

**Generische thermo-  
hydraulische und  
physikochemische  
Analysen zur  
Implementierung eines  
ATHLET-Moduls für  
die Simulation thermo-  
hydraulischer Folgen  
von Zinkborat-  
Ablagerungen im  
DWR-Kern**

**Generische thermo-  
hydraulische und  
physikochemische  
Analysen zur  
Implementierung eines  
ATHLET-Moduls für  
die Simulation thermo-  
hydraulischer Folgen  
von Zinkborat-  
Ablagerungen im  
DWR-Kern**

**Teilprojekt:  
Entwicklung und  
Validierung eines  
ATHLET-Moduls zur  
Simulation thermo-  
hydraulischer Folgen von  
Zinkborat-Ablagerungen  
im DWR-Kern**

Simone Palazzo  
Philipp Schöffel  
Inés Mateos Canals

Januar 2023

**Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen RS1571 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 BMWi übereinstimmen.

**Deskriptoren**

ATHLET, Chemische Effekte, Entstehungs- und Ablagerungsmodell, Freisetzungsmodell, Partikeltransport, Validierung, Zink-Borat

## Kurzfassung

Das Hauptziel des vorliegenden Projekts besteht darin, die Simulation von Zinkborat-Abscheidungen und derenthermohydraulischen Folgen im DWR-Kern nach einem Kühlmittelverluststörfall (KMV) mit dem Systemrechenprogramm ATHLET zu ermöglichen. Ein neues Modul namens „Zinkborat“ wurde zum Zweck der Erweiterung des Einsatzbereiches von ATHLET entwickelt und implementiert. Das Modul beinhaltet zum einen die Teilmodelle (Schließungsmodelle) für die Prozesse der Zink-Freisetzung und der Ausfällung/Anlagerung von Zinkborat-Partikeln. Zum anderen wird der Transport von Zinkionen bzw. Zinkborat-Partikeln durch eine Erweiterung der Stoffbilanzgleichungen realisiert. Die Berücksichtigung der Kühlmittel-Reinigung als Störfallfolgemaßnahme wird durch einen Senkenterm in den Bilanzgleichungen modelliert.

Zur Modellerstellung, -parametrierung und -validierung wurden Daten und Korrelationen aus Experimenten im halbtechnischen und im Labormaßstab verwendet, die von den Projektpartnern Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG), Helmholtz Zentrum Dresden-Rosendorf (HZDR) und Technische Universität Dresden (TUD) erzeugt bzw. bereitgestellt wurden. Bei der Erstellung der Korrelationen zur Beschreibung der chemisch-physikalischen Phänomene wurde darauf geachtet, dass die Abhängigkeiten von relevanten Eingangsparametern ausschließlich in ATHLET verfügbare Größen umfassen.

Für die Validierung der Teilmodelle sowie des Gesamtmoduls „Zinkborat“ wurden thermohydraulische ATHLET-Modelle der Integralversuchsanlage „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW) sowie der halbtechnischen Versuchsanlage THETIS (“Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation”) entwickelt. Nach der Validierung der Datensätze anhand der Nachrechnung von Inbetriebnahmeversuchen, wurden ausgewählte Versuche zur Zink-Freisetzung bzw. zur Zink-Borat-Entstehung und Anlagerung nachgerechnet.

Die Nachrechnung der Versuche hat beim Vergleich mit den verfügbaren experimentellen Daten gezeigt, dass die von den Projektpartnern entwickelten und in ATHLET implementierten Korrelationen zur Beschreibung der Zink-Freisetzung, der Ausfällung von Zinkboraten und der Anlagerung von Zinkboraten an Hüllrohroberflächen in der Lage sind, die wesentlichen, physikalischen Phänomene abzubilden. Die weitere Ertüchtigung von spezifischen Korrelationen ist jedoch erforderlich, um Modelllücken wie z. B. zur Berechnung der Ablagerung mobiler Zinkborate an Abstandshaltern zu schließen und das AZora-Modul somit zu verbessern.

## **Abstract**

The main goal of the present project is to allow for the simulation of zinc borate deposits and their thermohydraulic consequences in the PWR core after a loss-of-coolant accident (LOCA) with the system code ATHLET. The phenomena of zinc dissolution and formation of zinc borate particles occur because of flow-induced corrosion processes caused by a direct fluid contact or wetting with zinc-coated installations inside the containment sump.

A new module called "Zinc borate" has been developed and implemented to extend the area of application of ATHLET to the simulation of such chemical processes. The "Zinc borate" module contains three sub-models (or closure models) for simulating the processes of zinc release, the precipitation/accumulation of zinc borate particles as well as the transport of zinc ions and/or zinc borate particles.

To develop and validate each sub-model of the "Zinc borate" module, data and correlations from experiments on two different test facilities were used, which were designed and operated by the project partners University Zittau/Görlitz (HSZG), Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) und Technische Universität Dresden (TUD).

Thermal hydraulic models of both the integral test facility ZFT ("Zittau Flow Tray") and the test facility THETIS ("Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation") were developed in ATHLET for the validation of the sub-models as well as of the overall "Zinc borate" module. After the validation of the input deck against specific trial operations, selected tests on the release of zinc and on the formation and accumulation of zinc borate were simulated and compared with experimental data.

The comparison of the simulation results with the available experimental data has shown that the correlations developed by the project partners and implemented in ATHLET are able to describe the zinc release, the precipitation of zinc borates and the deposition of zinc borate on the fuel cladding surfaces. However, further upgrading of specific correlations is necessary in order to close the actual model gaps such as for the calculation of the deposition of zinc borate particles on spacer grids and thus to improve the ATHLET module "Zinc borate".

# Inhaltsverzeichnis

	<b>Kurzfassung.....</b>	<b>I</b>
	<b>Abstract.....</b>	<b>II</b>
<b>1</b>	<b>Zielsetzung.....</b>	<b>1</b>
1.1	Gesamtziel .....	1
1.2	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele .....	2
1.2.1	Entwicklung eines Konzepts für das ATHLET-Modul „Zinkborat“ (AP 1) ....	5
1.2.2	Entwicklung des ATHLET-Teilmodells für die Freisetzung von Zink im Kühlmittel (AP 2).....	6
1.2.3	Entwicklung der ATHLET-Teilmodelle für Transport und Ausfällungs- und Anlagerungseffekte im Kern (AP 3).....	6
1.2.4	Einbeziehung von Maßnahmen zur Störfallfolgenbehandlung (AP 4).....	8
1.2.5	Plausibilitätsprüfung und Validierung des ATHLET-Moduls „Zinkborat“ für die Sicherheitsbewertung von DWR-Anlagen (AP 5).....	8
<b>2</b>	<b>Stand der Wissenschaft und Technik .....</b>	<b>11</b>
2.1	Nationale Untersuchungen zur ZnB-Problematik.....	11
2.2	Internationale Untersuchungen zur ZnB-Problematik .....	11
2.3	Modellierung von Ablagerungsprozessen in ATHLET.....	12
<b>3</b>	<b>Ergebnisse des Arbeitsprogramms.....</b>	<b>15</b>
3.1	Entwicklung eines Konzepts für das ATHLET-Modul „Zinkborat“ (AP 1) ..	15
3.2	Modellentwicklung für positions- und flächenbezogene Korrosionsraten für Zinkinventar unter KMV-Bedingungen (AP 2).....	17
3.2.1	Modellgleichung des Transportmodells.....	17
3.2.2	Quellterme für Zink .....	20
3.2.3	Modellierung der Zinkfreisetzung aus Lichtgitterrosten.....	21
3.2.4	Modellierung von Filtern und Ionenaustauschern .....	30
3.2.5	Einspeisung über ein FILL-Objekt.....	31
3.3	Modellentwicklung zur Simulation von Zinkborattransport, -ausfällung und -anlagerung im DWR-Kern unter KMV-Bedingungen (AP 3).....	31

3.3.1	Modellierung des ZnB-Ausfällungsphänomens .....	32
3.3.2	Ablagerung mobiler Zinkborate an Abstandshaltern .....	35
3.3.3	Modellierung der ZnB-Anlagerung an Hüllrohren .....	38
3.4	Übersicht über die Ausgabegrößen des Zinkborat-Moduls .....	42
3.5	Maßnahmen zur Störfallfolgenbehandlung im Sumpfumwälzbetrieb (AP 4).....	43
3.6	Validierung des in ATHLET integrierten Moduls „Zinkborat“ (AP 5).....	44
3.6.1	Entwicklung von thermohydraulischen Modellen der Versuchs- anlagen mit ATHLET.....	44
3.6.2	Validierung des ATHLET-Datensatzes anhand der Nachrechnung von Inbetriebnahme-Versuchen .....	51
3.6.3	Validierung des AZora-Teilmoduls „Zink-Freisetzung“ .....	65
3.6.4	Validierung des AZora-Moduls „Zinkborat-Ausfällung, -Transport und - anlagerung“ .....	80
3.6.5	Validierung des Gesamtmoduls AZora.....	91
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>101</b>
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>105</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>111</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>114</b>

# **1 Zielsetzung**

## **1.1 Gesamtziel**

Die analytische Betrachtung von Transienten, Stör- und Unfällen in Kernkraftwerken wird international durch Anwendung von Rechenprogrammen auf der Basis des Standes von Wissenschaft und Technik möglichst realistisch („best estimate“) durchgeführt. Zur Simulation des Anlagenverhaltens bei Transienten und Störfällen wird in Deutschland das Systemrechenprogramm ATHLET (Analyse der Thermohydraulik von LEcks und Transienten) kontinuierlich weiterentwickelt und validiert. Im Fokus dieses Vorhabens steht die Weiterentwicklung und Validierung von ATHLET auf Basis des aktuellen Forschungsstands zu chemischen Langzeiteffekten nach Kühlmittelverluststörfall (KMV) in Druckwasserreaktoren (DWR).

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Simulation von Zinkborat-Abscheidungen und deren thermohydraulischen Folgen im DWR-Kern nach KMV in ATHLET zu ermöglichen. Das daraus resultierende Simulationswerkzeug, das ATHLET-Modul „Zinkborat“ (Akronym: „AZora“), soll für belastbare deterministische Sicherheitsbewertungen von DWR-Anlagen (z. B. zum Nachweis der Einhaltung von Hüllrohrgrenztemperaturen für eine gesicherte Kernkühlung und Identifikation lokaler Dryouts unter den Bedingungen des chemischen Langzeitverhaltens bei Sumpfumwälzbetrieb nach KMV) eingesetzt werden können. Am Beispiel des Zinkborats erfolgt somit eine verbesserte und realistischere Modellierung der Thermohydraulik für Auslegungsstörfälle bis hin zu Ablagerungsprozessen von Fremdstoffen im Reaktorkern. Die im Modul enthaltenen Modelle sollen ferner für Simulationen unter Berücksichtigung von Maßnahmen der Störfallfolgenbehandlung (z. B. Zwischenschaltung des Kühlmittelreinigungssystems zur Zinkabscheidung) bis hin zu Szenarien wie der Nichtverfügbarkeit von Maßnahmen der Störfallfolgenbehandlung einsetzbar sein.

Das Modul beinhaltet die Teilmodelle (Schließungsmodelle) für die Prozesse der Freisetzung und der Ausfällung/Anlagerung, während der Transport durch eine Erweiterung der Stoffstrombilanzen realisiert wird. Die Berücksichtigung der Kühlmittel-Reinigung als Störfallfolgemaßnahme soll durch einen Senkenterm in den Bilanzen berücksichtigt werden.

Eine Grundlage für die zur Modellerstellung, -parametrierung und -validierung notwendigen Daten und Korrelationen bilden die bereits vorliegenden Ergebnisse von Experimenten im halbtechnischen und im Labormaßstab (siehe /IPM19/). Diese werden von Projektpartnern Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG), Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) und Technische Universität Dresden (TUD) vertieft ausgewertet und gezielt um weitere Versuche zur Modellierung von Teilprozessen im DWR-Kern ergänzt. Für die experimentellen Arbeiten kommen die Integralversuchsanlage „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW) und die halbtechnische Versuchsanlage THETIS (“Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation”) zum Einsatz (siehe AZora-Vorhabensbeschreibung /HSZ18/). Die Arbeit für die Implementierung der im Rahmen des Vorhabens entwickelten Teilmodelle in dem ATHLET Code sowie die Validierung des Gesamtmoduls „Zinkborat“ wird anhand von experimentellen Ergebnissen aus Versuchen im halbtechnischen und im Labormaßstab von der GRS durchgeführt.

## **1.2            Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele**

Zur Abfuhr der Nachzerfallswärme in der Spätphase eines Kühlmittelverluststörfalles in DWR wird das über das Leck im Primärkreislauf austretende Kühlmittel (KM) aus dem Reaktorsumpf im Sumpfumwälzbetrieb in den Reaktorkern rezirkuliert. Im Containment kommt das borierte KM in Kontakt mit korrosionsanfälligen Materialien. Ergebnisse der BMWi-Vorhaben 1501360 und 1501363 /IPM12/ zeigten erstmals, dass verzinkte Containment-Einbauten wie Lichtgitterroste (LGR) einer beschleunigten Korrosion durch KM unterliegen. Entstehende Korrosionsprodukte können bis in den Kern gelangen, wo es zu Ausfällungen im KM und zu Ablagerungen von Zinkboraten (ZnB) an heißen Oberflächen und Abstandshaltern kommen kann /HZD14/, /IPM14/.

Die Vielzahl möglicher KMV-Szenarien sowie die Komplexität der Kerngeometrie und der damit verbundenen Thermohydraulik auf Kernquerschnittsebene legen nahe, eine Abschätzung der Folgen der Zink-Korrosions- und Ablagerungsprozesse auf simulativem Wege durchzuführen. Im ATHLET-Code besteht hierzubisher ein vereinfachter Modellierungsansatz. Dabei erfolgt die Simulation der Ablagerung von ZnB-Partikeln durch Anwendung des empirischen Clogging-Modells, welches für die Berücksichtigung von durch Isoliermaterialfasern hervorgerufenen Verblockungseffekten in die Simulationen entwickelt wurde. Anhand der an der Versuchsanlage der HSZG „Ringleitung 2“ erzielten Ergebnisse, wurde dieses Modell für ZnB-Ablagerungen angepasst.

Da der Verblockung mit Isoliermaterial und den Anlagerungseffekten durch ZnB gänzlich unterschiedliche Mechanismen zugrunde liegen, können bei Verwendung des bestehenden Clogging-Modells für die ZnB-Problematik folgende Effekte nicht berücksichtigt werden:

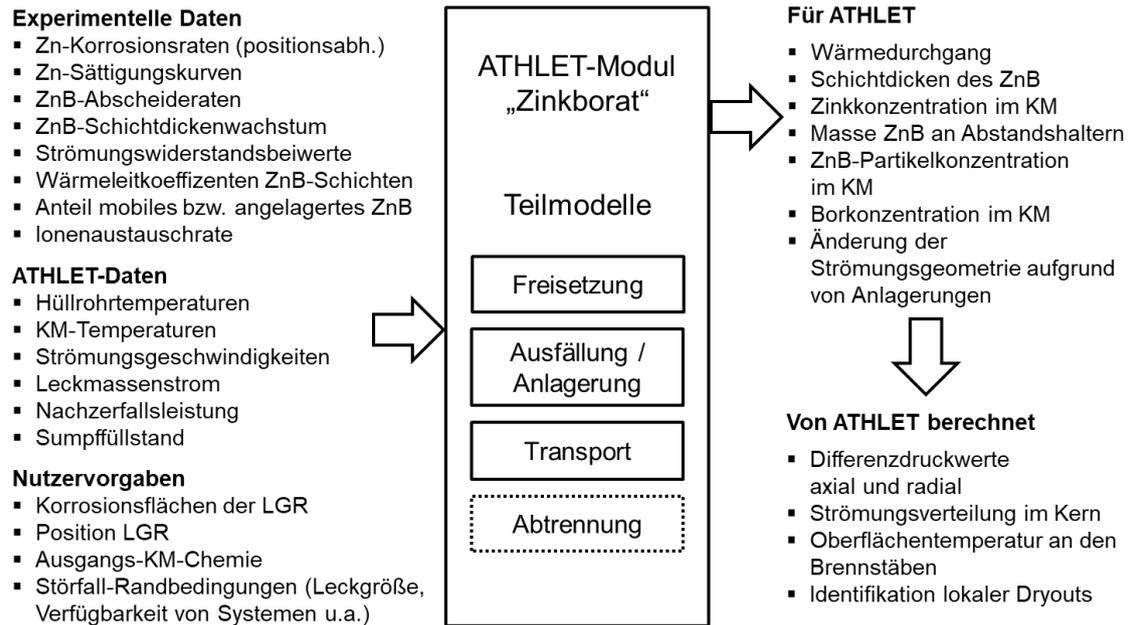
- Ausfällung von mobilen ZnB im KM, welches das Potenzial einer zunehmenden Verblockung von Strömungswegen im Kern durch Anlagerung (insbesondere an Abstandshaltern) aufweist,
- Erhöhung des radialen Strömungswiderstandes im Kern durch ZnB-Ablagerungen an den Hüllrohren,
- zeitlicher Verlauf des Schichtdickenwachstums an Hüllrohren und Abstandshaltern (AH) in Abhängigkeit von lokaler Thermohydraulik, lokaler KM-Chemie und ZnB-Stöchiometrie (d. h. die Auslösung von 1 kg Zink ergibt eine gewisse Menge (kg) an ZnB),
- Verringerung des Wärmetransportes durch ZnB-Schichten auf den Hüllrohren.

Diese Modelleinschränkungen führen dazu, dass das Clogging-Modell in der jetzigen Form für eine störfallrealistische Sicherheitsbewertung der thermohydraulischen Folgen von ZnB-Anlagerungen im Kern nicht geeignet ist.

Das Projekt sieht vor, die bestehenden Modelleinschränkungen zu beseitigen, indem die im Kapitel 1.1 aufgeführten Teilmodelle in einem zu entwickelnden Modul berücksichtigt werden.

Das zu entwickelnde ATHLET-Modul „Zinkborat“ besteht aus unterschiedlichen Teilmodellen (Abb. 1.1). Die Implementierung des zu entwickelnden Modells erfolgt unter Beachtung der Vorgaben der GRS-Qualitätsmanagementrichtlinie zur Programmentwicklung /GRS18/.

Das Teilmodell "Freisetzung" repräsentiert die Freisetzung von Zink-Ionen (Zn) durch Korrosion der im Sumpf und im Leckstrahl befindlichen verzinkten Oberflächen. Als Parameter sind die Positionen und Oberflächen der Lichtgitterroste (LGR) im Sumpf, die KM-Chemie, der Leckmassenstrom und der Sumpffüllstand relevant. Als Ausgangsgröße wird die Zn-Konzentration im KM bereitgestellt.



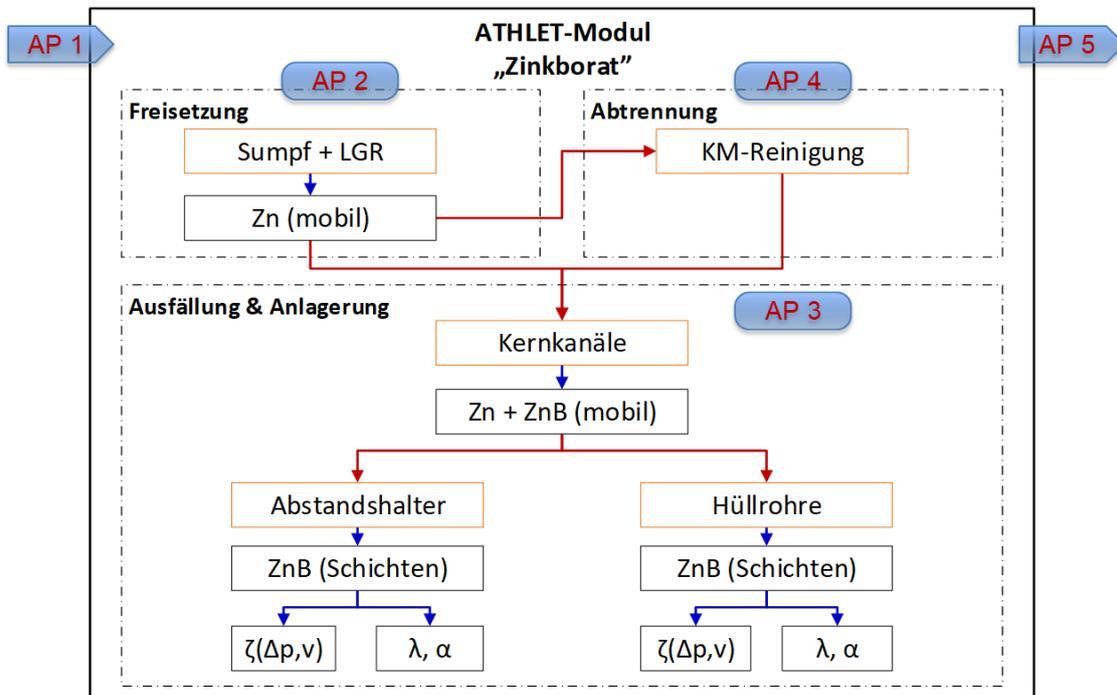
**Abb. 1.1** Eingangs- und Ausgangsgrößen sowie Teilmodelle des zu entwickelnden ATHLET-Moduls „Zinkborat“

Das Teilmodell "Ausfällung / Anlagerung" wird neu in ATHLET implementiert, um die Ausfällung und Anlagerung von ZnB in Abhängigkeit von lokalen Parametern wie KM-Temperatur, Bor- bzw. Zn-Konzentration und Fluidgeschwindigkeit berechnen zu können. Darüber hinaus soll eine Erhöhung der Druckverlustbeiwerte auch in Querrichtung und abhängig von der Masse der angelagerten ZnB-Schichten erfolgen. Die Auswirkung der Anlagerungsschichtdicke auf die Wärmeübertragung wird berücksichtigt. Ein Modell für die Berücksichtigung des dynamischen Wachstums von Zinkborat an Hüllrohroberflächen ist zu entwickeln. ATHLET wird hierfür die Eingangsgrößen wie Fluid- und Oberflächentemperatur und lokale Zink- und ZnB-Konzentration bereitstellen.

Die Eigenschaften des aktuell in ATHLET vorhandenen Transportmodells werden so erweitert, dass der Transport von zwei oder mehreren Stoffen (u. a. Zn-Ionen sowie ZnB-Partikel) ohne Rückwirkung auf die Thermohydraulik gleichzeitig betrachtet werden können. Als Ergebnis steht das Teilmodell „Transport“ zur Verfügung.

In der schematischen Darstellung der Teilmodelle in Abb. 1.1 ist auch der Term „Abtrennung“ gegeben, welcher eine durch Störfallmaßnahmen bewirkte Zinkentfernung aus dem KM berücksichtigt. Hier wird das Modul für die Integration eines entsprechenden Schließungsmodells vorbereitet.

Abb. 1.2 gibt die sich über drei Ebenen erstreckende Hierarchie der Teilmodelle und die komplexen Stoffströme (Transportpfade) wieder, die im ATHLET-Modul „Zinkborat“ berücksichtigt werden.



**Abb. 1.2** Hierarchie innerhalb der Teilmodelle und zu realisierende Transportpfade

Die Hierarchie innerhalb der Teilmodelle ist hier blau und zu realisierende Transportpfade rot dargestellt. Jeweils bezogen auf das zu entwickelnde ATHLET-Modul „Zinkborat“

Im Folgenden werden die Einzelziele dargestellt und kurz beschrieben.

### 1.2.1 Entwicklung eines Konzepts für das ATHLET-Modul „Zinkborat“ (AP 1)

Ziel dieses APs ist die Entwicklung eines Konzepts für das in ATHLET zu implementieren Gesamtmodul „Zinkborat“.

Im Rahmen dieses APs wird zusammen mit den Projektpartnern die Schnittstelle zwischen Experimenten und Simulation definiert. In dieser Phase wird das für das Gesamtmodul bestehende Konzept einschließlich seiner Modellhierarchie, Transportpfade und Eingangs-/Ausgangsgrößen ggf. angepasst und final bestätigt, sobald der zeitliche Ablauf sowie alle relevanten thermo- und fluiddynamischen Mechanismen nach aktuellem Kenntnisstand hinreichend nachgebildet werden können.

Gespräche zwischen der GRS und den anderen Projektpartnern sind in dieser Projektphase von Bedeutung, um die experimentellen Randbedingungen wie z. B. den erweiterten Parameterbereich, zu betrachtende Geometrien, Stoffsysteme, Thermohydraulik, Klasseneinteilung der ZnB, Komponenten und Materialien sowie Messgrößen und -positionen zu definieren.

### **1.2.2 Entwicklung des ATHLET-Teilmodells für die Freisetzung von Zink im Kühlmittel (AP 2)**

Ziel dieses APs ist ein Modell zur Zink-Freisetzung und Zink-Auflösung im Kühlmittel zu entwickeln. Das Modell "Freisetzung" soll die Freisetzung von Zink-Ionen durch Korrosion der im Sumpf bzw. im Leckstrahl befindlichen verzinkten Oberflächen repräsentieren.

Es erfolgt die Weiterentwicklung des bestehenden, seitens der GRS, entwickelten Zn-Freisetzungsmodells in ATHLET. Im Gegensatz zum bisherigen Ansatz, der auf Zn-Konzentrationsverläufe für feste Anordnungen von Lichtgitterrost (LGR), LGR-Flächen und KM-Volumina beschränkt ist, soll der zu implementierende Ansatz Kombinationen von verschiedenen Freisetzungsorten mit unterschiedlichen strömungsabhängigen Korrosionsraten ermöglichen. Involvierte Korrosionsflächen und Kühlmittelvolumen sind frei definierbar. Die vertiefende Auswertung des Datenbestands bereits durchgeführter ZSW-Experimente seitens der HSZG wird die Daten zu dieser Weiterentwicklung liefern. Die GRS wird die Ergebnisse der Auswertung in Form von Korrelationen nutzen, um das „Freisetzung“-Teilmodell in ATHLET zu implementieren.

### **1.2.3 Entwicklung der ATHLET-Teilmodelle für Transport und Ausfällungs- und Anlagerungseffekte im Kern (AP 3)**

Allgemeines Ziel dieses APs ist die Entwicklung und darauffolgende Bereitstellung der Teilmodelle in ATHLET für die Simulation der Entstehung und Transport von ZnB-Partikeln im Sumpf und Kernbereich sowie der An- und Ablagerung von Partikeln an den heißen Stellen im Kern (am Abstandshalter und an den Hüllrohr-Oberflächen).

Das in ATHLET verfügbare Clogging-Modell ist in seiner jetzigen Form für eine Repräsentation der ZnB-Anlagerungen nicht ausreichend (vgl. Kapitel 1.2). Das Projekt sieht vor, mittels eines zu entwickelnden Modells, welches alle in Kapitel 1.1 aufgeführten Teilprozesse einbezieht, die bestehenden Modelleinschränkungen zu beseitigen.

Beispielsweise soll durch eine getrennte Berücksichtigung der Prozesse ZnB-Ausfällung im KM (Bildung mobiler ZnB-Partikel) und ZnB-Anlagerung als Schichten an Hüllrohren und Abstandshalter in einem Teilmodell die Beeinflussung der Thermohydraulik im Kern umfassender repräsentiert werden.

Eine Reihe von Experimenten werden von Projektpartnern HSZG, HZDR und TUD durchgeführt, um Daten und daraus abgeleitete Korrelationen für die Modellierung folgender Teilprozesse sowie für die Quantifizierung thermohydraulischer Folgen von ZnB-Abscheidungen zur Verfügung zu stellen:

- ZnB-Ausfällung (mobile Partikel) und ZnB-Anlagerung an Hüllrohren und Abstandshaltern;
- Transport von Zn und ZnB;
- Strömungswiderstand in axialer und radialer Richtung;
- Wärmeübertragung über der an heißen Oberflächen angelagerten ZnB-Masse.

Die Einzelschritte dieses APs werden die Analyse unterschiedlicher Phänomene, die für die Entwicklung eines ATHLET-Teilmodells für Ausfällungs- und Anlagerungseffekte von Bedeutung sind, beinhalten und verteilen sich wie folgt:

1. Bestimmung von Löslichkeit und Kristallisationsverhalten von Zinkboraten (siehe AP 3.1 in der Vorhabensbeschreibung der Projektpartner HSZG, TUD und HZDR zum Vorhaben AZora, FKZ 1501585 /HSZ18/)
2. Quantifizierung thermohydraulischer Folgen von ZnB-Abscheidungen an heißen Oberflächen im Labormaßstab (siehe AP 3.1 in der Vorhabensbeschreibung der Projektpartner HSZG, TUD und HZDR zum Vorhaben AZora, FKZ 1501585 /HSZ18/)
3. Quantifizierung thermohydraulischer Folgen von ZnB-Abscheidungen in Kerngeometrien im halbtechnischen Maßstab (siehe AP 3.1 in der Vorhabensbeschreibung der Projektpartner HSZG, TUD und HZDR zum Vorhaben AZora, FKZ 1501585 /HSZ18/)
4. Teilmodellerstellung und Implementierung in ATHLET (siehe AP 3.2 und AP 3.3 in der Vorhabensbeschreibung der Projektpartner HSZG, TUD und HZDR zum Vorhaben AZora, FKZ 1501585 /HSZ18/)

Die Einzelschritte 1 bis 3 (AP 3.1 und AP 3.2 in der Vorhabensbeschreibung der Projektpartner /HSZ18/) werden von den Projektpartnern verfolgt. Die GRS wird sich mit dem Einzelschritt 4 (Teilmodellerstellung und Implementierung in ATHLET) befassen.

Die aus den Versuchen im Labor- und halbtechnischen Maßstab resultierenden Daten beschreiben die Abhängigkeit lokal angelagerter ZnB-Mengen von den thermohydraulischen Parametern der KM-Strömung und die daraus resultierenden zeitabhängigen thermohydraulischen Phänomene wie Differenzdruckaufbau, Strömungsumverteilung und Wärmetransportänderung. Daraus werden von den Projektpartnern Korrelationen und datengestützte Einzelmodelle abgeleitet. Die GRS unterstützt die Projektpartner, um eine geeignete Form von Korrelationen für eine Implementierung in den Systemcode ATHLET zu entwickeln. Die GRS implementiert schließlich die von Projektpartnern zur Verfügung gestellten Korrelationen in ATHLET.

#### **1.2.4 Einbeziehung von Maßnahmen zur Störfallfolgenbehandlung (AP 4)**

Ziel dieses APs ist die Entwicklung eines Teilmodells im ATHLET-Gesamtmodul „Zinkborat“, um die Effekte eines Einsatzes der in DWR-Anlagen vorhandenen Ionenaustauscher zur Zinkentfernung (Abtrennung) aus dem KM während des Sumpfumwälzbetriebes zu analysieren.

Die Einbeziehung von Maßnahmen zur Störfallfolgenbehandlung erfolgt auf experimentellem Wege am Beispiel der Nutzung des KM-Reinigungssystems.

Die experimentellen Arbeiten beschränken sich auf Versuche im Labormaßstab (siehe Vorhabensbeschreibung der Projektpartner /HSZ18/). Die Ionenaustauschkapazitäten, Austauschleistungen und -selektivitäten bezüglich  $Zn^{2+}$ -Ionen werden als Funktion verschiedener Prozessparameter (KM-Chemie, Zn-Konzentration im KM, Temperatur) durch Messung der Zn-Konzentrationen am Ausgang des Ionenaustauschers ermittelt.

#### **1.2.5 Plausibilitätsprüfung und Validierung des ATHLET-Moduls „Zinkborat“ für die Sicherheitsbewertung von DWR-Anlagen (AP 5)**

Das Ziel dieses APs ist die Zusammenstellung der in den vorherigen AP erstellten Teilmodelle, um ein validiertes Gesamtmodul „Zinkborat“ zu schaffen, welches im ATHLET Code implementiert wird.

Das ATHLET-Modul „Zinkborat“ resultiert aus der Kopplung der verschiedenen Teilmodelle. Dessen Validierung erfolgt am Beispiel von KMV-störfallorientierten Versuchen, welche an den Anlagen im halbtechnischen Maßstab durchgeführt werden und Ausfällungs- und Anlagerungsprozesse von ZnB beinhalten. Da die Validierung parallel zur experimentellen Studie bezüglich der Störfallfolgenbehandlung erfolgt, wird die Abtrennung des Zinks durch Ionenaustauscher nicht in die Validierung einbezogen. Die Validierungsanforderungen für die Experimente werden im Vorfeld mit den Projektpartnern festgelegt, woraus sich die Spezifikation einer weiteren messtechnischen Auf- bzw. Umrüstung der Versuchsanlagen ergibt (siehe Vorhabensbeschreibung der Projektpartner /HSZ18/).



## **2 Stand der Wissenschaft und Technik**

### **2.1 Nationale Untersuchungen zur ZnB-Problematik**

Die beim Kontakt mit KM zu verzeichnenden Zn-Korrosionsraten wurden von der HSZG und der TUD experimentell für die KM-Chemie in deutschen DWR ermittelt, u. a. für die im KMV während des Sumpfumwälzbetriebes auftretenden Konzentrationen von 2000 ppm Bor und 0.2 ppm Lithium im KM /HAR17/. Die Ergebnisse wurden im halbertechnischen Maßstab, unter Skalierung der Korrosionsoberflächen (verzinkte Oberflächen), des KM-Volumens und -Volumenstroms im Containment eines generischen DWR bestätigt /SEE17/. Es wurde der Einfluss von Leckvolumenstrom, Freistrahlausprägung, Luftatmosphäre durch Experimente unter verschiedenen geometrischen und thermohydraulischen Randbedingungen auf die Korrosion nachgewiesen. Die ermittelten flächenspezifischen Korrosionsraten lagen im Bereich von 1000 – 2500 mg/(m<sup>2</sup> h) und sind von den Strömungsverhältnissen an den untersuchten Zink-Oberflächen abhängig.

Schwerpunkt in den BMWi-Vorhaben 1501491 und 1501496 ist die Untersuchung der ZnB-Abscheidungsprozesse in Kernbereichen unterschiedlicher Heizleistung unter realitätsnahen Randbedingungen (konkrete KMV-Szenarien, Heizstabkonfiguration mit Originalstablänge). Im Ergebnis der experimentellen Untersuchungen wurde im labor- sowie halbertechnischen Maßstab nachgewiesen, dass die Randbedingungen eines KMV, bei Berücksichtigung verschiedener Leckgrößen, zu ZnB-Ausfällungen im KM sowie zu ZnB-Anlagerungen im DWR-Kern führen /REN18/. Bei der Bewertung des Einflusses von ZnB auf die Kernkühlung muss zwischen mobilen und schichtbildenden ZnB unterschieden werden. Mobiles ZnB war in Versuchen auch im Downstream-Bereich in Form von Anhaftungen oder Sedimenten nachweisbar.

### **2.2 Internationale Untersuchungen zur ZnB-Problematik**

Im Rahmen der ICET (Integrated Chemical Effects Tests) Serien zum GSI-191 wurden in den USA generische /PEA16/ und anlagenbezogene /ALI16/ Batch-Experimente zur Korrosion von Zn-Coupons in borierten KM-Lösungen durchgeführt. Die Untersuchungen beschränkten sich dabei auf typische KM-Zusammensetzungen US-amerikanischer DWR, wobei die Einspeisung von Pufferlösungen (Trinatriumphosphat) im Sumpfumwälzbetrieb vorausgesetzt wurde. Unter diesen Bedingungen wurde eine geringe Löslichkeit von Zn im KM gefunden.

Da sich die Untersuchungen auf den Problemkreis der Sumpfsiebverblockung durch Isoliermaterial und deren Wechselwirkung mit Metallen (Al, Zn) konzentrierten, wurde das KM keinen Temperaturzyklen unterzogen. Außerdem erfolgte keine experimentelle Simulation der thermohydraulischen Bedingungen im Reaktorkern. Das Phänomen der temperaturabhängigen ZnB-Bildung und -Ausfällung wurde folglich nicht beobachtet.

Zum Zeitpunkt liegen keine Informationen vor, dass internationale Untersuchungen zur ZnB-Problematik in nuklearen Anlagen aktuell durchgeführt werden. Hingegen sind verfahrenstechnisch vergleichbare Prozesse oftmals Untersuchungsgegenstand, wie z. B. die schichtbildende Auskristallisierung schwerlöslicher Salze im Kontext der Sicherheit und Effizienz geothermaler Kraftwerksanlagen /CAN15/. Weitere bisher bekannte und publizierte Untersuchungen zum kristallinen Schichtwachstum beschränken sich hauptsächlich auf die für industrielle Wärmeübertrager relevanten Calcium- und Magnesiumsalze.

### **2.3 Modellierung von Ablagerungsprozessen in ATHLET**

Ein Modell für die Berücksichtigung der Strömungswiderstände aufgrund der Ablagerung von Isoliermaterialfasern am Sumpfsieb, Kerneintritt und an den Abstandshaltern während eines KMV mit Freisetzung von Isolationsmaterial wurde im Simulationsprogramm ATHLET im Rahmen des BMU-Vorhabens SR-2444 /GRS05/ entwickelt.

Zur Ablagerung von Isoliermaterialien an den Abstandshaltern wurde im ATHLET-Code das bereits im vorherigen Vorhaben erstellte Clogging-Modell weiterentwickelt. Die wesentlichen Beiträge sind im GRS-A-Bericht 3526 (BMU-Vorhaben 3608R01326 /GRS10/) beschrieben. Bei den dort beschriebenen Rechnungen werden über das Clogging-Modell die zu belegenden Abstandshalter definiert. Mit dem Kontrollmodul GCSM werden die Ablagerungsmenge pro  $m^2$  und der belegungsspezifische Strömungswiderstand pro  $kg/m^2$  für die thermohydraulischen Rechnungen vorgegeben. Dabei wird die Anlagerungsmenge im GCSM-Block dynamisch berechnet. Eine Erhöhung der Druckverluste lässt sich im ATHLET-Modell berücksichtigen. Die Grundlage des GRS-Modells zur Bestimmung von Transportfaktoren, Belegungsdichten und Druckverlusten über die Sumpfsiebe sind im o. g. Bericht detailliert beschrieben.

Da eine direkte Übertragbarkeit der Versuchsergebnisse der HSZG/TUD zur Problematik der Zinkfreisetzung und ZnB-Ablagerung aufgrund der Skalierungseffekte nicht möglich ist, hat die GRS im Rahmen des Vorhabens UM14R01326 /GRS14/ ein empirisches Modell zur Übertragung der Versuchsergebnisse auf die Realanlage entwickelt. Das Modell berücksichtigt im Wesentlichen die Lösung von Zink aus verzinkten Oberflächen im Sumpf, die Berechnung des Transports von gelöstem Zink im Kühlkreislauf und die Ablagerung von Zink als ZnB in einzelnen thermohydraulischen Zonen.

Um die Arbeit im BMWi-Forschungsvorhaben 1501491 (HSZG) und 1501496 (TUD) zu unterstützen, wurden seitens der GRS im Rahmen des Vorhabens RS1519 /GRS17/ thermohydraulische Rechnungen zu postulierten KMV-Szenarien zur Festlegung der Randbedingungen für Korrosionsexperimente durchgeführt. Insgesamt 15 thermohydraulische Simulationsrechnungen von KMV-Störfallszenarien mit einer Problemzeit von jeweils max. 7 Tagen wurden durchgeführt. Ziel war ein breiteres Spektrum der Leckgröße für die Analyse abzudecken. Für die KMV-Analyse wurde ein Analysesimulator eines generischen Vorkonvoi-Druckwasserreaktors herangezogen. Die Ergebnisse der Rechnungen sowie die Dokumentation der anlagen- und störfallspezifischen Parameter wurden von der GRS der TU Dresden und der Hochschule Zittau-Görlitz für die Auswertung und Aufbereitung der Daten zur Verfügung gestellt.



### 3 Ergebnisse des Arbeitsprogramms

#### 3.1 Entwicklung eines Konzepts für das ATHLET-Modul „Zinkborat“ (AP 1)

Die Arbeit für die Entwicklung eines Konzepts für das in ATHLET zu implementierende Modul „Zinkborat“ wurde im Rahmen des AP1 durchgeführt. In erster Instanz wurde die modulare Struktur der Teilmodelle definiert, welche die Bestandteile des Gesamtmoduls „AZora“ darstellen.

Hierfür wurde seitens der GRS ein konzeptioneller Entwurf zur Modellierung der einzelnen Phänomene bzw. Prozesse erstellt, welcher als Grundlage für interne Gespräche mit den Projektpartnern diene.

Im Einzelnen wurden folgende Schritte für die Modellimplementierungen festgelegt:

- Zur Modellierung der im Kühlmittel gelösten Zink-Ionen wurde eine Transportgleichung für die Zinkkonzentration im Kühlmittel ( $c_{Zn}$  in  $\text{kg}/\text{m}^3$ ) abgeleitet. Quell- bzw. Senkenterme beschreiben die Lösung von Zink aus den Containment-Einbauten ( $G_{\text{Freisetzung}}$ ) sowie deren Ausfällung ( $G_{\text{Ausfällung}}$ ), sowohl durch Abscheidung ( $G_{\text{Abscheidung}}$ ) als auch in Form von Anlagerung als Zinkborat-Schicht ( $G_{\text{Anlagerung}}$ ) auf den Hüllrohren der Brennstäbe. Mit  $G_{\text{Filter}}$  bezeichnet man die Abtrennung durch Filter oder Ionenaustauscher (Kühlmittelreinigung). Entsprechende Korrelationen wurden unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Positionen der Zinkquelle von Projektpartnern HSZG erstellt, um die Abhängigkeit der Zink-Korrosionsrate von der Strömung im Modell betrachten zu können. Diese Korrelationen wurden auf Basis der vom Projektpartner HSZG durchgeführten Freisetzungsexperimente im Rahmen des abgeschlossenen BMWi-Forschungsvorhaben 1501491 /IPM19/ erstellt.

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_{Zn}}{\partial t} &= \frac{1}{V_{KM}} (\sum G_{in} - \sum G_{out} + G_{\text{Freisetzung}} - G_{\text{Ausfällung}} + Q) \\ &= \frac{1}{V_{KM}} (\sum c_{Zn} \cdot v_{KM,i} \cdot A_i + G_{\text{Freisetzung}} - G_{\text{Abscheidung}} - G_{\text{Anlagerung}} - G_{\text{Filter}} + Q)\end{aligned}$$

- Zur Beschreibung der mobilen Zinkborate wurde eine weitere Transportgleichung für die Zinkborat-Konzentration ( $c_{ZnB}$  in  $\text{kg}/\text{m}^3$ ) definiert. Für die Bildungsrate mobiler Zinkborate ( $G_{\text{Abscheidung}}$ ) wurde eine Korrelation von den Projektpartnern auf Basis

der Experimente bereitgestellt. Als Zinkborat-Senkenterm ( $G_{Partikel, Ablagerung}$ ) wurde die Anlagerung an den Abstandshaltern im Kernbereich berücksichtigt.

$$\frac{\partial c_{ZnB}}{\partial t} = \frac{1}{V_{KM}} (\sum G_{in} - \sum G_{out} + G_{Abscheidung} - G_{Partikel, Ablagerung} + Q_{ZnB,i})$$

- Mittels der Modellierung der angelagerten Zinkboratmasse und der Kenntnis der mittleren Dichte des festen Zinkborats (aus den Experimenten) wird die Schichtdicke der Anlagerung auf den Hüllrohren ( $D_{Anlagerung}$ ) berechnet. Diese wird genutzt, um einerseits die Verschlechterung des Wärmeübergangs zwischen Hüllrohr und Fluid aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{Anlagerung}$  des Zinkborats zu bestimmen, und andererseits die erhöhten Strömungsdruckverluste zu berechnen. Strömungsdruckverluste umfassen die Wandreibung ( $\zeta_{Wand}$ ) und Formverluste an Abstandshaltern ( $\zeta_{AH}$ ). Die geplante Modifizierung der Implementierung der Wandreibung wird die zeitlich veränderliche Strömungsquerschnittsfläche (aufgrund der Anlagerung) berücksichtigen. Zusätzlich sollen die Formverluste, z. B. über die Abstandshalter ( $\zeta_{AH}$ ), geeignet angepasst werden. Hierfür wird eine Korrelation entwickelt, welche eine Abhängigkeit zwischen abgelagerten Zinkboratpartikeln und lokalen Formverlust beschreibt. Zum Zweck der Korrelationsherstellung wird die HSZG auf experimentellem Weg die aus ZnB-Anlagerungen resultierenden Massen, Schichtdicken und Differenzdruckverläufe über die Abstandshalter sowie Querströmungsänderungen zwischen Stabbündeln ermitteln.

$$D_{Anlagerung} = \sum_i \frac{G_{Anlagerung,i}}{\rho_{Anlagerung,i}} \cdot \frac{1}{A_{HR}} \cdot \Delta t_i$$

$$\dot{Q} = \frac{A_{HR}}{\frac{D}{\lambda_{tot}}} (T_{HR} - T_{KM}) = \frac{A_{HR}}{\frac{1}{h_{tc}} + \frac{\delta/2}{\lambda_{HR}} + \sum \frac{D_{Anlagerung,i}}{\lambda_{Anlagerung,i}}} (T_{HR} - T_{KM})$$

$$\zeta_{AH}(t) = \zeta_{AH} \cdot f(D_{Anlagerung})$$

$$\zeta_{Wand} = \zeta_{Wand}(t, D_h, A, R_{Wand})$$

Das erarbeitete Konzept zur Implementierung des Zinkborat-Moduls in ATHLET wurde mit den Projektpartnern abgestimmt.

Im Rahmen einer öffentlichen Veranstaltung an der TUD am 10. Oktober 2019 wurde das Konzept für das in ATHLET zu implementieren Gesamtmodul "Zinkborat" vorgestellt (siehe /PAL19/).

### **3.2 Modellentwicklung für positions- und flächenbezogene Korrosionsraten für Zinkinventar unter KMV-Bedingungen (AP 2)**

#### **3.2.1 Modellgleichung des Transportmodells**

Dem neuen Transportmodell für gelöste Stoffe und Partikel liegen folgende Annahmen zugrunde:

- Die gelösten Stoffe werden ausschließlich von der Liquidphase, also von Wasser, mit der entsprechenden Phasengeschwindigkeit transportiert.
- Die gelösten Stoffe haben keinen Einfluss auf die Thermohydraulik. D. h., alle Stoffwerte und Stoffeigenschaften von Wasser erfahren durch die Anwesenheit der gelösten Stoffe keine Änderung.

Unter diesen Annahmen kann ein gelöster Stoff durch eine einzige Bilanzgleichung, eine Transportgleichung für die Masse des Stoffes, beschrieben werden. Ausgangspunkt für die implementierte Modellgleichung ist die Erhaltungsgleichung für die Masse des gelösten Stoffes  $M_S$ . Aus der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla(\rho \cdot v) = \varphi$$

folgt nach Integration über ein Kontrollvolumen (CV):

$$\frac{d}{dt} M_S = \sum G_{S,in} - \sum G_{S,out} + \Psi_S$$

$\Psi_S$  beschreibt den Quellterm in einem Kontrollvolumen.  $G_{S,in}$  bzw.  $G_{S,out}$  bezeichnen ein- und ausströmende Massenströme auf den Grenzen eines CV.

Die Verknüpfung der Massenerhaltungsgleichung zur Fluidodynamik erfolgt über die Definition der massenspezifischen Konzentration des gelösten Stoffes, bezogen auf die Liquidmasse  $M_L$  in einem CV:

$$C_S = \frac{M_S}{M_L}$$

Hiermit können die in ein CV ein- bzw. austretenden Massenströme des gelösten Stoffes  $G_{S,in}$  bzw.  $G_{S,out}$  unter Zuhilfenahme der Stoffkonzentration  $C_{S,j}^{up}$  im stromaufwärtigen CV geschrieben werden als:

$$G_{S,j} = C_S \cdot G_{L,j} = C_{S,j}^{up} \cdot G_{L,j} \quad (3.1)$$

Hieraus folgt für die Massenbilanz des gelösten Stoffes:

$$\frac{d}{dt} M_S = \sum_j C_{S,j}^{up} \cdot G_{L,j} + \Psi_S \quad (3.2)$$

Die Summation erfolgt hierbei über alle Oberflächen  $A_j$  eines CV. Der Wassermassenstrom  $G_{L,j}$  hängt von der Dichte  $\rho_{L,j}$  und der Wassergeschwindigkeit  $w_{L,j}$  ab, die wiederum der Transportgeschwindigkeit des gelösten Stoffes entspricht:

$$G_{L,j} = \rho_{L,j}^{up} \cdot w_{L,j} \cdot A_j$$

### 3.2.1.1 Modelleigenschaften

Das implementierte Transportmodell für gelöste Stoffe und Partikel zeichnet folgende Eigenschaften aus:

- Das Modell kann für eine beliebige Anzahl an gelösten Substanzen bzw. Partikelarten eingesetzt werden.
- Anders als das in ATHLET bereits verfügbare Modell für Borsäure besitzt das Partikelmodell kein spezielles Transportmodell zur Verringerung der numerischen Diffusion in Situationen steiler Konzentrationsgradienten. Hierauf wurde verzichtet, da die Lösung und Ablagerung der zu betrachtenden Substanzen Zink und Zinkborat auf

langen Zeitskalen erfolgt, die letztlich zu flachen Konzentrationsprofilen im Kühlmittel führen.

- Die Massenbilanz wird für jeden gelösten Stoff bzw. jede Partikelart unter Berücksichtigung der verschiedenen Quellterme systemweit berechnet und als Plot-Größe abgelegt.
- Das Modell ist restartfähig.
- Wenn der Liquidanteil in einem CV gegen Null geht (z. B. wegen Verdampfung des Kühlmittels im CV), steigt die Stoffkonzentration ( $C_{SOLUT}$ ) als Quotient aus gelöster Masse und Liquidmasse. Die Konzentration wird nach oben limitiert, indem eine minimale Liquidmasse im CV angenommen wird (auch wenn kein Liquid mehr vorhanden sein sollte). Nachdem kein Wasser mehr im CV vorhanden ist, wird die Masse des gelösten Stoffes im CV konstant gehalten und auf dem letzten Wert vor dem Ende der Verdampfung des letzten Liquids „eingefroren“.
- In einem sog. Time-Dependent-Volume (TDV), das in ATHLET zur Vorgabe einer Druck-Enthalpierandbedingung an Systemgrenzen genutzt wird, können keine Konzentrationen gelöster Stoffe vorgegeben werden.

Da in ATHLET keine Rückwirkung der gelösten Stoffe auf die Fluidodynamik vorhanden (bzw. vernachlässigbar) ist, wird das Transportmodell unabhängig vom (implizit gelösten) thermohydraulischen Gleichungssystem explizit mit eigenen Zeitschrittweiten integriert. Als Lösungsvariable der Transportgleichung wird die Masse des gelösten Stoffes genutzt. Dies bedeutet implizit, dass die Massenerhaltung gewährleistet ist. Alternative Formulierungen der Transportgleichung könnten bspw. die Konzentration als Lösungsvariable nutzen. Derartige Ansätze wurden verworfen, da die Massenerhaltung als wesentlich vorausgesetzt wird. Unter Beachtung von (3.2) resultiert somit als Gleichung für die gelöste Masse in einem CV zum Zeitpunkt  $i + 1$ :

$$\frac{\partial M_S}{\partial t} = \sum_j (C_{S,j}^{up} \cdot G_{L,j})^i + \Psi_S^i$$

$$M_S^{i+1} = M_S^i + \left( \sum_j (C_{S,j}^{up} \cdot G_{L,j})^i + \Psi_S^i \right) \cdot \Delta t = M_S^i + \left( \sum_j M_{S,j}^{up,i} \cdot \left( \frac{G_{L,j}}{M_{L,j}^{up}} \right)^i + \Psi_S^i \right) \cdot \Delta t$$

Bei der Bestimmung der maximal möglichen Zeitschrittweite  $\Delta t$  wird das für ein explizites Verfahren wichtige CFL-Kriterium berücksichtigt. Da  $\Delta t$  kleiner sein kann als die Zeitschrittweite des FEBE-Solvers des Thermohydraulikmoduls von ATHLET, betreibt das Transportmodell ggf. ein Subcycling (d. h. es werden mehrere Zeitschritte pro FEBE-Zeitschritt ausgeführt, bis die FEBE-Zeitschrittweite erreicht ist).

### 3.2.1.2 Eingabedaten

Für die Simulation von im Liquid gelösten Stoffen müssen im Eingabedatensatz unter dem neuen Control Word SOLUTE Eingaben vorgenommen werden. Für jeden gelösten Stoff werden der Name, die Anfangskonzentration im Gesamtsystem und ein Key zur Modellierung der Ablagerung erwartet. Die Eingabedaten besitzen folgendes Format und Bedeutung:

```
C----- SOLUTE
      NSOLUT
      ASOLCOMP      CSOL0      ISOLDEP
```

NSOLUT: Anzahl der gelösten Stoffe

ASOLCOMP: Name des gelösten Stoffes

CSOL0: Anfangskonzentration (für Zink: mg/kg; andere Stoffe: ppm)

ISOLDEP: Ablagerungsmodell

= 0: Ohne Ablagerung

= 1: Mit Ablagerung

### 3.2.2 Quellterme für Zink

Als Quellterme  $\Psi_S$  in der Transportgleichung (3.2) werden für gelöstes Zink verschiedene Beiträge berücksichtigt:

$$\Psi_S = G_{\text{Freisetzung}} - G_{\text{Abscheidung}} - G_{\text{Anlagerung}} - G_{\text{Filter}} + Q$$

Hierin sind:

- $G_{\text{Freisetzung}}$ : Lösung aus Lichtgitterrosten (LGR)
- $G_{\text{Filter}}$ : Abtrennung durch Filter oder Ionenaustauscher (Kühlmittelreinigung)
- $Q$ : Einspeisung über ein sog. FILL-Objekt

- $G_{\text{Abscheidung}}$ : Bildung/Vernichtung aus Reaktionskinetik  
(z. B. Entstehung mobiler ZnB-Partikel aus Zinkionen und Borsäure)
- $G_{\text{Anlagerung}}$ : Anlagerung in Form einer ZnB-Schicht auf dem Hüllrohr

Die Modellierung der einzelnen Quellterme wird in den nachfolgenden Kapiteln erläutert.

### 3.2.3 Modellierung der Zinkfreisetzung aus Lichtgitterrosten

Die Freisetzungsrates  $G_{\text{Freisetzung}}$  lässt sich aus der flächenspezifischen Korrosionsrate  $r$  und der vorhandenen Korrosionsoberfläche  $A_{\text{LGR}}$  berechnen:

$$G_{\text{Freisetzung}} = r \cdot A_{\text{LGR}}$$

Folgende qualitative Zusammenhänge zwischen physikalischen Einflussparametern und der Zinkfreisetzung aus LGR konnten in den Experimenten an der HSZG beobachtet werden:

- Abhängigkeit der Zinkfreisetzung von der Kühlmitteltemperatur: Diese wurde im Rahmen von bereits abgeschlossenen Projekten (siehe z. B. FKZ 1501491 /IPM19/) untersucht. Für die Bestimmung einer temperaturabhängigen, maximal möglichen Zinkkonzentration im KM wurden Ergebnisse aus Versuchen vom Projektpartner TUD/HZDR ausgewertet. Eine detaillierte Beschreibung ist in /SEE20c/ zu finden.
- Abhängigkeit der Zinkfreisetzung von Schichteigenschaften (dreischichtiger Aufbau) der LGR:
  - Charakteristischer Aufbau der LGR-Beschichtung aus drei Schichten mit unterschiedlichen physikalisch-chemischen Eigenschaften, Zinkanteilen und Schichtdicken
  - Die Kenntnis der bereits abgetragenen Schichtdicke (bzw. Zinkmasse) ist bedeutend für die Bestimmung der weiteren Freisetzung.
- Abhängigkeit der Zinkfreisetzung vom Volumenstrom: Der Leckvolumenstrom ist vor allem von Bedeutung für eine Zinkquelle im Leckstrahl.
- Einfluss des pH-Wertes auf die Zinkfreisetzung: Oberhalb eines pH-Wertes von 7 – 7.5 ist keine weitere Einlösung von Zink messbar.

Die beschriebenen Beobachtungen verdeutlichen, dass eine Korrelation für die flächenspezifische Freisetzungsrates von Zink aus LGR folgende funktionale Abhängigkeiten berücksichtigen muss:

$$r = r(\text{Position}, c_{Zn,max}(T_{KM}), pH, Q, d_{Abtrag})$$

Hierbei bezeichnet  $Q$  den Liquidvolumenstrom am LGR, der für ein LGR im Leckstrahl näherungsweise dem Leckvolumenstrom entspricht.

### 3.2.3.1 Sättigungskonzentration und maximale Konzentration von Zink im Kühlmittel

Zur Bestimmung einer maximalen Zinkkonzentration im Kühlmittel, bei der die Zinkfreisetzung aus LGR endet, wurden Freisetzungsversuche bei unterschiedlichen Temperaturen durchgeführt. Für eine Kühlmittelchemie von  $c_B = 2300 \text{ ppm}$  und  $c_{Li} = 0.5 \text{ ppm}$  wurde für einen Temperaturbereich von 25 bis 70 °C folgender funktionaler Zusammenhang bestimmt /IPM20b/:

$$c_{Zn,max} = a + b \cdot T_{KM} + c \cdot T_{KM}^{0.5} \quad (3.3)$$

wobei  $a = 559.6636$ ,  $b = 5.696612$  und  $c = -110.2023$ ; Werte von  $c_{Zn,max}$  in mg/l.

Die maximal mögliche Zinkkonzentration wird nach oben durch die Sättigungskonzentration von Zink begrenzt:

$$c_{Zn,max} = \min(c_{Zn,max}; c_{Zn,sat}) \quad (3.4)$$

Die Sättigungskonzentration für Zink, ab der es zu einer spontanen Bildung von ZnB-Partikeln kommt, ist für Kühlmitteltemperaturen zwischen 45 und 100°C nach /HAR20/ gegeben als:

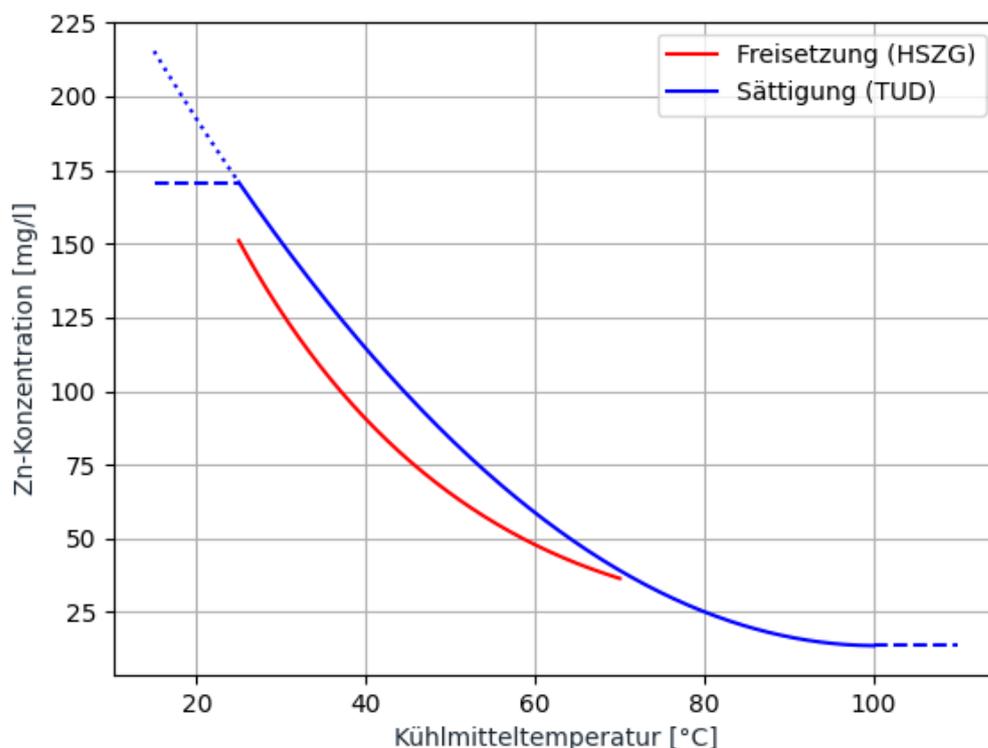
$$c_{Zn,sat} = d \cdot T_{KM}^2 + e \cdot T_{KM} + f \quad (3.5)$$

wobei  $d = 0,0276897 \text{ mg/l } ^\circ\text{C}^2$ ;  $e = -5,558 \text{ mg/l } ^\circ\text{C}$ ;  $f = 292,5 \text{ mg/l}$ .

Bei Erreichen der maximalen Zinkkonzentration in einem CV wird in ATHLET keine weitere Zinkfreisetzung simuliert.

Aktuell wird in ATHLET die Korrelation (3.5) für den Temperaturbereich zwischen 25 und 100 °C zur Bestimmung der Zink-Sättigung genutzt. Oberhalb bzw. unterhalb dieser Temperaturen wird die Zinksättigungskonzentration als konstant angenommen.

Abb. 3.1 zeigt einen Vergleich der Zinksättigungskurve (blau) und der maximalen Zinkkonzentration der Freisetzung. Aufgrund der plausiblen Übereinstimmung wird die Korrelation der Zinksättigung in ATHLET für den erweiterten Temperaturbereich zwischen 25 und 100 °C genutzt, um gemäß Gleichung (3.4) die maximale Zinkkonzentration der Freisetzung zu bestimmen.



**Abb. 3.1** Maximale Zinkkonzentration bei Freisetzung (rot) und Zinksättigungskonzentration für ZnB-Partikelbildung (blau)

### 3.2.3.2 Modell für die pH-Wert Bestimmung im Kühlmittel

Der pH-Wert hängt von den im KM gelösten Konzentrationen von Bor, Lithium und Zink ab. Experimentell untersucht wurde der pH-Wert für eine DWR-typische KM-Chemie. Hierfür wurde eine Korrelation mit folgender Form erstellt.

$$pH(c_B, c_{Li}, c_{Zn}) = pH(c_B, c_{Li}) + \Delta pH(c_{Li}, c_{Zn}) \quad (3.6)$$

Der erste Term auf der rechten Seite liefert hierbei den pH-Wert in Abhängigkeit der Bor- und Lithium-Konzentration. Der zweite Term ist ein additiver Beitrag, der die Konzentration von Zink im KM berücksichtigt. Details hierzu siehe in /SEE20a/. Somit ist es möglich, den pH-Wert des KM bei gegebener Kühlmittelchemie in Abhängigkeit von der Zinkkonzentration zu bestimmen.

Zur Bestimmung des ersten Terms werden in Abhängigkeit der Lithiumkonzentration zwei Korrelationen genutzt. Für  $c_{Li} < 0,2 \text{ ppm}$  gilt /SEE22a/:

$$pH_{LowLi} = (((a_1 \cdot c_B)^{0,2} - a_2) \cdot (a_3 \cdot c_{Li} + a_4) \cdot a_5 + a_6)$$

Hierin sind:

Parameter	Wert
$a_1$	3,23273305
$a_2$	6,53524645
$a_3$	15,47960207
$a_4$	4,17792419
$a_5$	-0,09604025
$a_6$	4,34165593

Für  $c_{Li} > 0,3 \text{ ppm}$  gilt /SEE20a/:

$$pH_{EPRI} = \log((a \cdot c_B + b) \cdot (c \cdot c_B / (d \cdot c_{Li}) + e)) \cdot f + g)$$

Hierin sind:

Parameter	Wert
a	0,04303771
b	17,29409800
c	1,61671532
d	0,16112428
e	1,82682066
f	-0,44353317
g	11,92026597

Im Bereich  $0,2 \text{ ppm} < c_{Li} < 0,3 \text{ ppm}$  wird entsprechend /SEE22a/ interpoliert.

Für  $\Delta pH(c_{Li}, c_{Zn})$  gilt:

$$\Delta pH(c_{Li}, c_{Zn}) = 0,4884266 \cdot 0,57135621^{c_{Li}} \cdot c_{Zn}^{0,332919220}$$

Mit dem Modell ist es möglich, den pH-Wert des KM bei gegebener Kühlmittelchemie ( $c_B, c_{Li}$ ) in Abhängigkeit von der Zinkkonzentration zu bestimmen.

Im Experiment konnte beobachtet werden, dass für pH-Werte größer als ca. 7 bis 7,5 keine Freisetzung von Zink aus LGR erfolgt. Dieser Zusammenhang wird in ATHLET derart berücksichtigt, dass im pH-Wert Intervall [7; 7,5] mit steigendem pH-Wert die Zinkfreisetzung linear auf null reduziert wird. Dies gilt gleichermaßen für alle Freisetzungsmodelle, die in den Abschnitten 3.2.3.3.1 bis 3.2.3.3.4 beschrieben sind.

Der Gültigkeitsbereich (3.7) wird angegeben mit:

$$c_B = \{50, \dots, 2500 \text{ ppm}\}$$

$$c_{Li} = \{0, \dots, 10 \text{ ppm}\}$$

$$c_{Zn} = \{0, \dots, 100 \text{ mg/l}\}$$

$$T_{KM} = 25^\circ\text{C}$$

### 3.2.3.3 Modell der Zinkquelle in ATHLET

Als Quellterm für die Freisetzung von Zink werden in ATHLET feuerverzinkte Lichtgitterroste modelliert. Für diese werden in Übereinstimmung mit /SEE20a/ folgende Eigenschaften angenommen:

- Die zinkhaltige Beschichtung besitzt einen dreischichtigen Aufbau mit einer Gesamtdicke von 150  $\mu\text{m}$ . Dicke und Zinkanteil je Schicht betragen:
  - $D_1$ :  $d_{D_1} = 30 \mu\text{m}$ ,  $f_{D_1} = 100 \%$  Zn
  - $D_2$ :  $d_{D_2} = 22.5 \mu\text{m}$ ,  $f_{D_2} = 94 \%$  Zn
  - $D_3$ :  $d_{D_3} = 97.5 \mu\text{m}$ ,  $f_{D_3} = 91 \%$  Zn
- Idealisiert man die Korrosionsfläche  $A_{corr}$  eines LGR als ebene Fläche, ist bei bekannten Schichtdicken und Zinkgehalten das Korrosionsinventar einer Zinkquelle über die Dichte  $\rho_{Zn} = 7.14 \text{ g/cm}^3$  approximierbar.

Die gesamte Zinkmasse ergibt sich zu  $M_{ges} = M_1 + M_2 + M_3$ . Für die Zinkmassen  $M_i$  in den einzelnen Schichten und den Zinkmassenanteil  $F_i$  der einzelnen Schichten gilt:

$$M_i = \frac{d_i}{150} \cdot f_i \cdot \frac{1}{\sum \frac{d_i}{150} \cdot f_i} \cdot M_{ges}$$

$$F_i = \frac{M_i}{M_{ges}}$$

Die Zinkfreisetzungsrates berechnet sich aus

$$r = \frac{dM_{corr}}{dt} = \gamma \cdot Q \cdot A_{corr} = \beta \cdot f(Q) \cdot M_{corr}$$

wobei  $\beta$  einen massebezogenen, schichtspezifischen Freisetzungskoeffizienten darstellt. Die aktuelle Freisetzungsrates berechnet sich mittels des schichtspezifischen Freisetzungskoeffizienten in Abhängigkeit der bereits korrodierten Zinkmasse  $M_{corr}$  zu

$$\beta = \begin{cases} \beta_1 & \text{für } M_{corr}/M_{ges} \leq F_1 \\ \beta_2 & \text{für } M_{corr}/M_{ges} \leq F_1 + F_2 \\ \beta_3 & \text{für } M_{corr}/M_{ges} > F_1 + F_2 \end{cases}$$

Die schichtspezifischen Freisetzungskoeffizienten  $\beta_i$  sind abhängig von der Position des LGR und werden in den nachfolgenden Abschnitten dokumentiert.

### 3.2.3.3.1 Zinkfreisetzung aus LGR im Jet

Für die Zinkfreisetzung im Leckstrahl gilt /SEE20d/:

$$f(Q) = Q_{liquid}$$

Hierbei ist in ATHLET  $Q_{liquid}$  der Flüssigkeitsvolumenstrom, der in ein CV mit LGR eintritt. Dies entspricht näherungsweise dem Leckvolumenstrom im Experiment.

$$\begin{aligned}\beta_1 &= 0.4650260942 \cdot 10^{-2} / m^3 \\ \beta_2 &= 0.3485949113 \cdot 10^{-2} / m^3 \\ \beta_3 &= 0.183186319 \cdot 10^{-3} / m^3\end{aligned}\tag{3.7}$$

Das Freisetzungsmodell im Jet kommt zum Einsatz, wenn das entsprechende LGR im Eingabedatensatz als LGR im Leckstrahl spezifiziert wurde und ein möglicherweise simulierter Gemischspiegel den LGR nicht überdeckt. Wird der LGR vom Gemischspiegel überdeckt, so dass es untergetaucht ist, gilt die Korrelation aus Kapitel 3.2.3.3.2.

### 3.2.3.3.2 Zinkfreisetzung bei untergetauchtem LGR im Jetbereich

Für unterhalb des Jets untergetauchte LGR ist eine eigene Korrelation basierend auf Informationen von HSZG (/SEE21a/) implementiert. Sie stellt eine Überlagerung aus der Zinkfreisetzung in einem ruhenden Fluid und der Zinkfreisetzung im Jetvolumenstrom dar.

$$\begin{aligned}\beta_1 &= \frac{\beta_0}{f(Q)} + 0.172278 \cdot 10^{-2} / m^3 \\ \beta_2 &= \frac{\beta_0}{f(Q)} + 0.172278 \cdot 10^{-2} * 0.7371 / m^3 \\ \beta_3 &= \frac{\beta_0}{f(Q)} + 0.172278 \cdot 10^{-2} * 0.0398 / m^3\end{aligned}\tag{3.8}$$

Wobei  $\beta_0 = 0.157730244 \cdot 10^{-2} / h$  und  $f(Q) = Q_{liquid}$  der in das CV eintretende Wassermassenstrom.

### 3.2.3.3.3 Zink-Freisetzung bei untergetauchtem LGR im ruhenden Medium

Für die Zinkfreisetzung im ruhenden Medium /SEE20e/ gilt  $f(Q) = 1$  sowie:

$$\begin{aligned}\beta_1 &= 0.172278 \cdot 10^{-2}/h \\ \beta_2 &= \beta_1 * 0.7371 \\ \beta_3 &= \beta_1 * 0.0398\end{aligned}\tag{3.9}$$

### 3.2.3.3.4 Zink-Freisetzung bei untergetauchtem LGR im Sumpf

Für die Zinkfreisetzung aus vertikal eingebauten LGR im Sumpf werden in /SEE20f/ zwei leicht unterschiedliche Korrelationen angegeben, die zwischen laminarer Strömung und stagnierender Strömung unterscheiden.

Für stagnierende Strömung gilt:

$$\begin{aligned}\beta_1 &= 0.154645 \cdot 10^{-2}/h \\ \beta_2 &= \beta_1 * 0.7371 \\ \beta_3 &= \beta_1 * 0.0398\end{aligned}\tag{3.10}$$

Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit der für ruhendes Fluid abgeleiteten Korrelation aus Kapitel 3.2.3.3.3.

Für laminare Strömung gilt:

$$\begin{aligned}\beta_1 &= 0.43204182 \cdot 10^{-2}/h \\ \beta_2 &= \beta_1 * 0.7371 \\ \beta_3 &= \beta_1 * 0.0398\end{aligned}\tag{3.11}$$

In ATHLET wird standardmäßig für LGR im Sumpf die Korrelation für laminare Strömung genutzt, es wird also eine zumindest geringfügige Umströmung der Gitter unterstellt. Für die Zinkfreisetzung im Sumpf gilt  $f(Q) = 1$ .

### 3.2.3.4 Modellübersicht und -optionen für die Zinkfreisetzung aus LGR

Zur Simulation der Zinkfreisetzung müssen Zinkquellen im Netzwerk spezifiziert werden. Dies geschieht mittels des neuen Pseudo-Keywords SOLUTE innerhalb der jeweiligen TFO-Definition unter dem Control Word OBJECT. Die erforderlichen Eingabedaten haben folgendes Format und Bedeutung:

```
----- SOLUTE
@      SLEN  ANAMSOL  ITYPSRC  ASOLSRC  MSOLSRC
```

SLEN:        Längenkoordinate innerhalb des TFO

ANAMSOL:    Name des gelösten Stoffes

          = ZINC für Zink

          = ZNB für Zinkborat

          = LITHIUM für Lithium

ITYPSRC:    Typ der Quelle

          =0: innerhalb eines CV, über/unter einem Gemischspiegel (falls vorhanden)

          =1: im Strahlbereich

          =2: im Sumpf

          =-1: Filter/Ionenaustauscher

ASOLSRC:    Gesamte Strukturoberfläche, aus der Zink gelöst werden kann (m<sup>2</sup>)

          wenn ITYPSRC=-1: Effizienz des Filters (zwischen 0 und 1)

MSOLSRC:    Für ITYPSRC=-1: Kapazität des Filters / Ionenaustauschers

Hinweis: Das PW SOLUTE wird mittels des COPY-Kommandos, das für eine vereinfachte Erstellung der Eingabedaten zur Verfügung steht, auf andere TFOs übertragen. Dies dient der vereinfachten Definition von gleichartigen Geometrien.

In folgender Tab. 3.1 sind die derzeit in ATHLET implementierten Eingabeoptionen für die Modellierung von Zinkquellen zusammengefasst:

**Tab. 3.1** Eingabeoptionen und Modelle für Zinkquellen

LGR Position	Inputoption ITYP SRC	Modellimplementierung
Im Jet	1	Gleichung (3.7) nur angewendet oberhalb der Gemischspiegelposition bzw. für $\alpha \geq 0.5$
Im Jet, untergetaucht	1	Gleichung (3.8) nur angewendet unterhalb der Gemischspiegelposition bzw. für $\alpha < 0.5$
Im ruhenden Medium	0	Gleichung (3.9) nur angewendet unterhalb der Gemischspiegelposition bzw. für $\alpha < 0.5$
Im Sumpf	2	Gleichung (3.11) nur angewendet unterhalb der Gemischspiegelposition bzw. für $\alpha < 0.5$

Wichtige Variablen des Zinkfreisetzungmodells aus LGR, die als Ausgabegrößen auch dem Anwender zur Analyse der Simulationsergebnisse zur Verfügung stehen, sind in Tab. 3.2 zusammengestellt.

**Tab. 3.2** Wichtige Variablen des Freisetzungmoduls

Variable	Beschreibung	Einheit Ausgabegröße
DSOL SRC	Verbleibende Dicke der zinkhaltigen LGR-Beschichtung	m
GSOL SRC	Freisetzungsmassenstrom	kg/s
MSOL SRC	Masse in Stoffquelle (LGR)	kg

### 3.2.4 Modellierung von Filtern und Ionenaustauschern

Ein weiterer Quellterm kann in Form eines Partikelfilters oder eines Ionenaustauschers gegeben sein. Beide Komponenten zeichnen aus, dass sie mit einer bestimmten Effizienz einen Stoff aus dem Kühlmittel abtrennen und bei einer bestimmten Masse gefüllt bzw. erschöpft sind. Über die Eingabedaten für Quellterme (siehe Kapitel 3.2.3.4) können Filter und Ionenaustauscher einschließlich der Angaben für deren Abtrenneffizienz  $\varepsilon_{Filter}$  und Kapazität definiert werden.

Die Abtrennungsrate eines Stoffes berechnet sich dann zu

$$G_{Filter} = \varepsilon_{Filter} \cdot G_{S,in}$$

wobei  $G_{S,in}$  den in ein mit Filter bzw. Ionenaustauscher bestücktes CV einströmenden Stoffmassenstrom bezeichnet.

### 3.2.5 Einspeisung über ein FILL-Objekt

ATHLET ermöglicht die Simulation einer Einspeise-Randbedingung über ein sogenanntes FILL-Objekt. Hierüber kann ein Kühlmittelmassenstrom vorgegeben werden. Das Modell wurde für das Kühlmedium Wasser derart erweitert, dass zusätzlich ein im Kühlmittel gelöster Stoff mit eingespeist werden kann. Die Eingabedaten für ein FILL haben folgendes, um ANAMSOL und CGSOL erweitertes Format:

```
C---- FILL
K---- FILLNAME
SGFLOW   SGENTH
SCBOR    AGAS   SCGSOL      !AGAS has to be "DUMMY"
ANAMSOL  CGSOL
```

ANAMSOL: Name des gelösten Stoffes

CGSOL: Konzentration des gelösten Stoffes als GCSM-Signal

### 3.3 Modellentwicklung zur Simulation von Zinkborattransport, -ausfällung und -anlagerung im DWR-Kern unter KMV-Bedingungen (AP 3)

Für die Arbeit in diesem AP wurden insgesamt zwei Teilmodelle von den Projektpartnern entwickelt und von der GRS in ATHLET implementiert. Das Teilmodell „Transport“ beschreibt das Phänomen des Transports von Zinkborat-Partikeln in einem thermohydraulischen Modell. Für Zinkborat-Partikel kommt ähnlich wie für gelöste Zinkionen eine Transportgleichung der Form (3.2) zu Einsatz. Da sich die beiden Gleichungen lediglich hinsichtlich ihrer stoffspezifischen Quellterme unterscheiden, wird auf eine detaillierte Beschreibung des Zinkborat-Transports an dieser Stelle verzichtet und stattdessen auf Kapitel 3.2.1 verwiesen.

Das Teilmodell „Ausfällung und Anlagerung“ beschreibt zwei unterschiedliche Phänomene:

- Die Entstehung bzw. die Abscheidung mobiler Zinkborat-Partikel und
- die An- und Ablagerung der Zinkborate an Strukturen und deren Rückwirkung auf Thermohydraulik und Wärmeübertragung.

Die Modellierung beider Phänomene wird in den nachfolgenden Kapiteln dargestellt.

### **3.3.1 Modellierung des ZnB-Ausfällungsphänomens**

Die Löslichkeit von Zink in Wasser nimmt mit steigender Temperatur ab, was die mit der Temperatur abnehmende Zinksättigungskonzentration verdeutlicht (Abb. 3.1). Bei Überschreiten der Zinksättigungskonzentration können mobile Zinkboratpartikel abgeschieden werden, die dann mit dem Kühlmittel weitertransportiert werden. Dieser Prozess geschieht insbesondere im Reaktorkern, wo das Kühlmittel kontinuierlich aufgeheizt wird. Der Vorgang ist von sicherheitstechnischer Relevanz, da sich die mobilen Partikel an Abstandshaltern im Kern ablagern und in der Folge die Kühlung einzelner Kernkanäle beeinflussen können.

#### **3.3.1.1 Entstehung mobiler ZnB Partikel in der Nähe beheizter Strukturen**

Ein vereinfachtes Modell der Zinkabscheidung in Form mobiler Zinkboratpartikel wäre die spontane Abscheidung, sobald die Zinksättigungskonzentration (siehe Kapitel 3.2.3.1) in einem CV überschritten wird. Ein solches Modell vernachlässigt jedoch die der Reaktionskinetik inhärente zeitliche Verzögerung und hat bei Nachrechnungen von Versuchen der THETIS-Anlage zu unrealistisch hoher und schneller Partikelbildung geführt. Daher wird zur Simulation der Zinkboratabscheidung in ATHLET ausschließlich ein Modell genutzt, das die zeitliche Dynamik der chemischen Reaktion erfasst.

Unter Berücksichtigung der Zinksättigungskonzentration wurde in /SEE22c/ eine Korrelation abgeleitet, die die Entstehung mobiler Zinkborate in der Nähe beheizter Strukturen abbildet. Hierbei kann es bereits zur ZnB-Bildung kommen, auch wenn die Bulktemperatur des Kühlmittels noch unterhalb der Zinksättigungstemperatur liegt. Um den Effekt der beheizten Strukturen zu berücksichtigen, wird vereinfachend von einer „Filmtemperatur“ in der Nähe von Strukturen ausgegangen, die sich als Mittelwert der Strukturoberflächentemperatur und der Kühlmitteltemperatur im Bulk ergibt.

Es wird davon ausgegangen, dass die ZnB-Bildung im Bereich der beheizten Oberfläche erfolgt. Hierauf aufbauend konnte eine Korrelation abgeleitet werden, die eine Entstehungsrate mobiler Zinkborate in Abhängigkeit der Zinkkonzentration im Kühlmittel, der Temperatur und der Strömungsgeschwindigkeit des Kühlmittels sowie der Oberflächentemperatur (d. h. der Hüllrohrtemperatur) beschreibt:

$$\begin{aligned}
 g_{ZnB,Abscheidung}(T_{Film}, c_{Zn}, v_{KM}) \\
 &= 0,004912 \cdot (T_{Film} - T_{Zn,sat}(c_{Zn})) \cdot (0,210115 \cdot c_{Zn} - 6,609674) \cdot v_{KM} \\
 &+ 0,04804
 \end{aligned}$$

Hierbei gilt:

$$T_{Zn,sat}(c_{Zn}) = \frac{\log(\log(0,203937 \cdot c_{Zn}))}{-17,824770 + 0,111723 \cdot c_{Zn}} \cdot 382,698005 + 75,580136$$

$$T_{Film} = \frac{1}{2}(T_{HR} + T_{KM})$$

$$[g_{ZnB,Abscheidung}] = \frac{g}{h}; [c_{Zn}] = \frac{mg}{l}; [v_{KM}] = \frac{cm}{s}$$

Diese Korrelation wurde anhand der 3x3-Stabbündelkonfiguration der THETIS-Versuchsanlage abgeleitet. Um die Anwendbarkeit der Korrelation auf andere Kerngeometrien und größere Bündel zu erweitern, muss die beheizte Bündeloberfläche  $A_{HR}$  (in  $m^2$ ) berücksichtigt werden. Damit folgt als Abscheiderate:

$$\begin{aligned}
 G_{ZnB,Abscheidung}(T_{Film}, c_{Zn}, v_{KM}, A_{HR}) \\
 &= \frac{g_{ZnB,Abscheidung}(T_{Film}, c_{Zn}, v_{KM})}{0,3313945} \cdot A_{HR}
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Die ZnB-Abscheiderate  $G_{ZnB,Abscheidung}$  wird in der Simulation ggf. begrenzt, falls nicht ausreichend Zink in gelöster Form im CV vorhanden ist.

Die Abscheiderate wird auf null gesetzt, falls:

- die Hüllrohrtemperatur kleiner als die Kühlmitteltemperatur ist
- obige Korrelation eine negative Abscheiderate ergibt

Aus der Abscheiderate folgt die in einem Zeitschritt produzierte ZnB-Masse:

$$\Delta m_{ZnB} = G_{ZnB, Abscheidung} \cdot \Delta t$$

### 3.3.1.2 Bestimmung der abgeschiedenen Zinkmasse

Die Abscheiderate in Form eines Senkenterms der Bilanzgleichung für Zink beschreibt die Masse Zink pro Zeiteinheit, die im Kühlmittel in Form mobiler ZnB-Partikel ausfällt. Zur Bestimmung der Masse an Zink müssen Zink- und Boranteil der gebildeten ZnB-Partikel berücksichtigt werden. Die Stöchiometrie der gebildeten, mobilen Zinkborate hängt von der Kühlmitteltemperatur zum Zeitpunkt der Abscheidung ab. Für den Stöchiometriefaktor wurde folgende Korrelation bestimmt /HAR20a/:

$$f_{ZnB} = f_{ZnB}(T_{KM}) = \frac{\Delta m_{ZnB}}{\Delta m_{Zn}}$$

$$f_{ZnB}(T_{KM}) = 0,000739T_{KM}^2 + 0,1289T_{KM} + 7,24$$

wobei  $[T_{KM}] = ^\circ C$ .

Der Stöchiometriefaktor gilt ebenfalls für die an Hüllrohren angelagerten Zinkborate.

Die Masse der in Form löslicher Zinkborate abgeschiedenen Zinkionen berechnet sich somit zu:

$$\Delta m_{Zn} = \frac{\Delta m_{ZnB}}{f_{ZnB}(T_{KM})}$$

### 3.3.1.3 Implementierung

Um die Simulation der Zinkabscheidung in Form von mobilen Zinkborat-Partikeln in ATHLET zu aktivieren, muss Zinkborat als eine der zu simulierenden Transportgrößen im Eingabedatensatz spezifiziert werden (zum Eingabedatenformat siehe Kapitel 3.2.1.2). Die Bilanzierung des im Kühlmittel gelösten Zinks und der produzierten mobilen Zinkborate muss auf Ebene der Kontrollvolumen im TFD-Modul von ATHLET erfolgen. Zur Bestimmung der Abscheiderate sind Temperatur und Oberfläche der an ein CV gekoppelten Struktur erforderlich.

Die Hüllrohrtemperatur wie auch die gesamte Hüllrohroberfläche sind jedoch Größen des HECU-Moduls. Strukturen werden in ATHLET durch sog. Heat Conduction Objects (HCO) repräsentiert, die mittels sog. HCV diskretisiert werden. Es ist zu beachten, dass ein CV mit mehreren HCV gekoppelt sein kann, die wiederum zu einem oder auch zu mehreren HCO (d. h. Brennstäben) gehören können. Jedes der gekoppelten HCV weist eine eigene Oberflächentemperatur auf und besitzt eine spezifische Oberfläche. Zur Bestimmung der Abscheiderate innerhalb eines CV wird in Gleichung (3.12) die Gesamtfläche aller gekoppelten HCV und deren mittlere Oberflächentemperatur herangezogen.

### 3.3.2 Ablagerung mobiler Zinkborate an Abstandshaltern

Für die Simulation der Ablagerung mobiler ZnB-Partikel an Abstandshaltern wurde auf dem bestehenden Spacer-Modell von ATHLET aufgesetzt. Im bestehenden Modell war die Position der Abstandshalter (Eingabegröße) lediglich im HECU-Modul bekannt. Das Modell ermöglichte bisher die Berücksichtigung des Einflusses der Abstandshalter auf den Wärmeübergang. Da das Zinkboratmodell eine Erweiterung des TFD-Moduls von ATHLET darstellt, musste die Information der Abstandshalterposition(en) von HECU an TFD übergeben werden. Hierzu werden die Leitungen (also die Verbindungen zwischen benachbarten CVs), die einen Abstandshalter enthalten, mit einer neuen Variablen ( $J_{SPACER}=1$ ) gekennzeichnet. Für die derart gekennzeichneten Leitungen kommt während einer Simulation eine Korrelation zur Ablagerung mobiler ZnB-Partikel zum Tragen, die von HSZG vorgeschlagen wurde /SEE22b/. Der Ablagerungsanteil der pro Zeiteinheit durch den Abstandshalter strömenden ZnB-Masse berechnet sich hierbei zu:

$$\alpha = -0,001930 \cdot c_{Zn} + 0,142361 \quad (3.13)$$

Hiermit ergibt sich die an einem Abstandshalter in einem Zeitschritt  $\Delta t$  abgelagerte ZnB-Masse zu:

$$\Delta M_{AH,j} = \alpha \cdot G_{ZnB,j} \cdot \Delta t$$

Der ZnB-Massenstrom  $G_{ZnB,j}$  durch die Spacerleitung  $j$  ergibt sich mittels der ZnB-Konzentration im stromaufwärts gelegenen CV zu:

$$G_{ZnB,j} = c_{ZnB} \cdot G_{L,j} = c_{ZnB,j}^{up} \cdot G_{L,j}$$

Die pro Zeitschritt an einem Abstandshalter angelagerte ZnB-Masse wird dem im Kühlmittel transportierten Zinkborat entzogen.

### 3.3.2.1 Modellierung von Strömungsdruckverlusten

Das Spacer-Modell von ATHLET erwartet zwingend, dass der Anwender für die Positionen der Abstandshalter Formverlustbeiwerte  $\zeta_{AH}$  im Eingabedatensatz bereitstellt. Durch Ablagerung von ZnB-Partikeln an den Abstandshaltern erhöhen sich die Formverluste. Da bisher noch keine geeignete Korrelation bereitsteht, um diesen Effekt realistisch in der Simulation zu berücksichtigen, wurde ein einfaches Modell implementiert, das den Einfluss der Ablagerung auf die Strömungsdruckverluste zumindest qualitativ berücksichtigt. Die Erhöhung des Druckverlusts wird durch einen Faktor  $f$  abgebildet:

$$\zeta_{Ablagerung} = f_j \cdot \zeta_{AH}$$

$$f_j = 10^{(1-P_j) \cdot 5}$$

$P_j$  bezeichnet hierbei die Porosität der Leitung  $j$ . Dies entspricht dem Anteil der ursprünglichen Strömungsfläche innerhalb des Abstandshalters, der nach Ablagerung für die Strömung noch verfügbar ist. Zur Bestimmung der Porosität muss neben der ursprünglichen Strömungsfläche im Abstandshalter (Eingabegröße) auch der Grad der Verblockung in Abhängigkeit der mit der Gleichung (3.13) berechneten abgelagerten Masse  $M_{AH}$  bekannt sein. Da für Letztere bisher keine geeignete empirische Korrelation vorliegt, wurde vereinfachend folgender Zusammenhang unterstellt:

$$P_j = (1 - M_{AH,j}) / 100$$

### 3.3.2.2 Blockade von Abstandshaltern

Zinkboratablagerungen haben eine Verengung von Strömungswegen zur Folge und können sogar zum Verschluss (Blockade) von Strömungswegen führen. Ablagerungen an Abstandshaltern führen zu Blockaden der Strömung in axialer Richtung. In ATHLET äußert sich das Eintreten einer Blockade durch die fortschreitende Verringerung der freien Strömungsquerschnittsfläche innerhalb einer Leitung. Ist die Blockade vollständig, so findet in dem betroffenen Gebiet keine Strömung mehr statt. Rein technisch bedeutet dies, dass die zu der betreffenden Leitung gehörigen Modellgleichungen nicht mehr gelöst und abgeschaltet werden müssen.

Ein derartiger Eingriff in die Simulation stellt immer eine Unstetigkeit dar (die Strömung reduziert sich schlagartig von einem endlichen, wenn auch geringen Wert auf null), die durch geeignete technische Maßnahmen möglichst glatt ablaufen sollte, um numerischen Schwierigkeiten vorzubeugen.

Die aktuelle Modellierung in ATHLET unterstellt, dass ein vollständiger Verschluss eines Abstandshalters vorliegt, sobald die Porosität  $P_j$  aufgrund der abgelagerten ZnB-Masse unter 5 % gesunken ist. Durch die kontinuierliche Erhöhung des Formverlustbeiwerts  $\zeta_{Ablagerung}$  mit zunehmender Ablagerung wird eine Verringerung der Strömung im Bereich des Abstandshalters bewirkt, die für einen glatten Übergang zum blockierten Zustand förderlich ist.

### 3.3.2.3 Implementierung

Das Spacer-Modell von ATHLET erwartet die Eingabe der Abstandshalterpositionen *zwischen* unterer und oberer Kernplatte. Die Positionen der beiden Platten werden automatisch an Beginn und Ende des entsprechenden HCO erzeugt. Die Ablagerung wird sowohl für die eingelesenen Abstandshalter wie auch für die untere und obere Kernplatte berechnet. Die Ablagerung und die damit einhergehende Erhöhung der Strömungsdruckverluste wird für beide Strömungsrichtungen gleichermaßen simuliert. Die an einem Abstandshalter angelagerte ZnB-Masse ist über die Ausgabegröße `WSPACER` verfügbar.

Ein Abstandshalter ist immer einer Leitung zugeordnet. Durch Ablagerung von mobilen ZnB-Partikeln am Abstandshalter verändert sich die Geometrie des Strömungsweges sowie der Druckverlust (siehe auch Kapitel 3.3.2.1). Dies betrifft folgende geometrische Größen, die zu Beginn eines jeden Zeitschritts entsprechend der Ablagerungsmenge und Porosität am Ende des vorangegangenen Zeitschritts neu berechnet werden:

- Linke, rechte und minimale freie Strömungsfläche der Leitung mit Abstandshalter
- Hydraulischer Durchmesser der Leitung
- Geometriefaktor der Leitung (enthält Strömungsfläche und hydraulischen Durchmesser) zur Berechnung der Wandreibung
- Sog. Trägheitsterm als Beitrag zur Impulsgleichung

Die genannten Größen werden mittels der aktualisierten Leitungsporosität  $P_j$  geeignet berechnet.

Kommt es zu einer vollständigen Blockade einer Leitung mit Abstandshalter, so werden folgende technische Maßnahmen ausgeführt:

- Abschalten der Leitung, d. h. die Leitungsgrößen werden nicht weiter durch Zeitintegration bestimmt
- Aktualisierung der Jacobi-Matrix, da sich die Abhängigkeiten zwischen den Lösungsvariablen (durch Wegfall einzelner Gleichungen) signifikant verändert
- Setzen physikalischer Größen der Leitung auf plausible Werte, wie z. B. die Phasengeschwindigkeiten und Massenströme gleich Null
- Print-Ausgabe mit Information über den Verschluss des Strömungsweges

### 3.3.3 Modellierung der ZnB-Anlagerung an Hüllrohren

Die Anlagerung von Zinkborat auf dem Hüllrohr beeinflusst den Wärmeübergang zum Fluid und kann zur Verblockung von Strömungswegen führen. Beide Phänomene lassen sich über die Schichtdicke des auf dem Hüllrohr angelagerten ZnB beschreiben.

#### 3.3.3.1 Korrelation für das Schichtwachstum

Die Anlagerung am Hüllrohr wird in Abhängigkeit der Zn-Konzentration im Kühlmittel und der Hüllrohrtemperatur berechnet. Experimentell können zwei Phasen der Anlagerung unterschieden werden: a) die Keimschichtbildung und b) das Schichtwachstum, wobei für Letzteres die Keimschicht als Kristallisationskeime dient. Beide Phasen werden in /SEE22d/ durch zwei linearisierte Gleichungen angenähert. Phase a endet, wenn eine Keimschicht der Dicke 32,9  $\mu\text{m}$  aufgewachsen ist. Das Wachstum während dieser Phase wird mittels der sog. Keimbildungszeit  $t_{kb}$  bestimmt, die der experimentell verstrichenen Zeit  $t_{kb}$  bis zum Abschluss der Keimschichtbildung entspricht. Es gilt:

$$t_{kb} = \beta \cdot (T_{HR} - 100^\circ\text{C}) \quad (3.14)$$

mit  $\beta = -0,3339282 - 1295073000/c_{Zn}^{5,874835}$  und  $[\beta] = \frac{\text{h}}{^\circ\text{C}}$ .

Für die Anlagerungsrate in Form einer Schichtwachstumsrate folgt hiermit:

$$\frac{\Delta d_{ZnB,keim}}{\Delta t} = \frac{32,9\mu m}{t_{kb}} \quad (3.15)$$

Die Zeit  $t_{kb}$  der Keimschichtbildung wurde aus experimentellen Daten auf Basis einer eingeschränkten Zahl an Experimenten bestimmt. Für Hüllrohrtemperaturen größer 100 °C liefert die Korrelation negative Zeiten. Daher wurde in der Implementierung  $T_{surf}$  auf maximal 99 °C begrenzt. Damit überhaupt eine Anlagerung berechnet wird, muss außerdem für die Zinkkonzentration gelten (da sonst eine Division durch Null erfolgen könnte):  $c_{Zn} > 10^{-5} \text{ mg/l}$ . Für kleinere Zinkkonzentrationen wird keine Anlagerung simuliert.

Nach Beendigung der Keimschichtbildung und bis Erreichen der maximal möglichen Schichtdicke von 1,775 mm kommt es zum ZnB-Schichtwachstum. Hierfür liefert /SEE22d/ folgende Korrelation:

$$t_{sw} = (21550 - 269 \cdot c_{Zn}) / (T_{HR} - 63,44^\circ C) \quad (3.16)$$

$$\frac{\Delta d_{ZnB,schicht}}{\Delta t} = \frac{1,7mm}{t_{sw}} \quad (3.17)$$

Um hierin die Division durch Null zu vermeiden, wird die Zinkkonzentration auf maximal 80 mg/l und die Oberflächentemperatur auf minimal 63,5 °C beschränkt. Unterhalb von 63,5 °C findet keine weitere Anlagerung (auch keine weitere Keimschichtbildung) mehr statt.

### 3.3.3.2 Anlagerungspotential und Anlagerungsrate

Wichtig zur Bestimmung des Schichtwachstums auf dem Hüllrohr ist die Oberflächentemperatur (siehe Gleichungen (3.16) und (3.17)). Für die Bestimmung der Anlagerungsrate ist außerdem die Gesamtoberfläche der Hüllrohre  $A_{HR}$  von Bedeutung, die wiederum von der Anzahl der Brennstäbe abhängt.

Beide Größen, Oberflächentemperatur sowie Hüllrohrgeometrie bzw. -anzahl, sind in ATHLET im HECU-Modul bekannt. Daher erfolgt die Berechnung des Schichtwachstums zunächst einmal in HECU.

Da sich die Hüllrohrtemperatur für einzelne Brennstäbe bzw. Brennstabbündel unterscheiden kann, müssen individuelle Schichtwachstumsraten zur Anwendung kommen. Brennstäbe mit unterschiedlichen Eigenschaften werden in ATHLET durch unterschiedliche HCO dargestellt, die jeweils mittels mehrerer HCV nodalisiert werden, sodass sich als potentielle Anlagerungsrate pro HCV ergibt:

$$G_{pot,HCV} = \frac{\Delta d_{ZnB,HCV}}{\Delta t} \cdot A_{HR,HCV} \cdot \rho_{ZnB}$$

$A_{HR,HCV}$  berücksichtigt hierbei die Gesamtanzahl der Brennstäbe bzw. Brennstabbündel, die durch ein HCV (bzw. HCO) repräsentiert werden. Die experimentell bestimmte mittlere Dichte von Zinkborat beträgt:

$$\rho_{ZnB} = 0,42g/cm^3 \quad (3.18)$$

Die Anlagerungsrate wird in HECU zunächst nur in Form eines Anlagerungspotentials berechnet. Anschließend wird über alle HCV, die mit einem CV gekoppelt sind, iteriert und die gesamte Anlagerungsrate, ebenfalls als Anlagerungspotential, summiert. Somit folgt als mögliche Massenlagerungsrate für ein CV, summiert über alle gekoppelten HCV  $i$ :

$$G_{pot,Anlagerung} = \sum_i G_{pot,i} = \sum_i \frac{\Delta d_{ZnB,i}}{\Delta t} \cdot A_{HR,i} \cdot \rho_{ZnB} \quad (3.19)$$

Wieviel Masse an ZNB sich letztlich innerhalb eines Zeitschritts tatsächlich anlagert, wird anschließend während der Zeitschrittintegration im TFD-Modul bestimmt. Hierbei wird berücksichtigt, wieviel Masse gelöstes Zink im CV vorhanden ist und sich somit auch nur anlagern kann. Die mögliche Anlagerungsrate wird entsprechend auf eine tatsächliche Anlagerungsrate  $G_{Anlagerung}$  reduziert, so dass für die in einem CV in einem Zeitschritt angelagerte Masse folgt:

$$\Delta M_{Anlagerung} = G_{Anlagerung} \cdot \Delta t$$

Mit Kenntnis der tatsächlich in einem CV angelagerten Masse und des HCV-spezifischen Anlagerungspotentials lässt sich wiederum die pro HCV individuell angelagerte Masse berechnen:

$$\Delta M_{Anlagerung, HCV} = G_{pot, HCV} \cdot \frac{\Delta M_{Anlagerung}}{G_{pot, Anlagerung}}$$

Als Schichtwachstum für ein HCV folgt final:

$$\Delta d_{ZnB, HCV} = \frac{\Delta M_{Anlagerung, HCV}}{A_{HR, HCV} \cdot \rho_{ZnB}}$$

### 3.3.3.3 Zeitlich veränderliche Geometrie des Strömungskanals

Über die in einem CV insgesamt angelagerte ZnB-Masse  $M_{Anlagerung}$  lässt sich mittels der ZnB-Dichte das durch ZnB eingenommene Volumen bestimmen:

$$V_{Anlagerung} = M_{Anlagerung} \cdot \rho_{ZnB}$$

Für die Porosität eines CV folgt somit:

$$P_{CV} = \frac{V_{CV} - V_{Anlagerung}}{V_{CV}}$$

Mittels der zeitlich veränderlichen Porosität lassen sich die aktuellen geometrischen Größen eines CV wie Strömungsquerschnittsfläche und hydraulischer Durchmesser berechnen. Diese haben einen unmittelbaren Einfluss auf die berechnete Wandreibung.

Kommt es zu einem Verschluss eines CV, d. h. die Porosität nähert sich dem Wert Null, so sollte auch die Strömung durch dieses CV zum Erliegen kommen. Hierfür ist im Programm bereits eine Implementierung vorbereitet, die jedoch bisher nur eingeschränkt überprüft wurde bzw. mangels experimenteller Ergebnisse nicht verifiziert werden konnte. Da die Strömung mittels der Impulsgleichung für die mit einem CV verknüpften Leitungen berechnet wird, muss sich auch die Porosität der Leitungen dem Wert Null nähern.

Dies wird sichergestellt, indem die Porosität einer Leitung die Porosität eines angrenzenden CV nicht überschreiten darf und ggf. reduziert wird:

$$P_j = \min (P_j, P_{CV})$$

Die Verringerung der Porosität der Leitung führt dann letztlich zur Blockade des Strömungsweges mit den in Kapitel 3.3.2.2 und 3.3.2.3 erläuterten Maßnahmen.

### 3.3.3.4 Berechnung des Wärmeübergangs

Aufgrund des auf dem Hüllrohr angelagerten Zink-Borat verändert sich der Wärmewiderstand der Struktur. Die Wärmeleitfähigkeit für angelagertes Zink-Borat beträgt nach /HAR22/:

$$\lambda_{Anlagerung,ZnB} = 4,2 \frac{W}{mK}$$

Die Wärmeleitfähigkeit des angelagerten ZnB sowie dessen Schichtdicke wird bei der Bestimmung des Wärmeübergangs zwischen der äußersten Schicht der Hüllrohrstruktur (Materialdicke  $\delta$ ) und dem Fluid wie folgt berücksichtigt:

$$\dot{Q} = \frac{A_{HR}}{\lambda_{tot}} (T_{HR} - T_{KM}) = \frac{A_{HR}}{\frac{1}{htc} + \frac{\delta/2}{\lambda_{HR}} + \sum \frac{D_{Anlagerung,i}}{\lambda_{Anlagerung,i}}} (T_{HR} - T_{KM})$$

Während der transienten Simulation ändert sich der Wärmewiderstand dynamisch. Die Änderung der Geometrie der einzelnen HCV aufgrund der angelagerten ZnB-Schicht wird bei der Berechnung der Wärmekapazität der Hüllrohrstruktur vereinfachend nicht berücksichtigt, da die ZnB-Schicht (aufgrund ihrer Porosität) eine nur geringe Wärmekapazität aufweist.

## 3.4 Übersicht über die Ausgabegrößen des Zinkborat-Moduls

Wichtige Variablen des Zinkborat-Moduls von ATHLET, die als Ausgabegrößen auch dem Anwender zur Analyse der Simulationsergebnisse zur Verfügung stehen, sind in Tab. 3.3 zusammengestellt.

**Tab. 3.3** Wichtige Variablen des Zinkborat-Moduls

Variable	Beschreibung	Formelzeichen	Einheit Ausgabegröße	Einheit programmintern
CSOLJ	Transportierte massenspezifische Konzentration	$c_{S,j}$	ppm = mg/kg	ppm
CSOLMDIS	Max. Massenkonzentration für die Freisetzung	$c_{max}$	ppm	ppm
CSOLUT	Massenspezifische Konzentration (Massenanteil)	$c_S$	ppm = mg/kg	ppm
CSOLUTM	Sättigungskonzentration	$c_{sat}$	ppm	ppm
DSADEP	Dicke der angelagerten Schicht pro HCV	$d_{HCV}$	$10^{-6}m$	$10^{-6}m$
GSOLUT	Transportierte Masse in einer Leitung	$G_S$	kg/s	mg/s
POROS I	Porosität CV	$P_{CV}$	-	-
POROS J	Porosität Leitung	$P_j$	-	-
RSADEP	Dichte des angelagerten Materials	$\rho$	mg/m <sup>3</sup>	mg/m <sup>3</sup>
WSAPOTL/R	Anlagerungspotential einer linken/rechten HCV-Oberfläche	$G_{pot,HCV}$	mg/s	mg/s
WSAPOTO	Anlagerungspotential eines CV	$G_{pot,Anlagerung}$	mg/s	mg/s
WSOLUTA	Abgelagerte Masse in einem CV	$M_A$	kg	mg
WSOLUT	Gesamte Masse in einem CV	$M_S$	kg	mg
WSPACER	Abgelagerte Masse an einem Abstandshalter	$M_{AH}$	kg	mg

### 3.5 Maßnahmen zur Störfallfolgenbehandlung im Sumpfumwälzbetrieb (AP 4)

Zur Unterstützung der Arbeit des Projektpartners TUD bei der experimentellen Studie zum Einsatz von Ionenaustauschern für den Zinkentzug (Abtrennung) aus dem KM unter KMV-Bedingungen wurde eine technische Notiz /PAL20/ erstellt. Das Dokument beschreibt im Wesentlichen den Aufbau des Kühlmittelreinigungssystems der KWU-Anlagen sowie die Charakteristika der Hauptkomponenten und vor allem der Mischbettfilter. Eine Beschreibung des Betriebs des Systems bei verschiedenen Anlagenzuständen ist enthalten und die Verbindung zur Not- und Nachkühlsystem durch das Volumenregelsystem ist erläutert.

Diese letzte Information ist zur Bestimmung der Pfade bei einer möglichen Umschaltung des Volumen- und Kühlmittelreinigungssystems nach Eintritt eines KMV-Störfalles zur Zinkentfernung wichtig. Somit können die Randbedingungen (u. a. Massenstrom und Temperatur des Kühlmittels) für die Experimente in Labormaßstab ermittelt und festgelegt werden.

### **3.6 Validierung des in ATHLET integrierten Moduls „Zinkborat“ (AP 5)**

#### **3.6.1 Entwicklung von thermohydraulischen Modellen der Versuchsanlagen mit ATHLET**

Für die Nachrechnung der Versuche zum Zweck der Validierung des entwickelten ATHLET-Moduls „Zinkborat“ stellt die Entwicklung von Datensätzen der Versuchsanlagen einen wesentlichen Schritt dar.

Im Rahmen dieses AP wurden die thermohydraulischen Modelle von folgenden Versuchsanlagen mit ATHLET erstellt:

- Integralversuchsanlage „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW)
- Halbtechnische Versuchsanlage THETIS (“Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation”)

##### **3.6.1.1 „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW)**

Die Integralversuchsanlage „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW) wurde ursprünglich von der Hochschule Zittau/Görlitz HSZG zur Untersuchung des Strömungsverhaltens von nach Kühlmittelverluststörfällen freigesetztem Isolationsmaterial und zur Validierung der in diesem Zusammenhang entwickelten Modellierung für die Phase des Sumpfumwälzbetriebes errichtet. Im Rahmen des abgeschlossenen Projektes BMWi 1501491 wurden anhand der ZSW Untersuchungen zum Freisetzungverhalten von Zink aus Lichtgitterrosten (LGR) unter dem Einfluss der Borsäuredurchströmung durchgeführt.

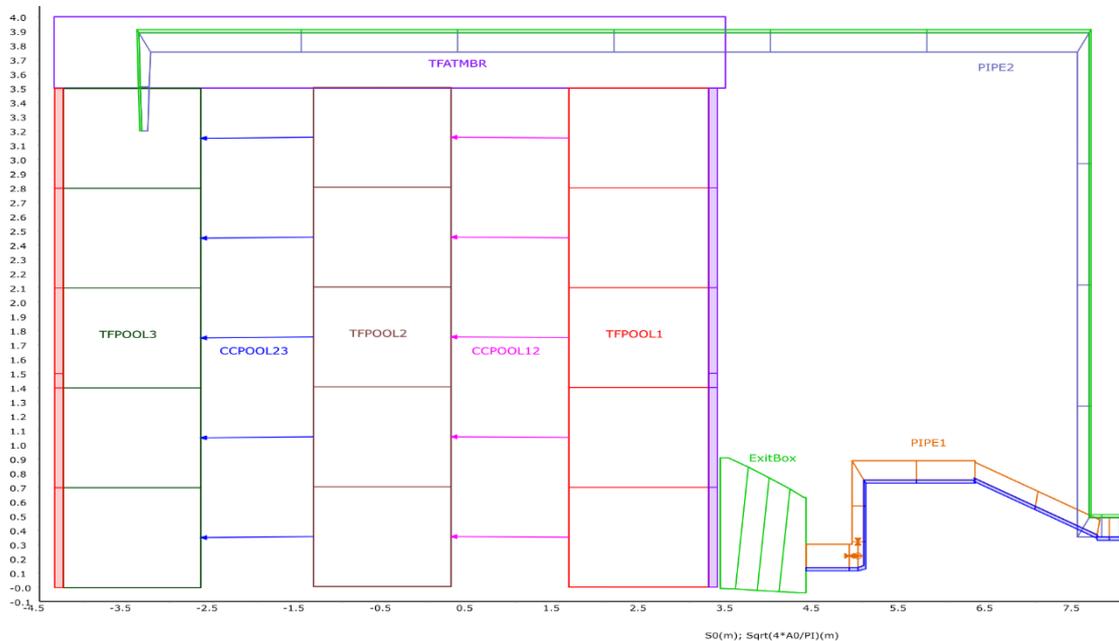
Für den Aufbau des Modells wurden Informationen aus einem Dokument vom Projektpartner HSZG /ALT20/ gewonnen. Das Dokument enthält die wesentlichen Daten der Versuchsanlage ZSW, u. a. die Geometrie der vorhandenen Komponenten, eine Abmessung der eingesetzten Rohrleitungen, die schematische Darstellung der Anordnung von Downstream-Komponenten an die ZSW sowie Informationen über die Heizkörper.

Das thermohydraulische Modell der ZSW-Versuchsanlage ist in Abb. 3.2 dargestellt. Die Thermofluid-Objekte (TFO) „POOL1“, „POOL2“ und „POOL3“ bilden die Wanne ab. Die Modellierung mit 3 Objekten verbunden mit den sog. Cross-Connection-Objekten („POOL-CC12“ und „POOL-CC23“) erlauben die Berechnung von Zirkulationsströmungen in der Wanne.

Das TFO namens „ExitBox“ stellt das Austrittsvolumen der Wanne dar, in dem die Heizpatronen eingebaut sind. Um den Energieeintrag im System zu berücksichtigen, wurde eine Wärmequelle direkt im TFO implementiert. Die Steuerung der Wärmequelle im Datensatz erfolgt durch eine Logik, welche mit Hilfe des ATHLET-Moduls GCSM entwickelt wurde.

Das Objekt „PIPE1“ stellt die Verbindung zum Filterbehälter dar. In diesem TFO wurde die Umwälzpumpe modelliert. Im Datensatz wurde das einfachste Pumpenmodell von ATHLET verwendet, bei welchem die Pumpen-Förderhöhe als Input eingegeben wird und während der Transienten via GCSM Signal gesteuert werden kann.

Das Objekt „PIPE2“ stellt die Verbindung zurück zur Wanne dar. Das TFO „ATM\_BRA“ ist ein sog. „Time-Dependent-Volume“ und repräsentiert das Atmosphärenvolumen. Die Luft wurde im Objekt als nicht-kondensierbares Gas mit einem Druck von 1 bar berücksichtigt.



**Abb. 3.2** ATHLET Nodalisierungsbild der ZSW-Versuchsanlage

### 3.6.1.2 Halbtechnische Versuchsanlage THETIS

An der Hochschule Zittau/Görlitz wurde für experimentellen Untersuchungen ein Dual 3x3 Heizstabmodul namens THETIS ("Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation") als Kernsimulator im halbtechnischen Maßstab aufgebaut, um Daten und Korrelationen für die Modellierung von ZnB-Abscheidungen im Kühlmittel (KM), Anlagerung an Hüllrohren (HR) und Ablagerung an den Abstandshaltern (AH) bereitzustellen und deren thermohydraulische Auswirkungen auf das Strömungsverhalten zu analysieren. Eine ausführliche Beschreibung der Versuchsanlage ist in /ALT22/ zu finden.

Ein ATHLET-Modell für die Versuchsanlage THETIS wurde auf Basis der seitens der Projektpartner (HSZG) erstellten Kurzdokumentation der Anlage entwickelt.

Abb. 3.3 zeigt die Nodalisierung des entwickelten ATHLET-Modells von THETIS. Das thermohydraulische Modell wurde mit dem GRS-Tool ATM erstellt (siehe Darstellung in Abb. 3.5). Jedes Bauteil (Rohrleitungsabschnitt, „RLA“) des Rohrleitungssystems wurde mit einem oder mehreren Thermofluidodynamischen-Objekten (TFOs) dargestellt. Parameter wie der hydraulische Durchmesser und die Druckverlustbeiwerte wurden nach Korrelationen aus der verfügbaren Literatur (/IDE60/) berechnet. Zur Implementierung der Wärmezufuhr im Vorwärmer (TFO „TFRLA0022“, siehe Abb. 3.4) wurde eine Wärmequelle im Rohrleitungsabschnitt 2 eingesetzt.

Die Doppel-3x3 Heizstäbe sind als Heat Conduction Objects (HCOs) im Rohrleitungsabschnitt 11 (TFO „TFD3x3A111“ und „TFD3x3B111“) implementiert worden.



Des Weiteren wurden leittechnische Modelle für die Regelung bzw. Steuerung der wesentlichen Komponenten von THETIS entwickelt. Die leittechnischen Modelle wurden mit dem GRS-Tool AGM generiert. Die Modelle für die Steuerung folgender Komponenten bzw. Parameter wurden erstellt:

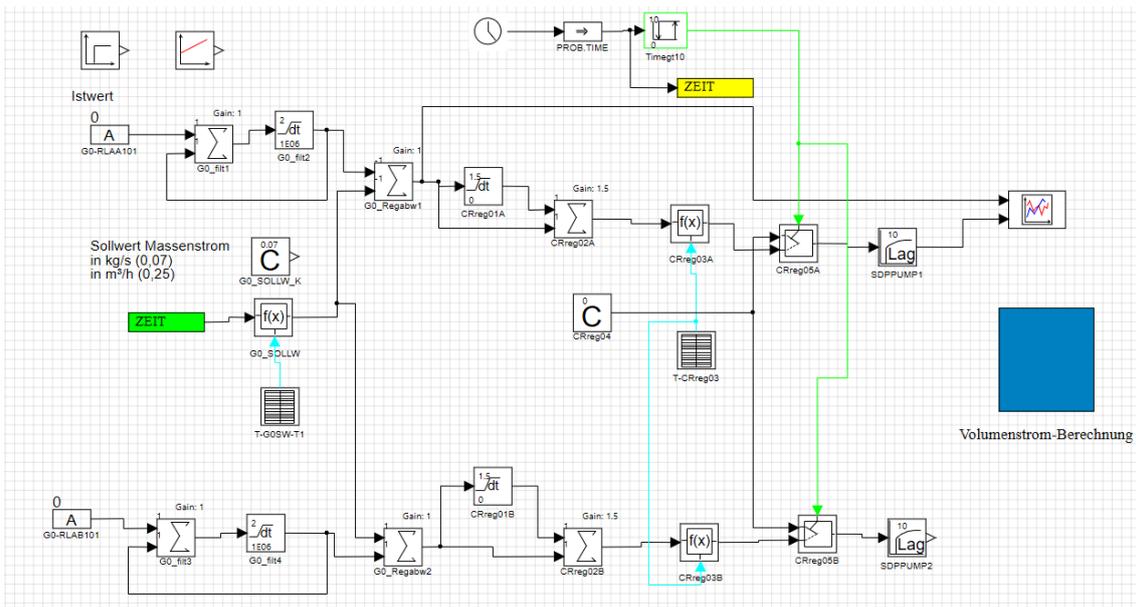
- Förderhöhe der Pumpen 1 (P01) und 2 (P02);
- Elektrische Stableistung für beide 3x3 Heizstabbündel (Stabpakete A und B);
- Eintrittstemperatur von Stabpaketen A und B mittels eines Vorwärmers (ZÜ01);
- Kühlmitteltemperatur in der Zittauer Strömungswanne ZSW durch Steuerung der Kühler-Komponente.

Für die Abbildung der leittechnischen Modelle wurden einfache Regelketten mit den in GCSM vorhandenen Bausteinen entwickelt. Abweichungen der wesentlichen Parameter zu den vorgegebenen Sollwerten wurden mittels eines stetigen kontinuierlichen PI-Reglers gesteuert. Verstärkungsfaktoren und Zeitkonstanten bzw. Nachstellzeiten der Regler wurden so ausgewählt, um eine stabile Antwort des Systems auf Variation der Regelgrößen zu gewährleisten.

Um die wesentlichen Größen zu steuern, wurden spezifische Prozessvariablen im Eingabedatensatz definiert. Die Position der verschiedenen Sensoren zur Messung der wesentlichen thermohydraulischen Parameter wurde aus /ALT22/ abgeleitet.

Abb. 3.6 zeigt beispielsweise die mit dem AGM-Tool entwickelte Regelkette für die automatische Steuerung der Pumpe 1 in ATHLET.

Der Sollwert kann entweder konstant gehalten oder mit Hilfe eines Funktionsgenerator-Bausteins in Abhängigkeit von der Zeit variiert werden. Die abgebildete Regelabweichung geht in einen PI-Regler. Die Antwort des Reglers wird weiter in einen Funktionsgenerator gegeben, welcher die Pumpen-Förderhöhe abhängig vom Regleraustrittssignal dynamisch steuert.



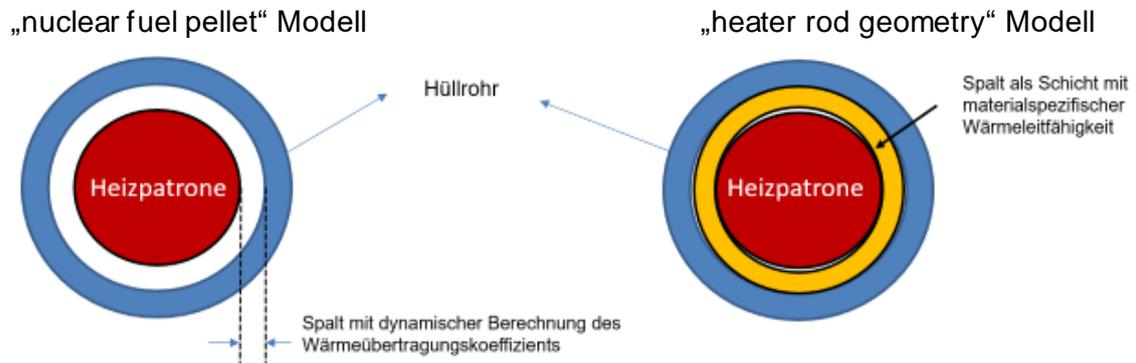
**Abb. 3.6** Regelkreis im AGM-Tool für die Regelung der Pumpen 1 und 2

Um die von ATHLET berechneten Werte der Parameter im Bereich der beheizten Teilbündel in THETIS zu prüfen, wurde ein Modell des 3x3 Heizstabpakets mit dem Unterkanalkode COBRA-TF (CTF Version 4.2) erstellt. Im Gegensatz zu den inhärent eindimensionalen thermohydraulischen Modellen in ATHLET löst COBRA-TF die dreidimensionalen 2-Fluid-3-Feldgleichungen für zweiphasige Strömungen und kann damit z. B. auch für die akkurate Simulation von Querströmungen in den Stabbündeln und die Beschreibung von Vermischungsprozessen eingesetzt werden.

Nur die Versuchsstrecke A wurde nachgebildet (siehe Abb. 3.8). Das Modell besteht aus 16 thermohydraulischen Unterkanälen in radialer Richtung mit Querverbindungen (siehe Nodalisdarstellung in Abb. 3.9). Die gesamte Länge des 3x3 Heizstabpakets wurde in axialer Richtung mit 30 Knoten nodalisiert. Für die Simulation der 9 Heizstäbe wurden zum Zweck der Berechnung des Temperaturprofils innerhalb des Heizstabs zwei unterschiedliche Modellierungsansätze berücksichtigt, die angewendet werden können (siehe Abb. 3.7):

- Das sog. „nuclear fuel pellet“ Modell, welches die Simulation des mit Gas gefüllten Spalts zwischen Pellet und Hüllrohr erlaubt; das Modell erlaubt die dynamische Berechnung des Wärmeübertragungskoeffizienten im Spalt des Brennstabs.
- Das sog. „heater rod geometry“ Modell, bei dem der Spalt als Struktur mit einer materialspezifischen Wärmeleitfähigkeit definiert wird; die Wärmeleitfähigkeit ist tabellarisch als Funktion der Temperatur vorzugeben.

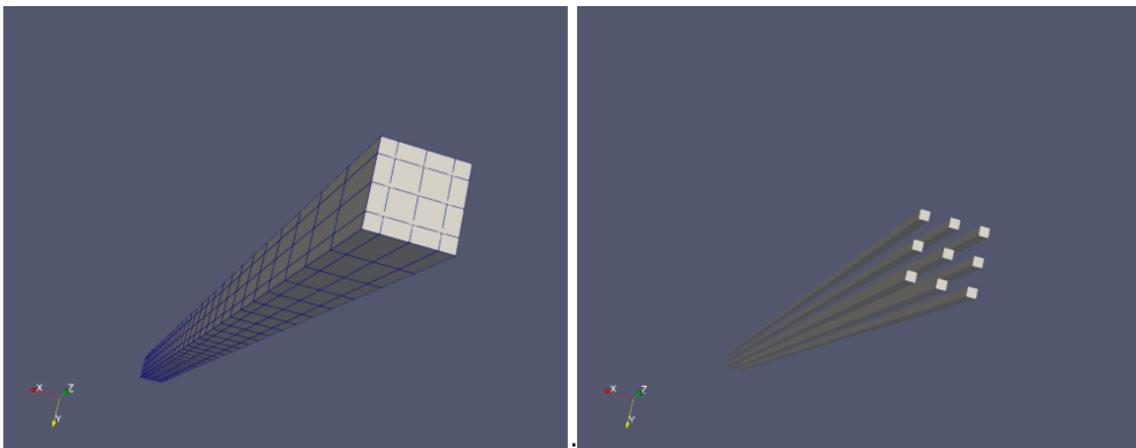
Die Heizleistung in der Heizpatrone wurde als Wärmequelle in beide Modellen implementiert und in radialer Richtung gleichmäßig verteilt.



**Abb. 3.7** Modellierungsansatz der Heizstäbe mit dem Unterkanalcode COBRA-TF

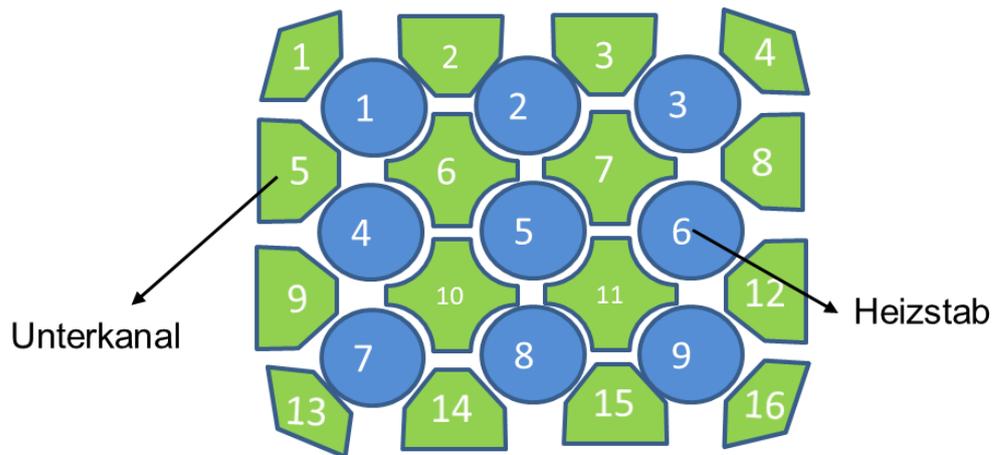
Die Heizstäbe produzieren die gleiche Leistung mit einer konstanten Heizleistungsverteilung entlang der beheizten Länge von 1090 mm. Die in der Versuchsstrecke A vorhandenen Abstandshalter wurden als Junctions mit Druckverlusten implementiert, um den Effekt auf die Strömungsverteilung im Bündel zu berücksichtigen.

Außerdem wurde das Gehäuse des Stabpakets als nicht-beheizte Struktur implementiert.



**Abb. 3.8** Darstellung des CTF-Modells des 3x3 Heizstabmoduls mit Paraview®

Linke Darstellung: Unterkanäle; rechts: Heizstäbe)



**Abb. 3.9** Vereinfachte Darstellung der radialen Nodalisierung des Stabpakets im thermohydraulischen CTF-Modell

### 3.6.2 Validierung des ATHLET-Datensatzes anhand der Nachrechnung von Inbetriebnahme-Versuchen

Für die Validierung des entwickelten ATHLET-Datensatzes vom Versuchsstand THETIS wurden die zugrundeliegenden Daten aus den Inbetriebnahme (IBN)-Versuchen der Anlage berücksichtigt. Die Daten wurden vom Projektpartner HSZG in Form von Rohdaten (Text-Datei) bzw. Excel-Tabellen der GRS zur Verfügung gestellt.

Ziel der Versuche war die genauere Ermittlung der thermohydraulischen Größen (u.a. im Bereich des Querkanals zwischen den zwei Heizstabpaketen) bei einem breiteren bzw. abdeckenden Spektrum von Anfangs- und Randbedingungen.

Eine Beschreibung der Versuchsabläufe sowie der Versuchsmatrix ist in /ALT22a/ zu finden. Die Versuchsmatrix umfasst die in Tab. 3.4 dargestellten Parameter der Anlage. Eine Variation der Zn-Konzentration erfolgt bei diesen IBN-Versuchen nicht.

**Tab. 3.4** Variation der Parameter für die Erstellung der Versuchsmatrix /ALT22a/

Parameter	Referenzwert	Maximum	Minimum
Kühlmittelgeschwindigkeit (cm/s)	7	11	3
Kühlmitteleintrittstemperatur (°C)	65	70	55
Kühlmittelaustrittstemperatur (°C)	75	85	65

Aus der Kombination der in Tab. 3.4 aufgelisteten Parameter ergaben sich insgesamt 9 IBN-Versuche. Ferner wurden 6 weitere Versuche mit variierender Kühlmittelgeschwindigkeit (3, 7 und 11 cm/s) und einer konstanten Eintrittstemperatur von 65°C und jeweils konstanten Heizleistungen (300 W bzw. 500 W pro Heizstab) in den Heizstrecken A und B durchgeführt.

All diese THETIS-Versuche wurden mit dem ATHLET-Datensatz nachgerechnet.

Um Schwankungen der wesentlichen thermohydraulischen Parameter bei der Initiierung der Rechnungen unter versuchsspezifischen Anfangsbedingungen zu vermeiden, wurde sowohl der Volumenstrom im THETIS-Kreislauf als auch die Heizleistung mit Null initialisiert. Bei jeder Simulation erfolgt eine Konditionierungsphase bis 1600s, in der die folgenden Parameter zum Zweck der Einstellung der versuchsspezifischen Anfangsbedingungen gesteuert werden:

- der Förderstrom-Sollwert der Pumpen
- die Leistung des Vorwärmers
- die Leistung der Stabpakete

Die Ergebnisse der Nachrechnungen der IBN-Versuche sind in Abb. 3.10 bis Abb. 3.14 geplottet. Die Tabelle Tab. 3.3 bis Tab. 3.5 stellen die Werte aus der Simulation und den Experimenten gegenüber.

Die Nachrechnung der Inbetriebnahme-Versuche zeigt ein oszillierendes Verhalten des Volumenstroms in der Querleitung bei niedrigem Kühlmittelgeschwindigkeit ( $< 4$  cm/s) und höherer Leistung der Stabpakete bzw. höherer Kühlmitteltemperatur am Bündelaustritt ( $> 75^\circ\text{C}$ ). Die Oszillationen führten zu einer Massenstromverringerng zuerst im oberen Teil des Stabpakets A und anschließend auch im Stabpaket B und zur Erhöhung der Fluidtemperatur bis zur Sättigungsbedingung. Der zweiphasige Zustand hat durch höhere zweiphasige Druckverluste das oszillierende Verhalten weiter verstärkt. Die Oszillationen bzw. der erhöhte Queraustausch wurden in diesem Ausmaß während der Versuche in der Versuchsanlage THETIS nicht beobachtet bzw. gemessen.

Als möglicher Auslöser dieses oszillierenden Verhaltens des Massenstroms im Querkanal in der Simulation wurden kleine Dichteunterschiede des Kühlmittels zwischen den

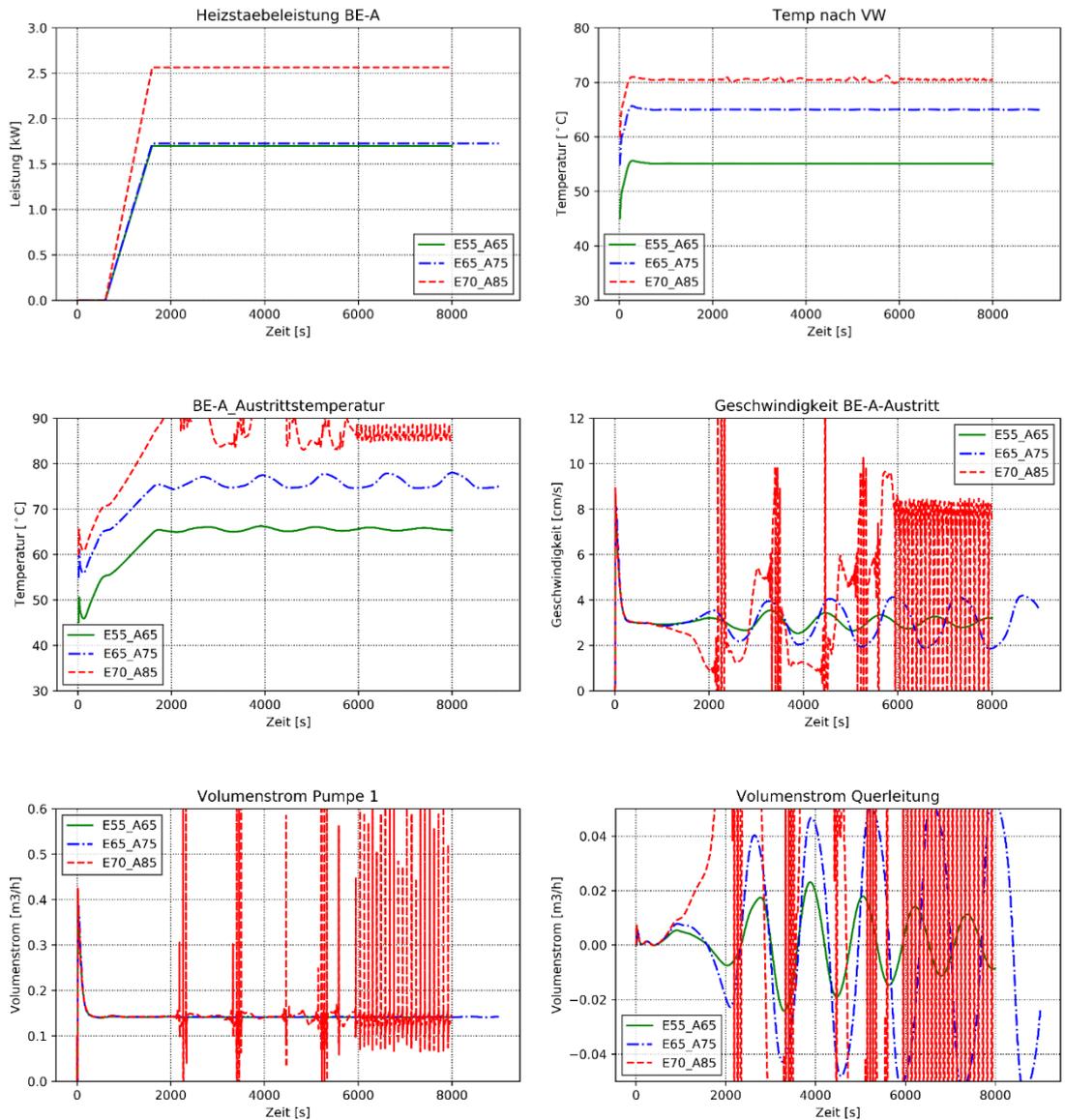
beiden senkrechten Vierkantrohren beim Heizvorgang identifiziert, welche einen Druckunterschied zwischen den parallelen Strängen verursachten.

Im Allgemeinen konnte beobachtet werden, dass die Viskositätskräfte im ATHLET-Modell die Trägheitskräfte bei niedriger KM-Geschwindigkeit ab einer Leistung von ca. 200 W pro Heizstab überwogen. Bei höherer KM-Geschwindigkeit ( $> 4$  cm/s) wurde kein oszillierendes Verhalten des Volumenstroms in der Querleitung berechnet, welches in Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen aus den IBN-Versuchen ist.

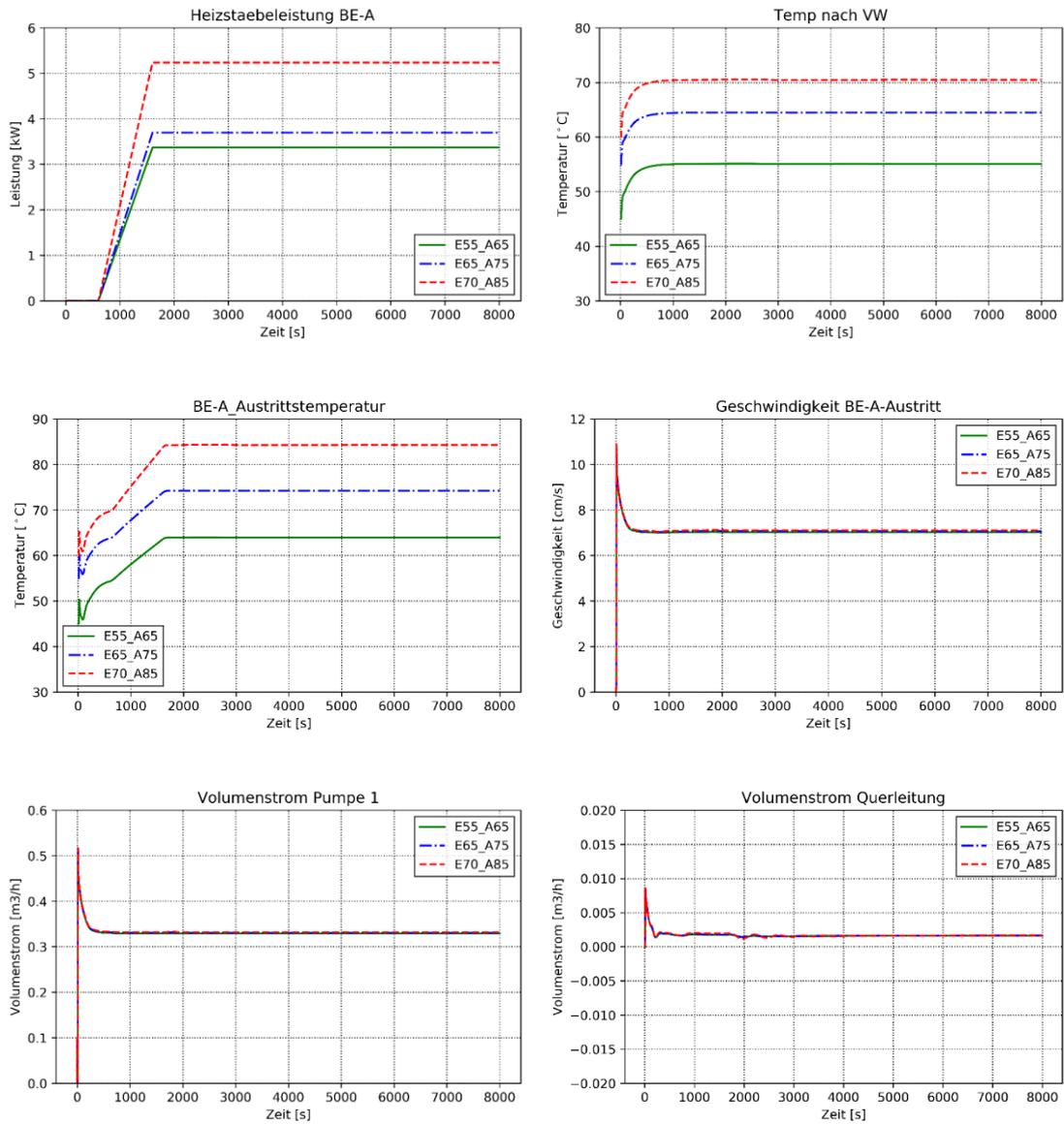
In Abb. 3.13 und Abb. 3.14 sind die berechnete KM-Temperatur am Bündelaustritt sowie die KM-Geschwindigkeit in der Querleitung und die Druckverluste in Stabpaket A als Ergebnis der Nachrechnung des Inbetriebnahme-Versuchs mit konstanter Heizleistung (300 W bzw. 500 W pro Heizstab) und Kühlmittleintrittstemperatur ( $65^{\circ}\text{C}$ ) und mit variierender KM-Geschwindigkeit (3 cm/s, 7 cm/s und 11 cm/s) dargestellt. Die zeitlichen Verläufe der Temperatur und des Volumenstroms nach einer Konditionierungsphase von 2000 s bestätigen das bei den anderen Versuchen berechnete Verhalten bei niedrigen KM-Geschwindigkeiten. Die Schwankungen, die durch die lokale Verdampfung des Wassers verstärkt werden, werden erst bei der Erhöhung des Volumenstroms durch die Pumpen gedämpft. Ab einem Volumenstrom von ca.  $0.2\text{ m}^3/\text{h}$  zum Zeitpunkt ca. 5000s verlaufen die Parameter wieder stabil.

Ein Vergleich der berechneten Werte mit den experimentellen Ergebnissen wurde in tabellarischer Form durchgeführt. Der Vergleich zwischen experimentellen Daten und den ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit Kühlmittelgeschwindigkeiten von 3, 7 und 11 cm/s ist in den Tabellen Tab. 3.3, Tab. 3.4 und Tab. 3.5 wiedergegeben. Die Rechenergebnisse zeigen im Allgemeinen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten für die IBN-Versuche mit Kühlmittelgeschwindigkeiten von 7 und 11 cm/s. Der Massenstrom in der Querleitung wird von ATHLET im Mittelwert für alle IBN-Versuche unterschätzt.

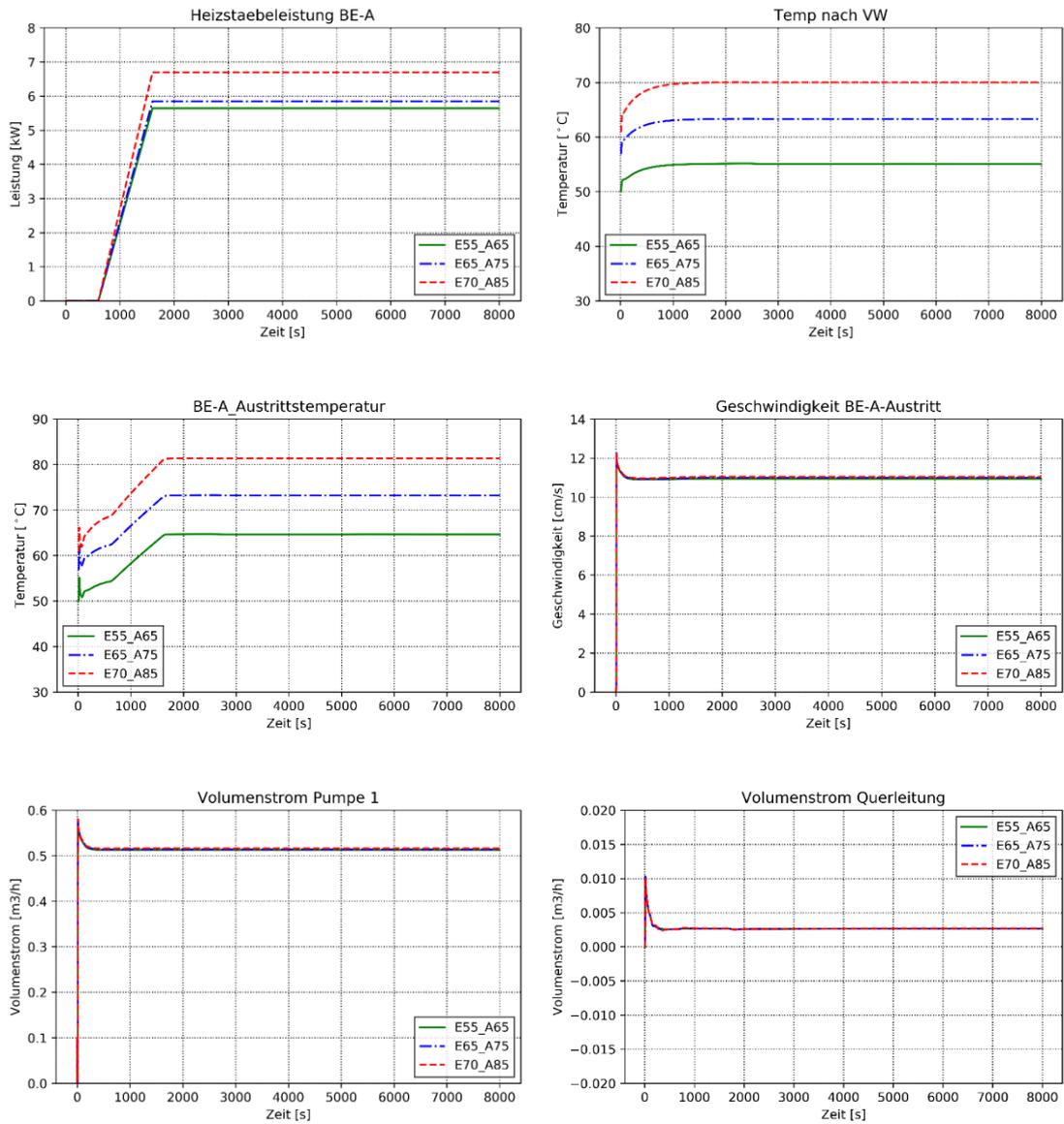
Auf Basis der Ergebnisse dieser Nachrechnungen wurde die Validierung des AZora-Moduls auf Versuche mit Kühlmittelgeschwindigkeiten  $> 4$  cm/s begrenzt.



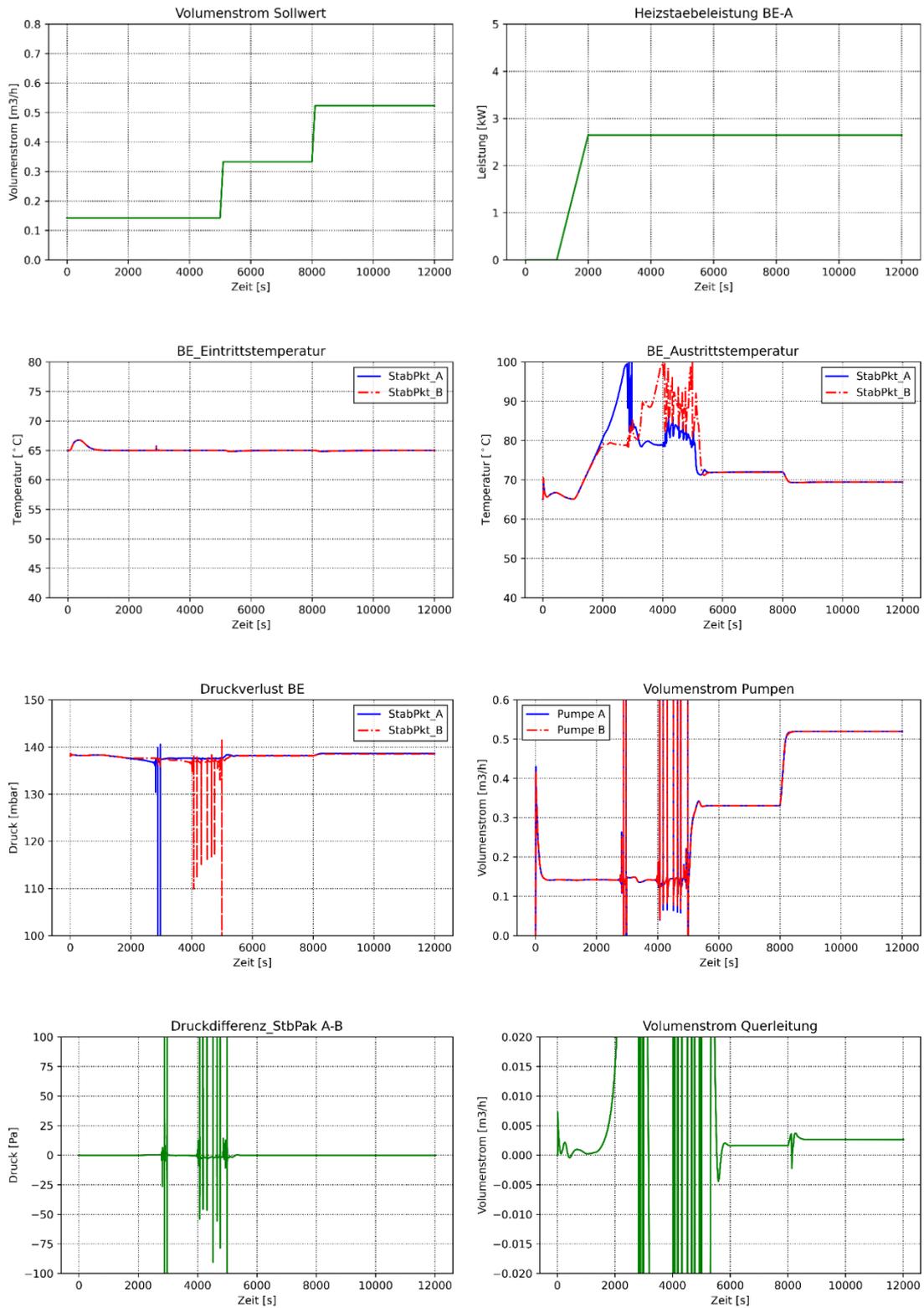
**Abb. 3.10** ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 3 cm/s



**Abb. 3.11** ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s

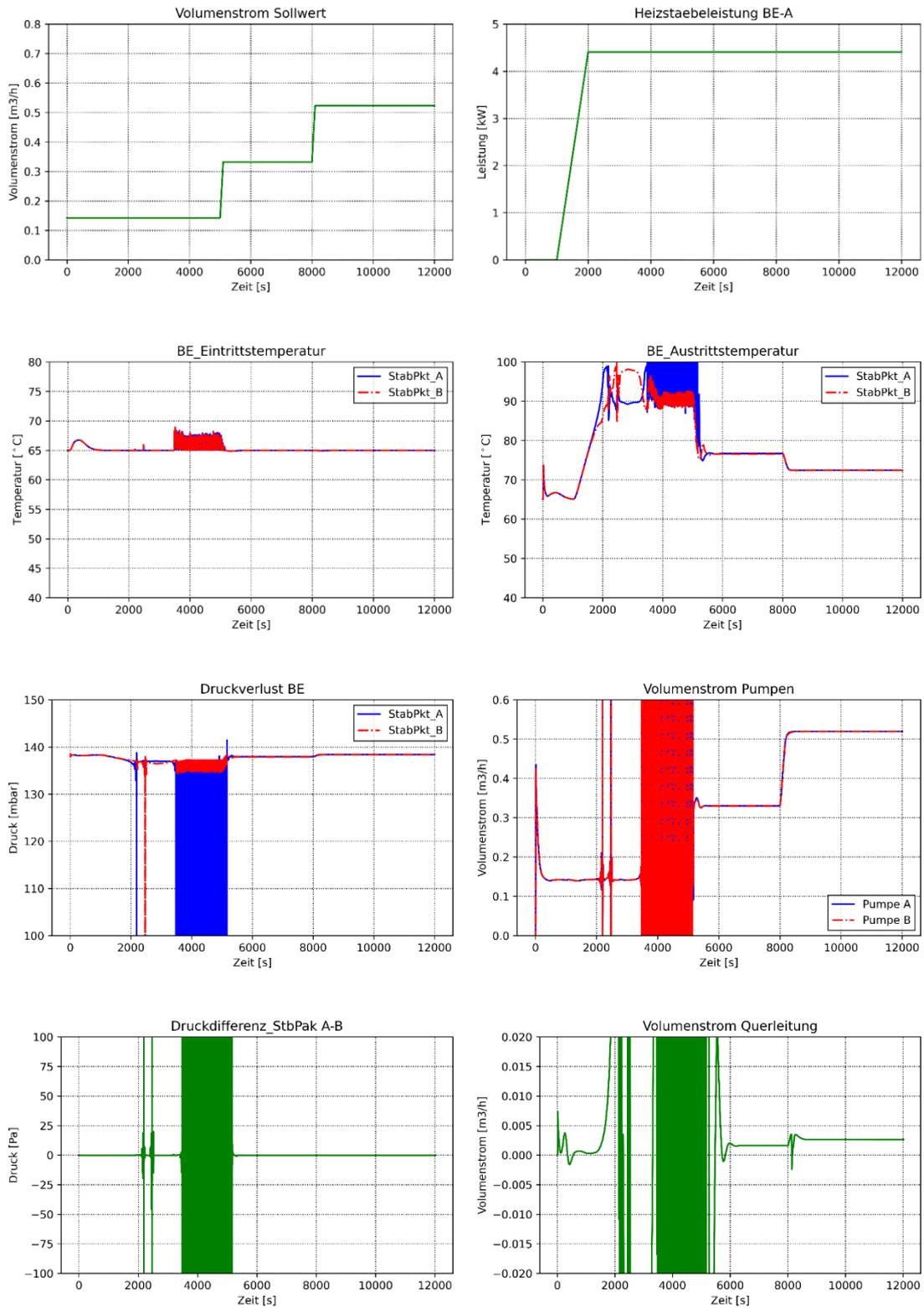


**Abb. 3.12** ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 11 cm/s



**Abb. 3.13** ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche

Hier mit konstanter Heizleistung (300 W pro Heizstab) u. Kühlmittelintrittstemperatur (65 °C)



**Abb. 3.14** ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche

Hier mit konstanter Heizleistung (500 W pro Heizstab) u. Kühlmittelintrittstemperatur (65 °C)

**Tab. 3.5** Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 3 cm/s zum Zeitpunkt  $t = 6000$  s

Versuchsbezeichnung	Eintrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Austrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Volumenstrom am Eintritt von Stabpaket A (m³/h)		Volumenstrom in der Querleitung (m³/h)	
	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET
E55-A65	55.45	54.79	65.00	63.69	0.1404	0.1435	0.0098	oszillierend
E65-A75	65.15	64.74	74.99	74.12	0.1407	0.1439	0.0077	oszillierend
E70-A85	70.65	70.19	85.00	85.30	0.1439	0.1447	0.0101	oszillierend

**Tab. 3.6** Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s zum Zeitpunkt  $t = 6000$  s

Versuchsbezeichnung	Eintrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Austrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Volumenstrom am Eintritt von Stabpaket A (m³/h)		Volumenstrom in der Querleitung (m³/h)	
	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET
E55-A65	56.29	55.10	64.99	63.99	0.3261	0.3308	0.0099	0.00168
E65-A75	65.52	64.50	74.97	74.26	0.3257	0.3322	0.0113	0.0017
E70-A85	71.56	70.50	84.99	84.32	0.3251	0.3332	0.0143	0.00172

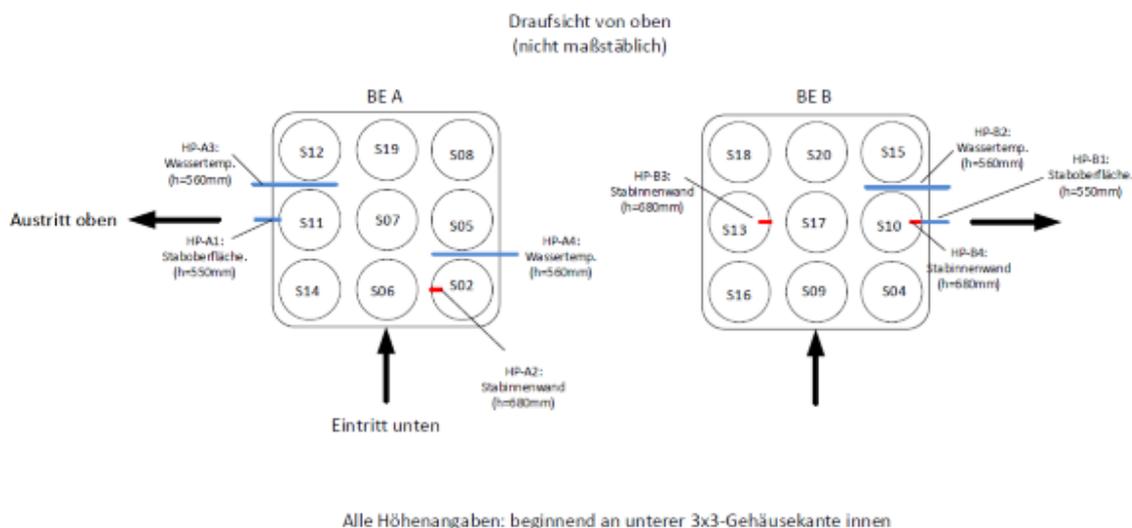
**Tab. 3.7** Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 11 cm/s zum Zeitpunkt  $t = 6000$  s

Versuchsbezeichnung	Eintrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Austrittstemp. des Kühlmittels in Stabpaket A (°C)		Volumenstrom am Eintritt von Stabpaket A (m³/h)		Volumenstrom in der Querleitung (m³/h)	
	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET	Exp.	ATHLET
E55-A65	55.55	55.10	64.95	64.68	0.5129	0.5142	0.0121	0.00269
E65-A75	65.18	63.29	74.96	73.22	0.5110	0.5158	0.0099	0.00271
E70-A85	70.22	70.00	80.96	81.37	0.5051	0.5123	0.0131	0.00272

Für die Verifikation der ATHLET-Ergebnisse im Bereich der Heizstäbe mit dem THETIS-Modell wurde das detaillierte thermohydraulische Modell des Stabpakets A mit dem Unterkanalcode CTF angewendet. Die Beschreibung des thermohydraulischen Modells mit CTF ist in Kapitel 3.6.1.2 zu finden.

Die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s wurden mit dem CTF-Modell nachgerechnet. Das sog. „nuclear fuel pellet“ Modell wurde für die Berechnung der Temperaturprofile in der Heizpatrone, im Gasspalt sowie im Hüllrohr berücksichtigt.

Um die Temperaturwerte in den verschiedenen inneren Schichten der Heizstäbe sowie vom Kühlmittel im Bündel zum Zweck des Vergleichs mit den experimentellen Ergebnissen zu ermitteln, wurden die Position der Messsonden aus der technischen Beschreibung des Versuchstandes THETIS /ALT22/ verwendet. In Abb. 3.15 ist die Position der Messsonden für die Temperatur in beiden Stabpaketen des THETIS Versuchstands dargestellt.



**Abb. 3.15** Schematische Darstellung der Position der Temperatur-Messsonden in beiden Stabpaketen A und B /ALT22/

Die Ergebnisse der Nachrechnungen sind in tabellarischer Form in Tab. 3.8 und Tab. 3.9 zusammengefasst. Für alle 3 Versuche mit konstanter Kühlmittelgeschwindigkeit wurden vergleichbare Temperaturwerte mit beiden Modellen erzielt. Die Temperatur im Bereich der Heizpatrone wurde sowohl in der Mitte als auch an der Oberfläche höher in CTF als in ATHLET berechnet. Die Abweichung der Temperaturwerte steigt mit steigender Leistung der Heizpatrone und erreicht den max. Wert von ca. 10 K an der Staboberfläche für den Fall E70-A85.

Im Gegensatz dazu ist die Temperatur im Bereich des Hüllrohrs sowie des Kühlmittels für beide Codes vergleichbar berechnet worden, was auf ähnliche thermohydraulische Bedingungen in den Wasserkanälen zurückzuführen ist.

Hauptgründe für die abweichenden Temperaturwerte sowohl in der Mitte als auch an der Oberfläche der Heizpatrone sind die codespezifischen, temperaturabhängigen Materialeigenschaften sowie der leicht unterschiedliche Wert des Wärmeübergangskoeffizienten im Gasspalt.

Die Tab. 3.9 zeigt einen Vergleich zwischen den ATHLET, den CTF-Rechenergebnissen und den experimentellen Ergebnissen für den IBN-Versuch E65-A75 mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s.

Bei der experimentellen Messung der Temperatur am Stabhüllrohr T\_HP\_A1 bzw. T\_HP\_B1 ist eine Abweichung von über 10 K im Vergleich zu den Rechenergebnissen mit beiden Codes zu erkennen, welche auf einen Fehler bei der Erfassung hindeutet. Ein weiterer Fehler bei der Temperaturerfassung am Messpunkt T\_HP\_A2 ist aufgrund der großen Abweichung zum Rechenergebnis (ca. 30K) vermutet.

Die erfassten Temperaturwerte an der Stabinnenwand T\_HP\_B3 und T\_HP\_B4 zeigen eine Abweichung zu den berechneten Werten von mehr als 100K. Als Hauptgründe dafür können folgende Aspekte genannt werden:

- Modellierung der Heizquelle: die erzeugte Leistung wird in den Modellen gleichmäßig über den gesamten radialen Durchmesser der Heizpatrone verteilt; die möglichen Temperaturspitzenwerte können somit nicht erfasst werden.
- Materialeigenschaften der Heizpatrone: in beiden thermohydraulischen Modellen wurden approximierete Werte der Wärmeleitfähigkeit und der spezifischen Wärmekapazität für Edelstahl in tabellarischer Form als Funktion der Temperatur berücksichtigt, die nicht den spezifischen Materialeigenschaften der Heizpatronen entsprechen.
- Präsenz von Öl im Spalt zwischen Heizpatrone und Hüllrohr: in /ALT22/ ist beschrieben, dass die Luftspalte zwischen Heizpatrone und Hüllrohr mit einem geeigneten Öl befüllt wurden. Ziel ist dabei, die Wärmeleitfähigkeit von der Heizpatrone hin zur Außenseite zu verbessern. Für beide Rechenmodelle, ATHLET und CTF, wurden für den Spalt zwischen Heizpatrone und Hüllrohr die Eigenschaften eines Edelgases (Helium) angenommen.

**Tab. 3.8** Vergleich zwischen ATHLET und CTF Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s

Ver- suchs- be- zeichn ung	Heizstabtemp. in der Mitte (°C)		Temperatur an der Heizstabober- fläche (°C)		Temperatur an in- nerer Hüllrohr- oberfläche (°C)		Temperatur an äußerer Hüllrohr- oberfläche (°C)		Kühlmitteltemp. (°C)		Wärmeüber- gangskoeff. im Gasspalt (W/m <sup>2</sup> /K)	
	CTF	ATHLET	CTF	ATHLET	CTF	ATHLET	CTF	ATHLET	CTF	ATHLET	CTF	ATHLET
E55- A65	121,55	117,82	119,87	115,1	69,11	71,3	68,6	70,8	59,27	58,42	269,2	271
E65- A75	136,52	131,33	132,88	128,39	79,1	81,48	78,55	80,92	69,01	68,14	276,5	278
E70- A85	169,16	160,57	166,62	156,51	91,13	92,78	90,33	91,99	77,05	75,67	287,3	289

**Tab. 3.9** Vergleich zwischen ATHLET und CTF-Rechenergebnissen

Hier sowie mit den experimentellen Ergebnissen für den IBN-Versuch E65-A75 mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s

Messstelle	Temperatur Exp. (°C)	Temperatur ATHLET (°C)	Temperatur CTF (°C)
T_HP_A1	68	80,92	78,55
T_HP_A2	95	128,39*	132,88
T_HP_A3	71	68,14 <sup>+</sup>	69,42
T_HP_A4	69	68,14 <sup>+</sup>	69,02
T_HP_B1	68	80,92	78,55
T_HP_B2	69	68,14 <sup>+</sup>	69,44
T_HP_B3	241	128,39*	134,39
T_HP_B4	195	128,39*	136,93

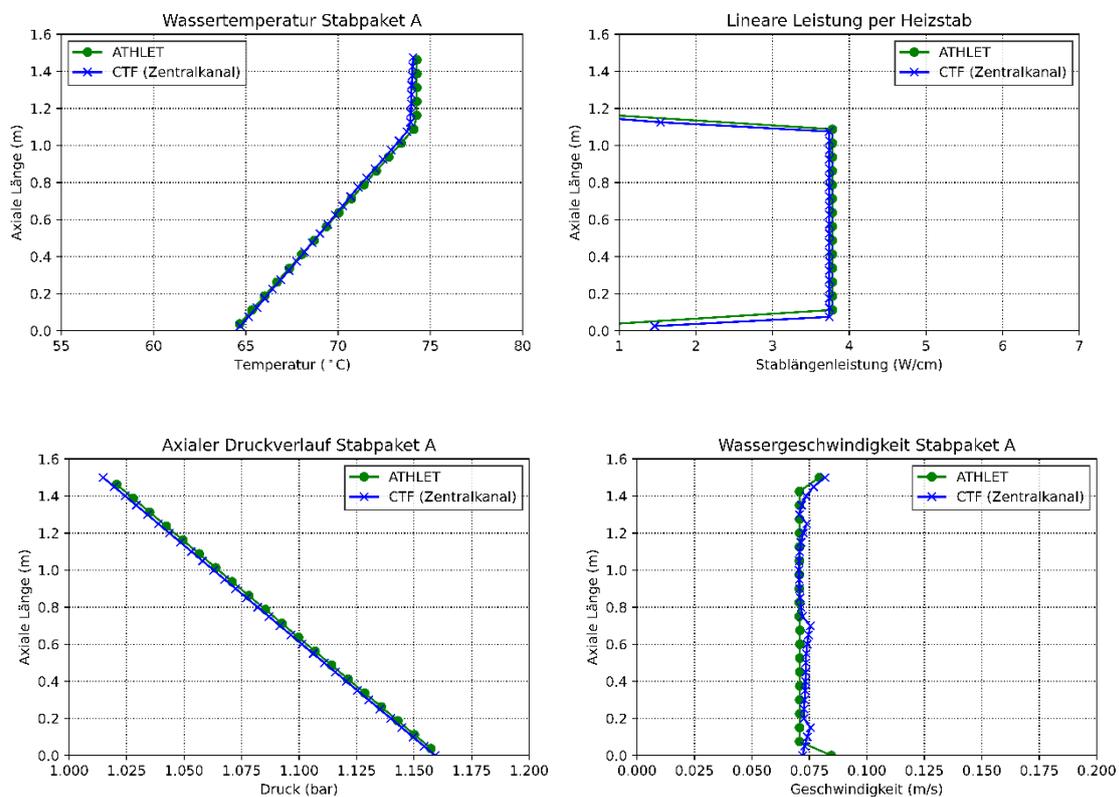
(\*) (+) Gleiche Werte aufgrund der Modellierung in ATHLET (ermittelt in der Mitte eines TF-Objekts bzw. eines HC-Objekts für beiden Stabpakete)

Ein Vergleich der mit ATHLET und CTF Stabpaket-Modellen erzielten Ergebnisse für den IBN-Versuch E65-A75 mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s ist in Abb. 3.16 gegeben. Der Verlauf der Parameter Wassertemperatur, Stablängenleistung, Druck und Geschwindigkeit ist als Funktion der aktiven Stablänge im Stabpaket dargestellt. Die mit dem Unterkanalmodell in CTF berechneten Parameterwerte stammen aus einem der simulierten Kanäle (Unterkanal Nr.11, siehe Abb. 3.9) im Zentralbereich des Stabpakets.

Der axiale Verlauf sowohl der Aufheizung als auch des Drucks in beiden Modellen weist einen vergleichbaren Trend auf. Die Stablängenleistung im oberen und unteren Bereich des Heizstabs in ATHLET weicht aufgrund der gröberen axialen Nodalisierung im Vergleich zum Ergebnis mit dem CTF-Modell nur leicht ab.

Das Geschwindigkeitsprofil des Wassers zeigt im CTF-Modell aufgrund der detaillierten Modellierung leichte Änderungen an den Positionen, an den die Abstandshalter positioniert sind und simuliert werden. Der mit ATHLET berechnete Verlauf stellt dagegen ein gemittelttes Profil der Fluidgeschwindigkeit für das gesamte Stabpaket dar.

Die Gegenüberstellung der Ergebnisse der beiden Codes bestätigt die Leistungsfähigkeit des entwickelten ATHLET-Modells des Stabpakets, um damit die thermohydraulischen Bedingungen im Bereich der beheizten Zonen zu simulieren.



**Abb. 3.16** Vergleich von erzielten Ergebnissen mit ATHLET und CTF Stabpaket-Modellen für den IBN-Versuch E65-A75 mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s

### 3.6.3 Validierung des AZora-Teilmoduls „Zink-Freisetzung“

Die Validierung des AZora-Teilmoduls „Zink-Freisetzung“ wurde anhand der Nachrechnung spezifischer Versuche durchgeführt. Diese Versuche wurden bereits vom Projektpartner HSZG im Rahmen des abgeschlossenen Forschungsvorhabens FKZ 1501491 /IPM19/ durchgeführt und ausgewertet.

Die Anzahl der zu nachrechnenden Versuche zum Zweck der Modulvalidierung wurden in Kooperation mit HSZG so festgelegt, dass eine abdeckende Validierung des Zn-Freisetzungsmoduls mit der geringstmöglichen Anzahl von Versuchsnachrechnungen möglich ist. Dabei wurde im Wesentlichen auf die Korrosionsfläche und die Positionierung in der ZSW als variierenden Größe geachtet.

Folgende Versuche wurden ausgewählt:

1. Versuch ZSW-LS-V01
2. Versuch ZSW-LS-V02
3. Versuch ZSW-LS-V08

Eine ausführliche Beschreibung der Versuche ist im Abschlussbericht /IPM19/ zu finden. Die Nachrechnung erfolgte unter Verwendung des ZSW-Datensatzes, welcher in Kapitel 3.6.1.1 beschrieben ist.

### 3.6.3.1 Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V01

Ziel des Versuches ZSW-LS-V01 war die Untersuchung des zeitlichen Freisetzungsverhaltens von Zink aus einem LGR im Leckstrahl der ZSW.

Die Versuchsrandbedingungen sind in Tab. 3.10 zusammengefasst.

**Tab. 3.10** Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V01

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2200
LiOH (ppm)	0.5
Füllstand in ZWS (m)	1.30
Wasservolumen in ZWS (m <sup>3</sup> )	8.33
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) am Leckstrahl	0.667
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) getauchte LGR	0.0
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) LGR Sumpfsieb	0.0
Volumenstrom (m <sup>3</sup> /h)	12.534
Mittlere KM-Temperatur in ZSW (°C)	45.022

Zur Abbildung des LGR wird im ATHLET-Eingabedatensatz im oberen Bereich von Objekt POOL1 eine Zinkquelle mit der Korrosionsoberfläche 0,667 m<sup>2</sup> spezifiziert:

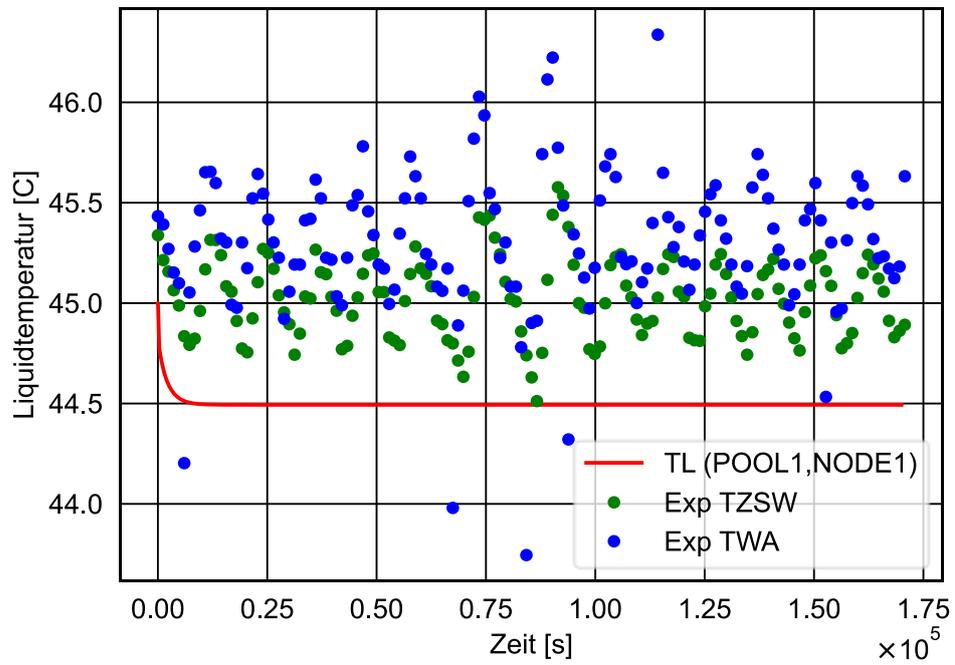
```
----- SOLUTE
@      SLEN  ANAMSOL  ITYPSRC  ASOLSRC  MSOLSRC
      2.5   ZINC     1        0.667    10.
```

Die Versuchsergebnisse können aus /SEE20b/ entnommen werden. Die nachfolgenden Abbildungen zeigen einen Vergleich zwischen Simulation und Experiment. Abb. 3.17 bis Abb. 3.19 zeigen als Randbedingungen für den Versuch die KM-Temperatur, den KM-Volumenstrom sowie die Lithium-Konzentration im KM. Die Borkonzentration beträgt im Versuch 2200 ppm. Die Temperaturmessungen werden in Abb. 3.17 an zwei unterschiedlichen Positionen in der ZSW gezeigt. Die von ATHLET berechnete Temperatur stammt aus dem unteren Knoten des TFOs POOL1. In Abb. 3.18 zeigt die rote Kurve den Massenstromverlauf aus der Düse (Parameter Q) und die grüne Kurve den berechneten Massenstromwert im Pool unterhalb der Düse. Beide Kurven weisen den gleichen Verlauf auf. Keine experimentellen Daten für die Lithium-Konzentration im Kühlmittel in der ZSW sind in Abb. 3.19 vorhanden.

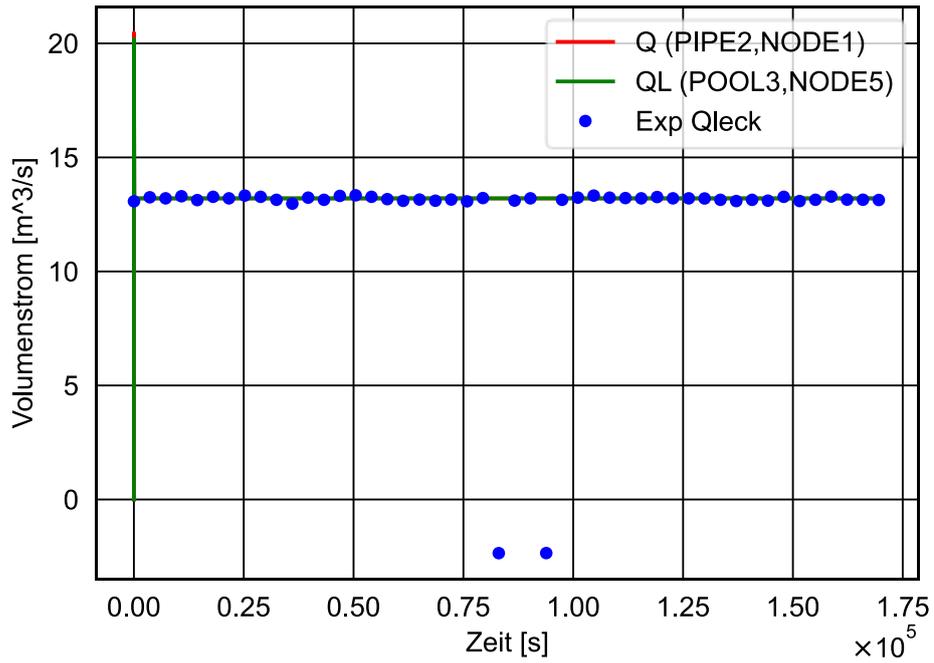
Die aus dem LGR freigesetzte Zinkmasse ist in Abb. 3.20 gezeigt. Die Konzentration von Zink im KM kann aus der Abb. 3.21 entnommen werden. Abb. 3.23 veranschaulicht die Entwicklung des pH-Werts.

Die Simulation stimmt gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Abweichungen können begründet werden durch

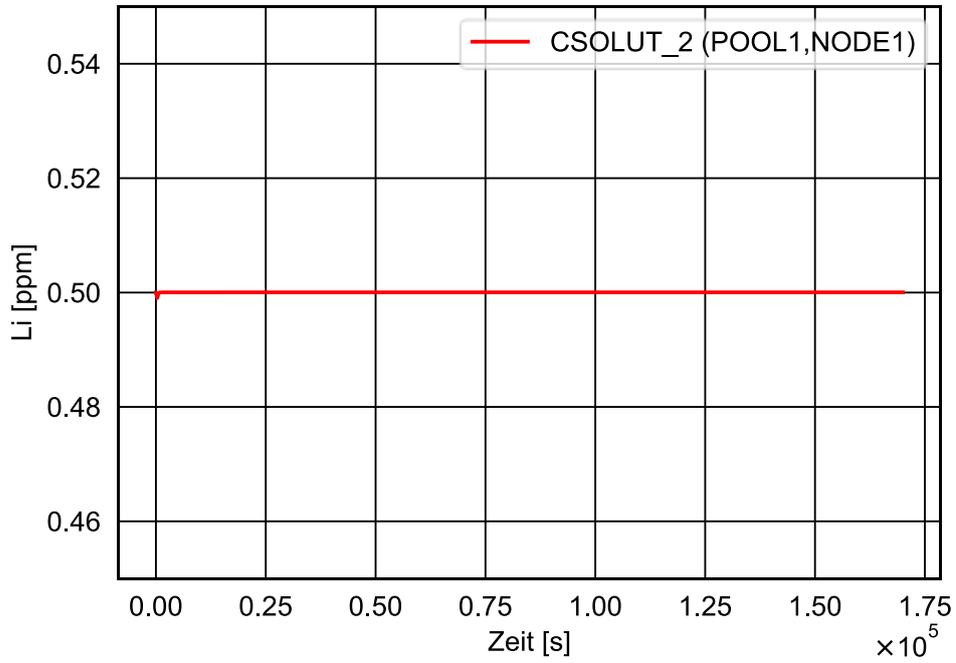
- eine über die Oberfläche des LGR ungleichmäßige Abtragung der Zinkschichten, da bspw. nicht alle Bereiche gleichermaßen vom Kühlmittelstrom beaufschlagt werden.
- einen variierenden Schichtaufbau des LGR mit abweichenden Dicken im Vergleich zur Spezifikation in Kapitel 3.2.3.3.



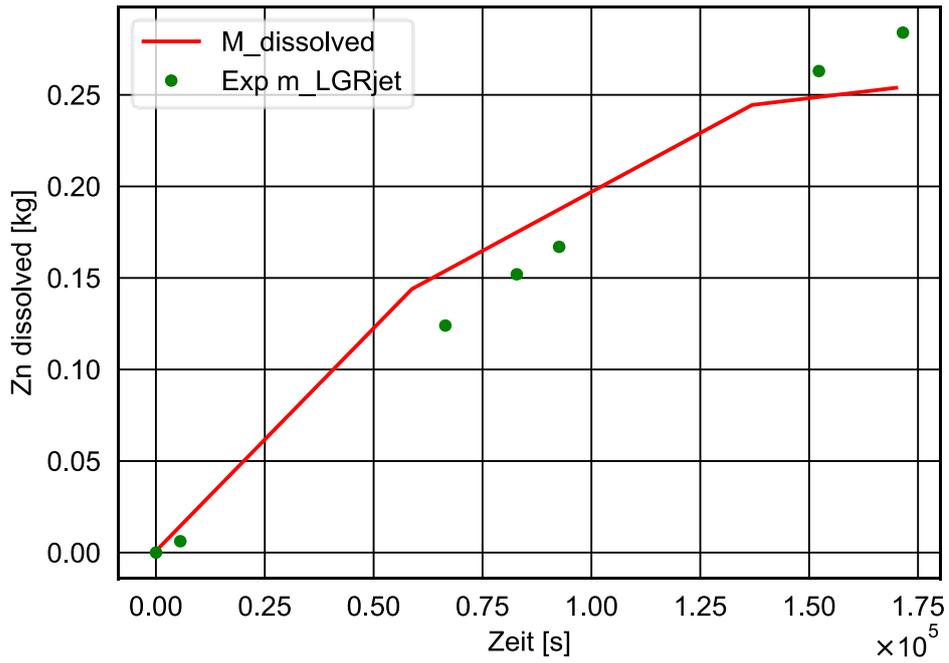
**Abb. 3.17** Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V01)



**Abb. 3.18** Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V01)



**Abb. 3.19** Lithium-Konzentration (ZSW-LS-V01)



**Abb. 3.20** Freigesetzte Zinkmasse (ZSW-LS-V01)

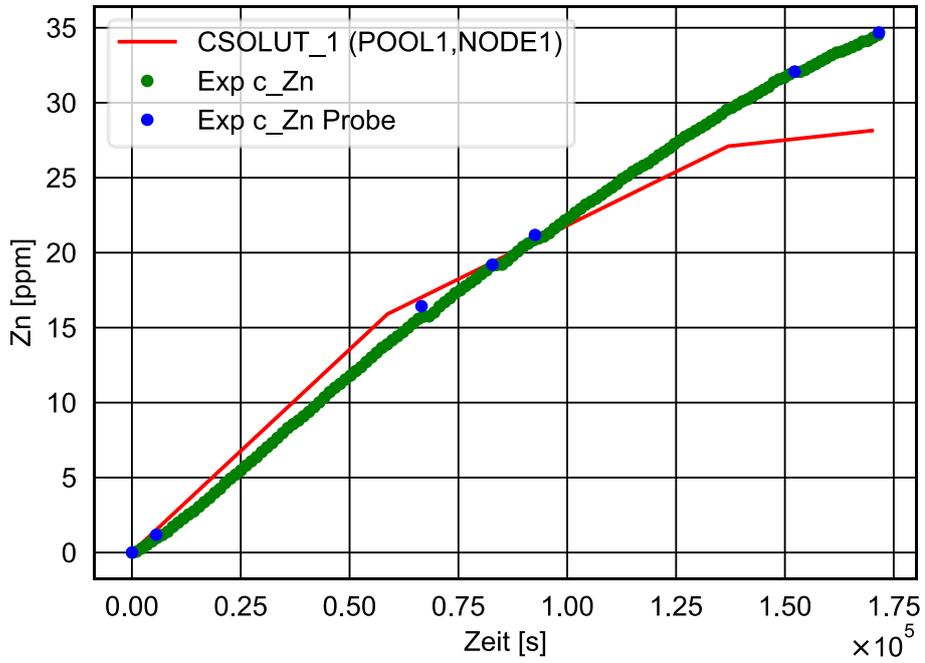


Abb. 3.21 Zinkkonzentration im KM (ZSW-LS-V01)

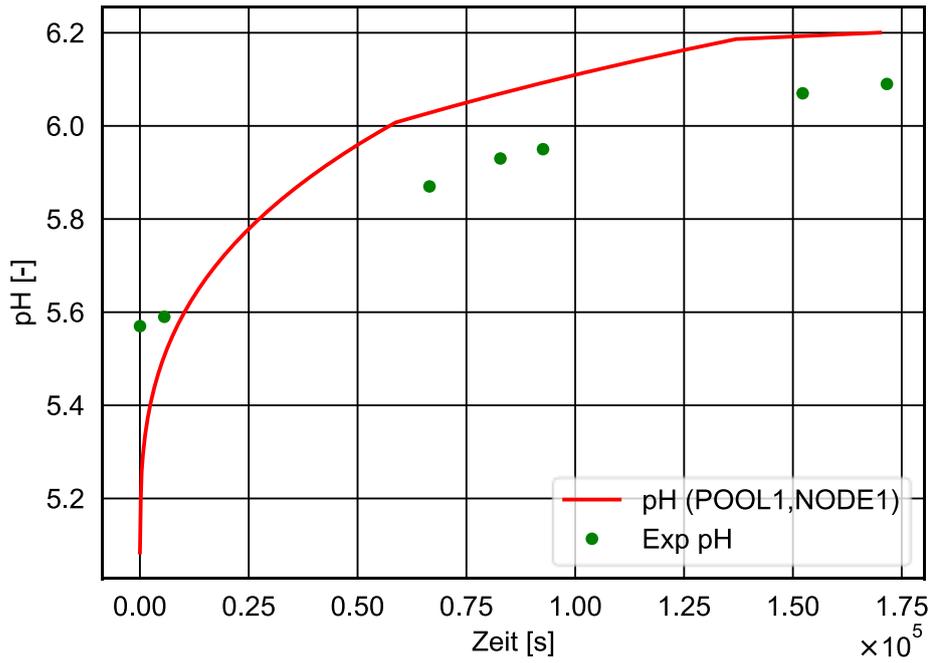


Abb. 3.22 pH-Wert im Pool (ZSW-LS-V01)

### 3.6.3.2 Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V02

Ziel des Versuches ZSW-LS-V02 war die Untersuchung des zeitlichen Freisetzungsverhaltens von Zink aus einem LGR im Leckstrahl der ZSW in Kombination mit einem nahe der Impaktregion des Leckstrahls getauchten LGR.

Die Versuchsrandbedingungen sind in Tab. 3.11 zusammengefasst.

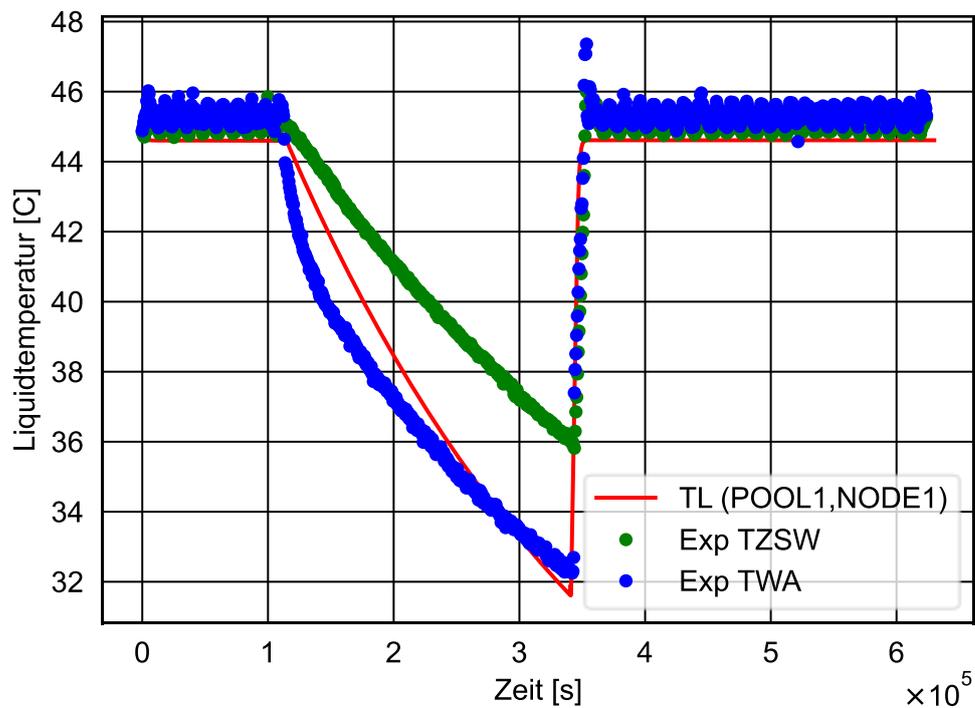
**Tab. 3.11** Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V02

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2200
LiOH (ppm)	0.5
Füllstand in ZWS (m)	1.30
Wasservolumen in ZWS (m <sup>3</sup> )	8.33
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) am Leckstrahl	0.67
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) getauchte LGR	1.39
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) LGR Sumpfsieb	0.0
Volumenstrom (m <sup>3</sup> /h)	13.2

Eine Besonderheit bei der Durchführung dieses Versuchs war die Außerbetriebnahme sowohl der Pumpen als auch der Heizpatronen (im Zeitraum von ca. 100.000 s bis ca. 270.000 s), um eine Demontage der LGR im Leckstrahlbereich zu ermöglichen.

Die Abbildungen Abb. 3.23 und Abb. 3.24 zeigen die Kühlmitteltemperatur in der Wanne und den umgewälzten Volumenstrom. Während der vorübergehenden Abschaltung der Pumpe kam es zu einem Abkühlen des Kühlmittels in der Strömungswanne. Abb. 3.25 veranschaulicht die Zinkkonzentration im Kühlmittel. Die Verläufe der Kühlmitteltemperatur und des Volumenstroms dienen als Randbedingung für die Nachrechnung des Versuchs und zeigen gegenüber den experimentellen Werten eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Die Zinkfreisetzung aus den LGR ist in Abb. 3.26 dargestellt.

Deutlich zu erkennen ist die vorübergehend unterbrochene Zinkfreisetzung aus dem LGR im Jet während der Phase der Pumpenabschaltung. Insgesamt stimmen die Freisetzungsraten gut überein, gleichwohl die Freisetzung aus dem untergetauchten LGR leicht unterschätzt wird. Der pH-Wert wird in der Simulation ebenfalls leicht unterschätzt (siehe Abb. 3.27).



**Abb. 3.23** Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V02)

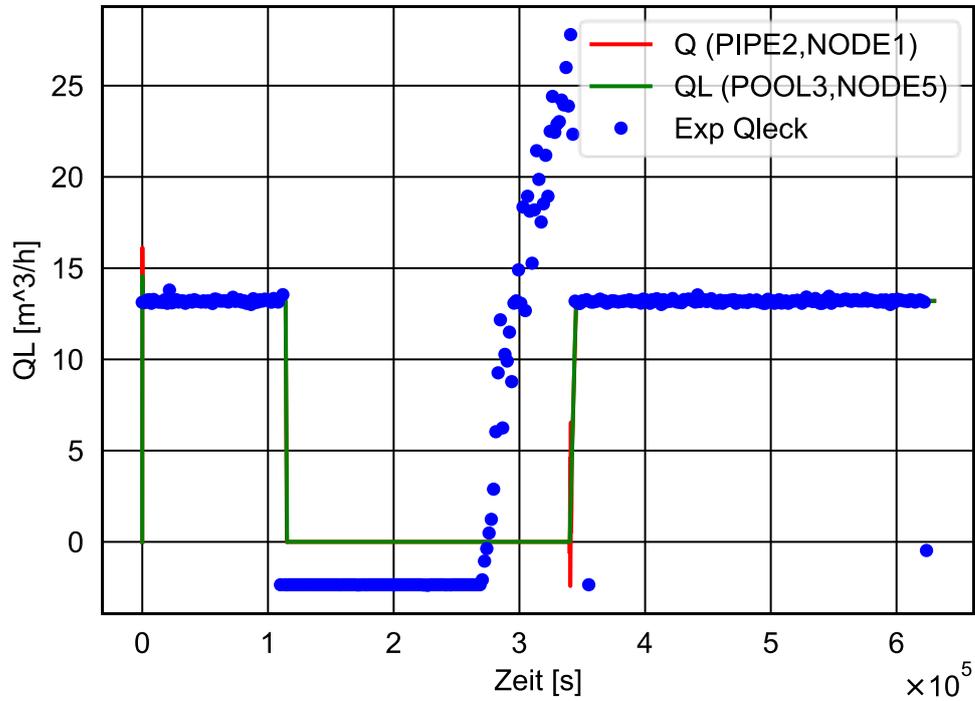


Abb. 3.24 Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V02)

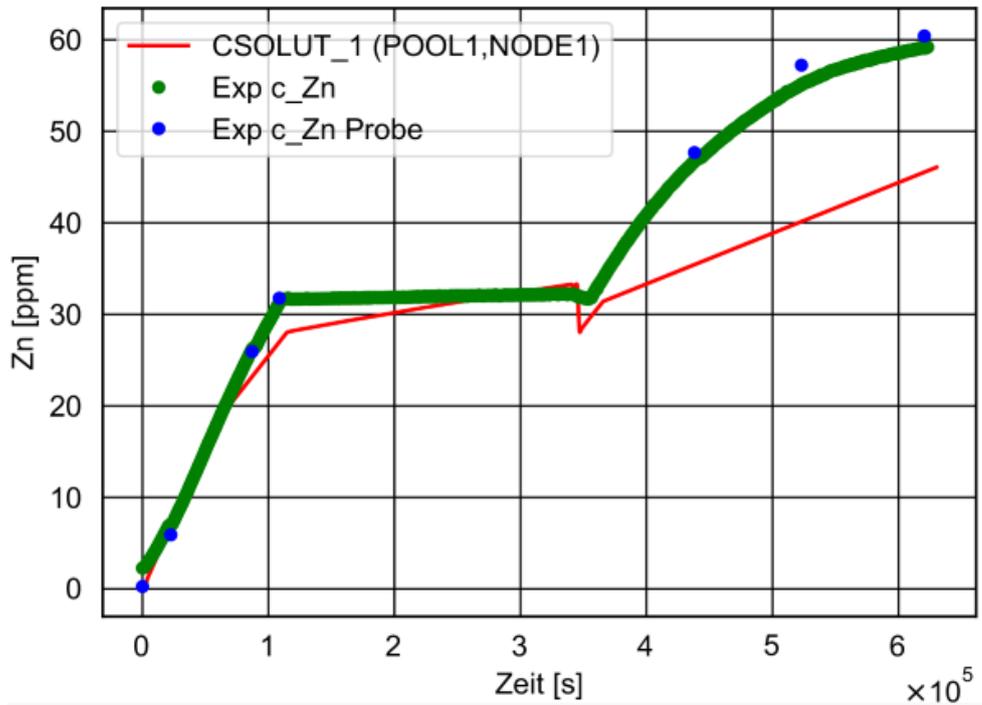
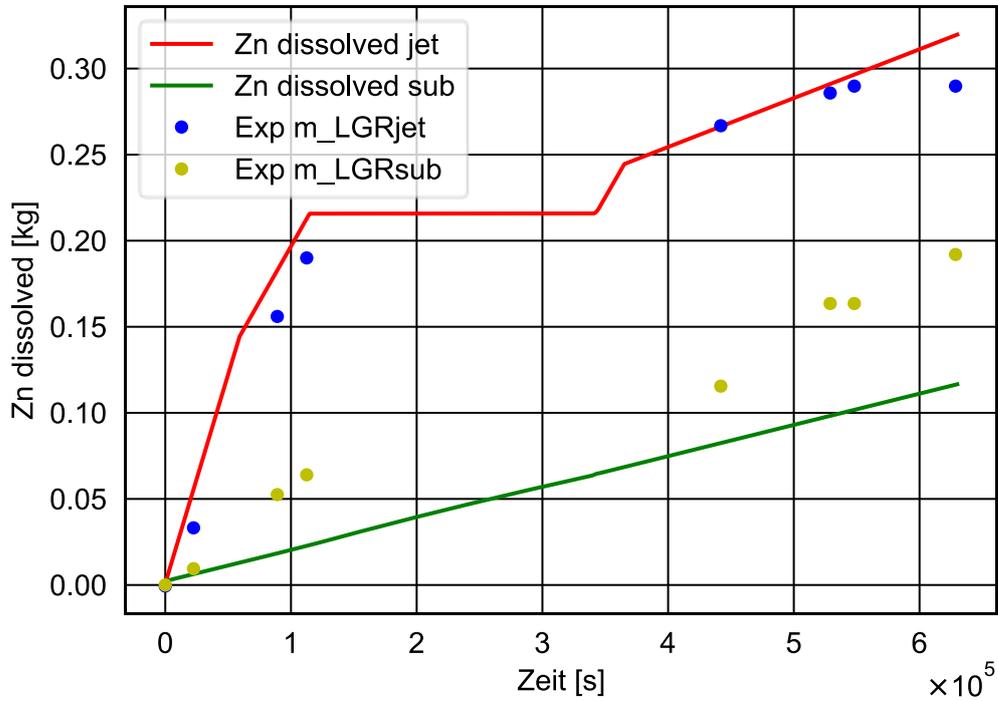
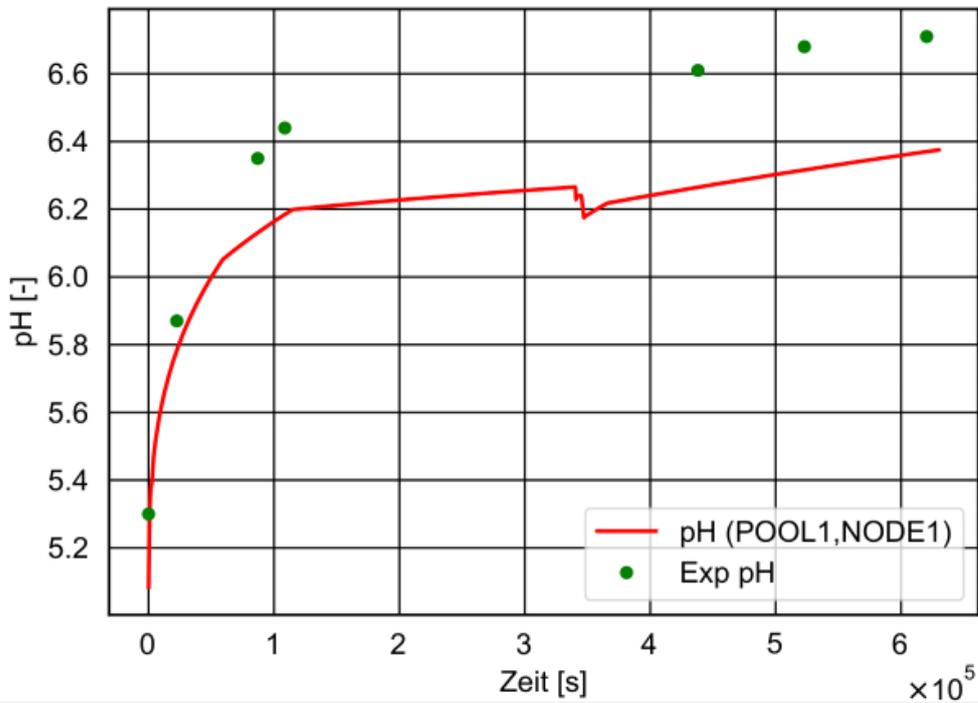


Abb. 3.25 Zink-Konzentration (ZSW-LS-V02)



**Abb. 3.26** Freigesetzte Zinkmasse aus den beiden LGR im Jet und untergetaucht unterhalb des Jets (ZSW-LS-V02)



**Abb. 3.27** pH-Wert in der Strömungswanne (ZSW-LS-V02)

### 3.6.3.3 Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V08

Der Versuch ZSW-LS-V08 ist ein anhand des Szenarios „kleines Leck“ skaliertes Freisetzungsexperiment mit angepasster Kühlmittelchemie und definiertem Zinkinventar. Ziel des Versuches war die Untersuchung des zeitlichen Freisetzungsverhaltens von Zink aus LGR in Abhängigkeit von deren Position bei der aus der Skalierung resultierenden Umströmungsgeschwindigkeit.

Die simultane Zinkfreisetzung aus LGR im Leckstrahl, untergetaucht unterhalb des Leckstrahls sowie im Sumpf wird im Versuch untersucht. Die Versuchsrandbedingungen sind in Tab. 3.12 zusammengefasst.

**Tab. 3.12** Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V08

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2000
LiOH (ppm)	0.2
Füllstand in ZWS (m)	1.52
Wasservolumen in ZWS (m <sup>3</sup> )	9.7
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) am Leckstrahl	0.26
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) getauchte LGR	3.12
Korrosionsfläche (m <sup>2</sup> ) LGR Sumpfsieb	4.51
Volumenstrom (m <sup>3</sup> /h)	3.86

In der Simulation wurde für das untergetauchte Gitter die Eingabeoption `ITYPSRC=0` (LGR im ruhenden Medium) gewählt. Sensitivitätsstudien hatten gezeigt, dass die Korrelation für untergetauchte LGR im Leckstrahl (`ITYPSRC=1`) zu einer deutlichen Überschätzung der Zinkfreisetzung führt. Ein Grund könnte sein, dass aufgrund des relativ geringen Volumenstroms das LGR im Experiment nicht vollständig bzw. nicht mit ausreichendem Impuls vom Leckstrahl getroffen wurde.

Die nachfolgenden Abbildungen zeigen einen Vergleich zwischen Simulation und Experiment. In Abb. 3.28 und Abb. 3.29 sind die Kühlmitteltemperatur im Pool und der Kühlmittelvolumenstrom im Kreislauf dargestellt. Wie in Kapitel 3.6.3.1 bereits erwähnt, werden die Temperaturmessungen in Abb. 3.28 an zwei unterschiedlichen Positionen in der ZSW gezeigt. Die von ATHLET berechnete Temperatur stammt aus dem unteren Knoten des TFOs POOL1. In Abb. 3.29 zeigt die rote Kurve den Massenstromverlauf aus der Düse (Parameter Q) und die grüne Kurve den berechneten Massenstromwert im Pool unterhalb der Düse. Beide Kurven weisen den gleichen Verlauf auf.

Abb. 3.30 zeigt die Zinkkonzentration im Pool und Abb. 3.31 die aus den LGR gelösten Zinkmassen. Nur wenige Messwerte für die Validierung der Zink-Freisetzung in Abb. 3.31 sind vorhanden. Die Zinkkonzentration stimmt quantitativ gut überein, gleichwohl der experimentell gemessene Verlauf mit Abknicken der Konzentrationszunahme nach ca. 200.000 s qualitativ nicht wiedergegeben wird. Ursächlich hierfür muss die abweichende Simulation der Zinkeinlösung sein, die insbesondere für die LGR der Positionen „untergetaucht“ und „Sumpf“ zu beobachten ist.

Der pH-Wert stimmt gut überein (Abb. 3.32). Die Lithiumkonzentration in Abb. 3.33 ist zeitlich konstant. Es entsteht in geringem Umfang mobiles Zink-Borat. In Abb. 3.34 ist dies am nicht vernachlässigbaren Residuum für die ZnB-Masse zu erkennen. Mobiles ZnB bildet sich gemäß der Gleichung (3.5) bei Überschreiten der Zn-Sättigung.

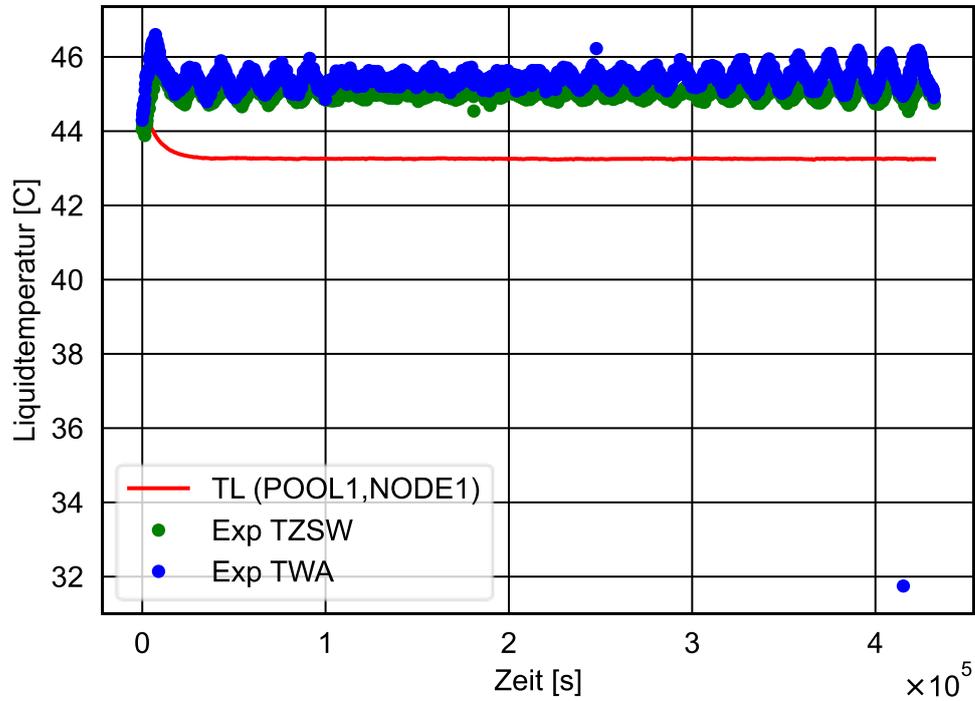


Abb. 3.28 Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V08)

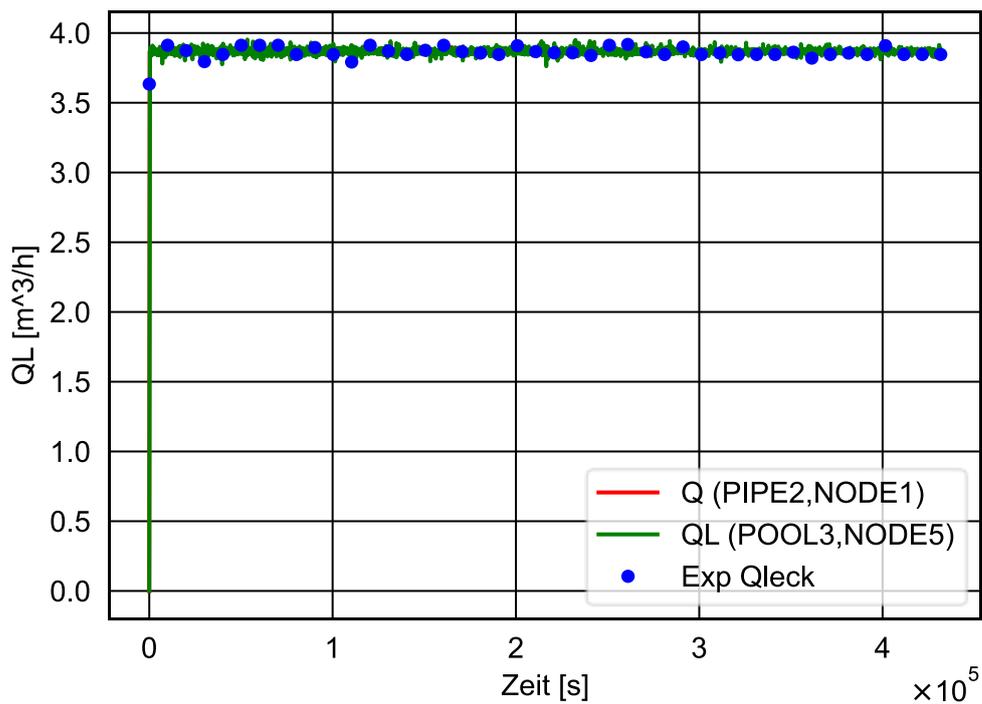


Abb. 3.29 Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V08)

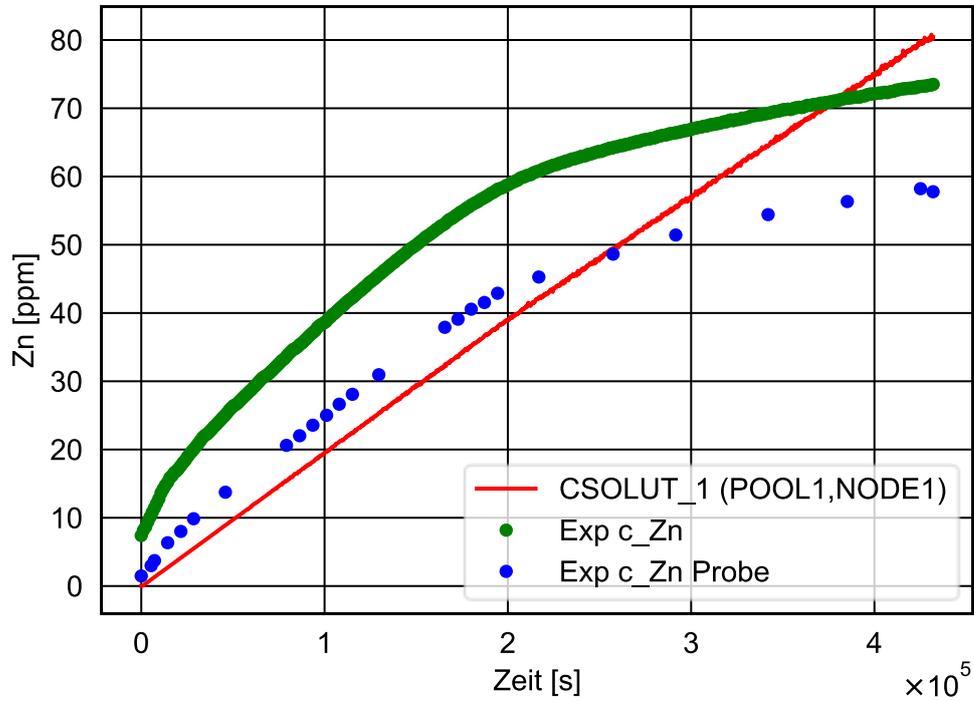


Abb. 3.30 Zinkkonzentration (ZSW-LS-V08)

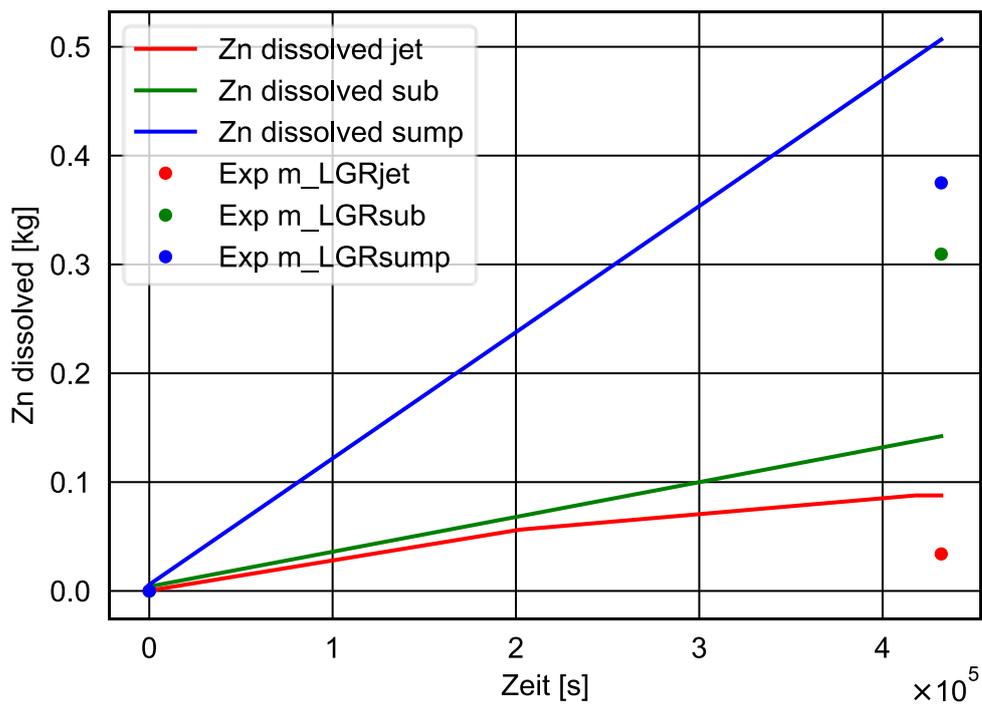
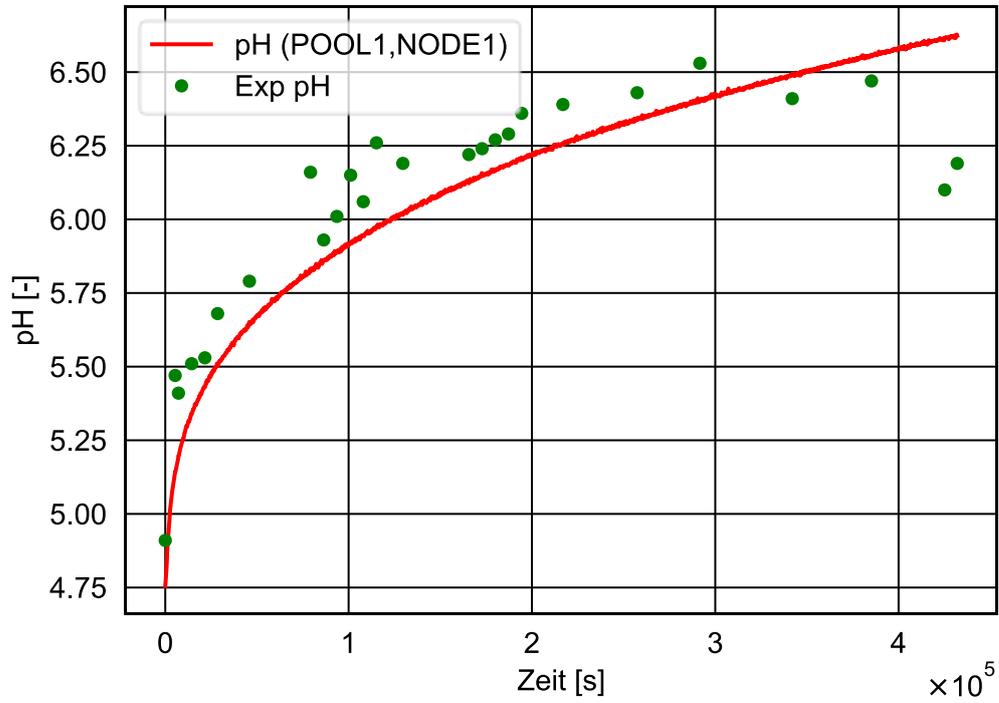
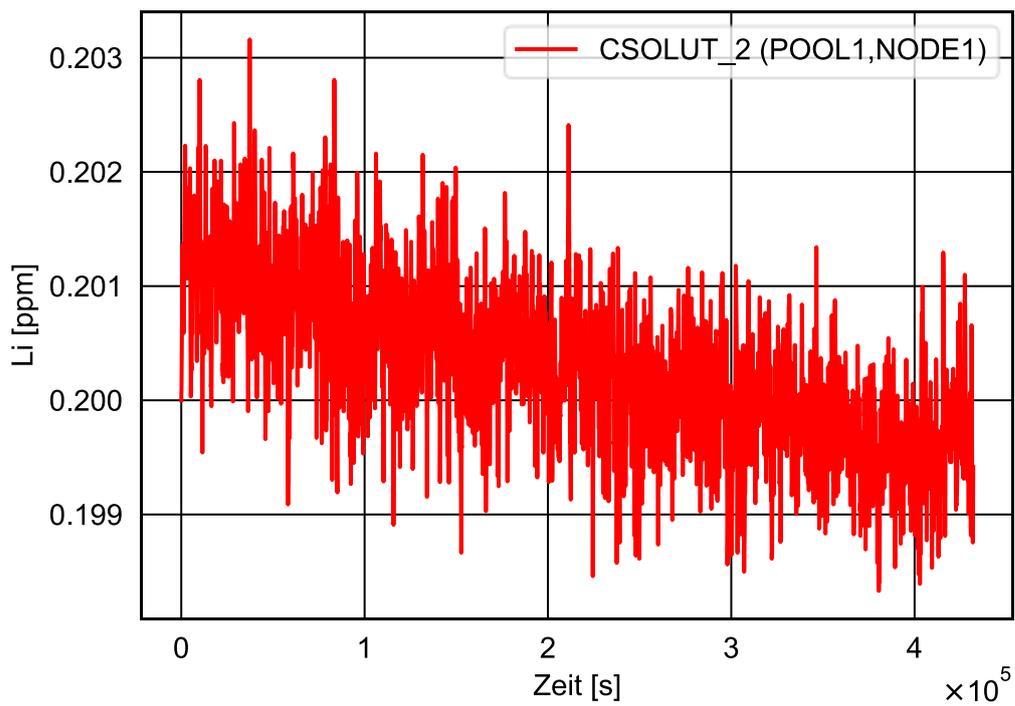


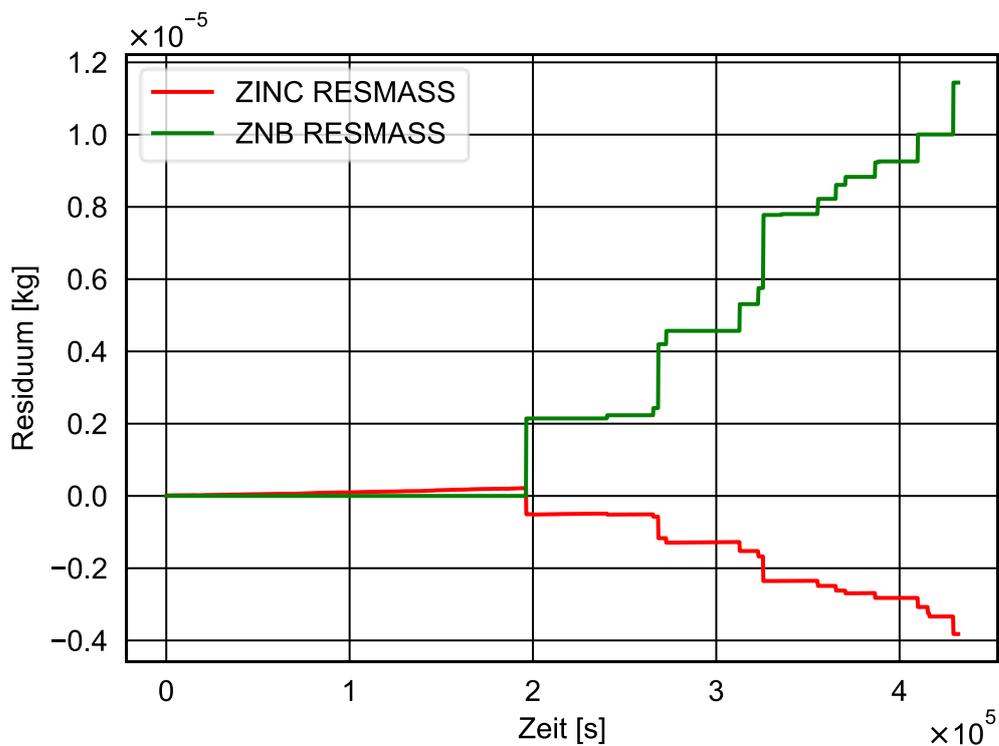
Abb. 3.31 Aus dem LGR freigesetzte Zinkmasse (ZSW-LS-V08)



**Abb. 3.32** pH-Wert (ZSW-LS-V08)



**Abb. 3.33** Lithium-Konzentration (ZSW-LS-V08)



**Abb. 3.34** Residuum für die Zinkmasse (ZSW-LS-V08)

### 3.6.4 Validierung des AZora-Moduls „Zinkborat-Ausfällung, -Transport und -anlagerung“

Die Validierung des AZora-Teilmoduls „Zinkborat-Ausfällung, -Transport und -anlagerung“ wurde anhand der Nachrechnung spezifischer Versuche durchgeführt. Diese Versuche wurden vom Projektpartner HSZG durchgeführt und ausgewertet.

Die Anzahl der nachzurechnenden Versuche zum Zweck der Modulvalidierung wurde in Kooperation mit HSZG so festgelegt, dass eine abdeckende Validierung des ZnB-Entstehungs- und Anlagerungsmoduls mit der geringstmöglichen Anzahl von Versuchsnachrechnungen möglich ist.

Folgende Versuche wurden ausgewählt:

1. Versuch THETIS\_T22-C1-V2
2. Versuch THETIS\_T00-C2-V2

Die Anfangs- und Randbedingungen für die Versuche wurden aus den Arbeitsberichten /IPM22a/ und /IPM22b/ abgeleitet.

Die Nachrechnung erfolgte unter Verwendung des thermohydraulischen THETIS-Modells, welches in Kapitel 3.6.1.2 beschrieben ist.

Für die Nachrechnung der Versuche wurde eine spezielle ATHLET-Programmversion, die auf der Code-Basisversion 3.3.1 aufsetzt, verwendet.

#### 3.6.4.1 Nachrechnung des Versuchs THETIS\_T22-C1-V2

Die Versuchsrandbedingungen für den Versuch THETIS\_T22-C1-V2 sind in Tab. 3.13 zusammengefasst.

**Tab. 3.13** Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs THETIS\_T22-C1-V2

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2000
LiOH (ppm)	0.2
Zinkkonzentration (mg/l)	63
Füllstand in ZWS (m)	1.90
Temperatur Wasser ZSW (°C)	55
Vorwärmer-Sollwerttemperatur THETIS (°C)	68
Volumenström-Sollwert ZSW-Pumpe (m³/h)	25
Volumenström-Sollwert THETIS-Pumpen (m³/h)	0.5

Die Abbildung einer spezifischen Anfangskonzentration von Zink und Lithium sowie von möglicherweise im Kühlmittel vorhandenen ZnB-Partikeln wird im ATHLET-Eingabedatensatz mittels des CW SOLUTE wie folgt spezifiziert:

```
C----- SOLUTE
@
@   NSOLUT
    3
@   ASOLCOMP      CSOLO      ISOLDEP
    ZINC           63.         0
    LITHIUM        0.2         0
    ZNB            0.0         1
```

Zur Berücksichtigung der Borsäure-Konzentration im Kühlmittel wird im ATHLET-Eingabedatensatz das Bortransportmodell aktiviert und die Werte des CW BORTRANS wie folgt implementiert:

```
C----- BORTRANS
@
@   IBTRAC        DSTRAC
    2              0.1
@   ISYSB         IBDEP          CBORO          ABOR
    1              0              2000.         'BORIC-ACID'
```

In Vorbereitung zur Durchführung der Simulation wurden vorab die während des Versuchs durchgeführten Handmaßnahmen protokolliert. Die Protokollierung der wesentlichen Handmaßnahmen für die automatisierte Steuerung der Anlagenkomponenten während der Rechnung wurde in einer Spezifikationsdatei als Python-Skript durchgeführt. Dieses Skript erlaubt sowohl das Verstellen von Sollwerten für die Aktivierung der Heizung bzw. des Kühlers als auch die Steuerung von Komponenten wie Pumpen und Ventilen automatisch während einer Simulation durch das sog. ATHLET-Steuerprogramm (ATHLET-Controller), welches im Rahmen des BMU-Vorhabens 4719R01375 entwickelt wurde (siehe /WEN22/).

In Abb. 3.35 bis Abb. 3.39 sind die Vergleichsplots der ATHLET-Rechnung mit den verfügbaren Versuchsdaten für den gesamten Versuchszeitraum von ca. 83 h (ca. 300.000 s) gezeigt.

Die Temperaturverläufe des Wassers in der ZSW und in THETIS sind in Abb. 3.35 gezeigt. Sowohl die berechneten Eintritts- als auch die Austrittswerte an den THETIS-Stabpaketen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Wassertemperatur in der ZSW weicht um ca. 3°C im Vergleich zum Experiment ab.

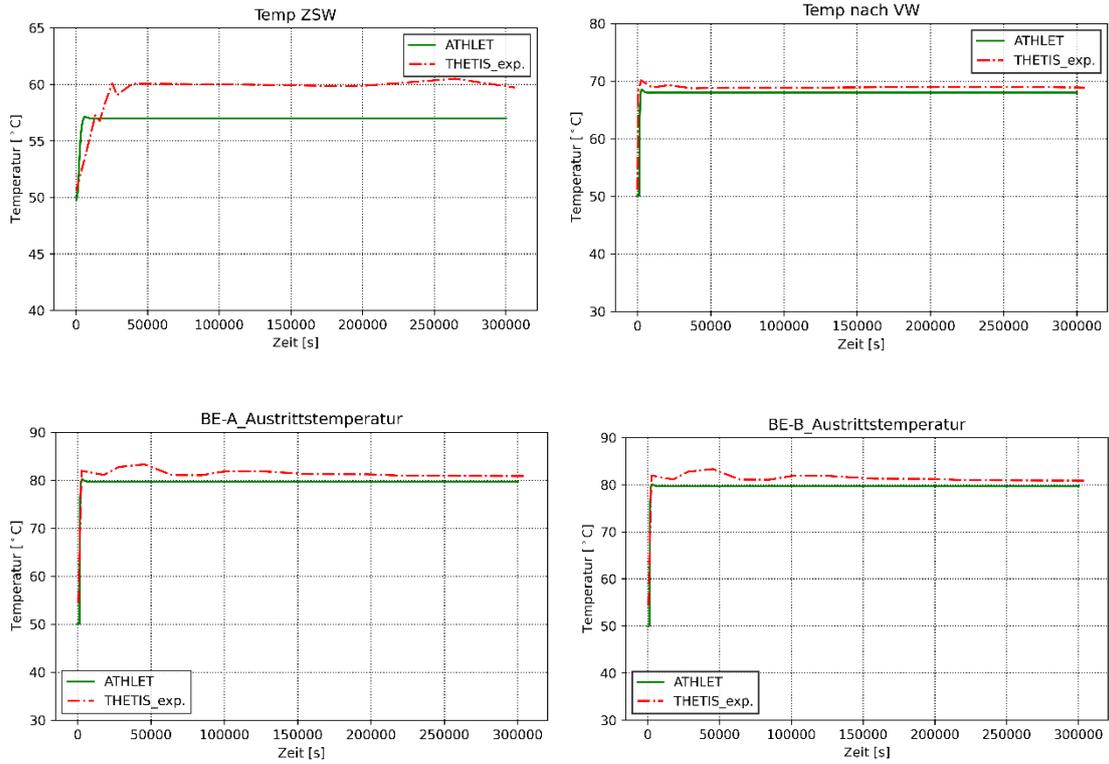
Der Volumenstrom der THETIS-Pumpen 1 und 2 in der Versuchsnachrechnung stimmt mit den Versuchsdaten überein (siehe Abb. 3.36).

Die berechnete Verminderung der Zink-Konzentration im Wasser in der ZSW sowie des daraus ermittelten pH-Wertes sind in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (siehe Abb. 3.37). Der Verlauf beider Parameter bestätigt die Qualität des implementierten Entstehungsmodells von ZnB-Partikeln aus der vorhandenen Konzentration von Zinkionen im Kühlmittel.

Die berechnete Massenbilanz von Zink und Zinkborat mit ATHLET ist in Abb. 3.38 gezeigt. Mit dem ZnB-Entstehungsmodell rechnet ATHLET nach 83 h insgesamt 0,797 kg ZnB im gesamten Kreislauf (ZSW und THETIS). Die an den beheizten Oberflächen und an den Abstandshaltern abgelagerte Menge an ZnB beträgt insgesamt 0,704 kg.

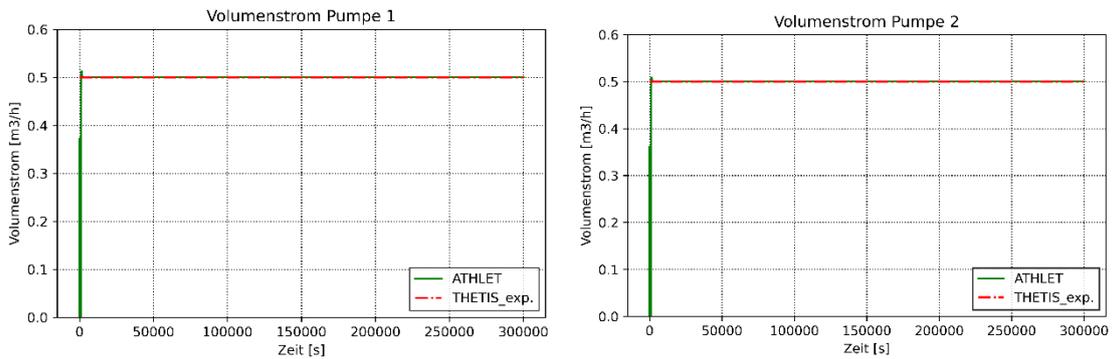
Die von ATHLET berechnete lokalen ZnB-Schichtdicken an den Hüllrohroberflächen im zugehörigen TFO nach dem Ende der Versuchsnachrechnung ist in Abb. 3.39 als Funktion der Stablänge dargestellt. Die im THETIS-Stabpaket ermittelte ZnB-Schichtdicke wurde nur an einem von neun Heizstäben gemessen. Der Vergleich mit dem berechneten axialen Verlauf der ZnB-Schicht zeigt, dass die spezifische Korrelation im ATHLET-Ablagerungsmodell die Anlagerung unterschätzt.

Die Tab. 3.14 fasst die Masse der abgelagerten Zinkborate an den Abstandshaltern zusammen. Der Vergleich zwischen den Rechenergebnissen und den experimentellen Daten zeigt eine deutliche Überschätzung der von ATHLET berechneten ZnB-Menge. Die aktuell implementierte Modellierung der Durchlässigkeit des AH-Bereiches bei ZnB-Belastung aus /SEE23a/ sowie der Verblockung der Abstandshalter mit mobilem ZnB aus /SEE22b/ sind derzeit nicht in der Lage, die Ablagerung an den Abstandshaltern realistisch abzuschätzen und benötigen somit eine weitere Adaption.

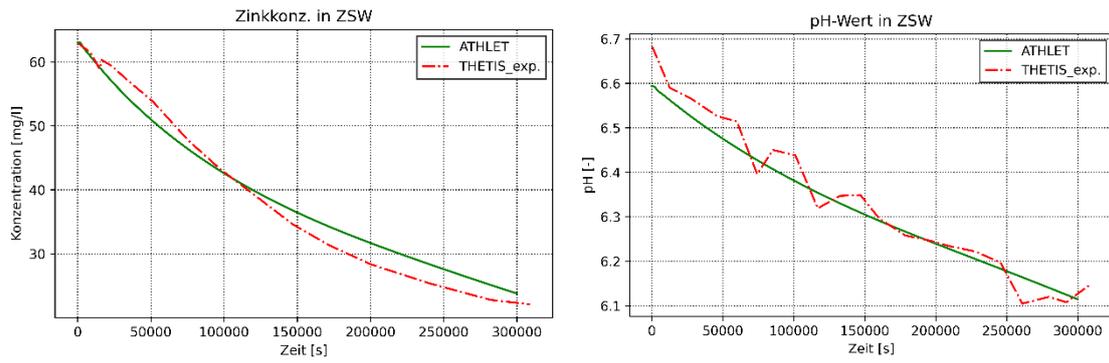


**Abb. 3.35** Vergleich zwischen experimentellen Daten und erzielten Ergebnissen

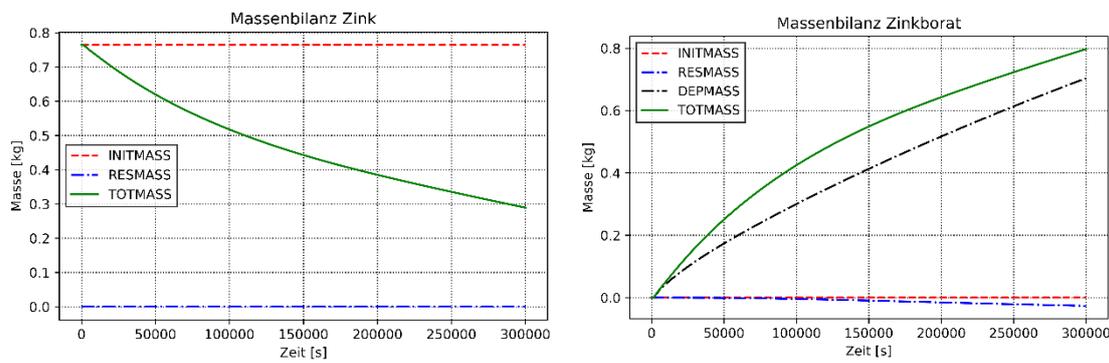
Hier für die Temperatur in der ZSW (oben links), am Eintritt der Stabpakete (oben rechts) sowie am Austritt des Stabpakets A (unten links) und B (unten rechts)



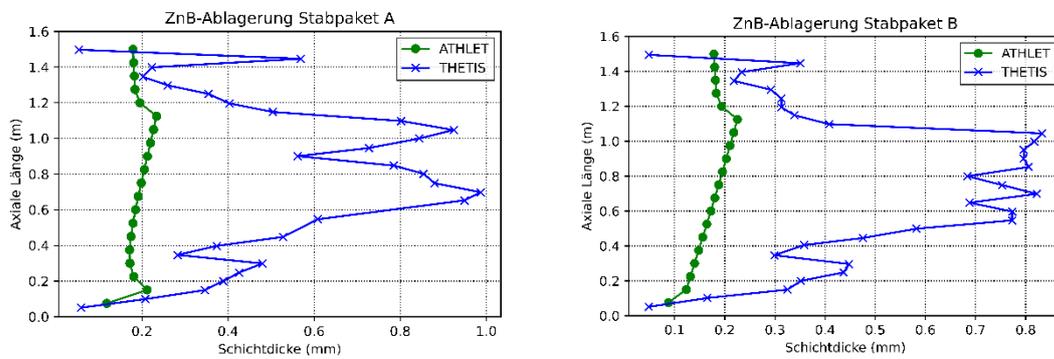
**Abb. 3.36** Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten für den Volumenstrom der THETIS-Pumpe 1 (links) und Pumpe 2 (rechts)



**Abb. 3.37** Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten für die Zinkkonzentration im Wasser (links) und den pH-Wert (rechts)



**Abb. 3.38** Berechnete Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET



**Abb. 3.39** Vergleich zwischen berechneter ZnB-Schichtdicke und gemessenen Werten an den Hüllrohroberflächen für die Stabpakete A (links) und B (rechts) nach 83 h

**Tab. 3.14** Gemessene und berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 83 h (THETIS-T2-C1-V2)

		Stabpaket A (g)	Stabpaket B (g)
AH3	THETIS	5,18	7,69
	ATHLET	15,46	17,11
AH2	THETIS	6,59	-
	ATHLET	14,7	-
AH1	THETIS	3,60	4,23
	ATHLET	13,39	13,75

### 3.6.4.2 Nachrechnung des Versuchs THETIS\_T00-C2-V2

Die Versuchsrandbedingungen für den Versuch THETIS\_T00-C2-V2 sind in Tab. 3.15 zusammengefasst.

**Tab. 3.15** Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs THETIS\_T00-C2-V2

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2000
LiOH (ppm)	0.2
Zinkkonzentration (mg/l)	72
Füllstand in ZWS (m)	2.10
Temperatur Wasser ZSW (°C)	48
Vorwärmer-Sollwerttemperatur THETIS (°C)	55
Volumenström-Sollwert ZSW-Pumpe (m³/h)	25
Volumenström-Sollwert THETIS-Pumpen (m³/h)	0.5

Die Nachbildung einer spezifischen Anfangskonzentration von Zink und Lithium sowie von möglicherweise vorhandenen ZnB-Partikeln wird im ATHLET-Eingabedatensatz mittels des CW SOLUTE wie folgt spezifiziert:

```
C----- SOLUTE
@
@   NSOLUT
    3
@   ASOLCOMP      CSOLO      ISOLDEP
    ZINC           72.         0
    LITHIUM        0.2         0
    ZNB            0.0         1
```

Zur Berücksichtigung der Borsäure-Konzentration im Kühlmittel werden im ATHLET-Eingabedatensatz die Werte des Bortransportmodells unter dem CW BORTRANS wie folgt implementiert:

```
C----- BORTRANS
@
@   IBTRAC        DSTRAC
    2              0.1
@   ISYSB         IBDEP          CBORO          ABOR
    1              0              2000.         'BORIC-ACID'
@
```

In Vorbereitung zur Durchführung der Simulation wurden vorab die während des Versuchs durchgeführten Handmaßnahmen protokolliert. Auch für die Nachrechnung dieses Versuchs wurde eine Protokollierung der wesentlichen Handmaßnahmen für die Steuerung der Anlagenkomponenten während der Rechnung in einer Spezifikationsdatei als Python-Skript durchgeführt.

In Abb. 3.40 bis Abb. 3.44 sind die Vergleichsplots der ATHLET-Rechnung mit den verfügbaren Versuchsdaten für die gesamten Versuchszeitraum von ca. 83 h (ca. 300.000 s) gezeigt. Der Versuch endete jedoch nach ca. 73h und die Abschaltung der wesentlichen Anlagekomponenten ist in den Plots ersichtlich.

Die Temperaturverläufe des Wassers in der ZSW und THETIS sind in Abb. 3.40 gezeigt. Sowohl die Eintritt- als auch die Austrittswerte an den THETIS-Stabpaketen zeigen für diese Validierungsrechnung eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

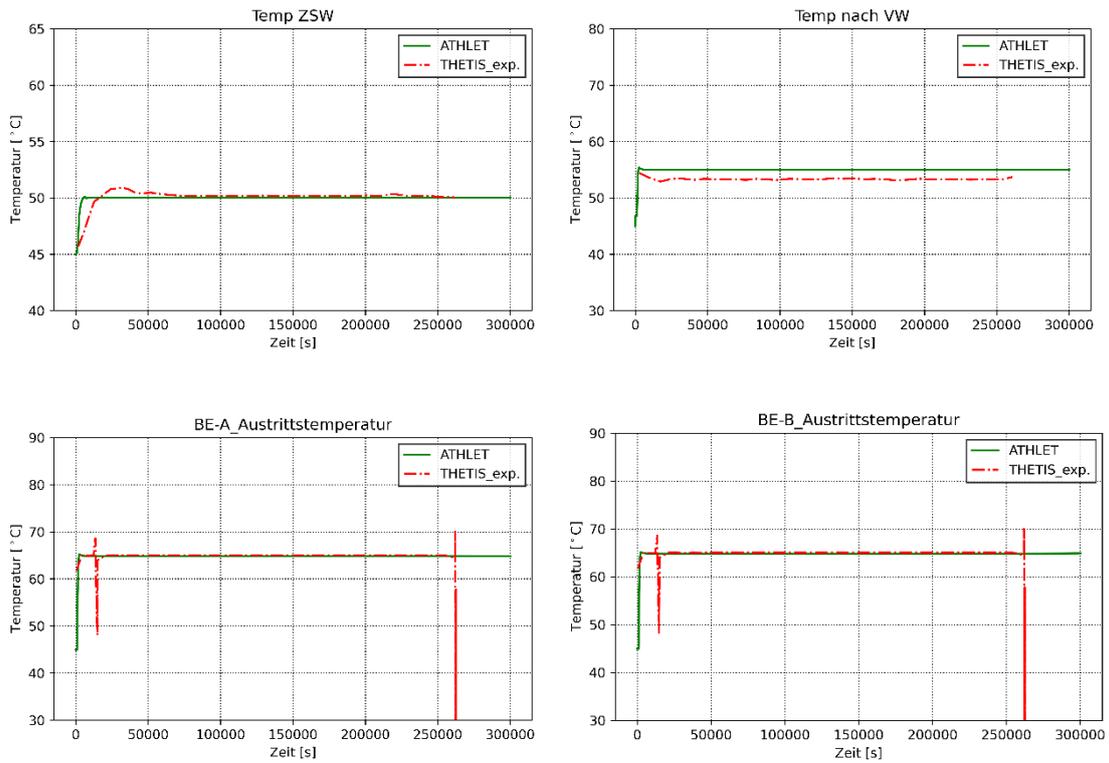
Der Volumenstrom der THETIS-Pumpen 1 und 2 in der Versuchsnachrechnung stimmt mit den Versuchsdaten überein (siehe Abb. 3.41).

Die berechnete Verminderung der Zink-Konzentration im Wasser in der ZSW sowie des daraus ermittelten pH-Wertes zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Daten in der ersten Phase des Versuchs (siehe Abb. 3.42). Nach ca. 5h ist eine Veränderung bei der Verminderung der Zinkkonzentration im Versuch zu erkennen. Diese ist auf einen kurzzeitigen Abbruch des Experiments zurückzuführen. Am Ende der Simulationszeit weicht die berechnete Zinkkonzentration um ca. 8 mg/l zu dem experimentell ermittelten Wert ab.

Der berechnete Massenbilanz von Zink und Zinkborat mit ATHLET ist in Abb. 3.43 gezeigt. Mit dem ZnB-Entstehungsmodell rechnet ATHLET nach 83 h insgesamt 0.668 kg ZnB im gesamten Kreislauf (ZSW und THETIS). Die an den beheizten Oberflächen und an Abstandshaltern abgelagerte Menge vom gesamten ZnB beträgt 0.279 kg.

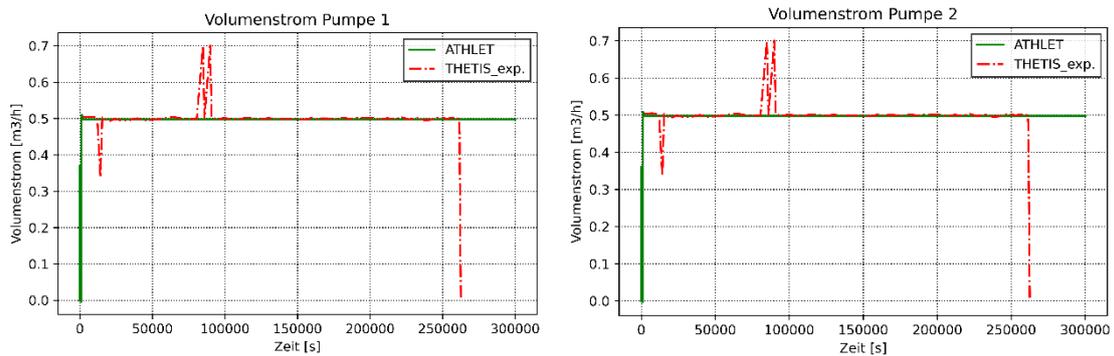
Die von ATHLET berechnete mittlere ZnB-Schicht an den Hüllrohroberflächen nach dem Ende der Versuchsnachrechnung wurde in Abb. 3.44 als Funktion der Stablänge dargestellt. Das Ablagerungsmodell unterschätzt auch für diesen Versuch die Anlagerung von Zinkborate an den Hüllrohroberflächen.

Die Tab. 3.16 fasst die Masse der abgelagerten Zinkborate an den Abstandshaltern zusammen. Der Vergleich zwischen den Rechenergebnissen und den experimentellen Daten zeigt auch für diesen Versuch eine deutliche Überschätzung der berechneten ZnB-Menge. Der Grund dieses Verhaltens liegt an der Korrelation zur Modellierung der Modellierung der Verblockung der AH mit mobilem ZnB aus /SEE22b/ sowie an der Korrelation zur Berechnung der Durchlässigkeit des AH-Bereiches bei ZnB-Belegung aus /SEE23a/.

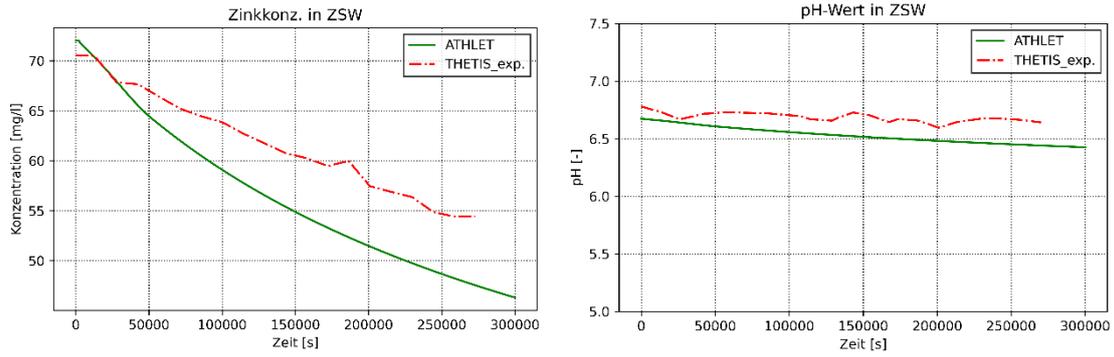


**Abb. 3.40** Vergleich zwischen experimentellen Daten und erzielten Ergebnisse

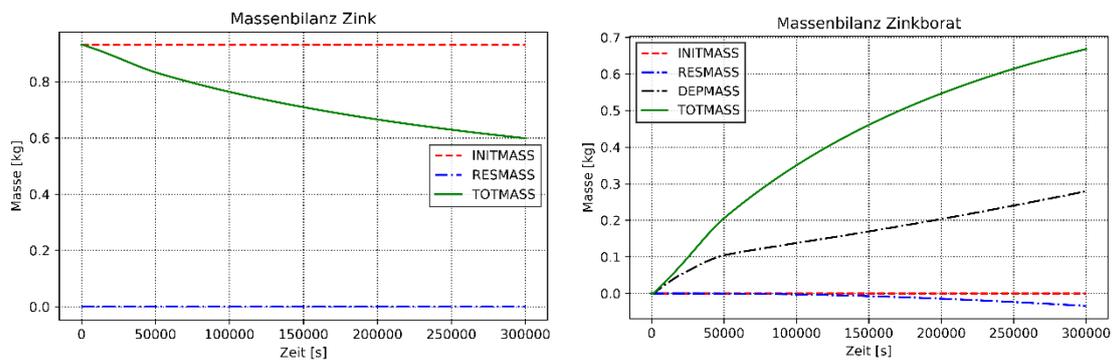
Hier für die Temperatur in der ZSW (oben links), am Eintritt der Stabpakete (oben rechts) sowie am Austritt des Stabpakets A (unten links) und B (unten rechts)



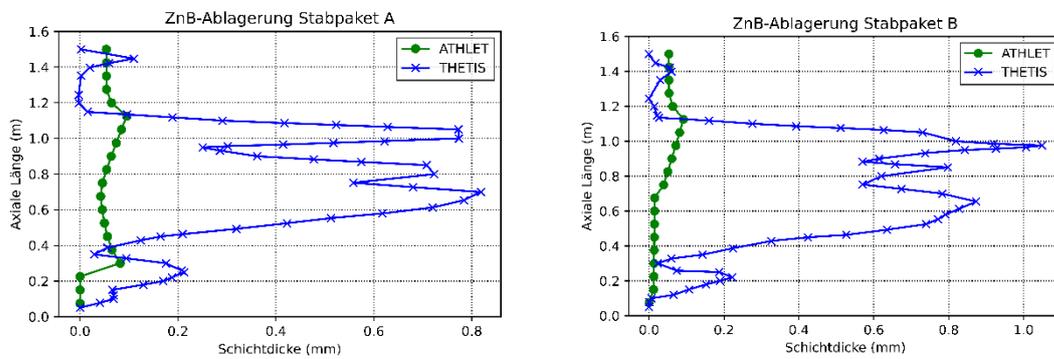
**Abb. 3.41** Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten vom Volumenstrom der THETIS-Pumpe 1 (links) und Pumpe 2 (rechts)



**Abb. 3.42** Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten von Zinkkonzentration im Wasser (links) und pH (rechts)



**Abb. 3.43** Berechneter Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET



**Abb. 3.44** Vergleich zwischen der berechneten ZnB-Schichtdicke und der gemessenen Werten an Hüllrohroberflächen

Hier für die Stabpakete A (links) und B (rechts) nach 83h

**Tab. 3.16** Berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 83h  
(THETIS-T0-C2-V2)

		Stabpaket A (g)	Stabpaket B (g)
AH3	THETIS	2,54	4,51
	ATHLET	22,14	24,48
AH2	THETIS	3,76	-
	ATHLET	19,96	
AH1	THETIS	0,92	0,83
	ATHLET	17,35	18,11

### 3.6.5 Validierung des Gesamtmoduls AZora

Die Validierung des Gesamtmoduls AZora in ATHLET wurde anhand der Nachrechnung des sog. Validierungsversuchs 1 durchgeführt.

Für die Nachrechnung der Versuche wurde eine spezielle ATHLET-Programmversion, die auf der Code-Basisversion 3.3.1 aufsetzt, verwendet.

Die Anfangs- und Randbedingungen wurden in Kooperation mit dem Projektpartner HSZG festgelegt und der GRS zur Verfügung gestellt (siehe /SEE23/) und sind in Tab. 3.17 zusammengefasst.

**Tab. 3.17** Anfangs- und Randbedingungen für die Validierungsrechnung

Parameter	Wert
Wasserchemie Borsäure (ppm)	2000
LiOH (ppm)	0.2
Füllstand in ZWS (m)	1.50
Temperatur Wasser ZSW (°C)	45
Volumenström-Sollwert ZSW-Pumpe (m <sup>3</sup> /h)	17
Volumenström-Sollwert THETIS-Pumpen (m <sup>3</sup> /h)	0.33
Korrosionsoberfläche im Jet (m <sup>2</sup> )	2 * 0.7
Korrosionsoberfläche unterhalb der Wasseroberfläche (m <sup>2</sup> )	2 * 2.7

Zur Abbildung der LGR werden im ATHLET-Eingabedatensatz im oberen Bereich von Objekt POOL3 die Zinkquelle wie folgt spezifiziert:

```

----- SOLUTE
@      SLEN  ANAMSOL  ITYPSRC  ASOLSRC  MSOLSRC
      1.41   ZINC     0         5.4      0.  @ unterhalb WO
      1.8    ZINC     1         1.4      0.  @ im Leckstrahl

```

Die spezifischen Lithium-Konzentration wurde im ATHLET-Eingabedatensatz im CW SOLUTE wie folgt definiert:

```

C----- SOLUTE
@
@      NSOLUT
      3
@      ASOLCOMP  CSOLO  ISOLDEP
      ZINC       0.0    0
      LITHIUM    0.2    0
      ZNB        0.0    1

```

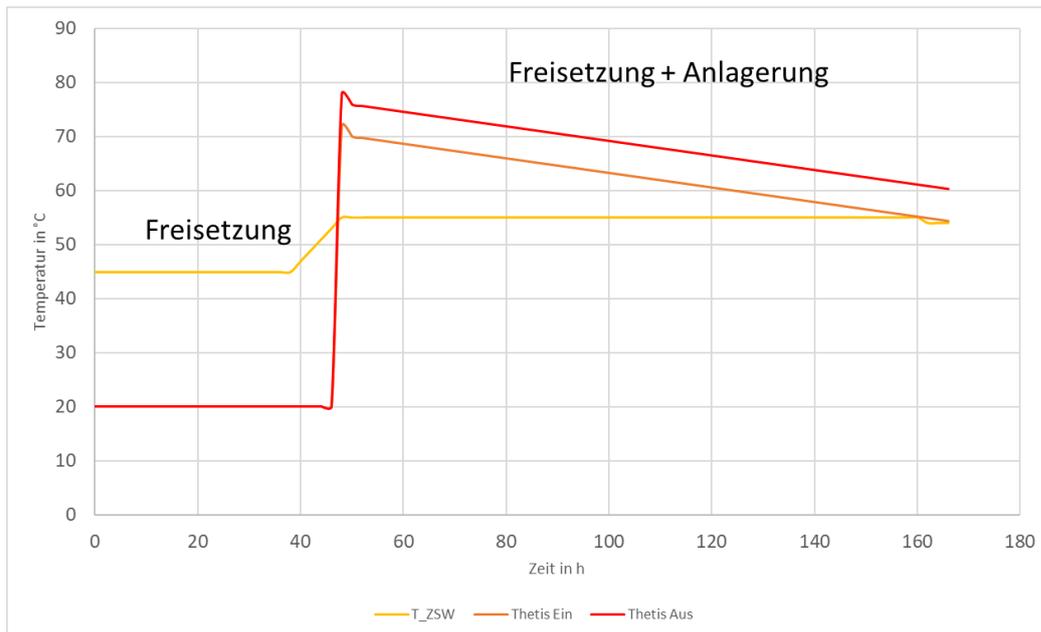
Zur Berücksichtigung der Borsäure-Konzentration im Kühlmittel wurde im ATHLET-Eingabedatensatz den Wert im bereits vorhandenen CW BORTRANS wie folgt implementiert:

```

C----- BORTRANS
@
@  IBTRAC  DSTRAC
   2        0.1
@  ISYSB   IBDEP   CBORO   ABOR
   1        0      2000.   'BORIC-ACID'
@

```

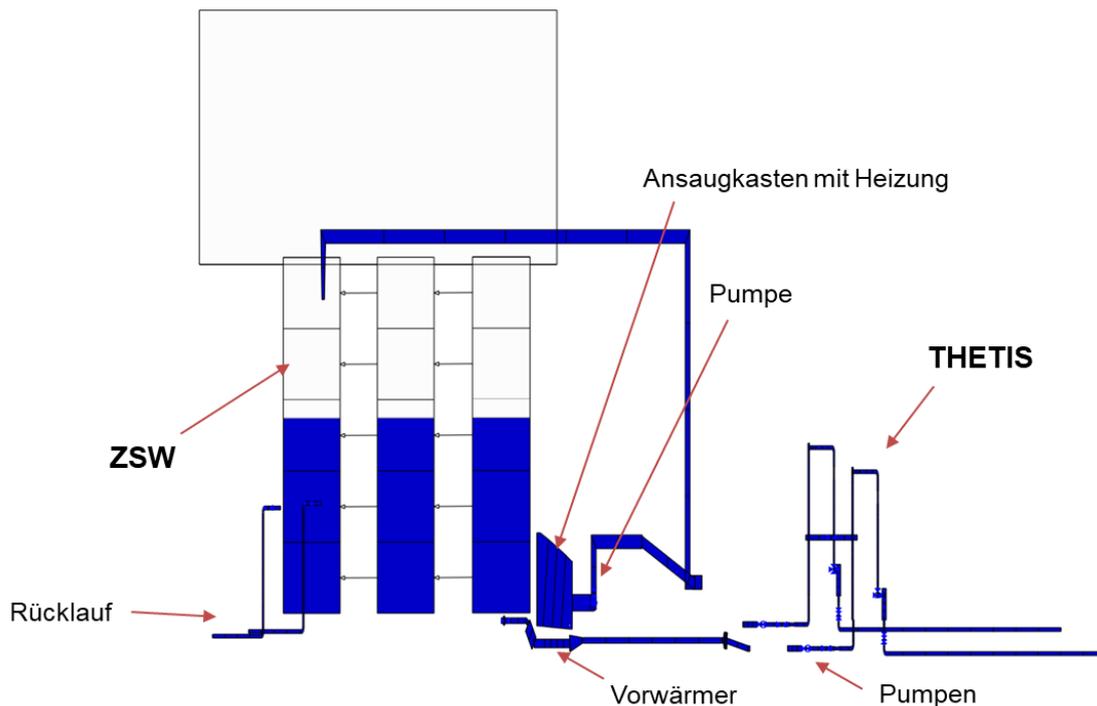
Die Zuschaltung der wesentlichen THETIS-Komponente (Pumpen, Vorwärmerheizung und Stabpaketleistung) erfolgt nach der erste Konditionierungsphase von ca. 48 h, in der die Freisetzung von Zink aus der LGR in der ZSW stattfindet. Der theoretische Verlauf der Temperatur des Wassers in der ZSW sowie am Eintritt und Austritt der Stabpakete in THETIS ist in Abb. 3.45 dargestellt.



**Abb. 3.45** Theoretischer Verlauf der Wassertemperatur in ZSW und THETIS-Stabpakete für den Validierungsversuch aus /SEE23/

Die Simulation erfolgte unter Verwendung einer angepassten Version des ATHLET-Eingabedatensatzes, bei welcher die thermohydraulischen Modelle von den Versuchsanlagen ZSW und THETIS zusammengeführt wurden. Grund der Erweiterung des thermohydraulischen THETIS-Modells war die zu simulierende Konditionierungsphase des Kühlmittels unter Berücksichtigung der Zink-Freisetzung in der ZSW während der Anfangsphase des Versuchs.

Das angepasste thermohydraulische Modell vom THETIS-Versuchsstand mit Berücksichtigung der wesentlichen Komponenten (Heizkastens, Pumpen und Leitungen) der ZSW-Versuchsanlage ist als Nodalisierungsbild in Abb. 3.46 dargestellt.



**Abb. 3.46** Nodalisierungsbild des angepassten THETIS-Datensatzes mit Berücksichtigung des Heizkastens, Pumpen und Leitungen der ZSW-Versuchsanlage

In Vorbereitung zur Durchführung der Simulation wurden vorab die während des Versuchs durchgeführten Handmaßnahmen protokolliert. Die Protokollierung der wesentlichen Handmaßnahmen für die Steuerung der Anlagenkomponenten während der Rechnung wurde in einer Spezifikationsdatei als Python-Skript durchgeführt, ähnlich wie für die Nachrechnung der Versuche THETIS\_T22-C1-V2 und THETIS\_T00-C2-V2 (siehe Kapitel 3.6.4).

Aufgrund von Schwierigkeiten bei der Lieferung von Komponenten für die Versuchsanlagen THETIS bzw. ZSW und der damit verbundenen Verzögerungen bei der Vorbereitungsarbeit zur Durchführung der Validierungsversuche seitens des Projektpartners HSZG konnten die Analyseergebnisse mittels ATHLET nicht in vollem Umfang mit den experimentellen Daten verglichen werden. Die Ergebnisse der Rechnung konnten somit nur mit den Daten aus dem Arbeitsbericht /IPM23/ verglichen werden, in dem nur die versuchsspezifischen Randbedingungen evaluiert wurden.

In Abb. 3.47 bis Abb. 3.52 sind die Vergleichsplots der ATHLET-Rechnung mit den verfügbaren Versuchsdaten für den gesamten Versuchszeitraum von ca. 168 h (ca. 605.000 s) gezeigt.

Für die Prüfung der entwickelten und in ATHLET implementierten Modelle des AZora-Moduls ist die genaue Berücksichtigung der Versuchsrandbedingungen erforderlich. Die Verläufe der Parameter Massenstrom und Temperatur sowohl in der ZSW als auch im THETIS-Modell deuten auf eine gute Nachrechnung der im Experiment gemessenen Anfangs- bzw. Randbedingungen hin (siehe Abb. 3.47 und Abb. 3.48). Die Aufheizung des Wassers in der ZSW im Experiment (siehe Abb. 3.47, oben links) startete nach ca. 27 h statt nach 38 h, wie im theoretischen Sollwert-Verlauf in Abb. 3.45 dargestellt.

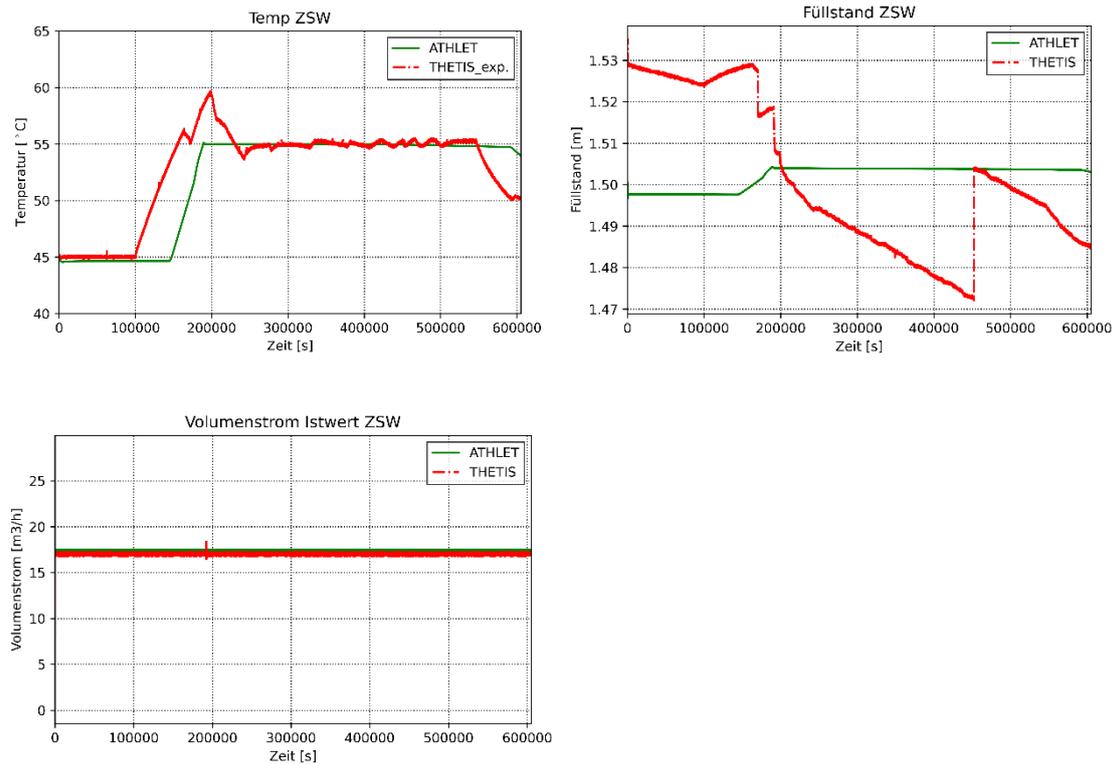
Die berechnete Zink-Konzentration im Wasser in der ZSW sowie der daraus ermittelten pH-Wert in Abb. 3.49 sind in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Das Verhalten beweist die Qualität des AZora-Teilmoduls „Zink-Freisetzung“ für die Berechnung der Freisetzung von Zinkionen aus den im Eingabedatensatz definierten, verzinkten Oberflächen.

Die berechnete Massenbilanz von Zink und Zinkborat mit ATHLET ist in Abb. 3.50 gezeigt. Die Entstehung von Zinkborat-Partikeln im Kühlmittel beginnt kurz nach der Inbetriebnahme der THETIS-Pumpen bzw. Zuschaltung der Heizstäbe in beiden Stabpaketen. Das entwickelte Modell „ZnB-Entstehung“ rechnet nach 168 h insgesamt 0.752 kg ZnB im gesamten Kreislauf (ZSW und THETIS). Die an den beheizten Oberflächen und an Abstandshaltern abgelagerte Menge ZnB beträgt insgesamt 0.5 kg.

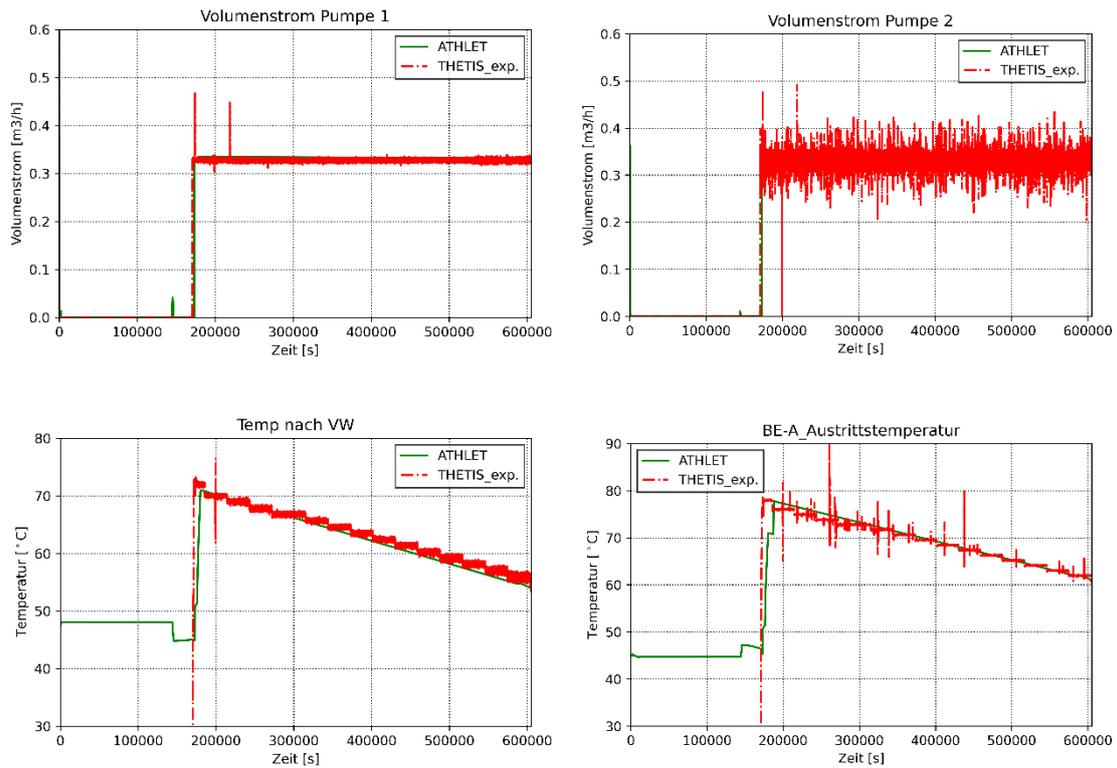
Die von ATHLET berechnete mittlere ZnB-Schicht an den Hüllrohroberflächen nach dem Ende der Versuchsnachrechnung wurde in Abb. 3.52 als Funktion der Stablänge dargestellt. Ein linearer Anstieg des ZnB-Schichtwachstums ist im Bereich der beheizten Zone der Stäbe zu erkennen. Die berechnete mittlere ZnB-Schichtdicke beträgt ca. 0,13 mm. Für die Stäbe in Stabpaket A berechnet ATHLET eine erhöhte Anlagerung im Bereich des Stabpaket-Eintritts (siehe Abb. 3.52 links). Die lokal erhöhte ZnB-Anlagerung am Eintritt des Stabpakets A hat den axialen Temperaturverlauf an den Hüllrohren beeinflusst (siehe Abb. 3.51). Der lokale Temperaturanstieg hat wiederum im Laufe der Simulation zum erhöhten Wachstum der ZnB-Schichtdicke geführt.

Die Tab. 3.18 fasst die berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an den Abstandshaltern nach 168 h zusammen. Ein Vergleich mit experimentellen Werten konnte im Projektzeitraum aufgrund fehlender Daten nicht durchgeführt werden.

Auch für diese Rechnung ist zu erwarten, dass die derzeit vorhandene Modelle für die Berechnung der Durchlässigkeit des AH-Bereiches bei ZnB-Belegung und für die Verblockung der Abstandshalter mit mobilem ZnB nicht in der Lage sind, eine realistische Ablagerungsmenge simulativ zu ermitteln.

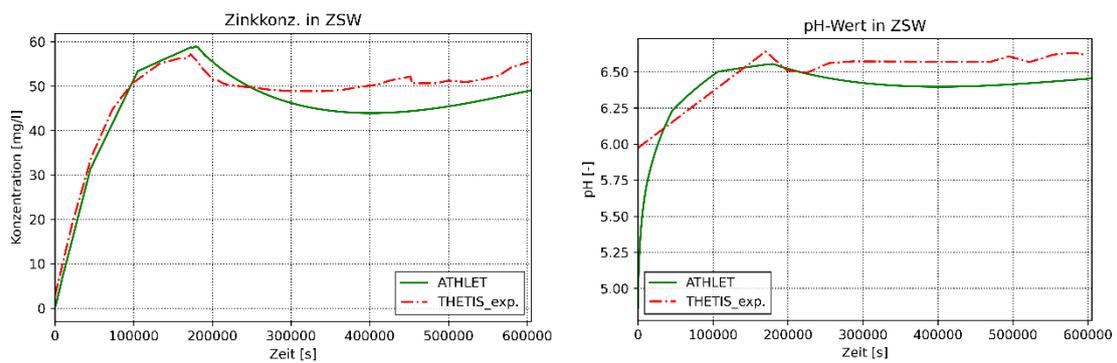


**Abb. 3.47** Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET-Nachrechnung für Temperatur (oben links), Füllstand (oben rechts) und Volumenstrom (unten links) in der ZSW

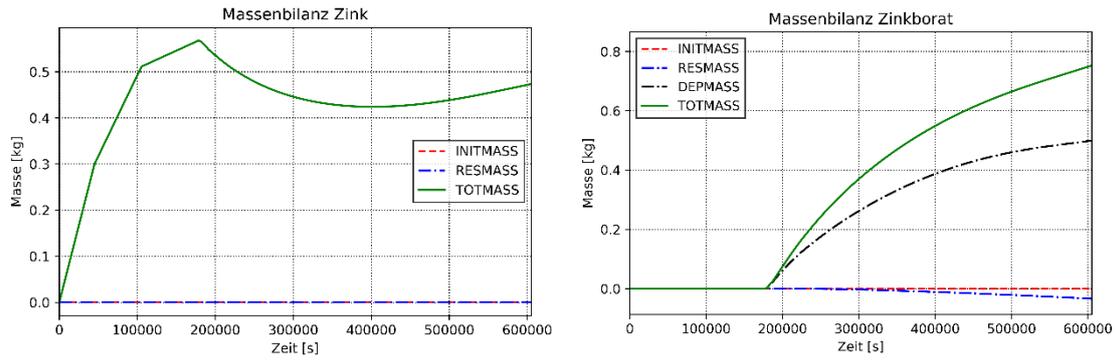


**Abb. 3.48** Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET-Nachrechnung

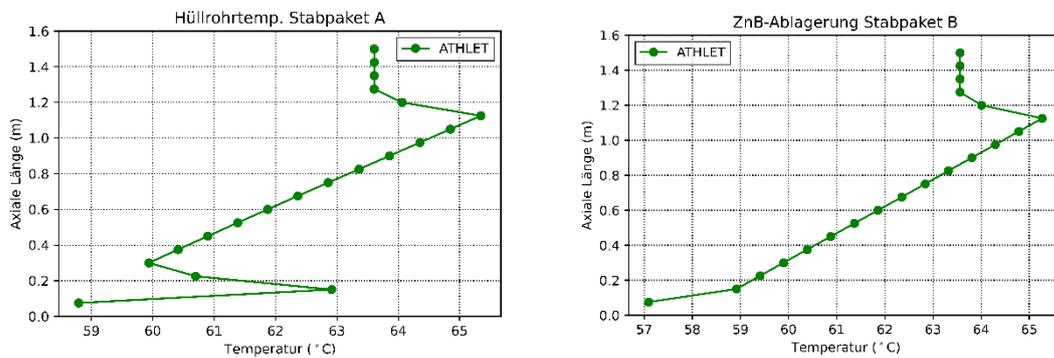
Hier für Volumenstrom der Pumpen (Pumpe 1: oben links, Pumpe 2: oben rechts), Stabpaket-Eintrittstemperatur (unten links) und Stabpaket-Austrittstemperatur (unten rechts) in THETIS



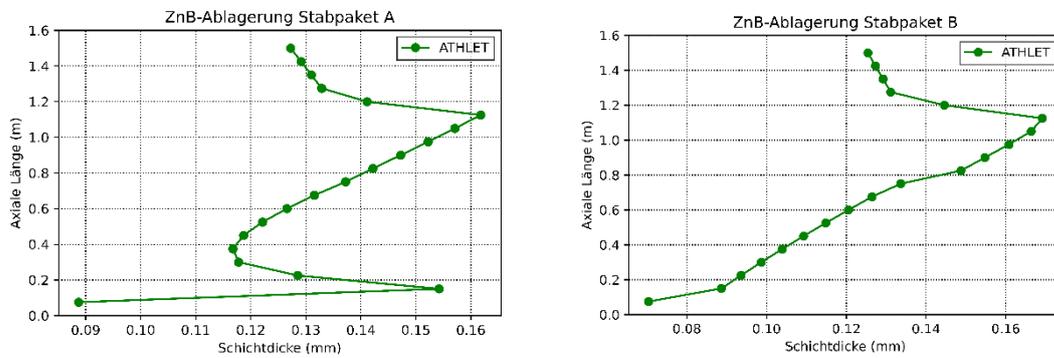
**Abb. 3.49** Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten der Zinkkonzentration im Wasser (links) und des pH-Wertes (rechts)



**Abb. 3.50** Berechnete Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET



**Abb. 3.51** Berechnete Hüllrohrtemperatur in Stabpaket A (links) und B (rechts) nach 168 h



**Abb. 3.52** Berechnete ZnB-Schichtdicke an den Hüllrohroberflächen von Stabpaket A (links) und B (rechts) nach 168 h

**Tab. 3.18** Berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 168 h

		<b>Stabpaket A (g)</b>	<b>Stabpaket B (g)</b>
AH3	THETIS	-	-
	ATHLET	17,13	18,71
AH2	THETIS	-	-
	ATHLET	15,48	-
AH1	THETIS	-	-
	ATHLET	13,31	13,32



## 4 Zusammenfassung

Um die Simulation von Zinkborat-Abscheidungen und deren thermohydraulischer Folgen im DWR-Kern nach KMV in ATHLET zu ermöglichen, wurde im Rahmen dieses Teilprojekts ein ATHLET-Modul namens „Zinkborat“ (Akronym: „AZora“) entwickelt und anhand der Nachrechnung von Validierungsversuchen erprobt. Zur Modellerstellung, -parametrierung und -validierung wurden Daten und Korrelationen aus Experimenten im halbtechnischen und im Labormaßstab verwendet, die von den Projektpartnern Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG), Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) und Technische Universität Dresden (TUD) erzeugt bzw. bereitgestellt wurden.

Das AZora-Modul beinhaltet die Teilmodelle (Schließungsmodelle) für die Beschreibung folgender Prozesse:

- Die Freisetzung von Zink-Ionen aus vorhandenen Zinkquellen (Lichtgitterroste);
- die Ausfällung bzw. Entstehung von Zinkborat im Kühlmittel;
- die An- bzw. Ablagerung von Zinkborat sowohl an heißen Strukturen (Hüllrohroberflächen) als auch an Abstandshaltern

Das Freisetzungsmodell berücksichtigt im Wesentlichen die unterschiedliche Freisetzungsrates von Zinkionen in Abhängigkeit der spezifischen Position der Zinkquelle (in der Nähe des Leckstrahls, getaucht unterhalb des Leckstrahls oder im ruhenden Medium). Die Abhängigkeit von weiteren physikalischen Parametern (wie z. B. dem pH-Wert, der Kühlmitteltemperatur und dem Volumenstrom in der Nähe der Zinkquelle) wird im Modell erfasst.

Zur Simulation der Zinkboratabscheidung wurde ein Modell in ATHLET implementiert, das die zeitliche Dynamik der chemischen Reaktion berücksichtigt. Die Entstehungsrate mobiler Zinkborate erfolgt in Abhängigkeit der Zinkkonzentration im Kühlmittel, der Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit des Kühlmittels sowie der Oberflächentemperatur (d. h. der Hüllrohrtemperatur).

Für den Transport von gelösten Stoffen und ZnB-Partikeln wurde ein gesondertes Modell entwickelt. Eine Rückwirkung der gelösten Stoffe auf die Fluidynamik wird im Modell nicht berücksichtigt.

Ferner wurde zur Simulation von Abtrennungseffekten in ATHLET ein weiteres Modell erstellt und implementiert, welche einen Stoff aus dem Kühlmittel mit einer bestimmten Effizienz abtrennt. Somit können Filter und Ionenaustauscher einschließlich der Angaben für deren Abtrenneffizienz und Kapazität vereinfacht definiert werden.

Die ZnB-Anlagerung am Hüllrohr wird in Abhängigkeit der Zink-Konzentration im Kühlmittel und der Hüllrohrtemperatur berechnet. Das implementierte Modell berücksichtigt die beiden Phasen der Anlagerung, die Keimschichtbildung sowie das eigentliche Schichtwachstum. Die Wärmeleitfähigkeit des angelagerten ZnB sowie dessen Schichtdicke wird bei der Bestimmung des Wärmeübergangs zwischen der äußersten Schicht der Hüllrohrstruktur und dem Fluid berücksichtigt.

Für die Simulation der Ablagerung mobiler ZnB-Partikel an Abstandshaltern wurde auf dem bestehenden Spacer-Modell von ATHLET aufgesetzt. Eine Korrelation wurde implementiert, die den Ablagerungsanteil der pro Zeiteinheit durch den Abstandshalter strömenden ZnB-Masse berechnet.

Durch Ablagerung von ZnB-Partikeln an den Abstandshaltern erhöhen sich die Formverluste. Da eine geeignete Korrelation, die diesen Effekt realistisch in der Simulation beschreibt, bisher fehlt, wurde ein vereinfachtes Modell implementiert, das den Einfluss der Ablagerung auf die Strömungsdruckverluste zumindest qualitativ berücksichtigt. Außerdem unterstellt die aktuelle Modellierung in ATHLET, dass ein vollständiger Verschluss eines Abstandshalters vorliegt, sobald die berechnete Porosität aufgrund der abgelagerten ZnB-Masse unter 5 % gesunken ist.

Für Versuchsnachrechnungen zum Zweck der Validierung des entwickelten ATHLET-Moduls „Zinkborat“ wurden thermohydraulische Modelle von folgenden Versuchsanlagen für ATHLET erstellt:

- Integralversuchsanlage „Zittauer Strömungswanne“ (ZSW)
- halbtechnische Versuchsanlage THETIS (“Twofold HEaTIng rod configuration for core Simulation”)

Die entwickelten ATHLET-Eingabedatensätze wurden durch die Nachrechnung von Inbetriebnahme-Versuchen qualifiziert.

Für die Validierung des thermohydraulischen ATHLET-Modells von THETIS im Bereich der Heizstäbe wurde zusätzlich ein detailliertes thermohydraulisches Modell des Stabpakets A mit dem Unterkanalcode CTF entwickelt und angewendet.

Die Validierung des AZora-Teilmoduls „Zink-Freisetzung“ wurde anhand der Nachrechnung von drei ZSW-Versuchen durchgeführt. Für alle drei Versuche haben die Ergebnisse der Nachrechnung durch den Vergleich mit den experimentellen Daten die Qualität des Zink-Freisetzungsmodells gezeigt.

Die Validierung des AZora-Teilmoduls „Zinkborat-Ausfällung, -Transport und -anlagerung“ wurde anhand der Nachrechnung von zwei THETIS-Versuchen durchgeführt. Bei den Nachrechnungen hat sich herausgestellt, dass die ZnB-Ablagerung an Abstandshaltern offensichtlich überschätzt, und die ZnB-Ablagerung an Hüllrohroberflächen unterschätzt wird. Aus diesem Grund wird eine weitere Bearbeitung bzw. Modifizierung der aktuellen Korrelation empfohlen. Alternativ wird ein vereinfachter Ansatz vorgeschlagen, der den Ablagerungsanteil der pro Zeiteinheit durch den Abstandshalter strömenden ZnB-Masse auf einen festen Wert setzt.

Die Validierung des Gesamtmoduls AZora in ATHLET wurde anhand der Nachrechnung des Validierungsversuchs mit der Nummer 1 durchgeführt. Auch die Ergebnisse der Nachrechnung des Validierungsversuchs deuten auf eine Überschätzung der Ablagerung von ZnB-Partikeln im Bereich der Abstandshalter sowie Unterschätzung der ZnB-Schichtdicke an Staboberflächen hin. Die Phänomene der Zink-Freisetzung aus den unterschiedlich positionierten Zinkquellen (Lichtgitterrosten) sowie der Entstehung von Zinkborate im Kühlmittel und der Transport der Stoffe könnte mit dem aktuellen Modellierungsansatz gut berechnet werden.

Neben der Verbesserung des Modells zur Ablagerung mobiler Zinkborate an Abstandshaltern sollten für die Validierung des AZora-Teilmoduls „Zinkborat-Ausfällung, -Transport und -anlagerung“ sowohl die Modellierung der dynamischen Erhöhung der Formverlustbeiwerte als auch das Modell zur Berücksichtigung der Blockade von Abstandshaltern aufgrund fortschreitender Verringerung der freien Strömungsquerschnittsfläche durch geeignete Korrelationen weiter verbessert werden.

Die Ergebnisse dieses Projekts haben hinsichtlich der Analyse chemisch-bedingter Prozesse zu einer Ausweitung des Anwendungsbereichs des Systemcodes ATHLET geführt. Derartige Prozesse können sowohl in nukleartechnischen als auch in nicht-nuklearen Einrichtungen auftreten.

Die Relevanz des Einflusses von chemischen Prozessen auf die Sicherheit der Anlagen kann zukünftig mit dem ATHLET-Code analytisch besser untersucht und bewertet werden.

Die Erkenntnisse aus diesem Vorhaben können auf die Analyse folgender Prozesse übertragen werden:

- Ablagerungsprozesse von Fremdstoffen im Reaktorkern (z. B. bei Notkühlung mittels eingespeisten Meerwassers) und
- verfahrenstechnisch vergleichbare Prozesse (z. B. schichtbildende Auskristallisierung schwerlöslicher Salze in geothermalen Kraftwerksanlagen, biologisches Fouling).

## Literaturverzeichnis

- /ALI16/ Ali, A.; LaBrier, D.; Blandfort, E.; Howe, K.: Corrosion and solubility in a TSP-buffered chemical environment following a loss of coolant accident: Part 4 - Integrated chemical effects testing; Nucl. Eng. Des. 300 (2016) 644-654.
- /ALT20/ S. Alt, Kurzdokumentation – Zittauer Strömungswanne (ZSW), Ausgabe 02/2020, Rev. 0.1.
- /ALT22/ S. Alt, A. Seeliger, F. Zacharias, S. Reinicke; KURZDOKUMENTATION – THETIS, Revision 0.5, Ausgabe: 12/2020, Berichts-Nr. BMWi 1501585A-KD-Thetis.
- /ALT22a/ S. Alt, F. Zacharias, Versuchsplanung IB-Versuche THETIS Phase 2, Stand 4.3.2022.
- /CAN15/ Canic, T.; Baur, S.; Bergfeldt, T.; Kuhn, D.: Influences on the barite precipitation from geothermal brines, Proceedings of the World Geothermal Congress 2015, Melbourne, Australia, 19 - 25 April 2015.
- /GRS05/ Gutachterliche Stellungnahme zu Ad-hoc-Problemen bei der Bundesaufsicht, GRS-Abschlussbericht, Vorhaben SR 2444, 05.08.2005.
- /GRS10/ Pointner et al.: Sicherstellung der Kernnotkühlung bei Kühlmittelverluststörfällen unter Berücksichtigung des Eintrags von Isoliermaterial in den Sicherheitsbehältersumpf (GRS-A-3526), FE-Vorhaben 3608R01326, Mai 2010.
- /GRS14/ Fachberatung des BMU bei wissenschaftlich-technischen Fragestellungen zu Ad-hoc-Problemen im Rahmen der Bundesaufsicht nach Art. 85 GG, BMUB-Vorhaben UM14R01326, GRS, Juni 2014.
- /GRS17/ Validierung von Rechenprogrammen zur Simulation des Reaktorkühlkreislaufs unter Stör- und Unfallbedingungen, Vorabversion Abschlussbericht GRS-404, F&E-Vorhaben RS1519, August 2016.

- /GRS18/ Maßnahmen zur Qualitätssicherung von Computerprogrammen der GRS, QM-Richtlinie Programmentwicklung, Managementhandbuch Kapitel 4.4, Juni 2018.
- /HAR17/ Harm, U.; Kryk, H.; Hampel, U.; Generic zinc corrosion studies at PWR LOCA conditions. Proceedings of the 48th Annual Meeting on Nuclear Technology (AMNT 2017), 2017.
- /HAR20/ Harm, U. et. al., Stand von Modellierung der Abscheidung mobiler Zinkborate im Kühlmittel unter KMV-Randbedingungen, Arbeitsbericht TUD, März 2020.
- /HAR20a/ Harm, U. et al.: Entwurf – Ergebnisse von Projektarbeiten der TUD zur Ermittlung des Stöchiometriefaktors  $f$  ( $mZnB / mZn$ ) von abgeschiedenen festen Zinkboraten, Arbeitsbericht TUD, Mai 2020.
- /HAR22/ Harm, U.: Experimentelle Daten und Korrelationen aus SMZ-Experimenten (KMV-Randbedingungen). Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), 2022.
- /HSZ18/ Kästner, W., Hampel, U. et al., Verbundprojekttitle: Generische thermohydraulische und physikochemische Analysen zur Implementierung eines ATHLET-Moduls für die Simulation thermohydraulischer Folgen von Zinkborat-Ablagerungen im DWR-Kern, FZK 150 1585A/B, Dezember 2018.
- /HZD14/ Kryk, H.; Hoffmann, W.: Partikelentstehung und –transport im Kern von Druckwasserreaktoren; Physikochemische Mechanismen. Abschlussbericht BMWi-Vorhaben 150 1430, 2014.
- /IDE60/ Idel'chik I.E., Handbook of Hydraulic Resistance – Coefficients of Local Resistance and of Friction, Published for the U.S. Atomic Energy Commission by the Israel Program for Scientific Translations, AEC-tr-6630.
- /IPM12/ Alt, S. et al.: Isolationsmaterialbelastete Kühlmittelströmung im Kern – Experimentelle Untersuchungen und Datenanalyse, Abschlussbericht des Projektes 150 1360 (HZG-IPM-2012/KTPA007/02/01.01/E), 2012.

- /IPM14/ Kästner, W. et al.: Partikelentstehung und –transport im Kern von Druckwasserreaktoren – FKZ 150 1431: Thermo- und fluiddynamische Mechanismen. Abschlussbericht BMWi-Vorhaben 150 1431, 2014.
- /IPM19/ Kästner, W. et al.: Lokale Effekte im DWR-Kern infolge von Zinkborat-Ablagerungen nach KMV – FKZ 150 1491. Abschlussbericht BMWi-Vorhaben 150 1491, Berichts-Nr. HZG-IPM-2019/KTPA012/01/01.01/F, Mai 2019.
- /IPM20a/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing: Modellierung der Kühlmittelchemie, Entwurf. 5. Mai 2020.
- /IPM20b/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing: Arbeitsbericht: Bestimmung einer temperaturabhängigen, maximal möglichen Zinkkonzentration im KM / Modellierung des Temperatureinflusses auf die Zinkfreisetzung, 30. Juli 2020.
- /IPM22a/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing. Arbeitsbericht: Quick Look Report zum Versuch THETIS\_T00-C2-V2, 1. August 2022.
- /IPM22b/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing. Arbeitsbericht: Quick Look Report zum Versuch THETIS\_T22-C1-V2, 24. Mai 2022.
- /IPM23/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing. Arbeitsbericht: Quick Look Report zum Validierungsexperiment, 23. Januar 2023.
- /PAL19/ Palazzo, S., Schöffel, P., Teilprojekt: Entwicklung und Validierung eines ATHLET-Moduls zur Simulation thermohydraulischer Folgen von Zinkboratablagerungen im DWR-Kern (RS1571), Kick-off Meeting „Azora“, GRS-Foliensatz, Dresden 10.10.2019.

- /PAL20/ Palazzo, S., Kühlmittelreinigungssystem – Zusammenstellung der Daten, Technische Notiz, Rev. 0, 20.04.2020.
- /PEA16/ Pease, D.; LaBrier, D.; Ali, A.; Blandfort, E. D.; Howe, K. J.: Corrosion and solubility in a TSP-buffered chemical environment following a loss of coolant accident: Part 2 - Zinc; Nucl. Eng. Des. 300 (2016) 620-631.
- /REN18/ Renger, S.; Kryk, H. et al.: Multiscaled Experimental Investigations of Corrosion and Precipitation Processes After Loss-of-Coolant Accidents in Pressurized Water Reactors, Nuclear Technology, 2018.
- /SEE17/ Seeliger, A.; Alt, S.; Kästner, W.; Renger, S.: Safety-Related Analyses of Corrosion Processes at Zinc-Coated Installations inside the PWR Sump. Proceedings of the Annual Meeting on Nuclear Technology (AMNT 2017), 2017.
- /SEE20a/ IPM – Institut für Prozesstechnik, Prozessautomatisierung und Messtechnik, Fachgebiet Kerntechnik/Soft Computing: Modellierung der Kühlmittelchemie, 5. Mai 2020.
- /SEE20b/ Seeliger, A.: Auswertung des Freisetzungversuches ZSW-LS-V01 zum Zwecke der Validierung des Zinkfreisetzungmodells, Arbeitsbericht, 21. Juli 2020.
- /SEE20c/ Seeliger, A.: Bestimmung einer temperaturabhängigen, maximal möglichen Zinkkonzentration im KM, Arbeitsbericht, 19.05.2020.
- /SEE20d/ Seeliger, A.: Arbeitsbericht: Zeitunabhängige Freisetzungmodellierung für Zinkquellen im Leckstrahl, 30. Juli 2020.
- /SEE20e/ Seeliger, A.: Arbeitsbericht: Zeitunabhängige Freisetzungmodellierung für Zinkquellen im ruhenden Medium, 18. September 2020.
- /SEE20f/ Seeliger, A.: Arbeitsbericht: Zeitunabhängige Freisetzungmodellierung für Zinkquellen am Sumpfsieb, 08. Oktober 2020.

- /SEE21a/ Seeliger, A.: Arbeitsbericht: Zeitunabhängige Freisetzungsmodellierung für getauchte Zinkquellen nahe dem Jet, 21. Mai 2021.
- /SEE22a/ Seeliger, A.: Modellierung der Kühlmittelchemie für niedrige Li-Konzentrationen, Arbeitsbericht, 03.06.2022.
- /SEE22b/ Seeliger, A.: Modellierung der Verblockung der AH mit mobilem ZnB – Erster Zwischenstand, Arbeitsbericht, 21.12.2022.
- /SEE22c/ Seeliger, A., Modellierung der Entstehungsraten von mobilem ZnB – Finale Fassung, Arbeitsbericht, 15.09.2022.
- /SEE22d/ Seeliger, A., Modellierung der ZnB-Masse und Schichtdicke am Hüllrohr – Teil 2: ZnB-Schichtwachstum, Arbeitsbericht HSZG, 5.12.2022.
- /SEE23/ Seeliger, A. und Zacharias, F., AZora-Validierungsexperiment, Folien-satz, 10.1.2023.
- /SEE23a/ Seeliger, A., Modellierung der Durchlässigkeit des AH-Bereiches bei ZnB-Belegung – Zwischenstand – Arbeitsbericht HSZG, 10.1.2023.
- /WEN22/ Wenzel, S. et al., Weiterentwicklung und Einsatz eines automatisierten Verifizierungsverfahrens für Analysesimulatoren, GRS-679, S. 121, ISBN 978-3-949088-70-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH: Garching bei München, Mai 2022



## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Eingangs- und Ausgangsgrößen sowie Teilmodelle des zu entwickelnden ATHLET-Moduls „Zinkborat“ .....	4
Abb. 1.2	Hierarchie innerhalb der Teilmodelle und zu realisierende Transportpfade .....	5
Abb. 3.1	Maximale Zinkkonzentration bei Freisetzung (rot) und Zinksättigungskonzentration für ZnB-Partikelbildung (blau) .....	23
Abb. 3.2	ATHLET Nodalisierungsbild der ZSW-Versuchsanlage .....	45
Abb. 3.3	Nodalisierungsbild der THETIS Versuchsanlage in ATHLET .....	47
Abb. 3.4	Nodalisierungsbild des Vorwärmers in ATHLET-Modell von THETIS.....	47
Abb. 3.5	Darstellung der Modellierung von THETIS mit dem GRS-Tool ATM .....	47
Abb. 3.6	Regelkreis im AGM-Tool für die Regelung der Pumpen 1 und 2.....	49
Abb. 3.7	Modellierungsansatz der Heizstäbe mit dem Unterkanalcode COBRA-TF .....	50
Abb. 3.8	Darstellung des CTF-Modells des 3x3 Heizstabmoduls mit Paraview®.....	50
Abb. 3.9	Vereinfachte Darstellung der radialen Nodalisierung des Stabpakets im thermohydraulischen CTF-Modell .....	51
Abb. 3.10	ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 3 cm/s.....	54
Abb. 3.11	ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s.....	55
Abb. 3.12	ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 11 cm/s.....	56
Abb. 3.13	ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche.....	57
Abb. 3.14	ATHLET-Ergebnisse aus der Nachrechnung der IBN-Versuche.....	58
Abb. 3.15	Schematische Darstellung der Position der Temperatur-Messsonden in beiden Stabpaketen A und B /ALT22/.....	61
Abb. 3.16	Vergleich von erzielten Ergebnissen mit ATHLET und CTF Stabpaket-Modellen für den IBN-Versuch E65-A75 mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s.....	65
Abb. 3.17	Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V01) .....	68

Abb. 3.18	Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V01) .....	68
Abb. 3.19	Lithium-Konzentration (ZSW-LS-V01).....	69
Abb. 3.20	Freigesetzte Zinkmasse (ZSW-LS-V01).....	69
Abb. 3.21	Zinkkonzentration im KM (ZSW-LS-V01) .....	70
Abb. 3.22	pH-Wert im Pool (ZSW-LS-V01).....	70
Abb. 3.23	Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V02) .....	72
Abb. 3.24	Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V02) .....	73
Abb. 3.25	Zink-Konzentration (ZSW-LS-V02) .....	73
Abb. 3.26	Freigesetzte Zinkmasse aus den beiden LGR im Jet und untergetaucht unterhalb des Jets (ZSW-LS-V02).....	74
Abb. 3.27	pH-Wert in der Strömungswanne (ZSW-LS-V02).....	74
Abb. 3.28	Kühlmitteltemperatur (ZSW-LS-V08) .....	77
Abb. 3.29	Kühlmittelvolumenstrom (ZSW-LS-V08) .....	77
Abb. 3.30	Zinkkonzentration (ZSW-LS-V08).....	78
Abb. 3.31	Aus dem LGR freigesetzte Zinkmasse (ZSW-LS-V08).....	78
Abb. 3.32	pH-Wert (ZSW-LS-V08) .....	79
Abb. 3.33	Lithium-Konzentration (ZSW-LS-V08).....	79
Abb. 3.34	Residuum für die Zinkmasse (ZSW-LS-V08).....	80
Abb. 3.35	Vergleich zwischen experimentellen Daten und erzielten Ergebnissen.....	84
Abb. 3.36	Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten für den Volumenstrom der THETIS-Pumpe 1 (links) und Pumpe 2 (rechts).....	84
Abb. 3.37	Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten für die Zinkkonzentration im Wasser (links) und den pH-Wert (rechts).....	85
Abb. 3.38	Berechnete Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET .....	85
Abb. 3.39	Vergleich zwischen berechneter ZnB-Schichtdicke und gemessenen Werten an den Hüllrohroberflächen für die Stabpakete A (links) und B (rechts) nach 83 h.....	85

Abb. 3.40	Vergleich zwischen experimentellen Daten und erzielten Ergebnisse .....	89
Abb. 3.41	Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten vom Volumenstrom der THETIS-Pumpe 1 (links) und Pumpe 2 (rechts).....	89
Abb. 3.42	Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten von Zinkkonzentration im Wasser (links) und pH (rechts) .....	90
Abb. 3.43	Berechneter Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET .....	90
Abb. 3.44	Vergleich zwischen der berechneten ZnB-Schichtdicke und der gemessenen Werten an Hüllrohroberflächen .....	90
Abb. 3.45	Theoretischer Verlauf der Wassertemperatur in ZSW und THETIS- Stabpakete für den Validierungsversuch aus /SEE23/.....	93
Abb. 3.46	Nodalisierungsbild des angepassten THETIS-Datensatzes mit Berücksichtigung des Heizkastens, Pumpen und Leitungen der ZSW-Versuchsanlage .....	94
Abb. 3.47	Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET- Nachrechnung für Temperatur (oben links), Füllstand (oben rechts) und Volumenstrom (unten links) in der ZSW.....	96
Abb. 3.48	Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET- Nachrechnung .....	97
Abb. 3.49	Vergleich zwischen experimentellen Daten und berechneten Werten der Zinkkonzentration im Wasser (links) und des pH-Wertes (rechts).....	97
Abb. 3.50	Berechnete Massenbilanz von Zink (links) und Zinkborat (rechts) mit ATHLET .....	98
Abb. 3.51	Berechnete Hüllrohrtemperatur in Stabpaket A (links) und B (rechts) nach 168 h.....	98
Abb. 3.52	Berechnete ZnB-Schichtdicke an den Hüllrohroberflächen von Stabpaket A (links) und B (rechts) nach 168 h .....	98

## Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Eingabeoptionen und Modelle für Zinkquellen.....	30
Tab. 3.2	Wichtige Variablen des Freisetzungsmodus.....	30
Tab. 3.3	Wichtige Variablen des Zinkborat-Moduls.....	43
Tab. 3.4	Variation der Parameter für die Erstellung der Versuchsmatrix /ALT22a/.....	51
Tab. 3.5	Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 3 cm/s zum Zeitpunkt $t = 6000$ s.....	59
Tab. 3.6	Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s zum Zeitpunkt $t = 6000$ s.....	59
Tab. 3.7	Vergleich zwischen experimentellen Daten und ATHLET Ergebnissen für die IBN-Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 11 cm/s zum Zeitpunkt $t = 6000$ s.....	60
Tab. 3.8	Vergleich zwischen ATHLET und CTF Ergebnissen für die IBN- Versuche mit einer Kühlmittelgeschwindigkeit von 7 cm/s.....	63
Tab. 3.9	Vergleich zwischen ATHLET und CTF-Rechenergebnissen.....	64
Tab. 3.10	Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V01 .....	66
Tab. 3.11	Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V02 .....	71
Tab. 3.12	Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs ZSW-LS-V08 .....	75
Tab. 3.13	Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs THETIS_T22-C1-V2.....	81
Tab. 3.14	Gemessene und berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 83 h (THETIS-T2-C1-V2).....	86
Tab. 3.15	Anfangs- und Randbedingungen für die Nachrechnung des Versuchs THETIS_T00-C2-V2.....	86
Tab. 3.16	Berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 83h (THETIS-T0-C2-V2) .....	91
Tab. 3.17	Anfangs- und Randbedingungen für die Validierungsrechnung .....	91

Tab. 3.18	Berechnete Ablagerungsmenge von ZnB an Abstandshaltern nach 168 h.....	99
-----------	---	----

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

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

**85748 Garching b. München**

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

**10719 Berlin**

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

**38122 Braunschweig**

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

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