnlich dem Erscheinungsbild der Schmelzen aus den Einzeleffekttests, bei denen das Wachstum einer Oxidschicht begleitet war von einzelnen Ablagerungen keramischer Partikel im Pool-Bereich.

Auf der Basis dieser Bildanalyse wurde unter Einbeziehung des Zr-O Phasendiagramms (s. Abb. 2.3) das neue Modell der Schmelzeoxidation mit der Annahme einer Vermischung durch Konvektion entwickelt. Das Modell erklärt das Entstehen der keramischen Ablagerungen, hervorgerufen durch die Temperaturdifferenz zwischen festem und flüssigem Material, und berechnet fortlaufende Oxidation bis zum Erreichen eines Gleichgewichtszustandes der Schmelze in Bezug auf das Phasendiagramm.



**Abb. 2.2** Querschnitt des QUENCH-02 Testbündels (850 mm) mit Mikrostruktur (FZK)



**Abb. 2.3** Zr-O Phasendiagramm

Das Modell resultiert in einer linearen oder nahezu linearen zeitlichen Abhängigkeit für die Entstehungsrate von ZrO<sub>2</sub> (Oxidschicht + Ablagerungen), was zu einer schnelleren Kinetik der Zr-Oxidation führt im Vergleich mit dem standardmäßig angewendeten parabolischen Entstehungsgesetz (beruhend auf der Diffusion durch die bereits bestehende Schicht).

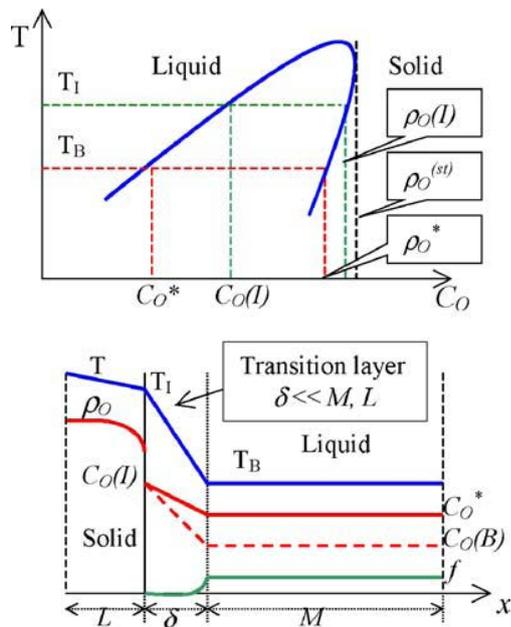
Entsprechend dem Vorgehen für Zr-O-Schmelzen wurde das neue Modell auch für U-Zr-O Schmelzeoxidation verallgemeinert und anhand der Bildanalyse von CORA-Tests

(W1 und W2) überprüft. Die Anwendbarkeit der zugrunde gelegten Theorie wurde auch für das erweiterte System bestätigt.

### **Überlegungen zur Übernahme des Veshchunov-Oxidationsmodells in ATHLET-CD**

Wie die Ausführungen zur Theorie von Veshchunov zeigen, beruht die im Schmelzebereich beobachtete erhöhte Oxidation (mit der entsprechenden  $H_2$ -Erzeugung) weitgehend auf der Tatsache, dass die Oxidation nicht auf die Hüllrohroberfläche beschränkt ist, sondern sich in einem Poolbereich der Schmelze einzelne  $ZrO_2$ -„Nester“ bilden, die nicht nur aufgrund einer veränderten Kinetik, sondern auch durch die vergrößerte Oberfläche zu einer verstärkten Reaktion führen. Da das in ATHLET implementierte Modell der Hüllrohroxidation auf der Vorstellung beruht, dass das Hüllrohr an den Oberflächen (außen bzw. auch innen) oxidiert, ist die Reaktionsfläche auf den betrachteten zylindrischen Abschnitt festgelegt. Nach dem Beginn des Schmelzens betrachtet das in ATHLET-CD implementierte „Candling“-Modell eine an der Staboberfläche ablaufende Schmelzesträhne und ist somit mit der für den Austausch berechneten Oberfläche ebenfalls in zylindrischer Form definiert. Die nach dem Veshchunov-Modell berechnete Kinetik („nahezu linear“) kann in ATHLET-CD mit Ausnutzung des Übergangs auf lineare Kinetik bei Definition einer entsprechend kleinen Übergangsoxidschichtdicke  $\delta_{crit} \sim 10^{-4}$  (Eingabewert ROXLMM) für die Schmelzeoxidation ebenfalls erreicht werden. Die entscheidende und auch bei Verwendung der Veshchunov-Oxidationskinetik undefinierte Größe ist die zu verwendende Austauschfläche mit der vom Candling-Modell abweichenden Vorstellung von zusätzlichen  $ZrO_2$ -Ablagerungen in den Schmelze-„Slugs“.

Des Weiteren ist die dem Veshchunov-Modell zugrunde liegende treibende Kraft für die angenommene Naturkonvektion zwischen der Grenzfläche Feststoff/Flüssigkeit und der Schmelzemasse, nämlich die Temperaturdifferenz zwischen der Oberfläche von festem und flüssigen Material  $T_1$  und der „Bulk“-Temperatur  $T_B$  (s. Abb. 2.4) in ATHLET-CD nicht definiert. Die in ATHLET-CD zur Verfügung stehende Temperaturdifferenz  $\Delta T = T_{PS} - T_{AM}$  (s. oben,  $\rightarrow KZR = 1$ ), die als Kriterium für das vollständige Aufschmelzen des metallischen Zr herangezogen wird, ist nicht identisch mit der benötigten Temperaturdifferenz  $\Delta T = T_1 - T_B$ , die gemäß mündlicher Auskunft des Autors (M. Veshchunov, Nov. 2012) ca. 30 – 50 °C (aus Messungen) beträgt. Für den Fall, dass



**Abb. 2.4** Schematische Darstellung der Grundlage zum Veshchunov-Modell

diese grundlegende Größe als Eingabewert definiert würde, besteht hier, ohne Berücksichtigung der Problematik der Austauschfläche, eine Unsicherheit in der Größenordnung von bis zu 60 %, die mit der bestehenden Modellierung ebenfalls erreicht werden kann (s. u.).

### Optimierter Stand der Berechnung der Schmelzeoxidation mit der bisherigen Modellierung von ATHLET-CD

Aufgrund der im obigen Kapitel aufgeführten Überlegungen wurde versucht, die in ATHLET-CD für die Oxidation relevanten Eingabeparameter so einzustellen, dass eine bessere Übereinstimmung mit den bei dem QUENCH-Versuchen sich ergebenden Wasserstofferzeugungsraten und dem in der nachfolgenden Versuchsauswertung bestimmten Anteil aus der Schmelzeoxidation erreicht wird. Dabei wurde auch darauf geachtet, dass die im Benutzer-Handbuch empfohlenen Werte bzw. Wertebereiche eingehalten werden. Die für die erzeugte Schmelzemenge und das Ausmaß der Schmelzeoxidation wichtigsten Eingabegrößen sind in Abb. 2.1 zusammengefasst.

**Tab. 2.1** Maßgebende Eingabegrößen für das Ausmaß der Schmelzeoxidation

Eingabegröße	Bedeutung	Empfohlener Wert
TAM	Schmelztemperatur von metallischem Zircaloy β-Zr α-Zr	2033 K 2250 K
TAL	Pseudo-Schmelztemperatur des Hüllrohrs	TAM+550K bzw. (ISLUM0>0) TAL=TALLOW
TALLOW	Versagenstemperatur des Hüllrohres für OXLAY<DDTAL	≥ TAM+200 K (2300 K)
TALHIG	Versagenstemperatur des Hüllrohres für OXLAY>DDTAL	≥ TALLOW+200 K (2400 K-2500K)
ROXLMM	Begrenzende Oxidschichtdicke – Übergang von parabolischer zu linearer Kinetik ROXLMM=1: keine Begrenzung	≥ 1.E -4 m

**Tab. 2.2** Resultierende Wasserstoffherzeugung für die Versuche QUENCH-03, -07 und -16

Versuch	H <sup>2</sup> -Erzeugung Experiment		ATHLET-CD Rechnung:	
QUENCH-03			ROXLMM=1:	ROXLMM=1.E-4
	incl. Shroud	118 g	91 g	99 g
	ohne Shroud	91 g		
	nur Rods	75 g	45 g	52 g
	Schmelze	5 g	9 g	15 g
QUENCH-07			ROXLMM=1:	ROXLMM=1.E-4
	incl. Shroud	151 g	127 g	136 g
	ohne Shroud	128 g		
	nur Rods	89 g	87 g	93 g
	Kontrollrods	8 g	8 g	8 g
	Schmelze	13 g	6 g	11 g
QUENCH-16			ROXLMM=1.E-4 (Vers. 30a)	ROXLMM=1.E-4 (Berechn. v. FPOR geändert)
	nach Voroxid	14 g	15,4 g	15,4 g
	ges.	142 g	34,1 g	43,3 g
	Schmelze (aus Bündel)	19 g	1 g	3 g
	Schmelze (ges.)	33 g		
	Luftoxid. Phase:			
	O <sub>2</sub> -Verbr.	58 g	56,5 g	56,5 g
	N <sub>2</sub> -Verbr.	29 g	30 g	30 g

In Tab. 2.2 sind die Ergebnisse neuer Simulationsrechnungen für die QUENCH-Versuche QUENCH-03, -07 und -16 im Hinblick auf die resultierende Wasserstoffproduktion den experimentellen Befunden gegenübergestellt. Gegenüber früheren Rechnungen mit  $TAM = 2250\text{ K}$  und überhöhten Versagenstemperaturen ( $TALLOW = 2650\text{ K}$ ,  $TALHIG = 2850\text{ K}$ ), um die gewünschte Gesamtmenge von  $H_2$  zu erreichen (Ausschalten der Oxidation bei Erreichen der Versagenstemperatur, s.o.) wurden jetzt die für  $\beta$ -Zr empfohlenen Werte benutzt:  $TAM = 2050$ ,  $TAL = 2600\text{ K}$ ,  $TALLOW = 2300\text{ K}$ ,  $TALHIG = 2500\text{ K}$ ).

Wie aus dem aufgelisteten Vergleich zu ersehen ist, kann mit Verwendung des Übergangs auf lineare Oxidation ( $ROXLMM = 1.E-4$ ) in den Versuchen QUENCH-03 und QUENCH-07 die Schmelzeoxidation in der erforderlichen Größenordnung erreicht werden.

Wie für die Nachrechnung des Versuchs QUENCH-16 /AUS 13c/ bereits festgestellt wurde, reicht hier die Modellierung der Auswirkung der Nitridschicht (Porositätsfaktor  $FPOR < 1.2$ ) bisher nicht aus, um nach Beginn der Wassereinspeisung die im Versuch beobachtete Oxidationswirkung auch im Feststoffbereich ausreichend simulieren zu können. Aufgrund der hierdurch zu niedrig berechneten Temperaturen im oberen Bündelbereich ist die Schmelzebildung und daher auch die Schmelzeoxidation zu gering. Weiterhin ist für den Versuch QUENCH-16 festzustellen, dass aufgrund der nach der Lufteinspeisung geänderten Temperaturverteilung (Maximum der Temperatur im mittleren Bündelbereich bei  $\sim 550\text{ mm}$  anstatt bei  $950\text{ mm}$  Bündelhöhe) das Eintreten des Hüllrohrversagens auf dieser Ebene eine stärkere Auswirkung auf das Ausschalten der Oxidation bei  $T > TALLOW$  in der derzeitigen ATHLET-CD Modellierung hat, da darüber liegende Hüllrohr-Abschnitte mit  $T > TAM$  mit ihrem metallischen Anteil als geschmolzen und bereits nach unten verlagert angenommen und daher für die Oxidation nicht mehr berücksichtigt werden.

Aufgrund der neueren Ergebnisse zu den QUENCH-Versuchen 03, 07 und 16 kann festgestellt werden, dass bei Verwendung des Parameters  $ROXLMM < 1$  (Übergang zu linearer Kinetik) die in den Versuchen beobachtete Wasserstoffproduktion in der Schmelze in ihrer Größenordnung nachgerechnet werden kann, vorausgesetzt die Temperaturen sind ausreichend hoch, um eine ausreichende Schmelzeerzeugung zu simulieren.

Im Zuge der Analyse der Oxidationslogik und der durchgeführten Rechnungen konnte weiterhin festgestellt werden, dass die bis Version ATHLET-CD 3.0A angewendete un- stetige Umschaltung des Versagenskriteriums von TALLOW auf TALHIG bei Erreichen einer bestimmten Oxidschichtdicke ( $d = 0.3$  mm, Eingabewert) für geringfügig anders verlaufende Kinetik unterschiedliche Ergebnisse hinsichtlich der weiteren Tempera- turentwicklung und somit auch der Wasserstofferzeugung zur Folge haben kann, je nachdem ob das Umschaltkriterium unter- oder überschritten wurde. Eine Umschalt- funktion kann die Ergebnisse entsprechend dem Anstieg im Phasendiagramm realisti- scher abbilden und dabei Zufallseffekte vermeiden, ohne die Verifikationsbasis grund- sätzlich zu verändern.

### **Durchgeführte Modelländerungen**

In /TRA 09/ ist die Methode zur Berechnung der Oxidation von Zirkon dokumentiert. Zur Auswahl der anzuwendenden Korrelation stehen in ATHLET-CD 3.0A noch die 3 Optionen zur Verfügung, die sich bei den Verifikationsrechnungen als „Best Estimate“ erwiesen haben (die früheren Optionen 15, 16 und 19 sind noch ohne Änderung gültig; diese entsprechen bei neuen Datensätzen 1, 2 und 3). Wie bereits vorher erläutert kommt die für den Feststoff verwendete Methode, bei der sich aus einer temperaturab- hängigen Arrhenius-Funktion die Oxidationsrate  $x_p = A e^{-B/(R T)}$  ergibt (A, B wird entsprechend der gewählten Korrelation gesetzt) und die Kinetik der Oxidation ent- sprechend der analytischen Lösung der Diffusionsgleichung  $dW^2 = x_p \cdot dt$  nach einem parabolischen Gesetz bestimmt wird, nach Erreichen der Versagenstemperatur auch für die Oxidation der Schmelze zur Anwendung. Aufgrund der Definition von W (absor- bierte Sauerstoffmasse pro  $m^2$  Oberfläche) hat hierbei die zur Verfügung stehende Re- aktionsfläche eine besondere Bedeutung. Die starke Reduktion der berechneten Oxi- dationswärme nach dem Erreichen der Versagenstemperatur des Hüllrohrs wird hauptsächlich durch das im ECORE-Modul angewendete „Candling“-Modell für das Abfließen der Schmelzesträhne verursacht, da die zur Verfügung stehende Oberfläche auf die zylindrische Form des Brennstabs (Heizstabs) beschränkt ist und die Bildung einer Schmelzesträhne unterhalb der Versagensstelle erst allmählich beginnt.

Der für den Feststoff vorgesehene Übergang auf lineare Oxidationskinetik („Breaka- way“: die zunehmende Sprödigkeit bewirkt das Auftreten von Rissen und das Ablät- tern der Oxidschicht) kann in der vorhandenen Modellierung auch für die Schmelze- Oxidation verwendet werden (Eingabewert ROXLMM < 1). Oben wurde gezeigt, dass mit  $ROXLMM = 1.0 \cdot 10^{-4}$  bei einem Teil der Nachrechnungen eine ausreichend hohe

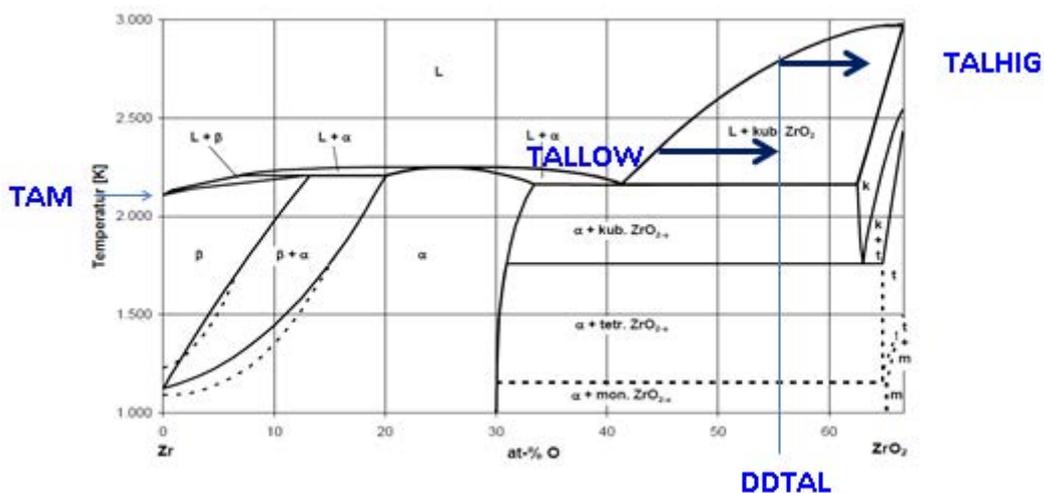
Menge der Wasserstoffherzeugung aus der Schmelze-Oxidation im Vergleich mit Experimentdaten erreicht wird.

Eine große Unterschätzung der Schmelze-Oxidation bestand weiterhin für die Simulation des Versuchs QUENCH-16. Wie sich insbesondere bei dieser Nachrechnung gezeigt hat, kann hier die Oxidation in dem Segment, in dem das Hüllrohrversagen aufgrund des Aufschmelzens gerade angezeigt wird, nicht vernachlässigt werden. Daher wurde eine empirische Methode entwickelt und getestet, um auch den Zwischenbereich zwischen Feststoff und Schmelzesträhne im versagenden Segment zu berücksichtigen und somit eine Verbesserung zu erreichen.

Außerdem wurde für die Belegung der Versagenstemperatur eine Optimierung angestrebt, um unterschiedliche Ergebnisse im Bereich des Umschaltkriteriums zu vermeiden.

### Belegung der Versagenstemperatur

Im bisherigen Modell von ATHLET-CD (bis Version 3.0A) wird das Hüllrohrversagen angezeigt, sobald die Temperatur die in den Eingabedaten definierten Werte TALLOW bzw. TALHIG überschreitet. Wie in Abb. 2.5 verdeutlicht, wird bei Erreichen der ebenfalls als Eingabewert gegebenen Oxidschichtdicke DDTAL (empfohlen:  $0.3\text{mm} \leq \text{DDTAL} \leq 0.6\text{ mm}$ ) unzeitig auf den höheren Wert umgeschaltet.

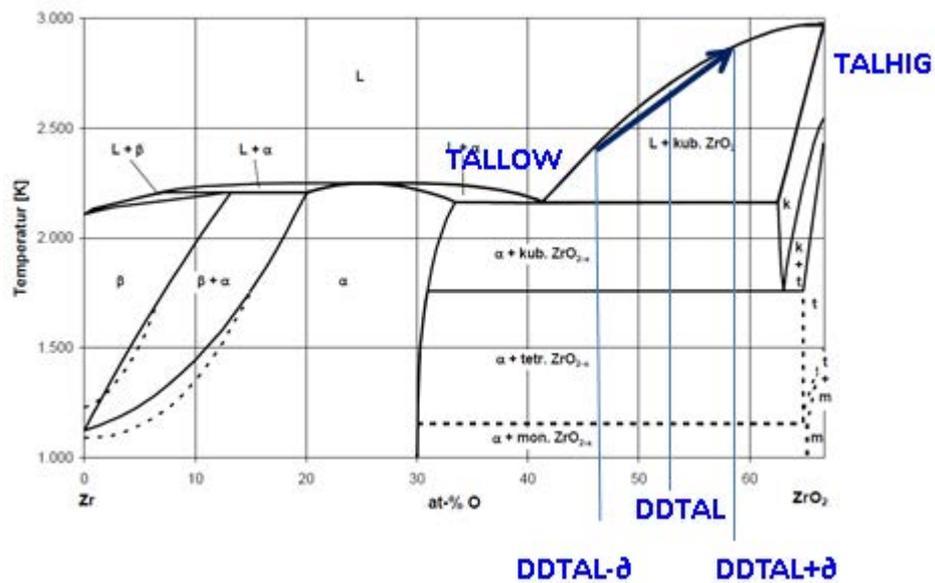


**Abb. 2.5** Belegung der Versagenstemperatur im Zr-ZrO<sub>2</sub> Phasendiagramm (bisher)

Dieses Vorgehen, das in Anlehnung an die Modellierung anderer Simulationsprogramme so definiert wurde und bei dem sich in Versuchsnachrechnungen die Ein-

gabeparameter  $TALLOW \approx 2300$  K,  $TALHIG \approx 2500$  K und  $DDTAL=0.3$  mm bewährt haben, liefert deutlich unterschiedliche Temperaturen, Schmelzemengen und Wasserstoff-Erzeugungsraten, abhängig davon, ob in der Simulation die für den Übergang ausschlaggebende Oxidschichtdicke  $DDTAL$  gerade noch unterschritten ist oder aber erreicht wird. Daher wurde die Versagenstemperatur in Anlehnung an die nahezu lineare Abhängigkeit von der Oxidschichtdicke im Phasendiagramm so modifiziert, dass im Bereich zwischen  $DDTAL - \delta$  und  $DDTAL + \delta$  ein linearer Anstieg der für die Beendigung der Feststoff-Oxidation verantwortlichen Temperatur  $TFAIL$  (Umschaltung auf  $KZR=3$ ) berechnet wird (Abb. 2.6).

Bei den durchgeführten Testrechnungen der zur Versionssicherung dienenden Beispiele werden mit  $\delta = 0.05$  mm (im Programm vorgegeben) und den bisher verwendeten Eingabedaten für  $TALLOW$ ,  $TALHIG$  und  $DDTAL$  Rechenergebnisse mit vergleichbarer Übereinstimmung mit Testdaten wie bisher erreicht.



**Abb. 2.6** Bestimmung der Versagenstemperatur im Zr-ZrO<sub>2</sub> Phasendiagramm (neu)

### Berücksichtigung einer Restoxidation in dem versagenden Segment

Ab dem Zeitpunkt des Hüllrohrversagens ( $T \geq TFAIL$ , wobei  $TFAIL=f(\delta_{ox})$ ) wird in der ATHLET-CD Simulation in dem betreffenden Segment keine Oxidation mehr berechnet, da angenommen wird, dass die vorhandene Masse von metallischem Zirkon als Schmelze vorliegt und diese sich nach unten verlagert. Außerdem wird das über der Versagensstelle vorhandene metallische Zirkon mit  $T > TAM$  als geschmolzen und ver-

lagert betrachtet und liefert keinen Beitrag zur Oxidation mehr. Da die Schmelzesträhne jedoch mit einer zeitlichen Verzögerung in der darunter liegenden Zelle ankommt und sich hierbei entsprechend der Strähnenoberfläche die Schmelzeoxidation erst allmählich aufbaut, reduziert sich die Oxidation auf der betrachteten Höhe erheblich, sobald das Versagenskriterium wirksam wird. Entgegen dem Verhalten der bei QUENCH-16 gemessenen Temperaturen, die in einer runden Kurve die Schmelztemperatur der Mischung erreichen und zum Teil über einen Zeitraum von 40 bis 50 s auf einer Höhe von über 2300 K bleiben, zeigt sich in der Rechnung ein plötzlicher Temperaturabfall sobald die Oxidation von Feststoff auf Schmelze umgeschaltet wird.

Um den im versagenden Segment und somit den im Zwischenbereich zwischen Feststoff und Schmelzesträhne befindlichen Anteil der Oxidation mit berücksichtigen zu können, wird in einer Testversion eine Restoxidation des im „slumping mode“ befindlichen Abschnitts betrachtet. Hierzu wird aus der vorhandenen metallischen Zirkon-schmelzemasse, den Abmessungen des Segments und der maximalen Schmelzeablaufgeschwindigkeit (WSLMAX, Eingabewert) eine Zeitdauer  $\Delta t_{\text{Res}}$  berechnet, in der nach dem Versagenszeitpunkt die Oxidation weiterhin berechnet wird. Um bei geringen Werten der „Candling“-Geschwindigkeit ( $WSLMAX < 0.01$  m/s) unrealistisch hohe Werte der Zeitdauer für das Ablaufen der Schmelze aus dem Versagenssegment zu vermeiden, wird  $\Delta t_{\text{Res}}$  in der vorliegenden Testversion auf maximal 10 s begrenzt. Innerhalb dieses Zeitbereichs wird mit der Annahme einer mit konstanter Geschwindigkeit abströmenden Schmelzesträhne die nach dem Feststoffmodell berechnete Restoxidation in einer linearen Abhängigkeit von der Zeit nach dem Eintreten des Versagenskriteriums (in der Routine EVLIFA wird  $KZR = 3$  gesetzt) auf 0 geführt. Da die mit dieser Modelländerung berechnete Restoxidation im versagenden Segment zu überhöhten Temperaturen im Vergleich mit QUENCH-16 Testdaten führte, wurde die nach dem Versagen berechnete Oxidationsrate auf einen Maximalwert der halben Oxidationsrate des Feststoffs begrenzt ( $FACT \leq 0.5$ ). Die aus der Restoxidation im versagenden Segment aufgetretene Wasserstoffproduktion wird der Schmelze zugeordnet (ACMELTH2).

## **Ergebnisse der Testrechnungen**

Die oben beschriebene Änderung bei der Belegung der Versagenstemperatur wurde anhand von Nachrechnungen der Versuche QUENCH-07, -10 und -16 erfolgreich getestet und bereits in die derzeit aktuelle Entwicklungsversion ATHLET-CD 3.0B übernommen.

Die Modellerweiterung zur Berücksichtigung der Restoxidation im versagenden Segment wurde zuerst anhand der Nachrechnung von QUENCH-16 überprüft und anschließend weiterhin durch den Vergleich mit QUENCH-03, -07, -10, -11 sowie von PHEBUS FPT1 Messdaten und Rechenergebnissen der bisherigen Version getestet. Die wesentlichen Ergebnisse der Testrechnungen sind im folgenden Abschnitt kurz zusammengefasst.

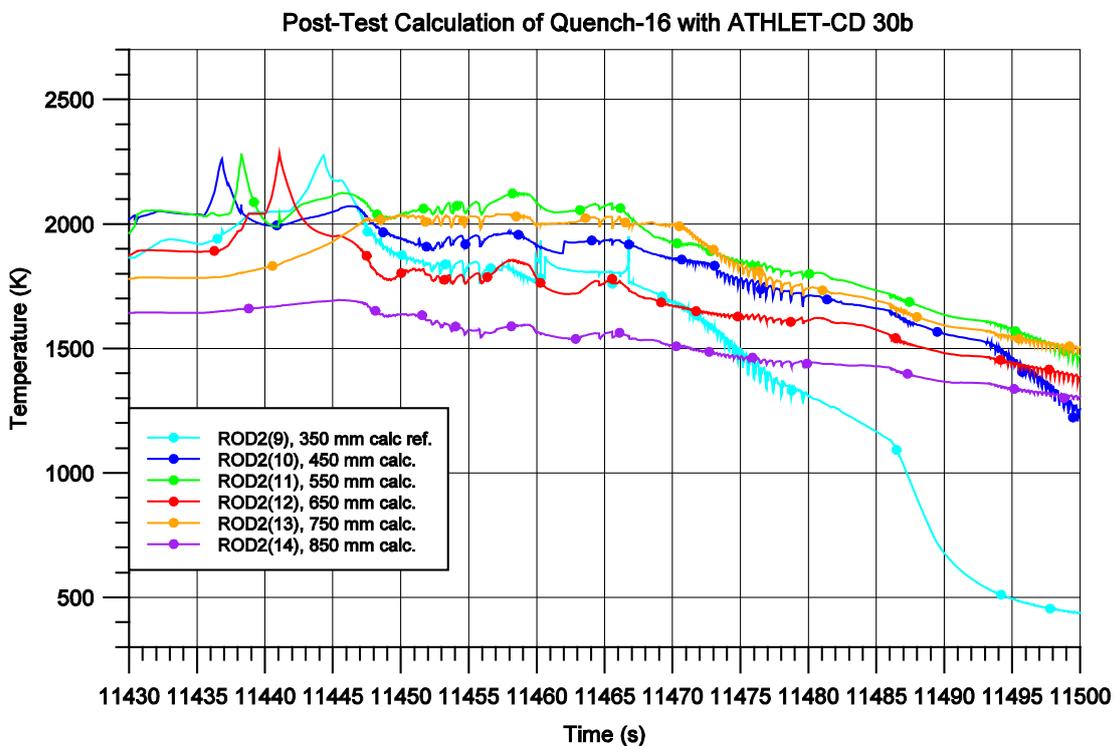
## **QUENCH-16**

Die mit dem bisherigen Oxidationsmodell von ATHLET-CD berechneten Temperaturverläufe zeigen bei Erreichen der Versagenstemperatur ( $T_{\text{FAIL}} \approx 2300 \text{ K}$ ) eine Spitze, da die Oxidation in dem betreffenden Segment vollständig ausgeschaltet wird. Dieses Verhalten ist insbesondere bei der Nachrechnung des Tests QUENCH-16 in aufeinanderfolgenden Heizleiter-Abschnitten festzustellen (Abb. 2.7), da die Maximaltemperatur während der Sauerstoffmangelphase im Zeitbereich der Lufteinspeisung in den mittleren Bündelbereich ( $\sim 550 \text{ mm}$ ) absinkt, sich aber nach dem Beginn der Wasserkühlung ( $t = 11350 \text{ s}$ ) wieder nach oben verlagert.

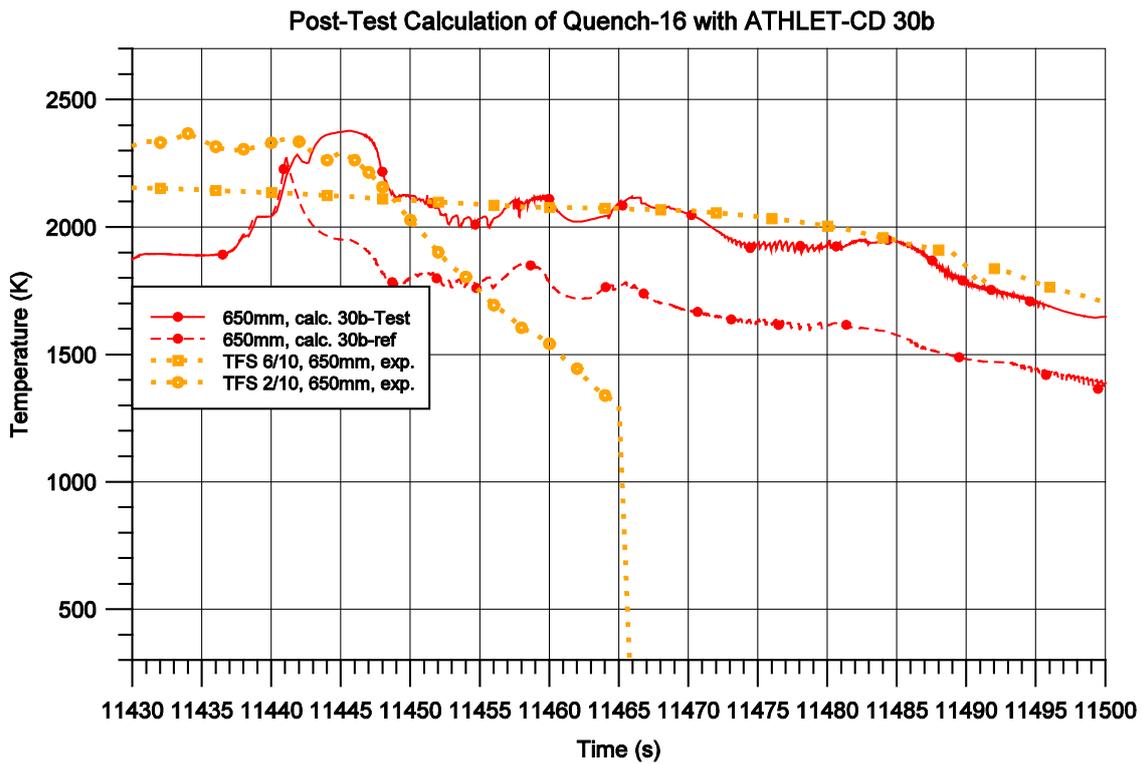
Da das in ATHLET und ATHLET-CD implementierte Nitridmodell derzeit die Reoxidation von Nitrid nicht und die hierdurch verursachte Porosität der Nitridschicht nicht ausreichend berücksichtigt, wird der Temperaturanstieg im oberen Bündelbereich nicht richtig simuliert, so dass die Wasserstofferzeugung der Simulation im Vergleich mit Experimentdaten noch weit unterschätzt wird. Als weitere Ursache der nach Einspeisebeginn unterschätzten Wasserstofferzeugung wurden die im Bereich von 350 bis 750 mm Höhe in der Simulation zu schnell absinkenden Temperaturen aufgrund der nicht berücksichtigten Schmelzwärme nach dem Auftreten des Versagens auf diesen Leveln ermittelt.

Eine Rechnung mit der Testversion zeigt, dass sich durch die Berücksichtigung der Restoxidation im Versagenssegment eine bessere Übereinstimmung mit den im mittleren Bündelbereich gemessenen Hüllrohrtemperaturen ergibt. In Abb. 2.8 und Abb. 2.9 sind die auf 650 und 750 mm Höhe mit der Testversion und der Referenzversion berechneten Temperaturen mit den verfügbaren Messdaten verglichen. Die Gegenüberstellung zeigt deutlich, dass die Simulation mit der Testversion trotz der nur kurzzeitig wirksamen Restoxidation ( $\Delta t_{\text{Res}} \leq 10 \text{ s}$ ) über den gesamten Zeitraum bis zur vollständigen Abkühlung höhere Temperaturen auf diesen Höhen ergibt. Die Auswirkung auf den Bündelbereich bei 850 mm und darüber ist allerdings nur noch gering.

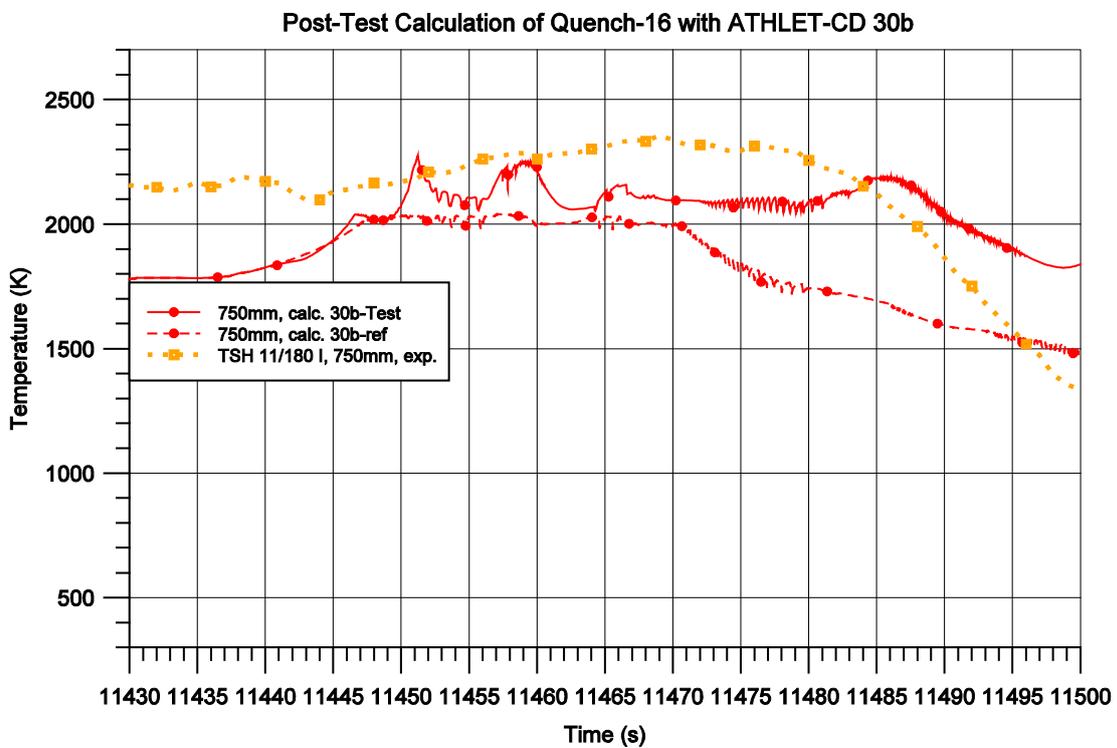
Entsprechend den höheren Temperaturen und den damit verbundenen höheren Oxidationsraten steigt die Wasserstoffproduktion auf einen Endwert von insgesamt 52,5 g an (bisherige Version 38,8 g), wobei die Oxidation der Schmelze auf einen Anteil von 8,3 g zunimmt (vorher 2,6 g), wie in Abb. 2.10 gezeigt wird. Im Vergleich mit dem in /STU 13a/ angegebenen Wert von 19 g für die aus den Hüllrohren resultierende Wasserstoffproduktion durch die Schmelze-Oxidation im Versuch ist der mit der Testversion erreichte verbesserte Wert immer noch zu gering. Die noch verbleibende Unterschätzung kann jedoch mit der noch nicht vollständig modellierten Auswirkung der Nitridschicht bei Beginn der Wasserkühlung erklärt werden.



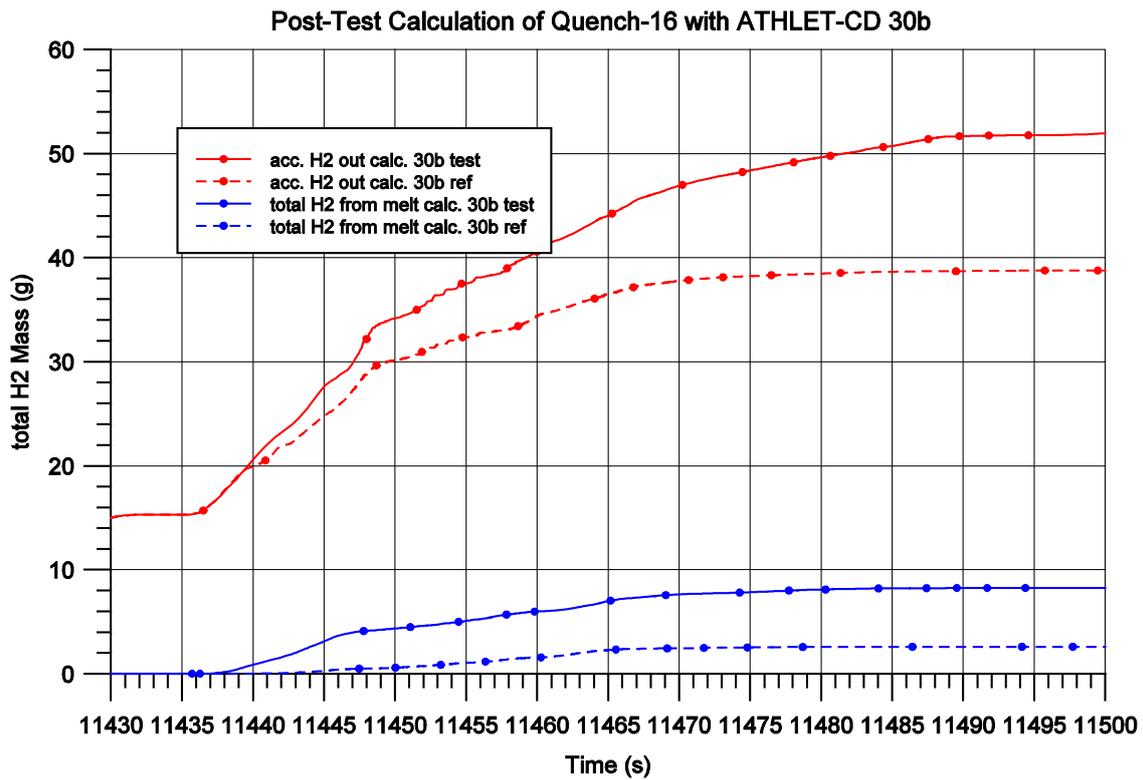
**Abb. 2.7** Berechnung der Hüllrohr-Temperaturen in der Referenzrechnung



**Abb. 2.8** Vergleich der Hüllrohr-Temperaturen in 650 mm Höhe



**Abb. 2.9** Vergleich der Hüllrohr-Temperaturen in 750 mm Höhe



**Abb. 2.10** Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung (Referenz- / Testrechnung)

### Überprüfung anhand von weiteren Versuchsnachrechnungen der QUENCH-Versuchsreihe (QU-03, QU-07, QU-10, QU-11 )

In Tab. 2.3 sind die für die Nachrechnungen der QUENCH-Versuchsreihe erzielten Rechenergebnisse der Wasserstoffproduktion für die Versuche QU-03, QU-07, QU-10, QU-11 sowie QU-16 den experimentellen Befunden gegenübergestellt.

**Tab. 2.3** Resultierende Wasserstoffherzeugung für die Versuche QUENCH-03, -07, -10, -11 und -16 (mit „?“ markierte Daten vom Experiment liegen nicht vor oder sind nicht gemessen)

Versuch	H <sup>2</sup> -Erzeugung Experiment		ATHLET-CD Rechnung	
			Referenz- version 30b	Test- version 30bx
QUENCH-03	inkl. Shroud	118 g	99 g	108 g
	ohne Shroud	91 g		
	nur Rods	75 g	52 g	67 g
	Schmelze	5 g	15 g	15 g
QUENCH-07	inkl. Shroud	151 g	131 g	136 g
	ohne Shroud	128 g		
	nur Rods	89 g	89,7 g	94 g
	Kontrollrods	8 g	8 g	8 g
	Schmelze	13 g	<b>9,8 g</b>	<b>12,8 g</b>
QUENCH-10	inkl. Shroud	53-58 g	60,8 g	60,1 g
	nur Rods		47,9 g	47,4 g
	(geringe) Schmelze- erzeugung		<b>0,07 g</b>	<b>0,26 g</b>
QUENCH-11	ges. / ohne W+Mo,	141g / 124 g	49,5 g	57,2 g
	ohne Shroud	120 g		
	nur Rods	74 g	28,9 g	30,5 g
	Schmelze	? g	7,3 g	7,4 g
QUENCH-16	nach Voroxid.	14 g	15,4 g	15,4 g
	ges.	142 g	38,8 g	52,5 g
	Schmelze (aus Bündel)	<b>19 g</b>	2,6 g	<b>8,3 g</b>
	Schmelze (ges.)	33 g		

Die Simulationsrechnungen wurden mit folgenden Eingabeparametern durchgeführt:

**Tab. 2.4** Simulationsrechnungen Eingabeparameter

ROXLMM = $1.0 \cdot 10^{-4}$	Oxidschichtdicke für den Übergang von parabolischer auf lineare Oxidationskinetik, Wert für die Schmelzesträhne
TAM = 2050 K	Schmelztemperatur von metallischem Zirkon ( $\beta$ -Zr)
TALLOW = 2300 K	Versagenstemperatur des Hüllrohrs für Oxidschichtdicke $ROXID \leq DDTAL - 0.05$ mm
TALHIG = 2500 K	Versagenstemperatur des Hüllrohrs für Oxidschichtdicke $ROXID \leq DDTAL + 0.05$ mm
DDTAL = 0.3 mm	lineare Berechnung der Versagenstemperatur im Bereich der Oxidschichtdicke $DDTAL - \vartheta$ bis $DDTAL + \vartheta$ (s.u.) Übergang von TALLOW auf TALHIG

Derzeit fest im Programm vorgegeben sind folgende Werte:

DDTAL +/-  $\vartheta$  mit  $\vartheta = 0.05$  mm

Maximalwert für  $\Delta t_{res} = 10$  s

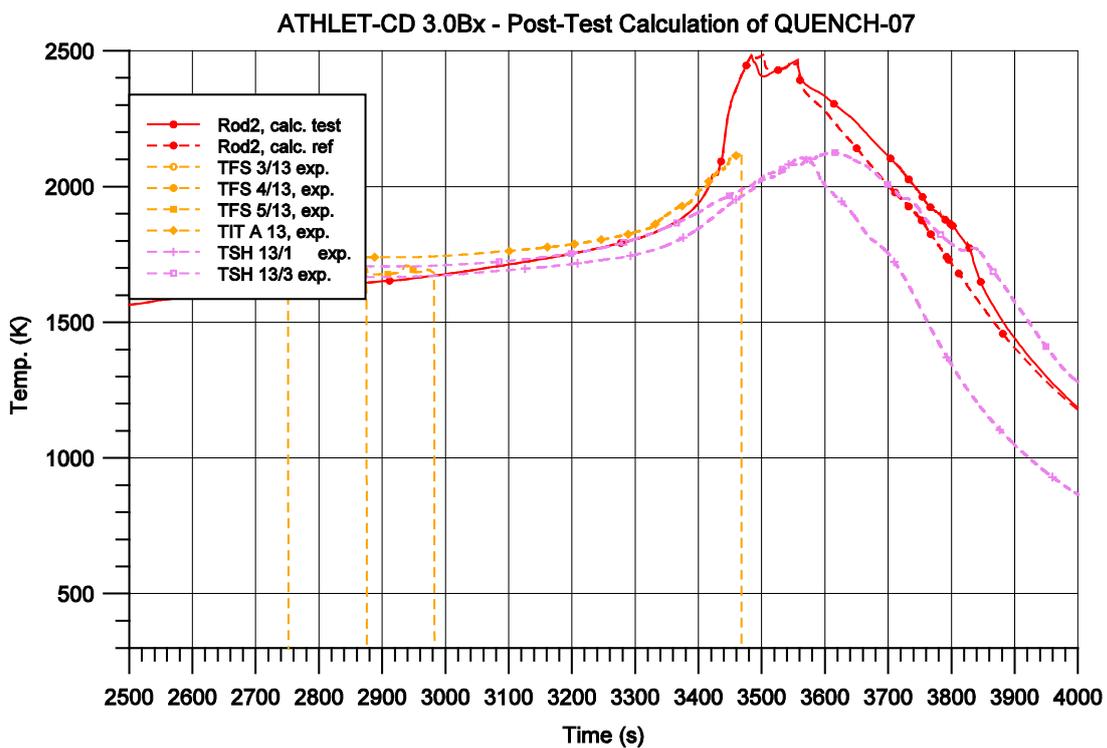
Maximalwert für Oxidationsrate der Restoxidation  $x_{Rest} < 0.5 x_{Feststoff}$

Die Gegenüberstellung in Tab. 2.3 zeigt, dass mit den gewählten Optionen und den für „Best Estimate“-Rechnungen empfohlenen Eingabewerten die Resultate der Testversion hinsichtlich der Oxidation und somit der Wasserstofferzeugung verbessert werden bzw. unverändert bleiben. Eine Verschlechterung ist in keinem der nachgerechneten Beispiele aufgetreten. Die Nachrechnung von QUENCH-11 kann in der Referenz- und Testversion nur mit höheren Werten für die Versagenstemperatur (TALLOW = 2650 K, TALHIG = 2850 K) in zufriedenstellender Übereinstimmung der insgesamt erzeugten Wasserstoffmasse gerechnet werden, wobei die Oxidation vollständig im Feststoffbereich berechnet und keine Schmelze erzeugt wird.

Als Beispiel für eine Nachrechnung, bei der sich die Ergebnisse der Testversion nur wenig gegenüber der Referenzversion verändert haben, wird der Versuch QUENCH-07 ausgewählt, da hier der Beitrag der Schmelzeoxidation relativ zuverlässig ermittelt wurde /STE 04/. Im Test QUENCH-07 wurden die höchsten gemessenen Temperaturen auf der Ebene 950 mm bzw. 1150 mm festgestellt, wobei die Mehrzahl der Thermoelemente bereits vor Beginn der Temperatureskalation ausgefallen ist. Die hier be-

rechneten Temperaturverläufe werden in Abb. 2.11 und Abb. 2.12 mit den Messkurven verglichen.

Die für diese Nachrechnung erreichten Wasserstoffmassen sind in Abb. 2.13 aufgetragen. Da im Messwert der Wasserstoff-Freisetzung Beiträge der Molybdän-Elektrode enthalten sind, ist von einem Vergleichswert zwischen 128 g (ohne Shroud-Anteil) und 151 g (mit Shroud-Anteil) für Versuch und Rechnung auszugehen. Der Rechenwert berücksichtigt den Beitrag der Shroud-Innenwand, nicht jedoch eine evtl. im Test aufgetretene Oxidation der Shroud-Außenwand. Die Gesamtmenge von 136 g H<sub>2</sub> für die Simulation mit der Testversion stimmt mit dem Messwert gut überein, wobei der Beitrag der Heizstäbe (Rods) mit 94 g geringfügig überschätzt wird. Der Beitrag der Schmelzeoxidation zur Wasserstofferzeugung wird jetzt mit 12,8 g gegenüber 13 g im Versuch fast exakt nachgerechnet.



**Abb. 2.11** QU-07 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen auf Höhe 950 mm

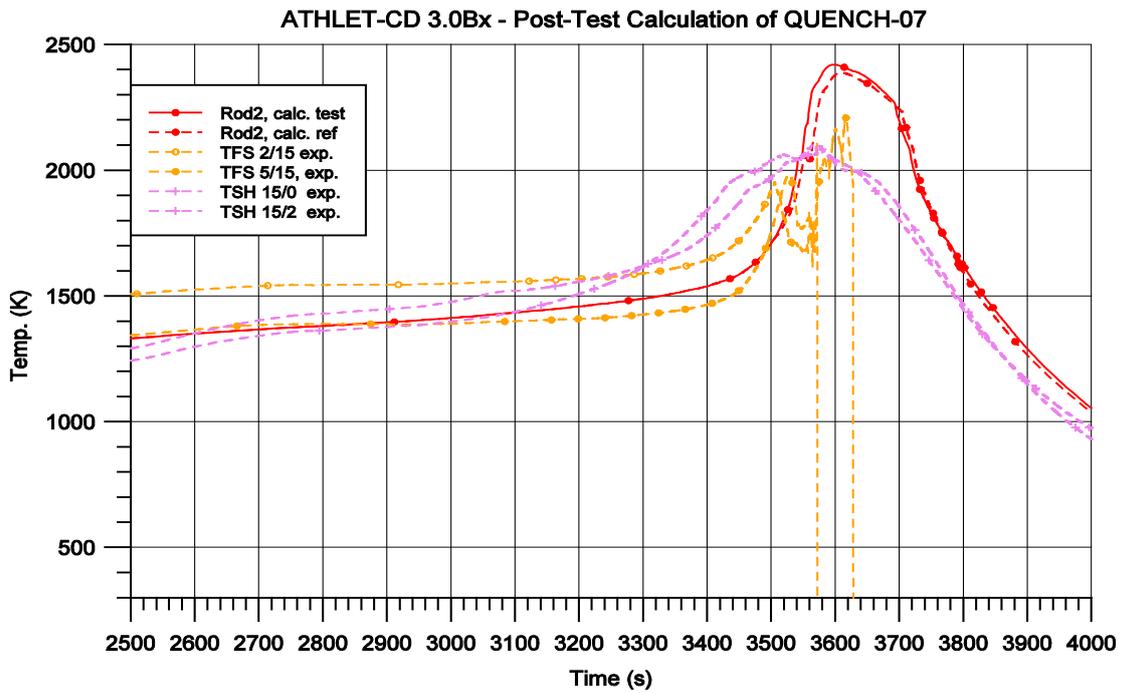


Abb. 2.12 QU-07 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen auf Höhe 1150 mm

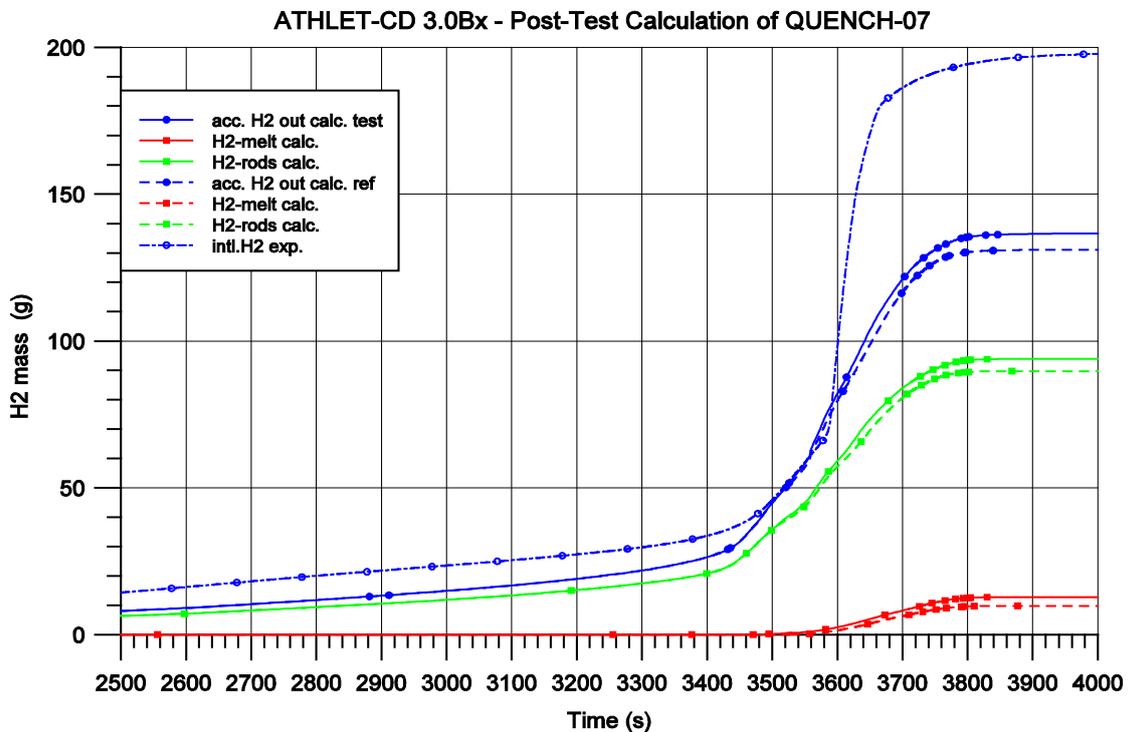


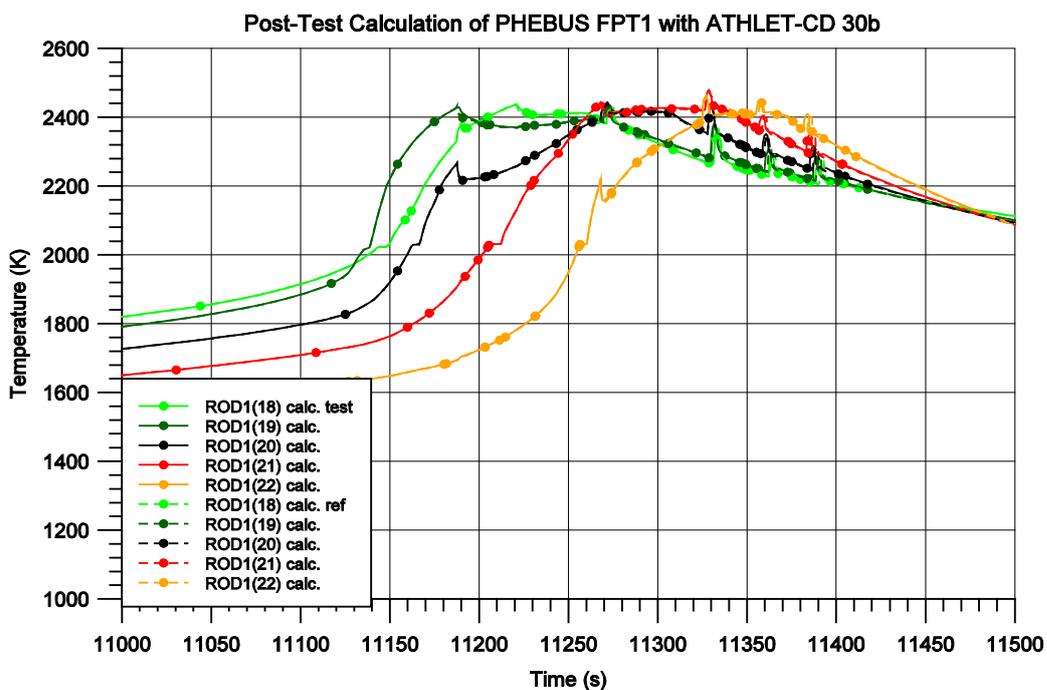
Abb. 2.13 QU-07 - Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung (Referenz- /Testrechnung)

## PHEBUS FPT1

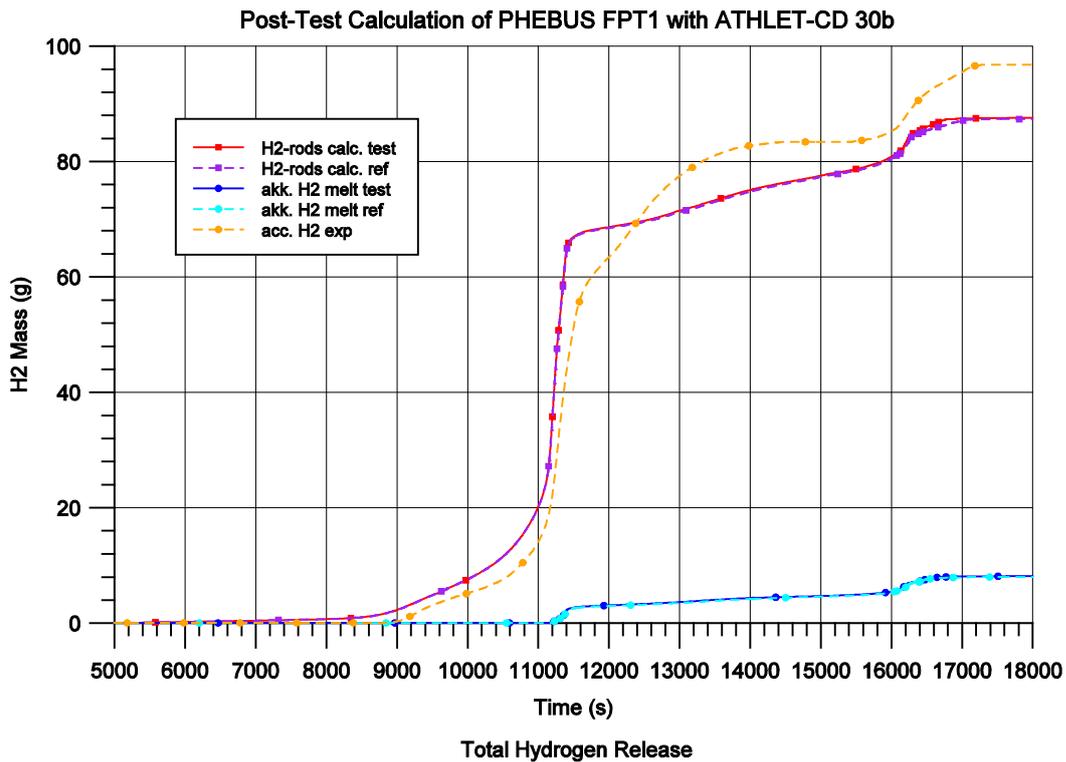
Zur weiteren Überprüfung der neu erstellten Testversion mit dem erweiterten Schmelze-Oxidationsmodell außerhalb der QUENCH-Versuchsreihe wurde der Versuch PHEBUS FPT1 ausgewählt und mit beiden Versionen nachgerechnet. Wie Abb. 2.14 (Vergleich der Temperaturverläufe) und Abb. 2.15 (Vergleich der Wasserstoff-Freisetzung) zeigen, wirkt sich die Änderung hier so wenig aus, dass die Unterschiede in der Graphik nicht erkennbar sind. Aufgrund der geringeren Menge an metallischem Zirkon im versagenden Segment und kürzeren Zellenlängen im Vergleich mit den Simulationen der QUENCH-Versuche wird die Zeitdauer der Restoxidation hier so gering berechnet ( $\Delta t_{\text{res}} = 1,7\text{s}$ ), dass die Wirkung nicht sichtbar wird. Nur die gering unterschiedlichen Zahlenwerte der Wasserstoff-Erzeugung zeigen, dass die Methode kurzfristig aktiviert war.

**Tab. 2.5** Wasserstofferzeugung beim Versuch FPT1

Versuch	H2-Erzeugung Experiment	ATHLET-CD Rechnung:	
		Referenzversion 30b	Testversion 30bx
PHEBUS FPT1	96 g	87,45 g Schmelze: 8,1 g	87,67 g Schmelze: 8,25 g



**Abb. 2.14** FPT1 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen



**Abb. 2.15** FPT1 - Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung

### Zusammenfassung und Bewertung

Es zeigte sich, dass in den bisherigen ATHLET-CD Versionen die un stetige Umschaltung des Kriteriums zum Hüllrohrversagen (TALLOW / TALHIG) bei Erreichen einer bestimmten Oxidschichtdicke bei geringfügig anders verlaufender Kinetik stark unterschiedliche Ergebnisse hinsichtlich der weiteren Temperaturentwicklung und somit auch der Wasserstoffproduktion zur Folge haben kann. Daher wurde die Belegung der Versagenstemperatur entsprechend dem Anstieg im Phasendiagramm in Abhängigkeit der Oxidschichtdicke als lineare Funktion definiert. Hierdurch wird das physikalische Verhalten realistischer abgebildet und Zufallseffekte werden vermieden. Wie die Nachrechnungen einiger Versuche der QUENCH-Serie zeigten, werden die Ergebnisse durch diese Änderung nicht negativ beeinflusst.

Bei der bisherigen Modellierung der Schmelzeoxidation wird ab dem Erreichen des Hüllrohrversagens im betreffenden Abschnitt die Oxidation vollkommen ausgeschaltet unter der Annahme, dass kein metallisches Zirkon mehr vorhanden ist und die Schmelzeströhne in das darunter liegende Segment abströmt. Wie die Auswertung des Experiments QUENCH-16 zeigt, führt diese Annahme zur Unterschätzung der Schmelzeoxidation, da die Abströmung der Schmelzeströhne erst mit einer Verzögerung im

darunter liegenden Node zu einer allmählich ansteigenden Oxidation der Schmelze führt. Da im versagenden Segment trotz hoher Temperatur und einem unter Umständen noch hohen Anteil an metallischem Zirkon die Auswirkung der Oxidationswärme weder im Feststoff noch in der Schmelze berücksichtigt wird, sinken die Temperaturen hier im Vergleich mit den Messdaten zu schnell ab. Es wurde eine Testversion entwickelt, bei der im „slumping node“ nach dem Eintreten des Versagens eine linear abnehmende Restoxidation solange berechnet wird, bis unter der Annahme einer konstanten Abströmgeschwindigkeit der vorhandenen metallischen Zirkonschmelze von einer Verlagerung in die darunter liegende Zelle auszugehen ist.

Es wurden Testrechnungen mit der geänderten Programmversion zu den QUENCH-Versuchen 03, 07, 10, 11 und 16 sowie PHEBUS FPT1 durchgeführt. Diese zeigen, dass für den Versuch QUENCH-16 eine wesentliche Verbesserung erreicht wurde. Bei den Versuchen, bei denen bereits mit Ausnutzung der Option zum Übergang auf lineare Oxidationskinetik gute Resultate der Schmelze-Oxidation erzielt werden konnten, wirkt sich die Modelländerung nur marginal aus, so dass insgesamt kein nachteiliger Effekt festgestellt werden konnte. Die Testversion wurde daher in die Entwicklungsversion ATHLET-CD 3.0B übernommen.

## **2.2 Einbau eines Modells zur Berechnung der axialen Verlagerungsgeschwindigkeit der Schmelze im Kern**

Der Einbau eines Verlagerungsmodells nach Veshchunov /VES 08/, welches über Energiebilanzen die Verlagerungsgeschwindigkeit der herabfließenden Schmelze berechnet, wurde geprüft. Bei der Untersuchung stellte sich heraus, dass der Einbau dieses Modells, das nicht mit dem aktuell implementierten Candling-Modell vereinbar ist (vgl. auch Abschnitt 2.1), mit immensen, tiefgreifenden Veränderungen in der gesamten Modellierung und Code-Struktur verbunden wäre und weite Teile des Codes betreffen würde. Es ist daher noch zu untersuchen, ob der Nutzen, den ein Einbau des Veshchunov-Modells für den Anwender bringen würde, den großen Aufwand rechtfertigen würde.

## **2.3 Einbau eines Modells zur radialen Schmelzeverteilung**

Die Verlagerung von Schmelze innerhalb des Kerns war in ATHLET-CD bisher über ein reines sogenanntes Candling-Modell realisiert. Das heißt, dass das Material, das

an einem Stab schmilzt, an diesem entlang nach unten läuft. Allerdings bleibt die Schmelze damit stets innerhalb des gleichen Rings und es findet keine radiale Ausbreitung des geschmolzenen Materials zwischen den einzelnen Ringen statt. Im realen Fall ist jedoch zu erwarten, dass sich das Material auch radial ausbreiten wird, und zwar in der Regel dann, wenn es während des Abwärtsfließens entlang des Stabes auf Widerstand stößt wie beispielsweise bei Einbauten oder Blockaden aus wiedererstartetem Material. In einigen Fällen kann es dabei zu merklichen Unterschieden zwischen dem tatsächlichen Verlagerungsverhalten und dem vereinfachten modellierten Verhalten kommen, was dann unter Umständen auch Einfluss auf den weiteren Störfallablauf haben kann.

Um die bisherige vereinfachte Modellierung der Schmelzeverlagerung zu erweitern und einen Austausch von Material zwischen den verschiedenen Ringen zu ermöglichen, sind zahlreiche Änderungen im Programm notwendig, besonders im Modul ECORE. Ziel der in diesem Abschnitt beschriebenen Weiterentwicklung der bestehenden Modellierung ist es zu ermöglichen, dass der Code im Falle einer Blockade die Schmelze zur Seite und dann entlang eines anderen Brennstabs nach unten fließen lässt. Die radiale Verlagerung der Schmelze muss dabei kontinuierlich in beide Richtungen (sowohl von innen nach außen, als auch umgekehrt) möglich sein. Bei kompletter Blockade (wie beispielsweise beim Unfall von TMI-2) sollte in jedem Ring ein gleich hoher Schmelzepool entstehen.

Der Schwerpunkt der in diesem Kapitel beschriebenen Arbeiten liegt auf der grundsätzlichen Modellierung und der Umsetzung für Druckwasserreaktoren. Die Modellierung für Siedewasserreaktoren wird in Abschnitt 6.2 vorgestellt.

### **2.3.1 Grundsätzliche Überlegungen und Modellierung**

Das Modell, das die radiale Verlagerung der Schmelze berechnet, wird erst aktiviert, wenn eine Blockade in einem Ring entsteht. Oberhalb der Blockade können Schmelzeströmen aus verschiedenen Nodes mit verschiedenen Parametern (Temperatur, Zusammensetzung, Leistung, usw.) zusammenfließen. Bei der Aktivierung des radialen Schmelzeverlagerungsmodells (RadRel Modell = Radial Relocation Modell) werden die Parameter der zu verlagernden Schmelzemasse berechnet. Die Parameter dieser Schmelzemasse werden massenanteilig aus den einzelnen Schmelzeströmen bestimmt. Ein Beispiel für die Berechnung der Parameter ist in Tab. 2.6 dargestellt.

Natürlich werden außer der Temperatur auf ähnliche Art auch die anderen Parameter (Leistungsdichte, Wärmekapazität, Dichte) berechnet.

**Tab. 2.6** Beispiel zur Berechnung der Parameter des Schmelzepools

Blockade im Node 5						
	Temperatur im Node 5 (K)	Temperatur im Node 6 (K)	Temperatur im Node 7 (K)	Masse im Node 5 (kg)	Masse im Node 6 (kg)	Masse im Node 7 (kg)
Strähne1	egal	2500	egal	egal	1	egal
Strähne2	egal	3000	egal	egal	1	egal
Gemisch	nicht vorhanden	2750	nicht vorhanden	nicht vorhanden	2	nicht vorhanden

Um die Richtung der Verlagerung zu bestimmen, werden die Schmelzehöhen über den Blockaden berechnet (falls es keine Blockade gibt, ist die Schmelzehöhe gleich Null). Die Schmelzehöhe oberhalb der Blockade wird mit der folgenden Gleichung bestimmt:

$$H_{sch} = \frac{m_{sch}}{A_{frei} * \rho_{sch}}$$

Wobei

- $H_{sch}$  die Höhe der Schmelze [m],
- $m_{sch}$  die Masse der Schmelze [kg],
- $A_{frei}$  die freie Durchströmfläche [m<sup>2</sup>],
- $\rho_{sch}$  die Dichte der Schmelze [kg/m<sup>3</sup>] ist.

Die Höhen der nebeneinander stehenden Schmelzesäulen werden verglichen und die Schmelze fließt in Richtung der niedrigeren Schmelzesäule. Die pro Zeitschritt zur Seite fließende Masse wird durch die folgende Gleichung bestimmt:

$$m_{Seite} = \Delta H_{sch} * R_{ring} * 2 * \pi * \rho_{sch} * v_{hor} * dt$$

Wobei

- $m_{Seite}$  die zur Seite fließende Masse pro Zeitschritt [kg],
- $\Delta H_{sch}$  der Schmelzehöhenunterschied zwischen zwei benachbarten Ringen [m],

- $v_{\text{hor}}$  die Geschwindigkeit der radialen Ausbreitung [m/s],
- $dt$  der Zeitschritt [s] ist.

Die freie Fläche des Mantels des Ringes wird für die Bestimmung der verlagerten Masse benutzt. Die Geschwindigkeit der radialen Verlagerung wurde auf ein Zehntel der axialen Schmelzeverlagerungsgeschwindigkeit gesetzt. Aus Stabilitätsgründen wurden Minimal- und Maximallimits ( $2.0E-4$  kg,  $1.0E-3$  kg) bei der zu verlagernden Masse pro Zeitschritt gesetzt. Bei der radialen Verlagerung wird angenommen, dass die Schmelze aus der Zelle (Node) über der Blockade in die benachbarte Zelle fließt, aus der die Schmelze wieder nach unten fließen kann. Bei der Verlagerung können verschiedene Fälle vorkommen:

- Fall 1: Die Schmelze fließt ohne Behinderung in die benachbarte Zelle, von der die Schmelze weiter nach unten fließen kann.
- Fall 2: Wenn sich in der benachbarten Zelle eine Blockade befindet, dann wird die Verlagerung nicht ausgeführt.
- Fall 3: Wenn sich unter der benachbarten Node eine Blockade befindet, dann wird Masse zwar verlagert, aber aus der Node kann die Schmelze nur weiter zur Seite fließen.
- Fall 4: Wenn im Kern eine komplette Blockade entsteht, dann werden die Schmelzepools in den einzelnen Ringen gleichmäßig verteilt. (Das Abfließen der Schmelze an der äußeren Seite des äußersten Ringes ist nicht möglich)
- Fall 5: Wenn in der benachbarten Zelle schon Schmelze existiert, dann wird wieder massenanteilig ein Gemisch aus der zur Seite fließenden Schmelze und aus der Schmelze in der benachbarten Zelle gebildet.
- Fall 6: Wenn die benachbarte Zelle schon aufgeschmolzen ist, dann wird die zur Seite fließende Schmelze nicht in die benachbarte Zelle verlagert, sondern in die Zelle, in der sich die Schmelze der früher aufgeschmolzenen benachbarten Zelle befindet. Praktisch bedeutet das, dass die zu verlagernde Schmelze in die Zelle herunterfällt, in die die Schmelze der benachbarten Zelle abgeflossen ist. Das Gleiche geschieht, wenn Schmelze in die benachbarte Zelle verlagert wurde, aber aus der Nachbarnode schon komplett ausgeflossen ist. Dieses "Herunterfallen" hat programmiertechnische Gründe.

Das bisher dargestellte Modell ist in dieser Form jedoch nur für Druckwasserreaktoren gültig. Die speziellen Einbauten und Strukturen in Siedewasserreaktoren erfordern weitere Modellierungen, welche in Kapitel 6.2 beschrieben werden.

Das RadRel Modell wurde als Option in ATHLET-CD eingebaut, unter dem Pseudokeyword "Rodliquan" wurde die Variable "LOL" eingeführt. Wenn RADREL = 0 ist das RadRel-Modell nicht aktiviert, wenn RADREL = 1 ist das RadRel-Modell aktiviert.

Das in ATHLET-CD eingebaute Modell zur radialen Schmelzeverlagerung wurde an mehreren Datensätzen getestet, wie im folgenden Abschnitt vorgestellt wird.

### **2.3.2 Überprüfung des Modells**

Es wurde ein Beispieldatensatz zusammengestellt, um das RadRel Modell ausführlich untersuchen zu können. In diesem Beispieldatensatz handelt es sich um den Kern eines Druckwasserreaktors mit drei Ringen und zehn axialen, gleichgroßen Nodes. Die Leistung des Kerns wurde tabellenförmig angegeben, um die Energiebilanzen einfacher überprüfen zu können. Bei der Verifikation wurden nur einzelne Nodes beheizt und zum Schmelzen gebracht, um den axialen und radialen Verlagerungsprozessen folgen und die Massen-, Energiebilanzen detailliert untersuchen zu können. Um die Stelle der Blockaden zu bestimmen, wurden die Durchströmflächen der Ringe in bestimmten Höhen verengt. Im dargestellten Beispiel wird zur seitlichen Verlagerung nur ein Minimallimit von 2.0E-3 benutzt. Bei der Auswertung der Simulationen wurde das Programm CView verwendet (s. Kapitel 3.2). In der Beispielrechnung (DWR) wird nur die Verlagerung der keramischen Schmelze mit Hilfe von CView dargestellt und erklärt:

In Abb. 2.16 kann man sehen, dass die Nodes 8 und 9 in Ring 1 zum Schmelzen gebracht worden sind. Die Schmelze fließt nach unten und über der Blockade beginnt die Bildung eines kleinen Schmelzepools, die angesammelte Masse hat jedoch den Minimalwert zur radialen Verlagerung noch nicht erreicht. Die Blockade in der verengten Node 6 ist wegen des Einfließens der metallischen Schmelze entstanden (nicht in der Abbildung sichtbar).

	ROD1	ROD2	ROD3
NODE10	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE9	6.650e-02 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE8	6.664e-02 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE7	4.562e-05 kg	V 0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE6	B 0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE5	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	V 0.000e+00 kg
NODE4	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE3	0.000e+00 kg	V 0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE2	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE1	V 0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg

**V = Verengung**  
**B = Blockade**

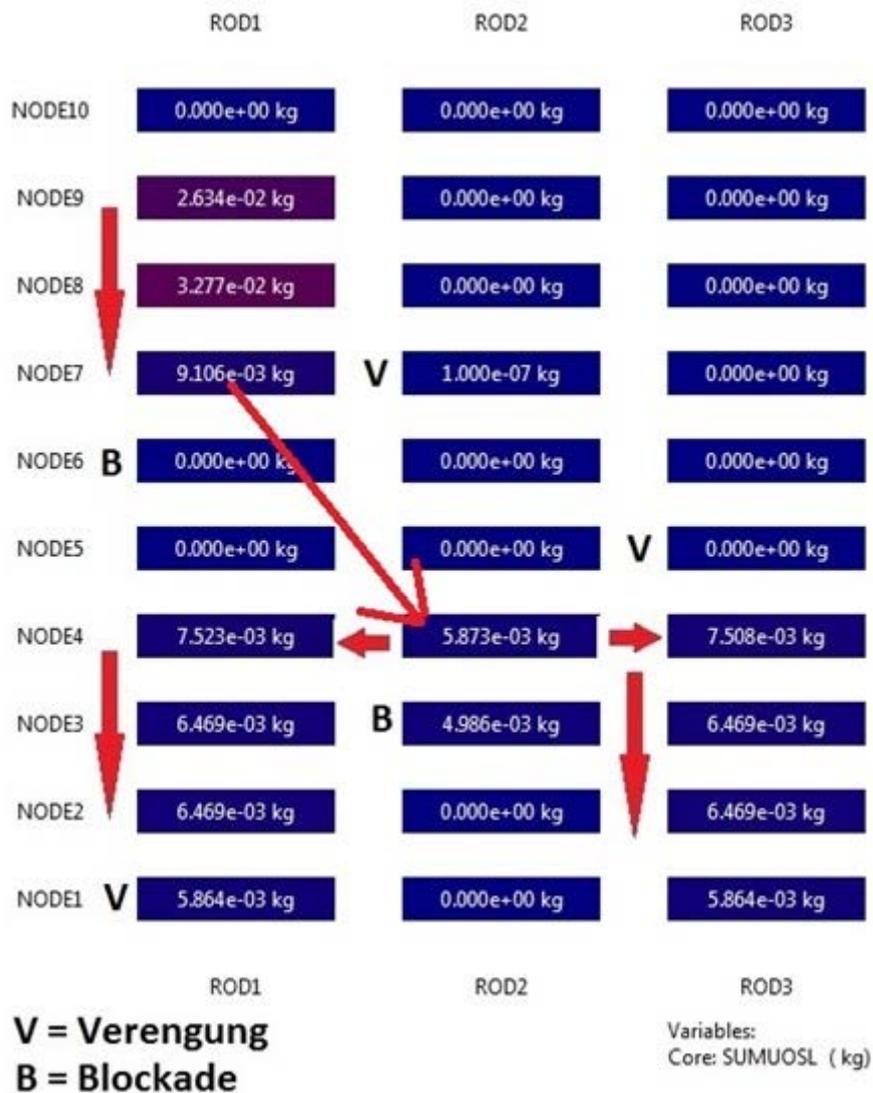
Variables:  
Core: SUMUOSL ( kg)

**Abb. 2.16** Beginn des Abfließens der Schmelze (dargestellt ist die keramische Schmelzemasse SUMUOSL)



**Abb. 2.17** Radiale Verlagerung von Ring 1 nach Ring 2

Zu einem späteren Zeitpunkt (Abb. 2.17) wurde der Minimalwert zur seitlichen Verlagerung erreicht, Schmelze fließt nach Node 7 von Ring 2, aus der dann die Schmelze weiter nach unten fließt. Es gibt zwar eine Verengung in Node 7 von Ring 2, aber es entsteht keine Blockade aufgrund der zugeflossenen Schmelze. Blockadenbildung wird nur berechnet, wenn die Schmelze von oben in die Node hineinfließt. Der Grund dafür ist, dass in der Realität die Schmelze aus einer Node nach unten und zur Seite fließen würde, nicht nur zur Seite. Die direkt benachbarte Node wird programmiertechnisch nur als Ausgangspunkt der Schmelze im neuen Ring betrachtet, die Schmelze fließt aus der Node heraus. Die in den Ring 2 verlagerte Schmelze fließt solange nach unten, bis in Node 3 in Ring 2 eine Blockade entsteht.



**Abb. 2.18** Radiale Verlagerung von Ring 2 nach innen und außen sowie das “Herunterfallen“ der Schmelze

Abb. 2.18 zeigt, dass nach der Blockadenbildung in Node 3 von Ring 2 die Schmelze sowohl nach außen als auch nach innen fließt. Die verlagerte Masse fließt in die Ringe 1 und 3, danach innerhalb dieser Ringe nach unten. Da die axiale Verlagerungsgeschwindigkeit der Schmelze schneller als die radiale ist, können Fälle vorkommen, bei denen die Node, in die die Schmelze von der Seite geflossen ist, komplett leer wird. Bei komplettem Herausfließen bleibt nur eine Schmelzemasse von  $1.0E-7$  kg Schmelze in der Zelle. Aus programmiertechnischen Gründen kann Schmelze von der Seite nicht wieder in diese Zelle fließen. Deswegen “fällt“ die Schmelze in die Zelle im benachbarten Ring, in die die vorher verlagerte Schmelze schon abgeflossen ist. Physikalisch kann diese Annahme so begründet werden, dass die zuerst verlagerte und abgeflossene Schmelze den Weg der Verlagerung für die nächsten Schmelzmassen

schon freigeschmolzen hat. Dieses "Herunterfallen" in der Modellierung ist also auch in der Realität zu erwarten. Dieses Verhalten kann man in Abb. 2.18 beobachten: Schmelze gelangt aus der Zelle 7 von Ring 1 direkt in die Zelle 4 von Ring 2.

Abb. 2.19 zeigt die Endposition der Schmelze aus den Nodes 7 und 8 von Ring 1. Nach der zwischenzeitlichen Momentaufnahme in Abb. 2.18 ist die Schmelze in Ring 1 und 3 weiter nach unten geflossen. In Ring 1 entstand in Node 1 dann zusätzlich noch eine Blockade, weswegen die Schmelze danach in Node 1 von Ring 2 verlagert wurde. Die Schmelze in Ring 3 ist hingegen ungehindert nach unten geflossen.

Abb. 2.20 zeigt einen späteren Zeitpunkt der Beispielsimulation. Zusätzlich Schmelze wurde hier in Node 9 von Ring 2 erzeugt, die nach unten fließt. Wegen einer Blockade in Node 7 fließt die Schmelze aber nach außen und nach innen. In Ring 3 fließt die Schmelze bis zur nächsten Blockade nach unten, dann wird die Schmelze wieder so verlagert wie vorher beschrieben. In Node 7 von Ring 1 sammelt sich die Schmelze an. Unter der Zelle 7 befindet sich zwar eine Blockade, Verlagerung zur Seite geschieht aber nicht, weil in der benachbarten Zelle auch eine Blockade existiert.

Abb. 2.21 stellt einen noch späteren Zeitpunkt der Beispielsimulation dar. In diesem Fall sind die ersten Nodes der Ringe 1 und 2 blockiert. Deswegen fließt die Schmelze von Ring 1 in den Ring 3.

Abb. 2.22 und Abb. 2.23 zeigen den Endzustand der Beispielsimulationen. In Abb. 2.22 ist das RadRel Modell eingeschaltet, in Abb. 2.23 ist es ausgeschaltet. Während der ganzen Simulation sind fünf Nodes zum Schmelzen gebracht worden (jeweils mit einem Stern markiert). Die Gesamtsumme des geschmolzenen Materials pro Ring und insgesamt ist in den Abbildungen ebenfalls dargestellt. Die Gesamtmassen der Schmelzen in den beiden Simulationen zeigen nur einen geringen Unterschied. Dieser kleine Unterschied ist kein Massenbilanzfehler, sondern erscheint wegen der durch die seitliche Verlagerung unterschiedlich entwickelten Temperaturen, die das Aufschmelzen bzw. die Bildung von Eutektikum beeinflussen (in den Abbildungen sind nur die keramischen Schmelzmassen dargestellt).

Ohne radiale Schmelzeverlagerung kann man in Abb. 2.23 beobachten, dass die Schmelzmassen unrealistisch über den Blockaden stehen bleiben. Dieses Phänomen wurde mit dem RadRel Modell beseitigt.

	ROD1	ROD2	ROD3
NODE10	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE9	1.000e-07 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE8	1.000e-07 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE7	1.480e-03 kg	V 1.000e-07 kg	0.000e+00 kg
NODE6	B 3.812e-04 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE5	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	V 0.000e+00 kg
NODE4	1.000e-07 kg	1.818e-03 kg	1.000e-07 kg
NODE3	0.000e+00 kg	B 4.995e-03 kg	0.000e+00 kg
NODE2	1.404e-03 kg	1.000e-07 kg	0.000e+00 kg
NODE1	B 7.056e-03 kg	5.310e-02 kg	6.205e-02 kg

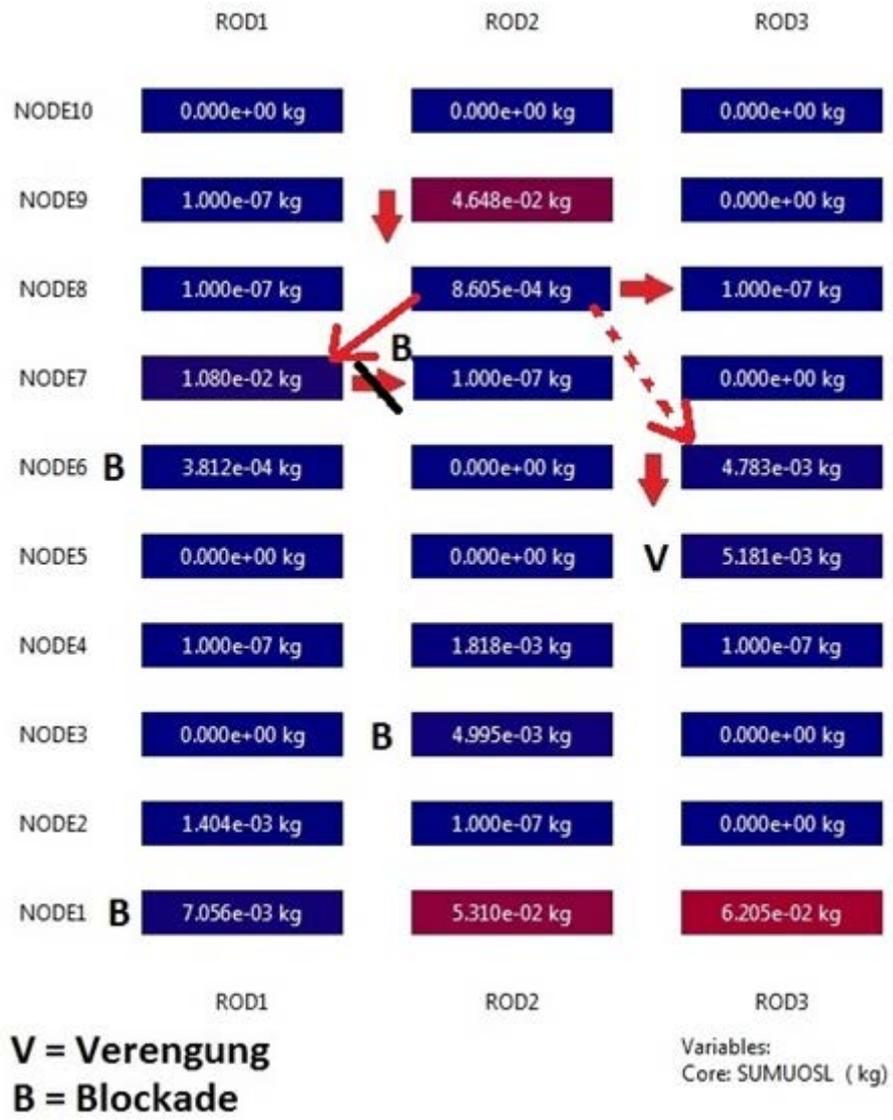
**V = Verengung**  
**B = Blockade**

Variables:  
Core: SUMUOSL ( kg)

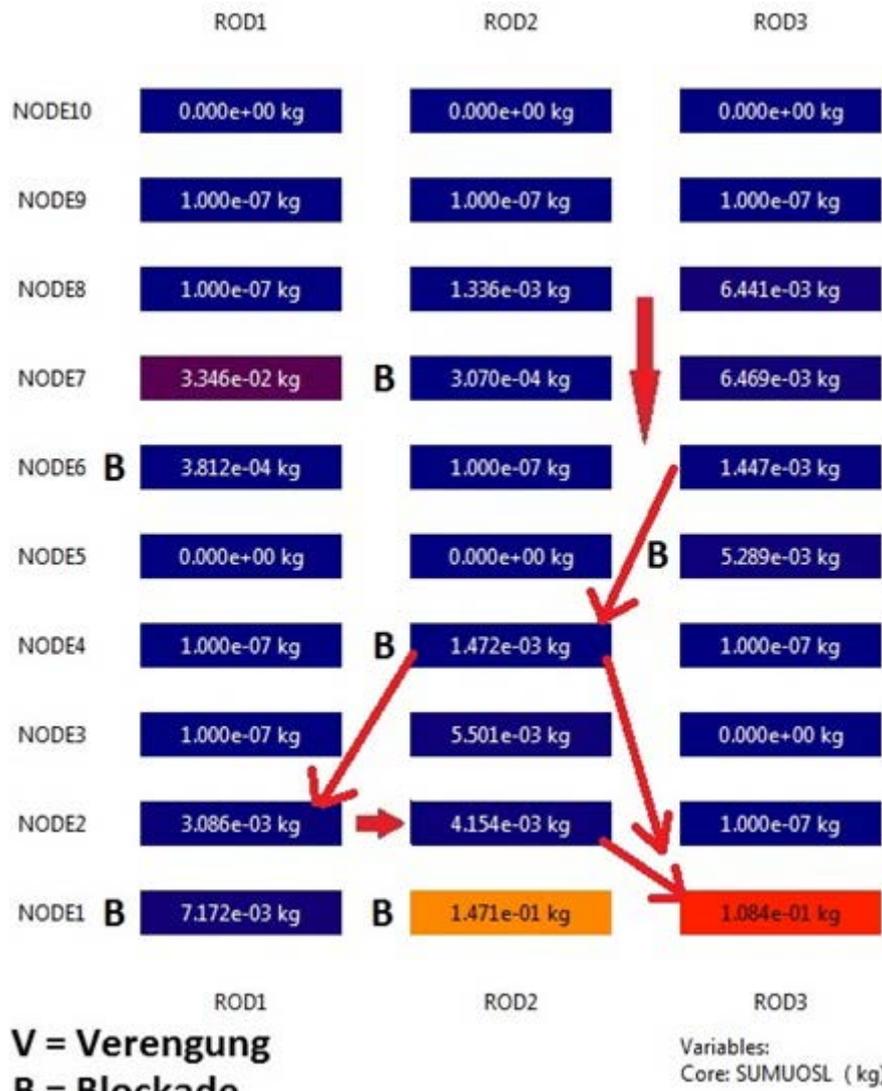
**Abb. 2.19** Endposition der Schmelze aus Node 7 und 8 von Ring 1

Im Beispiel wurde der Ablauf der Verlagerung der keramischen Schmelze dargestellt. Die metallische Schmelze verlagert sich vergleichbar.

Das radiale Schmelzeverlagerungsmodell wurde auch am Experiment Phebus FPT-2 getestet. Die mit dem neuen Modell durchgeführte Simulation ist bis zum Ende gelaufen und da in den Phebus-Experimenten nur kurzfristig Blockaden entstehen, war das RadRel-Modell nur kurz aktiv. Die neue Simulation lieferte daher sehr ähnliche Ergebnisse wie die Simulation mit der bisherigen Version.



**Abb. 2.20** Keine seitliche Verlagerung aufgrund einer Blockade in der benachbarten Node



**Abb. 2.21** Zweifache seitliche Verlagerung wegen nebeneinander existierenden Blockaden

	ROD1	ROD2	ROD3
NODE10	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE9	★ 1.000e-07 kg	★ 1.000e-07 kg	★ 1.000e-07 kg
NODE8	★ 1.000e-07 kg	1.336e-03 kg	1.000e-07 kg
NODE7	3.346e-02 kg	<b>B</b> 3.070e-04 kg	0.000e+00 kg
NODE6	<b>B</b> 3.812e-04 kg	1.000e-07 kg	1.596e-03 kg
NODE5	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	<b>B</b> 5.455e-03 kg
NODE4	★ 1.000e-07 kg	4.859e-05 kg	1.000e-07 kg
NODE3	1.000e-07 kg	<b>B</b> 5.501e-03 kg	0.000e+00 kg
NODE2	1.887e-03 kg	1.953e-03 kg	1.000e-07 kg
NODE1	<b>B</b> 7.172e-03 kg	<b>B</b> 1.471e-01 kg	1.922e-01 kg

**V = Verengung**  
**B = Blockade**  
**★ = Geschmolzene Node**

Variables:  
 Core: SUMUOSL ( kg)

	ROD1	ROD2	ROD3	Total Sum:
Sum SL:	4.290e-02 kg	1.563e-01 kg	1.993e-01 kg	3.985e-01 kg
Sum KR:	7.338e-04 kg	1.487e-04 kg	1.952e-04 kg	1.078e-03 kg
Total Sum:	4.364e-02 kg	1.564e-01 kg	1.995e-01 kg	3.995e-01 kg

**Abb. 2.22** Ende der Beispielsimulation mit radialer Schmelzeausbreitung

	ROD1	ROD2	ROD3
NODE10	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE9	★ 1.000e-07 kg	★ 1.000e-07 kg	★ 1.000e-07 kg
NODE8	★ 1.000e-07 kg	6.161e-02 kg	0.000e+00 kg
NODE7	1.324e-01 kg	B 5.299e-03 kg	0.000e+00 kg
NODE6	B 2.451e-04 kg	0.000e+00 kg	6.114e-02 kg
NODE5	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	B 4.935e-03 kg
NODE4	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg	1.000e-07 kg
NODE3	★ 1.000e-07 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE2	6.656e-02 kg	0.000e+00 kg	0.000e+00 kg
NODE1	B 1.703e-04 kg	0.000e+00 kg	6.616e-02 kg

**B = Blockade**

★ = Geschmolzene Node

Variables:  
Core: SUMUOSL ( kg)

	ROD1	ROD2	ROD3	Total Sum:
Sum SL:	1.993e-01 kg	6.691e-02 kg	1.322e-01 kg	3.985e-01 kg
Sum KR:	5.973e-04 kg	1.731e-05 kg	2.485e-04 kg	8.630e-04 kg
Total Sum:	1.999e-01 kg	6.692e-02 kg	1.325e-01 kg	3.993e-01 kg

**Abb. 2.23** Ende der Beispielsimulation ohne radiale Schmelzeausbreitung

### 2.3.3 Zusammenfassung

Durch die Implementierung der radialen Schmelzeverlagerung wurde eine Schwachstelle in ATHLET-CD beseitigt, weil der unrealistische Fall, dass die Schmelze innerhalb eines Rods stehen bleibt und eine Schmelzesäule bildet, bei Aktivierung des RadRel-Modells nicht mehr vorkommen kann. Die Änderungen wurden an Beispiel-

und Anlagendatensätzen getestet, das Modell erzeugte dabei keine Widersprüche (keine Massen- und Energiebilanzfehler) und lieferte plausible Ergebnisse. Die Validierung des neuen Modells muss in der Zukunft allerdings noch detaillierter ausgeführt werden.

## **2.4 Anwendung der 3D-Modellierung von ATHLET auf ATHLET-CD**

Mit der Entwicklung eines programminternen 3D-Modells wurde in ATHLET die Möglichkeit geschaffen, makroskopische mehrdimensionale Strömungen, wie sie insbesondere in großen Behältern wie beispielsweise dem Reaktordruckbehälter (RDB) auftreten, vollständig mehrdimensional zu simulieren /SCH 15/. Die bisher in ATHLET für die Simulation großer Behälter eingesetzte Parallelkanaltechnik ermöglicht lediglich eine pseudo-3D Darstellung, die auf der Lösung unvollständiger Erhaltungsgleichungen basiert und daher in ihrer Aussagekraft eingeschränkt ist. Die damit verbundene Ergebnisunsicherheit wurde durch die Implementierung der vollständigen mehrdimensionalen Gleichungen in ATHLET beseitigt. Für Anlagensimulationen ist vorgesehen, die mehrdimensionalen Gleichungen nur für ausgewählte Bereiche mit ausgeprägtem, mehrdimensionalem Strömungsverhalten einzusetzen, wohingegen die Rohrleitungsnetzwerke weiterhin durch die bewährten eindimensionalen Gleichungen beschrieben werden. Der Reaktordruckbehälter ist dabei ein Bereich, für den die dreidimensionale Modellierung von Interesse ist.

Um die Einflüsse der 3D-Modellierung auf Simulationen mit ATHLET-CD zu untersuchen, eignet sich ein Datensatz mit mehreren parallelen Kanälen am besten. Daher wurde zu diesem Zweck der Datensatz zum Unfall von TMI-2 gewählt, der auch in der Validierung von ATHLET-CD Verwendung findet.

### **2.4.1 Erweiterung des Datensatzes zur Simulation des Unfalls von TMI-2**

Als Basis diente der Standard-Datensatz aus der Validierung, der in /BAL 12/ beschrieben ist. Der Eingabedatensatz basiert im Wesentlichen auf dem Datensatz, der für den OECD/NEA-Benchmark /BEN 09/ benutzt wurde. Die angepasste Nodalisierung ist in Abb. 2.24 abgebildet. Sie besteht aus dem Reaktordruckbehälter (RPV), den zwei Kühlmittelschleifen A und B mit den once-through Dampferzeugern, vier kalten Strängen mit Hauptumwälzpumpen, vier Hochdruck-Einspeisungen in den kalten Strang und einem Let down in der Schleife A. Weiterhin ist der Druckhalter mit der an

der Schleife A angeschlossenen Druckhalterverbindungsleitung, den Heizern, der Einsprühung und dem Sicherheitsventil modelliert. Um die neue 3D-Modellierung von ATHLET für den Kern anzusprechen, waren außerdem noch einige wenige Erweiterungen notwendig („3D-MODULE“). Diese zusätzlichen Eingaben sind in Abb. 2.25 dargestellt.

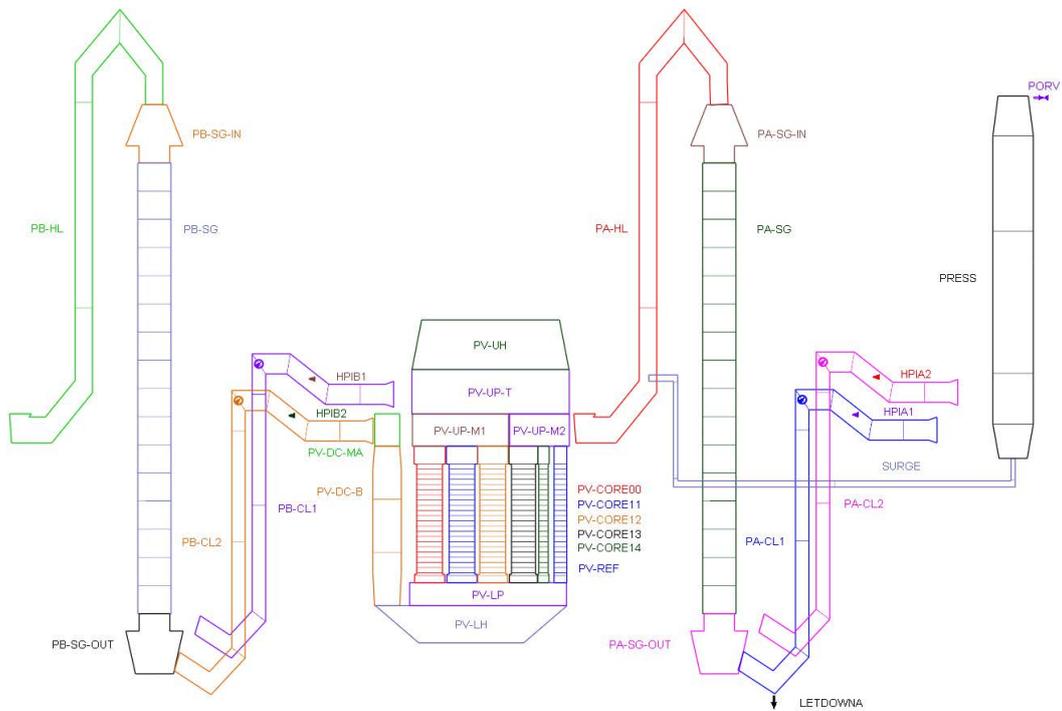


Abb. 2.24 Nodalisierung von TMI-2

```

C---- 3D-MODULE
@
@   I3DDP I3DCOR I3DWL I3DMOD I3DFTRX
    ..... 1     1     0     2     0
@
K---- CORE
@   GEOMETRY #X-CHNL #YCHNL CHNL/SEG I3DSHR
    ..... 3       1     4     0     0
@
ANAMO
PV-CORE
---- CYLRAD
    ..... 0.81
    ..... 1.14
    ..... 1.40
    ..... 1.60
    ..... 1.62

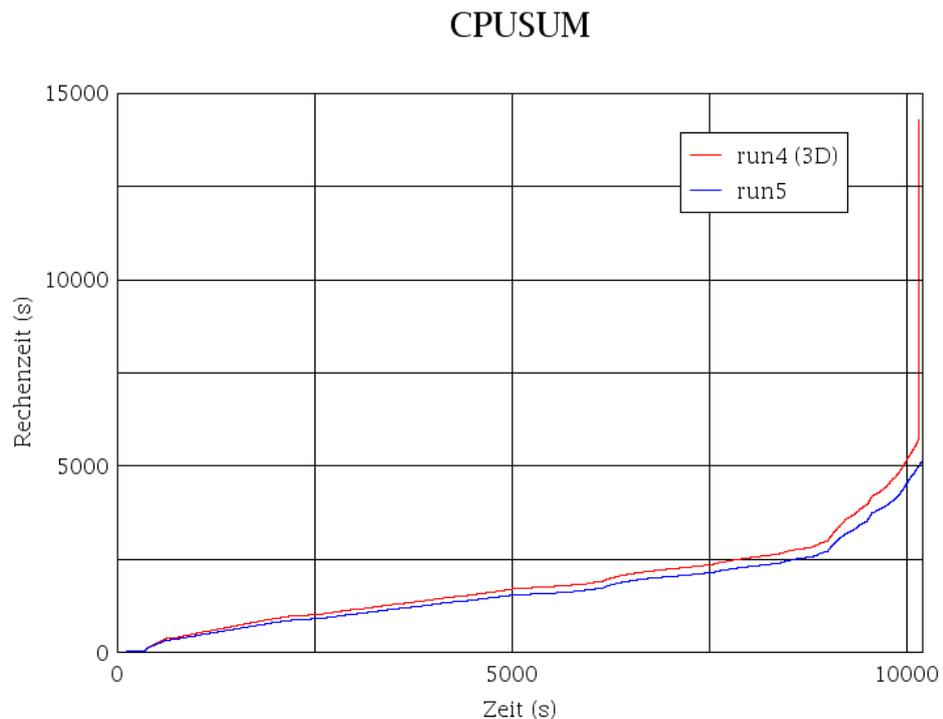
```

Abb. 2.25 Eingabe zur Aktivierung der 3D-Modellierung im Datensatz

## 2.4.2 Simulationsergebnisse

In der Entwicklerversion ATHLET-CD 3.1 vom Oktober 2015 stürzten beide Simulationen des TMI-2-Unfalls ungefähr zur gleichen Zeit ab. Die Rechnung ohne Aktivierung der 3D-Modellierung lief dabei etwas länger (bis  $t = 11836$  s) als die mit 3D-Modellierung (bis  $t = 10148$  s). Daher werden im Folgenden nur die Ergebnisse bis  $t = 10148$  s verglichen. Die Simulation mit dem 3D-Modell brauchte etwas länger, wie Abb. 2.26 zeigt, in der die kumulierte CPU-Zeit aufgetragen ist. Der Unterschied fällt jedoch recht gering aus. Kurz vor dem Programmabsturz stieg die Rechenzeit im Falle der 3D-Rechnung allerdings sehr stark an, so dass diese Rechnung bis  $t = 10148$  s mit 240 Minuten insgesamt deutlich länger dauerte als ohne Aktivierung der 3D-Modellierung mit 83 Minuten.

Die Fluidtemperaturen sind in Abb. 2.27 bis Abb. 2.29 für verschiedene Nodes im innersten Kernkanal PV-CORE00 dargestellt. In Node 11 sind zu einigen Zeiten kleinere Unterschiede zwischen den Temperaturen in beiden Läufen zu erkennen, der Verlauf ist im Großen und Ganzen jedoch vergleichbar. In Node 12 sind die Unterschiede noch geringer und in Node 15 nur noch in sehr geringem Umfang vorhanden. Ein ähnliches Verhalten ist auch in den anderen Kernkanälen zu beobachten. Die Unterschiede bei den Fluidtemperaturen fallen insgesamt also sehr gering aus und sind wohl nur durch kleinere Durchmischungsvorgänge bedingt.



**Abb. 2.26** Aufsummierte Rechenzeit

### Fluidtemperatur TFLUID (PV-CORE00, Node 11)

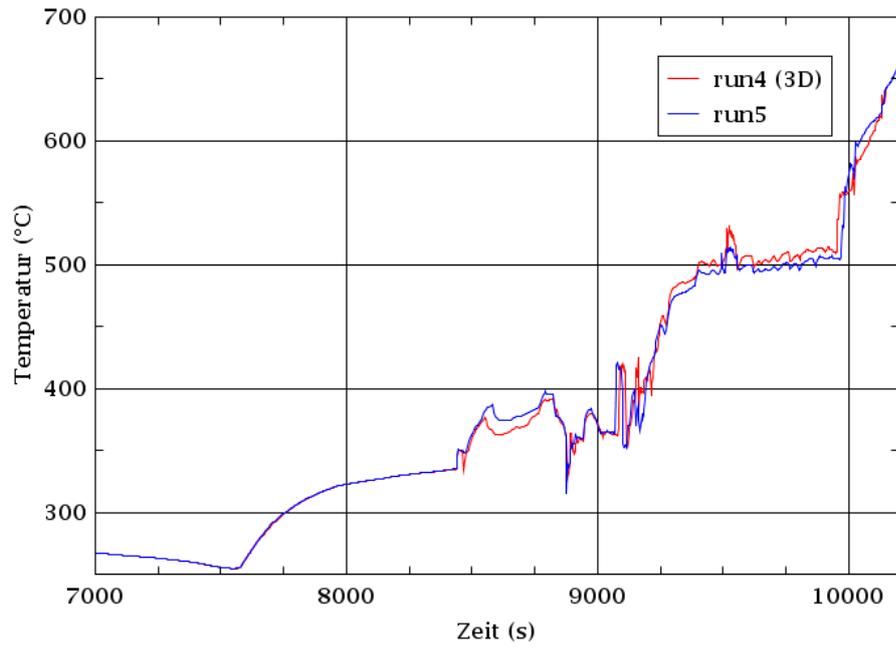


Abb. 2.27 Fluidtemperatur in Node 11 des Kanals PV-CORE00

### Fluidtemperatur TFLUID (PV-CORE00, Node 12)

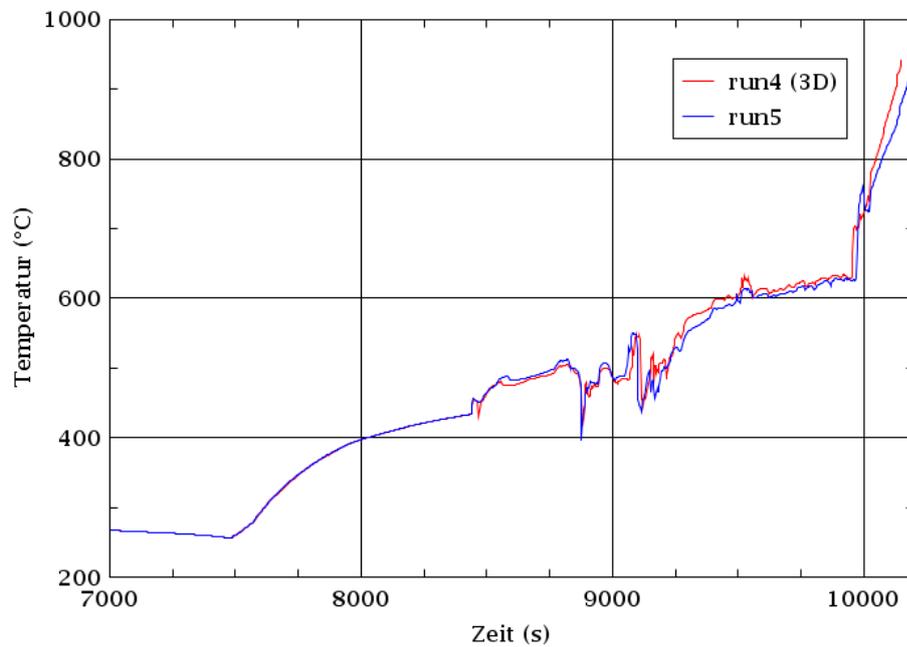


Abb. 2.28 Fluidtemperatur in Node 12 des Kanals PV-CORE00

### Fluidtemperatur TFLUID (PV-CORE00, Node 15)

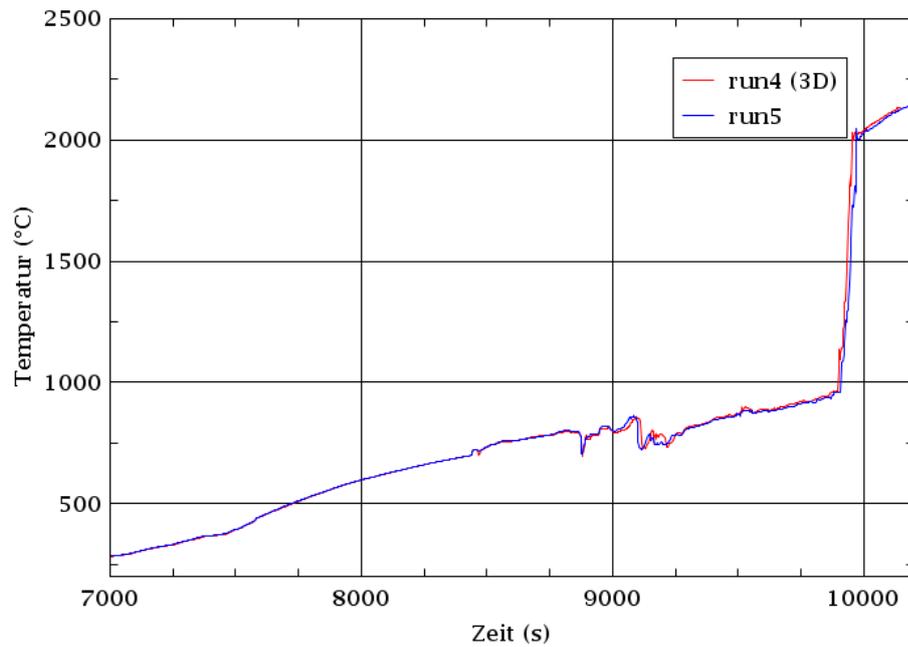


Abb. 2.29 Fluidtemperatur in Node 15 des Kanals PV-CORE00

### Schmelzemasse AMISUL

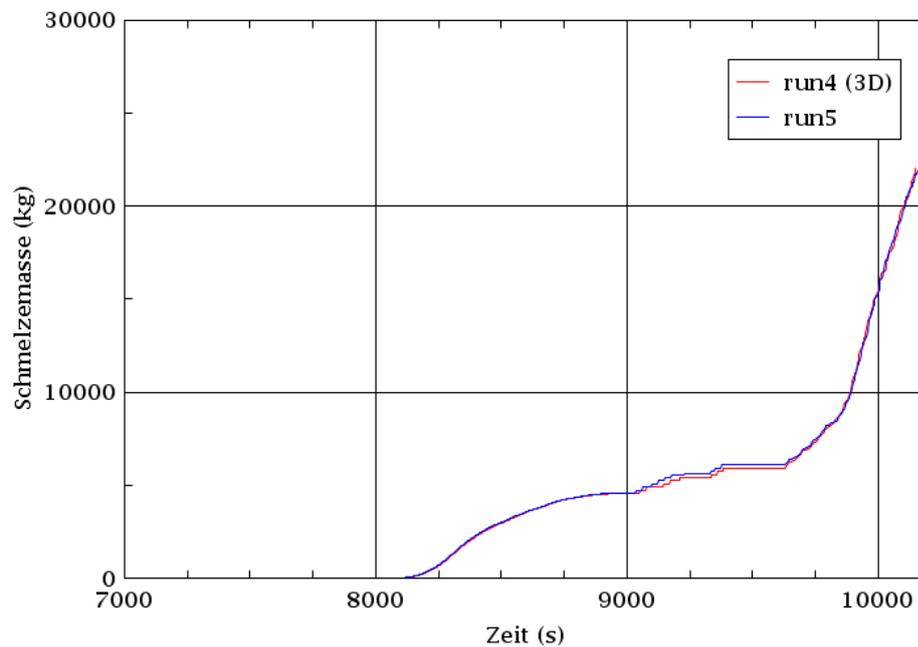


Abb. 2.30 Gesamtmasse an geschmolzenem Material

Auch bei der Schmelzemasse ergeben sich durch die 3D-Modellierung nur sehr geringe Abweichungen in den Simulationen. In Abb. 2.30 ist die Gesamtmasse an geschmolzenem Material im Kern dargestellt. Es sind kaum Unterschiede zwischen den

beiden Simulationen vorhanden, lediglich zwischen  $t = 9000$  s und  $t = 9750$  s sind ganz geringe Abweichungen der beiden Kurven zu sehen. Dieses Ergebnis passt gut zu den sehr geringen Unterschieden bei den Temperaturen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Simulationen des Unfalls von TMI-2 mit und ohne thermohydraulischem 3D-Modell von ATHLET bei den Fluidtemperaturen nur sehr geringe Unterschiede in kurzen Zeitabschnitten zeigten. Damit einhergehend wies auch die Menge an geschmolzenem Material äußerst geringe Unterschiede auf. Insgesamt sind die Ergebnisse aber sehr ähnlich, so dass bei dem untersuchten Fall eine Anwendung des 3D-Modells keine wesentliche Verbesserung der Ergebnisse ergab. Die Rechenzeit war bei aktiviertem 3D-Modell etwas länger als ohne, der geringe Unterschied spricht jedoch nicht gegen eine Anwendung des 3D-Modells.

## **2.5 Erweiterungen in AIDA**

Das Modul AIDA berechnet das thermische Verhalten von geschmolzenem Kernmaterial im unteren Plenum, die Wärmeleitung zwischen dem Schmelzpool und der Außenwand des Reaktordruckbehälters (inklusive Kühlung) sowie das mechanische Verhalten der Reaktordruckbehälterwand. Der Wärmeübergang sowie die Temperaturverteilung in der Wand des unteren Plenums werden bisher mit einem expliziten Differentialverfahren ermittelt. Im Rahmen des Projektes wurde ein neues, implizites Lösungsverfahren entwickelt und getestet, um eine bessere Berechnungsstabilität sowie adäquate, von der örtlichen Wandauflösung (Nodalisierung) unabhängige Rechenzeitschritte zu erzielen. Des Weiteren wurde der Einfluss der Nodalisierung des unteren Plenums auf die Simulationsergebnisse mit dem bereits bestehenden Berechnungsverfahren untersucht. Die Sensitivitätsanalysen wurden mit Simulationen sowohl von Experimenten als auch von generischen Reaktoranlagen durchgeführt.

### **2.5.1 Entwicklung eines impliziten Lösungsverfahrens zur Berechnung der Wärmeleitung in der Wand des unteren Plenums**

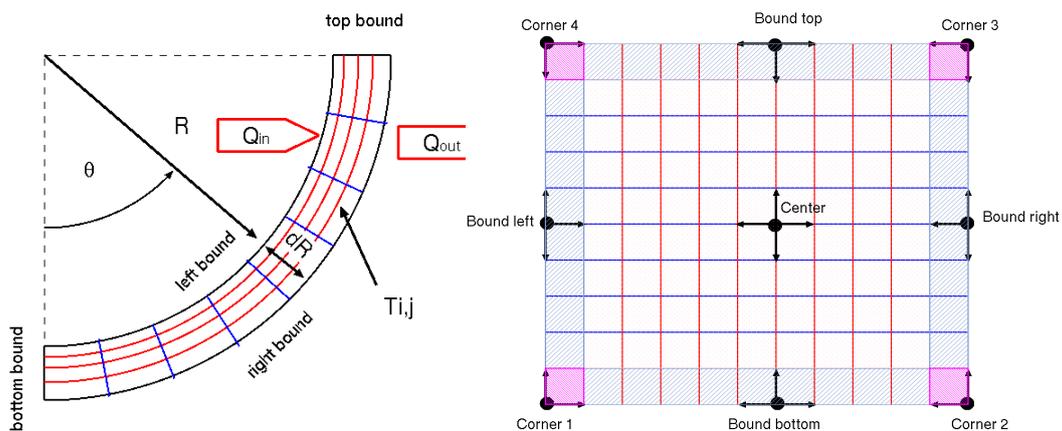
Aus Stabilitätsgründen und zur Gewährleistung adäquater Zeitschrittweiten, bei der Berechnung der Wechselwirkung zwischen metallischer bzw. oxydischer Schmelze zum einen und dem Reaktordruckgefäß im Bereich des unteren Plenums zum anderen, soll ein implizites Verfahren für die Berechnung der zeitabhängigen Wärmeleitung in der Wand des unteren Plenums entwickelt werden.

### 2.5.1.1 Theoretische Überlegungen

Als Ausgangspunkt wird die Wärmeleitungsgleichung mit Quellterm in sphärischen Koordinaten betrachtet:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left( \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\cot(\theta)}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\partial \alpha}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \alpha}{\partial \theta} \frac{\partial T}{\partial \theta} + Q \quad 2-1$$

wobei  $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  dem Diffusionskoeffizient entspricht. Des Weiteren bezeichnen die Größen  $\lambda$  den Wärmeleitwert,  $\rho$  die Dichte und  $c_p$  die Wärmekapazität des für die Wand verwendeten Materials (Stahllegierung). Der Ausdruck  $T = T(t, r, \theta)$  kennzeichnet dabei das zeitabhängige Temperaturfeld in der Wand und  $Q$  den Quell- bzw. Senken-Term für die ein- und ausgehenden Wärmeströme an der Wand.



**Abb. 2.31** Diskretisierung der Behälterwand in  $(r, \theta)$  und Darstellung der für die Berechnung zu entwickelnden Differenzenquotienten

Die rechte Seite dieser partiellen Differentialgleichung lässt sich in sechs Komponenten für die einzelnen Differentialoperatoren unterteilen. In Abschnitt 2.5.1.4 ist beispielhaft die Darstellung der einzelnen diskretisierten Operatoren (2-17 bis 2-22) für die zentralen Differenzenquotienten (Center, siehe Abb. 2.31) gegeben. Für die gesamte Berechnung war die Entwicklung von insgesamt 9 Differenzenquotienten notwendig. In Abb. 2.31 ist links die zweidimensionale Diskretisierung der Behälterwand in  $(r, \theta)$  und

rechts die Darstellung der für die Berechnung zu entwickelnden Differenzenquotienten abgebildet. Die Oberfläche der inneren (left bound) und äußeren (right bound) Behälterwand beinhaltet die Quellterme für die ein- und ausgehenden Wärmeströme. Der Wärmestrom an der Randfläche „bottom bound“ ist aus Symmetriegründen gleich Null. Der resultierende Wärmestrom „top bound“ wird durch die angrenzenden Strukturen des Reaktordruckbehälters bestimmt, welche durch die Wärmeleitobjekte aus ATHLET gegeben sind. In der folgenden Beschreibung bezeichnet  $i$  den Laufindex für die Diskretisierung der Behälterwand in radialer Richtung  $r$  ( $i = 0..N_{max}$ ) und  $j$  den entsprechende Laufindex für den Höhenwinkel  $\theta$  (Altitude) der Kalotte ( $j = 0..M_{max}$ ). Es folgen mit  $\Delta r = \frac{dR}{N_{max}}$  und  $\Delta \theta = \frac{\pi/2}{M_{max}}$  die entsprechenden Diskretisierungen der radialen und der Winkel – Komponente.

$$r_i = R + i \times \Delta r \quad \text{mit } r_i \in [R, R + dR] \quad 2-2$$

$$\theta_j = \theta_{j-1} + \Delta \theta \times F(\theta_{j-1}) \quad \text{mit } \theta_j \in [0, \pi/2] \quad 2-3$$

Die Funktion  $F$  in 2-3 entspricht der bereits in /BAL 12/ vorgestellten variablen Diskretisierung-Funktion. Durch die Diskretisierung der einzelnen Differentialoperatoren lässt sich 2-1 linearisiert darstellen und durch einen linearen Operator  $\mathbf{L}$  in die Form der nachfolgenden 2-4 bringen. Der Ausdruck  $\Delta t$  entspricht der gesetzten Zeitschrittweite innerhalb der Integration.

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \mathbf{L}(T_{i+1,j}^{n+1}, 2T_{i,j}^{n+1}, T_{i-1,j}^{n+1}) + Q_{i,j}^n \quad 2-4$$

Ziel ist es nun diesen Ausdruck nach Abhängigkeit des jeweiligen Zeitschrittes der einzelnen Komponenten, d.h. nach  $n$  bzw.  $n + 1$  zu sortieren.

$$T_{i,j}^n - \Delta t Q_{i,j}^n = T_{i,j}^{n+1} - \Delta t \mathbf{L}(T_{i+1,j}^{n+1}, 2T_{i,j}^{n+1}, T_{i-1,j}^{n+1}) \quad 2-5$$

Unter Verwendung des linearen Operators  $\mathbb{L}$  (2-6) lässt sich 2-4 weiter vereinfachen und in folgende Form (2-7) bringen.

$$\mathbb{L}(T_{i+1,j}^{n+1}, 2T_{i,j}^{n+1}, T_{i-1,j}^{n+1}) = T_{i,j}^{n+1} - \Delta t \mathbf{L}(T_{i+1,j}^{n+1}, 2T_{i,j}^{n+1}, T_{i-1,j}^{n+1}) \quad 2-6$$

$$T_{i,j}^n - \Delta t Q_{i,j}^n = \mathbb{L}(T_{i+1,j}^{n+1}, 2T_{i,j}^{n+1}, T_{i-1,j}^{n+1}) \quad 2-7$$

Der Ausdruck  $Q_{i,j}^n$  für die auftretenden Wärmeströme an der inneren ( $r_{i=0} = R$ ) bzw. äußeren ( $r_{i=N_{max}} = R + dR$ ) Behälterwand ist nur für  $i = 0$  und  $i = N_{max}$  von Null verschieden. Es kann somit geschrieben werden

$$Q_{i,j}^n = \begin{cases} Q_{in_j}^n & i = 0 & , j = 0..M_{max} \\ Q_{out_j}^n & i = N_{max} & , j = 0..M_{max} \end{cases} \quad 2-8$$

Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes  $T_{i,j}^{n+1}$  geschieht nun durch Inversion von 2-7. Hierfür ist es notwendig die gegebenen zweidimensionalen Felder mit der Größe  $(0..N_{max}, 0..M_{max})$  auf entsprechende Vektoren mit der Größe  $(0 \dots K_{max})$  abzubilden. ( $K_{max} = N_{max} \times M_{max}$ )

$$T_{i,j}^n \rightarrow [t_0^n, \dots, t_{N_{max}}^n, t_{N_{max}+1}^n, \dots, t_{2 \times N_{max}}^n, \dots, t_{K_{max}}^n] \quad 2-9$$

$$T_{i,j}^{n+1} \rightarrow [t_0^{n+1}, \dots, t_{N_{max}}^{n+1}, t_{N_{max}+1}^{n+1}, \dots, t_{2 \times N_{max}}^{n+1}, \dots, t_{K_{max}}^{n+1}] \quad 2-10$$

$$Q_{in_j}^n \rightarrow [qi_0^n, \dots, 0, qi_{N_{max}+1}^n, \dots, 0, qi_{M_{max} \times (N_{max}-1)}^n \dots 0] \quad 2-11$$

$$Q_{out_j}^n \rightarrow [0 \dots qo_{N_{max}}^n, 0, \dots, qo_{2 \times N_{max}}^n, 0 \dots, qo_{K_{max}}^n] \quad 2-12$$

Zur Vereinfachung der Darstellung wird die linksseitige Subtraktion in 2-7 durch den Vektor  $\overline{ts}^n$  substituiert.

$$\overline{ts}^n = \overline{t}^n - \Delta t(\overline{qin}^n + \overline{qo}^n)$$

$$\begin{bmatrix} ts_0^n \\ \vdots \\ ts_{K_{max}}^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_0^n \\ \vdots \\ t_{K_{max}}^n \end{bmatrix} - \Delta t \left( \begin{bmatrix} qin_0^n \\ \vdots \\ qin_{M_{max} \times (N_{max}-1)}^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ qout_{N_{max}}^n \\ \vdots \\ 0 \\ qout_{K_{max}}^n \end{bmatrix} \right) \quad 2-13$$

Mit diesen transformierten Größen kann 2-7 in folgender Matrixschreibweise dargestellt werden.

$$\overrightarrow{ts^n} = \mathbb{L} \times \overrightarrow{t^{n+1}} \quad 2-14$$

oder

$$\begin{bmatrix} ts_0^n \\ \vdots \\ ts_{K_{max}}^n \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} l_{00} & & l_{0,K_{max}} \\ & \ddots & \\ l_{K_{max},0} & & l_{K_{max},K_{max}} \end{pmatrix} \times \begin{bmatrix} t_0^{n+1} \\ \vdots \\ t_{K_{max}}^{n+1} \end{bmatrix} \quad 2-15$$

Durch Inversion der Matrix  $\mathbb{L}$  erhält man dann das gesuchte Ergebnis  $\overrightarrow{t^{n+1}}$ , d.h. durch Multiplikation des Vektors  $\overrightarrow{ts^n}$  mit der invertierten Matrix  $\mathbb{L}^{-1}$ .

$$\overrightarrow{t^{n+1}} = \mathbb{L}^{-1} \times \overrightarrow{ts^n} \quad 2-16$$

Im letzten Schritt wird der für den Zeitschritt  $(n + 1)$  berechnete Ergebnisvektor  $\overrightarrow{t^{n+1}}$  wieder auf das zweidimensionale Temperaturfeld  $T_{i,j}^{n+1}$  abgebildet.

### 2.5.1.2 Programmtechnische Realisierung

Eine schematische Darstellung des für das Modul AIDA erstellten Unterprogramms AIDA\_WALL ist in Abb. 2.31 gegeben. Die Funktionen der einzelnen Hauptkomponenten ist in Bezug auf die oben aufgeführte Berechnungsskizze gegeben durch:

#### SetInitialData:

- Allokation von Speicher für die Matrizen und Vektoren.
- Aktualisierung der auftretenden inneren und äußeren Wärmeströme  $(q_i, q_o)$ ,
- Bestimmung des Diffusivitätsfeldes  $\alpha_{i,j}$  (siehe Abschnitt 2.5.1.4) anhand des gegebenen Temperaturfeldes

**GetRHS:**

- Transformation des Temperaturfeldes  $T_{i,j}^n$  unter Berücksichtigung der Wärmeströme auf den Vektor  $\overrightarrow{ts}^n$

**SetMatrix:**

- Neuberechnung der Matrix-Koeffizienten  $l_{i,j}$  2-13 auf der Grundlage der aktualisierten Werte des Diffusivitätsfeldes  $\alpha_{i,j}$

**InvertMat:**

- Inversion der Matrix L unter Verwendung von BLAS – Bibliotheken

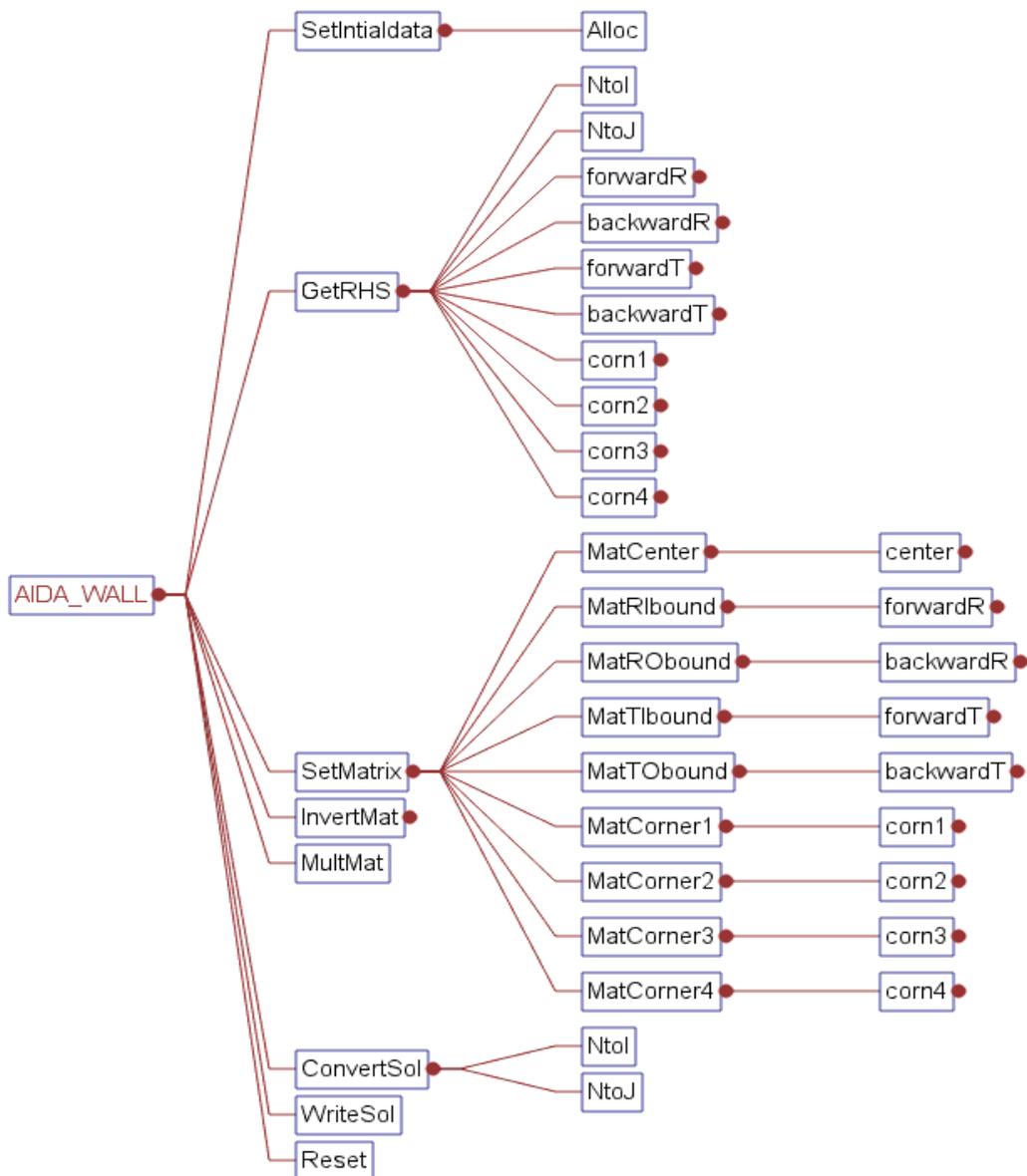
**MultMat:**

- Matrixmultiplikation (2-14) zur Berechnung von  $\overrightarrow{t}^{n+1}$

**ConvertSol:**

- Transformation des Lösungsvektors  $\overrightarrow{t}^{n+1}$  auf das neue Temperaturfeld  $T_{i,j}^{n+1}$

Die Untergruppen ForwardR, BackwardR, ForwardT und BackwardT enthalten die entsprechenden Differenzenquotienten für die Vorwärts-/Rückwärts-Differentiation entlang der Ränder des Entwicklungsgebietes. Corn1,...Corn4 enthalten die Differenzenquotienten an den jeweiligen Ecken (Siehe Abb. 2.31 „Rechts“).



**Abb. 2.32** Darstellung des Unterprogramms AIDA\_WALL zur impliziten Berechnung der Wandwärmeströme im unteren Plenum

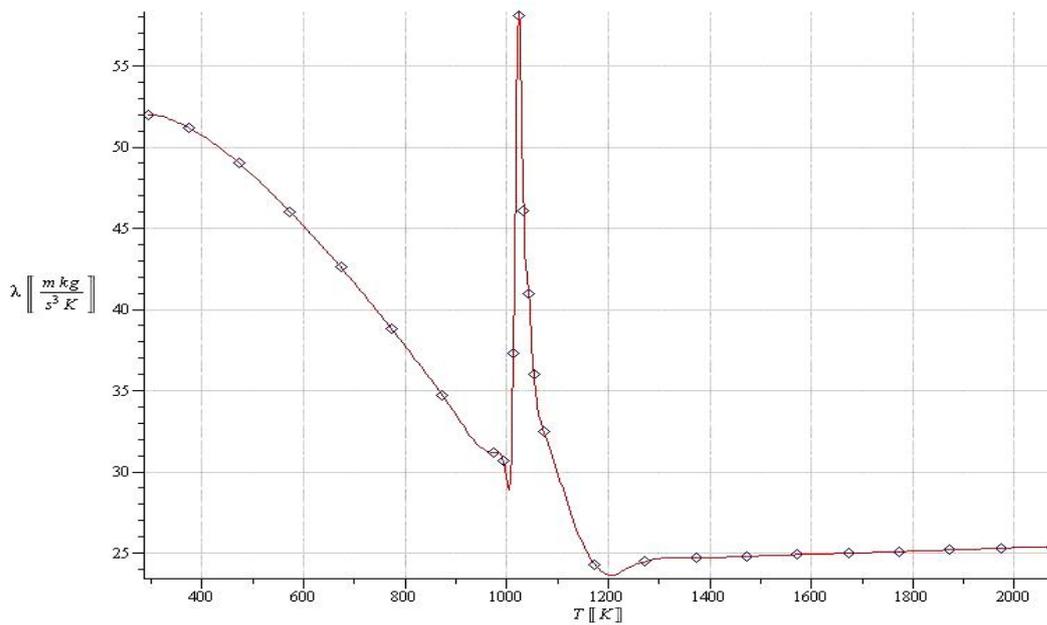
### 2.5.1.3 Testrechnung

Die folgende Testrechnung betrachtet die Wärmeleitung durch eine Kalotte mit einem Radius von 0.5 m und einer Dicke von 0.025 m. Die Wandtemperatur hat zum Zeitpunkt  $t=0$  einen Wert von  $T_{wall} = 323 K$  für den gesamten betrachteten Bereich  $(r \in [5.0 m, 50.25 m], \theta \in [0, \frac{\pi}{2}])$ .

Die laterale Wärmestromdichte an der Innenseite der Wand ist durch eine Gauß-Verteilung der Form gemäß

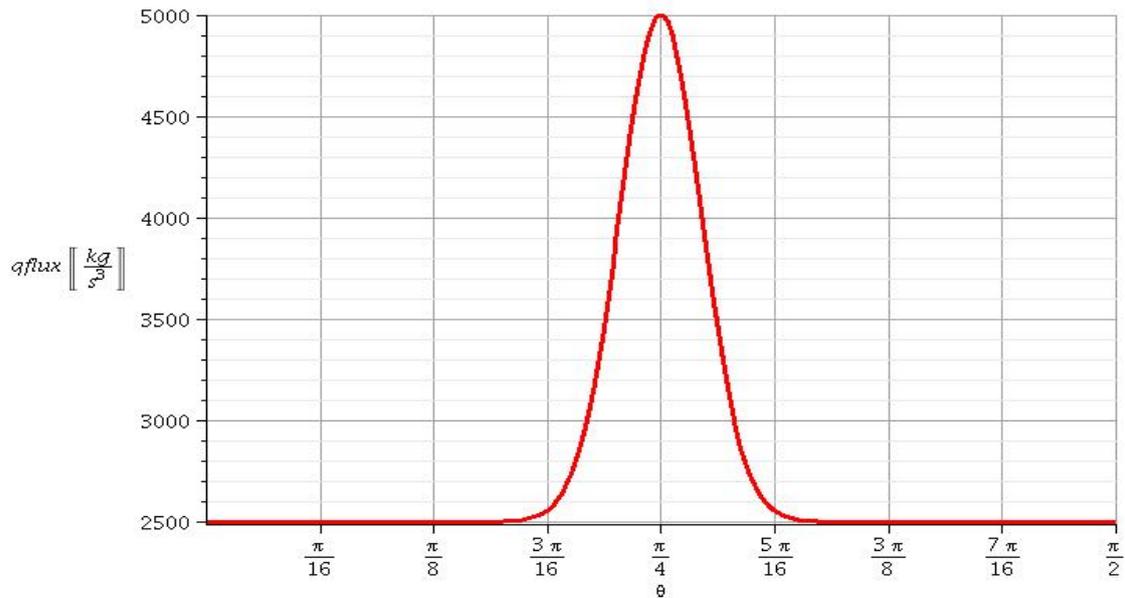
Abb. 2.34 gegeben, mit einem maximalen Wert von  $q_{max}^{in} = 5000 \frac{W}{m^2}$ . Für die Außenwand wird eine thermische Flussdichte der Form Abb. 2.35 angenommen, welche aus einer äußeren Wandkühlung resultiert. Die für die Dichte  $\rho = 7800 \frac{kg}{m^3}$  und die Wärmekapazität  $c_p = 449 \frac{J}{kgK}$  gesetzten Werte entsprechen der Stahllegierung mit der Bezeichnung SA533B1.

Die Werte für die Konduktivität  $\lambda$  werden in Abhängigkeit von der am Gitterpunkt vorliegenden, aktuellen Temperatur anhand der in Abb. 2.33 gegeben, interpolierten Werte in jedem Zeitschritt neu bestimmt.



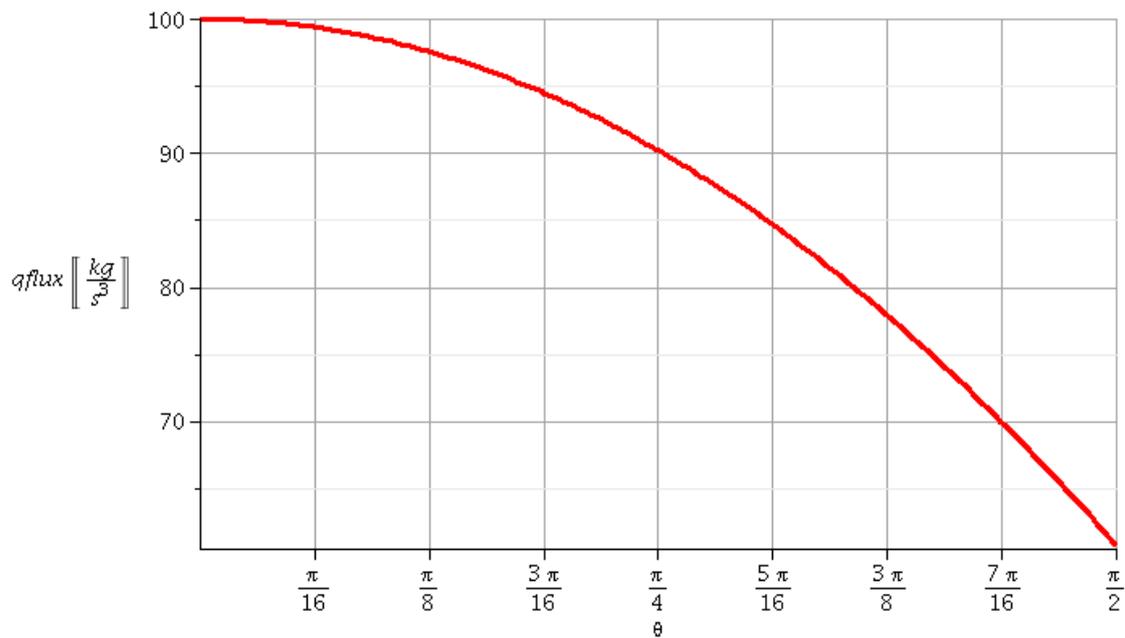
**Abb. 2.33** Temperaturabhängigkeit Konduktivität  $\lambda$  für Stahl (SA533B1)

Die Funktion  $\lambda(T)$  wurde durch Spline-Interpolation anhand der gegebenen Punktwerte berechnet



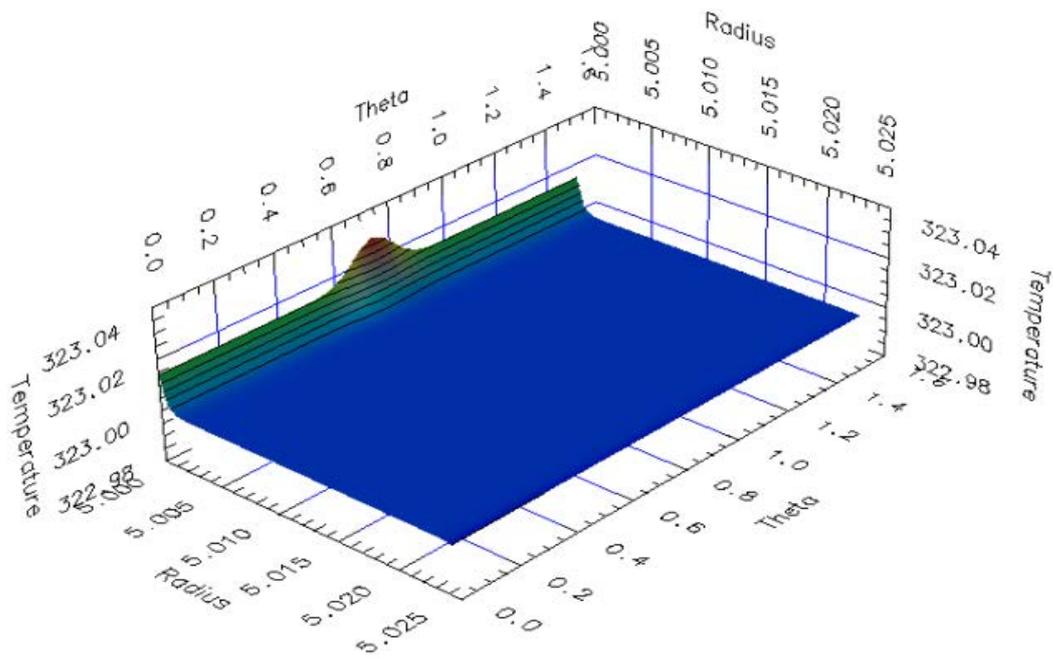
**Abb. 2.34** Gauß-Verteilung der inneren Wärmestromdichte (left bound)

$$q(\theta) = q_{max}^{in} \times \frac{1}{2} \left( 1 + \exp \left( -100 \times \left( \theta - \frac{\pi}{4} \right)^2 \right) \right) [W/m^2]$$

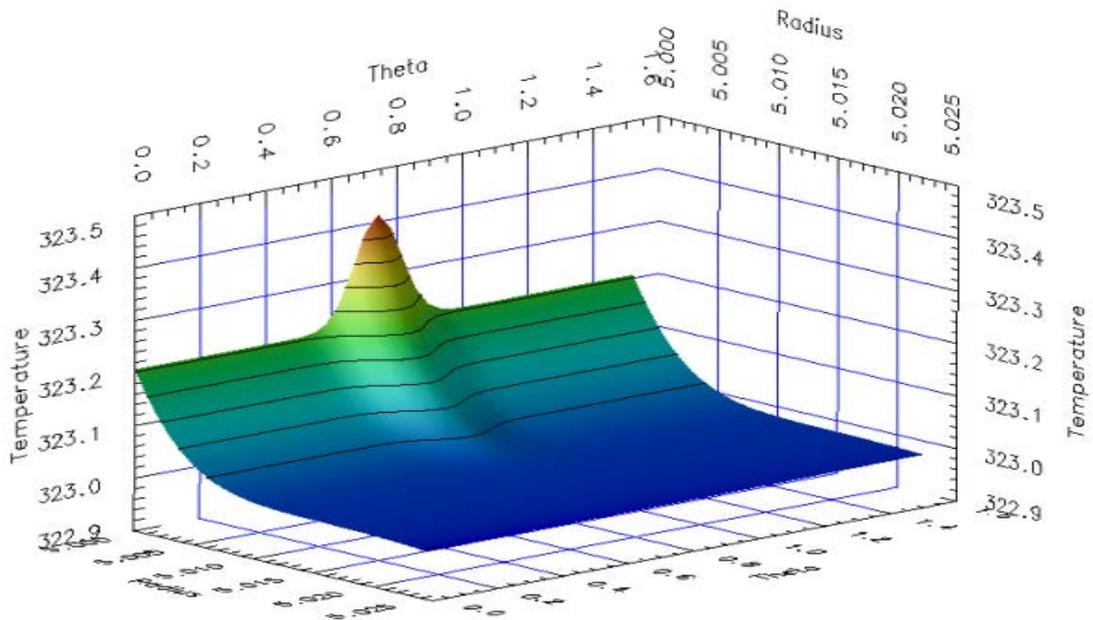


**Abb. 2.35** Quadratische Verteilfunktion für die äußere Wärmestromdichte

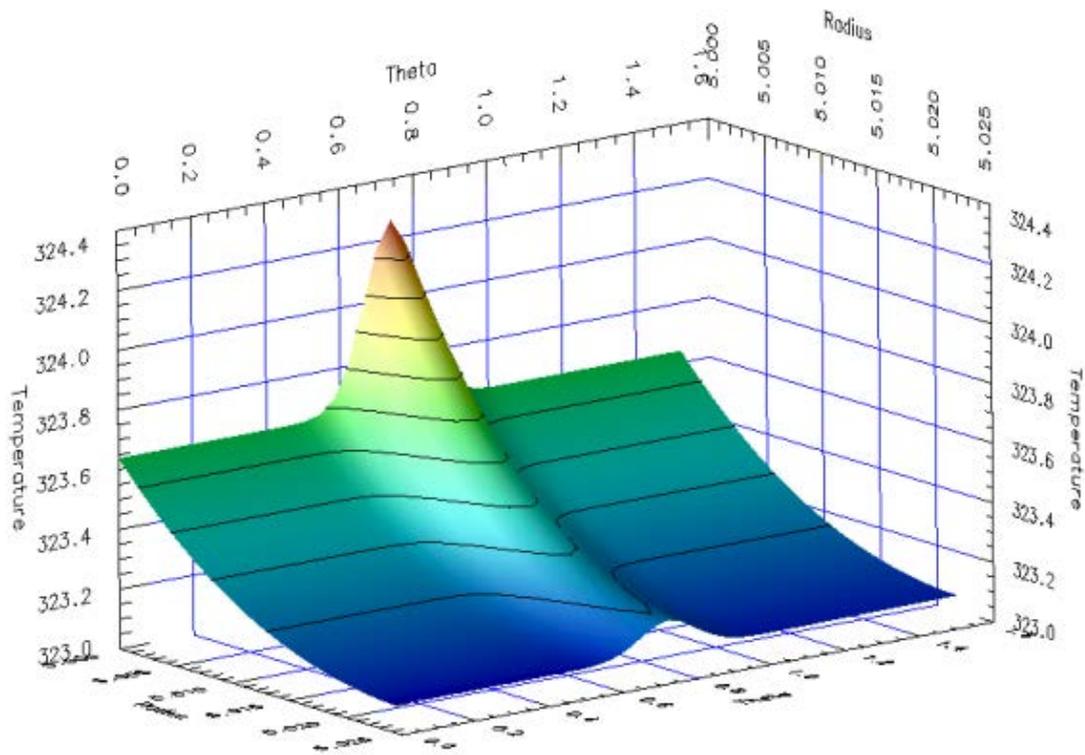
(right bound)  $q^{out}(\theta) = q_{max}^{out} \times \frac{\pi - \frac{1}{2}\theta^2}{\pi}$



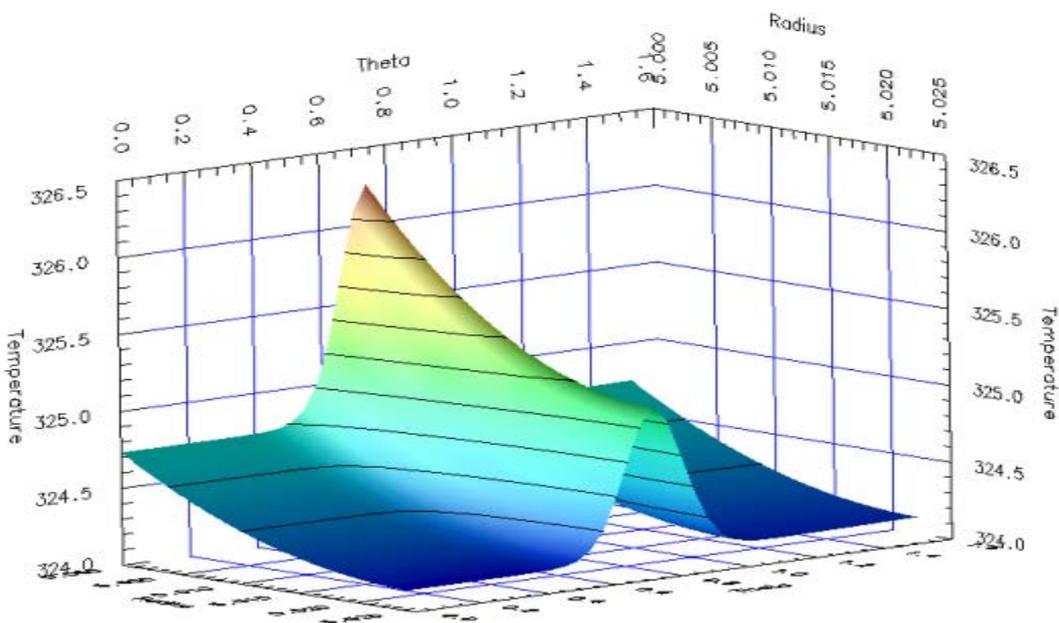
**Abb. 2.36** Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 0.01$  s



**Abb. 2.37** Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 1.0$  s



**Abb. 2.38** Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 10.0$  s



**Abb. 2.39** Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 50.0$  s

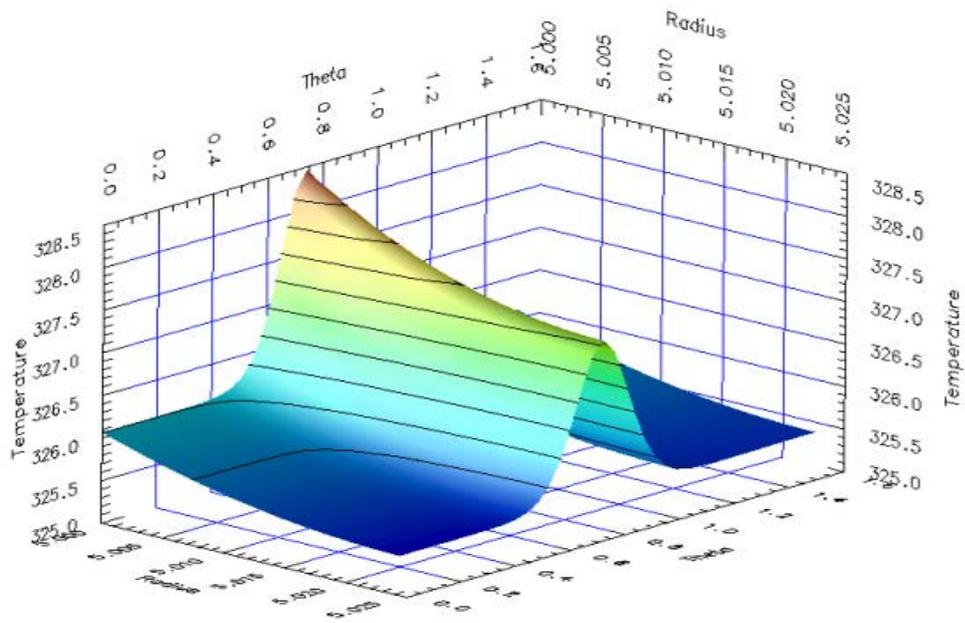


Abb. 2.40 Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 100.0 \text{ s}$

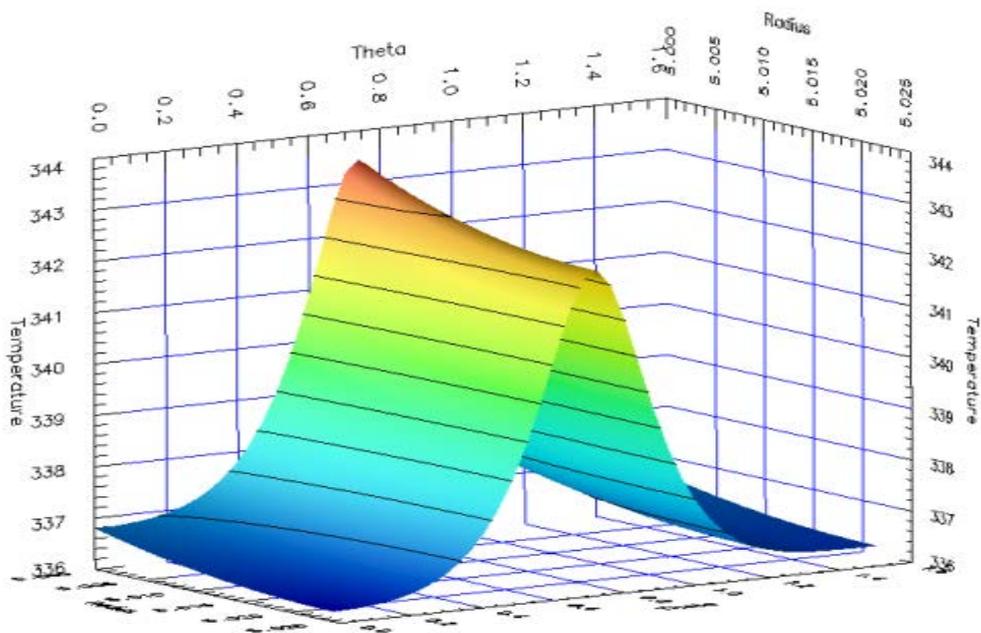
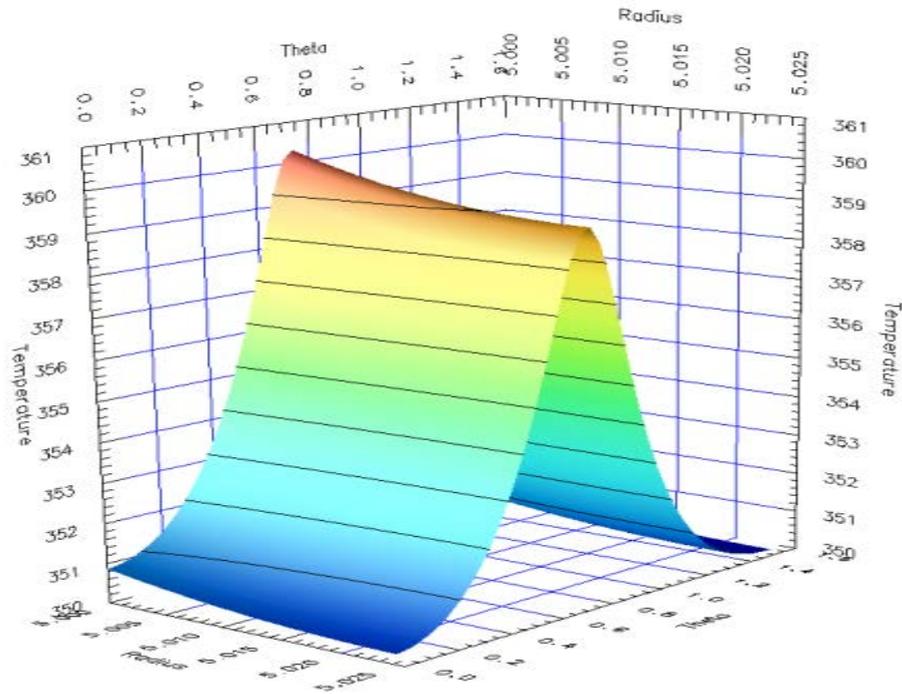


Abb. 2.41 Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 500.0 \text{ s}$



**Abb. 2.42** Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt  $t = 1000.0 \text{ s}$

#### 2.5.1.4 Zentrale Differenzen-Operatoren

Die auftretenden Terme  $\alpha_{i,j}$  in den Gleichungen 2-17 bis 2-22 stellen den temperaturabhängigen Diffusionskoeffizienten  $\alpha(T) = \alpha(T(r, \theta))$  dar. Dieser Term wird durch die Abbildung  $\alpha_{i,j} = \alpha(T_{i,j}^n)$  für jeden Zeitschritt aus interpolierten Werten neu berechnet.

$$\frac{2\alpha}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\alpha_{i,j} (T_{i+1,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1})}{\Delta_r (r_0 + i \Delta_r)} \quad 2-17$$

$$\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \frac{\alpha_{i,j} (T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1})}{\Delta_r^2} \quad 2-18$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\alpha_{i,j} \cot(\theta_j)}{(\theta_{j+1} - \theta_{j-1})(r_0 + i \Delta_r)^2} \\
&\quad \times \left( \frac{(\theta_j - \theta_{j-1})(T_{i,j+1}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1})}{\theta_{j+1} - \theta_j} \right. \\
\frac{\alpha \cot(\theta)}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \theta} &\quad \left. + \frac{(\theta_{j+1} - \theta_j)(T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j-1}^{n+1})}{\theta_j - \theta_{j-1}} \right) \quad 2-19
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} &= \frac{2 \alpha_{i,j}}{(\theta_{j+1} - \theta_{j-1})(r_0 + i \Delta_r)^2} \\
&\quad \times \left( \frac{(T_{i,j+1}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1})}{\theta_{j+1} - \theta_j} - \frac{(T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j-1}^{n+1})}{\theta_j - \theta_{j-1}} \right) \quad 2-20
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{4} \frac{(\alpha_{i+1,j} - \alpha_{i-1,j})(T_{i+1,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1})}{\Delta_r^2} \quad 2-21$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha}{\partial \theta} \frac{\partial T}{\partial \theta} &= \frac{((\theta_j - \theta_{j-1})(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j}) + (\theta_{j+1} - \theta_j)(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j-1}))}{(\theta_{j+1} - \theta_{j-1})^2 (r_0 + i \Delta_r)} \\
&\quad \times \frac{((\theta_j - \theta_{j-1})(T_{i,j+1}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}) + (\theta_{j+1} - \theta_j)(T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j-1}^{n+1}))}{(\theta_{j+1} - \theta_{j-1})^2 (r_0 + i \Delta_r)} \quad 2-22
\end{aligned}$$

Mit diesen Modellerweiterungen konnte der Versuch LIVE-6 erfolgreich simuliert werden.

## 2.5.2 Untersuchung der Wand-Nodalisation des unteren Plenums

Der Wärmeübergang in der Wand des unteren Plenums wird pseudo-zweidimensional mit einem expliziten Differentialverfahren berechnet. Die Diskretisierung der halb-sphärischen Wand erfolgt sowohl radial, als auch entlang der Winkel (axial). In den aktuellen Verfahren wird die halb-sphärische Wand entlang der Winkel in gleich große Winkelflächenelemente unterteilt, d.h. mit steigendem Winkel wird die Winkeldifferenz immer kleiner. Mit einer Annäherung werden zu den Winkelflächen jeweils Mantelflächen von zylindrischen Flächen zugewiesen, was die Nodalisation mit konstanten Elementlängen ermöglicht. Dadurch wird zu jedem axialen Volumenelement (Node) eine konstante Länge und ein Polarwinkel zugeordnet /BAL 12/. Des Weiteren werden die axialen Nodes radial weiter unterteilt. Die Differentialgleichung wird in radialer Richtung diskretisiert und für jedes axiale Node eindimensional mit folgenden Randbedingungen gelöst:

- einfließender Wärmestrom vom Schmelzpool (infolge der Nachzerfallsleistung) auf der linken Seite und
- ausfließender Wärmestrom abhängig von den Bedingungen in der Reaktorgrube des Containments (z. B. vorhandene Wasser) auf der rechten Seite.

Die eindimensionale Lösung erfolgt mit einem expliziten Verfahren in jedem Zeitschritt für jedes axiale Node. Dabei wird die Temperatur in jedem Volumenelement berechnet.

Die Feinheit der Nodalisation spielt in dem Differentialverfahren eine wichtige Rolle. Aktuell wird anhand der bisherigen Analysen eine Wandauflösung zwischen 30 und 50 Elementen axial und zwischen 5 und 10 Elementen radial empfohlen. Der Effekt der Wandauflösung außerhalb der empfohlenen Werte wurde untersucht, um die aktuellen Nodalisationsverfahren zu verifizieren und um die Notwendigkeit von neuen Nodalisationsverfahren zu ermitteln. Die Sensitivitätsanalysen wurden anhand der drei Versuche LIVE-6, LIVE-10 und LIVE-11 sowie dem Modell eines generischen DWR durchgeführt. Hierbei wurden entsprechend der Modelle vier unterschiedliche Szenarien untersucht:

- Schmelzpool mit Stratifizierung (Berücksichtigung der Ansammlung der leichten metallischen Anteile oberhalb des oxidischen Schmelzpool) mit erzwungener Außenkühlung (mittels einer Pumpe),

- homogener Schmelzpool mit erzwungener Außenkühlung,
- homogener Schmelzpool mit konvektiver Außenkühlung und
- Schmelzpool mit Stratifizierung in realem Maßstab und mit realen Randbedingungen.

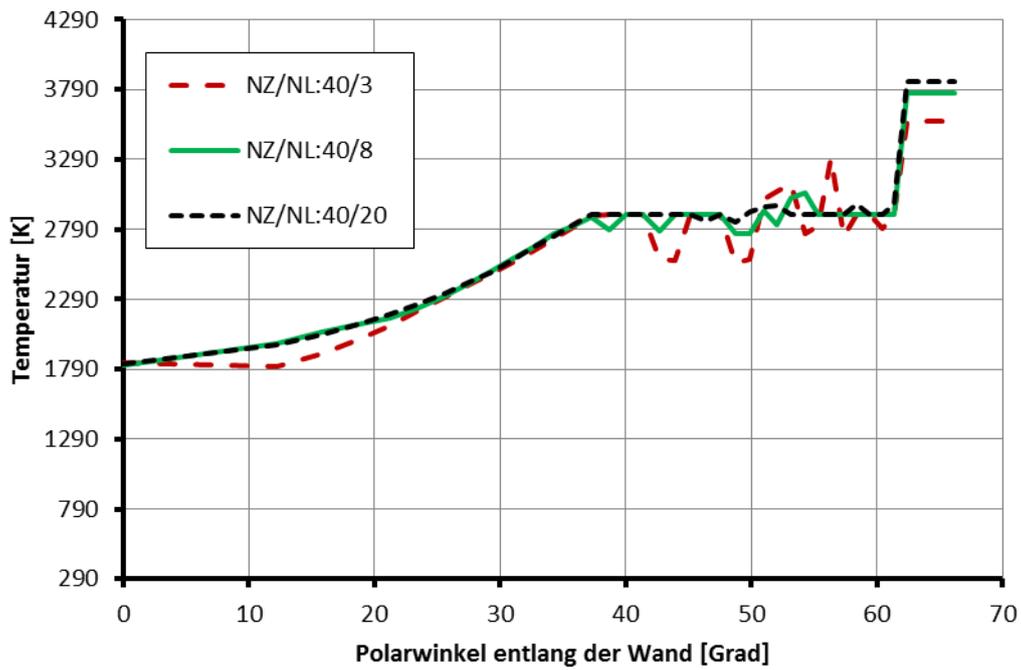
Während der Simulationen wurde die Nodalisierung in radialer Richtung mit Unterteilung in 3 bis 20 Volumenelemente untersucht.

### 2.5.2.1 Analysen mit DWR Modell

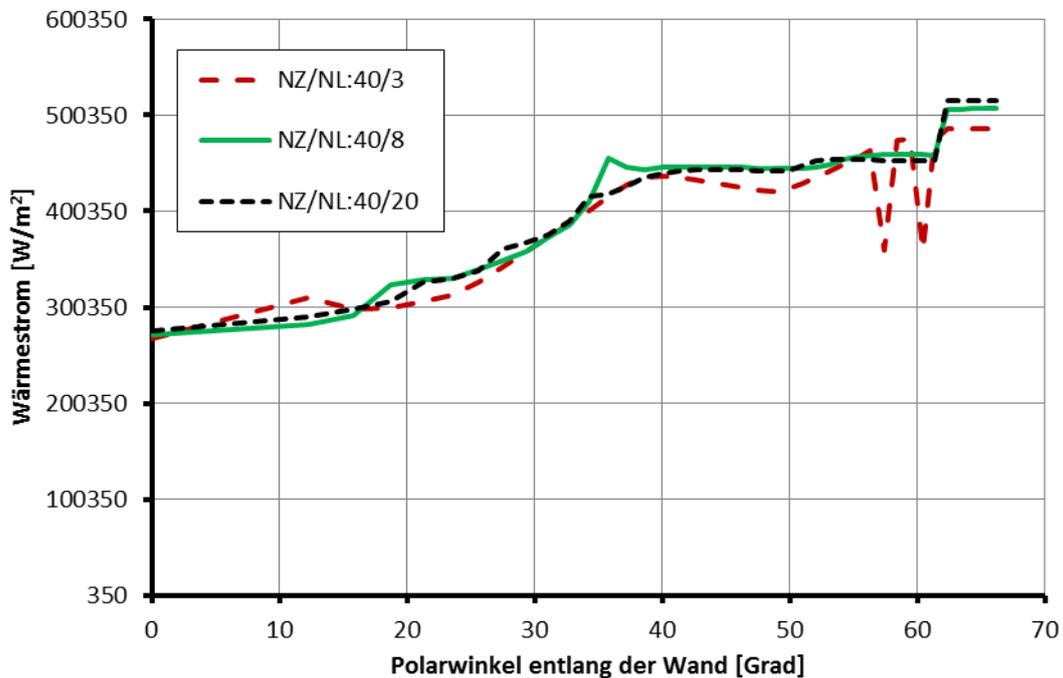
Zur Untersuchung des Einflusses der radialen Wandauflösung bei möglichst realistischen Bedingungen wurde das untere Plenum eines typischen DWR nachgerechnet. Für den Radius des unteren Plenums wurden 2 m gewählt, als Wandstärke dabei 150 mm. Die Innenwand des unteren Plenums wurde bis zu einer Höhe von 65 Grad mit Schmelze aufgefüllt. Außerdem wurde ein stratifizierter Schmelzpool mit einer Nachzerfallsleistung von ca. 14 MW modelliert.

Die Stand-alone-Simulationen mit AIDA wurden analog zu den Simulationen der LIVE-Versuche quasi-stationär mit denselben Randbedingungen, jedoch mit unterschiedlichen radialen Wandauflösungen durchgeführt. Die Wand wurde radial in 3, 8 bzw. 20 Nodes unterteilt. Die Breite eines Volumenelementes entspricht hierbei 50 mm bei einer Auflösung von drei Nodes. Damit ist sie wesentlich höher als bei den LIVE-Simulationen. Die berechneten Temperaturen an der Innenwand sind in Abb. 2.43 dargestellt.

Abb. 2.43 zeigt, dass sich zwischen den Ergebnissen mit dem grob und dem fein (d.h. mit der empfohlenen Anzahl von Volumenelementen) nodalisierten Modell deutliche lokale Temperaturunterschiede feststellen lassen. Die größten Abweichungen können am oberen Bereich, etwa in Höhe der oberen Schicht des stratifizierten Coriums (Metallschicht), beobachtet werden. Hier beträgt die Temperatur-Differenz ca. 200 °C. Des Weiteren führt die Verfeinerung der radialen Auflösung zu einem verbesserten, stabileren Temperaturverlauf.



**Abb. 2.43** Temperaturen an der Innenwand des unteren Plenums bei DWR Simulationen mit diverser radialer Wandauflösung



**Abb. 2.44** Wärmestrom durch die Wand des unteren Plenums in DWR Simulationen mit diverser radialer Wandauflösung

Abb. 2.44 zeigt die Abhängigkeit der Wärmestrom-Berechnung von der radialen Wandauflösung. Die Simulationen aller drei Wandauflösungen führten zu qualitativ ähnlichen Wärmestromverteilungen entlang der Wand, aber auch hier zeigen die Ergebnisse deutlich, dass die grobe Nodalisierung Schwankungen bei den Ergebnissen verursacht.

Die Analysen anhand der LIVE-Versuche sowie anhand des DWR-Modells haben ergeben, dass die aktuell empfohlene Wandauflösung zu guten Ergebnissen führt. Dabei wurde das Standard-Berechnungsverfahren von AIDA für die Bestimmung der Wärmeleitung in der Wand verwendet. Der Effekt der radialen Wandauflösung spielt erst ab größeren geometrischen Modellen oder bei in der Zeit stark wechselnden physikalischen Phänomenen eine wesentliche Rolle. In diesen Fällen (insbesondere bei Kombination von beiden Fällen) ist eine möglichst feine Nodalisierung zu empfehlen. Zusammenfassend lässt sich aber feststellen, dass eine weitere Verfeinerung oder eine Erweiterung der Nodalisierungsverfahren nicht erforderlich ist.

## **2.6 Erweiterungen bei der Berechnung des Nuklidinventars**

Hat man bei Reaktorrechnungen in den verschiedenen Kernringen unterschiedliche Brennstoffzusammensetzung, so musste man bisher die dazugehörigen Isotopenspektren in getrennten ATHLET-CD/OREST Rechnungen erzeugen. Die Module OREST und FIPISO wurden deshalb derart modifiziert, dass OREST und FIPISO in einem Rechengang mehrfach gestartet werden können.

### **2.6.1 Wiederholter Aufruf von OREST**

OREST ist der Modul innerhalb von ATHLET-CD, der die kernphysikalischen Berechnungen durchführt. Er liefert bei gegebener Geschichte der Betriebsleistung die Isotopenspektren: Die Verteilung der Massen, der Leistungen und der Aktivitäten des Kerns, bzw. eines Teilkerns. OREST wird auch bei der Berechnung des kernphysikalischen Verhaltens des Primärkreises bei einem schweren Störfall eingesetzt.

Eine Modellschwäche des bisherigen Systems war es, dass mit einer OREST-Rechnung kein Kern berechnet werden konnte, der aus unterschiedlichen Materialien zusammengesetzt ist. Als Beispiel soll ein Kern dienen, der zum Teil aus Urandioxid-Elementen besteht, und des Weiteren aus MOX-Elementen ( $\text{UO}_2/\text{PuO}_2$ ).

Um zu ermöglichen, dass OREST mehrere Eingaben hintereinander verarbeiten kann, war es notwendig, alle Variablen auf ihren Anfangswert zurückzusetzen. Dafür mussten die Mehrzahl der OREST-Routinen überarbeitet werden.

Auch die Eingabe musste modifiziert werden. So wurde gleich nach dem Kontrollwort OREST ein Pseudokeyword INPUTNAM eingeführt. Unter dieser Bezeichnung können die unterschiedlichen Eingaben abgelegt werden. Die letzte Eingabe wird mit dem Pseudokeyword END abgeschlossen. Keywords innerhalb der einzelnen Eingaben müssen einen Zähler beinhalten, der auf die Eingabenummer verweist. Nur so ist es möglich, gleiche Keywords innerhalb eines Kontrollwortes anzusprechen (siehe Beispiel unten). Die Wiederholung gleicher Keywords ist notwendig, da sie teilweise auf chemische Elemente/Verbindungen verweisen, deren Namen in OREST-Bibliotheken abgelegt sind.

All diese Modifikationen müssen nur bei der Verarbeitung von mehreren Eingaben berücksichtigt werden. Alte Eingabedatensätze laufen nahezu unverändert weiter. In diese Datensätze muss nur das Pseudokeyword INPUTNAM eingefügt werden. Und unter dem Pseudokeyword PATHLT muss der Name der Nukliddatei (früher GRAMAT.FIX fest vorgegeben) angegeben werden. Diese Maßnahmen waren notwendig, da mit dem neuen System mehrere Nuklidausgabedateien erzeugt werden können. Ein gekürztes Eingabebeispiel soll die Vorgehensweise veranschaulichen (Neuerungen sind rot markiert):

```
C---- OREST
@
----- INPUTNAM
@
  INPUTUO2
  INPUTMOX
@
K---- INPUTUO2
.
.
.
'fskoedata/shu/run/nuclfil1'
.
.
.
```

K---- INPUTMOX

.  
.  
.

'/run/nuclfil2'

.  
.  
.

K---- END

## 2.6.2 FIPISO

Im normalen Leistungsbetrieb eines Kernreaktors gibt es eine ausgeprägte radiale Leistungsverteilung, rechnerisch meist erfasst durch die Angabe von radialen Leistungsfaktoren.

Diese radiale Leistungsverteilung hat verschiedene Ursachen. Neben der unterschiedlichen Anreicherung der Brennstäbe mit spaltbarem Material wird die Leistungsverteilung auch durch den Verlust von Spaltneutronen an den Rändern verursacht. Nach einem SCRAM wird die radiale Leistungsverteilung nur noch von der Nachzerfallswärme bestimmt und nicht mehr durch den Neutronenfluss. Dies führt zu einer Abflachung der radialen Kurve, da die Nachzerfallskurven nur von der Vorgeschichte der Brennstäbe abhängen. Da die Nachzerfallsleistung von Isotopen der Elemente dominiert wird, deren Halbwertzeiten im Stundenbereich liegen, ist deren Verhalten entscheidend (Jod, Xenon, Ausnahme: Cäsium). Bei den Isotopen der Elemente Jod und Xenon tritt während des Leistungsbetriebs relativ schnell ein Gleichgewichtszustand ein.

Deshalb ist es wichtig, während eines schweren Störfalls in einem Kernreaktor neben der zeitlichen Veränderung der Nachzerfallsleistung auch deren örtliche Veränderung zu berücksichtigen. Um dieses programmtechnisch darzustellen, war eine Überarbeitung des Moduls FIPISO notwendig.

Um den Datenaustausch mit COCOSYS einfach zu gestalten, war es notwendig dafür zu sorgen, dass alle Kernregionen eine einheitliche Struktur bei den Isotopenspektren haben. Um dies sicherzustellen, wird in einem ersten Schritt vom Programm ein Master-Spektrum erzeugt, das alle Isotopen der unterschiedlichen Kernregionen enthält. Dieses Spektrum wird als Vergleich bei der Berechnung der einzelnen ortsabhängigen Spektren herangezogen. Als Ergebnis erhält man:  $I_{ACT_{Master}} = I_{act_{R1}} = I_{act_{R2}} = I_{act_{RN}}$ .

Was hier für die Aktiniden dargestellt ist, gilt auch für die leichtflüchtigen Isotope (ILITE) und für die Spaltprodukte (IFP).

Um die Eingabe für den Modul FIPISO übersichtlicher zu gestalten, wurden die Eingabegrößen ISTEP und ITIME (Nummer des HAMMER-Zeitschritts bzw. des OREST-Zeitschritts) ersetzt durch die Eingabe des Abbrandes in der Kernregion.

Hierfür wurden neue Keywörter eingeführt, die es dem Benutzer ermöglichen, die von OREST berechneten kernphysikalischen Abbrandbibliotheken für jede radiale Ebene einzugeben. Die Randbedingungen für FIPISO (FIPREM- und ATHLET-Daten) wurden derart modifiziert, dass sie das örtliche Verhalten des Reaktors repräsentieren.

Als Folge der veränderten Eingabe erhält der Benutzer auch eine detailliertere Ausgabe, die das radial unterschiedliche Leistungsverhalten widerspiegelt. Inwieweit diese Änderungen Einfluss auf das Schadensbild im Kern bei schweren Störfällen nimmt, muss noch untersucht werden.

## **2.7 Weiterentwicklung der Modelle zum Spaltproduktverhalten**

Mit dem Modul FIPREM wird in ATHLET-CD die Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Kern in den Kühlkreislauf berechnet. Der Transport der Spaltprodukte und Aerosole im Kühlkreislauf wird dann mit dem Modul SOPHAEROS simuliert.

### **2.7.1 Modellierung der Spaltproduktfreisetzung**

Durch die durchgeführte Erweiterung der Module OREST und FIPISO (s. Kap. 2.6) werden jetzt detailliertere Daten zur Verfügung gestellt und damit auch eine genauere Abbildung der Freisetzung in FIPREM ermöglicht. Um diese Möglichkeit zu nutzen, wurde die Anzahl der Spaltproduktgruppen von 34 auf 53 erweitert, jedoch nur für Fälle, in denen FIPREM zusammen mit FIPISO genutzt wird.

Da der in den bisherigen Versionen von ATHLET-CD verfügbare Diffusionsansatz in FIPREM keine Verbesserung in der Modellierung liefert, wurde der Diffusionsansatz entfernt, so dass jetzt nur noch der Ratenansatz vorhanden ist. Damit entfällt auch die Auswahl-Variable IFMOD im Eingabedatensatz.

### 2.7.1.1 Erweiterung der Modellierung der Spaltproduktfreisetzung bei verschiedenen chemischen Bedingungen

Für die Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus dem Reaktorkern in den Kühlkreislauf wird im Modul FIPREM ein Ratenansatz verwendet, der auf einem Arrhenius-Ansatz basiert. Die Freisetzung hängt wesentlich von der Temperatur ab, bei einigen Spaltprodukten werden jedoch auch die Partialdrücke berücksichtigt. In der Folge werden die freigesetzten Spaltprodukte dann von FIPREM an das Modul SOPHAEROS übergeben, welches den Transport im Kühlkreislauf unter Berücksichtigung chemischer und thermohydraulischer Effekte simuliert.

Allerdings spielen bei einigen Spaltprodukten auch die chemischen Bedingungen eine große Rolle hinsichtlich der Freisetzung, was in der bisherigen Modellierung innerhalb von FIPREM weitgehend unberücksichtigt geblieben ist. So zeigen beispielsweise Experimente, dass das normalerweise schwer flüchtige Ruthenium unter stark oxidierenden Bedingungen erheblich freigesetzt wird /PON 10b/, /PON 10c/, /GAL 14/, /MUN 07/. Um solche Effekte berücksichtigen zu können, wurden die Modelle in FIPREM für die Elemente Barium, Molybdän und Ruthenium erweitert. Bei Barium und Molybdän wurde dabei auf eine Modellierung zurückgegriffen, die von P. Kruse vorgeschlagen wurde /KRU 13/. Im Falle von Ruthenium wurde unter Berücksichtigung aktueller Forschungsergebnisse eine neue Modellierung implementiert. Verwendung fanden dabei vor allem Experimente in der VERDON-Versuchsanlage, bei denen die Freisetzung von Spaltprodukten unter verschiedenen chemischen Bedingungen untersucht wurde /GAL 14/.

Zunächst wurden die Versuche VERDON-1 und VERDON-2 mit der Version ATHLET-CD 3.0A simuliert /LOV 14/. Anschließend wurden die Modelle zur Freisetzung von Barium, Molybdän und Ruthenium verbessert und die Versuche mit der aktualisierten Version von ATHLET-CD erneut simuliert /LOV 15/.

#### Ruthenium

Das Element Ruthenium gehört zu den schwerflüchtigen Spaltprodukten, aber bei oxidierenden chemischen Bedingungen können sich verschiedene RuOx-Verbindungen bilden, die sich wesentlich flüchtiger verhalten. Um den Einfluss der verschiedenen RuOx-Verbindungen auf die Freisetzung zu berücksichtigen, ist die Berechnung ihrer Partialdrücke notwendig. Bei der Oxidation von Ruthenium können verschiedene Ver-

bindungen entstehen, von denen folgende berücksichtigt wurden: Ru, RuO, RuO<sub>2</sub>, RuO<sub>3</sub>, RuO<sub>4</sub>.

Der Gesamtdruck der verschiedenen RuO<sub>x</sub>-Verbindungen ist der Minimalwert der beiden Gleichungen A+B:

$$A = K_1 + K_2 \cdot (pO_2)^{0,5} + K_3 \cdot pO_2 + K_4 \cdot (pO_2)^{1,5} + K_5 \cdot (pO_2)^{2,0}$$

$$B = K_6 \cdot (pO_2)^{-1,0} + K_7 \cdot (pO_2)^{-0,5} + K_8 + K_9 \cdot (pO_2)^{0,5} + K_{10} \cdot pO_2$$

Die Werte für die Konstanten sind in /LOV 15/ erläutert. Der so erhaltene Druck von Ruthenium wird in die ursprüngliche Gleichung für die Freisetzung in ATHLET-CD eingebaut:

$$\text{Freisetzungsr} = K_x \cdot T^{0,75} \cdot \text{Min}(A,B) / p_{\text{sys}}$$

wobei

- T die Temperatur [K],
- p<sub>sys</sub> der Systemdruck [bar],
- pO<sub>2</sub> der Partialdruck des Sauerstoffs [bar] und
- K<sub>x</sub> die Elementarkonstante für Ruthenium ist.

Der Wert der Elementarkonstante K<sub>x</sub> für Ruthenium wurde empirisch, unter Verwendung der Daten aus dem Versuch VERDON-2, ermittelt, da in der wissenschaftlichen Literatur dieser Wert eine Unsicherheit von mehreren Größenordnungen aufweist. Der so bestimmte Wert beträgt

$$K_x = 1,9 \cdot 10^{-4}$$

Der Partialdruck des Sauerstoffs wurde mit folgender Formel berechnet:

$$pO_2 = p_{\text{sys}} \cdot W_{O_2} / W_{\text{TOT}}$$

wobei

- W<sub>O<sub>2</sub></sub> der molare Massenstrom von Wasser [mol/s] und
- W<sub>TOT</sub> der molare Massenstrom des Fluids [mol/s] ist.

Der Partialdruck von Sauerstoff wird auch dann berechnet, wenn vom Anwender im Input Luft statt Sauerstoff definiert wird. Dabei wird angenommen, dass der Sauerstoffanteil in der Luft 21% beträgt. Wenn im System kein Sauerstoff vorhanden ist, dann ver-

wendet ATHLET-CD weiterhin das bisher benutzte Freisetzungsmodell für Ruthenium (NMODI=3).

## Barium und Molybdän

Die Freisetzung von Barium und Molybdän hängt stark von den chemischen Bedingungen um den Brennstab ab. Diese Abhängigkeit wurde auch in den VERCORS- und VERDON-Experimenten nachgewiesen. Unter oxidierenden Bedingungen entstehen beim Element Barium schwerflüchtige, beim Element Molybdän leichtflüchtige Verbindungen. Die Eigenschaften der neu entstehenden Verbindungen müssen auch in der Modellierung berücksichtigt werden. Als Basis bei der Weiterentwicklung der Freisetzungsmodelle von Barium und Molybdän wurde das Modell aus der Doktorarbeit von Philipp Kruse verwendet /KRU 13/. In diesem Modell wird angenommen, dass bei der Freisetzung nur das Element (Ba oder Mo) und die am häufigsten entstehende Oxid-Verbindung (MoO oder BaO<sub>3</sub>) eine Rolle spielen. Der Anteil von Ba/BaO und Mo/MoO<sub>3</sub> wird maßgeblich von den chemischen Bedingungen beeinflusst.

Der bei der Berechnung der Freisetzungsrates benötigte gesamte Partialdruck von Ba und Mo wird mit Hilfe dieser Formeln berechnet:

- $p(\text{Ba}+\text{BaO}) = \mu_{\text{Ba}} \cdot p(\text{Ba}) + (1 - \mu_{\text{Ba}}) \cdot p(\text{BaO})$
- $p(\text{Mo}+\text{MoO}_3) = \mu_{\text{Mo}} \cdot p(\text{Mo}) + (1 - \mu_{\text{Mo}}) \cdot p(\text{MoO}_3)$

wobei

- $p(\text{Ba}+\text{BaO})$  der gesamte Partialdruck von Ba und BaO,
- $p(\text{Mo}+\text{MoO}_3)$  der gesamte Partialdruck von Mo und MoO<sub>3</sub>,
- $p(X)$  der Partialdruck von Ba, Mo, BaO bzw. MoO<sub>3</sub> und
- $\mu_x$  der Stoffmengenanteil von Ba bzw. Mo ist.

Der Stoffmengenanteil kann einen Wert zwischen 0 und 1 annehmen, abhängig von den chemischen Bedingungen.  $\mu_x$  gibt an, wie viel Ba bzw. Mo in seiner Elementform erhalten bleibt und nicht zu BaO bzw. MoO<sub>3</sub> reagiert. Der Wert von  $\mu_x$  wird empirisch bestimmt. In der Arbeit von Philipp Kruse wurden die in Tab. 2.7 angegebenen Werte vorgeschlagen:

**Tab. 2.7** Werte von  $\mu_x$  bei verschiedenen chemischen Bedingungen

Chemische Bedingung			
	Reduzierend	Neutral	Oxidierend
$\mu_{Ba}$	0,8	0,41	0,2
$\mu_{Mo}$	0,999	0,975	0,925

### Bestimmung der chemischen Bedingung

Neben der jeweiligen Freisetzungsrates wurden auch Auswahlkriterien implementiert, die automatisch zwischen reduzierenden, neutralen und oxidierenden Bedingungen unterscheiden und die entsprechenden Freisetzungsrates auswählen. Die dabei verwendeten Kriterien sind in Tab. 2.8 dargestellt.

**Tab. 2.8** Werte von  $\mu_x$  in Abhängigkeit des umliegenden Fluids

H <sub>2</sub> O	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	Chemische Bedingung	$\mu$ Werte
	x		Sehr stark oxidierend (1)	$\mu_{Mo}=0,93$ $\mu_{Ba}=0,09$
x	x		Stark oxidierend (2)	$\mu_{Mo}=0,94$ $\mu_{Ba}=0,12$
x			Stark oxidierend (3)	$\mu_{Mo}=0,95$ $\mu_{Ba}=0,15$
x	x	x	Oxidierend (4)	$\mu_{Mo}=0,96$ $\mu_{Ba}=0,2$
	x	x	Mittelmäßig oxidierend (5)	$\mu_{Mo}=0,97$ $\mu_{Ba}=0,25$
x		x	Wenig oxidierend (6)	$\mu_{Mo}=0,97$ $\mu_{Ba}=0,25$
			Neutral (7)	$\mu_{Mo}=0,975$ $\mu_{Ba}=0,41$
		x	Reduzierend (8)	$\mu_{Mo}=0,999$ $\mu_{Ba}=0,8$

Bei den Bedingungen (4), (5), und (6) liegen Gemische aus H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub> und H<sub>2</sub> vor. Um in diesen Fällen die passende chemische Bedingung zu finden, wurden zusätzlich die

Partialdrücke von H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub> und H<sub>2</sub> verwendet und im Programm-Code Schaltkriterien hinterlegt, die in Tab. 2.9 zusammengefasst sind.

**Tab. 2.9** Schalterkriterien zwischen chemischen Bedingungen

Bedingung	(4)	(5)	(6)
$(p_{O_2}+p_{H_2O})/p_{H_2} < 2$	$\mu_{Mo}=0,975$ $\mu_{Ba}=0,41$		
$(p_{O_2}+p_{H_2O})/p_{H_2} > 10$	$\mu_{Mo}=0,94$ $\mu_{Ba}=0,12$		
$10 > (p_{O_2}+p_{H_2O})/p_{H_2} > 2$	$\mu_{Mo}=0,96$ $\mu_{Ba}=0,20$		
$p_{O_2}/p_{H_2} < 2$		$\mu_{Mo}=0,975$ $\mu_{Ba}=0,41$	
$p_{O_2}/p_{H_2} > 10$		$\mu_{Mo}=0,93$ $\mu_{Ba}=0,09$	
$10 > p_{O_2}/p_{H_2} > 2$		$\mu_{Mo}=0,97$ $\mu_{Ba}=0,25$	
$p_{H_2O}/p_{H_2} < 2$			$\mu_{Mo}=0,999$ $\mu_{Ba}=0,80$
$p_{H_2O}/p_{H_2} > 10$			$\mu_{Mo}=0,95$ $\mu_{Ba}=0,15$
$10 > p_{H_2O}/p_{H_2} > 2$			$\mu_{Mo}=0,97$ $\mu_{Ba}=0,30$

Zur Berechnung der Partialdrücke von Ba, Mo, BaO und MoO<sub>3</sub> wird die Antoine-Gleichung verwendet. Die dabei benötigten Konstanten wurden von /KRU 13/ übernommen und sind in Tab. 2.10 zusammengefasst.

**Tab. 2.10** In der Antoine-Gleichung verwendete Konstanten

Element	Konstanten		
	A	B	C
Ba	8,2802	17913,9073	-6,7
BaO	16,3695	50426,6135	0
Mo	13,2826	62038,8523	-247,47
MoO <sub>3</sub>	7,3030	6673,2605	506,15

Unter Verwendung der bisher dargestellten Gleichungen und Konstanten kann die Freisetzungsrates berechnet werden:

$$- \text{ Freisetzungsrates} = K_x \cdot T^{0,75} \cdot p_{x,\text{tot}}/p_{\text{sys}}$$

wobei

- $K_x$  die Elementarkonstante ( $K_{\text{Ba}}=1,2 \cdot 10^{-7}$ ,  $K_{\text{Mo}}=3,5 \cdot 10^{-7}$ ),
- $T$  die Temperatur [K],
- $p_{x,\text{tot}}$  der gesamte Partialdruck eines Elements [bar] und
- $p_{\text{sys}}$  der Systemdruck [bar] ist.

Das hier dargestellte Freisetzungsmodell für Ba und Mo wird erst ab 1500°C aktiviert, da die Oxidationsvorgänge erst bei höherer Temperatur auftreten /BRI 10/.

Die für Ruthenium, Barium und Molybdän neu implementierten Modelle wurden anhand der Versuche VERDON-1, VERDON-2 und PHEBUS-FPT1/FPT2/FPT3 getestet.

## 2.7.2 Modellierung des Spaltprodukttransports

Mit dem Modul SOPHAEROS kann der Transport von Spaltprodukten und Aerosolen im Kühlkreislauf simuliert werden. Das Modul wird vom Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) in Frankreich entwickelt und in entsprechend angepasster Form in ATHLET-CD verwendet. Wichtige Input-Größen sind thermohydraulische Daten von ATHLET, Oberflächentemperaturen sowie die mit FIPREM berechneten Freisetzungen aus dem Kern. Weiterhin finden Daten aus FIPISO Eingang.

Bisher wurde die Version von SOPHAEROS verwendet, die in ASTEC V1.3 enthalten ist. Die Ergebnisse, die mit dieser Version erzielt werden können, sind zwar von hinrei-

chender Qualität, um realistische Aussagen über den Transport von Spaltprodukten und Aerosolen treffen zu können, wie beispielsweise in der Validierung von ATHLET-CD die Simulation des Versuchs Phébus FPT3 zeigt, die im Rahmen eines SARNET2-Benchmarks durchgeführt wurde /WEB 11, AUS 13c/. Allerdings sind in neueren Versionen von SOPHAEROS zahlreiche Erweiterungen und Verbesserungen enthalten, die auch in vielen Fällen die Qualität von Simulationen mit ATHLET-CD in Bezug auf den Radionuklidtransport im Kühlkreislauf deutlich verbessern können, was gerade in gekoppelten Rechnungen mit COCOSYS eine große Rolle spielt.

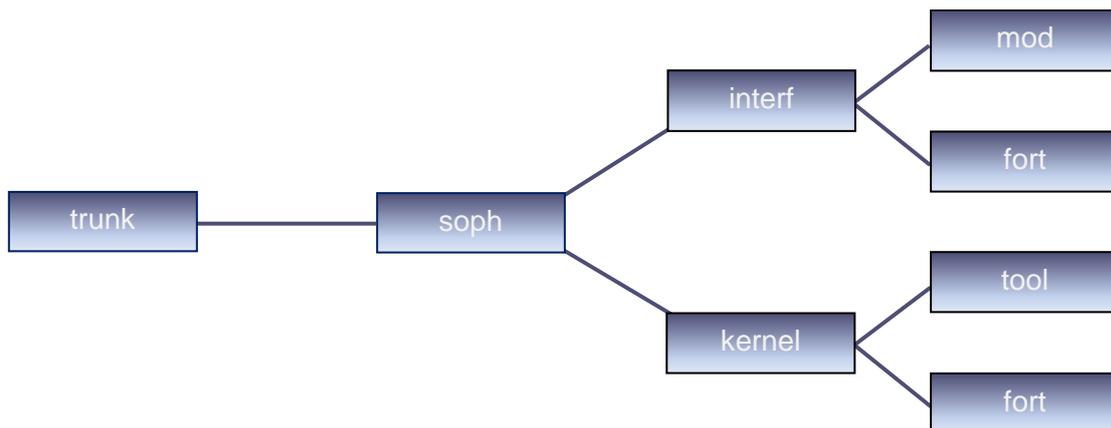
Nachdem vor etwa zehn Jahren SOPHAEROS erstmalig in ATHLET-CD implementiert worden war, wurde für die neuen ATHLET-CD Versionen beschlossen, nicht mehr die alte Version von SOPHAEROS zu aktualisieren, sondern eine neue aus ASTEC 2.0 zu extrahieren. Dieser Beschluss wurde auch dadurch unterstützt, dass mit der gekoppelten Version von ATHLET-CD und COCOSYS immer häufiger auch Anlagenrechnungen durchgeführt werden sollen und nicht nur Versuchsnachrechnungen. Bei Anlagenrechnungen ist es notwendig, den Strömungspfad der Radionuklide und deren chemischen Verbindungen genau zu beschreiben, d.h. mit allen möglichen Pfaden und Verzweigungen. Das ist mit der bisherigen Version von SOPHAEROS nicht hinreichend möglich. Dadurch, dass Verzweigungen nicht detailliert dargestellt werden können, gibt es in der bisherigen Version auch Probleme mit den in den letzten Jahren entwickelten kernphysikalischen Modellen (OREST, FIPISO). Da nur ein Teil des Rohrleitungssystems eines Kraftwerks vom dem in ATHLET-CD implementierten SOPHAEROS dargestellt werden kann, verteilen sich die vom Kern während eines schweren Unfalls freigesetzten Massen (Isotope) auf zu kleine Räume, was zu einer Überschätzung der Fluid- und Wandtemperaturen führt.

Ziel der neuen Implementierung ist es aber auch, die Benutzer zu entlasten, indem die Anzahl der einzugebenden Parameter reduziert wird und indem bei der Darstellung des Fluidkreislaufs verstärkt auf ATHLET-Daten zurückgegriffen wird.

Weiterhin soll es mit der neuen SOPHAEROS-Version möglich sein, bestimmte Rechenschritte parallel auszuführen, so dass sich die Rechengeschwindigkeit in vielen Fällen spürbar verbessern kann.

### 2.7.2.1 Programm und Datenstruktur

Die Programmstruktur wurde bei der neuen Version so gewählt, dass spätere Modifikationen und Erweiterungen einfach einzubinden sind. Wie schon in der ATHLET-CD Vorgängerversion hat SOPHAEROS das eigene Verzeichnis „soph“ in der ATHLET Hierarchie. Das Verzeichnis „soph“ hat zwei Unterverzeichnisse: „interf“ und „kernel“. Das Verzeichnis „interf“ gliedert sich in „mod“ und „fort“, „kernel“ in „tool“ und „fort“ (s. Abb. 2.45). Alle Programme, die in dem Unterverzeichnis „interf“ und seinen Folgeverzeichnissen sind, sind Eigenentwicklungen. Sie beschreiben die Kopplung zwischen den ATHLET-CD Modulen ATHLET, ECORE, FIPREM und FIPISO sowie SOPHAEROS. In diesen Programmen werden auch alle Datenfelder angelegt und verwaltet. Im Verzeichnis „kernel“ sind die Programme von SOPHAEROS abgelegt, die die Physik beschreiben. Sie sind direkt aus ASTEC entnommen und nur geringfügig modifiziert. Sie lassen sich also ohne große Mühe austauschen, falls neue Programmmodifikationen vorliegen.



**Abb. 2.45** Struktur von SOPHAEROS

Alle direkt von ASTEC übernommenen Programme im „kernel“ Verzeichnis sind von der äußeren Form her frei formatiert geschrieben. Dadurch sind sie unübersichtlich und schwer zu pflegen. Weiterhin widersprechen sie in dieser Form den ATHLET-Programmierregeln. Eine Umstellung wäre aber sehr zeit- und fehlerintensiv und der einfache Austausch der Routinen zwischen ATHLET-CD und ASTEC wäre dann auch nicht mehr möglich.

In dem neuen Verzeichnis „tool“ sind Hilfsprogramme aus ASTEC in ihrer Originalform abgelegt. Hierbei handelt es sich um Routinen, die z. B. Materialdaten beschreiben, in der Mehrzahl aber sind es „SIGAL“-Programme. „SIGAL“ ist das Datenbankprogramm von ASTEC. Es ruft auch auf Unterprogrammebene Daten aus der Datenbank ab, bzw.

es speichert dort Daten. Dadurch, dass diese Programme auch auf Unterprogrammebene aufgerufen werden, besteht eine enge Verknüpfung zwischen der Datenbank und SOPHAEROS, die sich schwer auflösen lässt, obwohl eine solche Technik den ATHLET-Regeln widerspricht. In ATHLET-CD werden globale Daten ausschließlich in Modulen abgelegt, auf die alle Programme direkt zugreifen können (USE-Statement). Ein zwischengeschalteter Unterprogrammaufruf der Datenbank erscheint auf dieser Ebene umständlich und zu langsam. Wegen dieser hier beschriebenen Unvereinbarkeiten zwischen den Programmsystemen ATHLET-CD und ASTEC ist in der Zukunft zu überlegen, inwieweit auch eine Eigenentwicklung der physikalischen Modelle in SOPHAEROS sinnvoll sein könnte.

Die Datenstruktur in der neuen SOPHAEROS Version (physikalische Module) wurde gegenüber der alten völlig neu gestaltet. Die wichtigsten Daten für die Beschreibung der Kreislaufvolumina, der Strömungspfade und der wärmeleitenden Strukturen werden in selbstdefinierten Datentypen vereinbart, die wiederum in Modulen abgelegt sind. Fast alle Daten sind frei allozierbar und passen sich somit an die jeweilige Problemstellung an.

```

MODULE t_sophaeros_type
!shu USE odessa
IMPLICIT NONE
TYPE gas_type
  CHARACTER(LEN=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: name ! name of the gas component
  DOUBLE PRECISION, DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: molm ! molar mass (kg/mol)
  DOUBLE PRECISION, DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: mf ! mass fraction (-)
  DOUBLE PRECISION, DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: molf ! Carrier gas molar ratio per carrier
  ! CO, CO2, H2, H2O, N2, O2, Ar
  ! H2, H2O, N2, O2, Ar, Xe, Kr, He, CO, CO2
END TYPE gas_type
TYPE kchs_type
  ! If mass transfer coefficients are identical for all the zones , they are set
  ! in the structure CODE/PHYS/KC : CH3I, I2, HIO and REFE (=LIQUID or GAS). Their type is
  ! If mass transfer coefficients are different for each zone, they are set in
  ! the 2 structures ZONE/KC
  DOUBLE PRECISION :: ngkci2 ! I2 mass transfer coefficient, reference GAS (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: rskci2 ! I2 mass transfer coefficient, reference SUMP (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: ngkch3i ! CH3I mass transfer coefficient, reference GAS (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: rskch3i ! CH3I mass transfer coefficient, reference SUMP (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: ngkchio ! HIO mass transfer coefficient, reference GAS (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: rskchio ! HIO mass transfer coefficient, reference SUMP (m/s)
  DOUBLE PRECISION :: hsi2 ! I2 partition coefficient (-)
  DOUBLE PRECISION :: hsch3i ! CH3I partition coefficient (-)

```

**Abb. 2.46** Beispiel für Quelltext-Struktur

Wie dem Beispiel in Abb. 2.46 zu entnehmen ist, sind die Variablenbeschreibungen direkt an die Definitionsvereinbarungen angehängt. Die Struktur ist unübersichtlich und nur schwer mit Hilfsprogrammen auszuwerten, die z. B. alphabetische Listen der glo-

balen Variablen erstellen. Diese ganzen Module auf ATHLET-CD Norm (s. Beispiel in Abb. 2.47) umzustellen erfordert einen nicht zu vertretenden Aufwand, der einfache Austausch der Programme zwischen ATHLET-CD und ASTEC wäre dann auch nicht mehr möglich.

```

MODULE EMODCOPY
C
C -- DECLARATION PART
C
CH NAME      | DIM.  | S | SIGNIFICATION
-----|-----|---|-----
CV IVECTOR  | -     | - | INTEGER POOL RESTART VECTOR
CV RVECTOR  | -     | - | REAL POOL RESTART VECTOR
CV LVEI     | -     | - | LENGTH OF IVECTOR
CV LVER     | -     | - | LENGTH OF RVECTOR
CV INDEXI   | -     | - | START POINTER AND LENGTH OF
CV          |       |   | INTEGER VARIABLES
CV INDEXR   | -     | - | START POINTER AND LENGTH OF
CV          |       |   | REAL VARIABLES
CV VARNAMI  | -     | - | NAMES OF INTEGER VARIABLES
CV VARNAMR  | -     | - | NAMES OF REAL VARIABLES
CV LC       | -     | - | STRING LENGTH(LC=40=CONST)
C
C -- MODULE MANAGES MDB-FILE
C
C   USE CCC,      ONLY: IOPRI
C   USE EMOINT,   ONLY: NEMODHEAT
C   USE EMOATHL,  ONLY: IOPE
C
C   INTEGER                                :: LVEI,
C   *                                       LVER
C   INTEGER,PARAMETER                       :: LC=40
C   INTEGER,ALLOCATABLE,SAVE,DIMENSION(:)   :: IVECTOR
C   INTEGER,ALLOCATABLE,SAVE,DIMENSION(:,):,TARGET :: INDEXI,
C   *                                       INDEXR
C
C   REAL(KIND(0.0D0)),ALLOCATABLE,SAVE,DIMENSION(:) :: RVECTOR
C
C   CHARACTER(LEN=LC),ALLOCATABLE,SAVE,DIMENSION(:),TARGET :: VARNAMI,
C   *                                       VARNAMR

```

Abb. 2.47 Beispiel für Quelltext-Struktur

### 2.7.2.2 Material Data Bank (MDB)

Die Materialdatenbank MDB aus ASTEC existierte schon in der alten Version von ATHLET-CD / SOPHAEROS, wurde aber erweitert. Sie beinhaltet die Materialdaten von den meisten chemischen Elementen und von über 1200 chemischen Verbindungen. Für jedes Element bzw. für jede Verbindung existiert eine eigene Datei in der Datenbank.

Die Verwaltung der Datenbank wird durch selbstentwickelte Programme durchgeführt, es werden keine ASTEC Routinen benutzt. Hierbei konnte auf Unterprogramme der Vorgängerversion zurückgegriffen werden, die nur modifiziert bzw. erweitert werden mussten, da in der neuen Version von SOPHAEROS andere und mehr Daten verlangt werden. Dies liegt zum Teil an neuen bzw. erweiterten physikalischen Modellen.

Alle Datenbankroutinen sind Bestandteil des Moduls TMODMDB. Um es dem Programmentwickler einfacher zu machen, sind sie unter dem generischen Namen TMDB zusammengefasst. Ihre speziellen Namen sind der Abb. 2.48 zu entnehmen.

```

C      PUBLIC TMDB
C
C      INTERFACE TMDB
C
C --      TMD BRO : READS REAL SCALAR NUMBER FROM MDB.
C --      TMD BCO : READS CHARACTER SCALAR NUMBER FROM MDB.
C --      TMD BIND: CALCULATES NUMBER OF MDB-FILES, READS INDEX.
C --      TMD BPOL: READS POLYNOMCOEFFICIENTS FROM MDB
C --      TMD BTY : DETERMINE type-PARAMETER
C --      TMD BAL : DETERMINE STOECHEIOMETRIC COEFFICIENTS
C --      TMD BDER: INTERPOLATION AND DERIVATION OF TABLE VALUES
C --      TMD BINT: INTERPOLATION OF TABLE VALUES
C --      TMD BKP : INTERPOLATION OF TABLE VALUES
C
C      MODULE PROCEDURE TMD BRO, TMD BCO, TMD BIND, TMD BPOL,
*          TMD BTY, TMD BAL, TMD BDER, TMD BINT,
*          TMD BKP
C
C      END INTERFACE
C

```

**Abb. 2.48** Datenbanken

Ein Aufruf der Datenbankroutine in einem Unterprogramm hat folgende Form:

```

CALL TMDB(NAME(IE), 'G_g(T)', TGAS, GG)
CALL TMDB(NAME(IE), NDP(ICD), IE, 'logP_sat(T)', TGAS, RL10PA)

```

Welche spezifische Routine vom Programm bei dem generischen Aufruf TMDB genommen wird, wird durch die unterschiedliche Anzahl der Aktualparameter bzw. durch deren unterschiedliche Typvereinbarungen der Parameter (INTEGER, REAL, ...) entschieden.

Nicht alle MDB-Aufrufrountinen in SOPHAEROS wurden durch TMDB-Aufrufe ersetzt. Diejenigen, die die Stoffwerte von Wasser bzw. Dampf berechnen, wurden durch Programme der ATHLET-Familie ersetzt (MPSPLK, MPZUS1, MPZUS2). Diese Vorgehensweise stellt sicher, dass die Wasserstoffwerte im gesamten Kühlkreislauf bei gleichen Temperaturen und Drücken identisch sind, was zu einer Erhöhung der numerischen Stabilität führt.

Völlig neu in dieser SOPHAEROS Version ist eine in der Materialdatenbank eingebettete Datenbank der chemischen Reaktionskinetik. Sie wird in ATHLET-CD über ein

Pseudokeyword „kinetic“ angesprochen. Dem PW „kinetic“ folgt zuerst ein Name der Datenbank (es gibt mehrere), danach kann der Benutzer die Namen der chemischen Reaktionen eingeben (s. Abb. 2.49).

```
@
----- KINETIC
@
@   DATA-BANK
@
@   'rcs_chemistry.mdb'
@
@   NAME
@
@   'rcs1'
@   'rcs2'
```

**Abb. 2.49** Datenbank-Beispiel

Erfahrungen mit den neuen Modellen liegen noch nicht vor. So können noch keine Aussagen gemacht werden, inwieweit sie sich auf die Rechengeschwindigkeit des Gesamtsystems auswirken, auch die physikalische Aussagekraft der Modelle kann noch nicht beurteilt werden.

### 2.7.2.3 Pseudokeyword PHENOMEN

Auch bei der Anzahl der berücksichtigten physikalischen Phänomene hat sich in der neuen Version von SOPHAEROS einiges getan. Eine aktuelle vollständige Liste ist in Abb. 2.50 so angeführt, wie sie vom Benutzer eingegeben werden muss.

```

@
----- PHENOMEN
@  KEYWORD          MODEL
   'SETTLING=YES '  '-----'
   'LAMINAR=YES '   '-----'
   'TURBULD=YES '   '-----'
   'EDDYIMP=YES '   'AGARWAL '
   'BENDIMP=YES '   'COMBINAT '
   'THERMOPH=YES '  '-----'
   'DIFFUSIO=YES '  'WALDMANN '
   'CONTRACT=YES '  '-----'
   'FALLBACK=YES '  '-----'
   'BROWN=YES '     'CONTINUE '
   'GRAVITAT=YES '  '-----'
   'TURBULC=YES '   '-----'
   'HOMOGENC=YES '  '-----'
   'HETEROGENC=YES '-----'
   'WALLCON=YES '   '-----'
   'WALLADS=YES '   '-----'
   'MECRES=YES '    'FORCE '
   'SCRUBBING=YES '-----'
   'CHEMISTRY=YES '-----'
   'BUBBLE_RIS=YES '-----'
@

```

**Abb. 2.50** Eingabe der berücksichtigten Phänomene

Falls für ein physikalisches Phänomen mehrere konkurrierende Modelle existieren, wird das zu verwendende vom Benutzer in der rechten Spalte aufgeführt. Die Bedeutungen der einzelnen Schlüsselwörter in der obigen Liste sind in Tab. 2.11 zusammengefasst. Inwieweit die hier mit „neu“ gekennzeichneten Modelle für die Berechnung des Kernes und des Primärkreises von Bedeutung sind, muss sich bei späteren Anwendungsrechnungen noch zeigen.

#### 2.7.2.4 Darstellung des Kühlkreislaufs

Die Eingabe erfolgt durch die Angabe der einzelnen verbundenen ATHLET-Objekte, die die Strömung beschreiben. Dabei kann der Benutzer analog zu ATHLET mehrere Kreisläufe beschreiben, auch Verzweigungen sind möglich. Alle geometrischen Daten werden direkt von ATHLET übernommen, so dass Mehrfacheingaben vermieden werden.

**Tab. 2.11** Schlüsselwörter zu den Phänomenen in SOPHAEROS

Schlüsselwort	aktiv	Bedeutung	Modelle	Kommentar
SETTLING	YES / NO	Absetzen von Aerosolen	---	alt
LAMINAR	YES / NO	laminare Diffusion	---	alt
TURBULD	YES / NO	Turbulente Diffusion	---	alt
EDDYIMP	YES / NO	Partikelagglomeration und Ablagerung	AGARWAL, FRIEDLAN, RAFT	alt
BENDIMP	YES / NO	Ablagerung an Krümmern	COMBINAT, TRAJECT	alt
THERMOPH	YES / NO	Aerosolbewegung aufgrund Temperaturgradienten	---	alt
DIFFUSIO	YES / NO	Aerosolbewegung aufgrund Konzentrationsgradienten	WALDMANN, LOYALKA	alt
CONTRACT	YES / NO	Aerosolablagerung aufgrund Zusammenschlüssen	---	alt
FALLBACK	YES / NO	Aerosolbewegung aufgrund von Gravitation	---	alt
BROWN	YES / NO	Brownsche Molekularbewegung	CONTINUE, DAVIES	alt
GRAVITAT	YES / NO	Koagulation aufgrund von Gravitation	---	alt
TURBULC	YES / NO	Turbulente Koagulation	---	alt
HOMOGENC	YES / NO	Homogene Keimbildung, Nukleation	---	alt
HETEROGENC	YES / NO	Heterogene Keimbildung, Nukleation	---	alt
WALLCON	YES / NO	Dampfkondensation an Wänden	---	alt
WALLADS	YES / NO	Dampfanreicherung an Wänden	---	alt
MECRES	YES / NO	Mechanische Aufwirbelung von Aerosolen	FORCE, ROCK	alt
SCRUBBING	YES / NO	AerosolAuswaschung	---	neu
CHEMESTRY	YES / NO	Chemie der Dampfphase	---	alt
BUBBLE_RIS	YES / NO	Blasenmitriss	---	neu

Die Eingabe kann die Gestalt wie in Abb. 2.51 dargestellt haben.

```

@
----- NAMES
@
@ ASOPN
@
@ 'LOOPA'
@ 'LOOPB'
@
K----- LOOPA
@
@ DOMNAME
@ 'PRIMARY'
@
@ ATHNAM
@
@ 'PV-CORE1 '
@ 'PV-UP-T '
@ 'PA-HL '
@ 'PA-SG '
@ 'PA-SG-OUT'
@
K----- LOOPB
@
@ DOMNAME
@ 'PRIMARY'
@
@ ATHNAM
@
@ 'PV-UP-T '
@ 'PB-HL '
@ 'PB-SG '
@ 'PB-SG-OUT'
@

```

**Abb. 2.51** Eingabe der Kopplung zur Thermohydraulik

Dies stellt für den Anwender eine immense Vereinfachung dar. Musste er in der früheren Version eine „FLOWMATRIX“ aufbauen, übernimmt jetzt das Programm diese Aufgabe.

Der Benutzer hat die Möglichkeit seine Eingaben durch umfangreiche Tabellen zu kontrollieren. Ein Beispiel für die Verknüpfung von Volumenverbindungen (JUNCTIONS) ist in Abb. 2.52 gekürzt dargestellt. Ähnliche Tabellen existieren auch z. B. für die Kreislaufvolumen.

JUNCTION SPECIFIC DATA														
JU	NAME	BASENAME	FROM	TO	VOLFROM	VOLTO	CIRCUIT	DDMAIN	NOUT	NCON	NFROM	NTO	MODE	CALC
1	JUN_0001	PRIMARY	VOL_0001	VOL_0002	VOL_0001	VOL_0002	PRIMARY	PRIMARY	0	0	1	2	0	1
2	JUN_0002	PRIMARY	VOL_0002	VOL_0003	VOL_0002	VOL_0003	PRIMARY	PRIMARY	0	0	2	3	0	1
3	JUN_0003	PRIMARY	VOL_0003	VOL_0004	VOL_0003	VOL_0004	PRIMARY	PRIMARY	0	0	3	4	0	1
4	JUN_0004	PRIMARY	VOL_0004	VOL_0005	VOL_0004	VOL_0005	PRIMARY	PRIMARY	0	0	4	5	0	1
5	JUN_0005	PRIMARY	VOL_0005	VOL_0006	VOL_0005	VOL_0006	PRIMARY	PRIMARY	0	0	5	6	0	1
6	JUN_0006	PRIMARY	VOL_0006	VOL_0007	VOL_0006	VOL_0007	PRIMARY	PRIMARY	0	0	6	7	0	1
7	JUN_0007	PRIMARY	VOL_0007	VOL_0008	VOL_0007	VOL_0008	PRIMARY	PRIMARY	0	0	7	8	0	1
8	JUN_0008	PRIMARY	VOL_0008	VOL_0009	VOL_0008	VOL_0009	PRIMARY	PRIMARY	0	0	8	9	0	1
9	JUN_0009	PRIMARY	VOL_0009	VOL_0010	VOL_0009	VOL_0010	PRIMARY	PRIMARY	0	0	9	10	0	1
10	JUN_0010	PRIMARY	VOL_0010	VOL_0011	VOL_0010	VOL_0011	PRIMARY	PRIMARY	0	0	10	11	0	1

**Abb. 2.52** Beispiel für Volumenverbindungen

### 2.7.2.5 Chemische Elemente und Verbindungen

Im Zuge der Programmentwicklung wurden in ATHLET-CD die kernphysikalischen Module OREST und FIPISO eingebaut. Durch diese Modelle stehen dem Gesamtsystem erheblich mehr Daten der chemischen Elemente und der dazugehörigen Isotope zur Verfügung. Deshalb war es möglich den Freisetzungsmodule FIPREM, der auch der Datenlieferant für SOPHAEROS ist, um neue Elementgruppen zu erweitern.

Der Modul FIPREM berechnet die Freisetzung von Elementen aus dem Reaktorkern in den Primärkreis. Dabei sind die Elemente in 34 Freisetzungsguppen unterteilt (nicht alle sind besetzt). Die Freisetzungsguppen werden grob in drei Hauptgruppen unterteilt: Spaltprodukte, Brennstoffelemente und Strukturmaterialien. Daten werden den Gruppenmitgliedern auf unterschiedliche Art zugewiesen. Entweder durch Tabellen oder durch GCSM-Signale oder durch Berechnung der Daten durch die kernphysikalischen Module OREST/FIPISO. In diesem Fall vergrößert sich die Anzahl der Elementgruppen durch die Aufteilung spezieller FIPREM-Gruppen auf 52.

Tab. 2.12 gibt eine Übersicht über die alten Strukturen mit 34 Gruppen und über die neuen Strukturen mit 52 Gruppen.

**Tab. 2.12** Gruppen in FIPREM

Gruppennummer	Alt/Neu ohne FIPISO	Neu mit FIPISO
1	Xe	Xe
2	Kr	Kr
3	I	I
4	Cs	CS
5	Rb	Rb
6	Br	Br
7	Te	Te
8	Se	Se
9	Ag	Ag
10	Ba	Ba
11	Sr	Sr
12	Ru(Pm,Sm,Eu,Gd,Nb,Nd,Pr,Ce,La,y)	Ru
13	Mo(Pd,Tc,Rh)	Pm
14	Sb	Sm
15	Zr	Eu
16		Gd
17		Nb
18		Nd
19		Pr
20		Ce
21	U	La
22	Pu	Y
23	Np(Am,Cm,Bk,Cf,Es)	Mo
24		Pd
25		Tc
26	AgST	Rh
27	In	Sb
28	Cd	Zr
29	ZrST	
30	Sn	
31	Fe	
32	Cr	
33	Ni	

Gruppennummer	Alt/Neu ohne FIPISO	Neu mit FIPISO
34	Mn	U
35		Pu
36		Np(Bk,Cf,Es)
37		Am
38		Cm
39		
40		
41		
42		
43		
44		AgSt
45		In
46		Cd
47		ZrST
48		Sn
49		Fe
50		Cr
51		Ni
52		Mn

Wie man der Tabelle entnehmen kann, sind die Gruppen 1-11 von den Modellerweiterungen nicht betroffen, da hier jede Gruppe nur ein Mitglied hat. Die Gruppe 12 dagegen besteht aus 11 Mitgliedern: Dem Namensgeber Ruthenium mit den Elementen: Pm, Sm, Eu, Gd, Nb, Nd, Pr, Ce, La, Y. Für alle 11 Elemente wird im Modul FIPREM angenommen, dass sie sich bei der Freisetzung aus der Brennstoffmatrix physikalisch ähnlich verhalten, d.h., für diese Elemente gibt es nur einen Satz Freisetzungsparemeter. In allen anderen physikalischen und chemischen Eigenschaften unterscheiden sich diese Elemente aber erheblich. Deshalb wurden diesen Elementen in der neuen FIPREM-Version eigene Gruppen zugewiesen, da durch die Verwendung der Module OREST/FIPISO genügend physikalische Daten zur Verfügung stehen: Massen, Leistungen und Aktivitäten im Kern. Ebenfalls sind viele chemische Verbindungen in der Materialdatenbank des Moduls SOPHAEROS abgelegt. Als Folge dieser Programm- und Modellerweiterung kann ATHLET-CD dem Programm COCOSYS wichtige chemische Verbindungen zur Verfügung stellen, was vor allem bei gekoppelten Rechnungen mit dem System ATHLET-CD/COCOSYS von Vorteil ist (s.u.).

Alle oben erwähnten Vorteile gelten auch bei den Erweiterungen der folgenden Gruppen:

- Molybdän: Pd, Tc Rh
- Neptunium. Am, Cm [Bk,Cf, Es]

Da für die Transurane Bk (Ordnungszahl 97), Cf (Ordnungszahl 98) und Es (Ordnungszahl 99) zu wenig Daten in der Materialdatenbank MDB zur Verfügung stehen, wurde darauf verzichtet, ihnen eigene Gruppen zuzuweisen.

Das modifizierte System aus den Modulen FIPREM, OREST, FIPISO und SOPHAEROS soll an einem einfachen Beispiel erläutert werden. In FIPREM wurden in diesem Fall nur 13 Elementgruppen angegeben, wie Abb. 2.53 zeigt.

```
INPUT DATA FOR EACH ELEMENT
-----
Xe
Kr
I
Cs
Te
Ru
Ag
Zr
U
Np
AgST
ZrST
Sn

AUTOMATICLY GENERATED ELEMENTS
-----
Pm
Sm
Eu
Gd
Nb
Nd
Pr
Ce
La
Y
Am
Cm
```

Abb. 2.53 Eingabebeispiel für die Auswahl der Elemente in FIPREM

Wie man sieht, wurden vom System 12 weitere Elementgruppen generiert. Hieraus errechnet SOPHAEROS chemische Verbindungen mit Hilfe der Materialdatenbank (MDB, die obige Liste wird noch um die Wasserbestandteile H und O erweitert), wie Abb. 2.54 zeigt.

```
Material Data Base
NAME(is)=
Xe      Kr      I       Cs       Te       Ru       Pm       Sm       Eu       Gd
Nb      Nd      Pr      Ce       La       Y        Ag       Zr      U        Np
Am      Cm      Sn      H        O        Ag2     Ag2Te   AgH     AgH0    AgI
Ag0     AgTe   CeI3    Ce0      CeO2     CeTe    Cs2     CsH0    CsI     Cs20
Cs2O2  Cs2O4Ru Cs2Te   Cs2Te2   Cs2Te3   CsH     CsH0    CsI     Cs0     CsTe
CsTe2  EuH2O2 EuH0    EuH02    Eu0      EuTe    GdI3    Gd0     H2      H20
H2O2   H2O2Sn H2O2U   H2O2Zr   H2O3Sn   H2O3Te  H2O3Zr  H2O4U   H2Te   H3O3U
H3O3Zr HI      HIO     HO       H2       H202   H202Ru  H202U   H2Zr   H3Ru
H3U    HORu   HOU     HTe      HZr     I2      I2Sn    I2Te   I2Zr   I3La
I3Nb   I3Nd   I3Pr    I3Zr     I4Sn    Nb0     Nb02    Nd0     Nd02    NdTe
I3Sn   La2O   La0     LaTe     Nb0     Nb02    Nd0     Nd02    NdTe   O2
O2Ru   O2Sn   O2Te    O2Te2   O2U     O2Y    O2Zr    O3      O3Ru   O3U
O4Ru   O4Te2 OPm      OPr      ORu     OSm    O5n     OTe     OU      OY
OZr    Sn2    SnTe    SnTe2   Te2     Te3    Zr2
```

Abb. 2.54 Berücksichtigte Verbindungen in SOPHAEROS (Beispiel)

Um dem Benutzer die Möglichkeit zu geben, diese Datenflut etwas einzudämmen, wurden Routinen entwickelt, in denen eine Positivliste der chemischen Verbindungen verarbeitet wird, d.h. der Benutzer kann die Anzahl der chemischen Verbindungen bestimmen. Hierdurch kann der Rechenaufwand erheblich reduziert werden. Abb. 2.55 zeigt ein Beispiel.

```
@
-- COMPNLY
@
'AgI '
'CsHO '
'CsI '
'I2 '
'I2Sn '
'I2Te '
'I2Zr '
'I3Zr '
'I4Sn '
'I4Te '
'I4U '
'I4Zr '
'ISn '
'H2 '
```

Abb. 2.55 Beispiel für die Auswahl der chemischen Verbindungen in SOPHAEROS

In diesem Beispiel hat sich der Anwender hauptsächlich auf die Jodchemie konzentriert.

### 2.7.2.6 Die Ausgabe

Die Ausgabe des neuen Moduls SOPHAEROS wurde sehr variabel gestaltet. Die Steuerung der Ausgabe erfolgt über das optionale Pseudokeyword „OUTFL“. Falls der Benutzer das Pseudokeyword „OUTFL“ in der Eingabe verwendet, muss er unter diesem Keyword fünf weitere Eingabegrößen bereitstellen:

- **IPRM:** Steuert die Ausgabe der Massen (Elemente und Verbindungen) (kg).
  - 0: Keine Ausgabe.
  - 1: Reduzierte Ausgabe: Es werden nur die Massen der beteiligten Elemente ausgegeben. Die Massen der Elemente werden aus den Massen der chemischen Verbindungen berechnet.
  - 2: Element- und Verbindungsmassen werden gedruckt. Dieser Output kann sehr umfangreich sein.
  - Der Standardwert ist 1.
- **IPRAMR:** Steuert die Ausgabe der Aerosol-Massenverhältnisse (Aerosolmasse eines Elements / Masse aller Aerosole) (-)
  - 0: Keine Ausgabe
  - 1: Reduzierte Ausgabe. Es werden nur die Aerosolverhältnisse der Elemente ausgegeben.
  - 2: Es werden die Verhältnisse sowohl auf Element- als auch auf Verbindungsebene ausgegeben.
  - Der Standardwert ist 0.
- **IPRRET:** In den Volumina und im gesamten Kühlkreislauf zurückgehaltene Elementmassen. Die Massen werden immer auf Elementebene angegeben, es sind also auch die in den Verbindungen gebundenen Massen berücksichtigt. (kg)
  - 0: Keine Ausgabe
  - 1: zurückgehaltene Massen
  - Der Standardwert ist 0.

- **IPRMEC:** Steuert die Ausgabe der Aerosolmassenverhältnisse sortiert nach den physikalischen Ablagerungsmechanismen (%).
  - 0: Keine Ausgabe
  - 1: Massenverhältnisse nach physikalischen Ablagerungsmechanismen
  - Der Standardwert ist 1.
- **IPRTHY:** Steuert die Ausgabe thermohydraulischer Daten (1/s ; K)
  - 0: Keine Ausgabe
  - 1: Massenrate der Trägergase (1/s) und Wandtemperaturen (K)
  - Der Standardwert ist 0.

Alle oben genannten Ausgabegrößen werden sowohl für alle Volumina als auch für den ganzen Kühlkreislauf gedruckt. Die einzelnen Ausgabegrößen sind in Tab. 2.13 zusammengefasst.

Weiterhin erhält der Benutzer während der Rechnung folgende Informationen direkt auf den Bildschirm gedruckt:

**SOPHAEROS: NUSTEP: 74 NDTMIC:1 NITER:3 SUM\_NITER:212 NVOL:16 NJUN:16 NWALL:21 NE:15 NS: 84**

NUSTEP:	Anzahl der SOPHAEROS Zeitschritte
NDTMIC:	Anzahl der SOPHAEROS Unterzeitschritte während dieses Zeitschritts
NITER:	Anzahl der Iterationen während dieses Zeitschritts
SUM_NITER:	Summe aller Iterationen
NVOL:	Anzahl der SOPHAEROS Volumina
NJUN:	Anzahl der SOPHAEROS Verbindungen (Thermohydraulik)
NE:	Anzahl der Grundelemente
NS:	Anzahl der Verbindungen (Chemie)

**Tab. 2.13** SOPHAEROS-Ausgabegrößen

<b>Ausgabegröße</b>	<b>Ein</b>	<b>Bedeutung</b>
SUS_VA	kg	Element-/Verbindungs­masse suspendiert (Dampfphase)
SUS_AE	kg	Element-/Verbindungs­masse suspendiert (Aerosol)
LIQUID	kg	Element-/Verbindungs­masse flüssig
DEP_AE	kg	Element-/Verbindungs­masse abgelagert (Aerosol)
SOR_VA	kg	Element-/Verbindungs­masse absorbiert (Dampfphase)
CONDEN	kg	Element-/Verbindungs­masse kondensiert
M_IN	kg	Element-/Verbindungs­masse eingespeist
OUT_V/*	kg	Element-/Verbindungs­masse ausgetreten (Dampfphase), *:1,2,3 ... : Nummer des Auslasses
OUT_A/*	kg	Element-/Verbindungs­masse ausgetreten (Aerosol)
OUT_L/*	kg	Element-/Verbindungs­masse ausgetreten (flüssig)
SUS_AMR	-	Aerosol Suspensions­massen­verhältnis
DEP_AMR	-	Aerosol Massen­verhältnis, abgelagert
M_RET	kg	Zurückgehaltene Masse im Volumen / Kreislauf (Element / Verbindung)
CON_VA_RET	kg	Zurückgehaltene Masse im Volumen / Kreislauf (Element / Verbindung) , Dampfphase

Ausgabegröße	Ein	Bedeutung
DEP_AE_RET	kg	Zurückgehaltene Masse im Volumen / Kreislauf (Element / Verbindung) , abgelagert als Aerosol
SOR_VA_RET	kg	Zurückgehaltene Masse im Volumen / Kreislauf (Element / Verbindung) , absorbiert im Dampf
MECHAN.	%	Physikalische Mechanismen: SETTLING, LAMI_DIF, TUR_DIF, EDDY_IMP, BEND_IMP, THERM_PH,
RATE	1/s	Trägergas Massenrate
WALL_T	K	Wandtemperatur pro Volumen

### 2.7.2.7 Stabilität und Rechenzeitverbrauch

Das Programmsystem, bestehend aus ATHLET-CD mit dem neuen SOPHAEROS, hat sich in den ersten Rechnungen mit den Testbeispielen Phebus FPT1, VERDON und S8-ORESTLP als stabil erwiesen. Dies wurde u.a. dadurch erreicht, dass das Massenkongruenzkriterium für kleine Massen auf 1.0D-20 beschränkt wurde. Ein kleineres Kriterium erscheint auf einem Digitalrechner mit einer Variablengenauigkeit von 8 Bytes („doppelte Genauigkeit“, 64 Bit) als nicht sinnvoll. So konnte bei allen Testrechnungen die Anzahl der Mikrozeitschritte und die Anzahl der Iterationen stark eingegrenzt werden. Das soll am Beispiel des S8-ORESTLP Datensatzes verdeutlicht werden.

```

SOPHAEROS TIME STEP SUMMARY
-----
NUMBER OF TIME STEPS(THIS RUN): 7471
NUMBER OF TIME STEPS(ALL RUNS): 7471
NUMBER OF SUB TIME STEPS      : 7743
NUMBER OF ITERATIONS          : 21281

```

**Abb. 2.56** SOPHAEROS-Zeitschrittstatistik

Die Anzahl der Makro-Zeitschritte (7471), die SOPHAEROS benötigt hat, ist identisch mit der Anzahl der ATHLET-CD Zeitschritte (s. Abb. 2.56). Die Anzahl der Mikrozeitschritte ist mit 7743 nur geringfügig größer, d.h., dass SOPHAEROS fast immer mit

den von ATHLET-CD vorgeschlagenen Zeitschritten zurechtkam. Auch die Gesamtzahl der Iterationen (21281) ist mit ca. 3 Iterationen pro Zeitschritt in Ordnung.

Ganz anders verhält es sich mit der während der Simulation verbrauchten CPU-Zeit. Der CPU-Zeitbedarf der neuen SOPHAEROS-Version pro Zeitschritt ist enorm. Hierfür sind aber weder die Anzahl der Unterzeitschritte noch die Anzahl der Iterationen verantwortlich, sondern das aufwendige Lösungsverfahren, das Kinetik-Modell und die von ASTEC übernommene Software SIGAL/ODESSA. Einen Vergleich der Rechenzeiten der neuen SOPHAEROS-Version mit der alten zeigt Abb. 2.57.

PROCEDURE	CPU CURRENT RUN	CPU TOTAL RUN	PROCEDURE	CPU CURRENT RUN	CPU TOTAL RUN
ECORE	10.60	10.60	ECORE	26.63	26.63
-EHEAT	9.49	9.49	-EHEAT	24.67	24.67
-ERAD	0.48	0.48	-ERAD	0.98	0.98
-EPOWER	0.06	0.06	-EPOWER	0.10	0.10
-ERODBH	0.00	0.00	-ERODBH	0.00	0.00
-EOXID	0.57	0.57	-EOXID	0.88	0.88
MEWA	0.00	0.00	MEWA	0.00	0.00
EFIPRE	0.33	0.33	EFIPRE	1.06	1.06
-EFPRAT	0.30	0.30	-EFPRAT	1.00	1.00
SOPHAEROS	4986.89	4986.89	SOPHAEROS	344.56	344.56
-SOLVER	4447.45	4447.45	-FPSOLV	269.91	269.91
FIPISD	9.39	9.39	FIPISD	67.07	67.07
-CORE	9.39	9.39	-CORE	52.69	52.69
-CYCLE	0.01	0.01	-CYCLE	14.37	14.37
EMOD-HEAT	4.11	4.11	EMOD-HEAT	4.35	4.35
EMOD-FIS	0.00	0.00	EMOD-FIS	0.00	0.00
TMOD-SOPH	0.55	0.55	TMOD-SOPH	0.45	0.45
CD-TOTAL	5011.88	5011.88	CD-TOTAL	444.11	444.11

**Abb. 2.57** CPU-Statistik mit neuem (links) und altem SOPHAEROS (rechts)

Während die alte SOPHAEROS-Version ca. 345 Sekunden brauchte, um das Beispiel zu rechnen, benötigte die neue Version ca. 4987 Sekunden, also ca. 15 Mal so lange. Dieser unbefriedigende Zustand kann so nicht hingenommen werden. Als Abhilfe bieten sich folgende Maßnahmen:

- ODESSA/SIGAL muss ersetzt werden, der Datentransfer zwischen Unterprogrammen darf nach ATHLET-CD Standard nur durch Module erfolgen. Die Auswirkung auf die CPU-Zeit ist gering.
- Eine Parallelisierung muss sowohl auf Modulebene als auch im Modul SOPHAEROS erfolgen. Das gilt auch für die Berechnung der Nachzerfallsleistung der durch SOPHAEROS transportierten Massen in den einzelnen Volumen. Die Auswirkung auf die CPU-Zeit ist hoch.

- Abschaltung des Kinetik-Modells. Die Auswirkung auf die CPU-Zeit ist sehr hoch (siehe unten).
- Bei der jetzigen Nodalisierung (1:1 Abbildung ATHLET/SOPHAEROS) werden alle Erhaltungsgleichungen für jedes Volumen gelöst. Es besteht aber die Möglichkeit mehrere Volumen (z. B. ein ATHLET-Objekt) zu einer Zelle mit einheitlichen Randbedingungen zusammenzufassen. Dann würden die Gleichungen nur noch auf dieser Ebene gelöst. Welche Auswirkungen das auf das Ergebnis, die Stabilität des Gesamtsystems hat und wieviel CPU-Zeit sich dadurch einsparen lässt, muss noch untersucht werden.
- Ob SOPAHEROS zu jedem ATHLET-CD Zeitschritt aufgerufen werden muss, sollte geprüft werden. Hierbei ist der eventuell sehr große programmtechnische Aufwand zu berücksichtigen. Die Auswirkung auf die CPU-Zeit muss noch untersucht werden.

Bei allen Problemen ist aber zu berücksichtigen, dass nur die neue SOPHAEROS-Version einen Kühlkreislauf mit allen Verzweigungen abbilden kann. Ebenso erlaubt nur diese Version die Darstellung des Kernes durch SOPAHEROS-Volumen und die mehrfach Einspeisung von Spaltprodukten aus den Brennstäben an unterschiedlichen axialen Positionen. Auch nur in dieser Version ist ein Modell zur Reaktionskinetik enthalten, d.h. bei einer gewissen Anzahl von chemischen Reaktionen wird der zeitliche Ablauf berücksichtigt. In diesem Modell wird mit Abstand die meiste CPU-Zeit verbraucht. Im Folgenden soll die gleiche Rechnung, die oben vorgestellt wurde, jedoch ohne das Modell „Kinetik“ gezeigt werden.

Die Eingabe ist für beide Fälle bis auf das Pseudokeyword „KINETIC“ gleich. Der Transport der Spaltprodukte wird in zwei ATHLET-Objekten berechnet. Sowohl ATHLET als auch SOPHAEROS teilen diesen Strömungspfad in 16 Volumen auf.

```

DERIVED SOPHAEROS NETWORK DATA
-----
SOPAEROS OBJECT: S_CORE      DOMAIN: PRIMARY

#      NAME  KOBJ  JUN  L-VOL.  R-VOL.  ITYPD  ISYSO  B/P
-----
1      CORE   4     12     15     16     20     1     1
2      CORE   4     13     16     17     20     1     1
3      CORE   4     14     17     18     20     1     1
4      CORE   4     15     18     19     20     1     1
5      CORE   4     16     19     20     20     1     1
6      CORE   4     17     20     21     20     1     1
7      PIPE   5     19     23     24     21     1     1
8      PIPE   5     20     24     25     21     1     1
9      PIPE   5     21     25     26     21     1     1
10     PIPE   5     22     26     27     21     1     1
11     PIPE   5     23     27     28     21     1     1
12     PIPE   5     24     28     29     21     1     1
13     PIPE   5     25     29     30     21     1     1
14     PIPE   5     26     30     31     21     1     1
15     PIPE   5     27     31     32     21     1     1
16     PIPE   5     28     32     33     21     1     1

```

**Abb. 2.58** Der SOPHAEROS-Strömungspfad

Die Energie in den Brennstäben wird mit den kernphysikalischen Modellen OREST und FIPISO berechnet. Die dabei erzeugten Spaltprodukte werden vom Modul FIPREM aus den Brennstäben freigesetzt und an das Modul SOPHAEROS übergeben.

Die transportierten Spaltprodukte bestehen aus 15 Basiselementen, die untereinander 85 chemische Reaktionen eingehen. Durch das Pseudokeyword „KINETIC“ wird bei 8 chemischen Reaktionen der zeitliche Verlauf berücksichtigt. Durch die Aktivierung dieses Modells wird ein sehr viel aufwendigeres Lösungsverfahren der Differentialgleichungen (Wechsel zwischen explizitem und implizitem Verfahren) angestoßen, so dass dieses Modell auch Auswirkungen auf das Lösungsverfahren der anderen Modelle hat.

```

NAMES OF CHEMICAL REACTIONS
-----

CHEMICAL DATA BANK : rcs_chemistry.mdb

  1. rcs1          2. rcs2          3. rcs3          4. rcs4          5. rcs5
  6. rcs6          7. kr1            8. krRu

REACTION NAME/EQUATION

  1. rcs1          "I + H2 -> HI + H"
  2. rcs2          "I + H2O -> HI + HO"
  3. rcs3          "I + HI -> H + I2"
  4. rcs4          "I + HO -> HI + O"
  5. rcs5          "I2 + HO -> HIO + I"
  6. rcs6          "H2 + IO -> HIO + H"
  7. kr1           " CsH + HO <-> CsHO + H"
  8. krRu          "O4Ru <-> O2Ru + O2"

```

Abb. 2.59 Chemische Reaktionen

Als erstes sollen die Zeitschrittstatistiken verglichen werden.

```

SOPHAEROS TIME STEP SUMMARY
-----

NUMBER OF TIME STEPS(THIS RUN): 7471
NUMBER OF TIME STEPS(ALL RUNS): 7471
NUMBER OF SUB TIME STEPS      : 7743
NUMBER OF ITERATIONS          : 21485

```

Abb. 2.60 SOPHAEROS-Zeitschrittstatistik ohne PW „KINETIC“

PROCEDURE	CPU CURRENT RUN	CPU TOTAL RUN
ECORE	11.51	11.51
-EHEAT	10.07	10.07
-ERAD	0.67	0.67
-EPOWER	0.08	0.08
-ERODBH	0.00	0.00
-EOXID	0.70	0.70
MEWA	0.00	0.00
EFIPRE	0.37	0.37
-EFPRAT	0.34	0.34
SOPHAEROS	227.20	227.20
-SOLVER	142.01	142.01
FIPISO	10.26	10.26
-CORE	10.25	10.25
-CYCLE	0.00	0.00
EMOD-HEAT	4.26	4.26
EMOD-FIS	0.00	0.00
TMOD-SOPH	0.61	0.61
CD-TOTAL	254.20	254.20

Abb. 2.61 CPU-Zeiten von SOPHAEROS, neues Modell ohne Kinetik

Verglichen mit der weiter oben angeführten Statistik, die für eine SOPHAEROS Rechnung mit dem Kinetik-Modell erstellt wurde, ergibt sich kein gravierender Unterschied. Als nächstes sollen die CPU-Zeiten aller drei Rechnungen (1. Neues Modell mit Kinetik, 2. Altes Modell, 3. Neues Modell ohne Kinetik) verglichen werden.

Die von den verschiedenen SOPHAEROS-Modellen verbrauchten CPU-Zeiten sind noch einmal übersichtlich in Tab. 2.14 zusammengefasst.

**Tab. 2.14** CPU-Zeiten von SOPHAROS

<b>Neues Modell mit Kinetik</b>	<b>Altes Modell</b>	<b>Neues Modell ohne Kinetik</b>
4987 sec.	345 sec.	227 sec.

Man sieht in dieser Gegenüberstellung den großen Einfluss der Modellwahl auf die CPU-Zeit. Das neue SOPHAEROS-Modell ohne das Kinetik-Modell ist sogar schneller als das alte SOPHAEROS-Modell, obwohl noch nicht einmal alle Optimierungsmöglichkeiten ausgenutzt worden sind (s.o.). Durch die Verwendung des Kinetik-Modells bleibt also die Anzahl der Makro-Zeitschritte, der Mikro-Zeitschritte und der Iterationen konstant. Die CPU-Zeit beim Kinetik-Modell wird also während des Zeitschrittes durch einen anderen Lösungsweg verbraucht, so dass hier noch Optimierungsmöglichkeiten bestehen. Da dieses Modell noch nicht als validiert angesehen werden kann, ist seine Verwendung zum jetzigen Zeitpunkt nur für Forschungs- und Entwicklungszwecke geeignet.

Zum Abschluss sollen die Unterschiede in den physikalischen Ergebnissen untersucht werden. Hierbei soll vor allem der Einfluss des Kinetik-Modells auf die Ergebnisse ermittelt werden, um beurteilen zu können, wie vorrangig eine Validierung des Modells vorangetrieben werden muss.

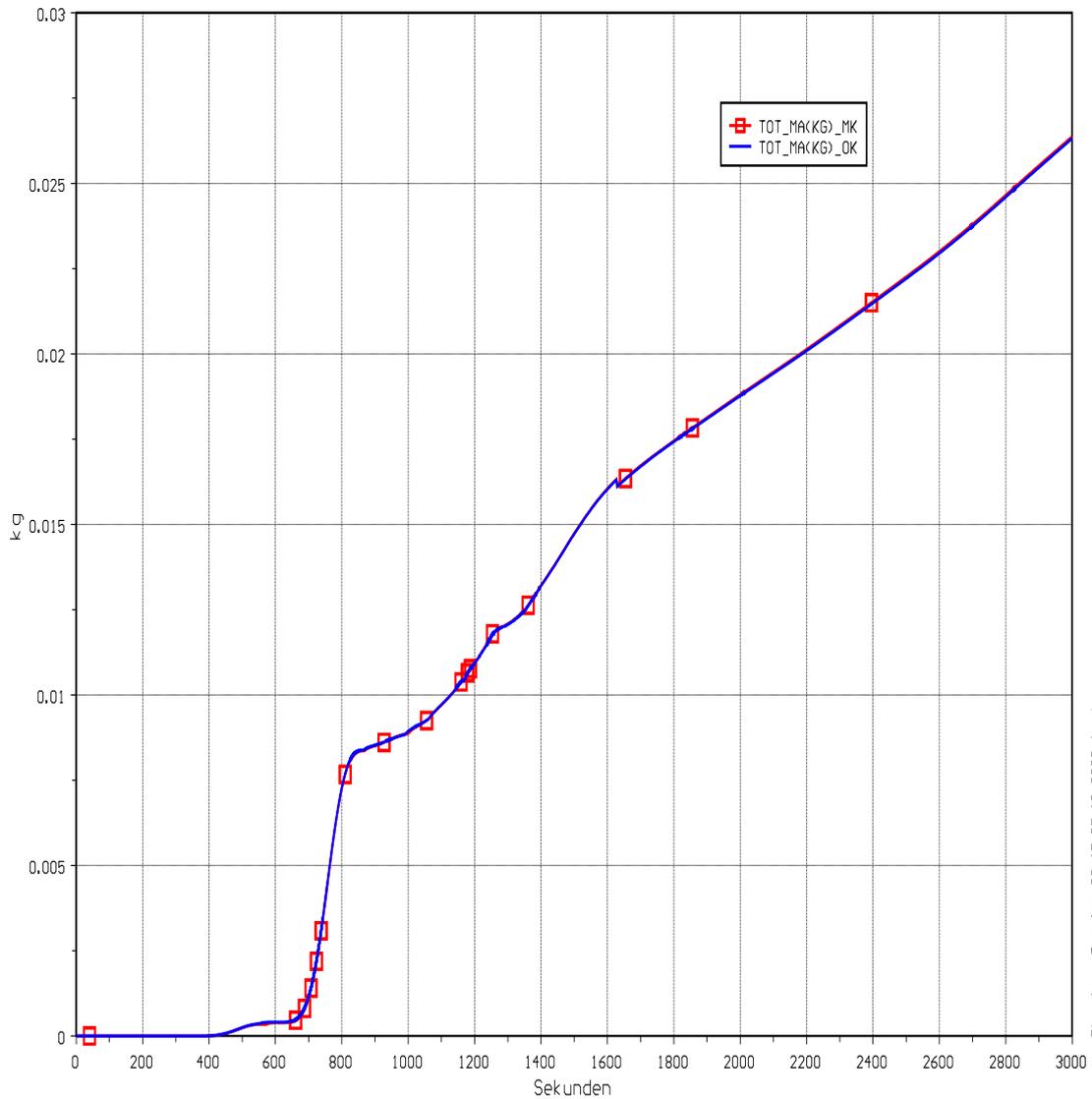


Fig. 1, , Tue Apr 22 15:37:13 2009, fcmdr.ptg

**Abb. 2.62** Im Kreislauf abgelagerte Massen (alle Elemente und Verbindungen)

In Abb. 2.62 sind die im Kreislauf abgelagerten Massen aller Elemente und Verbindungen sowohl für den Fall mit dem Kinetik-Modell als auch ohne dieses Modell dargestellt. Die Ergebnisse sind nahezu identisch. Betrachtet man einzelne chemische Elemente und ihre Verbindungen, so sind die Unterschiede zwischen den Fällen signifikanter. Als erstes sollen die Iod-Verbindungen betrachtet werden, da sie auch im Kinetik-Modell vorkommen. Die insgesamt im Kreislauf abgelagerte Iod-Masse ist nahezu unabhängig von den angewählten Modellen (Abb. 2.63). Ebenso verhält es sich mit den an die Umgebung (Containment) über die Bruchstelle abgegebenen Iod-Massen (schwarze Kurven).

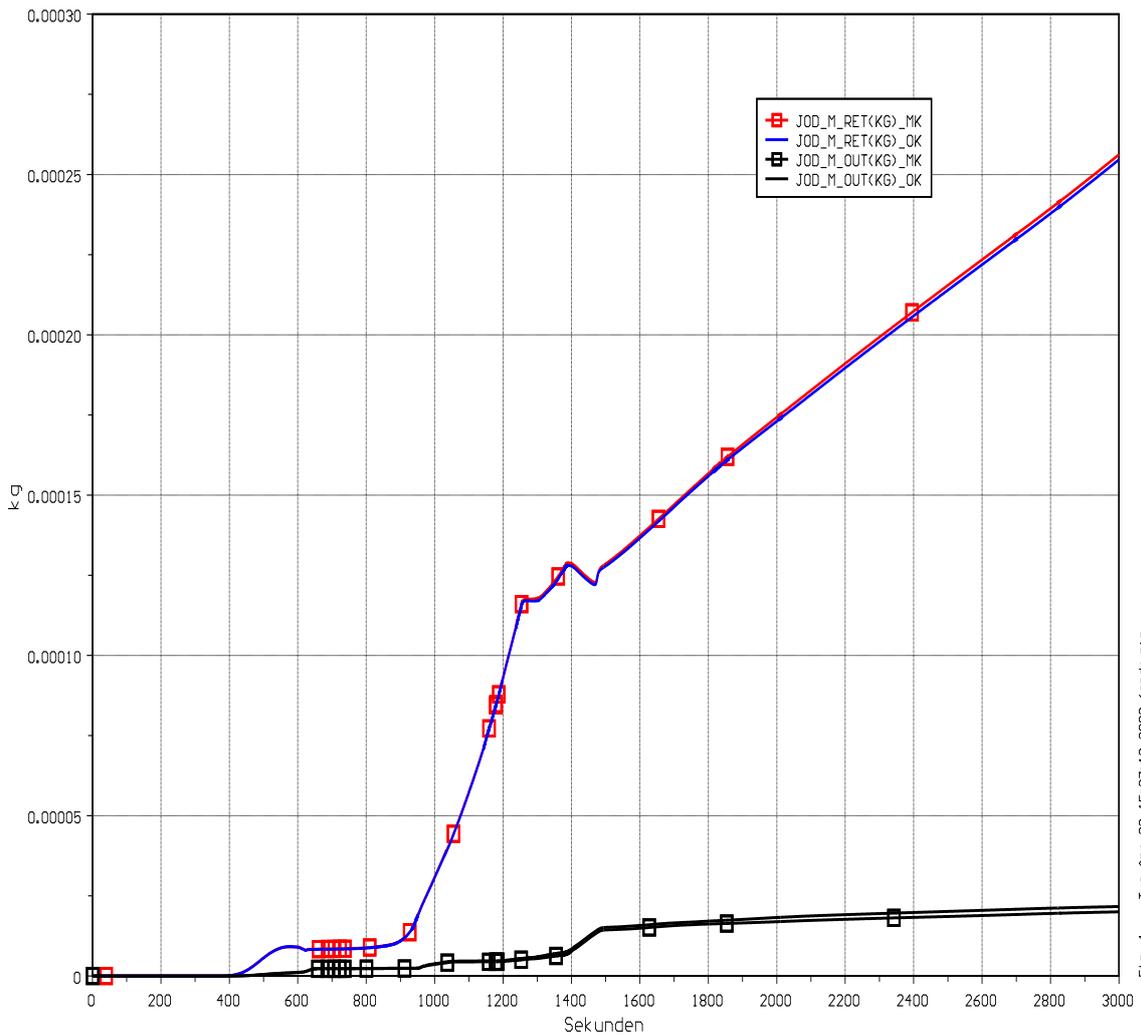
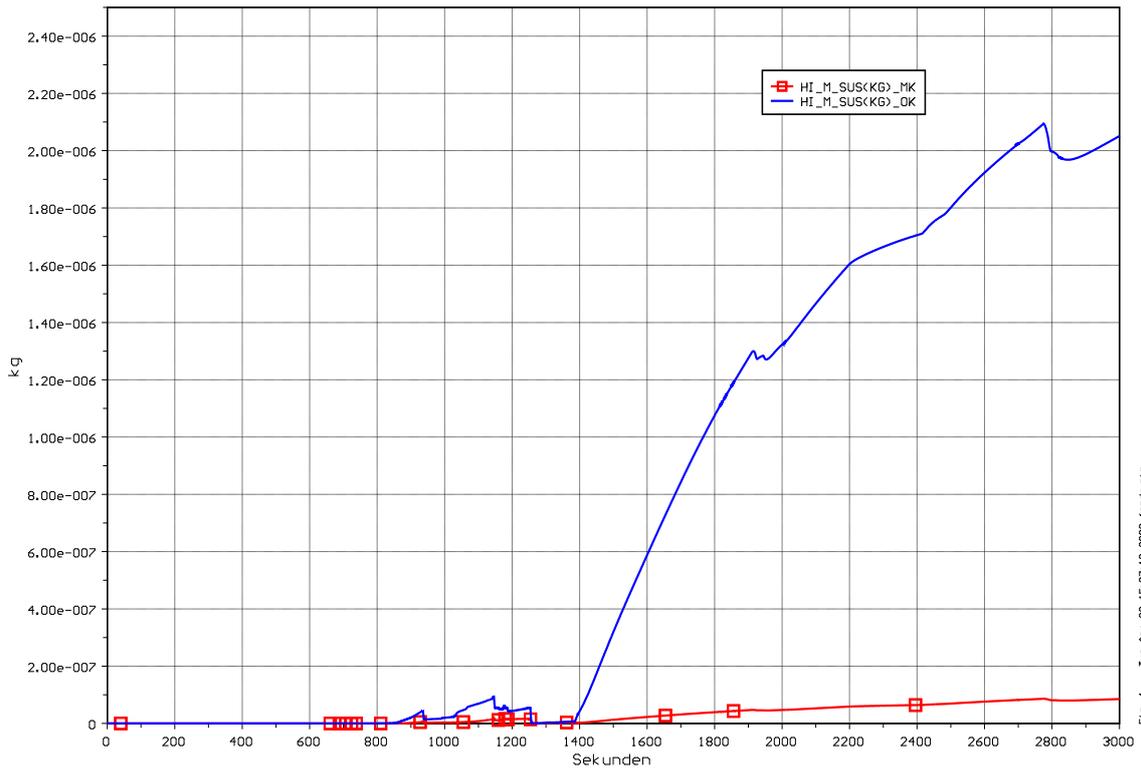


Fig. 1, , Tue Apr 22 15:37:13 2003, fiondr.png

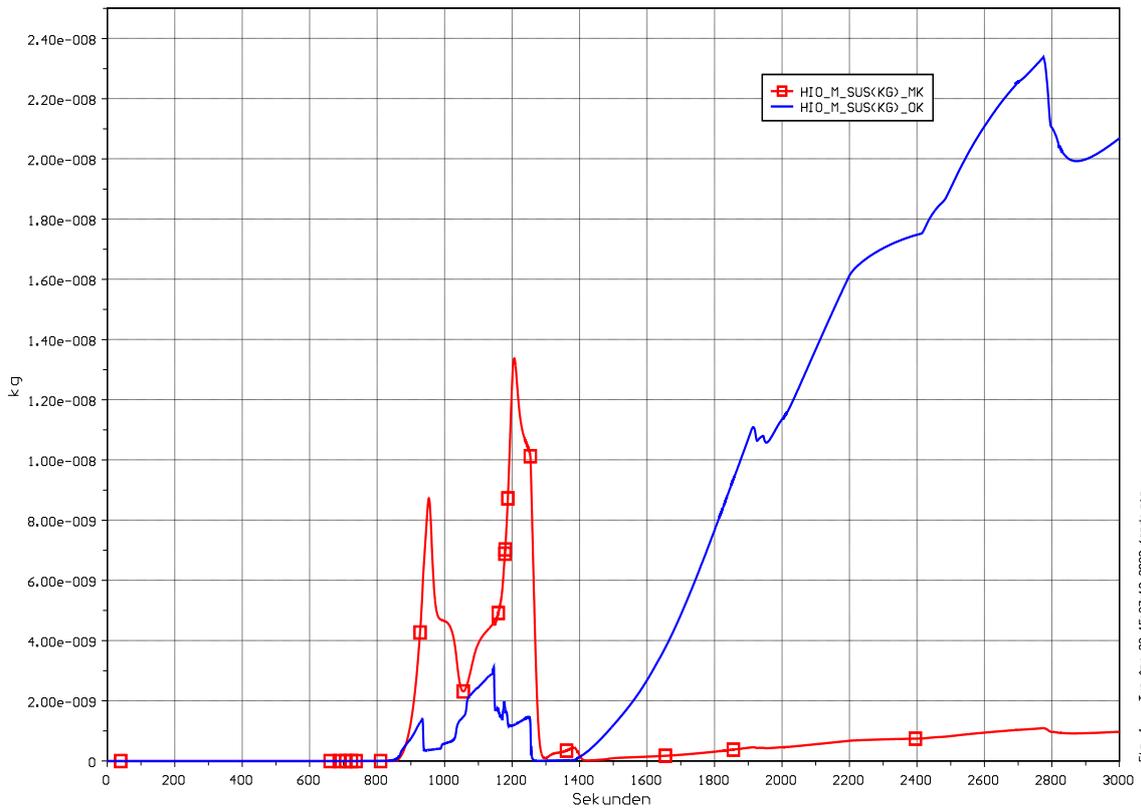
**Abb. 2.63** Im Kreislauf verbleibende und freigesetzte Iod-Masse

Anders verhält es sich bei den Iod-Verbindungen. Das soll exemplarisch an den Verbindungen Wasserstoffiodid (HI), Halogensauerstoffsäure (HIO) und Cäsiumiodid (CsI) gezeigt werden (Abb. 2.64 bis Abb. 2.66).

Da das Kinetik-Modell noch nicht an Versuchen ausreichend verifiziert ist, und da die Gesamtbilanz - eingespeiste Masse, im Kreislauf verbleibende Masse, ausgetretene Masse - eines Elements von der Modellwahl unbeeinflusst ist, erscheint es gerechtfertigt, bei der weiteren Entwicklung des SOPHAEROS-Modells die Validierung des Kinetik-Modells zurück zu stellen.



**Abb. 2.64** Im Kreislauf verbleibende Wasserstoffiodid-Masse (Dampfsuspension)



**Abb. 2.65** Im Kreislauf verbleibende HIO-Masse (Dampfsuspension)

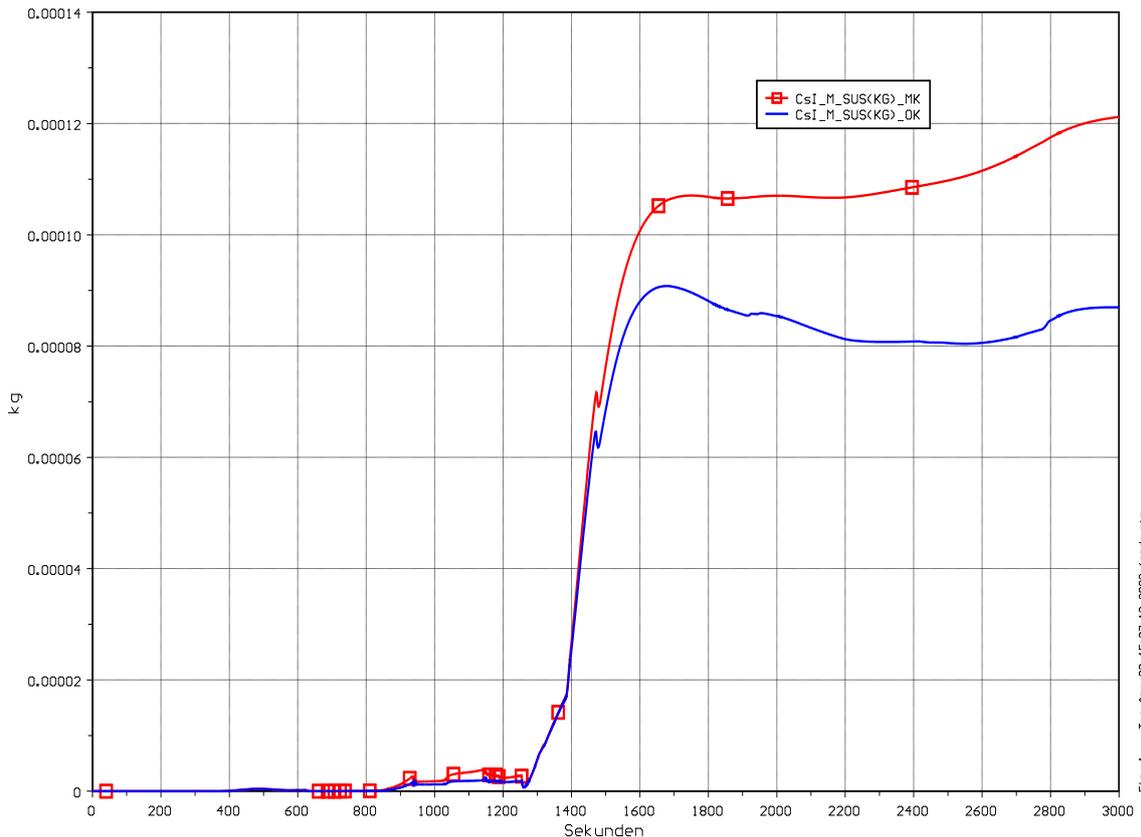


Fig. 1.1, Tue Apr 22 15:37:13 2003, fender.pptg

**Abb. 2.66** Im Kreislauf verbleibende Cäsiumiodid-Masse

Die ersten Rechnungen mit dem neuen SOPHAEROS-Modell haben gezeigt, dass das neue Modell sehr viel mehr Anwendungsmöglichkeiten bietet, ohne dass die Anforderung an die Rechnerumgebung gestiegen ist. Durch die Anwendung der oben skizzierten Optimierungsmöglichkeiten wird das neue SOPHAEROS nicht nur detaillierte physikalische Aussagen liefern, sondern auch effizienter sein als sein Vorgänger.

## 2.8 Erweiterung der MEWA-Einbindung

Das Modul MEWA, mit dem das Verhalten von Schüttbetten in der Spätphase berechnet werden kann, wird vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart entwickelt. Da es häufig besonders bei zweiphasigen Strömungsvorgängen durch das Schüttbett zu Instabilitäten bei der Kopplung zwischen MEWA und ATHLET-CD kommt, wurde mit dem IKE beraten, wie die Stabilität verbessert werden kann. So fand auch ein Treffen von Entwicklern von ATHLET, ATHLET-CD und MEWA statt, bei dem die Anwendbarkeit von neuen Lösungsverfahren (wie beispielsweise Krylow-Unterraum-Verfahren zum Lösen großer, dünnbesetzter linearer Gleichungen) diskutiert wurde.

chungssysteme) in MEWA und deren Auswirkungen auf die Kopplung diskutiert wurde. Eingang fanden hierbei auch Erfahrungen aus dem Thermohydraulik-Modul ATHLET.

Im Rahmen der Nachrechnung des Schüttbett-Versuchs QUENCH-17, bei dem die Zielstellung war, die Kühlbarkeit des vollständig oxidierten und fragmentierten Brennstabbindels zu untersuchen, wurde ab Beginn der Wassereinspeisung das Modul MEWA für die Simulation mit ATHLET-CD eingesetzt. Mit der Aktivierung des MEWA-Modells werden alle Differentialgleichungen, die das Brennstabverhalten (ECORE Modell) sowie auch das Thermofluid-Verhalten im definierten MEWA-Bereich beschreiben, im Integrationsmodul FEBE ausgeschaltet. Der MEWA-Bereich umfasst hierbei die Höhe des gebildeten Partikelbetts, das in der gewählten Nodalisierung drei Fluidvolumen umfasst. Die Randbedingungen für die noch verbleibenden ATHLET-CD Gleichungen werden dann über spezielle Kopplungsroutinen des MEWA Moduls definiert.

Um die Ablauffähigkeit der Simulation zu verbessern, wurde der ursprünglich entsprechend der Höhe der Pelletsegmente mit 3,5 mm angenommene Teilchendurchmesser auf den Wert 5 mm erhöht. Diese Änderung entspricht auch den ersten Auswertungen des Versuchs, die größere Hüllrohrabschnitte im gesammelten Debris zeigten und somit eine verbesserte Durchlässigkeit für das Quenchwasser ermöglichten.

Des Weiteren wurden wichtige Modellparameter für MEWA wie folgt gewählt (in der Eingabedatenbeschreibung empfohlen):

- Korrelation für die Wärmeleitfähigkeit im Schüttbett: Imura/Vortmeyer Modell (CONDMOD=3);
- Kontrollgröße für die Berechnung der Kapillarkräfte des Fluids: Modell wird nicht benutzt (LEV\_LIQ=0)
- Steuerung für die Berechnung der Permeabilität des Debrisbetts: Modell von Ergun (BED\_MODEL=0)
- Steuerung für Zweiphasen-Reibungsmodell: Reed Modell (FRIC\_MODE=0)

Die noch verbleibende Schwingungsanfälligkeit der Kopplung von MEWA-Zellen, die mit Wasser nahezu vollständig aufgefüllt sind, lässt noch den Bedarf an weiteren Entwicklungsarbeiten erkennen, da bereits diverse programmtechnische Änderungen notwendig waren, um die Ablauffähigkeit für QUENCH-17 zu gewährleisten. Die parallele

Anwendung von MEWA im Kern und im unteren Plenum hängt wesentlich von den Weiterentwicklungen des Moduls beim IKE ab. Die grundlegenden Arbeiten seitens ATHLET-CD zur Vorbereitung des Einbaus von MEWA wurden durch die Verlängerung der Zonen vom Kern bis ins untere Plenum durchgeführt.



### **3 Erhöhung der Rechenstabilität**

#### **3.1 Einbau einer stabilisierten Schnittstelle für externe Modelle**

Um eine Nachrechnung des Versuchs QUENCH-17 (Debrisbett-Kühlung) mit dem Modul MEWA zu ermöglichen, war es notwendig, noch vorhandene Schwachstellen zu bereinigen bzw. Optimierungen vorzunehmen, um eine bessere Konvergenz des Verfahrens zu ermöglichen. Ein Relaxationsfaktor wurde eingeführt, falls die Anzahl der internen Interaktionen eine vom Anwender bestimmte Grenze erreicht. Ein wesentlicher Teil der Arbeiten betraf die Anpassung des Programmablaufs in MEWA an das FEBE-Integrationsverfahren in ATHLET.

Außerdem wurde MEWA an die neue ATHLET-Version 3.0A so weit angepasst, dass nun die Simulation von 6 statt 5 nicht-kondensierbaren (NC-) Gasen, einschließlich der Option USERGAS, möglich ist. Falls NC-Gase simuliert werden, gibt es nun keine zusätzliche Faktorisierung der Jakobi-Matrix im MEWA-Subprogramm *emstepc*, was in verschiedenen Testfällen eine Erhöhung der Stabilität der numerischen Lösung bewirkt.

Schließlich wurde die Übertragung der Randbedingungen zwischen MEWA und dem Wärmeleitmodul HECU in ATHLET überarbeitet, wodurch die Lauffähigkeit von ATHLET-CD bei Verwendung von MEWA verbessert wurde.

Die Verbesserungen in MEWA bzw. der Schnittstelle zwischen MEWA und ATHLET-CD konnten im Rahmen der Validierung bei der Simulation des Versuchs QUENCH-17 (/AUS 13c, BAL 13a, BAL 13b/) erfolgreich überprüft werden.

#### **3.2 Einbau einer Überwachung der numerischen Stabilität**

Die komplexen physikalischen Vorgänge während der Kernzerstörung führen zu hohen numerischen Anforderungen und erfordern somit ein hohes Maß an Stabilität. Daher ist die Verbesserung der numerischen Stabilität ein wichtiges Ziel dieses Vorhabens. Der erste Schritt ist dabei die Analyse der numerischen Instabilitäten, was mit grafischen Mitteln am angenehmsten zu realisieren ist. Zu diesem Zweck wurde ein externes Tool namens CView entwickelt /WEB 13/.

CView (Core View) ist ein Python-Programm zum Visualisieren des Kern-Bereichs von ATHLET-CD-Simulationen. Das Programm wurde in erster Linie als Post-Processing-Tool zum Identifizieren und Analysieren von Problemen während der Simulation (z. B. bei Programmabbrüchen, verursacht durch Instabilitäten im Kernbereich) erstellt und richtet sich daher hauptsächlich an Entwickler von ATHLET bzw. ATHLET-CD. Damit CView bei Bedarf schnell und unkompliziert an das jeweilige Problem angepasst werden kann, wurde bei der Entwicklung die Scriptsprache Python gewählt. Außerdem ist CView damit auch problemlos auf verschiedenen Betriebssystemen lauffähig.

Neben dem Reaktorkern können mit CView prinzipiell auch andere Teile des Kühlkreislaufs dargestellt werden, allerdings mit deutlichen Abstrichen hinsichtlich der tatsächlichen geometrischen Anordnung der Objekte, da die Geometrie (zumindest in der ersten Version von CView) nicht vollständig ausgelesen wird. Lediglich die Anzahl der Nodes jedes Objektes wird vom Programm selbst ermittelt, nicht jedoch die räumliche Größe und Ausrichtung der Objekte.

Abb. 3.1 zeigt einen Screenshot von CView. Mithilfe des Programms können beliebige Variablen aus den in der ATHLET-CD-Simulation erzeugten Daten eingelesen und je nach Wert farblich unterschiedlich angezeigt werden. Neben den Werten in bestimmten Nodes können auch Strömungen zwischen verschiedenen Nodes angezeigt werden, was bei einer Analyse von Instabilitäten besonders wichtig ist. So können beispielsweise die Einflüsse von Blockaden auf das Verhalten der Strömungen im Falle von Kernschmelzvorgängen detailliert untersucht werden. Außerdem ist es möglich den zeitlichen Verlauf einer Variable für eine bestimmte Zelle in einem Diagramm darzustellen (s. Abb. 3.2). Es ist auch möglich die Grafiken im PS-, PDF- oder PNG-Format abzuspeichern.

Die Entwicklung des Tools war von vornherein so konzipiert, dass bei Bedarf Erweiterungen bzw. Anpassungen an bestimmte Problemstellungen mit möglichst geringem Aufwand durchzuführen sind. Somit ist ein variabler und vielseitiger Einsatz des Programms gewährleistet. CView wurde auch schon erfolgreich bei der Analyse von Simulationsergebnissen im Rahmen der Unterstützung interner Anwender und auch bei der Programmentwicklung eingesetzt (s. beispielsweise Abschnitt 2.3 oder Abschnitt 6.2).

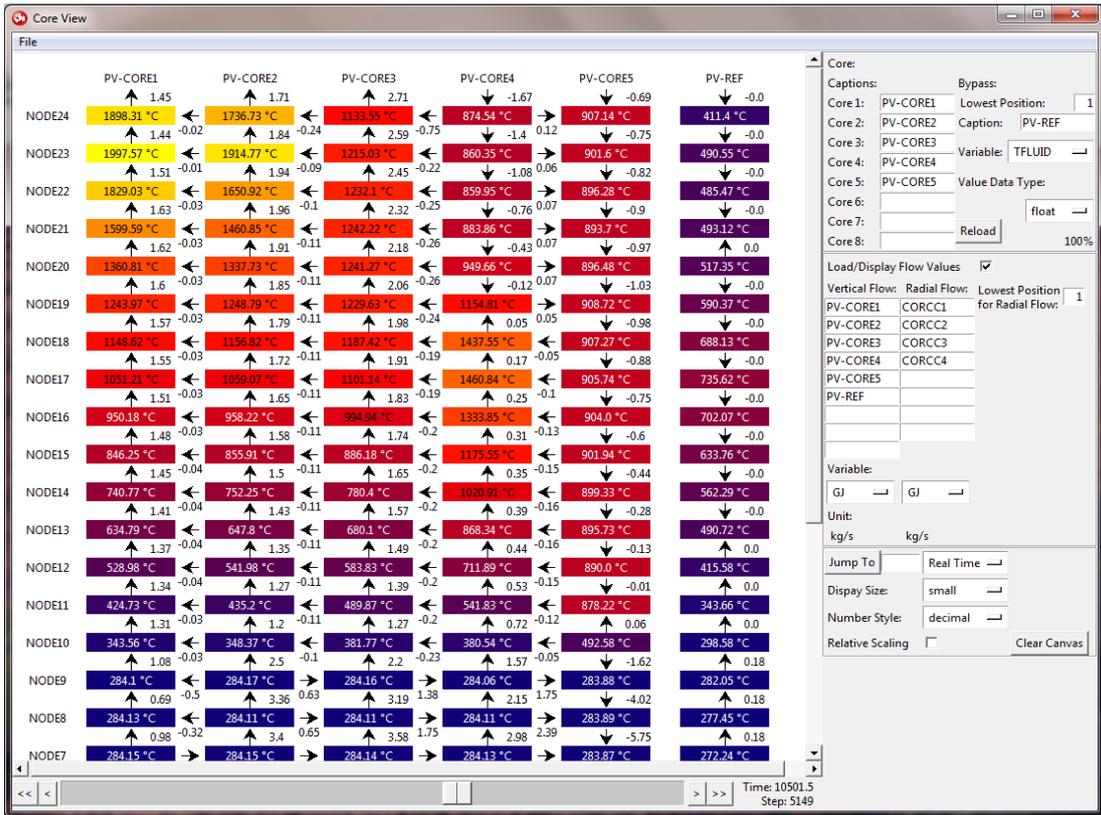


Abb. 3.1 Screenshot von CView

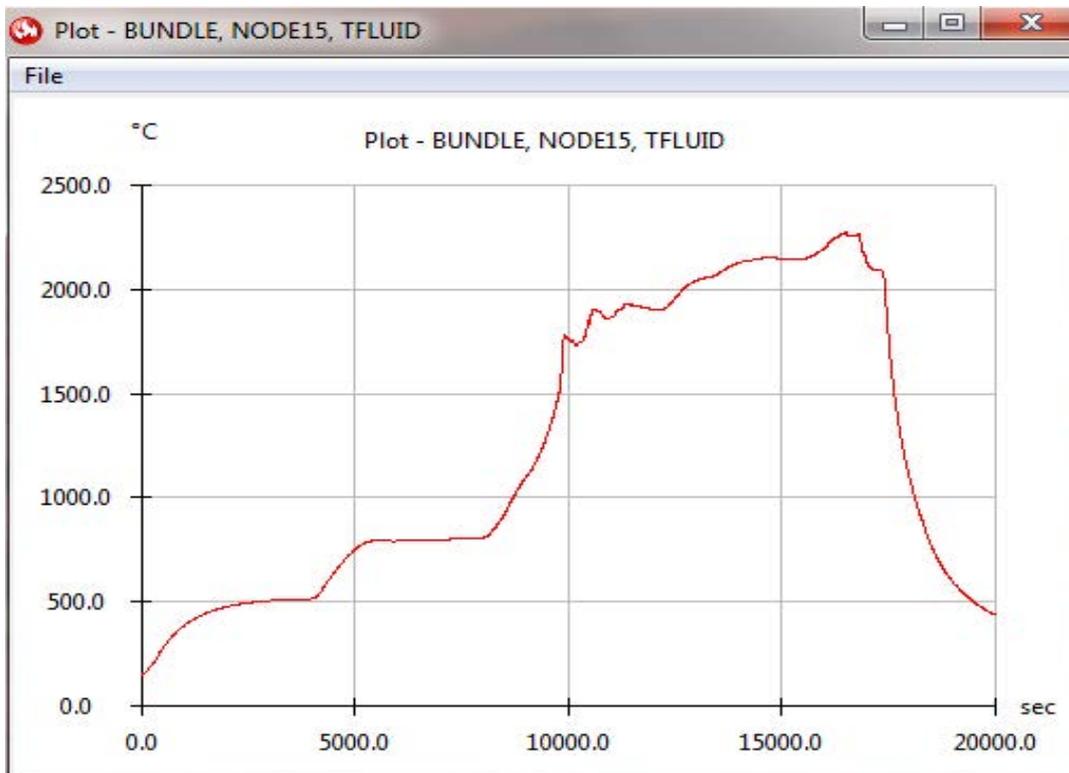
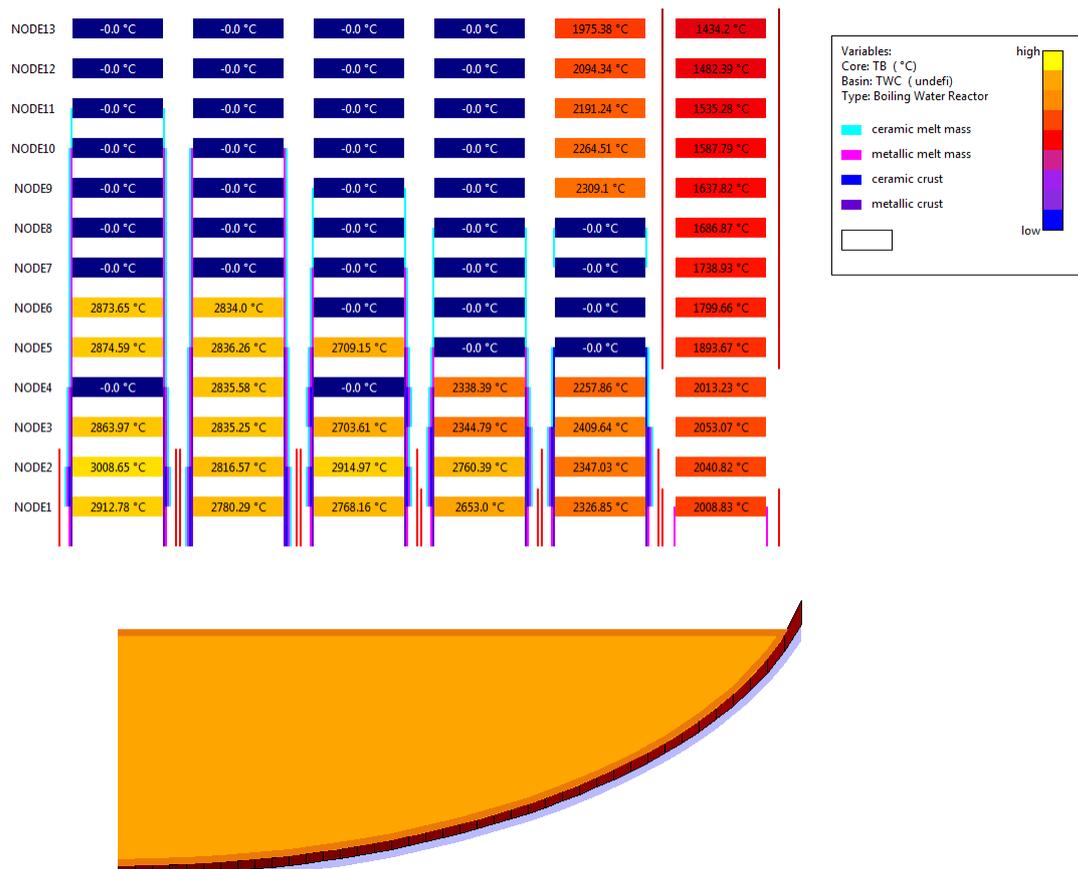


Abb. 3.2 Exemplarisches Diagramm in CView



**Abb. 3.3** Beispielhafte Darstellung von Reaktorkern und unterem Plenum mit CView

Durch eine Erweiterung des ursprünglichen CView können jetzt auch das untere Plenum (Abb. 3.3) sowie die Kanisterwände von Siedewasserreaktoren dargestellt werden. Zusätzlich ist es möglich die verschiedenen metallischen und keramischen Anteile der Schmelze bzw. Kruste sowie bestimmte aufsummierte Größen anzuzeigen. Besonders letzteres ist sehr hilfreich, um Massenbilanzen zu überprüfen.

Die meist sehr zeitaufwändigen Analysen von Instabilitäten konnten dabei bereits mithilfe der grafischen Darstellung mittels CView unterstützt werden. Besonders die Bestimmung der Massen- und Energiebilanzen konnten durch Darstellung der entsprechenden Ströme erleichtert werden.

Somit ist es den Entwicklern nun möglich, neben den bereits bestehenden Postprocessing-Tools auf ein weiteres Werkzeug zur Analyse von Simulationsergebnissen zuzugreifen, was auch bei der Suche nach Fehlern im Programm äußerst hilfreich sein kann. Eine mögliche künftige Anwendung von CView wäre die Erweiterung und Bereitstellung des Programms für interne und externe Anwender von ATHLET-CD, um spezielle Effekte im Kernbereich anschaulich visualisieren zu können.

Um die Vorgänge in der Spätphase eines schweren Störfalls mithilfe grafischer Darstellung näher untersuchen zu können, wurde außerdem die Ausgabe der dazu nötigen Daten von AIDA hinzugefügt (vgl. Kapitel 5.3). Dadurch wurde es ermöglicht, AIDA-Daten in ATLAS anzeigen zu lassen. So kann auch bei Analysen im Falle von Problemen mit der numerischen Stabilität in der Spätphase auf die Visualisierung zurückgegriffen werden, was die Arbeit oftmals deutlich erleichtert.

### **3.3 Durchgehende Analyse und Korrektur von numerischen Instabilitäten**

Viele Probleme, die zu Programmabbrüchen oder Instabilitäten führen, treten erst durch Anwendung von ATHLET-CD in möglichst vielen Szenarien auf. Diese müssen dann in der Regel durch sehr zeitaufwändige Analysen untersucht werden, um Lösungen zu finden. So zeigte die Teilnahme am OECD BETMI-2 Benchmark im Rahmen der ATHLET-CD Validierung /AUS 13c, BEN 15/, dass Störfallsequenzen, in denen größere Kernschäden auftreten, starke Instabilitäten bei der numerischen Integration bis hin zu Programmabbrüchen aufweisen. Durch Vermeidung von Diskontinuitäten bei der Berechnung der Formverluste und des äquivalenten hydraulischen Durchmessers als Funktion der Porosität innerhalb eines Integrationszeitschrittes, insbesondere im Falle einer partiellen Kanalblockade, konnte die Robustheit des Rechenprogramms deutlich erhöht werden.

Die wesentlichen Programmänderungen wurden in der Subroutine *etfbk4.f* durchgeführt, welche die Neuberechnung der Geometrie-Daten (insbesondere des hydraulischen Durchmessers, der Strömungsfläche und des Formverlustkoeffizienten) für die thermohydraulischen Kernobjekte als Funktion der aktuellen, lokalen Porositäten steuert.

Zwei zusätzliche Optionen für den Steuerparameter ITFBK (Eingabeparameter des Verlagerungsmodells in ATHLET-CD) wurden eingeführt. Für beide Optionen (ITFBK = 0 bzw. 3) wird nun eine quadratische Interpolation (statt der ursprünglichen linearen Interpolation) zwischen den Porositätsgrenzen zur Blockade  $P_{open}$  und  $P_{close}$  durchgeführt. Darüber hinaus, für die Option ITFBK = 3 wird der hydraulische Durchmesser für die Querverbindungen im Kernbereich nicht verändert.

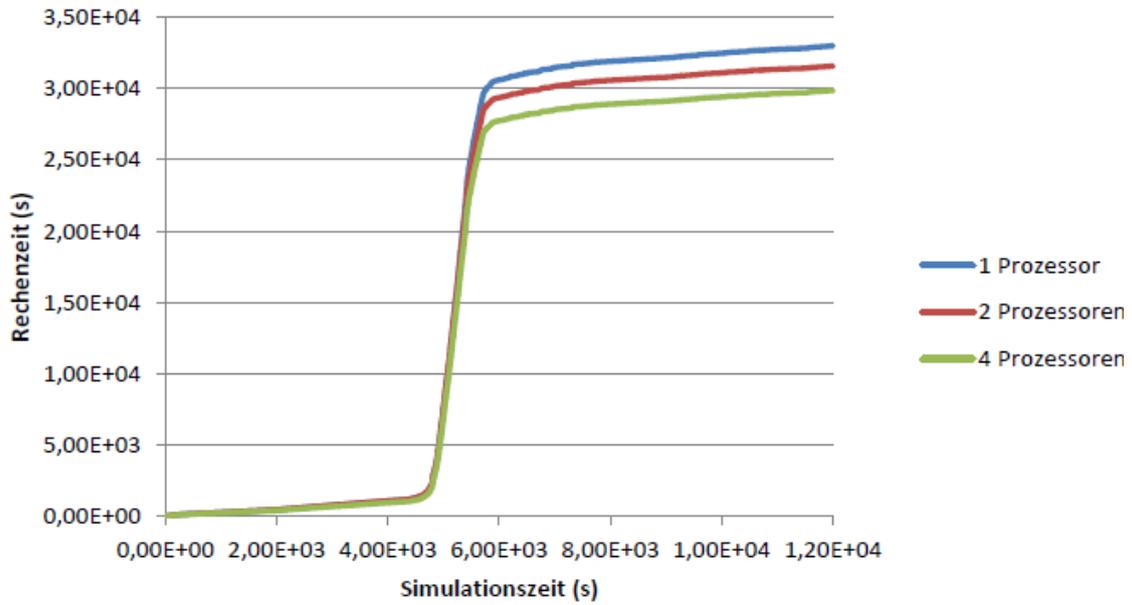
### 3.4 Parallelisierung auf Modulebene

Die Parallelisierung von SOPHAEROS wurde mit der alten Version implementiert. Für die neue Version von SOPHAEROS befindet sich die Parallelisierung derzeit noch in der Entstehungsphase und soll erst vervollständigt werden, wenn eingehendere Tests in der Validierung erfolgreich durchgeführt wurden, da selbst kleinere Anpassungen in SOPHAEROS zu großem Aufwand bei der Parallelisierung führen können.

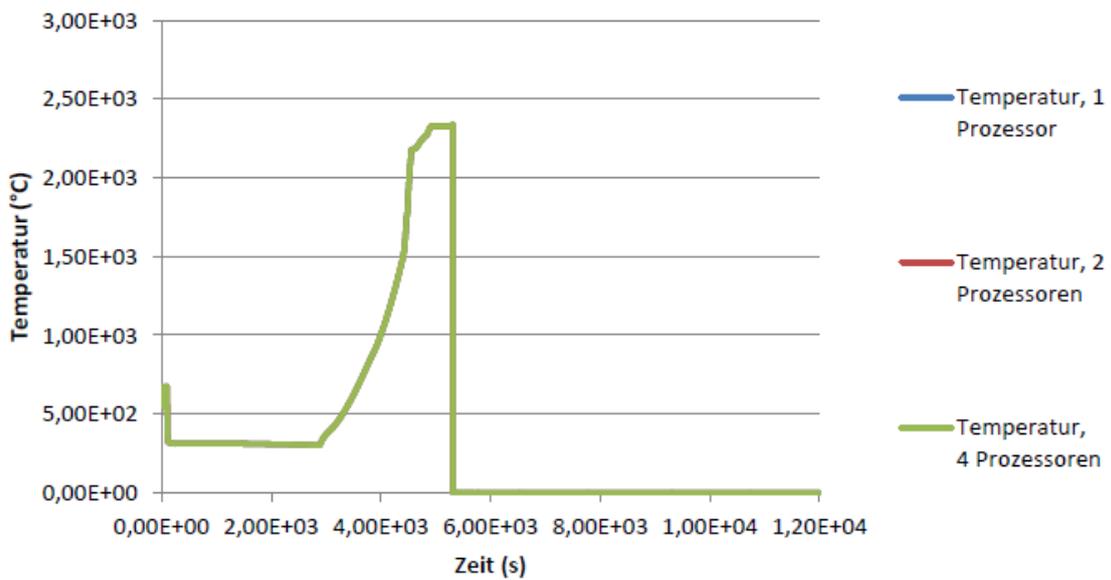
Für die aktuelle Entwicklungsversion von ATHLET-CD wurde auch eine Version gebunden, in der die thermohydraulischen Vorgänge parallelisiert sind. Man kann dabei im Datensatz angeben, wie viele Prozessoren genutzt werden sollen. Um den Einfluss dieser Parallelisierung auf die Rechenzeit zu untersuchen, wurde ein hypothetisches Station Blackout Szenario eines Siedewasserreaktors vom Typ SWR-69 unterstellt und analysiert.

Es wurden Simulationen unter Verwendung von einem, zwei bzw. vier Prozessoren durchgeführt. In Abb. 3.4 ist die Abhängigkeit der Rechenzeit von der Anzahl der verwendeten Prozessoren dargestellt. Erwartungsgemäß verringert sich die Rechenzeit für die 12000 Sekunden lange Simulation mit Erhöhung der bei der Rechnung benutzten Anzahl an Prozessoren. So läuft die Simulation mit vier Prozessoren ungefähr 10% schneller als die Rechnungen mit nur einem Prozessor. Bei ungefähr 4500 Sekunden beginnt der die Kernzerstörungsphase mit Freilegung des Kerns. In der Folge beginnen zu diesem Zeitpunkt die Oxidationsprozesse und die Temperaturen steigen an. Abb. 3.5 zeigt beispielhaft die Temperatur in Node 14 im zweiten Kernring und Abb. 3.6 zeigt den durch Oxidation entstandenen Wasserstoff. Durch die aufwändige Berechnung verschiedener Prozesse während der Kernzerstörung und deren Rückwirkung auf die thermohydraulischen Prozesse steigt die Rechenzeit deutlich an. Wie Abb. 3.4 zeigt, wird genau zu dieser Zeit die Rechenzeit durch die Parallelisierung verringert. Somit kann also durch Parallelisierung der thermohydraulischen Vorgänge die Rechenzeit in ATHLET-CD gerade für die Zeit während der Kernzerstörung reduziert werden.

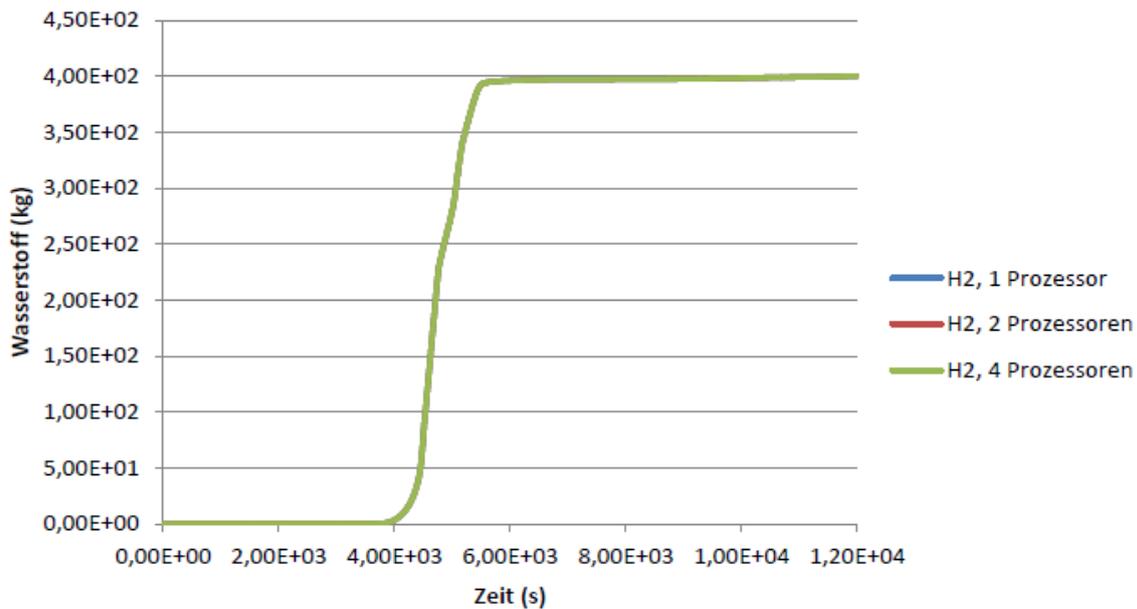
Abb. 3.5 und Abb. 3.6 belegen außerdem, dass die berechneten Werte der Simulationen unabhängig von der Anzahl der verwendeten Prozessoren sind. Die Ergebnisse sind in allen Fällen identisch.



**Abb. 3.4** Rechenzeit in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren



**Abb. 3.5** Brennstofftemperatur in Node 14 von Ring 2 in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren (nach Abschmelzen des Brennstoffs wird die Temperatur auf 0 °C gesetzt)



**Abb. 3.6** Akkumulierte Wasserstoffmenge in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren

### 3.5 I/O-Einheiten Manager

Die Module OREST und FIPISO benötigen während des Programmablaufs viele Dateien, die alle als I/O-Einheit angesprochen werden müssen. Dabei kann es bei der Vergabe der Dateinummern leicht zu Konflikten kommen. Deshalb wurde in ATHLET-CD eine automatische Vergabe der Dateinummern implementiert.

Dem Programmentwickler wird eine neue Routine zur Verfügung gestellt, die einfach zu handhaben ist:

```
KAN = SFILEMAN(OPFILES,KAN0)
```

KAN: neue Kanalnummer

KAN0: Nummer mit der die Suche gestartet wird: z. B. 35

OPFILES: Name der SFILEMAN rufenden Routine.

Das Ergebnis der freien I/O-Einheitsuche wird in der Variablen KAN gespeichert. KAN0 ermöglicht die Vorgabe einer Startnummer bei der Suche nach einer freien I/O-Einheit. So ist es möglich für jeden Modul einen Nummernkreis aufzubauen. Die Anga-

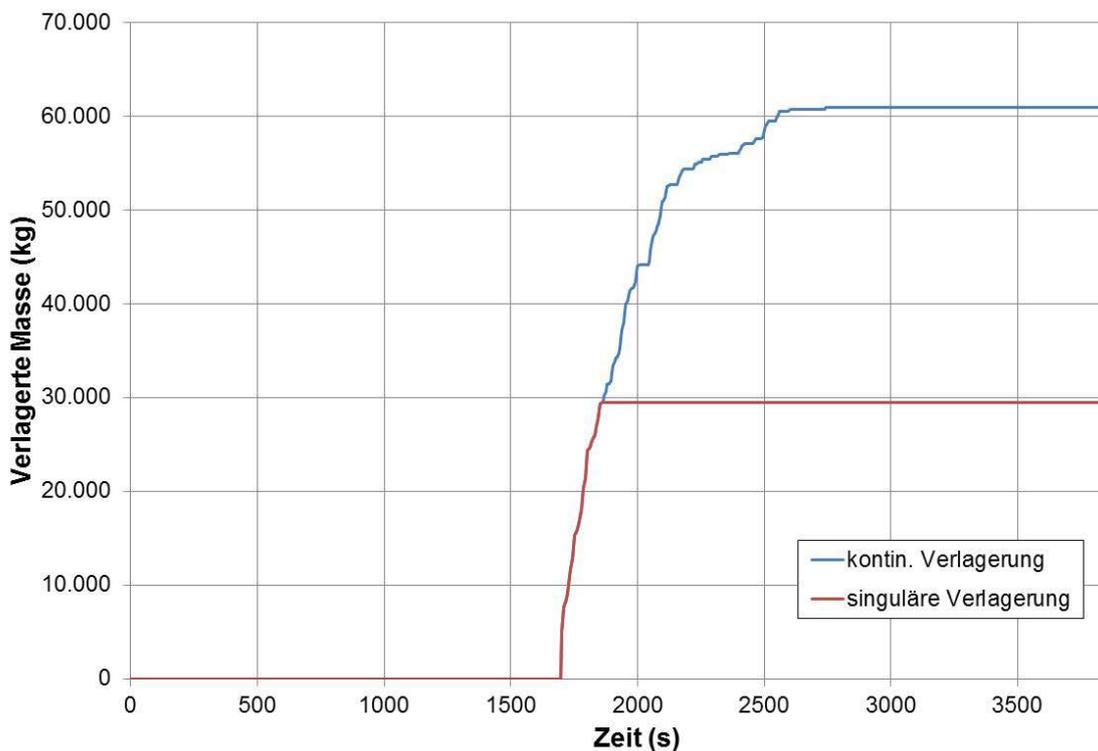
be des Namens des rufenden Programmes soll eine eventuelle Fehlersuche erleichtern.



## 4 Anlagen- und prozessspezifische Erweiterungen

### 4.1 Erstellung anlagenspezifischer Verlagerungsmodelle

Als AIDA neu in ATHLET-CD implementiert wurde, war es zunächst nur möglich geschmolzenes Material in einem einzigen Schritt an AIDA zu transferieren. AIDA hat dann mit dieser konstanten Masse gerechnet. Dabei wurde angenommen, dass bei hinreichend großer Ansammlung von Schmelze im Kern die untere Gitterplatte versagt und die Schmelze ziemlich schnell ins untere Plenum verlagert wird. Im realen Fall kann sich jedoch auch nach dem Versagen der Gitterplatte im Kernbereich neue Schmelze bilden, die sich dann im Laufe der Zeit ebenfalls nach unten verlagern wird, was in der damaligen Version jedoch nicht simuliert werden konnte. Eine deutliche Verbesserung der Simulation der Spätphase einer schweren Störfallsequenz war daher der Einbau der kontinuierlichen bzw. sukzessiven Verlagerung von geschmolzenem Material ins untere Plenum bei gleichzeitiger Übergabe dieser Schmelze an AIDA.



**Abb. 4.1** Ins untere Plenum verlagerte Masse

Abb. 4.1 verdeutlicht den Unterschied. Bei der roten Kurve geschieht die Verlagerung in einem Schritt und danach folgt keine weitere Verlagerung mehr. In der blauen Kurve hingegen kommt es nach der ersten Verlagerung später zu weiteren Verlagerungen,

sobald sich im Kernbereich wieder entsprechend Schmelze angesammelt hat. Diese neue Modellierung, die in ATHLET-CD 3.0A enthalten ist und über IDMTLP = 1 in ECOREMOD ausgewählt werden kann, gibt die Realität deutlich besser wieder als die erste, vereinfachte Modellierung. Damit verläuft die Verlagerung der Schmelze vom Kern ins untere Plenum deutlich realistischer, wie auch Rechnungen im Rahmen des TMI-Benchmarks BETMI-2 gezeigt haben. Der Unterschied macht sich dann natürlich auch im weiteren Verlauf der Unfallsequenz bemerkbar. Die Möglichkeit Schmelze kontinuierlich bzw. sukzessiv zu verlagern stellt also eine Verbesserung bei der gesamten Simulation der späten Phase dar.

## **4.2 Erstellung spezieller Modelle für Brennelementlagerbecken**

### **4.2.1 Simulation des Ignition-Tests im Rahmen des Sandia Fuel Projects**

Zur Simulation des Ignition-Tests der zweiten Phase des Sandia Fuel Projects (SFP) wurde der Datensatz aus der ersten Phase erweitert. Dabei wurden um das zentrale beheizte Brennelement in einer 1x4 Anordnung vier unbeheizte Brennelemente modelliert, wodurch die sog. „cold neighbour“ Bedingungen aus dem Experiment abgebildet wurden. Die Beschreibung der Testkonfiguration sowie die Ergebnisse der Simulationen werden in Kapitel 5.1 im Rahmen der Benchmark-Aktivitäten sowie in /AUS 13c/ beschrieben und diskutiert.

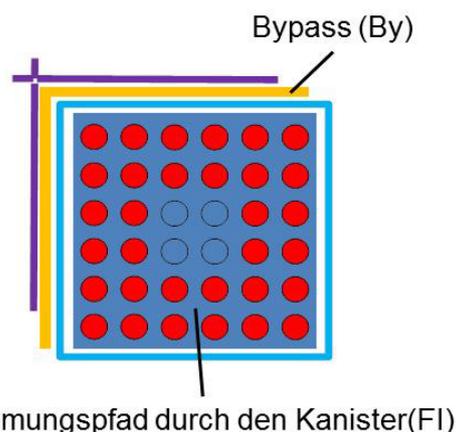
Zur Simulation der Bleche bzw. des Kanisters zwischen den Brennelementen werden Wärmeleitobjekte sog. HECU-Objekte in den ATHLET-CD Datensatz implementiert, so dass eine Wärmeübertragung sowohl durch Strahlung als auch über Wärmeleitung durch die HECU-Objekte von dem inneren beheizten Brennelement an die äußeren unbeheizten Brennelemente simuliert wird. Aufgrund der programmtechnischen Modellierung können HECU-Objekte zwar hohe Temperaturen erreichen, das Versagen der Strukturen nach Erreichen der Schmelztemperatur beispielsweise von Zirkaloy konnte in der hier verwendeten Version von ATHLET-CD jedoch noch nicht simuliert werden. Hierdurch kommt es im hohen Temperaturbereich zur nicht vollständigen Abbildung der Wärmeübertragungsphänomene, die im Experiment auftreten, da beispielsweise die Strahlung zwischen den Brennstäben im Fall eines versagten Kanisters nicht simuliert werden kann, weil programmtechnisch noch eine Wand vorhanden ist.

In diesem Fall müssten die Strukturen Eigenschaften und Modelle beinhalten, die für HEAT-Objekte im Modul ECORE definiert sind. Bisher sind in ATHLET-CD Objekte

zur Simulation der Brennstäbe, der Absorberstäbe in Druckwasserreaktoren sowie der Kanister und der Absorberblätter in Siedewasserreaktoren implementiert, die alle relevanten Phänomene während der Aufheizung des Kerns bis hin zum Versagen und Schmelzen der Strukturen abbilden können. Spezielle Objekte und Strukturen für Lagerbecken sind nicht implementiert. Auch ist es mit den vorhandenen Modellen nicht möglich die Kanister in Lagerbecken, die insbesondere bei Kompaktlagerbecken eine wesentliche Rolle spielen, abzubilden.



**Abb. 4.2** Exemplarische Darstellung eines Lagergestells mit Kanistern für das KKW Obrigheim /SKO 14/



**Abb. 4.3** SWR-Modellierung für SWR-Konfigurationen in ATHLET-CD /TRA 09/

Um die Modellbasis von ATHLET-CD auch für Brennelementlagerbecken zu ertüchtigen, ist in einem ersten Schritt die Implementierung der Kanister eines Kompaktlager-

gestells, die die einzelnen Brennelemente umgeben, notwendig. In Kompaktlagerbecken wird hierdurch vorrangig die Unterkritikalität der Brennelemente sichergestellt, die in ähnlichem Abstand wie im Reaktorkern angeordnet sind, so dass sie neutronenabsorbierende Wirkung haben und beispielsweise aus boriiertem Stahl hergestellt werden. Eine exemplarische Anordnung eines Lagergestells ist in Abb. 4.2 dargestellt, wie es im KKW Obrigheim verwendet wurde /SKO 14/.

Für die Abbildung der Kanister in Lagerbecken kann auf die bereits in ATHLET-CD implementierte Modellierung des Kanisters in Siedewasserreaktoren zurückgegriffen werden. Für Siedewasserreaktoren ist aber ein Zusammenwirken von Kanistern und Absorberblättern sowie den zugehörigen Strömungskanälen durch den Kanister und zwischen Kanister und Absorberblatt modelliert, die eine einfache Adaption nicht ermöglicht. Eine detaillierte Beschreibung der Siedewasserreaktor-Modellierung ist in /TRA 09/ gegeben (vgl. Abb. 4.3).

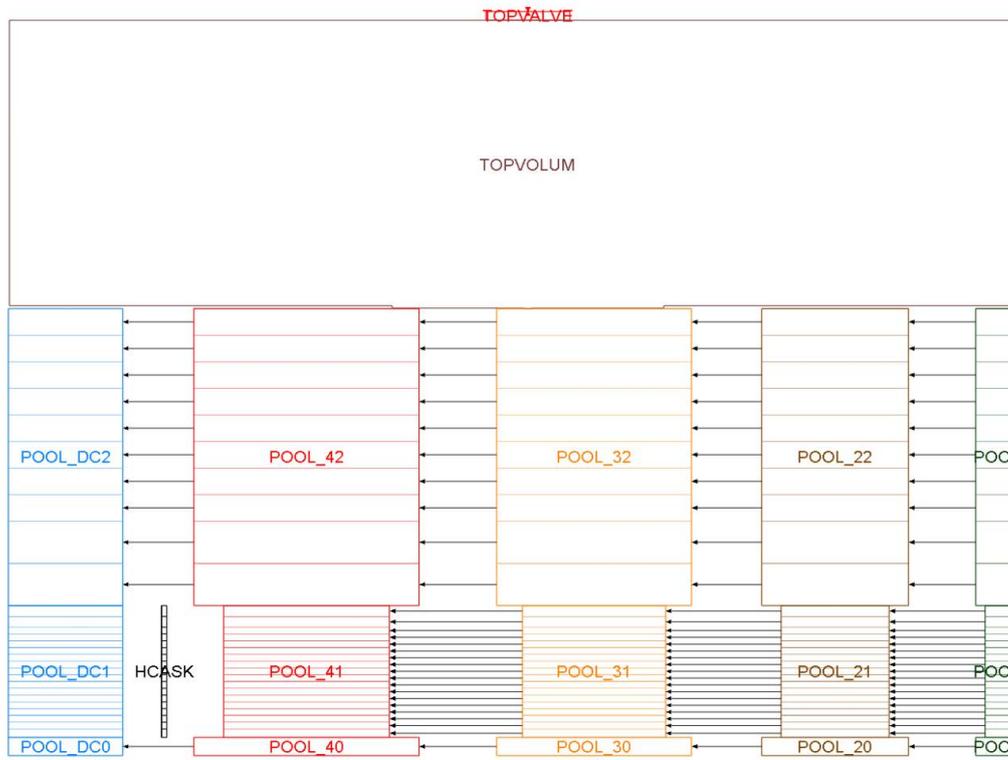
Für die Erstellung eines eigenen Modells für Lagerbecken, das beispielsweise über die Konfigurationsabfrage in der Eingabe (IBWR) abgefragt wird, müssen die Wärmebilanzen aus dem Siedewasserreaktor-Modell den geometrischen Bedingungen eines Lagerbeckens angepasst werden, d. h. Absorberblätter und deren Einfluss auf die Bilanzen müssen eliminiert werden. Darüber hinaus sind typische Materialien des Kanisters zu berücksichtigen, die Einfluss auf das Schmelzverhalten oder sich ggf. bildende Eutektika haben. Hierzu ist zunächst eine detaillierte Analyse des Materialverhaltens der Kanistermaterialien notwendig, da sie in Lagerbecken im Gegensatz zu Siedewasserreaktoren nicht zwingend aus Zirkaloy gefertigt sind, was auch einen Einfluss auf das Oxidationsverhalten und somit den Wasserstoffquellterm hat.

Anhand des Ignition-Tests im Rahmen des SFP, Phase II, kann die erweiterte Modellierung verifiziert werden, so dass mit einem verifizierten Modell Simulationen eines Lagerbeckens, beispielsweise einer deutschen Konvoi-Anlage, möglich sind.

#### **4.2.2 Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS für Brennelementlagerbecken**

Die Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS für die Simulation von postulierten Szenarien in Brennelementlagerbecken erfolgt über die bereits seit längerer Zeit implementierte thermohydraulische Schnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS. Hier-

für wird auf der ATHLET-Seite eine Discharge-Ventil verwendet und die ausgetragene Masse und Energie sowie Wasserstoff an COCOSYS übergeben und somit das zeitabhängige Volumen, das in ATHLET das Containment abgebildet hat, überschrieben.



**Abb. 4.4** ATHLET-CD Nodalisierung eines generischen Brennelementlagerbeckens

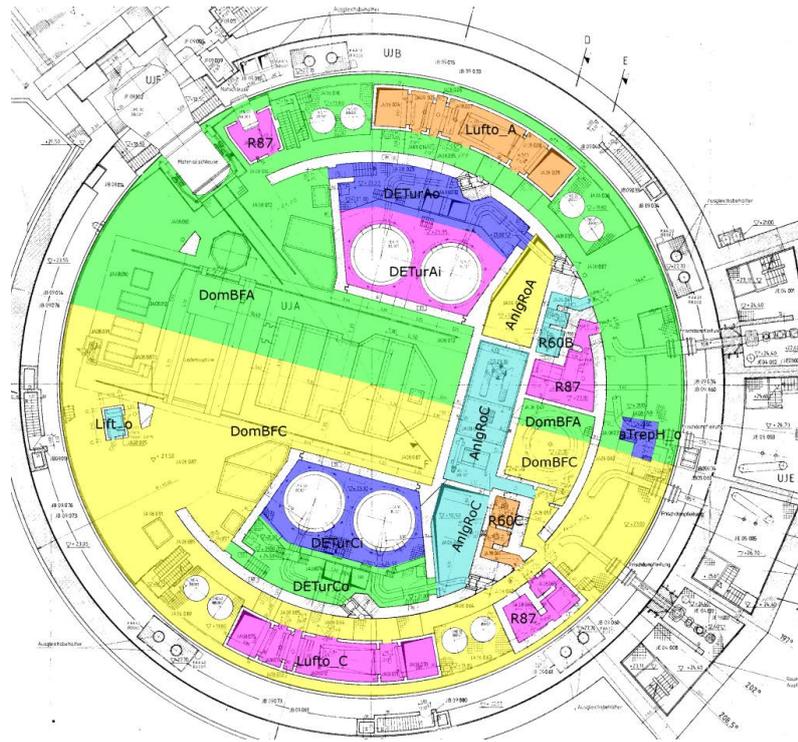
Die Schnittstelle liegt somit oberhalb des Brennelementlagerbeckens und ist ortsfest, d.h. dass nicht der ortsveränderliche Wasserspiegel die Schnittstelle bildet.

Abb. 4.4 zeigt die Nodalisierung eines generischen Brennelementlagerbeckens für ATHLET-CD. Das Objekt TOPVOLUME stellt ein Volumen oberhalb des Flüssigkeitsbereichs des Lagerbeckens dar und das damit verbundene Ventil TOPVALVE bildet die Übergabestelle zu COCOSYS. Das Brennelementlagerbecken ist in zwei Bereiche unterteilt, zum einen in den Bereich, in dem die Brennelemente eingebracht sind sowie die darüber und darunter liegenden freien Volumina (POOL\_1x bis POOL\_4x), und andererseits einen freien Bereich des Brennelementlagerbeckens (POOL\_DC...), in dem der äußere Bereich zur Beckenwand oder freie Positionen am Rand enthalten sind, die für spezielle Zwecke wie beispielsweise Lagerung von defekten Brennelementen verwendet werden. Der innere und äußere Bereich sind oberhalb und unterhalb der Brennelemente durch Cross-Connections miteinander verbunden, während im Bereich

der Brennelemente ein Queraustausch aufgrund der Kästen, die die Brennstäbe umschließen, nicht möglich ist. Innerhalb des Bereichs der Brennelemente sind allerdings Querströmungen möglich. Die inneren Strömungspfade (POOL\_11 bis POOL\_41) sind jeweils mit einem ECORE-Objekt verbunden, so dass eine radiale Leistungsverteilung unterstellt werden kann. Die Spaltproduktfreisetzung aus den Brennstäben wird mit dem Modul FIPREM berechnet und basiert auf Tabellenwerten für die einzelnen Spaltprodukte zu Beginn des Szenarios. Der Spaltprodukttransport wird mit dem Modul SOPHAEROS berechnet, wobei der SOPHAEROS-Pfad erst in dem gemeinsamen Volumen TOPVOLUME beginnt und der Spaltproduktquellterm in der gekoppelten Simulation an COCOSYS ebenfalls übergeben werden kann.

Im Containment wird der Massen- und Energieeintrag aus ATHLET-CD in das Volumen oberhalb des Brennelementlagerbeckens eingebracht und die Prozesse im Containment mit COCOSYS berechnet. Die sich daraus ergebenden Randbedingungen wie Temperatur und Druck werden dann wieder an ATHLET-CD zurück übergeben.

Abb. 4.5 zeigt die Nodalisierung in einem reduzierten COCOSYS-Datensatz mit etwa 100 Zonen oberhalb des Brennelementlagerbeckens. Die Kopplung zu ATHLET-CD erfolgt über das Objekt DomBFA, das einen relativ großen Raum im Containment darstellt. Das Objekt DomBFA ist über Junctions mit den angrenzenden Räumen verbunden, so dass das Verhalten im gesamten Containment in Folge des postulierten Szenarios (langfristiger Ausfall der Kühlung) im Brennelementlagerbecken berechnet werden kann.



**Abb. 4.5** Nodalisierungsschema des reduzierten Datensatzes

Erste Simulationen zeigen, dass die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS für Brennelementlagerbecken anwendbar ist und plausible Ergebnisse liefert. Eine vertiefte Analyse der numerischen Stabilität für so große Austauschflächen bei kleinen Druckdifferenzen ist jedoch notwendig. Darüber hinaus soll die Anwendbarkeit der neu entwickelten Kopplung, die im Rahmen des Vorhabens RS1535a entwickelt wird und für ebensolche Anwendungsfelder vorgesehen ist, überprüft werden.

### **4.3 Modellierung des Austritts von Schmelze nach Versagen des Reaktordruckbehälters**

Mit dem bisherigen Modellumfang von ATHLET-CD konnte ein Unfallablauf bis zum Versagen der unteren Bodenkalotte des Reaktordruckbehälters simuliert werden. Danach wurde die Simulation beendet. Durch die Zielsetzung, mit der Programmkette ATHLET – ATHLET-CD – COCOSYS eine vollständige Unfallsequenz von ersten Kernschädigungen bis hin zu gravierenden Vorgängen im Containment simulieren zu können, ist es jedoch erforderlich auch den Austritt von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter in die Reaktorgrube, also die Vorgänge nach dem Versagen der Reaktordruckbehälterwand, simulieren zu können. Daher sollte das Modul AIDA, welches die Vorgänge im unteren Plenum des Reaktordruckbehälters während der Spätphase

berechnet, so erweitert werden, dass die austretende Schmelze bestimmt und an COCOSYS übergeben werden kann. In COCOSYS soll dann das weitere Verhalten der Schmelze inklusive Beton-Schmelze-Wechselwirkung, welche in der Regel auch mit einer starken Freisetzung von Wasserstoff verbunden ist, simuliert werden. Dazu ist es wichtig, dass alle dafür notwendigen Parameter bzgl. der Schmelze von ATHLET-CD zur Verfügung gestellt werden.

Bei der Übergabe der Daten hinsichtlich der Schmelze von ATHLET-CD an COCOSYS ist eine Anpassung bzw. Erweiterung der Kopplung notwendig. Dazu ist die Zusammenarbeit der beiden Entwicklergruppen von essentieller Bedeutung.

#### 4.3.1 Modellierung

Als ein erster Schritt zur Erweiterung der Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD für den Austrag von Stoffen aus dem Primärkreis ins Containment nach Versagen des Reaktordruckbehälters wurde das Modul AIDA insofern erweitert, dass, falls das vom Anwender definierte Versagenskriterium für das untere Plenum erreicht wird, das Ausströmen von Schmelze mit Hilfe einer vereinfachten Durchfluss-Gleichung simuliert wird:

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

wobei

$G_M$ :	Menge der ausströmenden Schmelze (kg/s)
$\rho_M$ :	Dichte der Schmelze (kg/m <sup>3</sup> )
$A_H$ :	Leckquerschnitt (m <sup>2</sup> )
$C_d$ :	Ausströmoeffizient (-)
$P_{LP}$ :	Druck im unteren Plenum (Pa)
$P_{CAV}$ :	Druck in der Reaktorgrube (Pa).

Zur Bestimmung der Ausströmfläche  $A_H$  sind zwei Optionen vorgesehen:

- Konstanter Leckquerschnitt als Eingabeparameter. In diesem Fall wird angenommen, dass sich das Leck an zentraler Stelle im unteren Bereich der Kalotte befindet. Diese Annahme ist konservativ in Bezug auf den Schmelzeaustrag;

- Die Ausströmfläche sowie die azimutale Stelle des Lecks, werden im Modul AIDA in Abhängigkeit von den versagenden Nodes berechnet. Der Schmelzeaustrag findet statt, solange sich die Höhe des Schmelzepools oberhalb der Leckstelle befindet. Sinkt die Schmelzehöhe unterhalb des Lecks, wird der Schmelzeaustrag linear auf Null geführt.

In dieser ersten Version wird ein homogener Schmelzepool angenommen, d.h. ohne Berücksichtigung einer metallischen Schichtung. Somit darf dieses Modell nur im Zusammenhang mit der Konfiguration A in AIDA verwendet werden.

Folgende Größen stehen nun der Kopplungsschnittstelle zu COCOSYS bzw. zum COCOSYS-Modul MEDICIS zur Verfügung: Temperatur, integrierte Masse und Zusammensetzung der ausströmenden Schmelze, Ausströmgeschwindigkeit sowie die ausgetragene Nachzerfallsleistung. Der Druck in der Reaktorgrube wird vom COCOSYS als Randbedingung berechnet. Solange die Kopplung noch nicht realisiert ist, beträgt der Druck 0,1 MPa.

Die ersten Verifikationsrechnungen haben gezeigt, dass die im Modul AIDA durchgeführten Modellerweiterungen lauffähig und plausibel sind. Der Schmelzeaustrag aus dem unteren Plenum kann sowohl mit der „Stand-Alone“ Option von AIDA (was hilfreich ist zur Überprüfung der Kopplung mit COCOSYS) als auch mit der vollständigen ATHLET-CD Modellierung simuliert werden.

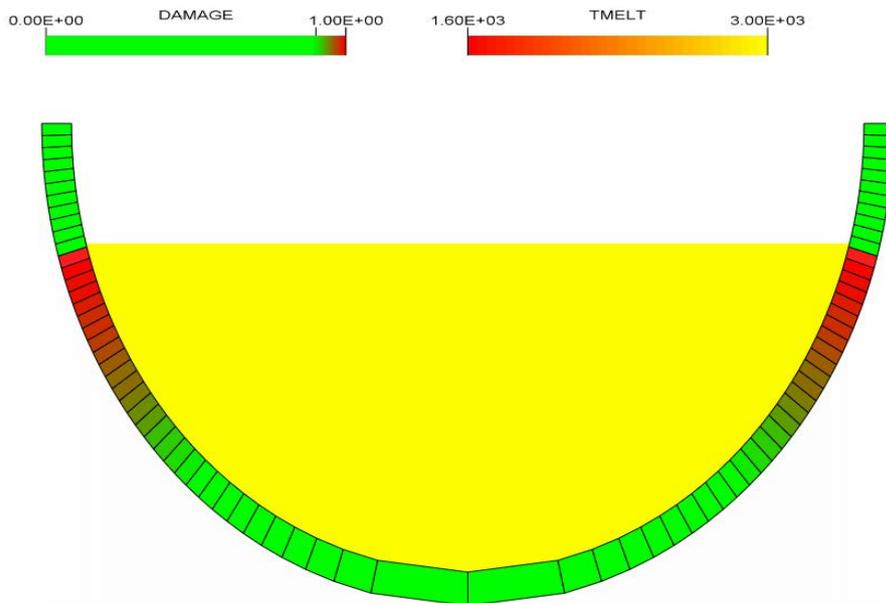
Die geplanten nächsten Entwicklungsschritte sind:

- Übergabe der Menge und Aktivitäten der Spaltprodukte an COCOSYS
- Modellierung und Übergabe des Gasmassenstroms nach Freilegung des Lecks bzw. Beendigung des Schmelzeaustrags.

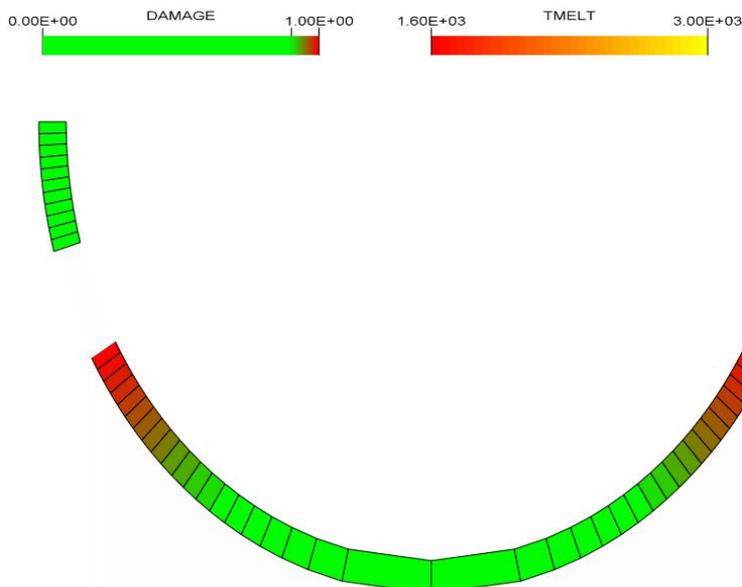
#### **4.3.2 Testrechnungen**

Um die neue Modellierung zu testen, wurde u.a. ein hypothetischer Beispieldatensatz für eine AIDA stand-alone Simulation verwendet. Dabei befinden befinden bereits zu Beginn der Simulation 80 t Schmelze im unteren Plenum. Durch die Nachzerfallswärme wird die Wand des Reaktordruckbehälters angegriffen, was im Verlaufe der Simulation zum Versagen der Wand und zum Ausfließen von Schmelze führt.

Abb. 4.6 zeigt das untere Plenum zum Zeitpunkt  $t = 10700$  s, d.h. kurz vor Versagen der Behälterwand. Im Inneren ist dabei die Temperatur der (homogenen) Schmelze dargestellt und in der Wand der akkumulierte Schaden, der mit dem ASTOR-Ansatz berechnet wurde (ein Wert von 1 ist dabei gleichbedeutend mit dem Versagen der Behälterwand). In Abb. 4.7 ist das untere Plenum nach dem Versagen der Behälterwand und dem Ausfließen der Schmelze dargestellt.

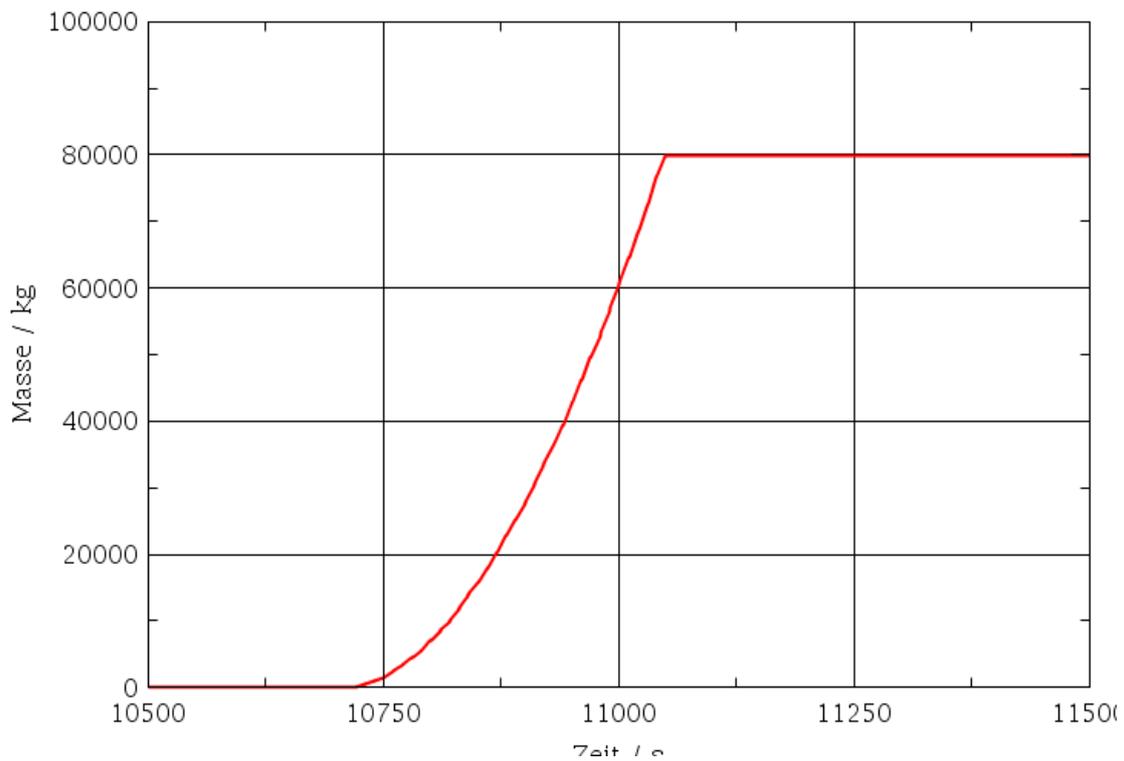


**Abb. 4.6** Untereres Plenum zum Zeitpunkt  $t = 10700$  s

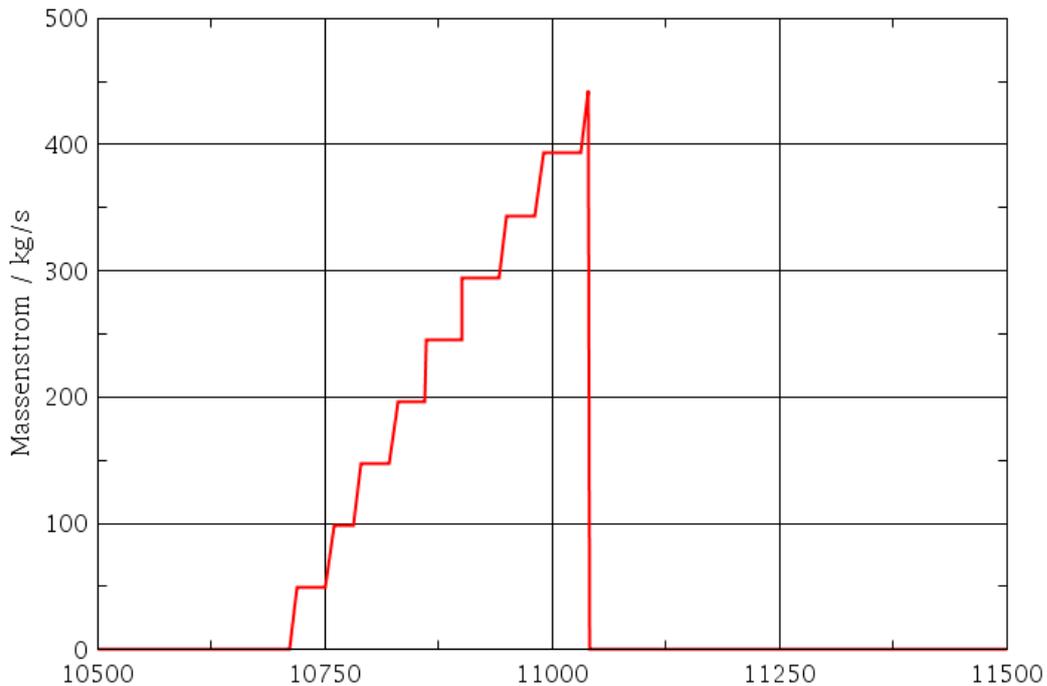


**Abb. 4.7** Untereres Plenum nach Versagen der Behälterwand und dem Ausfließen der Schmelze

In Abb. 4.8 und Abb. 4.9 sind die aufsummierte Masse an Schmelze, die aus dem Reaktordruckbehälter ausfließt, sowie der Massenstrom der ausfließenden Schmelze abgebildet. Man kann deutlich erkennen, dass nach dem Versagen der Behälterwand die Schmelze in sehr kurzer Zeit aus dem Reaktordruckbehälter ausströmt und somit in die Reaktorgrube gelangt. Das Leck in der Behälterwand vergrößert sich dabei sukzessive. In einer konservativen Annahme strömt in der Modellierung die gesamte Schmelzmenge aus dem Reaktordruckbehälter. In einer gekoppelten Rechnung könnte nun mit COCOSYS das weitere Verhalten der Schmelze im Containment simuliert werden.



**Abb. 4.8** Aufsummierte Masse der ausgetretenen Schmelze



**Abb. 4.9** Massenstrom der ausfließenden Schmelze

#### 4.4 Überprüfung und Modifikation von Modellen für neue Reaktorkonzepte

In ATHLET sind mit der neuen Version 3.0A auch Simulationen von neuen Reaktortypen möglich, die beispielsweise mit den Arbeitsmedien Helium, Natrium, Blei, Blei-Wismut-Eutektikum oder überkritischem Wasser arbeiten. Im Allgemeinen laufen schwere Unfälle in solchen Reaktoren im Vergleich zu herkömmlichen Leichtwasserreaktoren völlig anders ab. Daher sind für die Berücksichtigung neuer Konzepte ganz neue Modelle notwendig, was wiederum die entsprechende grundlegende Untersuchung aller wichtigen möglicherweise auftretenden Phänomene mithilfe von Experimenten voraussetzt. Da im Hinblick auf den Verlauf möglicher schwerer Unfälle bei neuen Reaktortypen die verfügbare Datenlage zurzeit jedoch noch sehr gering ist, soll die Entwicklung entsprechender Modelle in ATHLET-CD zurückgestellt werden. Forschungen auf diesem Gebiet wie beispielsweise neue Experimente sollen jedoch weiterhin beobachtet werden (z. B. durch Studium von Veröffentlichungen oder Besuch von Vorträgen bei Konferenzen), so dass bei verbesserter verfügbarer Datenlage Modelle entwickelt bzw. angepasst werden können. Falls sich dabei eine Entwicklung neuer Modelle als erfolgsversprechend herausstellen sollte, kann ATHLET-CD dann entsprechend erweitert werden.

#### **4.5 Erweiterung der Modellierung des Wärmeübergangs an der äußeren Reaktordruckbehälterwand**

Die Modellierung der Außenwandkühlung ist insbesondere für Maßnahmen zur Schmelzerückhaltung (In-Vessel Retention) im Falle eines schweren Störfalls von großem Interesse. Ziel solcher Maßnahmen ist es das geschmolzene und verlagerte Corium langfristig im Reaktordruckbehälter zu halten, wobei die Nachzerfallswärme durch Flutung der Reaktorgrube, d.h. per Außenkühlung, abgeführt werden soll. Die Kühlung kann abhängig von den vorhandenen Systemen bzw. Kühlmittelreservoirs mittels einer erzwungenen Strömung oder durch freie Konvektion erfolgen. Das Ziel der hier vorgestellten Untersuchungen ist die Analyse der Effektivität der Kühlung, um ein mechanisches Versagen der Reaktordruckbehälterwand vermeiden zu können.

Aktuell stehen in AIDA drei Modelle für die Außenwandkühlung zur Verfügung. Diese sind:

- Option 1: Konstante Kühlwassertemperatur und konstanter Wärmeübergangskoeffizient
- Option 2: Neues Modell mit konstantem Wärmeübergangskoeffizient
- Option 3: Neues Modell mit berechnetem Wärmeübergangskoeffizient (Dittus-Bölder-Korrelation)

Während der Außenkühlung können aufgrund der hohen Temperatur des Coriums (über 2000 °C) sehr hohe Wandtemperaturen erreicht werden, welche die Sättigungstemperatur des in die Reaktorgrube geleiteten Kühlwassers deutlich übersteigen. In Folge dessen ist insbesondere bei Naturumlauf starkes Sieden an der äußeren Oberfläche des unteren Plenums zu erwarten. Da die Verdampfungsprozesse einen starken Effekt auf den Wärmeübergang haben, ist die Berücksichtigung dieser Phänomene in der Modellierung wünschenswert. Die drei in AIDA verfügbaren Optionen zur Berechnung des Wärmeübergangs berücksichtigen die physikalischen Prozesse während der Verdampfung jedoch nicht. Deshalb wurde ein neues Modell, welches auch die Verdampfung mitberücksichtigt, in AIDA implementiert. Das neue Modell berücksichtigt also auch mehrphasige Phänomene an der Reaktordruckbehälterwand, was die Anwendbarkeit zur Bewertung der Effektivität einer Außenkühlung auch auf Bedingungen mit starken Siedebedingungen ausdehnt. Anschließend wurden dazu erste Testrechnungen durchgeführt. Hierbei wurden ein Datensatz zum Versuch LIVE-11 sowie ein

Datensatz für das untere Plenum eines generischen Druckwasserreaktor-Modells verwendet.

#### 4.5.1 RPI-Modell

Das von der Ruhr-Universität Bochum weiterentwickelte RPI-Modell wurde in AIDA als vierte Modellierungs-Option implementiert /INT 15/, /GAR 15/. Das Modell berechnet den Wärmeübergang zwischen Wand und Fluid unter Berücksichtigung der Siedeprozesse einschließlich des Blasensiedens. Filmsieden, welches bei weiterer Erhöhung der Temperatur auftritt, ist im RPI-Modell hingegen nicht berücksichtigt

Im RPI-Modell ist die Wärmestromdichte anhand der Wärmeübergangsprozesse in drei Teile unterteilt:

- Konvektive Wärmestromdichte,  $\dot{q}_K$
- Wärmestromdichte bei Quenching,  $\dot{q}_Q$
- Wärmestromdichte während Verdampfung,  $\dot{q}_V$ .

Die Gesamte Wärmestromdichte ergibt sich dann durch Addition dieser drei Teil-Wärmestromdichten.

$$\dot{q}_W = \dot{q}_K + \dot{q}_Q + \dot{q}_V \quad [W/m^2] \quad 4-1$$

Die einzelnen Wärmestromdichten werden wie folgt berechnet:

$$\dot{q}_K = A_U \cdot \alpha_K \cdot (T_W - T_L) \quad [W/m^2] \quad 4-2$$

$$\dot{q}_Q = A_B \cdot \alpha_Q \cdot (T_W - T_L) \quad [W/m^2] \quad 4-3$$

$$\dot{q}_V = \dot{m}_V \cdot (h'' - h') \quad [W/m^2] \quad 4-4$$

In Gleichungen 4-2 bis 4-4 bezeichnet  $\alpha_K$  den konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten,  $\alpha_Q$  den Wärmeübergangskoeffizienten bei Quenching,  $T_W$  die Wandtemperatur,  $T_L$  die Temperatur des Kühlmittels,  $\dot{m}_V$  die Verdampfungsrate und  $(h'' - h')$  die Verdampfungsenthalpie. Mit Hilfe von  $A_U$  sowie  $A_B$  werden die Wandbereiche zwischen

konvektivem Bereich und Quenching anhand der Blasenablösedurchmesser  $d_A$  unterteilt.

$$A_B = \min(\pi \cdot d_A^2 \cdot n, 1) \quad \text{und} \quad A_U = 1 - A_B \quad 4-5$$

Der Anteil des Wärmestroms durch Verdampfung wird aus der Verdampfungsrate unter Berücksichtigung der Blasenablösefrequenz  $f_A$ , der Keimstellendichte  $n$  sowie des Blasenablösedurchmessers berechnet.

$$\dot{m}_V = \rho_G \cdot \frac{\pi \cdot d_A^3}{6} \cdot f_A \cdot n \quad \left[ \frac{\text{kg}}{\text{s} \cdot \text{m}^2} \right] \quad 4-6$$

Der konvektive Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha_K$  und der Quenching-Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha_Q$  werden wie folgt berechnet:

$$\alpha_K = \frac{Nu \cdot \lambda_L}{L} \quad \left[ \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}} \right] \quad 4-7$$

$$\alpha_Q = 2 \cdot f_A \cdot \sqrt{\frac{t_A \cdot \lambda_L \cdot c_p \cdot \rho_L}{\pi}} \quad \left[ \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}} \right] \quad 4-8$$

In diesen Gleichungen beschreiben  $Nu$  die Nusselt-Zahl,  $\lambda_L$  den Wärmeleitungskoeffizienten,  $L$  die charakteristische Länge,  $t_A$  die Blasenwartezeit,  $c_p$  die Wärmekapazität und  $\rho_L$  die Dichte des Kühlmittels. Der Blasenablösedurchmesser berechnet sich anhand der Unterkühlung  $\Delta T_{SUB}$  sowie Referenzwerten ( $d_{ref} = 0,6 \text{ mm}$ ,  $\Delta T_{ref} = 45 \text{ K}$ ,  $d_{max} = 1,4 \text{ mm}$ ), basierend auf experimentellen Beobachtungen.

$$d_A = \min\left(d_{ref} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta T_{SUB}}{\Delta T_{ref}}\right), d_{max}\right) \quad [\text{mm}] \quad 4-9$$

$$\Delta T_{SUB} = T_{SAT} - T_L \quad [\text{K}] \quad 4-10$$

In letzter Gleichung beschreibt  $T_{SAT}$  die Sättigungstemperatur. Die Blasenwartezeit sowie die Keimstellendichte lassen sich anhand der Wandüberhitzung  $\Delta T_{SUP}$  mit den folgenden Formeln berechnen:

$$t_A = 139,1 \Delta T_{SUP}^{-4,1} [s] \quad 4-11$$

$$n = (185 \cdot \Delta T_{SUP})^{1,805} [1/m^2] \quad 4-12$$

$$\Delta T_{SUP} = T_W - T_{SAT} [K] \quad 4-13$$

Die Blasenablösefrequenz hängt vom Blasenablösedurchmesser und von der Dichte des Gases  $\rho_G$  sowie des Fluids  $\rho_L$  ab und ergibt sich wie folgt:

$$f_A = \sqrt{\frac{4 \cdot g \cdot (\rho_L - \rho_G)}{3 \cdot d_A \cdot \rho_L}} \left[ \frac{1}{s} \right] \quad 4-14$$

Die oben beschriebenen Gleichungen wurden in das explizite Differentialverfahren von AIDA implementiert, um den Wärmeübergang zwischen der Außenwand und dem Kühlmittel zu berechnen. In der neu entwickelten Option 4 wird also der Wärmeübergangskoeffizient unter Berücksichtigung von unterkühltem Sieden berechnet.

#### 4.5.2 Untersuchungen zur Außenwandkühlung

Mit den Modellen zum Wärmeübergang an der Reaktordruckbehälterwand stehen im Modul AIDA Werkzeuge zur Verfügung, um Strategien zur Schmelzerückhaltung im Reaktordruckbehälter realer Anlagen zu untersuchen.

Für eine erste Analyse wurde eine hypothetische Außenwandkühlung für eine Anlage eines Siedewasserreaktors vom Typ SWR-69 simuliert. Als Szenario wurde ein Station Blackout mit totalem Ausfall aller Not- und Nachkühlsysteme unterstellt. Die Analysen ergeben, dass der Kern nach 4500 s freigelegt wird und zu schmelzen beginnt. Insgesamt schmelzen ungefähr 95% des gesamten Kerns (54t keramische Schmelze und 32t metallische Schmelze). Die linke Seite von Abb. 4.10 zeigt den Reaktordruckbehälter vor der Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum und die rechte Seite den Reaktordruckbehälter nach der Verlagerung (bei ca. 9300 s).

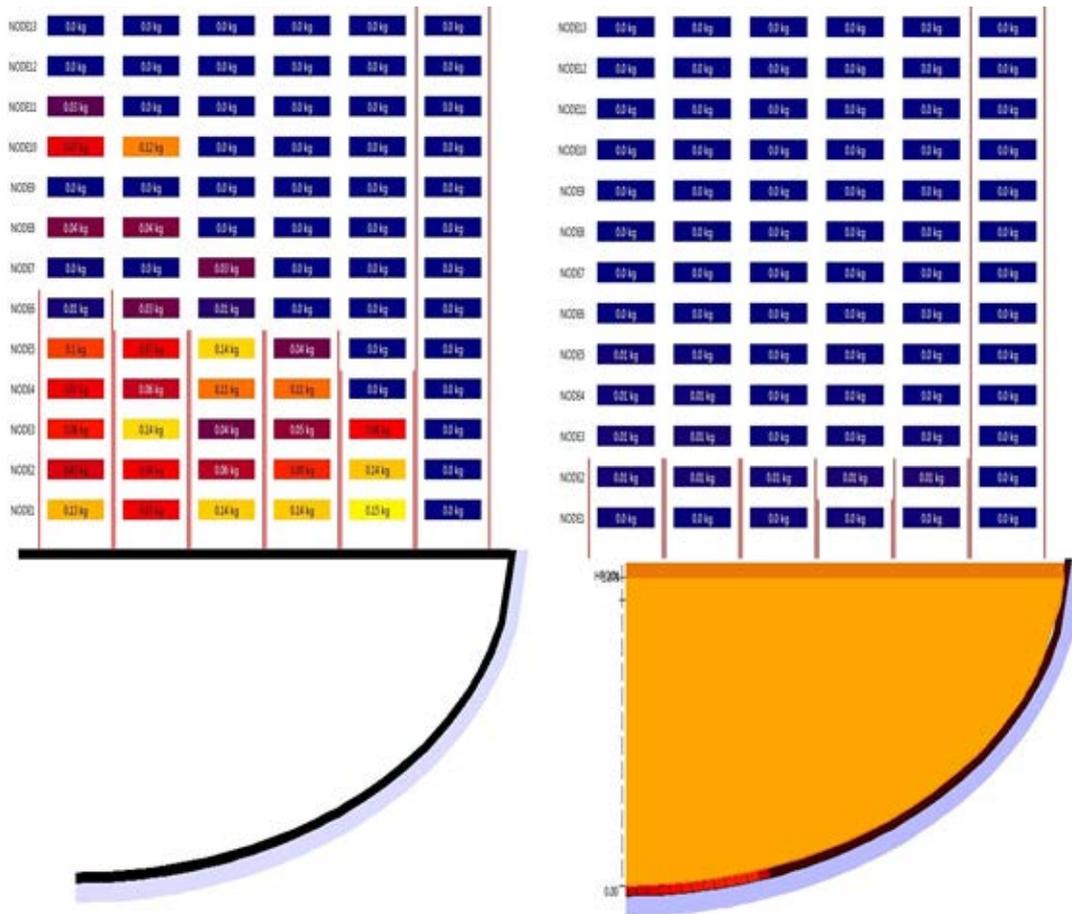
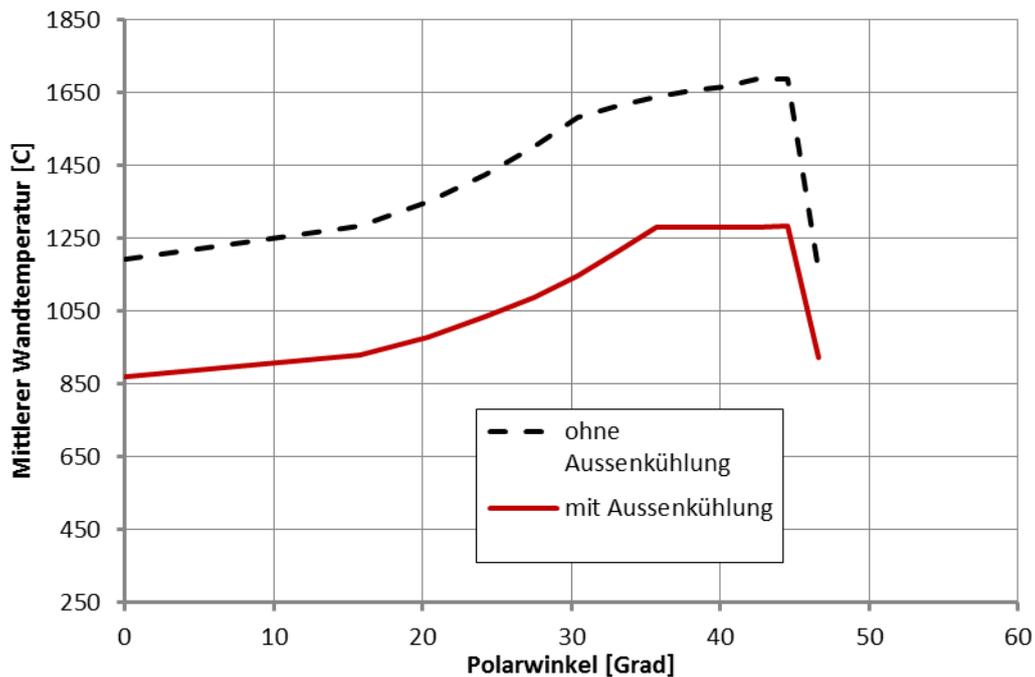


Abb. 4.10 Reaktordruckbehälter vor und nach Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum



**Abb. 4.11** Mittlere Wandtemperatur des Reaktordruckbehälters

Im Weiteren wurde ein Szenario mit Außenkühlung (mit Naturkonvektion in der Reaktorgroße) simuliert. Abb. 4.11 zeigt die berechnete mittlere Wandtemperatur des Reaktordruckbehälters 12.000 s nach Beginn des Störfalls mit und ohne Außenkühlung. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass sich die Wandtemperaturen durch den Abtransport der Nachzerfallswärme über die Außenkühlung deutlich reduzieren und dadurch das Versagen des Reaktordruckbehälters verzögert oder sogar komplett vermieden werden kann.

Um realistischere Ergebnisse zu erhalten, müssen im Falle eines Siedewasserreaktors jedoch auch die Durchführungen durch das untere Plenum berücksichtigt werden, was bisher noch nicht der Fall ist. Dazu bietet sich für die Zukunft an, das neue Modell LHEAD, welches Teil des Moduls ECORE ist, zu erweitern.

Die Ergebnisse solcher bzw. ähnlicher Analysen sollen auch im EU-Vorhaben IVMR („In-Vessel Melt Retention Severe Accident Management Strategy for Existing and Future NPPs“) Eingang finden. Dadurch kann der Stand der Entwicklung von ATHLET-CD mit dem anderer Codes verglichen und Ansätze für Weiterentwicklungen gefunden werden.

## 5 Querschnittsaufgaben

### 5.1 Analytische Begleitung experimenteller Programme

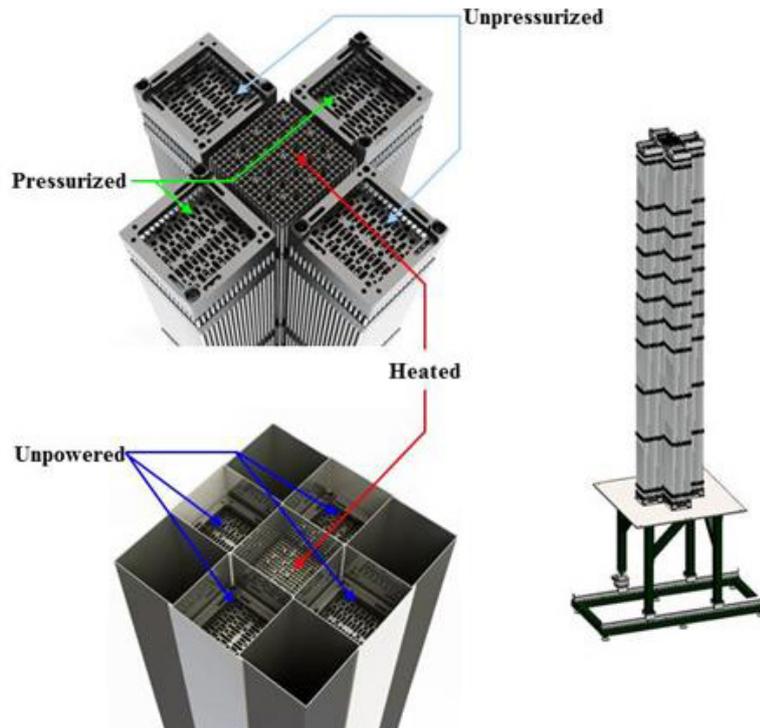
#### Sandia Fuel Project

Das OECD/NEA Sandia Fuel Project (SFP) wurde 2009 (mit Projektende im Jahr 2013) zur Untersuchung der Phänomene von simulierten Brennelementen im Lagerbecken unter trockener Luftatmosphäre in prototypischen Bedingungen eines Leichtwasserreaktors, z. B. nach einem vollständigen LOCA, initiiert. Hierzu wurden die Versuche mit kommerziellen 17x17 Brennelementen durchgeführt, wobei eine detaillierte Instrumentierung verwendet wurde, um die relevanten Phänomene zu detektieren und Daten für die Validierung von Schwerstörfallcodes zu generieren. Das Projekt bestand aus zwei Phasen, wobei die folgenden Hauptziele verfolgt wurden /NEA 13/:

Phase I: Axiale Aufheizung und Flammenfrontausbreitung in "hot neighbour" Bedingungen

Phase II: Radiale Aufheizung und Flammenfrontausbreitung sowie Ballooning in "cold neighbour" Bedingungen

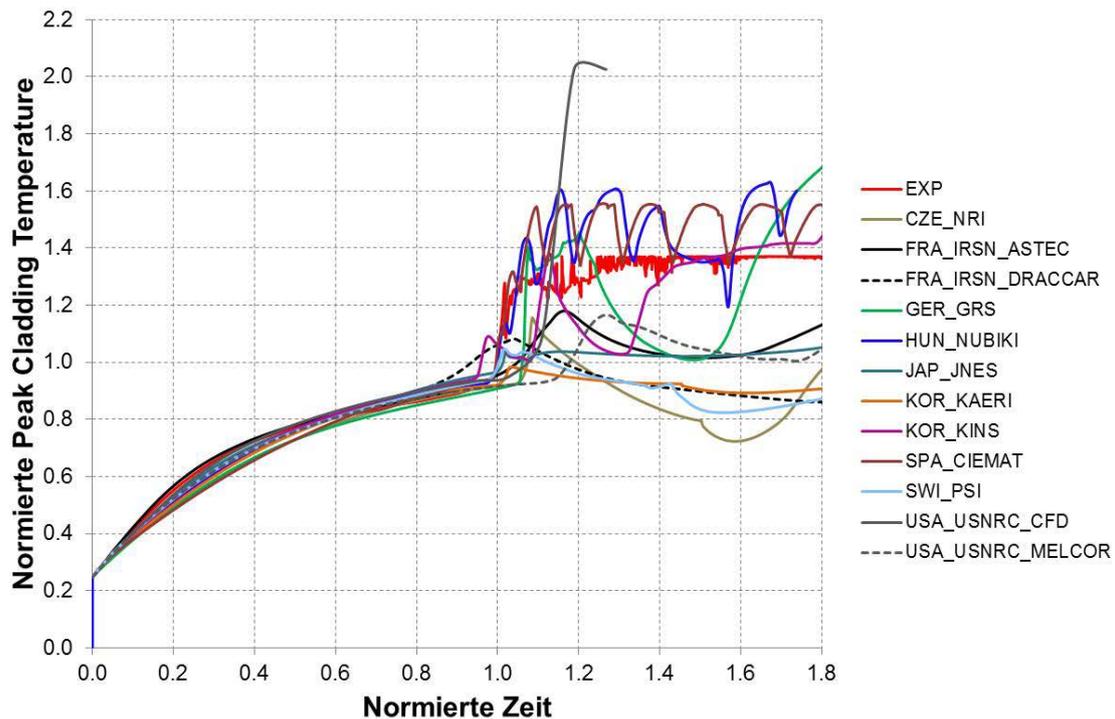
Im Rahmen des OECD/NEA SFP Phase II wurde – wie auch schon in Phase I – der Ignition-Test durch analytische Arbeiten in Form eines Post-Test-Benchmarks begleitet, das von der GRS koordiniert wurde. 2012 wurde der Ignition-Test an den Sandia National Laboratories in einer sog. 1x4 Anordnung durchgeführt, wobei das zentrale, elektrisch beheizte Brennelement von vier unbeheizten Brennelementen umgeben war /HOL 13/. Die Versuchsanordnung ist in Abb. 5.1 dargestellt. Am Benchmark haben Teilnehmer aus neun Ländern mit fünf verschiedenen Codes (vier Lumped-Parameter-Codes und ein CFD-Code) teilgenommen (vgl. Tab. 5.1). Die sogenannte Peak Cladding Temperature (PCT) in der Bündelhöhe, in der die Entzündung zuerst simuliert wird, ist für die unterschiedlichen Simulationen im Vergleich zum Experiment in Abb. 5.2 dargestellt. Die experimentellen Daten sind aufgrund des Gültigkeitsbereich der Messinstrumentierung ab einem maximalen Wert begrenzt, es kam aber lokal zu höheren Temperaturen, was visuell während des Versuchs beobachtet werden konnte.



**Abb. 5.1** Versuchsanordnung des Ignition-Tests des SFP Phase II (Quelle: USNRC/SNL und /HOL 13/)

**Tab. 5.1** Teilnehmer und Codes des OECD/NEA SFP Phase II Benchmarks

Land	Institution	Code and code version
Tschechien	NRI	MELCOR 1.8.6
Frankreich	IRSN	ASTEC V2.0
Frankreich	IRSN	DRACCAR V2.18
Deutschland	GRS	ATHLET-CD 2.2C
Ungarn	NUBIKI	MELCOR 1.8.6 YT1010
Japan	JNES	MELCOR 1.8.6.YV.3084
Korea	KAERI	MELCOR 1.8.6 YV.3084
Korea	KINS	MELCOR 1.8.6.YV.3084
Spanien	CIEMAT	MELCOR 1.8.6.YV.3084
Schweiz	PSI	MELCOR 1.8.6.YV.3084
USA	USNRC	MELCOR 1.8.6.YV_3084
USA	USNRC	FLUENT 14



**Abb. 5.2** Normierte PCT im zentralen Brennelement

Die Simulationen zeigen, dass das qualitative Verhalten bis zum Punkt der Entzündung in allen Simulationen in guter Näherung zum Experiment berechnet wird, obwohl auch schon bis dahin ein gewisses Temperaturband zwischen den unterschiedlichen Simulationen vorliegt. Dabei liegen die berechneten Zeitpunkte der Eskalation/Entzündung in einem kleinen Bereich um den experimentell bestimmten Punkt der Entzündung. Bis auf zwei Simulationen wird in allen anderen ein scharfer – wenn auch teilweise geringer – Temperaturanstieg berechnet. Hierbei können zwei Gruppen identifiziert werden. Die eine, in der die Temperaturen nach der ersten Eskalation nicht oder nur noch geringfügig ansteigen, und eine zweite, in der die Temperaturen nach der ersten Eskalation noch deutlich weiter ansteigen. Nach der Entzündung variieren die Ergebnisse stark aufgrund verschiedener Einflüsse wie Nodalisierung, gewählte Modellparameter oder die Modelle zur Beschreibung der Phänomene unter Luftatmosphäre.

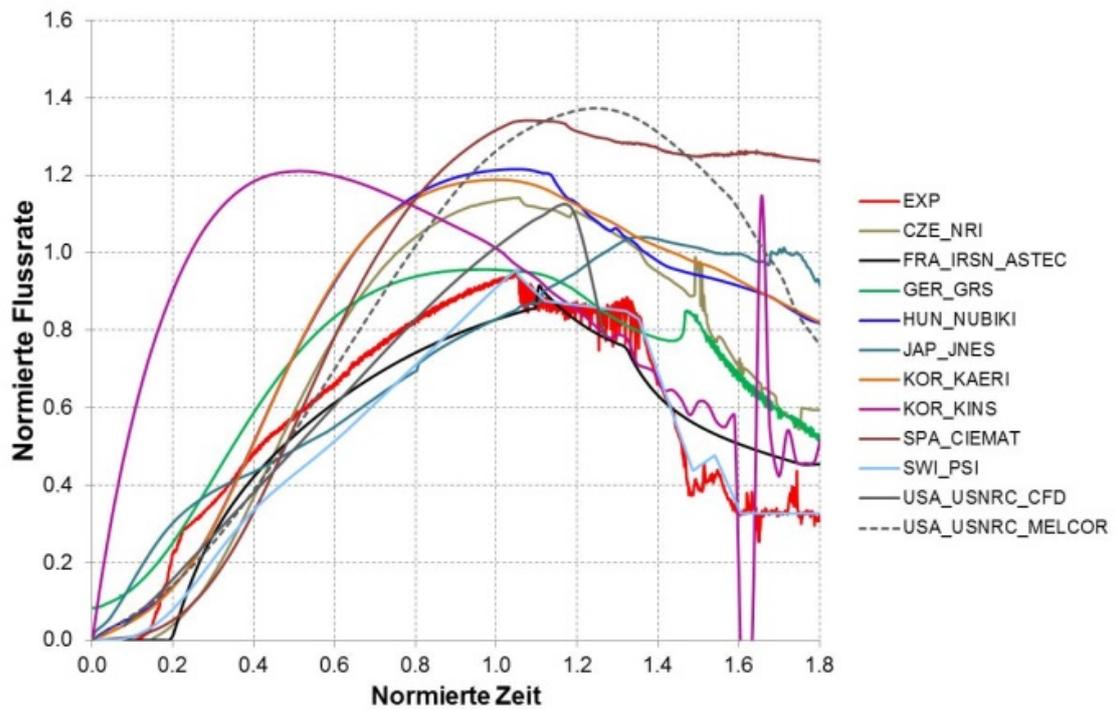
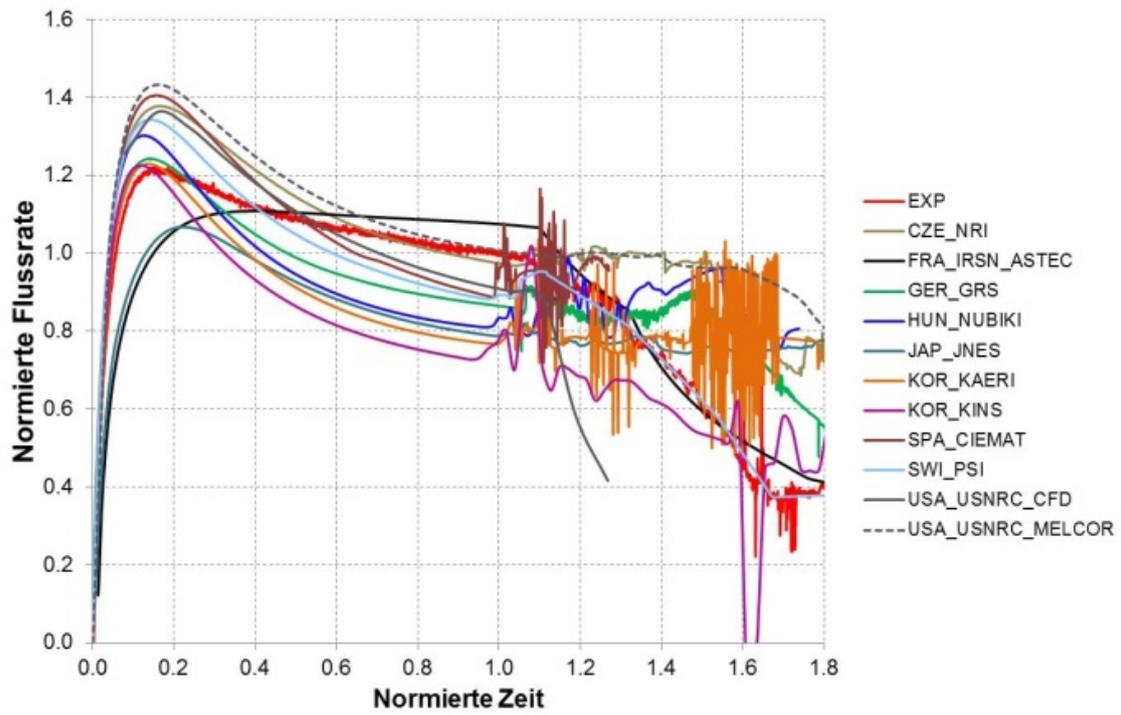
Die gemessenen und berechneten Flussraten am Eintritt in das zentrale bzw. die peripheren Brennelemente sind in Abb. 5.3 dargestellt. Bis zum Erreichen des Maximums überschätzen fast alle (bis auf zwei) Simulationen das gemessene Verhalten in zentralen Brennelement, bevor die Flussraten in den Simulationen spätestens bei Erreichen des Entzündungspunkt im Experiment unterschätzt werden, was mit dem thermi-

schen Verhalten interagiert. Nach der Entzündung zeigen die Simulationen ein stark oszillierendes Verhalten aufgrund der ablaufenden Oxidationsprozesse.

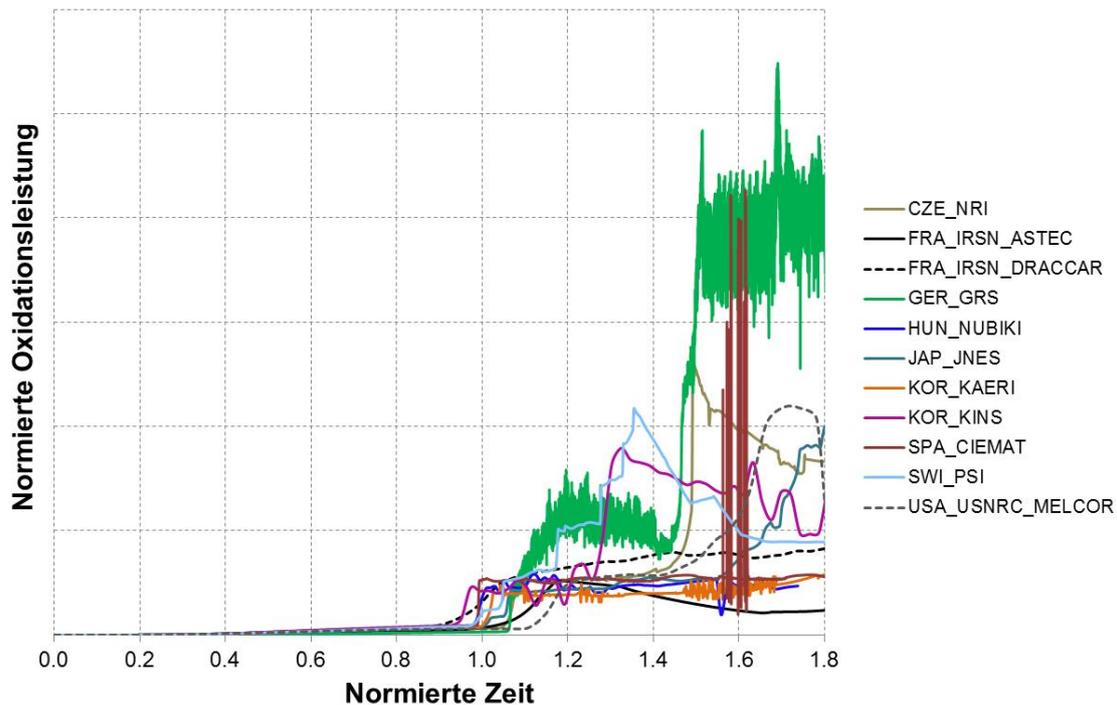
Die berechneten Flussraten in den peripheren Brennelementen weisen ein sehr diffuses Verhalten untereinander auf, was letztlich ab dem Punkt der Entzündung im Experiment in einer Überschätzung des gemessenen Wertes mündet, da die thermische Ausbreitung in den peripheren Brennelementen in den Simulationen mehr oder weniger ausgeprägt unterschätzt wird.

In Abb. 5.4 ist die gesamte Oxidationsleistung der fünf Brennelemente dargestellt, wobei eine detaillierte Aufschlüsselung in die einzelnen Brennelemente nicht in allen Simulationen möglich ist. Die Oxidation verstärkt sich in allen Simulationen etwa ab dem Punkt der berechneten Entzündung, aufgrund der beschleunigten Oxidation bei höheren Temperaturen. Zunächst steigt die Oxidationsleistung im zentralen Brennelement an, während der zweite starke Anstieg durch die Oxidation in den peripheren Brennelementen verursacht wird, da hier die Entzündung zeitverzögert gegenüber dem zentralen Brennelement im Experiment beobachtet und auch berechnet wird.

Die deutlich höhere Oxidationsleistung in der Simulation mit ATHLET-CD kann mit der Berücksichtigung der ZrN-Bildung erklärt werden, da hierdurch ein zusätzlicher Wärmeintrag in die Brennelemente berechnet wird, was wiederum die Oxidation bei hohen Temperaturen verstärkt.



**Abb. 5.3** Normierte Flussrate am Eintritt. Zentrales Brennelement (oben) und periphere Brennelemente (unten)



**Abb. 5.4** Normierte Oxidationsleistung in allen fünf Brennelementen

### Zusammenfassung des Benchmarks der Phase II

Die Analyse des Benchmarks zeigt, dass – auch bei der Anwendung des gleichen Simulationsprogramms – verschiedene Modellierungen und Modellparameter gewählt wurden, um das im Experiment beobachtete Verhalten abbilden zu können. Die Ergebnisse zeigen für das zentrale Brennelement eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulationen bis zum Punkt der Entzündung. Danach werden deutliche Abweichungen zum Experiment als auch zwischen den Simulationen sichtbar, was sich insbesondere auch in den peripheren Brennelementen zeigt, deren thermische Entwicklung mit der des zentralen Brennelements verbunden ist. Die radiale Ausbreitung der Flammenfront, deren Ausbildung eines der wesentlichen Ziele des Versuchs war, wird in den meisten Simulationen unterschätzt, da in den Lumped-Parameter-Codes meist eine grobe Nodalisierung mit nur einem Objekt für das zentrale Brennelement und einem Objekt für die vier peripheren Brennelemente verwendet wurde. Lediglich in vier Modellierungen wurde eine feinere Nodalisierung gewählt, was zu einer besseren Übereinstimmung mit dem Experiment führt. Es zeigt sich, dass die Modellierung der radialen Wärmeübertragung mittels View-Faktoren nicht leicht ist, da diese gewisse Unsicherheiten aufweisen.

Darüber hinaus zeigt sich bei der Simulation des Ignition-Tests der Phase II, wie auch schon in dem Benchmark der Phase I, dass die Kenntnis wesentlicher hydraulischer Parameter notwendig ist, um die vorherrschenden Strömungsbedingungen abzubilden, da sie im hier vorliegenden Versuch von den üblichen Größen für Stab- und Bündelgeometrien abweichen.

Die analytischen Arbeiten im Rahmen des Benchmarks zeigen in Übereinstimmung mit den Ergebnissen des Experiments, dass die Phänomene unter Luftatmosphäre nicht abschließend verstanden und modelliert sind. Der Stickstoffverbrauch und die Re-Oxidation des Nitrids sind in den meisten Codes noch nicht berücksichtigt und bedürfen einer weiteren Modellierung, die eine weitergehende Vergrößerung der experimentellen Datenbasis erfordert. Hierzu sind sowohl Single-Effekt-Tests wie auch Integraltests notwendig.

## **QUENCH-17**

Im Rahmen des europäischen SARNET2-Programms wurde beim KIT am 30./31. Januar 2013 der Versuch QUENCH-17 durchgeführt /STU 13b/. Ziel war dabei die Kühlbarkeit eines zerstörten Bündels bzw. das Verhalten während des Flutens zu untersuchen. Dazu sollte ein Schüttbett innerhalb eines vorher vollständig oxidierten Bündelbereichs ohne Schmelze erzeugt werden. Um dies realisieren zu können, wurden bei dem Experiment zwölf äußere, elektrisch beheizte Stäbe mit Hüllrohren aus Hafnium verwendet. Außerdem bestand auch die Bündelumfassung aus Hafnium. Hafnium wurde gewählt, weil bei diesem Element der Schmelzpunkt höher und die Oxidationsrate geringer ist als bei Zirkon. Die neun inneren, unbeheizten Stäbe, die im späteren Verlauf das Schüttbett bilden, hatten Zry-4 Hüllrohre und waren mit vorfragmentierten Zirconia-Pellets gefüllt.

Um die Experimentatoren bei der Durchführung des Versuchs zu unterstützen, erfolgte eine Vorausrechnung mit einer speziellen, für die Simulation der Hafnium-Komponenten geeigneten Version von ATHLET-CD 2.2C. Außerdem wurde später auch eine Nachrechnung durchgeführt. Die Simulationen des Versuchs wurden im Rahmen der ATHLET-CD Validierung realisiert und sind im Abschlussbericht der Validierung näher beschrieben /AUS 13c/. In der verwendeten hierfür entwickelten Version von ATHLET-CD 2.2C wurden die vom KIT zur Verfügung gestellten Materialdaten für Hafnium und Hafniumoxid sowie die Daten zur Reaktionskinetik von Hafnium implementiert. Dadurch konnte der Versuch erfolgreich mit ATHLET-CD simuliert werden.

## 5.2 Unterstützung der Programmvalidierung und -anwendung

Um Anwendern die erfolgreiche Nutzung des Programms ATHLET-CD zu erleichtern, wurden fortlaufend GRS-interne und auch externe Benutzer von ATHLET-CD (aus Deutschland sowie aus anderen Ländern) bei der Anwendung unterstützt. Die zunehmende nationale und internationale Nutzung des Programms führt dabei zu einem immer stärker werdenden zeitlichen Aufwand bei der Unterstützung, gerade wenn es um Simulationen komplexer Störfallsequenzen geht. Außerdem wurden zu diesem Zweck auch Schulungen bzw. Workshops durchgeführt, und zwar sowohl für Anwender, die neu in der Benutzung von ATHLET-CD sind, als auch für Anwender, die bereits Erfahrungen gesammelt haben. Dazu wurde auch bereits vorhandenes Schulungsmaterial aktualisiert bzw. komplett neu erstellt.

Die Hilfestellung bei der Programmanwendung umfasste sowohl Stand-alone-Rechnungen mit ATHLET-CD als auch Simulationen mit der gekoppelten Version ATHLET-CD/COCOSYS. Bei der gekoppelten Version wurden Anwender hauptsächlich bzgl. der Schnittstelle SOPHAEROS – COCOSYS unterstützt. Es erfolgte aber bereits auch Support bei ersten Anwendungen des neu modellierten Schmelzeübertrags vom Reaktordruckbehälter zum Containment.

Vom 7. bis 10. März 2016 fand ein Treffen mit 35 ATHLET/ATHLET-CD-Anwendern aus neun Ländern in Garching statt. Dabei wurden von externen Anwendern auch Vorträge über Anlagensimulationen bzw. Lagerbeckenrechnungen mit ATHLET-CD gehalten. Rund um das Seminar gab es außerdem zahlreiche bilaterale Gespräche über die Anwendung von ATHLET-CD. Entwickler und Anwender nutzten dabei die Gelegenheit Erfahrungen aus der Programmanwendung auszutauschen.

Die Rückflüsse und Anregungen von Anwendern sind ein wichtiger Beitrag zur Verbesserung von ATHLET-CD und finden daher laufend Eingang in die Programmentwicklung. Wichtig sind in diesem Zusammenhang vor allem Anregungen zu Programmweiterungen, zu numerischen Ausgaben (während und nach der Simulation) und deren grafischen Darstellungsmöglichkeiten sowie zu Verbesserungen hinsichtlich der Programmdokumentation.

### 5.3 Programmpflege und -optimierung

Es wurden zahlreiche Arbeiten bzgl. der Programmpflege und -optimierung durchgeführt. So wurde dem Anwenderwunsch nach einer Möglichkeit der Visualisierung der Ergebnisse aus dem Modul AIDA entsprochen. Die Anregung zum Einbau in das GRS-Programm ATLAS wurde an die entsprechenden Entwickler weitergeleitet, allerdings waren dazu auch einige Anpassungen in der Ausgabe von Daten innerhalb von ATHLET-CD notwendig. Nachdem die Übergabe der Daten zu ATLAS und dort die entsprechende Erweiterung der Grafikdarstellung realisiert wurde, können jetzt die Vorgänge im unteren Plenum in der Spätphase mit ATLAS visualisiert werden.

Ein Beispiel für die grafische Darstellung des unteren Plenums in ATLAS zeigt Abb. 5.5. In der Mitte der Abbildung ist der Füllstand der Schmelze im unteren Plenum zu sehen, außen der akkumulierte Schaden in der Wand des Reaktordruckbehälters. Sobald diese Variable den Wert  $DAMAGE = 1$  erreicht, schmilzt die Wand durch und das entsprechende Element wird in der Abbildung weggeschaltet. So kann man mithilfe von ATLAS sehr schnell sehen, für welche azimutale Position ATHLET-CD das Durchschmelzen der Reaktordruckbehälterwand berechnet, was die Auswertung der Rechnung deutlich beschleunigt.

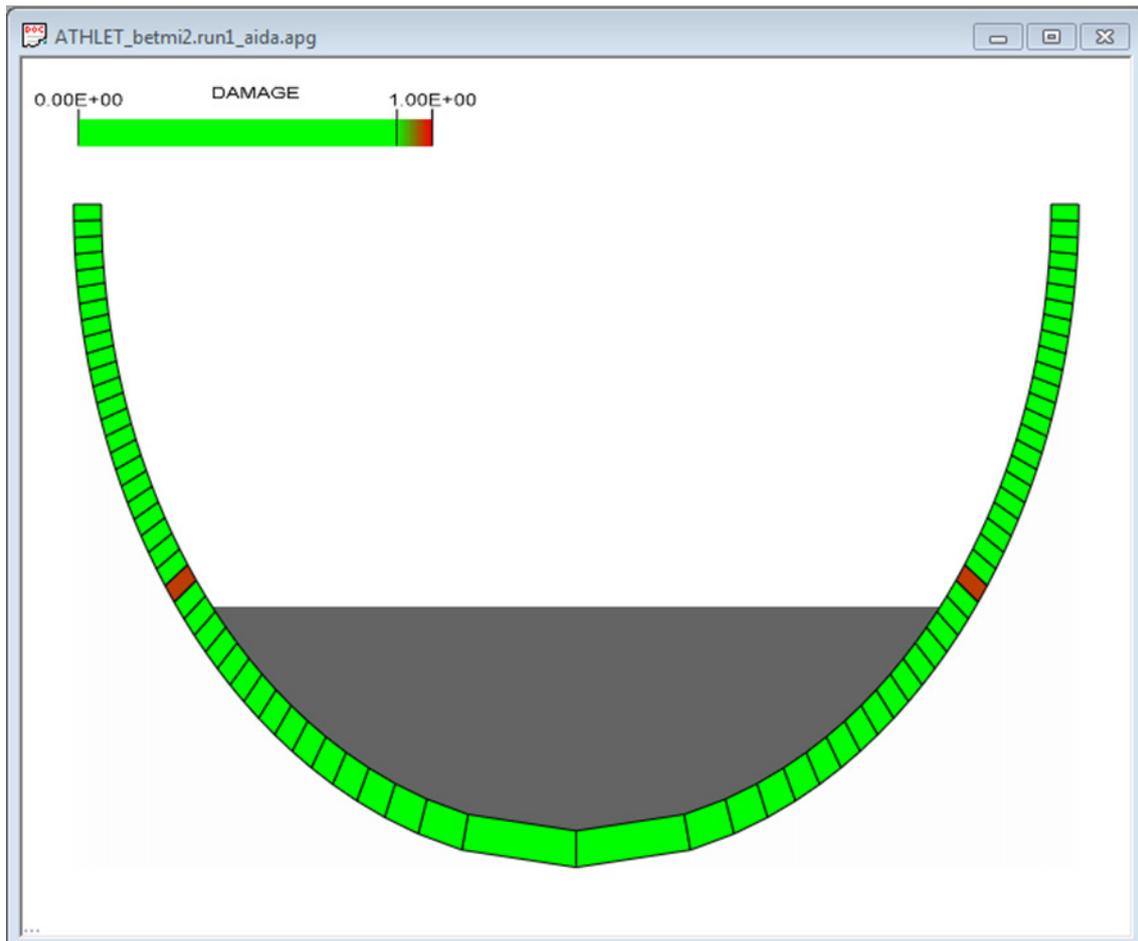
Für die Wand des Reaktordruckbehälters können verschiedene Variablen angezeigt und farblich markiert werden. Im Wesentlichen sind das folgende Output-Größen von AIDA:

- TWI: innere Wandtemperatur
- TWC: zentrale Wandtemperatur
- TWO: äußere Wandtemperatur
- QWS: Wärmestrom nach außen
- DAMAGE: aufsummierter Schaden (ASTOR-Modell)

Außerdem wurden die Postprocessing-Tools, die bei der Weitergabe von ATHLET-CD mitgeliefert werden, über den gesamten Zeitraum seit Beginn des Vorhabens kontinuierlich gepflegt. So erfordern Änderungen in ATHLET-CD oft auch eine Anpassung dieser Programme. Außerdem wurden auch zahlreiche Verbesserungen innerhalb der

Postprocessing-Tools an sich vorgenommen, um die Funktionalität bzw. die Benutzerfreundlichkeit zu erhöhen.

Ein weiterer Teil dieses Arbeitsunterpunktes war das entsprechende Binden von ATHLET-CD nach dem jeweiligen Einfrieren einer neuen (Zwischen-)Version, je nach Anforderung mit und/oder ohne Quelltext. Dazu gehört jeweils auch das Einbetten in die grafische Benutzeroberfläche bzw. das Aktualisieren der entsprechenden Schnittstellen.



**Abb. 5.5** Grafische Darstellung des unteren Plenums in ATLAS

#### 5.4 Ergänzung und Pflege der Programmdokumentation

Die Dokumentation von ATHLET-CD wurde seit Beginn des Vorhabens fortlaufend ergänzt. Dabei erforderten besonders die Freigaben der neuen Versionen ATHLET-CD 2.2 Cycle C, 3.0 Cycle A, 3.0 Cycle B und 3.1 Cycle A einen erhöhten Aufwand in Bezug auf die Ergänzung, Verbesserung und Überprüfung der Dokumentation. Außerdem

wurden sowohl die Eingabebeschreibung als auch die Ausgabebeschreibung einer gründlichen Überarbeitung unterzogen. Dabei wurden zahlreiche Anregungen und Hinweise von Anwendern berücksichtigt.

In früheren Versionen wurden das User's Manual und das Programmer's Manual in BroadVision Quicksilver erstellt und dann in PDF konvertiert. Um die Aktualisierung und Erweiterung der Handbücher durch die Entwickler in Zukunft zu erleichtern, wurden die Dokumente in das weit verbreitete MS Word-Format übertragen, das von allen Entwicklern verwendet werden kann.

Weiterhin wurde aktuelles Schulungsmaterial für neue Nutzer von ATHLET-CD erstellt. Die Arbeiten am Modellbericht wurden außerdem fortgesetzt.

## **5.5 Qualitätssicherung und Freigabe neuer Programmversionen**

Um die Qualitätssicherung zu erhöhen, wurde der bisher verwendete SVN-Server auf den im Funktionsumfang umfangreicheren und besser gewarteten TeamForge-Server der GRS transferiert. Dadurch wurde auch die Kopplung mit dem ebenfalls in TeamForge abgelegten COCOSYS deutlich erleichtert, da der Austausch der neuen Version innerhalb des TeamForge-Servers einfacher, nachvollziehbarer und damit auch sicherer zu bewerkstelligen ist.

Weiterhin wurden wichtige Datensätze ebenfalls über TeamForge versioniert. Somit hat jedes zugelassenes Mitglied des Entwicklerteams Zugriff auf die wesentlichen Datensätze für verschiedene ATHLET-CD-Versionen, die zudem noch gegen Datenverlust gesichert sind.

Bisher wurde ATHLET-CD nur mit dem INTEL-Compiler (letzte Version 14.01) getestet, da das OREST-Programmpaket aufgrund der originären Programmierung Hunderte von Warnungen und Fehler anzeigte, wenn man z. B. den GNU-Compiler (aktuell Version 5.2) benutzte. In der nun vorliegenden Version von ATHLET-CD ist diese Schwachstelle beseitigt, so dass alle Validierungsrechnungen auch mit dem GNU-Compiler durchgeführt werden können. Durch diese neue Option konnten Programmfehler gefunden werden, die beim Einsatz des INTEL-Compilers verdeckt blieben.

Nach Weiterentwicklungen bzw. generell nach Veränderungen im Quelltext wurden außerdem fortlaufend Testrechnungen durchgeführt, um die Qualität des Simulations-

programms für jede Zwischenversion zu gewährleisten. Neben der grundsätzlichen Funktionalität muss hier vor allem die Restartfähigkeit einer Prüfung unterzogen werden.

#### **5.5.1 Freigabe von ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C**

Die Freigabe von ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C erfolgte am 01.10.2012 als Entwicklerversion /AUS 12a, AUS 12b/. Das bedeutet, dass die Weitergabe nur innerhalb der GRS und an externe Institute erfolgte, die an der Entwicklung von ATHLET-CD beteiligt sind.

Um die Qualitätssicherung zu gewährleisten, wurde die neue Version vor der Freigabe intensiven Tests unterzogen. Die Version wurde nach der Freigabe auch für die Kopplung mit COCOSYS an die entsprechenden Entwickler in der GRS weitergegeben.

Wesentliche Neuerungen in der Version ATHLET-CD 2.2C waren das Modul AIDA, das die Simulation der Spätphase bei Schmelzeverlagerungen ins untere Plenum ermöglicht, die Modellierung der Nitridbildung bei Lufteinbruch /HOL 10/ und die neue ATHLET-Version 3.0A /LER 12, AUS 13d/. Außerdem fanden wichtige Neuerungen wie beispielsweise Verbesserungen in den Modulen FIPISO und ECORE Eingang.

#### **5.5.2 Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A**

Nach ausgiebigen Tests konnte am 07.08.2013 die Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A erfolgen /AUS 13a, AUS 13b/. Im Gegensatz zur Entwicklerversion 2.2C ist die Version 3.0A eine offizielle Release-Version, die für die Weitergabe an alle lizenzierten Anwender von ATHLET-CD vorgesehen ist. Da die letzte offizielle Release-Version mit Weitergabe an alle zugelassenen Anwender die Version 2.2A1 war, stehen mit ATHLET-CD 3.0A erstmals das Spätphasenmodul AIDA sowie das integrierte ATHLET 3.0A für externe Anwender zur Verfügung. Dadurch kann jetzt der komplette Unfallablauf von der frühen Phase bis hin zum möglichen Versagen des Reaktordruckbehälters nach Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum simuliert werden. Im Vergleich zur Version 2.2C wurden aber auch weitere Erweiterungen und Verbesserungen durchgeführt, wie z. B. generelle Verbesserungen der Stabilität und Verbesserungen bei der Simulation von Oxidationseffekten.

Ein Vergleich von ATHLET-CD 3.0A mit der letzten offiziell freigegebenen und an die zugelassenen Anwender ausgelieferten Version zeigt somit folgende wesentliche Neuerungen und Verbesserungen:

- Neues Modell für die Modellierung der Spätphase im unteren Plenum: AIDA (inklusive kontinuierlicher Verlagerung der Schmelze vom Kern ins untere Plenum sowie mögliches Versagen des Reaktordruckbehälters)
- Implementierung von ATHLET 3.0A
- Einbau der Modellierung der Nitridbildung bei Lufteinbruch
- Erweiterte Modellierung der Spaltproduktfreisetzung: Freisetzung einiger Spaltprodukte in Abhängigkeit des Partialdrucks (und Reduzierung der Anzahl an Modelloptionen)
- Allgemeine Verbesserung der Stabilität
- Verbesserung der Kopplung mit MEWA
- Verbesserungen bei der Oxidationsmodellierung (und Reduzierung der Anzahl an Modellen)
- Erweiterungen und Verbesserungen in OREST und FIPISO bzgl. der Leistungsverteilung im Kern
- Verbesserung der Kopplung mit COCOSYS

Die Anwender von ATHLET-CD können somit über einen deutlich erweiterten und verbesserten Funktionsumfang von ATHLET-CD verfügen und ein breites Spektrum an Möglichkeiten bei der Simulation schwerer Störfallabläufe abdecken.

Als Vorbereitung zur Freigabe der neuen Version 3.0A wurde auch die Programmdokumentation aktualisiert und die neue Version anhand der Basis-Validierungsmatrix erfolgreich getestet. Nach entsprechender Freigabe durch die zuständigen Stellen erfolgten bereits die ersten Programm-Auslieferungen an nationale und internationale Anwender. Erste Erfahrungsrückflüsse sind bereits erfolgt.

### **5.5.3 Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle B**

Die Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle B erfolgte am 19.12.2014 als Entwicklungsversion. Die Version wurde freigegeben, damit das im Rahmen des BMBF-Verbundhabens WASA-BOSS („Weiterentwicklung und Anwendung von Severe Accident Codes – Bewertung und Optimierung von Störfallmaßnahmen“, BMBF 02NUK028) entwickelte und in ATHLET-CD implementierte Modell LHEAD, welches Vorgänge im unteren Plenum (speziell in Siedewasserreaktoren) beschreibt /AUS 15/, an externe Anwender weitergegeben werden konnte. Daher erfolgte die Weitergabe nur innerhalb der GRS und an externe Institute, die am BMBF-Verbundvorhaben WASA-BOSS beteiligt sind. Die Anwender führten mit dieser Version von ATHLET-CD zahlreiche Simulationen durch und gaben ihre Erfahrungen an die Entwickler zurück, was der weiteren Entwicklung von ATHLET-CD zu Gute kam.

Um die Qualitätssicherung zu gewährleisten, wurde auch diese Version vor der Freigabe intensiven Tests unterzogen. Die Dokumentation wurde entsprechend aktualisiert.

### **5.5.4 Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A**

Die Version ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A wurde eingefroren und wird zurzeit getestet sowie für die Freigabe vorbereitet. Die Version 3.1A ist seit der Version 3.0A die erste offizielle Release-Version, die für die Weitergabe an alle lizenzierten Anwender von ATHLET-CD vorgesehen ist.

Mit ATHLET-CD 3.1A stehen dem Anwender folgende wesentliche Neuerungen und Verbesserungen zur Verfügung:

- Neues Modell für die Modellierung der Spätphase im unteren Plenum: LHEAD
- Implementierung von ATHLET 3.1A
- Erweiterung von AIDA: Berechnung des Austritts von Schmelze aus dem Reaktor-druckbehälter nach dessen Versagen
- Erweiterung der Kopplung mit COCOSYS: Übergabe der Schmelze an COCOSYS nach dem Versagen des Reaktordruckbehälters
- Erweiterte Modellierung der Spaltproduktfreisetzung: Berücksichtigung von chemischen Bedingungen bei der Freisetzung der Elemente Barium, Molybdän und Ruthenium

- Allgemeine Verbesserung der Stabilität

Mit dem Modell LHEAD, welches im Modul ECORE implementiert ist, ist eine Alternative zu AIDA für das untere Plenum vorhanden. LHEAD ermöglicht dabei eine genauere Abbildung der Strukturen und Vorgänge im unteren Plenum. Gerade bei der Simulation von Unfällen mit Spätphase bei Siedewasserreaktoren ist diese genauere Modellierung von besonderem Interesse, da dadurch auch die speziellen Einbauten dieses Reaktortyps (z. B. Durchführungen durch die Bodenkalotte) berücksichtigt werden können. Das neue Modell kann aber auch für Druckwasserreaktoren verwendet werden.

Dadurch, dass in der neuen Programmversion nach einem möglichen Versagen des Reaktordruckbehälters Schmelze aus dem Behälter austreten und die entsprechenden anschließenden Vorgänge im Containment mit COCOSYS berechnet werden können, ist es jetzt möglich mit dem Programmsystem ATHLET – ATHLET-CD – COCOSYS eine komplette Unfallsequenz zu simulieren.

Außerdem wurde auf Basis von ATHLET-CD 3.1A eine neue Version eingeführt, die das neue SOPHAEROS sowie das neue Modell der radialen Schmelzeausbreitung (für Druckwasser- und Siedewasserreaktoren) enthält. Bevor diese beiden wesentlichen Neuerungen für alle Anwender freigegeben werden können, müssen noch umfangreiche Tests erfolgen, da hierbei sehr große Auswirkungen auf viele Simulationen auftreten können. Daher soll die erweiterte Version von ATHLET-CD zunächst nur GRS-intern validiert und verwendet werden. Sobald die Tests erfolgreich waren und ggf. Fehler korrigiert worden sind, soll die Version freigegeben werden.

## **5.6 Unterstützung bei der Implementierung von SWR Modellen in ASTEC**

Im Rahmen der Kooperation mit dem Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) in Frankreich zur Weiterentwicklung von ASTEC fand ein Treffen mit den französischen Code-Entwicklern in Garching statt. Dabei wurde die aktuelle Modellierung der Siedewasserkomponenten in ATHLET-CD für schwere Unfallsequenzen vorgestellt und Möglichkeiten zur Modellierung in ASTEC diskutiert.



## **6 Fukushima**

Am 11. März 2011 um 14:46 Uhr Ortszeit ereignete sich ein schweres Erdbeben der Stärke 9 vor der Küste Japans, nordwestlich der Hauptinsel Honshu. Das Erdbeben führte zu schweren Zerstörungen in der angrenzenden Küstenregion, die auch den Ausfall der Stromversorgung in dieser Region bewirkten. Von den in diesem Küstenbereich vorhandenen vier Kernkraftwerksstandorten waren vier Siedewasserreaktoren am Standort Fukushima I am stärksten betroffen. Durch das Erdbeben wurde auslegungsgemäß eine sofortige Reaktorschnellabschaltung ausgelöst und der Ausfall der externen Stromversorgung führte zum automatischen Start der Notstromdiesel. Infolge des Erdbebens trat ein Tsunami auf, der den Küstenbereich des KKW-Standortes Fukushima mit einer geschätzten Wellenhöhe von 14 – 15 m ca. eine Stunde später erreichte, wodurch es zu einer zeitlich begrenzten Überflutung weiter Bereiche des Kraftwerksgeländes kam. Die dadurch verursachten Ausfälle der Notstromdiesel und der Nebenkühlwassersysteme führten zum Totalausfall der Nachwärmeabfuhr aus dem Reaktor und der Kondensationskammer des Sicherheitsbehälters der Blöcke 1 bis 3.

### **6.1 Beteiligung am OECD BSAF Projekt und den Projektmeetings**

Von der OECD/NEA in Zusammenarbeit mit Japan und anderen Ländern wurde im Herbst 2012 das internationale Projekt „Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Dai-ichi NPS“ (BSAF) initiiert, um die Unfallabläufe in den Blöcken 1 bis 3 am Standort Fukushima und den aktuellen Status des Kernmaterials mit verschiedenen Programmsystemen zu analysieren /BEN 16/. Das BSAF-Projekt hat zwei grundsätzliche Ziele:

- Eine detaillierte Analyse des Unfalls der Blöcke 1 bis 3 in Fukushima Dai-ichi für die ersten 6 Tage und die Ermittlung des sich ergebenden Brennstoff-/Kernschmelzustandes innerhalb des Reaktors sowie des Containments. Die Erkenntnisse aus dem Vergleich der Analysen mit verschiedenen Codes sollen die japanischen Organisationen bei der Planung der Aufräumarbeiten unterstützen (speziell bei der Rückholung der Schmelze).
- Das Gewinnen von Erkenntnissen aus den Analysen und dem späteren Rückbau der Anlagen für die Verbesserung der verwendeten Simulationscodes.

Die Organisation des BSAF-Vorhabens erfolgt maßgeblich durch JAEA (Japan Atomic Energy Agency) mit Unterstützung durch IAE (Institute of Applied Energy), JNES (Japan Nuclear Energy Safety Organization), CRIEPI (Central Research Institute of Electric Power Industry), TEPCO (Tokyo Electric Power Company) sowie weiteren Partnern aus Japan. Die bei BSAF (Phase-1) teilnehmenden Organisationen stammen aus folgenden Ländern:

- Frankreich
- Deutschland
- Japan
- Korea
- Russland
- Spanien
- Schweiz
- USA

Die GRS beteiligte sich an Phase 1 des BSAF-Vorhabens mit Unfallanalysen für die baugleichen Blöcke 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi mit der gekoppelten Codeversion ATHLET-CD/COCOSYS. Phase 1 des Projekts wurde Ende 2014 abgeschlossen und Anfang 2015 wurde Phase 2 initiiert, die für 3 Jahre vorgesehen ist. Die Arbeiten in Phase 2 bauen auf den Unfallanalysen aus Phase I auf und erweitern das Untersuchungsspektrum signifikant. Zielsetzung ist es, das Spaltproduktverhalten in den Blöcken 1 bis 3 in Fukushima Dai-ichi und den Quellterm aus den Anlagen für die ersten ca. 3 Wochen des Unfallablaufes bis Ende März 2011 zu ermitteln. Mit den Analysen sollen das Inventar an radioaktiven Stoffen im verbliebenen Kernmaterial im Reaktor sowie im Containment ermittelt werden, sowie Aussagen zur Rückhaltung von Spaltprodukten im Wasser in der Kondensationskammer, zu Ablagerungsvorgängen auf wesentlichen Strukturen und Komponenten in Reaktor, Containment und umgebendem Reaktorgebäude und zum Quellterm in die Umgebung erarbeitet werden. Die Beteiligung der GRS wird fortgesetzt, wozu ein eigenes BMWi gefördertes Vorhaben initiiert wurde.

Aus den Unfallanalysen aller Partner aus Phase 1 des BSAF-Projektes konnten noch nicht für alle Anlagen eindeutige Zustände hinsichtlich der Kernzerstörung ermittelt

werden. Für Block 1 ergab sich ein weitgehend konsistentes Bild: Alle Simulationen kamen zu dem Schluss, dass es zum Versagen des RDB kam, und quasi alle Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter ausgetragen wurde, wo es zu einer anschließenden Schmelze-Beton-Wechselwirkung kam. Allerdings sagten einige Analysen eine zeitlich unbegrenzte Erosion des Betons voraus, wofür es keine Anzeichen gibt. Für Block 2 und Block 3 ergab sich kein eindeutiges Bild. Tendenziell ist Block 3 stärker zerstört als Block 2. Insbesondere für Block 2 prognostizierten einige Teilnehmer das Versagen des Reaktordruckbehälters, während andere Teilnehmer zu dem Schluss kamen, dass die Kernzerstörung vorher aufgehalten werden konnte bzw. dass die Schmelze im unteren Plenum ausreichend gekühlt werden konnte. Auf Ergebnisse der GRS-Analysen mit der gekoppelten Codeversion ATHLET-CD/COCOSYS wird nachfolgend eingegangen. Diese wurden auch auf einem Vortrag auf der NURETH16 Konferenz präsentiert /BAN 15/.

#### **6.1.1 Erstellte Datensätze und Randbedingungen der Analysen**

Verwendet wurden für die Analysen die Versionen ATHLET-CD 3.0A für den Kern und den Primärkreis sowie COCOSYS 2.4v4 für das Containment. Um den gesamten Unfallhergang für die ersten Tage des Ablaufes analysieren zu können, wurden folgende Module von ATHLET-CD eingesetzt:

- ATHLET (Thermo-Fluid-Dynamik)
- ECORE (Kernzerstörung)
- OREST / FIPISO (Nuklidverhalten)
- FIPREM (Freisetzung von Spaltprodukten und Aerosolen)
- SOPHAEROS (Transport von Spaltprodukten und Aerosolen)
- AIDA (Verhalten der Schmelze im unteren Plenum)

Die Kopplung der Programme wurde über den COCOSYS-Treiber realisiert, der zusätzlich noch folgende Module von COCOSYS einbindet:

- RAMAIN (simuliert die thermohydraulischen Vorgänge innerhalb des Containments und angrenzender Gebäude)

- AFP (berechnet die Verteilung der aus dem Kreislauf (ATHLET-CD) freigesetzten Spaltprodukte ins Containment und in die angrenzenden Gebäude, die Iod-Chemie sowie die Rückhaltung der Aerosole im Wasser der Kondensationskammer)
- MEDICIS (wird gegenwärtig noch nicht verwendet, steht aber zur Verfügung, um die Schmelze-Beton-Wechselwirkung und die damit verbundenen Freisetzungen von Spaltprodukten bzw. Gasen zu simulieren)

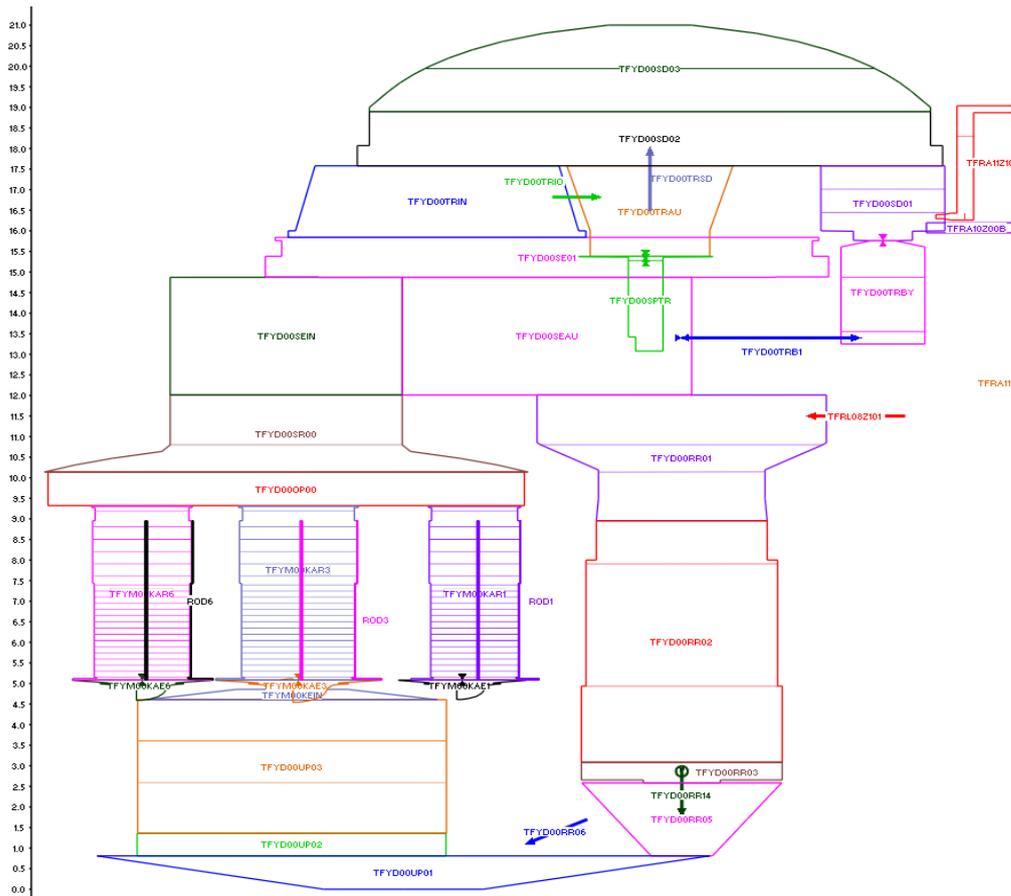
Zur Visualisierung der Rechnungen wurde das Programm ATLAS genutzt.

Die Rechnungen wurden bis zu einem möglichen RDB-Versagen durchgeführt, da zum Zeitpunkt der Analysen das Modell, das in der gekoppelten Codeversion den Austrag der Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter in das Containment simuliert, noch nicht fertiggestellt war.

Da nur einige Messdaten aus den Unfallabläufen vorliegen, wurden erforderliche Randbedingungen zu Beginn der Phase 1 des Vorhabens festgelegt. Um vergleichbare Simulationen durchführen zu können, wurden die Start- und Stopp-Zeiten für die dampfbetriebenen Notkühlsysteme RCIC (Niederdrucksystem) und HPCI (Hochdrucksystem) fest vorgegeben. Natürlich sind einige dieser Zeitpunkte durch die Aktionen auf der Anlage bekannt, einige Zeitpunkte konnten aber auch nur durch das Anlagenverhalten abgeleitet werden, wie z. B. der Ausfall des RCIC-Systems in Block 2, der nur durch den abfallenden Füllstand innerhalb des Reaktordruckbehälters diagnostiziert werden konnte. Die Ein- bzw. Ausspeiseraten der Systeme wurden in Form einer Tabelle vorgegeben und zwar so, dass die Ergebnisse möglichst gut den tatsächlichen Unfallablauf entsprechend den aktuell verfügbaren Messdaten wiedergeben.

#### **6.1.1.1 ATHLET-CD Datensatz**

Der ATHLET-CD Datensatz basiert ursprünglich auf dem Datensatz einer typischen deutschen SWR-Anlage und wurde entsprechend den von TECPO Ende 2012 zur Verfügung gestellten Daten aus den BSAF-Vorhaben sukzessive angepasst. Die ursprüngliche Nodalisierung des SWR-69 Datensatzes ist in Abb. 6.1 dargestellt.



**Abb. 6.1** ATHLET-CD Nodalisierung des Reaktors eines SWR Baulinie 69

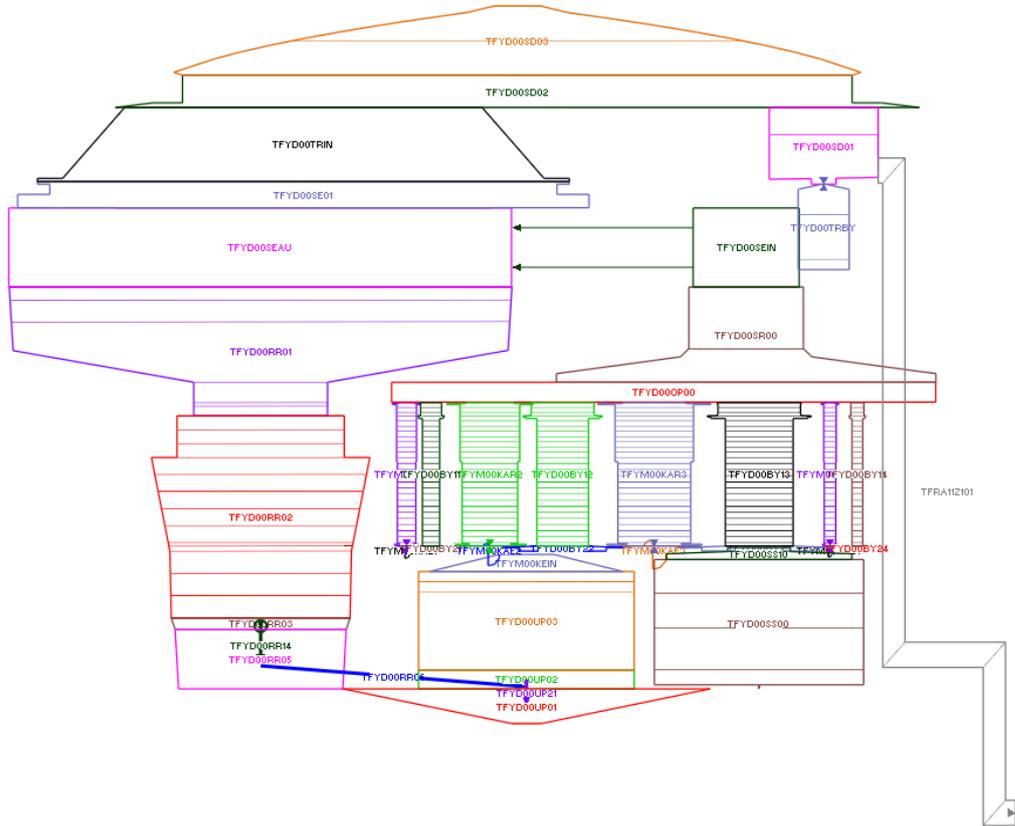
Anfänglich wurde ein Datensatz mit sechs thermohydraulischen Kernkanälen und acht Kernringen genutzt. Da die hohe Anzahl von Kontrollvolumen dabei sehr hohe Anforderungen an die Rechenzeit stellt, wurde der Datensatz auf vier Kernkanäle mit sechs Kernringen reduziert. Vergleichsrechnungen zwischen den Datensätzen mit vier und sechs Kernkanälen rechtfertigten dieses Vorgehen.

Die Anzahl der Brennelemente in den Kernringen ist so gewählt worden, dass sie von innen nach außen zunimmt (bis zu Ring 4) und dann wieder abnimmt (s. Tab. 6.1). Dadurch wird eine realistischere Simulation der Kernzerstörung erwartet.

Die im Vorhaben genutzte ATHLET-CD Nodalisierung ist in Abb. 6.2 schematisch dargestellt.

**Tab. 6.1** Anzahl der Brennelemente je Kernring

Kernring	1	2	3	4	5	6
BE pro Ring	64	80	112	140	112	40



**Abb. 6.2** ATHLET-CD Nodalisierung des Reaktors der Blöcke 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi

Der anfängliche Ansatz ein realistisches Pumpenmodell für RCIC und HPCI zu implementieren wurde verworfen, da nicht ausreichend Daten zur Verfügung stehen. Es wurde stattdessen versucht, die Ein- und Auspeiseraten so anzupassen, dass die verfügbaren Messwerte (Druck und Füllstand im Reaktordruckbehälter) bestmöglich getroffen werden.

Leckagen am Reaktordruckbehälter (Bereich der Steuerstabdurchführungen) oder an den externen Umwälzpumpen wurden nicht angenommen<sup>1</sup>. Unfallbedingte Leckagen am RDB, die auch im Rahmen des BSAF-Projekts diskutiert wurden, sind in dem Datensatz abgebildet. So kann aufgrund der hohen Temperaturen der bei der Kernzerstörung freigesetzten Gase die Dichtung des arbeitenden Sicherheitsventils versagen. Dadurch können Gas, Dampf und Spaltprodukte direkt, unter Umgehung der Wasservorlage im Torus, in den Sicherheitsbehälter gelangen. Ebenfalls während der Kernzerstörung kann es zum Versagen der durch den Reaktordruckbehälterboden geführten Rohre für die Kerninstrumentierung<sup>2</sup> kommen. Dies hat für die Langzeitphase eine größere Bedeutung, da die Leckage im Kernbereich beginnt, und in den Sicherheitsbehälter führt. Somit kann beim Wiederfluten des Reaktordruckbehälters der Leckageort überspeist werden, und Wasser tritt in den Sicherheitsbehälter aus.

Block 2 und 3 sind nahezu identisch aufgebaut, so dass der Datensatz weitgehend identisch ist und sich nur hinsichtlich der Kernbeladung<sup>3</sup> unterscheidet. Block 2 ist mit UO<sub>2</sub>-Brennelementen beladen gewesen, während Block 3 teilweise auch mit MOX-Brennelementen beladen war. Da die MOX-Brennelemente über den ganzen Kern verteilt sind, konnten die geänderten geometrischen Profile in den Datensätzen nicht berücksichtigt werden, ein „Verschmieren“ der veränderten geometrischen Profile hätte zu starke Auswirkungen auf das sonstige Strömungsverhalten.

Bei den Simulationen musste angenommen werden, dass die Stromversorgung nicht gleichzeitig mit der Schnellabschaltung des Reaktors nach dem Erdbeben, sondern erst ca. 120 s später ausfällt, da sonst das Kollabieren der Dampfblasen einen stärkeren Abfall des Füllstandes zur Folge gehabt hätte als die Messkurven aufzeigen, und nach dem Ausfall der Stromversorgung die großen Speisewasserpumpen nicht länger zur Verfügung gestanden hätten.

Die Modelle der Kernzerstörung, die derzeit in allen Codes zur Analyse von schweren Unfällen zum Einsatz kommen, sind an den Erkenntnissen aus dem TMI2-Unfall validiert. Aufgrund der Unterschiede im Aufbau eines Siedewasserreaktorkerns (BE-

---

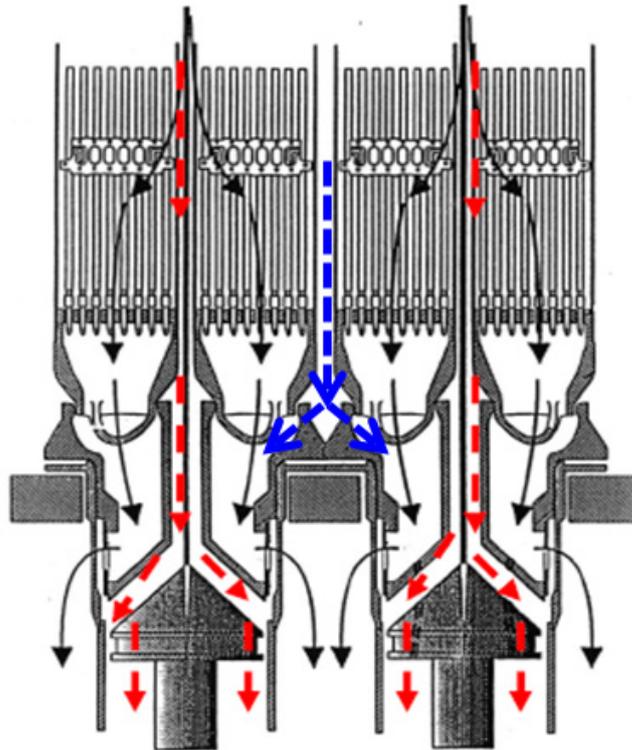
<sup>1</sup> Einzelne Rechnungen wurden in einer früheren Phase mit entsprechenden Annahmen durchgeführt, um z. B. den Containmentdruck besser zu treffen. Diskrepanzen zwischen Messwerten und Simulationsergebnissen wiesen aber darauf hin, dass die Annahmen nicht haltbar sind.

<sup>2</sup> Da diese Rohre dünnwandig und „relativ leer“ sind, ist die Wärmeleitung gering.

<sup>3</sup> Unterschiede der Brennelementtypen auf die Geometrie sind nicht berücksichtigt.

Kästen, Steuerstabkreuze, größere Durchmesser) im Vergleich zum „offenen“ DWR-Kern ohne BE-Kästen lassen sich die entsprechenden Erkenntnisse nicht unbedingt direkt für einen Siedewasserreaktor anwenden. So können z. B. die Brennelementkästen die Ausbildung eines Schmelzepools im Kern verhindern. Auch sind unterschiedliche Wege der Schmelzeverlagerung in das untere Plenum, ohne das Versagen der Kerngitterplatte, denkbar (denkbare Pfade sind in Abb. 6.3 dargestellt):

- Rote Pfeile: Umlagerung von Schmelze im Bypass zwischen den BE-Kästen, also z. B. geschmolzene Steuerstäbe, in das untere Plenum in die Führungsrohre der Steuerstäbe. Diese Schmelze würde sich zunächst in den Führungsrohren ansammeln, erst nach deren Versagen würde sie sich weiter im unteren Plenum ausbreiten, und käme dann mit dem Reaktordruckbehälter in Kontakt.
- Blaue Pfeile: Schmelze, die sich im Bypass zwischen den BE-Kästen in Bereichen ohne Steuerstäbe bildet/befindet, kann auch nach dem Versagen der BE-Kästen im Bereich der BE-Füße über offene Verbindungen in der Kerngitterplatte in das untere Plenum zwischen die Steuerstabführungsrohre fließen, wo es zu einem direkten Kontakt mit dem Reaktordruckbehälter kommt.
- Schwarze Pfeile: Geschmolzenes Material des BE selbst kann durch die Öffnung in der Kerngitterplatte fließen. Es würde sich ebenfalls direkt zwischen den Steuerstabführungsrohren ansammeln und würde auch direkt mit dem Reaktordruckbehälter in Kontakt kommen.



**Abb. 6.3** Mögliche Wege der Schmelzeverlagerung aus dem Kern in das untere Plenum eines SWR

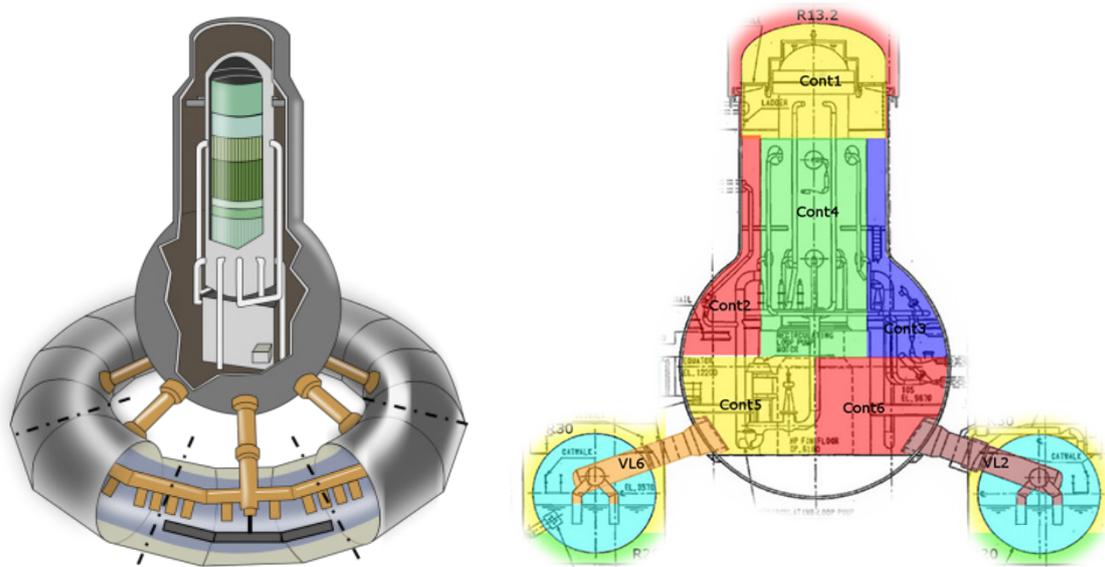
Weitere Möglichkeiten der Schmelzeverlagerung oder der Ausbildung lokaler Schmelzeansammlungen sind denkbar, wie z. B. das Versagen des Kernmantels, oder auch die Verlagerung nach dem Versagen der Kerngitterplatte. Weitere Forschung zu diesem Thema ist notwendig. Außerdem werden spätestens aus dem Rückbau der Anlagen in Fukushima weitere Erkenntnisse dazu gewonnen. Bis dahin müssen die verwendbaren Modelle, die z. B. keine Schmelzeumlagerung in die Steuerstabführungsrohre selbst beschreiben, bestmöglich zur Simulation angewendet werden und verbleibende Unsicherheiten bewertet werden.

#### 6.1.1.2 COCOSYS Datensatz

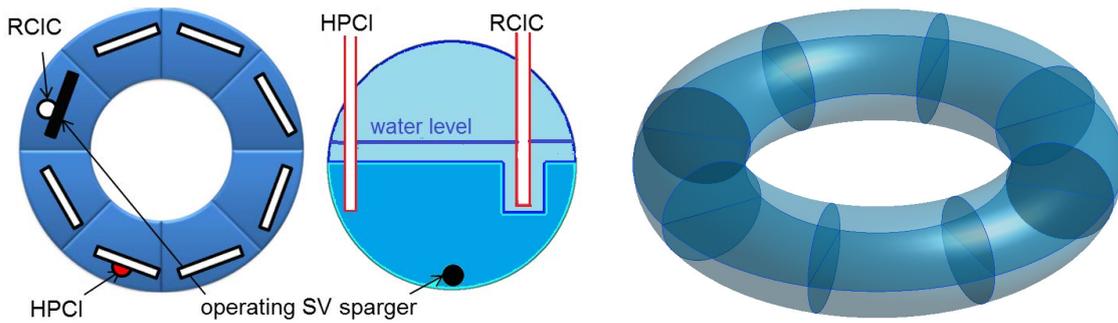
In den Analysen wurden nur die Zustände im Containment untersucht. In einer ersten Version des COCOSYS-Datensatzes wurde das Containment lediglich durch sieben Zonen abgebildet, eine davon für die Kondensationskammer. Eine schematische Darstellung des Containments ist in Abb. 6.4 zu sehen.

Um die gemessene Druckentwicklung im SHB zu simulieren, war eine spezielle Nodalisierung des Torus nötig, die verwendete Nodalisierung ist schematisch in Abb. 6.5

dargestellt. Bisher war es gängige Praxis große Wasserpools im Sicherheitsbehälter in einer Zone (in manchen Fällen in zwei Zonen) zu simulieren, da es der Vorstellung aller Anwender entsprach, dass sich in die Kondensationskammer über verschiedene Systeme (Sicherheitsventile am Reaktorkreislauf oder Kondensationsrohre aus der Druckkammer) eingetragene Wärme rasch homogen verteilt. Bei den Unfallabläufen in Fukushima kommt es aber in charakteristischen Unfallphasen nur zu einem geringen Massen- und Energieeintrag aus dem Rücklauf z. B. des RCIC-Systems, die zu einer thermischen Stratifikation innerhalb des Pools führen kann, so dass die Kondensationskammer feiner unterteilt werden musste. Die Nodalisierung des Torus wurde an die anlagenspezifischen Gegebenheiten angepasst, das heißt achtfach im Umfang und einmal in der Höhe unterteilt. Im Rahmen dieser feineren Unterteilung musste auch die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS entsprechend angepasst werden: Die Sicherheitsventile, das RCIC und HPCI speisen jetzt gemäß der Anlagenspezifik in verschiedene Sektoren des Torus ein. Auch entnimmt das RCIC-System wenn erforderlich das Wasser wiederum aus einer anderen Zone des Torus.

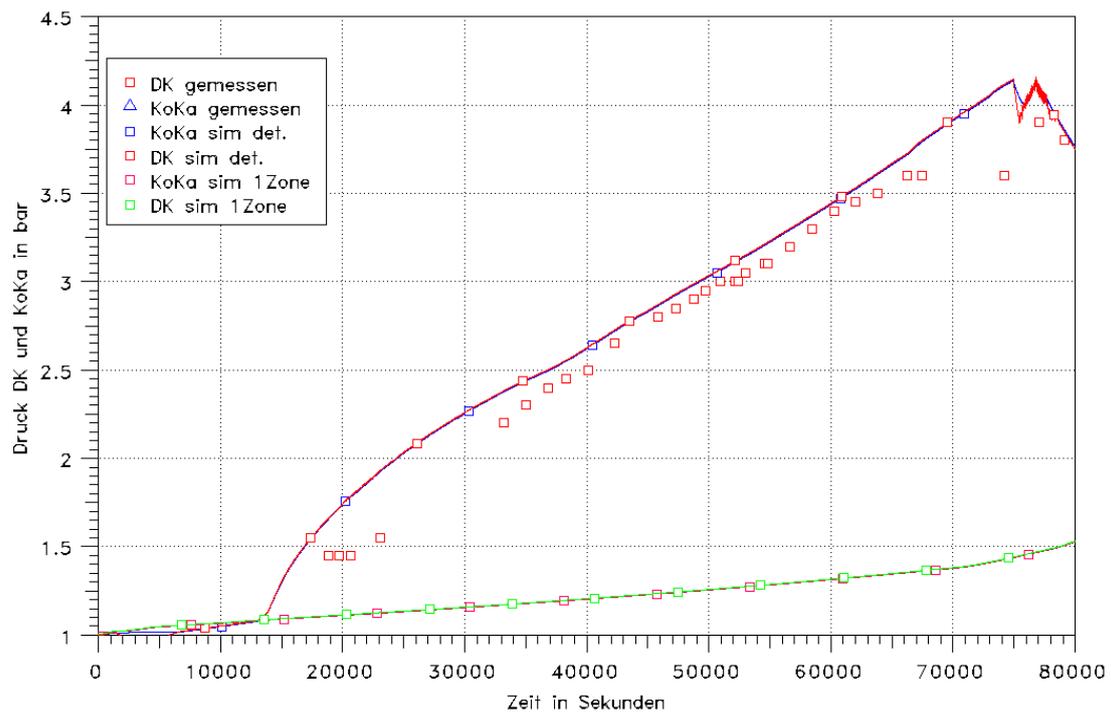
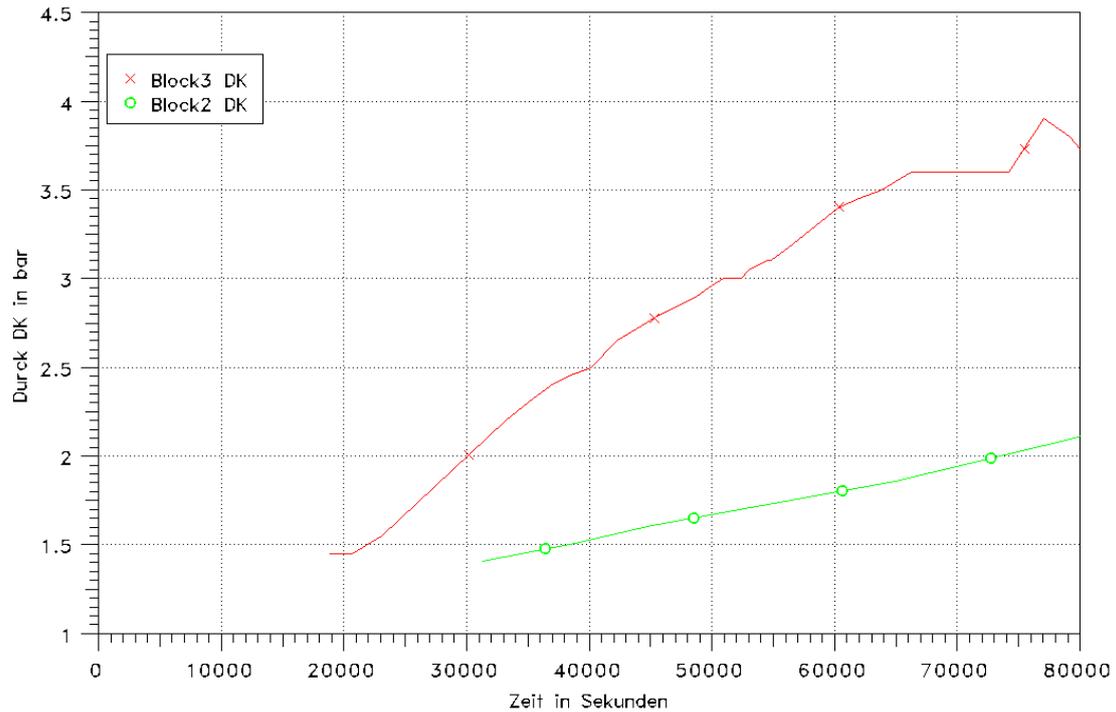


**Abb. 6.4** COCOSYS Nodalisierung des Containments der Blöcke 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi



**Abb. 6.5** COCOSYS Nodalisierung des Torus mit 2 Ebenen mit 8 Sektoren

Abb. 6.6 unten zeigt den Druckverlauf im Containment mit einer Torus-Zone und den entsprechenden Druckverlauf bei einer feineren Unterteilung für Block 3 im Vergleich zu den Messwerten. Deutlich zu erkennen ist, dass der Druck im ursprünglichen Datensatz signifikant unterschätzt wird während er bei der feineren Nodalisierung getroffen bzw. etwas überschätzt wird. Derzeit werden im Datensatz im laufenden Vorhaben weitere Verbesserungen durchgeführt.



**Abb. 6.6** Druckentwicklung im Containment

Oben: Vergleich der gemessenen Drücke für Block 2 und 3.

Unten: Vergleich der Druckentwicklung einer 1-Zonen-Nodalisierung der KoKa und einer detaillierten Nodalisierung mit den Messwerten für Block 3.

Die deutlich sichtbaren Unterschiede in den Druckentwicklungen zwischen Block 2 und Block 3 (siehe Abb. 6.6 oben) werden durch eine Flutung des Raums um den Torus

erklärt. Nach dem Tsunami lief Wasser in das Reaktorgebäude, und hat sich in dem unterirdischen Torusraum angesammelt, wodurch der untere Teil des Torus von außen mit Wasser gekühlt wurde und zusätzlich Wärme abgeführt wird, was zu einem niedrigeren Druckanstieg führt. In Phase 2 des BSAF Vorhabens wird der Datensatz zur Simulation der Vorgänge im Reaktorgebäude erweitert.

### **6.1.2 Best Estimate Rechnungen für Fukushima Dai-ichi Block 2**

Im Folgenden werden die Ergebnisse der „Best Estimate“ Simulationen, die am Ende der ersten Phase des Projekts für die Unfallabläufe in Block 2 und 3 durchgeführt wurde, vorgestellt. Die Analysen beginnen mit dem Erdbeben, dies definiert den Zeitpunkt 0 h, wodurch wird die Reaktorschnellabschaltung ausgelöst wurde.

Nach dem Eintreffen des Tsunamis ca. 45 min später kommt es zu einem totalen Ausfall der Spannungsversorgung in Block 2, das RCIC-System wurde kurz zuvor in Betrieb genommen. Durch das Fehlen der Spannung gehen die S&E-Ventile von ihrem betrieblichen Ansprechverhalten, in ein mechanisches Verhalten über, wodurch der Ansprechdruck gering steigt. Dies ist im Reaktordruckbehälter-Druck in Abb. 6.7 deutlich zu erkennen.

Mit dem Ausfall der Spannungsversorgung besteht keine Möglichkeit mehr, das RCIC-System zu steuern. Dadurch steigt der Füllstand im Reaktordruckbehälter bis zur Anbindung der Frischdampfleitung an den Reaktordruckbehälter an (siehe Abb. 6.9). Der Messbereich der verfügbaren Füllstandsmessung reicht nicht so hoch, so dass die Rechnungen einen deutlich höheren Füllstand ergeben als die Messungen. Sobald der Wasserspiegel in der Frischdampfleitung die Entnahmestelle des turbinengetriebenen RCIC-Systems erreicht, wird ein Zweiphasengemisch entnommen, wodurch der Wirkungsgrad der Turbine und somit auch der Pumpe deutlich einbricht, und es wird weniger Wasser in den Reaktordruckbehälter gefördert.

Nach ca. 7 h ist die Nachzerfallsleistung soweit abgefallen, dass durch den Betrieb des RCIC-Systems genug Leistung gebunden/abgeführt werden kann, so dass der Druck unter den Ansprechdruck der S&E-Ventile fällt, bis bei ca. 11,5 h ein Minimum erreicht wird. In der Simulation fiel der Wasserspiegel in der Frischdampfleitung immer wieder soweit ab, dass das RCIC-System zeitweise nur Dampf entnahm und als Folge wieder mehr Wasser einspeiste. Die berechneten Ein- und Ausspeisemassenströme des RCIC-Systems sind in Abb. 6.8 dargestellt. Der Grund für das Druckminimum ist nicht

geklärt. Zu diesem Zeitpunkt saugt das RCIC-System noch aus einem Kondensatvorratsbehälter kaltes Wasser an.

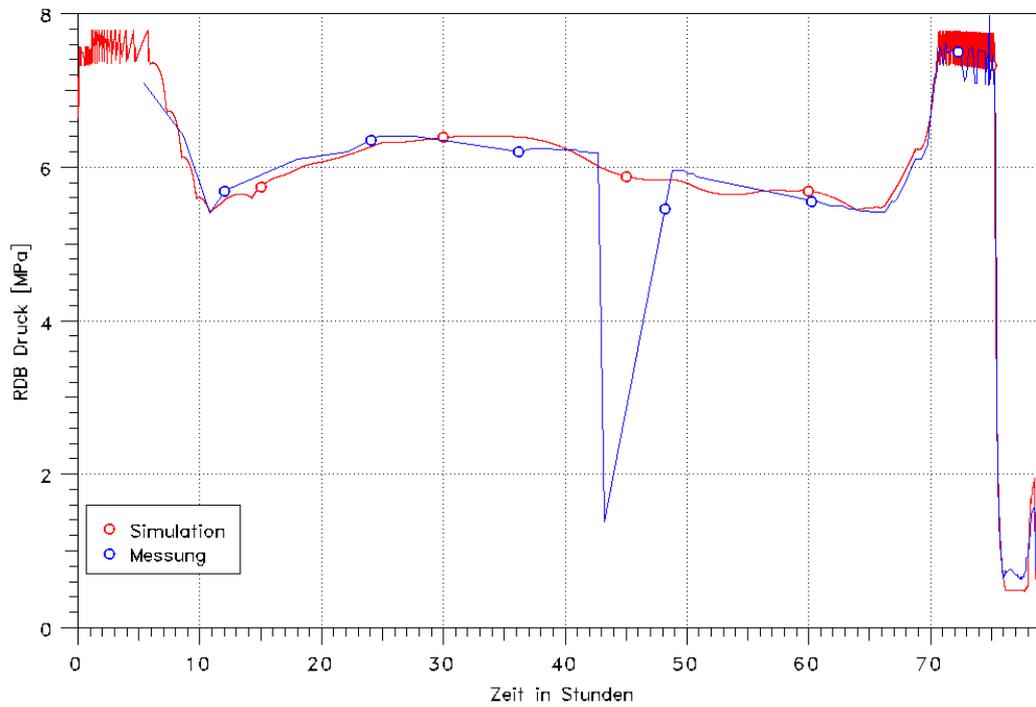


Abb. 6.7 Gemessener und berechneter RDB-Druck

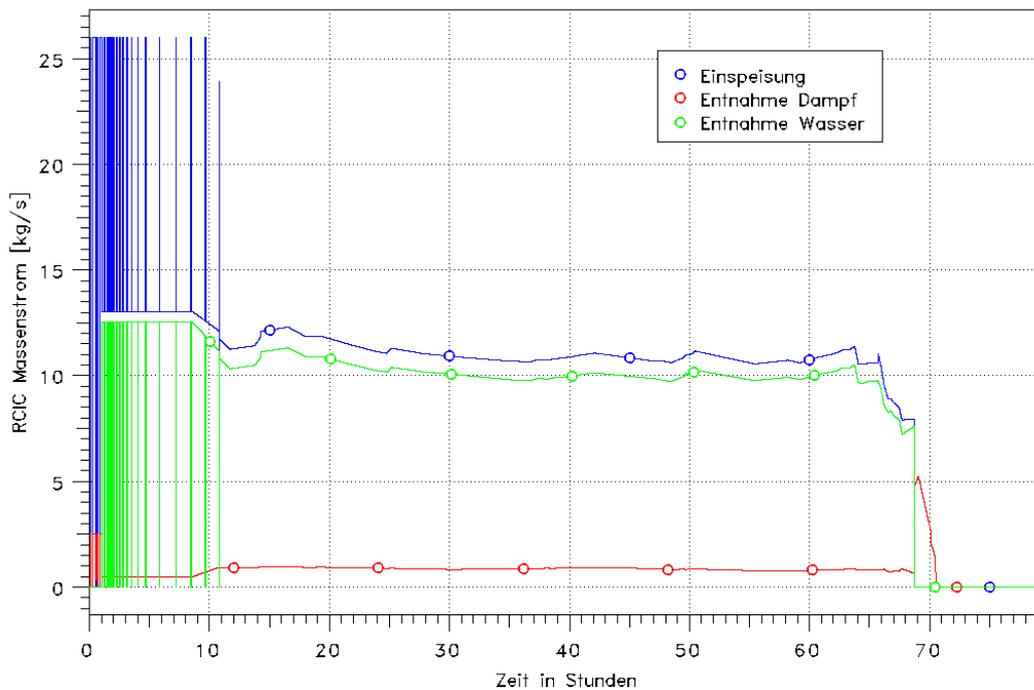
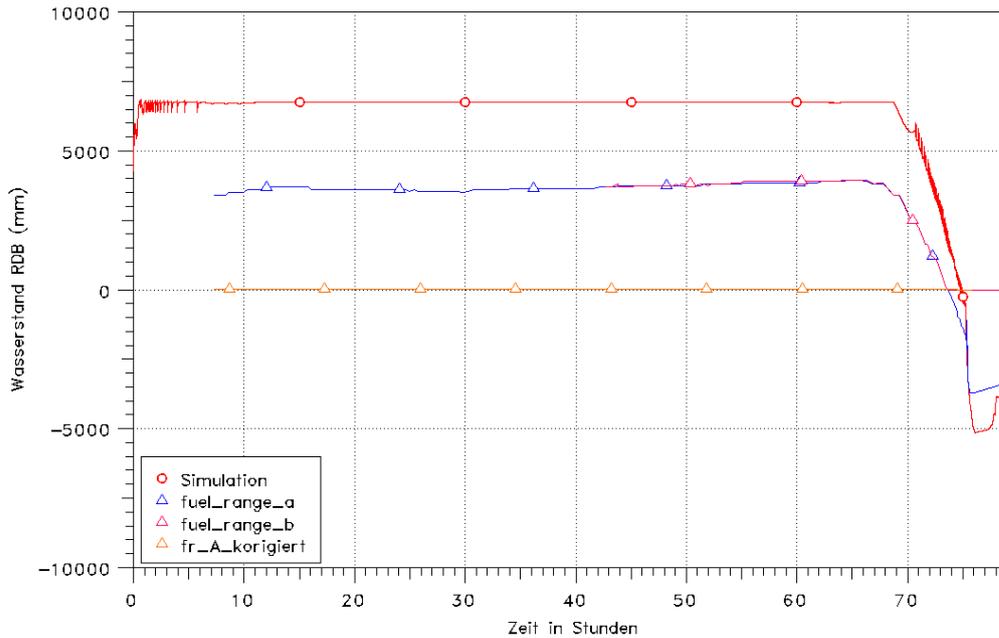


Abb. 6.8 Massenströme des RCIC-Systems

Nach dem Druckminimum steigt der Druck im Reaktordruckbehälter wieder leicht an, und der Füllstand fällt nicht mehr unter die Einbindung der Frischdampfleitung. Bei ca. 14,2 h wird die Förderung des RCIC-Systems auf die Ansaugung aus der Kondensationskammer umgeschaltet; in der Simulation ist dies durch ein nicht ganz so stark ausgeprägtes Druckminimum zu erkennen.

Nach 68,7 h fällt das RCIC-System aus, was durch den fallenden Füllstand und den Druckanstieg geschlossen wurde. In der Simulation wurde davon ausgegangen, dass das System noch eine Zeit lang einen erhöhten Dampfmassenstrom entnimmt (siehe Abb. 6.8), aber kein Wasser mehr einspeist, bevor die Turbine aufgrund einer zu hohen Drehzahl komplett schließt. Ein solches Verhalten ist prinzipiell möglich, wodurch eine bessere Übereinstimmung des gemessenen und berechneten Reaktordruckbehälter-Drucks erreicht werden konnte.

Mit dem Ausfall der Bespeisung fällt der Füllstand im Reaktordruckbehälter deutlich ab (Abb. 6.9, relativ zur Kernoberkante), während der Reaktordruckbehälter-Druck ansteigt und wieder ein Sicherheitsventil öffnet. Ca. 75,25 h nach dem Erdbeben wurde die Druckentlastung des Reaktordruckbehälters initiiert, um eine mobile Bespeisung zu ermöglichen. Der Reaktordruckbehälter-Füllstand fällt dadurch sehr schnell stark bis unter die Kernunterkante ab. Bedingt durch den niedrigen Druck kann mit der mobilen Bespeisung begonnen werden, welche aber erst ab ca. 77,1 h wirklich Wasser in den Reaktordruckbehälter einspeist, wodurch es zwischenzeitlich zur Kernzerstörung kam. Auch wenn der Grund für den Peak im Reaktordruckbehälter-Druck ab ca. 78 h nicht abschließende geklärt wurde, konnte er in der Simulationen durch das Schließen des zur Druckentlastung geöffneten S&E-Ventiles reproduziert werden. Durch den Druckanstieg fällt die Bespeisung wieder zwischenzeitlich aus, da die mobilen Pumpen nicht gegen diesen Druck fördern können. Der Wasserstand hatte ganz knapp die Kernunterkante erreicht.

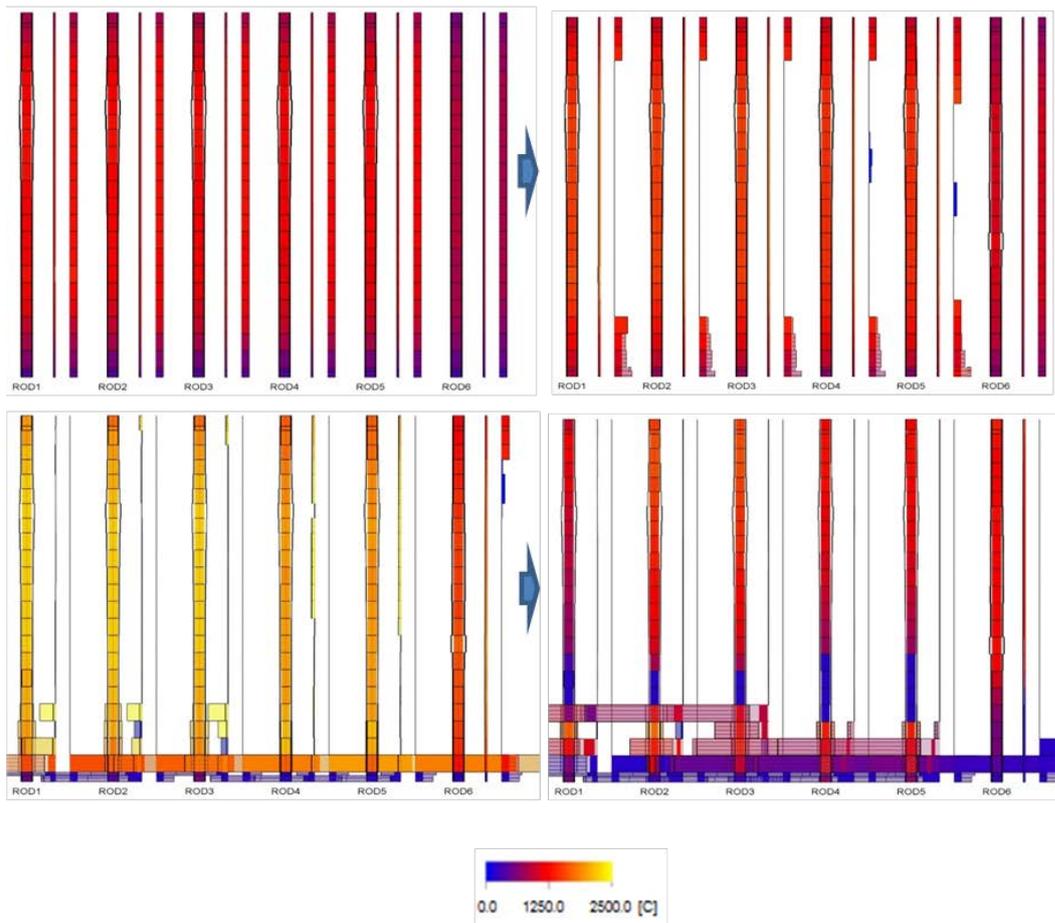


**Abb. 6.9** Vergleich von gemessenem und berechnetem RDB-Füllstand

Der Zustand des Kerns ist in Abb. 6.10 für vier Zeitpunkte dargestellt. In dem Bild sind die sechs Kernringe durch je (von links nach rechts) einen charakteristischen Brennstab, mit BE-Kasten und einem Steuerstab dargestellt. Die Bilder zeigen folgendes:

- Im ersten Bild (links oben), ist der Kernzustand bei 77,1 h also bevor Wasser den Kern erreicht und Dampf produziert werden kann, dargestellt. Der Kern hat sich seit der Druckentlastung aufgeheizt. Das Aufblähen der Brennstäbe, bedingt durch den hohen Innendruck bei gleichzeitigem niedrigem Druck im Reaktordruckbehälter, ist deutlich zu erkennen und charakteristisch für derartige Niederdruck-Szenarien.
- Das Schmelzen der Steuerstäbe bedingt durch eutektische Reaktion des Absorber mit dem Strukturmaterial ist auf dem nächsten Bild (bei 77 h) gut zu erkennen. Brennstäbe und BE-Kästen sind zu diesem Zeitpunkt noch relative intakt.
- Der Zustand nach 78,7 h ist im linken unteren Bild zu erkennen: der Wasserstand hatte die Kernunterkante erreicht, Dampf wurde produziert, wodurch Oxidation ermöglicht wurde. Die Nachzerfallsleistung zusammen mit der bei der Oxidation freiwerdenden Energie hat Teile des Kerns auf über 2000 °C aufgeheizt. Steuerstäbe und die Brennelementkästen sind zu diesem Zeitpunkt nahezu komplett geschmolzen.

- Das letzte Bild in Abb. 6.10 zeigt den Zustand des Kerns nachdem der Wasser-  
spiegel wieder in den Kernbereich gestiegen ist und der Kern deutlich abgekühlt  
wurde. Zu diesem Zeitpunkt wurde die Simulation beendet. Aufgrund der Zerstö-  
rung der Steuerstäbe, der aber weitgehend intakten Geometrie des Kerns kam die  
Frage einer möglichen Rekritikalität auf, die sich derzeit in den Simulationen nicht  
berücksichtigen lässt.



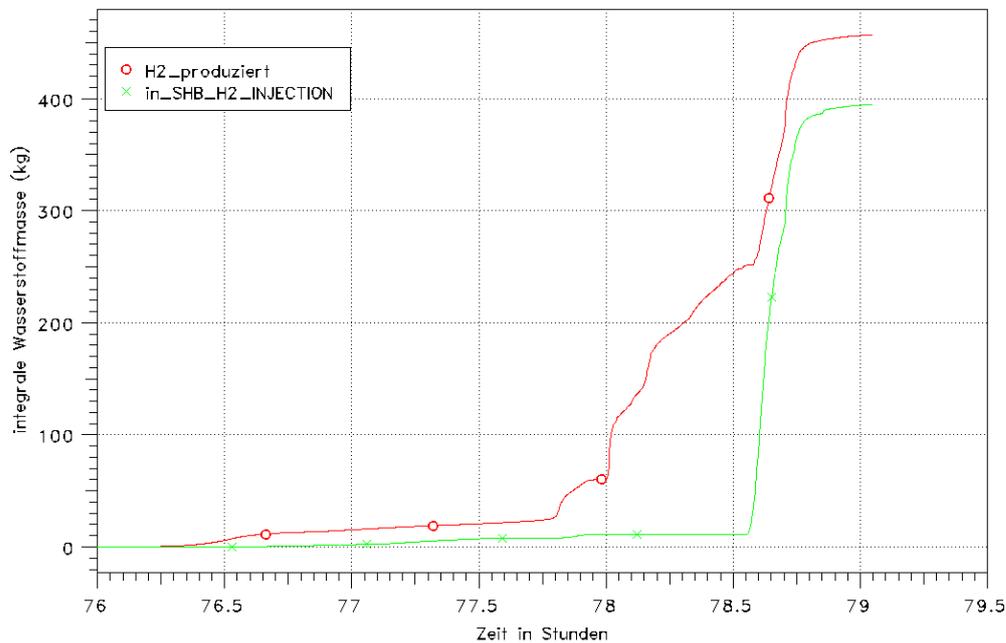
**Abb. 6.10** Berechnete Temperaturprofile des Kerns für ROD1-6 (jeweils Brennstab, BE-Kasten und Steuerstab)

Zeitpunkte: 77,1h (Kernaufheizung), 77,6h (Beginn der Kernzerstörung, Schmelzen der Steuerstäbe), 78,7h (Eskalation der Kernzerstörung) und 79,1h (nach Wiederfluten, Ende der Analyse)

Die Rechnung endet derzeit mit dem ersten Wiederfluten des Kerns. Eine Materialumlagerung ins untere Plenum ist unter diesen Umständen nicht zu befürchten. Das Ergebnis, das kein Versagen des Reaktordruckbehälters mit Schmelzeaustrag zeigt, ist in

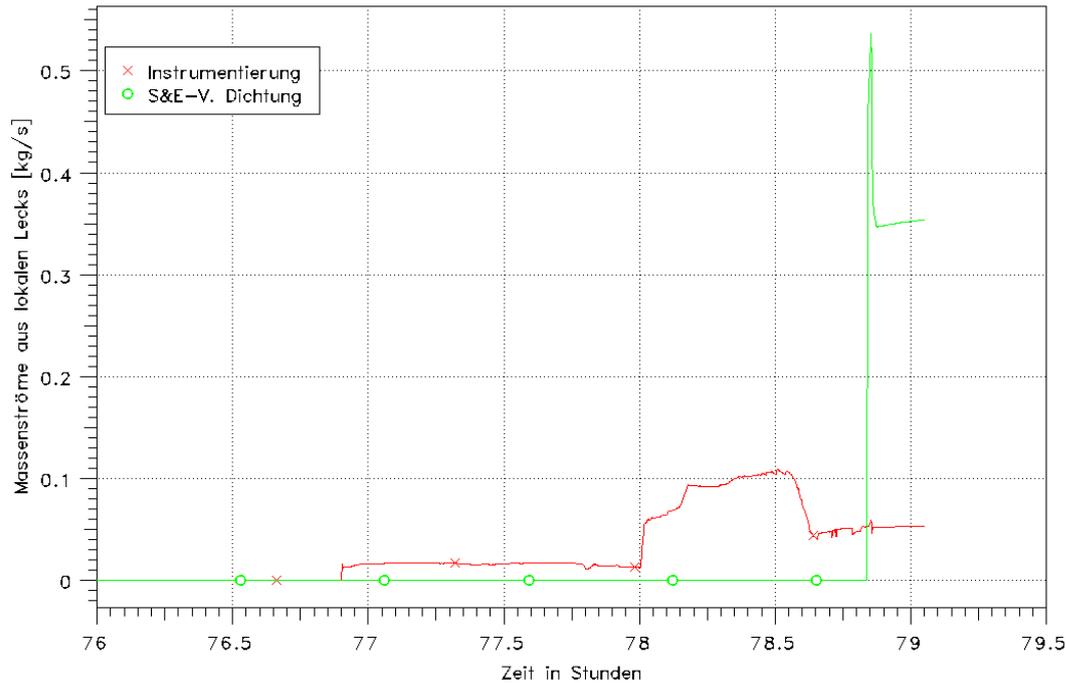
prinzipieller Übereinstimmung mit dem Ergebnis anderer Simulationen aus dem BSAF-Projekt.

Aufgrund des Dampf mangels wird in der ersten Phase der Kernzerstörung (Zeit bis ca. 77,75 h) kaum Wasserstoff produziert (siehe Abb. 6.11). Sobald der Wasserstand weit genug steigt, dass Wasser im Kernbereich wieder verdampfen kann, und somit Dampf zur Verfügung steht, wird Wasserstoff in größeren Mengen produziert (Zeitbereich ab ca. 78 h). Dieser gelangt erst mit dem erneuten Öffnen S&E-Ventils vom Reaktordruckbehälter in das Containment.



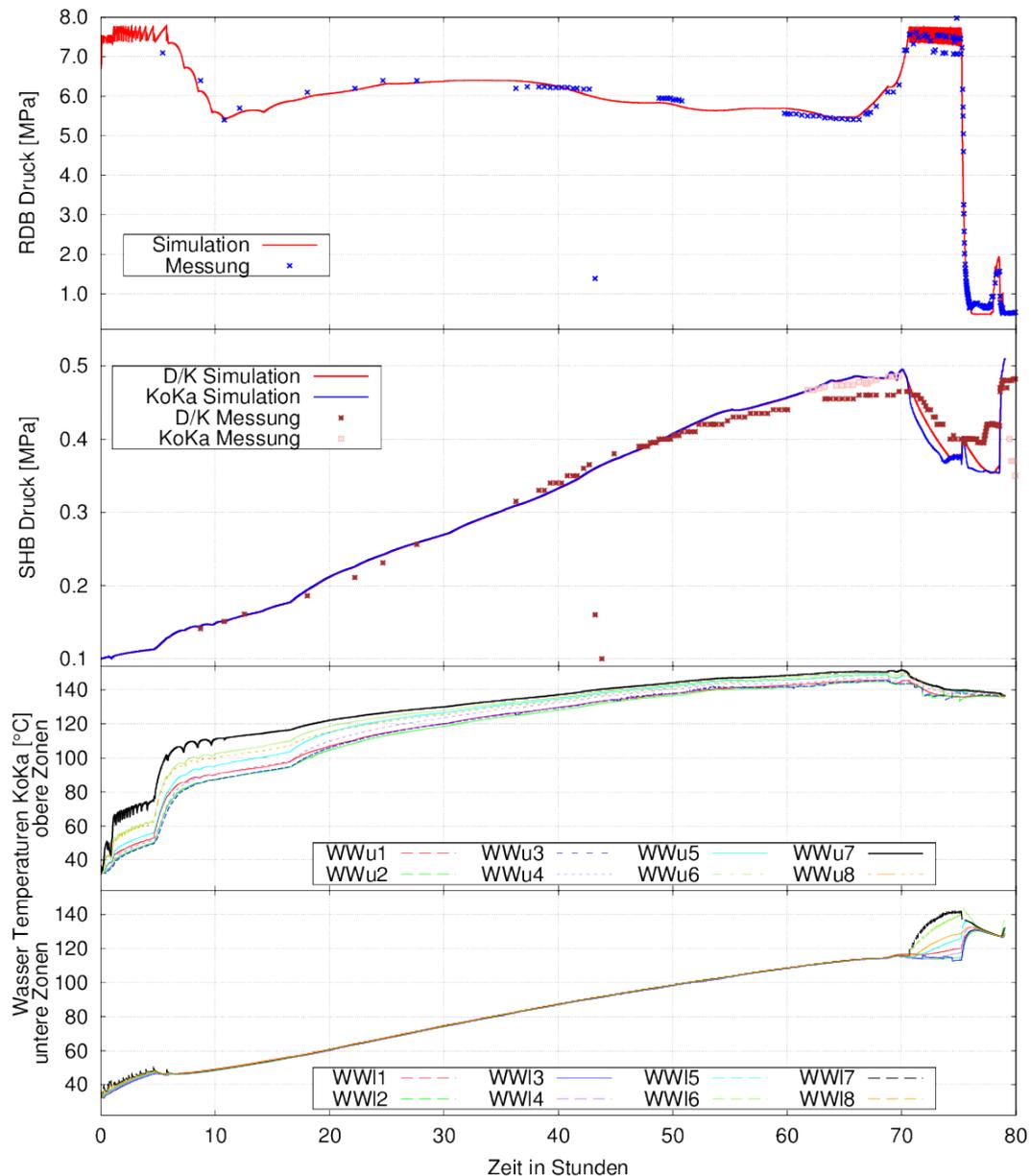
**Abb. 6.11** Wasserstoffmasse: gesamte produzierte Masse (rot) und aus dem Reaktor freigesetzte Masse (grün)

Bedingt durch die Aufheizung des Kerns kommt es bei ca. 76,5 h zu einem Versagen von Führungsrohren für die Kerninstrumentierung. Bedingt durch den niedrigen Druck im Reaktordruckbehälter, das Fehlen einer Wasserverdampfung und der Tatsache, dass noch keine Gase aus der Kernzerstörung produziert werden, ist der Leckmassenstrom (Abb. 6.12) anfänglich sehr gering. Mit dem Zufallen des Sicherheitsventiles, steigt der Druck und der Massenstrom über dies Leck nimmt deutlich zu. Nach dem erneuten Öffnen des Sicherheitsventiles wird das Material des S&E-Ventils durch die Durchströmung mit heißen Gasen letztlich so stark erhitzt, dass es zu einem Versagen der Dichtung kommt und einer Leckage in den Sicherheitsbehälter.



**Abb. 6.12** Leckagen aus dem RDB über eine S&E-Ventildichtung bzw. Rohre der Kerninstrumentierung

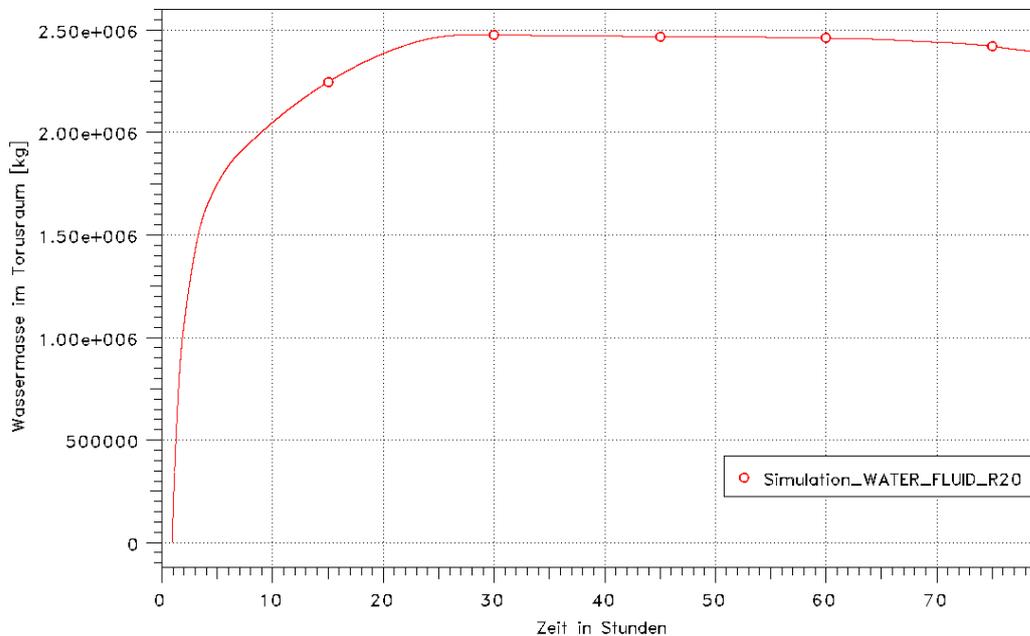
Abb. 6.13 zeigt den Containment-Druck und die Wassertemperaturen in den unterschiedlichen Toruszonen zusammen mit dem Druck im Reaktordruckbehälter. Anfänglich steigt der Containment-Druck langsam an. Erst wenn nach ca. 5,5 h die Wassertemperatur in der Koka lokal (Zone WWu7) auf über 65°C steigt, kommt es nicht länger zu einer schlagartigen Kondensation des Dampfes in der Leitung die den Abdampf der RCIC-Turbine in den Torus leitet. Diese Kondensation führte bis dahin durch die hohe Dynamik zu einer guten thermischen Durchmischung des Pools in der Koka. Das Aussetzen der vollständigen Kondensation führt dazu, dass heißes Wasser mit Dampf entlang des Abdampfrohres zur Oberfläche des Pools strömt. Es wird erwartet, dass sich eine deutliche thermische Stratifikation ausbildet, was durch die detaillierte Nodalisierung abgebildet wird. Der Druck im Sicherheitsbehälter steigt in der Folge stärker an.



**Abb. 6.13** Vergleich gemessener und berechneter RDB- und Containment-Druck und berechnete Wassertemperaturen in den Toruszonen

Bis zum Ausfall des RCIC-Systems steigt der Druck im Sicherheitsbehälter kontinuierlich an. Dass der Druckanstieg deutlich geringer ausfällt als bei Block 3 (siehe unten), liegt an der oben diskutierten angenommen bzw. erwarteten Flutung des Torusraums, wodurch der Torus von außen gekühlt wird. Die Wassermasse im Torusraum ist in Abb. 6.14 dargestellt. Es wurde angenommen, dass mit dem Eintreffen des Tsunami ein sehr hoher Massenstrom in den Torusraum eindringt, der dann immer weiter abnimmt, bis nach ca. einem Tag kein Wasser nachläuft. Da vom Torus Wärme in das Wasser übertragen wird, steigt dessen Temperatur an, bis es anfängt zu verdampfen.

In der Abbildung macht sich dies durch die sinkende Wassermasse bemerkbar. Ein interessanter Aspekt dieses Prozesses ist, dass durch den dabei entstehenden Wasserdampf das Gebäude inertisiert wird, so dass in Block 2 keine Wasserstoffverbrennung möglich war.



**Abb. 6.14** Wassermasse im Torusraum

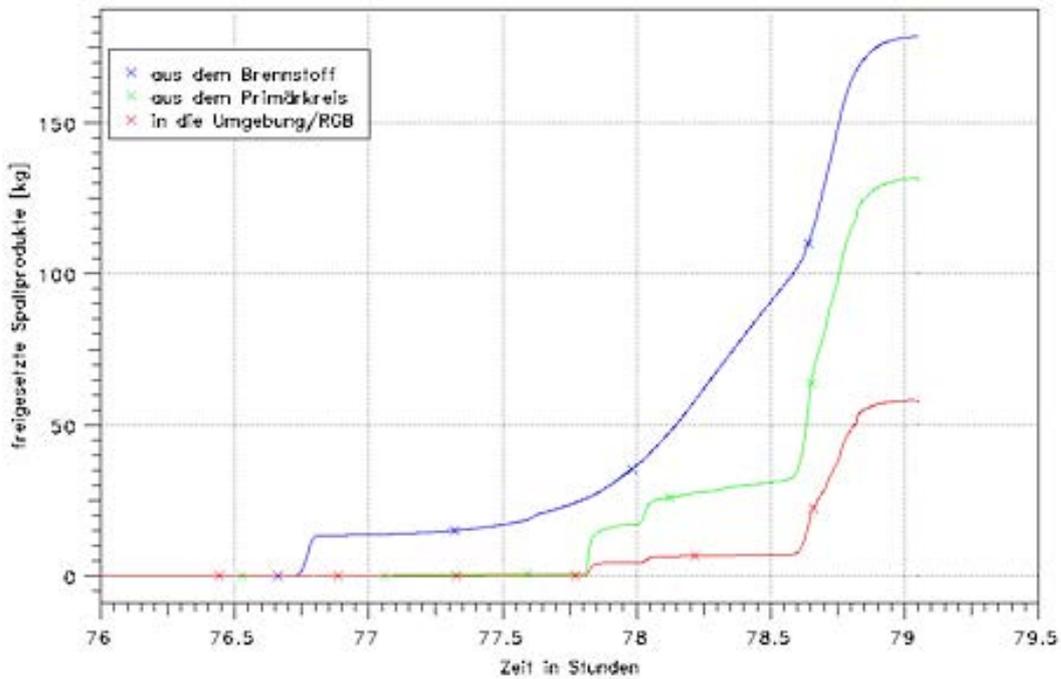
Nach dem Ausfall des RCIC-Systems steigt der Druck innerhalb des Reaktordruckbehälters wieder soweit an, dass er durch die S&E-Ventile begrenzt wird. Gleichzeitig sinkt der Druck innerhalb des Sicherheitsbehälters. Dies auf den ersten Blick irritierende Verhalten kann in der Simulation aufgrund der relativ aufwendigen Nodalisierung des Torus und der simulierten Vorgänge nachvollzogen werden. Der Druck im Containment ist primär durch die Temperatur der oberen Wasserschicht im Torus und den Verdampfungsvorgang bestimmt worden, während die unteren Wasserschichten im Torus von außen gekühlt wurden. Die Einperlvorrichtung des Dampfes (Sparger) der S&E-Ventile liegen in den unteren Zonen des Torus. Wird nun Dampf durch diese Sparger in das unterkühlte Wasser geleitet, kondensiert der Dampf vollständig und kaltes Wasser aus den unteren Zonen wird in die darüber liegenden Zonen im Torus gedrückt, wodurch die Temperatur unter die Siedetemperatur sinkt und kein Dampf mehr produziert wird und auch zusätzlich Dampf aus der Torusgasphase an der Wasseroberfläche kondensieren kann. Damit fällt der Druck im Sicherheitsbehälter. Gleichzeitig steigt die Temperatur im Torus in der Zone, in die das arbeitende Sicherheitsventil einbläst, stark an (Abb. 6.13), bis sich die Temperaturen nahezu egalisieren. Durch

den Eintrag der bei der Kernzerstörung entstehenden nicht kondensierbaren Gase kommt es letztlich zu einem starken Anstieg des Containmentdrucks am Ende (derzeit) der Rechnung.

Während der Phase 1 des BSAF Projekts waren die Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Kern und der Transport in den Sicherheitsbehälter noch nicht im Fokus der Untersuchungen, und die Datensätze sind auf entsprechende Transportvorgänge in das Containment noch nicht abschließend abgestimmt worden. Bei den Analysen spielt die Freisetzung von Spaltprodukten aber eine Rolle, da sich hierbei der Ort, an dem die Nachzerfallsleistung frei wird, ändert. Sie wurden in die Simulation einbezogen. Nachfolgend werden die entsprechenden Freisetzungen aus dem Kern in den Primärkreis, aus diesem in das Containment und von da in das Reaktorgebäude bzw. die Umgebung kurz dargestellt, um zu zeigen, dass derartige Vorgänge modelliert waren. Die Freisetzung wurde in diesem Fall über eines der arbeitenden S&E-Ventile in die Koka simuliert.

Nach dem Versagen der Brennstabhüllrohre werden zuerst leichtflüchtige Spaltgase wie Xe oder Kr, aber auch zum Teil schon Cs, Te oder Iod freigesetzt. Die Gesamtmasse ist in Abb. 6.15 dargestellt. Da zum Zeitpunkt der beginnenden Kernzerstörung das Sicherheitsventil am Reaktor Druckbehälter noch geschlossen ist, können die Spaltprodukte nicht aus dem Primärkreis in das Containment gelangen. Nach dem Bersten der BE-Hüllrohre werden während der weiteren Kernaufheizung und der starken Oxidation des Zr weitere Spaltprodukte aus dem Kern freigesetzt und in den Sicherheitsbehälter transportiert. Aerosole werden stark in der Koka zurückgehalten. In Abhängigkeit des Druckanstiegs im Sicherheitsbehälter werden durch die simulierte Containmentleckage Spaltprodukte (bevorzugt Edelgase), die nicht in der Wasservorlage des Torus zurückgehalten werden können, in das Reaktorgebäude transportiert.

Die Analysen hinsichtlich des Spaltproduktverhaltens in der Anlage werden im laufenden Vorhaben vertieft. Die bisherigen Ergebnisse zeigen die prinzipielle Anwendbarkeit der gekoppelten Codeversion für solche Analysen auf.

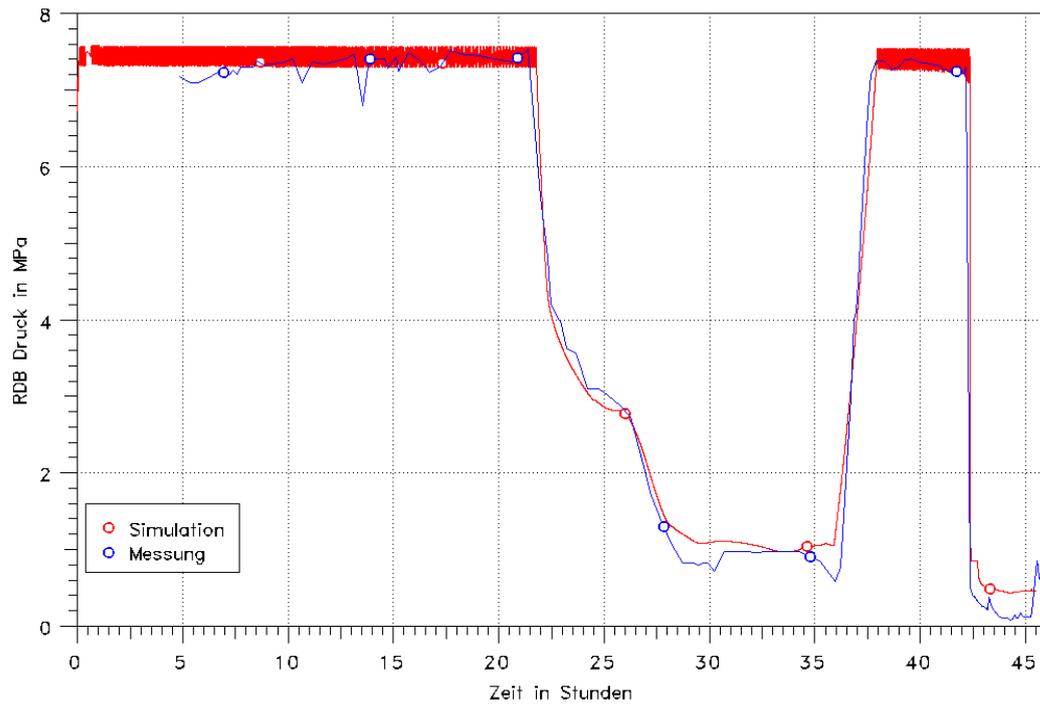


**Abb. 6.15** Gesamtmasse der freigesetzten Spaltprodukte

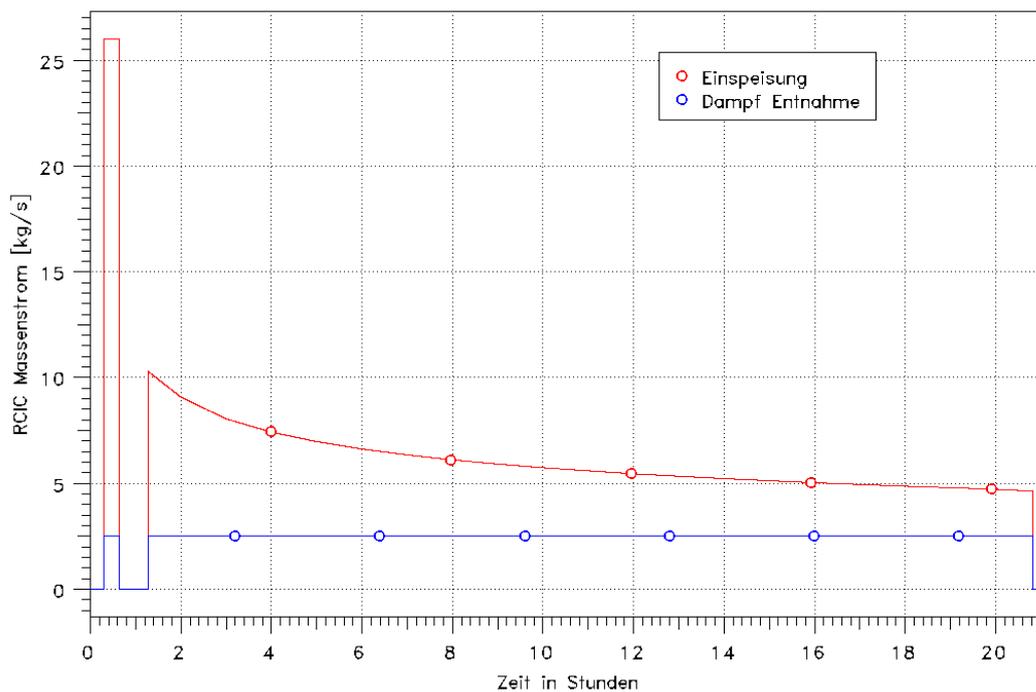
(Aerosole und Edelgase) aus dem Kern, aus dem Primärkreis ins Containment und über Leckagen in die Umgebung bzw. das Reaktorgebäude (vorläufige Ergebnisse)

### 6.1.3 Best Estimate Rechnungen für Fukushima Dai-ichi Block 3

Wie auch bei der Simulation von Block 2 wird die Rechnung mit dem Erdbeben begonnen. Nach der dadurch ausgelösten Schnellabschaltung des Reaktors steigt der Druck bis zum Ansprechdruck der Sicherheitsventile an und das RCIC-System wird zurhaltung des Reaktordruckbehälter-Füllstands eingesetzt. Anders als in Block 2 kann aufgrund der teilweise verfügbaren Spannungsversorgung von den Operateuren das System so reguliert werden, dass der Füllstand während des RCIC-Betriebs nahezu stabil bleibt (siehe Abb. 6.18). Da die entnommene Dampfmenge zusammen mit dem eingespeisten Wasser nicht in der Lage ist, den Reaktordruckbehälter-Druck abzusenken, wird der Druck weiterhin durch mindestens ein S&E-Ventil begrenzt (Abb. 6.16). Betrachtet man den Druckverlauf in einer etwas feineren Auflösung, so fällt auf, dass sich die Ansprechhäufigkeit der Ventile nach dem Ausfall des RCIC-Systems (bei ca. 20,8 h) etwas erhöht. Langfristig lässt sich auch beobachten, dass wegen des konstanten Dampfmassenstroms zur RCIC-Turbine ein immer höherer Anteil der Nachzerfallsleistung auf diese Art abgeführt werden kann, und die Ansprechhäufigkeit der Ventile gegen Ende des RCIC-Betriebs reduziert wurde.



**Abb. 6.16** Vergleich von gemessenem und berechnetem RDB-Druck

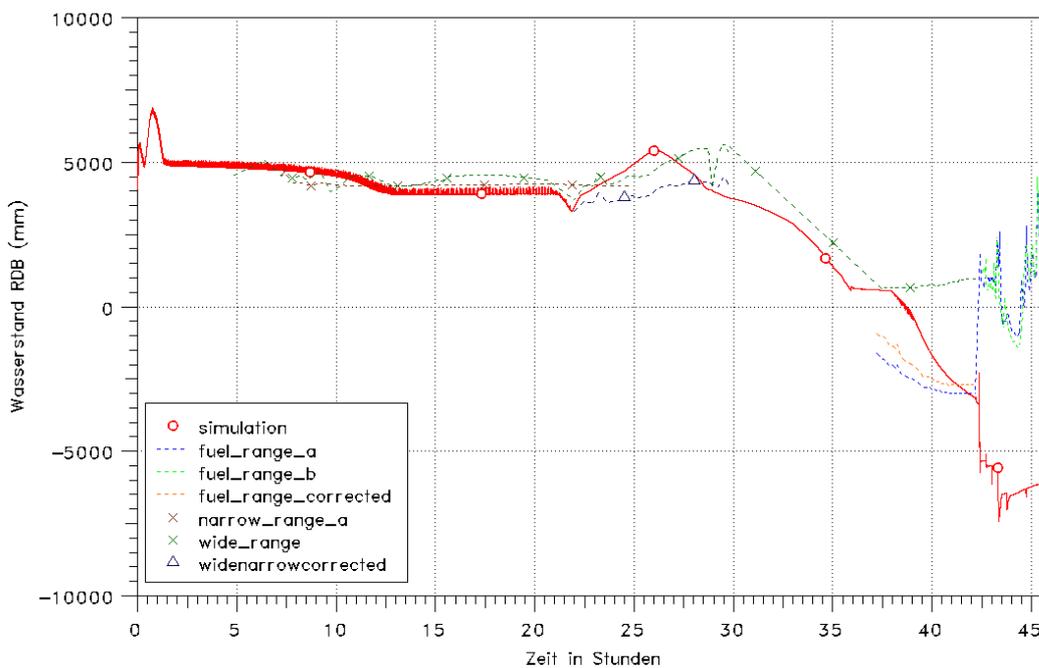


**Abb. 6.17** Massenströme des RCIC-Systems

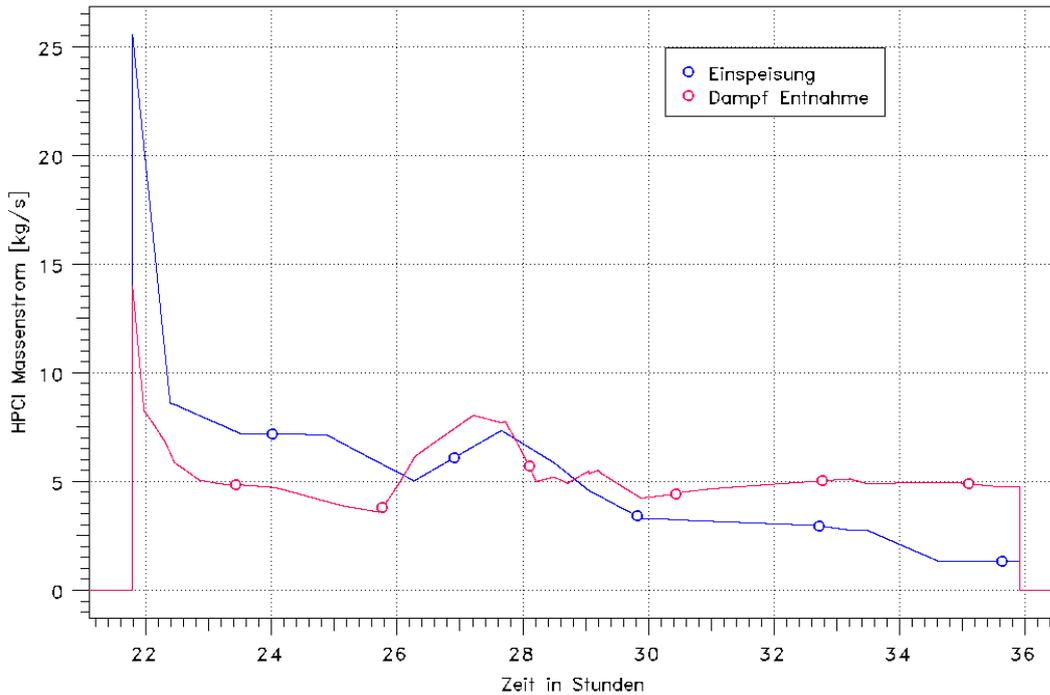
Die ein- bzw. ausgespeisten Massenströme des RCIC-Systems, die in der Simulation unterstellt wurden, sind in Abb. 6.17 dargestellt. Die Abnahme der Einspeisung ergibt sich durch die Reduktion der Nachzerfallsleistung. Das RCIC-System wurde nach ca. 21 h aufgrund des hohen Abdampfdruckes automatisch deaktiviert; dies war wegen der

noch verfügbaren Spannungsversorgung möglich. Nach ca. 22 h wurde dann das HPCI-System aktiviert, nachdem mittels des Sprühsystems im Torus der Druck gesenkt werden konnte. Mit dem Start des HPCI-Systems bei ca. 22 h sinkt der Reaktor-druckbehälter-Druck wegen des deutlich höheren entnommenen Dampfmassenstroms und der zumindest anfänglich deutlich höheren eingespeisten Wassermasse schnell ab, während der Reaktor-druckbehälter-Füllstand anfänglich deutlich steigt (Abb. 6.18 relativ zur Kernoberkante).

Bei sehr niedrigem Reaktor-druckbehälter-Druck ist die Wirksamkeit der HPCI-Einspeisung fraglich, da für niedrige Reaktor-druckbehälter-Drücke die Turbine nicht ausgelegt ist. Unterhalb von 10 bar kann sie wohl nicht mehr einspeisen. In der Simulation wurde dem Rechnung getragen, indem der Massenstrom, den das HPCI-System einspeist, relativ gering angesetzt wurde. Der Dampfmassenstrom sowie wie die Masse des eingespeisten Wassers sind in Abb. 6.19 dargestellt.



**Abb. 6.18** Vergleich des gemessenen und berechneten RDB-Füllstands



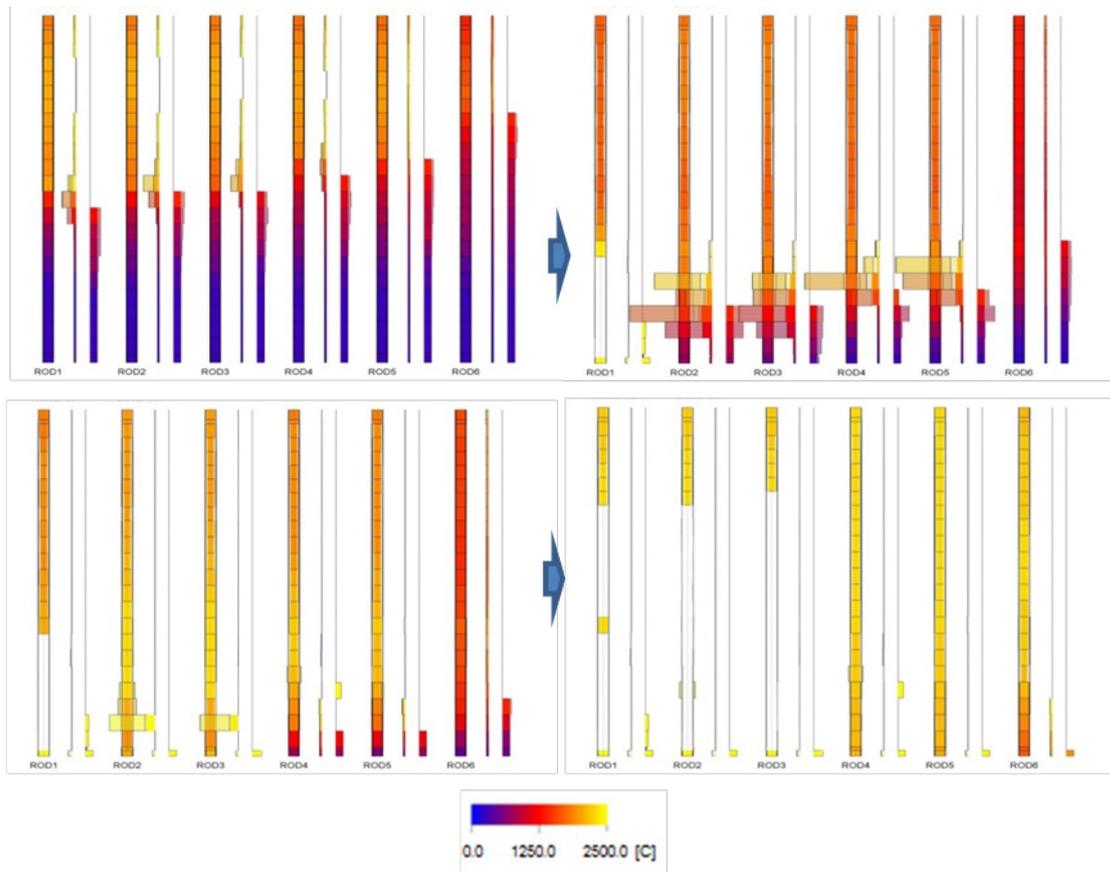
**Abb. 6.19** Massenströme des HPCI-Systems

Nach 36 h wurde das HPCI-System außer Betrieb genommen, um eine vorgesehene mobile Bespeisung des Reaktordruckbehälters vorzunehmen. Diese konnte nicht rechtzeitig initiiert werden, und der Reaktordruckbehälter-Druck stieg wieder bis zum Ansprechdruck der S&E-Ventile an (Abb. 6.16). In dieser Zeit bleibt der Füllstand im Reaktordruckbehälter konstant, da kein Wasser entnommen wird. Sobald die S&E-Ventile zyklisch öffnen, um den Druck zu begrenzen, beginnt der Füllstand zu sinken, und fällt unter die Kernoberkante. Bei 42 h wird die Druckentlastung eingeleitet, der Druck und der Füllstand fallen ab. Der Reaktordruckbehälter-Druck wird dabei durch den Druck innerhalb des Sicherheitsbehälters nach unten begrenzt.

Der Ausfall der Füllstandsmessung von 29,5 h bis ca. 37 h und die unterschiedlichen Messwerte der verschiedenen Messungen ergaben bei der Simulation erhebliche Schwierigkeiten bzw. unterschiedliche Möglichkeiten der Interpretation des Verhaltens. Der Füllstand wird bei einem Siedewasserreaktor durch eine Differenzdruckmessung bestimmt. Dieses System kann unter Unfallbedingungen zu ungenauen Messwerten führen. Der gemessene Füllstand kann also durchaus vom realen Füllstand abweichen. In der Simulation wurde deshalb versucht, den Füllstand direkt vor der Druckentlastung des Reaktordruckbehälters möglichst genau zu reproduzieren.

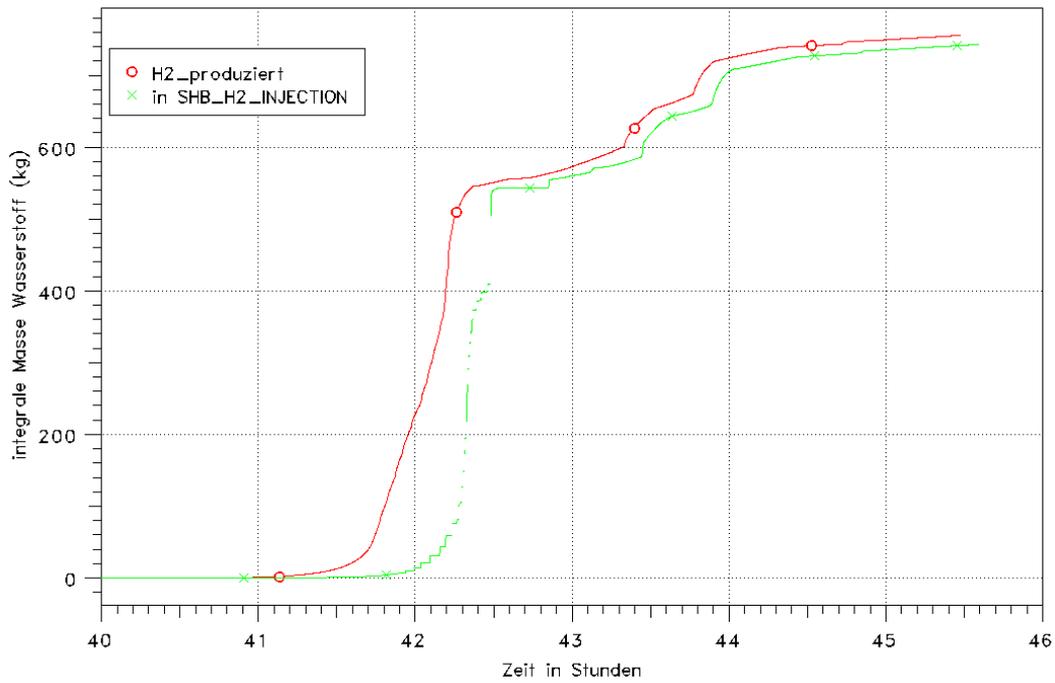
Der Füllstand am Ende des HPCI-Betriebs hat starke Auswirkungen auf das Fortschreiten der Kernzerstörung. Da der Füllstand schon vor der Druckentlastung unter die Kernoberkante fällt, beginnt die Kernzerstörung im oberen Teil des Kerns während der untere Kernbereich noch im Wasser steht (siehe Abb. 6.20 links oben). Da der untere Kernbereich noch mit Wasser bedeckt ist, steht ausreichend Dampf für die Oxidation des Zirkons im oberen Kernbereich zur Verfügung und große Mengen Wasserstoff entstehen (siehe Abb. 6.21). Die bei der Oxidation freiwerdende Wärme heizt den Kern weiter auf. Die bei ca. 42 h eingeleitete Druckentlastung führt zu einer anfänglich starken Wasserstoffproduktion durch die Verdampfung. Mit voranschreitender Oxidation lässt die H<sub>2</sub>-Bildung nach, was auch durch auftretenden Dampf mangel verstärkt wird. Der Kern heizt sich dennoch weiter auf, und ab 42,1 h fällt auch keramische Schmelze (geschmolzener Brennstoff) an. Die Analysen ergaben, dass sich bei ca. 43 h eine große Menge keramischer Schmelze bildet, so dass eine Umlagerung ins untere Plenum im Reaktordruckbehälter zu unterstellen ist. Diese kann aus den am Anfang des Kapitels genannten Gründen nur vereinfacht modelliert werden. Abb. 6.22 zeigt die Schmelzemassen im Kernbereich und im unteren Plenum. Die Schmelze im unteren Plenum verdampft das dort befindliche Wasser und der entstehende Dampf führt zu einer erneuten Zunahme der Oxidation und Wasserstoffbildung.

Die Rechnung endet bei 45,7 h mit dem Versagen des Reaktordruckbehälters, da ein Schmelzeaustrag mit der verwendeten gekoppelten Programmversion zum Zeitpunkt der Analyse noch nicht möglich war. Das Ergebnis, das ein Versagen des Reaktordruckbehälters mit Schmelzeaustrag zeigt, ist in prinzipieller Übereinstimmung mit dem Ergebnis anderer Simulationen aus dem BSAF-Projekt.

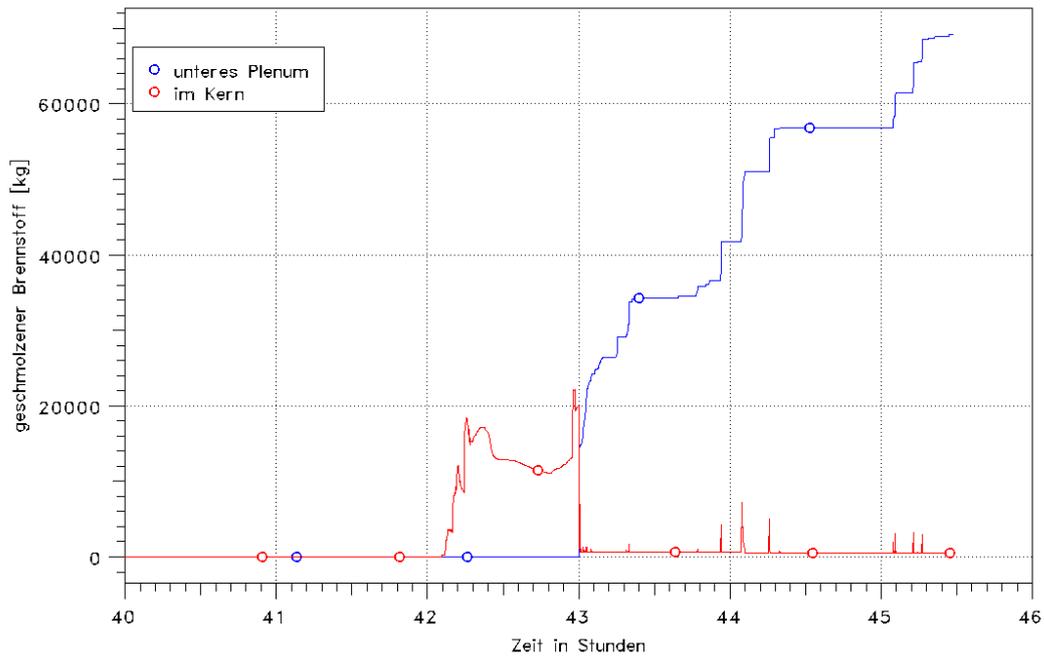


**Abb. 6.20** Temperaturprofile des Kerns für ROD1-6 (jeweils Brennstab, BE-Kasten und Steuerstab)

Zeitpunkte: ca. 42 h, 43 h (kurz vor der Verlagerung), 43,9 h (nach der Verlagerung) und 45,7 h (am Ende der Rechnung)



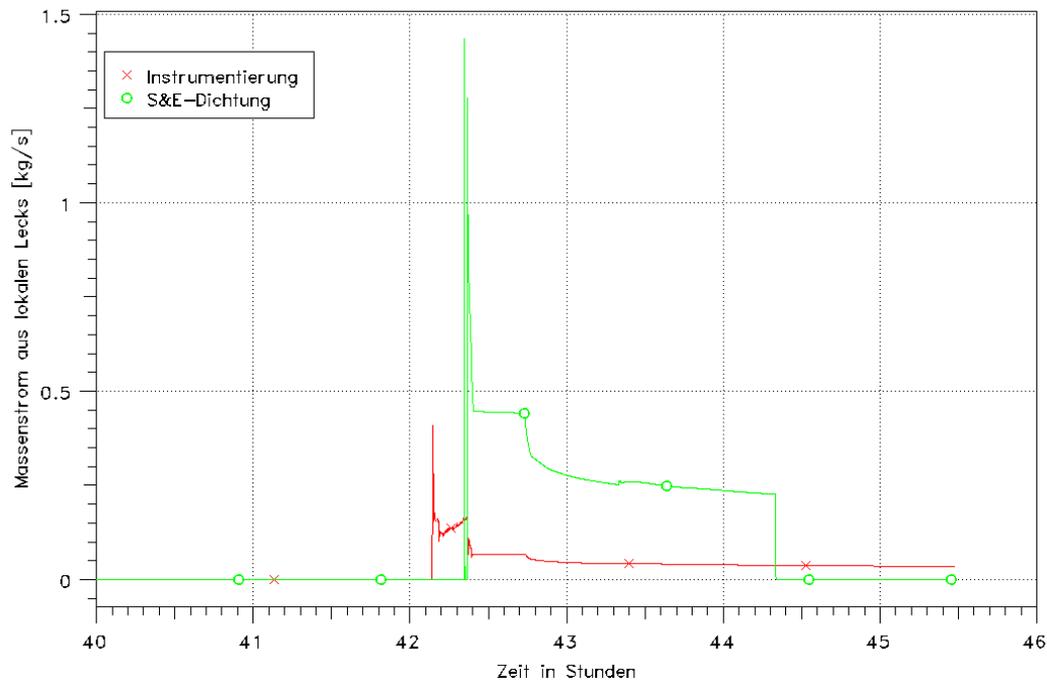
**Abb. 6.21** Wasserstoffmasse: gesamte produzierte Masse (rot) und aus dem Reaktor freigesetzte Masse (grün)



**Abb. 6.22** Schmelzmasse ( $\text{UO}_2$ ) im Kernbereich (rot) und verlagert ins untere Plenum (blau)

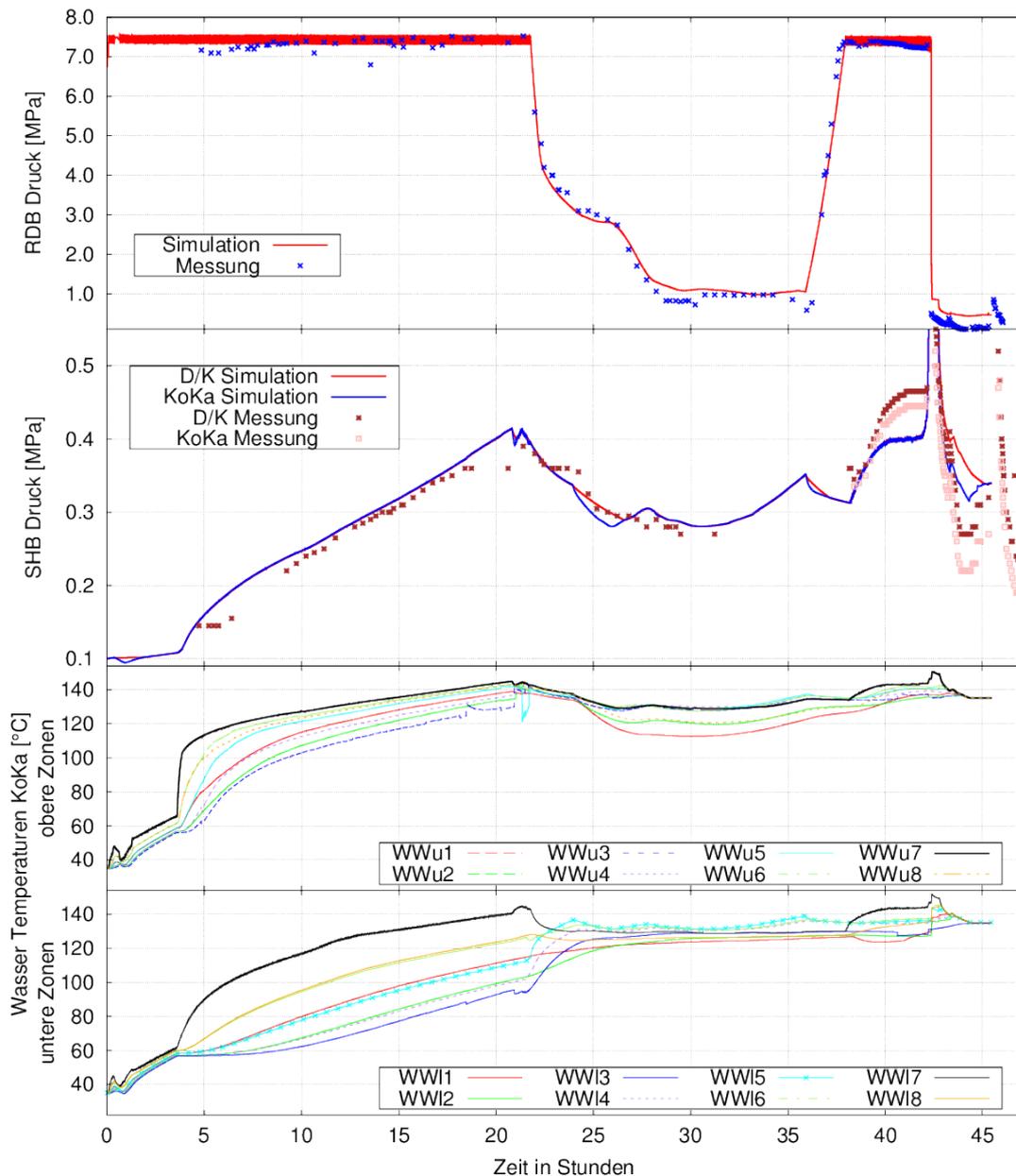
Durch den schnelleren Ablauf der Kernzerstörung und die Tatsache, dass die heißen Gase kontinuierlich durch das arbeitende Sicherheitsventil strömen, kommt es kurz nacheinander zu einem Versagen zuerst von Kerninstrumentierungsrohren und dann

zum Versagen der Sicherheitsventildichtung (siehe Abb. 6.23). In der Abbildung ist zu erkennen, dass in der Implementierung des Versagensmodells der S&E-Ventildichtung ein kleiner Fehler war, der zu einem Wiederschließen des Leckpfades führte. Dieser ist inzwischen behoben, hat aber keinen nennenswerten Einfluss auf das Gesamtergebnis.



**Abb. 6.23** Leckagen aus dem RDB über eine S&E-Ventildichtung bzw. Rohre der Kerninstrumentierung

Der Containmentdruck (Abb. 6.24) steigt ähnlich wie bei Block 2 zuerst langsam, bis das Wasser lokal im Torus soweit erwärmt wurde, dass der Dampf nicht länger im Abdampfrohr des RCIC-Systems kondensieren kann. Zusätzlich zum Eintrag von Dampf über das RCIC-System strömt auch noch Dampf über das arbeitende S&E-Ventil in den gleichen Sektor des Torus. Dampf und heißes Wasser strömen nun zur Oberfläche des Pools und sorgen für einen stärkeren Druckerhöhung im Sicherheitsbehälter. Der Ausfall des RCIC-Systems nach ca. 20,8 h ist auf den hohen Druck im Sicherheitsbehälter von etwas über 4 bar zurückzuführen.

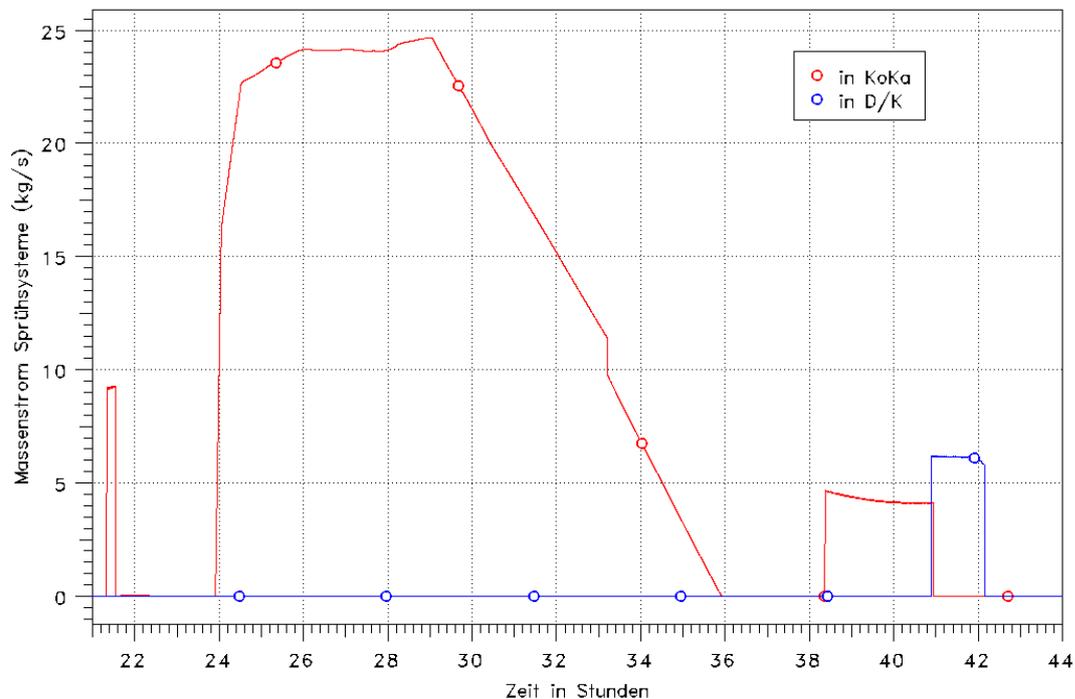


**Abb. 6.24** Vergleich gemessener und berechneter RDB- und Containment-Druck und berechnete Wassertemperaturen in den Toruszonen

In der Rechnung ergibt sich während dieser ersten Unfallphase bis ca. 20 h eine starke Temperaturverteilung sowohl in vertikaler als auch in azimuthaler Richtung. Die Zone WWu7 (Abb. 6.24), der Ort an dem der Abdampf des RCIC-Systems in die Wasservorlage des Torus im oberen Bereich eingetragen wird, hat die höchste Temperatur. Die direkt darunter liegende Zone WWI7 wird stark durch den Dampf, der über das arbeitende Sicherheitsventil freigesetzt wird, erhitzt. Der Abdampf des anschließend gestarteten HPCI Systems wird etwas tiefer und an einer anderen Stelle als der des RCIC-Systems in den Torus eingespeist (WWI5). Das Wasser in dieser Zone (Abb. 6.24) be-

ginnt sich genau wie in den Nachbarzonen stark zu erhitzen. Dadurch wird relativ viel Energie gebunden, die zunächst nicht zur Erhöhung des Drucks im Sicherheitsbehälter zu Verfügung steht.

Zusätzlich wurde in Block 3 das Sprühsystem in Torus und Druckkammer auch noch genutzt, worauf nachfolgend noch eingegangen wird. Der Sicherheitsbehälter-Druckabfall bei >20 h (Abb. 6.24) wird durch den Einsatz des Sprühsystems im Torus auch mit hervorgerufen, bevor das HPCI-System gestartet wird. Bis zu 36 h wird zum Sprühen Wasser aus einem Kondensatvorratsbehälter mit einer Temperatur von ca. 10°C verwendet. Wie in den Sprühmassenströmen in Abb. 6.25 erkennbar ist, wurde nach einer kurzen Phase des Sprühens angenommen, dass das Sprühsystem für ca. zwei Stunden nicht wirklich bespeist wurde, um den Druckverlauf im Sicherheitsbehälter zu treffen. Verlässliche Informationen liegen keine vor. Ab ca. 24 h wurde in den Rechnungen das Sprühsystem wieder erfolgreich mit Wasser versorgt, und der Druck des relativ homogen erhitzten Torus wird dadurch begrenzt. Ab ca. 29 h steigt der Druck im Containment, wodurch der Fördermassenstrom der mobilen Pumpen über die das Sprühsystem versorgt wird, stark zurückgeht. Gegen Ende des Sprühvorgangs wurde der Massenstrom in der Rechnung zusätzlich etwas reduziert. Genau wie die Füllstandsmessung ist gegen Ende des HPCI Betriebs auch die Messung des Containment-Drucks ausgefallen.

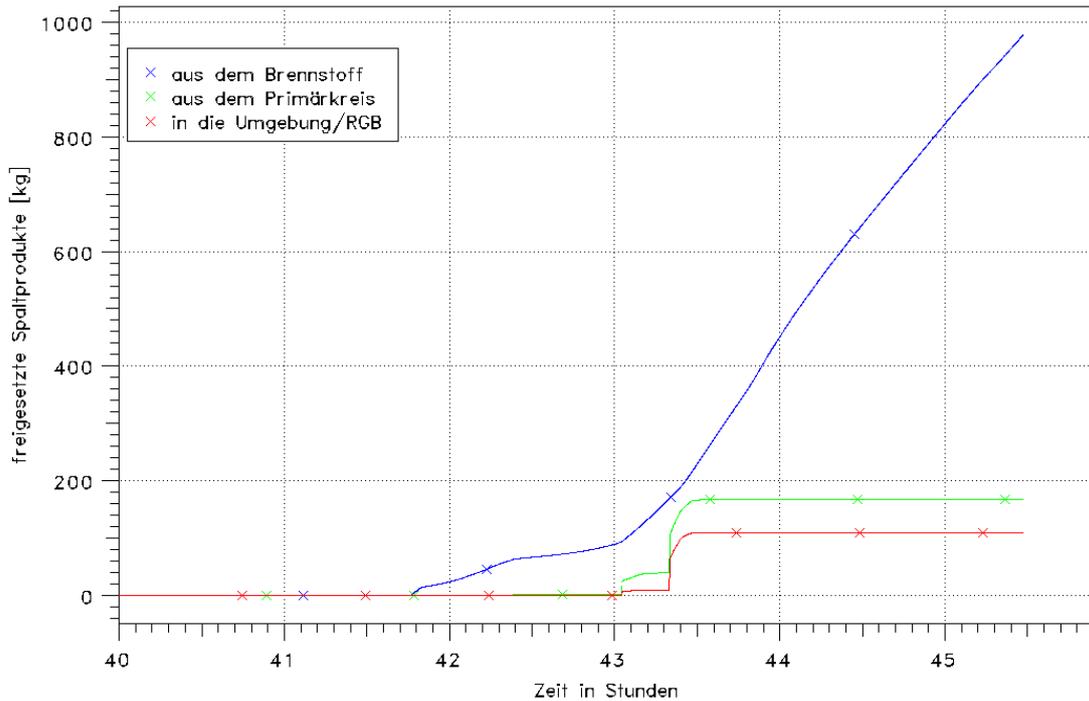


**Abb. 6.25** Massenströme der Sprühsysteme ins Containment

Nach dem Ausfall des HPCI-Systems wurde das Sprühsystem im Torus nochmal von ca. 38,2 h - 41 h und anschließend in der Druckkammer von ca. 41 - 42,2 h mittels mobilen Pumpen bespeist. Beide Male wurde das Wasser zum Sprühen aus dem Torus entnommen. Obwohl das Wasser aus dem Torus zu diesem Zeitpunkt deutlich heißer als 100 °C ist, musste in beiden Fällen angenommen werden, dass nicht der maximal mögliche Massenstrom genutzt werden konnte, da sonst der Druckabfall zu stark gegenüber dem Messwert ausgefallen wäre.

Wie bereits erwähnt standen während der Phase 1 des BSAF Projekts die Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Kern und der Transport in den Sicherheitsbehälter noch nicht im Fokus der Untersuchungen, und die Datensätze sind auf entsprechende Vorgänge insbesondere zur Freisetzung in das Containment noch nicht endgültig abgestimmt worden. Nachfolgend werden die entsprechenden Freisetzungen aus dem Kern in den Primärkreis, aus diesem in das Containment und von da in das Reaktorgebäude bzw. die Umgebung kurz dargestellt, um zu zeigen, dass derartige Vorgänge modelliert waren.

Mit dem Beginn der Kernzerstörung werden Spaltprodukte aus dem Kern freigesetzt, wie auch die Rechnung für Block 2 zeigte. Nach dem Absturz eines Teils des Kerns ins untere Plenum steigt die Freisetzung aus dem Kern nochmals stark an (Abb. 6.26). Da in der gegenwärtigen Implementierung des Spaltprodukttransportes in ATHLET-CD nur ein Freisetzungspfad ins Containment angegeben werden kann, und erste Rechnungen für Block 3 die Instrumentierungsrohre als Leckage nach Versagen nahelegten, wurde in dieser Rechnung anders als in Block 2 die Freisetzung (testweise) über versagende Rohre der Kerninstrumentierung simuliert. Der Pfad über die S&E-Ventile entfällt damit, was sich in einer Limitierung der Freisetzung in der Spätphase des Unfalls äußert. Abb. 6.26 zeigt, dass es nach einer anfänglichen Freisetzung von Edelgasen und Aerosolen aus dem Reaktordruckbehälter in den Sicherheitsbehälter trotz anhaltender Freisetzung aus dem Kern zu keiner signifikanten Freisetzung kommt. Dies spiegelt die zu erwartenden Zustände nicht wieder und Änderungen an der Modellierung wurden für weitere und laufende Rechnungen vorgenommen. Weiterentwicklungen in ATHLET-CD werden zukünftig eine Modellierung mehrerer Freisetzungspfade erlauben (s. Abschnitt 2.7.2).



**Abb. 6.26** Gesamtmasse der freigesetzten Spaltprodukte

(Aerosole und Edelgase) aus dem Kern, aus dem Primärkreis ins Containment und über Leckagen in die Umgebung bzw. das Reaktorgebäude (vorläufige Ergebnisse)

#### 6.1.4 Fazit und erforderliche Modellerweiterungen für Siedewasserreaktoren

Die Simulation der Unfallabläufe in den baugleichen Blöcken 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi mit der gekoppelten Version von ATHLET-CD/COCOSYS lieferte Ergebnisse, die die meisten Aspekte der Unfälle für die ersten Tage schlüssig erklären. Wesentliche bekannte Phänomene schwerer Unfälle wie die Kernaufheizung und die Wasserstoffherzeugung können mit plausiblen Ergebnissen nachgerechnet werden und stehen in prinzipiell guter Übereinstimmung zu den Ergebnissen anderer Partner des BSAF-Projektes, die mit anderen Codes erzeugt wurden. Ohne die Daten aus dem BSAF-Projekt wären so detaillierte und qualitativ wie quantitativ in guter Übereinstimmung mit gemessenen Werten befindliche Ergebnisse nicht erzielbar gewesen. Unbekannte Parameter, wie zum Beispiel fehlende Informationen bzgl. der tatsächlichen Einspeiseraten des RCIC- und HPCI-Systems oder der mobilen Pumpen zur Reaktordruckbehälter-Bespeisung oder zum Sprühen im Sicherheitsbehälter, oder ungenaue Informationen zu den Reaktordruckbehälter-Füllständen, bei denen sich teilweise Messwerte widersprechen, machen genaue Analysen der Abläufe schwierig und erforder-

dern technisches und physikalisches Verständnis, um durch Anpassungen und Annahmen den erwarteten Ablauf bestmöglich durch die Analysen zu reproduzieren.

Neu und in dieser Art nicht erwartet waren die Anforderungen an die Modellierung der Vorgänge innerhalb der Wasservorlage in der Kondensationskammer, die in den Anlagen durch einen Torus gebildet wird. Die verwendete Modellierung stellt mit der aktuellen Version von COCOSYS eine Herausforderung dar, da eine mehrfache Unterteilung von Wasserpools mit dem Ziel der Berechnung thermischer Schichtungen bzw. azimuthaler Temperaturunterschiede so nicht vorgesehen war. Diese Erfahrung fand mittlerweile Eingang in Anforderungen zur Codeerweiterung.

Bei der Erstellung der Datensätze für die Simulation der Unfallabläufe kann die Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum mit den Möglichkeiten, die ATHLET-CD durch den Einbau von AIDA und die entsprechenden Erweiterungen in ECORE bietet, schon hinreichend gut abgebildet werden, um plausible Ergebnisse zu erzielen. Die tatsächlichen Verlagerungsprozesse, die in Fukushima stattgefunden haben, sind jedoch immer noch weitgehend ungeklärt, so dass an dieser Stelle noch große Unsicherheiten bestehen. Letztlich ist die Entwicklung neuer Modelle bzw. die Verbesserung bestehender Modelle in ATHLET-CD erforderlich. So sind in allen derzeit zum Einsatz kommenden Simulationscodes, die in der Lage sind, eine Kernzerstörung zu berechnen, die Modelle meist an den Erkenntnissen für Druckwasserreaktoren aus dem TMI2-Unfall sowie einschlägigen Experimenten (z. B. CORA, QUENCH und Phebus FP) validiert. Für Siedewasserreaktoren fehlen noch Erkenntnisse, die die späte Phase der Kernzerstörung und insbesondere die Möglichkeiten der Schmelzeverlagerung ins untere Plenum genauer beschreiben. Bei einem Siedewasserreaktor ist davon auszugehen, dass es auf Grund konstruktiver Unterschiede bzgl. des Reaktorkerns (BE mit Kästen) und der Steuerstäbe (kreuzförmige Steuerstabblätter im Bypass zwischen vier BE) Prozesse gibt, die bei der Kernzerstörung anders ablaufen werden. Experimente dazu oder Erkenntnisse aus dem Rückbau der Anlagen in einigen Jahren werden für die Verbesserung des Modellverständnisses benötigt. Daher kann bei der Siedewasserreaktor-spezifischen Verlagerung derzeit noch keine fundierte Verbesserung der Modelle durchgeführt werden. Die Simulationen mit der aktuellen Modellbasis liefern jedoch plausible Ergebnisse. Auch die radiale Ausbreitung von Schmelze in Siedewasserreaktoren im Kernbereich kann von Bedeutung sein. Sie wurde bereits in ATHLET-CD modelliert (s. Abschnitt 6.2), konnte allerdings in den hier vorgestellten Simulationen zu Fukushima noch nicht berücksichtigt werden.

Der Fortgang der Modellentwicklung der Codes ATHLET-CD und COCOSYS wird für die laufenden Arbeiten in Phase 2 des BSAF Projektes der GRS nutzbringend sein.

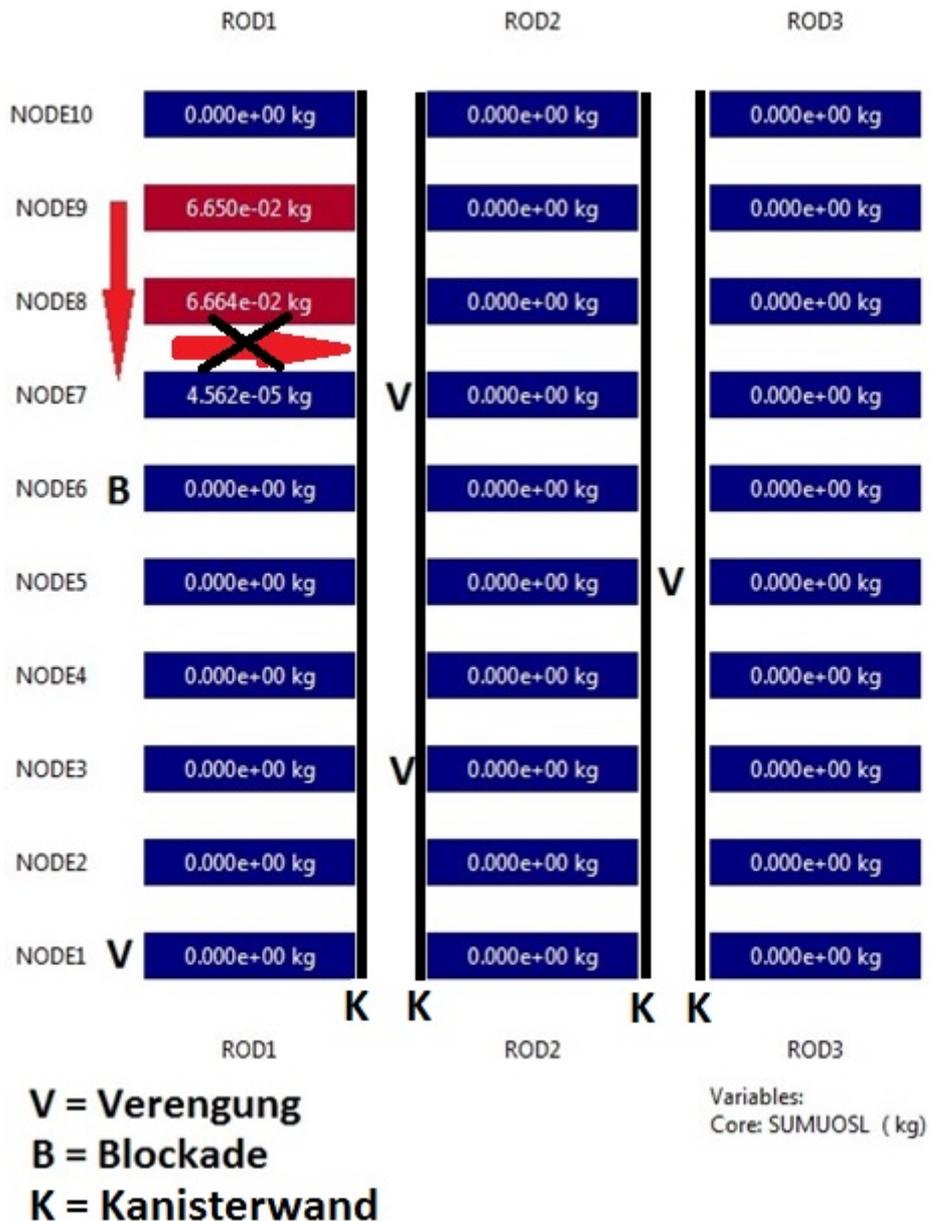
## **6.2 Modellierung der radialen Schmelzeausbreitung in Siedewasserreaktoren**

Für Siedewasserreaktoren wurde die Grundstruktur des Modells der radialen Schmelzeausbreitung, welches in Kapitel 2.3 beschrieben wurde, behalten, es wurde aber um die Berücksichtigung der Siedewasserreaktor-spezifischen Elemente (z. B. Kanisterwände) ergänzt. Das Modell wird aktiv, wenn sich über einer Blockade Schmelze ansammelt hat und die Wände der Kanister im Ring und im benachbarten Ring geschmolzen sind. Bei intakter Kanisterwand kann die Schmelze hingegen nicht zur Seite fließen.

Wie bereits erwähnt ist, ist die Logik des Ablaufs der radialen Schmelzeverlagerung bei Siedewasser- und Druckwasserreaktoren prinzipiell gleich, bei Siedewasserreaktoren bleibt aber die Schmelze solange im Ursprungsrod stehen, solange die Kanisterwände des aktuellen und des benachbarten Rods intakt sind. Der Ablauf der Schmelzeverlagerung bei einem Siedewasserreaktor wird schematisch in Abb. 6.27 und Abb. 6.28 dargestellt. Nach dem Abschmelzen der Kanisterwände verlagert sich die Schmelze weitgehend genauso wie beim Druckwasserreaktor.

Nachdem die Testrechnungen an einem schnelllaufenden, einfachen Datensatz plausible Ergebnisse geliefert haben, wurde das neue Modell an einem komplexen Siedewasserreaktor-Datensatz getestet. In der Rechnung wurde ein Unfall mit Station Black Out simuliert. Während der Unfallsequenz wurde der Kern massiv zerstört. Abb. 6.29 bis Abb. 6.33 zeigen den Ablauf der Kernzerstörung in den Simulationen mit der alten und der neuen Modellierung.

Der Kern des Reaktors wurde in der Simulation in sechs radiale Ringe und 22 axiale Nodes aufgeteilt. In Abb. 6.29 ist der Anfangszustand des intakten Kerns dargestellt. Die sichtbaren vertikalen Linien zwischen den Ringen repräsentieren die Kanisterwände der einzelnen repräsentativen Brennstäbe, die vor ihrem Abschmelzen die Schmelzeverlagerung verhindern können (zu jedem Rod gehört jeweils die Kanisterwand rechts daneben).



**Abb. 6.27** Aufstauen von Schmelze in radialer Richtung aufgrund der noch intakten Kanisterwand

Der Endzustand des Kerns nach der Simulation ohne radiale Schmelzeausbreitung ist in Abb. 6.30 dargestellt. Man kann sehr gut beobachten, wenn eine Blockade in den unteren Nodes entsteht, denn dann sammelt sich die Schmelze oberhalb der Blockade. Die aufgestaute Schmelze bildet eine Schmelzesäule, bleibt aber immer im Ring, in dem sie entstanden ist, obwohl sich im benachbarten Ring eine niedrigere Schmelzesäule gebildet hat. In der Realität würden sich die Höhenunterschiede ausgleichen. Das Ziel der Erweiterung der aktuellen Modellierung durch die radiale Schmelzeaus-

breitung war diesen Ausgleich der eventuell entstehenden Schmelzehöhenunterschiede simulieren zu können.

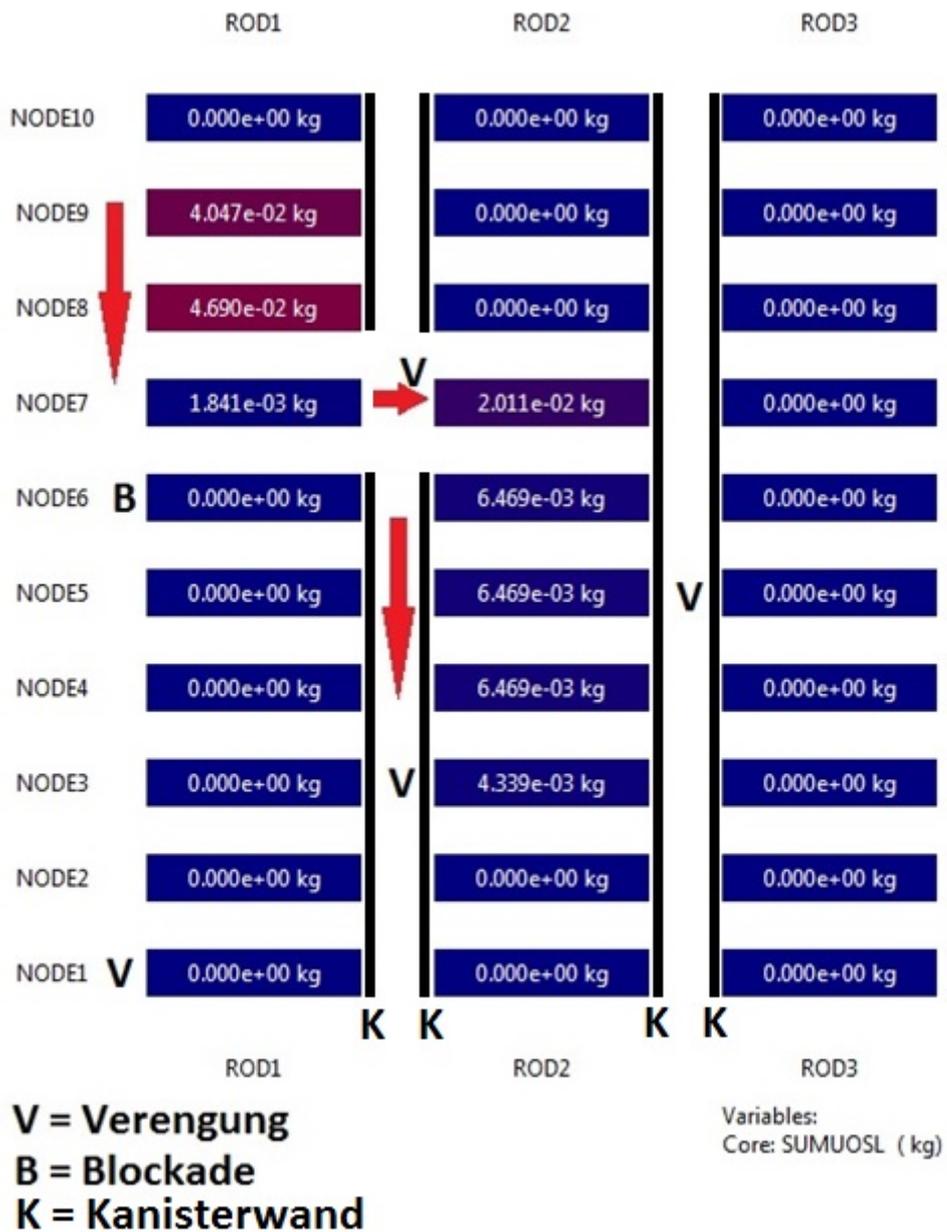
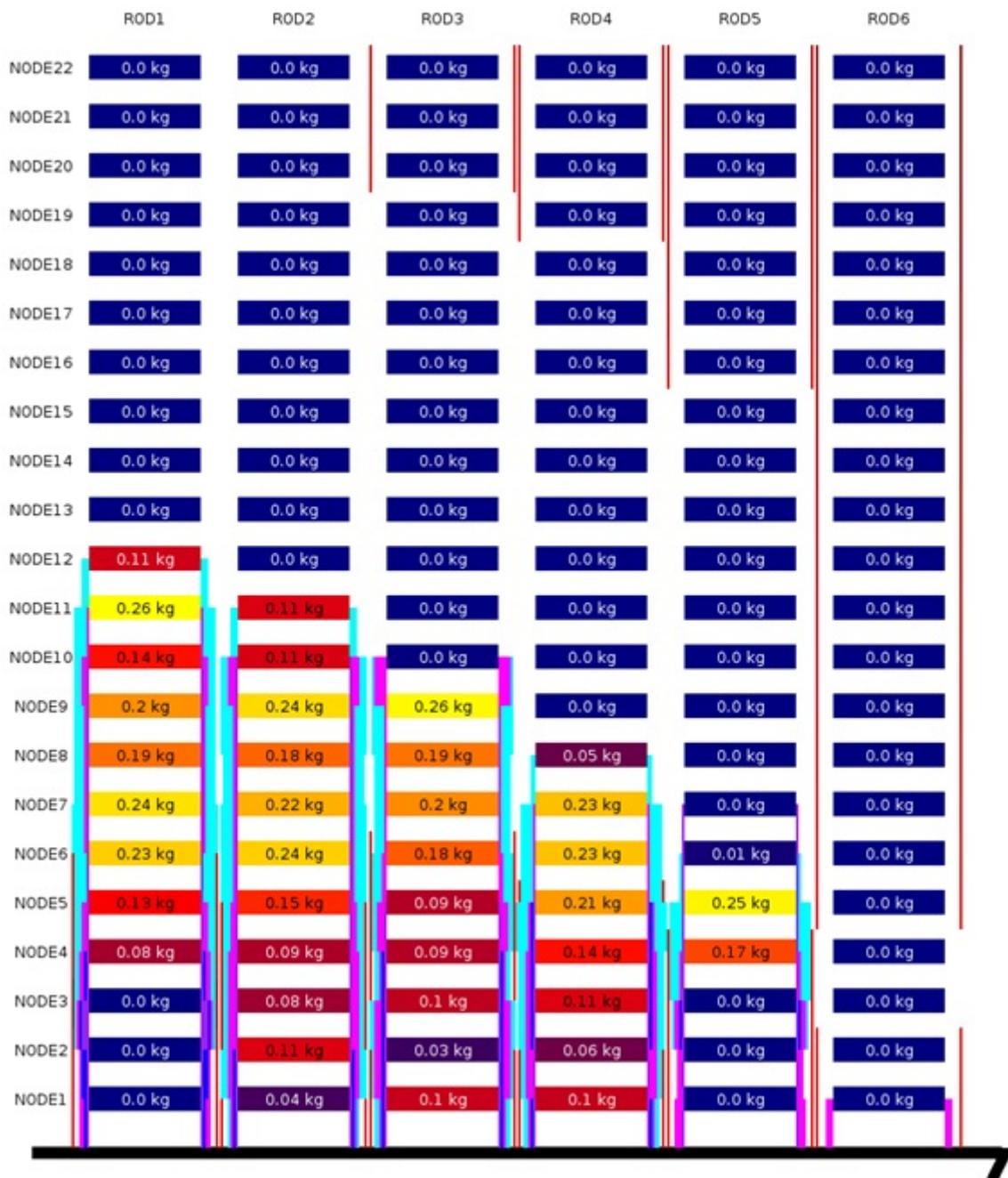


Abb. 6.28 Radiale Schmelzeausbreitung nach dem Aufschmelzen der Kanisterwände in den benachbarten Rods

	ROD1	ROD2	ROD3	ROD4	ROD5	ROD6
NODE22	0.0 kg					
NODE21	0.0 kg					
NODE20	0.0 kg					
NODE19	0.0 kg					
NODE18	0.0 kg					
NODE17	0.0 kg					
NODE16	0.0 kg					
NODE15	0.0 kg					
NODE14	0.0 kg					
NODE13	0.0 kg					
NODE12	0.0 kg					
NODE11	0.0 kg					
NODE10	0.0 kg					
NODE9	0.0 kg					
NODE8	0.0 kg					
NODE7	0.0 kg					
NODE6	0.0 kg					
NODE5	0.0 kg					
NODE4	0.0 kg					
NODE3	0.0 kg					
NODE2	0.0 kg					
NODE1	0.0 kg					

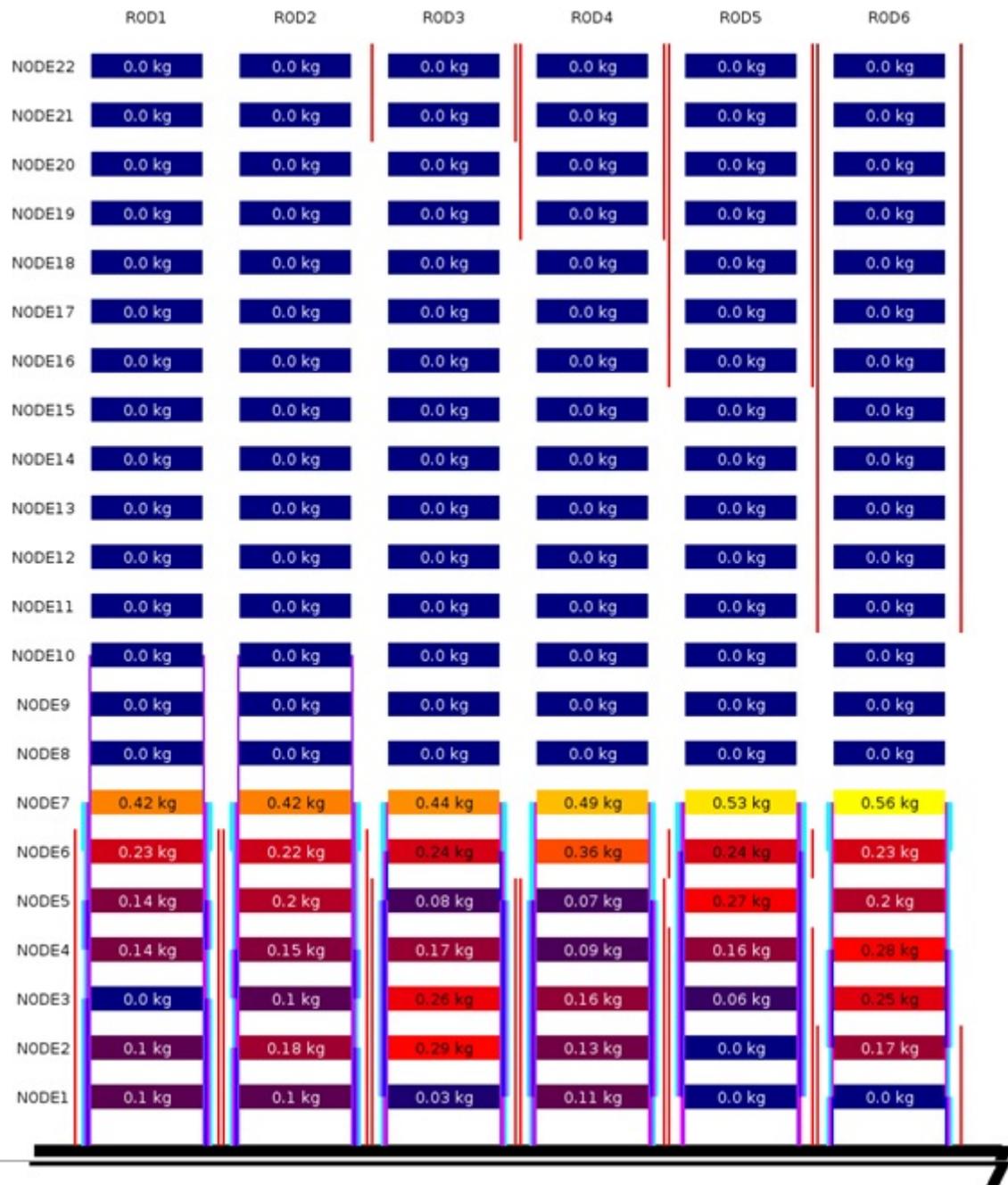
**Abb. 6.29** Nodalisierung des Kern beim Rechnungsstart (die geschmolzene Masse ist daher überall Null)

Abb. 6.31 stellt den Endzustand des Kerns am Ende der Simulation mit radialer Schmelzeausbreitung dar. Der Unterschied zum Endzustand in Abb. 6.30 ohne radiale Ausbreitung ist erheblich. Die Schmelze konnte keine Säule in einem Ring bilden, da diese Schmelze zur Seite geflossen ist anstatt im gleichen Rod, in dem sie entstanden ist, stehen zu bleiben. So entstand schließlich in jedem Ring ein Schmelzepool von gleicher Höhe.



**Abb. 6.30** Zustand des Kerns am Ende der Simulation ohne radiale Schmelzeausbreitung

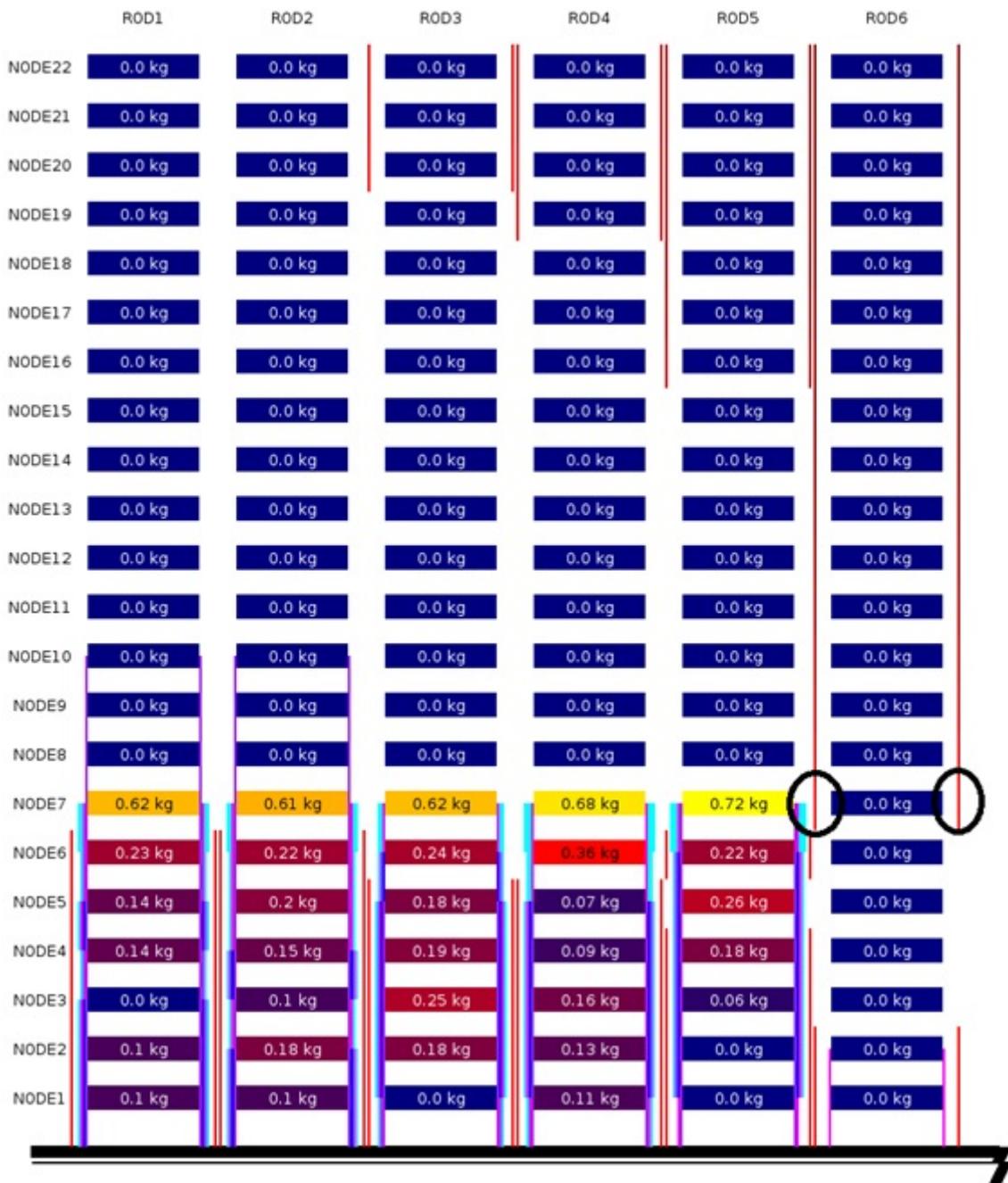
Abb. 6.32 zeigt den Zustand des Kerns während der Simulation, in der die äußerste Kanisterwand die Schmelze noch in den ersten fünf Ringen hält. Nachdem diese Wand abgeschmolzen ist, fließt die aufgestaute Schmelze von den inneren Ringen nach außen. Die seitliche Verlagerung nach dem Abschmelzen der Kanisterwand ist in Abb. 6.33 dargestellt.



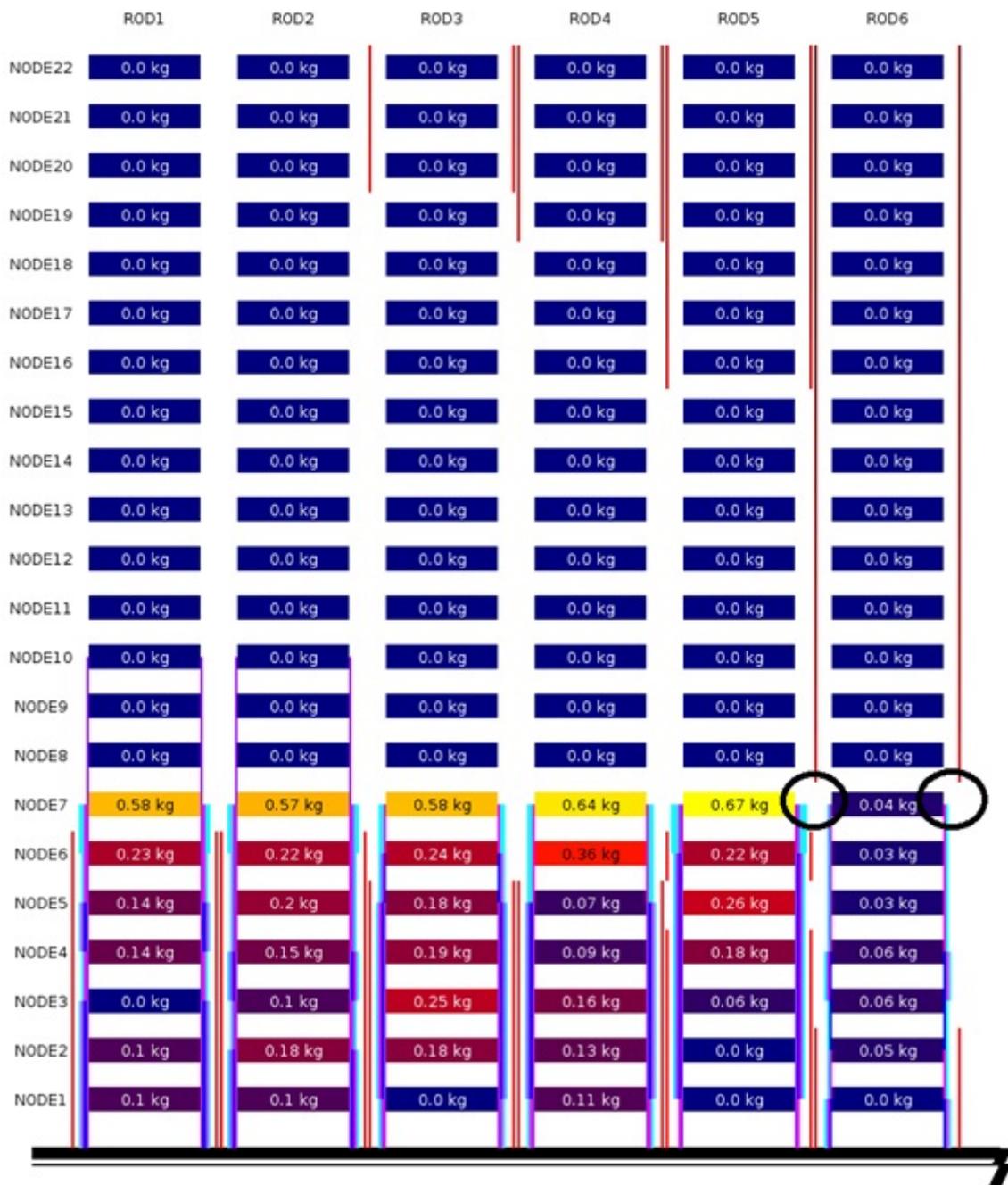
**Abb. 6.31** Zustand des Kerns am Ende der Simulation mit radialer Schmelzeausbreitung

Der Vergleich der zwei Simulationen mit bzw. ohne radiale Schmelzeausbreitung zeigt also, dass die Ergebnisse mit radialer Schmelzeausbreitung die Realität besser widerspiegeln. Die für die Simulationen benötigte Rechenzeit ändert sich durch die Implementierung des RadRel-Modells nicht wesentlich.

Die Testrechnungen haben also positive Ergebnisse geliefert, eine ausführliche Validierung des neuen Modells ist aber noch erforderlich.



**Abb. 6.32** Zustand des Kerns vor dem Abschmelzen der Kanisterwand im äußersten Ring (mit radialer Schmelzeausbreitung)



**Abb. 6.33** Zustand des Kerns nach dem Abschmelzen der Kanisterwand im äußersten Ring (mit radialer Schmelzeausbreitung)



## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS1505 wurde das Rechenprogramm ATHLET-CD weiterentwickelt. Laufzeit des Vorhabens war vom 1. März 2012 bis zum 31. März 2016.

Die durchgeführten Arbeiten umfassten ein weites Spektrum. Die wichtigsten Erweiterungen und Verbesserungen sind:

- Erweiterung der Modellierung zum Oxidationsverhalten
- Einbau eines Modells zur radialen Schmelzeausbreitung im Kern
- Erweiterungen und Verbesserungen im Spätphasenmodul AIDA
- Erweiterungen bei der Berechnung des Nuklidinventars
- Verbesserungen bei der Simulation der Spaltproduktfreisetzung
- Einbau einer neuen Version des Moduls SOPHAEROS zur Simulation des Transports von Spaltprodukten im Reaktorkühlkreislauf
- Allgemeine Verbesserung der Robustheit und der Rechengeschwindigkeit von ATHLET-CD
- Erstellung eines Programms zur Visualisierung des Kernbereichs von ATHLET-CD-Simulationen und zur Analyse von Stabilitätsproblemen während der Simulation
- Kontinuierliche Verlagerung von Schmelze aus dem Kern ins untere Plenum und Berücksichtigung im Spätphasenmodul AIDA
- Erweiterung eines Datensatzes zur Simulation eines Brennelementlagerbeckens und Kopplung mit COCOSYS
- Modellierung des Austritts von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen
- Verbesserung der Modelle zur Außenkühlung
- Koordination der analytischen Aktivitäten in der zweiten Phase des OECD/NEA Sandia Fuel Projects (SFP)
- Teilnahme am OECD BSAF Projekt mit Simulation der Unfälle in den Blöcken 2 und 3 von Fukushima Dai-ichi

Die Erweiterungen und Verbesserungen fanden zum Teil bereits Eingang in die neuen Programmversionen ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle C, ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle A, ATHLET-CD Mod 3.0 Cycle B und ATHLET-CD 3.1 Cycle A, die im Berichtszeitraum freigegeben bzw. eingefroren wurden. Mit der neuesten Version von ATHLET-CD ist es dem Anwender jetzt möglich, einen kompletten Unfallablauf von der frühen Phase über die Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum bis hin zum Austritt von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen möglichem Versagen zu simulieren. Die Zielstellung des Vorhabens wurde damit erreicht. Die Simulationen mit ATHLET-CD können dann im Weiteren mit COCOSYS gekoppelt werden. Mit diesem Programmpaket können dann auch die Vorgänge im Containment bis hin zur Beton-Schmelze-Wechselwirkung berechnet werden.

Die neu implementierte Version von SOPHAEROS und das Modell zur radialen Schmelzeausbreitung sind bisher noch nicht ausreichend getestet und sind daher zurzeit nur für GRS-interne Tests verfügbar. Sobald eine erfolgreiche Validierung erfolgt ist, sollen die beiden Modelle in einer offiziellen Version ATHLET-CD freigegeben werden und somit allen Anwendern von ATHLET-CD zur Verfügung stehen.

Die Verbesserungen in ATHLET-CD werden ständig im Rahmen des Validierungsprojektes RS1519 durch die Simulation verschiedener Experimente und Szenarien überprüft.

Weitere Verbesserungen und Erweiterungen von ATHLET-CD sollen in einem Anschlussvorhaben entwickelt werden. Besonderes Augenmerk soll dabei auf die zuverlässige und stabile Simulation von kompletten Anlagen gelegt werden.

## Literatur

- /AUS 12a/ Austregesilo, H., Bals, C., Hollands, T., Köllein, C., Luther, W., Schubert, J.-D., Trambauer, K., Weber, S.,  
ATHLET-CD Mod 2.2 - Cycle C, User's Manual,  
GRS – P – 4 / Vol. 1, GRS (2012)
- /AUS 12b/ Austregesilo, H., Bals, C., Hollands, T., Köllein, C., Luther, W., Schubert, J.-D., Trambauer, K., Weber, S.,  
ATHLET-CD Mod 2.2 - Cycle C, Programmer's Manual.  
GRS – P – 4 / Vol. 2, GRS (2012)
- /AUS 13a/ Austregesilo, H., Bals, C., Hollands, T., Köllein, C., Luther, W., Schubert, J.-D., Trambauer, K., Weber, S.,  
ATHLET-CD Mod 3.0 - Cycle A, User's Manual,  
GRS – P – 4 / Vol. 1, GRS (2013)
- /AUS 13b/ Austregesilo, H., Bals, C., Hollands, T., Köllein, C., Luther, W., Schubert, J.-D., Trambauer, K., Weber, S.,  
ATHLET-CD Mod 3.0 - Cycle A, Programmer's Manual,  
GRS – P – 4 / Vol. 2, GRS (2013)
- /AUS 13c/ Austregesilo, H., et al.,  
Validierung von Rechenprogrammen zur Simulation von Stör- und Unfällen  
im Reaktorkühlsystem, Abschlussbericht zum RS1195,  
GRS – A – 3706 (2013)
- /AUS 13d/ Austregesilo, H., Deitenbeck, H.,  
ATHLET Mod 3.0 Cycle A, Programmer's Manual,  
GRS-P-1 / Vol. 2 Rev. 7, GRS (2013)
- /AUS 15/ Austregesilo, H.,  
Modelling of the lower head of a BWR with the code ATHLET-CD  
Technische Notiz, TN-AUH-01/15, GRS (2015)

- /BAL 12/ Bals, C., Köllein, C., Cester, F., Hollands, T., Luther, W., Schubert, J.-D., Weber, S.,  
Entwicklung von Kühlkreislaufmodellen zur Spätphase von Kernschmelzunfällen (ATHLET-CD und ASTEC), Abschlussbericht zum RS 1187, GRS-A-3646 (2012)
- /BAL 13a/ Bals, C., Austregesilo, H., Hollands, T.,  
Analytical support to experiment QUENCH-17 and first post-test calculations with ATHLET-CD,  
6th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR 2013, Avignon, 2-4 October 2013
- /BAL 13b/ Bals, C., Hollands, T., Austregesilo, H.,  
Analytical support to experiment QUENCH-17 and first post-test calculations with ATHLET-CD,  
19th International QUENCH Workshop, KIT Karlsruhe, 19-21 November 2013
- /BAN 15/ Band, S., Sonnenkalb, M.,  
ATHLET-CD/COCOSYS Analyses of Severe Accidents in Fukushima – Units 2 and 3 (OECD/NEA BSAF Project, Phase 1),  
NURETH-16 Conference, Chicago, 30. August – 4. September 2015
- /BEN 09/ Ability of Current Advanced Codes to Predict Core Degradation, Melt Progression and Reflooding - Benchmark Exercise on an Alternative TMI-2 Accident Scenario,  
NEA/CSNI/R(2009)3, OECD (2009)
- /BEN 15/ Ability of Current Advanced Codes to Predict In-Vessel Core Melt Progression and Degraded Core Coolability - Benchmark Exercise on the Three Mile Island-2 Plant Final Report,  
NEA/CSNI/R(2015)3, OECD (2015)
- /BEN 16/ Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant (BSAF Project) - Phase I Summary Report March 2015,  
NEA/CSNI/R(2015)18, OECD (2016)

- /BRI 10/ Brillant, G.  
Interpretation and modelling of fission product Ba and Mo releases from fuel,  
Journal of Nuclear Materials 397 (2010) 40-47
- /CEA 11/ DEN 2011 Activity Report,  
Nuclear Energy Division, CEA (2011)
- /GAL 11/ Gallais-During, A., Pontillon, Y.,  
International Source Term Program – VERDON-1 Test: Fission product release from high burn up UO<sub>2</sub> fuel in severe accident conditions,  
Quick Look Report,  
CEA/DEN/CAD/DEC/SA3C/LAMIR 11- 011 – Indice 1, ISTP 145, CEA (2011)
- /GAL 14 Gallais-During, A., et al.,  
Performance and first results of fission product release and transport provided by the VERDON facility,  
Nuclear Engineering and Design 277 (2014) 117–123
- /GAR 15/ Garma, R., Bourouis, M., Bellagi, A.,  
Numerical Investigation of Nucleate Boiling Flow in water Based Bubble Bumps,  
International Journal of Fluid Mechanics & Thermal Sciences, Volume 1, Issue 2 (2015) 36-41
- /GAU 10/ Gaus-Liu, X., Miassoedov, A., Cron, T., Wenz, T., Schmidt-Stiefel, S.,  
LIVE-L6 Experiment with Stratified Melt Pool, Quick Look Report,  
Internal Report IKET-Nr. 1/10, KIT (2010)
- /GLE 12/ Gleizes, B., Morin, S.,  
International Source Term Program – VERDON-2 Test: fission product release and transport from MOX fuel under air ingress conditions,  
Quick Look Report,  
CEA/DEN/CAD/DEC/SA3C/LAMIR 12-012 – Indice 0, ISTP150, CEA (2012)

- /GLE 13/ Gleizes, B., Pontillon, Y., Ducros, G.,  
International Source Term Program – VERDON-2 Test: fission product re-  
lease and transport from MOX fuel under air ingress conditions,  
Final Report,  
CEA/DEN/CAD/DEC/SA3C/LAMIR 13-016 – Indice 0, ISTP159, CEA  
(2013)
- /GRE 08/ Gregoire, A.-C  
FPT2 Final Report  
PHEBUS-FP document IP08/579, IRSN (2008)
- /HOL 10/ Hollands, T.,  
Modellierung der Stickstoffreaktion in Störfallanalysecodes zur Simulation  
des Lufteinbruchs in kerntechnischen Anlagen,  
Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, er-  
schienen im Selbstverlag des Lehrstuhls Energiesysteme und Energiewirt-  
schaft, Ruhr-Universität Bochum, ISBN 978-3-934951-27-3, Bochum  
(2010)
- /HOL 13/ Hollands, T.,  
OECD/NEA SFP Phase II Benchmark Exercise, 19th International  
QUENCH Workshop, KIT Karlsruhe, 19-21 November 2013
- /INT 15/ Interner Informationsaustausch zwischen Ruhr-Universität Bochum und  
GRS
- /JAC 00/ Jacquemain, D., Bourdon, S., de Bremaecker, A., Barrachin, M.,  
FPT1 Final Report,  
PH-PF IP/00/479, IRSN (2000)
- /KRU 13/ Kruse, P.,  
Erweiterung der Spaltproduktfreisetzungsmodele des Störfallanalysecodes  
ATHLET-CD,  
Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum (2013)

- /LER 12/ Lerchl, G., Austregesilo, H., Schöffel, P., von der Cron, D., Weyermann, F.,  
ATHLET Mod 3.0 Cycle A, User's Manual,  
GRS - P - 1/ Vol. 1 Rev. 6, GRS (2012)
- /LOV 14/ Lovasz, L.,  
Simulation der Experimente VERDON-1 und VERDON-2 mit ATHLET-CD  
3.0A,  
Technische Notiz, TN-165-14/01, GRS (2014)
- /LOV 15/ Lovasz, L.,  
Verbesserung der Modellierung der Spaltproduktfreisetzung unter Berücksichtigung chemischer Bedingungen,  
Technische Notiz, TN-LOL-15/01, GRS (2015)
- /MUN 07/ Mun, C., Cantrel, L., Madic, C.,  
A Literature Review on Ruthenium Behaviour in Nuclear Power Plant Severe Accidents,  
HAL archives-ouvertes, irsn-00177621, IRSN (2007),  
<https://hal-irsn.archives-ouvertes.fr/irsn-00177621>
- /NEA 13/ OECD/NEA Sandia Fuel Project (SFP),  
<http://www.oecd-nea.org/jointproj/sfp.html>
- /PAY 10/ Payot, F., Haste, T., Biard, B., Bot-Robin, F., Devoy, J., Garnier, Y., Guillot, J., Manenc, C., March, P., FPT3 Final Report,  
Document Phébus PF IP/11/589, IRSN (2010)
- /PON 10a/ Pontillon, Y., Ducros, G., Malgouyres, P.,  
Behaviour of fission products under severe PWR accident conditions  
VERCORS experimental programme - Part 1: General description of the programme,  
Nuclear Engineering and Design 240 (2010) 1843–1852

- /PON 10b/ Pontillon, Y., Ducros, G.,  
Behaviour of fission products under severe PWR accident conditions. The  
VERCORS experimental programme - Part 2: Release and transport of fis-  
sion gases and volatile fission products,  
Nuclear Engineering and Design 240 (2010) 1853–1866
- /PON 10c/ Pontillon, Y., Ducros, G.,  
Behaviour of fission products under severe PWR accident conditions. The  
VERCORS experimental programme - Part 3: Release of low-volatile fis-  
sion products and actinides,  
Nuclear Engineering and Design 240 (2010) 1867–1881
- /PON 12/ Pontillon, Y., Gallais-During, A., Bernard, S.,  
International Source Term Program – VERDON-1 Test: Fission product re-  
lease from high burn up UO<sub>2</sub> fuel in severe accident conditions,  
Final Report, CEA/DEN/CAD/DEC/SA3C/LAMIR 12- 013 – Indice 0, ISTP  
151, CEA (2012)
- /SCH 15/ Schöffel, P., et al., Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms  
ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit,  
GRS - 387 (2015)
- /SKO 14/ ŠKODA JS a.s.,  
Compact spent fuel storage racks, [http://www.skoda-js.cz/en/products-and-  
services/spent-nuclear-fuel-storage/compact-spent-fuel-storage-racks.shtml](http://www.skoda-js.cz/en/products-and-services/spent-nuclear-fuel-storage/compact-spent-fuel-storage-racks.shtml)  
ŠKODA JS a.s., Orlik 266, 316 06 Plzeň, Czech Republic (2014)
- /STE 04/ Steinbrück, M.,  
Analysis of Hydrogen Production in QUENCH Bundle Tests,  
FZKA 6968 (2004)
- /STU 13a/ Stuckert, J., et al.,  
Results of the QUENCH-16 Bundle Experiment on Air Ingress,  
KIT Scientific Report 7634 (2013)

- /STU 13b/ Stuckert, J., et al.,  
Results of the QUENCH-DEBRIS bundle test,  
19th International QUENCH Workshop,  
KIT Karlsruhe, 19-21 November 2013
- /TRA 09/ Trambauer, K.; et al.:  
Weiterentwicklung ATHLET / ATHLET-CD, Abschlußbericht zum RS1162 ,  
GRS – A – 3461 (2009)
- /VES 02/ Veshchunov, M., Stuckert, J., Berdyshev, A.,  
Modelling of Zr-O and U-Zr-O Melts Oxidation and New Crucible Tests,  
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6792, SAM-COLOSS-P040 (2002)
- /VES 05/ Veshchunov, M., Müller, K., Berdyshev, A.,  
Molten corium oxidation model,  
Nuclear Engineering and Design 235 (2005)
- /VES 08/ Veshchunov, M., et al,  
Model for melt blockage (slug) relocation and physico-chemical interactions  
during core degradation under severe accident conditions,  
Nuclear Engineering and Design 238, Issue 12 (2008), p. 3500-3507
- /WEB 10/ Weber, S.,  
Nachrechnung des Versuchs PHEBUS FPT3 mit ATHLET-CD,  
Technische Notiz, TN-WES-09/01, GRS (2009)
- /WEB 10/ Weber, S.,  
Weiterentwicklung der Spaltproduktfreisetzung in ATHLET-CD und Nach-  
rechnung der Phebus-Versuche  
Technische Notiz, TN-WES-10/01, GRS (2010)
- /WEB 11/ Weber, S.,  
Nachrechnung des Versuchs PHEBUS FPT3 mit ATHLET-CD 2.2C,  
Technische Notiz, TN-WES-11/01, GRS (2011)

/WEB 13/ Weber, S., Nachbagauer, F.

CView – Ein Programm zum Darstellen von ATHLET-CD-Daten, Technische Notiz, TN-WES-13/01, GRS (2013)

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Übergang von parabolischer zu linearer Reaktionskinetik.....	6
Abb. 2.2	Querschnitt des QUENCH-02 Testbündels (850 mm) mit Microstruktur (FZK).....	8
Abb. 2.3	Zr-O Phasendiagramm .....	8
Abb. 2.4	Schematische Darstellung der Grundlage zum Veshchunov-Modell .....	10
Abb. 2.5	Belegung der Versagenstemperatur im Zr-ZrO <sub>2</sub> Phasendiagramm (bisher) .....	14
Abb. 2.6	Bestimmung der Versagenstemperatur im Zr-ZrO <sub>2</sub> Phasendiagramm (neu).....	15
Abb. 2.7	Berechnung der Hüllrohr-Temperaturen in der Referenzrechnung.....	18
Abb. 2.8	Vergleich der Hüllrohr-Temperaturen in 650 mm Höhe .....	19
Abb. 2.9	Vergleich der Hüllrohr-Temperaturen in 750 mm Höhe .....	19
Abb. 2.10	Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung (Referenz- / Testrechnung) .....	20
Abb. 2.11	QU-07 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen auf Höhe 950 mm.....	23
Abb. 2.12	QU-07 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen auf Höhe 1150 mm.....	24
Abb. 2.13	QU-07 - Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung (Referenz- /Testrechnung) .....	24
Abb. 2.14	FPT1 - Vergleich der Hüllrohrtemperaturen .....	25
Abb. 2.15	FPT1 - Vergleich der Wasserstoff-Erzeugung.....	26
Abb. 2.16	Beginn des Abfließens der Schmelze (dargestellt ist die keramische Schmelzemasse SUMUOSL).....	32
Abb. 2.17	Radiale Verlagerung von Ring 1 nach Ring 2 .....	33
Abb. 2.18	Radiale Verlagerung von Ring 2 nach innen und außen sowie das "Herunterfallen" der Schmelze .....	34
Abb. 2.19	Endposition der Schmelze aus Node 7 und 8 von Ring 1.....	36
Abb. 2.20	Keine seitliche Verlagerung aufgrund einer Blockade in der benachbarten Node .....	37
Abb. 2.21	Zweifache seitliche Verlagerung wegen nebeneinander existierenden Blockaden.....	38

Abb. 2.22	Ende der Beispielsimulation mit radialer Schmelzeausbreitung .....	39
Abb. 2.23	Ende der Beispielsimulation ohne radiale Schmelzeausbreitung .....	40
Abb. 2.24	Nodalisierung von TMI-2.....	42
Abb. 2.25	Eingabe zur Aktivierung der 3D-Modellierung im Datensatz .....	42
Abb. 2.26	Aufsummierte Rechenzeit.....	43
Abb. 2.27	Fluidtemperatur in Node 11 des Kanals PV-CORE00 .....	44
Abb. 2.28	Fluidtemperatur in Node 12 des Kanals PV-CORE00 .....	44
Abb. 2.29	Fluidtemperatur in Node 15 des Kanals PV-CORE00 .....	45
Abb. 2.30	Gesamtmasse an geschmolzenem Material .....	45
Abb. 2.31	Diskretisierung der Behälterwand in $(r, \theta)$ und Darstellung der für die Berechnung zu entwickelnden Differenzenquotienten.....	47
Abb. 2.32	Darstellung des Unterprogramms AIDA_WALL zur impliziten Berechnung der Wandwärmeströme im unteren Plenum.....	52
Abb. 2.33	Temperaturabhängigkeit Konduktivität $\lambda$ für Stahl (SA533B1) .....	53
Abb. 2.34	Gauß-Verteilung der inneren Wärmestromdichte (left bound) .....	54
Abb. 2.35	Quadratische Verteilfunktion für die äußere Wärmestromdichte .....	54
Abb. 2.36	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t = 0.01 s$ ....	55
Abb. 2.37	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t = 1.0 s$ ....	55
Abb. 2.38	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t = 10.0 s$ ....	56
Abb. 2.39	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t = 50.0 s$ ....	56
Abb. 2.40	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t =$ <b>100.0 s</b> .....	57
Abb. 2.41	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t =$ <b>500.0 s</b> .....	57
Abb. 2.42	Temperaturverteilung in der Kalotten-Wand zum Zeitpunkt $t =$ <b>1000.0 s</b> .....	58
Abb. 2.43	Temperaturen an der Innenwand des unteren Plenums bei DWR Simulationen mit diverser radialer Wandauflösung .....	62
Abb. 2.44	Wärmestrom durch die Wand des unteren Plenums in DWR Simulationen mit diverser radialer Wandauflösung .....	62

Abb. 2.45	Struktur von SOPHAEROS.....	74
Abb. 2.46	Beispiel für Quelltext-Struktur .....	75
Abb. 2.47	Beispiel für Quelltext-Struktur .....	76
Abb. 2.48	Datenbanken .....	77
Abb. 2.49	Datenbank-Beispiel.....	78
Abb. 2.50	Eingabe der berücksichtigten Phänomene.....	79
Abb. 2.51	Eingabe der Kopplung zur Thermohydraulik .....	81
Abb. 2.52	Beispiel für Volumenverbindungen .....	81
Abb. 2.53	Eingabebeispiel für die Auswahl der Elemente in FIPREM .....	85
Abb. 2.54	Berücksichtigte Verbindungen in SOPHAEROS (Beispiel).....	86
Abb. 2.55	Beispiel für die Auswahl der chemischen Verbindungen in SOPHAEROS.....	86
Abb. 2.56	SOPHAEROS-Zeitschrittstatistik.....	90
Abb. 2.57	CPU-Statistik mit neuem (links) und altem SOPHAEROS (rechts).....	91
Abb. 2.58	Der SOPHAEROS-Strömungspfad .....	93
Abb. 2.59	Chemische Reaktionen.....	94
Abb. 2.60	SOPHAEROS-Zeitschrittstatistik ohne PW „KINETIC“ .....	94
Abb. 2.61	CPU-Zeiten von SOPHAEROS, neues Modell ohne Kinetik .....	94
Abb. 2.62	Im Kreislauf abgelagerte Massen (alle Elemente und Verbindungen) .....	96
Abb. 2.63	Im Kreislauf verbleibende und freigesetzte Iod-Masse.....	97
Abb. 2.64	Im Kreislauf verbleibende Wasserstoffiodid-Masse (Dampfsuspension).....	98
Abb. 2.65	Im Kreislauf verbleibende HIO-Masse (Dampfsuspension) .....	98
Abb. 2.66	Im Kreislauf verbleibende Cäsiumiodid-Masse .....	99
Abb. 3.1	Screenshot von CView.....	105
Abb. 3.2	Exemplarisches Diagramm in CView .....	105
Abb. 3.3	Beispielhafte Darstellung von Reaktorkern und unterem Plenum mit CView .....	106

Abb. 3.4	Rechenzeit in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren .....	109
Abb. 3.5	Brennstofftemperatur in Node 14 von Ring 2 in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren (nach Abschmelzen des Brennstoffs wird die Temperatur auf 0 °C gesetzt).....	109
Abb. 3.6	Akkumulierte Wasserstoffmenge in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren .....	110
Abb. 4.1	Ins untere Plenum verlagerte Masse.....	113
Abb. 4.2	Exemplarische Darstellung eines Lagergestells mit Kanistern für das KKW Obrigheim /SKO 14/.....	115
Abb. 4.3	SWR-Modellierung für SWR-Konfigurationen in ATHLET-CD /TRA 09/ .....	115
Abb. 4.4	ATHLET-CD Nodalisierung eines generischen Brennelementlagerbeckens .....	117
Abb. 4.5	Nodalisierungsschema des reduzierten Datensatzes.....	119
Abb. 4.6	Unteres Plenum zum Zeitpunkt $t = 10700$ s .....	122
Abb. 4.7	Unteres Plenum nach Versagen der Behälterwand und dem Ausfließen der Schmelze .....	122
Abb. 4.8	Aufsummierte Masse der ausgetretenen Schmelze .....	123
Abb. 4.9	Massenstrom der ausfließenden Schmelze .....	124
Abb. 4.10	Reaktordruckbehälter vor und nach Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum .....	129
Abb. 4.11	Mittlere Wandtemperatur des Reaktordruckbehälters .....	130
Abb. 5.1	Versuchsanordnung des Ignition-Tests des SFP Phase II (Quelle: USNRC/SNL und /HOL 13/.....	132
Abb. 5.2	Normierte PCT im zentralen Brennelement.....	133
Abb. 5.3	Normierte Flussrate am Eintritt. Zentrales Brennelement (oben) und periphere Brennelemente (unten) .....	135
Abb. 5.4	Normierte Oxidationsleistung in allen fünf Brennelementen .....	136
Abb. 5.5	Grafische Darstellung des unteren Plenums in ATLAS .....	140
Abb. 6.1	ATHLET-CD Nodalisierung des Reaktors eines SWR Baulinie 69 .....	151

Abb. 6.2	ATHLET-CD Nodalisierung des Reaktors der Blöcke 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi .....	152
Abb. 6.3	Mögliche Wege der Schmelzeverlagerung aus dem Kern in das untere Plenum eines SWR.....	155
Abb. 6.4	COCOSYS Nodalisierung des Containments der Blöcke 2 und 3 in Fukushima Dai-ichi .....	156
Abb. 6.5	COCOSYS Nodalisierung des Torus mit 2 Ebenen mit 8 Sektoren.....	157
Abb. 6.6	Druckentwicklung im Containment.....	158
Abb. 6.7	Gemessener und berechneter RDB-Druck.....	160
Abb. 6.8	Massenströme des RCIC-Systems .....	160
Abb. 6.9	Vergleich von gemessenem und berechnetem RDB-Füllstand .....	162
Abb. 6.10	Berechnete Temperaturprofile des Kerns für ROD1-6 (jeweils Brennstab, BE-Kasten und Steuerstab) .....	163
Abb. 6.11	Wasserstoffmasse: gesamte produzierte Masse (rot) und aus dem Reaktor freigesetzte Masse (grün).....	164
Abb. 6.12	Leckagen aus dem RDB über eine S&E-Ventildichtung bzw. Rohre der Kerninstrumentierung .....	165
Abb. 6.13	Vergleich gemessener und berechneter RDB- und Containment-Druck und berechnete Wassertemperaturen in den Toruszonen .....	166
Abb. 6.14	Wassermasse im Torusraum .....	167
Abb. 6.15	Gesamtmasse der freigesetzten Spaltprodukte .....	169
Abb. 6.16	Vergleich von gemessenem und berechnetem RDB-Druck .....	170
Abb. 6.17	Massenströme des RCIC-Systems .....	170
Abb. 6.18	Vergleich des gemessenen und berechneten RDB-Füllstands.....	171
Abb. 6.19	Massenströme des HPCI-Systems .....	172
Abb. 6.20	Temperaturprofile des Kerns für ROD1-6 (jeweils Brennstab, BE-Kasten und Steuerstab) .....	174
Abb. 6.21	Wasserstoffmasse: gesamte produzierte Masse (rot) und aus dem Reaktor freigesetzte Masse (grün).....	175
Abb. 6.22	Schmelzmasse (UO <sub>2</sub> ) im Kernbereich (rot) und verlagert ins untere Plenum (blau) .....	175

Abb. 6.23	Leckagen aus dem RDB über eine S&E-Ventildichtung bzw. Rohre der Kerninstrumentierung .....	176
Abb. 6.24	Vergleich gemessener und berechneter RDB- und Containment-Druck und berechnete Wassertemperaturen in den Toruszonen .....	177
Abb. 6.25	Massenströme der Sprühsysteme ins Containment .....	178
Abb. 6.26	Gesamtmasse der freigesetzten Spaltprodukte .....	180
Abb. 6.27	Aufstauen von Schmelze in radialer Richtung aufgrund der noch intakten Kanisterwand .....	183
Abb. 6.28	Radiale Schmelzeausbreitung nach dem Aufschmelzen der Kanisterwände in den benachbarten Rods.....	184
Abb. 6.29	Nodalisierung des Kern beim Rechnungsstart (die geschmolzene Masse ist daher überall Null).....	185
Abb. 6.30	Zustand des Kerns am Ende der Simulation ohne radiale Schmelzeausbreitung .....	186
Abb. 6.31	Zustand des Kerns am Ende der Simulation mit radialer Schmelzeausbreitung .....	187
Abb. 6.32	Zustand des Kerns vor dem Abschmelzen der Kanisterwand im äußersten Ring (mit radialer Schmelzeausbreitung) .....	188
Abb. 6.33	Zustand des Kerns nach dem Abschmelzen der Kanisterwand im äußersten Ring (mit radialer Schmelzeausbreitung) .....	189

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Maßgebende Eingabegrößen für das Ausmaß der Schmelzeoxidation.....	11
Tab. 2.2	Resultierende Wasserstofferzeugung für die Versuche QUENCH-03, -07 und -16 .....	11
Tab. 2.3	Resultierende Wasserstofferzeugung für die Versuche QUENCH-03, -07, -10, -11 und -16 (mit „?“ markierte Daten vom Experiment liegen nicht vor oder sind nicht gemessen).....	21
Tab. 2.4	Simulationsrechnungen Eingabeparameter .....	22
Tab. 2.5	Wasserstofferzeugung beim Versuch FPT1 .....	25
Tab. 2.6	Beispiel zur Berechnung der Parameter des Schmelzepools .....	29
Tab. 2.7	Werte von $\mu_x$ bei verschiedenen chemischen Bedingungen.....	70
Tab. 2.8	Werte von $\mu_x$ in Abhängigkeit des umliegenden Fluids.....	70
Tab. 2.9	Schalterkriterien zwischen chemischen Bedingungen.....	71
Tab. 2.10	In der Antoine-Gleichung verwendete Konstanten .....	72
Tab. 2.11	Schlüsselwörter zu den Phänomenen in SOPHAEROS.....	80
Tab. 2.12	Gruppen in FIPREM .....	83
Tab. 2.13	SOPHAEROS-Ausgabegrößen.....	89
Tab. 2.14	CPU-Zeiten von SOPHAROS .....	95
Tab. 5.1	Teilnehmer und Codes des OECD/NEA SFP Phase II Benchmarks .....	132
Tab. 6.1	Anzahl der Brennelemente je Kernring .....	152

**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](http://www.grs.de)