

**Optimierung der
bestehenden
Unfallanalysen
hinsichtlich der
Jodfreisetzung aus dem
Reaktorkühlkreislauf
unter Berücksichtigung
neuer Erkenntnisse**

**Optimierung der
bestehenden
Unfallanalysen
hinsichtlich der
Jodfreisetzung aus dem
Reaktorkühlkreislauf
unter Berücksichtigung
neuer Erkenntnisse**

Abschlussbericht
zum Arbeitspaket AP 7

Michael Kowalik
Manuel Obergfell

März 2022

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen 4719R01377 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUV übereinstimmen.

Deskriptoren

ATHLET-CD, COCOSYS, FIPREM, Iod, Iodchemie, MELCOR, Quellterm, Reaktorkühlkreislauf, SAFT, Unfallanalysen

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit im Vorhaben 4719R01377 (Optimierung der bestehenden Unfallanalysen hinsichtlich der Jodfreisetzung aus dem Reaktorkühlkreislauf unter Berücksichtigung neuer Erkenntnisse (z. B. IRSN)) wurde im Rahmen des Gesamtvorhabens 4719R01370 (Untersuchungen zu sicherheitstechnischen Fragestellungen für Anlagen im Leistungsbetrieb) erstellt. Sie beinhaltet die Ertüchtigung von Analysen zu kerntechnischen Unfällen auf Basis von MELCOR-Simulationen hinsichtlich der Freisetzung gasförmigen Iods aus dem Reaktorkühlkreislauf auf Grundlage der Verwendung fortschrittlicher Module in der Rechenkette AC2 (ATHLET-CD, COCOSYS). Das Vorhaben steht dabei im Zusammenhang mit dem Vorhaben 4718R01313, welches sich mit der Iodchemie im Sicherheitsbehälter beschäftigt hat.

Die Arbeiten umfassten eine ausgiebige Literaturrecherche hinsichtlich der Iodchemie innerhalb des Reaktorkühlkreislaufes und einer detaillierten Betrachtung der in ATHLET-CD gegebenen Module, die im Zusammenhang mit der Iodfreisetzung stehen (SAFT, FIPREM). Ferner sind diese Module für Analysen von Unfällen auf Basis von MELCOR-Simulationen nutzbar gemacht worden. Unter Verwendung der Ergebnisse aus diesem Vorhaben, welches sich mit der Freisetzung von Iod aus dem Reaktorkühlkreislauf beschäftigt und der Ergebnisse des Vorhabens 4718R01313, ist ein integraler Vergleich zwischen der Rechenkette AC2 und MELCOR mit einem ertüchtigten Eingabedatensatz ermöglicht worden.

Die Umsetzung der Nutzbarmachung ist durch zwei Methoden durchgeführt worden, welche als „direkte“ und „phänomenologische“ Umsetzung bezeichnet werden. Im ersteren Fall ist eine ATHLET-CD-Simulation durchgeführt worden, deren Ergebnisse in ein Tabellenwerk (Freisetzung von Iodspezies, abgelagerte Nachzerfallsleistung etc.) in MELCOR eingegeben worden sind, welche dann mit Radionuklidquellen das AC2-Ergebnis in die MELCOR-Simulation eingebracht haben.

Die zweite Umsetzung impliziert die Durchführung von ATHLET-CD-Simulationen unter Variation relevanter Parameter. In der Analyse der freigesetzten Iodspezies konnten Korrelationen zwischen der Freisetzung in den Sicherheitsbehälter und messbaren Größen wie gemittelter Dampftemperatur im oberen Plenum erkannt werden. Diese Korrelationen sind in MELCOR als Funktion eingegeben worden, die mit Radionuklidquellen verknüpft worden sind.

Der integrale Vergleich zwischen ertüchtigter MELCOR-Simulation und AC2-Vergleichsimulation zeigt signifikante Unterschiede, so dass eine Verwendung lediglich unter genauer Betrachtung der thermohydraulischen Bedingungen möglich ist, welche ähnlich zu sein haben. Für eine Betrachtung der Bandbreite der Freisetzung gasförmiger Iodspezies aus dem Reaktorkühlkreislauf sind die in diesem Vorhaben gewonnenen Erkenntnisse sehr nützlich.

Abstract

The work in this project with the denotation 4719R01377 (Optimierung der bestehenden Unfallanalysen hinsichtlich der Jodfreisetzung aus dem Reaktorkühlkreislauf unter Berücksichtigung neuer Erkenntnisse (z. B. IRSN), *Optimisation of the Given Severe Accident Analyses Regarding the Iodine Release from the Reactor Coolant System Considering new Realisations (e.g. from IRSN)*) has been conducted in the context of the project denoted as 4719R01370 (Untersuchungen zu sicherheitstechnischen Fragestellungen für Anlagen im Leistungsbetrieb, *Analyses of Subjects Concerning the Nuclear Safety in Full Power Operation*). The subject of this project is the improvement of analyses of severe accidents in nuclear power plants based on MELCOR simulations regarding the release of gaseous iodine from the reactor cooling system using sophisticated modules in the simulation code framework AC2 (ATHLET-CD, COCOSYS). This project is associated with the project 4718R01313 which treats the iodine chemistry in the containment.

The work comprises an exhaustive literature research with respect to the iodine chemistry inside the reactor cooling system and a detailed inspection of the modules given in ATHLET-CD corresponding to the iodine release (SAFT, FIPREM). Moreover, these modules were being utilised for analyses based on simulations performed with MELCOR. Using the results of this project treating the iodine release from the reactor cooling system and the results from the project 4718R01313, an integral comparison between the code AC2 and MELCOR with an improved input deck was performed.

The mentioned utilisation was realised by two different methods denoted as “direct” and “phenomenological” realisations. For the direct realisation a ATHLET-CD simulation was performed whose results were recorded in a table framework (release of iodine species, deposited decay power etc.) in MELCOR which in turn was connected to radionuclide sources. Correspondingly, the results from the AC2 simulation were implemented in the MELCOR simulation.

The second realisation implies the performance of a spectrum of simulations with ATHLET-CD using varied parameters relevant to the iodine chemistry. During the analysis of the released iodine species, correlations between the release into the containment and measurable quantities such as averaged steam temperature inside the upper plenum could be recognised. These correlations were implemented in a MELCOR input deck as a control function block connected to radionuclide sources.

The integral comparison between the improved MELCOR simulation and the AC2 simulation shows significant differences so that an application has to be done with great care regarding the thermohydraulic conditions which have to be comparable. The results from the variation simulations are very useful for an estimation of the bandwidth of the release of gaseous iodine species.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
1	Einleitung, Aufgabenstellung und Zielsetzung	1
2	Kurzdarstellung des relevanten Standes von Wissenschaft und Technik	5
2.1	Forschungsergebnisse zur Jodchemie während des Ablaufes von Unfallszenarien in DWRs	5
2.2	Simulation der Iodchemie im Reaktorkühlkreislauf mit SAFT und FIPREM.....	9
2.3	Simulation der Iodchemie mit dem Integralcode MELCOR	11
3	Nutzbarmachung vorhandener Computermodelle für MELCOR (AP 2)	15
3.1	Prinzipielles Vorgehen	15
3.1.1	Analytische bzw. empirische Untersuchung der in ATHLET-CD gegebenen Iod-Modelle	20
3.1.2	Identifikation der für die Iodchemierechnung in SAFT wesentlichen Verbindungen	37
3.1.3	Definition von Iodspezies, Neudefinition von Elementklassen	40
3.2	Anlagenmodelle AC2, MELCOR	45
3.2.1	MELCOR	46
3.2.2	ATHLET-CD, COCOSYS (AC2).....	47
3.3	Vereinfachte, phänomenologische Umsetzung der in ATHLET-CD gegebenen Modelle (FIRPEM, SAFT), AP 2.1	48
3.3.1	Randbedingungen	49
3.3.2	Auswahl der Parameter	51
3.3.3	Simulationsdurchführung	59
3.3.4	Ergebnisse der SBO-Gruppe	60
3.3.5	Ergebnisse der KMV-Gruppe	82

3.4	Vereinfachte direkte Umsetzung der in ATHLET-CD (SAFT und FIPREM) gegebenen Modelle in MELCOR, AP 2.2	106
3.4.1	Radionuklidsenken	107
3.4.2	Anpassung der Nachzerfallsleistung	111
3.4.3	Anpassung der abgelagerten Leistung.....	114
4	Integrale Vergleichsrechnungen (AP 3)	119
4.1	SBO-Gruppe.....	122
4.2	KMV-Gruppe.....	125
4.3	Diskussion, Unsicherheiten.....	128
5	Zusammenfassung, Fazit	133
	Literatur, Quellen	137
	Abbildungsverzeichnis.....	145
	Tabellenverzeichnis.....	151
	Abkürzungsverzeichnis.....	153

1 Einleitung, Aufgabenstellung und Zielsetzung

Eine zentrale Aufgabe der GRS ist die Gewinnung wissenschaftlicher Erkenntnisse sowie die Entwicklung neuer Methoden auf dem Gebiet der Reaktorsicherheit, um den hohen Sicherheitsstand deutscher Kernkraftwerke weiter zu verbessern. Sie liefert durch wissenschaftlich abgesicherte Analysen und Bewertungen einen Beitrag, um den Stand von Wissenschaft und Technik weiterzuentwickeln sowie Mensch und Umwelt vor Gefahren und Risiken kerntechnischer Anlagen zu schützen. Die GRS verfolgt mit diesem Eigenforschungsvorhaben zudem das grundsätzliche Ziel ihre Kompetenz und Aussagefähigkeit zu sicherheitstechnischen Fragestellungen für Anlagen im Leistungsbetrieb auf dem Gebiet der Unfallanalytik zu stärken.

Ionisierende Strahlung ist in Bezug auf Reaktoren bei schweren Unfällen mit dem Begriff des Quellterms verknüpft, welcher die Freisetzung von Radionukliden bzw. deren nuklidspezifische Aktivität in die Anlagenumgebung inklusive der Information um den Freisetzungsort beschreibt. Letzterer wird wiederum vom Freisetzungspfad innerhalb der Anlage bestimmt. Bei der Spaltung von U-235 und Pu-239 wird ein breites Spektrum an Radionukliden produziert (siehe Abb. 1.1), die z. B. in /SSK 04/ für Leistungsreaktoren aufgelistet sind. Von diesen Nukliden sind nur einige für den Quellterm radiologisch relevant. Hierzu gehören Cs-137 (Cäsium) und I-131 (Iod). Im Falle von I-131 handelt es sich um einen β^- -Strahler, dessen Aktivität mit einer relativ kleinen physikalischen Halbwertszeit von $T_{1/2}^{I-131, \text{physik.}} = 8,0252 \text{ d}$ /IAE 20/ ($A = \dot{N}_{I-131} = \frac{1}{T_{1/2}} \cdot N_{I-131}$, Qualitätsfaktor 1) relativ hoch ist und dessen mittlerer β -Emissionsenergie mit $\langle E_{\beta}^{I-131} \rangle = 181,85 \text{ keV}$ bzw. γ -Energie von $\langle E_{\gamma+X}^{I-131} \rangle = 381,989 \text{ keV}$ /IAE 20/ ebenfalls relativ hoch ist. Die relativ geringe Halbwertszeit führt automatisch zu einer relativ hohen Aktivität. Die Halbwertszeit ist allerdings nicht klein genug damit der substanzielle Teil bereits vor der Freisetzung (durch eine gefilterte Druckentlastung etwa, die im Falle eines Station Blackouts nach ca. $t_p^{\text{Vent.-Beg.}} \approx 2 \text{ d}$ („Problem“-Zeit des Beginns der gefilterten Druckentlastung nach RESA ($t_p^0 = t_{\text{Abschalt}} = 0,0 \text{ s}$) gemäß Analysen in /GRS 01/) zerfallen würde ($\frac{N}{N_0}(t_p^{\text{Vent.-Beg.}}) \approx 0,84$).

Ersichtlicher Weise ist für die Bewertung der Relevanz eines Radionuklids im Unfallszenario ebenfalls zu berücksichtigen, ob sich eine relevante Menge dieses Isotops im Reaktorkern befindet, welches dann freigesetzt werden kann. Gemäß Tab. 2-7 ist in /SSK 04/ eine Anfangsaktivität von ca. $A_{I-131}(t_{\text{Abschalt}}) = 3,1 \cdot 10^{18} \text{ Bq}$ in einer DWR-

Referenzanlage am Zyklusende vorhanden. Hierzu trägt das Leitnuklid Kr-88 mit einer Anfangsaktivität von $A_{\text{Kr-88}}(t_{\text{Abschalt}}) = 2,3 \cdot 10^{18}$ Bq im Reaktorkern bei, dessen Strahlungsenergie $\langle E_{\beta^-}^{\text{Kr-88}} \rangle = 365,34$ keV bzw. $\langle E_{\gamma+Y}^{\text{Kr-88}} \rangle = 1.950,461$ keV /IAE 20/ beträgt. Jedoch beträgt die Halbwertszeit lediglich $T_{1/2}^{\text{Kr-88, physik.}} = 2,825$ h /IAE 20/, so dass die Aktivität Kr-88 zu Beginn eines Ventings in einem SBO-Szenario (s.o.) bereits substantiell abgefallen ist ($\frac{N}{N_0}(t_{\text{P}}^{\text{Vent.-Beg.}}) \approx 8 \cdot 10^{-6}$).

In Bezug auf die radiologische Wirkung von radioaktivem Iod auf den Organismus sei auf die SSK-Empfehlung zur Verwendung von Jodtabletten zur Jodblockade der Schilddrüse bei einem Notfall von radioaktivem Jod /SSK 18/ verwiesen.

Die Quelltermermittlungen basieren in der GRS zu einem großen Anteil auf Berechnungen mit dem Integral-Code MELCOR und zu einem geringeren Teil auf Simulationen des Codes ATHLET-CD gekoppelt mit COCOSYS /COC 20/ bzw. auf ASTEC /AST 15/. Das Programm MELCOR ist aus mehreren Programmpaketen zusammengesetzt, welche für die Simulation verschiedener Phänomene während eines schweren Unfallablaufs zuständig sind wie beispielsweise die Thermohydraulik (CVH- und HS-Paket), die Kernzerstörung (COR-Paket), die Schmelze-Beton-Wechselwirkung (CAV-Paket) oder das Verhalten von radioaktiven Dämpfen oder Aerosolen (RN-Paket) (siehe /SAN 17/). Auch verfügt MELCOR über ein Modell zur Iodchemie insbesondere in Bezug auf den Reaktorsumpf. Dessen Verwendung wird jedoch vom Entwickler SANDIA derzeit nicht empfohlen, da es beispielsweise zu großen Bilanzfehlern (siehe /HOR 10/) kommt und somit nicht als validiert angesehen werden kann.

Basierend auf Analysen der Iod-Freisetzung nach dem Reaktorunfall in TMI-2 (Anlage **Three Mile Island**) wird in MELCOR Iod lediglich als Verbindung mit Cäsium als Aerosol oder Dampf von CsI aus dem Reaktorkühlkreislauf freigesetzt. Ohne das nicht-empfohlene Iod-Modell kann gasförmiges Iod allenfalls durch Chemisorption aus CsI hervorgebracht werden.

Das mittlerweile beendete Vorhaben 4718R01313 („Weiterentwicklung der Modell- und Datenbasis zur Durchführung von Unfallanalysen für die Fortschreibung eines einheitlichen Ereignisbaums“, welches vom 11.06.2018 bis zum 31.07.2021 bearbeitet wurde) beschäftigte sich in Arbeitspaket 3.3 („Erweiterung der Methoden für deterministische Unfallanalysen zur Bestimmung gasförmiger Iodfreisetzungen“) mit der Iodchemie im Sicherheitsbehälter. Die Idee für dieses Vorhaben war, das fortschrittliche Modul, welches

im Code COCOSYS gegeben ist, für Analysen auf Basis von MELCOR-Simulationen nutzbar zu machen. Da diese Module ständig einer Weiterentwicklung unterliegen, wird dies als Stand von Wissenschaft und Technik angesehen. Mit Hilfe des Vorhabens sollen die Analysen basierend auf MELCOR-Simulationen in Hinsicht auf die Iodchemie ertüchtigt werden.

Bezüglich des Iod-Verhaltens innerhalb des Reaktorkühlkreislaufes (RKL) können die Untersuchungen in 4718R01313 keine neuen Einsichten liefern. Auch im Bereich des RKL ist in MELCOR ein äußerst einfaches Modellverhalten gegeben. Aufgrund des Stoffmengenüberschusses von Cäsium wird bei schweren Unfällen eine vollständige Verbindung des Iods an Cäsium angenommen. Entsprechend wird aus dem Brennstoff ausschließlich CsI freigesetzt. Eine gewisse Menge kann hierbei an Zirkalloy und rostfreiem Stahl durch Chemisorption in I_2 und CsOH (Oxidation an H_2O) umgewandelt werden. Einschlägige experimentelle Untersuchungen (siehe /IRS 15/ oder Kapitel 2) haben jedoch gezeigt, dass auch gasförmiges Iod in nennenswerten Mengen aus dem RKL austreten kann. Dies ist in erster Linie auf den Verlust von Cäsium als Reaktionspartner zurückzuführen und auf kinetische Hemmung insbesondere in Bereichen mit steilen Temperaturgradienten bei den Unfallabläufen. Entsprechend bleibt die Reaktion von Cäsium mit Iod unvollständig und Iod kann in verschiedenen gasförmigen Spezies vorhanden sein (z. B. HI, I_2 , I, Kapitel 5.5.6.1 in /IRS 15/) und in den Sicherheitsbehälter freigesetzt werden.

Ziel dieses Projektes ist es die aktuellen Erkenntnisse in der Forschung zur Freisetzung des Iods aus Brennstoff bzw. aus dem RKL aufzuarbeiten und sowohl für zukünftige als auch für vergangene Analysen auf Basis von MELCOR-Simulationen nutzbar zu machen. Dies soll auf zwei Wegen geschehen: Zum einen sollen die in dem Referenzcode, deren Modelle (SOPHAEROS für die Iodchemie im RKL, FIPREM für die Freisetzung aus dem Brennstoff) als auf den Stand von Wissenschaft und Technik angesehen werden, möglichst direkt in den MELCOR-Eingabedatensatz einer Referenzanlage implementiert werden und zum anderen sollen Zusammenhänge aus Variationsrechnungen mit diesen Programmen erkannt werden, um damit möglichst einfache Regeln der Iodfreisetzung in den Eingabedatensatz einzupflegen. Mit solchen Regeln ließen sich auch frühere MELCOR-Simulationen korrigieren.

Mittels solcher Untersuchungen hinsichtlich der Freisetzung von Iod aus dem RKL werden jene Untersuchungen im Vorhaben 4718R01313 ergänzt, so dass zukünftige Simulationen mit MELCOR von der Freisetzung aus dem Brennstoff bis hin zur Freisetzung in die Anlagenumgebung auch in Hinsicht auf das in der ersten Phase einer Freisetzung

radiologisch besonders relevante Iod auf Stand von Wissenschaft und Technik gebracht werden.

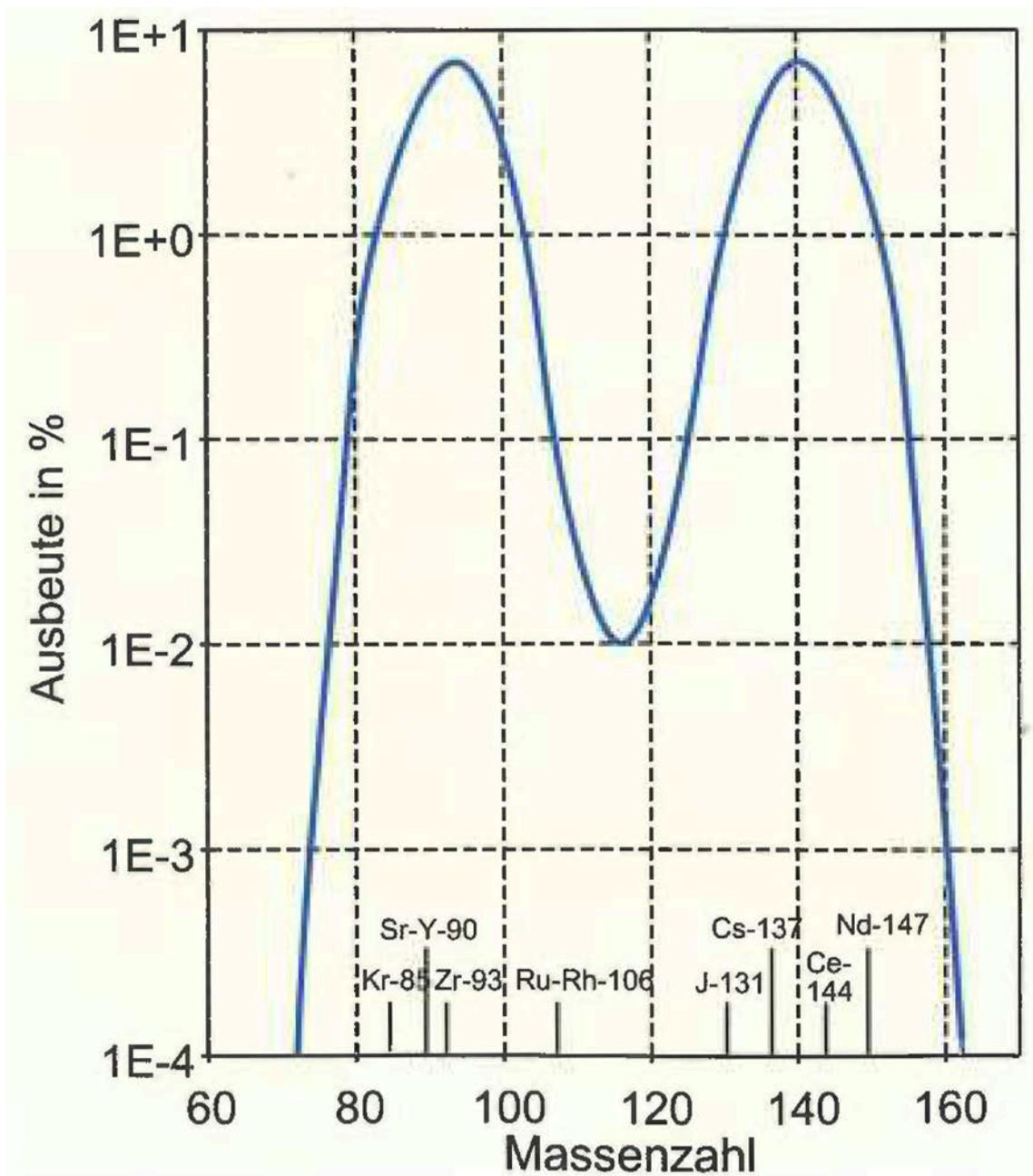


Abb. 1.1 Spaltproduktspektrum von U-235 /AKR 11/

2 Kurzdarstellung des relevanten Standes von Wissenschaft und Technik

2.1 Forschungsergebnisse zur Jodchemie während des Ablaufes von Unfallszenarien in DWRs

Die Berechnung der Freisetzungsraten von Jod nach Eintritt eines schweren Unfallszenarios in einem Druckwasserreaktor (DWR) setzen eine gute Kenntnis der im Sicherheitsbehälter und im Primärkühlkreislauf vorliegenden Form von Iod voraus. Anfängliche KKW-Auslegungsempfehlungen, die auf dem Konzept eines größten anzunehmenden Unfalls basieren und im US-Regelwerk zu finden sind, /AEC 62/, basieren auf relativ unsicheren Einschätzungen. In diesen anfänglichen Zeiten der Nutzung der Kernenergie wurde angenommen, dass Iod hauptsächlich gasförmig in den Sicherheitsbehälter gelangt, die Literatur /AEC 74/ gibt diesbezüglich einen Wert von 91 % elementaren Iods (I) an neben den Formen Jodwasserstoff (HI) und Cäsiumjodid (CsI).

Für die Aufarbeitung verschiedener Reaktorunfälle wurden in /OAK 92/ Berechnungen zur Jodchemie unter Unfallbedingungen im Reaktorkühlsystem und im Sicherheitsbehälter durchgeführt. Die Annahmen aus den Regelwerken konnten dabei nicht bestätigt werden. Liegt im Bereich des Kernes noch ein beachtlicher Anteil Jod in den Formen I und HI vor, beispielsweise 9 % im Unfallablauf von Grand Gulf, zeigte sich aber, dass in 6 von 7 Unfallszenarien fast ausschließlich CsI den Reaktorkühlkreislauf verlässt. In einem Unfallszenario sind die Bedingungen für den Austritt von I und HI in relevanten Mengen, 3,2 %, gegeben. Diese Berechnungen wurden unter Vernachlässigung der Reaktionen mit Oberflächen und der Anlagerung chemischer Substanzen an Oberflächen durchgeführt. Nur für die Verbindung Cäsium-Hydroxid (CsOH) wurden die physikalischen Oberflächeneffekte explizit berücksichtigt. Die Stärke der Wechselwirkungen mit Oberflächen führte dabei nicht zu genügend niedrigen CsOH-Dampfdrücken, die eine Produktion von I aus CsI entsprechend der Reaktionsgleichung $\text{CsI} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CsOH} + \text{I} + \frac{1}{2}\text{H}_2$ begünstigen könnten. Für die säurebasierte Reaktion von CsI mit Wasser muss nach /OAK 92/ das Verhältnis der Dampfdrücke CsOH zu H₂O unterhalb des Gleichgewichtswertes sein, damit das Radikal I (bei Temperaturen über 1800 K) oder HI entsteht. Die Autoren dieser Veröffentlichung kommen zu der begründeten Abschätzung, dass in allen Unfallabläufen ein maximaler Anteil von 5 % des aus dem Kühlkreislauf austretenden Jods in elementarer Form oder als HI vorliegen.

Neuere Untersuchungen berücksichtigen auch weitere chemische Elemente aus dem Reaktor. Hier sind vor allem die relativ großen Mengen der Elemente Silber (Ag), Indium (In), und Cadmium (Cd) zu nennen, sofern entsprechende Steuerstäbe im Reaktor verwendet werden. Mehrere Experimente wurden durchgeführt, um die Einflüsse der Steuerstäbe und weiterer chemischer Elemente, die als Spaltprodukte im Kerninventar vorliegen, auf die Jodchemie zu bestimmen. Ergebnisse systematischer experimenteller Untersuchungen zum Verhalten CsI/Cd und CsI/Ag und zum Einfluss von Bor (z. B. aus B₄C-Steuerstäben, wie sie im SWR Verwendung finden oder durch die Borsäure in einem DWR) auf die Jodchemie im Reaktorkühlkreislauf wurden im Rahmen des Exsi-Programms, u. a. /VTT 18/ und /VTT 18a/ gemacht.

Eine Reihe weiterer Veröffentlichungen beschäftigt sich mit der Analyse der Daten aus dem CHIP Programm (**C**hemistry of **I**odine in the Reactor Coolant system), u. a. /IRS 13/, und den Phébus Versuchen, u. a. /SAR 16/, /IRS 09/, /IRS 13a/, /IRS 13b/, /IRS 13c/, /IRS 13d/, /ITE 17/. Das CHIP Programm war Teil des internationalen Quell-Term-Programms, ISTP, das im Zeitraum von 2004 bis 2012 in den Forschungseinrichtungen des IRSN betrieben worden ist. Experimentell wurden die chemischen Reaktionsabläufe von Iod mit 10 chemischen Substanzen, die während eines Unfallszenarios in großen Mengen aus dem Kern austreten, unter Unfallbedingungen im Reaktorkühlkreislauf untersucht. In einem Aluminiumrohr werden dabei mit einer Flamme Temperaturen bis 1600°C erzeugt, um die Bedingungen am Eingang des primären Kühlkreislaufes im Falle eines schweren Unfalls nachzustellen. Die kinetischen Reaktionsparameter der wichtigsten Reaktionen sollten mit diesen Experimenten bestimmt werden. Ein Ergebnis der Arbeiten war die Weiterentwicklung des Simulationspaketes SOPHAEROS um einen Satz von 41 Reaktionsgleichungen für die homogene Gasphase, wie in /IRS 12/ beschrieben.

Im Gegensatz zu obigen Experimenten sind die Phébus-Versuche Experimente in einem maßstäblich verkleinerten Reaktorkern mit künstlich erzeugten Kernschmelzen. In vier Versuchen der IRSN in den Jahren 1993 bis 2000 wurden die Bedingungen während eines Kernschmelzunfalls möglichst detailgetreu nachgestellt und das Verhalten der Spaltprodukte im Reaktorkühlkreislauf und im Sicherheitsbehälter untersucht.

Neben dem großen Einfluss von CsI sind unter anderem drei weitere wichtige Einflussfaktoren auf die Jodchemie im Reaktorkühlkreislauf erkannt worden. Diese Einflussfaktoren ergaben sich aus den bisherigen theoretischen und experimentellen Untersuchungen und in mehreren Veröffentlichungen wird auf diese verwiesen. Zum einen könnte

durch die Freisetzung von Molybdän (Mo) aus dem Kern, die Verfügbarkeit von Cs zur Bildung von CsI reduziert werden. Darüber hinaus ergibt sich ein Einfluss von Ag und Cd aus den Steuerstäben durch die Bildung von Cadmiumjodid (CdI und CdI_2) und Silberjodid (AgI) auf die Iodchemie. Ein dritter wichtiger Einflussfaktor, der streng genommen keiner eigener darstellt, ist der Einfluss der Reaktionskinetik auf die Bildung der chemischen Verbindungen, da üblicherweise in Simulationen nur die chemischen Gleichgewichtsbedingungen berechnet werden. Die Ergebnisse der Literaturrecherche zu diesen drei Einflussfaktoren werden im Folgenden aufgezeigt.

Zur Beschreibung der Reaktionskinetik für das System Jod-Sauerstoff-Wasserstoff, $\{I, O, H\}$, wurde SOPHAEROS um ein optionales Paket erweitert, /IRS 12/. Als Datengrundlage dienten quantenmechanische Rechnungen, verschiedene Veröffentlichungen und experimentelle Daten. Die CHIP Experimente, /IRS12a/ und /IRS 13/ und nachfolgende Versuche basierend auf der gleichen Flammkammer, /IRS 17/, überprüften und verfeinerten das Kinetik-Modell. Der Anteil gasförmigen Jods (hauptsächlich I_2) stieg in den Versuchen mit dem Verhältnis Mo zu Cs in der Hochtemperaturzone an. Der Anstieg wurde dabei mit der Reaktion von Cs und Mo zu Mo-Cs Verbindungen und der reduzierten Menge Cs zur Bildung von CsI in Zusammenhang gebracht und wurde auch in SOPHAEROS Rechnungen gefunden. Entscheidend für die Entstehung von HI und I_2 ist, nach Ausführungen in /IRS 13/, die Kinetik im Temperaturbereich zwischen $600^\circ C$ und $900^\circ C$. Ab $900^\circ C$ kondensiert Cs_2MoO_4 an Aerosolen und reduziert die Verfügbarkeit von Cs in der Gasphase und führt zu einer Entstehung gasförmiger Jodverbindungen durch die chemische Umwandlung $Cs_2MoO_4 + 2I + H_2 \leftrightarrow 2CsI + MoO_3 + H_2O$ im Reaktionsverlauf von der rechten zur linken Seite der Reaktionsgleichung. Unterhalb von $700^\circ C$ kondensiert MoO_3 an Polymeren und bei $600^\circ C$ CsI an Aerosolen, was die weitere Entstehung gasförmiger Jodverbindungen unterdrückt. SOPHAEROS Rechnungen ohne kinetisches Modul ergeben dabei HI als häufigste Form gasförmigen Jods nach Abkühlung, während die Experimente I_2 als häufigste Form zeigen. Die Erklärung hierfür ist, dass die Reaktion $I + I \rightarrow I_2$ schneller abläuft als $H + I \rightarrow HI$. Auch wird in /IRS 13b/ die Freisetzungseigenschaft von Cd als mögliche Ursache genannt. Cd kann dabei aus den Steuerstäben stammen und sich mit HI verbinden: $Cd + 2HI \leftrightarrow CdI_2 + H_2$. Neben dem $\{Cs, I, Mo, O, H\}$ System wurden auch die Wechselwirkungen mit Bor, $\{Cs, I, B, O, H\}$ genauer analysiert. Es zeigte sich, dass auch Bor mit Cs in Wechselwirkung steht (die chemischen Formen $CsBO_2$ und $Cs_2B_8O_{13}$ werden in /IRS 12a/ genannt oder $BCsO_2$ in /IRS 13b/), die vorhandene Menge CsI in einem kerntechnischen Unfall verringern

kann und zu einer Erhöhung des Anteils gasförmigen Jods im Reaktorkühlkreislauf führen könnte /IRS 12a/. Die Wirkung von Mo als Cs-Falle ist dabei stärker als die Wirkung des Bors bei gleichen relativen Mengenverhältnissen Mo/Cs bzw. B/Cs.

Bereits in den Phébus Versuchen, im direkten Vergleich von FPT2 (*Fission Product Test* - Spaltprodukttest) und FPT3, zeigte sich ein möglicher Einfluss der Elemente Ag, In oder Cd aus SIC-Steuerstäben (Silber-Indium-Cadmium) auf die Freisetzung gasförmigen Jods aus dem Reaktorkühlkreislauf. Systematische Untersuchung zur Wechselwirkung zwischen CsI/Cd und CsI/Ag an den Rohrwänden (Edelstahl 304 oder oxidiertes Aluminium) bei 400°C bzw. 650°C (oberhalb der Schmelztemperatur von CsI, 621°C) finden sich in /VTT 18/. Im Experiment mit Ag kam es zu einer höheren Freisetzung gasförmigen Iods am Ende des Rohres bei 125°C als im Experiment mit Cd. Auch die Beimischung von Wasserstoffgas (10 %) hatte einen Einfluss auf die Freisetzung von gasförmigem Iod in der Form, dass eine Erhöhung im Cd-Experiment und eine Reduzierung im Ag-Experiment zu verzeichnen gewesen ist. Darüber hinaus wurde in /VTT 18/ festgestellt, dass der Transport von Cd durch die Anwesenheit von CsI-Aerosolen, die dem Cd-Dampf als Kondensationskeime dienen, sich erhöht. Allerdings wird in /IRS 13b/, einer Zusammenstellung der Veröffentlichungen zu den Phébus-Versuchen, darauf hingewiesen, dass im Versuch FPT2 (Versuch mit SIC-Steuerstab und weniger gasförmiger Iodfreisetzung als in FPT3 mit B₄C-Steuerstab) die gemessenen Temperaturen und Drücke an den Stellen der Iod-Anlagerungen nicht für die Anlagerungen von Cadmiumiodid oder Silberiodid sprechen. Die Untersuchung der Cs-Anlagerungen ergaben weiter, dass CsI nur teilweise in den Anlagerungen zu finden ist. Es wird vermutet, dass auch andere Iodverbindungen, wie FeI₂, BaI₂ oder SrI₂, für die Rückhaltung von Jod im Reaktorkühlkreislauf verantwortlich sein könnten.

Fazit

Die Iodchemie im Reaktorkühlkreislauf eines Kernkraftwerkes ist nach wie vor Gegenstand aktueller Forschungsanstrengungen. Die lang vertretene Annahme, Iod würde nahezu ausschließlich als CsI freigesetzt kann allenfalls als erste Näherung angesehen werden. Verschiedene Experimente legen nahe, dass sich einige Stoffe wie Silber oder Cadmium mit Iod verbinden und gasförmiges Iod verhindern. Andererseits kann Bor oder Molybdän des Reaktionspartner Cäsium binden, so dass die Bildung von CsI gehemmt wird, welches wiederum die Freisetzung gasförmigen Iods begünstigt. Daneben existieren Indizien, dass es sehr viele Verbindungen von Iod mit verschiedenen Reaktionspartnern geben kann.

2.2 Simulation der Iodchemie im Reaktorkühlkreislauf mit SAFT und FIPREM

Zur Aufbereitung des Standes von Wissenschaft und Technik ist die Betrachtung der bisherigen Arbeiten der GRS relevant. Insbesondere die Grundlagen der vorhandenen Computermodellierungen der ATHLET-CD (**A**nalyse der **T**hermohydraulik von **L**eckagen und **T**ransienten, **C**ore **D**egradation) und das Teilpaket SAFT (**S**imulation des **A**erosol- und Spalt-(engl. **F**ission-)produkt-**T**ransports), einer GRS-Weiterentwicklung von SOPHAEROS 2.0, und FIPREM (**F**ission **P**roduct **R**elease **M**odule – Modul zur Spaltproduktfreisetzung) sind diesbezüglich zu nennen. FIPREM berechnet die Freisetzung der elementaren Spaltprodukte aus dem Kern über ein Arrhenius-Ansatz mit element-spezifischen Aktivierungsenergien und einer proportionalen Abhängigkeit der Freisetzungsrates zum Verhältnis zwischen Partialdruck des betrachteten Elementes und dem Systemdruck, /GRS 04/. Die Modellparameter wurden durch Anpassung an experimentelle Daten (u. a. die VERCORS-Versuche und die beiden Versuche des VERDON-Programmes, /GRS 16a/, /GRS 14/ und /GRS 15/) festgelegt.

Die Freisetzungsrates r_i der Spezies $i \in \{\text{Cs, Cd, Mo, Ag}\}$ ist wie folgt implementiert /GRS 19/:

$$r_i = K_i T^3 \beta_i \cdot \frac{1}{p} \cdot e^{A_i - \frac{B_i}{T+C_i}} \quad (2.1)$$

In (2.1) sind K_i und β_i für Materialparameter und A_i , B_i , C_i sind Parameter, die sich auf den Dampfdruck beziehen. T und p stehen bekanntermaßen für die Temperatur und den Systemdruck.

Für I, Rb, Br ist folgende Freisetzungsrates vorgesehen:

$$r_i = r_{0,i} e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (2.2)$$

Hierbei steht Q für eine brennstoffabhängige Aktivierungsenergie und R für die Gaskonstante.

In Veröffentlichungen der Ergebnisse der VERCORS- und VERDON-Experimente wird die Flüchtigkeit der unterschiedlichen Radionuklide wie folgt klassifiziert (siehe z. B. /CEA 12/, /CEA 19/ und /JAE 15/).

Klasse 1 – sehr flüchtige Spaltprodukte: Edelgase (Xenon, Krypton), Iod, Cäsium, Rubidium, Tellur, Cadmium, Silber und Antimon. Es ist, nach /CEA 12/, mit einer Freisetzung nahezu des gesamten Inventars dieser Elemente zu rechnen, den größten Teil des Inventars sogar noch vor Eintritt der Schmelze.

Klasse 2 – weniger-flüchtige Spaltprodukte: Molybdän, Barium, Rhodium, Palladium und Technetium. Es konnten hohe Freisetzungsraten in den VERCORS-Versuchen festgestellt werden, allerdings sind diese beeinflusst durch die vorherrschenden atmosphärischen Bedingungen, den Fortschritt der Oxidation und dem Kernabbrand. So wird beispielsweise Molybdän in oxidierender Atmosphäre und bei fortgeschrittenem Kernabbrand schnell und in großen Mengen freigesetzt /CEA 19/, während Barium in reduzierender Atmosphäre schneller freigesetzt wird (Strontium und Ruthenium werden in /JAE 15/ als weniger-flüchtiges Spaltprodukt klassifiziert).

Klasse 3 – wenig-flüchtige Spaltprodukte: Ruthenium, Cerium, Strontium, Yttrium, Niob, Lanthan, Europium, Neptunium, Plutonium und Uran. Bei fortgeschrittenem Kernabbrand konnten Freisetzungen typischerweise um 15 % bis zu maximal 30 % des Inventars gemessen werden (Zirkonium wird in /JAE 15/ als wenig-flüchtiges Spaltprodukt klassifiziert).

Klasse 4 – nicht-flüchtige Spaltprodukte: Zirkonium, Neodym und Praseodym. In den VERCORS-Versuchen konnte keine messbare Freisetzung dieser Spaltprodukte festgestellt werden.

Entsprechend den experimentellen Ergebnissen wurden Korrekturfaktoren bezüglich der Dampfdrücke von Elementen aus Legierungen, den zeitlich ändernden Oxidationsgraden der Hüllrohre und der Brennelemente und dem Fortschritt des Abbrandes berücksichtigt /GRS 09/, /GRS 16a/. Die Spaltprodukte, Absorber-, Hüll- und Konstruktionsmaterialien¹, die mit FIPREM aus dem Kern freigesetzt werden, werden in elementarer

¹ Aus dem Kernbereich werden Teile des Spaltproduktinventars, des Kernbrennstoff (Urandiooxid), des Hüllmaterials (Zirkalloy) des Strukturmaterials (austenitische Stähle) und des Materials der Steuerstäbe (Silber, Cadmium und Indium) nach einem Kernschaden freigesetzt.

Form an SAFT im oberen Plenum übergeben, wobei die Nachzerfallsleistung der Spaltprodukte gemäß der Nodalisierung örtlich aufgelöst weiter von FIPISO gerechnet wird. In MELCOR kommt es zu einem analogen Zusammenspiel vom Radionuklid- (RN) und vom Paket für die Berechnung der Nachzerfallsleistung (DCH) (DCH → FIPISO, RN → SAFT). SAFT rechnet neben den 40 Elementen aus FIPREM noch mit weiteren 249 chemischen Verbindungen dieser Elemente. Die Mengenverteilung der einzelnen Elemente und Verbindungen im Kühlkreislauf wird über das Massenwirkungsgesetz gerechnet, so dass auch hier von einem Gleichgewichtszustand ausgegangen wird. Dieses Programmmodul benötigt eine möglichst lückenlose Datenbasis bezüglich aller temperatur- und verbindungsabhängigen Dampfdrücke und Massenwirkungskonstanten der Reaktionsgleichungen. SAFT sucht dabei die numerische Lösung eines großen Satzes von Differentialgleichungen. Neben dem Massenwirkungsgesetz rechnet SAFT den Transport und die Rückhaltung der Elemente und Verbindungen als Dampf, Gas, Aerosol, Flüssigkeit oder als abgelagerte Kondensate. Die Größe der Aerosole wird bei der Berechnung der Ablagerung und des Transportes berücksichtigt. Für die Ablagerung der Aerosole werden verschiedene physikalische Phänomene berücksichtigt, u. a. Thermo- und Diffusiophorese, turbulente Anlagerungen durch Aufschlag auf Strukturen, Diffusion und Sedimentierung. SAFT benötigt für die Rechnungen einen oder mehrere vordefinierte Austrittspfade aus dem Reaktorkühlkreislauf und führt die Berechnungen in diesen Volumenelementen durch. Die Berechnung des Transportes durch den Kernbereich ist derzeit mit SAFT leider noch nicht möglich. Die Nachzerfallsleistungen werden dabei im ATHLET-CD-Modul FIPISO berechnet und über die freigesetzten Radionuklide auf Strukturen, sowie das Kühlmittel als Dampf oder Flüssigkeit übertragen. Die benötigten Spaltproduktverteilungen im Kühlkreislauf liefert SAFT. Wichtige Einflussgrößen auf die Berechnungen sind bei FIPREM das Anfangskerninventar, die Temperaturen im Kern sowie der Druck im Reaktor. Für die Berechnungen in SAFT sind die Temperaturen im Reaktorkühlkreislauf (von Wänden und Wasserdampf), der Druck, die Strömungsgeschwindigkeiten, Strömungseingängen, die Volumen, die Größen der Strukturflächen und die eingebrachten Mengen der verschiedenen Spaltprodukte wichtige Einflussgrößen.

2.3 Simulation der Iodchemie mit dem Integralcode MELCOR

MELCOR berechnet über das RN-Paket (**R**adio **N**uclid) die Freisetzung und den Transport der Spaltprodukte, /SAN 17/. Bei einem Kernschaden werden die Radionuklide in

elementarer Form vom COR-Paket (**core**) aus dem Brennstoff an das RN Paket übergeben. Für die Freisetzung aus dem Kern stehen 3 Modelle zur Verfügung, 2 empirische Modelle, CORSOR und CORSOR-M, sowie das Diffusionsmodell CORSOR-Booth² (seit Version 2.1 mit neuen Parameterwerten nach ORNL-Booth), siehe /SAN 10/ und /SAN 17/. Darüber hinaus ist in MELCOR eine Emission sehr flüchtiger Gase aus dem Spalt zwischen Brennstoffpellet und Hüllrohr implementiert. Diese Gase werden beim Hüllrohrversagen instantan freigesetzt. Einige Effekte können allerdings mit den implementierten Freisetzungsmodellen nicht abgedeckt werden, z. B. wird die Freisetzung von Cs bei hohem Druck unterdrückt /JAE 15/. Hier würde das sogenannte CORSOR-P Modell bessere Ergebnisse zeigen. Ein solches ist in MELCOR derzeit nicht verfügbar.

Das RN-Paket teilt die aus dem Kern freigesetzten Elemente in 17 Stoffklassen ähnlicher physikalischer bzw. chemischer Eigenschaften (teilweise eingeteilt in die chemischen Hauptgruppen) ein. Durch chemische Reaktionen können die Elemente (z. B. Cs in Klasse 2 und I in Klasse 4) die Klasse wechseln (zu CsI in Klasse 16), welches vom Anwender vorgegeben und nicht mechanistisch berechnet wird. Entsprechend der Stoffklasse ergeben sich die Kondensations- und Verdampfungsraten der Radionuklide an Aerosolen. Der Transport der Aerosole (und damit der Spaltprodukte) durch den RKL berücksichtigt weitere physikalische Effekte, hierzu gehören, /GRS 20/:

- Gravitatives Absetzen: Dieser Prozess besteht schlicht im schwerkraftbedingten Niederrieseln von Aerosolen.
- Thermophorese: Hierbei handelt es sich um einen Prozess, der der Brown'schen Bewegung ähnelt, wobei sich Aerosole in kühleren Bereichen ansammeln.
- Diffusiophorese: Im Falle dieses Effektes handelt es sich um eine Ablagerung, die durch Kondensation von Wasserdampf auf Strukturen induziert wird.
- Turbulente Ablagerung: Im Falle von hohen Reynolds-Zahlen kann es zu einer Ablagerung aus der Strömung von Aerosolen kommen, wobei drei Effekte unterschieden werden, die abhängig von der Teilchengröße sind. Die kleinsten Teilchen wer-

² Das CORSOR-Booth Modell rechnet die Freisetzung aus dem Kern über ein Diffusionsmodell über das Ficksche Gesetz. In MELCOR wird bei Aktivierung dieses Modells die Freisetzung von Cs explizit gerechnet und die Freisetzungsraten für andere Elementklassen über Skalierungsfaktoren bestimmt, die von den Kerntemperaturen abhängen können. Auch der Fortschritt des Abbrandes und der Hüllrohroxidation werden bei der Bestimmung der Skalierungsfaktoren berücksichtigt.

den durch Brown'sche Bewegung in Richtung Struktur transportiert. Größere Teilchen werden durch Wirbel im Kern (im Rohr beispielsweise) beschleunigt und gleiten durch die Pufferschicht und die viskose Schicht an der Oberfläche der Struktur. Im Falle der Aerosole in der größten Größenklasse ist eine geringe Beschleunigung im Kern zu verzeichnen, jedoch eine deutlich kleinere oder gar keine durch kleine Wirbel in Oberflächennähe. Somit werden diese Aerosole durch ihre Trägheit an die Strukturoberfläche getragen.

Ferner werden Aerosole oder Dämpfe durch Strömungspfade transportiert und können durch Filter zurückgehalten werden, falls solche modelliert sind. Es wird dabei mit zeitabhängigen Größenverteilungen mit unterschiedlichen chemischen Verteilungen der Aerosol Schwebeteilchen gerechnet, da es neben einer Agglomeration auch zu einer Kondensation von Wasser an Aerosolen kommen kann.

Iod wird derzeit in MELCOR lediglich in der Verbindung CsI freigesetzt. Die Iodklasse 4 wird mit gasförmigem Iod gefüllt, das sich durch den Prozess der Chemisorption bildet. Chemisorption ist ein Prozess der Anlagerung (Adsorption), der chemischen Umwandlung durch Reaktionen mit dem Substrat und einer Wiederfreisetzung. Derzeit wird in MELCOR eine Chemisorption lediglich an Strukturen aus einigen Materialien berechnet, die in MELCOR hinterlegt sind (rostfreier Stahl, Zirkalloy). Viele Strukturen im SHB des MELCOR-Eingabedatensatzes bestehen aus Materialien, die eigens für deutsche Anlagen definiert wurden. Entsprechend kann gasförmiges Iod lediglich im RKL oder an den Druckspeichern (DS) gebildet werden.

Im RN Paket können zeitabhängige Aerosol Quellen und Senken in beliebigen Kontrollvolumina definiert werden. Diese Eigenschaft MELCORs führt zu der Möglichkeit, das Ergebnis der Iodchemie in MELCOR zu „entfernen“ (RN-Senke) und durch ein anderes, in diesem Falle von ATHLET-CD, zu ersetzen (RN-Quelle). Eine Quelle oder Senke für auf Strukturen abgelagerte Radionuklide ist nicht möglich, welches in der Übertragung von ATHLET-CD-Ergebnissen in MELCOR berücksichtigt zu werden hat.

3 Nutzbarmachung vorhandener Computermodelle für MELCOR (AP 2)

3.1 Prinzipielles Vorgehen

Für die Verwendung der in ATHLET-CD gegebenen Modelle in MELCOR sind zwei wesentliche Umsetzungen zu unterscheiden.

Zum einen sollen die in ATHLET-CD gegebenen Modelle möglichst direkt in MELCOR umgesetzt werden. Hierbei ist eine lose Kopplung beider Codes vorgesehen, die darin besteht, dass eine ATHLET-CD-Rechnung durchgeführt wird, deren Ergebnisse hinsichtlich der Iodchemie in Tabellen eingetragen werden. Diese Tabellen können dann in MELCOR dergestalt verwendet werden, als dass sie die RN-Senken und Quellen mit einer Vernichtungs- und Erzeugungsrate bedienen. Um dieses Vorgehen zu bewerkstelligen ist sicherzustellen, dass die thermohydraulischen Bedingungen in ATHLET-CD und MELCOR möglichst ähnlich sind. Für eine genauere Planung der Tätigkeiten siehe Kapitel 3.4.

Die zweite Umsetzung gleicht einem empirischen Vorgehen. Hierbei sollen Rechnungen mit ATHLET-CD unter Variationen der wesentlichen Einflussfaktoren durchgeführt werden. Die Variation soll dabei möglichst mehrere Szenarien abdecken. Die Einflussfaktoren sind zunächst zu eruieren. Die Ergebnisse der Iodchemie werden anschließend in Streudiagrammen in Abhängigkeit von den variierten Parametern dargestellt, so dass Korrelationen erkannt werden können, sollten solche vorhanden sein. Diese Korrelationen können dann mittels Tabellenfunktionen in MELCOR eingebracht werden. Dies ist das präferierte Vorgehen, da MELCOR häufig einfache Korrelationen verwendet und weniger mechanistisch rechnet.

Es hat sich im Lauf des Vorhabens jedoch herausgestellt, dass die Verwendung von RN-Senken, wie sie für beide Umsetzungen geplant waren, zu numerischen Schwierigkeiten führt und nicht praktikabel ist. Stattdessen wird auf ein Übersteuern der Ergebnisse in MELCOR komplett verzichtet. Für die vereinfachte direkte Umsetzung ist ein alternatives Vorgehen entwickelt worden, in dem die Freisetzung iodrelevanter Elemente aus dem Kern in dem Maße verringert wird, welche als Quelle über das Tabellenwerk aus der ATHLET-CD-Rechnung eingetragen wird. Eine solches iodrelevantes Element ist aus

seiner Elementklasse, in das es in MELCOR eingruppiert ist, herauszulösen und als eigenständige Klasse zu definieren. Ferner ist die Nachzerfallsleistung des Anteils, der nicht freigesetzt wird und im Brennstoff zurückbleibt, entsprechend so zu korrigieren, als wäre das Element freigesetzt.

Im Falle der vereinfachten phänomenologischen Umsetzung wird das Ergebnis aus MELCOR schlicht ignoriert und nur die Quellen und deren Umgang seitens MELCOR betrachtet. Dies hat den Vorteil, dass ohne Korrektur, kein Bilanzfehler in der Nachzerfallsleistung entsteht und dennoch auf Senken verzichtet werden kann. Ausführungen hierzu finden sich unter Kapitel 3.1.3.

Ein Verzicht auf das explizite Übersteuern der MELCOR-Ergebnisse impliziert ebenfalls, dass eine genaue Abbildung der Iodchemie innerhalb des Reaktorkühlkreislaufes nicht möglich ist. Ferner ist sie ebenfalls nicht erforderlich, da für die relevante Quelltermbestimmung lediglich der Austrag aus dem Reaktorkühlkreislauf notwendig ist, so dass eben diese in MELCOR eingegeben wird.

Des Weiteren haben vorläufige Ergebnisse und Überlegungen ebenfalls nahegelegt, dass eine Aufteilung der Variation in zwei Gruppen sinnvoll ist, so dass präzisere Variationsergebnisse erwartet werden können. Die Gruppen bestehen dabei aus solchen, die sich einerseits durch ihre Eigenschaften auszeichnen, die dem Station Blackout ähneln („SBO“) und andererseits solche, die durch einen Kühlmittelverlust („KMV“) charakterisiert sind. Ausführungen hierzu finden sich unter Kapitel 3.4.

Für beiden Arten der Umsetzung sind die in MELCOR einzutragenden Spezies zu definieren. Für ein Herauslösen iodrelevanter Elemente sind eben diese und die Restklassen als weitere Elemente bzw. Klassen zu definieren, wie es für die direkte Umsetzung erforderlich ist. Entsprechende Ausführungen zu der Definition finden sich unter Kapitel 3.1.3.

Um eine gewisse Gleichheit der Simulationen in MELCOR und ATHLET-CD zu gewährleisten, ist es ursprünglich angedacht gewesen, die Inventare in ATHLET-CD an jene in MELCOR anzupassen, die auf präzisen Rechnungen des 21. Zyklusses der KONVOI-Referenzanlage basieren. Unter dem Kontrollwort ‚FIPREM‘ ist es prinzipiell möglich, Elementmassen und deren spezifische Nachzerfallsleistung einzutragen, wobei sich diese Leistung auf die Schwermetallmasse bezieht und nicht, so wie in MELCOR, auf die jeweilige Elementmasse. Ein der Eingabe in MELCOR entsprechendes Tabellenwerk

mit Neugruppierung für den reduzierten Satz an möglichen Elementen in ATHLET-CD und Renormierung für die Gesamtnachzerfallsleistung ist vollständig in einen ATHLET-CD-Eingabedatensatz eingetragen worden. Bedauerlicherweise hat das Programm die Eingabe zwar formal angenommen, eine Simulation war jedoch nicht möglich auch nach Fehlerbehebungsmaßnahmen nach Empfehlung der Entwickler. Da dies nun derart nicht möglich war und eine Variation der Inventare zumindest in der vereinfachten Umsetzung ohnehin vorgesehen war, ist entschieden worden, die Inventare nicht anzupassen und stattdessen die Austräge an Iodspezies auf das vorhandene Kerninventar zu beziehen, so dass die nachstehende Definition im Folgenden von Relevanz ist:

$$a_{\text{I aus } i} = \frac{1}{m_{\text{I Kern}}} \frac{n_i M_i}{\sum_j n_j M_j} m_i \quad (3.1)$$

In (3.1) steht der Index i für die Iodspezies, j für das Element, das in der Spezies vorhanden ist, n_j für die jeweiligen Stöchiometriefaktoren und M_j für die molaren Massen der Elemente j . $m_{\text{I Kern}}$ ist das Kerninventar an Iod und m_i ist die Masse der Iodspezies i . Im Folgenden soll der Anteil des Iods an der Spezies bezogen auf das Kerninventar statt mit $a_{\text{I aus } i}$ schlicht mit a_i bezeichnet werden, also gilt der Übergang $a_{\text{I aus } i} \rightarrow a_i$.

Für eine Umsetzung ist es zunächst sinnvoll, das Programm ATHLET-CD zu analysieren, um die Einflussfaktoren zu eruieren. Ferner ist der Eingabedatensatz auf die hier vorliegende Aufgabe anzupassen und ohnehin auf den aktuellen Stand der Entwicklung zu bringen, welches unter Kapitel 3.1.1 beschrieben ist.

In den Abbildungen Abb. 3.1 und Abb. 3.2 sei das prinzipielle Vorgehen ein wenig veranschaulicht. In Abb. 3.1 ist der Bezug das vereinfachte phänomenologische Vorgehen für den SBO als Beispiel. Hier ist die Austragsrate für CsI (Beispiel) gezeigt, der Gesamt-austrag, die Temperatur im oberen Plenum in MELCOR und die gemittelte Temperatur. Der Austrag beginnt mit dem Austrag, wie er von MELCOR nach $t_p = 1.373,3$ s berechnet wird. Bereits zuvor wird die Mittelung eingeschaltet, wenn in etwa die DH-Ventile ansprechen (über Temperaturwert getriggert). Der Austrag orientiert sich gemäß Korrelation an der gemittelten Temperatur, die die Fluktuationen der tatsächlichen effektiv einleitet. Nach Versagen des RDB nach $t_p = 35.967,8$ s soll der Austrag enden, jedoch ist die Rate über die Zeitdifferenz zwischen Freisetzungsbeginn und RDB-Versagen berechnet. Der Freisetzungsbeginn kann direkt erfasst werden in der Rechnung, für das

RDB-Versagen wird eine alte Rechnung verwendet. Ferner wird die gemittelte Temperatur stets nachgefahren und ist tendenziell steigend. Dies bedeutet, dass erst am Ende die ursprünglich für die Ermittlung der Korrelation verwendete gemittelte Temperatur anliegt. Dies führt zu einer zu geringen Austragsrate, so dass bei RDB-Versagen der Rest schnell ausgetragen werden muss. Dies geschieht mittels I-Reglern, um numerische Instabilitäten zu vermeiden, die möglicherweise bei einem Eintrag innerhalb eines Zeitschrittes entstehen würden. Für weitere Ausführungen siehe Kapitel 3.3.4.

In Abb. 3.2 ist der Bezug die vereinfachte direkte Umsetzung im SBO-Szenario als Beispiel. Hier beginnt der Radionuklidaustrag – ebenfalls von CsI (Beispiel) – mit Beginn der Freisetzung nach $t_p = 13.774,1$ s wie es in MELCOR berechnet ist. Die eingegebenen Tabellen ATHLET-CD-Vorrechnung beginnen bei der Freisetzung in AC2, so dass keine weitere Korrektur hierfür stattzufinden hat. Die Tabellen repräsentieren eine Stufenfunktion, welches eine einfache Erhaltung des Integrals in der zu Grunde liegenden Rechnung ermöglichte. Die Freisetzung endet mit dem Zeitpunkt, der durch das RDB-Versagen in der ATHLET-CD-Vorrechnung vorgegeben wird (nach $t_p = 23.073$ s). Eine Korrektur der ausgetragenen Menge wie in der phänomenologischen Umsetzung ist aufgrund der direkten Übernahme der ATHLET-CD-Ergebnisse nicht notwendig. Eine Skalierung der Rate auf den entsprechenden MELCOR-Zeitintervall zwischen Austragsbeginn und RDB-Versagen hat nicht stattgefunden, ist jedoch auch aufgrund der Unkenntnis des RDB-Versagens in MELCOR im Voraus nicht präzise möglich.

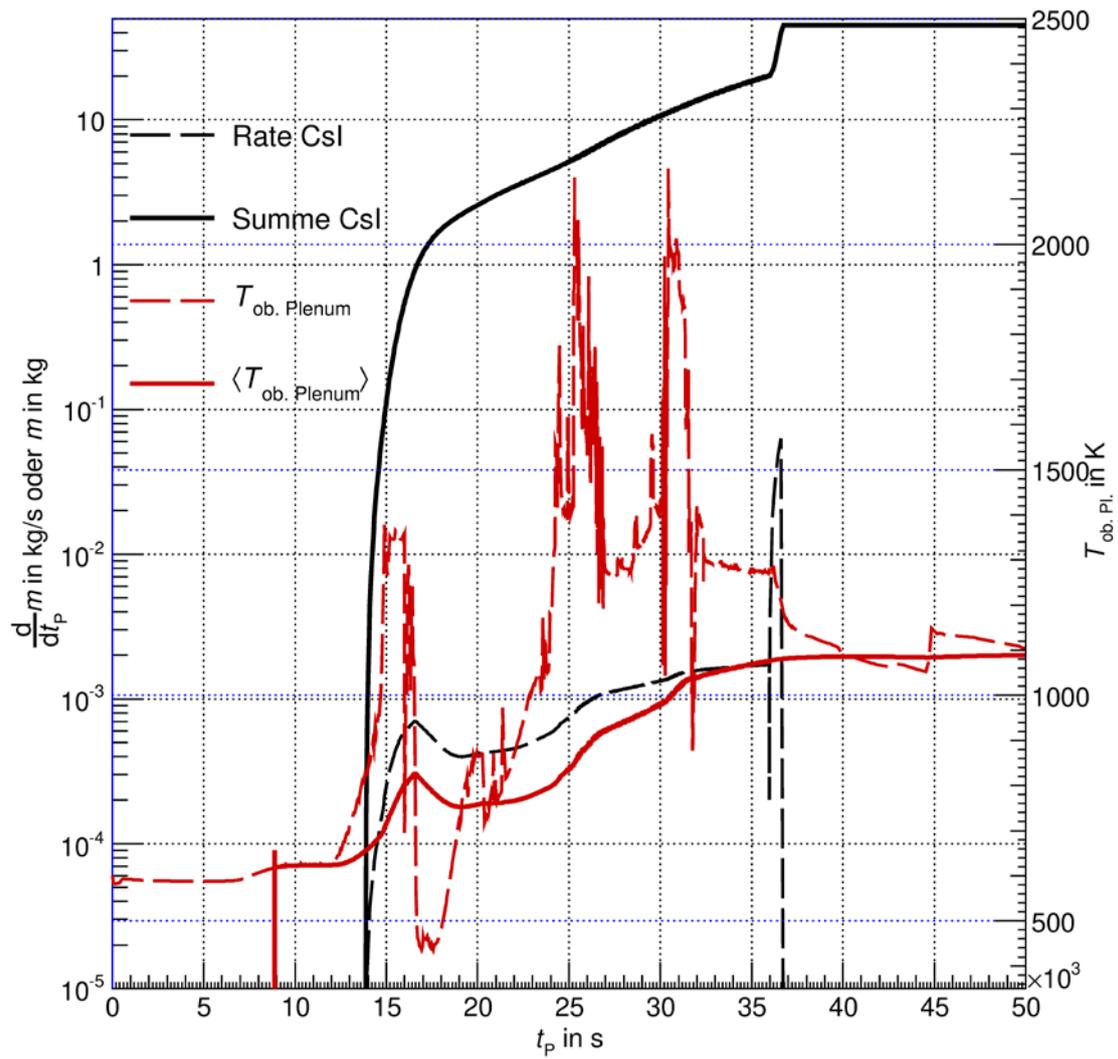


Abb. 3.1 Austragsrate, Gesamtaustrag von CsI, Temperatur im oberen Plenum und gemittelter Wert dieser Größe im SBO-Szenario, vereinfachte phänomenologische Umsetzung

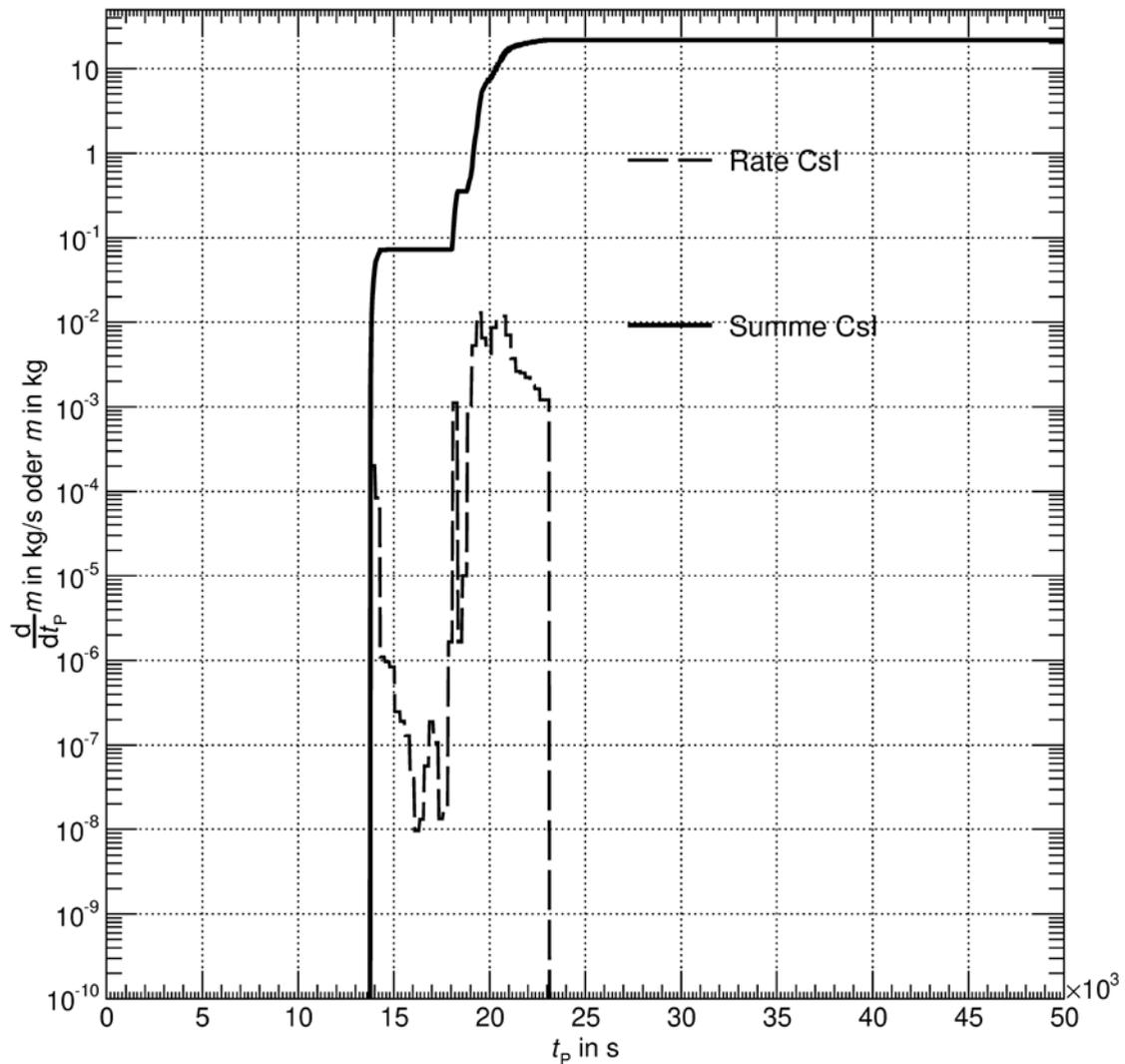


Abb. 3.2 Austragsrate und Gesamtaustrag von CsI im SBO-Szenario, vereinfachte direkte Umsetzung

3.1.1 Analytische bzw. empirische Untersuchung der in ATHLET-CD gegebenen Iod-Modelle

Als Grundlage der Analysen zur Iodfreisetzung aus dem RKL dienen als Testsimulation zwei Sequenzen innerhalb eines Station Black Out (SBO) Szenarios und eine Sequenz eines kleinen Leck Szenarios eines Kernkraftwerkes mit Druckwasserreaktor vom Typ Konvoi. Diese drei Szenarien decken einen möglichst breiten Wertebereich der Einwirkungsparameter ab, ein Kernschadenzustand tritt im Laufe der Rechnung ein und ein wesentlicher Teil der Radionuklide wird aus dem Kern freigesetzt. Das Szenario SBO-

LP berücksichtigt ein Teilabfahren der Dampferzeuger und die Einspeisung des Druckspeicherinventars in die Heißleitungen der Kühlmittelschleifen. Die schnellere Hochdrucksequenz SBO-HP und die Sequenz nach einem kleinen Leck SBLOCA berücksichtigen keine primärseitige Druckentlastung und keine sekundärseitige Dampferzeugerwiederbespeisung. Die wichtigsten Zeitpunkte im Sequenzverlauf sind in Tab. 3.1 gezeigt. Die Rechnungen sind teilweise mit einer aktuellen AC2-Version vom September 2020 (SBO-LP und SBLOCA) und mit einer älteren AC2-Zwischenversion vom Januar 2020 (SBO-HP) gerechnet. Die Ergebnisse befinden sich in den Abschnitten 3.1.1.1, 3.1.1.2 und 3.1.1.3. Es ist angedacht, die Rechnungen mit einem neuen AC2-Release zu wiederholen.

Tab. 3.1 Gerechnete Unfallsequenzen in einem generischen DWR, angegeben sind die wichtigsten Zeitpunkte im Verlauf der Unfälle

Sequenz		SBO-LP	SBO-HP	SBLOCA
Abweichung zum beherrschten Störfall		Beide Notstromschienen un verfügbar	Beide Notstromschienen un verfügbar, primärseitige Druckentlastung un verfügbar, sekundärseitige Druckentlastung und Bespeisung wird nicht durchgeführt	Ausfall DE-Bespeisung, keine primärseitige Druckentlastung, sekundärseitige Druckentlastung und Bespeisung wird nicht durchgeführt
Sequenzablauf, Zeitpunkte	Verlust der Kernüberdeckung	460 min	130 min, erneut nach 230 min	475 min
	Hüllrohrversagen	480 min	160 min	525 min
	Schmelzeverlagerung ins untere Plenum	660 min	290 min	545 min
	RDB-Versagen, vollständiger Druckausgleich RKL – Containment	770 min über Abblaseventil (RDB-Versagen > 1.170 min)	170 min (Kriechversagen Volumenausgleichsleitung), 340 min (RDB-Versagen)	580 min (RDB-Versagen und Kriechversagen im heißen Bein, 585 min)

Parameter mit Wirkung auf die Iodchemie im RKL in ATHLET-CD

Als Einflussfaktoren auf die Iodchemie im RKL wurden folgende Parameter in den Testrechnungen im Sequenzablauf analysiert:

- Kernfreisetzungsrelevante Parameter für FIPREM: Kerninventar, Kerntemperaturen, Druck im RKL und der Zustand der Hüllrohre und des Kernbrennstoffs
- Bestimmung des chemischen Gleichgewichtes mit SAFT: Dampftemperaturen hauptsächlich im oberen Plenum und bei hohen Temperaturen im heißen Bein ist eine Anpassung des chemischen Gleichgewichtes möglich, Kernfreisetzungsraten der Elemente und vorhandene Mengen an Radionukliden in der Dampfphase. Kondensierte Elemente und Verbindungen (auch Aerosole) sind chemisch stabil. Die Reaktionskinetik wird bei der Entstehung der Verbindungen nicht berücksichtigt.
- Transportparameter für SAFT: Dampf- und Wandtemperaturen, Strömungsgeschwindigkeiten im SAFT-Austrittspfad und die Wasserdampfmasse im RKL
- Spezifische Aerosolparameter zur Berechnung der Rückhaltung von Aerosolen: Molekülmasse, gesättigte Dampfdichte, latente Wärme und der mittlere Wärmeübergangskoeffizient, sowie die Nachzerfallsleistung der gebundenen Elemente

Die Parameter ergeben sich aus den Grundlagen der Rechenmodule SAFT und FIPREM, Abschnitt 2.2. Die Thermophorese, Sedimentation und die turbulenten Ablagerungen an Rohrverengungen oder Rohrkrümmern konnten als wichtigste Aerosolrückhaltemechanismen in den Rechnungen identifiziert werden. Das Anfangsinventar zu Beginn der Rechnung mit allen iodrelevanten Elementen ist in Tab. 3.2 gezeigt. Die wichtigsten Verbindungen für die Iodchemie und die überwiegend vorliegenden Aggregatzustände (g: gas- oder dampfförmig, ae: als Aerosol) sind mit angegeben.

Tab. 3.2 Anfangsinventar aus Abbrandrechnung für die Iodchemie betreffende Elemente

Element	Kerninventar in kg	Steuerstäbe in kg	Verbindungen in SAFT
I	22,7		HI (g), I ₂ (g)
Cs	284		CsI (ae, g), Cs ₂ I ₂ (ae, g), CsOH (ae)
Ag	7,3	2.040	AgI (g), Ag ₂ (ae), Ag ₂ Se (ae), Ag (ae)
Mo	328,4		Cs ₂ MoO ₄ (ae), Rb ₂ MoO ₄ (ae, g), MoO ₂ I ₂ (g)
Cd	10,9	127,5	CdI ₂ (g, ae), CdO ₂ H ₂ (ae, g), Cd (ae)
Rb	35,8		RbOH (g), RbI (g, ae), Rb ₂ I ₂ (ae, g), Rb ₂ O ₂ H ₂ (ae, g)
Br	2,1		Br ₂ Rb ₂ (ae, g), BrCs (ae, g), Br ₂ Cs ₂ (ae, g)
Ba	147		BaI ₂ (ae)

Weitere Elemente können die Iodchemie auch indirekt über deren Nachzerfallsleistung beeinflussen. Die wichtigsten Strahlungsquellen mit hoher Nachzerfallsleistung sind u. a. Xe, Kr, Tc und Sb.

3.1.1.1 Testrechnungen: SBLOCA

Nach Erscheinen des kleinen Lecks (20 cm² Ausströmfläche) im heißen Bein der Kühlmittelschleife 20 (jene mit Druckhalter) fällt der Druck im primären RKL innerhalb von 90 min auf 75 bar ab. Gleichzeitig fallen die Füllstände im Dampferzeuger. Eine Einspeisung in den RKL erfolgt über die Sicherheitseinspeisepumpen bis die Flutbehälter nach 190 min entleert sind. Danach fällt der Druck innerhalb von 25 min auf unter 10 bar ab und die heißseitigen Druckspeicher übernehmen die Einspeisung in den RKL. Nach 280 min sind die Druckspeicher leer und nach 300 min die Dampferzeuger. Mit dem Wegfall der Dampferzeuger als Hauptwärmesenke steigt der Druck im primären RKL durch Verdampfung an. Nach 475 min erfolgt die Kernfreilegung, nach 525 min kommt es zum ersten Hüllrohrversagen in einem der vier Kernbereiche, so dass die Radionuklidfreisetzung aus dem Kern beginnt. Die Oxidation der Hüllrohre führt zu einer beschleunigten Kernzerstörung mit einem Beginn der Schmelzeverlagerung ins untere Plenum nach weiteren 20 min. Nach 580 min versagt der RDB und direkt im Anschluss das heiße Bein. Die Bedingungen im Kern, RDB und RKL in der Zeit zwischen dem ersten Hüllrohrversagen und dem Druckausgleich mit dem Containment nach RDB-Versagen sollen nun weiter untersucht werden, um den Wertebereich der Einwirkungsparameter auf die Iodchemie genauer zu charakterisieren.

Der Druckverlauf im RKL ist in Abb. 3.3 gezeigt. Die Transiente ist in der Abbildung durch 3 schwarze senkrechte Linien in 4 Zeitbereiche unterteilt. In der Vorlaufphase bis 525 min ist der Kern noch intakt, nach 545 min verlagert sich der Kern ins untere Plenum und nach 580 min tritt ein Druckausgleich mit dem Containment ein aufgrund des RDB-Versagens (kurze Zeit später kommt es zu einem Versagen der Hauptkühlmitteleitung, was durch das Larson-Miller-Kriterium angezeigt ist). Dieser Vorgang, der nach 590 min noch nicht abgeschlossen ist, soll aber auch nur bis zu dem Zeitpunkt von 590 min analysiert werden. Das Modul SAFT kann aktuell noch keinen Kerndurchtritt der Spaltprodukte rechnen, weshalb spätere Zeiten für die Analyse entfallen sollen.

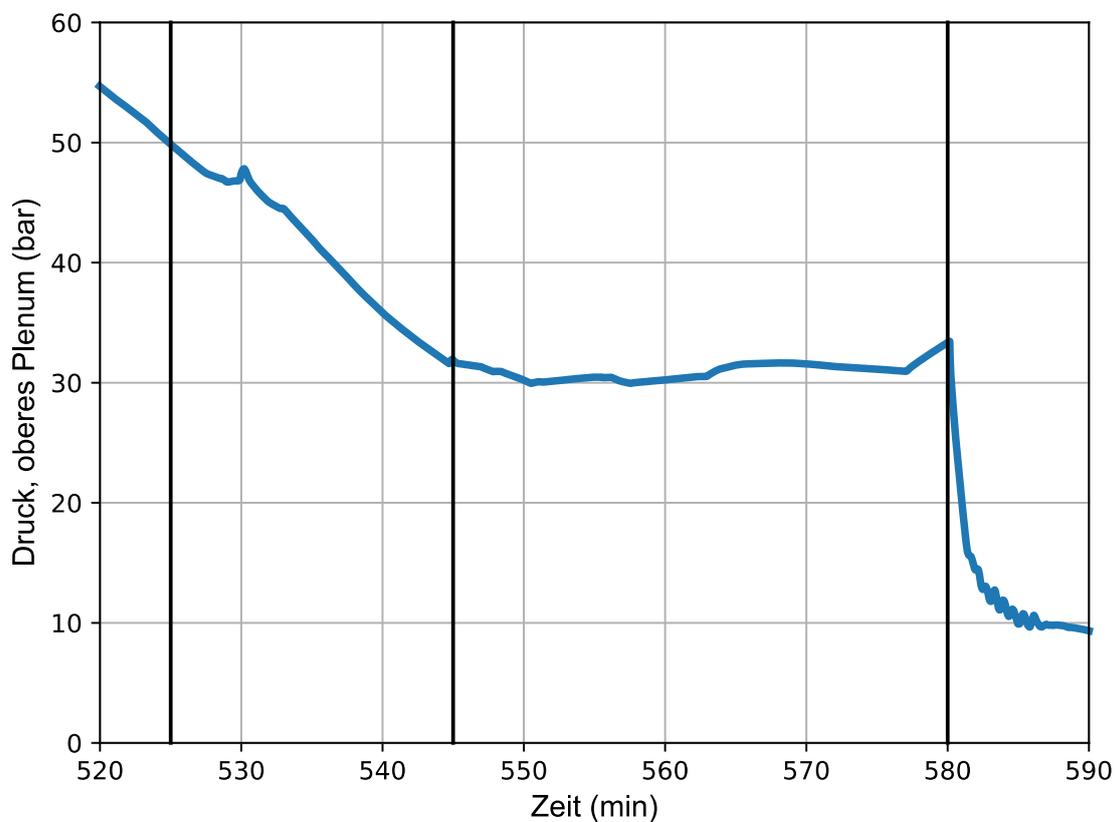


Abb. 3.3 Druck im RKL im Störfallablauf der SBLOCA-Sequenz

Die Temperaturen entlang des SAFT-Austrittspfades, der vom oberen Plenum über das heiße Bein zum kleinen Leck reicht, variieren. Die Kernaustrittstemperaturen liegen über Spaltproduktfreisetzungszeit zwischen 525 min und 580 min bei über 1.000 °C, wie in Abb. 3.4 gezeigt. SAFT geht dabei vereinfachend von einem elementaren Übertritt der freigesetzten Spaltprodukte vom Kern ins obere Plenum aus. Die Spaltproduktfreisetzungsraten aus dem Kern werden in Abb. 3.5 präsentiert.

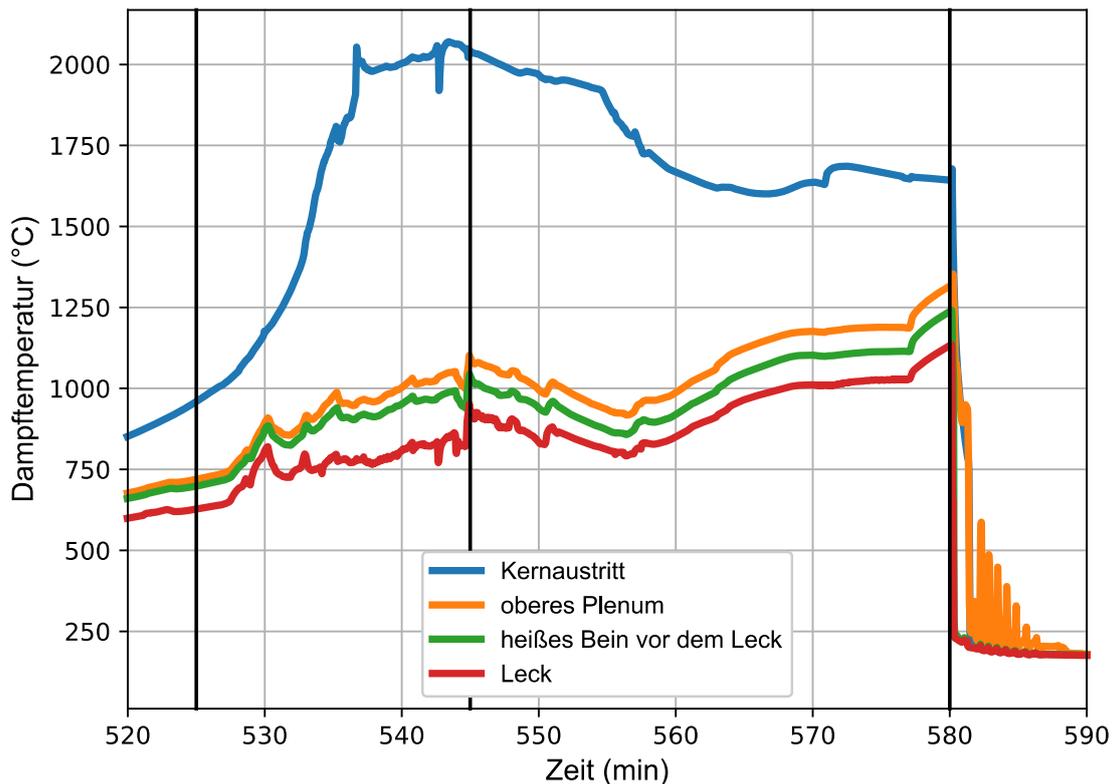


Abb. 3.4 Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfad

Bei Temperaturen um die 1000 °C im oberen Plenum errechnet SAFT das chemische Gleichgewicht der unterschiedlichen Elemente und deren möglichen chemischen Verbindungen. SAFT rechnet das chemische Gleichgewicht dabei in den Gas- und Dampfphasen. Entsprechend der Temperaturbedingungen und Freisetzungsraten, die teilweise druckabhängig sind, ergeben sich die Gleichgewichtsdampfmassen aus Abb. 3.6 im chemischen Gleichgewicht. Die gezeigten Elementmassen (über ‚ges‘ angedeutet) setzen sich dabei aus den Teilmassen aus Verbindungen zu anderen Elementen und einem möglichen ungebundenen Anteil zusammen (z. B. wird das I aus CsI auch in ‚I ges‘ mitgezählt. Das anfänglich in großen Mengen vorliegende Rb und zu Teilen auch das vorliegende Cs verbinden sich mit dem Iod, sodass sich weder HI noch I₂ in der Anfangsphase bilden. Nach etwa 565 min sinkt die Freisetzungsrate für Rb, das mit einem Gesamtinventar von 36 kg schon fast komplett freigesetzt ist, ab (Abb. 3.5). Zusätzlich dazu tritt Mo verstärkt in der Gasphase auf und bindet Teile des Cs und Rb (Abb. 3.6) zu Cäsium- und Rubidiummolybdat. Ein kleiner Teil des Iods verbleibt nach 575 min in der Gasphase ohne Bindungspartner Cs oder Rb und bildet gasförmiges HI in geringen Mengen, was in der Darstellung in Abb. 3.6 zu sehen ist. Das Versagen des RDB nach 580 min verhindert in dieser Rechnung die weitere Erzeugung gasförmigen Iods, was

jedoch mit einer großen Unsicherheit über den genauen Zeitpunkt des RDB-Versagens zusammenhängt.

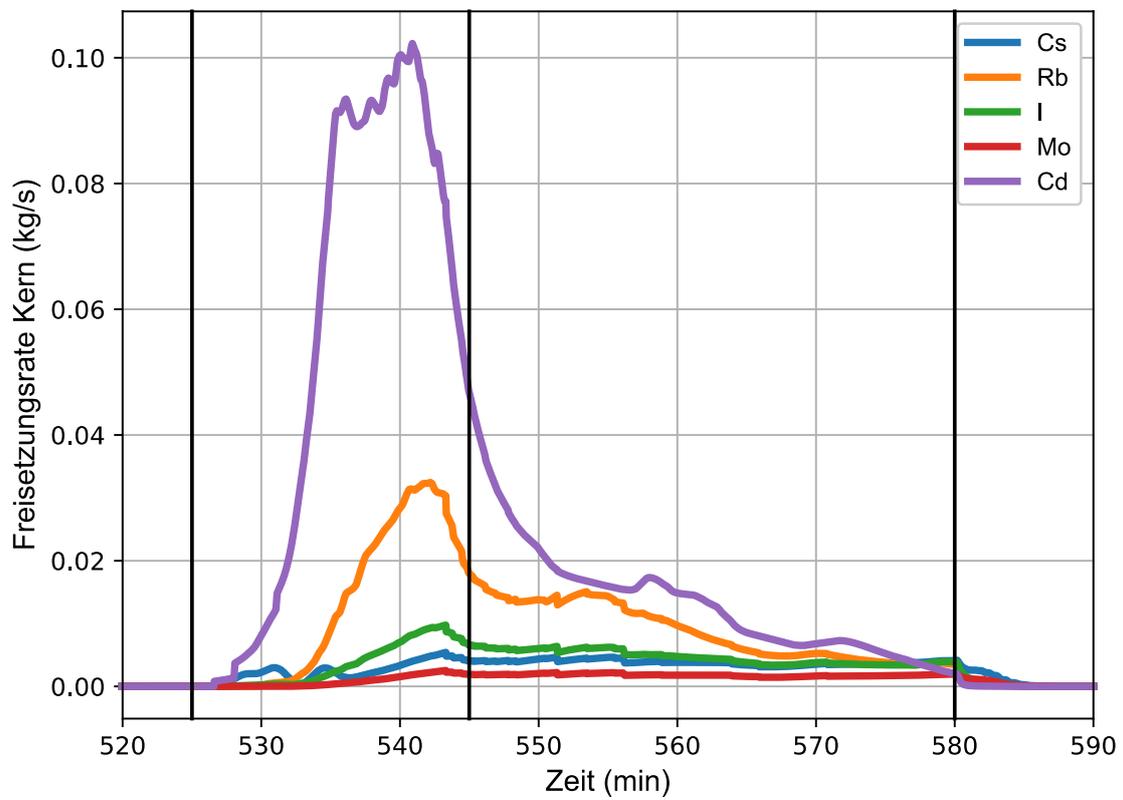


Abb. 3.5 Kernfreisetzungsrates von Iod und möglicher Verbindungspartner

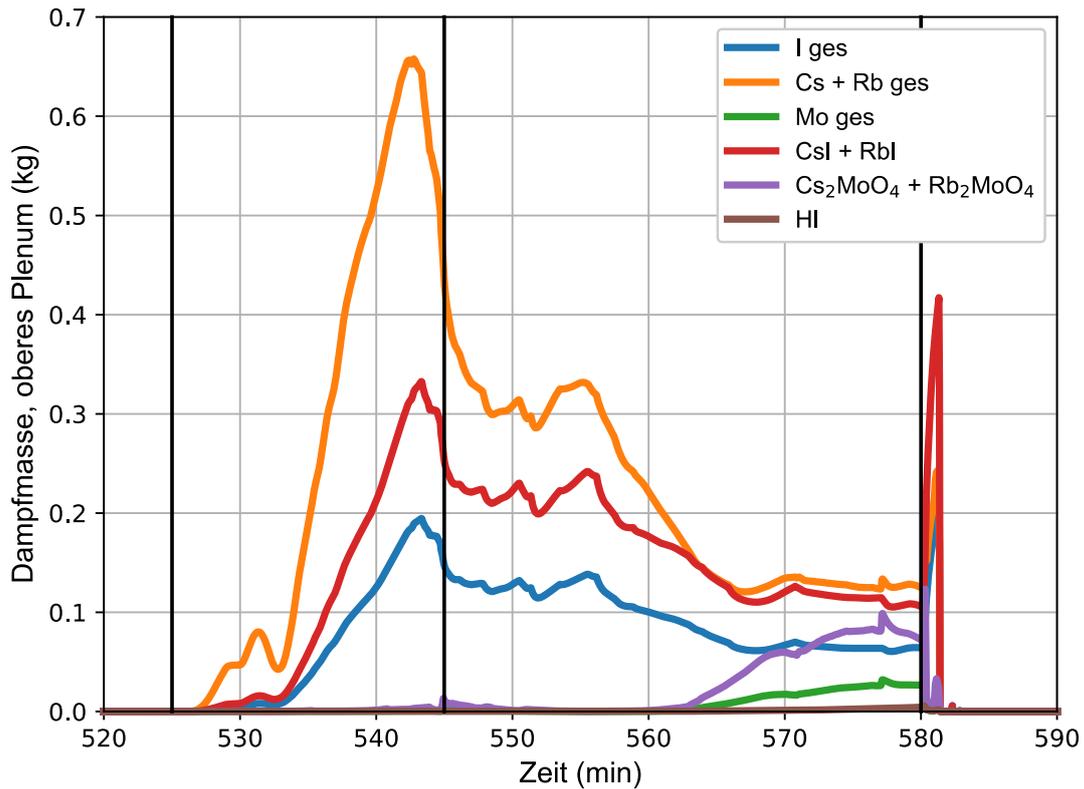


Abb. 3.6 Dampfmassen im oberen Plenum

Die Dampftemperaturen im SAFT-Austrittspfad sind mit ca. 500 °C, Abb. 3.4, hoch genug, um einen dampfförmigen Austritt der Spaltproduktverbindungen zu ermöglichen, Abb. 3.7. Erst nach Versagen des RDB tritt noch eine kleine Menge Csl als Aerosol aus dem kleinen Leck aus. Die Austrittsmenge HI beläuft sich in der Rechnung auf 16 g, was allerdings, wie bereits oben angedeutet, wahrscheinlich stark vom Zeitpunkt des RDB-Versagens abhängt. Der Gesamtaustrag von Iod aus dem kleinen Leck von 12,6 kg der anfänglichen 22,7 kg im Kern (55,5 %) wird hauptsächlich von dampfförmigem Csl und Rbl bzw. Rb_2I_2 getragen.

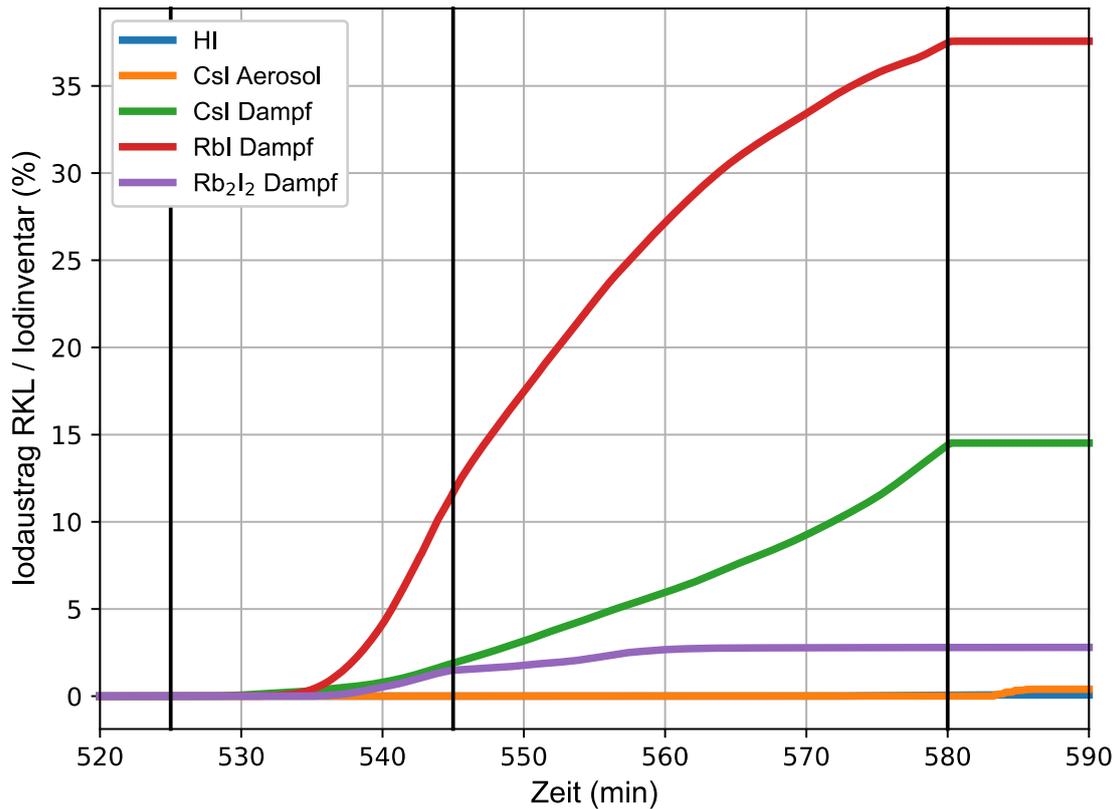


Abb. 3.7 Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar von Iod (24,7 kg) bezogen

3.1.1.2 Testrechnungen: SBO-LP

Nach Ausfall aller externen Stromversorgungen und aller Dieseldgeneratoren (D1 und D2) können die Dampferzeuger nicht bespeist werden. Infolgedessen sind die Dampferzeugerfüllstände nach 70 min auf 3 m abgesunken, welches in etwa dem Vorbereitungssignal für die sekundärseitige Druckentlastung und Bespeisung (SDE) darstellt. Eingeleitet wird diese bei mehrfachem Ansprechen des DH-Abblaseventils oder einer $KMT_{AUS} > 310 \text{ °C}$ oder einem DH-Füllstand von $> 9,5 \text{ m /GKN 19a/}$. Die Bespeisung nach Einleitung der Druckentlastung erfolgt passiv aus dem Speisewasserbehälter, der zuvor über die DE aufgeladen worden ist, bzw. über die Speisewasser (SpW)-Leitungen. In Folge der passiven Bespeisung und der damit wieder verfügbaren sekundären Wärmesenke, sinkt der Druck im Primärkreis ab und nach 190 min beginnt eine erste Phase der Bespeisung des Primärkreises über die heißseitigen Druckspeicher. Nach 225 min ist der Füllstand bzw. der Druck im Speisewasserbehälter so weit abgesunken, dass die Dampferzeuger als Wärmesenke ausfallen und der Druck im Primärkreis bis zum Ansprechen

des Abblaseventils bei 166 bar wieder ansteigt. Nach 450 min wird die primärseitige Druckentlastung (Vorbereitungssignal: $KMT_{AUS} > 350 \text{ °C}$ oder SDE unwirksam, Einleitungskriterien: RDB-Füllstand $< \text{min}3$ oder Brennelementaustrittstemperatur $> 400 \text{ °C}$ /GKN 19/) eingeleitet und nach 460 min kommt es zum Verlust der Kernüberdeckung trotz erneuter Einspeisung der heißseitigen Druckspeicher. Nach 480 min tritt ein erstes Hüllrohrversagen in einem der vier Kernringen in Erscheinung und Radionuklide werden aus dem Kern in den RKL freigesetzt. Der Oxidationsprozess der Hüllrohre verläuft langsamer als beim SBLOCA, die Schmelzeverlagerung³ ins untere Plenum erfolgt nach 660 min. Der Druckausgleich mit dem Containment erfolgt langsam über das Abblaseventil und die geöffneten Sicherheitsventile bis zu einem vollständigen Druckausgleich nach 770 min. Zu einem RDB-Versagen oder einem Versagen der druckführenden Umschließung (DFU) des RDB kommt es nicht bis zum Ende der Rechnung nach 1170 min. Nach 770 min kommen die Durchflussraten durch den RKL aufgrund des fehlenden Wasserdampfes fast zum Erliegen. Auch die Austragsraten der Radionuklide aus dem RKL über das Abblaseventil und der Sicherheitsventile, die aufgrund der PDE offenstehen, verringern sich stark und die Radionuklide kondensieren an der kältesten Stelle im RKL, heizen diese Stelle auf und lagern an der nächsten kühlen Stelle entlang des SAFT-Pfades auf dem Weg zum Druckhalter ab. Die Bedingungen im RKL während des Austritts der Radionuklide zwischen 470 min und 800 min werden im Folgenden dargestellt.

Der Druckverlauf im oberen Plenum ist in Abb. 3.8 gezeigt. Nach der primärseitigen Druckentlastung kommt es nach 480 min zur erneuten Einspeisung der heißseitigen Druckspeicher zwischen 10 bar und 15 bar.

³ Die Schmelzeverlagerung wird durchgeführt, sobald eine größere Masse an Schmelzmaterial vorhanden ist.

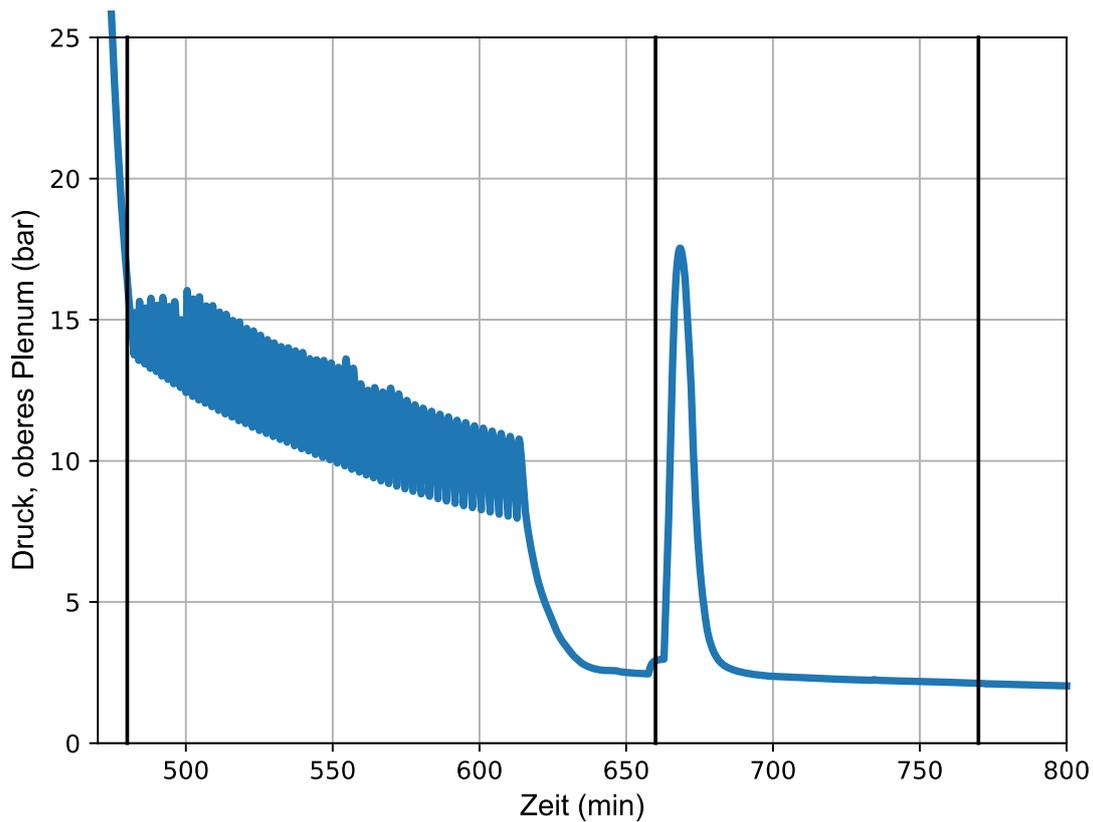


Abb. 3.8 Druck im RKL im Störfallablauf der SBO-LP-Sequenz

Vertikale Linien zeigen in den Graphiken die Zeitpunkte des Versagens der Hüllrohre, 480 min, die Kernverlagerung nach 660 min und den Druckausgleich mit dem Containment nach 770 min an. Ein kurzer Druckanstieg erfolgt noch nach der Kernverlagerung ins untere Plenum. Hohe Kerntemperaturen führen zur schnellen Verdampfung des eingespeisten Kühlmittels und dem Verlust der Kernüberdeckung, die Kernaustrittstemperaturen des verdampfenden Kühlmittels und der austretenden Gase sind in Abb. 3.9 im Vergleich zu den Temperaturen entlang des SAFT-Pfades gezeigt. Deutlich zeigt sich ein Temperaturgradient zwischen dem heißen Bein und der Volumenausgleichsleitung (VAL), was zur Ablagerung durch Kondensation von Radionukliden in der VAL nach mehr als 700 min bei niedrigen Wasserdampfdurchflussgeschwindigkeiten führt.

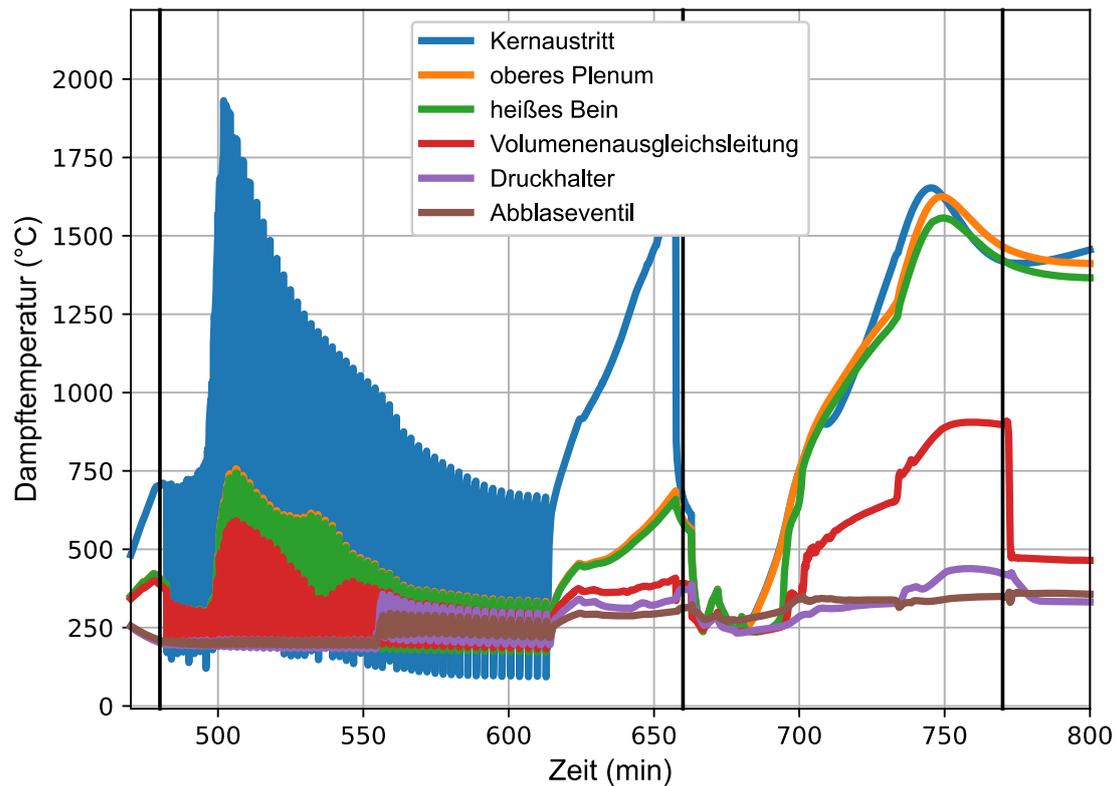


Abb. 3.9 Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfades

Die Freisetzungsraten aus dem Kern erreichen Maxima bei hohen Kernaustrittstemperaturen nach 500 min und 650 min und in der Folge der ersten Verlagerung von Schmelzmasse ins untere Plenum zwischen 670 min und 770 min.

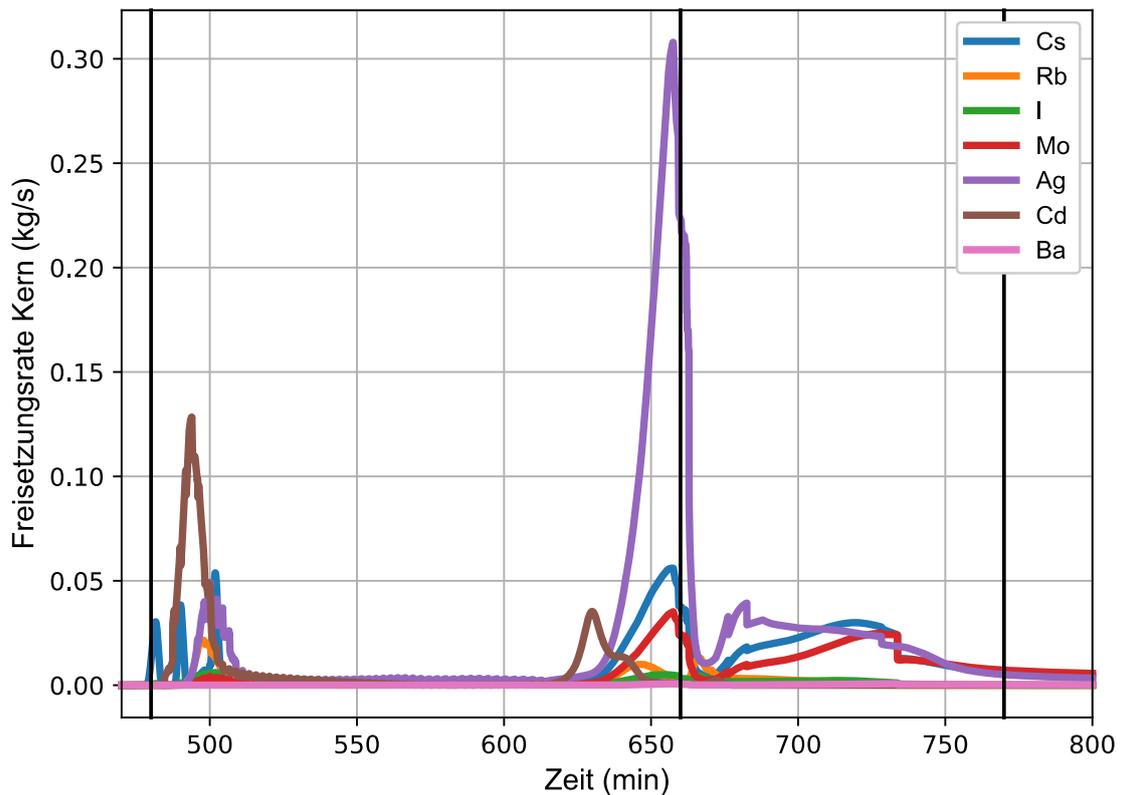


Abb. 3.10 Kernfreisetzungsrates von Iod und möglicher Verbindungspartner

Zu Beginn der Kernfreisetzung steht Cs in ausreichenden Mengen dampfförmig zu Verfügung, siehe Abb. 3.11, um alles Iod zu binden. Auch Ag, das nach Freisetzung schnell kondensiert, bindet wenig später einen Teil des anfänglich freigesetzten Iods. Die aus dem RKL ausgetragenen Iodhaltigen Stoffe und auf die Iodanfangsinventarmassen bezogenen Stoffmengen sind in Abb. 3.12 gezeigt. Die Dampftemperatur sinkt innerhalb der VAL und im DH deutlich ab, siehe Abb. 3.9, der größte Teil der austretenden Iodhaltigen Stoffe kondensiert und der Austrag aus dem RKL erfolgt in Form von Aerosolen. Nach 650 min verdampft ein großer Teil des an den Strukturen kondensierten und dadurch zurückgehaltenen Iods durch den Temperaturwiederanstieg im oberen Plenum. Das Iod verbindet sich mit dem vorhandenen Cd und Ba und es kommt zu Austrägen von CdI_2 (in kleinen Teilen auch dampfförmig), CsI , AgI und BaI_2 . Nach der Kernverlagerung ins untere Plenum kommt es zu einem erneuten Temperaturanstieg nach 700 min. Auch zu dieser Zeit kommt es zu einem starken Anstieg dampfförmigen Iods im oberen Plenum, wie in Abb. 3.11 gezeigt. Dabei entsteht unter anderem gasförmiges HI und das Mo-Dioxyhalogenid (MoO_2I_2) das dampfförmig aus dem RKL austritt, siehe Abb. 3.12. Die freigesetzten Mengen Cs und Rb aus dem Kern werden auch vom freigesetzten Mo zu Cäsium- bzw. Rubidiummolybdat gebunden.

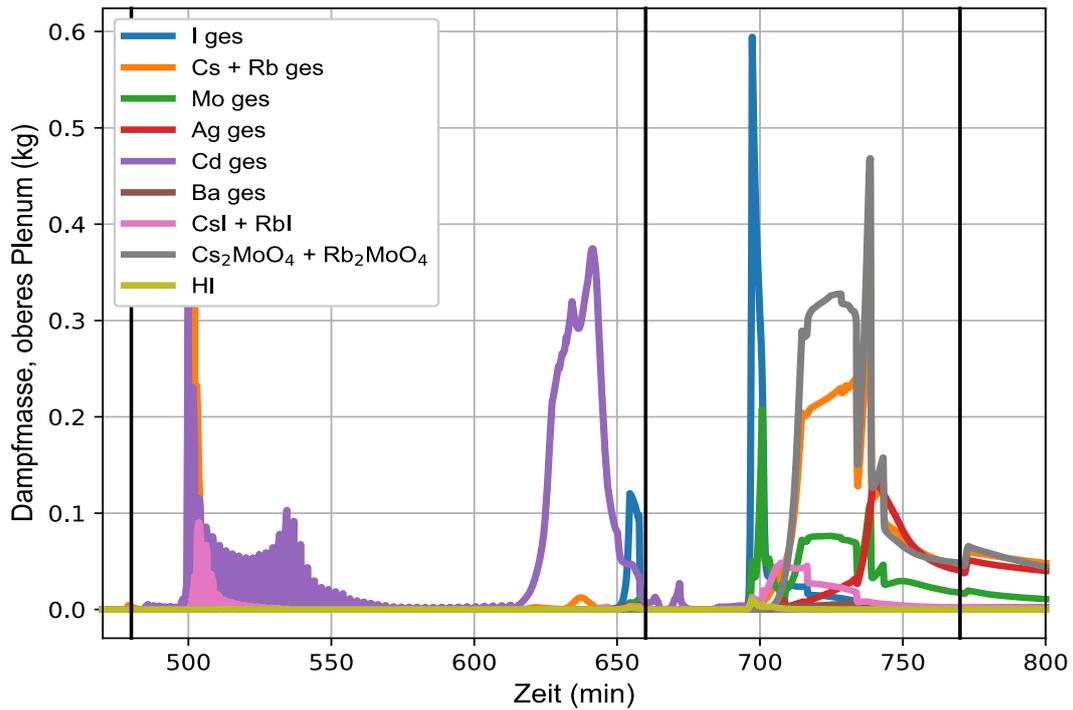


Abb. 3.11 Dampfmassen im oberen Plenum

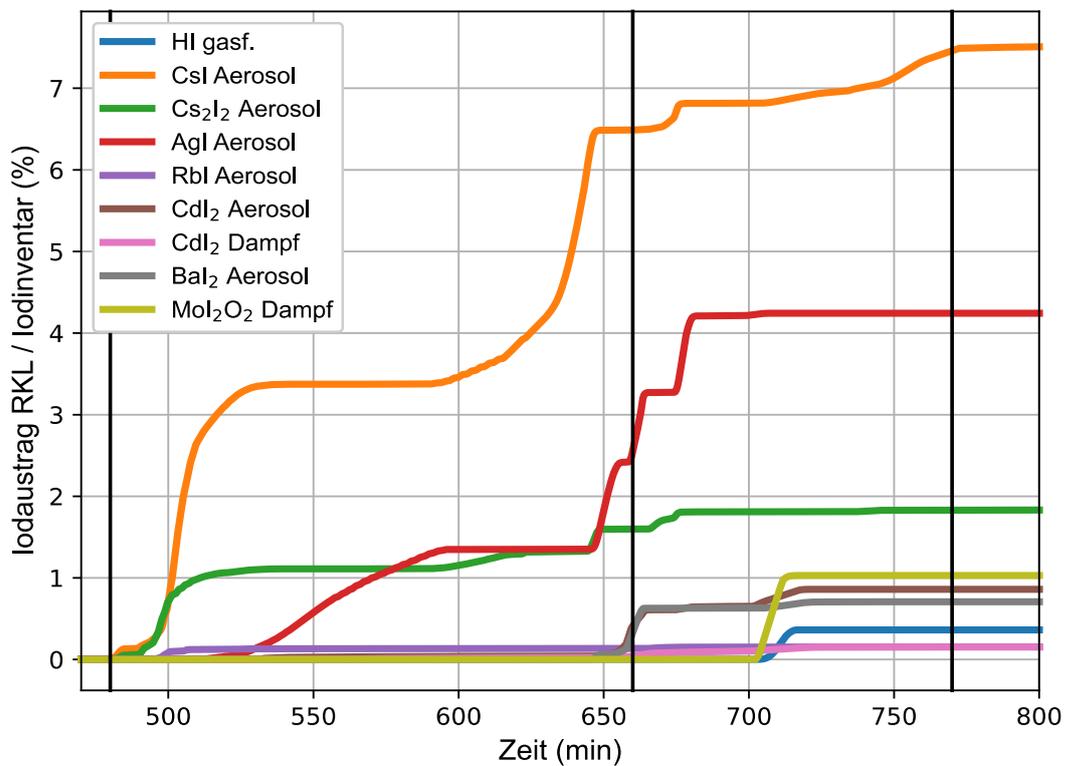


Abb. 3.12 Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar Iod (24,7 kg) bezogen

3.1.1.3 Testrechnungen: SBO-HP

In dieser Unfallsequenz fallen alle externe Stromanbindungen aus und alle Dieseldgeneratoren (D1 und D2) sind unverfügbar bzw. starten nicht. Die Füllstände in allen Dampferzeugern sinken ab. Eine sekundärseitige Druckentlastung wird nicht durchgeführt und in der Folge kann es auch zu keiner Bespeisung aus dem Speisewasserbehälter kommen. Im Primärkreis kommt es zu einem Druckaufbau und zum Ansprechen des Abblaseventils nach 67 min. Der Beginn der Kernfreilegung erfolgt nach 130 min aufgrund des Kühlmittelverlustes durch das Abblaseventil. Ein erstes Versagen der Hüllrohre in einem der vier Kernringe erfolgt nach 160 min. Das Larson-Miller-Kriterium für das Kriechversagen der VAL ist nach 170 min erfüllt, so dass es zu einem Leck in eben dieser kommt. Der Druck im RKL fällt in der Folge schnell ab, Abb. 3.13, und die Druckspeicher speisen ein. Die Kernüberdeckung wird für kurze Zeit wiederhergestellt und die erneute Freilegung des Kerns beginnt nach 230 min. Die Schmelzeverlagerung ins untere Plenum findet nach 290 min statt und der RDB versagt nach 340 min. Die Zeitpunkte des Kriechversagens der Volumenausgleichsleitung, der erneute Kernfreilegung, der Schmelzeverlagerung und des RDB-Versagens sind in den folgenden Graphiken durch schwarze senkrechte Linien markiert.

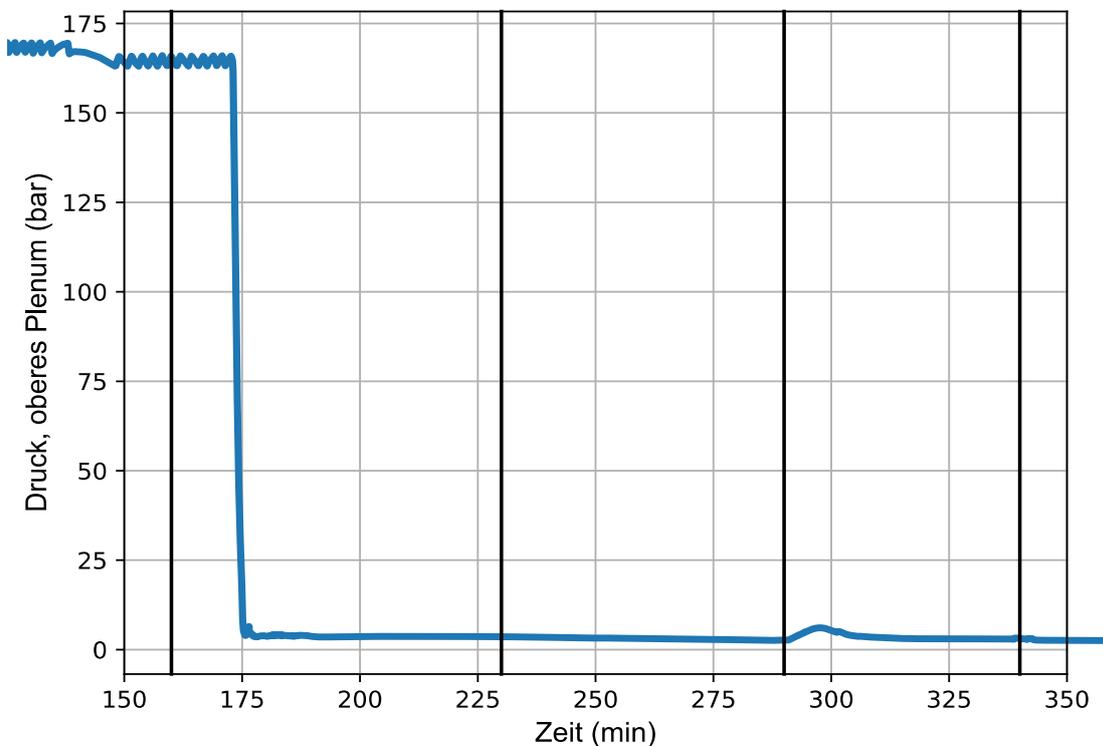


Abb. 3.13 Druck im RKL im Unfallablauf der SBO-HP-Sequenz

Die Temperaturbedingungen im SAFT-Austrittspfad vom oberen Plenum bis zum Versagenspunkt in der VAL sind in Abb. 3.14 gezeigt. Im Sequenzverlauf kommt es bis zum Versagen des RDB zu zwei Phasen mit sehr hohen Kerntemperaturen und großen Freisetzungsraten von Spaltprodukten aus dem Kern. Die Freisetzungsraten sind in Abb. 3.15 gezeigt. Die Hüllrohrversagen in den äußeren Kernringen führen zu den kurzzeitigen Iodfreisetzungsspitzen nach 250 min und 260 min aus dem Brennstab-Spalt.

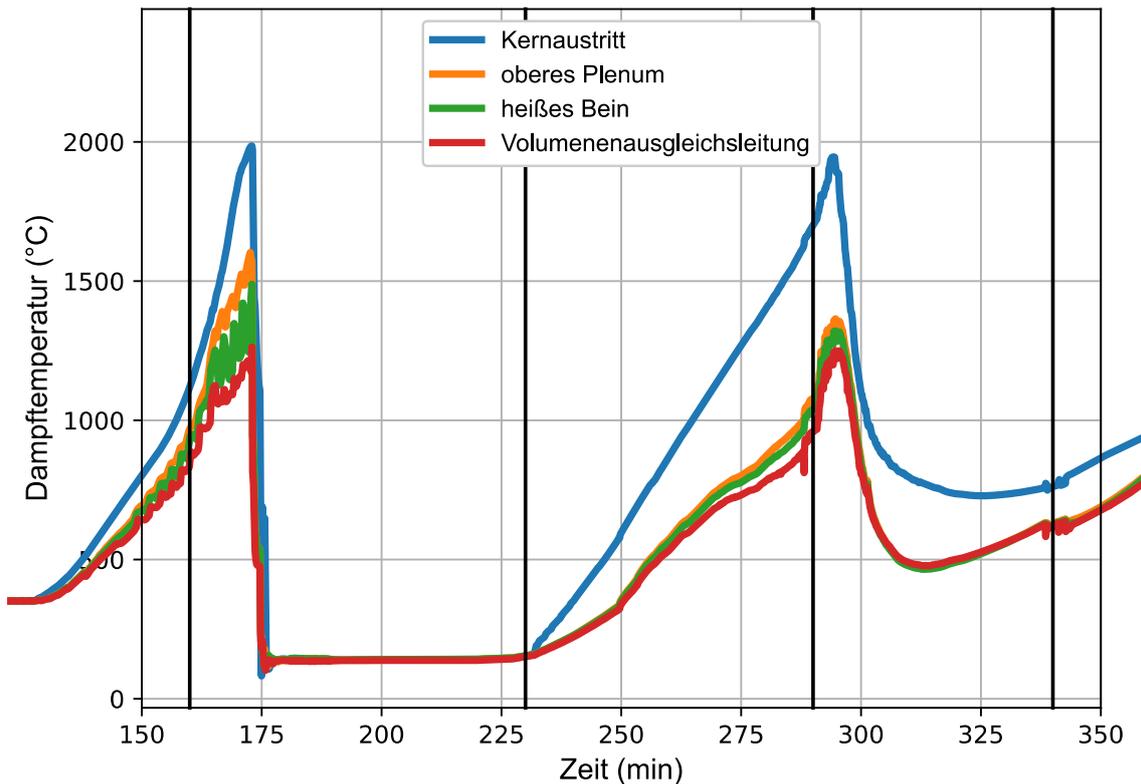


Abb. 3.14 Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfad

Während der zweiten Aufwärmphase des Kerns, nach 280 min, kommt es zu einem verstärkten Einfluss von Mo auf die Iodchemie aufgrund höheren Freisetzungsraten im Vergleich zur ersten Aufwärmphase. Die verringerte Verfügbarkeit von Cs und Rb durch Bindung an Mo, siehe Abb. 3.16, sorgt für die Bildung anderer Iodverbindungen im oberen Plenum. Infolgedessen werden auch AgI-Dampf und HI aus dem RKL ausgetragen, siehe Abb. 3.17. Detailreichere Analysen dieser Sequenz sollen nach Durchführung der Rechnung mit einer neueren AC2-Version folgen, da sich auch in den anderen Sequenzen bzgl. der unterschiedlichen AC2-Versionen deutliche Unterschiede in den Ergebnissen zeigten.

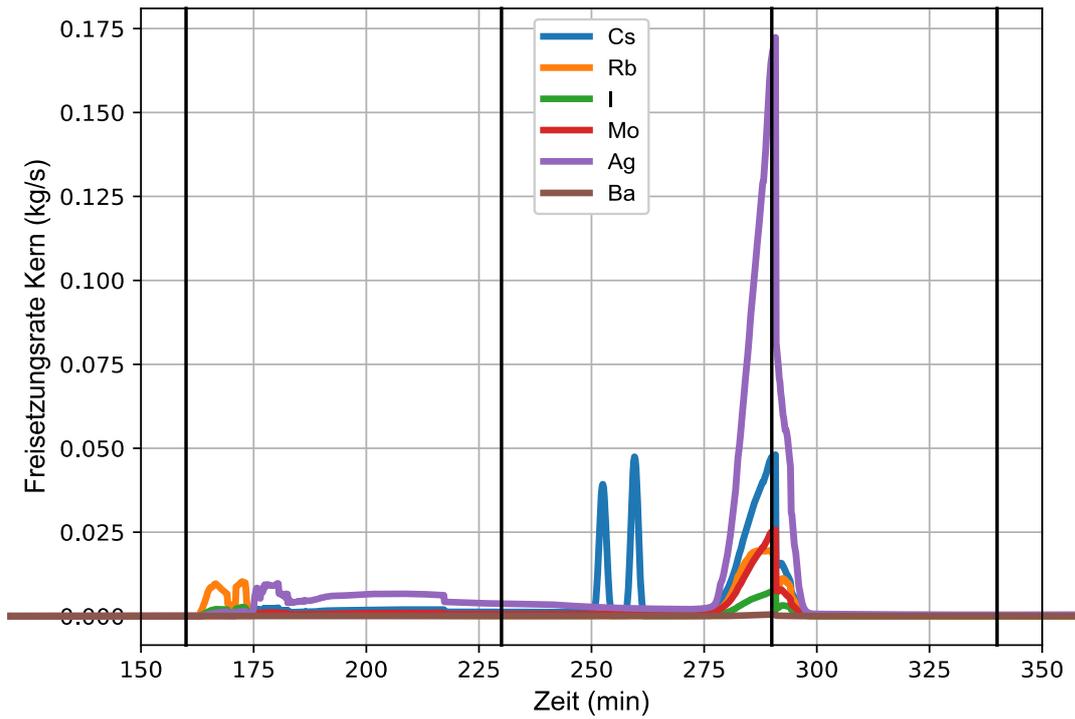


Abb. 3.15 Kernfreisetzungsrates von Iod und möglicher Verbindungspartner

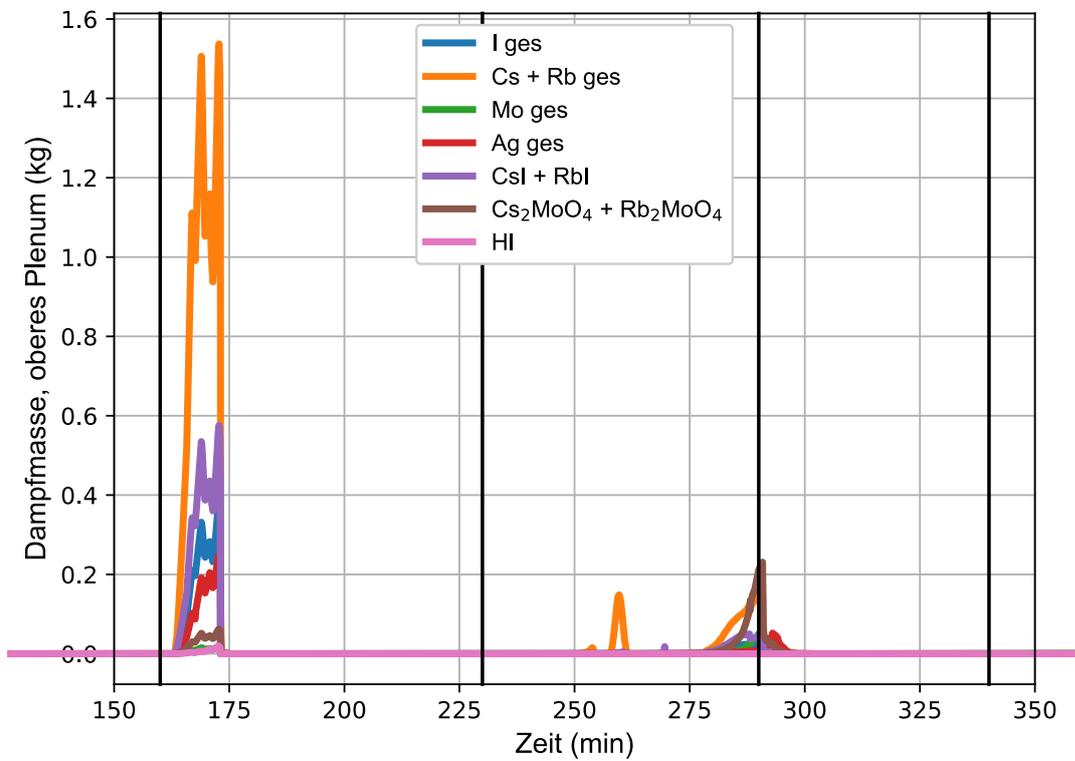


Abb. 3.16 Dampfmassen im oberen Plenum

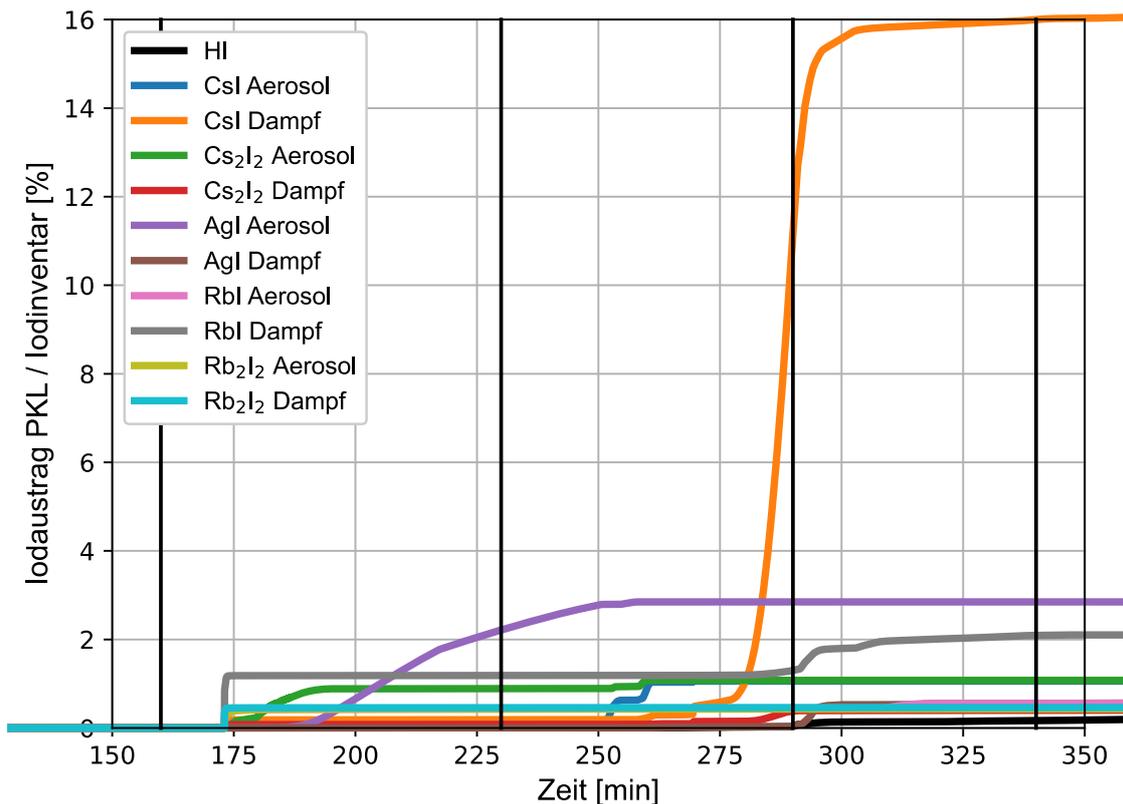


Abb. 3.17 Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar Iod (24,7 kg) bezogen

3.1.2 Identifikation der für die Iodchemierechnung in SAFT wesentlichen Verbindungen

In den verschiedenen gerechneten Unfallabläufen treten in für die Iodchemie relevanten Mengen folgende 19 Elemente und Verbindungen aus den 7 relevanten Elementen I, Cs, Ag, Mo, Cd, Rb, Ba, (H, O) in Erscheinung:

- Iod und Iodverbindungen: Cs_2I_2 , CsI , CdI_2 , AgI , I , Rb_2I_2 , RbI , BaI_2 , MoO_2I_2
- Cs als wichtigstes Verbindungselement: CsOH , $\text{Cs}_2\text{H}_2\text{O}_2$, Cs_2MoO_4
- Silber aus den Steuerstäben und Iodfalle: Ag_2 , Ag_2Se , Ag
- Molybdän als Rb-Falle: Rb_2MoO_4
- Cd aus den Steuerstäben als Iodverbindungselement: CdH_2O_2 , Cd
- Rb als Iodverbindungselement: $\text{Rb}_2\text{H}_2\text{O}_2$

Iod liegt basierend auf der anfänglichen Abbrandrechnung im Kern in einer Menge von ungefähr 23 kg vor und ist sehr flüchtig. Cäsium ist ebenfalls flüchtig und ist mit einem Inventar von über 280 kg in großen Mengen als Verbindungspartner vorhanden. Dies gilt ebenfalls für die Stoffmengen, die $n_I \approx 173$ mol und $n_{Cs} \approx 2.206$ mol betragen. CsOH ist dabei die in SAFT gerechnete reaktive Form des Cs. Als Hauptfalle für das Cs ist das in einer Menge von etwa 330 kg ($n_{Mo} \approx 3440$ mol) vorkommende Molybdän. Als Verbindung mit Molybdän tritt dabei auch Rubidium in Erscheinung, das allerdings nur mit ungefähr 36 kg ($n_{Rb} \approx 421$ mol) im Kern vertreten ist, ähnlich flüchtig ist wie Jod und mit Jod Verbindungen eingeht. Die Steuerstabmaterialien Silber und Cadmium sind in großen Mengen von 1.500 kg ($n_{Ag} \approx 13906$ mol) bzw. 610 kg ($n_{Cd} \approx 5426$ mol) vorhanden und bilden Verbindungen mit Jod. Silber bildet dabei das wasserunlösliche stabile AgI aus, CdI₂ ist dagegen ein flüchtigeres Aerosol mit höheren Dampfdrücken. Generell ist Cadmium das flüchtigste Element aus dem Kern bzw. primär den Steuerstäben und tritt hauptsächlich in den ersten Phasen nach der Kernzerstörung stark in Erscheinung, wobei große Mengen Cadmium als Aerosole und Dämpfe in den Formen Cd und CdH₂O₂ ohne direkten Einfluss auf die Iodchemie aus dem RKL austreten. Die Freisetzung von Silber passiert langsamer und große Mengen verlassen den RKL in den Formen Ag₂ und Ag als Aerosole. Am Rande sei bemerkt, dass das wenige (6 kg) aber flüchtige Selen ($n_{Se} \approx 76$ mol) und das in größeren Mengen (50 kg) vorhandene, langsam abgegebene Tellur ($n_{Te} \approx 392$ mol) hauptsächlich in Verbindungen mit Silber in SAFT auftritt, sich dies aber in der Iodchemie aufgrund der großen Menge Silber nicht bemerkbar macht. Die Untersuchungen der vorhandenen Aerosole Ag₂, Ag₂Se und Ag ist aufgrund der hohen Schmelztemperatur und niedrigen Dampfdrücke von geringerem Interesse und kann allgemein als Ag-Senke angesehen und zusammengefasst werden. Damit sind für die Entstehung von AgI auch hauptsächlich die Bedingungen im RDB aufgrund der dort herrschenden höheren Temperaturen relevant. Die Verbindungen Cs₂I₂, CsI, CdI₂, Rb₂I₂ und RbI sind flüchtiger, treten bei höheren Temperaturen als Dämpfe auf, sind wasserlöslich und dissoziieren teilweise. Die Übergabemengen dieser Verbindungen an das Containment ist für die Iodchemie ebendort von besonderer Bedeutung. Auch kann ein Anstieg der Temperaturen entlang eines SAFT-Pfades zu einer Verdampfung dieser hauptsächlich als Aerosole transportierter Verbindungen führen. In der Gasphase können chemische Reaktionen einsetzen, die Auswirkungen auf die Iodchemie des RKL haben.

3.1.2.1 Analysen zum chemischen Gleichgewicht und zum Spaltprodukttransport mittels Tabellen

Der Programmteil SAFT verteilt die einzelnen Elemente entsprechend den chemischen Gleichgewichtsbedingungen in den verschiedenen Kontrollvolumina der Nodalisierung auf chemische Verbindungen (z. B. wird aus Cs und I teilweise CsI). Das Teilsystem aus Cs, I und Cd ist in tabellarischer Form nachgestellt worden. Durch eine manuelle Variation einzelner Parameter, u. a. Dampftemperatur des Wassers, Druck, Volumen und Stoffmengen zeigten sich mehrere Einflussgrößen auf die Menge gasförmigen Iods im RKL bzgl. dieses Teilsystems. Generell ist die Temperatur des Wasserdampfes die wichtigste Einflussgröße, gefolgt vom Stoffmengenverhältnis Cs zu I (Rb zu I-Abhängigkeit ergibt sich analog) und dem CdI_2 -Dampfdruck (AgI-Dampfdruck-Abhängigkeit ergibt sich analog). Darüber hinaus sind für die Entstehung der verschiedenen Iod-Verbindungen nicht nur absolute Mengen der Ausgangsstoffe entscheidend, sondern auch die Menge pro Volumen (beeinflusst die maximale Dampfmenge bei Dampfsättigung im Node) und damit auch ein möglicher Einfluss der Nodalisierung. Tendenziell ergibt sich im Gleichgewicht mehr gasförmiges Iod, HI oder I_2 , durch höhere Temperaturen und kleinere Verhältnisse Cs zu I. Die noch fehlende Implementierung von SAFT in den Kernkanälen mit heißeren Temperaturen als im oberen Plenum könnten eine Entstehung von gasförmigem Iod entsprechend der Ergebnisse aus dem Teilsystem Cs, I und Cd begünstigen. Die Implementierung der Kernkanäle in den SAFT-Pfad soll noch entwickelt werden.

Die Rechnungen für den Weitertransport bzw. die Anlagerung der Elemente und chemischen Verbindungen in Form von Aerosolen oder als Dampf konnte sollen anhand von Tabellen untersucht werden. Die typische Form der Rückhaltung der Spaltprodukte im RKL ist gegeben durch die Kondensation der Dämpfe unterschiedlicher Verbindungen an Aerosolen gefolgt von der Sedimentation, der Thermophorese oder der turbulenten Anlagerung dieser Aerosole an Oberflächen oder Krümmungen (die Diffusiophorese liefert keinen nennenswerten Beitrag). Alle weiteren Anlagerungsmechanismen hatten nur einen geringen Beitrag an der Rückhaltung. Die turbulente Anlagerung ist bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten von großer Bedeutung (u. a. an Engstellen), die Thermophorese hängt stark vom Temperaturunterschied zwischen Wand und Wasserdampf ab und die Sedimentation nimmt auch mit der Masse an vorhandenem Wasserdampf im Volumen zu. Sedimentation und Thermophorese führen in Volumina größerer Durchmesser (z. B. Druckhalter) zu höheren Rückhaltungsraten als die turbulente Anlagerung. In Unfallszenarien während der Kühlung eines freiliegenden geschädigten Kernes über

Druckspeicher ist die turbulente Anlagerung aufgrund der hohen Strömungsgeschwindigkeiten (schnelle Verdampfungsraten des eingespeisten Kühlmittels am Kern) an Engstellen der wichtigste Mechanismus der Rückhaltung der Spaltprodukte. Sind die Druckspeicher leer, folgt eine Phase mit heißem Dampf an noch relativ kühlen Strukturen und die Bedeutung der Thermophorese nimmt zu. Die Anteile der unterschiedlichen Rückhalte-mechanismen an der Gesamtrückhaltung werden in SAFT ausgegeben und die Ausgaben stimmen mit den Überlegungen überein.

3.1.3 Definition von Iodspezies, Neudefinition von Elementklassen

Ein erster Schritt für eine Umsetzung darin, neue Elementklassen in MELCOR zu berücksichtigen bzw. bestehende zu ändern. Ein wesentlicher Grund hierfür ist, dass MELCOR Elementklassen berücksichtigt, die selbst mehrere chemisch ähnliche Elemente umfassen. Für eine vereinfachte und dennoch präzisere Abbildung der Iodchemie ist hierbei ein höheres Auflösungsvermögen vonnöten.

Um nun eine bessere Berücksichtigung physikalischer Eigenschaften der für die Iodchemie wichtigsten chemischen Verbindungen zu gewährleisten, ist eine Identifikation der Elemente bzw. der Spezies notwendig, die zu einem relevanten Anteil aus dem Reaktorkühlkreislauf ausgetragen werden. Aus den Basisrechnungen für die phänomenologische Umsetzung aus Kapitel 3.3 zeigen sich nach dem Kriterium, dass eine Spezies mindestens 1 % ($\frac{m_i^{\text{I aus } i}}{\sum_i m_i^{\text{I aus } i}}$ mit $m_i^{\text{I aus } i} = \frac{M_i}{\sum_j \beta_j \cdot M_j}$, $m_i^{\text{I aus } i}$: Masse des Iods in der Spezies i , β_j : Stöchiometriefaktor des Elementes j in der Iodspezies i , M_k : molare Masse des Elementes k) zum Gesamtaustrag beizutragen hat. Hieraus folgend die Repräsentanten für die SBO-Gruppe: AgI, Cs₂I₂, CsI, FeI₂, HI, RbI, I (atomar) und für die KMV-Gruppe: AgI, BaI₂, CdI₂, Cs₂I₂, CsI, FeI₂, HI, RbI. Diese eher Auswahl hat unabhängig von den Testrechnungen in Kapitel 3.1.1 stattgefunden, um den Umsetzungsaufwand zu begrenzen und an den tatsächlich verwendeten Rechnungen zu orientieren.

Die Elemente Cs, Rb, Ag, Ba, Cd sind als Spaltprodukte oder auch als Strukturmaterialien im MELCOR-Kern vorhanden. Cs und Rb gehören zur MELCOR-Klasse ‚Cs‘, Ag, Ba, Cd sind die Repräsentanten der eigenen Klassen in MELCOR. Für die direkte Umsetzung sind diese aus ihren Klassen herauszulösen, so dass einerseits eigene Klassen zu definieren sind und Restklassen, die die restlichen Mitglieder beinhalten. Entsprechend sind die Klassen ‚Cs‘, ‚Rb‘ (SBO, KMV), ‚Cd‘ und ‚Ba‘ (KMV) definiert worden und

die Restklassen ‚Cs_Rest‘ (SBO, KMV), ‚Cd_Rest‘ und ‚Ba_Rest‘ (nur KMV). Da die Klassen ‚CsI‘ und ‚I2‘ unangetastet bleiben, werden für die Austragsspezies die Klassen ‚CsI_ZWO‘ und ‚I2_ZWO‘ angelegt. In die Klasse ‚CsI_ZWO‘ wird auch der Austrag der Spezies ‚Cs₂I₂‘ eingruppiert, im Falle des atomaren Iods (‚I (atomar)‘) wird davon ausgegangen, dass es sich schnell zu I₂ bildet, so dass es der Klasse ‚I2_ZWO‘ zugeordnet wird.

Sowohl die Austragsspezies als auch die letztgenannten Elemente werden in MELCOR unter ‚DCH_CL‘ als eigenständige Elementklasse definiert, wo auch die Elemente aufzuführen sind, die zu der Klasse gehören (siehe /SAN 17/). Die einzelnen Elemente werden unter ‚DCH_EL‘ mit Nachzerfallsleistung ausgestattet. Im Falle der phänomenologischen Umsetzung wird diese zu Null gesetzt. Für die vereinfachte direkte Umsetzung konsultiere man die Ausführungen unter Kapitel 3.4.2, da nur in dieser Umsetzung eine Korrektur der Nachzerfallsleistung durchgeführt wird.

Da dieses Vorhaben lediglich die Iodchemie im Reaktorkühlkreislauf zum Gegenstand hat, wird keine Betrachtung von Freisetzungen während des MCCI vorgenommen. Entsprechend ist keine Zuordnung der Spezies zu VANESA-Klassen (solche die im Cavity-Modul in MELCOR vorhanden sind) notwendig. Ausgenommen sind die Elemente, die aus den Elementklassen herausgelöst worden sind und die entsprechenden Restklassen, die wie die ursprünglichen Klassen unter ‚RN1_CLVN‘ und ‚RN_VNCL‘ eingetragen werden.

Die definierten Klassen sollen sich in MELCOR realitätsnah verhalten, daher sind Angaben zu deren molare Masse (unter ‚SC7120‘) und dem Dampfdruck (unter ‚SC7110‘), dem Freisetzungsfaktor (unter ‚SC7103‘, siehe Ausführungen unter Kapitel 3.4.2), der Löslichkeit in Wasserfilmen (unter ‚SC7136‘) und der Dampfdiffusivität (unter ‚SC7111‘) anzugeben. Im Falle der molaren Massen werden die Informationen aus dem Periodensystem /PSE 02/ verwendet. Für die Dampfdiffusivität wird die Empfehlung der Tabelle unter ‚SC7111‘ in /SAN 17/ für anwenderdefinierte Klassen gefolgt. Für die Löslichkeit in Wasserfilmen wird der Faktor entsprechend der ursprünglich vorhandenen Klassen gewählt, der typischerweise zu „1“ gewählt worden ist, ferner wird der Wert in RN-UG-127 in /SAN 17/ implizit empfohlen.

Die Eingaben zum Dampfdruck unter ‚SC7110‘ sind beziehen sich auf einen Exponentialausdruck für den Dampfdruck, wie er in /SAN 17a/ gezeigt ist:

$$\log_{10} p = -\frac{A}{T} + B + C \cdot \log_{10} T \quad (3.2)$$

In (3.2) stehen p und T für Dampfdruck und Temperatur, die Koeffizienten A , B und C sind für die Elementklassen verschieden und haben entsprechend eingegeben zu werden. Für die Klassen ‚Cs‘, ‚Cs_Rest‘ sind die Angaben in /SAN 17/ gegeben (siehe Seite RN-UG-120/121). Da ‚Rb‘ aus dieser Klasse stammt, können die Informationen direkt für ‚Rb‘ verwendet werden. Auch existieren entsprechende Informationen für ‚Ba‘, ‚Ba_Rest‘, ‚Cd‘, ‚Cd_Rest‘ und die mit ‚CsI‘ bzw. ‚I2‘ chemisch identischen Klassen ‚CsI_ZWO‘ und ‚I2_ZWO‘. Für die neue Klasse RbI sind hierfür die Eingaben von CsI, die ebenfalls in /SAN 17/ gegeben sind, verwendet worden, da Rubidium chemisch ähnlich zu Cäsium ist. Für HI ist der eine Eingabeoption gewählt worden, die dafür sorgt, dass HI stets gasförmig ist. Einzig für die Spezies AgI, FeI₂ und CdI₂ sind keine einfachen Ableitungen oder Angaben möglich gewesen. Hierfür sind Informationen aus /GES 21/, /NCB 21/, /CHE 21/ oder auch Wikipedia genutzt worden, welche in den Temperaturen für Schmelzpunkt und Siedepunkt und teilweise mit einem Wert für einen Dampfdruck bei gegebener Temperatur bestehen. Mit dem Wissen um die Bezugsbedingungen (typischerweise 25 °C, 1 bar) kann dem Dampfdruck bei Schmelztemperatur der Dampfdruck „0“ zugeordnet werden und der Siedetemperatur 1 bar. Für einen Exponentialansatz als Testfunktion in einer Regression sind mehr als zwei Wertepaare notwendig, welche im Falle von CdI₂ und AgI vorhanden sind. Allein im Falle von FeI₂ sind nur zwei Werte vorhanden. Mit Hilfe funktionierender Regressionen für erstgenannte Spezies konnte auch für letztgenannte eine plausible Dampfdruckkurve erzeugt werden, wie in den Abb. 3.18, Abb. 3.19 und Abb. 3.20 zu erkennen ist.

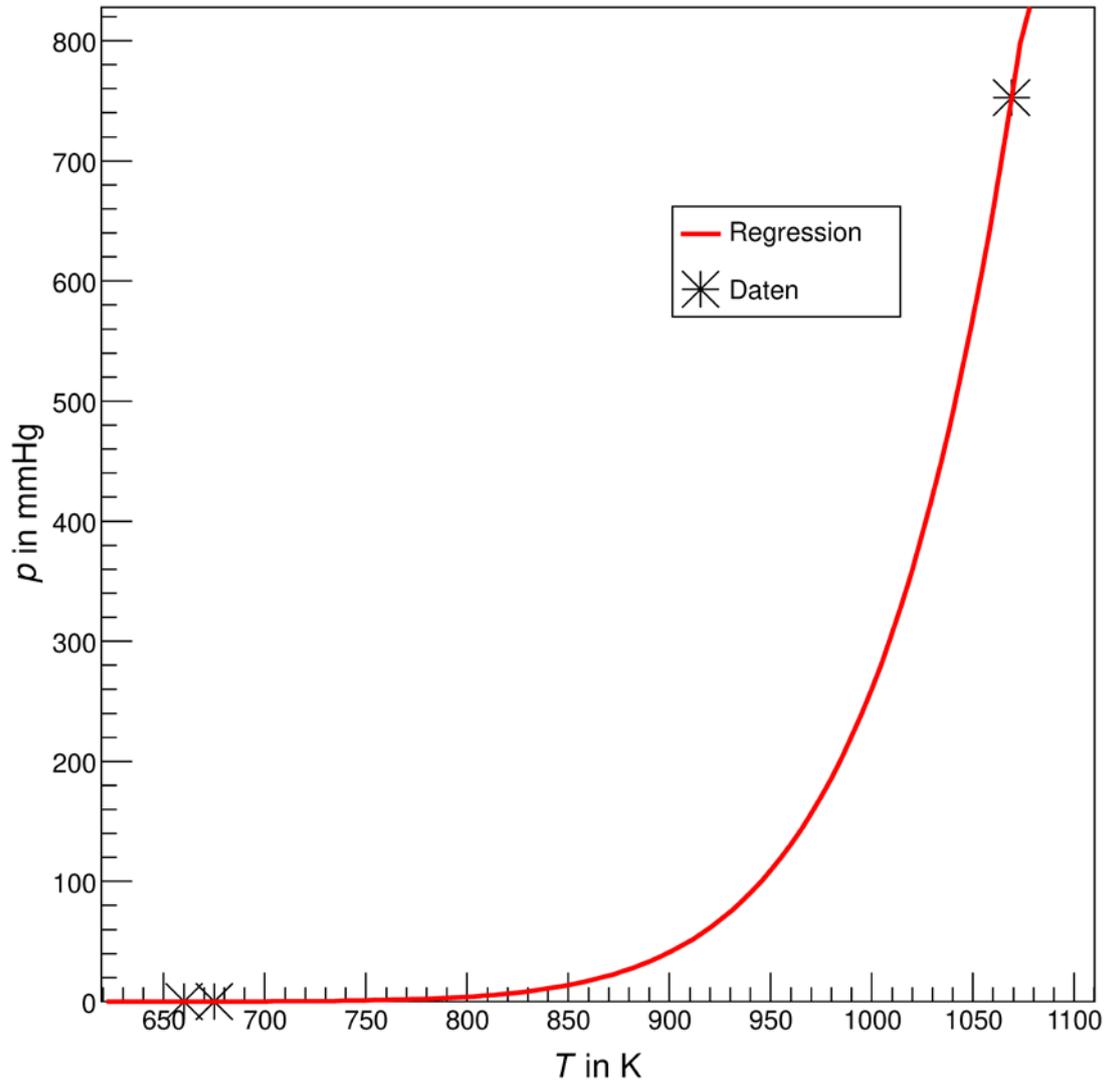


Abb. 3.18 Dampfdruckkurve für CdI₂

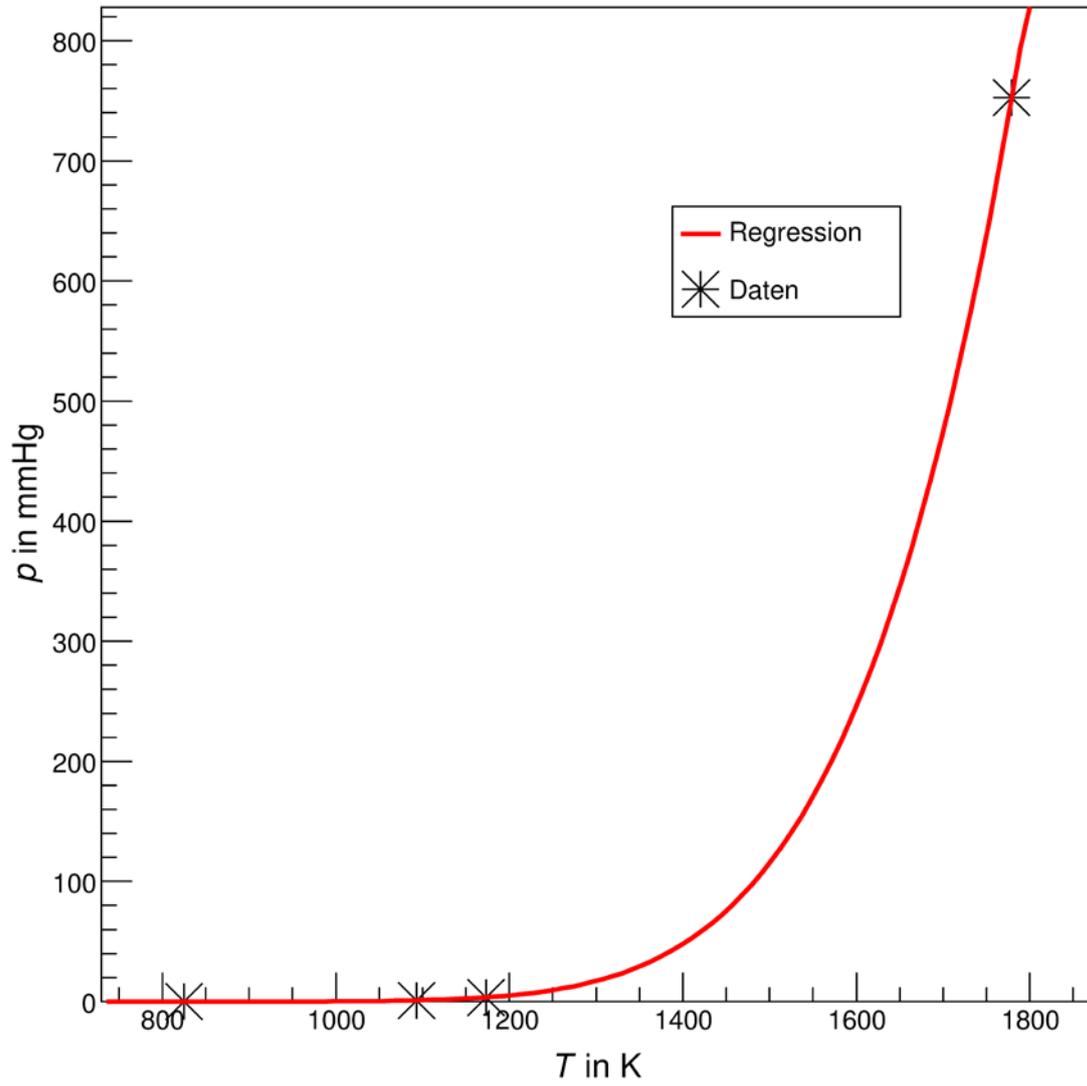


Abb. 3.19 Dampfdruckkurve für AgI

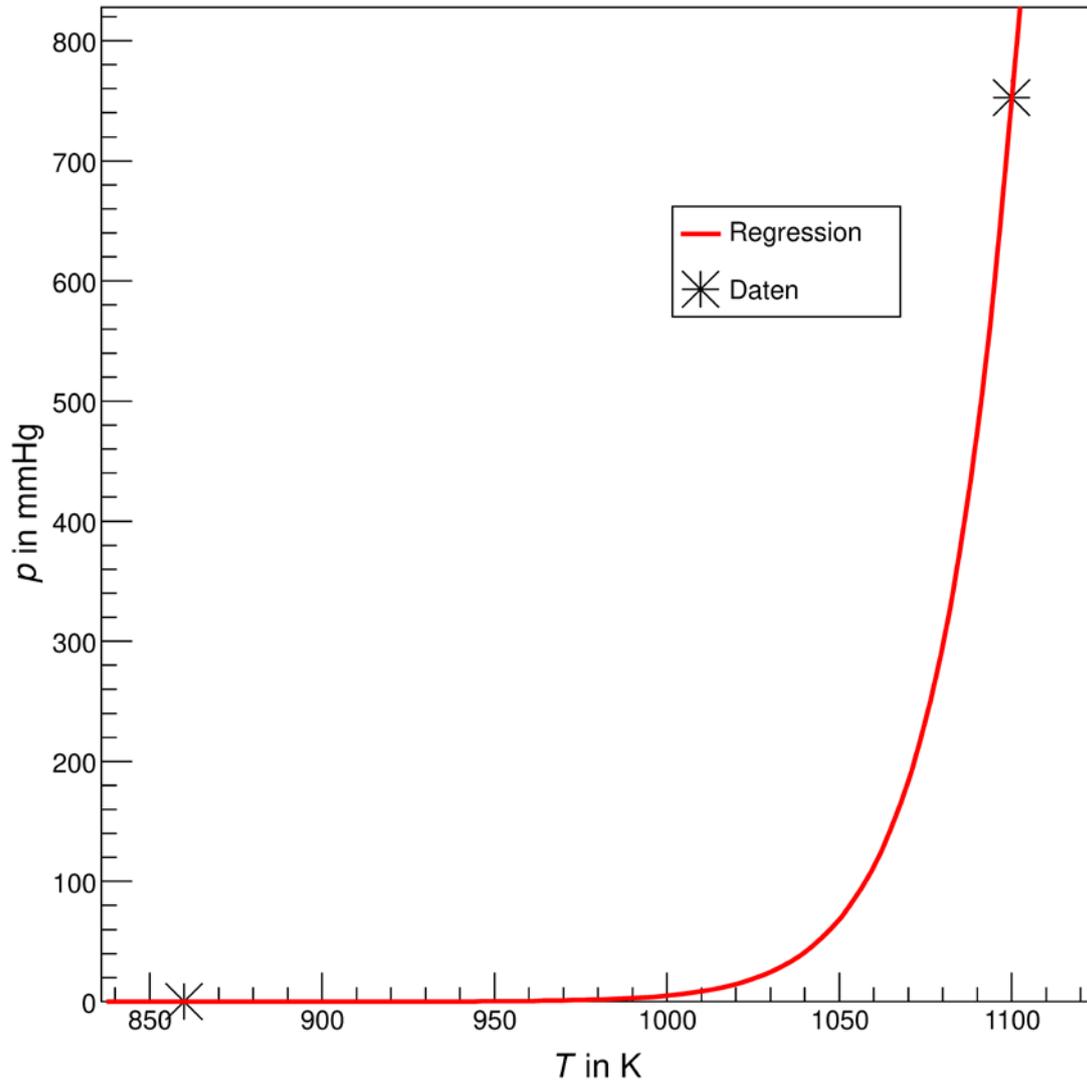


Abb. 3.20 Dampfdruckkurve für Fe₂

3.2 Anlagenmodelle AC2, MELCOR

Für die Abbildung der realen Verhältnisse in einem Unfallgeschehen in einer kerntechnischen Anlage ist einerseits die präzise Modellierung der Physik oder der Chemie notwendig, andererseits ist eine konkrete Anlage zu betrachten. Ersteres wird von der Programmierung des Rechenprogrammes zur Verfügung gestellt. Letzteres manifestiert sich in einem Eingabedatensatz, welcher vom Anwender des Programms aufzustellen ist. Im Folgenden sollen kurz die Spezifika der hier verwendeten Modellierung aufgezeigt werden. Für eine genaue Beschreibung der aufwändigen Eingabedatensätze konsultiere man die referenzierten Dokumente.

3.2.1 MELCOR

Der MELCOR-Eingabedatensatz, der in diesem Vorhaben Verwendung findet, ist in Vorhaben 4718R01313 (siehe /GRS 21/) genauer beschrieben.

Für diese Zwecke sind in erster Linie Kontrollfunktionsblöcke entwickelt worden, die einerseits Korrelationen aus den Variationsrechnungen (siehe Kapitel 3.3) oder andererseits Tabellen für die Iodausträge aus einer ATHLET-CD-Vorrechnung abbilden (siehe Kapitel 3.4). Die Änderungen im Datensatz haben dabei weiterhin einen Schwerpunkt auf die Eingaben im Radionuklidpaket (,RN1', siehe /SAN 17/), welche im Wesentlichen in Kapitel 3.1.3 beschrieben sind.

Erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang, dass die Filterung unter im ,RN2'-Paket in MELCOR komplett entfernt worden ist. Realistischerweise wäre eine Filterung anzunehmen, diese ist jedoch in MELCOR als einfacher, konstanter Faktor modelliert. Eine solche Filterung führt zu keinen vertieften Erkenntnissen hinsichtlich des Anlagenverhalten und kann, wenn es gewünscht ist, in der Datenanalyse nachträglich berücksichtigt werden.

Für den KMV ist eine Kühlung für das Brennelementlagerbecken vorgesehen, die für die Zeit der Einspeisung der Sicherheitseinspeisepumpen inaktiv ist, wie es in der entsprechenden Systembeschreibung der Referenzanlage niedergeschrieben ist. Diese Kühlung ist mittels einer Tabelle als einfache Proportionalregelung bewerkstelligt, deren Sollwert bei $T_{\text{Soll}}^{\text{BELB}} = 303,15 \text{ K}$ liegt und gemäß Systembeschreibung eine Höchstleistung von $P_{\text{Kühl. max}}^{\text{BELB}} = 7,9 \text{ MW}$, die aufgrund der eingelagerten Leistung von $P_{\text{BE}}^{\text{BELB}} = 1,248 \text{ MW}$ zu keiner Zeit ausgereizt wird.

Für den KMV ist weiterhin ein Leckpfad (im ,FL'-Paket in MELCOR) definiert worden, dessen Leckquerschnitt einer der Parameter darstellt, der in den Variationsrechnungen variiert wird (siehe Kapitel 3.3).

Insbesondere für den KMV ist die Modellierung der Überlaufleitung vom Brennelementlagerbecken (BELB) zu erwähnen. Das BELB ist im KMV gekühlt und fungiert als Kondensationssenke, welches zu einem Füllstandsanstieg führen kann, so dass gekühltes Wasser in den Reaktorsumpf gelangen kann. Indirekt können somit Wärmequellen ebendort gekühlt werden.

3.2.2 ATHLET-CD, COCOSYS (AC2)

Die Modellierung des ATHLET-CD- und des COCOSYS-Eingabedatensatzes ist grundsätzlich in /GRS 22/ beschrieben, wobei jedoch der COCOSYS-Datensatz eine vereinfachte Version desselben mit lediglich 103 Zonen darstellt. Diese Version ist insbesondere deswegen verwendet worden, um die Rechenzeit in Grenzen zu halten. Im Folgenden sollen die wesentlichen Spezifika erläutert werden.

In Abb. 3.21 ist eine Darstellung des RKL geben, wobei die SAFT-Pfade entsprechend der Modellierung in ATHLET-CD kenntlichgemacht sind. Die SAFT-Pfade umfassen im KMV-Szenario lediglich das postulierte Leck und ein Leck, das durch Kriechversagen an der Hauptkühlmittelleitung (HKML) entstehen kann.

Im SBO-Szenario sind hingegen Pfade für die Lecks durch Kriechversagen an HKML und Volumenausgleichsleitung (VAL) entstehen können.

Darüber hinaus sind die Abblasepfade für die Druckhalterventile modelliert, wobei die Sicherheitsventile den oberen Bereich des Druckhalters als Ausgangspunkt haben. Lediglich das Abblaseventil verfügt über einen geschlossenen Pfad vom oberen Plenum bis hin zum Abblasebehälterdom, der selbst jedoch nicht Teil der ATHLET-CD-Modellierung ist.

Für das Kriechversagen ist ein parametrisches Larson-Miller-Modell als GCSM-Block abgebildet.

Wie in der MELCOR-Modellierung auch, die in der AC2-Modellierung keine Filterung berücksichtigt worden, da diese aus einem einfachen, konstanten Filterfaktor besteht, der keine Einsichten in wenig intuitive Phänomene verspricht. Ferner kann eine solche einfache Filterung, falls gewünscht, in der nachträglichen Datenanalyse berücksichtigt werden.

Um eine der MELCOR-Modellierung weitgehend äquivalente Modellierung einzusetzen, ist auch im Eingabedatensatz eine Überlaufleitung vom Brennelementlagerbecken (BELB) hin zum Reaktorsumpf speziell für dieses Vorhaben definiert worden. Diese ist als sog. ‚ATM_FULLL-Junction‘ definiert, so dass sowohl Gase als auch Wasser in einem einzigen Strömungspfad transportiert werden können.

Das BELB verfügt des Weiteren über eine Wärmequelle, die der Nachzerfallsleistung der Brennelemente im Lagerbecken entspricht, die dem Wert in MELCOR angepasst worden ist. Die Kühlung des BELB ist mittels einer einfachen Zweipunktregelung (zwischen $T_{\text{unten}}^{\text{BELB}} = 333,15 \text{ K}$ und $T_{\text{oben}}^{\text{BELB}} = 354,15 \text{ K}$) bewerkstelligt, welche von der Proportionalregelung in MELCOR abweicht. Die Leistung der Wärmesenke beträgt $P_{\text{Kühl}}^{\text{BELB}} = 2,0 \text{ MW}$, welches unterhalb des Höchstwertes lauf Systembeschreibung liegt. Da jedoch die eingebrachte Wärmeleistung der Brennelemente bei $P_{\text{BE}}^{\text{BELB}} = 1,248 \text{ MW}$ liegt, ist diese Kühlleistung ausreichend. Der untere Wert der Regelung liegt höher als der Sollwert in MELCOR, dennoch stellt das gekühlte Wasser in der AC2-Rechnung eine erhebliche Kondensationssenke dar.

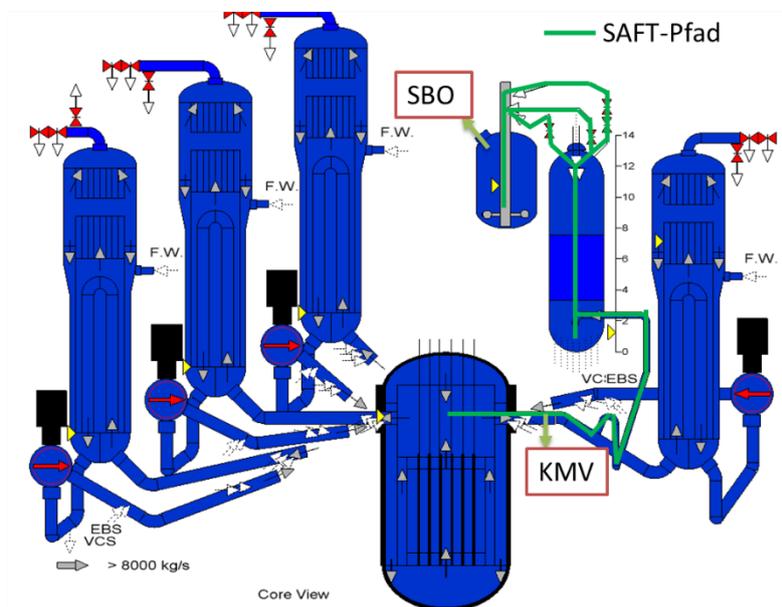


Abb. 3.21 Reaktorkühlkreislauf mit Kenntlichmachung der SAFT-Pfade für beide Szenariengruppen (SBO, KMV)

3.3 Vereinfachte, phänomenologische Umsetzung der in ATHLET-CD gegebenen Modelle (FIRPEM, SAFT), AP 2.1

Wie bereits angedeutet, ist es angedacht, Korrelationen der Massen der aus dem RKL ausgetragenen Iodspezies und messbarer Parameter zu finden. Solche messbaren Parameter können die eingespeiste Wassermasse, die gemittelte Temperatur im RKL, der gemittelte Druck im RKL oder die Borkonzentration im Kühlmittel sein. Um die Aussage-

fähigkeit in Bezug auf Analysen basierend auf MELCOR-Simulationen zu steigern, haben die Größen in MELCOR nutzbar und somit ebenfalls messbar zu sein. Eine Bestimmung der wesentlichen Einflussgrößen auf die Iodchemie ist dabei in Kapitel 3.1.2.1 beschrieben. Diese Größen hängen mit technischen Größen und damit einstellbaren Größen zusammen. So z. B. bestimmen die Ansprechdrücke des Abblaseventils oder auch der Sicherheitsventile den gemittelten Druck im Reaktorkühlkreislauf, welcher gemäß des CORSOR-P-Ansatzes die Freisetzung aus dem Brennstoff determiniert. Gemäß Kapitel 3.1.2.1 sind die wesentlichen Einflussfaktoren für die Freisetzung von Iodspezies die (Dampf-)Temperatur im RKL, Stoffmengenverhältnisse zwischen Cs zu I bzw. Rb zu I, der CdI_2 - bzw. AgI-Dampfdruck und die Konzentrationen, die die Reaktionsrate bei sonst gleichen Verhältnissen bestimmen. Ferner ist ersichtlich, dass die Zeit, die für die Prozesse im RKL zur Verfügung steht, die absoluten Mengen der ausgetragenen Spezies beeinflusst.

3.3.1 Randbedingungen

Die Randbedingungen der zwei grundsätzlichen Gruppen (SBO, KMV) sind vereinfacht gewählt, da die Variation der Parameter (siehe Kapitel 3.3.2) für eine Variation physikalischer Zustände sorgt, so dass ein Auffinden von Korrelationen ermöglicht wird. Eine Variation verschiedener Notfallmaßnahmen, welche im realen Fall anzunehmen wäre, ist dazu nicht erforderlich. Daher handelt es sich um Randbedingungen, die auf die Erfordernisse dieses Vorhabens angepasst sind. Im Folgenden seien die wesentlichen Charakteristika der beiden Gruppen aufgelistet und beschrieben:

SBO-Gruppe

- Eigenbedarfsschienen unverfügbar
- Lastabwurf auf EB nicht erfolgreich
- Notstromdiesel (D1 & D2) starten nicht
- keine Bespeisung der Dampferzeuger
- keine präventiven oder mitigativen Notfallmaßnahmen (bis auf SHB-Druckentlastung)
- es wird keine Filterung bei der SHB-Entlastung angenommen

KMV-Gruppe

- Dampferzeuger (mit 100 K/h abgefahren), bleiben bespeist
- Sumpfschaltung nicht erfolgreich
- keine präventiven oder mitigativen Notfallmaßnahmen (bis auf SHB-Druckentlastung)
- BELB bleibt gekühlt
- Ringraum-Störfallabsaugung ist verfügbar
- es wird keine Filterung bei der SHB-Entlastung angenommen

Im Falle der SBO-Gruppe sind die Randbedingungen entsprechend einfach gewählt, so dass es zu keiner Einspeisung oder einer Druckentlastung kommt. Letztlich ist auch der Grund für den Ausfall der Eigenbedarfsversorgung und der Unverfügbarkeit der Notstromerzeugeranlagen unerheblich für die Zwecke der Variationsrechnungen.

Im Falle der KMV-Gruppe bleiben die Dampferzeuger bespeist, da ein Ausfall die Eintrittswahrscheinlichkeit des Szenarios reduziert und für das Auftreten des Kernschadens nicht notwendig ist, da der Kühlmittelverlust nicht verhindert oder dauerhaft überspeist wird. Ein Ausbleiben der Sumpfschaltung ist hingegen erforderlich, da ansonsten das in den Reaktorsumpf eingetragene Kühlmittel im Kreislauf über den Nachkühler befördert würde, so dass der Kern gekühlt bliebe. Im Falle relativ kleiner Lecks führt dies jedoch zu einer verhältnismäßig wirksamen Kühlung, so dass der Kernschaden hinausgezögert wird, welches sich ebenfalls in den Rechenzeiten der Simulationen zeigt. Dies ist der Grund, warum für den Basisfall nicht nur das Leck mit einer Größe von 20 cm² angesetzt worden ist, sondern auch mit 200 cm² und 400 cm², wobei letztere eine nutzbare Reife (RDB-Versagen und Beendigung der SHB-Druckentlastung) zum Zeitpunkt der Auswertung erreicht hat, die anderen nicht.

Die Filterung während der SHB-Druckentlastung ist nicht angenommen worden, auch wenn dies realistischerweise berücksichtigt zu werden hätte. Die liegt in dem Umstand begründet, dass die Filtermodelle lediglich einen konstanten Filterfaktor (Verhältnis von der in den Filter eintretenden Masse zur in die Umgebung freigesetzte) berücksichtigen, der auch nachträglich in der Datenanalyse berücksichtigt werden kann.

Das Brennelementlagerbecken bleibt im KMV gekühlt, im SBO nicht. Es hat sich zumindest in MELCOR herausgestellt, dass eine Kühlung eine signifikante Senke für Dampf darstellt. Ferner kann über den Überlauf der Reaktorsumpf indirekt gekühlt werden.

3.3.2 Auswahl der Parameter

Durch elementare Überlegungen der Zusammenhänge zwischen Einflussgrößen und variierbarer technischer oder physikalischer Größen und nach Expertenschätzung, ist eine Auswahl von zu variierenden Parametern mit entsprechenden Variationsbreiten getroffen worden. Die Parametervariation stützt sich zum Teil auf jene in /GRS 19a/ z. T. sind sie nach Experteneinschätzung derart gewählt, dass sie zu einer signifikanten Variation von den genannten „Messgrößen“ führen. Eine Quantifizierung der Variationsbreite von Freisetzungen aus dem RKL oder der gesamten Anlage, ist nicht Ziel dieser Variationsrechnungen, so dass die Variationsbreite nicht zwingenderweise realitätsnah zu sein hat.

Im Folgenden sollen diese Parameter im Einzelnen erläutert werden:

1. Abbrand ($\tau_{\text{Abbr.}}$)

Der Abbrand des Kernbrennstoffes bestimmt sowohl die Nachzerfallsleistung als auch die Inventare der Spaltprodukte. Es ist dabei offensichtlich, dass die Menge an iodrelevanten Elementen, einen Einfluss auf die absolute Menge von ausgetragenen Iodspezies haben, daher werden beide Mengen auf das Anfangsinventar normiert. Somit werden lediglich die Verhältnisse zwischen den iodrelevanten Elementen variiert. Als Beweis sei die nuklidspezifische Dgl. für Auf- und Abbau aufgestellt. Der Aufbau ist dabei von der Neutronenstromdichte und dem Wirkungsquerschnitt von thermischen Neutronen an U-235 abhängig. Da jedoch eine konstante Leistung angenommen wird, kann vereinfacht eine konstante Aufbaurrate r_i angenommen werden. Der Abbau geschieht proportional zur Menge des Nuklids i :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = r_i - \lambda_i N_i(t) \quad (3.3)$$

Die simple Gleichung (3.3) wird mit dem Ansatz $N_i(t) = \beta \cdot e^{-\lambda_i t} + \alpha$ gelöst, genau dann, wenn $\alpha = \frac{r_i}{\lambda_i}$ (da $\dot{N}_i = -\lambda_i N_0 e^{-\lambda_i t} = -\lambda_i(N_i(t) - \alpha) = -\lambda_i N_i(t) - \lambda_i \alpha$). Für die Konstante β wird die Anfangsbedingung $N_i(t_0 = 0) = 0$ verwendet, so dass folgt: $\beta = -\frac{r_i}{\lambda_i}$. Somit folgt der finale Ausdruck: $N_i(t) = -\frac{r_i}{\lambda_i} \cdot e^{-\lambda_i t} + \frac{r_i}{\lambda_i} = \frac{r_i}{\lambda_i} (1 - e^{-\lambda_i t})$.

Methode der Variation der Konstanten mit dem Ansatz $N_i = c(t)e^A$, hieraus folgt für die Ableitung: $\dot{N}_i = \dot{c}e^A + c\dot{A}e^A = \dot{c}e^A + \dot{A}N_i$. Diese Gleichung löst die Dgl., falls $-\lambda_i = \dot{A}$ und $\dot{c}e^A = r_i$ ist. Hieraus folgt sofort: $A = -\lambda_i(t - t_0)$ und $\dot{c} = r_i e^{-A} = r_i e^{\lambda_i(t-t_0)}$. Die Größe c ist dann $c = \frac{r_i}{\lambda_i} e^{\lambda_i(t-t_0)} + \gamma$. Somit ergibt sich für N_i : $N_i = \left(\frac{r_i}{\lambda_i} e^{\lambda_i(t-t_0)} + \gamma\right) e^{-\lambda_i(t-t_0)} = \frac{r_i}{\lambda_i} + \gamma e^{-\lambda_i(t-t_0)}$. Mit der Anfangsbedingung $N_i(t_0 = 0) = 0$ folgt für γ : $\gamma = -\frac{r_i}{\lambda_i}$, welches zum finalen Ausdruck führt:

$$N_i(t) = \frac{r_i}{\lambda_i} (1 - e^{-\lambda_i(t-t_0)}) = \frac{r_i}{\lambda_i} - \frac{r_i}{\lambda_i} e^{-\lambda_i(t-t_0)} \quad (3.4)$$

Über $\dot{N}_i(t) = r_i e^{-\lambda_i(t-t_0)} = -\lambda_i \left(N_i(t) - \frac{r_i}{\lambda_i}\right) = r_i - \lambda_i N_i(t)$ überzeugt man sich leicht, dass (3.4) die Dgl. löst. Das Verhältnis zwischen den Mengen des Nuklids i und j ist trivialerweise:

$$\frac{N_i}{N_j} = \frac{r_i \lambda_j}{r_j \lambda_i} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda_i(t-t_0)}}{1 - e^{-\lambda_j(t-t_0)}} \quad (3.5)$$

Es lässt sich am Ausdruck (3.5) leicht erkennen, dass sich das Verhältnis mit der Zeit ändert (es sei denn, es gilt $\lambda_i = \lambda_j$).

Der Abbrand wird in ATHLET-CD als Abbrandtage in der Abbrandhistorie eingegeben. Die Revisionszeiten dazwischen werden nicht variiert. Der Basiswert beträgt hierbei $\tau_{\text{Abbr.}} = 330.0 \text{ d}$ und wird im Bereich $300.0 \text{ d} \leq \tau_{\text{Abbr.}} \leq 330.0 \text{ d}$ gleichverteilt variiert. Die Werte verstehen sich als Abbrandtage pro Jahr, wobei den einzelnen Kernringen in ATHLET-CD mehrere Abbrandjahre zugeordnet sind (der innerste beinhaltet dabei den neuesten Brennstoff, der äußerste den ältesten).

2. Spezifische Brennstoffleistung (p_{BS})

Die spezifische Leistung, die sich als thermische Leistung pro Brennstoffmasse ($p_{BS} = \frac{P_{gesamt}}{m_{gesamt}^{BS}}$) versteht, bestimmt ebenfalls maßgeblich das Spaltproduktinventar und die Nachzerfallsleistung. Der Wert kann ebenfalls für die vier vorhandenen Kernringe einzeln variiert werden, dies ist jedoch nicht notwendig, da lediglich eine gewisse Variation erforderlich ist und kein „best estimate“ Wert. Die spezifische Leistung ist im Bereich $\frac{\Delta p_{BS}}{p_{BS}^0} = \pm 15\%$ gleichverteilt variiert, wobei der Basiswert bei $p_{BS}^0 = 36,4 \frac{MW}{t_{SM}}$ liegt (SM: Schwermetall, BS: Brennstoff).

Die spezifische Leistung ist ebenfalls relevant für den Abbrand. Deren Abbrandzeiten werden mit den Einträgen zum zeitlichen Verlauf der Leistung (Leistungshistorie) eines jeden Kernringes i verglichen. Jeder Kernring hat nun das Alter T_i , dass sich aus Leistungsphase Δt_j^P und Revisionsphase Δt_j^R zusammensetzt:

$$T_i = \sum_{j=1}^i \Delta t_j^P + \Delta t_j^R \quad (3.6)$$

In (3.6) steht der Index j für die einzelnen Phasenabfolgen von Leistungsphase und Revision. Dies bedeutet, dass der äußerste Kernring die längste Leistungshistorie aufweist. Die Reaktorleistung P_i für die einzelnen Phasen ist:

$$P_i(t) = \begin{cases} P_0 \text{ für } \sum_{j=1}^{i-1} (\Delta t_j^P + \Delta t_j^R) < t \leq \Delta t_i^P + \sum_{j=1}^{i-1} (\Delta t_j^P + \Delta t_j^R) \\ 0 \text{ für } \sum_{j=1}^{i-1} (\Delta t_j^P + \Delta t_j^R) < t \leq \sum_{j=1}^i (\Delta t_j^P + \Delta t_j^R) \end{cases} \quad (3.7)$$

Der Index i steht somit für die einzelnen Betriebsjahre des Reaktors, welche sich ebenfalls auf jeden Reaktorring ($i = 1, \dots, 4$) beziehen.

Die spezifische Leistung ist für die Einträge in die Leistungshistorie ist die Leistung P_i auf die Brennstoffmasse zu normieren.

3. Versagensdehnung der Hüllrohre (ε_{HR})

Während der Kernaufheizung im Unfallszenario heizen sich ebenfalls die Hüllrohre auf, so dass diese eine Dehnung erfahren (*ballooning*). Diese Dehnung findet ihr Ende beim Zerreißen des Hüllrohrmaterials, da der Innendruck dann schlagartig abfällt und kein Differenzdruck auf dem Hüllrohr mehr lastet. Der entsprechende Grenzwert ε_{HR} bestimmt den zeitlichen Verlauf der Kernzerstörung und der Freisetzung (Beginn der Freisetzung mit Hüllrohrversagen). Der Basiswert liegt bei $\varepsilon_{HR}^0 = 0,38$ und wird im Bereich $\frac{\Delta\varepsilon_{HR}}{\varepsilon_{HR}^0} = \pm 5\%$ gleichverteilt variiert.

4. Grenzmassen der Schmelze zur Verlagerung ins untere Plenum

$$(m_{tot}^{Schmelze}, m_{keramisch}^{Schmelze})$$

Die Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum ist ein wesentliches Maß des zeitlichen Verlaufs der Kernzerstörung. Ferner wird hierdurch auch die Form des Brennstoffes bestimmt. Während vor der Verlagerung der Kern degradiert ist, jedoch teilweise noch eine geometrisch bestimmte Form hat (z. B. nur teilzerstörte Brennelemente im Außenbereich), ist dies nach Verlagerung ins untere Plenum nicht mehr gegeben. Hierdurch kann sich beispielsweise die Oxidation der Metalle wie Zirkalloy oder Eisen (im Stahl) ändern und hat somit Einfluss auf Druck und Temperaturverlauf im RKL. Die Verlagerung wird in ATHLET-CD über die Massen der kompletten Schmelze $m_{tot}^{Schmelze}$ und der keramischen Schmelze $m_{keramisch}^{Schmelze}$ getriggert, wobei beide Abfragen UND-verknüpft sind. Die Basiswerte liegen bei $m_{tot,0}^{Schmelze} = 4,5 \cdot 10^4$ kg und $m_{keramisch,0}^{Schmelze} = 1,0 \cdot 10^4$ kg und werden im Bereich $\frac{\Delta m_{tot, keram.}^{Schmelze}}{m_{tot, keram. 0}^{Schmelze}} = \pm 10\%$ gleichverteilt variiert. Bei der Variation ist die Abhängigkeit $m_{keramisch}^{Schmelze} < m_{tot}^{Schmelze}$ implementiert worden, obgleich eine Überschneidung der Variation durch die Gleichverteilung nicht möglich ist.

5. Fläche der durch das Leck abgeplatzten Isolation an der Hauptkühlmittelleitung ($a_{Isol.}^{HKML}$)

Das in der Gruppe „KMV“ postulierte Leck führt zu einem Abplatzen der Isolierung mit dem die Hauptkühlmittelleitung (HKML), wie auch der Rest des RKL, ausgekleidet ist. Diese Isolierung bestimmt den Wärmeübergang bzw. Durchgang von RKL und Sicherheitsbehälter (SHB) und somit auch die Temperatur in der Region um das Leck herum.

Der Basiswert liegt bei $a_{\text{isol.0}}^{\text{HKML}} = 1,0$ und wird im Bereich $0,0 \leq a_{\text{isol.}}^{\text{HKML}} \leq 1,0$ gleichverteilt variiert. Eine Abhängigkeit zur Leckgröße ist nicht vorgesehen.

In der „SBO“-Gruppe wird dieser Parameter nicht variiert.

6. Wärmeübergang an RKL-Strukturen ($b_{\text{Wärmeüb.}}^{\text{RKL}}$)

Die Wärmeübergangskoeffizienten bestimmen den Wärmeübergang und Durchgang durch die RKL-Strukturen, so dass eine Variation die Temperatur im Innern bestimmt. In ATHLET-CD können diese mittels Korrelationen in Abhängigkeit von z. B. der Reynolds-Zahl berechnet werden oder werden vom Anwender eingetragen. An der Außenseite einiger RKL-Strukturen ist eine solche vorgegeben, die mit dem Faktor $b_{\text{Strukt.}}^{\text{RKL}}$ variiert wird. Der hierfür verwendete Wärmeübergangskoeffizient beträgt $\alpha = 4,4 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}$ und der Basiswert des Variationsfaktors entsprechend $b_{\text{Wärmeüb.0}}^{\text{RKL}} = 1,0$, wobei dieser im Bereich

$\frac{\Delta b_{\text{Wärmeüb.}}^{\text{RKL}}}{b_{\text{Wärmeüb.0}}^{\text{RKL}}} = \pm 20 \%$ variiert wird.

7. Zugfestigkeit der unteren Kalotte ($R_{\text{m.}}^{\text{u. Kal.}}$)

Das Versagen der unteren Kalotte durch den Einfluss von Corium, das in das untere Plenum verlagert worden ist, bestimmt maßgeblich den zeitlichen Verlauf des Unfallgeschehens und markiert den Übergang von der „in vessel“-Phase zur „ex vessel“-Phase. Eine Variation des Versagenszeitpunktes bestimmt auch die Zeit, die für die Iodchemie im RKL zur Verfügung steht und ist somit ein wichtiger Einflussfaktor. Das Versagen wird über die Zugfestigkeit des RDB-Stahls in diesem Bereich variiert. Der entsprechende Basiswert liegt bei $R_{\text{m.0.}}^{\text{u. Kal.}} = 3,0 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ und wird im Bereich $\frac{\Delta R_{\text{m.}}^{\text{u. Kal.}}}{R_{\text{m.0.}}^{\text{u. Kal.}}} = \pm 50 \%$ gleichverteilt variiert. Der Basiswert von $R_{\text{m.0.}}^{\text{u. Kal.}} = 3,0 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ liegt dabei bereits niedriger als die Nennzugfestigkeit des Stahls, welche bei $R_{\text{m}}^{20\text{MnMoNi5-5}} > 560 \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$ bei $20 \text{ }^\circ\text{C}$ bzw. $R_{\text{m}}^{20\text{MnMoNi5-5}} = 505 \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$ bei $300 \text{ }^\circ\text{C}$, der ungefähren Betriebstemperatur in RKL, wobei die Streckgrenze bei $R_{\text{p0,2}}^{20\text{MnMoNi5-5}} = 350 \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$ gemäß /KTA 17a/ liegt. Kriechen ist ein Phänomen, dass ab ca. 40 % der Schmelztemperatur und unterhalb der Streckgrenze auftritt. Das Phänomen basiert dabei auf verschiedenen Prozessen wie Diffusion, Versetzungskriechen (~duktile Verformung bei geringer Temperatur → dominant in Kernschmelz Szenarien) oder Versetzungsgleiten wie in /GRS 17a/ beschrieben. Im Modell ASTOR, welches als Modelloption in ATHLET-CD gegeben ist, siehe /GRS 93/, kann es

zum Kriechen oder auch zu einem Versagen aufgrund von Festigkeitsverringern kommen. Tatsächlich verwendet worden ist ein denkbar einfaches Modell, das nach Anschmelzen durch das Corium in unteres Plenum, die Spannung im Restmaterial mit dem einzugebenen Wert verglichen wird.

8. Kriech-Parameter der HKML (C)

Das Versagen der druckführenden Umschließung bestimmt maßgeblich den zeitlichen Ablauf des Unfallgeschehens während der „in vessel“-Phase, indem es direkten Einfluss auf den Druck im RKL nimmt. Bis zum Versagen der dfU ist der Druck im RKL im Bereich der Ansprechdrücke des Abblaseventils bzw. der Sicherheitsventile im Falle der Szenariogruppe „SBO“. Bleibt der Druck derart hoch, wird das Versagen der unteren Kalotte deutlich früher in Erscheinung treten, da die Materialspannung auf hohen Werten verharrt. Die Iodchemie wird durch den hohen Druck und die Zeit der „in-vessel“-Phase beeinflusst.

Für das Versagen kann ein Materialkriechen verantwortlich gemacht werden, das gemäß den Ausführungen unter Punkt 7 bereits unterhalb der Steckgrenze ab ca. 40 % der Materialschmelztemperatur in Erscheinung tritt. Ein sog. Larson-Miller-Modell berechnet dabei die Versagenszeit, die wie folgt definiert ist: $t_R = e^{\frac{P_{LM}}{T}-C}$, wobei T für die Materialtemperatur steht und der Parameter PLM von der Materialspannung abhängt. Ein Versagen wird angenommen, falls das Integral $\int \frac{dt}{t_R} = 1$ beträgt. P_{LM} wird dabei über $P_{LM} = a_1 + \sqrt{a_2 + a_3 \cdot \log_{10} \sigma}$ berechnet.

Für die Variation ist nun der Parameter C als eine einfache Eingriffsmöglichkeit identifiziert worden. Eine Variation wird über einen Faktor C' vorgenommen, dessen Basiswertes von $C'_0 = 1,0$ beträgt und im Bereich $\frac{\Delta C}{C_0} = \pm 20\%$ gleichverteilt variiert wird. Für eine Abschätzung, wie sich dies auf die Variation der Versagenszeit auswirkt, wird die einfache Differenz $\Delta t_R = e^{\frac{P_{LM}}{T}-C_0 \cdot (1+0,2)} - e^{\frac{P_{LM}}{T}-C_0 \cdot (1-0,2)}$ gebildet. Für C_0 wird der Wert $C_0 = 25$ verwendet, für die Temperatur ein Wert von beispielhaften $T = 600\text{ °C} = 873,15\text{ K}$ und für die Spannung ein Wert von $\sigma = p \cdot \frac{d_m}{2s} = \frac{17,0\text{ MPa} \cdot 0,803\text{ m}}{0,106\text{ m}} = 128,7\text{ MPa}$. Für P_{LM} betragen die Faktoren $(a_1, a_2, a_3) = (16.189,0\text{ K}, 2,5736 \cdot 10^8\text{ K}^2, -9,0228 \cdot 10^7\text{ K}^2)$, so dass für P_{LM} ein Wert von $P_{LM} = 24.373,8$, so dass eine Variation von t_R von $\Delta t_R = 0,124\text{ s}$ –

2.737,6 s folgt. Somit ist eine relativ große Variationsbreite erreicht, welche gewünscht ist.

9. Leckgröße (F_{Leck})

Für die Szenariogruppe „KMV“ ist ein offensichtlicher Variationsparameter die Leckgröße, welche den Druck im RKL bestimmt und ebenfalls wie lange die Phase der Einspeisung von HD- und/oder ND-Systemen andauert, da ein Sumpfbetrieb ausgeschlossen wird. Da der Druck und die Zeit z. B. durch den Einfluss auf die Nachzerfallsleistung wesentlichen Einfluss auf die Iodchemie haben, ist im Wesentlichen die Leckgröße und nicht der Ort entscheidend. Daher wird nur die Leckgröße des Lecks im heißen Strang variiert.

Die Leckgröße wird dabei zwischen $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \leq F_{\text{Leck}} \leq 0,4418 \text{ m}^2$ normalverteilt variiert. Über die Art der Verteilung ist empirisch entschieden worden, so dass sowohl einige Vertreter in der Nähe der unteren Grenze als auch an der oberen Grenze sicher vorhanden waren. Die obere Grenze stellt dabei den Querschnitt der Hauptkühlmittelleitung dar.

10. DH-Ventil-Ansprechdrücke (a_{Vent})

Der Druck während der Phase innerhalb der „in-vessel“-Phase, in der die druckführende Umschließung intakt ist, wird in erster Linie von der Dampf- und Gasentwicklung bzw. von den Ansprechdrücken der Druckhalterventile (Abblaseventil, Sicherheitsventile) bestimmt. Der Druck bestimmt wiederum die Freisetzung von Elementen aus dem Brennstoff gemäß dem CORSOR-P-Ansatzes und es wird Einfluss auf die Iodchemie im RKL genommen wie z. B. über die Dampfdrücke der iodrelevanten Spezies.

Die Variation der Ansprechdrücke bzw. der zugehörigen Hysterese wird durch einen einfachen Faktor bewerkstelligt, dessen Basiswert $a_{\text{Vent},0} = 1,0$ beträgt und im Bereich $\frac{\Delta a_{\text{Vent}}}{a_{\text{Vent},0}} = \pm 10 \%$ gleichverteilt variiert.

11. Flutbehälter-Füllstands-Grenzwert ($h_{\text{FB}}^{\text{Grenz}}$)

Die Menge, die im Falle der „KMV“-Szenariengruppe in den RKL eingespeist wird, bestimmt die Phase geringer Temperatur und rel. hohen definierten Druckes, sollte das

Leck nicht zu klein sein. Auch die Borkonzentration kann durch die Mischung mit dem RKL-KM-Inventar hierdurch beeinflusst werden. Durch die zeitliche Verzögerung des Kernschadens mit der Einspeisung wird ebenfalls die Nachzerfallsleistung und damit die Geschwindigkeit der Kernzerstörung beeinflusst.

Die eingespeiste Menge wird über den Füllstands-Grenzwert in den Flutbehältern bestimmt, die als GCSM-Signal vorliegt und einfach variiert werden kann. Der Basiswert beträgt dabei $h_{\text{FB},0}^{\text{Grenz}} = 0,3 \text{ m}$ und wird im Bereich $0,3 \text{ m} \leq h_{\text{FB}}^{\text{Grenz}} \leq 13,05 \text{ m}$ gleichverteilt variiert.

12. Obere Grenze für die relative Dampfverfügbarkeit ($a_{\text{Ox}}^{\text{Dampf}}$)

Der Modellparameter ‚OXXLIM‘ beschreibt in ATHLET-CD die relative Dampfverfügbarkeit für die Zirkonium-Dampf-Reaktion an den Hüllrohren des Kerns. So kann die Oxidation lokal eingestellt werden, wenn nicht genug Dampf vorhanden ist bzw. der Parameter entsprechend gewählt wird.

Über diesen Parameter wird der Verlauf der Kernzerstörung und die Temperatur im RKL, da der Zirkonium-Brand einen hohen Leistungseintrag in den RKL darstellt. Ferner hat dies wahrscheinlich Auswirkungen auf die Gesamtmenge an Zirkonium, das während der „in-vessel“-Phase oxidiert und somit wird der Gesamt-Wärmeeintrag in dieser Phase beeinflusst.

Der Basiswert dieses Parameters liegt bei $a_{\text{Ox},0}^{\text{Dampf}} = 0,1$ und wird im Bereich $0,1 \leq a_{\text{Ox}}^{\text{Dampf}} \leq 0,5$ gleichverteilt variiert.

13. Dicke der anfänglichen Oxidschicht ($d_{\text{Ox}}^{\text{ini}}$)

Dieser Modellparameter beschreibt die anfängliche Oxidschichtdicke auf der Außenseite der Hüllrohre. Mit Hilfe dieses Parameters kann auf die Gesamtmenge an Zirkonium Einfluss genommen werden, das im Unfallablauf oxidieren kann. Somit hat dieser Parameter Einfluss auf den zeitlichen Verlauf des Unfallgeschehens und auf die Temperatur im RKL, sowie die Wasserstoffmenge ebendort.

Der Basiswert beträgt hierbei $d_{\text{Ox},0}^{\text{ini}} = 5,0 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ und wird im Bereich $1,0 \cdot 10^{-6} \text{ m} \leq d_{\text{Ox}}^{\text{ini}} \leq 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ gleichverteilt variiert.

14. Borkonzentration im RKL-Kühlmittel (c_{Bor})

^{10}B stellt mit $\sigma_n(\langle E_n \rangle = 0,0253 \text{ eV}) = 3837 \text{ barn}$ für die Reaktion $^{10}\text{B}(n, \alpha) \text{ } ^7\text{Li}$ ein starkes Neutronengift dar, das in einem Druckwasserreaktor für die Abbrandkompensation verwendet wird. Damit variiert die Borkonzentration mit dem Abbrand über den Brennstoffzyklus. Die Basis-Borkonzentration beträgt für die Simulationen $c_{\text{Bor},0} = 1.125 \text{ ppm}$ und wird im Bereich $50 \text{ ppm} \leq c_{\text{Bor}} \leq 2200 \text{ ppm}$ gleichverteilt variiert. Die obere Grenze stellt dabei einen Wert für den Brennelementwechsel dar und wird im Volllastbetrieb nicht erreicht.

15. Nodalisation (a_{Noda}^i)

Neben der Variation technischen Parametern oder von Modellparametern, ist entschieden worden, auch den Einfluss der Feinheit der Nodalisation zu variieren. Diese Variation bezieht sich auf die verschiedenen Elemente der SAFT-Pfade, die für die Gruppen „KMV“ und „SBO“ unterschiedlich sind. So ist nur im „SBO“-Eingabedatensatz eine SAFT-Pfadmodellierung für die Abblaseleitungen zum Abblasebehälter vorhanden.

Die Variation des Faktors a_{Noda} wird dabei diskret im Bereich $1 \leq a_{\text{Noda}}^i \leq 3$ mit $a_{\text{Noda},0}^i = 1$ gleichverteilt vorgenommen. Dieser Faktor wird auf die Anzahlen der Kontrollvolumina in den SAFT-Pfadobjekten wie Abblaseleitung oder Hauptkühlmittelleitung bezogen. Im Falle der Verdreifachung der Nodalisationsfeinheit wird eine vergrößerte Rechenzeit erwartet. Da nun mehrere Objekte vorhanden sind, werden ebenfalls mehrere Variationsfaktoren unabhängig voneinander variiert. Im Falle der „SBO“-Gruppe sind acht Faktoren vorhanden (HKML, VAL [3 Faktoren für 3 Objekte], DH, ABV-Abblaseleitung, SiV1-Abblaseleitung, SiV2-Abblaseleitung) und im Falle der „KMV“-Gruppe lediglich zwei (HKML [2 Faktoren für 2 Objekte]).

3.3.3 Simulationsdurchführung

Aufgrund der Erfahrung, dass nicht alle Sätze an Parametern gleich stabile Simulationen zur Folge haben, muss mit der Aufgabe der ein- oder anderen Simulation gerechnet werden. Entsprechend sind mehr Simulationen anzusetzen als zunächst notwendig, wobei hierbei das 1,5-fache der Anzahl der variierten Parameter als Orientierung gilt.

Unter weiterer Berücksichtigung der Kapazitäten und der erfahrungsgemäßen Lauffähigkeit der Eingabedatensätze sind 80 Simulationen für die SBO-Gruppe und 60 für die KMV-Gruppe angesetzt worden. Aufgrund der Vielzahl der Simulationen ist die Durchführung auf den GRS-eigenen HPC-Rechencluster – genannt „Manitu“ – vollzogen worden.

Wie erwartet ist es dabei zu numerischen Instabilitäten gekommen, die ein häufiges Eingreifen erfordert hat. Dieses hat im Wesentlichen darin bestanden, nach einem Abbruch ein gewisser Zeitbereich um die Abbruchzeit herum mit einem geringeren maximalen Zeitschritt erneut zu simulieren. Als Zeitpunkt für eine Auswertung ist das RDB-Versagen ausgewählt worden. Nicht alle Rechnungen sind zu diesem Zeitpunkt simuliert worden oder laufen derzeit noch und können in dieser Analyse nicht mehr berücksichtigt werden. Es liegen Ergebnisse für 30 (SBO-Gruppe) bzw. 24 (KMV-Gruppe) Simulationen vor.

3.3.4 Ergebnisse der SBO-Gruppe

Im Folgenden sollen nun die für den Iodaustrag relevanten Größen gezeigt werden. Hierzu gehören zunächst allgemeine Größen wie Druck und Temperatur und anschließend die Austräge der wesentlichen Spezies, deren Anteil an der Gesamtfreisetzung mindestens 1 % betragen haben ($\frac{m_i^{\text{I aus } i}}{\sum_i m_i^{\text{I aus } i}}$ mit $m_i^{\text{I aus } i} = \frac{M_I}{\sum_j \beta_j \cdot M_j}$, $m_i^{\text{I aus } i}$: Masse des Iods in der Spezies i , β_j : Stöchiometriefaktor des Elementes j in der Iodspezies i , M_k : molare Masse des Elementes k). Diese Spezies sind im Folgenden aufgelistet:

1. AgI
2. Cs₂I₂
3. CsI
4. FeI₂
5. HI
6. IRb

Austräge, physikalische Größen

In den Abbildungen Abb. 3.22, Abb. 3.23 und Abb. 3.24 sind die Nachzerfallsleistung, der Druck und die Dampftemperatur im oberen Plenum gezeigt. Die Nachzerfallsleistung ist jene, die im Brennstoff gegeben ist. Aus diesem Grunde nimmt sie mit der Frei-

setzung von Radionukliden zu bestimmten Zeiten stärker ab als das Verhalten der Gesamtnachzerfallsleistung erwarten lässt. Druck und Temperatur variierten vor der Kernfreilegung in einer Weise, die weitgehend von dem Ansprechdruck des Abblaseventils und der Sicherheitsventile bestimmt wird. Nach der Freilegung von Teilen des Kerns, kann der Dampf überhitzen, so dass sich deren Temperaturen mitunter jenen annähern können, die auch die Hüllrohre zeigen.

In Abb. 3.25 sind die Iodinventare (Elementmasse) des Kerns für die einzelnen Variationen gegeben. Die Mengen sind zunächst konstant, solange der Kern intakt ist, anschließend wird Iod aus dem Kern freigesetzt, so dass die Masse abnimmt.

Im Falle der Austräge der einzelnen Iodspezies, die in den Abbildungen Abb. 3.27 bis Abb. 3.32 gezeigt und auf das Kerninventar normiert sind, erkennt man eine deutliche Streuung der Ergebnisse. Eine quantitative Bewertung kann bei der Betrachtung dieser Abbildungen nicht durchgeführt werden. Für eine Bewertung müssen nun die Variationsgrößen bzw. die selbst indirekt variierten Größen herangezogen werden.

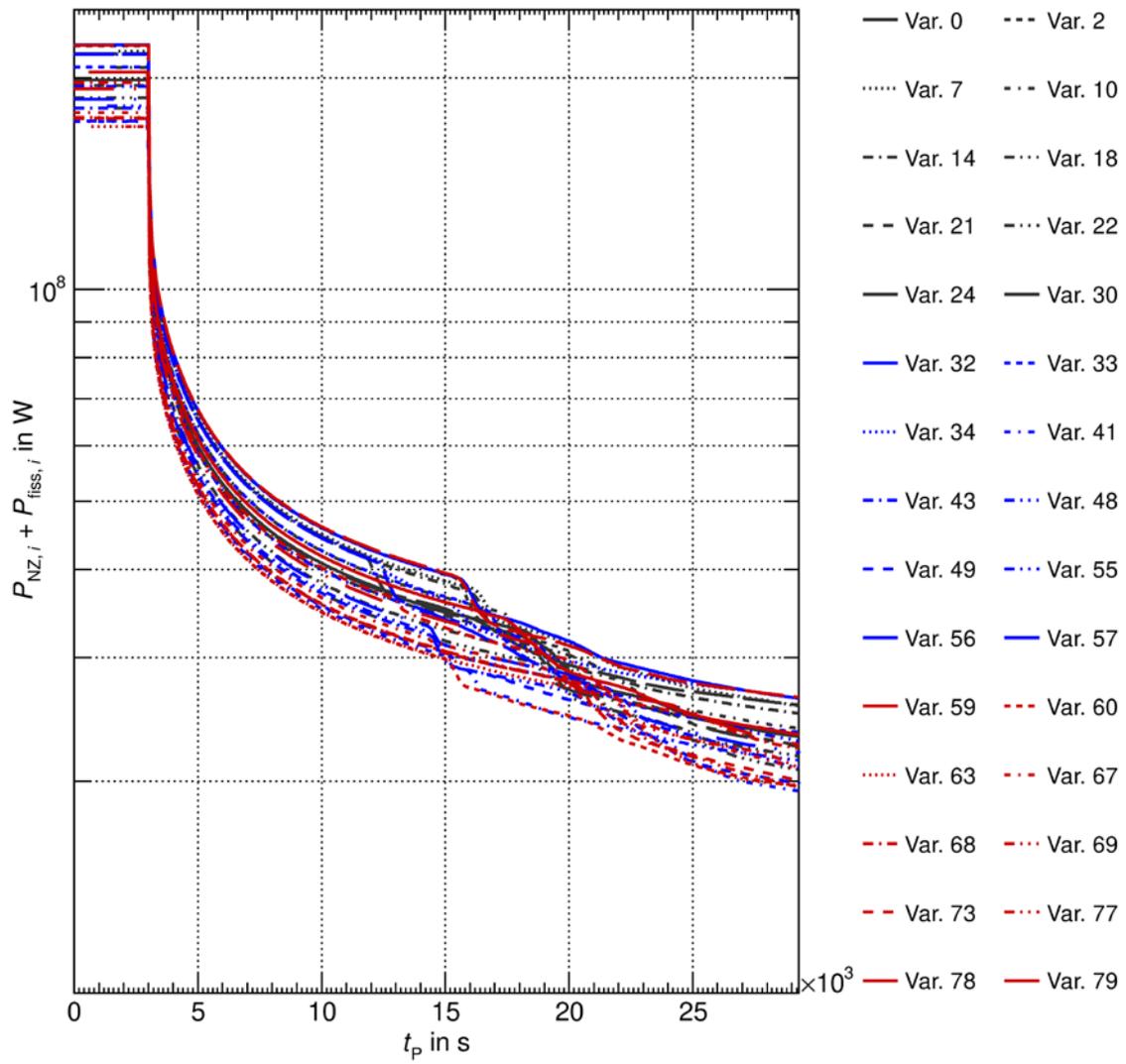


Abb. 3.22 Nachzerfallsleistung

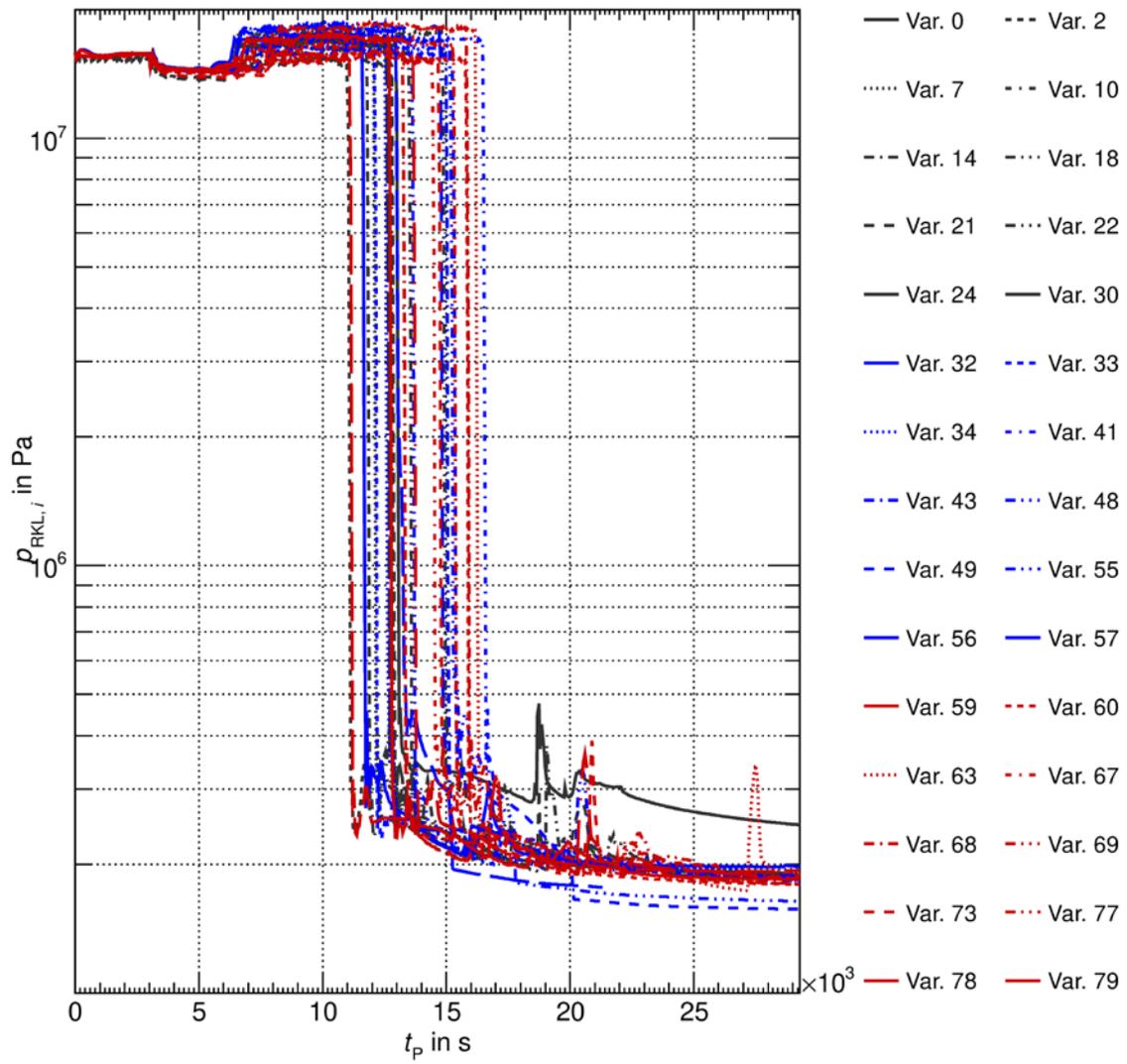


Abb. 3.23 Druck im oberen Plenum

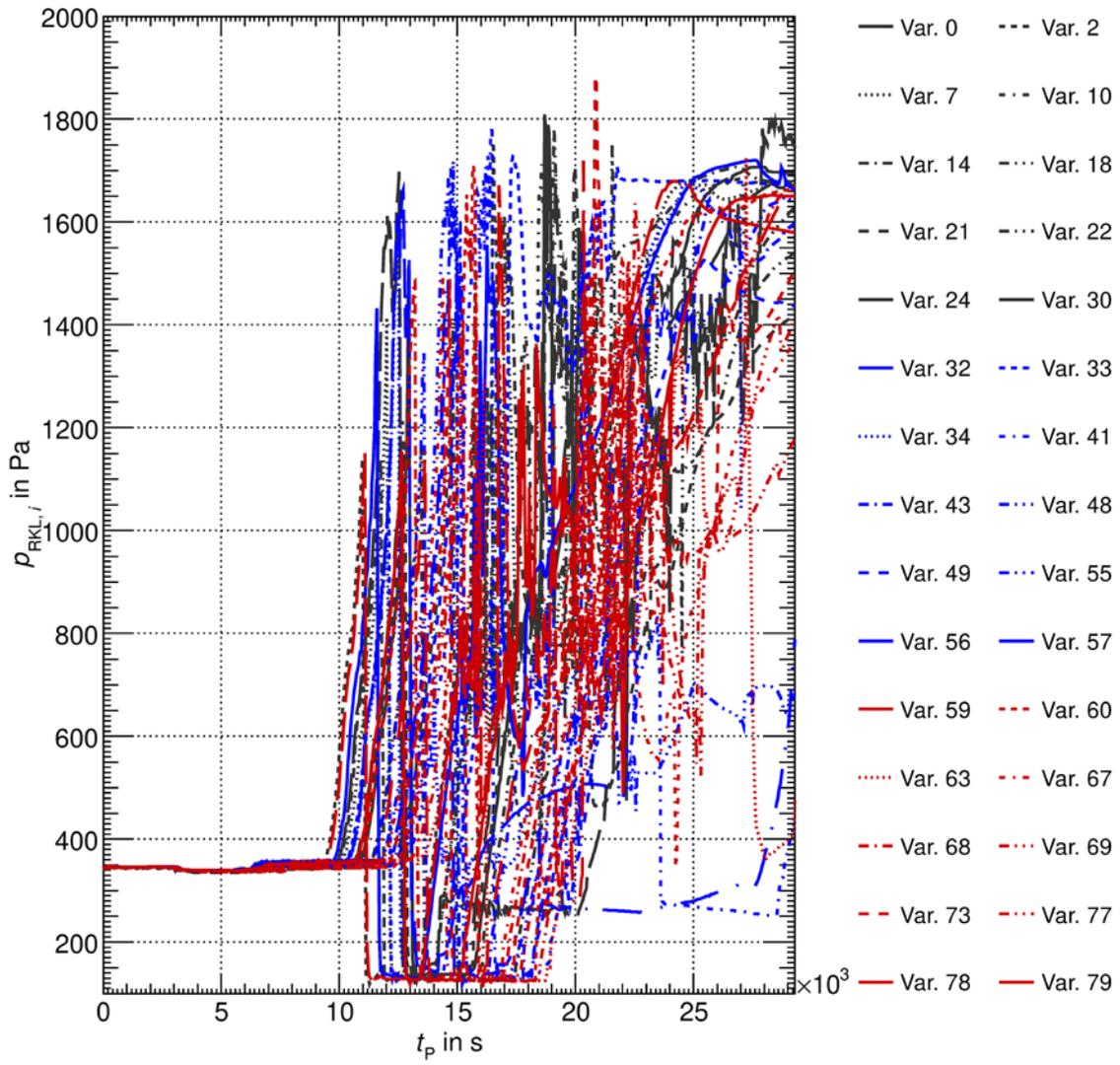


Abb. 3.24 Temperatur im oberen Plenum

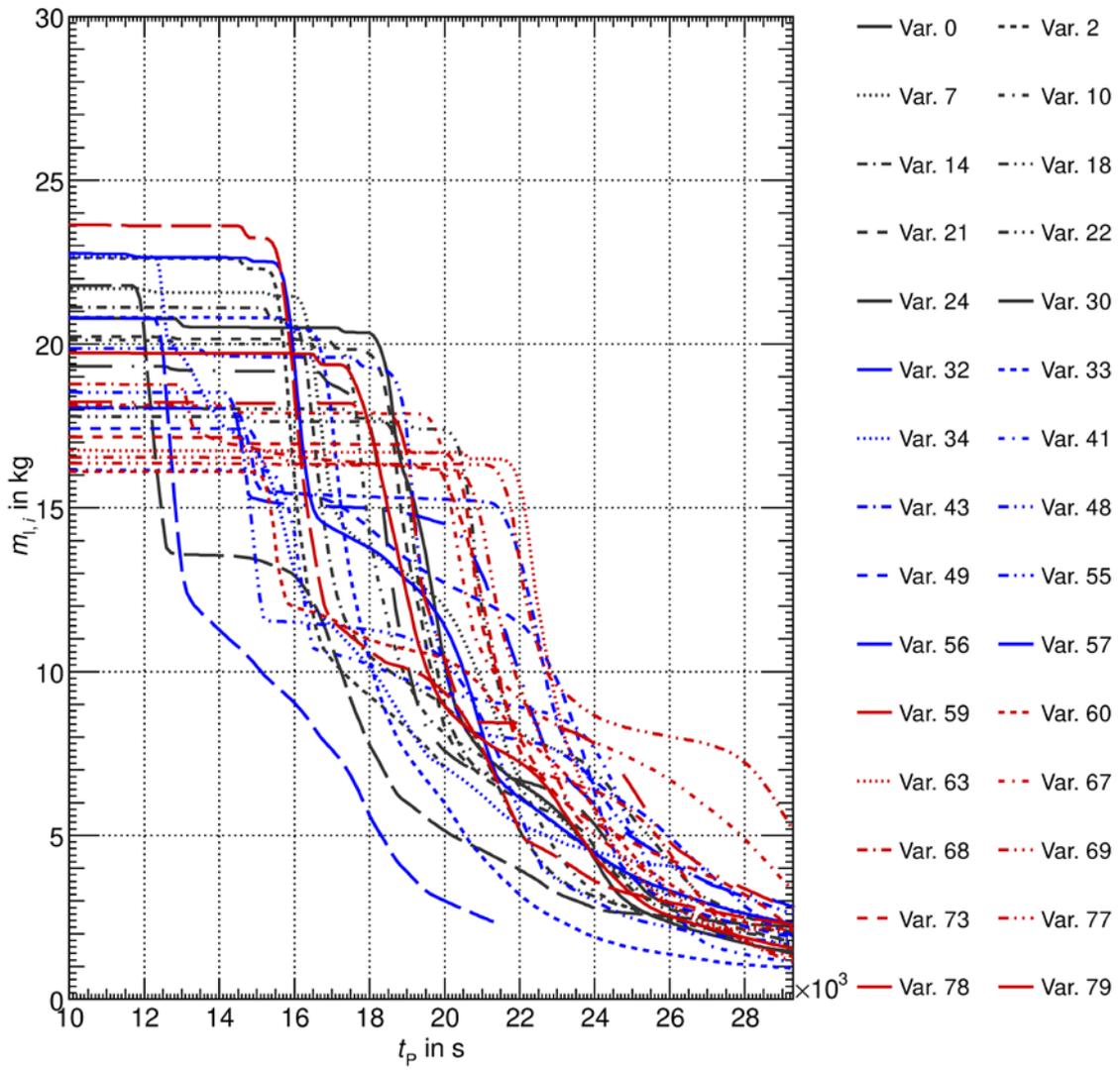


Abb. 3.25 Kerninventar des Elementes Iod

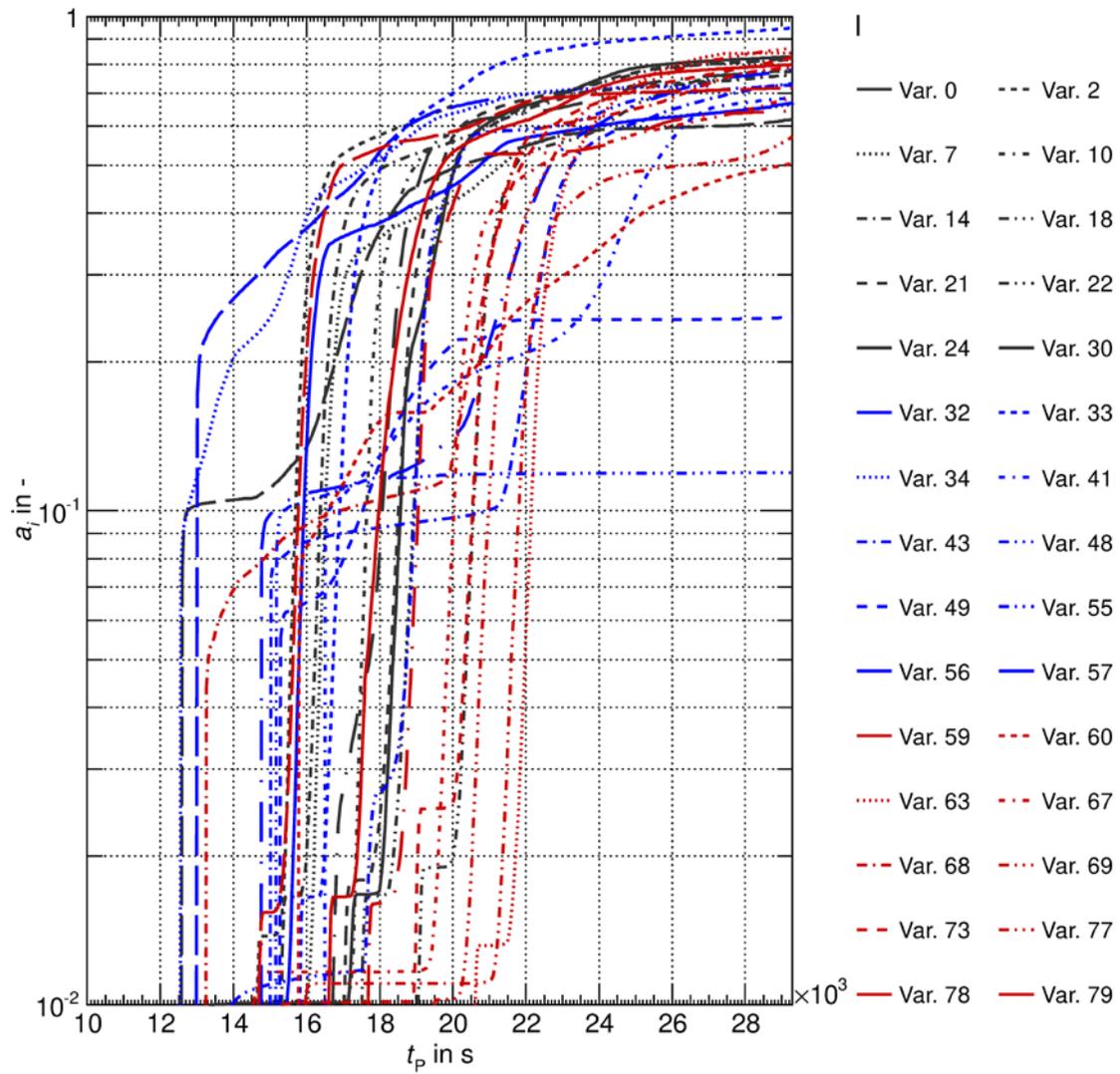


Abb. 3.26 Gesamtaustrag von Iod aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

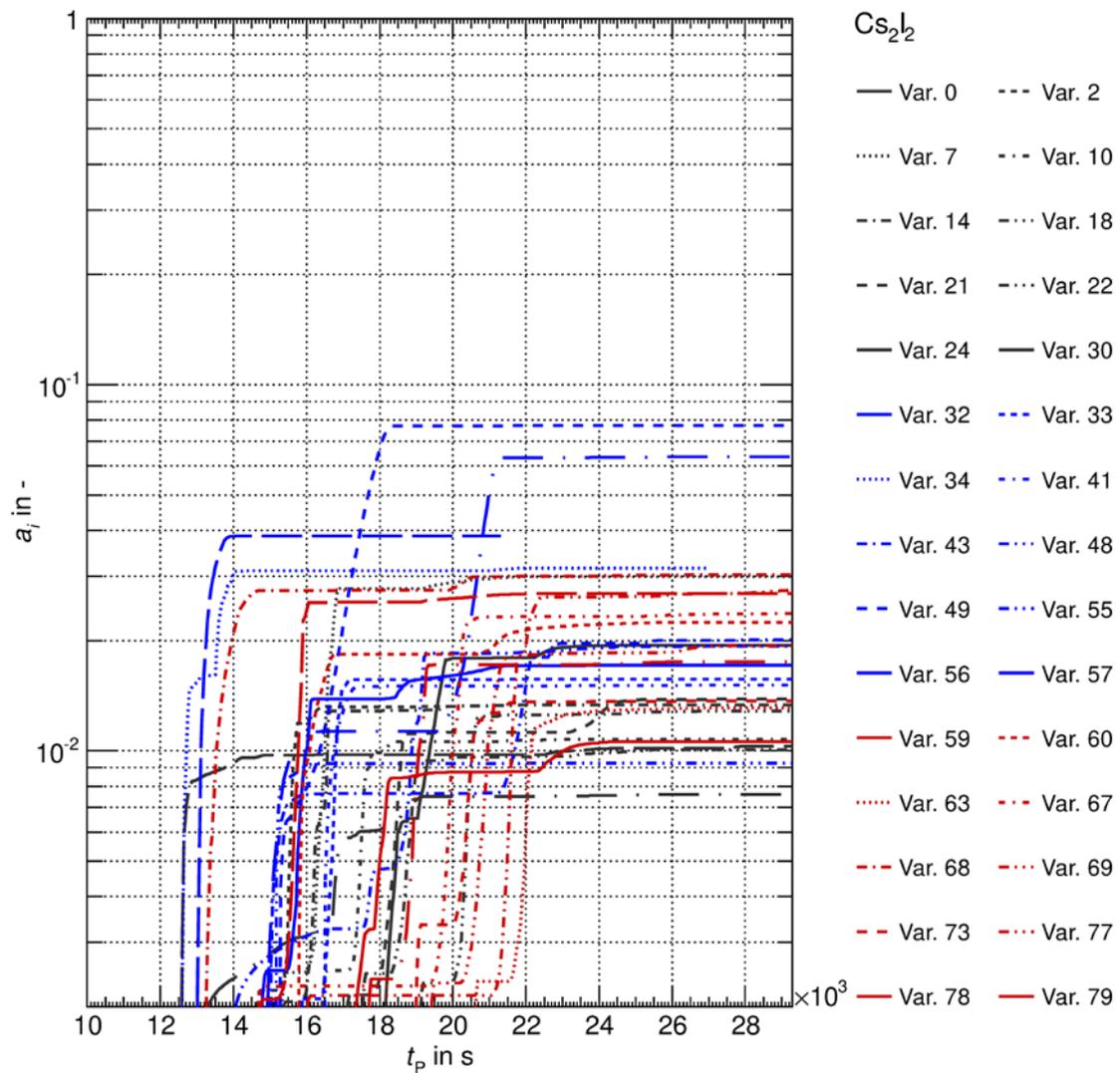


Abb. 3.27 Austrag von Iod in der Spezies Cs_2I_2 aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

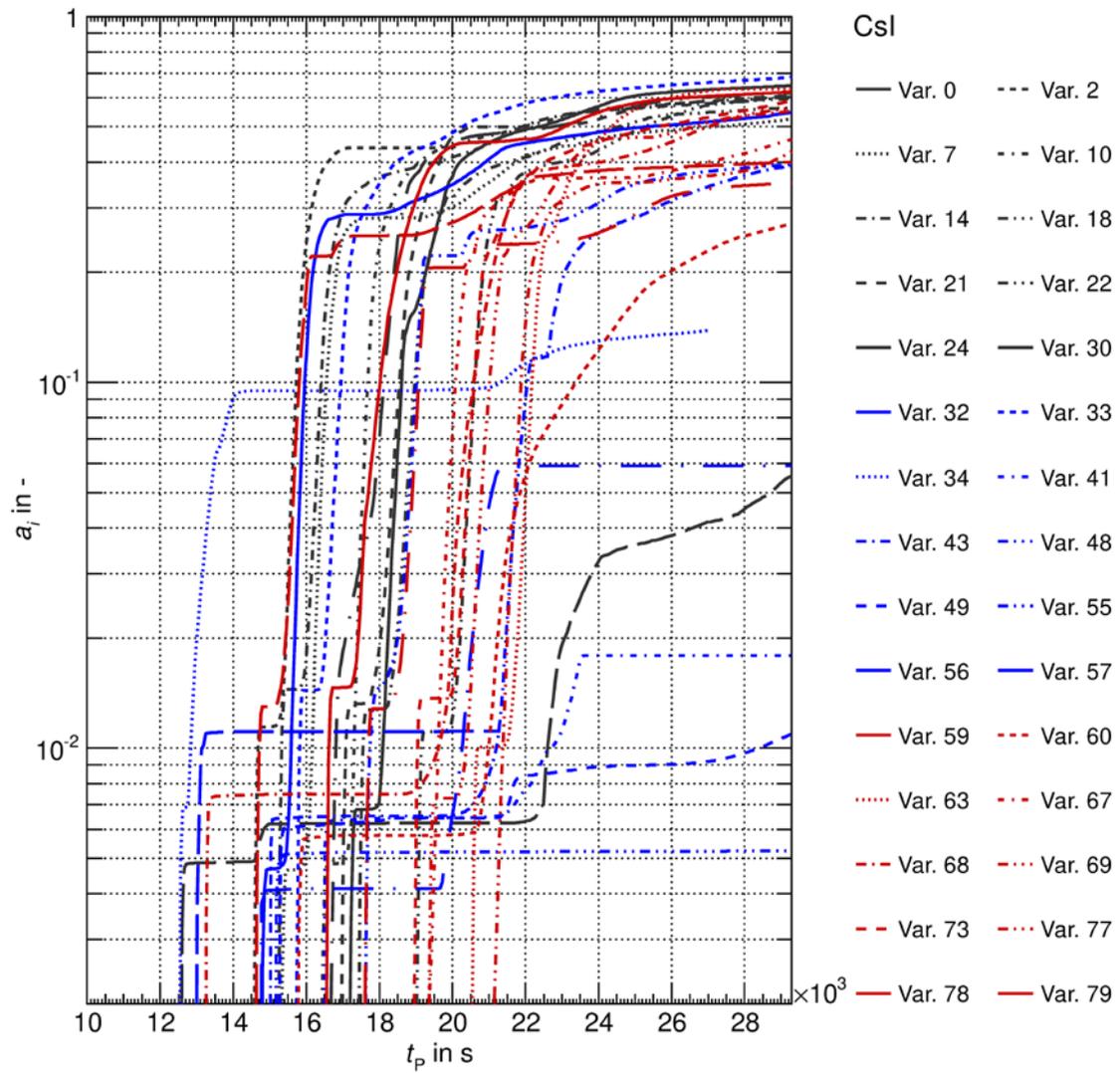


Abb. 3.28 Austrag von Iod in der Spezies CsI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

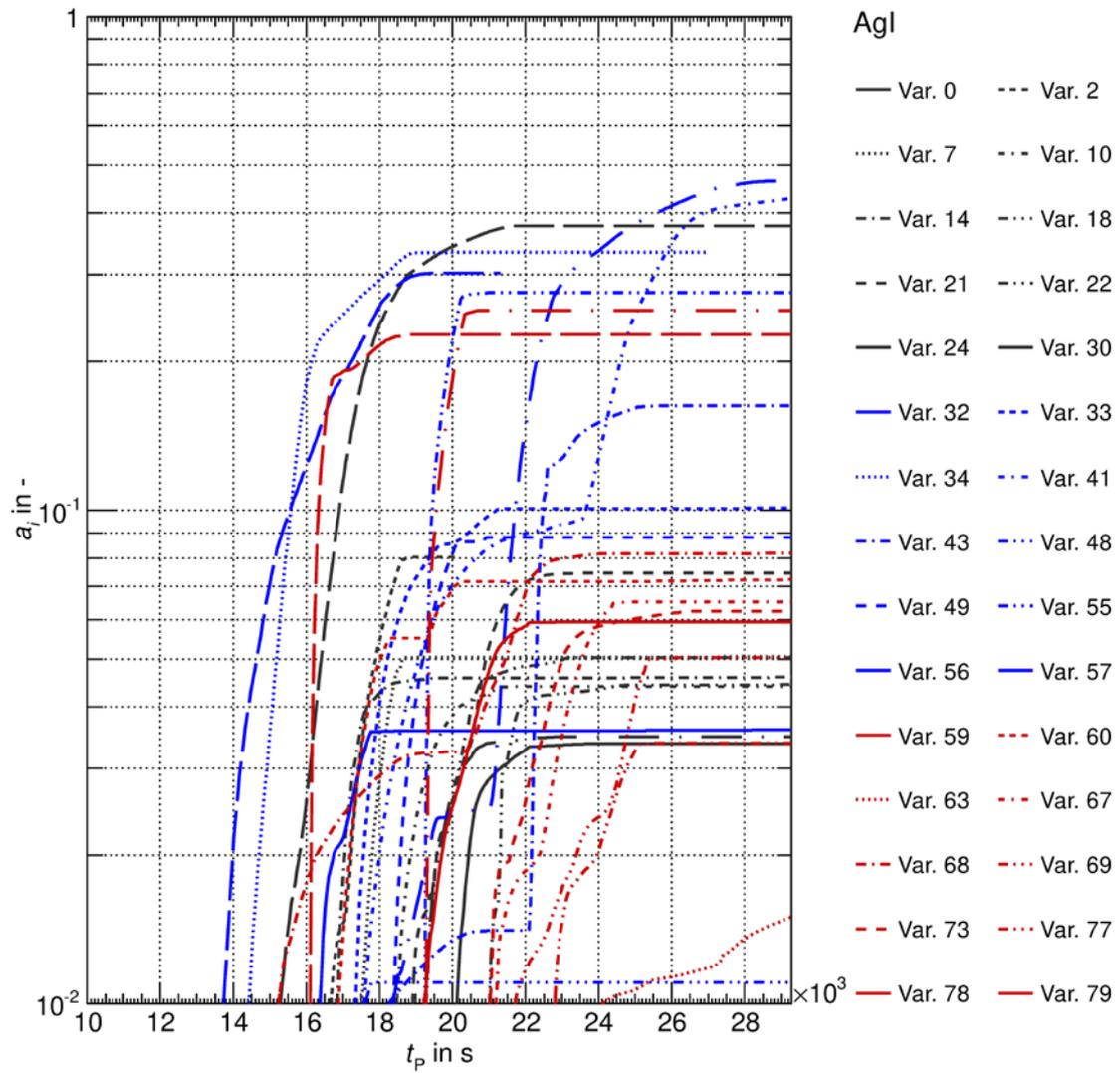


Abb. 3.29 Austrag von Iod in der Spezies AgI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

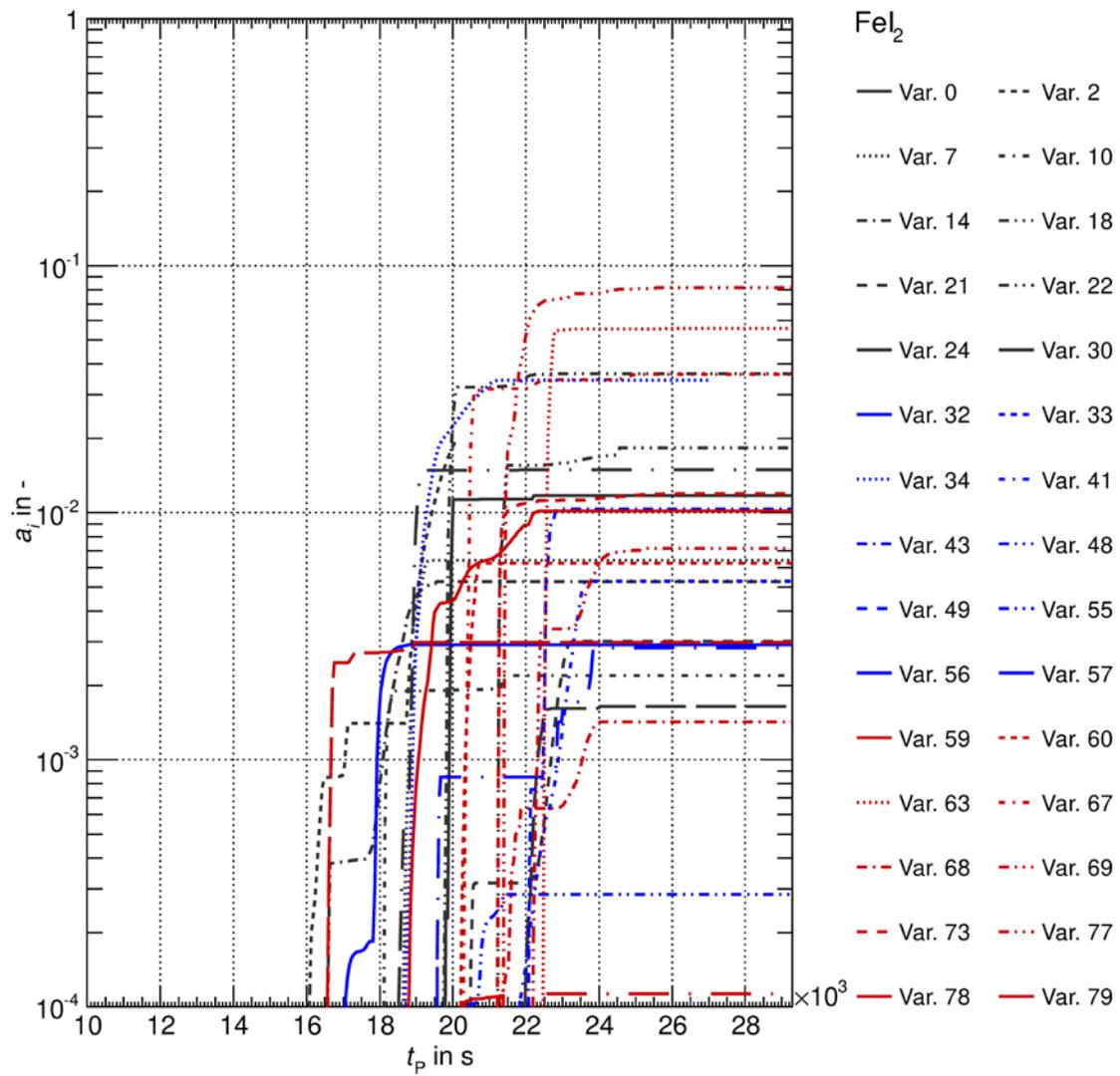


Abb. 3.30 Austrag von Iod in der Spezies FeI_2 aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

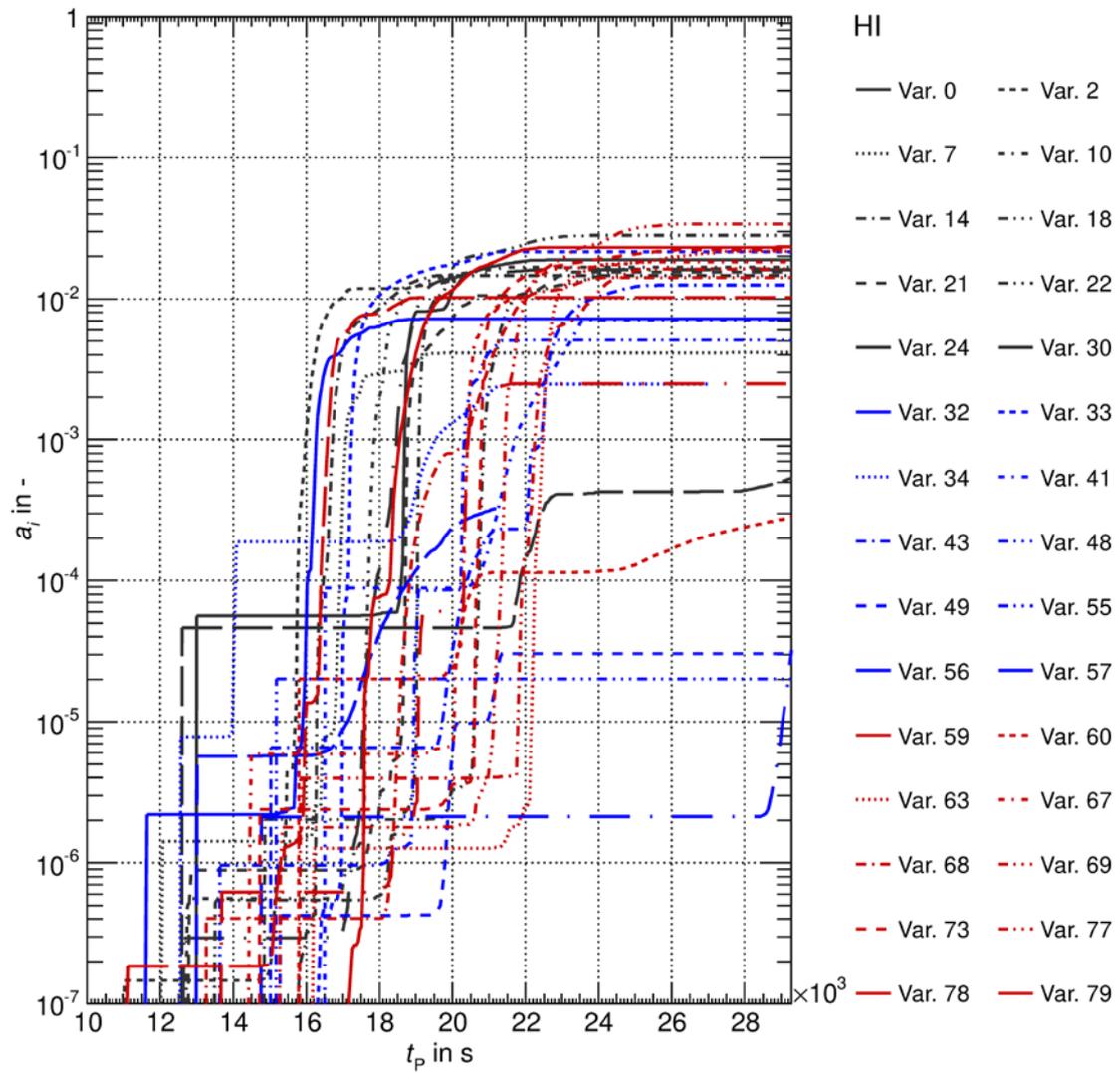


Abb. 3.31 Austrag von Iod in der Spezies HI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

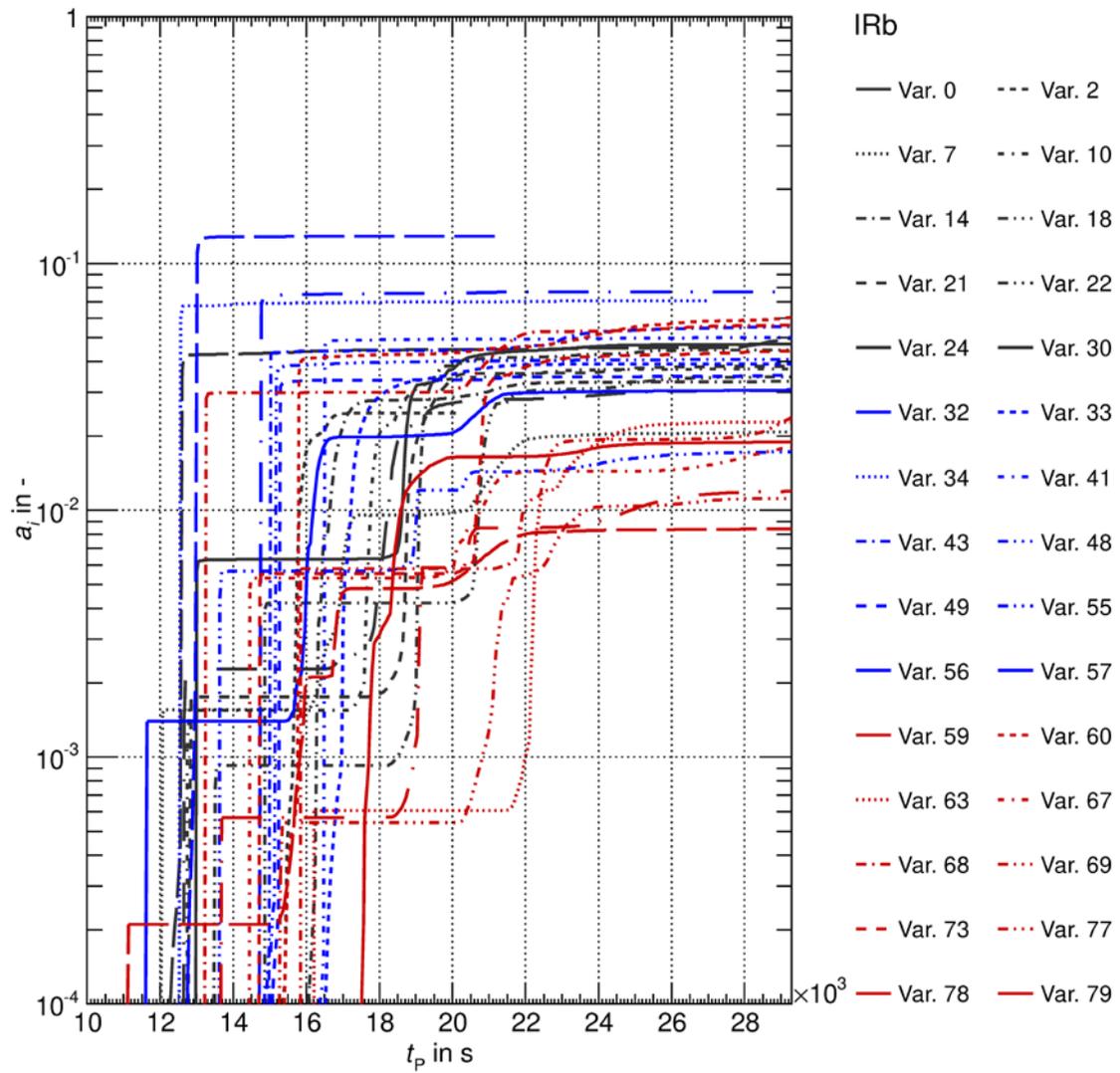


Abb. 3.32 Austrag von Iod in der Spezies IRb aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)

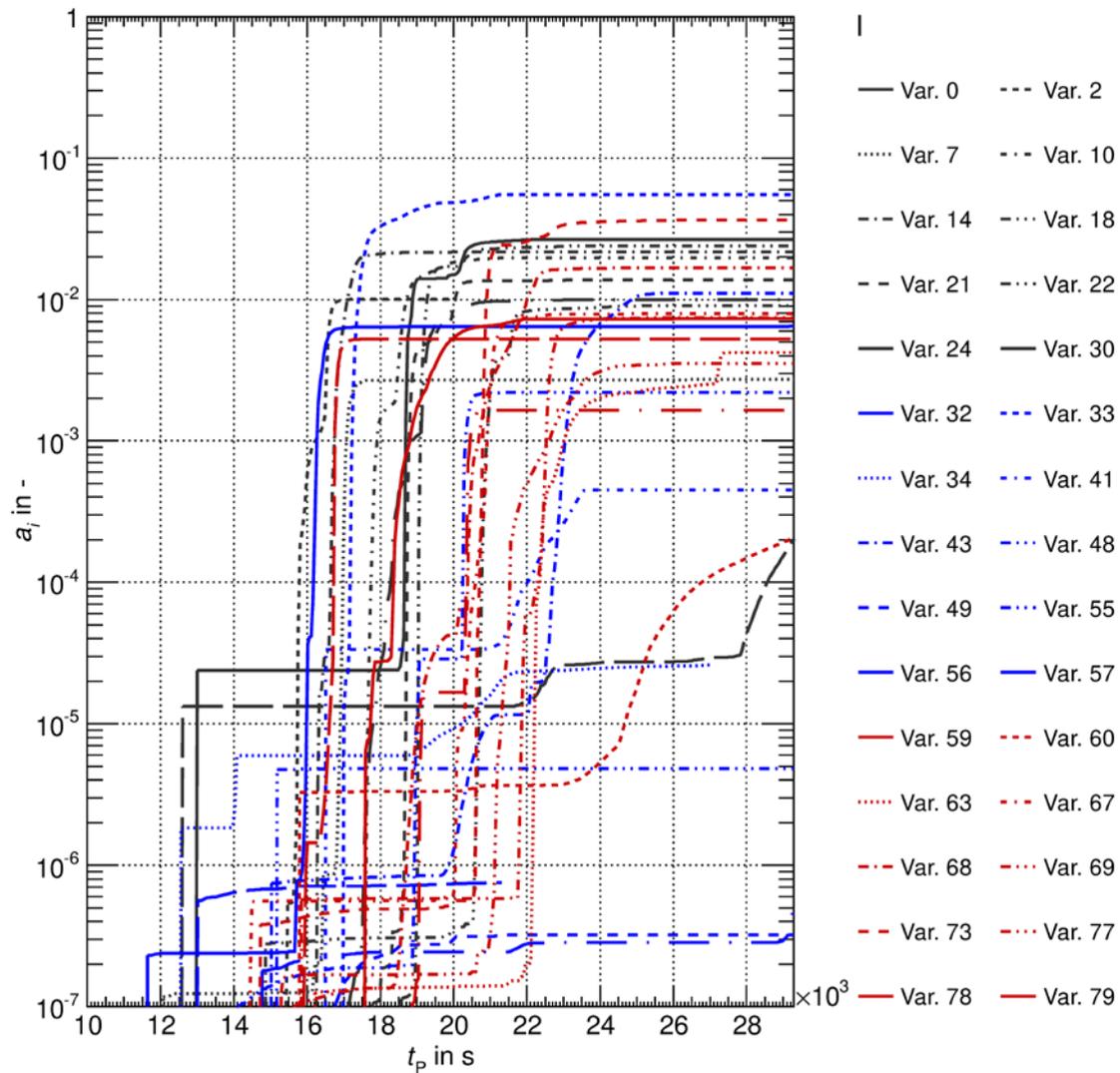


Abb. 3.33 Austrag von Iod in der Spezies I aus den Ablaseleitungen (von Ablaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmitteleitung, Volumenausgleichsleitung)

Korrelationen

Dies geschieht mit den bereits angekündigten Streudiagrammen. Insgesamt sind

$$1n n_{\text{Para}} + n_{\text{phys. Größe}} + n_{\text{Zeit}}^{\text{Phänomen}} + n_{\text{Inventar}}^{\text{El. I}} \cdot \left((n_{\text{Austrag}}^{\text{Sp. } i} - 1) + n_{\text{Austrag}}^{\text{Igesamt}} + n_{\text{phys. Größe}} + n_{\text{Inventar}}^{\text{El. } j} + n_{\text{Zeit}}^{\text{Phänomen}} \right) = (20 + 3 + 2 + 1) \cdot (6 + 1 + 3 + 3 + 2) = 390 \quad \text{Streudiagramme}$$

bzw. Korrelationskoeffizienten aufgestellt worden. Letztere sind in Gänze in Tab. 3.3 gezeigt. Hiervon stellen 6 Autokorrelationen dar (Korrelation einer Größe mit sich selbst) und sind für eine weitere Betrachtung unerheblich. Die große Mehrheit der Koeffizienten

beziehen sich auf unterschiedliche Größen, und sollen Kreuzkorrelationskoeffizienten genannt werden.

Kreuzkorrelationen können in zwei Gruppen unterschieden werden. Die erste Gruppe wird von „a priori“-Korrelationen bestimmt, also solche, die aus grundsätzlichen Überlegungen heraus erwartet werden. Diese sind beispielsweise die Korrelation zwischen Nachzerfallsleistung und spezifischer Brennstoffleistung (0,999, siehe Abb. 3.34) oder die Inventare mit eben derselben Größe ($> 0,95$, siehe z. B. Abb. 3.35). Auch wird der gemittelte Druck vom Ansprechdruck der DH-Ventile und somit vom entsprechenden Parameter (0,989, siehe Abb. 3.36) bestimmt. Diese „a priori“-Korrelationen legen nahe, dass das Vorgehen grundsätzlich korrekt ist, liefern jedoch keine für die Iodfreisetzung relevanten Informationen. Solche stecken in den restlichen Korrelationen, wobei zunächst einige überraschende zu finden sind. So korreliert der Austrag von I, AgI, CsI, HI und RbI relativ stark mit dem Parameter „LM_C_Var“, der die Belastbarkeit der DFU bestimmt. Dieser Parameter sollte sich in der Zeit des Versagens der DFU zeigen ($> 0,6$), die entsprechende Korrelation ist jedoch deutlich geringer ($< 0,388$). Eine mögliche Ursache für diese Diskrepanz mag darin bestehen, dass die absolute Versagenszeit verwendet worden ist und durch die unterschiedliche Nachzerfallsleistung die Freilegungszeit ebenfalls variiert, so dass die Korrelation mit der Versagenszeit verschmiert ist.

Im Falle der Inventare besteht eine starke Korrelation mit spezifischer Brennstoffleistung ($> 0,95$), Nachzerfallsleistung ($> 0,95$) und Versagenszeiten ($> 0,63$). Hierbei wird deutlich, dass Korrelationen keinen direkten kausalen Zusammenhang anzeigen. So wären die Inventare nicht kleiner, falls die DFU aufgrund einer Vorschädigung früher versagte. Im Falle der spezifischen Brennstoffleistung jedoch lässt sich physikalisch zeigen, dass ein Betrieb mit einem höheren Wert dieser Größe ein größeres Radionuklidinventar nach sich zieht. Das wiederum erhöht die Nachzerfallsleistung, welches zu einer schnelleren Aufheizung der DFU führt. Entsprechend versagt diese schneller (daher auch die negative Korrelation mit dieser Größe).

Im Folgenden sollen die relevanten Korrelationen für die Austräge der Iodspezies ausgewählt werden.

Da Korrelationen eher von Messgrößen denn von technischen Parametern abhängig verwendet werden sollen, wird die für die Austräge von CsI, HI und der Spezies I die Abhängigkeit vom Parameter „LM_C_VAR“ ignoriert und die zweitgrößte verwendet, die in der gemittelten Temperatur im oberen Plenum besteht. Diese scheint jedoch lediglich

für Csl (inklusive Cs₂I₂, 0,757, siehe Abb. 3.37) und HI gilt (0,731, siehe Abb. 3.38). Die angegebenen Unsicherheiten beziehen sich auf das Verhältnis zur Basisrechnung und stellen die einfache Standardabweichung dar.

Diese Korrelation für Csl lautet nun

$$\frac{a_{\text{Csl}}}{a_{\text{Csl}}^{\text{Var } 0}} = 2,3928 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var } 0}} - 1,4955 \text{ mit } \sigma_{\text{Csl}} = 0,375 \quad (3.8)$$

Jene für HI lautet:

$$\frac{a_{\text{HI}}}{a_{\text{HI}}^{\text{Var } 0}} = 3,0168 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var } 0}} - 2,0633 \text{ mit } \sigma_{\text{HI}} = 0,489 \quad (3.9)$$

Und die für I lautet:

$$\frac{a_{\text{I}}}{a_{\text{I}}^{\text{Var } 0}} = 3,242 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var } 0}} - 2,5101 \text{ mit } \sigma_{\text{I}} = 0,466 \quad (3.10)$$

In den Gleichungen (3.6), (3.9) und (3.10) steht a_i für den Anteil der freigesetzten Menge Csl (inklusive Cs₂I₂) oder HI und $a_i^{\text{Var } 0}$ für dieselbe Größen in der Basisrechnung. Für eine Umsetzung in MELCOR wird jedoch eine Austragsrate verwendet. Vereinfacht wird die ausgetragene Menge auf den Zeitintervall zwischen Beginn der Freisetzung von Iod in MELCOR und dem RDB-Versagen verwendet. Analog zum Vorgehen in Kapitel 3.4 wird vereinfacht eine Vorrechnung des SBO-Szenarios verwendet, um derartige Größen zu verwenden. Entsprechend folgt für die Rate im Falle von Csl:

Diese verwendete Korrelation für die Masse Csl lautet nun

$$\dot{m}_{\text{Csl frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{Cs}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{Csl}}^{\text{Var } 0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}} \cdot \left\{ 2,3928 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var } 0}} - 1,4955 \right\} \quad (3.11)$$

Jene für HI lautet:

$$\dot{m}_{\text{HI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{H}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{HI}}^{\text{Var 0}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}} \cdot \left\{ 3,0168 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var 0}}} - 2,0633 \right\} \quad (3.12)$$

Und die für die Spezies I:

$$\dot{m}_{\text{I frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{H}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{I}}^{\text{Var 0}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}} \cdot \left\{ 3,242 \cdot \frac{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle T_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var 0}}} - 2,5101 \right\} \quad (3.13)$$

In den Gleichungen (3.11), (3.12) und (3.13) sind die Verhältnisse der molaren Massen (M_i) von Iod auf der einen Seite und Wasserstoff bzw. Cäsium auf der anderen Seite eingebracht, da a_i den Anteil des Iods von der Spezies vom Kerninventar darstellt. Für die Austragsrate ist jedoch die Gesamte Molekülmasse relevant.

Die Mittelung der Temperatur im oberen Plenum hat in der Auswertung der ATHLET-CD-Rechnungen ab einer gewissen Temperatur stattgefunden, die mit dem Anstieg auf die Siedetemperatur verknüpft ist, die dem Ansprechdruck des Abblaseventils entspricht, welches unmittelbar nach dem Verlust des DE-Inventars zustande kommt. In MELCOR kann ein ähnlicher Zeitpunkt verwendet werden, wobei die Mittelung dann stets zwischen der erreichten Problemzeit und dem genannten Zeitpunkt stattfindet. Erst am Ende des Intervalls beim RDB-Versagen steht die gemittelte Temperatur fest, so dass eine Korrektur notwendig ist. Da ferner eine Senke aufgrund der Ausführungen in Kapitel 3.4 nicht möglich ist, muss die vor dem RDB-Versagen austretende Masse geringer sein als der Endwert. Dies ist gemäß Testrechnungen der Fall, so dass die Austragsrate nicht künstlich herabgesetzt werden muss. Die Austragskorrektur wird beim RDB-Versagen durchgeführt und soll mehr oder weniger instantan den Restbetrag freisetzen. Dieses Vorgehen deckt auch die Unsicherheit im Zeitpunkt des RDB-Versagens ab, der mit einigen Randbedingungen variieren kann.

Im Falle von AgI und RbI finden sich keine auffällige Korrelation, weswegen hier das einfache arithmetische Mittel über die Variationen verwendet wird. Für AgI gilt entsprechend:

$$\frac{a_{\text{AgI}}^{\text{Var 0}}}{a_{\text{AgI}}} = 2,343810 \text{ mit } \sigma_{\text{AgI}} = 2,034 \quad (3.14)$$

Für RbI gilt:

$$\frac{a_{\text{RbI}}^{\text{Var 0}}}{a_{\text{RbI}}} = 8,116341 \cdot 10^{-1} \text{ mit } \sigma_{\text{RbI}} = 0,547 \quad (3.15)$$

Hieraus ergeben sich die folgenden Raten:

$$\dot{m}_{\text{AgI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{Ag}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{AgI}}^{\text{Var 0}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}} \cdot 2,343810 \quad (3.16)$$

und:

$$\dot{m}_{\text{RbI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{Rb}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{RbI}}^{\text{Var 0}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,8116341 \quad (3.17)$$

Im Falle der Spezies FeI_2 lässt sich eine gewisse Korrelation mit der spezifischen Brennstoffleistung (0,444) erkennen, die, wie beschrieben auch mit den Versagenszeiten von DFU und RDB, der Nachzerfallsleistung und dem Iod-Anfangsinventar verknüpft ist. Der größte Wert ist bei der Versagenszeit des RDB gegeben. Dieser kann jedoch nur über einen Wert einer Vorrechnung verwendet werden, so dass die Verwendung einer solchen Korrelation nicht sinnvoll ist. Die Koeffizienten der spezifischen Brennstoffleistung (0,444) ist ein wenig geringer als jener der gemittelten Nachzerfallsleistung (0,448). Der Unterschied ist jedoch gering und die Verwendung der spezifischen Brennstoffleistung einfacher, da er sich auf die thermische Volllastleistung bezieht und sich somit nicht im Unfallverlauf ändert.

Entsprechend gilt:

$$\frac{a_{\text{Fel}_2}}{a_{\text{Fel}_2}^{\text{Var } 0}} = -7,8 \frac{\text{kg}}{\text{MW}} \cdot \frac{\langle p_{\text{th}} \rangle}{\langle p_{\text{th}} \rangle_{\text{Var } 0}} + 8,5453 \text{ mit } \sigma_{\text{Fel}_2} = 1,605 \quad (3.18)$$

Hieraus ergibt sich für die Austragsrate:

$$\dot{m}_{\text{Fel}_2}^{\text{MEL frei}}(t) = \frac{2M_I + M_{\text{Rb}}}{2M_I} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{Fel}_2}^{\text{Var } 0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}} \cdot \left\{ -7,8 \frac{\text{kg}}{\text{MW}} \cdot \frac{\langle p_{\text{th}} \rangle}{\langle p_{\text{th}} \rangle_{\text{Var } 0}} + 8,5453 \right\} \quad (3.19)$$

Mit den genannten Korrelationen oder Punktwerten stehen die Beziehungen für die Austräge fest.

Tab. 3.3 Korrelationsmatrix für die SBO-Gruppe

	σ_{frei} I	σ_{frei} AgI	σ_{frei} CsI	σ_{frei} Fel ₂	σ_{frei} HI	σ_{frei} RbI	σ_{frei} I (Spezies)	σ_{frei} I	σ_{frei} Rb	σ_{frei} Cs	σ_{frei} Cs/I	σ_{frei} Rb/I	σ_{frei} Rb/I	σ_{frei} DFU	σ_{frei} RDB	σ_{frei} <P _{ob,pi} >	σ_{frei} <T _{ob,pi} >	σ_{frei} <P ₁₀₂ >
ABBR_VAR	4.03E-02	1.16E-01	5.16E-02	1.41E-01	1.17E-01	1.43E-01	7.11E-02	4.42E-01	4.50E-01	4.74E-01	2.86E-01	4.12E-01	2.50E-01	1.24E-01	2.75E-01	1.97E-02	1.91E-01	
PSP_VAR	4.87E-02	1.06E-01	1.80E-03	4.44E-01	2.25E-01	4.77E-02	8.19E-02	9.62E-01	9.59E-01	9.51E-01	9.91E-01	9.49E-01	9.44E-01	6.63E-01	6.67E-02	1.86E-02	9.99E-01	
TSPBURST_VAR	1.24E-02	1.04E-01	2.16E-03	2.87E-02	1.27E-01	1.83E-01	1.43E-02	1.55E-01	1.55E-01	1.55E-01	1.38E-01	1.41E-01	3.70E-03	5.27E-02	4.55E-01	1.11E-02	1.35E-01	
CERMELT_VAR	1.30E-01	3.13E-01	7.60E-02	2.06E-01	1.09E-01	1.59E-01	6.75E-04	4.69E-01	4.59E-01	4.66E-01	4.80E-01	4.91E-01	4.94E-01	3.16E-01	1.48E-01	1.34E-02	4.72E-01	
TOTMELT_VAR	1.55E-01	1.17E-01	1.39E-01	1.62E-01	1.25E-01	1.76E-01	1.49E-01	6.07E-02	6.05E-02	5.87E-02	5.71E-02	4.45E-02	8.34E-02	1.21E-02	5.85E-02	7.81E-02	4.01E-02	
HTC_VAR	2.18E-01	3.68E-01	7.95E-02	1.37E-01	2.98E-02	1.43E-02	4.23E-02	1.56E-01	1.68E-01	1.50E-01	1.98E-01	1.41E-01	2.06E-01	1.87E-01	3.82E-02	3.43E-02	2.08E-01	
TENNSLSTR_VAR	2.52E-01	4.64E-02	1.98E-01	3.34E-01	2.00E-01	1.80E-01	1.20E-01	1.71E-01	1.82E-01	1.67E-01	1.82E-01	1.21E-01	1.94E-01	1.92E-01	2.67E-01	7.94E-02	1.95E-01	
LM_C_VAR	8.04E-01	2.70E-01	8.24E-01	2.70E-01	6.47E-01	6.43E-01	4.76E-01	1.99E-01	2.06E-01	1.98E-01	2.17E-01	1.84E-01	4.22E-01	4.35E-01	2.16E-01	4.49E-01	2.29E-01	
DH_VEN_ANSPR_VAR	2.04E-01	1.12E-01	1.87E-01	2.07E-02	2.16E-01	2.43E-01	3.53E-01	6.23E-02	6.10E-02	7.12E-02	1.51E-02	5.53E-02	2.19E-01	4.58E-02	9.89E-01	3.46E-01	2.04E-03	
OXIML_VAR	1.12E-02	1.44E-01	2.96E-02	2.17E-01	4.27E-02	5.59E-03	1.30E-01	4.20E-02	3.69E-02	3.97E-02	3.18E-02	3.79E-02	6.84E-02	5.57E-03	1.19E-01	2.57E-02	3.99E-02	
OXINI_VAR	1.22E-01	2.57E-01	9.39E-02	3.13E-02	1.72E-01	4.26E-01	1.19E-01	1.26E-01	1.22E-01	1.29E-01	1.35E-01	1.66E-01	4.89E-02	1.44E-01	2.04E-01	4.82E-02	8.86E-02	
BOR_VAR	1.50E-01	8.80E-02	2.21E-01	1.54E-01	1.64E-01	1.84E-01	3.58E-02	1.33E-01	1.91E-01	1.26E-01	1.60E-01	4.49E-02	1.67E-01	1.22E-01	2.30E-02	1.20E-01	1.55E-01	
NODAHUO_VAR	3.11E-01	3.48E-01	2.17E-01	7.40E-02	1.64E-01	1.37E-01	2.57E-01	3.79E-01	3.73E-01	3.80E-01	3.61E-01	3.80E-01	3.79E-01	2.07E-02	4.80E-02	1.90E-01	3.58E-01	
NODABR1_VAR	1.84E-01	3.69E-03	2.57E-01	3.19E-02	7.44E-02	2.96E-01	6.82E-03	1.39E-01	1.49E-01	1.36E-01	1.11E-01	6.41E-02	1.81E-01	1.34E-01	1.67E-01	1.19E-01	1.43E-01	
NODABR2_VAR	1.24E-01	2.29E-01	3.12E-02	1.54E-01	8.22E-02	1.16E-01	2.47E-02	2.25E-01	2.35E-01	2.27E-01	2.62E-01	2.52E-01	2.76E-01	2.48E-01	1.14E-01	7.77E-02	2.29E-01	
NODABR3_VAR	8.70E-02	4.41E-02	1.30E-01	4.76E-02	5.78E-02	5.92E-02	1.12E-01	1.76E-02	2.88E-02	1.79E-02	2.34E-02	1.89E-03	8.41E-02	6.04E-02	3.97E-02	7.46E-02	2.79E-02	
NODABB1_VAR	1.67E-01	2.55E-01	2.27E-01	3.40E-01	3.02E-01	1.35E-01	1.08E-01	1.60E-01	1.61E-01	1.60E-01	1.63E-01	1.62E-01	2.08E-01	4.10E-03	4.09E-02	7.80E-02	1.76E-01	
NODABV_VAR	7.05E-02	1.70E-01	2.25E-02	1.88E-01	2.07E-01	2.40E-01	2.02E-01	1.64E-01	1.91E-01	1.76E-01	1.18E-01	9.67E-02	1.36E-01	1.80E-02	1.05E-01	1.55E-01	8.83E-02	
NODASV1_VAR	2.48E-01	2.43E-01	2.72E-01	3.14E-01	3.48E-01	7.44E-02	4.10E-01	5.80E-02	5.97E-02	5.40E-02	6.94E-02	4.79E-02	5.06E-02	2.06E-01	5.19E-02	2.75E-01	8.75E-02	
NODASV2_VAR	2.30E-01	5.20E-02	1.61E-01	2.97E-01	2.59E-01	1.25E-02	4.59E-02	3.23E-02	5.04E-03	2.43E-02	4.32E-02	8.12E-02	1.24E-01	1.19E-03	1.49E-01	1.20E-01	8.84E-02	
<P _{ob,pi} >	1.88E-01	1.33E-01	1.72E-01	8.95E-02	1.94E-01	2.16E-01	3.83E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.47E-01	9.93E-02	1.33E-01	3.00E-01	2.71E-02	1.00E+00	3.42E-01	8.52E-02	
<T _{ob,pi} >	7.25E-01	2.26E-01	7.57E-01	2.42E-01	7.31E-01	6.60E-02	8.25E-01	1.57E-02	4.69E-03	1.43E-02	1.70E-03	2.96E-02	1.43E-01	4.93E-01	3.42E-01	1.00E+00	1.54E-02	
<P ₁₀₂ >	3.70E-02	1.26E-01	6.46E-03	4.48E-01	2.18E-01	3.54E-02	9.43E-02	9.64E-01	9.60E-01	9.54E-01	9.92E-01	9.53E-01	9.51E-01	6.57E-01	8.52E-02	1.54E-02	1.00E+00	
f _{versagen} DFU	1.58E-01	1.61E-01	2.07E-01	3.77E-01	3.47E-02	9.03E-02	2.69E-01	9.29E-01	9.29E-01	9.22E-01	9.53E-01	9.18E-01	1.00E+00	5.17E-01	3.00E-01	1.43E-01	9.51E-01	
f _{versagen} RDB	7.12E-01	2.92E-02	6.76E-01	6.11E-01	7.31E-01	3.53E-01	3.05E-01	6.43E-01	6.26E-01	6.37E-01	6.49E-01	6.73E-01	5.17E-01	1.00E+00	2.71E-02	4.93E-01	6.57E-01	
a _{pi} I	3.68E-02	1.37E-01	5.88E-03	4.45E-01	2.39E-01	3.46E-03	9.19E-02	1.00E+00	9.98E-01	9.99E-01	9.83E-01	9.82E-01	9.29E-01	6.43E-01	1.39E-01	1.57E-02	9.64E-01	

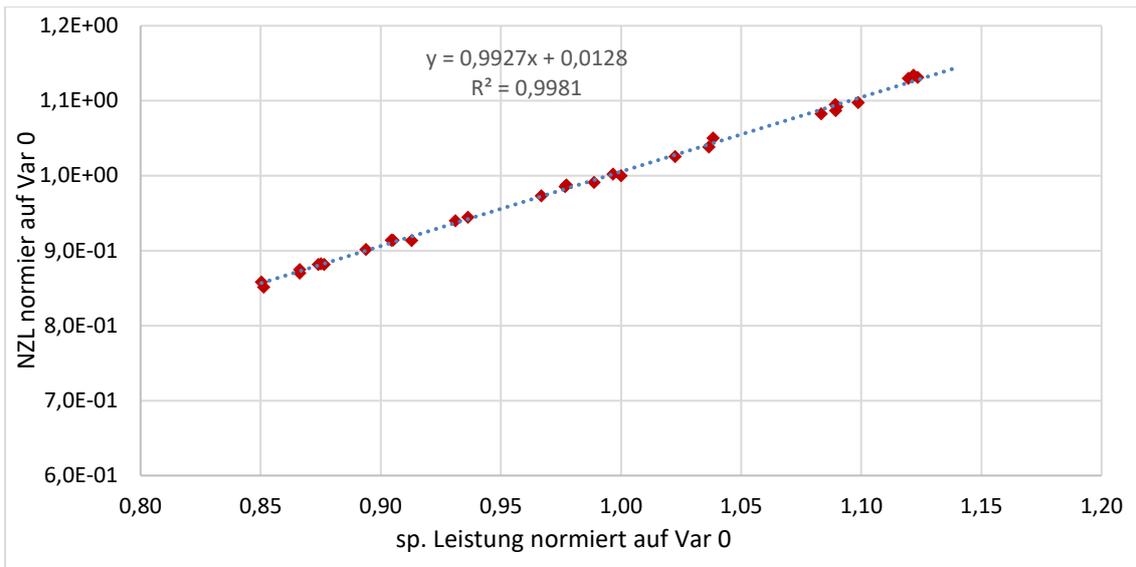


Abb. 3.34 Streudiagramm zwischen den Größen der Nachzerfallsleistung und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

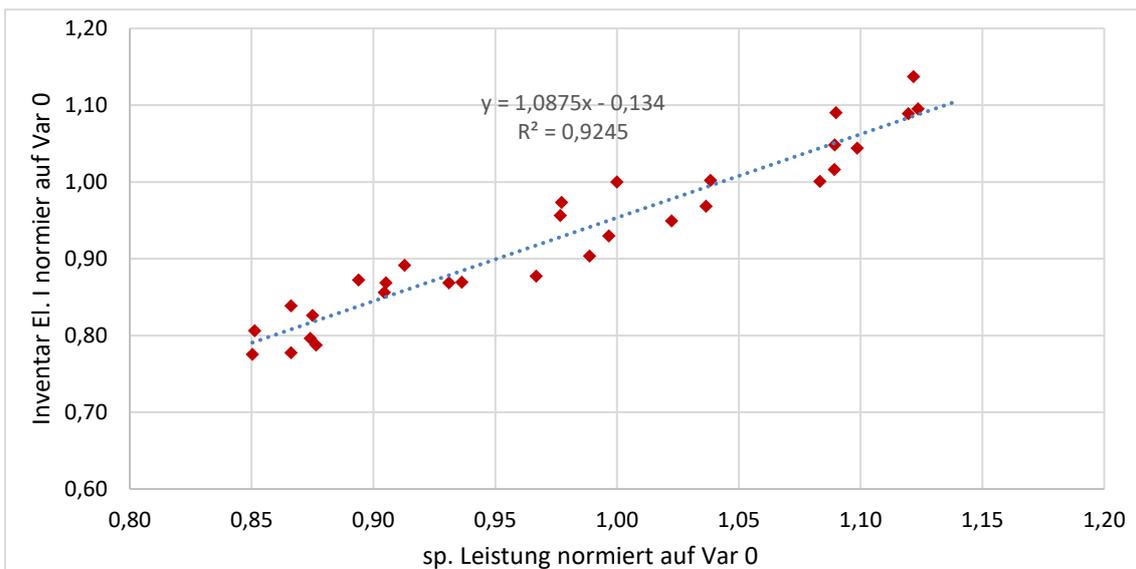


Abb. 3.35 Streudiagramm zwischen den Größen des Iodinventars und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

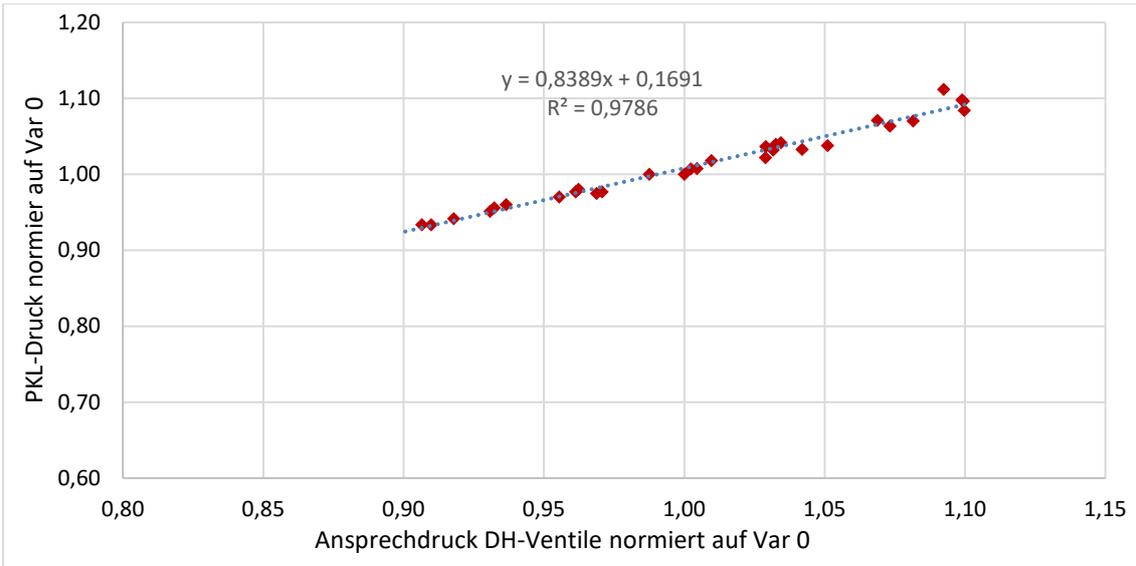


Abb. 3.36 Streudiagramm zwischen den Größen des gemittelten PKL-Druckes und dem Variationsparameter für den Ansprechdruck der DH-Ventile (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

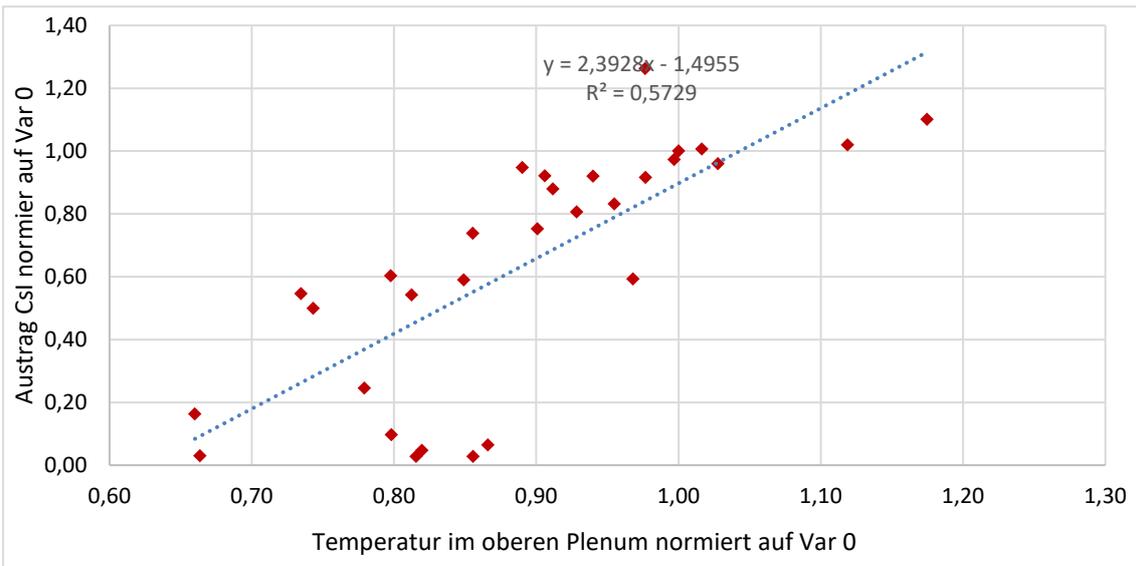


Abb. 3.37 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Csl (gesamt) und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

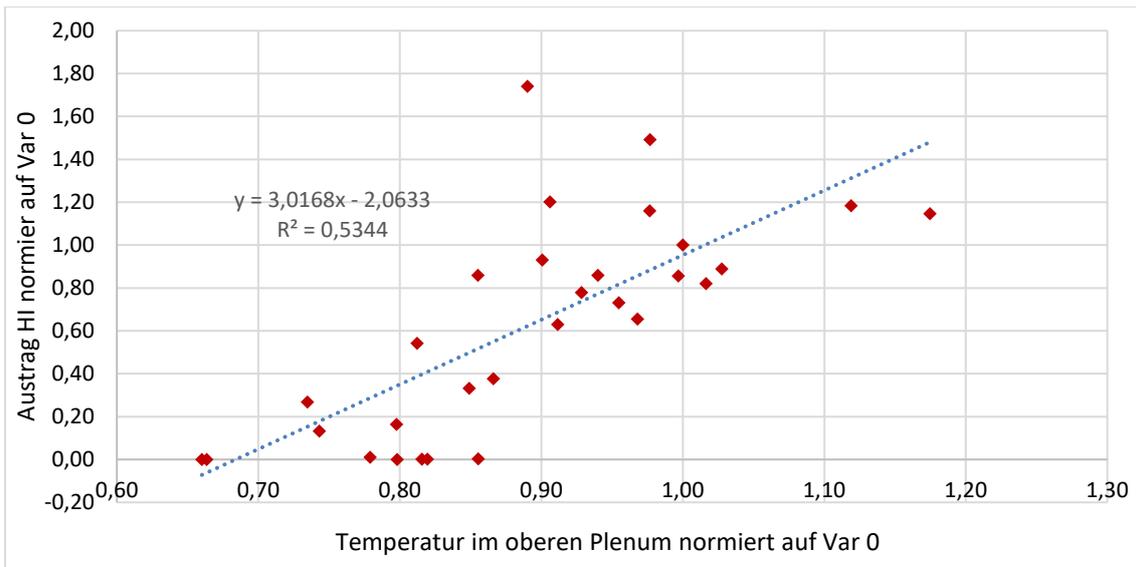


Abb. 3.38 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von HI und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

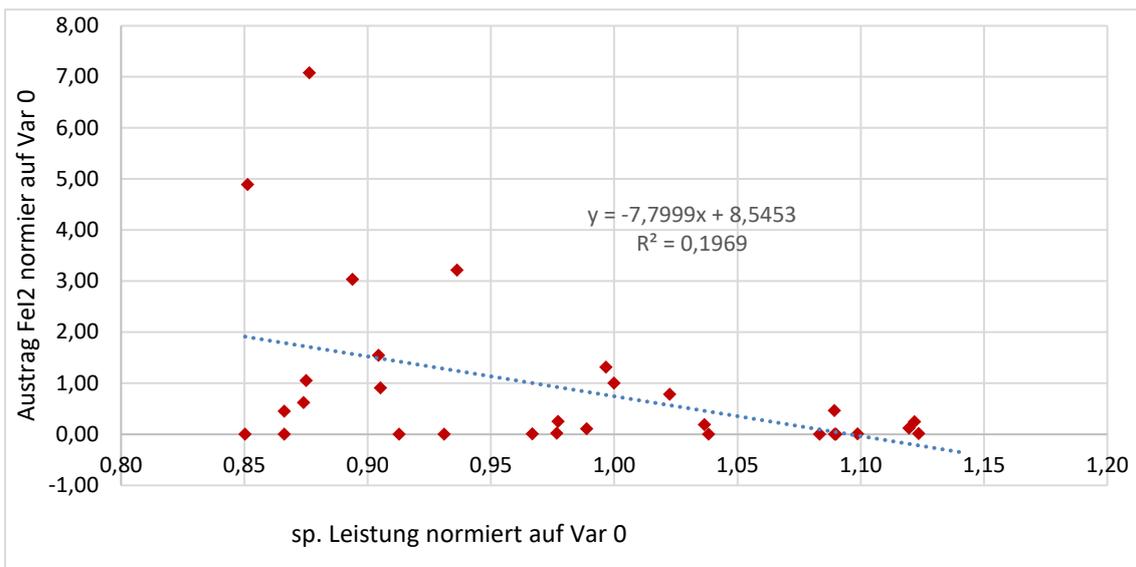


Abb. 3.39 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Fe₂ und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

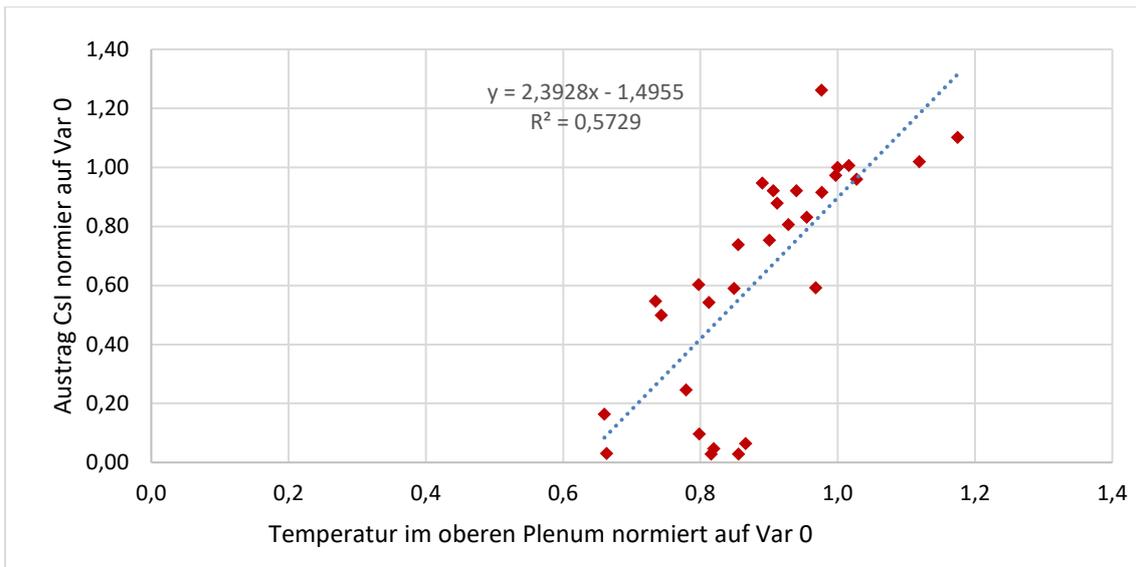


Abb. 3.40 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Csl (gesamt) und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

3.3.5 Ergebnisse der KMV-Gruppe

Im Folgenden sollen nun die für den Iodaustrag relevanten Größen gezeigt werden. Hierzu gehören zunächst allgemeine Größen wie Druck und Temperatur und anschließend die Austräge der wesentlichen Spezies, deren Anteil an der Gesamtfreisetzung mindestens 1 % betragen haben ($\frac{m_i^{\text{l aus } i}}{\sum_i m_i^{\text{l aus } i}}$ mit $m_i^{\text{l aus } i} = \frac{M_I}{\sum_j \beta_j \cdot M_j}$, $m_i^{\text{l aus } i}$: Masse des Iods in der Spezies i , β_j : Stöchiometriefaktor des Elementes j in der Iodspezies i , M_k : molare Masse des Elementes k). Diese Spezies sind im Folgenden aufgelistet:

1. AgI
2. BaI
3. CdI₂
4. Cs₂I₂
5. CsI
6. FeI₂
7. HI
8. IRb

Austräge, physikalische Größen

In den Abbildungen Abb. 3.41, Abb. 3.42 und Abb. 3.43 sind die Nachzerfallsleistung, der Druck und die Dampftemperatur im oberen Plenum gezeigt. Die Nachzerfallsleistung ist jene, die im Brennstoff gegeben ist. Aus diesem Grunde nimmt sie mit der Freisetzung von Radionukliden zu bestimmten Zeiten stärker ab als das Verhalten der Gesamtnachzerfallsleistung erwarten lässt. Druck und Temperatur variierten im Wesentlichen gemäß der Leckgröße. Im Falle kleineren Lecks fällt das Plateau des Druckes auf, welches ein Resultat aus der Einspeisung der Sicherheitseinspeisepumpen ist. Im Falle der Temperatur lassen sich derartige Plateaus vor der Kernfreilegung ebenfalls erkennen, welche nach der Einspeisephase durch die Siedetemperatur bestimmt sind. Nach der Freilegung von Teilen des Kerns, kann der Dampf überhitzen, so dass sich deren Temperaturen mitunter jenen annähern können, die auch die Hüllrohre zeigen.

In Abb. 3.44 sind die Iodinventare (Elementmasse) des Kerns für die einzelnen Variationen gegeben. Die Mengen sind zunächst weitgehend konstant, solange der Kern intakt ist, anschließend wird Iod aus dem Kern freigesetzt, so dass die Masse abnimmt.

Insgesamt zeigt sich, dass die Abläufe sich zeitlich erheblich unterscheiden. So kann es im Falle eines eher kleinen Lecks zu einer langen Einspeisephase kommen. Ferner sorgen die immer noch bespeisten Dampferzeuger für eine gewisse Kühlung des Primärkreises.

Im Falle der Austräge der einzelnen Iodspezies, die in den Abbildungen Abb. 3.45 bis Abb. 3.54 gezeigt und auf das Kerninventar normiert sind, erkennt man eine deutliche Streuung der Ergebnisse. Eine quantitative Bewertung kann bei der Betrachtung dieser Abbildungen nicht durchgeführt werden. Für eine Bewertung müssen nun die Variationsgrößen bzw. die selbst indirekt variierten Größen herangezogen werden.

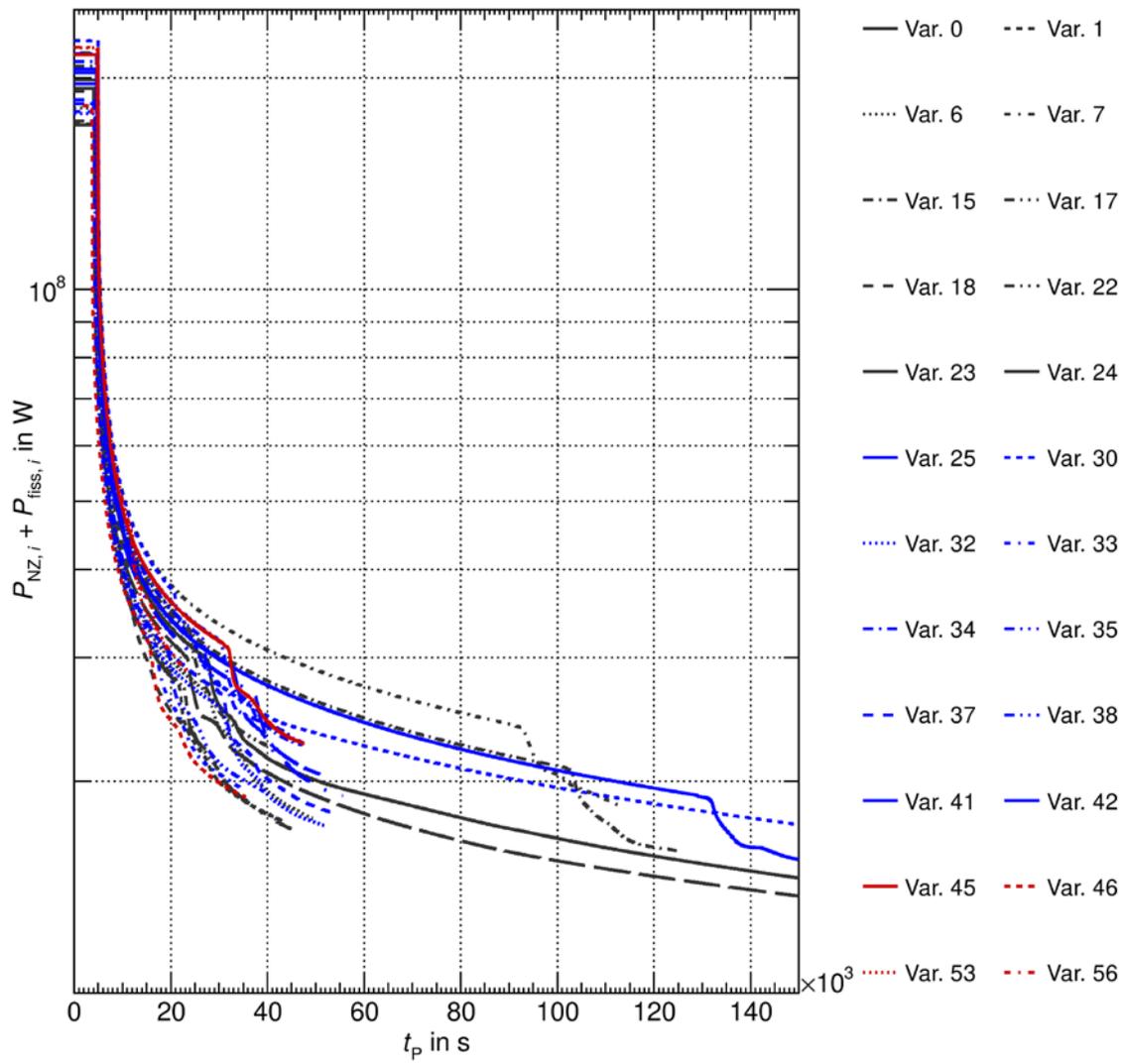


Abb. 3.41 Nachzerfallsleistung

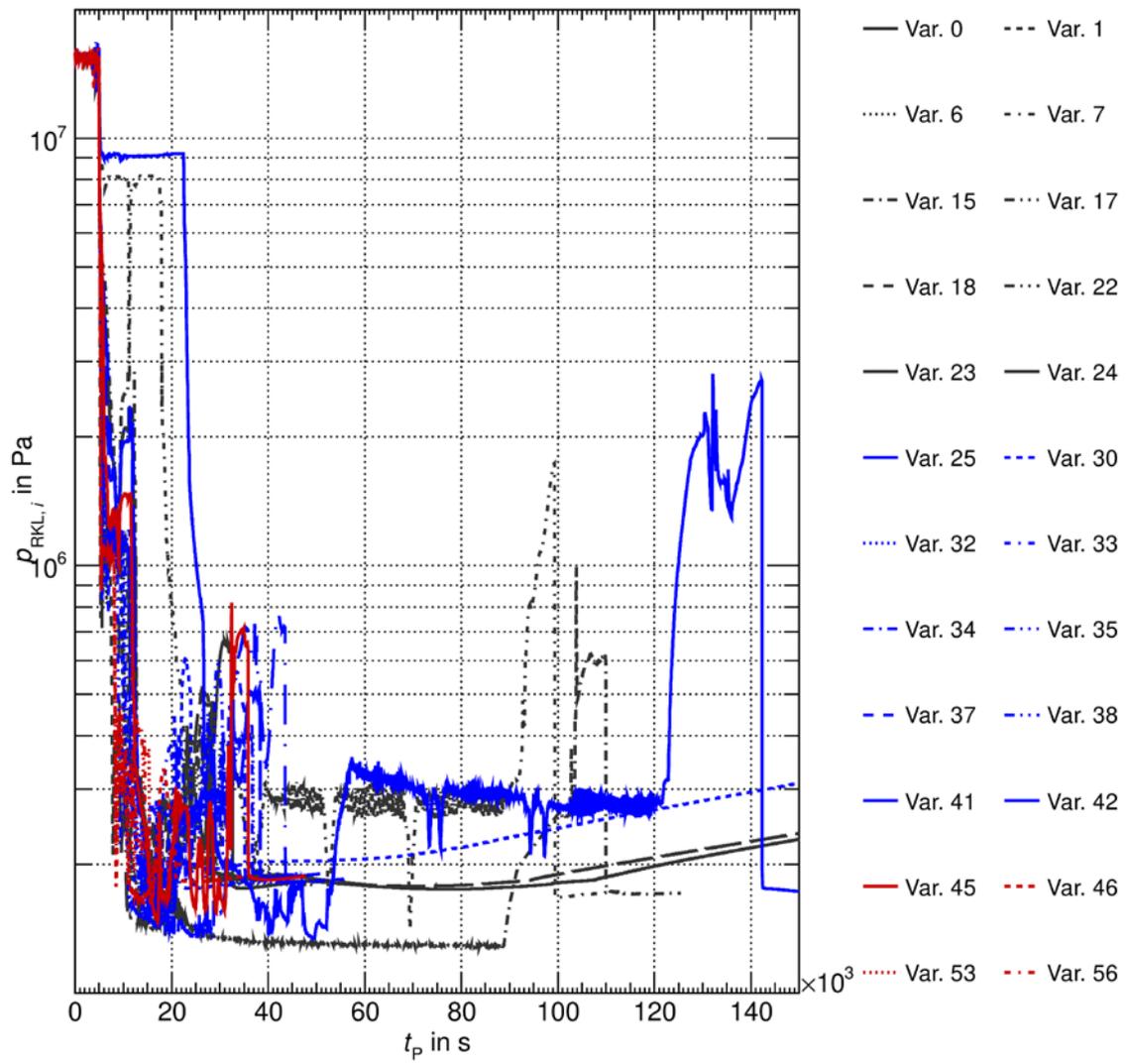


Abb. 3.42 Druck im oberen Plenum

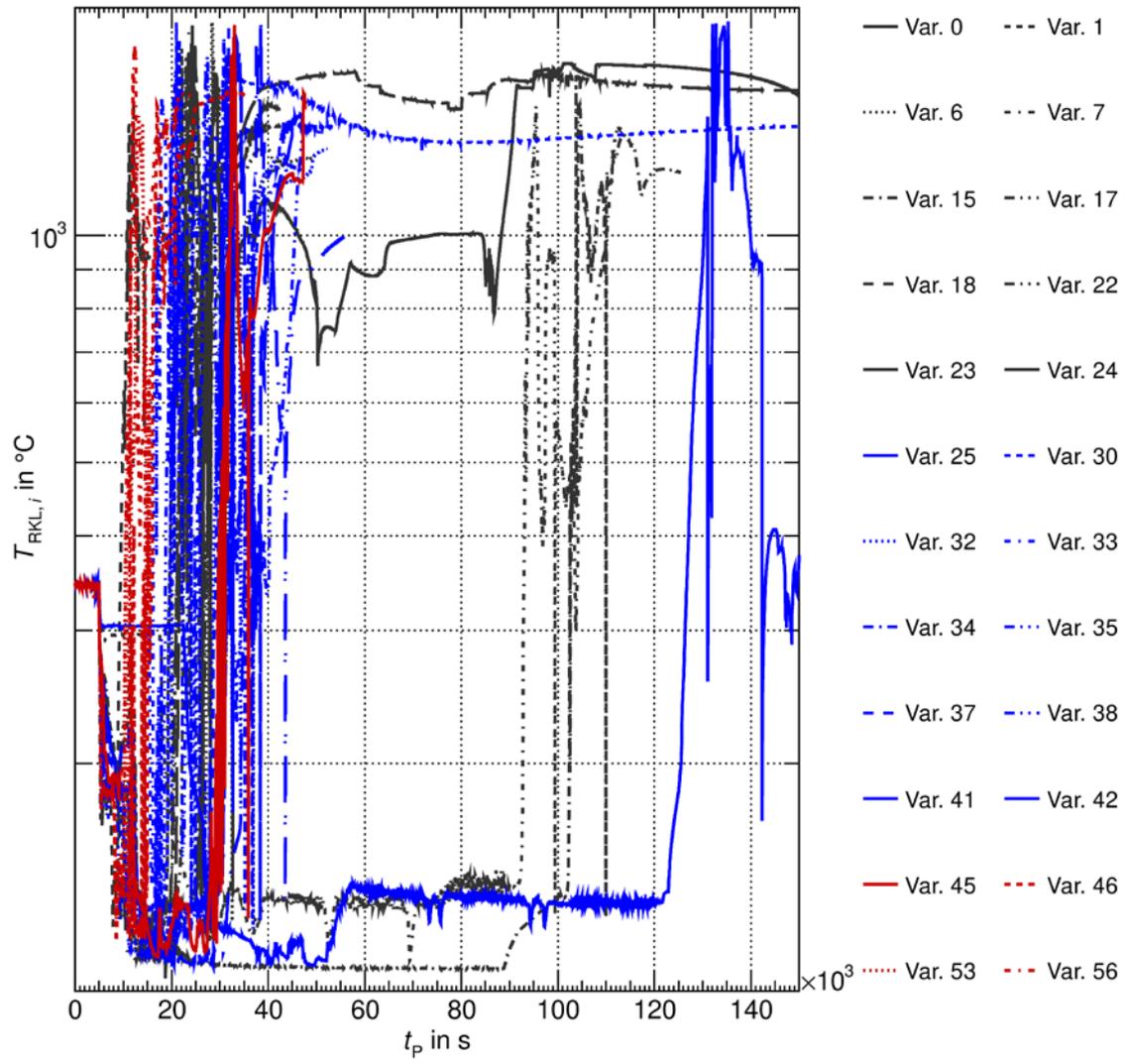


Abb. 3.43 Temperatur im oberen Plenum

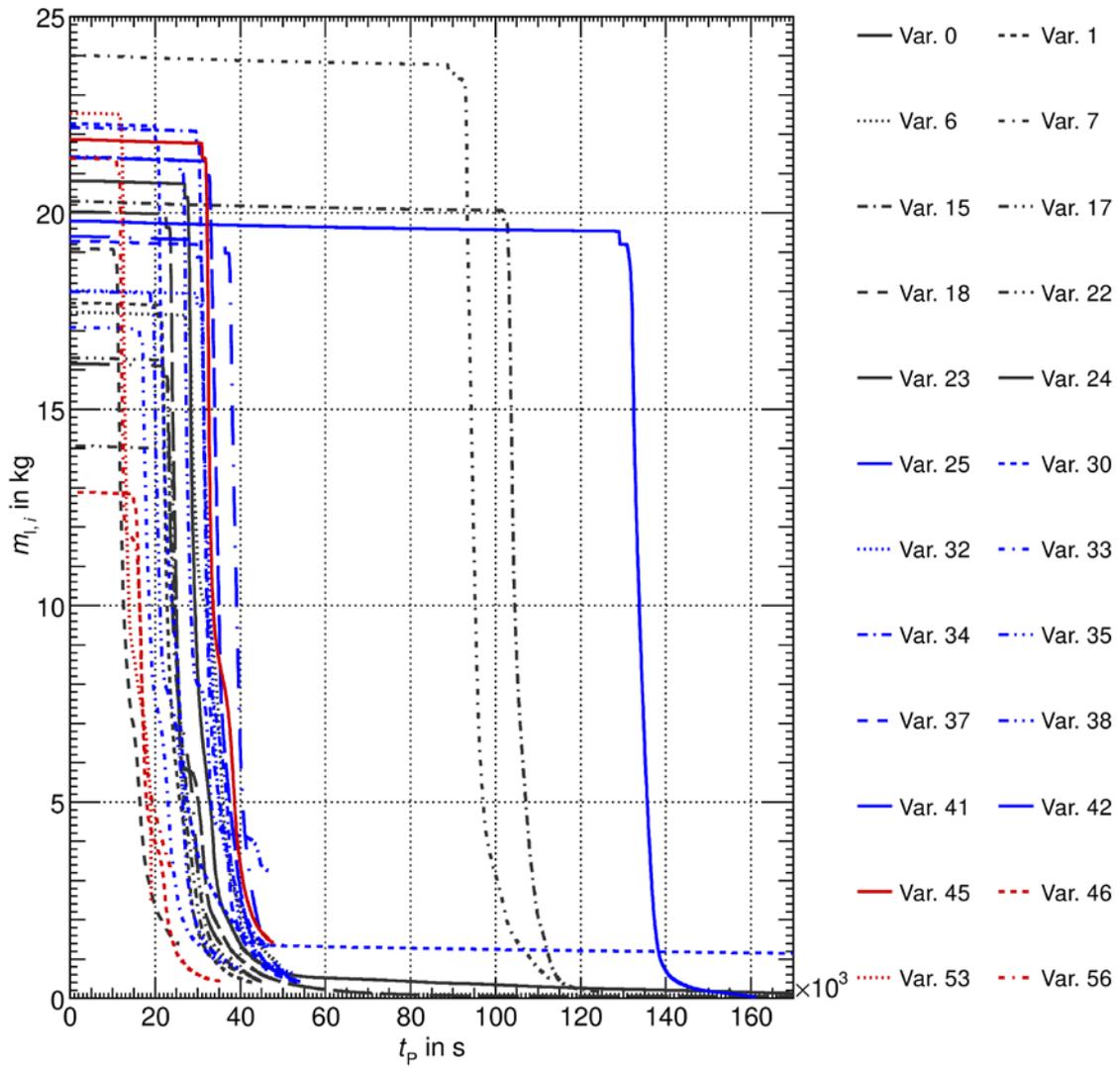


Abb. 3.44 Kerninventar des Elementes Iod

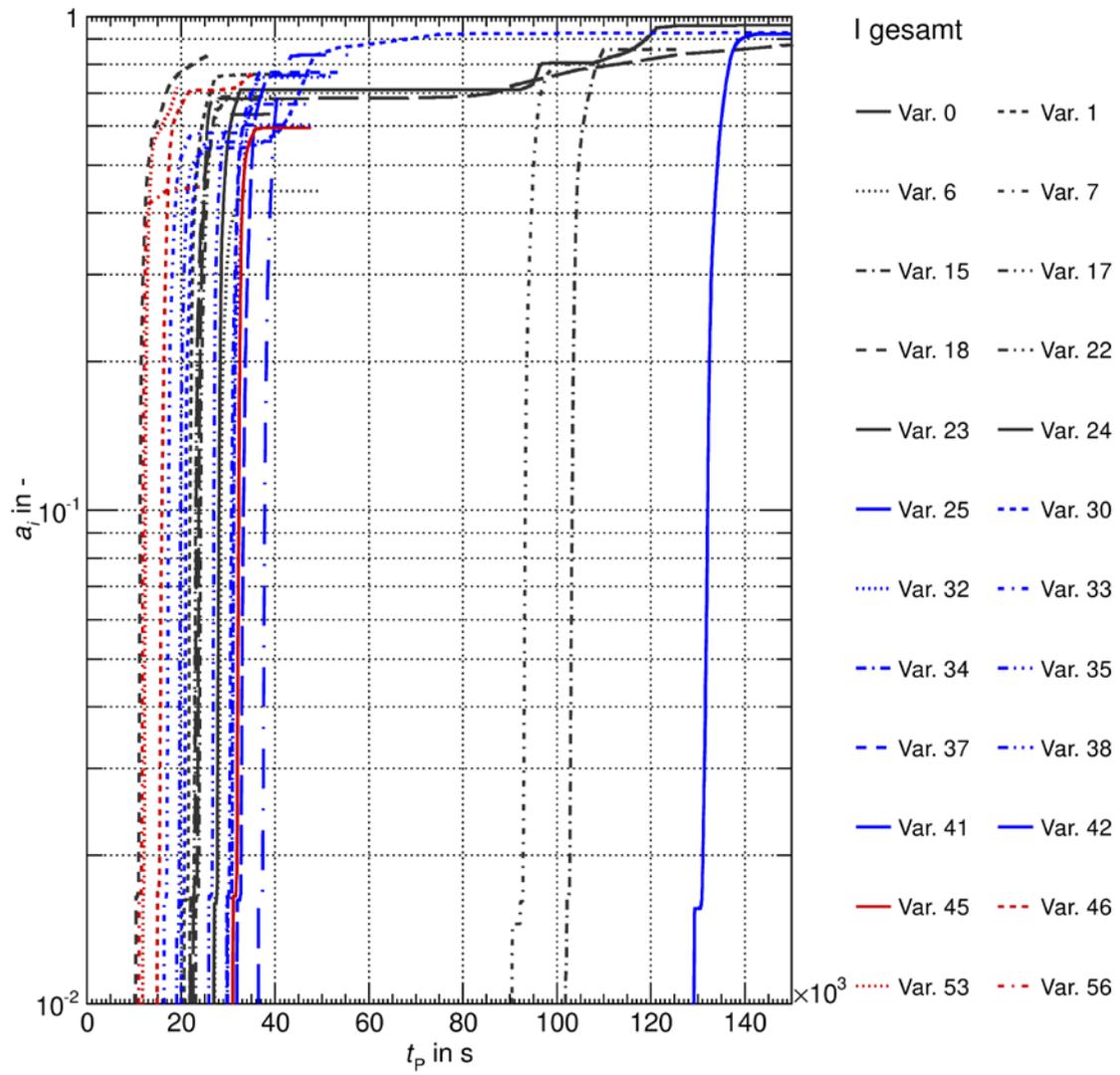


Abb. 3.45 Gesamtaustrag von Iod aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

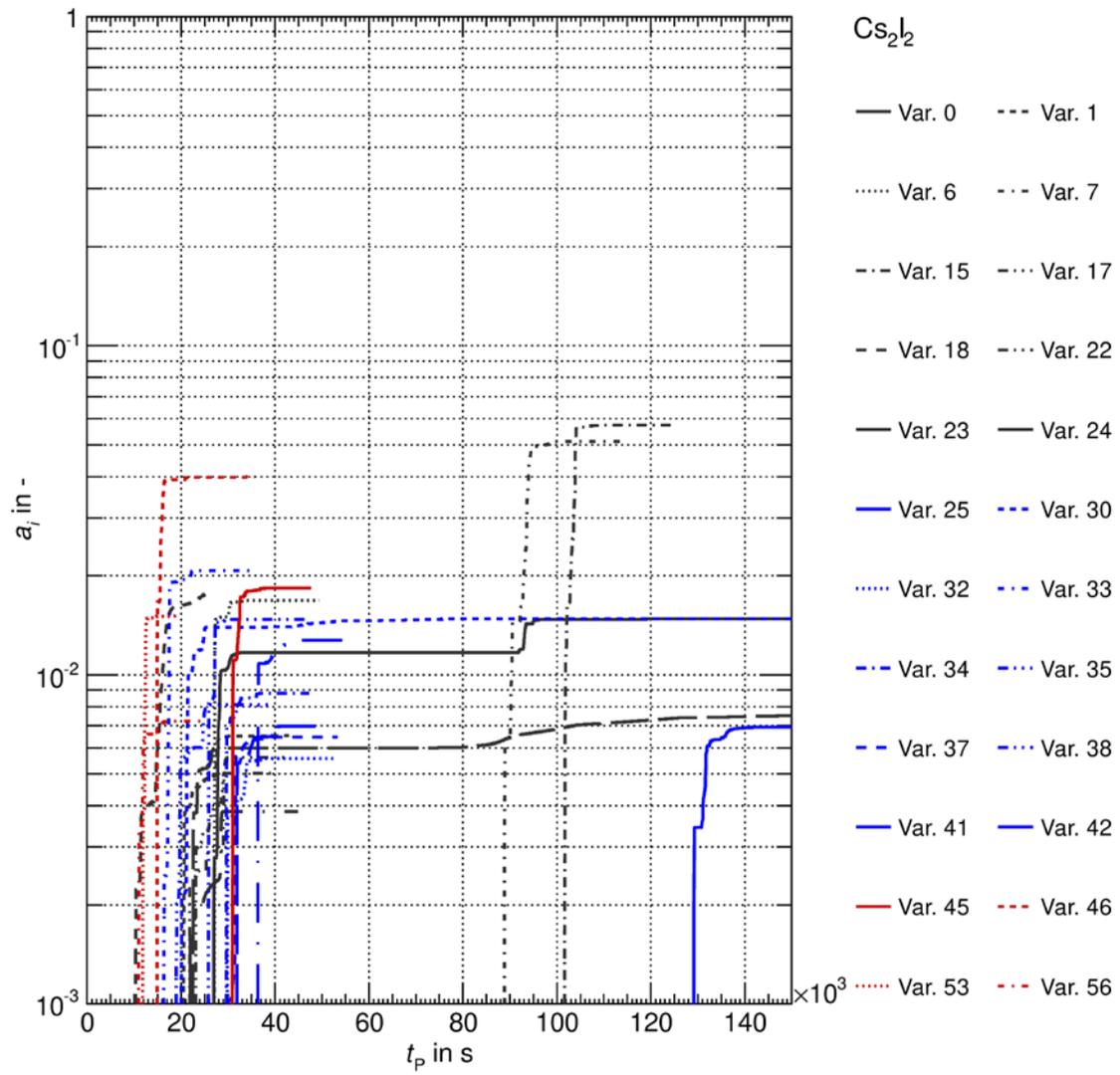


Abb. 3.46 Austrag von Iod in der Spezies Cs_2I_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

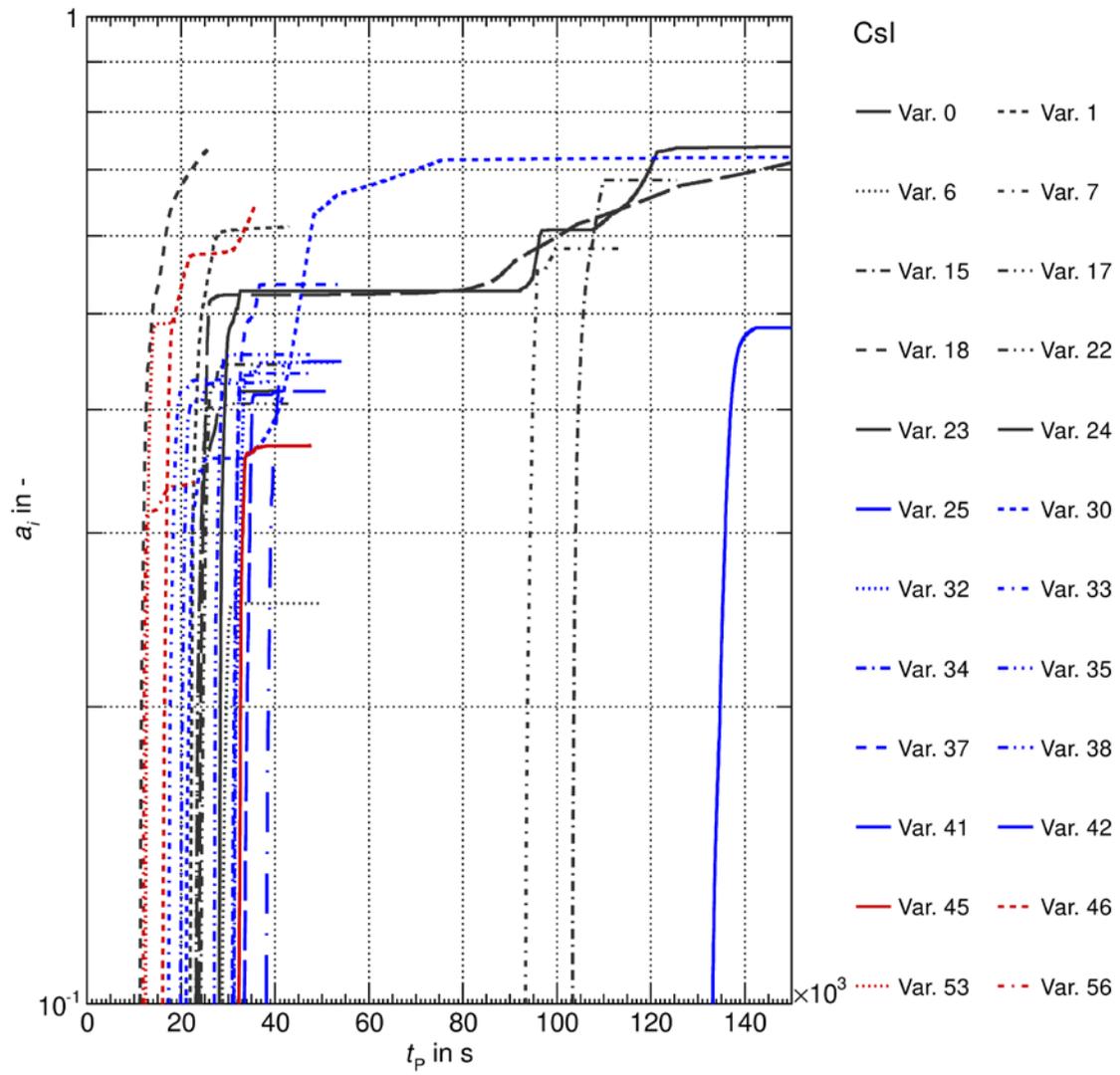


Abb. 3.47 Austrag von Iod in der Spezies CsI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

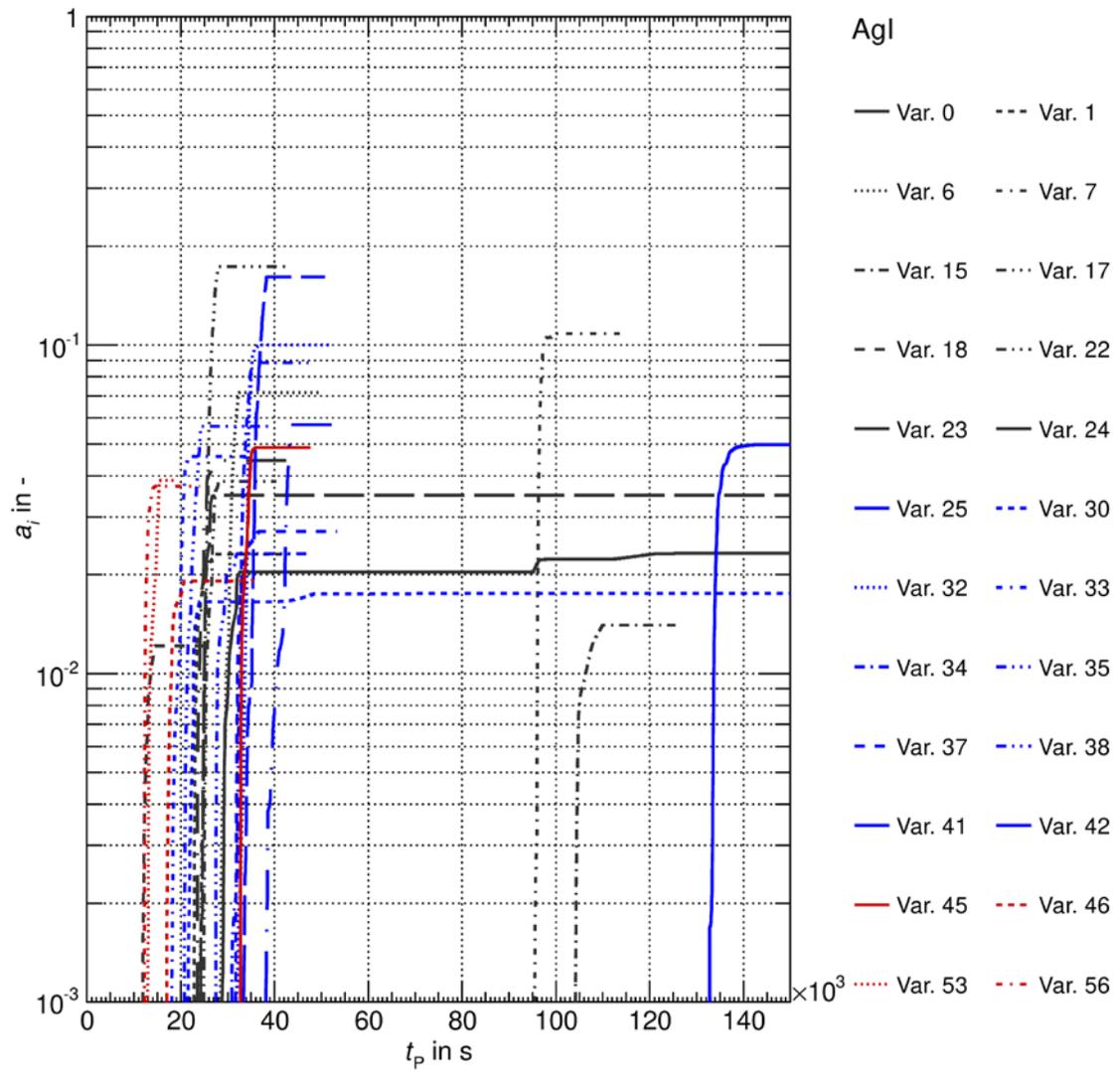


Abb. 3.48 Austrag von Iod in der Spezies AgI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

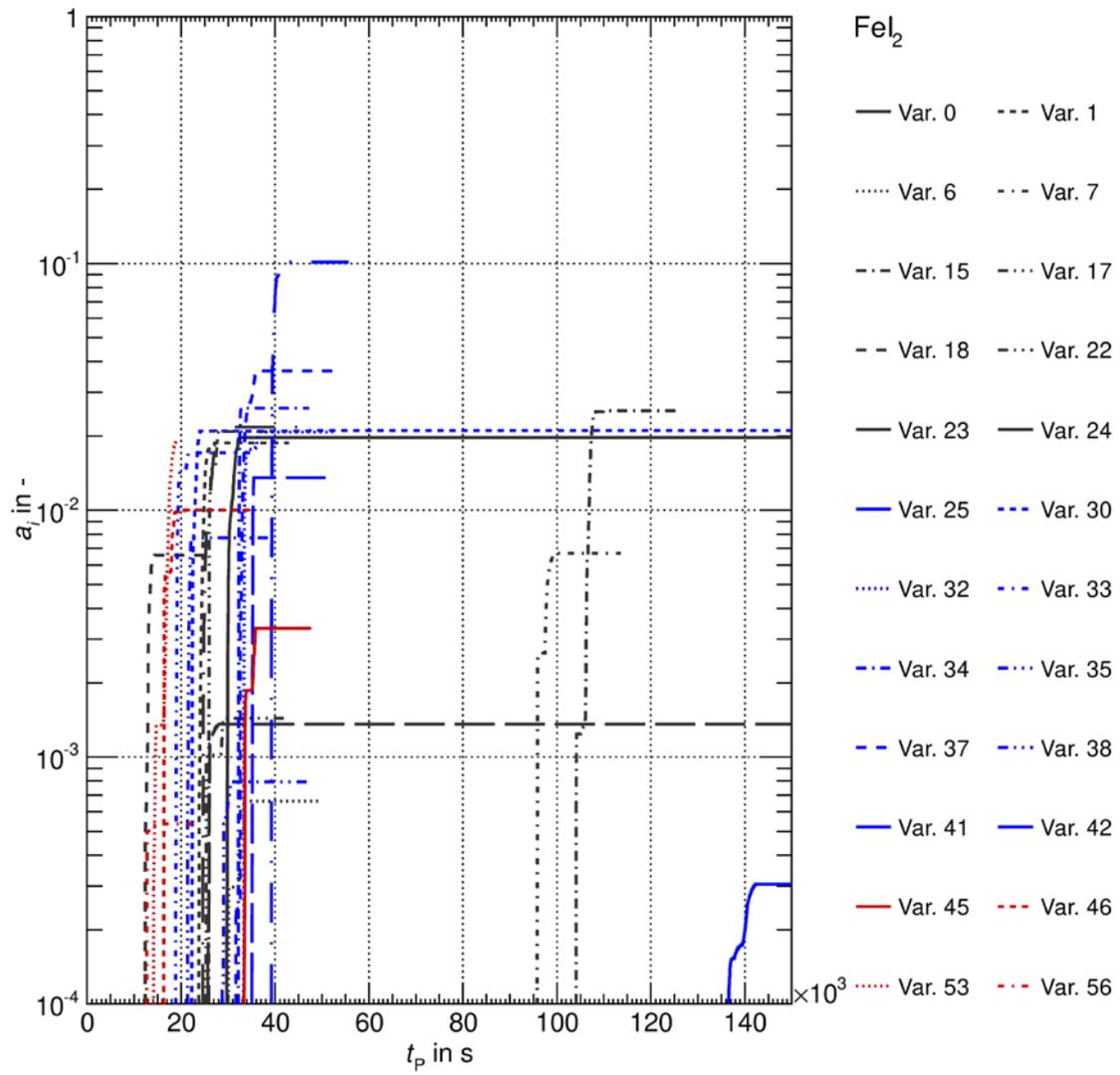


Abb. 3.49 Austrag von Iod in der Spezies FeI_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

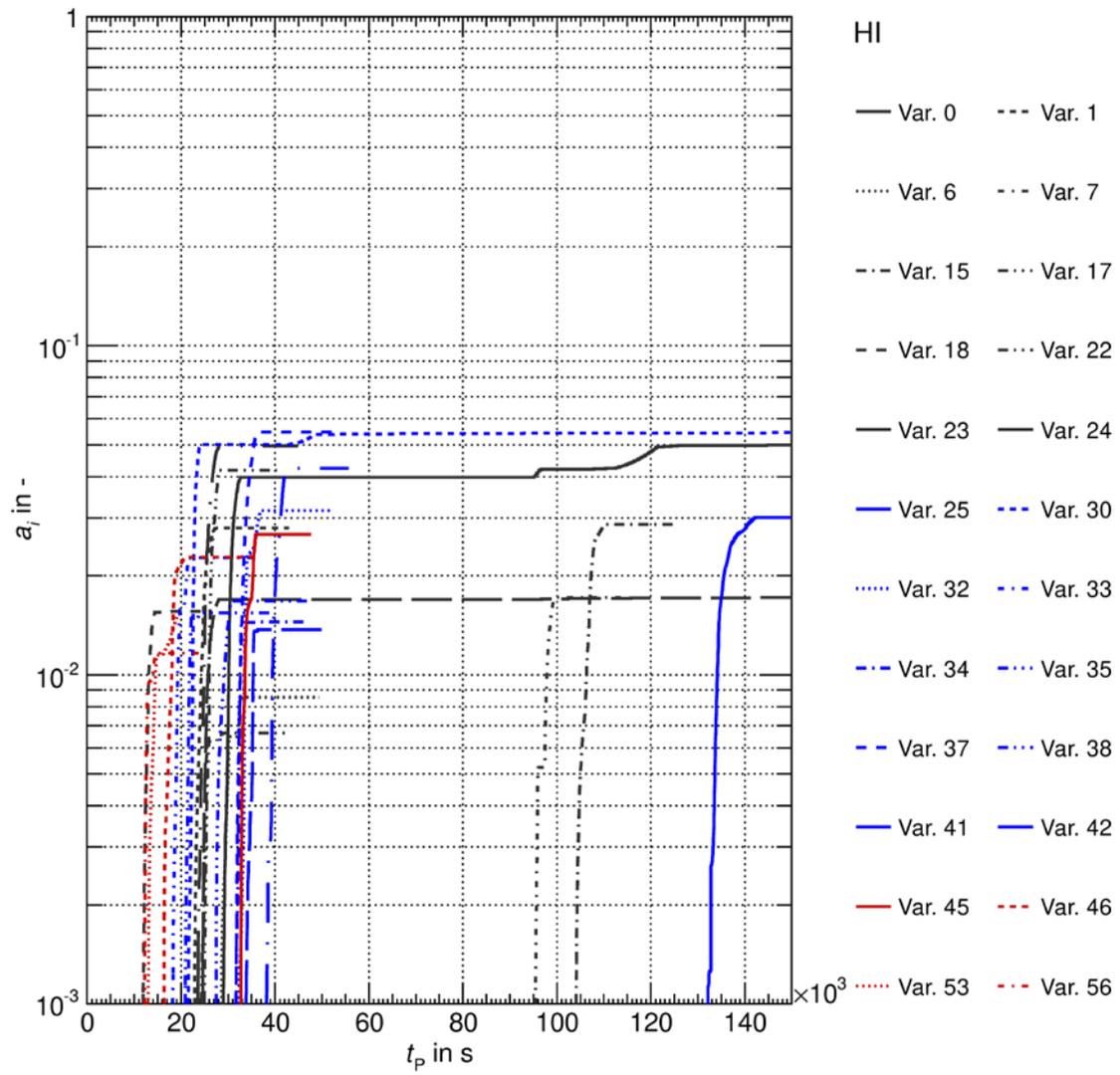


Abb. 3.50 Austrag von Iod in der Spezies HI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

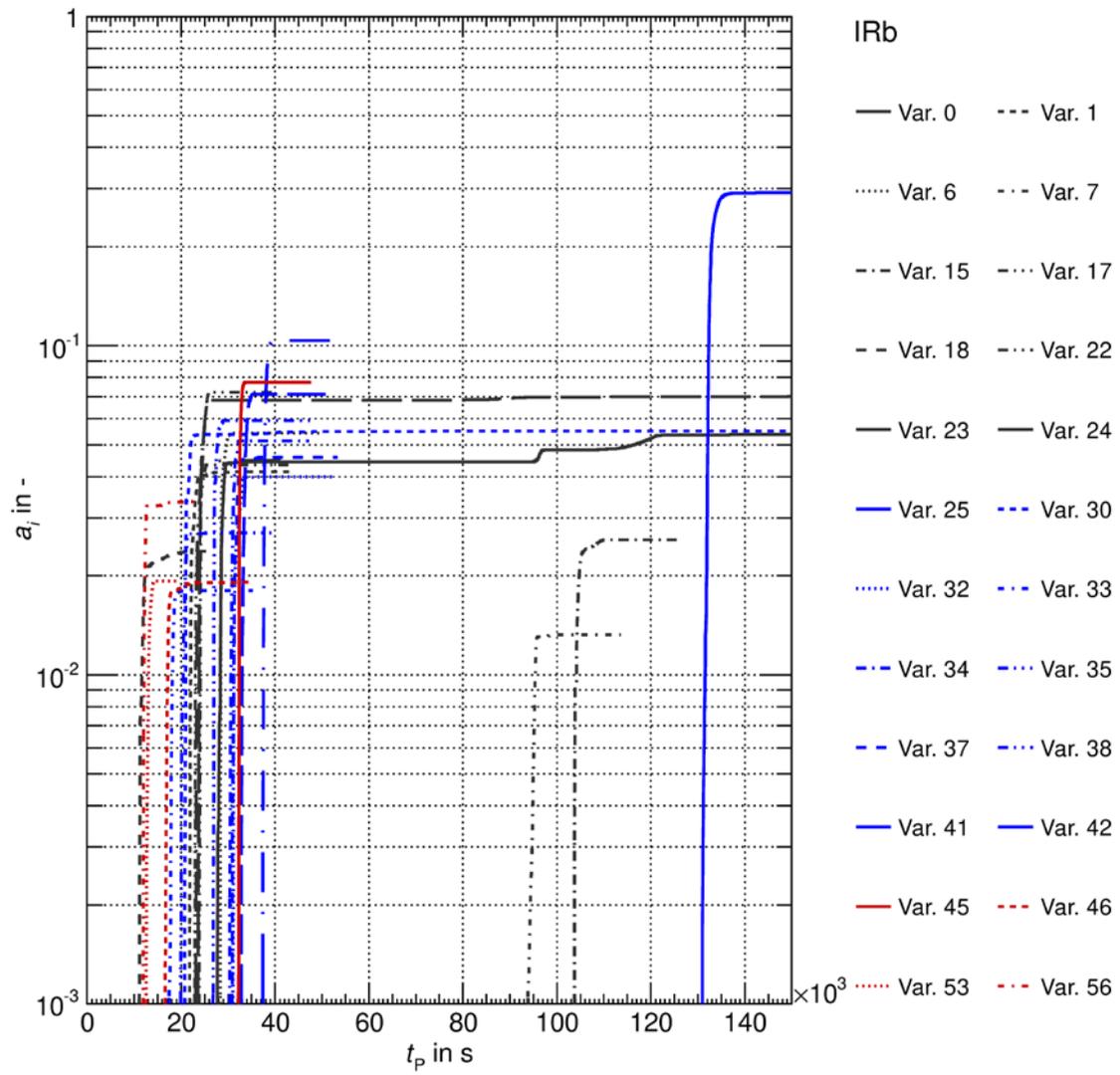


Abb. 3.51 Austrag von Iod in der Spezies IRb aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

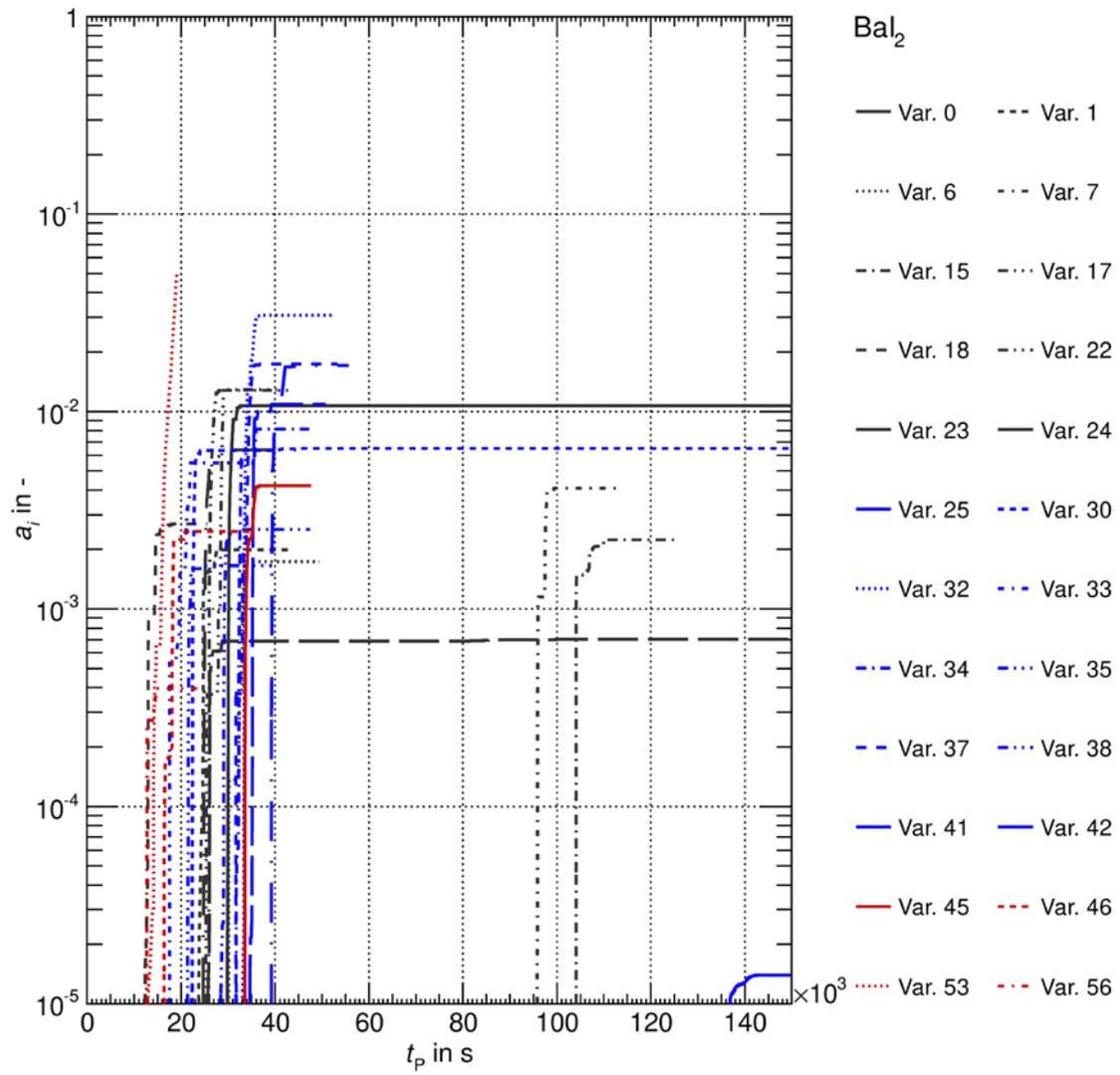


Abb. 3.52 Austrag von Iod in der Spezies BaI_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

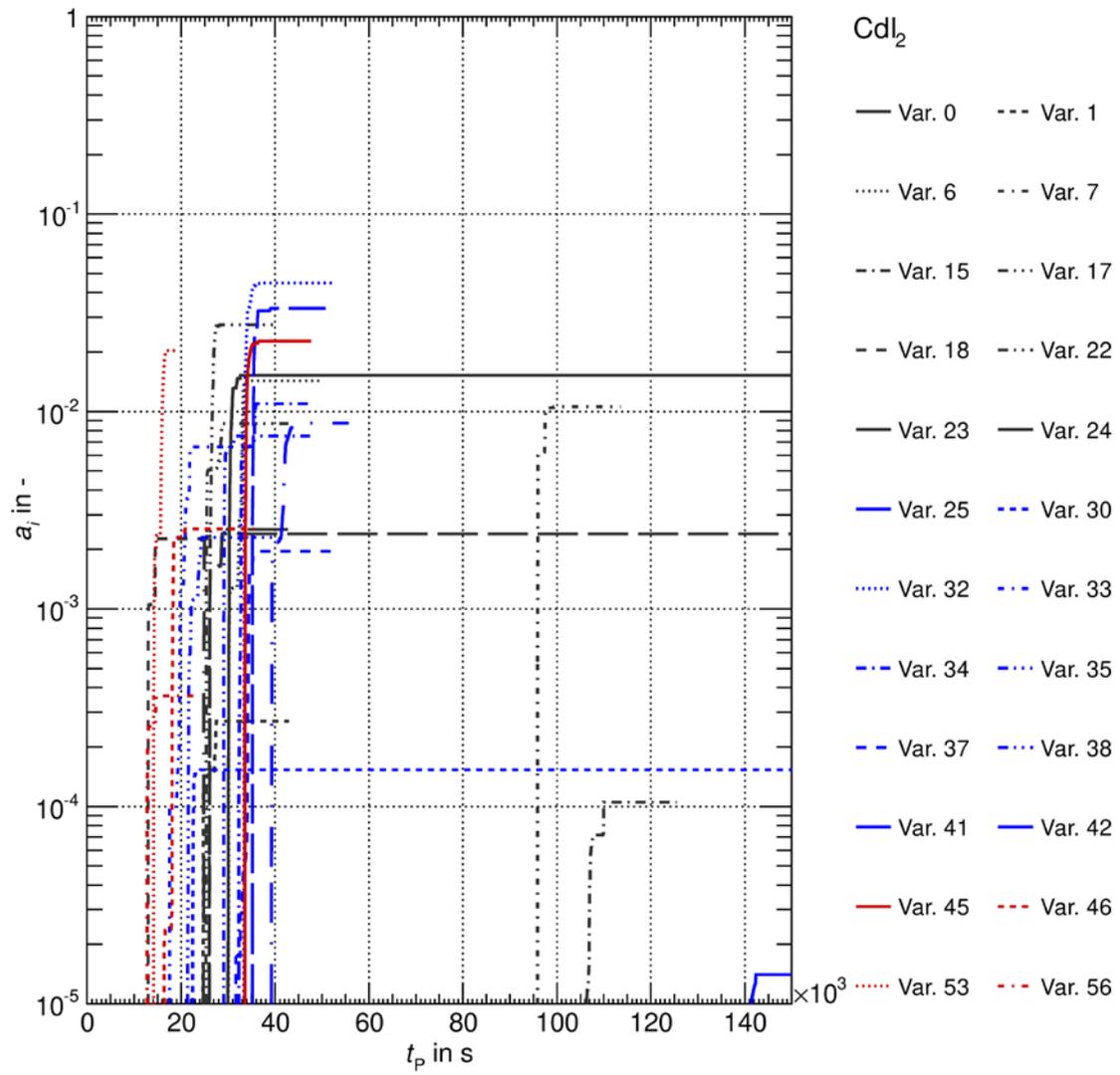


Abb. 3.53 Austrag von Iod in der Spezies CdI_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

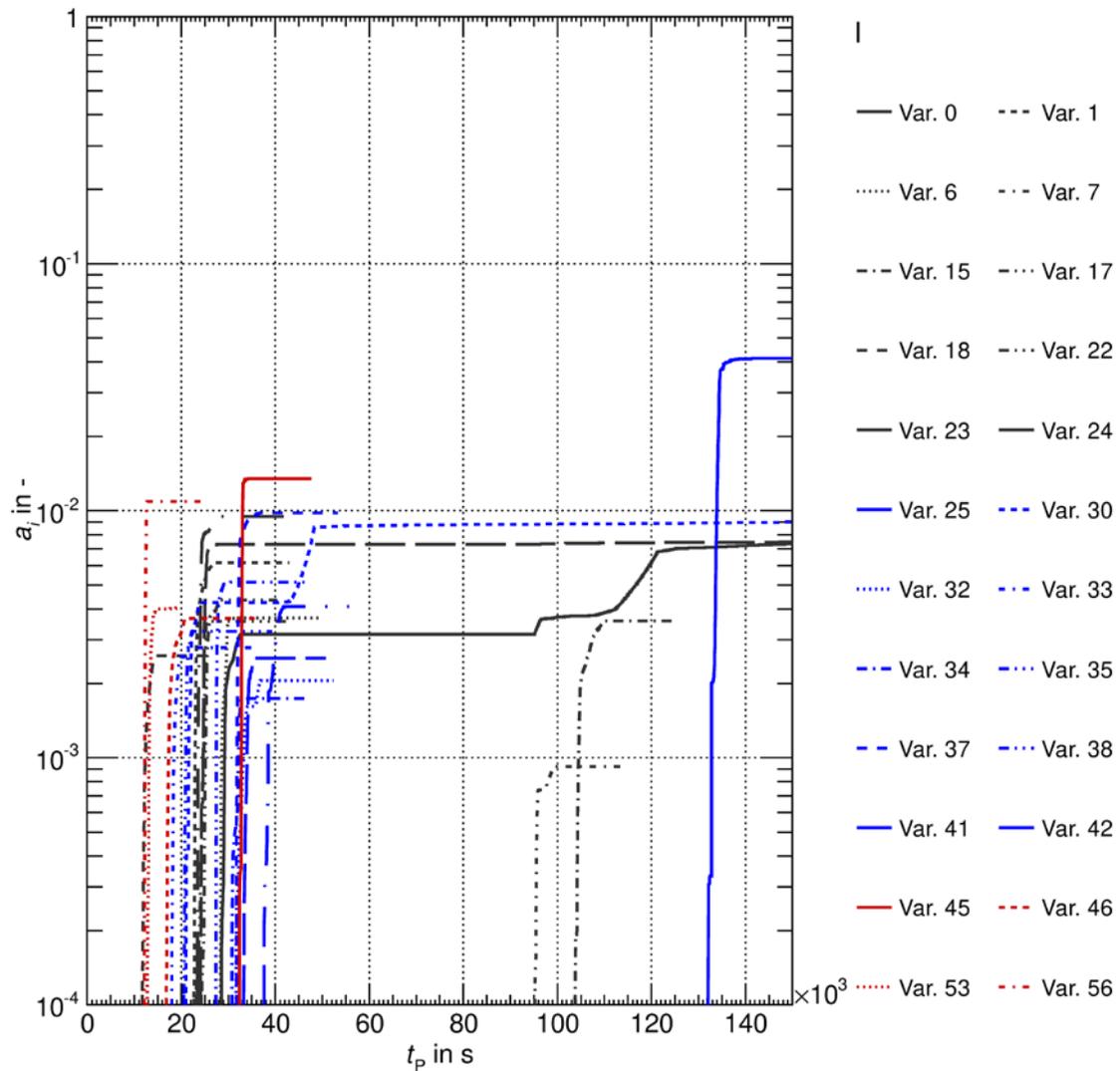


Abb. 3.54 Austrag von Iod in der Spezies I aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML

Korrelationen

Dies geschieht mit den bereits angekündigten Streudiagrammen. Insgesamt sind:

$$n_{\text{Para}} + n_{\text{phys. Größe}} + n_{\text{Zeit}}^{\text{Phänomen}} + n_{\text{Inventar}}^{\text{El. I}} \cdot \left((n_{\text{Austrag}}^{\text{Sp. } i} - 1) + n_{\text{Austrag}}^{\text{Igesamt}} + n_{\text{phys. Größe}} + n_{\text{Inventar}}^{\text{El. } j} + n_{\text{Zeit}}^{\text{Phänomen}} \right) = (17 + 3 + 1 + 1) \cdot (8 + 1 + 3 + 3 + 1) = 352 \quad \text{Streudiagramme}$$

bzw. Korrelationskoeffizienten aufgestellt worden. Letztere sind in Gänze in Tab. 3.4 gezeigt. Hiervon stellen 5 Autokorrelationen dar (Korrelation einer Größe mit sich selbst) und sind für eine weitere Betrachtung unerheblich. Die große Mehrheit der Koeffizienten beziehen sich auf unterschiedliche Größen, und werden gemäß Definition unter Kapitel 3.3.3 Kreuzkorrelationskoeffizienten genannt.

Wie auch schon in Kapitel 3.3.3 können Kreuzkorrelationen in zwei Gruppen unterschieden werden. Die erste Gruppe wird von „a priori“-Korrelationen bestimmt, also solche, die aus grundsätzlichen Überlegungen heraus erwartet werden. Diese sind beispielsweise die Korrelation zwischen Nachzerfallsleistung und spezifischer Brennstoffleistung (0,865, siehe Abb. 3.55) oder die Inventare mit eben derselben Größe ($> 0,65$, siehe z. B. Abb. 3.56). Der gemittelte Druck hängt vom Leckquerschnitt und interessanterweise noch stärker von der Versagenszeit des RDB. (0,664, siehe Abb. 3.57) bestimmt. Diese „a priori“-Korrelationen legen nahe, dass das Vorgehen grundsätzlich korrekt ist. Ferner ist die gemittelte PKL-Temperatur stark korreliert mit dem Leckquerschnitt, welches aufgrund der erhöhten Siedetemperatur wenig überraschend ist (0,835, siehe Abb. 3.58).

Es fällt auf, dass einige gezeigten Koeffizienten wie z. B. der des Iodinventars deutlich geringer ausfallen als bei der SBO-Gruppe. Eine Ursache hierfür kann nicht direkt erkannt werden. Im Falle des gemittelten Druckes sind für die Mittelungsgrenzen andere Kriterien herangezogen worden als bei der SBO-Gruppe, bei dem der PKL bis zum Versagen der DFU geschlossen ist. Im Streudiagramm für das Iodinventar fallen (Abb. 3.56) zwei Ausreißer auf, die das Korrelationsergebnis verschlechtern. Weder die Abbrandzeit noch die spezifische Brennstoffleistung weicht deutlich von den anderen Variationen ab.

Die „a priori“-Korrelationen liefern keine für die Iodfreisetzung relevanten Informationen. Um solche zu erkennen, ist eine Betrachtung der restlichen Streudiagramme notwendig, wobei auffallend wenige schwache Korrelationen zu erkennen sind. Der Gesamtaustrag von Iod korreliert noch stark mit der RDB-Versagenszeit (0,704, siehe Abb. 3.59), die Trägerspezies, die den größten Anteil daran ausmacht, ist CsI und korreliert deutlich schwächer mit dieser Größe. Es lässt sich zwar eine stärkere Korrelation mit den Abbrandtagen feststellen, da jedoch eine entsprechende Stärke mit dem Iodinventar fehlt, wird diese ignoriert. Der Umstand, dass die Korrelation mit der RDB-Versagenszeit geringer ausfällt, ist nicht überraschend, falls der Anteil von CsI am Gesamtiodaustrag betrachtet wird, welcher relativ stark variiert, entsprechend wird die Korrelation verschmiert.

Im Falle der Inventare besteht eine starke Korrelation mit spezifischer Brennstoffleistung ($> 0,664$) und Nachzerfallsleistung ($> 0,633$). Hierbei wird deutlich, dass Korrelationen keinen direkten kausalen Zusammenhang anzeigen. So sind die Inventare sicher nicht abhängig von der NZL, jedoch von der spezifischen Brennstoffleistung, die dazu führt, dass eine Menge von Elementen während des Betriebes aufgebaut wird. Diese Menge führt dann auch zu einer gewissen NZL.

Im Folgenden sollen die relevanten Korrelationen für die Austräge der Iodspezies ausgewählt werden.

Bei der Betrachtung von Tab. 3.4 sind für die Speziesausträge mit einer Ausnahme keine Korrelationskoeffizienten $> 0,5$ gegeben, so dass Punktwerte analog zu z. B. AgI in der SBO-Gruppe verwendet. Die einzige Spezies, bei der ein Korrelationskoeffizient $> 0,5$ vorhanden ist, ist RbI, wobei die zwei Abhängigkeiten im gemittelten Druck (0,637, siehe Abb. 3.60) und der RDB-Versagenszeit (0,603, siehe Abb. 3.61) gegeben sind. In beiden Fällen ist mindestens ein Ausreißer gegeben, dessen genauere Betrachtung wert ist. Der größte Wert ist bei Variation 25 vorhanden, der die größte RDB-Versagenszeit von $t_{\text{Versagen}}^{\text{RDB}} = 1,42346 \cdot 10^5 \text{ s}$ aufweist. Dies ist auf den Parameter der Leckgröße zurückzuführen, die in diesem Falle sehr gering ist. Zwar gibt es weitere Variationen, die hier ebenfalls geringe Werte zeigen, diese sind jedoch nicht in dieser Auswertung verwendet worden. Die kleine Leckquerschnitt wird durch eine eher geringe Einspeisemenge etwas konterkariert. Nichtsdestotrotz ist die RDB-Versagenszeit mit der Parameterkombination sehr hoch und damit auch die Menge an RbI, wie sich zeigt. Die Abhängigkeit vom Druck ist wie nachstehend gegeben. Die angegebenen Unsicherheiten beziehen sich auf das Verhältnis zur Basisrechnung und stellen die einfache Standardabweichung dar.

$$\left. \frac{a_{\text{RbI}}}{a_{\text{RbI}}^{\text{Var 0}}} \right|_p = 2,4427 \cdot \frac{\langle p_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle p_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var 0}}} - 0,6066 \text{ mit } \sigma_{\text{RbI}} = 1,213 \quad (3.20)$$

Jene für die Versagenszeit:

$$\left. \frac{a_{\text{RbI}}}{a_{\text{RbI}}^{\text{Var 0}}} \right|_t = 0,7697 \cdot \frac{t_{\text{Versagen}}^{\text{RDB}}}{t_{\text{Versagen}}^{\text{RDB, Var 0}}} + 0,3255 \text{ mit } \sigma_{\text{RbI}} = 1,213 \quad (3.21)$$

Um beide Größen zu verbinden, ist eine einfache zweidimensionale Regression durchgeführt worden, die folgendes liefert:

$$\frac{a_{\text{RbI}}}{a_{\text{RbI}}^{\text{Var 0}}} = 1,624 \cdot \frac{\langle p_{\text{ob. Plen.}} \rangle}{\langle p_{\text{ob. Plen.}} \rangle_{\text{Var 0}}} + 0,410 \cdot \frac{t_{\text{Versagen}}^{\text{RDB}}}{t_{\text{Versagen}}^{\text{RDB, Var 0}}} - 0,4786 \text{ mit } \sigma_{\text{RbI}} = 2,446 \quad (3.22)$$

Ausdruck (3.22) ist, wie auch schon für die SBO-Gruppe, in eine Austragsrate zu überführen, wobei der Anfang der Freisetzungsbeginn und das Ende das RDB-Versagen ist.

Ersteres kann in der Simulation abgefragt werden, letzteres wird angenommen und eine Korrektur eingeführt, wie es in Kapitel 3.3.3 beschrieben worden ist (kompakt geschrieben mit $b_{1/2/3}$ gemäß (3.22)):

$$\dot{m}_{\text{Rbl frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{m_{\text{i Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{FeI}_2}^{\text{Var 0}} (M_{\text{I}} + M_{\text{Rb}})}{(t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}) M_{\text{I}}} \left\{ b_1 \frac{\langle p_{\text{ob. Pl.}} \rangle}{\langle p_{\text{ob. Pl.}} \rangle_{\text{Var 0}}} + b_2 \frac{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB, Var 0}}} + b_3 \right\} \quad (3.23)$$

Wie schon in Kapitel 3.3.3 steht die Größe $\dot{m}_{\text{i frei}}^{\text{MEL}}$ für die Freisetzungsrates, die in MELCOR eingegeben wird, $m_{\text{i, Kern}}^{\text{MEL}}$ ist das Iodinventar in MELCOR, M_j sind die molaren Massen der entsprechenden Elemente in der Verbindung (hier: Rubidium und Iod), $\langle p_{\text{ob. Pl.}} \rangle$ ist der gemittelte Druck im oberen Plenum, $t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}}$ ist die Zeit, bei dem der RDB versagt und $t_{\text{Freis.}}^{\text{Beg.}}$ ist der Beginn der Freisetzung. Beide Zeiten werden ebenfalls auf MELCOR bezogen, jene Größen mit dem Index „Var 0“ beziehen sich selbstverständlich auf die zu Grunde liegende ATHLET-CD-Rechnung.

Erst am Ende des Intervalls beim RDB-Versagen steht der gemittelte Druck fest, so dass eine Korrektur notwendig ist. Da ferner eine Senke aufgrund der Ausführungen in Kapitel 3.4 nicht möglich ist, wird die Rate mit $\frac{3}{4}$ des eigentlichen Wertes angesetzt. Die Korrektur wird beim RDB-Versagen durchgeführt und soll mehr oder weniger instantan den Restbetrag freisetzen. Dieses Vorgehen deckt auch die Unsicherheit im Zeitpunkt des RDB-Versagens ab, der mit einigen Randbedingungen variieren kann.

Für die restlichen Spezies ist, wie angedeutet, keine nennenswerte Korrelation erkennbar, weswegen das einfache arithmetische Mittel über die Variationen verwendet wird.

Entsprechend ergibt sich für AgI:

$$\frac{a_{\text{AgI}}}{a_{\text{AgI}}^{\text{Var 0}}} = 2,67263 \text{ mit } \sigma_{\text{AgI}} = 2,095 \quad (3.24)$$

Für die Austragsrate ergibt sich analog zu obigen Behandlungen:

$$\dot{m}_{\text{AgI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{Ag}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{i Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{AgI}}^{\text{Var 0}}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 2,67263 \quad (3.25)$$

Für Ba_2 ergibt sich:

$$\frac{a_{\text{Ba}_2}}{a_{\text{Ba}_2}^{\text{Var } 0}} = 0,50915 \text{ mit } \sigma_{\text{Ba}_2} = 0,615 \quad (3.26)$$

Dies wird in die folgende Rate überführt:

$$\dot{m}_{\text{Ba}_2}^{\text{MEL frei}}(t) = \frac{2M_{\text{I}} + M_{\text{Ba}}}{2M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{Ba}_2}^{\text{Var } 0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,50915 \quad (3.27)$$

Für die Spezies Cd_2 ergibt sich:

$$\frac{a_{\text{Cd}_2}}{a_{\text{Cd}_2}^{\text{Var } 0}} = 0,71957 \text{ mit } \sigma_{\text{Cd}_2} = 0,986 \quad (3.28)$$

Dies wird in die folgende Rate überführt:

$$\dot{m}_{\text{Cd}_2}^{\text{MEL frei}}(t) = \frac{2M_{\text{I}} + M_{\text{Cd}}}{2M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{Cd}_2}^{\text{Var } 0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,71957 \quad (3.29)$$

Für die Spezies CsI (Cs_2 inklusive) zeigt sich ein Mittel von:

$$\frac{a_{\text{CsI}}}{a_{\text{CsI}}^{\text{Var } 0}} = 0,87981 \text{ mit } \sigma_{\text{CsI}} = 0,1877 \quad (3.30)$$

Dies wird in die folgende Rate überführt:

$$\dot{m}_{\text{CsI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_{\text{I}} + M_{\text{Cs}}}{M_{\text{I}}} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{CsI}}^{\text{Var } 0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,87981 \quad (3.31)$$

Für die Spezies Fe_2 wird folgender Wert verwendet:

$$\frac{a_{\text{FeI}_2}}{a_{\text{Var}0}} = 0,80899 \text{ mit } \sigma_{\text{FeI}_2} = 1,039 \quad (3.32)$$

Dies wird in die folgende Rate überführt:

$$\dot{m}_{\text{FeI}_2 \text{ frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{2M_I + M_{\text{Fe}}}{2M_I} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{FeI}_2}^{\text{Var}0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,80899 \quad (3.33)$$

Als letzte Spezies sei HI genannt für die der folgende Wert gelten soll:

$$\frac{a_{\text{HI}}}{a_{\text{HI}}^{\text{Var}0}} = 0,64538 \text{ mit } \sigma_{\text{HI}} = 0,347 \quad (3.34)$$

Die entsprechende Rate ist:

$$\dot{m}_{\text{HI frei}}^{\text{MEL}}(t) = \frac{M_I + M_{\text{H}}}{M_I} \frac{m_{\text{I Kern}}^{\text{MEL}} \cdot a_{\text{HI}}^{\text{Var}0}}{t_{\text{Vers.}}^{\text{RDB}} - t_{\text{Freis.}}^{\text{Beginn}}} \cdot 0,64538 \quad (3.35)$$

Mit den genannten Korrelationen oder Punktwerten stehen die Beziehungen für die Austräge fest.

Tab. 3.4 Korrelationsmatrix für die KMV-Gruppe

	σ_{I}	σ_{AgI}	σ_{Bal_2}	σ_{CdI_2}	σ_{CsI}	σ_{FeI_2}	σ_{HI}	σ_{RbI}	σ_{I}	σ_{Rb}	σ_{Cs}	$\sigma_{\text{Cs/I}}$	$\sigma_{\text{Rb/I}}$	$t_{\text{Versagen RDB}}$	$\langle P_{\text{ob. p}} \rangle$	$\langle T_{\text{ob. p}} \rangle$	$\langle P_{\text{M}} \rangle$
ABBR_VAR	3.40E-01	3.78E-02	3.64E-01	3.99E-01	4.32E-01	6.27E-02	6.12E-02	2.25E-01	1.94E-01	1.99E-01	2.05E-01	1.06E-01	1.52E-01	1.01E-01	6.06E-02	3.90E-03	1.53E-01
PSP_VAR	1.74E-02	1.06E-01	1.32E-01	5.38E-02	8.80E-03	8.70E-02	4.68E-02	1.24E-01	7.15E-01	6.72E-01	6.64E-01	9.14E-01	7.67E-01	2.50E-01	4.18E-01	3.36E-01	8.65E-01
TSPBURST_VAR	9.95E-02	4.70E-02	2.28E-01	2.53E-02	4.81E-02	4.23E-02	2.09E-01	2.44E-01	1.17E-01	1.03E-01	9.96E-02	2.15E-01	1.43E-01	2.96E-01	2.47E-01	1.83E-01	3.62E-01
CERMELT_VAR	2.65E-01	1.56E-03	4.20E-02	2.45E-01	2.57E-01	1.88E-01	2.10E-02	5.76E-02	9.35E-02	1.10E-01	1.08E-01	2.51E-02	7.86E-02	2.37E-01	2.48E-02	1.10E-01	1.49E-01
TOTMELT_VAR	2.03E-01	2.41E-01	5.46E-02	9.10E-02	1.80E-01	5.70E-02	3.93E-01	4.91E-02	1.91E-01	1.80E-01	1.84E-01	1.85E-01	1.84E-01	2.50E-01	1.09E-01	1.86E-01	1.34E-01
HTCLO_VAR	4.20E-01	7.45E-02	2.68E-02	1.85E-02	3.78E-01	1.81E-02	2.21E-02	1.64E-01	4.00E-02	2.64E-02	2.87E-02	9.95E-02	7.19E-02	2.56E-01	2.75E-02	1.99E-01	1.91E-01
HTC_VAR	3.30E-01	5.24E-01	5.12E-02	2.07E-01	1.61E-01	1.33E-01	2.87E-01	2.74E-02	1.42E-02	2.49E-02	2.26E-02	2.75E-03	1.32E-02	3.47E-01	7.85E-02	3.50E-01	1.68E-01
TENNSLSTR_VAR	1.15E-01	1.44E-01	4.16E-02	1.52E-01	1.54E-01	3.17E-01	1.67E-01	3.11E-02	6.76E-02	8.08E-02	7.50E-02	3.46E-02	5.16E-02	2.15E-01	2.27E-01	6.56E-02	6.96E-02
LM_HK_C_VAR	1.29E-01	2.24E-01	2.84E-02	2.24E-01	3.04E-01	4.71E-02	2.48E-01	1.40E-01	3.12E-01	3.15E-01	3.13E-01	3.18E-01	3.29E-01	5.65E-02	1.59E-01	1.96E-01	4.15E-01
CSALECK_VAR	6.27E-01	2.97E-01	3.32E-01	3.42E-01	1.85E-01	2.67E-01	2.90E-01	4.75E-01	3.13E-01	3.20E-01	3.14E-01	3.06E-01	3.01E-01	6.70E-01	4.67E-01	8.53E-01	2.26E-01
DH_VEN_ANSPR_VAR	8.14E-02	1.73E-01	2.98E-02	2.11E-01	7.62E-02	6.40E-02	6.99E-02	9.27E-02	2.96E-02	8.61E-03	9.09E-04	1.96E-01	4.95E-02	4.90E-02	1.74E-02	1.77E-01	2.43E-01
FB_VAR	2.72E-01	6.93E-02	1.44E-01	3.79E-01	1.24E-01	1.86E-01	2.64E-02	3.18E-01	4.76E-02	5.52E-02	5.12E-02	1.24E-02	5.24E-03	3.70E-01	4.42E-02	2.03E-01	5.18E-02
OXLIM_VAR	9.99E-02	1.69E-01	2.32E-01	1.78E-01	8.15E-02	2.24E-01	8.78E-02	2.70E-02	1.62E-01	1.43E-01	1.47E-01	2.44E-01	2.26E-01	1.07E-01	5.86E-04	1.23E-02	3.41E-01
OXINI_VAR	8.64E-02	1.76E-01	4.84E-02	5.07E-03	1.65E-02	1.14E-01	4.98E-02	2.53E-01	3.42E-01	3.49E-01	3.52E-01	2.44E-01	3.16E-01	1.51E-02	1.04E-01	6.80E-02	2.24E-01
BOR_VAR	3.08E-02	1.06E-01	1.37E-01	1.53E-02	3.02E-02	9.79E-03	1.34E-01	5.17E-02	1.27E-01	1.76E-01	1.37E-01	9.08E-02	6.74E-03	1.15E-01	1.72E-01	9.52E-02	6.12E-02
NODA_VAR_1	1.18E-01	2.47E-01	3.66E-04	1.78E-01	2.41E-01	2.86E-01	8.81E-02	5.92E-02	1.77E-01	1.75E-01	1.68E-01	1.90E-01	1.57E-01	2.52E-01	2.47E-01	2.48E-02	1.42E-01
NODA_VAR_2	5.75E-02	1.96E-02	2.20E-01	9.05E-02	3.43E-01	2.94E-01	3.10E-01	4.09E-01	3.34E-02	3.85E-02	4.66E-02	3.21E-02	4.93E-02	1.39E-01	5.02E-02	2.14E-01	2.27E-02
$\langle P_{\text{ob. p}} \rangle$	4.34E-01	1.33E-01	8.22E-02	1.07E-02	1.28E-01	1.06E-01	1.79E-02	6.37E-01	4.06E-01	3.99E-01	3.92E-01	4.44E-01	3.99E-01	6.64E-01	1.00E+00	2.81E-01	3.57E-01
$\langle T_{\text{ob. p}} \rangle$	3.88E-01	3.26E-01	1.52E-01	2.23E-01	8.78E-02	1.49E-01	9.52E-02	2.89E-01	3.56E-01	3.51E-01	3.47E-01	3.82E-01	3.57E-01	6.69E-01	2.81E-01	1.00E+00	3.60E-01
$\langle P_{\text{M}} \rangle$	1.09E-01	6.05E-03	1.99E-01	4.55E-02	1.15E-01	2.84E-02	7.14E-02	6.76E-02	6.72E-01	6.40E-01	6.33E-01	8.30E-01	7.28E-01	2.25E-01	3.57E-01	3.60E-01	1.00E+00
$t_{\text{Versagen RDB}}$	7.04E-01	9.00E-02	6.38E-02	5.24E-02	4.52E-01	1.88E-02	9.36E-02	6.03E-01	2.57E-01	2.57E-01	2.49E-01	2.86E-01	2.56E-01	1.00E+00	6.64E-01	6.69E-01	2.25E-01
σ_{el}	3.77E-02	5.59E-02	9.43E-02	2.19E-02	4.79E-02	5.85E-02	1.52E-01	5.48E-02	1.00E+00	9.97E-01	9.98E-01	9.93E-01	9.89E-01	2.57E-01	4.06E-01	3.56E-01	6.72E-01

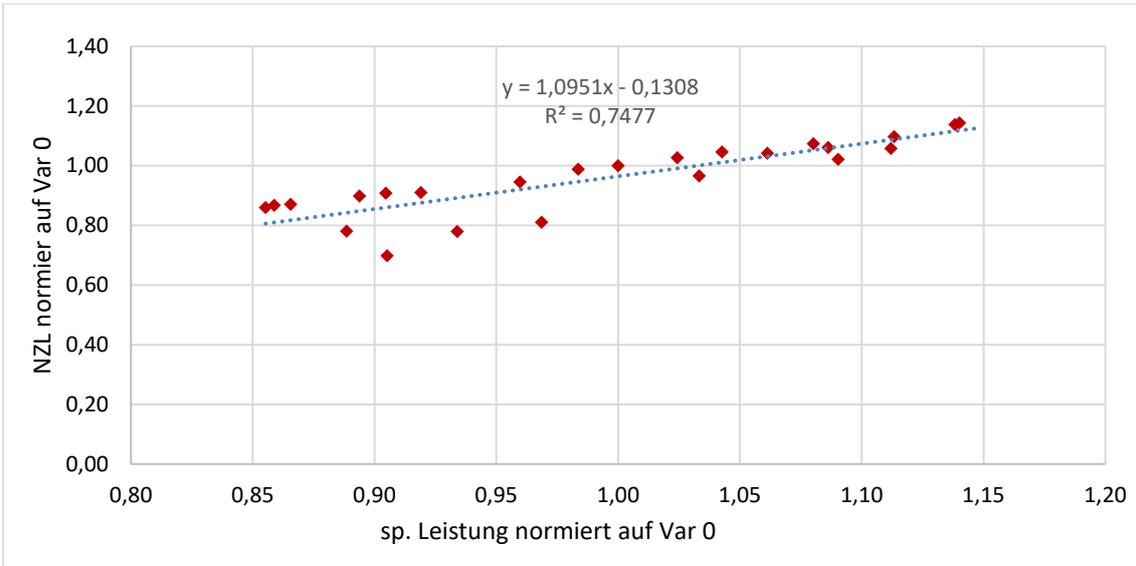


Abb. 3.55 Streudiagramm zwischen den Größen der Nacherfallsleistung und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

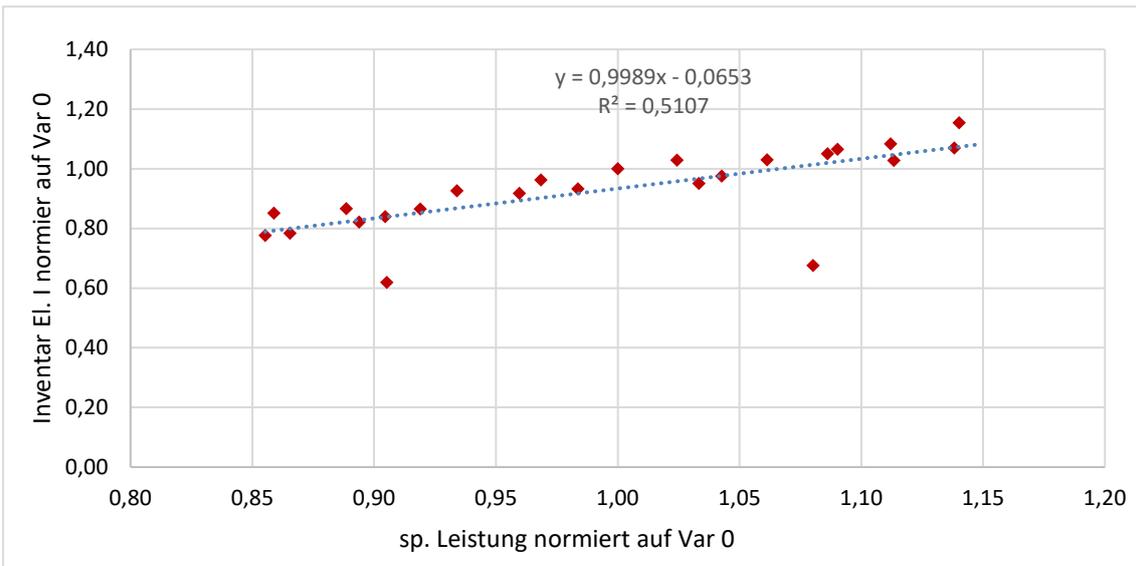


Abb. 3.56 Streudiagramm zwischen den Größen des Iodinventars und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

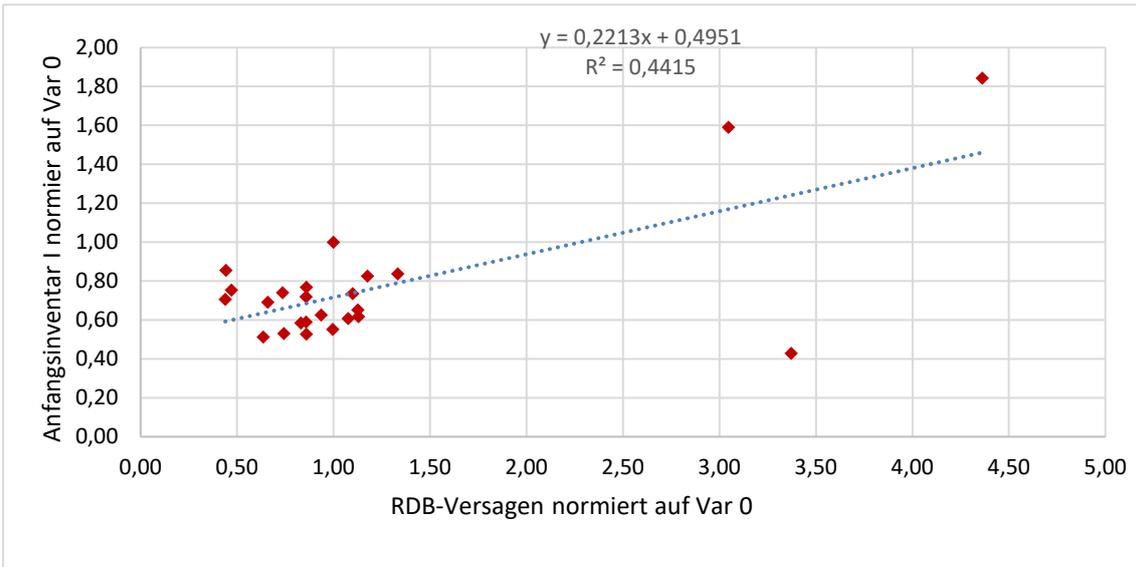


Abb. 3.57 Streudiagramm zwischen den Größen des gemittelten PKL-Druckes und der Versagenszeit des RDB (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

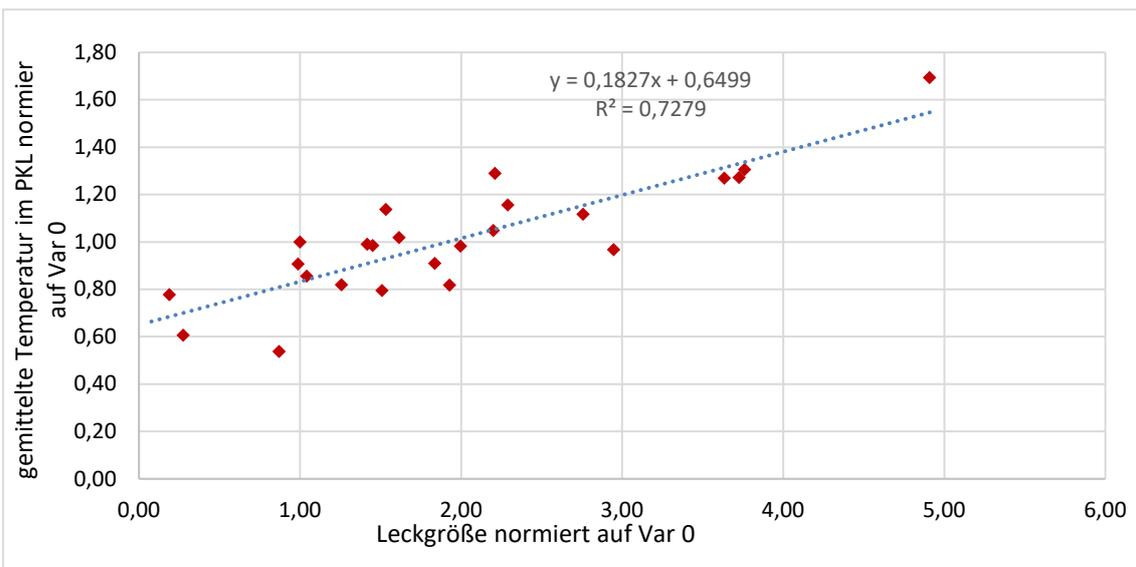


Abb. 3.58 Streudiagramm zwischen den Größen der gemittelten PKL-Temperatur und dem Leckquerschnitt (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

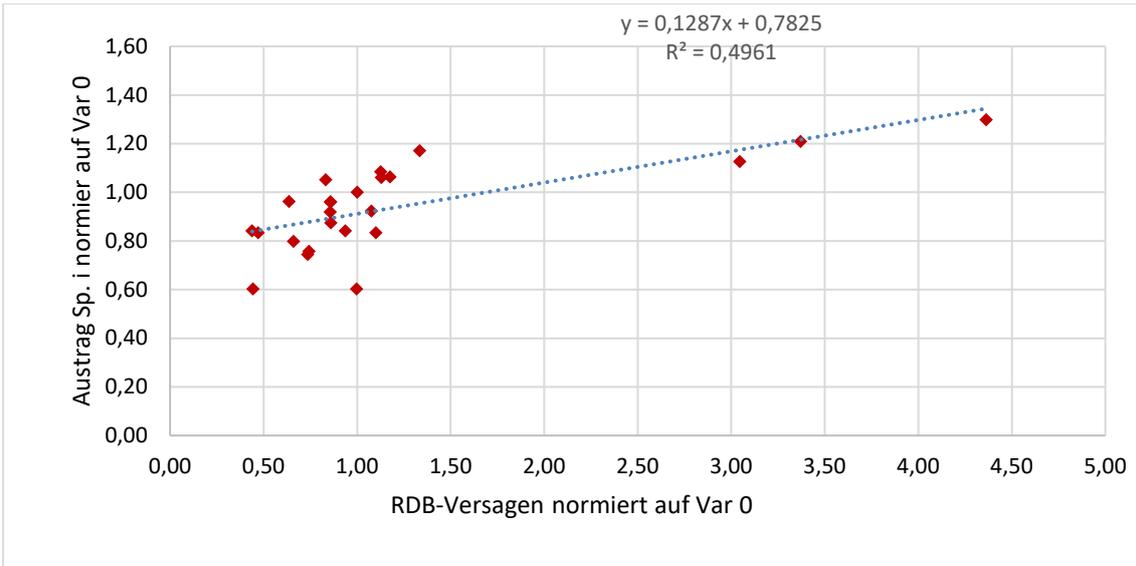


Abb. 3.59 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von I (gesamt) und der RDB-Versagenszeit (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

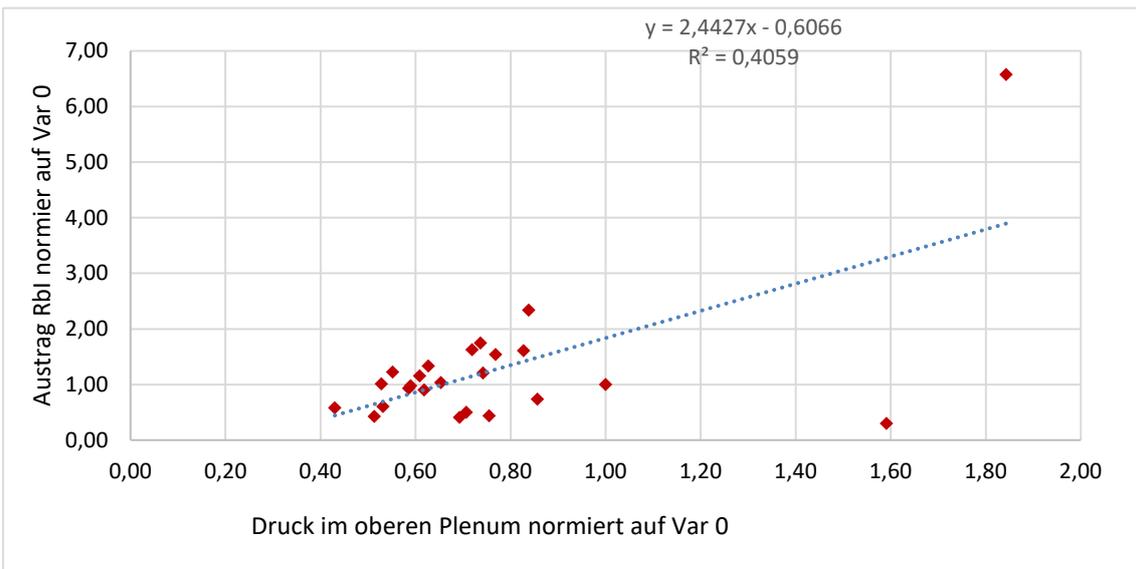


Abb. 3.60 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von RbI und dem gemittelten Druck im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

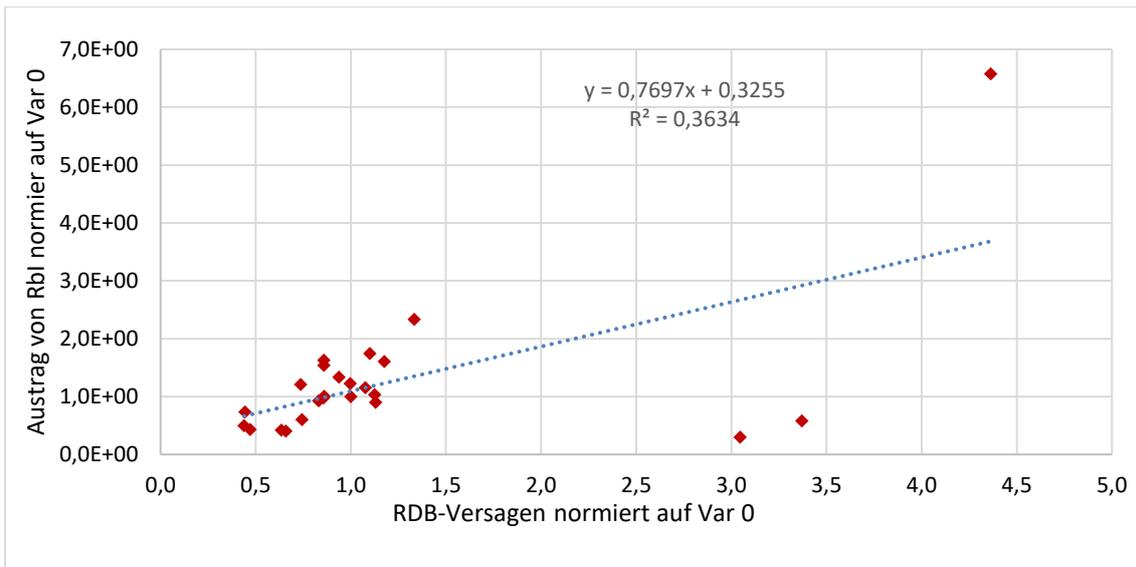


Abb. 3.61 Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Rbl und der RDB-Versagenszeit (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)

3.4 Vereinfachte direkte Umsetzung der in ATHLET-CD (SAFT und FIPREM) gegebenen Modelle in MELCOR, AP 2.2

Wie in Kapitel 3.1 bereits vereinfacht beschrieben, ist es angedacht, die in ATHLET-CD bzw. in SAFT gegebenen Modelle für die Iodchemie in MELCOR-Simulationen nutzbar zu machen. Der Grund hierfür liegt in dem Umstand, dass in MELCOR wichtige chemische Verbindungen für die quantitative Betrachtung der Iodchemie im RKL nicht explizit gerechnet und deren physikalische Eigenschaften bei Transport- und Anlagerungsprozessen daher im RKL nicht genügend berücksichtigt wird, auch wenn die physikalischen Ablagerungsmechanismen in MELCOR grundsätzlich abgebildet sind. Die grundlegende Idee ist hierbei, eine ATHLET-CD-Simulation für vordefinierte Randbedingungen durchzuführen, die iodrelevanten Ergebnisse in kompatibler Form in einen MELCOR-Eingabedatensatz einzugeben und anschließend MELCOR mit diesen Ergebnissen dasselbe Szenario simulieren zu lassen. Dies wird als vereinfachte Code-Kopplung angesehen. In diesem Vorhaben ist es vorgesehen, die prinzipielle Machbarkeit einer solchen Kopplung zu zeigen.

Zunächst ist es dabei angedacht gewesen, die iodrelevanten Spezies aus der MELCOR-Rechnung zu entfernen. Dies sollte mittels Radionuklidsenken geschehen. Aufgrund der Erfahrungen mit solchen Konstrukten, die im nachfolgenden Unterkapitel 3.4.1 beschrieben sind, ist beschlossen worden, auf dieses Vorgehen zu verzichten. Ein einfaches,

alternatives Vorgehen hätte darin bestanden, die iodrelevanten Spezies in MELCOR zu belassen und in der Datenanalyse als entfernt zu erachten, also zu ignorieren. Dies hätte jedoch einen Fehler in der Nachzerfallsleistung bedeutet, der, wollte man ihn korrigieren, in der Leistungslosigkeit der eingespeisten Iodspezies gemündet hätte. Dies hätte jedoch zumindest einen Verteilungsfehler zur Folge gehabt, da sich die iodrelevanten Elementklasse ein wenig anders verhalten als die eingespeisten Iodspezies. Dieses Vorhaben ist als Vorgehen im Zwischenbericht genannt.

Eine elegantere Vorgehensweise besteht nun darin, die iodrelevanten Spezies an der Freisetzung aus dem Kern zu hindern, welches in den CORSOR-BOOTH-Koeffizienten im Sensitivitätsfeld ‚SC7103‘ bewerkstelligt wird. Dies bedeutet jedoch, dass bei der Freisetzung eine zu große Nachzerfallsleistung im Brennstoff zurückbleibt, so dass dies in den spezifischen Nachzerfallsleistungstabellen zu berücksichtigen ist. Die eingespeisten Spezies werden mit einer Nachzerfallsleistung ausgestattet, die aus dem Kern hätte austreten sollen gemäß der Vorgabe der ATHLET-CD-Simulation. Entsprechende Ausführungen sind Kapitel 3.4.2 zu entnehmen. Eine weitere Anpassung besteht darin, die Nachzerfallsleistung zu korrigieren, die sich auf Strukturen ablagert. Dieser Effekt wird sowohl in ATHLET-CD als auch in MELCOR abgebildet, so dass hier eine Differenzbetrachtung stattfindet. Eine Entfernung der Leistung in MELCOR wäre aufwändig und kann nicht als „a priori“ präziser erachtet werden. Entsprechende Ausführungen sind unter Kapitel 3.4.3 zu finden.

Für das Einbringen von Iodspezies sind solche in MELCOR zu definieren.

3.4.1 Radionuklidsenken

Um das Ergebnis MELCORs zu übersteuern, ist es angedacht gewesen, das Ergebnis von MELCOR zu entfernen, um es mit dem ATHLET-CDs zu ersetzen. Hierzu sind RN-Senken für die iodrelevanten Spezies definiert worden. RN-Senken lassen sich lediglich für Aerosole und Dämpfe in der Gas- und Wasserphase in einem Kontrollvolumen definieren (Kontrollfunktionsvariablen: ‚RN1-A/VMG(CV,RN-Klasse,Größenklasse, Stoffklasse)‘ und ‚RN1-A/VML(CV,RN-Klasse,Stoffklasse)‘ siehe RN-UG-156 in /SAN 17/) und nicht auf Strukturen. Daher gilt es, Ablagerungseffekte zu vermeiden, so dass eine möglichst instantane Entfernung der RN angestrebt wird.

Dies ist mit folgender massebezogener Vernichtungsrate der Elementklasse i zu bewerkstelligen:

$$\dot{m}_i = \frac{m_i(t_k)}{\Delta t_k} \quad (3.36)$$

In (3.1) steht Δt_k für das aktuelle Intervall des zeitlichen Diskretisierungsschrittes k , und m_i steht für die aktuelle Masse der Elementklasse i .

In Abb. 3.16 ist die Abbaurrate von Csl im Kernvolumen, deren Restmasse im Kernvolumen gesamt und in Gas- und Wasserphase für ein SBO-Szenario gezeigt. Hierbei ist die Abbaurrate in der Wasserphase etwa 50-mal so groß wie die Restmasse ebendort. Dies korrespondiert mit dem Zeitschritt von $\Delta t = 2,0 \cdot 10^{-2}$ s. Offensichtlich verbleibt jedoch eine Restmasse an Csl, welche in ihrer Quantität wiederum akzeptabel ist.

In Abb. 3.17 ist die Nachzerfallsleistung in einer MELCOR- und einer entsprechenden ATHLET-CD-Rechnung gezeigt. Die im RKL abgelagerte Leistung ist nicht zugänglich, wohl aber lässt sich ein einfacher Anteil an der gesamten abgelagerten Leistung definieren:

$$P_{\text{abgel.}}^{\text{RKL}} = \frac{1}{m_{\text{RN abgel.}}^{\text{gesamt}}} \cdot \sum_{j=1}^{N_{\text{RKL}}} m_{\text{RN abgel.}}^{\text{HS } j} \cdot P_{\text{abgel.}}^{\text{gesamt}} \quad (3.37)$$

$m_{\text{RN}}^{\text{HS } j}$ ist die Masse von Radionukliden, die sich auf die Struktur j abgelagert hat, wobei über alle RKL Strukturen im RKL aufsummiert wird. $m_{\text{RN abgel.}}^{\text{gesamt}}$ ist die Gesamtmasse an RN, die sich auf Strukturen abgelagert haben und $P_{\text{abgel.}}^{\text{gesamt}}$ ist die gesamte abgelagerte Leistung im System. Es zeigt sich eine deutliche Diskrepanz, die sich jedoch auf alle RN bezieht. Die Elemente Cs, Mo, I und Ag, die die Minimalmenge an iodspezifischen Elementen darstellt, machen ca. 17,9 % der Gesamtnachzerfallsleistung aus. Dennoch spricht die Diskrepanz für deutliche Unterschiede im RN-Transport.

Während der Kernzerstörung kommt es in MELCOR zu häufigen Fehlermeldungen, die sich auf die RN-Berechnung beziehen und offenbar durch die Senke hervorgerufen wird

(„EXCESSIVE ERROR IN AEROSOL CALCULATION IN CONTROL VOLUME...“). Dieser Fehler wird begleitet mit einer dramatischen Reduktion des Rechenzeitschrittes. Eine Diskrepanz zwischen den alten und neuen Rechenergebnissen also im zeitlichen Diskretisierungsschritt k und $k-1$ liegt dabei nahe. Denn falls die aktuelle Masse $m_i(t_k)$ mit einem Zeitschritt Δt_{k-1} dividiert wird, kann ein falsches Ergebnis resultieren, falls sich die Zeitschritte unterscheiden. Dies hängt von der Reihenfolge der Abarbeitung des RN- und des CF-Paketes ab. Wobei in letzterem die Abbauraten berechnet werden. Es ist daneben jedoch ebenfalls zu bedenken, dass im RN-Paket eine Ablagerung berechnet wird, so dass die definierte Senke mit diesen Prozessen konkurriert. Dies kann ebenfalls zu einer Diskrepanz führen. Es zeigt sich nun in Testrechnungen, dass die Begrenzung der maximalen Rechenschrittweite auf geringe Werte eine Rechnung möglich macht. Hierbei ist jedoch zu bedenken, dass derartig kleine Rechenschrittweiten für sich genommen eine Rechnung in einer Weise verlängern, so dass sie unpraktikabel werden kann. Aus diesem Grunde ist zu überlegen, ob auf RN-Senken verzichtet werden kann. Eine RN-Quelle sollte derartige Probleme nicht zeigen.

Eine alternative Umsetzung einer Radionuklidsenke hat darin bestanden, statt des in Gleichung (3.1) gezeigten vollständigen instantanen Abbaus, einen allmählichen Abbau mittels Integralreglern zu bewerkstelligen.

$$\dot{m}_i = \int_{t_p^m}^{t_p^k} c(m_i(t_p^k) - m_{\text{Soll}}) dt = c(m_i(t_k) - m_{\text{Soll}}) \cdot (t_p^k - t_p^m) \quad \text{für} \quad (3.38)$$

$$m_i(t_p^k) - m_{\text{Soll}} > 0 \text{ und } \dot{m}_i = 0 \text{ für } m_i(t_p^k) - m_{\text{Soll}} \leq 0$$

In (3.38) steht c für eine Konstanten, die grob von der Differenz von Ist- zu Sollwert der Radionuklidmasse abhängt. Die Abhängigkeit ist derart gestaltet, dass zwischen zwei Werten unterschieden wird. Ein Wert ist dem Weit-, der andere dem Nahbereich zugeordnet. Hierbei ist der Nahbereich, also jene Differenzwerte unterhalb einer gewissen Grenze zum Sollwert, einstellbar. Der Sollwert hat in (3.38) keinen Index i erhalten, da er für alle RN gleich gewählt ist.

Die Problemzeit t_p^k steht für die aktuelle Problemzeit des Zeitschrittes k , t_p^m steht hingegen für die letzte Problemzeit zum Zeitschritt m , an dem zum letzten Male das Vorzeichen bei der Differenzbildung $m_i(t_k) - m_{\text{Soll}}$ gewechselt hat („Nulldurchgang“). Hierbei handelt es sich um einen reinen I-Regler ohne P-Anteil. Das Ergebnis von den Reglern ist in Abb. 3.63 gezeigt. Dabei ist jeweils ein Regler für die 10 Klassen von Aerosolen in

der Gasphase, der Aerosole in der Wasserphase und für RN-Dampf in Gas- und Wasserphase definiert worden, jedoch nur für das Kernvolumen. Für das unteren Plenum ist eine weitere Senke für die Aerosole in der Wasserphase gegeben.

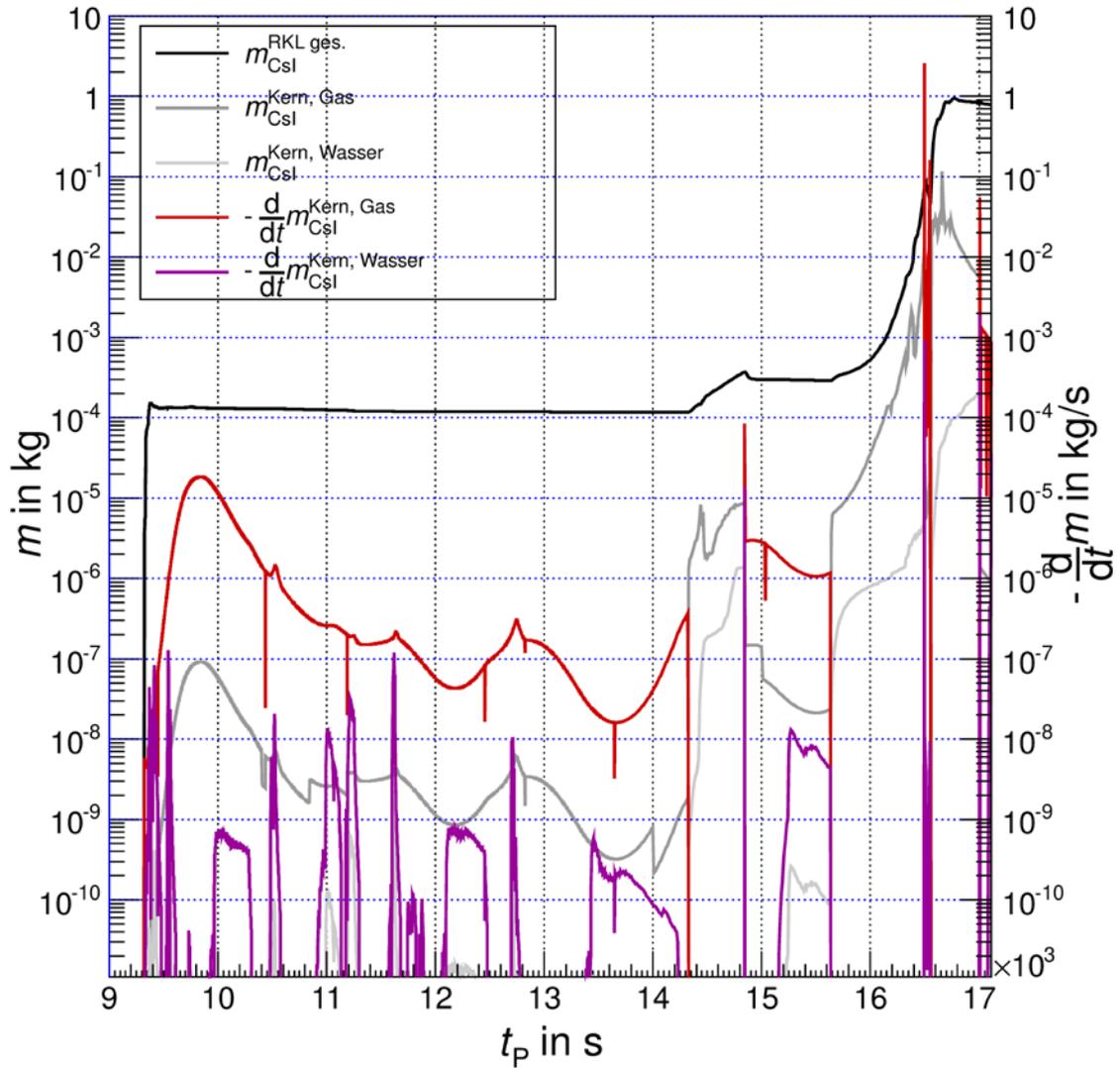


Abb. 3.62 Abbaurrate von CsI, CsI-Restmasse gesamt und in Gas- und Wasserphase im Kernvolumen mit Hilfe einfacher Abbauraten

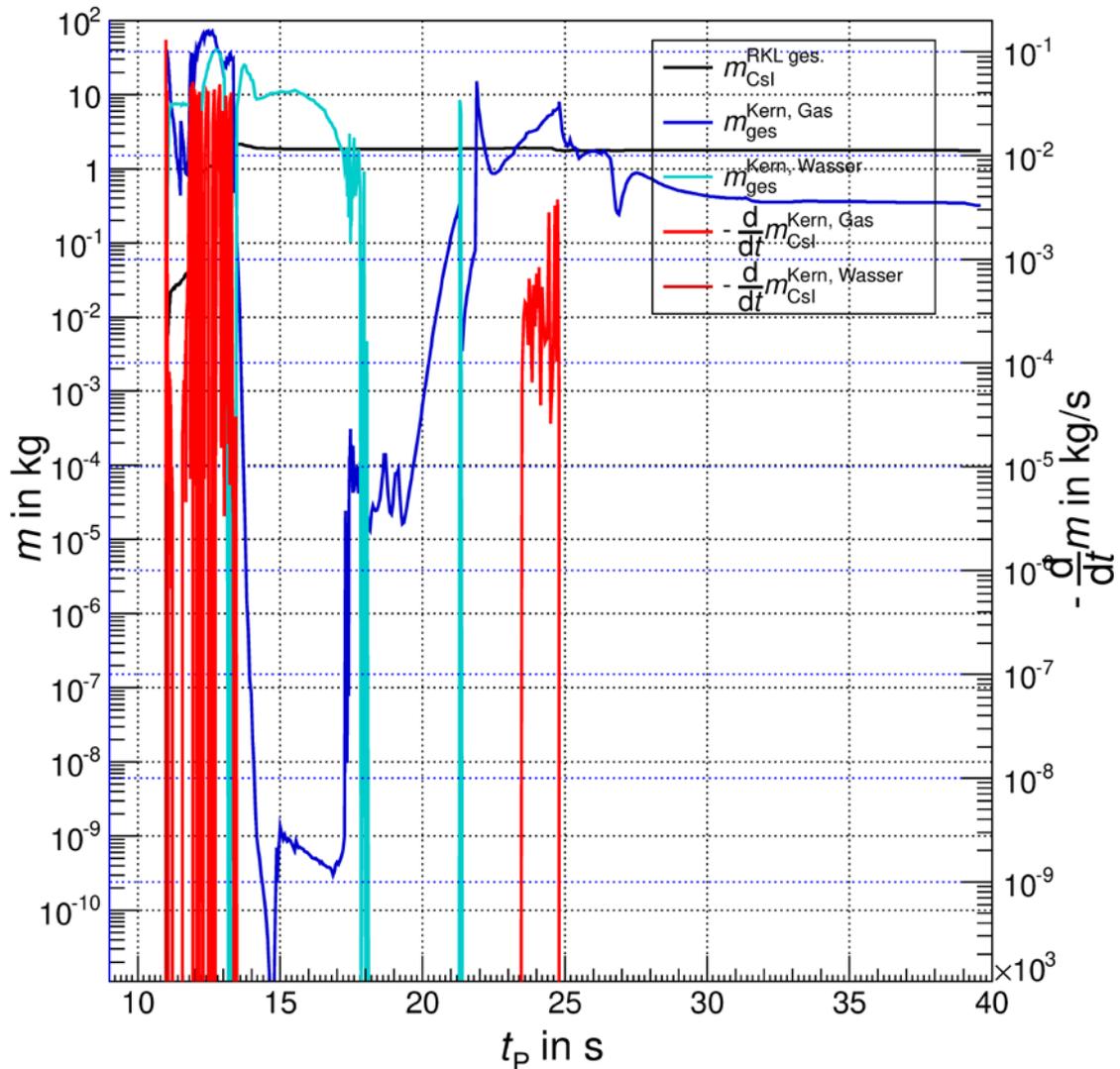


Abb. 3.63 Abbaurate von CsI, CsI-Restmasse gesamt und in Gas- und Wasserphase im Kernvolumen mit Hilfe von Integralreglern

3.4.2 Anpassung der Nachzerfallsleistung

Bei der Definition von Klassen bzw. Elementen in MELCOR ist grundsätzlich die Nachzerfallsleistung einzutragen. Für 67 Elemente ist eine spezifische Nachzerfallsleistung (Leistung je Masseinheit des Elementes) bereits gegeben. Durch eine reine Neuklassifizierung wird aufgrund der elementspezifischen Eingabe automatisch die Klassenleistung berechnet, so dass kein weiterer Handlungsbedarf besteht. Für die Restklassen (z. B. ‚Cs_Rest‘, ‚Ba_Rest‘, ‚Cd_Rest‘) besteht daher kein Handlungsbedarf. Für die neuen Klassen, die selbst eine Verbindung darstellen, ist eine spezifische Nachzerfallsleistung einzugeben. Eine direkte Verbindung zwischen Elementen ist hier nicht möglich,

da dies lediglich in festen stöchiometrischen Verhältnissen geschehen kann, so dass sich, wie im Falle von CsI, I direkt mit Cs verbindet. Dies soll jedoch von ATHLET-CD vorgegeben werden. Aus diesem Grunde sind die Klassen als Verbindungen definiert und deren Leistung ist spezifisch für diese. Dies gilt nun für ‚FeI2‘, ‚AgI‘, ‚HI‘, ‚RbI‘, ‚BaI2‘, ‚CdI2‘, ‚CSI_ZWO‘ und ‚I_ZWO‘ (siehe zur Klassendefinition Kapitel 3.1.3). Das vorkommende atomare Iod wird in die Klasse ‚I2_ZWO‘ und ‚Cs2I2‘ in ‚CsI‘ eingruppiert. Letztere beiden stellen die Ersatzklassen für die ursprünglichen Klassen ‚CsI‘ und ‚I2‘ dar. Auch deren Informationen hinsichtlich der Freisetzung stammen von ATHLET-CD, so dass auch hier eine Nachzerfallsleistung einzugeben ist. Diese ist für die Ersatzklassen *i* wie folgt gegeben:

$$p_i = \frac{1}{\sum_{j=1}^N n_j M_j} \sum_{j=1}^N n_j M_j p_j \quad (3.39)$$

Der Index *j* in (3.39) steht hierbei für die Elemente, aus denen die Spezies *i* zusammengesetzt ist. *n_j* steht für den entsprechenden Stöchiometriefaktor. Es ist sofort ersichtlich, dass (3.39) ein simpler, mit der molaren Masse gewichteter, Mittelwert darstellt. Im Falle von Spezies, die nur einen Träger von Nachzerfallsleistung beinhalten (z. B. HI und FeI₂) vereinfacht sich der Ausdruck zu $p_i = \frac{n_i M_i}{\sum_{j=1}^N M_j} p_i$. Die restlichen Elemente wie Wasserstoff oder Eisen stammen aus Strukturmaterialien oder dem Wasser.

Die iodrelevanten Elemente - je nachdem ob für den SBO oder KMV sind dies – Cs, Cd, Ba oder Rb werden über die Eingabe in den Sensitivitätskoeffizient ‚SC7103‘ an der Freisetzung in dem Maße gehindert, wie es die Quellstärke aus der ATHLET-CD-Vorrechnung vorgibt. Diese Aussage lässt sich wie folgt mathematisch formulieren:

$$\alpha_j = \frac{m_{j,1}^{\text{frei}}}{m_{j,0}^{\text{frei}}} \quad (3.40)$$

In (3.40) steht $m_{j,0/1}^{\text{frei}}$ für die freigesetzte Menge des Elementes *j* aus dem Brennstoff (“in vessel”-Phase) für den ursprünglichen Bezugsfall ohne Quellen aus ATHLET-CD (“0”) oder mit diesen Quellen (“1”). Für den Einsatz unter ‚SC7103‘ ist dieser Faktor α_j noch mit dem ursprünglichen Freisetzungsfaktor des Freisetzungsmodells „CORSOR-

BOOTH“ zu modifizieren, der hier $\beta_{\text{CORS.-B.}}^j$ genannt sei, so dass für den Einsatz unter ‚SC7103‘ der folgende Ausdruck zu verwenden ist:

$$SC7103_j = \alpha_j \beta_{\text{CORS.-B.}}^j \quad (3.41)$$

Mit Verwendung des Faktors α_j wird auf Radionuklidsenken verzichtet, welche die Lauf-fähigkeit gemäß den Ausführungen unter Kapitel 3.4.1, deutlich einschränken.

Die Verhinderung der Freisetzung bedeutet jedoch, dass im Kern eine zu große Nach-zerfallsleistung zurückbleibt. Um dies zu korrigieren, wird die spezifische Nachzerfalls-leistung der genannten Elemente um einen gewissen Wert reduziert, der aus der Lei-stungserhaltung stammt, welche wie folgt formuliert sei:

$$P_{j,0}^{\text{ges}} = P_{j,1}^{\text{ges}} = P_{j,1}^{\text{Rest}} + P_{j,1}^{\text{frei}} + P_j^{\text{Quell AC2}} \quad (3.42)$$

In (3.42) steht der Index „0“ für den Fall ohne Quelleneintrag aus AC2 (hier der ATHLET-CD-Teil) und „1“ für den Fall eben mit diesen Quellen. $P_{j,0/1}^{\text{ges}}$ steht für die gesamte Nach-zerfallsleistung des Elements j , $P_{j,0/1}^{\text{Rest}}$ steht für die Leistung, die im Brennstoff zurück-bleibt, $P_{j,0/1}^{\text{frei}}$ steht für die freigesetzte Leistung und $P_j^{\text{Quell AC2}}$ für die Leistung der Quelle aus AC2. Die Leistungen werden so nicht in MELCOR eingegeben, sondern die auf die Masse bezogene Leistung, so dass (3.42) in folgenden Ausdruck übergehen:

$$p_{j,0} m_j^{\text{ini}} = p_{j,1} m_{j,1}^{\text{Rest}} + p_{j,1} m_{j,1}^{\text{frei}} + p_{j,0} m_{j,1}^{\text{Quell AC2}} \quad (3.43)$$

In (3.43) stehen m_j^{ini} für das Kerninventar des Elementes j , $m_{j,0/1}^{\text{Rest}}$ steht für die Masse des Elementes j , die im Brennstoff verbleibt, $m_{j,0/1}^{\text{frei}}$ ist die freigesetzte Masse, $m_{j,1}^{\text{Quell AC2}}$ ist die Quellstärke als Masse, hier nur mit dem Index „1“ versehen, da im Fall „0“ keine Quelle angenommen wird. Im Falle der spezifischen Nachzerfallsleistungen $p_{j,0/1}$ wird nicht zwischen Rest- und freigesetztem Fall unterschieden zu werden. Die Quelle wird mit der sp. Nachzerfallsleistung mit dem Index „0“ multipliziert, da hier die unmodifizierte Leistung zum Einsatz kommt, lediglich für die Reste im Kern und jene Masse, die nicht an der Freisetzung gehindert wird, erhält die modifizierte Variante.

$m_{j,1}^{\text{frei}}$ kann mit der Definition (3.40) als $m_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j$ geschrieben werden. Ferner kann die gesamte Gleichung auf das Anfangsinventar (m_j^{ini}) bezogen werden, so dass sich folgender Ausdruck ergibt:

$$p_{j,0}a_j^{\text{ini}} = p_{j,1}a_{j,1}^{\text{Rest}} + p_{j,1}a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j + p_{j,0}a_{j,1}^{\text{Quell AC2}} \quad (3.44)$$

Hierbei steht a , wie üblich, für den Anteil am Kerninventar. Da $a_{j,1}^{\text{Rest}} + a_{j,1}^{\text{frei}}$ nichts anderes ist als 1 (ohne Normierung auf das Kerninventar also eben dieses), folgt: $a_{j,1}^{\text{Rest}} = 1 - a_{j,1}^{\text{frei}}$. $a_{j,1}^{\text{frei}}$ wiederum ist nach Definition (3.40) als $a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j$, so dass gilt: $a_{j,1}^{\text{Rest}} = 1 - a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j$. Eingesetzt und mit der trivialen Ersetzung $a_j^{\text{ini}} = 1$ ergibt sich:

$$p_{j,0}a_j^{\text{ini}} = p_{j,1}(1 - a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j) + p_{j,1}a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j + p_{j,0}a_{j,1}^{\text{Quell AC2}} \quad (3.45)$$

Als letzten Schritt soll Gleichung (3.45) zur modifizierten spezifischen Nachzerfallsleistung $p_{j,1}$ hin aufgelöst werden:

$$p_{j,1} = p_{j,0} \frac{1 - a_{j,1}^{\text{Quell AC2}}}{1 - a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j + a_{j,0}^{\text{frei}}\alpha_j} = p_{j,0}(1 - a_{j,1}^{\text{Quell AC2}}) \quad (3.46)$$

Mit Gleichung (3.46) ist ein einfacher Ausdruck für die Korrektur der spezifischen Leistung der Elemente gegeben, die per Tabelle aus AC2 (ATHLET-CD-Teil) in MELCOR eingegeben wird.

3.4.3 Anpassung der abgelagerten Leistung

Ein wesentlicher Unterschied zwischen ATHLET-CD und MELCOR hinsichtlich des Radionuklidverhaltens innerhalb des Reaktorkühlkreislaufes besteht darin, dass in ATHLET-CD explizite SAFT-Pfade definiert zu werden haben, an deren assoziierten Strukturen sich Radionuklide ablagern können. Dieser „SAFT-Pfad“ ist entlang der Kühlmittelschleife gegeben, die – wie üblich - den Druckhalter beinhaltet. Eine solche, zusätzliche Definition ist in MELCOR nicht notwendig und Radionuklide können sich im gesam-

ten Reaktorkühlkreislauf ablagern. So kann es eine Diskrepanz zwischen der abgelagerten Masse und Wärmeleistung kommen, die einer weiteren Korrektur bedarf. Hierbei soll die in ATHLET-CD abgelagerte und die im Vergleich zu MELCOR überschüssige Leistung in MELCOR eingebracht. Für die Wärmestruktur m im 1er-Loop (in MELCOR jener, der den Druckhalter beinhaltet) ergibt sich folgende Leistung:

$$P_{m(o)}^{\text{MELCOR}} = \frac{F_{m(o)}}{\sum_{n \in M(o)} F_n} \cdot P_{o(M)}^{\text{ATHLET-CD}} \quad (3.47)$$

In (3.47) ist M die Menge an Wärmestrukturen in MELCOR, die dem Thermofluidobjekt o in ATHLET-CD zugeordnet sind. $P_{o(M)}^{\text{ATHLET-CD}}$ ist entsprechend der Leistung in ATHLET-CD, die im Thermofluidobjekt o abgelagert wird.

Für eine Verwendung in MELCOR wird die gesamte in ATHLET-CD abgelagerte Leistung in eine Tabelle eingetragen, wobei die Zeit ab Freisetzungsbeginn zählt: $(t_{\text{p}}^{\text{ATHLET-CD}} - t_{\text{p Freis.-Beginn}}^{\text{ATHLET-CD}}, P_{\text{ges}}^{\text{ATHLET-CD}})$. Entsprechend wird in MELCOR die Tabelle ab Freisetzungsbeginn verwendet. Hiermit ist eine grobe Korrektur der zeitlichen Unterschiede in beiden Simulationen gegeben.

Die Verteilung dieser Leistung wird über Anteile der Leistung für die einzelnen Wärmestrukturen in MELCOR bewerkstelligt:

$$p_{m(o)}^{\text{MELCOR}} = \frac{P_{m(o)}^{\text{MELCOR}}}{P_{\text{ges}}^{\text{ATHLET-CD}}} \quad (3.48)$$

$p_{m(o)}^{\text{MELCOR}}$ wird als Tabelle für jede relevante Wärmestruktur ($n_{\text{TF}} = 19$) bewerkstelligt. Um nun die Ablagerung in MELCOR, die im gesamten RKL stattfindet, Rechnung zu tragen, soll lediglich die Differenz zwischen der Leistung aus ATHLET-CD und MELCOR berücksichtigt werden, so dass nun die tatsächliche Leistung, die auf die Wärmestrukturen eingebracht wird, wie folgt lautet:

Hierbei ist die Leistung in MELCOR schlicht die Summe über die Leistungen im RKL: $P_{\text{ges}}^{\text{MELCOR}} = \sum_{n \in \{\text{HS in RKL}\}} P_n^{\text{MELCOR}}$ und die in ATHLET-CD ist $P_{\text{ges}}^{\text{ATHLET-CD}} = \sum_{k \in \{\text{TFO in SAFT-PFad}\}} P_k^{\text{ATHLET-CD}}$. In ATHLET-CD liegt die abgelagerte Leistung als Variable

‚PT-WA‘ im Modell ‚FIP-CYCLE‘ vor (siehe /GRS 16c/). In MELCOR ist die abgelagerte Leistung als Variable ‚HS-Q-DECAY‘ vor, die jedoch teilweise als unzuverlässig bewertet werden musste, so dass die abgelagerte Menge (m_m^{RN} , ‚RN1-MDT‘) an Radionukliden verwendet worden ist, welche dann auf die gesamte Ablagerungsmenge ($m_{\text{ges}}^{\text{RN}}$, ‚RN1-TMDTR‘) bezogen worden ist. Mit der gesamten abgelagerten Leistung ($P_{\text{abgel. ges}}^{\text{MELCOR}}$, ‚RN1-DHDEP‘) ist die Leistung auf der Wärmestruktur m wie folgt zu berechnen:

$$P_m^{\text{MELCOR}} = \frac{P_{\text{abgel. ges}}^{\text{MELCOR}}}{m_{\text{ges}}^{\text{RN}}} \sum_{n \in \{\text{RKL}\}} m_n^{\text{RN}} \quad (3.49)$$

Für die Einbringungen der Leistung sind je Wärmestruktur eine Kontrollfunktion (CF) für das Einbinden der Tabelle und eine weitere für die Multiplikation mit der Gesamtdifferenzleistung notwendig. Ferner ist ein gewisses Arrangement für die Summation Differenzbildung und Normierung der abgelagerten RN ($n_{\text{CF}} = 3$) notwendig. Die Leistungen werden unter ‚HS_L/RB‘ als ‚SourCF‘ (siehe /SAN 17/), also als Oberflächenleistung eingebracht. Ein Vergleich zwischen der abgelagerten Leistung in ATHLET-CD und MELCOR ist in Abb. 3.64 zu erkennen, wobei in MELCOR bereits eine Testrechnung verwendet worden ist, bei der die Freisetzung iodrelevanter Elemente vollständig unterbunden worden ist. Der die auffälligen Sprünge nach $t_p \approx 15900$ s und $t_p \approx 18500$ s in MELCOR korrelieren mit dem Versagen der Volumenausgleichsleitung, woran sich die Druckspeichereinspeisung und die Kernabkühlung anschließt, bzw. dem Wiederausdampfen einiger Kontrollvolumen im RKL nach der Wiederaufheizung des Druckspeicherinventars. In MELCOR werden die Radionuklide, die in der Wasservorlage gegeben sind, instantan auf die Wärmestruktur abgelagert, wenn das Wasser verdampft ist. In ATHLET-CD sind derartig diskrete Sprünge nicht zu erkennen.

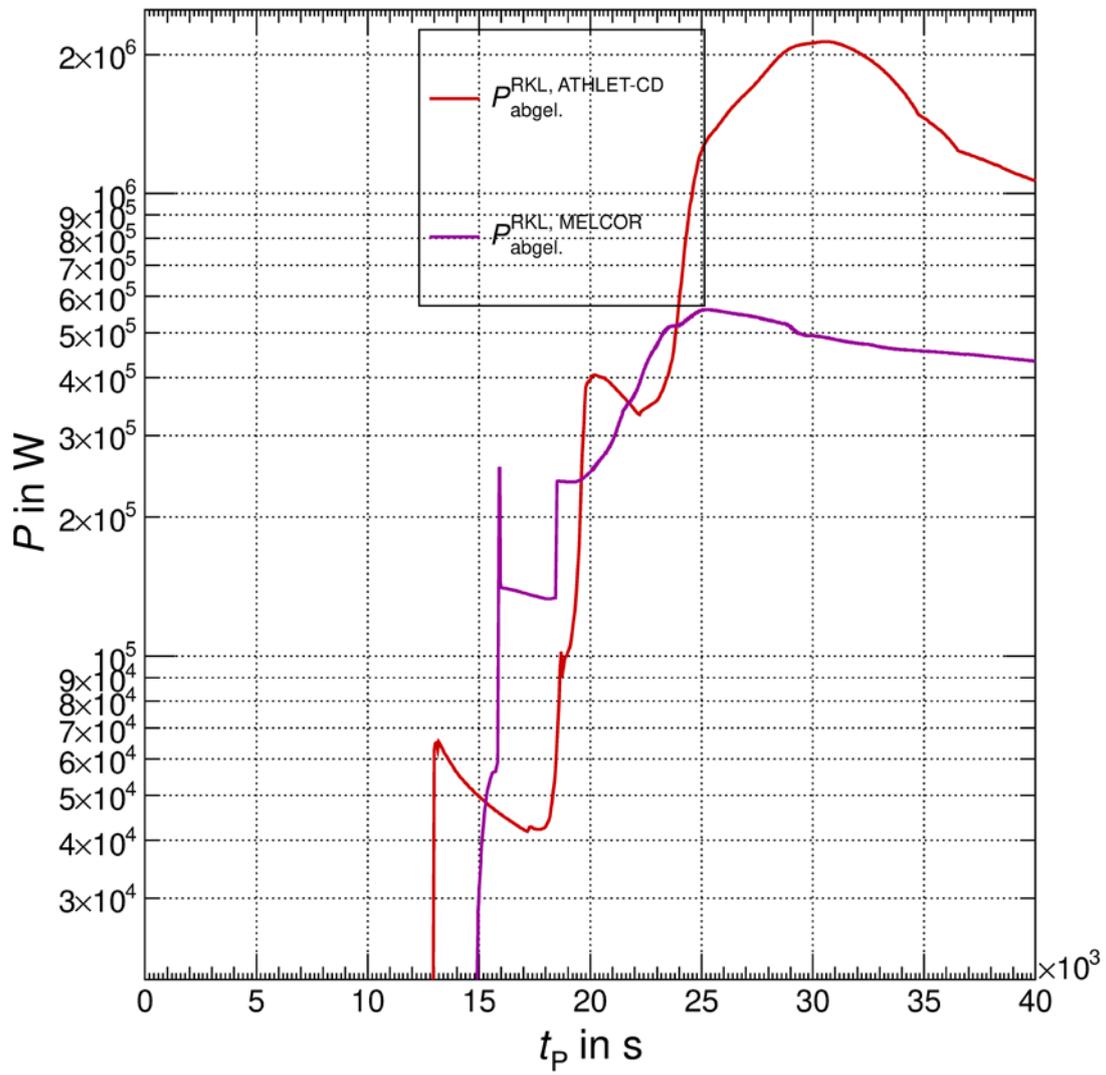


Abb. 3.64 Abgelagerte Nachzerfallsleistung im RKL anhand von SBO-Testrechnungen

4 Integrale Vergleichsrechnungen (AP 3)

Um die Qualität der Umsetzung bzw. des ertüchtigten Eingabedatensatzes auf Seiten MELCORs in Hinsicht auf die Iodchemie im RKL und SHB zu prüfen, sind integrale Vergleichsrechnungen zwischen MELCOR und ATHLET-CD gekoppelt mit COCOSYS (AC2-Integralrechnung) durchzuführen. Das gewählte Szenarienspektrum für diesen Vergleich umfasst den SBO und einen Repräsentanten eines Kühlmittelverlustes. Verwendet worden sind für die Vergleichsrechnungen die Basisrechnungen aus den Variationsrechnungen (siehe Kapitel 3.3). Ursprünglich war ein kleines Leck mit 20 cm^2 angedacht. Da jedoch der Verzicht auf den Ausfall der Dampferzeugerbespeisung in der entsprechenden Simulation zu einer erheblichen Rechenzeitsteigerung geführt hat, sind zwei weitere Basisrechnungen mit 200 cm^2 und 400 cm^2 angesetzt worden, wovon letztere für einen Vergleich herangezogen worden ist, da diese eine ausreichende Reife erreicht hat. Diese ist dadurch definiert, dass die erste SHB-Druckentlastung abgeschlossen ist.

Hierfür sind einerseits die Ergebnisse aus dem Vorhaben 4719R01377 bzgl. der Iodchemie zu verwenden und andererseits solche Ergebnisse aus dem Vorhaben 4718R01313, welches die Iodchemie im SHB zum Gegenstand hat (siehe /GRS 21/). Im Vorhaben 4718R01313 ist eine aufwändige Schnittstelle zwischen MELCOR und COCOSYS erstellt worden, so dass COCOSYS mit den Randbedingungen MELCORs ohne eine Kopplung mit ATHLET-CD die Phänomene im SHB zu simulieren imstande ist. Die Schnittstelle ist dabei zunächst nur auf das „kleine Leck“ abgestimmt worden und berücksichtigt lediglich CsI und I₂ als Iodspezies, die den RKL verlassen können. Das Vorhaben 4718R01313 ist ähnlich gestaltet wie 4719R01377 und sieht ebenfalls eine direkte und eine eher empirische (sog. „phänomenologische“) Umsetzung der in COCOSYS gegebenen Modelle in MELCOR vor. Beides soll der Ertüchtigung des SHB-Eingabedatensatzes auf Seiten MELCORs dienen. Die phänomenologische Umsetzung sieht Variationsrechnung verschiedener Parameter vor, inklusive des Wärmeeintrags aus dem Kernbrennstoff bzw. der Schmelze, dem Wasseraustrag aus dem Leck oder dem Eintrag diverser RN. Für die Variationsrechnung ist ebenfalls die genannte Schnittstelle für das kleine Leck verwendet worden. Der Parameter des Wasseraustrages aus dem Leck wurde so weit variiert, so dass auch andere Szenarien abgedeckt werden sollten. Aus diesem Grunde sind lediglich die Ergebnisse aus der Variation des kleinen Lecks verwendet worden.

Im Vorhaben 4718R01313 (siehe /GRS 21/) sind keine Korrelationen hinsichtlich des Austrages von Iod aus dem Reaktorsumpf erkannt worden, wo die meiste Iodchemie erwartet worden war. Lediglich bei der Betrachtung der Austräge in die Anlagenumgebung sind Korrelationen aufgefallen, welche die Folgenden sind (die angegebenen Unsicherheiten beziehen sich auf das Verhältnis zur Basisrechnung und stellen die einfache Standardabweichung dar):

Freisetzung von I₂ in die Umgebung:

$$\frac{N_{I_2}^{\text{frei}}}{N_{I_2}^{\text{frei, Var 0}}} = \frac{a_{I_2}^{\text{frei}}}{a_{I_2}^{\text{frei, Var 0}}} = 3,3208 \cdot \frac{Q}{Q_{\text{Var 0}}} - 1,9098 \text{ mit } \sigma_{I_2} = 0,71 \quad (4.1)$$

Freisetzung von CH₃I in die Umgebung:

$$\frac{N_{CH_3I}^{\text{frei}}}{N_{CH_3I}^{\text{frei, Var 0}}} = \frac{a_{CH_3I}^{\text{frei}}}{a_{CH_3I}^{\text{frei, Var 0}}} = -1,4825 \cdot \frac{m_{\text{Wasser}}}{m_{\text{Wasser}}^{\text{Var 0}}} + 2,3874 \text{ mit } \sigma_{CH_3I} = 0,687 \quad (4.2)$$

Für CsI (in COCOSYS mit I⁻ bezeichnet) ist keine Korrelation zu erkennen gewesen (außer jene triviale mit dem CsI-Austrag, die hier aufgrund des größeren Spektrums an ausgetragenen Spezies nur sehr ungenau umsetzbar wäre), weshalb der Mittelwert über die Variationsrechnungen verwendet wird:

$$\frac{N_{I^-}^{\text{frei}}}{N_{I^-}^{\text{frei, Var 0}}} = \frac{a_{I^-}^{\text{frei}}}{a_{I^-}^{\text{frei, Var 0}}} = 0,967 \text{ mit } \sigma_{I^-} = 0,176 \quad (4.3)$$

In den Ausdrücken (4.1) bis (4.3) steht N_i^{frei} für die Stoffmenge, die in die Umgebung freigesetzt worden ist (ohne Filterung), und $N_i^{\text{frei, Var 0}}$ für dieselbe Größe in der Basisrechnung (in 4718R01313). Da im Zähler und Nenner dieselben Spezies stehen, entspricht dem molaren Verhältnis dem Masseverhältnis und auch dem Verhältnis der Anteile am Kerninventar.

Ein Austrag von AgI in die Umgebung konnte nicht erkannt werden.

Da nun diese Korrelationen für die Anlagenumgebung gelten, ist die ursprüngliche Er-
tuchtung des MELCOR-SHBs nicht möglich bzw. sinnvoll. Stattdessen sind die ent-
sprechenden Spezies in MELCOR aus ATHLET-CD eingegeben worden (siehe Kapitel
3.1.3), so dass die MELCOR-Simulation entsprechend ihrer Fähigkeiten Ablagerungs-
Prozesse berücksichtigen konnte. Diese Fähigkeiten beziehen sich jedoch in erster Linie
auf Aerosole, so dass keine Ablagerung von gasförmigem Iods abgebildet ist und die
direkten Ergebnisse aus MELCOR nur pro forma im Folgenden ebenfalls dargestellt wor-
den sind.

Aus oben genannten Gründen, ist es sinnvoll gewesen, die Korrelationen (4.1), (4.2) und
der Mittelwert (4.3) in eine Rate umzuwandeln und erst in der Datenanalyse zu berück-
sichtigen. Im Falle der Korrelation (4.1) ist der Wert der eingetragenen Wärme proporti-
onal zur Nachzerfallsleistung. Diese ist auch als Variation verwendet worden. Das Ver-
hältnis der Basisrechnung aus 4718R01313 zu der in 4719R01377 beträgt

$$\frac{P_{NZ}^{4719R01313 \text{ Var } 0}}{P_{NZ}^{4718R01377 \text{ Var } 0}} = 0,8566 \text{ (SBO, KMV).}$$
Für (4.2) beträgt das Verhältnis $\frac{m_{\text{Wasser}}^{\text{Var } 0}}{m_{\text{Wasser}}} =$

$$\frac{m_{\text{RKL}}}{m_{\text{RKL}} + 4 \cdot m_{\text{RB}}} = 0,1457 \text{ (SBO) und } \frac{m_{\text{Wasser}}^{\text{Var } 0}}{m_{\text{Wasser}}} = 1 \text{ (KMV),}$$
 wobei m_{RKL} für das RKL-Inventar steht
und m_{RB} für das Inventar eines Flutbeckens. Aus den Endwerten für die Austräge wird
eine Rate berechnet, die sich auf das Zeitintervall $t_{\text{Beginn}}^{\text{Venting}} \leq t_p \leq t_{\text{Ende}}^{\text{Venting}}$, wobei $t_{\text{Beginn}}^{\text{Venting}}$
für den Beginn der SHB-Druckentlastung steht und $t_{\text{Ende}}^{\text{Venting}}$ für das entsprechende Ende.
Eine Filterung ist nicht berücksichtigt worden, da diese lediglich mit einem Filterfaktor
arbeitet, welche in der Simulation keinen physikalischen Inhalt hat. Die Raten für die
Spezies i sind nun wie folgt (Index-Trafo: 4718R01313 \rightarrow P1 [„Projekt 1“], 4719R01377
 \rightarrow P2 [„Projekt 2“]):

$$\dot{m}_i^{\text{MEL frei}} = \left(\frac{N_i^{\text{frei}}}{N_i^{\text{frei Var } 0}} \right) \Big|_{\text{P1}} \cdot \frac{N_i^{\text{frei Var } 0} \Big|_{\text{P1}}}{t_{\text{Ende}}^{\text{Venting}} - t_{\text{Beginn}}^{\text{Venting}}} \cdot \frac{m_i^{\text{P2 Kern}}}{m_i^{\text{P1 Kern}}} \cdot \sum_j M_j n_j \quad (4.4)$$

M_j steht für die molaren Massen des Elementes j , das in der Verbindung der Spezies
vorhanden ist. Im Vergleich zu den Ausdrücken in Kapitel 3.3 und 3.4 fehlt die Normie-
rung auf M_i , welches darauf zurückzuführen ist, dass hier die Stoffmengen verwendet
worden sind. Ferner sind die Kerninventare in den Basisrechnung in COCOSYS, da die
Einträge aus einer MELCOR-Rechnung stammen, gleich denen in der hier verwendeten

MELCOR-Rechnung, so dass das Verhältnis $\frac{m_{l\text{Kern}}^{P2}}{m_{l\text{Kern}}^{P1}} = 1$ ist und in der tatsächlichen Rechnung nicht berücksichtigt wurde.

Ferner ist hinzuzufügen, dass das Spektrum der Spezies, die ATHLET-CD betrachtet werden, deutlich größer ist als jenes in COCOSYS (AIM), ebenfalls jenes, das an MELCOR übergeben worden ist. Daher ist eine Zusammenfassung für die Auswertung zu unternehmen. Diese stellt eine Auswahl an der Zuordnung dar, die auf Seiten der Schnittstelle der Codes ATHLET-CD und COCOSYS, vorhanden ist, dar (linke Seite: betrachtete Spezies mit Beitrag > 1 %, rechte Seite: COCOSYS-Spezies laut ATHLET-CD-COCOSYS-Schnittstelle):

Cs ₂ l ₂	→	CsI
RbI	→	CsI
CsI	→	CsI
BaI ₂	→	CsI
FeI ₂	→	CsI
CdI ₂	→	CsI
I ₂	→	I ₂
HI	→	I ₂
AgI	→	AgI
BaI ₂	→	CsI

4.1 SBO-Gruppe

Im Folgenden sollen die Ergebnisse der Vergleichsrechnungen kurz anhand der Freisetzung in die Umgebung dargestellt werden. Hierzu betrachte man die Abb. 4.1 und Abb. 4.2, die die Austräge der einzelnen Spezies in der MELCOR-Rechnung mit ertüchtigtem RKL aber ohne ertüchtigtem SHB für die phänomenologische und direkt Umsetzung zeigen. Ferner sind die Austräge der entsprechenden Spezies der AC2-Basisrechnung gezeigt, welche für beide Umsetzungen dieselbe ist. Daneben sind die Ergebnisse der Korrelationen gezeigt, die als einfache Rate im Zeitbereich zwischen Beginn und Ende der ersten SHB-Druckentlastung eingegeben worden sind. Hierbei ist zu berücksichtigen,

dass eine Filterung der Einfachheit nicht vorgesehen war, die jedoch in den realen Anlagen gegeben wäre.

Man erkennt, dass die Freisetzung im Wesentlichen von Schüben gekennzeichnet ist, welche mit der Druckentlastung in Zusammenhang stehen, welche nach $t_{p, \text{Beginn}}^{\text{MEL phän.}} = 193.924 \text{ s}$ für die phänomenologische Umsetzung und nach $t_{p, \text{Beginn}}^{\text{MEL direkt}} = 168.234 \text{ s}$ in der direkten Umsetzung in Erscheinung tritt. Diese dauern bis $t_{p, \text{Beginn}}^{\text{MEL phän.}} = 282.674 \text{ s}$ bzw. $t_{p, \text{Beginn}}^{\text{MEL direkt}} = 259.860 \text{ s}$. Im Falle der AC2-Rechnung findet die Druckentlastung im Zeitintervall $15.0897 \text{ s} \leq t_p^{\text{AC2}} = 245.575 \text{ s}$ statt. Die Freisetzung davor wird von der Ausleungsleckage bestimmt. Die Korrelationen haben einen rein linearen Verlauf, der hier nur als grobes Maß verstanden zu werden hat, da die Korrelationen auf den Endwert bezogen sind.

Ein Vergleich sei nun durch die Verhältnisse gegeben. Im Falle des Vergleichs zwischen der MELCOR-Rechnung und der AC2-Rechnung für die vereinfachte phänomenologische Umsetzung liegen die Verhältnisse im Bereich $2,8 \cdot 10^3 \leq \frac{m_i^{\text{MEL}}}{m_i^{\text{AC2}}} |_{\text{phänom.}} \leq 2,2 \cdot 10^4$. Die Verhältnisse der AC2-Rechnung und der Korrelationen liegen im Bereich $8,04 \cdot 10^{-3} \leq \frac{m_i^{\text{AC2}}}{m_i^{\text{Korr.}}} |_{\text{phänom.}} \leq 4,50 \cdot 10^{-1}$. Im Falle der vereinfachten direkten Umsetzung betragen die Verhältnisse $3,3910^2 \leq \frac{m_i^{\text{MEL}}}{m_i^{\text{AC2}}} |_{\text{direkt}} \leq 9,52 \cdot 10^3$ und $8,09 \cdot 10^{-3} \leq \frac{m_i^{\text{AC2}}}{m_i^{\text{Korr.}}} \leq 4,55 \cdot 10^{-1}$.

Betrachtet man lediglich die AC2-Rechnung und die Korrelationen, so ist zu erwähnen, dass der größte Anteil an Iod als Organiod freigesetzt wird ($> 97 \%$), das entsprechende Verhältnis beträgt $\frac{m_{\text{CH}_3\text{I}}^{\text{AC2}}}{m_{\text{CH}_3\text{I}}^{\text{Korr.}}} = 0,36$. Auch hier ist eine signifikante Diskrepanz gegeben, die Größenordnung ist jedoch dieselbe.

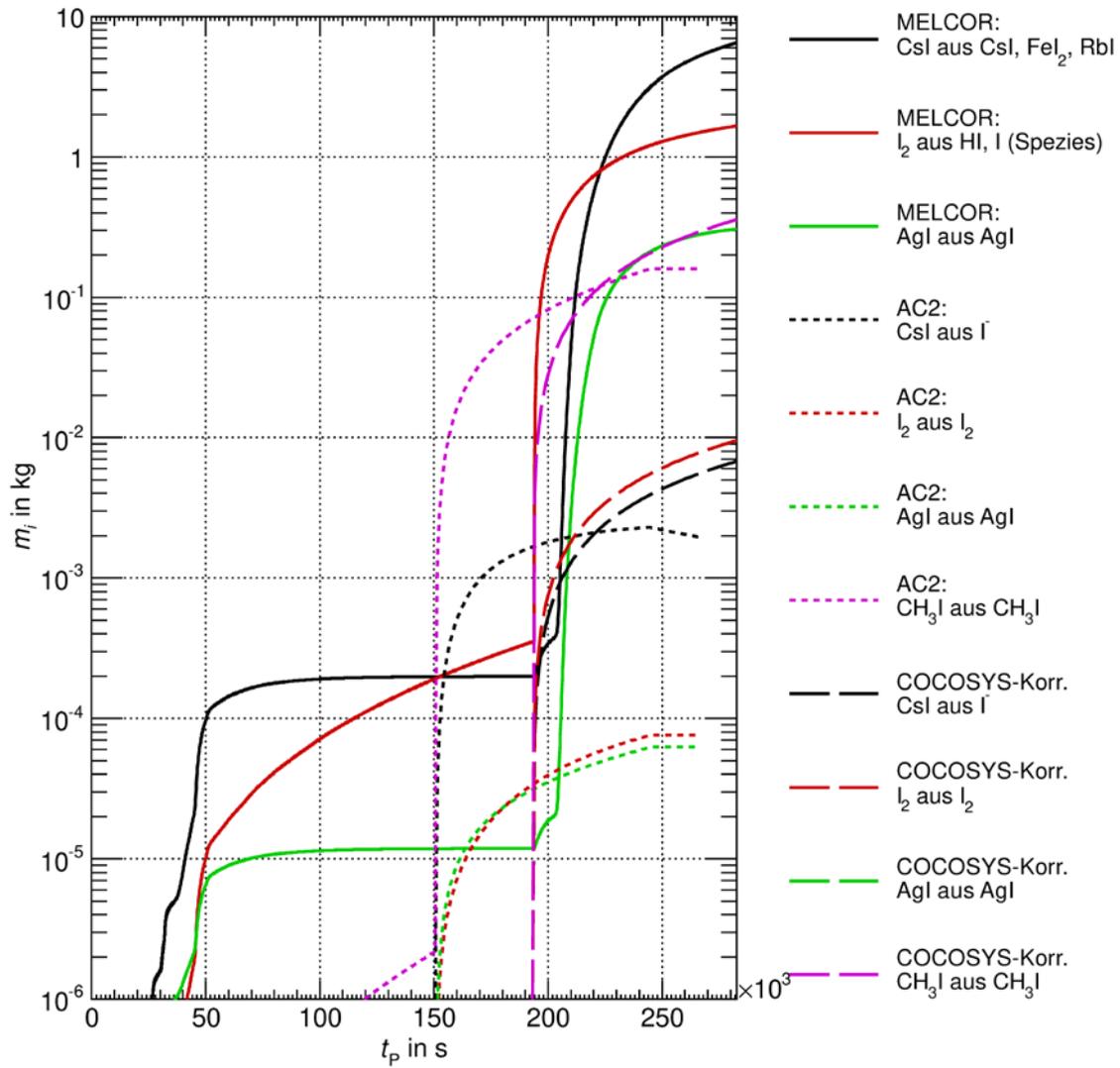


Abb. 4.1 Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten phänomenologischen Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: SBO

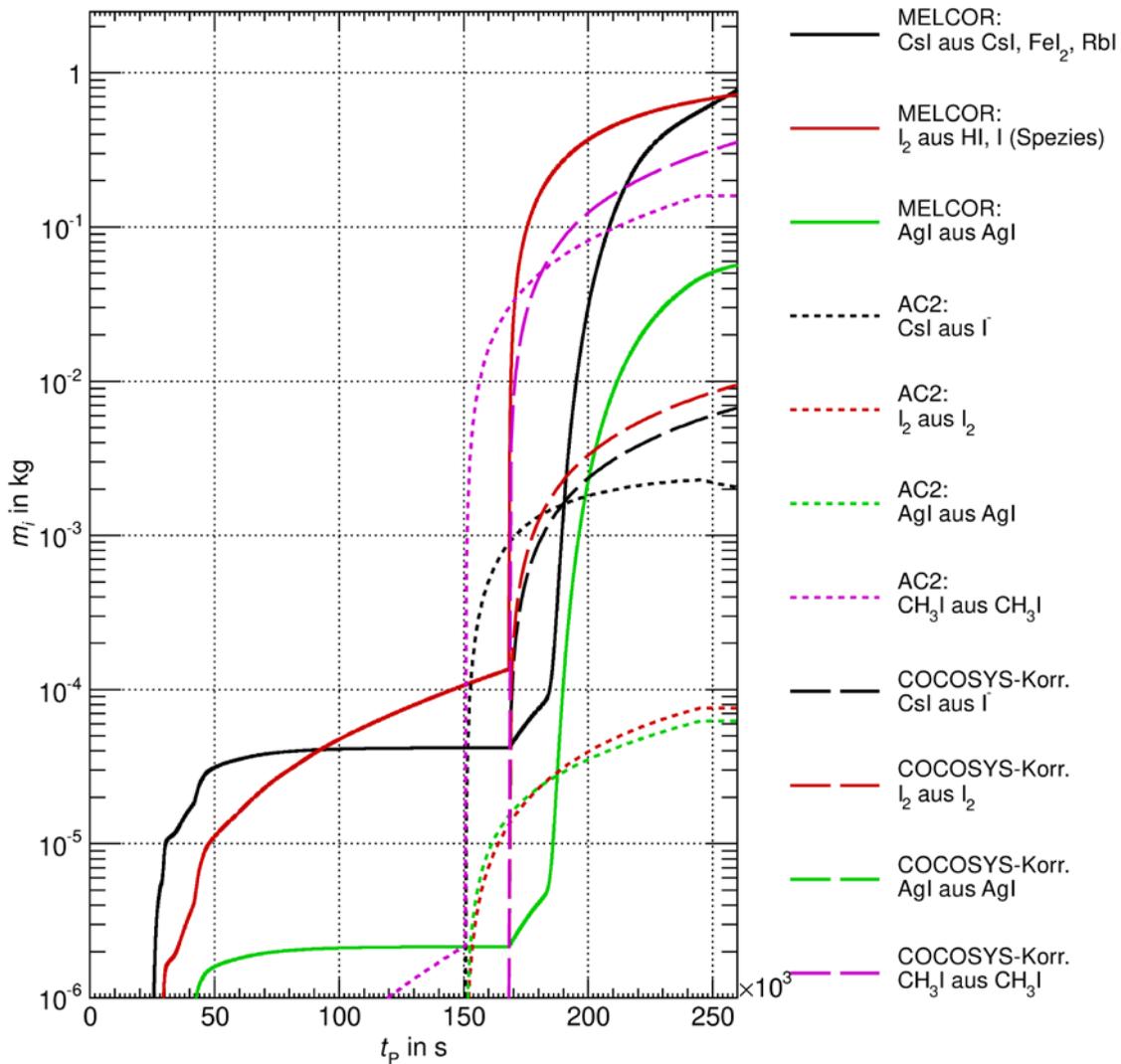


Abb. 4.2 Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten direkten Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: SBO

4.2 KMV-Gruppe

Im Folgenden sollen die Ergebnisse der Vergleichsrechnungen kurz anhand der Freisetzung in die Umgebung dargestellt werden. Hierzu betrachte man die Abb. 4.3 und Abb. 4.4, die die Austräge der einzelnen Spezies in der MELCOR-Rechnung mit ertüchtigtem RKL aber ohne ertüchtigtem SHB für die phänomenologische und direkt Umsetzung zeigen. Ferner sind die Austräge der entsprechenden Spezies der AC2-Basisrechnung gezeigt, welche für beide Umsetzungen dieselbe ist. Daneben sind die Ergebnisse der Korrelationen gezeigt, die als einfache Rate im Zeitbereich zwischen Beginn und Ende der

ersten SHB-Druckentlastung eingegeben worden sind. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass eine Filterung der Einfachheit nicht vorgesehen war, die jedoch in den realen Anlagen gegeben wäre. Ferner ist hier eine Abweichung zum ursprünglichen Vorgehen vorhanden. Aufgrund thermohydraulischer Umstände haben beide MELCOR-Rechnungen nicht in akzeptabler Zeit zu einer SHB-Druckentlastung geführt. Die näheren Gründe werden in Kapitel 4.3 erläutert. Als Alternative ist für die vereinfachte direkte Umsetzung ist die Druckentlastung bereits bei ca. $p_{\text{SHB}} = 5 \text{ bar}$ eingeleitet worden.

Man erkennt nun, dass die Freisetzungen von Schüben gekennzeichnet sind, welche mit der Druckentlastung in Zusammenhang stehen. Diese treten in der phänomenologischen Umsetzung nach $t_{\text{P, Beginn}}^{\text{MEL phänom.}} = 513.203 \text{ s}$ und im Falle der direkten Umsetzung nach $t_{\text{P, Beginn}}^{\text{MEL direkt}} = 420.101 \text{ s}$ in Erscheinung bzw. werden zu diesen Zeiten eingeleitet. Sie dauern bis $t_{\text{P, Ende}}^{\text{MEL phänom.}} = 567.202 \text{ s}$ bzw. $t_{\text{P, Beginn}}^{\text{MEL direkt}} = 483.002 \text{ s}$. Im Falle der AC2-Rechnung findet die Druckentlastung im Zeitintervall $432.437 \text{ s} \leq t_{\text{P}}^{\text{AC2.}} = 462.000 \text{ s}$ statt. Die Freisetzung davor wird von der Auslegungsleckage bestimmt. Die Korrelationen haben einen rein linearen Verlauf, der hier nur als grobes Maß verstanden zu werden hat, da die Korrelationen auf den Endwert bezogen sind.

Ein Vergleich sei nun durch die Verhältnisse gegeben. Im Falle des Vergleichs zwischen der MELCOR-Rechnung und der AC2-Rechnung für die vereinfachte phänomenologische Umsetzung liegen die Verhältnisse im Bereich $2,62 \cdot 10^0 \leq \frac{m_i^{\text{MEL}}}{m_i^{\text{AC2}}}|_{\text{phänom.}} \leq 1,02 \cdot 10^5$. Die Verhältnisse der AC2-Rechnung und der Korrelationen liegen im Bereich $3,90 \cdot 10^{-4} \leq \frac{m_i^{\text{AC2}}}{m_i^{\text{Korr.}}}|_{\text{phänom.}} \leq 9,88 \cdot 10^{-1}$. Im Falle der vereinfachten direkten Umsetzung betragen die Verhältnisse $8,33 \cdot 10^{-1} \leq \frac{m_i^{\text{MEL}}}{m_i^{\text{AC2}}}|_{\text{direkt}} \leq 1,41 \cdot 10^5$ und $3,9 \cdot 10^{-4} \leq \frac{m_i^{\text{AC2}}}{m_i^{\text{Korr.}}} \leq 9,88 \cdot 10^{-1}$.

Betrachtet man lediglich die AC2-Rechnung und die Korrelationen, so ist zu erwähnen, dass der größte Anteil an Iod als Organiod freigesetzt wird (> 94 %), das entsprechende Verhältnis beträgt $\frac{m_{\text{CH}_3\text{I}}^{\text{AC2}}}{m_{\text{CH}_3\text{I}}^{\text{Korr.}}} = 0,78$. Auch hier ist eine signifikante Diskrepanz gegeben, die Größenordnung ist jedoch dieselbe.

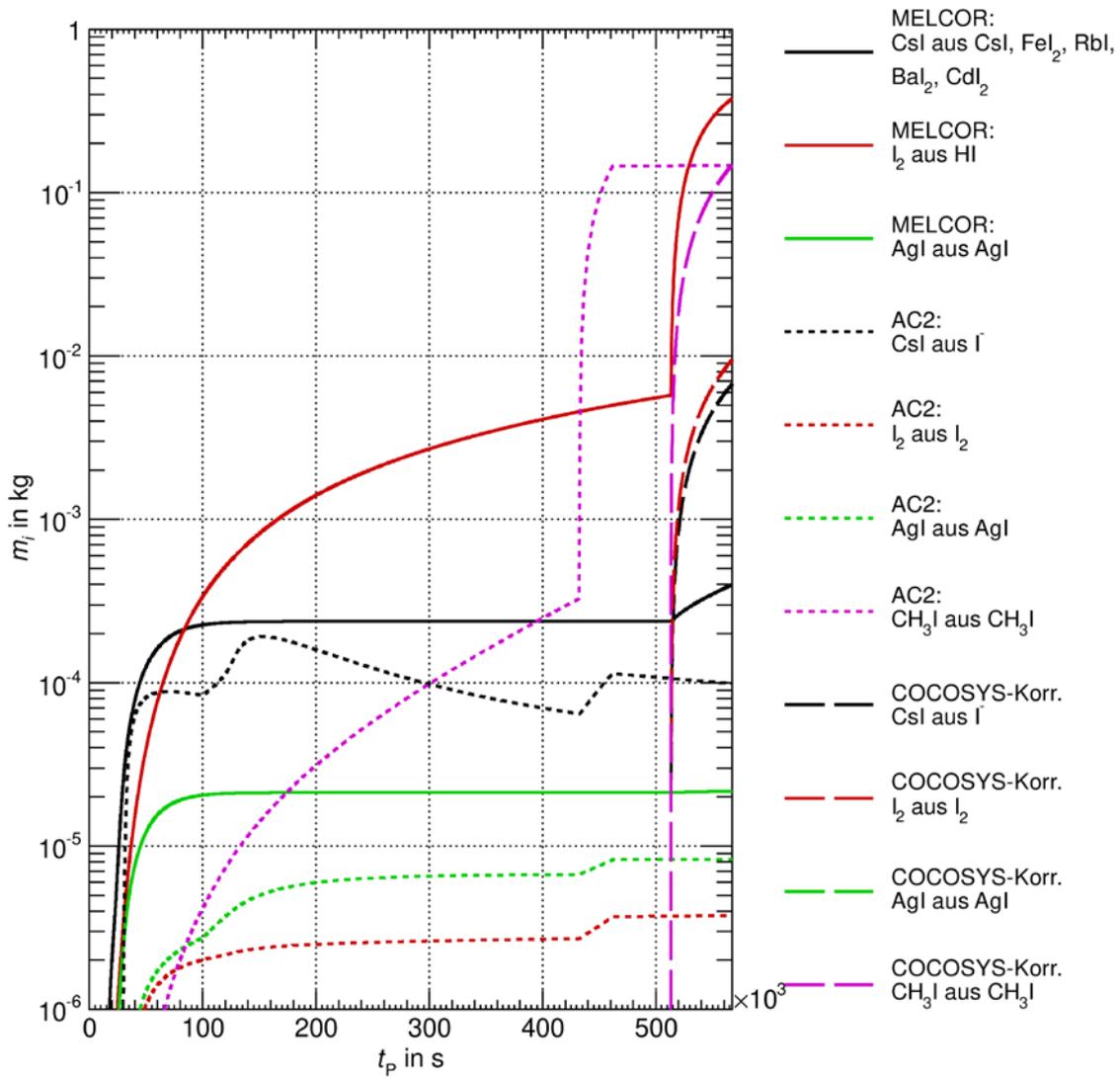


Abb. 4.3 Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten phänomenologischen Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: KMV

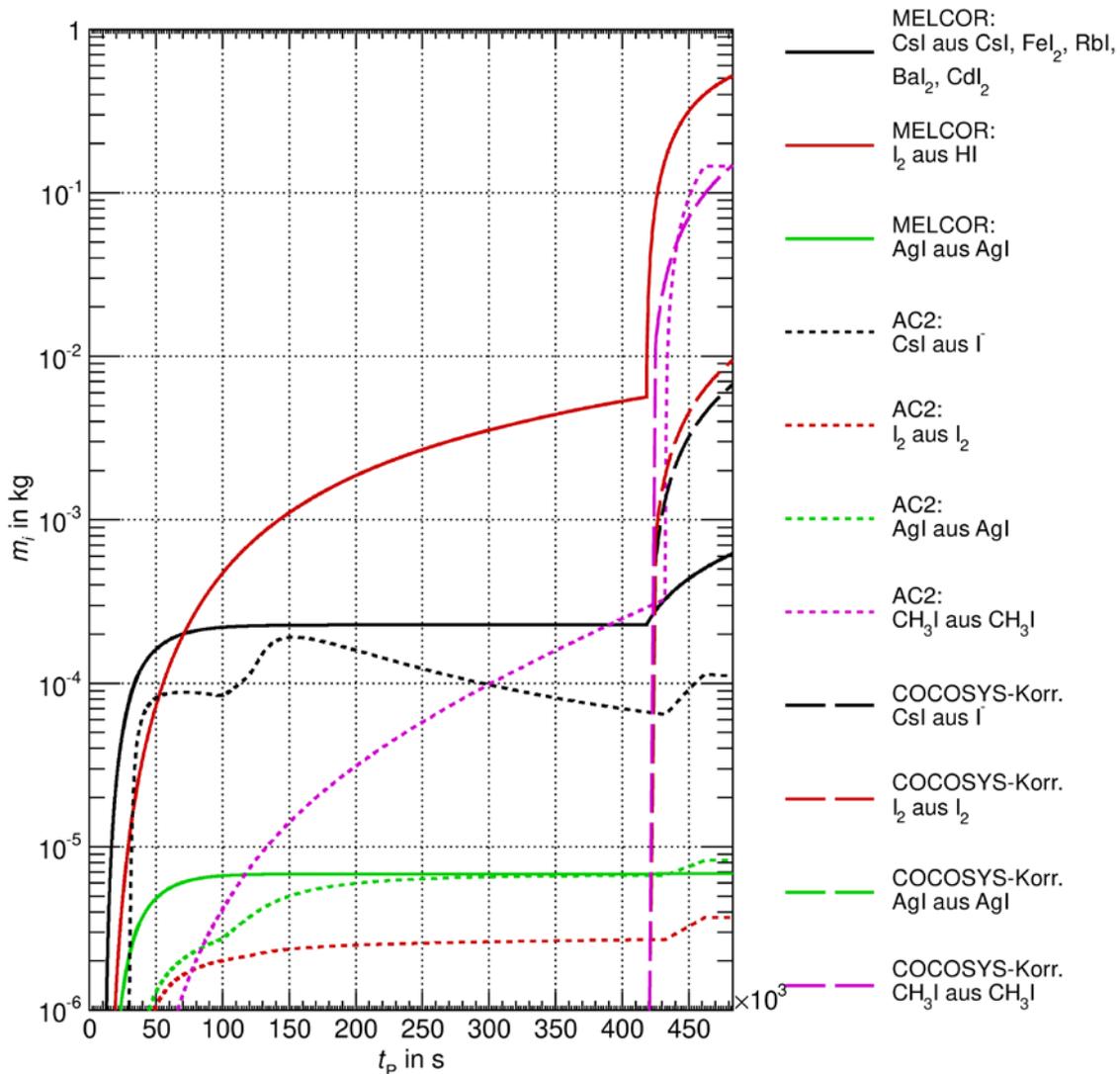


Abb. 4.4 Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten direkten Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: KMV

4.3 Diskussion, Unsicherheiten

An den Verhältnissen von MELCOR- und AC2-Ergebnissen bzw. in Verbindung mit den Korrelationen aus dem Vorhaben 4718R01313 ist zu erkennen, dass die Diskrepanzen zwischen den einzelnen Simulationen bzw. Korrelationen erheblich sind. Es zeigt sich auch, dass selbst MELCOR-Simulationen mit geringen Änderungen zu deutlich unterschiedlichen Ergebnissen führen, welches unter anderem an der Nutzung verschiedener MELCOR-Versionen liegen mag (die gezeigten Simulationsergebnisse stammen nach diversen Testrechnungen aus Rechnungen einheitlich mit der Version M2.2 9607, die

auch schon in Vorhaben 4718R01313 verwendet worden war). Bei entsprechenden Te-
strechnungen ist auch aufgefallen, dass das aus AC2-Quelle eingetragene Csl in der
Freisetzung um einen Faktor 2,5 gegenüber der ursprünglichen Klasse Csl (Freiset-
zungsanteil an gesamter vorhandener Masse) abweicht. Trotz identischer Eingaben für
die Klasse, scheinen beide Varianten von MELCOR unterschiedlich behandelt zu wer-
den. Dies könnte an dem Umstand liegen, dass die Quelle als Dampfquelle eingegeben
ist. Zwar sollte, und dies lässt sich an den Variablen auch verifizieren, eine Umwandlung
zu Aerosolen stattfinden, dies mag jedoch zu einer anderen Größenverteilung führen.

Ferner ist zu sagen, dass die MELCOR-Ergebnisse ohne SHB-Ertüchtigung nicht dem
Sinn dieses APs entspricht, da die MELCOR-intrinsische Behandlung von Iodspezies
nicht auf dem Stand von AC2 ist, welches der Ausgangspunkt für dieses Vorhaben ge-
wesen ist. Die unbehandelten Ergebnisse sind lediglich der Vollständigkeit halber einge-
tragen. Die Ertüchtigung des SHB ist implizit in den Korrelationen aus Vorhaben
4718R01313 gegeben, so dass der Vergleich zwischen AC2-Rechnung und den Korre-
lationen von Relevanz ist. Auch hier zeigen sich erhebliche Unterschiede, welche einer-
seits auf die Einfachheit der Korrelationen und deren Unsicherheit und andererseits auf
die unterschiedlichen Randbedingungen aus der COCOSYS-Variation und der
MELCOR-Rechnung zurückzuführen ist. Die COCOSYS-Variation basierte auf dem
Szenario „kleines Leck“ und ist trotz der Variation nur bedingt anwendbar auf den hier
gezeigten SBO.

Ferner ist zu erwähnen, dass in diesem Vorhaben auch aus Gründen der Begrenzung
der Rechenzeit ein vereinfachtes COCOSYS-Modell verwendet worden ist, welches von
dem in Vorhaben 4718R01313 verwendeten abweicht.

Darüber hinaus zeigen sich erhebliche Unterschiede in der „ex vessel“-Phase in AC2
und MELCOR. In MELCOR ist wie auch in der AC2-Modellierung eine Schmelze-Beton-
Wechselwirkung in drei Bereichen möglich: Reaktorgrube, Spalt (Bereich zwischen bio-
logischem Schild und Tragschild), Reaktorgrube. In der AC2-Simulation kommt es je-
doch zu einer Erosion, die eher zur axialen Bewegung tendiert, so dass kein Austrag in
den Spalt oder Reaktorsumpf stattfindet. Ein solcher Übertrag führt in MELCOR dazu,
dass das Sumpfwasser schnell aufgeheizt wird und verdampft. Dies wiederum treibt den
Druckaufbau im SHB. Ferner kann ein erhöhtes Maß an Dampfanteil in der SHB-
Atmosphäre zu einer erhöhten Kondensation an Aerosolen und somit zu einer begüns-
tigten Ablagerung derselben auf Strukturen kommen. In der AC2-Simulation kommt le-
diglich zu einem Zutritt von Sumpfwasser in die das Spaltvolumen, so dass kein Kontakt

zur Schmelze gegeben ist. Diese deutliche Diskrepanz zwischen beiden Codes bzw. den Anlagenmodellen ist einer weiteren, vertieften Analyse wert, kann hier jedoch nicht geschehen. In diesem Zusammenhang sei daran erinnert, dass die Korrelationen aus der COCOSYS-Variation stammen, die als Austrag aus dem RKL (H₂, H₂O, RN etc.) und dem MCCI (CO, CO₂, H₂, Wärme) aus einer MELCOR-Rechnung mit im Wesentlichen derselben Modellierung wie die hier verwendeten Eingabedatensätze. Dies bedeutet, dass auch in den COCOSYS-Variationsrechnung Schmelze im Reaktorsumpf liegt, der das Sumpfwasser erhitzt und verdampft.

Insbesondere in Bezug auf die KMV-Gruppe ist des Weiteren zu bemerken, dass in beiden Eingabedatensätzen beider Codes sowohl Kühlung als auch eine Überlaufleitung gegeben sind. In MELCOR führt dies zu einer sehr effektiven Kondensation von Dampf im BELB, welches wiederum zu einem Füllstandanstieg und zu einem Übertrag in den Reaktorsumpf führt. Durch die Kühlung des Wassers im BELB wird indirekt die Schmelze im Reaktorsumpf gekühlt. In COCOSYS (AC2) ist dieser Effekt bei weitem nicht derart prägnant ausgeprägt. Dies kann mitunter an der Modellierung des BELB, der Überlaufleitung oder der Kühlung liegt, wahrscheinlicher ist jedoch, dass die fehlende Schmelze im Reaktorsumpf dafür verantwortlich ist. Diese führt, wie oben bereits angesprochen, zu einem effektiven Verdampfen von erheblichen Mengen an Wasser, das wiederum im BELB kondensieren kann. In der MELCOR-Simulation kommt es daher gewissermaßen zu einer Umwälzung des Wassers durch das BELB. Inwiefern dieser Effekt physikalische korrekt abgebildet wird, lässt sich durch die durchgeführten Analysen nicht validieren.

Die thermohydraulischen Unterschiede führen auch zu unterschiedlichen Dauern der Druckentlastung, welches ebenfalls zu unterschiedlichen Freisetzung nach der ersten Druckentlastung führt.

Weiterhin ist zu erwähnen, dass die MELCOR-Eingabe in den COCOSYS-Variationen in Vorhaben 4718R01313 lediglich ein begrenztes Spektrum an Spezies (CsI, I₂) verwendet worden ist, mit dem COCOSYS die chemischen Prozesse gerechnet hat. Erst als Resultat hieraus entsprangen andere Spezies wie Methylidid. In diesen Analysen hingegen konnte COCOSYS über ATHLET-CD ein deutlich breiteres, wenngleich auch zusammengefasstes, Spektrum übergeben werden.

Ein anderer Aspekt ist, wie in Abb. 4.1 bis Abb. 4.4 zu erkennen ist, dass die Menge einiger Spezies nach der Freisetzung in die Umgebung noch einmal geringer wird. Dies ist auf Umwandlungen in eben dieser Zone zurückzuführen.

All diese Umstände führen zu einer erheblichen Unsicherheit, die sich nicht präzise quantifizieren lässt. Um überhaupt eine quantitative Aussage tätigen zu können, ist zunächst das direkte MELCOR-Ergebnis zu ignorieren, da dies auf Grundlage eines nicht-ertüchtigten SHB zustande gekommen ist. Daher sind lediglich die Korrelationen, die sich in Abhängigkeit von Eingangsgrößen auf den Austrag in die Anlagenumgebung beziehen, von Relevanz. Diese jedoch sind dabei unabhängig von den hier durchgeführten MELCOR-Simulationen. Die Unsicherheiten sind bereits hinter den Ausdrücken (4.2), (4.2) und (4.3) gezeigt. Diese Unsicherheiten sind bereits deutlich, decken jedoch nicht das Ergebnis unter Kapitel 4.1 und 4.2 ab.

5 Zusammenfassung, Fazit

Mit einer intensiven Literaturrecherche, die im Wesentlichen Veröffentlichungen auf Grundlage der PHEBUS-Experimente und des CHIP-Programms umfassten, sind die essentiellen Phänomene und die relevanten Iodspezies identifiziert worden. Ferner sind sowohl mit ATHLET-CD als auch mit MELCOR Testrechnungen durchgeführt worden, um das Verhalten der involvierten Codes zu ermitteln bzw. deren Eingabedatensätze anzupassen, zu erweitern oder zu korrigieren. Hierbei ist ebenfalls bereits die Umsetzung einer RN-Senke in MELCOR versucht und die prinzipielle Machbarkeit gezeigt worden. Einer Verwendung stehen jedoch numerische Schwierigkeiten entgegen, so dass diese Form der Umsetzung nicht weiterverfolgt werden konnte.

Für die Umsetzung der in ATHLET-CD gegebenen Modelle in MELCOR sind mehrere Konzepte in Erwägung gezogen worden. Ursprünglich sollte die Iodchemie von ATHLET-CD durch die Implementierung der relevanten Differentialgleichungen in einen Kontrollfunktionsblock in MELCOR umgesetzt werden. Da jedoch ein solches Vorgehen keine Iterationen zulässt, musste dieser Ansatz überarbeitet werden. Eine enge Code-Kopplung könnte ebenfalls durch eine Austauschdatei erstellt werden. Der entsprechende Aufwand ist jedoch als zu hoch eingeschätzt worden.

Als Alternative ist eine Umsetzung mittels einer ATHLET-CD-Vorrechnung und der Abbildung der Iodchemie durch Tabellenfunktionen in MELCOR, in denen die Werte aus ATHLET-CD hinterlegt sind. Eine exakte Abbildung der Iodchemie im RKL scheint nicht zielführend zu sein. Zum Einen ist eine solche aufgrund der numerischen Schwierigkeiten in den RN-Senken in MELCOR praktisch nur unter hohem Arbeits- und Zeitaufwand möglich und zum Anderen scheint ein solches Vorgehen nicht sinnvoll, wenn man bedenkt, dass die Tätigkeiten unter der Prämisse betrieben werden, die Quellterme in ihrer Aussagekraft zu verbessern. Aus diesem Grunde ist es angebracht nur den Austrag iodrelevanter Spezies aus dem RKL zu ermitteln.

Die Umsetzung der in ATHLET-CD (Teil der AC2-Rechenkette) gegebenen Modelle FIPREM und SAFT hat keine Übersteuerung der MELCOR-Ergebnisse impliziert. Stattdessen ist für die vereinfachte phänomenologische Umsetzung das MELCOR-Ergebnis in der Datenanalyse schlicht ignoriert worden und die eingetragenen Spezies sind leistungslos definiert worden. Dies hat den Vorteil, dass kein Bilanzfehler in der Nachzerfallsleistung entsteht. Die eingetragene Menge orientiert sich dabei an Korrelationen, die aus den Variationsrechnungen erkannt unter Kapitel 3.3 beschrieben worden sind.

In Hinsicht auf die vereinfachte direkte Umsetzung hat das zu einer Radionuklid-senke alternative Vorgehen beinhaltet, dass die Elemente, die von den ausgetragenen Iodspezies getragen werden, an der Freisetzung in dem Maße gehindert wurden, wie es die Quellstärke aus der ATHLET-CD-Vorrechnung vorgibt. Entsprechend haben die Iodspezies eine Nachzerfallsleistung erhalten, die Leistung, die in erhöhtem Maße im Kern zurückgeblieben ist, ist über die Tabellen für die spezifische Nachzerfallsleistung korrigiert worden.

Der Eintrag der Iodspezies in den MELCOR-Sicherheitsbehälter hat über Radionuklidquellen stattgefunden, deren Information hinsichtlich der Quellstärke sich in einem Tabellenwerk aus einer ATHLET-CD-Vorrechnung niedergeschlagen hat (vereinfachte direkte Umsetzung) oder aus den genannten Korrelationen, welche eine Erfassung einer Abhängigkeit (z. B. Temperatur im oberen Plenum) beinhaltet hat.

Unter AP 3 (siehe Kapitel Integrale Vergleichsrechnungen (AP 3)) sind mit diesen Eingaben MELCOR-Simulationen durchgeführt worden. Hierbei hat keine Ertüchtigung des Sicherheitsbehälters um die Iodchemie aus den Erkenntnissen in Vorhaben 4718R01313 stattgefunden, da entsprechende Zusammenhänge nicht erkannt werden konnte. Lediglich indirekt über Korrelationen des Austrags in die Umgebung konnte ein solcher erkannt werden. Daher ist es als nicht sinnvoll erachtet worden, den SHB in MELCOR in irgendeiner Weise zu ändern, so dass er diesen Korrelationen entsprechen würde. Stattdessen hat die Implementierung der Korrelationen allein in der Datenanalyse stattgefunden.

Die in Kapitel 4 dargestellten Vergleichsrechnungen zeigen erhebliche Unterschiede zwischen der MELCOR-Rechnung, der AC2-Basisrechnung und den Korrelationen, sowohl für den SBO als auch für den KMV um teilweise mehrere Größenordnungen. Hierbei ist jedoch aufgrund der fehlenden direkten Ertüchtigung des MELCOR-SHBs der entsprechende Austrag nicht von Belang, sondern lediglich die Austräge von AC2 und den Korrelationen. Auch hier zeigen sich Unterschiede im Bereich von Größenordnungen, die sich jedoch relativieren, falls man den Hauptträger an Iod, welcher in Organiod besteht, betrachtet. Die entsprechenden Austräge sind in derselben Größenordnung. Hierbei ist anzumerken, dass die Relevanz der MELCOR-Integralrechnung von untergeordneter Bedeutung ist. Die angesprochenen Diskrepanzen sind auf die fehlende Ertüchtigung des MELCOR-SHB, unterschiedlicher Thermohydraulik insbesondere aufgrund der Unterschiede des MCCI, unterschiedliche COCOSYS-Modelle bzgl. des SHB und der

fehlenden Unterscheidung zwischen SBO und KMV im Vorhaben 4718R01313 zurückzuführen.

Letztlich lässt sich der Schluss ziehen, dass eine Implementierung der Iodchemie in MELCOR wenig präzise Ergebnisse nach sich ziehen und nicht empfohlen werden kann. Die Variationsbreite an Iodausträgen in den Variationssimulationen stellen sicherlich das nutzbarste Ergebnis des Vorhabens dar. Sie zeigt, mit welchen Spezies und mit welcher Bandbreite an Austrägen nach derzeitigem Stand von Wissenschaft und Technik zu rechnen ist.

Auch die Korrelationen mögen als grobes Schätzmaß für solche Austräge dienen. Hierbei ist jedoch Vorsicht bei der Interpretation und der Verwendung geboten. So zeigen sich in einigen Fällen beispielsweise keine starken Abhängigkeiten von Größen wie der Nachzerfallsleistung. Diese jedoch ist die treibende Kraft hinter der wesentlichen Phänomenologie in einem Unfall in einer kerntechnischen Anlage. So ist davon auszugehen, dass grundsätzlich eine Abhängigkeit besteht, jedoch keine solche, die bei der geringen Variationsbreite wie die hier vorgenommene, eine Rolle spielte. Entsprechend kann die gefundene Abhängigkeit nur unter grundsätzlich ähnlichen und nur graduell anderen Bedingungen valide sein.

Als Entwicklungspotential kann sicherlich die Unterscheidung zwischen mehreren Szenariengruppen erachtet werden. Die Variationsrechnungen unter AC2 sind dann nicht nur auf den Austrag aus dem RKL zu beschränken, sondern auf die Freisetzung in die Umgebung auszuweiten. Hierbei sollte ebenfalls eine Variation der Bedingungen im SHB stattfinden, so dass beispielsweise auch ein MCCI im Reaktorsumpf stattfindet. Ohnehin ist das Verhalten des MCCI in AC2 einer genaueren Betrachtung zu unterziehen, um den grundsätzlichen Unterschied zu dem typischen Verhalten in MELCOR herauszufinden, welches der Einschätzung dienen mag, welches Verhalten wahrscheinlicher ist. Eine nähere Betrachtung der Unterschiede zwischen dem thermohydraulischen Verhalten im Brennelementlagerbecken ist ebenfalls angebracht, da sich dies zwischen COCOSYS und MELCOR erheblich unterscheiden, trotz ähnlicher Modellierung im Eingabedatensatz. Dies hat nennenswerten Einfluss auf das Unfallgeschehen, da das gekühlte Wasser aus dem Brennelementlagerbecken über den Überlauf den Reaktorsumpf kühlt. Dies ist insbesondere dann bedeutsam, falls Schmelze dort vorhanden ist.

Literatur, Quellen

- /AEC 62/ "CALCULATION OF DISTANCE FACTORS FOR POWER AND TEST REACTOR SITES", Technical Information Document, Division of Licensing and Regulation, AEC Washington, D. C., TID-14844, März 1962.
- /AEC 74/ "ASSUMPTIONS USED FOR EVALUATING THE POTENTIAL RADIOLOGICAL CONSEQUENCES OF A LOSS OF COOLANT ACCIDENT FOR PRESSURIZED WATER REACTORS", Regulatory Guide 1.4, Directorate of Regulatory Standards, Juni 1974.
- /AEC 81/ R. J. Lemire et al.: "ASSESSMENT OF IODINE BEHAVIOUR IN REACTOR CONTAINMENT BUILDINGS FROM A CHEMICAL PERSPECTIVE", Pinawa, Manitoba ROE 1L0, June 1981.
- /AKR 11/ Kurs Reaktorphysik und Messtechnik am Ausbildungskernreaktor AKR-2, Technische Universität Dresden, 2011.
- /AST 15/ P. Chatelard et al.: "Main modelling features of the ASTEC V2.1 major version", Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS), Annals of Nuclear Energy, 2015.
- /CEA 12/ G. Le Petit et al.: "Analysis of Radionuclide Releases from the Fukushima Dai-Ichi Nuclear Power Plant Accident Part I ", Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, CEA (Frankreich), Pure and Applied Geophysics, 2012.
- /CEA 19/ Y. Pontillon, E. Geiger, C. Le Gall, S. Bernard, A. Gallais-During, et al.: "Fission products and nuclear fuel behaviour under severe accident conditions part 1: Main lessons learnt from the first VERDON test", CEA, *Journal of Nuclear Materials*, 2017, 495, pp.363-384. (Fission products and nuclear fuel behaviour under severe accident conditions part 1: Main lessons learnt from the first VERDON test - CEA - Commissariat à l'énergie atomique (archives-ouvertes.fr) (cea-02388710), HAL archives-ouvertes.fr, 2019).

- /CHE 21/ Chemie.de, Lexikon, <https://www.chemie.de/lexikon>, LUMITOS AG Ernst-Augustin-Str. 2, 12489 Berlin, abgerufen 2021, 2022 Deutschland.
- /COC 20/ S. Arndt et al.: COCOSYS 3.0, User Manual, Rev 54, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (gGmbH), GRS-P-3 / Vol. 1, Rev. 54, Juni 2020.
- /EUC 15/ A. V. Jones et al.: "CIRCUIT AND CONTAINMENT ASPECTS OF PHÉBUS EXPERIMENTS FPT0 AND FPT1", JRC Science and Policy Report, European Commission, Consolidated Interpretation Report, 2015.
- /GES 21/ Gestis Stoffdatenbank, <https://gestis.dguv.de>, Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung, abgerufen 2021, 2022.
- /GKN 19/ Notfallhandbuch Block II, Gemeinschaftskraftwerk Neckar, Teil 2, Kapitel 2.2.1 (b), Primärseitiges Druckentlasten und Bespeisen, 2019.
- /GKN 19a/ Notfallhandbuch Block II, Gemeinschaftskraftwerk Neckar, Teil 2, Kapitel 2.4.1 (b), Sekundärseitiges Druckentlasten und Bespeisen, 2019.
- /GRS 90/ "Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke Phase B", Eine Untersuchung im Auftrag des Bundesministers für Forschung und Technologie, Gesellschaft für Reaktorsicherheit, 1990.
- /GRS 01/ M. Sonnenkalb et al.: „Unfallanalysen für DWR vom Typ KONVOI (GKN-2) mit dem Integralcode MELCOR 1.8.4“, Bericht zum Vorhaben SR 2306, GRS-A-2954, Dezember 2001.
- /GRS 04/ K. Trambauer et al.: „Weiterentwicklung des Rechenprogrammsystems ATHLET/ATHLET-CD“, GRS-A-3215, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Abschlussbericht zum Vorhaben RS 1126, Juli 2004.
- /GRS 09/ K. Trambauer et al.: „Weiterentwicklung ATHLET / ATHLET-CD“, Abschlussbericht zum Vorhaben RS 1162, GRS-A-3461, März 2009.

- /GRS 14/ Lovasz, L., „Simulation der Experimente VERDON-1 und VERDON-2 mit ATHLET-CD 3.0A“, Technische Notiz, TN-165-14/01, GRS (2014).
- /GRS 15/ Lovasz, L., „Verbesserung der Modellierung der Spaltproduktfreisetzung unter Berücksichtigung chemischer Bedingungen“, Technische Notiz, TN-LOL-15/01, GRS (2015).
- /GRS 15a/ T. Steinrötter et al.: „Untersuchungen zum anlageninternen Notfallschutz deutscher Kernkraftwerke und Darstellung der Wirksamkeit von Optimierungsmaßnahmen“, GRS-A-3839, Abschlussbericht zum Vorhaben 3613R0139, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, November 2015.
- /GRS 16/ H. Löffler et al.: „Unfallanalysen in Kernkraftwerken nach anlagenexternen auslösenden Ereignissen und im Nichtleistungsbetrieb“, GRS-393, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Abschlussbericht zum Vorhaben 3612R01361, Juni 2016.
- /GRS 16a/ S. Weber et al.: „Weiterentwicklung des Rechenprogramms ATHLET-CD“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, November 2016.
- /GRS 16b/ W. Klein-Heßling et al.: „COCOSYS V2.4, User’s Manual“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2016.
- /GRS 16c/ H. Austregesilo et al.: „ATHLET-CD 3.1A, User’s Manual“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Juli 2016.
- /GRS 16d/ S. Weber: „Weiterentwicklung der Spaltproduktfreisetzung in ATHLET-CD und Nachrechnung der Phébus-Versuche, TN-WES-10/01, Mai 2010.
- /GRS 17/ L. Tiborc: „Nachrechnung mit dem neuen SOPHAEROS Modul“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, TN-TIB-17/01, März 2017.
- /GRS 19/ Lovasz, L., „ATHLET-CD Mod 3.2: “Models and Methods“ Entwurf, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS (2015).

- /GRS 19a/ „Unsicherheit – und Sensitivitätsanalyse von FPT3 mit ATHLET-CD“, Gesellschaft- für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, , 2019.
- /GRS 20/ M. Kowalik et al.: „Ergänzungen der Quelltermdatenbank des Entscheidungshilfesystems RODOS für Freisetzen aus dem RDB bei Nichtleistungsbetriebszuständen in Kernkraftwerken“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Abschlussbericht zum Vorhaben 3617S62560, 2020.
- /GRS 21/ „Weiterentwicklung der Modell- und Datenbasis zur Durchführung von Unfallanalysen für die Fortschreibung eines einheitlichen Ereignisbaums (AP 3)“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Abschlussbericht zum Vorhaben 4718R01313, GRS-641, 2021.
- /GRS 22/ „Forschungsarbeiten zur Ermittlung der Wirksamkeit von Notfallmaßnahmen für eine DWR-Referenzanlage“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Abschlussbericht zum Vorhaben 4717R01335, GRS-A-4004, 2022.
- /GRS 17a/ Komponentenverhalten bei auslegungsüberschreitenden Belastungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, GRS-459, 2017.
- /GRS 93/ Untersuchungen von Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes zur Schadensbegrenzung für LWR, Näherungsweise Ermittlung von Versagenszeiten für einen thermisch hochbeanspruchten DWRRDB-Boden mit der Methode ASTOR, GRS-A-2095, 1993.
- /HCP 74/ Handbook of Chemistry and Physics, CRC-Press, 1974, ISBN 0-87819-454-1.
- /HOR 10/ Horváth, G. L.: Severe Accident Volatile Iodine Release from Containment vs. Sump Alkalinity, Vortrag bei: „2nd Meeting of the European MELCOR User Group“, Prag, März 2010.
- /IAE 20/ Life Chart of Nuclides, International Atomic Energy Agency (IAEA), <https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html>.

- /IRS 06/ Frédéric Cousin: "ASTEC V1.3 SOPHAEROS module : Theoretical manual rev. 1", SEMIC-2006-379, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, NOTE TECHNIQUE, 2006.
- /IRS 09/ Girault, N., Fiche, C., Bujan, A., & Dienstbier, J. (2009). Towards a better understanding of iodine chemistry in RCS of nuclear reactors. *Nuclear Engineering and Design*, 239(6), 1162-1170.
- /IRS 12/ Xerri, Bertrand, et al. (2012). Ab initio calculations and iodine kinetic modeling in the reactor coolant system of a pressurized water reactor in case of severe nuclear accident. *Computational and Theoretical Chemistry*, 990, 192-208.
- /IRS 12a/ Gouëlle, Mélanie, et al.: "Chemistry of iodine and aerosol composition in the primary circuit of a nuclear power plant." Proc. 21 st Int. Conf. Nuclear Energy for New Europe, Ljubljana, Slovenia, September. 2012.
- /IRS 13/ Gouello, M., Muelle, H., Cousin, F., Sobanska, S. & Blanquet, E. (2013). Analysis of the iodine gas phase produced by interaction of CsI and MoO₃ vapours in flowing steam. *Nuclear Engineering and Design*, 263, 462-472.
- /IRS 13a/ Clément, B., & Zeyen, R. (2013). The objectives of the Phébus FP experimental programme and main findings. *Annals of Nuclear Energy*, 61, 4-10.
- /IRS 13b/ Girault, N., & Payot, F. (2013). Insights into iodine behaviour and speciation in the Phébus primary circuit. *Annals of Nuclear Energy*, 61, 143-156.
- /IRS 13c/ Cantrel, L., Louis, F., & Cousin, F. (2013). Advances in mechanistic understanding of iodine behavior in PHEBUS-FP tests with the help of ab initio calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 61, 170-178.
- /IRS 13d/ Cousin, F., Kissane, M. P., & Girault, N. (2013). Modelling of fission-product transport in the reactor coolant system. *Annals of Nuclear Energy*, 61, 135-142.

- /IRS 15/ D. Jacquemain et al.: „Nuclear Power Reactor Core Melt Accidents“, Current State of Knowledge, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire Dezember 2015.
- /IRS 17/ Grégoire, A. C., Délicat, Y., Tornabene, C., Cousin, F., Gasnot, L., Lamoureux, N., & Cantrel, L. (2017). Study of the iodine kinetics in thermal conditions of a RCS in nuclear severe accident. *Annals of Nuclear Energy*, 101, 69-82.
- /IRS 19/ “THE PHEBUS FP programme”, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, <https://www.irsn.fr/EN/Research/Research-organisation/Research-programmes/PHEBUS-PF/Pages/Severe-accident-research-programme-PHEBUS-FP-3455.aspx>
- /ITE 17/ K. Knebel et al. : „Characterisation of aerosols produced in a simulated severe nuclear accident using electron microscopy“ , Journal of Aerosol Science 106 (2017) 68–82, 2017.
- /JAE 15/ Miwa S., Yamashita, S., Ishimi, A., Osaka, M., et al. (2015). Research Program for the Evaluation of Fission Product and Actinide Release Behaviour, Focusing on Their Chemical Forms. *Energy Procedia*, 71, 168-181.
- /KTA 17a/ Komponenten des Primärkreises von Leichtwasserreaktoren Teil 1: Werkstoffe und Erzeugnisformen, KTA 3201.1, Fassung 2017-11, 2017.
- /MPA 05/ Beschreibung des Kurzzeitstandverhaltens bei auslegungsüberschreitenden Temperaturen bis 1200°C auf der Basis von Schädigungsmechanismen, Reaktorsicherheitsforschungs-Vorhaben Nr. 1501257, MPA Stuttgart, September 2005/NRC 81/“Technical Base of Estimating Fission Product Behaviour During LWR Accidents”, U.S. Nuclear Regulatory Commission, NUREG-0772, 1981.
- /NCB 21/ PubChem, National Library of Medicine, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>, abgerufen 2021, 2022.
- /NRC 95/ L. Soffer et al.: „Accident Source Terms for Light-Water Nuclear Power Plants“, NUREG-1465, U.S. Nuclear Regulatory Commission, 1995.

- /NUK 06/ J. Magill et al.: "Karlsruher Nuklidkarte", 7. Auflage, Forschungszentrum Karlsruhe, EUROPEAN COMMISSION, Research Centre, Report EUR 22276, 2006.
- /OAK 92/ E. C. Beahm et al.: „Iodine Chemical Forms in LWR Severe Accidents“, Final Report, Oak Ridge National Laboratory, NUREG CR-5732 ORNL/TM-11861.
- /OEC 07/ B. Clément et al.: "State of the Art Report on Iodine Chemistry", Organisation for Economic Co-Operation and Development, NEA/CSNI/R(2007)1, 2007.
- /PSE 02/ Periodensystem der Elemente, Nach FLUCK und HEUMANN unter Berücksichtigung der IUPAC-Empfehlungen bis 2002, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 3. Auflage, 2002.
- /SAN 10/ R. O. Gauntt: Synthesis of VERCORS and Phebus Data in Severe Accident Codes and Applications, SANDIA REPORT, SAND2010-1633, April 2010.
- /SAN 17/ L. L. Humphries: MELCOR Computer Code Manuals, Vol. 1 Primer and User's Guide, Version 2.2.9541 2017, SANDIA REPORT, SAND2017-0876 O, January 2017.
- /SAN 17a/ L. L. Humphries: MELCOR Computer Code Manuals, Vol. 2 Reference Manual, Version 2.2.9541 2017, SANDIA REPORT, SAND2017-0455 O, January 2017.
- /SAR 07/ Girault et al.: "Towards a better understanding of iodine chemistry in RCS of nuclear reactors", The 2nd European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2007) Forschungszentrum Karlsruhe GmbH (FZK), Germany, 12-14 June 2007.
- /SAR 16/ Giuli et al. (2016). "SARNET benchmark on Phébus FPT3 integral experiment on core degradation and fission product behavior". *Annals of Nuclear Energy*, 93, 65-82.

- /SSK 18/ “Verwendung von Jodtabletten zur Jodblockade der Schilddrüse bei einem Notfall mit Freisetzung von radioaktivem Jod”, Empfehlung der Strahlenschutzkommission, verabschiedet in der 294. Sitzung der Strahlenschutzkommission am 26. April 2018, Strahlenschutzkommission Geschäftsstelle der Strahlenschutzkommission Postfach 12 06 29 D-53048 Bonn
<http://www.ssk.de>, 2018.
- /SSK 04/ Erläuterungsbericht zum Leitfaden für den Fachberater Strahlenschutz der Katastrophenschutzleitung bei kerntechnischen Notfällen - Begründungen, Modelle, Daten und Programme, Berichte der Strahlenschutzkommission (SSK) des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Heft 38 (2004), ISBN 3-437-22179-5, 2004.
- /TIB 18/ L. Tiborcz et al.: “Source Term assessment for a severe accident scenario in a generic German PWR with AC2”, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, NENE 2018, 27th International Conference Nuclear Energy for New Europe, Portorož, Slovenia, 2018.
- /VTT 18/ Gouello, M., Kalilainen, J., Kärkelä, T., & Auvinen, A. (2018). Contribution to the understanding of iodine transport under primary circuit conditions: CsI/Cd and CsI/Ag interactions in condensed phase. Nuclear Materials and Energy, 17, 259-268.
- /VTT 18a/ Gouello, M., Hokkinen, J., Kärkelä, T., & Auvinen, A. (2018). A scoping study of the chemical behavior of cesium iodide in the presence of boron in the condensed phase (650 C and 400 C) under primary circuit conditions. Nuclear Technology, 203(1), 66-84.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Spaltproduktspektrum von U-235 /AKR 11/.....	4
Abb. 3.1	Austragsrate, Gesamtaustrag von Csl, Temperatur im oberen Plenum und gemittelter Wert dieser Größe im SBO-Szenario, vereinfachte phänomenologische Umsetzung.....	19
Abb. 3.2	Austragsrate und Gesamtaustrag von Csl im SBO-Szenario, vereinfachte direkte Umsetzung.....	20
Abb. 3.3	Druck im RKL im Störfallablauf der SBLOCA-Sequenz.....	24
Abb. 3.4	Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfad es	25
Abb. 3.5	Kernfreisetzungsraten von Iod und möglicher Verbindungspartner	26
Abb. 3.6	Dampfmassen im oberen Plenum.....	27
Abb. 3.7	Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar von Iod (24,7 kg) bezogen.....	28
Abb. 3.8	Druck im RKL im Störfallablauf der SBO-LP-Sequenz	30
Abb. 3.9	Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfad es.....	31
Abb. 3.10	Kernfreisetzungsraten von Iod und möglicher Verbindungspartner	32
Abb. 3.11	Dampfmassen im oberen Plenum.....	33
Abb. 3.12	Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar Iod (24,7 kg) bezogen.....	33
Abb. 3.13	Druck im RKL im Unfallablauf der SBO-HP-Sequenz	34
Abb. 3.14	Dampftemperatur im RKL entlang des SAFT-Austrittspfad es	35
Abb. 3.15	Kernfreisetzungsraten von Iod und möglicher Verbindungspartner	36

Abb. 3.16	Dampfmassen im oberen Plenum.....	36
Abb. 3.17	Iodaustrag aus dem RKL integriert und auf das Gesamtinventar Iod (24,7 kg) bezogen.....	37
Abb. 3.18	Dampfdruckkurve für CdI_2	43
Abb. 3.19	Dampfdruckkurve für AgI	44
Abb. 3.20	Dampfdruckkurve für FeI_2	45
Abb. 3.21	Reaktorkühlkreislauf mit Kenntlichmachung der SAFT-Pfade für beide Szenariengruppen (SBO, KMV).....	48
Abb. 3.22	Nachzerfallsleistung.....	62
Abb. 3.23	Druck im oberen Plenum	63
Abb. 3.24	Temperatur im oberen Plenum	64
Abb. 3.25	Kerninventar des Elementes Iod	65
Abb. 3.26	Gesamtaustrag von Iod aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichs- leitung).....	66
Abb. 3.27	Austrag von Iod in der Spezies Cs_2I_2 aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung).....	67
Abb. 3.28	Austrag von Iod in der Spezies CsI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung).....	68

Abb. 3.29	Austrag von Iod in der Spezies AgI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)	69
Abb. 3.30	Austrag von Iod in der Spezies FeI ₂ aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)	70
Abb. 3.31	Austrag von Iod in der Spezies HI aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)	71
Abb. 3.32	Austrag von Iod in der Spezies IRb aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)	72
Abb. 3.33	Austrag von Iod in der Spezies I aus den Abblaseleitungen (von Abblaseventil, Sicherheitsventil 1 und Sicherheitsventil 2) und den Leckleitungen (durch DFU-Versagen an Hauptkühlmittelleitung, Volumenausgleichsleitung)	73
Abb. 3.34	Streudiagramm zwischen den Größen der Nachzerfallsleistung und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	79
Abb. 3.35	Streudiagramm zwischen den Größen des Iodinventars und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	79
Abb. 3.36	Streudiagramm zwischen den Größen des gemittelten PKL-Druckes und dem Variationsparameter für den Ansprechdruck der DH-Ventile (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	80

Abb. 3.37	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von CsI (gesamt) und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	80
Abb. 3.38	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von HI und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	81
Abb. 3.39	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Fel_2 und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	81
Abb. 3.40	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von CsI (gesamt) und der gemittelten Temperatur im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	82
Abb. 3.41	Nachzerfallsleistung.....	84
Abb. 3.42	Druck im oberen Plenum	85
Abb. 3.43	Temperatur im oberen Plenum	86
Abb. 3.44	Kerninventar des Elementes Iod	87
Abb. 3.45	Gesamtaustrag von Iod aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML	88
Abb. 3.46	Austrag von Iod in der Spezies Cs_2I_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	89
Abb. 3.47	Austrag von Iod in der Spezies CsI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	90
Abb. 3.48	Austrag von Iod in der Spezies AgI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	91
Abb. 3.49	Austrag von Iod in der Spezies Fel_2 aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	92

Abb. 3.50	Austrag von Iod in der Spezies HI aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	93
Abb. 3.51	Austrag von Iod in der Spezies IRb aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	94
Abb. 3.52	Austrag von Iod in der Spezies BaI ₂ aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	95
Abb. 3.53	Austrag von Iod in der Spezies CdI ₂ aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	96
Abb. 3.54	Austrag von Iod in der Spezies I aus dem Leck und dem Versagenspfad der HKML.....	97
Abb. 3.55	Streudiagramm zwischen den Größen der Nachzerfallsleistung und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“).....	103
Abb. 3.56	Streudiagramm zwischen den Größen des Iodinventars und der spezifischen Brennstoffleistung (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“).....	103
Abb. 3.57	Streudiagramm zwischen den Größen des gemittelten PKL-Druckes und der Versagenszeit des RDB (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“).....	104
Abb. 3.58	Streudiagramm zwischen den Größen der gemittelten PKL-Temperatur und dem Leckquerschnitt (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“).....	104
Abb. 3.59	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von I (gesamt) und der RDB-Versagenszeit (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“).....	105

Abb. 3.60	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Rbl und dem gemittelten Druck im oberen Plenum (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	105
Abb. 3.61	Streudiagramm zwischen den Größen des Austrags von Rbl und der RDB-Versagenszeit (beide normiert auf die Basisrechnung „Var 0“)	106
Abb. 3.62	Abbaurrate von Csl, Csl-Restmasse gesamt und in Gas- und Wasserphase im Kernvolumen mit Hilfe einfacher Abbauraten	110
Abb. 3.63	Abbaurrate von Csl, Csl-Restmasse gesamt und in Gas- und Wasserphase im Kernvolumen mit Hilfe von Integralreglern	111
Abb. 3.64	Abgelagerte Nachzerfallsleistung im RKL anhand von SBO-Testrechnungen	117
Abb. 4.1	Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten phänomenologischen Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: SBO	124
Abb. 4.2	Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten direkten Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: SBO	125
Abb. 4.3	Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten phänomenologischen Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: KMV	127
Abb. 4.4	Vergleich zwischen MELCOR-Ergebnisse der vereinfachten direkten Umsetzung mit denen der AC2-Simulation (Basisrechnung aus Variation) und Korrelationen aus COCOSYS-Variationsrechnungen, Szenario: KMV	128

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Gerechnete Unfallsequenzen in einem generischen DWR, angegeben sind die wichtigsten Zeitpunkte im Verlauf der Unfälle	21
Tab. 3.2	Anfangsinventar aus Abbrandrechnung für die Iodchemie betreffende Elemente	23
Tab. 3.3	Korrelationsmatrix für die SBO-Gruppe.....	78
Tab. 3.4	Korrelationsmatrix für die KMV-Gruppe	102

Abkürzungsverzeichnis

Ann.	Annahme
ATHLET	A nalyse der T hermohydraulik von L eckagen und T ransient
CD	C ore D egradation
BMUV	B undes m inisterium für U mwelt, N aturschutz, nukleare S icherheit und V erbraucherschutz
BS	Brennstab oder Brennstoff
BELB	B rennelement l ager b ecken
CAV	C avity-Paket in MELCOR (basiert auf CORCON)
CHIP	C hemistry of I odine in the R eactor C oolant system
CCI	C ore C oncrete I nteraction (entspricht MCCI)
CF	C ontrol F unctions, Kontrollfunktions-Paket in MELCOR
CR	control rod (Steuerstab)
COCOSYS	C ontainment C ode S ystem (Unfallphänomenologie im SHB)
COR	C ore, Paket für die Abbildung des Reaktorkerns in MELCOR
CVH	C ontrol V olume H ydrodynamics, Thermohydraulik-Paket in MELCOR
D1/2	Notstromerzeugeranlagen
DCH	D ecay H eat, Paket für die Nachzerfallsleistung in MELCOR
DE	D ampferzeuger
DFU	druckführende Umschließung
DH	D ruck h alter
FIPREM	F ission P roduct R elease M odule (Modul zur Spaltproduktfreisetzung)
FL	F low P ath, Strömungspfad-Paket in MELCOR (Teil des CVH-Paketes)
GCSM	G eneral C ontrol S imulation M odule (Kontrollfunktions-Modul in ATHLET)
GVA	g emeinsam v erursachter A usfall
HKML	H aupt k ühl m ittelleitung
HP	<i>high pressure</i> , Hochdruckszenario
HS	h eat s tructure (Wärmestrukturmodell in MELCOR)
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
JDH	Zusatzboriersystem
JNA	Nachkühlsystem
JND	HD-Sicherheits-Einspeisesystem
JNG	Druckspeicher-Einspeisesystem
KBA	Volumenregelsystem
KMT _{AUS}	Kühlmitteltemperatur am Reaktorausritt
KMV	Kühlmittelverlust (Szenariengruppe neben der SBO-Gruppe)

LOCA	<i>loss of coolant accident</i> , Kühlmittelverluststörfall
LP	<i>low pressure</i> , Niederdruckszenario
MADTEB	M assen- D ichte- T emperaturgradienten b egrenzung
MCCI	M olten C orium C oncrete I nteraction
MELCOR	Methods for Estimation of Leakages and Consequences of Releases (kein offizielles Akronym)
NWA	N ach w ärme a bfuhr
NZL	N ach z erfalls l eistung
PDE	p rimärseitige D ruckentlastung
PKL	P rimär k reislauf
RDB	R eaktor d ruck b ehälter
RKL	R eaktor k ühlkreislauf
RN	R adionuclide, Paket für die Behandlung der Radionuklide in MELCOR
RSB	R eaktor s icherheits b ehälter (entspricht SHB)
SAFT	S imulation of A erosol and F ission Product T ransport
SBLOCA	<i>small break</i> LOCA ↑, Kühlmittelverluststörfall, kleines Leck
SBO	<i>station black out</i> , Szenario ohne externe Stromversorgung oder Nostromerzeugeranlage
SDE	sekundärseitige Druckentlastung und Bespeisung
SHB	S icherheits b ehälter (= RSB)
SIC	S ilver I ndium C admium (Argentum [Silber], Indium, Cadmium)
SIV	S icherheits v entil
SpW	Speisewasser (-System)
TSO	T echnical S afety O rganisation (Organisation zur Bewertung nuklearer Sicherheit)
VAL	V olumen a usgleichsleitung (<i>surge line</i>)

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de