

**Verbesserungen von
Modellen zur Simulation
von Containment-
phänomenen mit dem
AC²-Programm COCOSYS**

Verbesserungen von Modellen zur Simulation von Containment- phänomenen mit dem AC²-Programm COCOSYS

Abschlussbericht

Claus Spengler
Siegfried Arndt
Ivan Bakalov
Sara Beck
Daniel von der Cron
Dandy Eschricht
Dimitar Iliev
Holger Nowack

November 2024

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1598 durchgeführt.

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

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

Deskriptoren

AC², COCOSYS, Containment, Iod- und Aerosolverhalten, Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI), Sicherheitsbehälter, Thermohydraulik

Kurzfassung

In dem von der GRS entwickelten Programmpaket AC² ist COCOSYS (**Containment Code System**) das detaillierte Analysewerkzeug zur Simulation von relevanten Vorgängen und Zuständen im Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken (KKW). AC²/COCOSYS wird zur Auswertung von Fragestellungen der Reaktorsicherheit genutzt. In diesem Vorhaben wurden in COCOSYS bestimmte Modelle verbessert oder ergänzt, um sowohl das Containmentverhalten als auch Freisetzungspfade aus dem Containment in die Umgebung für ein breites Spektrum von KKW-Technologien (Generation II – III+ sowie Forschungsreaktoren und zukünftige KKW der Generation IV und SMR) nach aktuellem Stand von W&T berechnen zu können. Dies erfolgte durch die Bearbeitung von fünf Themenbereichen:

- **Thermohydraulik im Containment:** Zur Simulation des Containment-Druckabbaus mit Gebäudekondensatoren (z. B. im WWER-1200 oder im HPR1000 als Sicherheitssystem auf den Sicherheitsebenen 3 und 4) wurden Modelle für den Kondensationswärmeübergang zwischen Containmentatmosphäre und Außenseite des Wärmetauschers erweitert und für die Kopplung mit ATHLET (Beschreibung des Wasser-/Dampf-Kreislaufes innerhalb des Wärmetauschers) ertüchtigt. Für die Simulation einer Temperaturverteilung in einem Wasserpool im Containment (in verschiedenen KKW auf der Sicherheitsebene 3 zur Abfuhr von Nachwärme bei der Stör- und Unfallbeherrschung vorgesehen, z. B. in den „Residual Heat Removal“-Systemen beim AP1000 oder HPR1000) oder wenn ein komplettes Auffüllen von ursprünglich leeren Raumbereichen mit Wasser simuliert werden soll, wurde die Funktionalität des zu diesem Zwecke zur Verfügung stehenden, kombinierten Gas-/Wasser-Strömungsmodells ATM_FULL erweitert (Initialisierung einer Zonenunterteilung in einem gefüllten Pool, Transport von Spaltprodukten und Aerosolen).
- **Verhalten von Spaltprodukten und Aerosolen:** Eine im Rahmen der COCOSYS-Entwicklung langfristig verfolgte Zielsetzung ist der Ersatz des früheren Modells AFP zur Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens in COCOSYS durch die Neuentwicklung AFP2 (ehemaliger Arbeitstitel: „NewAFP“), welche die Hauptkritikpunkte an AFP eliminiert und nun zentrale Bilanzen für Stoffmengen auf verschiedenen Ebenen (chemischen Verbindungen, Elementen oder Isotopen) führt. In diesem Vorhaben ist die Integration der bisher fehlenden, relevanten Teilmodelle in AFP2 nach derzeitigem Stand von W&T abgeschlossen worden, u. a. ist der Einbau des pH-Wert-Modells in AFP2 erfolgt. Im Hinblick auf die Errechnung des Nuklidinventars von Reaktorkernen und der Zerfallsprozesse wurde die GRS-Rechenkette AC² mit

einer Schnittstelle ausgestattet, die es erlaubt, einen separaten Code zur Berechnung des Isotopenverhaltens, anzubinden. Dies wurde im Vorhaben für den von GRS und PSI gemeinsam entwickelten Rechencode VENTINA realisiert. Im hier durchgeführten Vorhaben ist der für die COCOSYS-Modelle benötigte Teil der Schnittstelle erstellt und an VENTINA angebunden worden. Die Zerfallsrechnungen in COCOSYS-AFP2 basieren nun auf VENTINA-Methoden. Für das Isotopenverhalten in gekoppelten Rechnungen mit COCOSYS und ATHLET-CD stehen Arbeiten an der Schnittstelle zur Anbindung des Codes VENTINA aus.

- **Verhalten der Ex-Vessel-Kernschmelze:** Für die Simulation einer nicht-kühlbaren, kompakten Kernschmelze bzw. der Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) ist das Hauptmodul CCI in COCOSYS verfügbar und im Rahmen des Vorhabens gepflegt und aktualisiert worden. Basierend auf Rückflüssen aus Anwendung und internationalem fachlichen Austausch zu Fragestellungen aus diesem Themenkomplex wurden im Rahmen dieses Vorhabens Verbesserungen an existierenden Teilmodellen durchgeführt. Der Hauptaspekt der Arbeiten zum Ex-Vessel-Schmelzeverhalten lag auf der Ergänzung eines Ansatzes, um in Unfallsimulationen im Unterschied zu MCCI auch eine potenziell kühlbare Schüttbettkonfiguration zu berücksichtigen. Hierzu wurde in diesem Vorhaben das von der AG PSS an der Ruhr-Universität Bochum entwickelte Modell DEMON in CCI eingebaut und zunächst vereinfachend an die Bedingungen (und Unsicherheiten) bei Ex-Vessel-Szenarien angepasst sowie in der Einbettung in COCOSYS erprobt.
- **Kopplungen in COCOSYS bzw. AC²:** Neben der Erweiterung der Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET für den Wärmeübergang an Strukturen wurde die Verwendung des WGR-Strahlungsmodells aus COCOSYS für den Energieaustausch zwischen der Oberfläche einer in ATHLET gerechneten Wärmestruktur und der anliegenden, in COCOSYS gerechneten Containment-Zone ermöglicht. Des Weiteren ist COCOSYS um die Datenausgabe im HDF5-Format erweitert worden, so dass für das Postprocessing von Rechenergebnissen ein verbreitetes, mit frei verfügbarer Software lesbares Datenformat verfügbar ist. Daher können jetzt auch die für AC² entwickelten Werkzeuge ATLASneo und Batchplot zur graphischen Darstellung von COCOSYS-Ergebnissen genutzt werden. Ferner wurde COCOSYS für die Nutzung der Wasser-/Dampf-Stoffwertdatenbank der Hochschule-Zittau-Görlitz weitestgehend vorbereitet. Ferner wurde die Nutzung des Modells LHEAD in ATHLET-CD für die Simulation der Vorgänge im unteren Plenum des Reaktordruckbehälters bei der Kernzerstörung als Alternative zum Modell AIDA für die gekoppelte Rechnung mit COCOSYS ermöglicht.

- **Querschnittsaktivitäten und Benutzerberatung:** Hier wurde die Beteiligung der GRS in verschiedenen, vorwiegend internationalen Forschungsvorhaben und Fachgruppen fortgesetzt (OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS, IPRESKA). Darüber hinaus wurden in diesem Vorhaben Nutzerrückflüsse aus interner und externer Nutzung kontinuierlich erfasst, um den Code zu verbessern. Durch diese Vernetzung wurde die Qualität des Codes stetig im Einklang mit international fortentwickeltem Stand von W&T bewahrt und verbessert. Ferner wurden für COCOSYS Handbücher aktualisiert, welche die in der jeweiligen Version aktuell enthaltenen Modelle und ihre Grundlagen sowie ihre Handhabung bei der Eingabedatensatzerstellung beschreiben. Vorgaben der GRS für die Qualitätssicherung bei der Codeentwicklung wurden unter Nutzung aktueller Methoden (Continuous Integration, Regressionstesten) und Tools des Softwaremanagements (GitLab/Git) eingehalten.

Im Modellstand von COCOSYS wurden bedeutsame Verbesserungen für die Simulation der Containmentphänomene erreicht. Mit den im Rahmen dieses Projektes durchgeführten Arbeiten ist gewährleistet, dass das Programmpaket AC² das fortschreitende Modellwissen sowie die gesamte Erfahrung auf dem Gebiet der Stör- und Unfallanalysen seit Bestehen der GRS integriert.

Abstract

In the AC² programme package developed by GRS, COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem) is the detailed analysis tool for simulating relevant processes and conditions in the containment of nuclear power plants (NPPs). AC²/COCOSYS is used to analyse reactor safety issues. In this project, certain models were improved or supplemented in COCOSYS in order to be able to calculate both the containment behaviour and release paths from the containment for a wide range of NPP technologies according to the current state of the art in S&T. This was achieved by working on five topical areas:

- **Thermal hydraulics in the containment:** For the simulation of containment depressurisation with building condensers as level 3 safety system (e.g., in the VVER-1200 or in the HPR1000), models for the condensation heat transfer between the containment atmosphere and the outside of the heat exchanger were extended and upgraded for coupling with ATHLET (with the latter describing the water/steam circuit within the heat exchanger). For the simulation of a temperature distribution in a water pool in the containment (provided in various NPPs on safety level 3 for the removal of residual heat during incident and accident control, e.g. in the ‘residual heat removal’ systems in the AP1000 or HPR1000) or if a complete filling of originally empty compartments with water is to be simulated, the functionality of the combined gas/water flow model ATM_FULL available for this purpose has been extended (initialisation of a zone subdivision in a filled pool, transport of fission products and aerosols).
- **Behaviour of fission products and aerosols:** One of the long-term objectives of COCOSYS development is to replace the previous AFP model for simulating aerosol and fission product behaviour in COCOSYS with the new development AFP2 (former working title: ‘NewAFP’), which eliminates the main critical points of AFP and now provides central balances for substance quantities at different levels (chemical compounds, elements or isotopes). In this project, the integration of the relevant sub-models previously lacking in AFP2 has been completed according to the current status of S&T, including the integration of the pH value model in AFP2. With regard to the calculation of the nuclide inventory of reactor cores and the decay processes, the GRS calculation chain AC² was equipped with an interface that allows a separate code for calculating the isotope behaviour to be connected. This was realised in the project for the VENTINA calculation code developed jointly by GRS and PSI. In this project, the part of the interface required for the COCOSYS models was created and connected to VENTINA. The decay calculations in COCOSYS-AFP2 are now based on VENTINA methods. For the isotope behaviour in coupled calculations with

COCOSYS and ATHLET-CD, work is pending on the interface for linking the VENTINA code.

- **Behaviour of the ex-vessel core melt:** The COCOSYS-CCI main module is available for the simulation of a non-coolable, compact core melt or the core melt/concrete interaction (MCCI) and has been maintained and updated as part of the project. Based on feedback from application and international technical exchange on issues relating to this thematic complex, improvements were made to existing sub-models as part of this project. The main aspect of the work on ex-vessel melt behaviour was the addition of an approach that, in contrast to MCCI, also takes into account a potentially coolable debris bed configuration in accident simulations. For this purpose, the DEMON model developed by the PSS working group at the Ruhr University Bochum was integrated into COCOSYS in this project and initially adapted to the conditions (and uncertainties) in ex-vessel scenarios in a streamlined approach and tested in the embedding in COCOSYS.
- **Couplings in COCOSYS and AC²:** In enhancing the coupling between COCOSYS and ATHLET for heat transfer to structures, the use of the WGR radiation model from COCOSYS for the energy exchange between the surface of a thermal structure calculated in ATHLET and the adjacent containment zone calculated in COCOSYS has been enabled. Furthermore, COCOSYS has been extended to include data output in HDF5 format, so that a common data format that can be read with freely available software is available for the post-processing of calculation results. As a result, the ATLASneo and Batchplot tools developed for AC² can also be used now for the graphical visualisation of COCOSYS results. Furthermore, COCOSYS has been prepared as far as possible for the use of the water/steam material properties database of the Zittau-Görlitz University of Applied Sciences. Moreover, the use of the LHEAD model in ATHLET-CD for the simulation of the processes in the lower plenum of the reactor pressure vessel during core degradation was enabled as an alternative to the AIDA model for the coupled calculation with COCOSYS.
- **Cross-sectional activities and user support:** GRS continued to participate in various, mainly international, technical groups (OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS, IPRESKA). In addition, user feedback from internal and external utilisations was continuously evaluated in this project in order to improve the code. Through this networking, the quality of the code was constantly maintained and improved in line with the internationally developed state of S&T. Furthermore, manuals have been updated for COCOSYS, which describe the models currently contained in the

respective version and their basics as well as their handling when creating input data sets. GRS specifications for quality assurance during code development were adhered to using the latest methods (continuous integration, regression testing) and software management tools (GitLab/Git).

Significant improvements were thus achieved in the COCOSYS model status for the simulation of containment phenomena. The work carried out as part of this project ensures that the AC² program package integrates the growing model knowledge and the entire experience in the field of incident and accident analyses of GRS.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	V
1	Einleitung	1
2	Verbesserung der Thermohydraulik.....	5
2.1	Verbesserungen zur Simulation von Gebäudekondensatoren	5
2.1.1	Durchgeführte Erweiterungen	5
2.2	Entwicklungsnahes Testen der ATHLET-COCOSYS-Kopplung.....	22
2.2.1	Beschreibung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatzes	22
2.2.2	Ergebnisse der gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Testrechnung	24
2.2.3	Schlussfolgerungen	28
2.3	Vergleichsrechnungen der Rechenkette AC ² im gekoppelten Betrieb durch Nachrechnung eines ausgewählten Experimentes.....	28
2.3.1	Auswahl eines Experimentes aus der INKA-Versuchsreihe	29
2.3.2	Beschreibung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatzes zur Nachrechnung des INKA-Experimentes.....	29
2.3.3	Ergebnisse der durchgeführten Nachrechnungen	32
2.3.4	Schlussfolgerungen	36
2.4	Verbesserungen der Simulation gefluteter Raumbereiche im Containment mit COCOSYS-Zonen.....	37
2.4.1	Initialisierung wassergefüllter Zonen	37
2.4.2	Berücksichtigung der temperaturabhängigen Wasserdichte	39
3	Erweiterungen der Modelle für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten.....	45
3.1	Erweiterung und Ergänzung von Modellen in AFP2	45
3.1.1	Rivulet-Modell	45
3.1.2	pH-Wert-Modell	47
3.1.3	Transport durch Rekombinatoren	61
3.1.4	Pool-Scrubbing	62
3.1.5	Resuspension.....	64

3.2	Berechnung des Isotopenverhaltens mittels VENTINA	72
3.2.1	Erstellung der Bibliothek LIB_BND	73
3.2.2	Kopplung der Daten mit dem Speziesbaum	74
3.2.3	Testrechnung anhand eines Filter-Beispiels	78
3.3	Nutzerfreundliche Ausgabeoptionen für detaillierte Rechenergebnisse des Spaltproduktmoduls	83
4	Erweiterungen für das Verhalten von Kernschmelze im Wasser	87
4.1	Arbeiten zur Ergänzung eines Modells für die Simulation von Ex- Vessel-Schüttbettsituationen	87
4.1.1	Anforderungen an einen geeigneten Modellansatz für COCOSYS	87
4.1.2	Durchgeführte Arbeiten zur Integration des Modells DEMON in COCOSYS.....	89
4.1.3	Testrechnungen für einen Beispiel-Datensatz.....	93
4.1.4	Zusammenfassung und offene Punkte für Verbesserungen.....	105
4.2	Rückflüsse aus der Begleitung der MCCI-Fachgruppe zu MCCI (Gruppe 3) im Projekt OECD-ARC-F	107
5	Aktualisierung von Kopplungen in COCOSYS bzw. AC²	111
5.1	Vervollständigung des Wärmedurchgangs an Strukturen zwischen Kühlkreislauf und Containment	111
5.1.1	Ausgangslage	111
5.1.2	Durchgeführte Arbeiten.....	112
5.2	Kopplungen mit ATHLET-CD entsprechend dem Fortschritt des Lower- Plenum-Modells LHEAD	120
5.2.1	Erprobung von LHEAD in gekoppelten Anlagen-Datensätzen.....	122
5.2.2	Erprobung und Ertüchtigung für einen schnell laufenden gekoppelten Datensatz mit Kernschmelzen	125
5.3	Nutzung einheitlicher Module in AC ²	127
5.3.1	Anbindung der Stoffwertpakete für Wasser/Dampf der Hochschule Zittau-Görlitz in COCOSYS.....	127
5.3.2	Implementierung des HDF5-Ausgabeformats in COCOSYS.....	128
6	Querschnittsaktivitäten und Benutzerberatung	131
6.1	Mitwirkung in internationalen Arbeitsgruppen und Aktivitäten.....	131

6.1.1	OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS, IPRESCA.....	131
6.1.2	OECD-ARC-F	133
6.1.3	ERMSAR-Konferenz und NUGENIA TA2	133
6.2	Verwertung von Rückflüssen auf chemische Einzelmodelle in AFP2	134
6.3	Unterstützung der Weiterentwicklung von COCOSYS durch externe Partner.....	136
6.3.1	Unterstützung der AG Plant Simulation and Safety (PSS) Ruhr-Universität Bochum.....	136
6.3.2	Unterstützung der Entwicklungsarbeiten beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	137
6.4	Beratung von Nutzern und Verwertung weiterer Rückflüsse aus der Nutzung von COCOSYS.....	137
6.4.1	Review der Implementierung von Sprühsystemen im THY-Hauptmodul	137
6.4.2	Verifizierung der Anwendung von ATM_FULL-Verbindungen zusammen mit Pumpen-Systemen und Sprühsystemen.....	141
6.4.3	Erweiterung der Berechnung von Sigma-Kriterium	141
6.4.4	Erweiterung der Definition von externen Ereignissen mit arithmetischen Operationen.....	141
6.4.5	Verbesserung des Tools WALL_LAYER.....	141
6.4.6	Organisation der GRS-internen AC ² -Seminarreihe	142
6.5	Sicherung von Qualitätsstandards bei der Codeentwicklung.....	143
6.5.1	Internes Audit zur Qualitätssicherung bei der Softwareentwicklung	143
6.5.2	Umstellung auf das freie Quelltext-Format in THY	143
6.5.3	Umstrukturierung des CO1-Moduls.....	144
6.5.4	Diverse Verbesserungen des Codes.....	144
6.5.5	Veröffentlichung von Release-Versionen	145
7	Zusammenfassung	147
	Literaturverzeichnis.....	153
	Abbildungsverzeichnis.....	159
	Tabellenverzeichnis.....	165

1 **Einleitung**

In Deutschland ist die Nutzung der Kernenergie zur kommerziellen Elektrizitätserzeugung beendet. Weltweit werden hingegen Kernkraftwerke (KKW) weiter betrieben oder neu errichtet. In Europa waren im März 2024 laut der IAEA-Datenbank PRIS 168 Leistungsreaktoren in Betrieb und 14 im Bau /IAEA 24/. In vielen Ländern wird darüber hinaus nachgedacht, die Laufzeiten der derzeit in Betrieb befindlichen Anlagen zu verlängern. Die in den ausländischen Anlagen zu postulierenden Stör- und Unfälle können Konsequenzen für Deutschland haben.

Zur unabhängigen Sicherheitsbewertung – speziell der im grenznahen Ausland betriebenen, in Bau befindlichen oder geplanten KKW sowie Forschungsreaktoren – entwickelt die GRS im Rahmen von Eigenforschungsvorhaben eine eigene nukleare Rechenkette entsprechend dem fortschreitenden Stand von Wissenschaft und Technik (W&T). Das zentrale Element dieser Rechenkette ist das Programmsystem AC² /WEY 19/ /GRS 20/ zur Simulation von Betriebszuständen sowie Stör- und Unfallabläufen. AC² ermöglicht Analysen mit folgenden Einzelcodes:

1. ATHLET (Analysis of Thermal-Hydraulics of Leaks and Transients) für die Vorgänge und Zustände im Reaktordruckbehälter (RDB) bzw. in den Kühlkreisläufen.
2. CD (**C**ore **D**egradation) für die Phänomene bzw. für den Verlauf der Kernzerstörung im Reaktorkern bis hin zum Versagen des RDB und dem nachfolgenden Schmelzeaustrag ins Containment.
3. COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem) als detailliertes Analysewerkzeug für die Vorgänge und Zustände im Sicherheitsbehälter (Containment).

In diesem Vorhaben wurden in dem AC²-Programm COCOSYS Modelle zur Verfügung gestellt oder verbessert, um das Containmentverhalten und Freisetzungspfade aus dem Containment für ein breites Spektrum von KKW-Technologien (Generation II – III+ sowie Forschungsreaktoren und zukünftige KKW der Generation IV und SMR) nach aktuellem Stand von W&T berechnen zu können. Dies erfolgte durch die Bearbeitung von fünf Arbeitspunkten (AP):

AP1: Ergänzungen von Modellen in der Thermohydraulik in COCOSYS für die verbesserte Simulation von Gebäudekondensatoren sowie der Flutung von Räumen im Containment. Hier wurden entsprechende Erweiterungen in COCOSYS für die Simulation der Außenseiten von Gebäudekondensatoren durchgeführt. Dazu wurden u. a. nötige Ergänzungen in dem in COCOSYS vorhandenen, kombinierten Wärmeübergangsmodell

CO1 im Einklang mit aktueller Literatur eingebracht. Damit wurde der Anwendungsbereich von COCOSYS bzw. von gekoppelten Rechnungen mit AC² auf die Simulation des äußeren Wärmeübergangs an Gebäudekondensatoren erweitert. Ferner wurde die Anwendungstauglichkeit des in COCOSYS verfügbaren Modellansatzes für das komplette Auffüllen von Raumbereichen des Containments mit Wasser verbessert.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 2 beschrieben.

AP2: Weiterentwicklung und globale Etablierung des Moduls NewAFP als neues Standardmodul AFP2 zur Simulation des Spaltprodukt- und Aerosolverhaltens. Hier wurden einerseits gezielte Modellerweiterungen zu Einzelphänomenen für die Simulation des Spaltproduktverhaltens durchgeführt (z. B. zur Simulation des pH-Wertes in Wasser-pools). Des Weiteren wurden grundlegende Schritte durchgeführt, um die Berechnung des Isotopenzerfalls in AC² mit einer Schnittstelle auf die Nutzung der Methoden bzw. Datenformate eines separaten Programmcodes (MOTIVE/VENTINA /HAN 17/) umzustellen. Die Erstellung der Schnittstelle zur Anbindung des separaten Codes VENTINA an AFP2 erforderte umfangreiche, neu zu entwickelnde Codeteile, da die Konzepte von AFP2, insbesondere die konsistente Bilanzierung von Aerosolen, Verbindungen, Elementen und Isotopen mittels der globalen Datenstruktur Speziesbaum, deutlich über die Möglichkeiten des früheren Moduls AFP hinausgehen.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 3 beschrieben.

AP3: Verbesserungen und Ergänzungen der Simulationskette für das Ex-Vessel-Schmelzeverhalten in COCOSYS, insbesondere zur Berücksichtigung einer gekühlten Ex-Vessel-Schüttbettkonfiguration der Kernschmelze. Hier wurde der Modellstand in COCOSYS zum Verhalten nach Freisetzung von Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter anhand kontinuierlicher Fortschritte im internationalen Kenntnissstand zu diesen Themen erweitert und aktualisiert, um die wichtigsten Einflüsse der Ex-Vessel-Schmelze-Konfiguration auf den Unfallablauf realistisch wiederzugeben. Dazu wurde das von der Arbeitsgruppe PSS an der Ruhr-Universität Bochum entwickelte Modell DEMON zur Darstellung einer gekühlten Schüttbettkonfiguration der Kernschmelze in COCOSYS integriert und erfolgreich erprobt.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 4 beschrieben.

AP4: Pflege und Aktualisierung von Schnittstellen innerhalb des Codesystems AC². Das Zusammenspiel der Einzelcodes ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS wurde durch dedizierte Arbeiten in diesem AP4 gezielt vorangetrieben und verbessert. Dazu wurden Schnittstellen innerhalb des Codesystems AC² gepflegt bzw. aktualisiert. Dies betraf

u. a. den Wärmedurchgang durch Strukturen, die die Rechengebiete von ATHLET und COCOSYS trennen, die Anbindung von Lower-Plenum-Modellen zwischen ATHLET-CD und COCOSYS, das wissenschaftliche Datenformat HDF5 zur Ausgabe von Simulationsergebnissen sowie die Anbindung von einheitlichen Stoffwertdaten.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 5 beschrieben.

AP5: Querschnittsaktivitäten und Benutzerberatung. In diesem AP wurden Nutzer in der GRS oder in externen Organisationen bei der Anwendung von COCOSYS sowie bei externer Modellentwicklung unterstützt und beraten. Rückflüsse aus der Anwendung und aus der Teilnahme an Expertengruppen wurden zur Verbesserung des Codes genutzt. Insbesondere wurde hierüber der Kenntnistannd zu chemischen Vorgängen in Bezug auf nötige Codeverbesserungen ausgebaut. Ferner wurden in AP5 die Standards der GRS in der Qualitätssicherung bei der Codeentwicklung gewahrt und erforderliche Arbeiten zur Codepflege und zur Dokumentation und zur Nutzung etablierter Werkzeuge bei der Softwareentwicklung durchgeführt. Fortschritte in der Modellentwicklung wurden in den Codehandbüchern und in Publikationen veröffentlicht.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 6 beschrieben.

2 Verbesserung der Thermohydraulik

Die Modelle zur Thermohydraulik der Containmentatmosphäre sind als Basismodelle in COCOSYS durch vorlaufende Arbeiten zur Entwicklung und Validierung in großen Anwendungsbereichen abgesichert. Die Simulation der Wirkungsweise von Gebäudekondensatoren sowie die Simulation von Wasserpools sind als neue Anwendungsbereiche ins Blickfeld getreten, die eine Weiterentwicklung von Modellen erforderlich gemacht haben. Hierzu wurden vorwiegend punktuelle Verbesserungen durchgeführt, einerseits zur Berechnung von Wärmeübergängen an der Außenseite von Gebäudekondensatoren, andererseits zur Simulation von mit Wasser gefüllten Räumen. Hierdurch sind entsprechend der Projektplanung in COCOSYS die Modelle für den Einfluss der Vorgänge/Phänomene

- beim Einsatz von Gebäudekondensatoren
- beim Fluten von Raumbereichen / in großen Wasserpools

auf die Thermohydraulik im Containment verbessert worden.

Weitere, nicht vorher im Detail geplante Programmverbesserungen zur Thermohydraulik sind aus der Nutzerbetreuung erwachsen, z. B. eine signifikante Beschleunigung des THY-Hauptmoduls in Rechenläufen unter Nutzung eines Sprühsystems (siehe Abschnitt 6.4.1).

2.1 Verbesserungen zur Simulation von Gebäudekondensatoren

2.1.1 Durchgeführte Erweiterungen

Hinter den hier beschriebenen Entwicklungsarbeiten steht die Absicht, den Wärmedurchgang in Wärmetauschern zukünftig unter Nutzung der physikalischen Kopplung zwischen ATHLET und COCOSYS an der Strukturoberfläche zu simulieren. Für einen Gebäudekondensator bedeutet dies konkret, dass die thermohydraulischen Vorgänge auf der Kondensatorinnenseite der Rohre des Wärmetauschers mit ATHLET und jene auf der Kondensatoraußenseite mit COCOSYS berechnet werden sollen; Kopplungsschnittstelle ist demzufolge die Kondensatorrohrwand.

Die COCOSYS-Wärmeübergangsmodelle in ihrer bisherigen Form sind für diese Aufgabe noch nicht hinreichend ertüchtigt: Wenn sich die Atmosphärenzusammensetzung

auf der Kondensatoraußenseite größtenteils Dampf und nur wenige oder gar keine nicht-kondensierbaren Gase enthält, berechnet das Programm bisher aufgrund einer Modell-lücke deutlich zu kleine Wärmeübergangskoeffizienten. Außerdem werden für Wärmetauscher charakteristische Größen mit Einfluss auf den Wärmetransport, z. B. Rohrneigung oder Bündelkonfiguration, in den Modellen nicht berücksichtigt.

Die Implementierung von Modellerweiterungen sollte weitestgehend auf das CO1-Wärmeübergangsmodell beschränkt sein, da geplant ist, dass dieses die älteren Wärmeübergangsmodelle COD und CDW mittelfristig ersetzen soll. Im Rahmen einer Analyse des CO1-Modells fiel eine Ungenauigkeit bzgl. der Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten bei laminar abfließenden Wasserfilmen auf, welche im Zuge der hier beschriebenen Arbeiten ebenfalls behoben werden sollte. Aus dem beschriebenen bisherigen Zustand wurden folgende Entwicklungsarbeiten abgeleitet, welche in den Unterabschnitten 2.1.1.2 bis 2.1.1.5 beschrieben sind:

- Schließen der Modelllücke bei der Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten bei reiner Dampfatmosfera
- Korrektur der Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten bei laminar abfließenden Wasserfilmen
- Berücksichtigung der Rohrgeometrie bei der Wärmetransportberechnung (Rohraußendurchmesser, Rohrneigung)
- Berücksichtigung von Bündeleffekten auf den Wärmeübergang

Der Einfluss der Modellerweiterungen auf die Ergebnisse von Simulationsrechnungen wurde anhand einfacher Minimalbeispiele sowie komplexer Datensätze aus den Regressionstests untersucht. Regressionstests werden regelmäßig durchgeführt, um kontinuierlich eingebrachte Modelländerungen im Hinblick auf ihre Effekte in existierenden Datensätzen zu untersuchen. In Unterabschnitt 2.1.1.1 ist ein Minimalbeispiel beschrieben, welches in den nachfolgenden Unterabschnitten über die Entwicklungsarbeiten zur Ergebnisvisualisierung herangezogen wird.

Wie in den Unterabschnitten beschrieben, sind noch nicht alle Modelländerungen und Entwicklungen vollständig getestet. Das fortlaufende Testen – und ggf. Verbessern – der beschriebenen Modelle sind als weiterführende Arbeiten zu betrachten. Die abschließende Validierung wird in den begleitenden Validierungsvorhaben sichergestellt (z. B. UMRS1617).

2.1.1.1 Minimalbeispiel

Der Datensatz zum Minimalbeispiel besteht aus den drei Zonen A1, A2 und ENV (für „environment“). A1 und A2 sind über eine Wärmeleitstruktur S1 (in Abbildung Abb. 2.1 schraffiert dargestellt) lediglich thermisch gekoppelt, während A1 und ENV über eine atmosphärische Verbindung (COCOSYS Junction, weißer Pfeil in der Abbildung) Massen und Energie austauschen können.

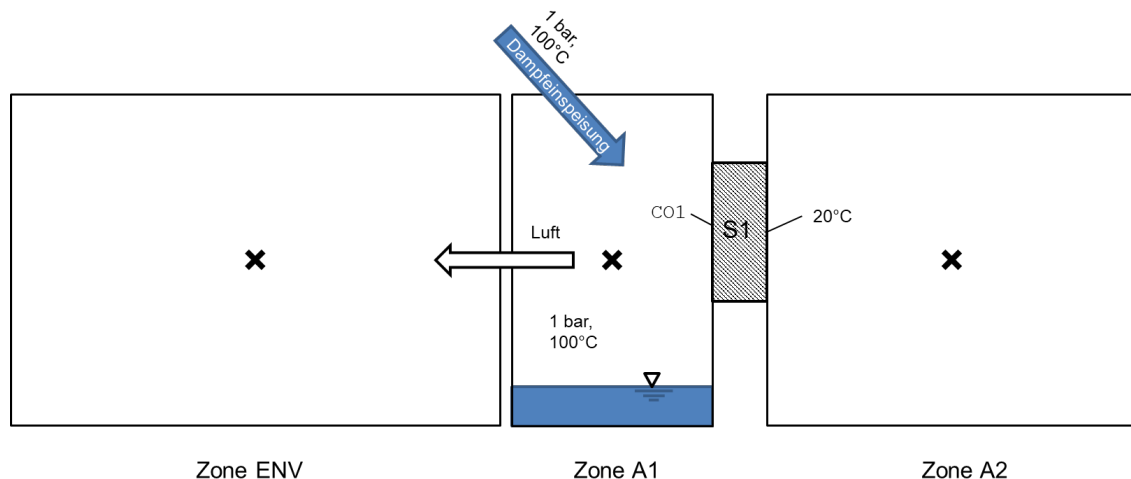


Abb. 2.1 Schematische Darstellung des Datensatzes

Alle Zonen sind zu Simulationsbeginn ausschließlich mit Luft gefüllt, welche auf der linken Seite der Struktur eine Temperatur von 100°C und auf der rechten Seite 20°C aufweist. In A1 findet im Verlauf der Simulation eine Dampfeinspeisung (blauer Pfeil mit Aufschrift) statt. Wenn der eingespeiste Dampf an der Struktur S1 kondensiert, sammelt sich das Kondensat wie in der Abbildung skizziert am Zonenboden.

Für den Wärmeaustausch zwischen Struktur S1 und Zone A1 (linke Strukturseite) wird das Modell CO1 verwendet; auf der rechten Strukturseite wird eine feste Randbedingung für die Temperatur vorgegeben. Dazu sind auf der rechten Strukturseite sowohl der Wärmeübergangskoeffizient als auch die zur Berechnung des Wärmeübergangs herangezogene „Gas“-Temperatur über das Pseudokeyword BOUNDARY_CONDITION fix vorgegeben (100 000 W/(m² K) und 20 °C).

Um die Rückwirkungen auf die Zone ENV so gering wie möglich zu halten, ist das Zonenvolumen der Zone ENV deutlich größer als das von A1, so dass der Umgebungsdruck sich bei einem von A1 nach ENV (oder umgekehrt) gerichteten Massenstrom nicht signifikant ändert.

Die Dampfeinspeisung findet ab 500 s Simulationszeit statt. Durch den eingespeisten Dampf wird die Luft aus Zone A1 im Verlauf der Simulation über die Junction in die Zone ENV verdrängt¹. Der Simulationsablauf lässt sich hinsichtlich der Atmosphärenzusammensetzung von A1 in drei Phasen gliedern:

- 0 s bis 500 s: „Nulltransiente“; reine Luftatmosphäre
- 500 s bis 700 s: Luft/Dampf-Atmosphäre
- ab 700 s bis 1 000 s (Simulationsende): reine Dampfatmosphäre

Abb. 2.2 verdeutlicht den zeitlichen Verlauf der Atmosphärenzusammensetzung. Zwischen 500 s und 550 s nimmt der Dampfanteil aufgrund der Einspeisung rapide zu. Bei 600 s beträgt der Dampfanteil bereits 99,93 %, bei 650 s 99,9988 % und ab ca. 700 s schließlich 100 %.

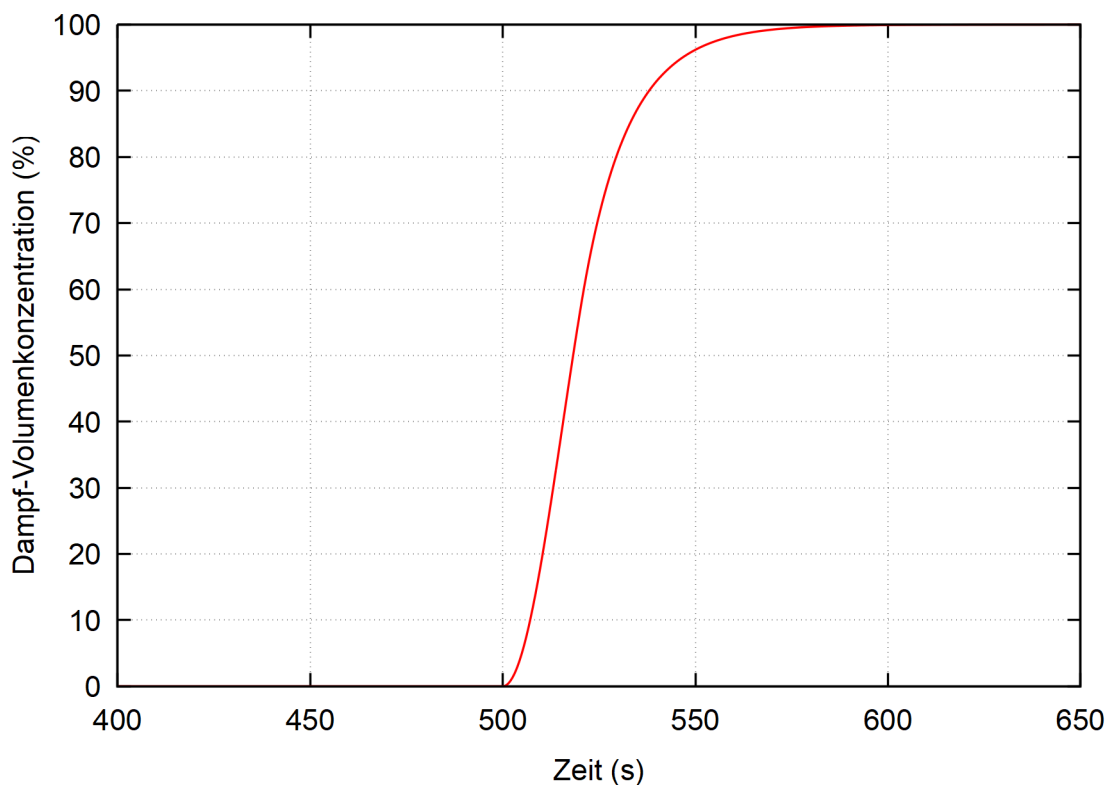


Abb. 2.2 Zeitverlauf des Dampf-Volumenanteils in Zone A1

¹ In einer realen Versuchsanordnung würde der Dampf die Luft nicht vollständig verdrängen; stattdessen würde sich diese nahe der kalten Struktur aufkonzentrieren. Das hier gezeigte Minimalbeispiel wurde allerdings bewusst „unphysikalisch“ gestaltet, um den Übergang zu einer reinen Dampfatmosphäre auf numerische Stabilität zu untersuchen.

Im Mittelpunkt der nachfolgenden Betrachtungen steht die in Abb. 2.1 mit „CO1“ beschriftete Strukturoberfläche S1, an der Dampf kondensiert und nachfolgend entlang der Wand abfließt.

2.1.1.2 Wärmeübergang bei reiner Dampfatmosfera

Abb. 2.3 zeigt schematisch einen über eine senkrechte Wand abfließenden Wasserfilm.

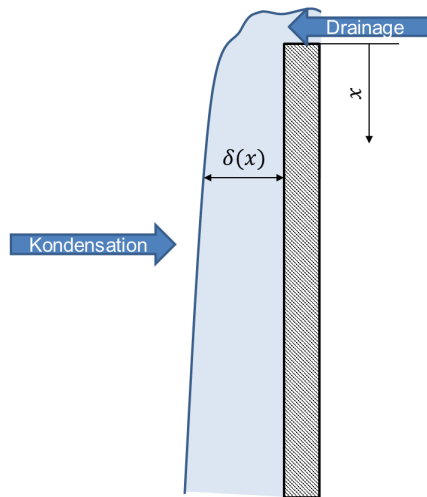


Abb. 2.3 Vertikal abfließender Wasserfilm entlang einer Struktur

Die Dicke des Wasserfilms ist zunächst einmal durch einen möglichen Zufluss am oberen Ende der Struktur („Drainage“) bestimmt. Dieser Zufluss kommt generisch z. B. durch einen Abfluss eines Kondensatfilms von einer höher liegenden Struktur zustande. In vertikalen Wärmetauschern liegt dies vor, wenn Teile des vertikalen Wärmetauschers als separate COCOSYS-Strukturen definiert werden. Die Dicke des Wasserfilms kann bei kühlender Struktur durch kondensierenden Dampf zunehmen, aber auch bei heizender Struktur aufgrund von Verdampfung abnehmen. Diese Effekte sind im CO1-Modell abgebildet. Für den Kondensationsfall berechnet sich die lokale Filmdicke nach der Vorschrift

$$\delta(x) = \left[\frac{3 \cdot \eta}{\rho^2 \cdot g} \cdot (\dot{m}'_{\text{Drainage}} + \dot{m}''_{\text{Kondensation}} \cdot x) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (2.1)$$

Hier stehen η für die dynamische Viskosität, ρ für die Dichte des Wassers, g für die Gravitationsbeschleunigung, $\dot{m}$ für Massenströme und x für die überströmte Länge.

Die Massenstromdichte des an die Filmoberfläche transportierten Dampfes wird nach /ARN 21/ über das Stefan-Gesetz für einseitige Diffusion bestimmt, welches molekularen

und konvektiven Transport berücksichtigt /BAE 96/ und vom Gesamtdruck p_{ges} , Sättigungsdruck p_{sat} und Wasserdampfpartialdruck $p_{part,Dampf}$ abhängt:

$$\dot{m}''_{Stefan} \sim \ln \frac{p_{ges} - p_{sat}(T_{Film})}{p_{ges} - p_{part,Dampf}} \quad (2.2)$$

Die Oberflächentemperatur des Wasserfilms, T_{Film} , bestimmt also maßgeblich die Menge des kondensierenden Dampfes pro Zeiteinheit; gleichzeitig ist sie aufgrund des Wärmetransports² durch den Wasserfilm abhängig von der Filmdicke:

$$T_{Film} = T_{Film}(\delta) \quad (2.3)$$

Das Gleichungssystem (2.1) bis (2.3) wird mit $\dot{m}''_{Kondensation} = \dot{m}''_{Stefan}$ iterativ gelöst. Für den Grenzfall einer reinen Dampfatosphäre ($p_{part,Dampf} = p_{ges}$) ist Gleichung (2.2) nicht definiert. Aus diesem Grund war der Nenner des Bruchs in der Gleichung auf einen Minimalwert begrenzt, wodurch sich jedoch kleinere Kondensatmassenströme – und damit Wärmeübergangskoeffizienten – als erwartet ergeben haben.

Das CO1-Modell wurde für die Berechnung der Kondensations- und Verdampfungsrate bei reiner Dampfatosphäre nun um die aus der statistischen Mechanik hergeleitete Hertz-Knudsen-Gleichung /AKK 21/ erweitert. Der implementierte Zusammenhang zwischen der Kondensationsmassenstromdichte sowie Drücken und Temperaturen ist

$$\dot{m}''_{HertzKnudsen} \sim \left(\frac{p_{part,Dampf}}{\sqrt{T_{sat}}} - \frac{p_{sat}(T_{Film})}{\sqrt{T_{Film}}} \right) \quad (2.4)$$

Diese Gleichung ist für $T_{sat}, T_{Film} > 0$ definiert.

Um einen stetigen Übergang zwischen (2.2) und (2.4) zu erhalten, definiert der Code

² COCOSYS berücksichtigt den Wärmetransport sowohl bei laminar abfließenden Filmen (d. h. Wärmeleitung durch den Film, vgl. Nußeltsche Wasserhauttheorie /NUS 16/) als auch bei turbulenten Filmen (Korrelation nach Chun und Seban, vgl. /ARN 23a/; /CHU 71/).

$$\dot{m}_{Kondensation}'' = \min (|\dot{m}_{Stefan}'', |\dot{m}_{HertzKnudsen}''|) \quad (2.5)$$

In Abb. 2.4 ist der Einfluss der Modellerweiterung zu sehen. Das Diagramm zeigt den Zeitverlauf des Kondensations-Wärmeübergangskoeffizienten für das im vorigen Abschnitt beschriebene Minimalbeispiel. Im Einklang mit der in Abb. 2.2 gezeigten Atmosphärenzusammensetzung beträgt der Kondensations-Wärmeübergangskoeffizient in den ersten 500 s (trockene Luftatmosphäre) 0 W/(m² K) und steigt daraufhin zügig an. Der mit der bisherigen CO1-Implementierung berechnete Wärmeübergangskoeffizient (WÜK) erreicht nach ca. 560 s (der Dampf-Volumenanteil beträgt ca. 98 %) mit knapp 3 000 W/(m² K) seinen Maximalwert, welchen er bis zum Simulationsende beibehält (tatsächlich nimmt der WÜK nach 560 s sogar leicht ab). Mit der Modellerweiterung steigt der WÜK mit zunehmendem Dampfanteil monoton an, bis er bei ca. 700 s (entspricht reiner Dampfatmosfera) seinen Maximalwert von knapp 6 000 W/(m² K) erreicht hat, welchen er bis zum Simulationsende beibehält.

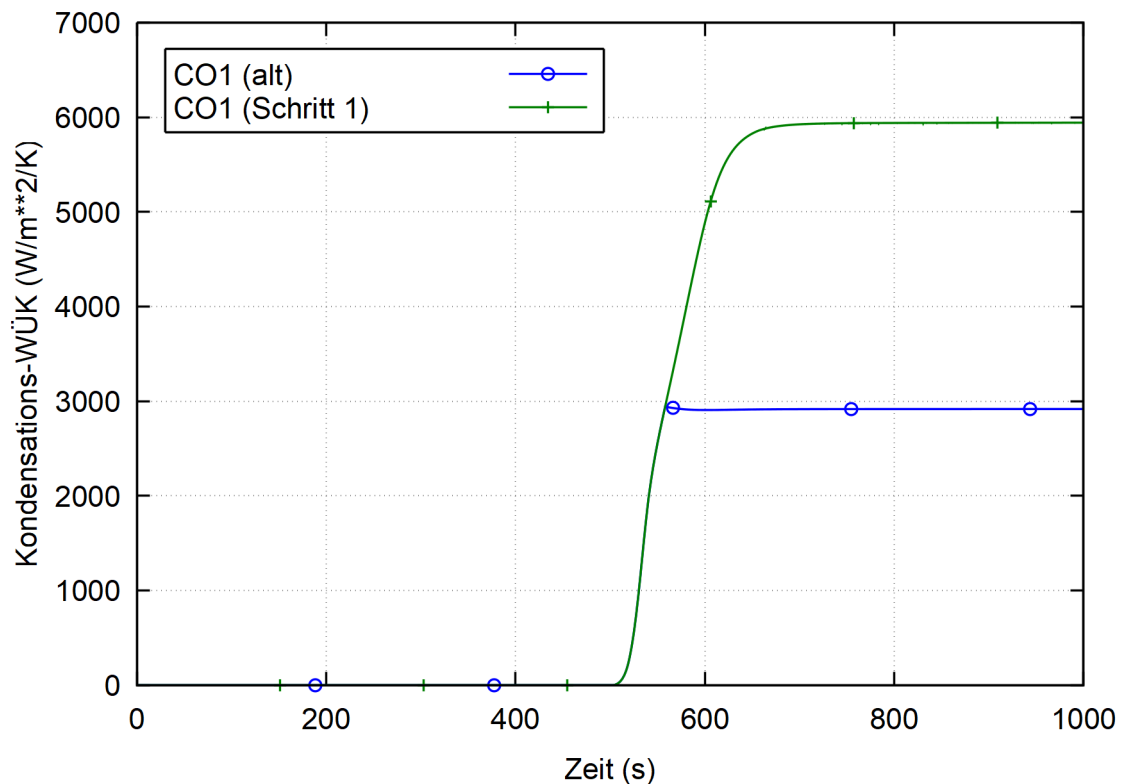


Abb. 2.4 Einfluss der Modellerweiterung für reine Dampfatmosfera auf den berechneten Wärmeübergangskoeffizienten

Da die Modellerweiterung noch nicht vollständig getestet wurde, ist sie in der aktuellen COCOSYS-Version nur über die Spezifikation eines Kommandozeilenparameters beim Programmaufruf verfügbar. Das vermeidet vorerst, dass diese Option standardmäßig bei externen Nutzern zum Einsatz kommt.

2.1.1.3 Berechnung des durchschnittlichen Wärmeübergangskoeffizienten

Die lokale Filmdicke δ an der Position x ist in Gleichung (2.1) beschrieben. Wenn die Länge des abströmenden Films mit x_{max} bezeichnet wird, kann die mittlere Filmdicke gemäß

$$\bar{\delta} = \frac{1}{x_{max}} \int_0^{x_{max}} \delta(x) dx \quad (2.6)$$

berechnet werden.

Wird, der Nußeltschen Wasserhauttheorie folgend, Wärmeleitung als einziger Wärmetransportmechanismus durch den Film unterstellt, beträgt der lokale Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha(x) = \frac{\lambda}{\delta(x)} \quad (2.7)$$

und der mittlere WÜK

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{x_{max}} \int_0^{x_{max}} \alpha(x) dx = \frac{1}{x_{max}} \int_0^{x_{max}} \frac{\lambda}{\delta(x)} dx \quad (2.8)$$

In der bisherigen COCOSYS-Implementierung wird der mittlere WÜK allerdings vereinfacht zu

$$\bar{\alpha}_{COC} = \frac{\lambda}{\bar{\delta}} = \frac{\lambda}{\frac{1}{x_{max}} \int_0^{x_{max}} \delta(x) dx} \quad (2.9)$$

berechnet.

Wird für die Mittelung gemäß (2.8) und (2.9) die Gleichung (2.1) verwendet und $\dot{m}'_{\text{Drainage}} = 0 \text{ kg}/(\text{s} \cdot \text{m})$ gesetzt, folgt:

$$\bar{\alpha} = \frac{3}{2} \cdot \lambda \cdot \left(\frac{3 \cdot \eta}{\rho^2 \cdot g} \right)^{-\frac{1}{3}} \cdot (\dot{m}''_{\text{Kondensation}} \cdot x_{\text{max}})^{-\frac{1}{3}} \quad (2.10)$$

und

$$\bar{\alpha}_{\text{COC}} = \frac{4}{3} \cdot \lambda \cdot \left(\frac{3 \cdot \eta}{\rho^2 \cdot g} \right)^{-\frac{1}{3}} \cdot (\dot{m}''_{\text{Kondensation}} \cdot x_{\text{max}})^{-\frac{1}{3}} \quad (2.11)$$

Hieraus folgt, dass $\bar{\alpha}_{\text{COC}}$ den mittleren WÜK gegenüber $\bar{\alpha}$ um 11 % unterschätzt. Im Rahmen von RS1598 wurde die Berechnung des durchschnittlichen Wärmeübergangskoeffizienten von (2.9) auf (2.8) umgeschrieben.

In Abb. 2.5 ist der Effekt dieser Modelländerung gezeigt: Der maximale WÜK erhöht sich von knapp 6 000 W/(m² K) (grüne Kurve) auf ca. 6 700 W/(m² K) (rote Kurve).

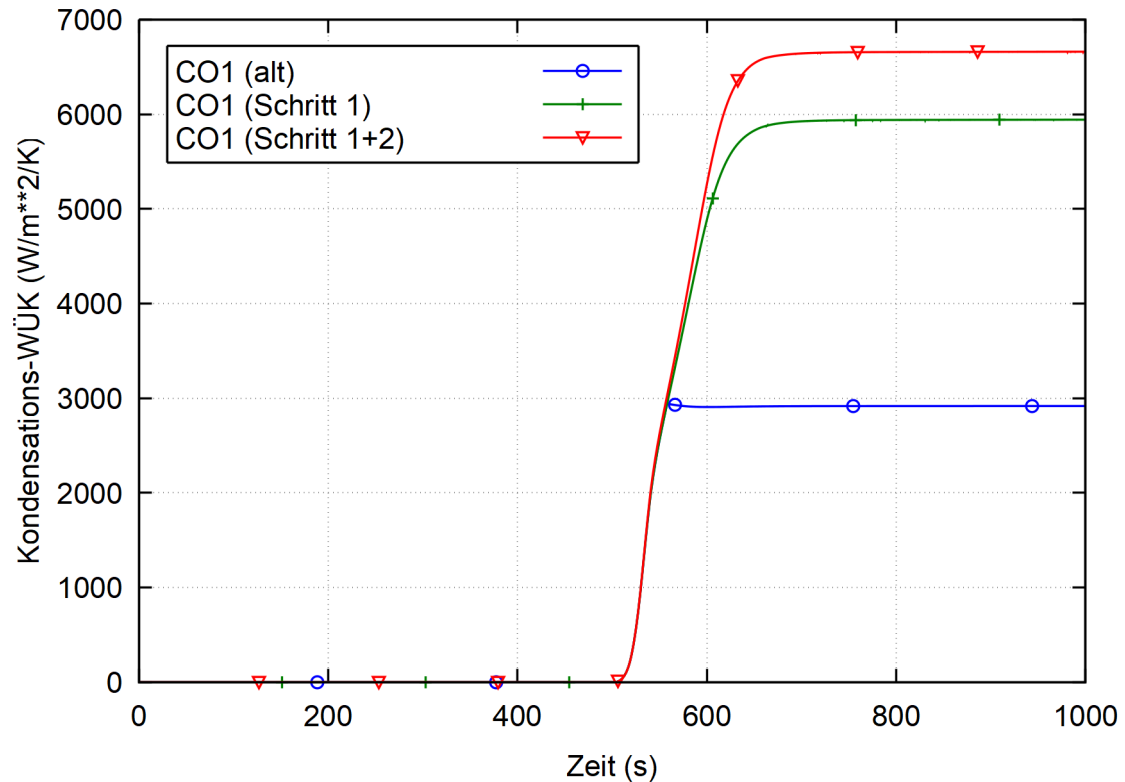


Abb. 2.5 Einfluss der Mittelungsart auf den berechneten Wärmeübergangskoeffizienten

Die Modelländerung ist in die COCOSYS-Hauptentwicklungslinie aufgenommen worden und in künftigen Code-Versionen enthalten; sie muss nicht gesondert durch den Anwender aktiviert werden.

Die Ergebnisse der Simulationen „CO1(alt)“ und „CO1(Schritt 1+2)“ aus Abb. 2.5 sind ebenfalls in Abb. 2.6 dargestellt – allerdings ist hier der Wärmeübergangskoeffizient über dem Dampf-Volumenanteil aufgetragen. Im Gegensatz zum bisherigen Modell („alt“, blaue Kurve) passt der Verlauf der mit dem modifizierten Modell berechneten Kurve (rote Kurve) qualitativ und auch quantitativ zu Messwerten aus der Literatur, vgl. Abb. 2.7.

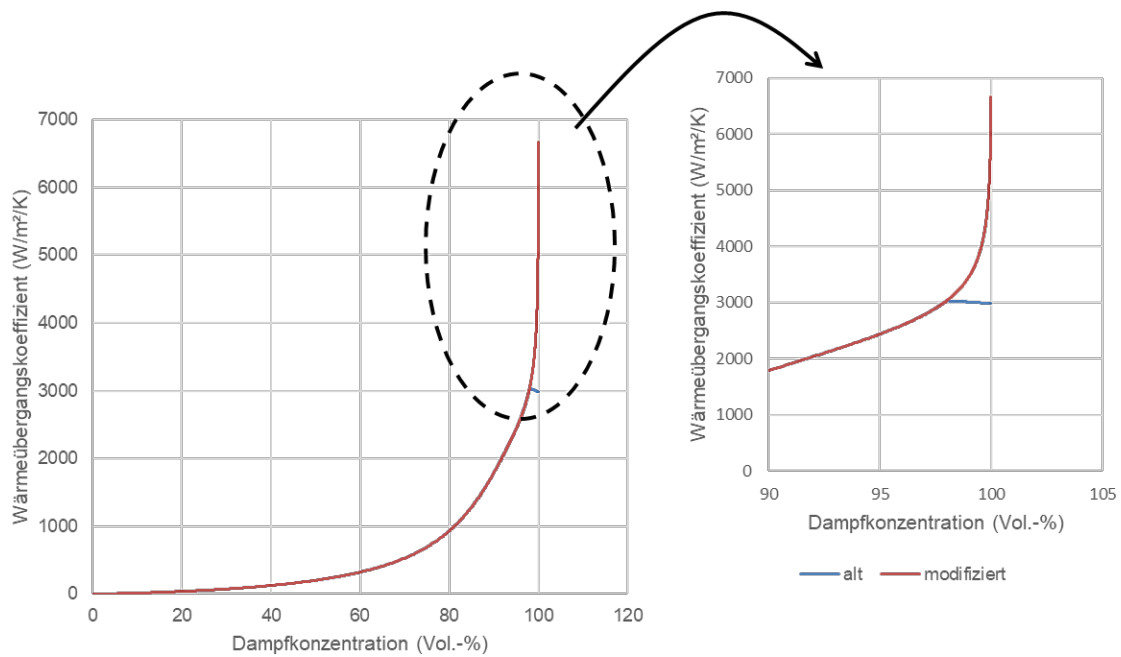


Abb. 2.6 Wärmeübergangskoeffizient über Dampf-Volumenanteil

NB: „Modifiziert“ beinhaltet hier sowohl die Berücksichtigung der Hertz-Knudsen-Gleichung als auch die neue Mittelwertbildung des Wärmeübergangskoeffizienten

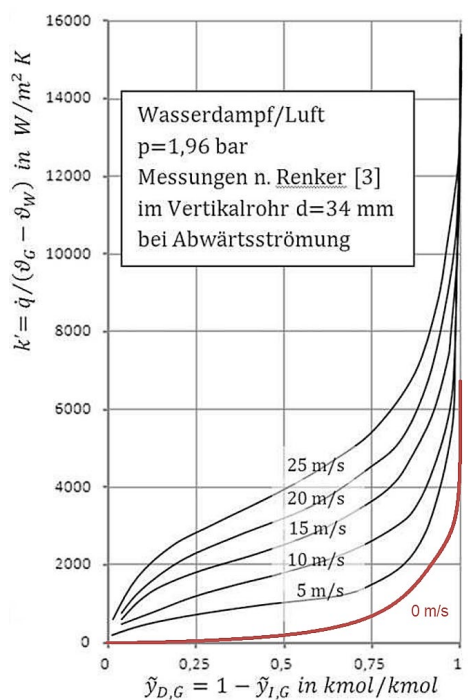


Abb. 2.7 Vergleich von Literaturdaten /VDI 13/ mit dem berechneten WÜK

Die rote Kurve wurde aus Abb. 2.6 übernommen und in das Diagramm eingepasst

2.1.1.4 Wärmeübergang bei geneigten Rohren

Neben einer Korrelation für senkrechte Wände und Rohre hat Nußelt in /NUS 16/ weitere Zusammenhänge untersucht und Korrelationen ermittelt. Für das Verhältnis des WÜK eines horizontal liegenden und eines senkrecht stehenden Rohres (jeweils vom Durchmesser d und der Länge H) stellt er fest:

$$\frac{\bar{\alpha}_{horizontal}}{\bar{\alpha}_{vertikal}} = 0,77 \cdot \sqrt[4]{\frac{H}{d}} \quad (2.12)$$

Dieser Zusammenhang (jedoch mit einem nach verschiedenen Quellen genaueren Vorfaktor von 0,772) wurde in COCOSYS implementiert.³

Für ein geneigtes Rohr mit Neigungswinkeln zwischen 0° und 90° ist der Strömungspfad des Kondensatfilms nicht trivial; in der COCOSYS-Implementierung wird der WÜK für solche Geometrien in erster Näherung vereinfacht zwischen $\bar{\alpha}_{vertikal}$ und $\bar{\alpha}_{horizontal}$ mit einer Cosinus-Funktion interpoliert.

Den Einfluss der Rohrneigung auf den berechneten WÜK ist in Abb. 2.8 dargestellt. In den Simulationen wurde ein 1 m langes Rohr mit 30 mm Außendurchmesser betrachtet. Es ist zu erkennen, dass der WÜK bei dieser Geometrie erwartungsgemäß für kleinere Neigungswinkel zunimmt.

³ Tatsächlich hat Nußelt diesen Zusammenhang im Rahmen seiner Untersuchungen zu laminar abfließenden Filmen festgestellt. Da ihm nachvollziehbare geometrische Überlegungen zugrunde liegen, wird er in COCOSYS auch bei turbulenten Filmen angewendet.

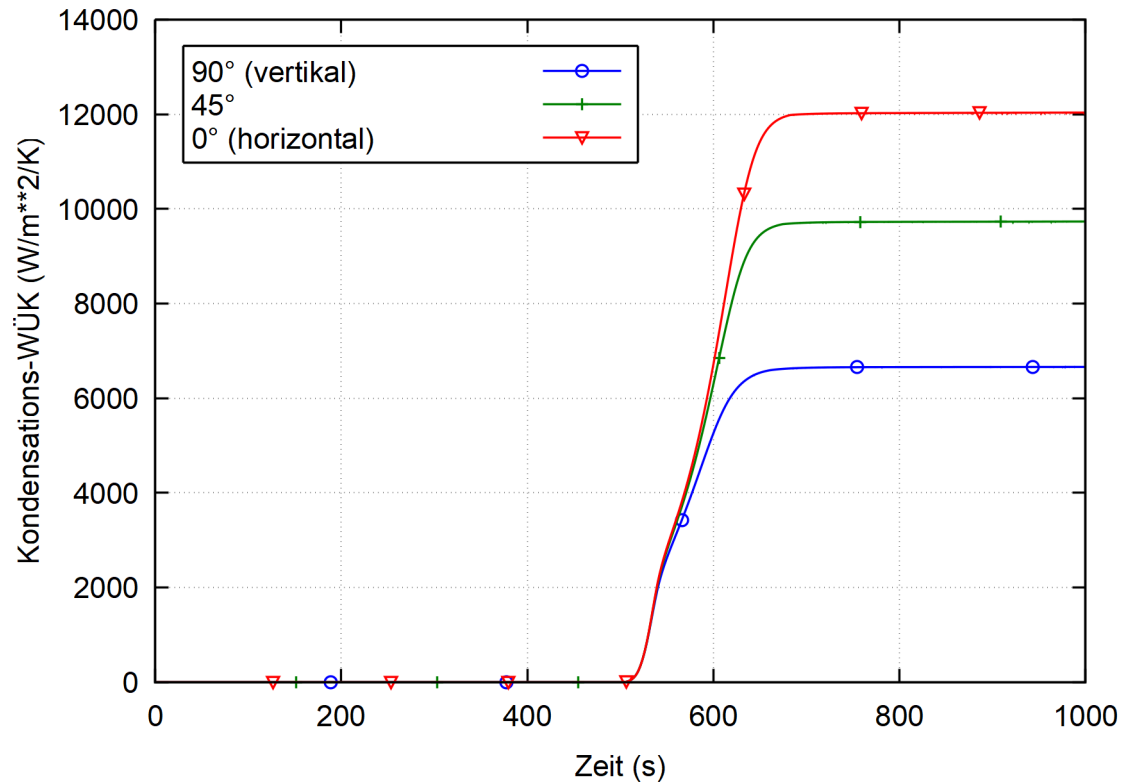


Abb. 2.8 Einfluss der Rohrneigung auf den berechneten WÜK

2.1.1.5 Bündeleffekte

Wenn die Kondensatorrohre nicht einzeln, sondern in Bündeln angeordnet werden, beeinflusst die Bündelkonfiguration den Wärmeübergang auf der Rohraußenseite:

- Der Kondensations-Wärmeübergang verschlechtert sich, da Kondensat auf fluchtend tiefergelegene Rohre tropft und einen isolierenden Film bildet, vgl. Abb. 2.9.
- Der Konvektions-Wärmeübergang wird durch erhöhte Turbulenz verbessert.
- Indirekt kann dies in einer leichten Verbesserung des Kondensations-Wärmeübergangs resultieren, da sich zusammen mit dem Konvektions-Wärmeübergangskoeffizienten der Stoffübergangskoeffizient für den Dampftransport zur Filmoberfläche (Stefan-Strom) erhöht. Vermutlich ist dieser sekundäre Effekt aber geringer als der oben genannte verschlechternde Bündeleinfluss durch heruntertropfendes Kondensat; Untersuchungen hierzu wurden nicht durchgeführt.

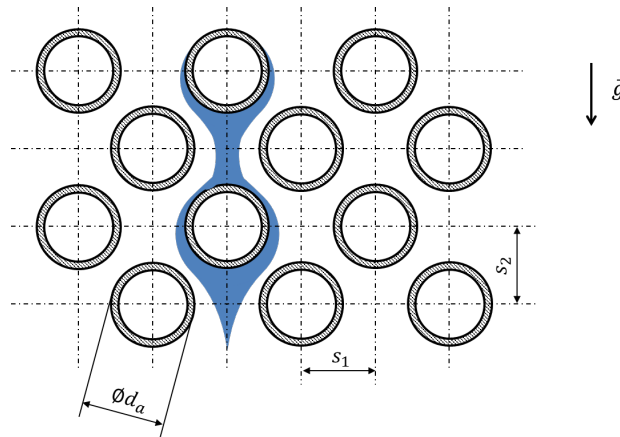


Abb. 2.9 Kondensat tropft auf fluchtend tiefergelegene Rohre

Der genannte primäre Bündeleinfluss auf den Kondensations-Wärmeübergang wird wie im GEKO-Modul von COCOSYS durch den einfachen Zusammenhang

$$\alpha_{\text{Bündel}} = \alpha_{\text{Einzelrohr}} \cdot n_f^{-\frac{1}{6}} \quad (2.13)$$

für horizontale Rohre modelliert, wobei n_f die Anzahl der fluchtend übereinanderliegenden Rohrreihen bezeichnet. Der mittlere Kondensations-WÜK eines Bündels nimmt gemäß dieser Vorschrift also mit der Anzahl der fluchtend übereinanderliegenden Rohrreihen ab. Zusätzlich werden der Neigungswinkel der Rohre (bei leicht geneigten Rohren ist der Effekt stärker als bei steil angestellten Rohren; bei vertikalen Rohren tropft kein Kondensat auf andere Rohre) und die Rohranordnung (bei fluchtend angeordneten Rohren tropft das Kondensat von einer Rohrreihe auf die jeweils folgende; bei versetzt angeordneten Rohren tropft das Kondensat auf die jeweils übernächste Rohrreihe, vgl. Abb. 2.9) berücksichtigt.

Der Effekt auf den Konvektions-Wärmeübergang wird durch Bündelfaktoren für die Strömung

- entlang des Bündels durch den Bündelfaktor nach Inayatov /INA 75/
- quer zum Bündel gemäß Korrelationen aus dem VDI-Wärmeatlas /VDI 13/

berücksichtigt. Die berechneten Bündelfaktoren sind abhängig von der Bündelkonfiguration, dem Rohraußendurchmesser, den horizontalen und vertikalen Rohrabständen („Pitches“) sowie der Anzahl der horizontalen und vertikalen Rohrreihen. Da in

COCOSYS-Zonen keine dominante Strömungsrichtung bekannt ist, werden die Bündelfaktoren für verschiedene Anströmrichtungen berechnet und arithmetisch gemittelt.

Um dem oben genannten sekundären Bündeleinfluss auf den Kondensations-Wärmeübergang Rechnung zu tragen, wird der für die Verbesserung der Konvektion genutzte Bündelfaktor auch auf den Stoffübergangskoeffizienten für den Dampftransport zur Filmoberfläche angewendet.

Die gegenwärtig zu Testzwecken genutzte Eingabe ist in Abb. 2.10 abgebildet.

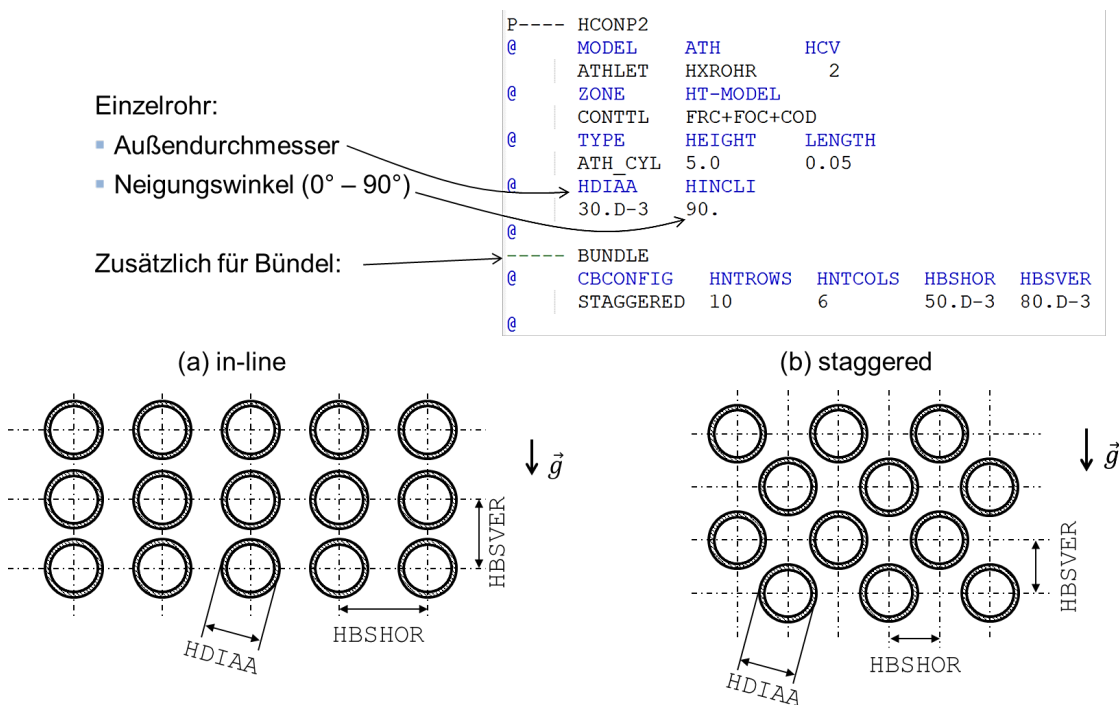


Abb. 2.10 Eingabebeispiel für Rohr- und Bündelgeometrien zum aktuellen Stand

Bis zur abschließenden Validierung ist diese Eingabe für den Nutzer noch nicht verwendbar.

2.1.1.6 Sonstiges

Da das CO1-Modell zum Teil dieselben Routinen nutzt wie das CDW-Modell, wurde letzteres im Zuge der CO1-Modifikationen ebenfalls angepasst. Abb. 2.11 zeigt den Einfluss der ersten oben genannten Modelländerung, die Implementierung der Hertz-Knudsen-Gleichung, für CO1 und CDW (vgl. Abschnitt 2.1.1.2). Es zeigt sich, dass die Kondensationsmodelle in ihrer bisherigen Form bei gleichen Randbedingungen deutlich voneinander abweichende WÜK bei reiner Dampfatmosfera berechnen (CDW:

ca. $600 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$; CO1: knapp $3\,000 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$). Durch die Modifikation wurden die Modelle aneinander angeglichen. Die Ursachen für dennoch weiterhin vorhandene Unterschiede, etwa bezüglich des Kurvenverlaufs, wurden nicht weiter untersucht.

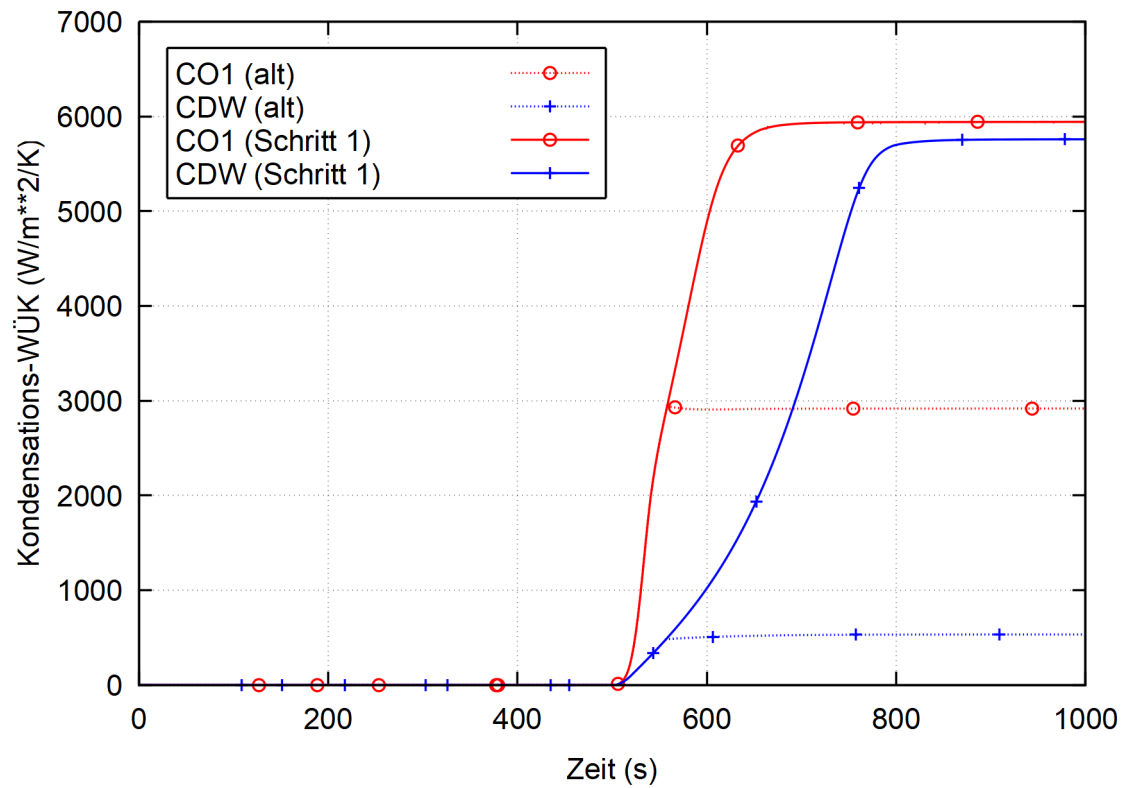


Abb. 2.11 Die Modellerweiterung für reine Dampfatmosfera wurde auch für CDW implementiert und führt zu einer Angleichung der mit CO1 und CDW berechneten WÜK

2.2 Entwicklungsnahes Testen der ATHLET-COCOSYS-Kopplung

Zurzeit steht dem Nutzer die Möglichkeit zur Verfügung, den Wärmeübergang an der Außenseite von Gebäudekondensatoren unter Nutzung der physikalischen Kopplung zwischen ATHLET und COCOSYS an einer Wärmeleitstruktur zu simulieren. Um die Simulation des äußeren Wärmeübergangs an Gebäudekondensatoren zu verbessern, wurden die verfügbaren COCOSYS-Wärmeübergangsmodelle (z. B. das CO1-Modell) für waagerechte und senkrechte Rohrbündel erweitert. Zum Testen der ATHLET-COCOSYS-Kopplung, insbesondere im Hinblick auf die neuen Modellerweiterungen in COCOSYS zur Simulation des Wärmeübergangs an der Außenseite des Gebäudekondensators, wurde eine gekoppelte ATHLET/COCOSYS-Testrechnung zu einem Gebäudekondensator durchgeführt, welcher hinsichtlich seiner Dimensionierung an der INKA-Versuchsanlage angelehnt ist. Die Testrechnung wurde mit der aktuellen, freigegebenen AC²-2023.1-Version durchgeführt.

2.2.1 Beschreibung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatzes

Zur Austestung der Kopplung von HCO-Strukturen zwischen ATHLET und COCOSYS wurde zunächst ein vereinfachter, gekoppelter ATHLET/COCOSYS-Datensatz entwickelt. Die ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung für den Testfall ist in Abb. 2.12 dargestellt.

Der ATHLET-Datensatz umfasst ein thermo-hydraulisches Kreislaufsystem, mit dem der Gebäudekondensator (GEKO) und das Absetzbecken abgebildet sind. Die Gebäudekondensatorseite besteht aus der Vorlaufleitung, dem Gebäudekondensator selbst (inklusive Eintritts- und Austrittssammler) und der Rücklaufleitung zum Absetzbecken. Der Gebäudekondensator selbst besteht aus zwei Wärmetauschern. Jeder Wärmetauscher hat ein Rohrbündel, welches 120 Wärmetauscherrohre zusammenfasst. Die Rohre haben eine Länge von 4 m und sind in fünf Reihen angeordnet. In ATHLET sind die Rohrbündel der beiden Wärmetauscher jeweils mit einem TFO (**T**hermo **F**luiddynamic **O**bject), vgl. HCC1-HX und HCC2-HX in Abb. 2.12 links, abgebildet und in Längsrichtung in 10 Nodes unterteilt. Der Neigungswinkel der Wärmetauscherrohre beträgt ca. 6°. Das Absetzbecken hat eine Höhe von 8 m und ein Wasservolumen von ca. 35 m³. Zur Simulation der Aufheizung und der Temperaturschichtung wurde das Absetzbecken in zwei einzelne, nebeneinander liegende TFOs unterteilt, die mit CCO (**C**ross **C**onnection **O**bjects) verbunden sind. Jedes TFO ist in 3 Nodes entlang der Höhe unterteilt. Für das Absetzbecken wurden die Böden und Wände mittels wärmeleitender HCO-Strukturen in ATHLET berücksichtigt.

Im COCOSYS-Datensatz ist der Behälter definiert, in dem sich die beiden Wärmetauscher befinden. Der Behälter hat eine Höhe von 12 m und einen Innendurchmesser von 5 m. Das freie Gasvolumen des Behälters beträgt ca. 200 m³. Der Behälter-Raum, in dem sich die zwei GEKO-Rohrbündel befinden, ist in zwei COCOSYS-Zonen (VGeko1 und VGeko2) unterteilt. Die Energiezufuhr wird durch Einspeisen von gesättigtem Dampf in die Wasservorlage im unteren Bereich (VBottom) simuliert. Es wird angenommen, dass die Einspeisung mit konstantem Massenstrom von 0,5 kg/s erfolgt. Der COCOSYS-Datensatz umfasst 4 Zonen für den Behälter (Abb. 2.12, rechts) und eine Zone für die Umgebung. Die Umgebungszone ist in der Abbildung nicht gezeigt.

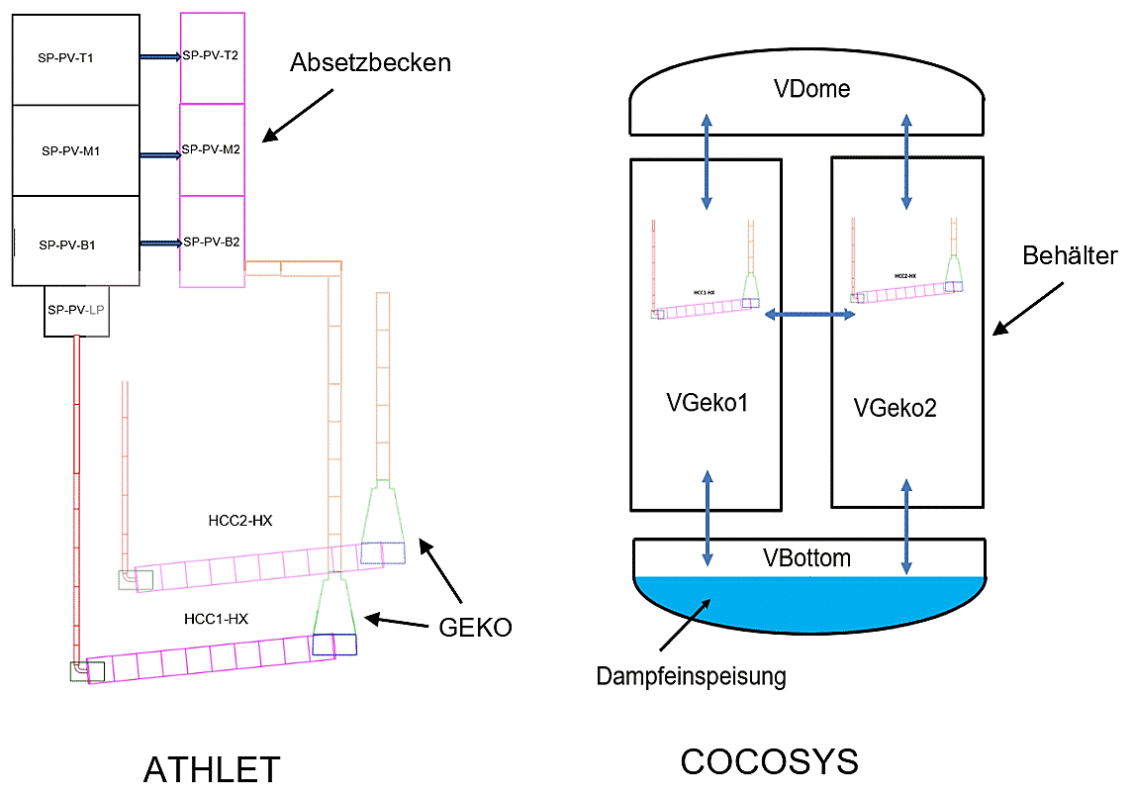


Abb. 2.12 ATHLET/COCOSYS-Nodalisierungsschema (nicht maßstäblich)

Die Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS befindet sich an den Gebäudekondensatorbündeln, die durch die ATHLET-HCOs (**H**eat **C**onduction **O**bject) modelliert sind. Die schematische Darstellung der Kopplung zwischen ATHLET-HCO-Struktur und COCOSYS-Struktur ist in Abschnitt 5.1 auf Seite 112 dargestellt. Wärmeübergangskoeffizient und Wärmestrom auf der linken Seite des HCO sowie die Wärmeleitung durch das HCO werden von ATHLET berechnet. Wärmeübergangskoeffizient sowie Fluidtemperatur auf der rechten Seite des HCO werden von COCOSYS berechnet. In COCOSYS wird die allgemeine Eingabestruktur für eine HECU-Wärmeleitstruktur verwendet, es müssen jedoch nur Informationen für die linke Seite der Wärmeleitstruktur

angegeben werden (d. h. Zonenname und Wärmeübergangsmodelle). Die rechte Seite der HECU-Struktur wird vom Code intern als adiabatisch betrachtet.

Bezüglich der Kopplung von HCOs zwischen ATHLET und COCOSYS stehen dem Nutzer zwei Optionen zur Verfügung. Zurzeit ist es möglich, über die Nutzer-Vorgabe entweder das gesamte HCO oder einzelne Nodes des HCO mit COCOSYS-Strukturen zu koppeln. Abb. 2.13 zeigt beispielhaft die Eingabe für die Kopplung des gesamten ATHLET-HCO mit einer HECU-Struktur in COCOSYS.

```

@=====
P----- HCO1N1
@      MODEL      ATH      HCV
      ATHLET      HCC1-HX
@      ZONE      HT-MODEL
      VGeko1      CO1
@      TYPE      HEIGHT      LENGTH
      SIDE      4.0      4.0
@

```

Abb. 2.13 Beispiel der Eingabe für die Kopplung des gesamten ATHLET-HCO (HCC1-HX) mit der HECU-Struktur (HCO1N1) in COCOSYS

Für die Simulation des Wärmeübergangs an der Außenseite der Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators wird gegenwärtig das ertüchtigte CO1-Model in COCOSYS angewendet. Der Wärmeübergang an der Innenseite der Wärmetauscherrohre wird standardmäßig durch die in ATHLET verfügbaren Wärmeübergangsmodelle simuliert.

2.2.2 Ergebnisse der gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Testrechnung

Nach der Erstellung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatzes wurde zunächst eine Testrechnung durchgeführt, in der angenommen wurde, dass gesättigter Dampf mit konstantem Massenstrom von 0,5 kg/s über die gesamte Rechenzeit von 3000 s in die Wasservorlage des Behälters eingespeist wird.

Aufgrund der Dampf einspeisung kommt es zur Verdampfung des Wasserpools, was zum Druckanstieg im Behälter führt. Der zeitliche Druckverlauf im Behälter ist in Abb. 2.14 dargestellt.

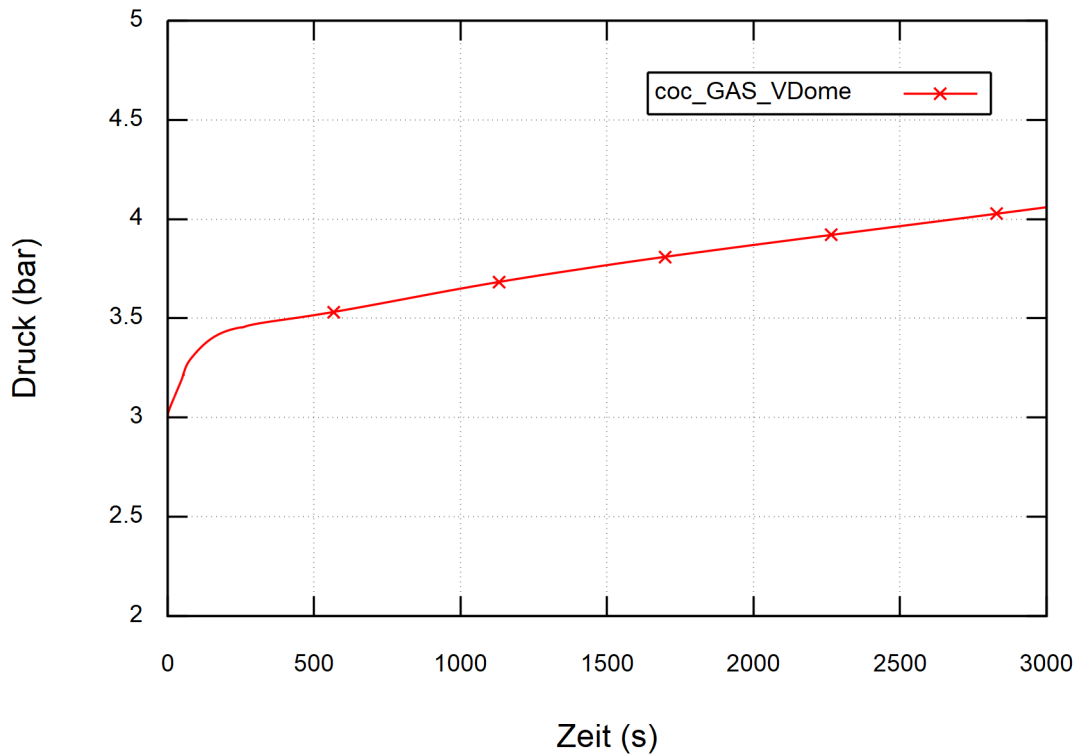


Abb. 2.14 Zeitlicher Druckverlauf im Behälter bei konstanter Einspeisung gesättigten Dampfes in den Wasserpool

Im weiteren Verlauf kondensiert der Dampf an der Außenseite der Wärmetauscherrohre (WTR) des Gebäudekondensators und überträgt dabei die Kondensationswärme über die Rohrwände in das Kühlmittel. Auf der Innenseite der WTR erwärmt sich das Kühlwasser, so dass aufgrund der Dichtereduzierung eine aufwärts gerichtete Strömung entsteht. Gleichzeitig fließt kaltes Wasser mit größerer Dichte aus dem Absetzbecken in die Wärmetauscherrohre nach, so dass sich ein Naturumlauf einstellt. Der berechnete Massenstrom durch den Gebäudekondensator ist in Abb. 2.15 dargestellt. Zu Beginn der Testrechnung steigt der Massenstrom aufgrund der anfänglich niedrigeren Eintrittstemperatur an. Nach einem Anstieg verbleibt der Massenstrom durch den Gebäudekondensator bis zum Ende der Rechnung nahezu konstant.

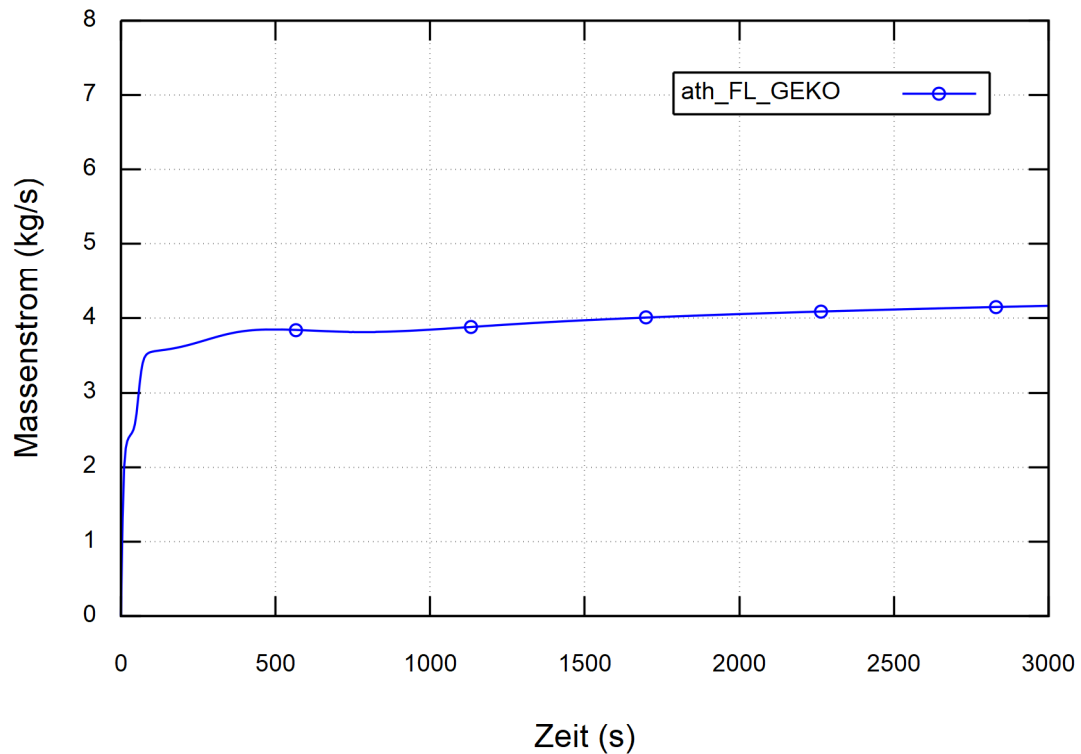


Abb. 2.15 Zeitlicher Verlauf des Massenstroms durch den Gebäudekondensator

Abb. 2.16 zeigt die berechnete Kühlleistung des Gebäudekondensators, d. h. die Wärme, die durch den Gebäudekondensator abgeführt wird. Da bei dieser Testrechnung eine einphasige Strömung innerhalb der Kondensatorrohre entsteht, wurde ein einfacher Ansatz für die Berechnung der Kühlleistung angesetzt. Bei der Berechnung wurden der berechnete Massenstrom sowie die Enthalpie aus den berechneten Temperatur- und Druckverläufen am Ein- und Austritt des Gebäudekondensators verwendet. Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, steigt die Kühlleistung des Gebäudekondensators zu Beginn der Testrechnung an, was die Folge des Anstiegs des Massenstroms durch den Gebäudekondensator ist.

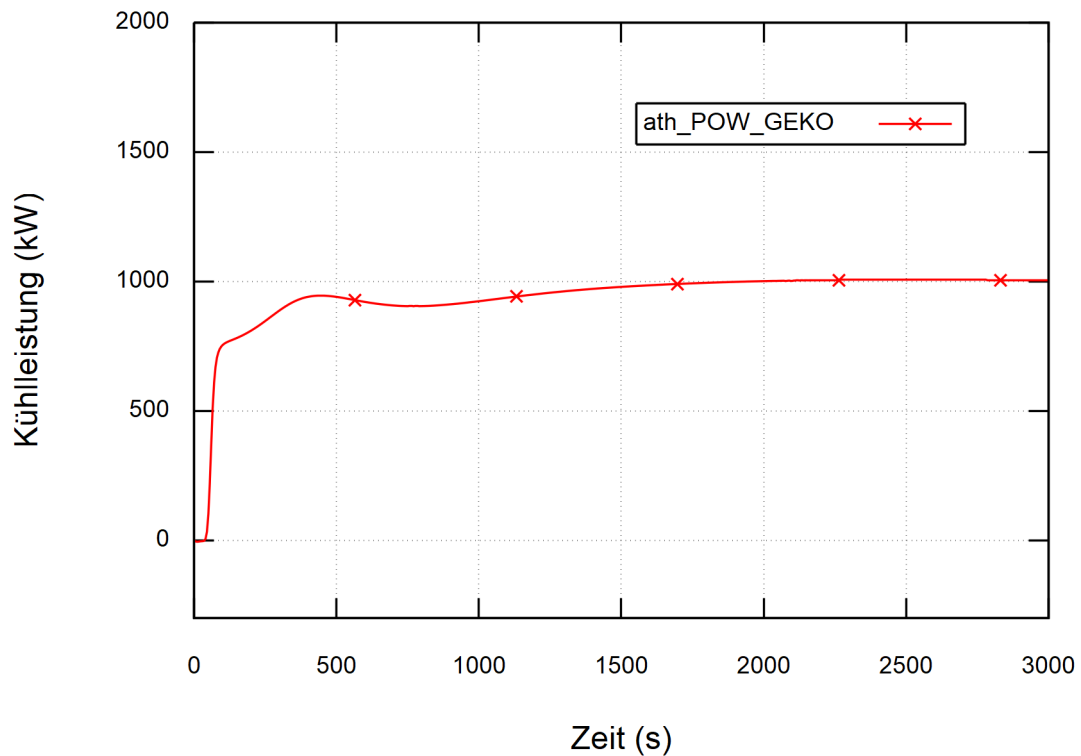


Abb. 2.16 Zeitlicher Verlauf der Kühlleistung des Gebäudekondensators

Durch den Naturumlauf steigt die Wassertemperatur im Absetzbecken langsam an und somit auch die Eintrittstemperatur des Gebäudekondensators. Abb. 2.17 stellt die berechnete Wassertemperatur im unteren Plenum des Absetzbeckens dar. Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, steigt die Wassertemperatur in der Vorlaufzone (SP-PV-LP) über die gesamte Zeit langsam an, da die heiße Wasser-Dampf-Mischung am Austritt des Kondensators in die Rücklaufzone geführt wird. Dies führt dazu, dass sich das Wasser in der Rücklaufzone (SP-PV-T2) kontinuierlich aufheizt, während das Wasser in der Vorlaufzone (SP-PV-LP) bis zum Ende der Rechnung kühler bleibt.

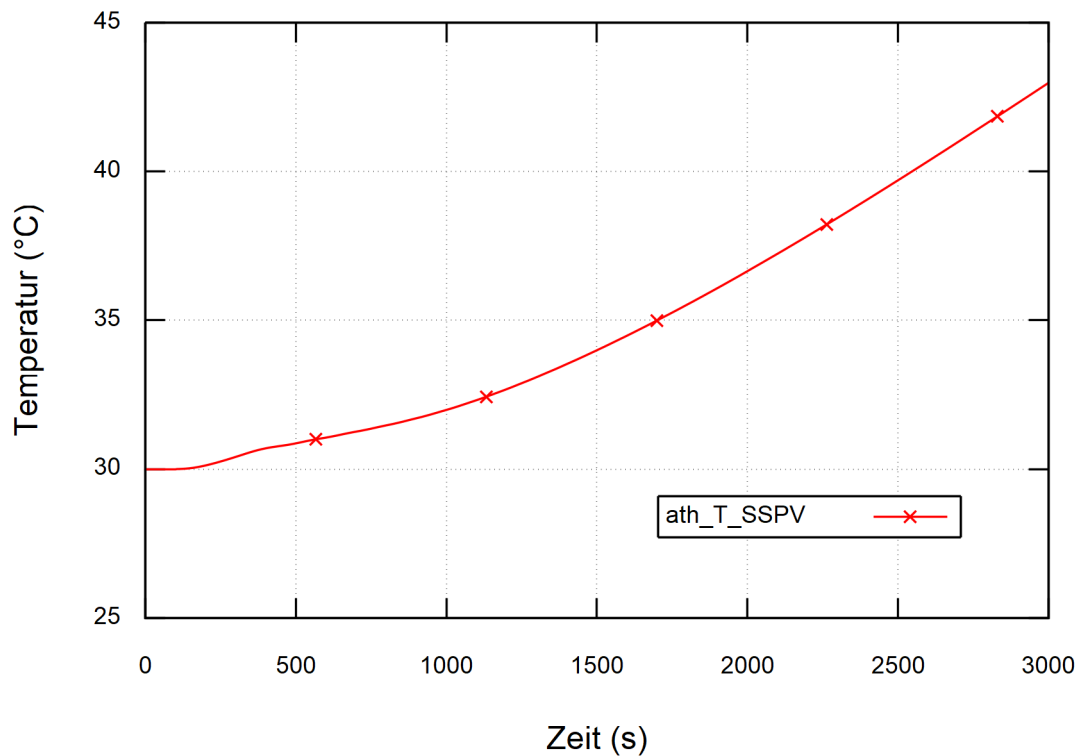


Abb. 2.17 Wassertemperatur im unteren Plenum des Absetzbeckens

2.2.3 Schlussfolgerungen

Mit den durchgeführten Arbeiten wurde ein erstes Testen der ATHLET-COCOSYS-Kopplung zur Simulation des Wärmeübergangs an der Außenseite des Gebäudekondensators, insbesondere unter Verwendung der neuen Modellerweiterungen des CO1-Wärmeübergangsmodells in COCOSYS, durchgeführt. Auf der Grundlage dieser AC²-Testrechnung lässt sich schlussfolgern, dass die ATHLET-COCOSYS-Kopplung für die Simulation der Prozesse in Gebäudekondensatoren unter den zu erwartenden thermohydraulischen Bedingungen im Containment-Raum im Rechenablauf funktionsfähig ist. Die Plausibilität der Ergebnisse sollte in gezielten Validierungsrechnungen untersucht werden.

2.3 Vergleichsrechnungen der Rechenkette AC² im gekoppelten Betrieb durch Nachrechnung eines ausgewählten Experimentes

Unter diesem Arbeitspunkt wurde eine Nachrechnung eines ausgewählten INKA-Experimentes (Integral-Teststand Karlstein, Framatome) mit dem gekoppelten AC²-Codesystem durchgeführt.

2.3.1 Auswahl eines Experimentes aus der INKA-Versuchsreihe

Zur Durchführung von Vergleichsrechnungen mit dem AC²-Codesystem wurde aus der INKA-Versuchsreihe ein Experiment (CCC_050_030_20_01, /WAG 16/) mit einem Dampf-Luft-Gemisch bzw. mit sehr kleinem Dampfgehalt ausgewählt. Im ausgewählten Experiment beträgt der Anfangsdruck im Flutbehälter 3,05 bar und die Atmosphärentemperatur entspricht der zu Beginn des Experimentes gemessenen Temperatur von 96,23 °C (s. Tab. 2.1). Die Anfangstemperatur des Wassers im Absetzbecken liegt bei ca. 30 °C.

Tab. 2.1 Anfangs- und Randbedingungen des ausgewählten INKA-Experimentes mit Dampf-Luft-Gemisch im Flutbehälter /WAG 16/

Experiment	Druck (bar) (UJACP101)	Temperatur (°C) (UJACT153)	Wassertem- peratur (°C) (UJACT141)	Dampfanteil (%)
CCC_050_030_20_01	3,05	96,23	30	20

2.3.2 Beschreibung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatzes zur Nachrechnung des INKA-Experimentes

Für die Nachrechnung des ausgewählten INKA-Experimentes wurde der vorliegende, gekoppelte ATHLET/COCOSYS-Datensatz zum Testen der Kopplung von HCO-Strukturen an die Spezifika des Gebäudekondensators in der INKA-Versuchsanlage angepasst.

Im ATHLET-Datensatz ist das Strömungssystem des Gebäudekondensators (GEKO), bestehend aus den Vorlauf- und Rücklaufleitungen sowie dem Absetzbecken der INKA-Versuchsanlage, abgebildet. Der Gebäudekondensator besteht aus zwei eigenständigen, aber baugleichen Wärmetauschern. Jeder Wärmetauscher hat 145 Wärmetauscherrohre, die in fünf Rohrlagen versetzt übereinander angeordnet sind /WAG 17/. Jedes Wärmetauscherrohr ist 4 m lang und hat einen Innendurchmesser von 34 mm mit einer Wandstärke von 2 mm. Der Neigungswinkel der Rohrbündel beträgt 5,7° gegenüber der Horizontalen. Wie im ATHLET-Testdatensatz sind die Rohrbündel der beiden Wärmetauscher jeweils mit einem TFO (GEKO1 und GEKO2) abgebildet und in 10 Nodes entlang der Rohre eingeteilt (Abb. 2.18). Die Gebäudekondensatorrohre sind nicht einzeln modelliert, sondern den Rohrlagen entsprechend in fünf Gruppen zusammengefasst. Die Bündelkonfiguration der Wärmetauscher wird mit dem Pseudokeyword BUNDLE vorgegeben (siehe Abschnitt 2.1.1.5), um dem Einfluss von

Rohrbündeleffekten auf den Wärmeübergang auf der Kondensatoraußenseite Rechnung zu tragen. Die Materialeigenschaften der Wärmetauscherrohre, wie z. B. Wärmeleitfähigkeit oder Wärmekapazität sind durch die entsprechenden Angaben im ATHLET-Eingabedatensatz angegeben.

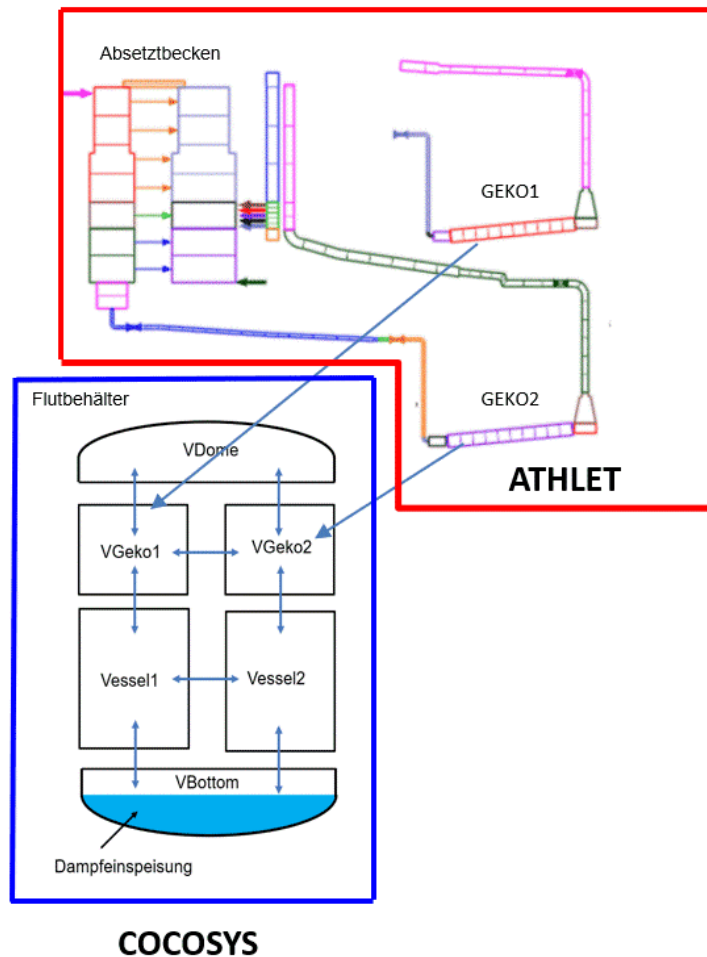


Abb. 2.18 ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage

Das Absetzbecken hat eine Höhe von 7,34 m und ein Wasservolumen von ca. 29 m³. Wie in Abb. 2.18 dargestellt ist, mündet die Rücklaufleitung des Gebäudekondensators oberhalb der Kote der Vorlaufleitung, so dass sich im Experiment eine Temperaturschichtung innerhalb des Absetzbeckens ausgebildet hat, d. h. das Wasser an der Eintrittsöffnung zum Kondensator ist kälter als das Wasser im Bereich der Austrittsöffnung. Zur Simulation der Temperaturschichtung wurde das Absetzbecken in zwei einzelne nebeneinander liegende TFOs unterteilt, die mit CCO verbunden sind. Jedes TFO ist in 7 Nodes entlang der Höhe unterteilt. Das Absetzbecken ist zwar zur Atmosphäre offen, sonst aber rundum mit Isoliermaterial (Steinwolle, 80 mm) und Abdeckblechen

(Aluminium, 2 mm) umgeben /WAG 17/. Für das Absatzbecken wurden die Böden und Wände mittels wärmeleitender HCO-Strukturen in ATHLET berücksichtigt.

Im COCOSYS-Datensatz ist der Flutbehälter mit der Dampfeinspeisung in die Wasservorlage im unteren Bereich modelliert. Der Flutbehälter hat eine Höhe von 11,4 m (Abb. 2.19, links) und einen Innendurchmesser von 5 m im unteren Bereich und 5,5 m im oberen Bereich, in dem der Gebäudekondensator installiert ist. Die zwei Wärmetauscher sind auf zwei Zonen (VGeko1 und VGeko2, s. Abb. 2.19, rechts) aufgeteilt. Das freie Gasvolumen des Flutbehälters beträgt ca. 220 m³ /WAG 17/. Der COCOSYS-Datensatz umfasst 6 Zonen für den Flutbehälter und eine Zone für die Umgebung. Zur Modellierung aller Zonen wurde das Nichtgleichgewichtsmodell von COCOSYS verwendet. Der COCOSYS-Datensatz berücksichtigt auch die in den einzelnen Zonen vorhandenen wärmeleitenden Strukturen wie Decken, Böden und Wände aus Stahl. Den Zonen des Flutbehälters sind insgesamt 6 wärmeleitende Strukturen zugeordnet.

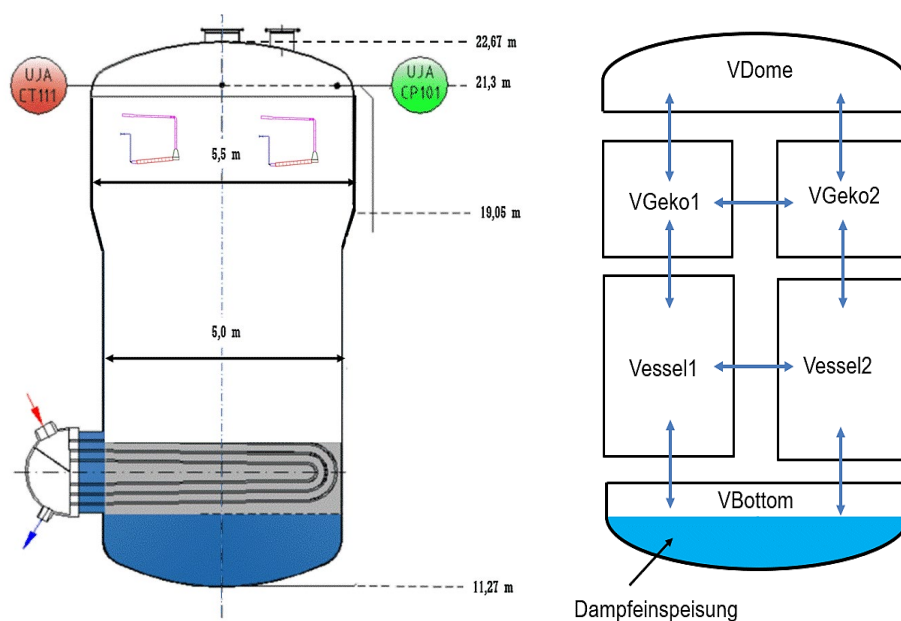


Abb. 2.19 Flutbehälter mit Messstellen für den Druck und die Temperatur (links /WAG 17/) und die COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters (rechts)

Die Energiezufuhr beim Notkondensatorbetrieb wird durch Einspeisen von überhitztem Dampf in die Wasservorlage am Boden der Flutbehälterzone (VBottom) simuliert. Die Dampfeinspeisung ist in Form einer Tabelle implementiert, in der Massen- sowie Energiestrom vorgegeben sind. Wenn der Wasserpool zu sieden beginnt, wird dadurch Satt-dampf in die Atmosphäre des Flutbehälters freigesetzt.

Die Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS befindet sich an den Gebäudekondensatorbündeln, die durch die ATHLET-HCOs modelliert sind. Eine schematische Darstellung der Kopplung zwischen ATHLET-HCO-Struktur und COCOSYS-Struktur ist unter dem Punkt 2.2.1 aufgeführt.

2.3.3 Ergebnisse der durchgeführten Nachrechnungen

Zu Beginn des Versuchs wird die Wasservorlage im Flutbehälter durch die Einspeisung von überhitztem Dampf aufgeheizt. Durch die Energiezufuhr wird Sattedampf in die Atmosphäre freigesetzt, was einen schnellen Anstieg des Drucks und der Temperatur im Flutbehälter zur Folge hat. Kurz nach dem Druckanstieg sinkt der Druck aufgrund der Öffnung des Druckregelventils, das auf dem Flutbehälter installiert wurde, um den Druck konstant zu halten. Danach stabilisiert sich der Druck im Bereich von 2,95 – 3,05 bar. Der Vergleich zeigt insgesamt eine gute Übereinstimmung des berechneten Drucks mit den im Experiment gemessenen Druckwerten. In Abb. 2.20 ist der Temperaturverlauf den experimentellen Messwerten gegenübergestellt. Auffällig ist, dass die berechnete Atmosphärentemperatur im Flutbehälter nach einem anfänglichen Anstieg wieder abfällt und langfristig die experimentellen Temperaturwerte unterschätzt werden. Die Ursachen für diese Abweichungen im Verlauf der Temperatur sind noch nicht abschließend geklärt und Gegenstand zukünftiger Untersuchungen.

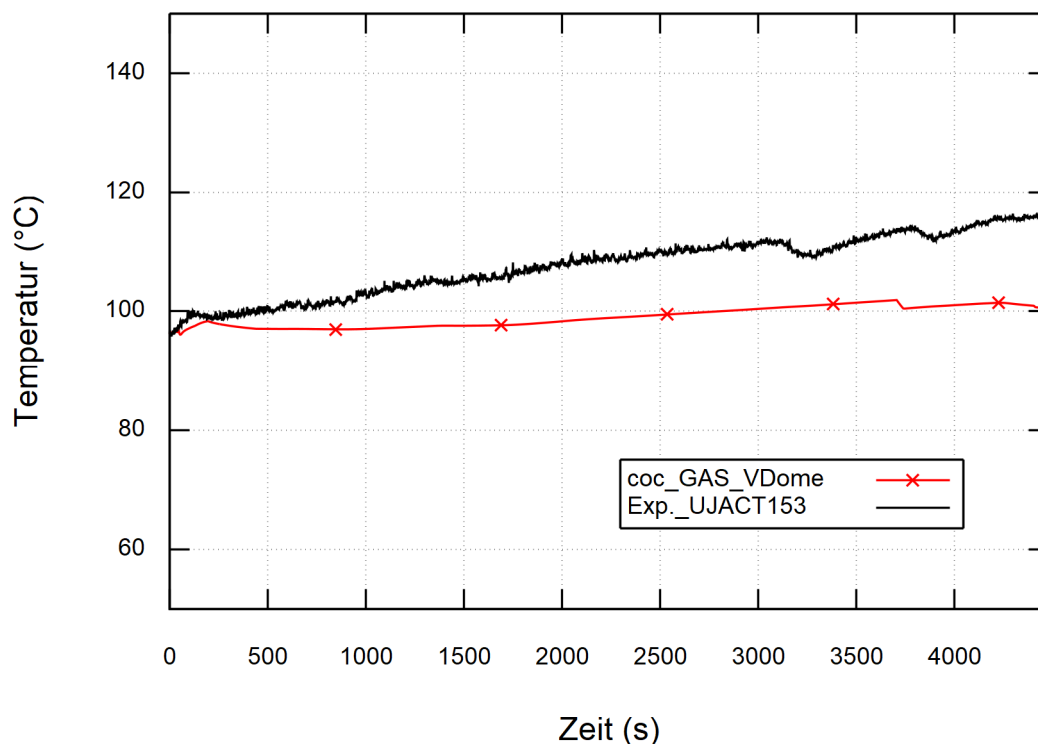


Abb. 2.20 INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich der berechneten Atmosphären-temperatur mit der im Experiment gemessenen Atmosphärentemperatur im Flutbehälter

Abb. 2.21 zeigt den Vergleich des berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment gemessenen Massenstrom. Wie in der Abbildung zu sehen ist, wird der Massenstrom zu Beginn der Simulation leicht unterschätzt. Danach verbleibt der Massenstrom durch den Gebäudekondensator bis ca. 3 000 s nahezu konstant und ist generell in guter Übereinstimmung mit den im Experiment gemessenen Werten. Kurz nach 3 000 s ließen sich im Versuch aufgrund des sogenannten Geyserings zweifach sehr hohe Massenstrompeaks beobachten, in denen der Massenstrom schlagartig anstieg. Der Geysering-Effekt zählt zu den thermohydraulischen Instabilitäten in Naturumlaufsystemen, wie zum Beispiel in Gebäudekondensatoren. Die im Experiment beobachteten Massenstrompeaks konnten mit der aktuellen AC²-Version nicht wiedergegeben werden.

Wie aus der Abb. 2.22 zu ersehen, wird die berechnete Kühlleistung des Gebäudekondensators zu Beginn der Rechnung im Vergleich zum Experiment auch leicht unterschätzt, was auf den anfänglich kleineren Massenstrom durch den Kondensator zurückzuführen ist. Langfristig ist die Leistung allerdings in guter Übereinstimmung mit der aus

dem Experiment ausgewerteten Leistung (bis zum Auftreten des Geyserings kurz nach 3 000 s).

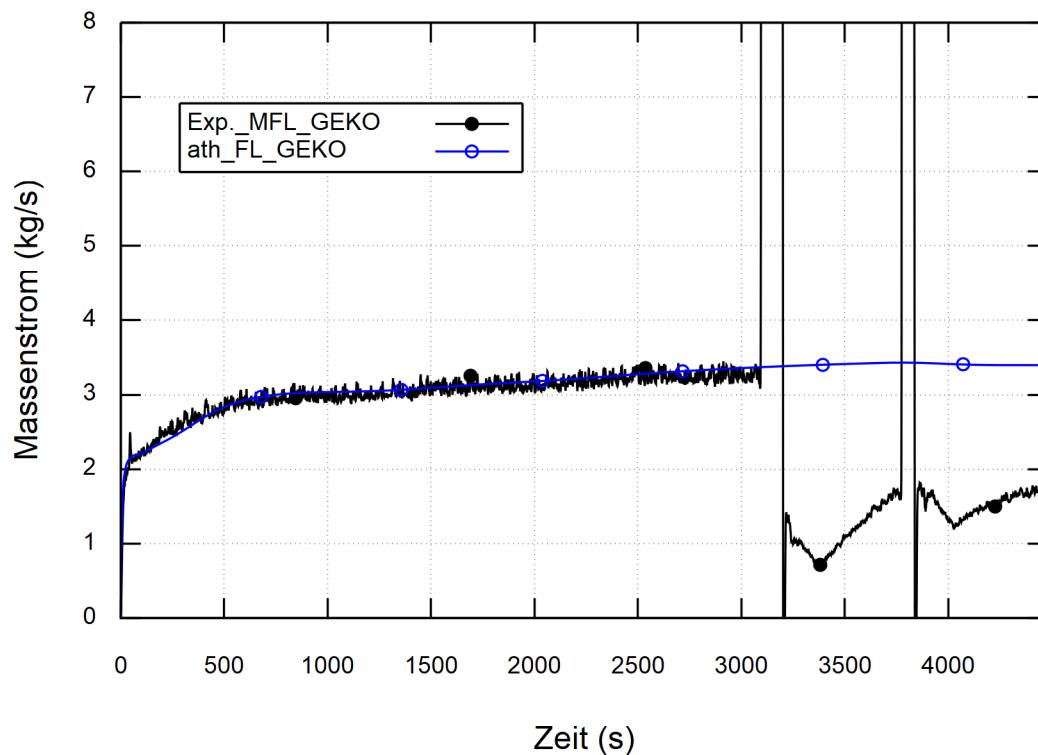


Abb. 2.21 INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich des berechneten Massenstroms mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom durch den Gebäudekondensator

In Abb. 2.23 sind der von COCOSYS berechnete Energieeintrag auf der linken Seite der gekoppelten HECU-Strukturen (HCO1N1 und HCO2N1) und der von ATHLET berechnete Energieeintrag auf der rechten Seite der gekoppelten HCO-Strukturen (HCC1-HX und HCC2-HX) miteinander verglichen. In der Abbildung ist zu erkennen, dass die beiden Energieeinträge durch die gekoppelten HCO-Strukturen in sehr guter Übereinstimmung stehen, was darauf hindeutet, dass die Energie in vollem Umfang von COCOSYS an ATHLET weitergegeben wird.

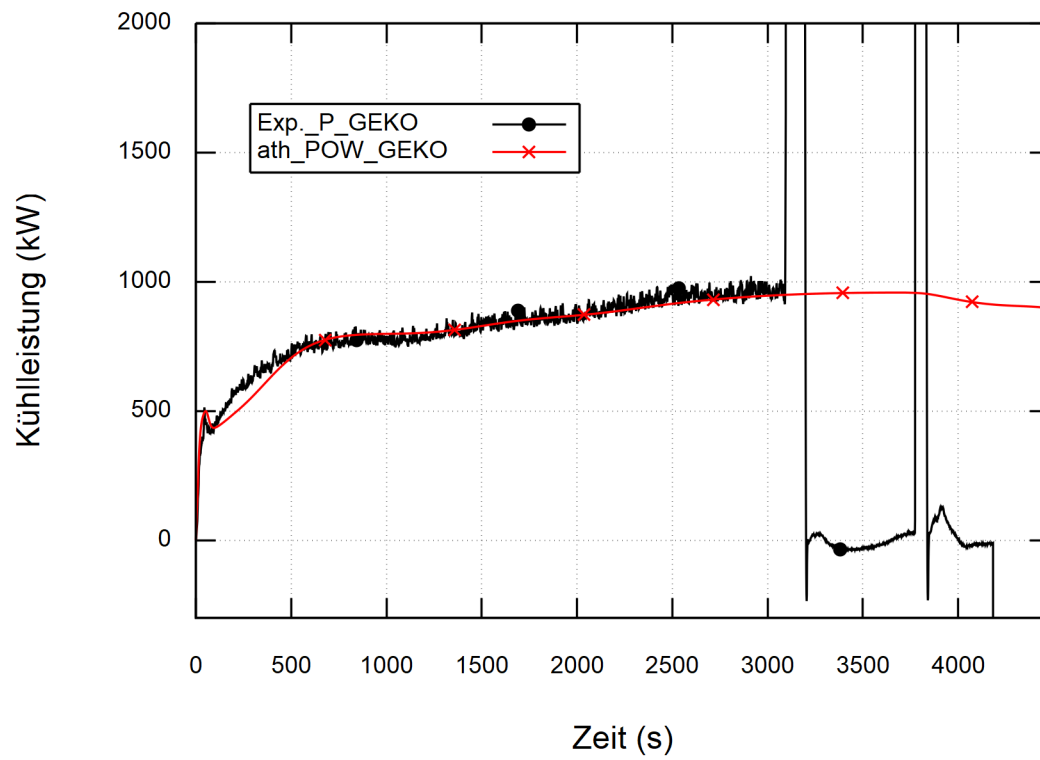


Abb. 2.22 INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators

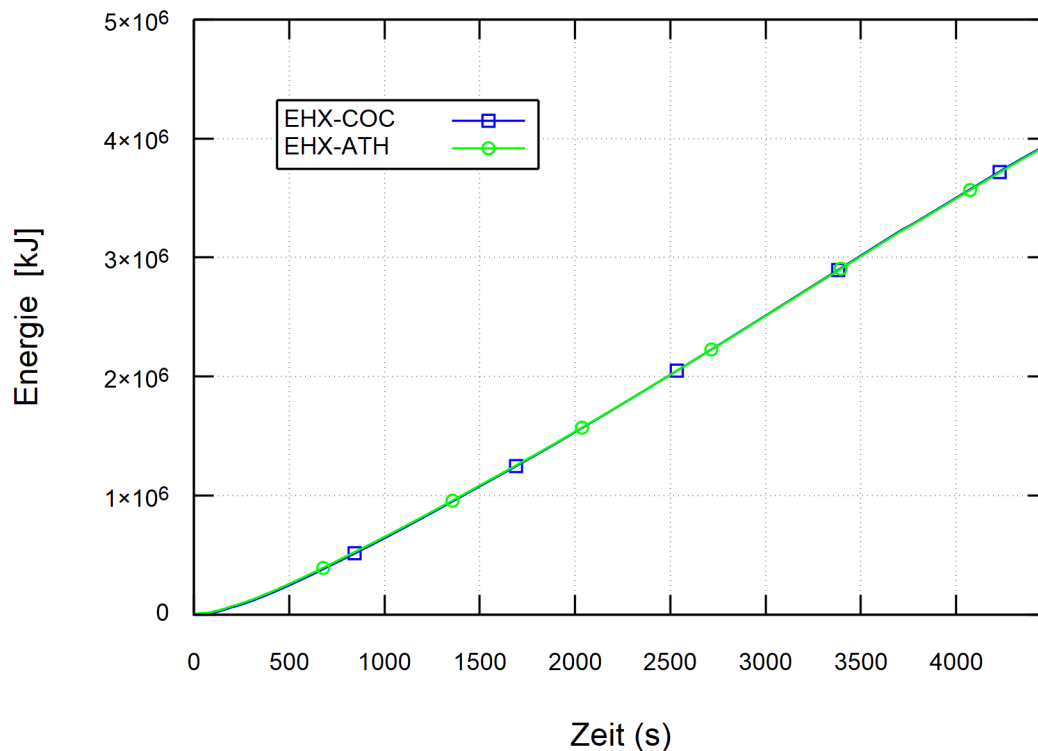


Abb. 2.23 INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich des von ATHLET sowie von COCOSYS berechneten Energieeintrags durch die gekoppelten HCO-Strukturen.

2.3.4 Schlussfolgerungen

Mit dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Codesystem wurde ein INKA-Experiment mit Dampf-Luft-Gemisch aus der INKA-Versuchsreihe nachgerechnet. Auf Basis der durchgeführten Nachrechnung lässt sich schließen, dass die Anwendung von gekoppelten HCO-Strukturen zwischen ATHLET und COCOSYS unter Berücksichtigung des ertüchtigten CO1-Wärmeübergangsmodells funktioniert. Bei der Nachrechnung des ausgewählten INKA-Experimentes zeigt sich, dass im in einigen Punkten Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment vorliegen. Die Ergebnisse zeigen jedoch, dass die Atmosphärentemperatur im Flutbehälter in der Simulation langfristig unterschätzt wird. Die Ursachen für diese Abweichungen im Verlauf der Temperatur sind Gegenstand zukünftiger Untersuchungen.

2.4 Verbesserungen der Simulation gefluteter Raumbereiche im Containment mit COCOSYS-Zonen

2.4.1 Initialisierung wassergefüllter Zonen

2.4.1.1 Ausgangslage

Die Nodalisierung von Wasserpools durch das Übereinanderschichten von Zonen in einer COCOSYS-Nodalisierung erlaubt die Realisierung von Pools mit unterschiedlichen Temperaturen in verschiedenen Wassertiefen. Dies ist für die realistische Simulation von vertikalen thermischen Schichtungen wichtig, die wiederum Phänomene wie die Wärmeabgabe von der Wasseroberfläche bedingen. Dazu wird ein Wasserpool mit mehreren übereinanderliegenden Zonen dargestellt, die durch ATM_FULL-Verbindungen miteinander verbunden sind (siehe Abb. 2.24). Bei der Vorgabe der Startbedingungen in den Zonen setzte der bisherige Algorithmus voraus, dass immer eine Gasphase vorhanden ist (Abb. 2.24, linke Seite). Nach dem Start der Rechnung musste das Gas aus den unteren Zonen zunächst nach oben transportiert werden. Je nach Komplexität der Nodalisierung konnte es dabei wiederholt zum Löschen und Erzeugen der Gasphase in Zonen kommen, was den Lösungsalgorithmus zu kleinen Zeitschritten zwingt. Hinzu kam, dass die Drücke in den tiefergelegenen Zonen vom Anwender häufig nicht entsprechend dem hydrostatischen Druck im Gleichgewicht exakt vordefiniert werden können, so dass hier weiteres Potential für ein Ungleichgewicht zu Rechnungsbeginn bestand.

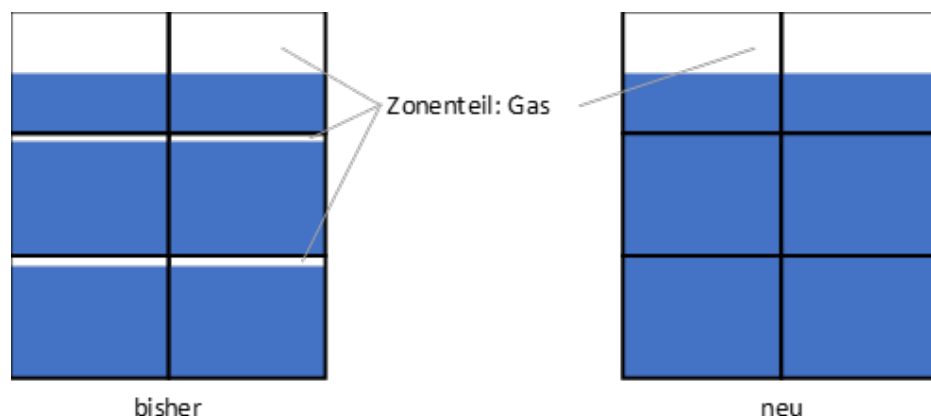


Abb. 2.24 Geschichtete Nodalisierung eines Wasserpools

In der Regel führt das Lösungsverfahren nach gewisser Zeit auf den gewünschten Zustand mit gasfreien, komplett mit Wasser gefüllten Zonen. Dies bedurfte bei komplexer Nodalisierung jedoch bereits einiges an Rechenzeit.

2.4.1.2 Durchgeführte Arbeiten

Im ersten Schritt wurde die Eingabe von Startbedingungen ohne Gasphase ermöglicht. Die neue Eingabe orientiert sich an dem ansonsten auch verwendeten Eingabeformat für die Startbedingungen. Im unteren Beispiel sind die für gasfreie Zonen nötigen Parameter kursiv-blau markiert. Bei der Eingabe der Zonenteile wird der erste Teil, der für die Gasphase steht, als DUMMY definiert. Bei der Eingabe der eigentlichen Startwerte unter dem Pseudowort (PW) STARTING muss nur die Anfangstemperatur der Wasserphase (IPART=2) definiert werden. Mit WATER REST 2 wird dem Rest des Zonenteils die Komponente Wasser zugeordnet. Da keine weiteren Komponentenmassen definiert wurden, füllt die Wasserphase die gesamte Zone.

```
K---- R11
----- MODEL
      NONEQUILIB
@    MAIN PHASE OF THE ZONE PARTS
      DUMMY FLUID
----- GEO_BASIC
@    ZTVOL      ZELEV      ZFAREA      ZFELEV
      8.0        1.0        4.0        0.0
----- STARTING
@    COMP      TYPE  IPART  VALUE      UNIT
      TEMP      2      300.0    K
      WATER     REST  2
```

In der klassischen Behandlung der vom Anwender vorgegebenen Startbedingungen werden die Daten eingelesen und direkt für die Initialisierung verwendet. Dieser Ablauf ist beim automatischen Bestimmen der Größen für gasfreie Zonen nicht möglich, da die Informationen über die Verbindungen zwischen Zonen noch fehlen. Diese werden jedoch benötigt, um die unbekannten Drücke in gasfreien Zonen über bekannte Drücke in Zonen mit Gasphase zu bestimmen. Es wird hier also intern beim Einlesen der Eingabedatei nur die Temperatur initialisiert, der Druck wird zunächst auf null gesetzt und die Zone wird als gasfrei markiert.

Nach dem Einlesen der Verbindungsdaten startet die zweite Phase der Initialisierung mit der eigentlichen Bestimmung der Anfangsdrücke in gasfreien Zonen. Dabei wird in einer Schleife über alle Zonen für jede Zone mit undefiniertem Druck (= 0) geprüft, ob eine Verbindung zu einer Zone mit definiertem Druck ($\neq 0$) existiert. Falls ja, wird der Druck iterativ bestimmt. Dabei kommt ein klassisches Newton-Verfahren zum Einsatz, das den Druck so lange variiert, bis die Differentialgleichung für die zeitliche Änderung des Massenstroms der Verbindung den Wert Null hat, über die Verbindung also ein Druckgleichgewicht besteht. Die Hauptschleife über alle Zonen wird so lange wiederholt, bis sich

keine Zonen mit unbekanntem Druck mehr finden lassen. In dem obigen Beispiel (Abb. 2.24) werden die Drücke in der mittleren Ebene von Zonen so im ersten Durchlauf bestimmt, während die untere Ebene im zweiten Durchlauf erfasst wird.

Die Implementierung der Initialisierung ist anhand verschiedenster Beispiele geprüft worden. In dem Beispiel aus Abb. 2.24 ergeben sich Drücke, die den erwarteten, hydrostatischen Drücken entsprechen. Das Gesamtsystem befindet sich dann im Gleichgewicht, d. h. die instationäre Lösung zeigt keine relevanten Änderungen in thermodynamischen Größen oder Verbindungsmassenströmen.

2.4.2 Berücksichtigung der temperaturabhängigen Wasserdichte

2.4.2.1 Ausgangslage

Der Druck in den Zonen mit einem Gasanteil bestimmt sich aus dem Zusammenhang:

$$p = p(\rho, T) \quad (2.14)$$

worin die Temperatur T selbst Lösungsvariable ist, und sich die Gasdichte ρ aus den Lösungsvariablen für die Massen der Gaskomponenten ergibt. Für wassergefüllte Zonen ohne Gasanteil musste hierzu ein Ersatzmodell geschaffen werden. Dieses Ersatzmodell wurde in Analogie zu (2.14) formuliert. Diese liefert bei Zeitableitung:

$$\frac{dp}{dt} = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho_w} \right|_{T_w} \frac{d\rho_w}{dt} + \left. \frac{\partial p}{\partial T_w} \right|_{\rho_w} \frac{dT_w}{dt} \quad (2.15)$$

Im bestehenden Ersatzmodell ist bisher daraus nur der erste Term verwendet worden, der mit der zeitlichen Änderung der Wassermasse $m_w = \rho_w V_w$ in Zusammenhang steht:

$$\frac{dp}{dt} = \alpha \frac{1}{V_w} \frac{dm_w}{dt} + q_D(\delta, \bar{p}) + q_C(\gamma, m_w) \quad (2.16)$$

Dabei wurde die Abhängigkeit des Drucks von der Dichte durch den Modellkoeffizienten α ersetzt. Die beiden zusätzlichen Terme q_D und q_C enthalten die Modellkoeffizienten δ und γ . Über den Term q_D werden mit Hilfe des Gleichgewichtsdrucks $\bar{p}$ Schwingungen gedämpft, die system-inhärent sind. Der Gleichgewichtsdruck $\bar{p}$ wird dabei aus den Differentialgleichungen für die Verbindungen bestimmt. Der Term q_C wird nur

relevant, wenn der Wasserstand in der Zone nahe der Zonendecke liegt, er wirkt einem Überfüllen der Zone entgegen.

2.4.2.2 Durchgeführte Arbeiten

Variation der Koeffizienten

Die Koeffizienten für die Ersatzdifferentialgleichung für den Druck waren bisher unveränderbar im Quellcode festgeschrieben. Zur Durchführung von Studien zu einer optimalen Wahl der Koeffizienten sollten diese veränderbar gemacht werden. Diese Änderungen sind im Projektzeitraum durchgeführt worden. Eine Besonderheit betrifft dabei den Koeffizienten δ . Anders als die weiteren Parameter wird er nicht dimensionsbehaftet vorgegeben. In der Analyse der Schwingungsdifferentialgleichung für den Druck, die sich aus der Ersatzmodellgleichung für den Druck und den Gleichungen für die Verbindungen ergibt, lässt sich der Koeffizient δ so definieren, dass das Dämpfungsglied der Normalform einer linear gedämpften Schwingung entspricht. Der Koeffizient δ ist hier so definiert, dass $\delta = 0$ der ungedämpften, harmonischen Schwingung, und $\delta = 1$ dem aperiodischen Grenzfall entspricht. Da der Dämpfungsterm Terme enthält, die Parameter aus allen angeschlossenen Verbindungen der Zone enthalten, wäre eine einzelne, für alle Zonen geltende Eingabe für δ ansonsten nicht möglich.

Die Implementierung ist an verschiedenen Beispielen getestet worden. Der Verlauf des Drucks aus solchen Rechnungen mit Variation des Koeffizienten δ ist in Abb. 2.25 gezeigt. Die Variation von geringer zu hoher Dämpfung zeigt den erwarteten Verlauf.

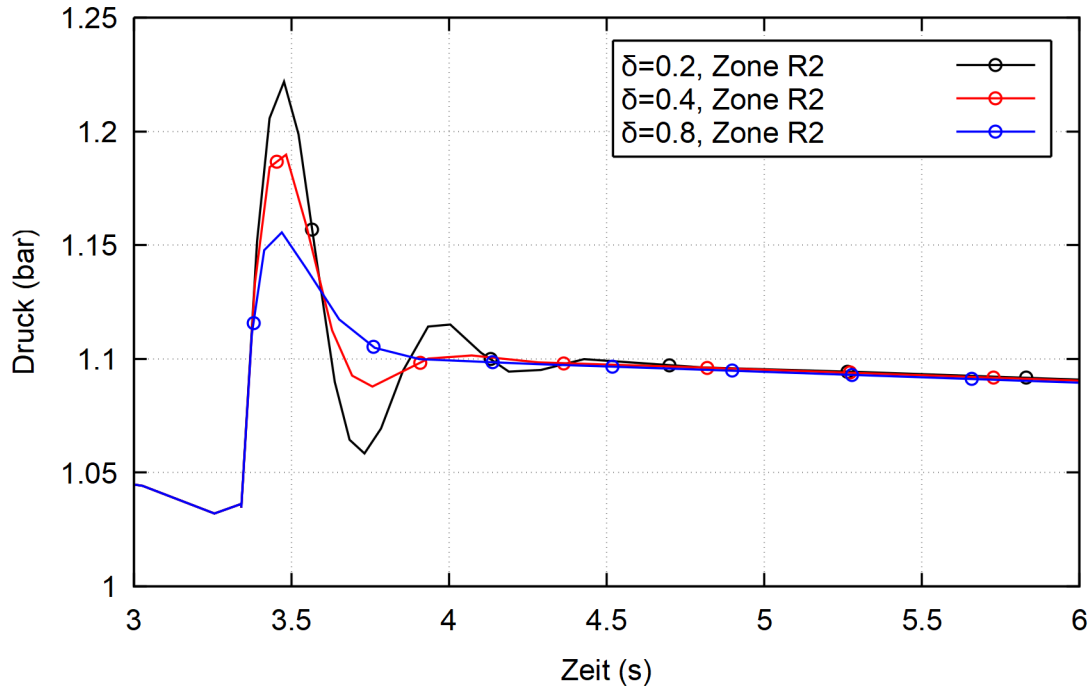


Abb. 2.25 Verlauf des Drucks beim Volllaufen einer Zone; die Gasphase wird hier bei einer Zeit von 3,34 s gelöscht

Berücksichtigung der Temperaturänderung

Anwender berichteten von Fällen, in denen eine schleichende Abnahme des Wasserniveaus in gefüllten Zonen beobachtet wurde. Durch Analyse dieser Fälle konnte ein Zusammenhang mit der Abkühlung dieser Zonen, und damit zur fehlenden Berücksichtigung der Wasserdichte im Druckmodell hergestellt werden. Die Modellgleichung für den Druck in der gefüllten Zone, Gl. (2.16), wurde daher so erweitert, dass in Abhängigkeit vom Parameter τ der Einfluss der Temperaturänderung auf den Druck des Wasserzonteils berücksichtigt wird.

$$\frac{dp}{dt} = \alpha \frac{1}{V_w} \frac{dm_w}{dt} + q_D(\delta, \bar{p}) + q_C(\gamma, m_w) + \tau \frac{dT_w}{dt} \quad (2.17)$$

Der Einfluss dieses zusätzlichen Terms kann bereits in einfachen Datensätzen demonstriert werden. Abb. 2.26 zeigt eine solche, einfache Nodalisierung eines Wasserpools mit 4 Zonen (R11 – R22), die durch 4 Verbindungen (vA bis vD) verbunden sind. Die Größe der Verbindungen entspricht dabei der Boden- bzw. Seitenfläche der Zonen, so dass die Verbindung vC hier auch Gas transportiert. Die beiden unteren Zonen wurden als vollständig wassergefüllt initialisiert, wobei das flüssige Wasser in allen Zonen jeweils eine

Temperatur von 60 °C hat. Im Verlauf der Rechnung, zwischen 15 s und 75 s, wird die Zone R11 abgekühlt.

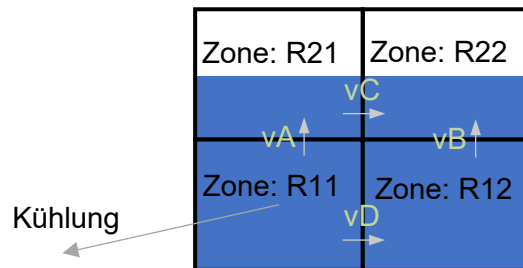


Abb. 2.26 Geschichtete Nodalisierung eines Wasserpools; Pfeile an den Verbindungen vA bis vD zeigen die Strömungsrichtung bei positivem Massenstrom

Ergebnisse aus Rechnungen dieses Szenarios werden in Abb. 2.27 gezeigt, dargestellt sind die Wassermassenströme durch die vier Verbindungen. Im Gegensatz zu der Referenzrechnung ohne Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte, $\tau = 0$, in der kaum Bewegung in der Wasserphase entsteht, zeigt die erweiterte Modellierung die Ausbildung einer Ausgleichsströmung. Wie erwartet bildet sich zunächst eine Konvektionsströmung entgegen dem Uhrzeigersinn mit negativem Wert für v_C und v_A bzw. positiven Werten für v_B und v_D aus. Wegen der Trägheit der Verbindungsgleichungen zeigt sich dann ein abklingender Wechsel der Richtung der Konvektionsschleife.

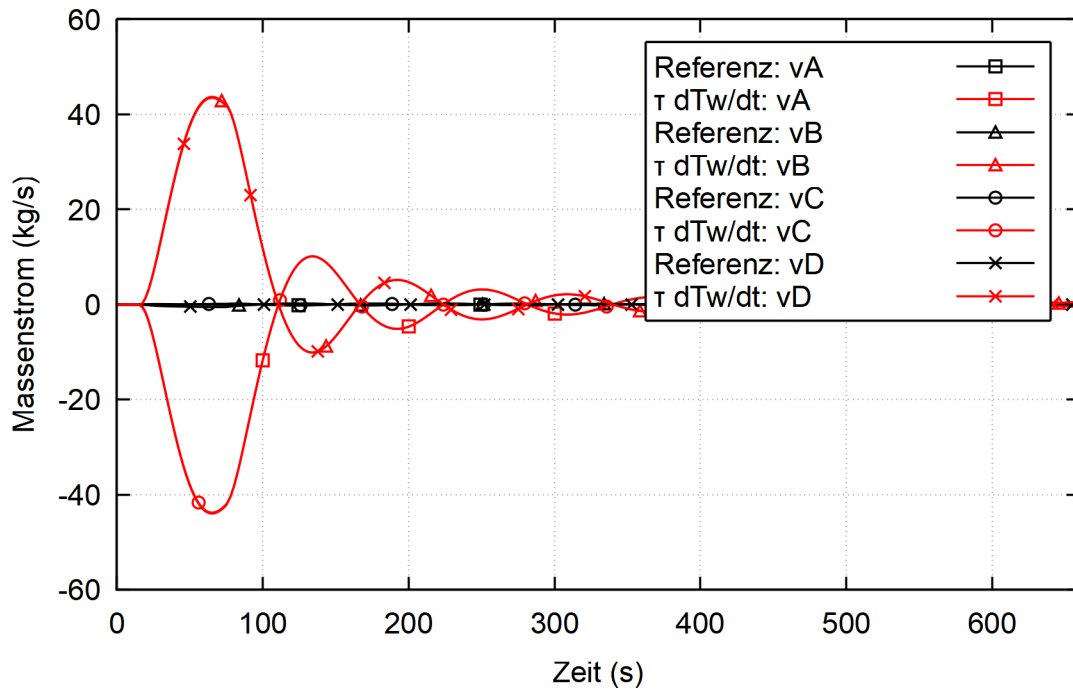


Abb. 2.27 Vergleich einer Rechnung ohne die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte (Referenz) mit einer Rechnung mit erweiterter Modellierung ($\tau \frac{dT_w}{dt}$)

Die Untersuchung des Beispiels zeigt, dass mit der vorgenommenen Erweiterung der Druckgleichung im COCOSYS-Modell die Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte plausibel berücksichtigt wird. Die relevanten Modellparameter können vom erfahrenen Nutzer über Kommandozeilenargumente vorgegeben werden. Die Tauglichkeit der intern vorgegebenen Referenzwerte muss auf der Basis von weitergehenden Anwendungsrechnungen bzw. Validierungsrechnungen untersucht werden und entsprechende Empfehlungen müssen für zukünftige Anwendungen vorgenommen werden.

3 Erweiterungen der Modelle für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten

3.1 Erweiterung und Ergänzung von Modellen in AFP2

3.1.1 Rivulet-Modell

Im Rahmen des ESSA-Projektes war bei KIT (FKZ 1501537) zwischen 2018 und 2021 das Modell CONRAG (CONDensate coverAGE) entwickelt worden, das zur Beschreibung der Phänomenologie von Wasserrinnsal- bzw. Wasserfilmbildung unter kondensierenden Bedingungen dient /WAN 19/ /WAN 20/ /WAN 21/. Im Englischen wird das Phänomen der Wasserrinnsale mit ‚Rivulet‘ bezeichnet. Dieses Modell wurde für die Implementation in COCOSYS zur Quantifizierung von Parametern erstellt, die zur Simulation des Aerosolabwaschens benötigt werden, z. B. der Benetzungsgrad einer Struktur sowie die Dicke des sich einstellenden Wasserfilms unter Berücksichtigung von Kondensation sowie von herablaufendem Wasser. In Zusammenarbeit mit KIT war im Rahmen des Projektes RS1561 im Jahr 2021 eine erste Codeversion dieses Modells in die COCOSYS-Entwicklerversion übernommen worden.

Ferner war für die Beschreibung der Containmentaußenkühlung, wie z. B. beim AP1000, zuvor bei KIT ein weiteres Modell zur Beschreibung des außen ablaufenden Wasserfilms bzw. dessen Auflösung unter verdampfender Bedingung entwickelt worden /HUA 15/. Für die Nutzung dieser beiden Modelle (internes Modell bei Kondensation, externes Modell für die Situation der Verdampfung) in COCOSYS ist es nötig, dass diese für die verschiedenen Bedingungen aufgestellten Wasserfilmmodelle zukünftig zusammengeführt und in einer konsistenten Weise an die Thermohydraulik in COCOSYS angebunden werden.

Mit dem Ziel der Weiterführung von Modellentwicklungen zur Wasserfilmbeschreibung ist dementsprechend von KIT ein Projektvorschlag VEKOCO in Diskussion mit der GRS vorbereitet worden. Dazu ist von der GRS die bisherige Anwendung der Modelle analysiert und darauf basierend eine Liste von Prioritäten in der Verbesserung der Modelle aufgestellt worden. Von der GRS werden demnach Prioritäten in folgenden Punkten gesehen:

- Die Rückwirkung der im Wasserfilmmodell CONRAG ermittelten Strömungsform (Strömungsregime Tropfen/Rinnsal oder Film) sowie der zugehörigen Parameter

(z. B. Filmdicke, Film-Geschwindigkeit, Benetzungsfläche, o.ä.) auf die Berechnung des Wärmeübergangs. Im aktuellen Zustand der Anbindung des CONRAG-Modells (s. o.) ist diese Rückwirkung derzeit nicht gegeben. Für die Strömungsformen Rivulet oder Tropfen fehlen dazu Wärmeübergangsmodelle in COCOSYS. Für den Wasserfilm gibt es in COCOSYS das kombinierte Modell CO1. Das von KIT erstellte Wasserfilmmodell für Verdampfungsbedingungen hingegen wirkt bereits auf die Berechnung des Wärmeübergangs in COCOSYS zurück.

- Es ist nötig, dass die algorithmische Einbindung beider Modelle (d. h. für Verdampfung als auch für Kondensation) harmonisiert wird und dass die entsprechende Modelloption (Kondensation oder Verdampfung) automatisch vom Code ausgewählt wird.
- Es fehlt derzeit eine Erweiterung beider Modelle auf die Anwendung von Strukturen, die in einem Containment-Datensatz unterteilt sind. Ein Beispiel ist die Innenseite des Containments, die in gebräuchlichen Datensätzen in mehrere Teilstrukturen unterteilt ist und deren Teilstrukturen in verschiedenen Zonen liegen. Die Anwendung des Modells sollte im entwicklungsnahe Testen daher mindestens einen Fall abdecken, bei dem die betrachtete Struktur entlang der Höhe diskretisiert ist und bei dem gleichzeitig das Aerosolabwaschen in AFP2 angesprochen wird. Eine Ertüchtigung des Modells für eine Unterteilung der Strukturen in COCOSYS und für die Benutzung der neuen Option von segmentierten Strukturen ist daher nötig. Mit der Option von segmentierten Strukturen können unterschiedliche Randbedingungen auf beiden Seiten der Struktur entsprechend den Wasserständen in einer vertikalen Unterteilung der Struktur berücksichtigt werden.

Die Beratungen mit KIT über den Inhalt von VEKOCO sind innerhalb des laufenden Vorhabens durchgeführt worden. Das Projekt VEKOCO startet erst nach Ende der Laufzeit von RS1598, der ursprüngliche Start war früher geplant. Eine Begleitung der externen Codeentwicklung in enger Abstimmung mit KIT ist für das Nachfolgeprojekt zu RS1598, UMRS1626, seitens der GRS geplant. Ein Teil der oben genannten Aufgaben wird entsprechend der im Projekt VEKOCO geplanten Arbeiten durch die Entwickler von KIT geleistet. In Rücksprache mit KIT werden dann komplementäre Arbeiten dazu, insbesondere für die Integration des verbesserten Modells in COCOSYS, durch die GRS geleistet.

3.1.2 pH-Wert-Modell

Das pH-Wert-Modell in COCOSYS basiert auf Arbeiten von Framatome /FUN 07/. Dieses Modell war in einem früheren Vorhaben im COCOSYS-Modul AFP übernommen worden /ECK 11/. Die aktuellen Arbeiten umfassen zum großen Teil den Einfluss von CO_2 , welches in der Atmosphäre im THY-Modul berechnet wird. Dabei wird die CO_2 -Konzentration an das AFP-Modul gesendet. In AFP wird die Löslichkeit von CO_2 in Wasser nach dem Henry-Gesetz berechnet. Das pH-Wert-Modell in COCOSYS nutzt die im Wasser gelöste Konzentration zur Berechnung des pH-Werts zusammen mit den im Wasser gelösten Spezies Bor, Lithium, Ammoniak (NH_3), Cäsiumhydroxid (CsOH) und Salpetersäure (HNO_3). Die für das Containment typische chemische Form CsI wird nicht berücksichtigt.

Bei Framatome wird derzeit weiter an der Verbesserung des pH-Wert-Modells gearbeitet. In dem Zuge sind die erzielten Ergebnisse der Framatome-Arbeiten in COCOSYS im Rahmen von entsprechenden Quellcodemodifikationen zunächst in AFP übernommen worden. Die durchgeführten Arbeiten umfassten zwei Punkte

- Korrektur der CO_2 -Massenbilanz in COCOSYS
- Reformulierung der gelösten CO_2 -Konzentration im Wasser
 - Speziell bei hohem pH-Wert reagiert das CO_2 in zwei Schritten einer Hydrolysereaktion weiter zur Bildung der Spezies HCO_3^- und CO_3^{2-}
 - Dadurch verringert sich die CO_2 -Konzentration im Wasser, weshalb ein weiterer Massentransport von CO_2 zwischen Atmosphäre und Wasser über die Wasseroberfläche erfolgt
 - Dieses Verhalten ist im derzeitigen COCOSYS-Modell nicht enthalten

Zusätzlich ist das Modell auch nach AFP2 übernommen worden, so dass jetzt eine weitgehend konsistente Beschreibung in AFP und AFP2 vorliegt.

3.1.2.1 Korrektur der CO_2 -Massenbilanz im AFP pH-Wert-Modell

Im Folgenden wird der erste Punkt über die Korrektur der CO_2 -Massenbilanz im pH-Wert-Modell erläutert.

Framatome hat der GRS einen unabhängig von COCOSYS auswertbaren Programmcode ihres pH-Wert-Modells zum Zwecke unabhängiger Untersuchungen zukommen lassen. Damit sind einige parametrisierte Testrechnungen durchgeführt worden, um das Problem nachzuvollziehen. Anders als in dieser Stand-alone-Parameterrechnung werden die Spezies in COCOSYS für einen Testfall zeitlich nacheinander eingespeist, wie anhand der gelösten molaren Konzentrationen im Sumpfwasser in Abb. 3.1 ablesbar ist.

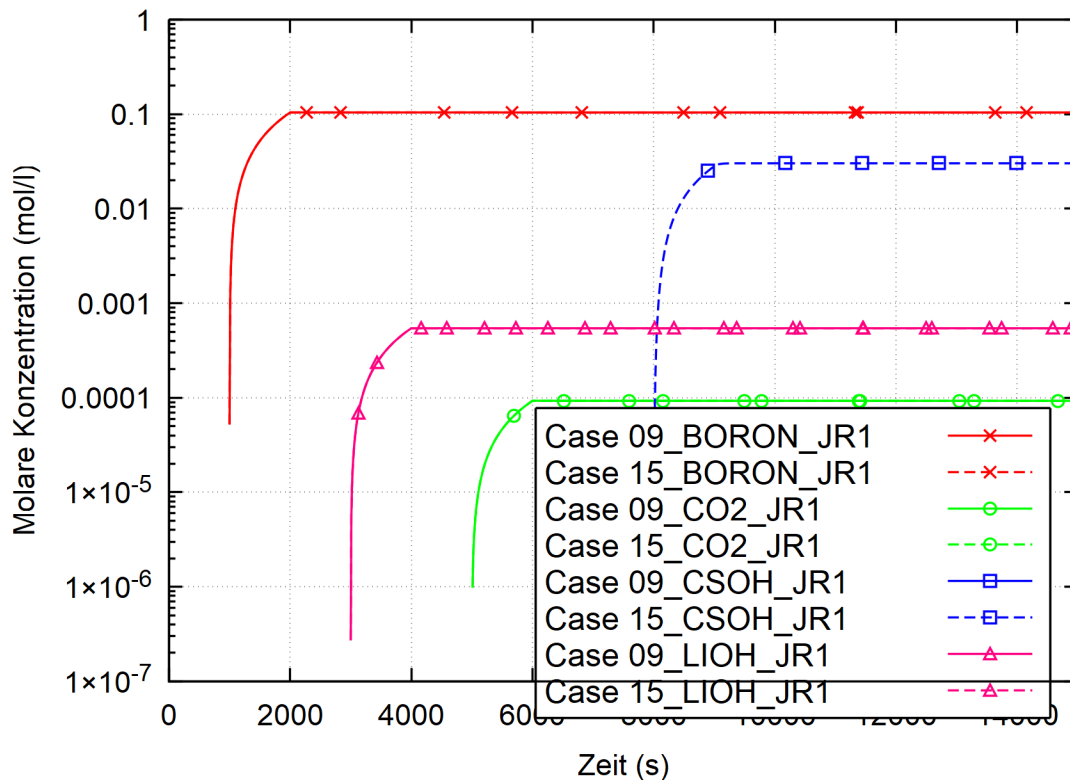


Abb. 3.1 Molare Konzentrationen der Spezies im Sumpf

Nacheinander werden die Spezies Bor, Lithium und CO₂ eingespeist. Im Rechenfall (Case) Nr. 15 wird als letztes zusätzlich CsOH eingespeist. Die molaren Konzentrationen nehmen im Sumpfwasser über der Zeit entsprechend der eingespeisten Menge zu und können der Grafik entnommen werden.

Das Problem der CO₂-Massenbilanz wird in Abb. 3.2 deutlich. Diese vergleicht die Stoffmenge von CO₂ in der Atmosphäre, die im THY-Modul bilanziert wird, mit den CO₂-Stoffmengen in der Atmosphäre und der im Sumpfwasser gelösten Menge, wie sie im AFP-Modul berechnet werden.

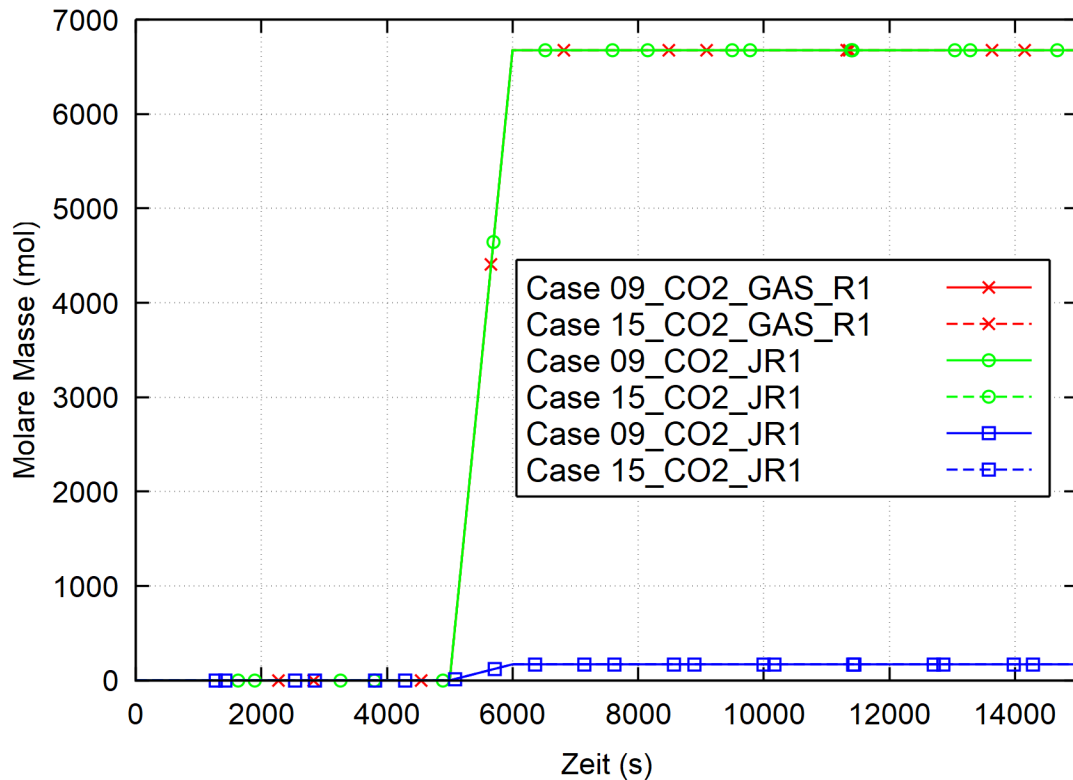


Abb. 3.2 Berechnete CO₂-Stoffmengen

Die in der Luft getragenen Mengen sind im THY-Modul (rot) und AFP-Modul (grün) dieselben, da AFP diese Mengen als Vorgabe aus dem THY-Modul erhält. Zusätzlich gibt es in AFP die Ausgabegröße der im Sumpf gelösten Menge (blau), wie sie im pH-Wert-Modell über das Henry-Gesetz berechnet wird. Das ist inkonsistent, da die in AFP ausgegebene Gesamtmenge an CO₂ größer als die von THY gelieferte Menge ist. Daher soll für die AFP-Ausgabewerte die im Sumpf gelöste Menge an CO₂ von der Stoffmenge im Gas abgezogen werden. Die Summe der blauen und der grünen Kurve wäre dann kleiner als die Menge der roten Kurve aus THY, da die im Wasser gelöste Menge (blau) nur den Anteil entsprechend dem Henry-Gesetz zeigt. Die über die Hydrolyse entstehenden Spezies HCO_3^- und CO_3^{2-} sind darin nicht enthalten.

Die Entwicklung des pH-Wertes für die betrachteten Testrechnungen Nr. 09 und 15 ist in Abb. 3.3 dargestellt. Für die in diesem Abschnitt zu bearbeitende Fragestellung ist der pH-Wert allerdings nicht relevant.

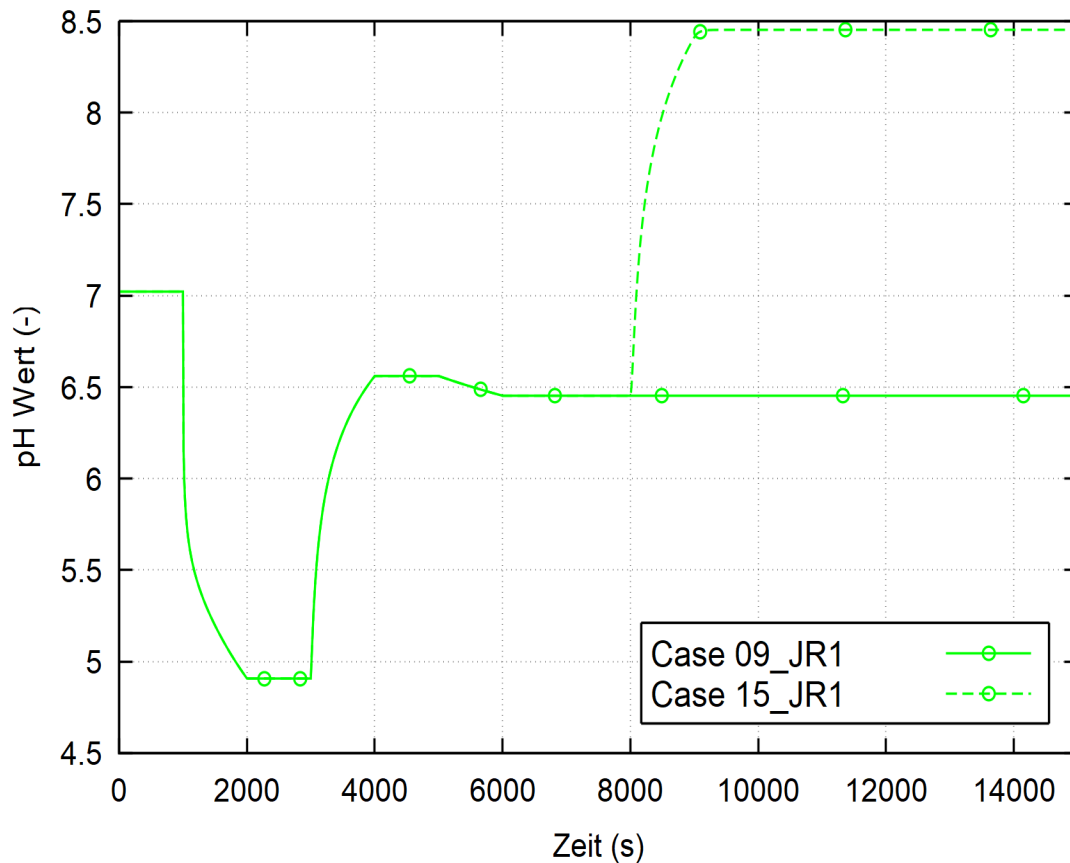


Abb. 3.3 pH-Wert in der Testrechnung

Durch Zugabe des Bors fällt der pH-Wert unter 5, durch das Li erhöht er sich wieder auf einen Wert oberhalb von 6,5 und die CO_2 -Konzentration senkt ihn wieder unterhalb von 6,5. In der Rechnung Nr. 15 steigt der pH-Wert nach Zugabe von CsOH auf einen Wert von etwa 8,5.

3.1.2.1.1 Durchgeführte Arbeiten

Während der Einarbeitung in das Modell ist der zugehörige Code in AFP für eine bessere Verständlichkeit überarbeitet worden. So sind die Programm-Routinen zur Berechnung des Ionenprodukts von Wasser SUB_HELGESON für unter 100 °C nach /HEL 67/ und SUB_MESMER für über 100 °C nach Mesmer /MES 70/ so umgestellt worden, dass sie unabhängig von externen Variablen sind. Dasselbe gilt für die eigentliche Berechnung der Bor-Massenbilanz in SUB_NEW1 nach Crutel /CRU 95/. Auch die eigentliche pH-Wert-Routine AFPJDPH ist unabhängig von Modul-Variablen angelegt worden und gibt neben dem pH-Wert jetzt die Ausgabegrößen für die gelöste CO_2 -Menge sowie die enthaltenen Mengen von HCO_3^- und CO_3^{2-} in mol zurück. Dadurch, dass diese Routinen nicht mehr von spezifischen AFP-Modulvariablen abhängen, können sie auch separat

genutzt und in Testroutinen aufgerufen werden. Außerdem erlaubt dieses Vorgehen eine gleichförmige Einbindung sowohl in AFP als auch in AFP2. An der eigentlichen chemisch-physikalischen Modellierung ist dabei noch nichts geändert worden.

Die Rückgabewerte für CO_2 , HCO_3^- und CO_3^{2-} werden jetzt benutzt, um die Bilanz in den Ausgabewerten von AFP zu korrigieren. Diese Mengen werden von der atmosphärischen CO_2 -Menge abgezogen. Für HCO_3^- und CO_3^{2-} gibt es keine Ausgaben, sondern nur für die übrigbleibende atmosphärische Menge und die im Sumpf tatsächlich als CO_2 gelöste Menge.

3.1.2.1.2 Ergebnisse

Der Unterschied der geänderten CO_2 -Massenbilanz wird an der Testrechnung Nr. 11 gezeigt. Der Vergleich der Stoffkonzentrationen von Fall Nr. 11 mit Fall Nr. 09 ist in Abb. 3.4 dargestellt.

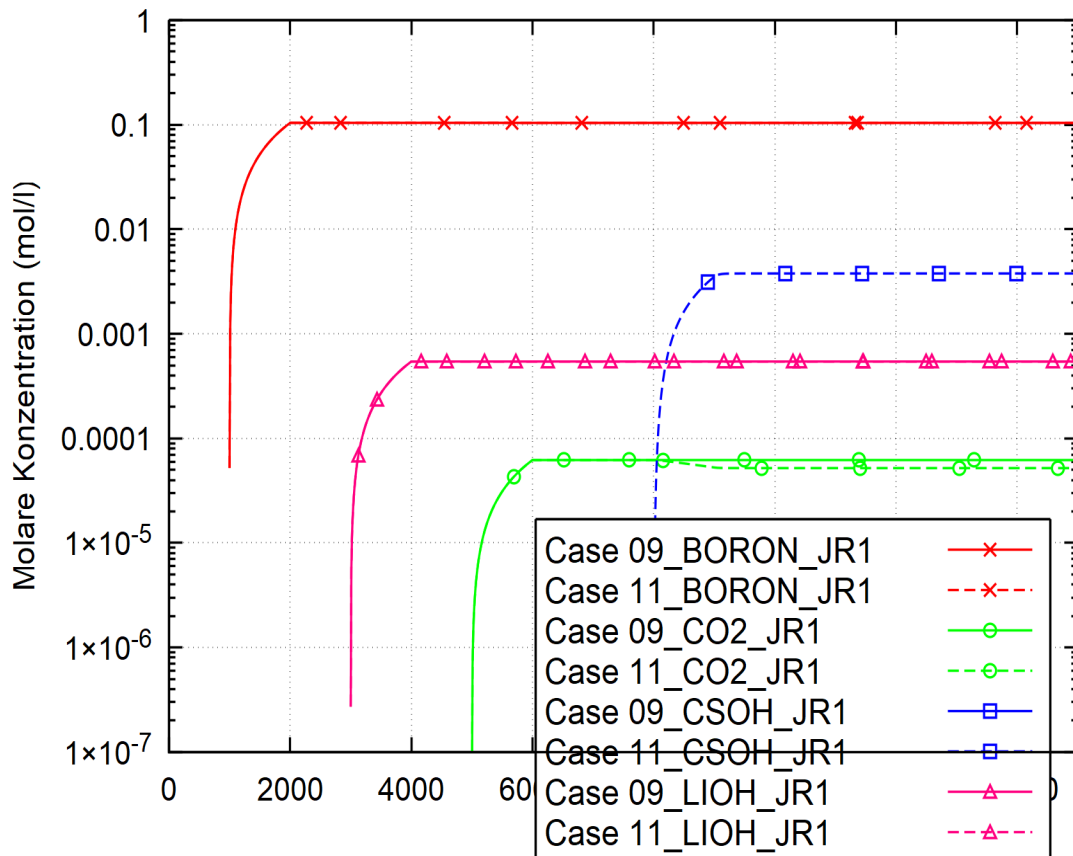


Abb. 3.4 Molare Massen der Spezies im Sumpf

Der einzige Unterschied zu dem Fall Nr. 09 ist, dass wie in Fall Nr. 15 zusätzlich CsOH eingespeist wird. Allerdings ist die Menge im Vergleich zu Fall Nr. 15 um einen Faktor 10 kleiner. Alle anderen Spezies liegen in denselben Mengen wie in den Fällen Nr. 09 und Nr. 15 vor.

Die in diesem Fall berechneten CO₂-Mengen in der Atmosphäre und im Sumpf sind in Abb. 3.5 aufgetragen.

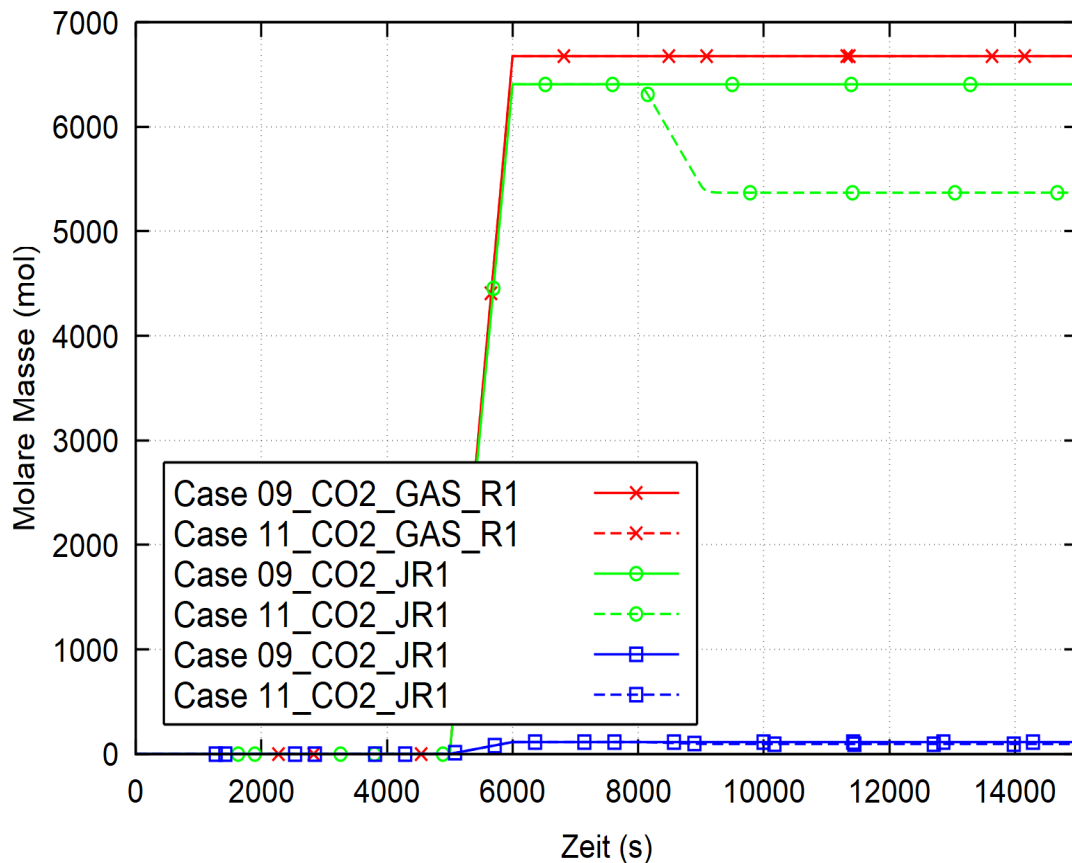


Abb. 3.5 Berechnete CO₂-Mengen

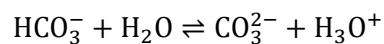
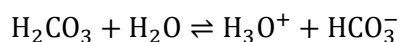
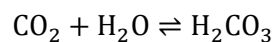
Direkt nach der Einspeisung von CO₂ ist der gasförmige Wert im AFP-Modul (grün in Abb. 3.5) kleiner als der im THY-Modul (rot), denn eine Rückwirkung der korrigierten Bilanz nach THY existiert nicht. Auch ist die Summe der gelösten CO₂-Menge und der in der Atmosphäre (grün + blau) kleiner als die in THY berechnete, weil die entstehenden Spezies HCO₃⁻ und CO₃²⁻ ebenfalls von der im AFP-Modul bilanzierten Gasphase abgezogen werden. Nach der Einspeisung von CsOH sinkt die atmosphärische CO₂-Menge weiter, da der höhere pH-Wert zu einer stärkeren Hydrolyse mit vermehrter Bildung von HCO₃⁻ und CO₃²⁻ führt. Für diese beiden Spezies ist keine Ausgabe vorgesehen. Die Differenz zeigt aber die berechnete Umsetzung von CO₂ im Wasser.

Für den weiter oben diskutierten Fall Nr. 15 ergibt sich eine komplette Umsetzung von CO_2 in die Wasserphase aufgrund der größeren Menge des basisch wirkenden CsOH . Deshalb ist hier der Fall Nr. 11 anstatt Nr. 15 gewählt worden, um die Korrektur der Massenbilanz zu verdeutlichen.

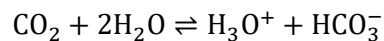
3.1.2.2 Bildung von Carbonaten

Im Folgenden wird der zweite Arbeitspunkt über die Ergänzung des pH-Wert-Modells erläutert. Dieses betrifft insbesondere das Verhalten von im Wasser gelöstem CO_2 .

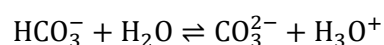
Das pH-Wert-Modell hat bisher nur die Lösung von CO_2 im Wasser aufgrund der Henry-Konstante berücksichtigt. Je nach pH-Wert bildet die Kohlensäure aber Carbonate in zwei verschiedenen Stufen, die bei höheren pH-Werten zu einer Bindung von CO_2 im Sumpf führen. In der Stand-alone-Version des pH-Wert-Modells von Framatome finden diese Reaktionen in der neuesten Version Berücksichtigung. Folgende Reaktionen werden dabei beschrieben:



Dabei bezeichnet H_2CO_3 die eigentliche Kohlensäure, die nur zu einem geringen Prozentsatz aus CO_2 mit Wasser gebildet wird. Die zweiprotonige Kohlensäure gibt ihre Protonen in folgenden Dissoziationsschritten unter Bildung des Hydrogencarbonats HCO_3^- und in einem zweiten Schritt unter der Bildung des Carbonat-Ions CO_3^{2-} ab. Da das gelöste CO_2 nur zu einem geringen Teil Kohlensäure bildet, werden die beiden ersten Reaktionsgleichungen zusammengefasst –



– mit einem pKs-Wert von 6,35 bei 25 °C und der zweiten Carbonisierungsstufe, die sich im Vergleich zu oben nicht ändert:



Dieser wird ein pKs-Wert von 10,33 bei 25 °C zugeschrieben. Dabei bezeichnet der pKs-Wert den negativen dekadischen Logarithmus der Säurekonstanten. Damit kennzeichnet ein kleiner pKs-Wert eine starke Säure.

Das Verhältnis des CO_2 zu den gebildeten Carbonaten ist dabei pH-Wert-abhängig wie in Abb. 3.6 in einem Hägg-Diagramm aufgetragen ist.

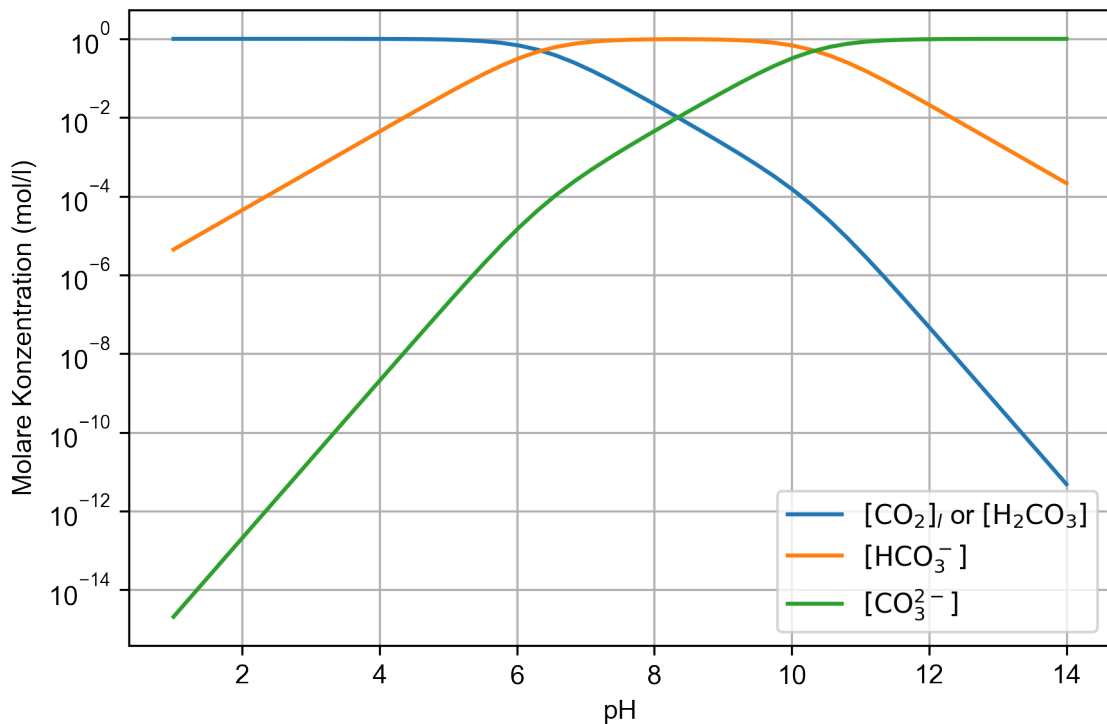


Abb. 3.6 Konzentrationen der Carbonate in Abhängigkeit des pH-Werts

Bis zu einem pH-Wert von 5 dominiert das gelöste CO_2 bzw. die Kohlensäure, im Bereich pH 6 bis 8 das Hydrogencarbonat und ab einem pH-Wert von 9 die zweite Carbonisierungsstufe mit dem Carbonat-Ion. Je höher der pH-Wert also ist, desto mehr CO_2 kann im Wasser gelöst werden. Diese Nachführung von CO_2 nach der Bildung von Carbonaten wird in der aktuellen Version berücksichtigt.

3.1.2.2.1 Ergebnisse

Wie in dem Hägg-Diagramm dargestellt ist, treten die größten Unterschiede in Rechenfällen mit den höchsten pH-Werten auf. In den bereitgestellten Testfällen ist das der Fall Nr. 15. Daher soll hier ein Vergleich mit der Version vor der Implementierung und der aktuellen Version dargestellt werden. Ein Vergleich der Ergebnisse für die CO_2 -Konzentrationen vor und nach Einbau der Änderungen ist in der folgenden Grafik

dargestellt. Die durchgezogene Linie ist jeweils das Ergebnis der alten Rechnung und die gestrichelte die geänderte Version.

Der Vergleich der originalen mit der neueren Version bezüglich des berechneten pH-Wertes ist in Abb. 3.7 dargestellt.

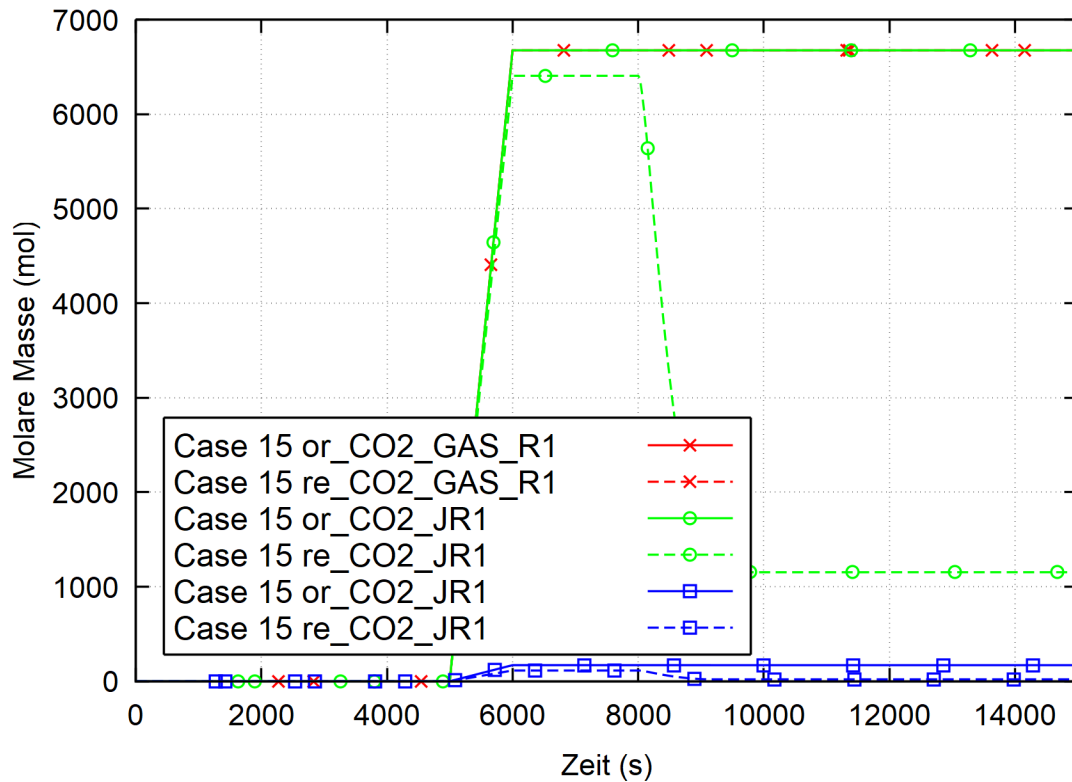


Abb. 3.7 Vergleich berechneten CO₂-Konzentrationen

Das THY-Ergebnis bleibt von den Änderungen unberührt, da aktuell noch keine Rückkopplung zwischen AFP und THY bei der Änderung der CO₂-Konzentration in der Atmosphäre besteht. Bereits nach dem Einspeisen des CO₂-Gases sind Unterschiede sichtbar, die auch auf die Korrektur der Massenbilanz zurückzuführen sind.

Aber nach der Einspeisung von CsOH ab dem Zeitpunkt 8.000 s steigt der pH-Wert weiter, wodurch eine verstärkte Bildung von Carbonaten erfolgt. In Abb. 3.8 wird gezeigt, dass der pH-Wert nach CsOH-Einspeisung bis auf einen Wert von etwa 8,8 ansteigt. In der Atmosphäre sinkt in der neueren Berechnung dadurch die enthaltene Menge CO₂ von 6 800 mol auf etwa 1 100 mol. Gleichzeitig fällt auch die im Sumpf enthaltene Menge auf einen Wert nahe Null ab, da sich die Carbonate im basischen Bereich bilden. Laut dem Hägg-Diagramm ist in diesem pH-Bereich nur noch etwa ein Promille als CO₂ bzw. Kohlensäure im Wasser gelöst.

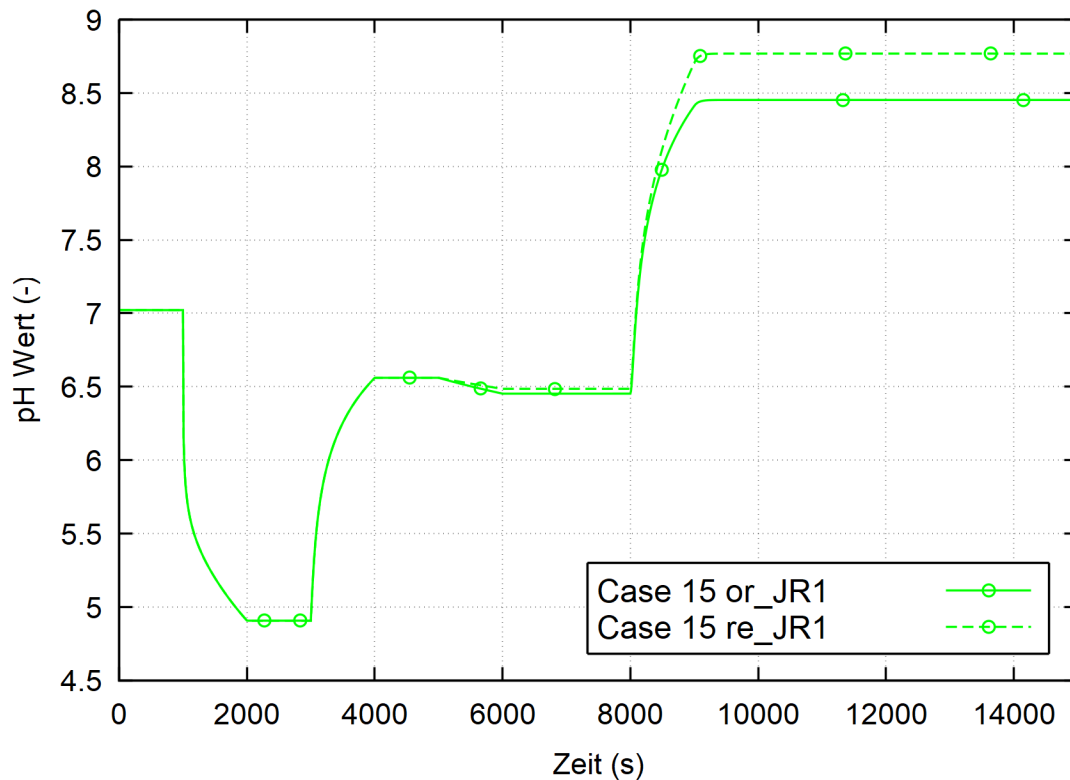


Abb. 3.8 Vergleich der pH-Werte

Die Carbonate haben einen höheren pKs-Wert und sind somit schwächere Säuren als die Kohlensäure. Daher bewirkt die Abnahme der Kohlensäure-Konzentration auch eine Zunahme des pH-Werts. Dieser ist in der aktuellen Version mit 8,8 um etwa 0,3 höher als in der Ausgangsversion.

3.1.2.3 Übertragung des Modells von AFP nach AFP2

Das pH-Wert-Modell ist aus AFP als Modul herausgetrennt worden, so dass es auch für AFP2 in derselben Version angesprochen werden kann. Allerdings ist die Ansteuerung aufgrund der geänderten Programmlogik unterschiedlich. Die pH-Wert-Berechnung erfolgt vor Berechnung des chemischen Zeitschritts innerhalb des größeren Aerosolzeitschritts. Eine Ausnahme ist die Berechnung der Salpetersäure, die genau wie in AFP als chemische Reaktion berechnet wird. Diese Reaktionen werden also innerhalb des chemischen Zeitschritts berechnet und die gebildeten Spezies außerhalb für die pH-Wert-Berechnung berücksichtigt.

3.1.2.3.1 Der Einfluss von Salpetersäure

Die Struktur der Bildung von Salpetersäure ist nach /WEB 14/ durch das Auftreten von Salpetersäure in der Gasphase ($d[\text{HNO}_3]_G$), der Wasserphase ($d[\text{HNO}_3]_S$) und auf Strukturen ($d[\text{HNO}_3]_{\text{dep}}$) gegeben. Diese Prozesse werden in /SPE 14/ ausführlich beschrieben. Die Ratengleichungen für die Bildung und den Transport zwischen diesen Spezies werden über folgende Reaktionsraten berechnet.

$$\frac{d[\text{HNO}_3]_G}{dt} = +k_{87} \cdot DR_G \cdot \frac{m_{N_2}}{V_G} \cdot \frac{\rho_{O_2}}{\rho_{ref}} - k_{89} \cdot A_{\text{sump}} \cdot \frac{[\text{HNO}_3]_G}{V_G} - k_{90} \cdot [\text{HNO}_3]_G \cdot \frac{S_G}{V_G} \quad (3.1)$$

$$\frac{d[\text{HNO}_3]_{\text{dep}}}{dt} = +k_{90} \cdot [\text{HNO}_3]_G - k_{91} \cdot [\text{HNO}_3]_{\text{dep}} \quad (3.2)$$

$$\frac{d[\text{HNO}_3]_S}{dt} = +k_{86} \cdot DR_S \cdot \rho_W + k_{91} \cdot [\text{HNO}_3]_{\text{dep}} \cdot \frac{S_G}{V_G} + k_{89} \cdot A_{\text{sump}} \cdot \frac{[\text{HNO}_3]_G}{V_G} \quad (3.3)$$

Die Gleichungen sollen hier nur in Grundzügen erklärt werden. Zum einen wird die direkte Bildung im Sumpf nach Beahm u. a. /BEA 92/ simuliert unter der Annahme einer Dosisleistung DR_S im Wasser mit der Reaktionskonstanten k_{86} . Die so erzeugte Salpetersäure ist direkt im Wasser vorhanden und wirkt auf den pH-Wert. Zum anderen wird die Bildung in der Atmosphäre wie im Rechenprogramm MELCOR unterstellt /GAU 00/ unter einer Dosisleistung in der Atmosphäre DR_G mit der Reaktionskonstanten k_{87} . Auf diesem Wege gelangt die Salpetersäure nicht direkt in den Sumpf, sondern wird über Abwaschvorgänge in die Sümpfe transportiert. In AFP erfolgt dieser Vorgang über die Prozesse der Ablagerung auf Strukturen und das Abwaschen von diesen in die Sümpfe aufgrund chemischer Reaktionen. Allerdings erlaubt das Chemiemodell in AFP2 derzeit keinen direkten Reaktionspfad zwischen der Wasserphase und der Gasphase. In AFP2 ist der Stoffübergang zwischen Gas- und Wasserphase als gesonderter Prozess außerhalb der chemischen Reaktionsgleichungen modelliert. Prinzipiell ließe sich dieses Verhalten darüber in AFP2 abbilden, wäre aber mit größeren Code-Ergänzungen verbunden. Daher ist zunächst untersucht worden, welchen Einfluss die Salpetersäure in Szenarien haben kann.

3.1.2.3.2 Vergleichbarkeit der Ergebnisse

So ist der Testfall Nr. 09 aus Abschnitt 3.1.2.1 ebenfalls mit AFP2 berechnet worden. Ein Vergleich der sich einstellenden Konzentrationen ist in Abb. 3.9 gegeben.

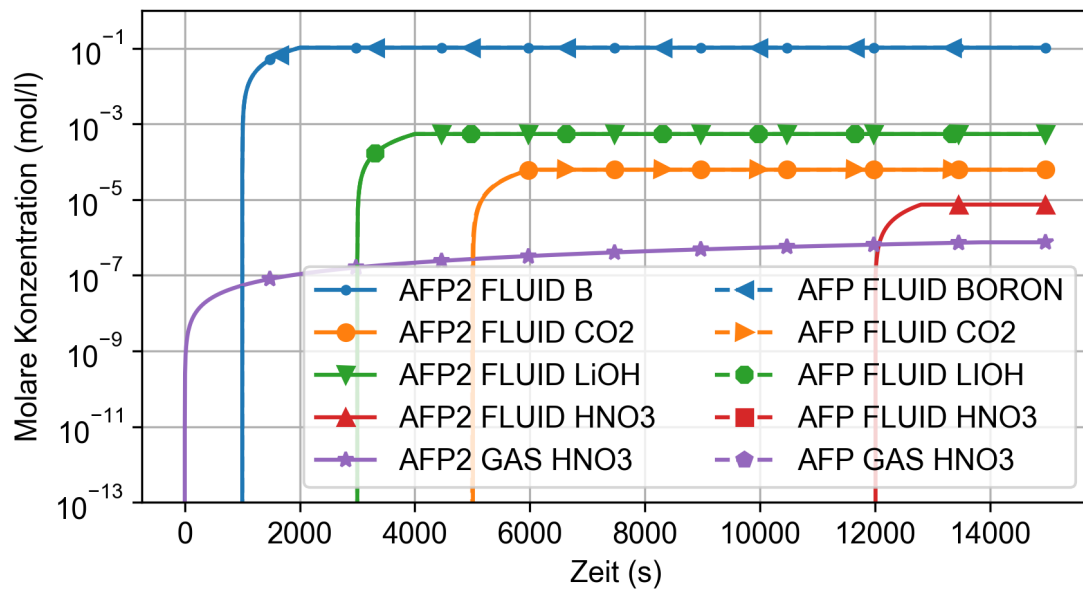


Abb. 3.9 Vergleich der Konzentrationen zwischen AFP und AFP2

Zusätzlich aufgeführt sind hier die Konzentrationen der Salpetersäure HNO_3 . Diese waren bisher nicht gezeigt, da sie für die pH-Wert-Berechnung keine relevante Rolle spielen, wie im Folgenden dargestellt wird. In der AFP2-Rechnung wird direkt von Beginn an eine HNO_3 -Einspeisung in die Gasphase simuliert und ab 12 000 s eine Einspeisung in die Wasserphase, die um mehr als eine Größenordnung stärker ist. Der Vergleich der berechneten pH-Werte zwischen AFP und AFP2 ist Abb. 3.10 aufgetragen.

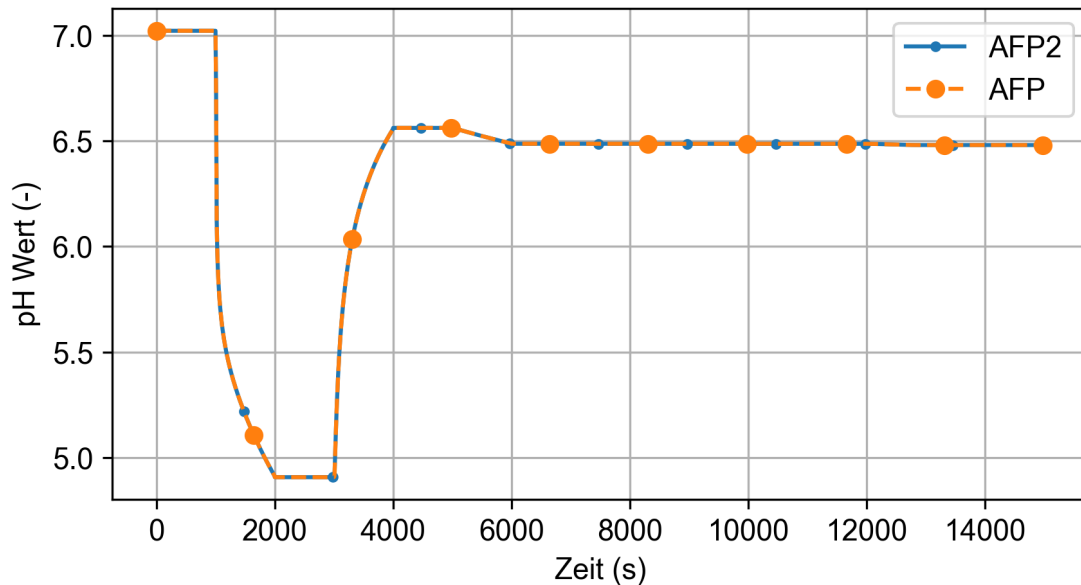


Abb. 3.10 Vergleich der pH-Werte zwischen AFP und AFP2

Zu Beginn startet die Rechnung mit einem neutralen pH-Wert von 7. Nach der Einspeisung von Bor sinkt er unter 5 und nach zusätzlicher Einspeisung von Lithium steigt er wieder auf über 6,5. Die angenommene Menge CO_2 senkt den Wert wieder leicht unterhalb von 6,5. In diesem Fall ist kein CsOH unterstellt worden und der pH-Wert bleibt bis zum Ende der Rechnung konstant. Insbesondere hat die durch die Strahlung erzeugte Menge Salpetersäure keinen sichtbaren Einfluss auf den pH-Wert. Die Werte sind numerisch nicht identisch, aber der Einfluss der Salpetersäure wird durch den der anderen Spezies weit überlagert. Die übrigen Basen und Säuren wirken als eine Pufferlösung für die Salpetersäure. Die Bildung durch die Strahlung direkt nach einem Störfall reicht nicht aus, um eine dominante Wirkung der Salpetersäure auf den pH-Wert zu erzielen.

Die unterstellten Bedingungen ergeben sich aus den Randbedingungen wie sie direkt nach einem Störfall anzunehmen sind. Insbesondere in der Langzeitphase über mehrere Monate oder Jahre werden aber die Ausgangsstoffe wie Bor oder Lithium aus dem Kühlwasser ausgewaschen, die Salpetersäure wird im Gegensatz dazu durch die vorhandene Strahlung in einem Störfallszenario kontinuierlich gebildet. Unter solchen Bedingungen kann die Salpetersäure dominierend für den pH-Wert werden. Derartige Bedingungen sollen in dem beantragten Projekt SOCRATES bei der Europäischen Kommission untersucht werden. Bei diesem eingereichten Projekt geht es um die langfristigen Eigenschaften wasserbedeckter Schmelze und das Auslaugen von Spaltprodukten aus dieser Schmelze (Leaching). Die pH-Wert-Bedingungen sind eine entscheidende Randbedingung in solchen chemischen Systemen. Eine Ausarbeitung zu

entsprechender pH-Wert-Entwicklung unter solchen Bedingungen wurde von Framatome in Zusammenarbeit mit der GRS bei der ERMSAR 2024 veröffentlicht /ANS 24/. Dieses enthält Ergebnisse mit dem aktuellen COCOSYS-Modell.

3.1.2.4 Zusammenfassung

Die CO₂-Massenbilanz im AFP-Modul von COCOSYS ist so korrigiert worden, dass sie jetzt ohne eine scheinbare Massenzunahme im Vergleich zum THY-Modul konsistente Ergebnisse liefert. Dabei wird die Umsetzung durch CO₂-Hydrolyse in HCO₃⁻ und CO₃²⁻ behandelt, allerdings gibt es keine Ausgabeinformationen für diese beiden Spezies. Eine Rückkopplung der in die Wasserphase aufgenommenen CO₂-Stoffmenge an das THY-Modul existiert ebenfalls nicht. Die Korrekturen an der CO₂-Bilanz sind in den COCOSYS-Entwicklungszweig eingeflossen und können in zukünftigen Programmversionen benutzt werden.

Weiter sind die letzten Änderungen an dem Stand-alone-pH-Wert-Modell von Framatome in COCOSYS übernommen worden. Dies betrifft die Behandlung von CO₂ und speziell die Bildung von Carbonaten, die eine verstärkte Bindung von CO₂ im Sumpf aufgrund der Henry-Konstanten bewirkt.

Die Modelle sind so weit möglich nach AFP2 übernommen worden. Speziell die Behandlung der Salpetersäure in AFP2 ist derzeit aber noch nicht identisch mit AFP. Allerdings ist aktuell noch fraglich, ob diese einen entscheidenden Einfluss haben kann und unter welchen Bedingungen dieser Einfluss auftreten kann. Erst ausgehend von diesen Resultaten kann entschieden werden, ob der Aufwand lohnt, die Modellierung auch in AFP2 zu implementieren. Alle anderen Spezies zeigen dasselbe Verhalten in AFP und AFP2.

Folgende Punkte sind bei den Arbeiten als mögliche weitere Entwicklungsziele identifiziert worden:

- Rückkopplung der gelösten CO₂-Menge an das THY-Modul
- Im Framatome-Modell werden zusätzlich die Spezies Natriumhydroxid (NaOH) und Natriumcarbonat (Na₂CO₃) berücksichtigt. Diese werden in COCOSYS zurzeit nicht betrachtet.

Die Rückkopplung von gelöstem CO₂ nach THY ist vornehmlich relevant bei hohen pH-Werten. Derzeit ist unklar, inwieweit das in Störfallszenarien auftritt. Der zweite Punkt

erscheint sinnvoll, da Zusätze verwendet werden, um Wasser zu konditionieren wie z. B. in nassen Filter-Strecken unter Einsatz von Venturi-Scrubbern oder anderen Abscheidetechniken, die auch gasförmige Iodspezies zurückhalten sollen.

3.1.3 Transport durch Rekombinatoren

Bei der Durchströmung von Rekombinatoren, z. B. Boxen des Framatome-Typs, werden mit dem Gasstrom auch Aerosole und gasförmige Spaltprodukte mit dem heißen Gas durch die Rekombinatorbox transportiert. Es gibt Hinweise, dass kleine Aerosolpartikel, die Iod enthalten, bei dem Durchgang durch das heiße Gas zerstört werden und dass so leichtflüchtige gasförmige Spezies wie I_2 gebildet werden können. In der Vergangenheit wurde dieser Effekt in THAI bereits für Csl-Aerosole untersucht. Im laufenden OECD-THEMIS-Vorhaben zeigte der realistische Rekombinatorversuch HR-59, dass eine relevante Menge des IO_x^- -Aerosols unter der Bildung von I_2 zersetzt worden ist. Das im Versuch verwendete Einkomponenten-Aerosol, das durch die Bildung aus der Reaktion von I_2 mit Ozon entstanden ist, weist aufgrund der Durchmesser im Submikronen-Bereich ideale Bedingungen für eine solche Zersetzung auf. Unklar bleibt insbesondere, ob eine IO_x^- -Komponente in einem realen Mehrkomponenten-Aerosol, das im Containment im Falle eines Störfalls immer vorliegt, ähnlich beim Durchtritt durch die heißen Zonen eines Rekombinators reagiert. Solch eine Aerosolzersetzungsreaktion wurde im AERIKA-Modell des Aerosol- und Spaltproduktmoduls AFP bisher nicht betrachtet, da die gemessene Umsetzung für Csl-Aerosole nur im Bereich der Nachweisgrenze der durchgeführten Versuche war. Neben einer möglichen Zersetzung wirken die Rekombinatoren aber auch als Verbindungen zwischen zwei Zonen in der Simulationsrechnung, falls der Rekombinatoreinlass und der Auslass in zwei verschiedenen Zonen definiert sind. Unter Verwendung von AFP in Verbindung mit dem detaillierten Modell ("CATALY_BOX", vgl. /ARN 23a/) kann dieser Massendurchgang simuliert werden, jedoch nicht bei der Verwendung der Korrelationen ("CATALY_SIM"), die nur einen Wasserstoffumsatz in der Einlasszone, aber keinen Transport durch den Rekombinator berechnen. Im neuen AFP2-Hauptmodul von COCOSYS ist der Transport im detaillierten Rekombinator-Modell ("CATALY_BOX"), in dem die Gasströmung durch das Metallgehäuse einer Rekombinator-Box detailliert simuliert wird, derzeit nicht möglich. In den vereinfachten Modellen ("CATALY_SIM"), in denen lediglich durch eine empirische Korrelation die Rekombination des Wasserstoffs berücksichtigt wird (Massenumsatzraten von H_2 und O_2 in Dampf sowie Wärmefreisetzung), wird im Modellansatz kein Massenstrom durch den Rekombinator berechnet.

Da bisher kein Modell für den Transport durch Rekombinatoren unter Nutzung von AFP2 implementiert ist, wurde bislang die COCOSYS-Simulation mit AFP2 generell künstlich gestoppt, sofern der Nutzer Rekombinatoren im Anlagenmodell vorgesehen hatte. Der Sourcecode von AFP2 wurde daher jetzt in Analogie zu AFP so abgeändert, dass Rechnungen mit "CATALY_SIM" möglich sind; ein Abbruch erfolgt nur bei Verwendung von "CATALY_BOX". Diese Änderung steht ab der Version AC²-2023.3 zur Verfügung. Mit der Änderung wird dem Nutzer auch signalisiert, dass in der weiteren Entwicklung von AFP2 ein entsprechendes Modell implementiert werden soll.

3.1.4 Pool-Scrubbing

Das Thema Pool-Scrubbing ist vor allem in der Diskussion mit den internationalen Partnern in den Projekten OECD-THEMIS, OECD-BCAPFIS und IPRESKA behandelt worden, wie in Abschnitt 6.1.1 erläutert wird. Bereits im Vorgängerprojekt sind Benchmark-Aktivitäten im Rahmen von IPRESKA durchgeführt worden /SPE 21/. Die Ergebnisse des Aerosolbenchmarks sind im Nachgang von IRSN auf der NURETH-19 vorgestellt worden /MAR 22/. Die Schlussfolgerungen daraus sind bereits in dem Bericht zum Vorgängerprojekt /SPE 21/ erläutert worden. Sowohl für die Aerosolabscheidung als auch die von gasförmigen Stoffen bleiben die Aussagen gültig, dass derzeit keine vollumfänglichen Korrelationen vorliegen, die in Systemcodes wie COCOSYS verwendet werden können. Das SPARC-B/98-Modell bleibt damit das Modell für die Beschreibung in COCOSYS. Dennoch ist festzustellen, dass das internationale Interesse am Pool-Scrubbing nach wie vor hoch ist, vor allem in der Modellierung von Einzelphänomenen mit CFD-Tools. Daher sollte die GRS den Fortschritt in diesem Bereich auch in den nächsten Jahren weiterverfolgen.

In BCAPFIS geht es um die Beschreibung des internationalen Standes der Forschung zum Thema Pool-Scrubbing. Somit sind dort zwar keine direkten Ergebnisse zu erwarten, die in COCOSYS einfließen können. Allerdings erlaubt die Teilnahme, mögliche Entwicklungen in der Beschreibung der Pool-Scrubbing-Phänomene zukünftig international zu verfolgen.

Anders sieht es für die Teilnahme an dem THEMIS-Benchmark /FRE 24/ zum Versuch WH-33 aus, der direkt einen Entwicklungsbedarf ableiten lässt. Die Simulation dieses Versuchs mit COCOSYS hat dieselben konservativen Ergebnisse für die Rückhaltung der Aerosole ergeben, wie sie mit der in COCOSYS vorhandenen Modellversion SPARC-B/98 bereits zuvor bekannt war, welche sich in einer deutlichen Unterschätzung

der Dekontamination äußert. Jedoch ist in dem Benchmark eine Abweichung in den thermodynamischen Größen beobachtet worden, die Rückschlüsse über mögliche erforderliche Modellerweiterungen geben. In Abb. 3.11 ist ein Vergleich der benutzten Codes mit dem Experiment für die Temperatur in der Gasphase oberhalb der Wasservorlage gezeigt, der aus dem Benchmark-Vergleichsbericht entnommen ist. Die blaue COCOSYS-Linie überschätzt die Temperatur des Experiments um etwa 10 °C.

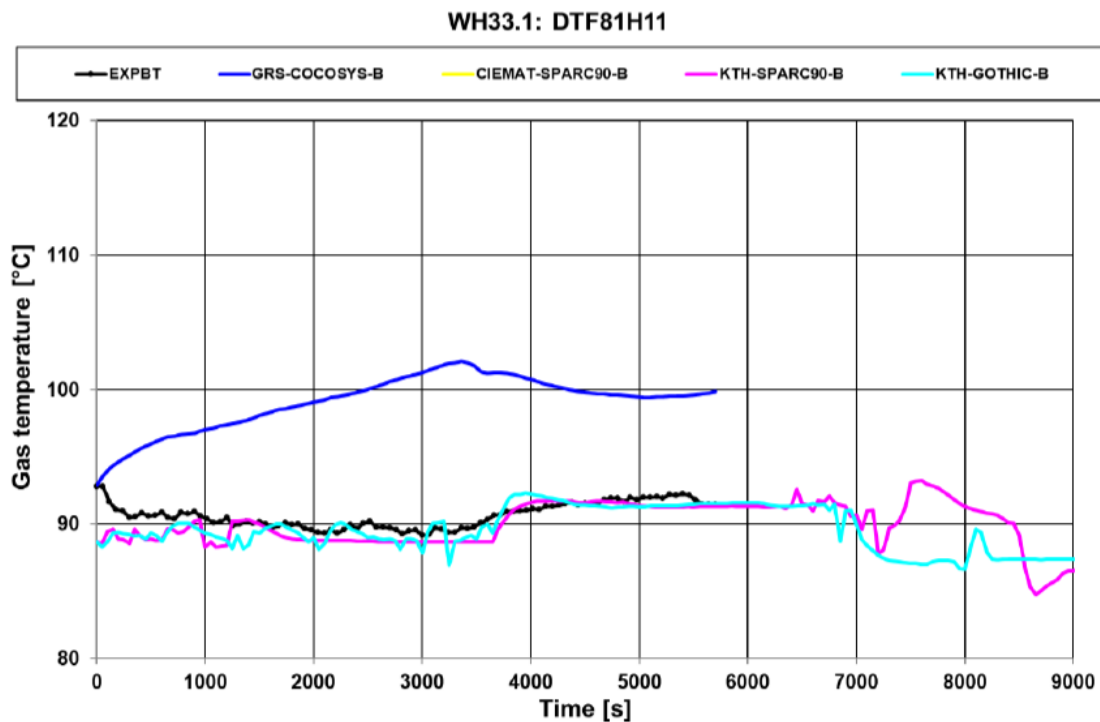


Abb. 3.11 Vergleich der Temperaturen oberhalb des Pools in WH-33.1 nach /FRE 24/

Gleichzeitig wird der Dampfpartialdruck um etwa 0,2 bar unterschätzt und beträgt nur etwa ein Zehntel des experimentellen Wertes, wie in Abb. 3.12 gezeigt wird. In dem dort dargestellten Graphen startet das COCOSYS-Ergebnis bereits bei diesem tiefen Wert, weil die Präparierungsphase mit Aktivierung der Heizmäntel über 100 min und Einspeisung von Gasen über 10 min auch in der Simulation berücksichtigt worden ist. Die beiden anderen Codes starten hingegen mit dem experimentell bestimmten Wert. Es ist bemerkenswert, dass der Dampfpartialdruck in diesen beiden Rechnungen ebenfalls auf einen ähnlichen Wert über die Simulationszeit von 9 000 s herabfällt.

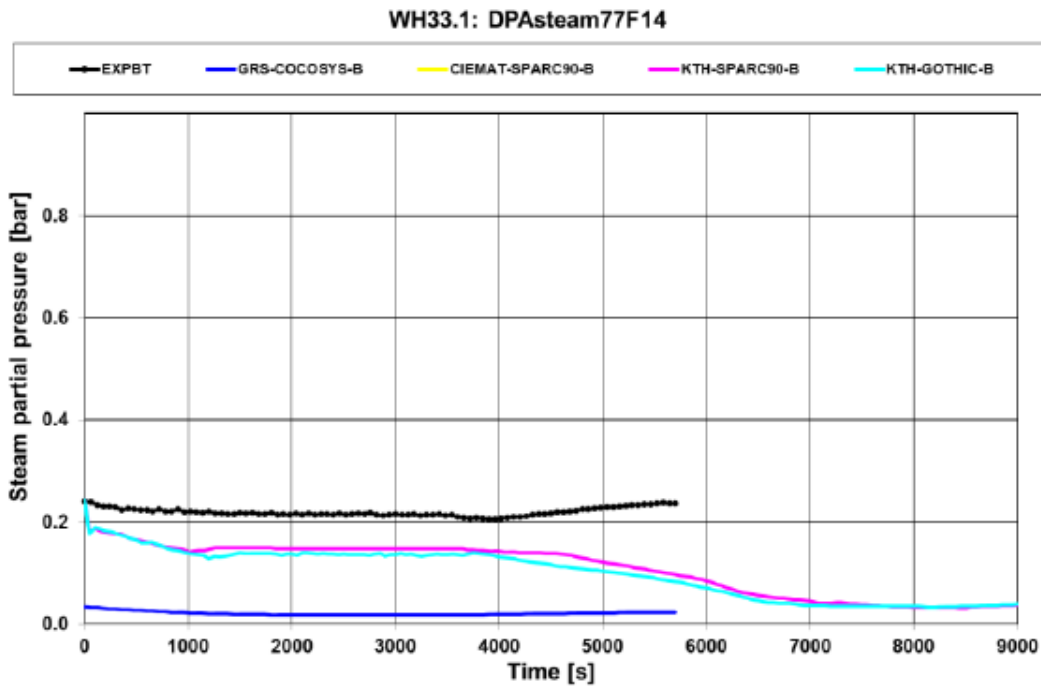


Abb. 3.12 Vergleich des Dampfpartialdrucks oberhalb des Pools in WH-33.1 nach /FRE 24/

Eine Analyse legt nahe, dass die Abweichungen daraus resultieren, dass in COCOSYS eine komplette Kondensation des einströmenden Wasserdampfes gerechnet wird, also keine unvollständige Kondensation berücksichtigt wird. Ein solches Modell gibt es bisher nur bei der Anwendung mit DRASYS und in der Kopplung mit ATHLET bei Quellen in den Sumpfteil von COCOSYS-Zonen. Daher wird der mögliche Entwicklungsbedarf abgeleitet, den Vorgang von unvollständiger Kondensation bei Dampfeinspeisung in eine Wasservorlage auch in normalen COCOSYS-Verbindungen in den Sumpfteil zu ermöglichen. In diesem Falle ist die INSERTION-Option für das Verhalten eines Druckabbausystems benutzt worden. Eine bessere Beschreibung dieser Vorgänge in Pool-Scrubbing-Experimenten sollte damit möglich werden.

3.1.5 Resuspension

3.1.5.1 Nasse Resuspension

Das Phänomen der nassen Resuspension lässt sich in AFP über die Vorgabe von Tabellenwerten als auch mit einer Korrelation simulieren, die an der Ruhr-Universität Bochum (RUB) entwickelt wurde. In AFP werden die Daten auf Elementbasis im FIPHOST-Modell für die Beschreibung von Spaltprodukten ausgewertet, da AFP keine Aerosolpartikel im Wasser behandelt. In AFP ist deshalb die Verwendung von FIPHOST zwingend

notwendig und die Übertragung der freigesetzten Elemente auf Aerosole erfolgt über die Zuordnung unter der Eingabetabelle FP_ELEMENT, die die in FIPHOST bilanzierten Elemente den Aerosolenkomponenten im Aerosolmodell zuweist. In AFP2 hingegen werden alle Spezies in einem Speziesbaum bilanziert und der Bezug zwischen Aerosol- bzw. Chemie- und Elementebene ist immer gegeben. Daher lässt sich das Modell nicht identisch umsetzen. Die implementierten Berechnungsmethoden für die Nasse Resuspension beruhen aber auf demselben Code und liefern somit gleiche Ergebnisse. Nur die Behandlung der Speziesklassen weicht in beiden Modulen voneinander ab.

3.1.5.1.1 Testrechnung TH-14

Die Portierung des Modells zur nassen Resuspension von AFP nach AFP2 ist anhand des THAI-Versuchs TH-14 /KLE 10/ durchgeführt und getestet worden. Dazu ist der aus der Validierung vorhandene Datensatz auf die Eingabe von AFP2 umgestellt worden. Nachfolgend sind Vergleichsrechnungen zwischen AFP und AFP2 unter Verwendung der RUB-Korrelation dargestellt. Die Tabellenoptionen sind ebenfalls übernommen worden und liefern in beiden Modulen gleiche Ergebnisse. Als erstes wird in Abb. 3.13 der Entrainment-Faktor dargestellt, der sich aus der Gasfreisetzung an der Wasseroberfläche berechnet, die sich wiederum aus dem Gasdurchtritt durch die Wasservorlage und der Verdampfungsrate an der Wasseroberfläche zusammensetzt. Damit hängt dieser nur von thermodynamischen Randbedingungen ab. Da die Modellberechnung in beiden Modulen dieselbe ist, ist auch der berechnete Wert gleich.

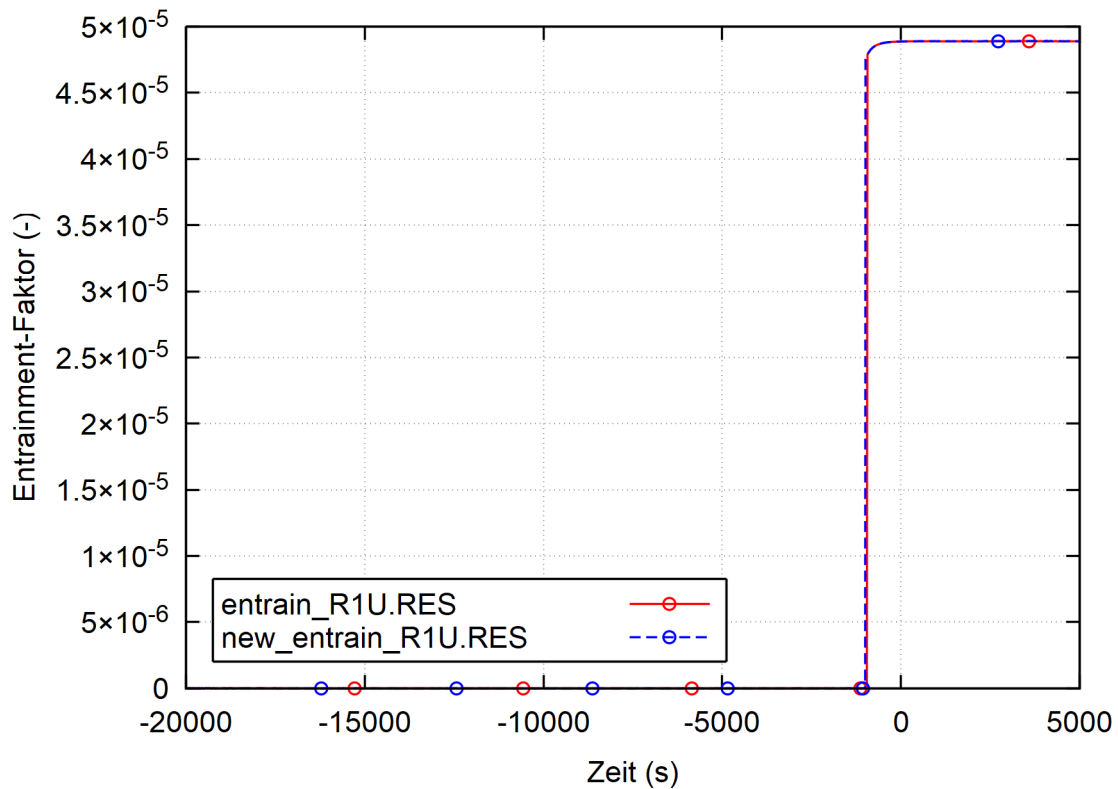


Abb. 3.13 Vergleich des Entrainment-Faktors in TH-14 zwischen AFP und AFP2

Anders ist das aber für die Aerosolgrößen in der Atmosphäre, da diese von der Beschreibung des freigesetzten Aerosols und der Kondensation von Wasser an den Partikeln abhängen. Damit sind diese Größe auch von der Numerik des AFP/AFP2-Moduls und von den sich einstellenden Zeitschritten abhängig. Aber auch für die Aerosolkonzentration in Abb. 3.14 und den sich einstellenden Massenmedian in Abb. 3.15 zeigen sich sehr gute Übereinstimmungen zwischen beiden Modulen mit nicht-signifikanten Abweichungen. Für den Massenmedian in AFP2 ist dabei anders als in AFP auch ein Wert im Sumpf eingezeichnet. Das liegt daran, dass AFP2 auch Aerosolpartikel mit einer Größenverteilung im Sumpf berechnet, wobei Sedimentationsprozesse behandelt werden.

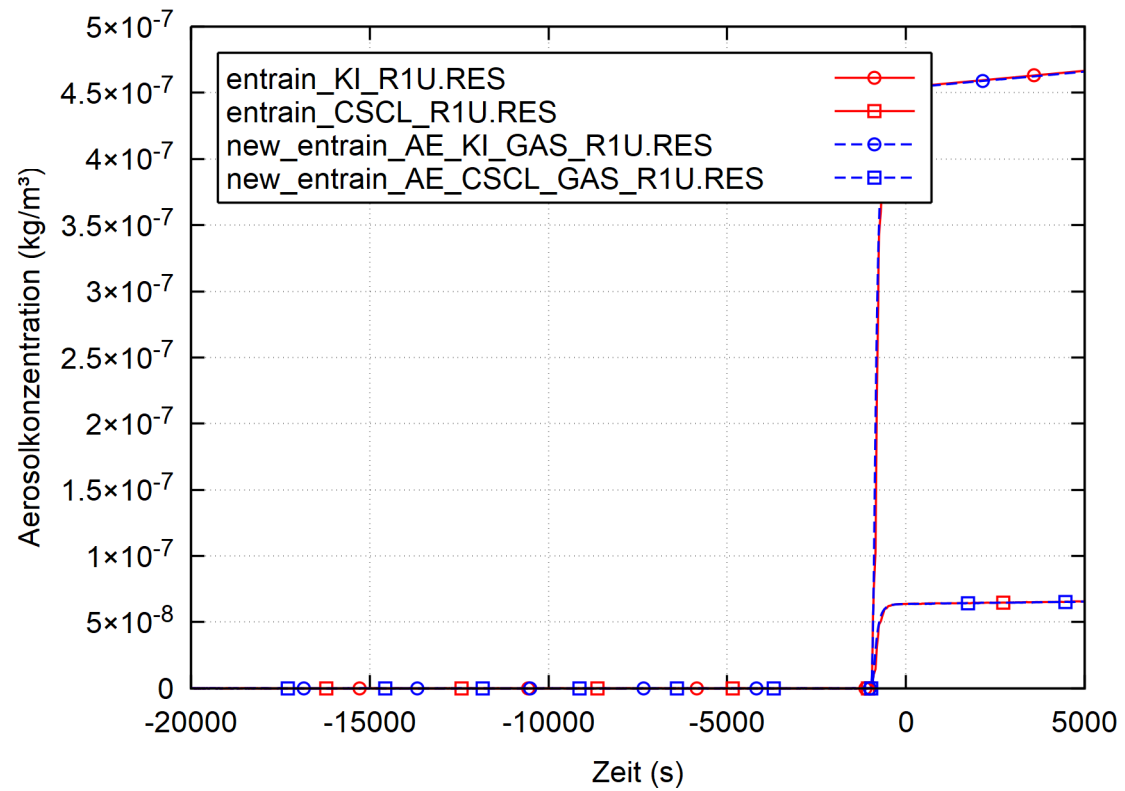


Abb. 3.14 Vergleich der Aerosolkonzentration in TH-14 zwischen AFP und AFP2

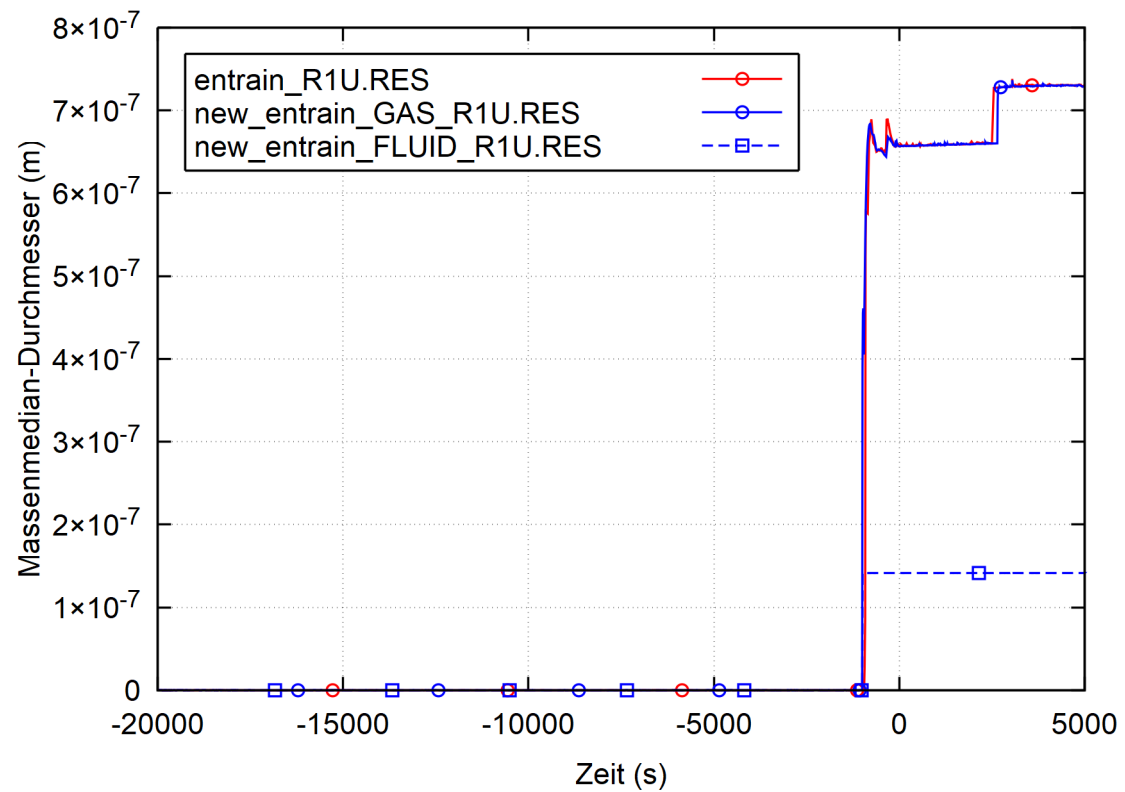


Abb. 3.15 Vergleich des Massenmedians in TH-14 zwischen AFP und AFP2

3.1.5.1.2 Limitierung des Modells

Das Modell AFP2 transportiert Aerosole und gelöste Stoffe aus der Wasservorlage in die Atmosphäre, wobei diese in derselben Zusammensetzung (AFP2-Terminus: COMPOSITION) bleiben. Für Aerosole bedeutet das, dass sie einfach als dieselben Aerosole in die Atmosphäre eingetragen werden, in der sie auch im Sumpf vorliegen, was kein Problem darstellt. Gelöste Stoffe allerdings liegen in der COMPOSITION DISSOLVED vor, die in der Gasphase für gasförmige Stoffe vorgesehen ist. Allerdings gibt es im Wasser gelöste Spezies, die in der Atmosphäre eigentlich einem Aerosol zugeordnet werden müssten. So dissoziiert z. B. das Csl-Aerosol (Csl%CsI), wenn es aus der Atmosphäre in ein Wasservolumen sedimentiert, und wird im Sumpf aufgeteilt in die Spezies DISSOLVED%I-%I und DISSOLVED%GENLIQ%Cs. Beim erneuten Freisetzen dieser Spezies in die Atmosphäre durch den Vorgang der nassen Resuspension verbleiben diese aber algorithmisch in den Positionen unter DISSOLVED im Speziesbaum. Das heißt, die freigesetzten Stoffe werden in COCOSYS in der Atmosphäre wie gasförmige Stoffe weitertransportiert und stehen auch nicht für eventuelle Reaktionen zur Verfügung, obwohl diese realistischere Weise mit den Oberflächen von Aerosolpartikeln reagieren könnten. Dafür existiert aber bislang kein allgemein für alle Stoffe geltendes Modell.

3.1.5.2 Trockene Resuspension

Als Trockene Resuspension werden Vorgänge bezeichnet, bei denen auf trockenen Oberflächen abgelagerte Aerosole durch Luftströmungen wieder in die Atmosphäre eingetragen werden. Dieser Effekt ist somit vergleichbar mit dem Aufwirbeln von Staub, wenn ein Luftstoß im Raum auftritt. Im Containment während eines schweren Störfalls könnte sich diese Situation insbesondere bei möglichen Wasserstoffverbrennungen einstellen. Unter diesen Umständen könnte ein kurzzeitig nur wenige Sekunden dauerndes Ereignis zu einer massiven Wiederfreisetzung von bereits abgelagerten Aerosolen in die Atmosphäre führen. Dieser Vorgang ist damit grundsätzlich anders als die Resuspension im Reaktorkühlkreislauf, wo Bedingungen mit einer zwar sich ändernden, aber kontinuierlichen Strömung vorherrschen. Das in AFP enthaltene Modell ist im Rahmen einer Doktorarbeit /NOW 08/ zu den THAI-Versuchen Aer-1, Aer-3 und Aer-4 speziell für schnelle Ereignisse wie Wasserstoffverbrennungen entwickelt worden. In diesen Versuchen ist ein vertikales Rohr in den THAI-Behälter installiert worden, an dessen unterem Ende sich eine horizontale Düse anschließt, die sich über einer horizontalen Ablagefläche für Aerosole befindet, wie in Abb. 3.16 schematisch dargestellt wird.

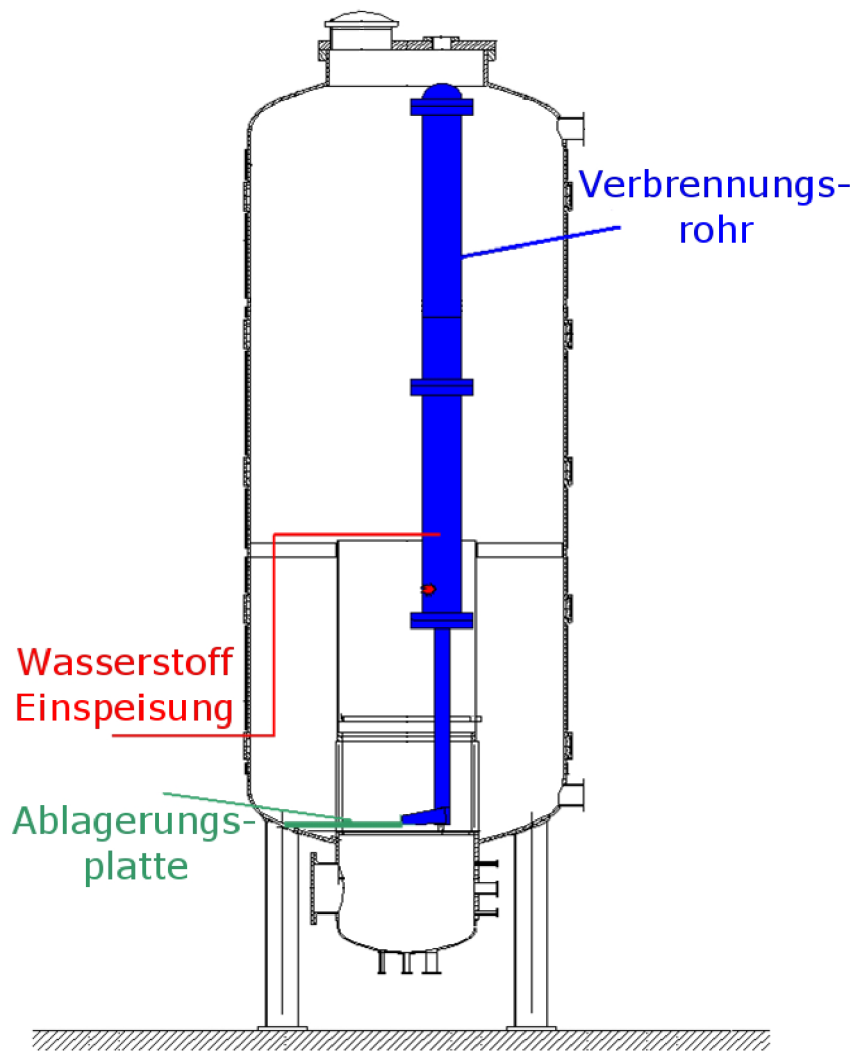


Abb. 3.16 Schemazeichnung der THAI Aer-Versuche

Zu Beginn der Experimente ist dieses Rohr mit Wasserstoff befüllt worden. In der ersten Experimentphase ist dann Csl-Aerosol in den THAI-Behälter eingespeist worden, das sich über eine etwa einen Tag lange Sedimentationsphase auf den Strukturen des THAI-Behälters abgelagert hat. Während dieser Zeit sind die luftgetragenen Aerosolkonzentrationen mit Impaktoren gemessen worden und die integral abgelagerten Mengen sind mit Coupons gewogen worden. Im zweiten Teil des Experiments ist der Wasserstoff am unteren Ende des Rohrs gezündet worden. Das expandierende Gas ist dann durch die Düse über die Aerosolablagerungsfläche entwichen und hat das dort abgelagerte Aerosol aufgewirbelt. Die neu eingetragene Aerosolmasse ist im Verlauf einer zweiten Ablagerungsphase erneut mit Impaktoren gemessen worden. Die drei Versuche sind mit jeweils unterschiedlichen Wasserstoffbeladungen durchgeführt worden, um unterschiedlich starke Strömungen über der Ablagerungsplatte einzustellen. Im Unterschied zu realen Verhältnissen einer Wasserstoffverbrennung im freien Raum eines

Containments sind so die Strömungswege experimentell vorgegeben worden. Damit spiegelt dieser Versuchsaufbau keine realistischen Bedingungen wider, aber er bietet die Möglichkeit einer einfacheren Interpretation für die Modellbildung.

Die Modellübertragung von AFP nach AFP2 benötigte einige Modifikationen bezüglich der geänderten Geometriedaten. Zunächst benutzt das Resuspensionsmodell die von THY eigentlich für den konvektiven Wärmeübergang an Strukturen berechnete Zonengeschwindigkeit ZVELO, die eine einfache Näherung für die Strömungsverhältnisse in den COCOSYS-Zonen darstellt. Detailliertere Aussagen über Strömungsbedingungen sind aber im Lumped-Parameter-Konzept von COCOSYS nicht möglich. Diese Größe musste bei der Modellübertragung zunächst von THY an AFP2 gesendet werden. Des Weiteren benutzt AFP für die Aerosolablagerung das Verhältnis von Oberflächen zu Zonenvolumen ($1/m$), wie es in den Zonendaten für Decken-, Boden- und Wandflächen angegeben wird. In AFP2 wird diese Größe jedoch für alle thermodynamischen Oberflächen separat berechnet. Somit erfolgt auch die Berechnung der Aerosolablagerung nicht auf Basis von Zonen, sondern auf Basis der einzelnen definierten Strukturen. Daher muss auch das Resuspensionsmodell für jede Struktur einzeln ausgewertet werden, wobei für alle Strukturen in derselben Zone dieselbe Geschwindigkeit ZVELO unterstellt wird.

Um das Modell in AFP2 zu überprüfen, ist der Versuch Aer-4 mit der geringsten Austrittsgeschwindigkeit mit AFP2 neu gerechnet worden. In Abb. 3.17 ist der Vergleich der Aerosolkonzentrationen für den Versuch THAI Aer-4 zwischen der originalen Rechnung mit AFP (schwarz) und der neuen mit AFP2 (rot) gezeigt. Die AFP-Kurve zeigt die Einspeisung und Ablagerung des Aerosols über einen Zeitraum bis 93.600 s. Danach erfolgt die Deflagration und die Kurve zeigt eine schnelle Zunahme der Aerosolkonzentration durch die Resuspension. In der Folge lagert sich das neu aufgewirbelte Aerosol wieder ab, wobei die Abnahme schneller ist als bei der ursprünglichen Aerosoleinspeisung, was darauf hindeutet, dass das resuspendierte Aerosol größere Partikel aufweist als das zunächst eingespeiste. Die rote AFP2-Kurve zeigt ein ähnliches Verhalten in der ersten Ablagerungsphase. Eine identische Berechnung ist dabei nicht zu erwarten, da die Ablagerungskoeffizienten auf Basis der Strukturen und nicht auf Basis der Zonendaten wie in AFP berechnet werden. Auch die integral freigesetzte Masse nach der Deflagration stimmt gut überein zwischen AFP und AFP2. Allerdings ist die Ablagerung des freigesetzten Aerosols danach in AFP2 deutlich schneller. In beiden Fällen sinkt die Konzentration in etwa auf das Level vor der Deflagration, das in AFP in dieser Zone auch vor der Resuspension im Vergleich zu AFP2 höher war.

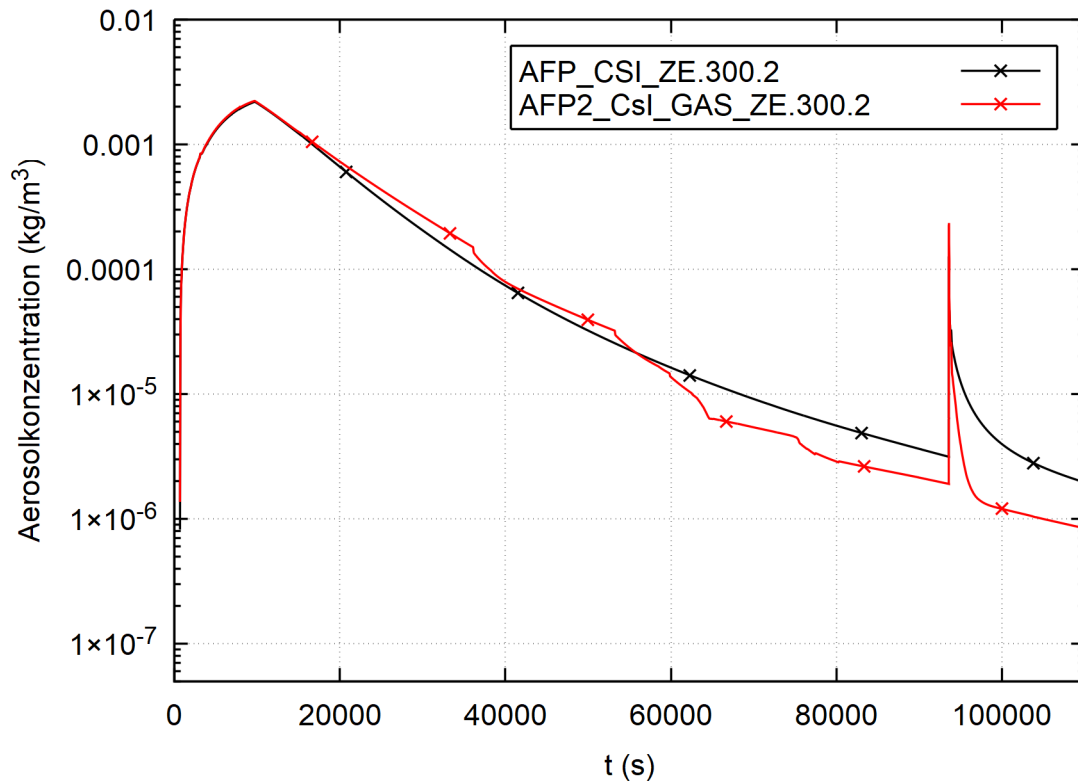


Abb. 3.17 Vergleich der Aerosolkonzentrationen in THAI Aer-4

Die Modellierung dieses Experiments erfolgt mit drei Resuspensionszonen im Bereich der Einspeisung über die Düse. Zwischen diesen Zonen wird die Zonengeschwindigkeit über ein Gebläsesystem (FAN) so eingestellt, dass die Strömungsgeschwindigkeiten des Experiments möglichst genau getroffen werden. In Abb. 3.18 wird der Vergleich der Konzentrationen in der ersten dieser Resuspensionszonen dargestellt. Zu erkennen ist, dass die in AFP2 berechnete Konzentration an dieser Stelle wesentlich größer ist als in der AFP-Rechnung. Die Konzentrationen zwischen AFP und AFP2 nähern sich erst über einen Zeitraum bis 96 000 s an. Das zeigt, dass der eigentliche Mechanismus der Aerosolfreisetzung funktioniert und die Unterschiede im Transport zwischen den beteiligten Behältervolumen mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten in AFP und AFP2 zu abweichenden Verteilungen der Aerosolkonzentration im Behälter führen.

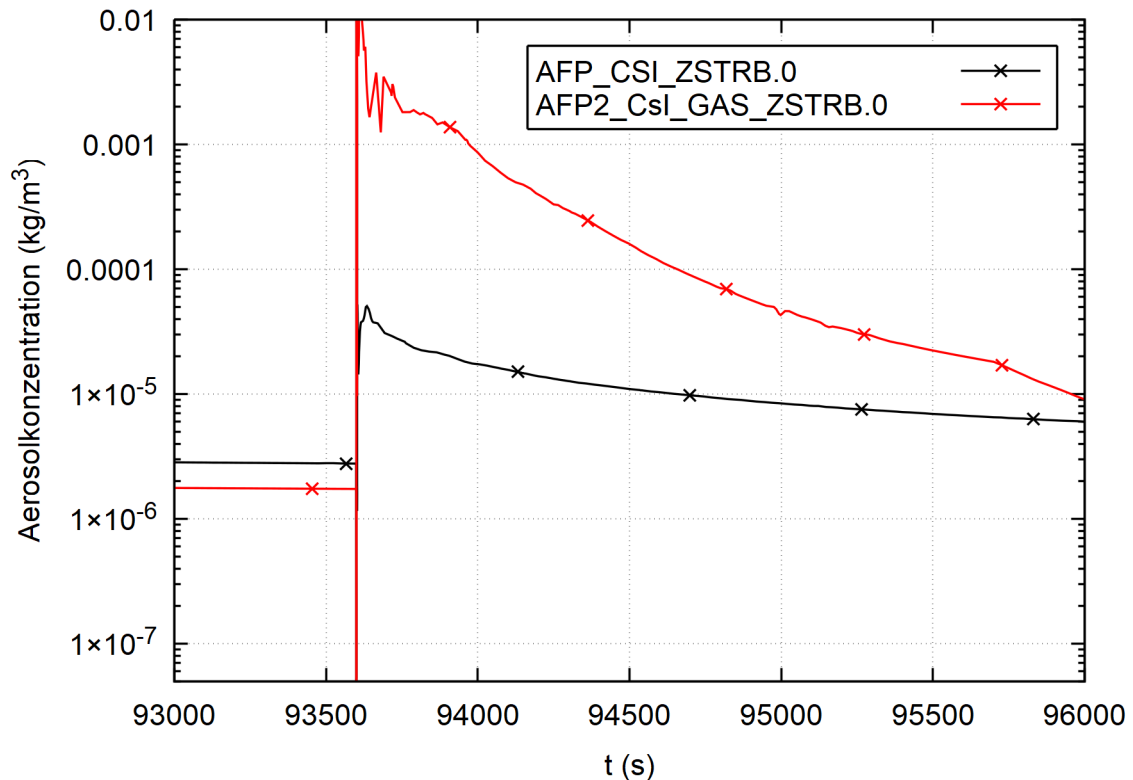


Abb. 3.18 Vergleich der Aerosolkonzentrationen in der Resuspensionszone

Der Vergleich zwischen AFP und AFP2 zeigt, dass die genaue Verteilung der Aerosole über verschiedene Zonen des Behälters stark von der genauen Berechnung des Aerosoltransports abhängt. So ist der Transport von Aerosol in weiter oben gelegenen Zonen in der AFP-Rechnung höher als in der AFP2-Rechnung, was zu einer höheren AFP2-Konzentration in der Ablagerungszone, aber zu einer niedrigeren in dem Behälter führt. Dieser Transport wird auch stark von den numerischen Kriterien bestimmt, die z. B. zu unterschiedlichen Aerosolzeitschrittweiten führen, die besonders in der transienten Resuspensionsphase von Bedeutung sind. Außerdem sind die Ablagerungsmechanismen andere, da in AFP2 die Ablagerungskoeffizienten auf Basis der tatsächlichen Geometrie auf den einzelnen Oberflächen berechnet werden, während in AFP allgemeine Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnisse angegeben werden.

3.2 Berechnung des Isotopenverhaltens mittels VENTINA

Die Berechnung des radioaktiven Zerfalls und der so freigesetzten Nachzerfallsleistung soll in AFP2 mit einem separat von AC² entwickelten Programmpaket erfolgen. Aktuell ist hierfür der Reencode VENTINA vorgesehen. VENTINA wird von der GRS zusammen mit dem Paul Scherr Institut (PSI) für die Berechnung des Abbrandverhaltens und

des radioaktiven Zerfalls entwickelt. In AFP2 spielt jedoch nur die Zerfallsberechnung eine Rolle. Die grundlegende Idee für die Nutzung eines separaten Codes wie VENTINA in AC² ist, dass sowohl ATHLET/CD als auch AFP2 dasselbe Modell zur Berechnung des Isotopenverhaltens aufrufen. Dazu ist in einem ersten Schritt eine Software-Bibliothek LIB_BND (Library for Burnup and Decay) erstellt worden, die im Rahmen von AC² auf gleiche Weise in AFP2 als auch in ATHLET-CD eingebunden wird. LIB_BND kapselt VENTINA und stellt Methoden-Schnittstellen bereit, die in AFP2 und ATHLET-CD gleichermaßen angesprochen werden. Dieses Vorgehen ermöglicht die gleichförmige und somit konsistente Modellierung des Isotopenverhaltens auf demselben zu betrachtenden Isotopenvektor. Während AFP2 nur die Nachzerfallsroutinen benutzt, wird in ATHLET-CD auch das Abbrandverhalten über LIB_BND berechnet.

3.2.1 Erstellung der Bibliothek LIB_BND

VENTINA ist ein Software-Programm, das separat von AC² besteht und entwickelt bzw. auch benutzt wird. Dabei ist es sowohl als Stand-alone-Anwendung als auch als Bibliothek (Library) zur Einbindung in andere Programme nutzbar. Um die Entwicklung von VENTINA separat von AC² zu halten und gleichzeitig die Nutzung als Library in AC² zu ermöglichen, ist die LIB_BND erstellt worden, die in AFP2 und ATHLET-CD auf die gleiche Weise statisch gelinkt eingebunden wird.

Die VENTINA-Entwickler haben eine Testroutine für die Einbindung von VENTINA in ein ausführbares Programm zur Verfügung gestellt. Aufbauend auf dieser Testrechnung ist die LIB_BND aufgesetzt worden. Der so erstellte Rechenfall dient jetzt noch als Testbeispiel in dem GitLab-Repository für LIB_BND. Das Build-Management erfolgt wie in den anderen AC²-Programmen auch über das Werkzeug CMake.

VENTINA benötigt Eingabedaten, um die Isotope zu definieren, die berechnet werden sollen. Diese werden über ASCII-Textdateien übergeben. Dafür stehen im Paket LIB_BND die Dateien *decay_chains.kbf* und *NuclideData.txt* zur Verfügung. In der ersten Datei werden die Zerfallsketten aufgrund des radioaktiven Zerfalls als auch die Zerfallsketten aufgrund der Neutronenkinetik für die Abbrandrechnung gegeben. Die Datei über die Nukliddaten liefert weitere charakteristische Werte der einzelnen Isotope wie spezifische Aktivität oder spezifische Leistung nach den unterschiedlichen Strahlungsarten (α -, β - und γ -Strahlung). Der derzeit verwendete Isotopenvektor umfasst insgesamt 1 345 Nuklide. Darüber hinaus gibt es drei zusätzliche Nuklide für Zerfallsprodukte, die

nicht von den definierten Nukliden abgedeckt werden und somit als Senke in den Berechnungen des Nachzerfalls bzw. Abbrands wirken:

dec_sink

Decay sink. Beinhaltet alles, was in nicht berücksichtigte Isotope radioaktiv zerfällt.

cat_sink

Capture and transfer reaction sink. Beinhaltet alles, was durch Neutroneneinfang und Transferreaktionen in nicht berücksichtigte Isotope zerfällt.

sf_sink

Spontaneous fission sink. Beinhaltet alles, was durch spontane Spaltung in nicht berücksichtigte Isotope zerfällt.

Die in diesen Dateien vorhandenen Daten lassen sich als Nuklidkarte darstellen.

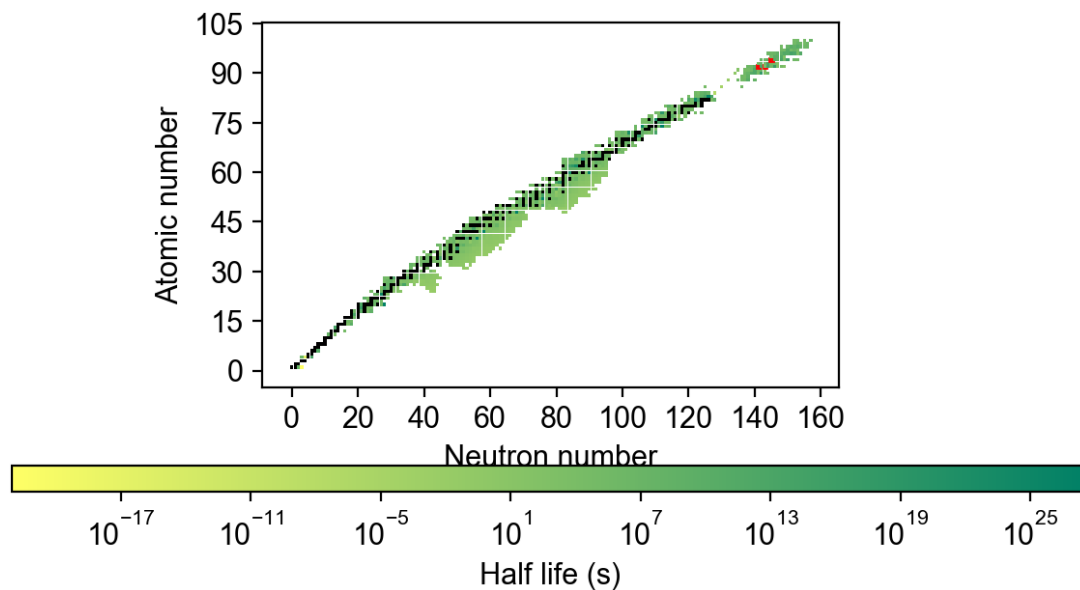


Abb. 3.19 Nuklidkarte mit den von VENTINA benutzten Nukliden

Die Grafik stellt die verwendeten Nuklide dar, wobei die Farbskala die Halbwertszeit der Isotope wiedergibt.

3.2.2 Kopplung der Daten mit dem Speziesbaum

In AFP2 werden die verschiedenen berücksichtigten Spezies in einem Speziesbaum gespeichert, um eine konsistente Beschreibung von Aerosolen, chemischen Verbindungen

und der Elemente sowie der Isotopen zu realisieren. Dieses Konzept unterteilt die Stoffe in verschiedenen Ebenen. Das Konzept ist in folgender Grafik dargestellt.

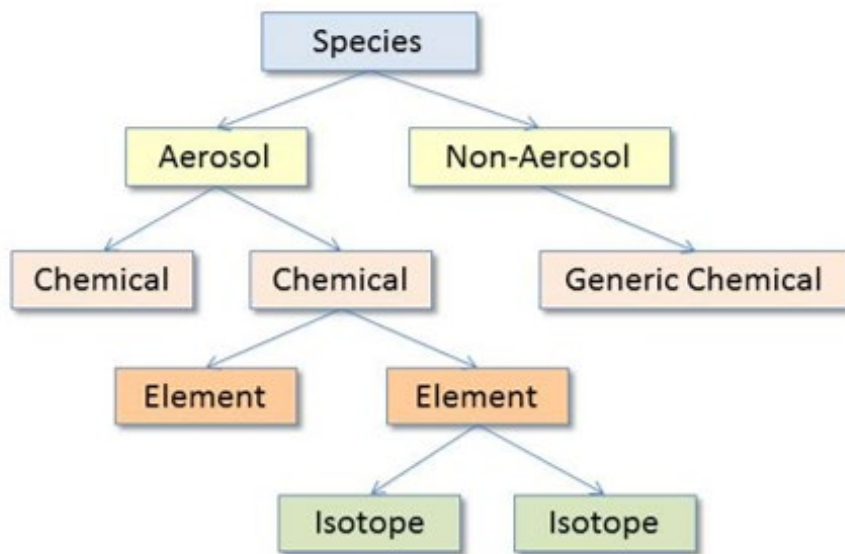


Abb. 3.20 Speziesbaum in AFP2

Auf der obersten Ebene ist nur die Wurzel Species eines Speziesbaums gegeben. Darunter werden Komponenten unterschieden, die entweder aerosolförmig oder nicht-aerosolförmig sind. Die nicht-aerosolförmigen Komponenten sind alle gasförmigen Stoffe in der Atmosphäre sowie im Wasser gelöste Stoffe. Auf dieser Ebene werden einerseits die Aerosolprozesse wie Agglomeration, Kondensation an den Partikeln (Nebelbildung), Ablagerung auf Strukturen und Abwaschen aus Wasservorlagen berechnet. Andererseits wird auf dieser Ebene der Transport zwischen verschiedenen Zonen berücksichtigt. Das beinhaltet den gasförmigen Transport über atmosphärische Verbindungen genauso wie die verschiedenen Arten von Drainagen, über die im Wasser gelöste Spezies transportiert werden. Die Anzahl der Aerosolkomponenten ist dabei nicht begrenzt und kann vom Anwender definiert werden. Jedoch gibt es nur eine DISSOLVED-Komponente, unter der alle nicht-aerosolförmigen Verbindungen behandelt werden

Die chemischen Reaktionen im Chemiemodell AIM (**A**dvanced **I**odine **M**odel) finden auf der Ebene darunter statt und behandeln chemische Umwandlungen sowohl von Aerosolen als auch von gasförmigen und im Wasser gelösten Stoffen. Die Organisation in diesem Speziesbaum ermöglicht es, Änderungen der chemischen Massen auch in der darüber gelegenen Komponenten-Ebene anwenden zu können.

Die chemischen Verbindungen sind aus chemischen Elementen aufgebaut, die auf der Ebene darunter berücksichtigt werden. An dieser Stelle findet die Berechnung der Nachzerfallsleistung statt. Zum einen gibt es die Möglichkeit, die Ausbreitung der Spaltprodukt-Elemente auf dieser Ebene zu berechnen und die Nachzerfallsleistung durch Tabellen bereitzustellen (DCAY_FANP-Option). Zum anderen ist es das Ziel, die radioaktiven Zerfälle und also die Nachzerfallswärmeleistung mittels VENTINA detailliert zu berechnen. Dafür ist eine Berücksichtigung der einzelnen Isotope für jedes Element auf der untersten Ebene nötig. Nur bei der Verwendung von VENTINA wird auch diese unterste Ebene benutzt.

Zur Erläuterung dieses Konzepts ist in der folgenden Grafik ein Beispiel mit je einer aerosolförmigen und einer gasförmigen bzw. im Wasser gelösten Spezies gegeben.

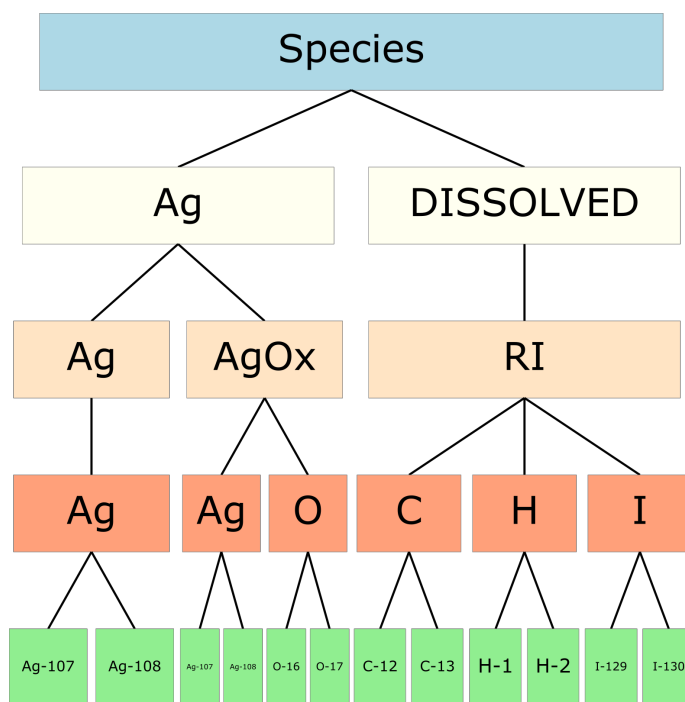


Abb. 3.21 Beispielhafte Einbindung in den Speziesbaum

Eine typische Aerosolkomponente in AFP2 ist Silber, das ein nicht-lösliches Aerosol ist. Die Aerosolkomponente besteht aber nicht aus chemisch reinem Silber, sondern berücksichtigt auch Silberoxid auf der chemischen Ebene. Diese beiden unterschiedlichen Verbindungen können auf der chemischen Ebene unabhängig in chemischen Reaktionen genutzt werden. Die chemischen Spezies berücksichtigen die Elemente, aus denen sie aufgebaut sind auf der darunter liegenden Ebene. Für Silberoxid sind in dem Speziesbaum dort die Elemente Silber und Sauerstoff eingetragen. Bei der Benutzung von VENTINA sind diese wiederum aus Isotopen zusammengesetzt.

Auf der anderen Seite gibt es nur eine einzelne Komponente DISSOLVED für die Berücksichtigung von gelösten und gasförmigen Spezies. Als Beispiel wird in der Grafik das Organoiod RI angegeben, das in AFP2 nicht nur Methylodid, sondern über den organischen Rest R alle möglichen Organoiodverbindungen repräsentiert. Auf der Ebene der Elemente sind diese organischen Iodverbindungen aus Kohlenstoff, Wasserstoff und Iod zusammengesetzt. Bei der Benutzung von VENTINA werden auch diese Elemente aus ihren Isotopen zusammengesetzt modelliert.

3.2.2.1 Bereitstellung der Daten aus dem Speziesbaum

Für den Aufruf der Nachzerfallsrechnung mit VENTINA ist die Datenübergabe der in dem Speziesbaum gespeicherten Isotope an LIB_BND nötig. Der Speziesbaum wird in einem ersten Schritt für jeden Host gelesen und die Nuklidmassen gespeichert. Dabei liegen dieselben Nuklide in unterschiedlichen chemischen Verbindungen vor. Für die Übergabe an LIB_BND werden diese jedoch aufsummiert. Die Hosts umfassen dabei alle Strukturen, die flüssigen und gasförmigen Phasen der Zonen sowie spezielle Wasservolumen wie Filmvolumen für das Abwaschen oder Sprühtröpfchen. An LIB_BND wird ein einzelnes Feld über den Nuklidvektor und die Anzahl der Hosts übergeben. Derzeit wird wie oben berichtet mit 1 348 Nukliden gerechnet. Eine größere Rechnung mit 1 000 Hosts käme also auf 1 348 000 Gleitkommazahlen, die mit doppelter Genauigkeit vorliegen und damit für jede Zahl 8 Byte Speicherplatz benötigen. Das entstehende Feld hätte somit einen Speicherplatz von etwa 10 MB, was mit heutiger Rechnerleistung kompatibel ist. LIB_BND übergibt VENTINA dieses Feld und berechnet den Zerfall über alle Zonen in einem Ausführungsschritt. Die Berechnung erfolgt innerhalb des Aerosolzeitschritts, aber außerhalb der chemischen Rechnung, die mit einem kleineren Zeitschritt als das Aerosolmodell rechnet.

3.2.2.2 Rückgabe der Ergebnisse in den Speziesbaum

Nach der Zerfallsrechnung müssen die Ergebnisse wieder auf den Speziesbaum übertragen werden. Ein Problem ist dabei, dass chemische Verbindungen durch den radioaktiven Zerfall zerstört werden. Der Anteil einer chemischen Verbindung wie z. B. AgI, der auf Elementbasis zerfällt, steht damit nicht mehr der Bildung der chemischen Verbindung, also in diesem Fall AgI zur Verfügung. Wenn also 1 % des Iods zerfällt, nimmt auch die AgI-Masse um 1 % ab, falls kein weiteres Ag zerfällt. Gleichzeitig wird aber eine entsprechende Masse an Ag frei, die aber nicht als Zerfallsprodukt vorliegt, sondern immer noch als freies Ag. In AFP2 werden die freigesetzten Stoffe einer Standardspezies

zugeordnet, die nicht als chemische Verbindung vorliegt. In dem Beispiel von AgI werden also die aus dem Iodzerfall entstandenen Zerfallsprodukte den Standardverbindungen der einzelnen Elemente zugeordnet. Zusätzlich wird das freigewordene Ag der Standardspezies von Ag zugeordnet. Zerfallen beide Elemente zu in der Regel unterschiedlichen Teilen, wird die Massendifferenz der einzelnen Elemente gebildet und die übrigbleibende Menge der weniger zerfallenen Elemente als freigesetzt angenommen. Dieser Anteil wird dann neben den Zerfallsprodukten seiner Standardspezies zugeordnet. Sicherlich entspricht diese Annahme nicht der Realität, ist aber eine handhabbare Möglichkeit, chemische Zerfälle durch Radioaktivität insoweit zu berücksichtigen, dass die Massenbilanzen erhalten bleiben. Derzeit müssen die Standardspezies vom Benutzer für alle Elemente unter dem Schlüsselwort FP_ELEMENT vom Benutzer vorgegeben werden.

Neben der Berechnung der Speziesanteile ist die freigesetzte Energie von zentraler Bedeutung, weshalb die Nachzerfallsleistung an das THY-Modul gesendet und dort für die Berechnung der Aufheizung von Sümpfen, Strukturen und der Atmosphäre benutzt wird. Dazu wird die spezifische Leistung der Elemente in W/kg auf Basis der Isotop-Zusammensetzung berechnet. Diese Ergebnisse werden auf Elementbasis an THY geliefert. Bei dieser Übergabe der Nachzerfallswärme in der Rechnung mit VENTINA sind dieselben Datenstrukturen wie bei der Berechnung mit Tabellenwerten (DCAY_FANP) benutzt worden, so dass eine einheitliche Berechnungsmethode vorliegt, die unabhängig von der Modellierungsoption der Nachzerfallswärme ist.

3.2.3 Testrechnung anhand eines Filter-Beispiels

Die Implementierung der LIB_BND in AFP2 ist anhand eines einfachen Testbeispiels überprüft worden. Dazu ist der Datensatz zur Modellierung bei der Berücksichtigung der Nachzerfallsleistung in Filterstrukturen benutzt worden, der mit tabellarischen Werten schon in /SPE 21/ vorgestellt worden ist. An dieser Stelle ist dieselbe Rechnung mit VENTINA berechnet worden. Die entsprechende Leistung von 0,35 kW ist so eingestellt worden, dass sie mit den Cs-Isotopen Cs-129, Cs-130, Cs-131, Cs-132 und Cs-133 erreicht wird. Die getroffene Wahl entspricht damit nicht einer realen Nuklidverteilung und dient nur der Überprüfung der korrekten Implementierung. Dennoch lässt sich das Modellierungspotential mit dem neu eingebundenen Zerfallsmodell erkennen.

Dabei sind folgende Massenanteile für die Cs-Isotopen eingestellt worden.

Tab. 3.1 Massenanteile für die Cs-Isotopen

Isotop	Massenanteil
Cs-129	0,00015
Cs-131	0,00015
Cs-132	0,00015
Cs-133	0,9994
Cs-134	0,00015

Die Leistung kommt zum allergrößten Teil von dem Isotop Cs-129, das eine Halbwertszeit von etwa 32 h hat.

Der verwendete Datensatz entspricht der Filterstrecke, wie sie für die ACE-Versuche benutzt worden ist, und ist in der folgenden Abbildung dargestellt.

COCOSYS-MFVF nodalisation of ACE filter testing device

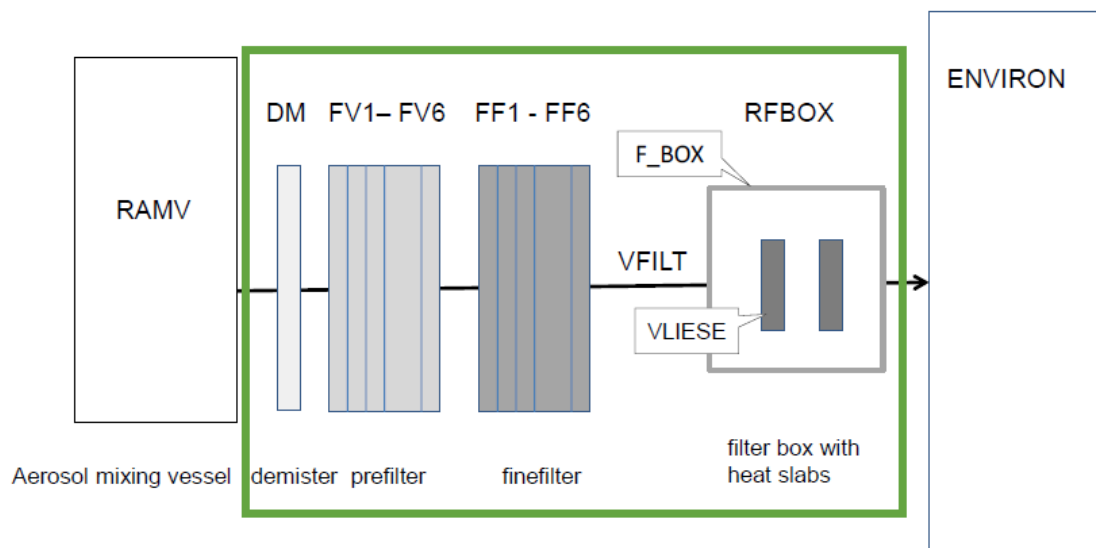


Abb. 3.22 Nodalisierung der Filterstrecke im ACE-Versuch

Eine genauere Beschreibung des Aufbaus findet sich in /SPE 21/ und soll hier nicht wiederholt werden. Wie im Folgenden erläutert wird, zeigt die aufgesetzte Testrechnung das zu erwartende Verhalten für die Abnahme der Cs-129 Menge und den Eintrag der Nachzerfallsleistung in die simulierten Filterstrukturen.

Der Verlauf der Cs-129 Masse ist in der ersten Ergebnis-Grafik dargestellt, die über einen Zeitraum von 2 000 Minuten geht, was in etwa der Halbwertszeit von 32 h entspricht.

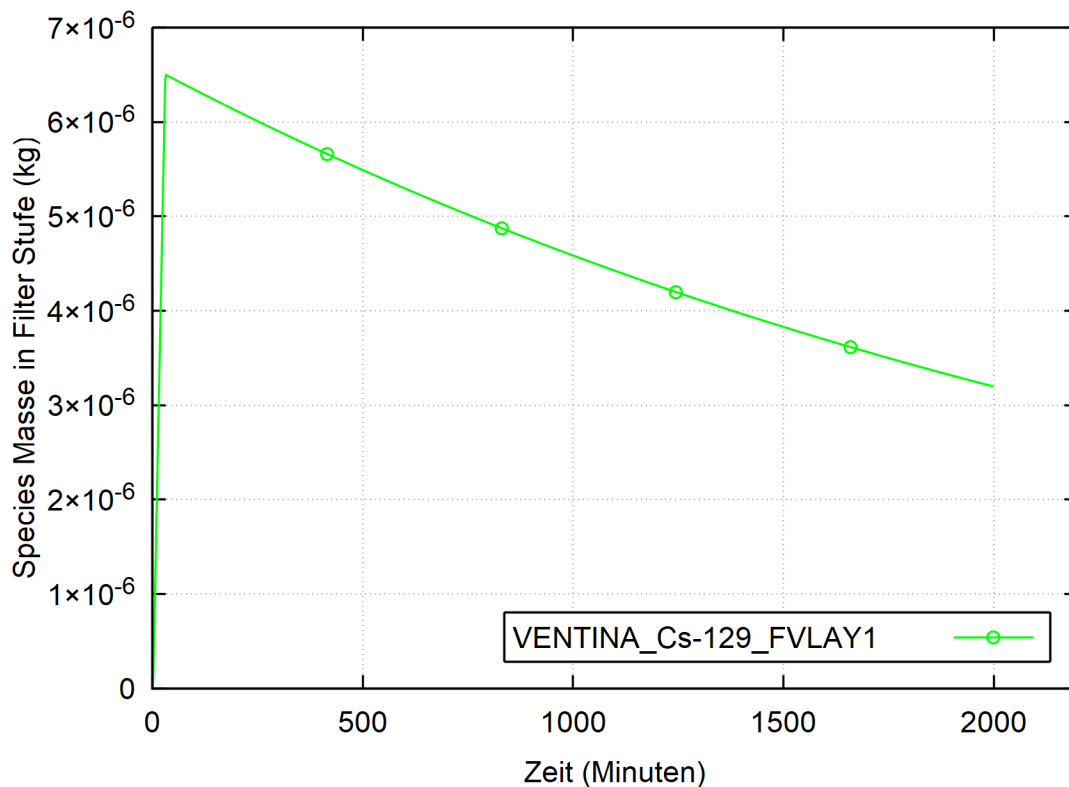


Abb. 3.23 Isotopenmasse auf Filterstruktur

Es ist zu erkennen, dass sich in der ersten Phase das Cäsium auf der beispielhaft gewählten ersten Filterstufe ablagert. Danach nimmt die dort abgelagerte Menge von etwas mehr als 6 mg bis zum Zeitpunkt 2 000 min auf die Hälfte ab. Somit wird die Abnahme durch den radioaktiven Zerfall korrekt gerechnet.

Im Folgenden ist ein Vergleich der Temperaturentwicklung in der Gasphase und den Strukturen zwischen der Ausgangsrechnung mit Tabellenwerten für die Nachzerfallsleistung (rot) und der Benutzung der LIB_BND mit VENTINA (grün) gegeben.

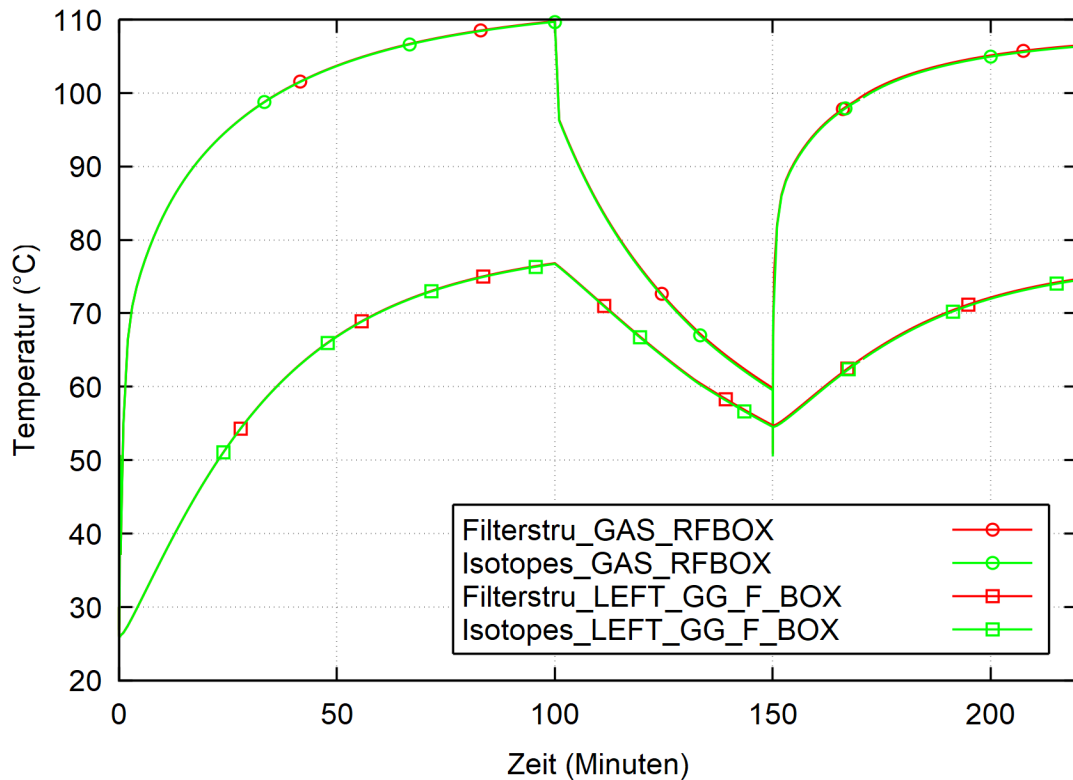


Abb. 3.24 Temperaturen im Filter-Testbeispiel

Der Vergleich der Aufheizungen in beiden Rechnungen zeigt dasselbe Verhalten. Das ist zu erwarten, da die Isotopenmassen in der neuen Rechnung so gewählt worden sind, dass sie die unterstellte Nachzerfallsleistung von 0,35 kW aufweisen. Die Übereinstimmung der Temperaturen zeigt die korrekte Berechnung der freigesetzten Energie durch den Zerfall, der hauptsächlich durch das Isotop Cs-129 freigesetzt wird.

Unterschiede lassen sich jedoch in der freigesetzten Leistung in die Strukturen erkennen, wie die folgende Grafik zeigt.

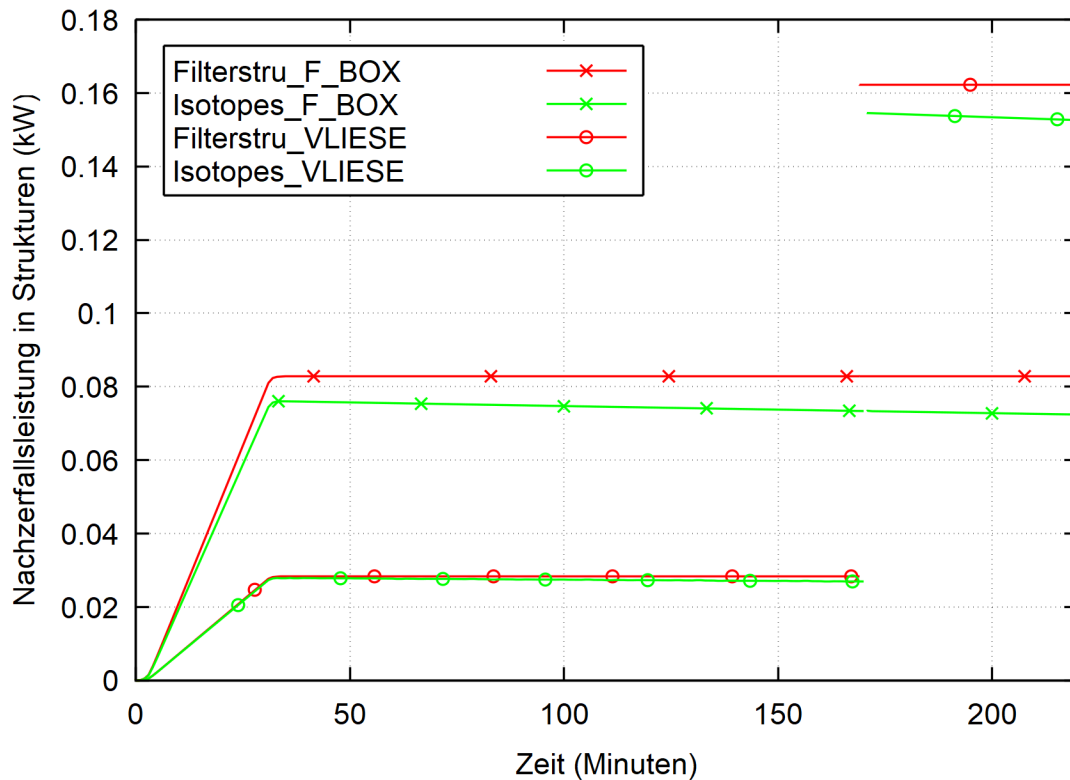


Abb. 3.25 Eintrag der Nachzerfallsleistung in die Strukturen

Dort ist tatsächlich ein Unterschied zwischen den beiden Rechnungen zu erkennen. Während die Nachzerfallsleistung am Beginn der Rechnung noch gut übereinstimmt, nimmt sie unter Verwendung von LIB_BND im Laufe der Zeit immer mehr ab. Dieses Verhalten ist allerdings zu erwarten, da in der Rechnung mit VENTINA die Leistung mit dem Zerfall von Cs-129 abnimmt, während die Tabellenwerte in der Ausgangsrechnung zeitlich konstant sind. Somit spiegelt die Abnahme der Leistung nur die Abnahme der am stärksten strahlenden Spezies wider. In der Temperaturentwicklung ist diese Abnahme aufgrund der thermischen Trägheit noch nicht sichtbar. Diese Ergebnisse zeigen aber, dass der radioaktive Zerfall stattfindet.

Wie in folgender Grafik gezeigt, nimmt der Rechenaufwand unter der Verwendung der LIB_BND mit VENTINA zu.

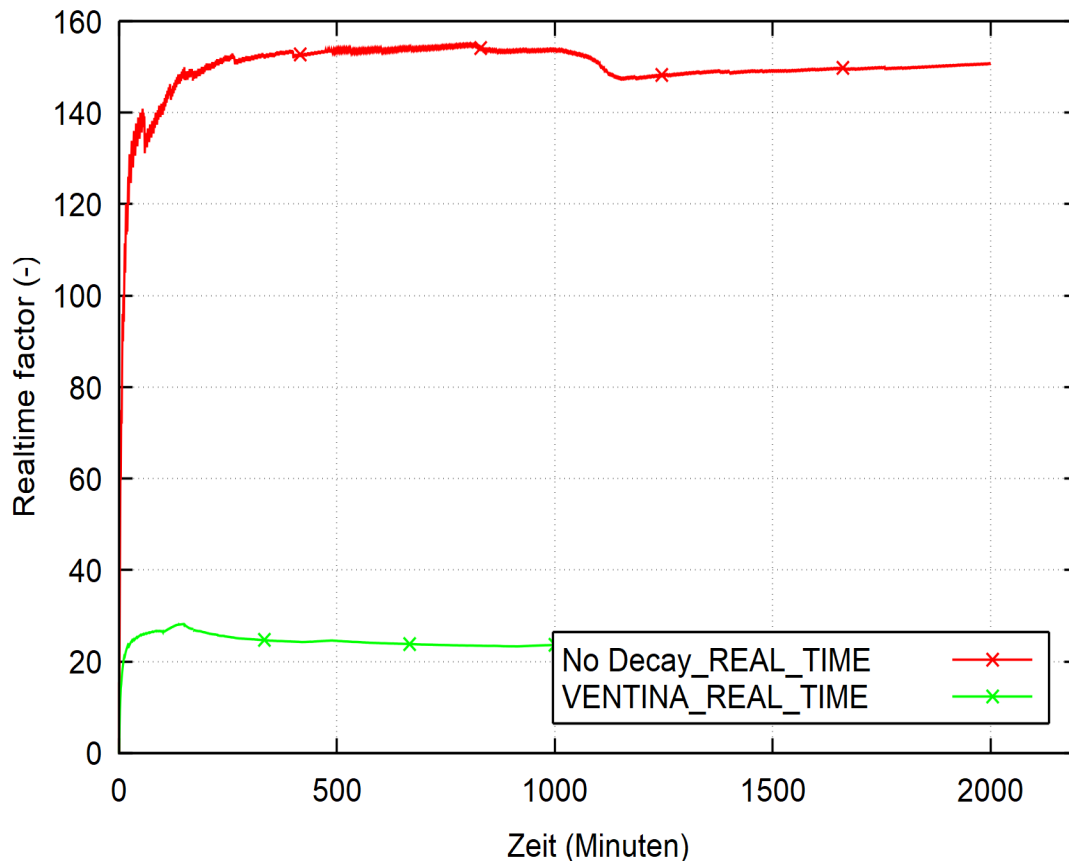


Abb. 3.26 Real-Zeit-Faktor im Filter-Testbeispiel

Der Real-Zeit-Faktor nimmt in der VENTINA-Rechnung um einen Faktor 7 ab, was einer Verlängerung der Rechenzeit um denselben Faktor 7 entspricht. Unklar ist derzeit, ob das hauptsächlich an der VENTINA-Rechnung selbst liegt. Andererseits erfordert LIB_BND, dass der Speziesvektor alle Elemente enthält, die im Nuklidvektor der Eingabedaten aus der decay_chains und NuclideData für VENTINA definiert sind. Damit erweitert sich auch der in AFP2 behandelte Speziesbaum und der Aufwand der Berechnungen nimmt so auch ohne den Aufwand in VENTINA selbst zu.

3.3 Nutzerfreundliche Ausgabeoptionen für detaillierte Rechenergebnisse des Spaltproduktmoduls

Das Spaltprodukt-Transportmodell FIPHOST im COCOSYS-Hauptmodul AFP liefert detaillierte Rechenergebnisse, d. h., für alle in der Eingabe definierten Spaltprodukte wird die zeitabhängige Verteilung der Massen und Aktivitäten auf den jeweils bis zu 5 Hosts (GAS, AEROSOL, GAS_SURF, WATER und WATER_SURF) in allen Zonen ausgegeben. Dazu kommt für alle Spaltprodukte die Massenbilanz (bis zu 5 Gruppen CORE,

ZONES/SYST, INJECTION, DECAY, DIFFERENCE) sowie die jeweils freigesetzte Nachzerfallsenergie (DECAY_HEAT). Im Fall von gekoppelten AC²-Rechnungen wird die aktuelle Isotopenzusammensetzung (Anzahl und Namen) von ATHLET-CD übernommen.

In Nutzerrückflüssen, z. B. bezüglich AC²-Störfallanalysen zum Brennelement-Lagerbecken oder zu Reaktoranlagen, wurde berichtet, dass diese Informationen einerseits zu umfangreich sind. Andererseits ist die Ausgabe zu wenig flexibel, so dass oft ein umfangreiches Post-Processing notwendig ist. In Diskussionen mit Anwendern wurde deshalb die Möglichkeit implementiert, über eine Nutzer-Vorgabe in COCOSYS die Ausgabe der Spaltprodukt-Massen und -Aktivitäten zu steuern. Folgende Optionen sind möglich: Werte

- in allen Zonen,
- in definierten Zonengruppen (unter C---- BALANCE, K---- ZONES) oder
- in allen Zonen plus Zonengruppen

für

- alle Spaltprodukte oder
- ausgewählte Spaltproduktisotope und/oder Elemente (unter C---- MODULES, K--- FIPHOST, FH_PRINT).

Die Ausgabe der Massen- und Energiebilanzen (6 + 1 Gruppen) erfolgt dann für alle der ausgewählten Spaltprodukte. Damit ist eine flexible, nutzerdefinierte Aufbereitung der Ausgabe möglich (Abb. 3.27).

(FIPHOST) ISOTOPE MASSES (KG) FOR ALL FPs IN ALL ZONES						
NO. ZONE	HOST	FPZMAS H-1	FPZMAS H-3	FPZMAS HE-4	FPZMAS HE-6	FPZMAS LI-7
1 Zone1	GAS	0.00000E+00	0.00000E+00	1.82028E-18	0.00000E+00	0.00000E+00
	AEROSOL	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
2 ENVIRON	WATER_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS	0.00000E+00	0.00000E+00	2.45628E-26	0.00000E+00	0.00000E+00
	AEROSOL	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
3 Zone2	WATER	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	AEROSOL	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
(FIPHOST) ISOTOPE/ELEMENT MASSES (KG) FOR USER DEFINED FP OUTPUT GROUPS IN ZONE GROUPS						
NO. ZONEGRP	HOST	FPZGM I-132	FPZGM KR-88	FPZGM I-134	FPZGM TE	FPZGM I
1 CONT	GAS	0.00000E+00	2.49188E-05	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	AEROSOL	1.76059E-05	0.00000E+00	1.05461E-05	6.10846E-03	1.19828E-02
	GAS_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
2 ENVIRON	WATER_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	GAS	0.00000E+00	8.35722E-06	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	AEROSOL	4.06941E-06	0.00000E+00	2.42084E-06	4.66310E-04	2.81297E-03
	GAS_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
	WATER_SURF	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00

Abb. 3.27 Ausgabe der Spaltproduktmassen, oben: alte Ausgabe, unten: Nutzerdefinierte Zonengruppen und ausgewählte Spaltproduktisotope und Elemente

4 Erweiterungen für das Verhalten von Kernschmelze im Wasser

4.1 Arbeiten zur Ergänzung eines Modells für die Simulation von Ex-Vessel-Schüttbettsituationen

In diesem Arbeitspunkt wurden bereits vorhandene Modelle in COCOSYS zur Simulation des Verhaltens einer Kernschmelze im Containment (Schmelzeausbreitung, Schmelze-Beton-Wechselwirkung MCCI, Kernfänger) durch ein Modell zur Simulation eines mit Wasser gekühlten Partikel-Schüttbettes (Debris Bed) erweitert.

In COCOSYS fehlte bisher noch ein Ansatz, um in Unfallsimulationen eine sogenannte Schüttbettkonfiguration zu berücksichtigen, d. h. die Möglichkeit abzudecken, dass nach Eintrag von Kernschmelze in wassergefüllte Räume im Containment eine ausgeprägte Fragmentierung der kompakten Kernschmelze erfolgt und das entstandene Schüttbett kühlbar ist. Dazu wurden in RS1561 wichtige Vorarbeiten geleistet: Mit dem bei IKE Stuttgart entwickelten Rechenprogramm COCOMO /BUC 16/, das mechanistische Modelle zur Fragmentierung von Kernschmelze beim Eintrag ins Wasser, zur Schüttbettbildung und zur Schüttbettkühlung enthält, wurde eine Matrix von repräsentativen Rechenfällen erzeugt, die den Rahmen der zu erwartenden Anfangsbedingungen für die Auswertung von möglichen Schüttbettsituationen in einer Reaktoranlage weitgehend abdeckt. Auf der Basis dieser Rechenergebnisse kann die mögliche Kühlbarkeit eines Schüttbettes basierend auf Angaben zu seiner Charakterisierung (wie z. B. Höhe des Schüttbettes, Porosität, Partikelgrößen etc.) beurteilt werden. Im Falle der positiven Beurteilung der Kühlbarkeit des Schüttbettes soll die Ex-Vessel-Schmelze zukünftig als Schüttbett-Charakterisierung weiter in COCOSYS simuliert werden. Bislang war nur die Simulation von fortgesetzter, nicht-kühlbarer Schmelze-Beton-Wechselwirkung oder die Ex-Vessel-Rückhaltung der Kernschmelze mittels eines Kernfänger-Systems möglich.

4.1.1 Anforderungen an einen geeigneten Modellansatz für COCOSYS

Abb. 4.1 zeigt schematisch die Situation einer Ex-Vessel-Kernschmelze in der Reaktorgrube in Form einer Schüttung von teilweise erstarrten Partikeln. Die Entstehung dieser Partikelschüttung während des Austrages von Schmelze aus dem RDB in die wassergefüllte Reaktorgrube ist ein transienter, überaus komplexer Vorgang unter Beteiligung mehrphasiger Phänomene. Wenngleich Modellentwicklungen für die Formierung eines Schüttbettes schon seit mehreren Jahren verfolgt werden, siehe z. B.

/BUC 16/, /HOT 20/, ist der Vorgang von einer solch hohen Komplexität und das Maß der damit verbundenen Unsicherheiten so groß, dass die Ausgewogenheit eines entsprechenden detaillierten Modells für den Einbau in einen Systemcode wie COCOSYS aktuell nicht gegeben ist.

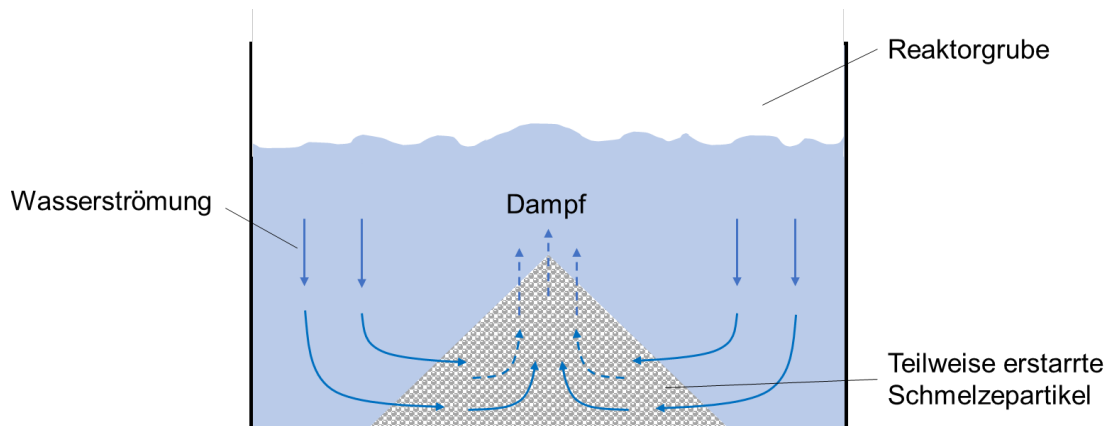


Abb. 4.1 Schematische Darstellung einer Partikelschüttung in der Reaktorgrube

Als möglich erachtet wurde die Implementierung eines vereinfachten Kriteriums zur Bewertung der Kühlbarkeit einer in Abb. 4.1 gezeigten Partikelschüttung. Sie ist kühlbar, wenn die in den Partikeln produzierte Nachwärme an das Kühlmittel abgegeben werden kann, ohne dass das Schüttbett lokal austrocknet. Die Kühlbarkeit kann mit einem detaillierten Simulationscode wie COCOMO /BUC 16/ folgenderweise simuliert werden, vgl. auch /SPE 21/:

- Start der Simulation mit einem vollständig gefluteten Schüttbett unter Vorgabe von Schüttbettparametern (Partikeldurchmesser, Porosität, ...).
- Stationäre Einspeisung der Nachzerfallswärmeleistung in den Partikeln.
- Stationäre Nachspeisung von Wasser in den Pool.
- Untersuchung der transienten Simulation auf lokales Austrocknen von Partikeln bei stationärer Wärmeleistung. Diese kann sukzessiv erhöht werden. Ein lokales Austrocknen ist vor allem an der Spitze einer kegelförmigen Schüttung (sofern sie sich kegelförmig ausprägt) zu erwarten.

Die Untersuchungen in /SPE 21/ haben gezeigt, dass instationäre Rechnungen mit COCOMO zur Prognose der Schüttbettkühlbarkeit einen hohen Rechenzeitbedarf erfordern, obwohl die Randbedingungen des Schüttbettes bereits in hohem Maß als idealisiert angenommen werden. Diese Idealisierung umfasst zum Beispiel Annahmen über die Geometrie und Homogenität des Schüttbettes sowie die Konstanz von Masse und

Volumen des Schüttbettes. Für COCOSYS wurde es daher als sinnvoll erachtet, kein transientes Detailmodell wie COCOMO (vgl. z. B. die COCOMO-MELCOR-Kopplung in /HOT 20/) zur Bewertung der Kühlbarkeit zu verwenden, sondern ein Kriterium zu nutzen, das aufgrund der vom Nutzer angenommenen Randbedingungen für das Schüttbett und für die in der Simulation errechnete Schmelzemasse die mögliche Kühlbarkeit auf der Basis von Vorausrechnungen mit dem detaillierten Modell COCOMO bewertet. In der Simulation soll dann eine entsprechende Auswahl zwischen dem MCCI-Modell (nicht-kühlbare Schmelze-Beton-Wechselwirkung) und der Simulation einer kühlbaren Konfiguration als Schüttbett (Schüttbett-Modell) getroffen werden.

Die Anforderung an das Schüttbettmodell wird damit hauptsächlich auf die korrekte Darstellung der Wärmeeinspeisung in die Wasservorlage (Wärmeübertragungsfläche, Wärmeübertragungskoeffizient, Temperaturdifferenz zwischen Wasser und Schmelzepartikeln) sowie die realistische Bestimmung der Partikeltemperatur heruntergebrochen. Als Modellbasis für COCOSYS eignet sich das an der Arbeitsgruppe PSS der Ruhr-Universität Bochum für ATHLET-CD entwickelte Modell DEMON /PES 24a/ /PES 23/. Die Anforderung an das Schüttbettmodell wird damit hauptsächlich auf die korrekte Darstellung der Wärmeeinspeisung in die Wasservorlage (Wärmeübertragungsfläche, Wärmeübertragungskoeffizient, Temperaturdifferenz zwischen Wasser und Schmelzepartikeln) sowie die realistische Bestimmung der Partikeltemperatur heruntergebrochen. Als Modellbasis für COCOSYS eignet sich das an der Arbeitsgruppe PSS der Ruhr-Universität Bochum für ATHLET-CD entwickelte Modell DEMON.

4.1.2 Durchgeführte Arbeiten zur Integration des Modells DEMON in COCOSYS

4.1.2.1 Ursprüngliche Integration des Modells in ATHLET-CD

Die nachstehende Abb. 4.2 zeigt die Struktur des Modells DEMON und die Abfolge von Aufrufen einzelner ProgrammROUTINEN in der ursprünglichen Anbindung an ATHLET-CD.

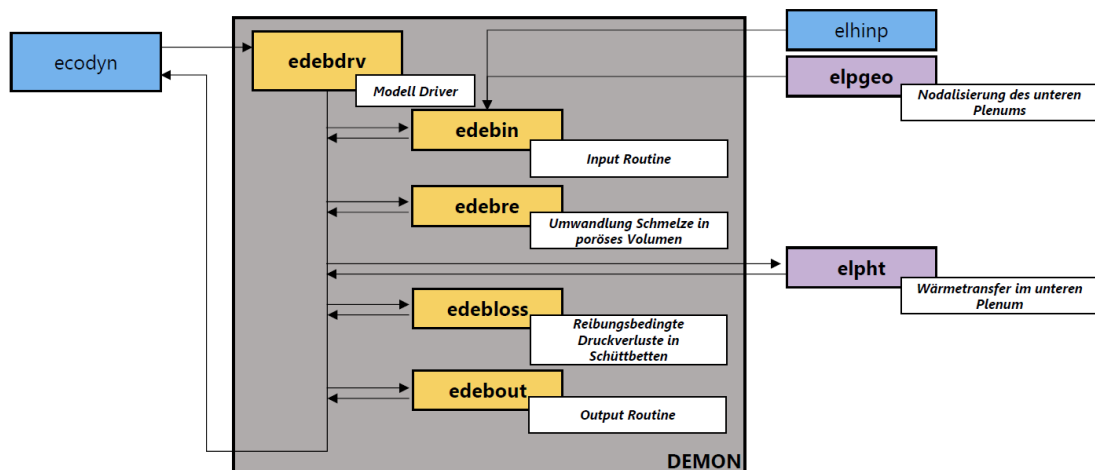


Abb. 4.2 Implementierung des Modells DEMON in ATHLET-CD /PES 24b/

Die Programmroutine ECODYN in ATHLET-CD wird im Kernzerstörungsmodul ECORE in ATHLET-CD aufgerufen und berechnet die Wärmeerzeugung im Reaktorkern, die Wärmeübergänge und das Abschmelzen des Kerns. In ECODYN wird optional die Treiber-Routine EDEBDRV für das Schüttbettmodell DEMON aufgerufen, sofern das detaillierte Modell LHEAD in der Eingabedatei des Rechenfalls ausgewählt wurde und die Simulation des Schüttbettes im unteren Plenum des RDB in der Rechnung angewählt wird.

Gemäß der Programmabfolge für die Anbindung von DEMON an ATHLET-CD werden in DEMON (grauer Kasten in Abb. 4.2) zunächst in der Routine EDEBIN alle benötigten Daten für die Schüttbettsimulation aus den ATHLET- bzw. ATHLET-CD-Variablen gelesen und in moduleigene Variablen umkopiert.

Die Routine EDEBRE ermittelt anschließend unter Kenntnis der gesamten sowie der im aktuellen Zeitschritt zugeführten Masse vom abschmelzenden Reaktorkern in LHEAD eine lokale Repräsentation (Volumen) des geschmolzenen Reaktorkerns sowie dessen Temperatur in der Form einer porösen Partikelschüttung. Für das Kühlmittel in den Kontrollzellen, in denen ein Partikelvolumen > 0 ausgerechnet wird, verbleibt somit entsprechend weniger freies Volumen.

Die Routine ELPHT berechnet den Wärmeübergang zwischen den Partikeln des Schüttbettes und dem Kühlmittel. Hierbei wird ein Wärmeübergang an das Wasser in den Zwischenräumen und ein Wärmeübergang an den Dampf in den Zwischenräumen betrachtet. Die Routine EDEBLOSS berechnet die reibungsbedingten Druckverluste für die

Strömung des Wassers in den Zwischenräumen des porösen Schüttbettes. Die neuen lokalen Temperaturen der Partikelverteilung werden in DEMON unter Kenntnis von mittleren Stoffwerten der Partikel berechnet.

Schließlich kopiert die Routine EDEBOUT alle benötigten Daten für die weiteren Berechnungen in ATHLET-CD (z. B. die in das Wasser bzw. in den Dampf abgeführten Wärmeströme) auf die entsprechenden Variablen in ATHLET-CD um.

4.1.2.2 Einbau des Modells in COCOSYS

Vom Autor des Modells DEMON war bereits berücksichtigt, dass das Modell auch von anderen Codes verwendet werden könnte. Dazu steht im Programmcode von DEMON der Parameter IMODE zur Verfügung, der beim Aufruf der Treiber-Routine EDEBDRV in der Argumentliste mitgegeben wird. Für IMODE = 1 wird in den Ein- und Ausgaberroutinen entsprechend von den relevanten ATHLET-CD-Variablen auf lokale DEMON-Variablen eingelesen bzw. die Ergebnisse von lokalen DEMON-Variablen auf ATHLET-CD-Variablen zurückgeschrieben.

Für den Einbau des Modells DEMON in COCOSYS wurde zweckmäßigerweise daher folgende Vorgehensweise durchgeführt:

- Festlegung, dass der Aufruf der Treiberroutine EDEBDRV aus dem FORTRAN-Projekt 'ccimain' in der COCOSYS-Projektmappe erfolgen soll, d. h., der Aufruf des Schüttbettmodells erfolgt aus dem Modul CCI.
- Ergänzung der folgenden DEMON-Quelltextdateien in einem Unterordner 'demon' im Projekt 'ccimain': edebdrv.f90, edebin.f90, edebloss.f90, edebout.f90, edebre.f90, edlhstec.f90, elhbch.f90, elpgeo.f90, elpht.f90, emoddlh.f90, lltaf.f90, lltsa.f90

Die endgültige Struktur der Quelltexte sollte zukünftig noch im Hinblick auf die Vermeidung von Doppelungen (im AC²-Rahmen) optimiert werden, d. h., das Schüttbettmodell DEMON sollte in AC² nur als eine gemeinsame Quellcode-Instanz existieren.

- Bereitstellung aller für die fehlerfreie Übersetzung (Kompilierung) der zuvor genannten, unmodifizierten DEMON-Quelltexte benötigten Variablendeklarationen in einer neuen Quelltextdatei coco_demon.f90 als neues FORTRAN-Modul. Dieses FORTRAN-Modul wird in den entsprechenden DEMON-Quelltextdateien verwendet, so dass die Variablendeklarationen überall, wo benötigt, bekannt sind.

- Übertragung von zusätzlich benötigten thermo-physikalischen Daten der COCOSYS-Zone der Reaktorgrube zwischen THY und CCI via AC²-Treiber mittels der Interprozesskommunikationstechnik MPI. Dies betrifft insbesondere die zur Charakterisierung des Kühlmittelzustands benötigten Zustandswerte und thermo-physikalischen Stoffeigenschaften von Wasser und Dampf in der Zone.
- Aufruf der Treiber-Routine EDEBDRV an einer geeigneten Stelle im COCOSYS-Hauptmodul CCI mit dem Parameter IMODE = 3. Die ‚3‘ steht für die Kopplung mit COCOSYS. Die Option ‚1‘ ist für ATHLET-LHEAD reserviert, die Option ‚2‘ steht für ATHLET-AIDA zur Verfügung.
 - Der Aufruf wurde im Modul ‚ccimain‘ an derselben Stelle implementiert, an der dort mit der Routine flux_f nacheinander alle Massen- und Energieströme für die Massen- und Energiebilanz der möglichen Schmelzeschichten in der Konfiguration eines kompakten Schmelzepools berechnet werden. Er erfolgt im Rahmen einer neuen Routine flux_debris alternativ anstelle der Routine flux_f im Falle einer entsprechenden Auswertung eines Flags L_DEBRISBED == .TRUE. (siehe unten). Es wird hierbei davon ausgegangen, dass für die Bilanzierung des Schüttbetts im CCI-Modul nur eine einzige Schmelzeschicht verwendet wird, d. h., die Dimension der Variable ‚layer‘ ist eins.

```

IF (L_DEBRISBED) THEN
  CALL flux_debris( time, dt, ioxid, layer, atmos, cavity, wall,
                   concrete, decayheat )
ELSE
  CALL flux_f( time, dt, ioxid, layer, atmos, cavity, wall, concrete,
              decayheat )
ENDIF

```

- In der Routine flux_debris wird die Treiberroutine EDEBDRV aufgerufen. Die von DEMON berechnete Wärmeleistung – Summe aus dem Wärmestrom an das flüssige (QCONVL) bzw. gasförmige Kühlmittel (QCONVG) – wird in der vorliegenden Implementation vereinfachend exklusiv an das das Schüttbett bedeckende Wasser zurückgegeben; dies erfolgt über die im CCI-Modul verwendete Variable atm%power_water. Im MCCI-Modus würde alternativ für L_DEBRISBED == .FALSE. beim Ausführen der Routine flux_f zur Berechnung der Massen- und Energieströme mit dieser Variable der Wärmestrom aus einer kompakten, gefluteten Schmelze an das Wasser übertragen. Entsprechend wird in flux_debris im Anschluss der berechnete Enthalpiestrom mit dem zu- bzw. abgeführten Enthalpiestrom aus der in CCI bilanzierten Schmelzeschicht lay(1)%fh verrechnet:

```
call EDEBDRV (3,1, ncv_rad, 1, ncv_ax, 1, ncv_rad, 1, ncv_ax+1, NFE)
if (atm%water_mass > 0.0d0) then
  atm%power_water = QCONVL(1,1) + QCONVG(1,1)
else
  atm%power_water = 0.0d0
endif
lay(1)%fh = lay(1)%fh - atm%power_water
CALL corium_properties( lay(1) )
! decay heat imposed by the user or by the FP distribution
IF( ipdecay > 0 ) CALL decay_heat( time, decayheat, lay )
```

- Die neue Temperatur der überdeckenden Wasserschicht bzw. des FLUID-Zonenteils wird von THY unter Einbezug der von CCI berechneten Wärmeübergänge berechnet, wohingegen die Temperatur der Schmelze von CCI unter Einbezug dieser Wärmeverluste sowie der Nachzerfallswärmeleistung (mit der Routine decay_heat, s. o.) ermittelt wird.

4.1.3 Testrechnungen für einen Beispiel-Datensatz

Um erste Erfahrungen mit dem in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen, in COCOSYS integrierten Modell DEMON zu gewinnen, wurden Testrechnungen mit einem realistischen Beispieldatensatz durchgeführt. Der Beispieldatensatz lehnt sich an den im OECD-FACE-Projekt behandelten Referenz-Datensatz für die Sensitivitätsstudie zu MCCI-Codes an. In diesem Projekt wurde für den Unfallablauf in Block 1 des KKW Fukushima angenommen, dass sich aufgrund der über mehrere Tage fehlenden Einspeisung von Wasser eine kompakte Kernschmelze im Containment gebildet hat und es wurden Code-Prognosen für die Wechselwirkung dieser Schmelze mit dem Beton studiert /PEL 22/, siehe auch Abschnitt 4.2. Im Unterschied dazu wurde der Datensatz als Testfall für die Ex-Vessel-Schüttbettsimulation hier etwas modifiziert:

- Der Raum unter dem RDB (Steuerstabantriebsraum SAS) wird als notwendige Randbedingung für die Schüttbettsimulation nicht als trocken, sondern als mit Wasser geflutet angenommen. Die Masse des Wasserpools wurde willkürlich zum Zwecke der Testrechnungen zu 20 000 kg definiert.
- Das Volumen der Zone im Datensatz, in dem die Schmelze simuliert wird, ist für diese Untersuchung gegenüber dem wirklichen Volumen eines Pumpensumpfes ($1,45 \text{ m} \times 1,45 \text{ m} \times 1,2 \text{ m}$) im SAS, in dem gemäß dem Fukushima-Datensatz die im MCCI-Datensatz angenommene kompakte Schmelze wechselwirkt, um einen Faktor ~ 10 vergrößert. Dies ist notwendig, um die gesamte Schmelzemasse auch in der Form einer porösen Partikelschüttung und zusätzlich eine genügend große Wasservorlage aufzunehmen. Der Radius des Schüttbettes wird auf $R = 0,82 \text{ m}$ gelegt, um eine identische Grundfläche zum quaderförmigen Pumpensumpf der Querschnittsfläche $1,45 \text{ m} \times 1,45 \text{ m}$ einzuhalten. Die besondere Form des Schüttbettes (Kegelform, wie in Abb. 4.1, oder Zylinderförmig) kann in der jetzigen Form der Implementierung nicht unterschieden werden.
- Entsprechend der Annahme von gefluteten Bedingungen wurden niedrigere Temperaturanfangsbedingungen der Atmosphäre als für die MCCI-Rechnungen in OECD-FACE angesetzt. Zur Beurteilung der berechneten Wärmeabgabe an den Wasserpool wurden zusätzlich vereinfachend Strukturen entfernt, die gleichzeitig eine Abkühlung des Wassers oder der Atmosphäre bewirken könnten.
- In einer ersten Rechnung wurde die originale, von der Arbeitsgruppe im OECD-FACE-Projekt angenommene Nachzerfallswärmeleistung von anfänglich 0,85 MW betrachtet (Abschnitt 4.1.3.1). Um die Randbedingungen für das Schüttbett speziell an der oberen Grenze der Kühlbarkeit zu untersuchen, wurde die Nachzerfallswärmeleistung für die Variationsrechnung künstlich auf ein Niveau von 10 MW angehoben, d. h. um einen (willkürlichen) Faktor von etwa 12,5 gegenüber dem Fukushima-Datensatz (Abschnitt 4.1.3.2).

In der hier beschriebenen Implementierung wird angenommen, dass das Schüttbett genauso wie die Schmelze unter MCCI-Bedingungen in nur einer COCOSYS-Zone repräsentiert wird. Die wichtigen Schüttbettparameter Porosität und Partikeldurchmesser wurden in der ersten Testrechnung im mittleren Bereich des in der Spezifikation von Unsicherheitsparametern für die Schüttbettsimulation in /SPE 21/ zugrunde gelegten

Wertebereiches angesetzt: Porosität 40 %, mittlerer Partikeldurchmesser 3 mm. Die Materialdaten Dichte, spezifische Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit der Partikel werden bei der jeweiligen Schmelzetemperatur durch das CCI-Modul ermittelt und DEMON zur Verfügung gestellt. Die Anfangs- bzw. Randbedingungen für diese Testrechnung sind in Tab. 4.1 zusammengestellt.

Tab. 4.1 Schüttbettparameter des Testrechenfalls

Parameter	Wert
Druck (Pa)	0,7E6
Schmelzemasse (kg)	19 500
Porosität (%)	40
Partikeldurchmesser (m)	0,003
Böschungswinkel (°)	n. a.
Radius des Schüttbettes (m)	0,82
Spez. Wärmeleistung zu Beginn der Rechnung (W/kg)	44 (550)
Dichte (kg/m ³)	7 744
Spez. Wärmekapazität (J/(kg K))	600
Wärmeleitfähigkeit (W/(m K))	4,75

4.1.3.1 Testrechnung für das originale Niveau der Leistungsdichte

Das originale Niveau der Nachzerfallswärmeleistung in der Schmelze beträgt zu Beginn der Rechnung 0,85 MW. Damit wird eine auf die Partikelmasse spezifische Leistung von ca. 44 W/kg Schmelze erzielt. Diese spezifische Nachzerfallswärmeleistung würde basierend auf einer zuvor aufgestellten Datenmatrix aus Variationsrechnungen mit dem detaillierten Schüttbettmodell COCOMO sehr wahrscheinlich kühlbar sein: Kein Rechenfall zeigte dort ein lokales Austrocknen (Dryout) bei dieser Leistungsdichte unter Variation der wichtigsten Parameter für die Charakterisierung des Schüttbettes, siehe (Abb. 4.3).

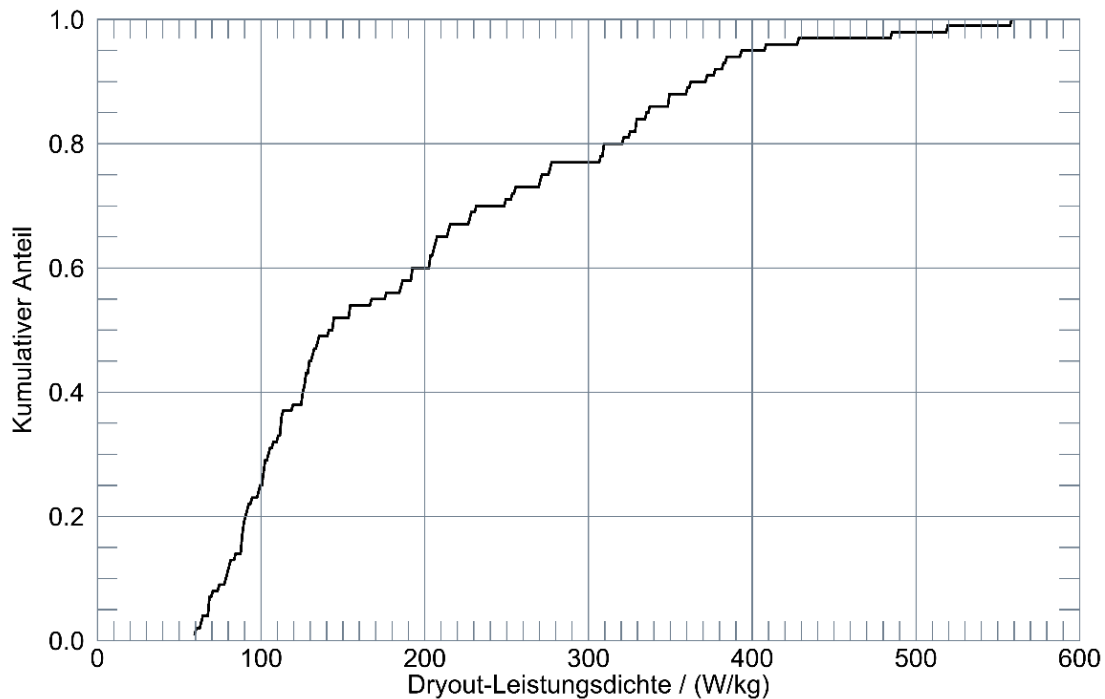


Abb. 4.3 Kumulative Verteilungsfunktion der COCOMO-Rechenfälle bezogen auf die spezifische Dryout-Wärmestromdichte (aus /SPE 21/)

In den durchgeführten Testrechnungen wird prinzipiell unterstellt, dass das Schüttbett zunächst einmal kühlbar ist. Die Kühlbarkeit selbst soll zukünftig mit einem vorgeschalteten Kriterium, basierend auf der COCOMO-Datenbasis, ausgewertet werden.

Derzeit kann in COCOSYS kein Dampfgehalt im Wasser simuliert werden. Mögliche Modellentwicklungen dazu sind Gegenstand des Projektes RS1604. Der zeitabhängige Dampfgehalt und die Temperatur der Dampfblasen werden aber von DEMON benötigt. Solange diese Informationen von COCOSYS nicht bereitgestellt werden, erfolgt eine Vorgabe durch den Anwender. In diesem Fall wurde ein konstanter Dampfgehalt (Void) von 40 % vorgegeben und eine Dampftemperatur, die identisch mit der Sättigungstemperatur des Wassers ist.

In den Simulationen kann es dazu kommen, dass selbst mit der Annahme des konstanten Dampfgehalts die zunächst einmal unterstellte Kühlbarkeit des Schüttbettes beendet wird, wenn nämlich die Wasservorlage aufgrund von Verdampfung und fehlender Einspeisung von Wasser global austrocknet. In diesem Fall wird die Simulation beendet, da das Modell darauf nicht mehr anwendbar ist.

Die Testrechnung mit originaler Leistungsdichte zeigt für einen Partikeldurchmesser von 3 mm und bei einem angenommenen Dampfgehalt von 40 % sowie einer Porosität der Partikelschüttung von 40 % (vgl. Tab. 4.1) ein Austrocknen der Wasserbedeckung von 20 000 kg nach ca. 10 h (36 500 s), Abb. 4.4. Trotz anhaltender Nachzerfallswärmeleistung werden die Partikel innerhalb von nur ca. 50 s von 2 200 °C auf wenige Grade über Sättigungstemperatur, die für 7 bar bei 165 °C liegt, abgekühlt, Abb. 4.5. Der starke Temperaturabfall nach 30 s in Abb. 4.5 hängt mit einem Anstieg des Wärmestroms zwischen Partikeln und Wasservorlage zusammen (Abb. 4.6), bedingt durch den Übergang vom Filmsieden zum Blasensieden. Bei Temperaturrückgang der Schmelze auf ca. zwei Grad über Sättigungstemperatur fällt dann der Wärmeübertrag rasch bis zum stationären Wärmestrom ab, der der Nachzerfallswärmeleistung entspricht. Ab diesem Zeitpunkt wird der Wärmeübergang durch freie Konvektion bestimmt.

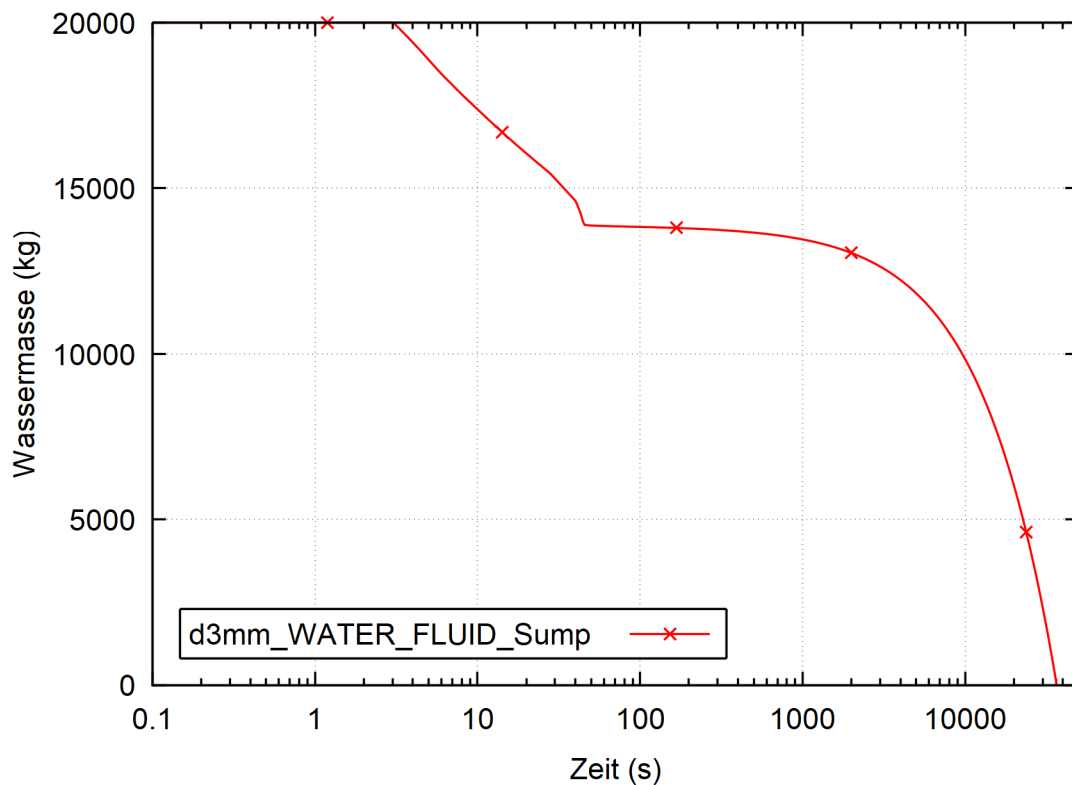


Abb. 4.4 Wassermasse als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm

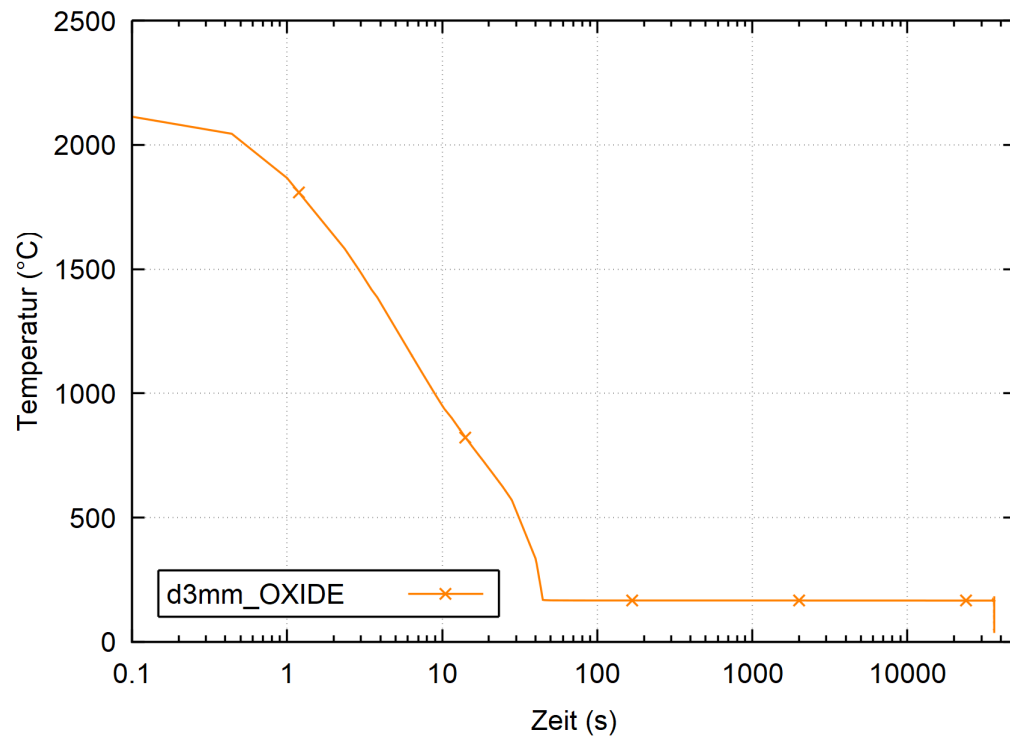


Abb. 4.5 Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm

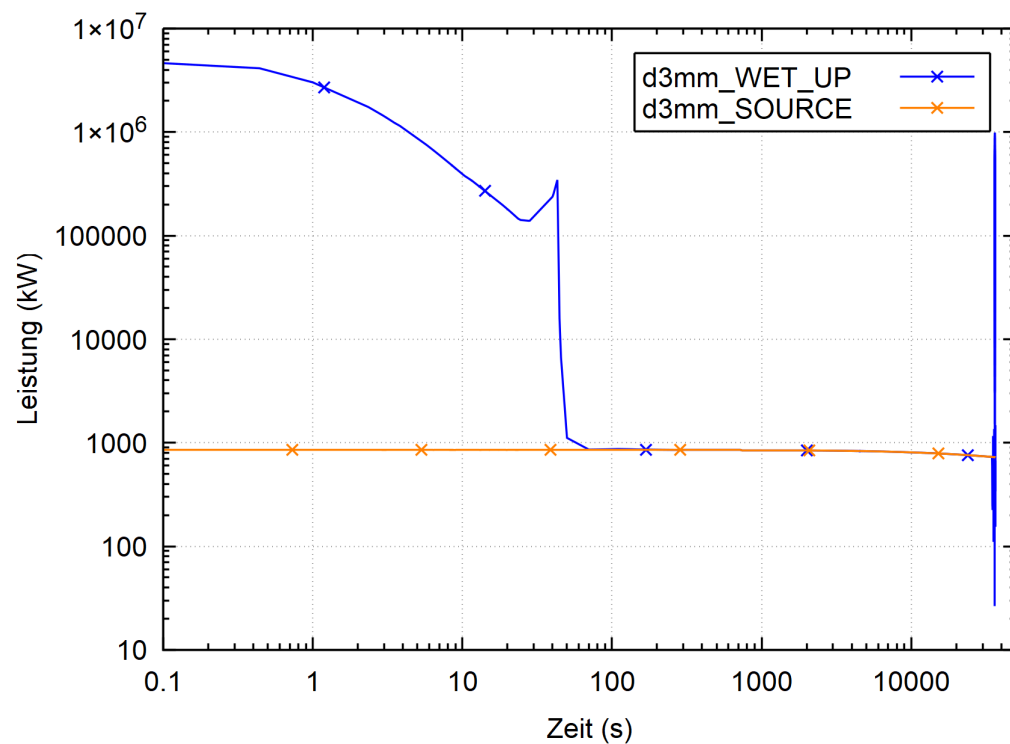


Abb. 4.6 Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung

4.1.3.2 Testrechnungen mit angehobener Leistungsdichte

Für weitere Testrechnungen wurde ein künstlich modifiziertes Niveau der Leistungsdichte betrachtet. Das modifizierte Niveau der Nachzerfallswärmeleistung in der Schmelze beträgt zu Beginn der Rechnung etwas mehr als 10 MW, also einen Faktor 12,5 größer als das originale Niveau in Abschnitt 4.1.3.1. Damit wird eine auf die Partikelmasse spezifische Leistung von ca. 550 W/kg Schmelze erzielt. Diese spezifische Leistung ist nur mit geringer Wahrscheinlichkeit in typischen Schüttbettkonfigurationen kühlbar: In den zuvor mit dem detaillierten Schüttbettmodell COCOMO durchgeführten Rechnungen stellten sich nur weniger als 2 % der Rechenfälle mit dieser Leistungsdichte als kühlbar heraus, siehe Abb. 4.3.

Die Testrechnung mit der angehobenen Leistungsdichte und weiteren Schüttbettparametern wie zuvor (Partikeldurchmesser von 3 mm, Dampfgehalt von 40 % sowie einer Porosität der Partikelschüttung von 40 %, vgl. Tab. 4.1) zeigt vor allem ein schnelleres Austrocknen der Wasservorlage nach 2 700 s, Abb. 4.7. Die Abkühlung der Partikel (Abb. 4.8) und das zeitliche Verhalten des übertragenen Wärmestroms (Abb. 4.) erfolgen nahezu identisch wie im Rechenfall der kleineren Leistungsdichte in Abschnitt 4.1.3.1.

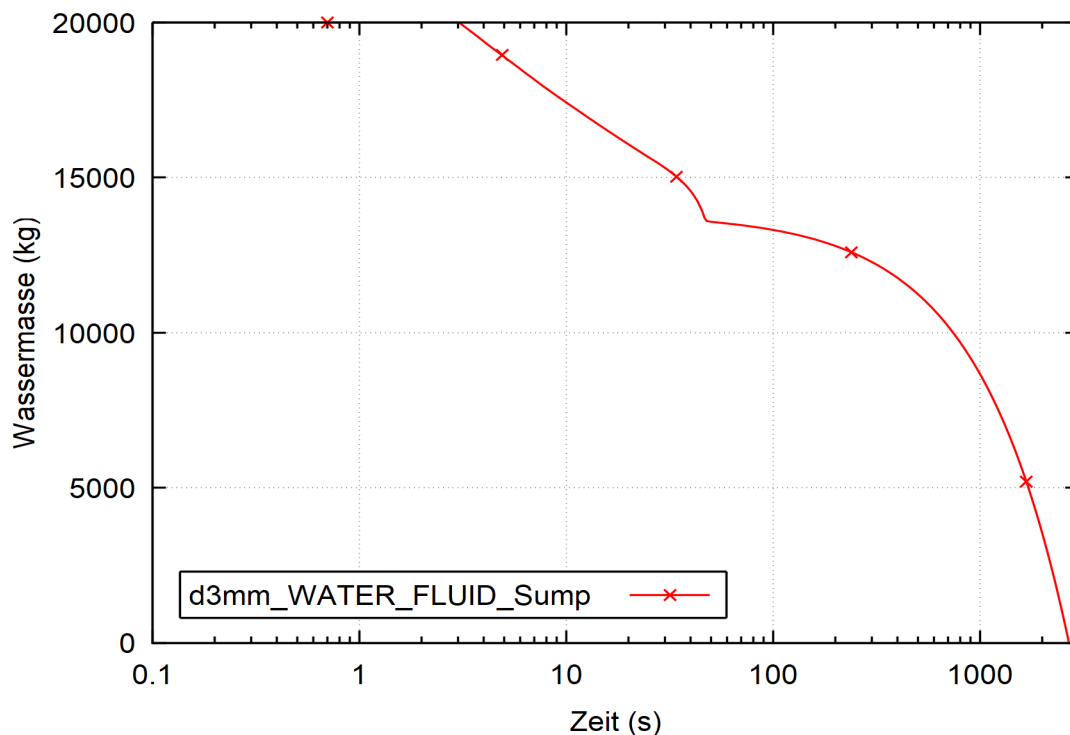


Abb. 4.7 Wassermasse als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm

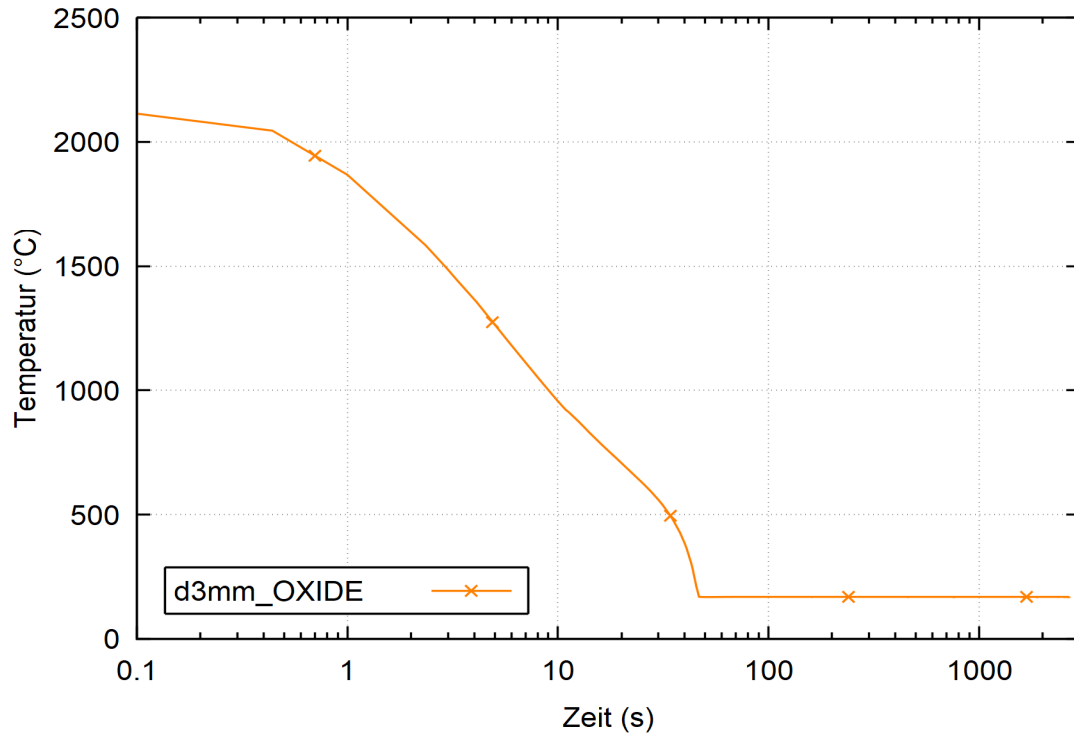


Abb. 4.8 Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm

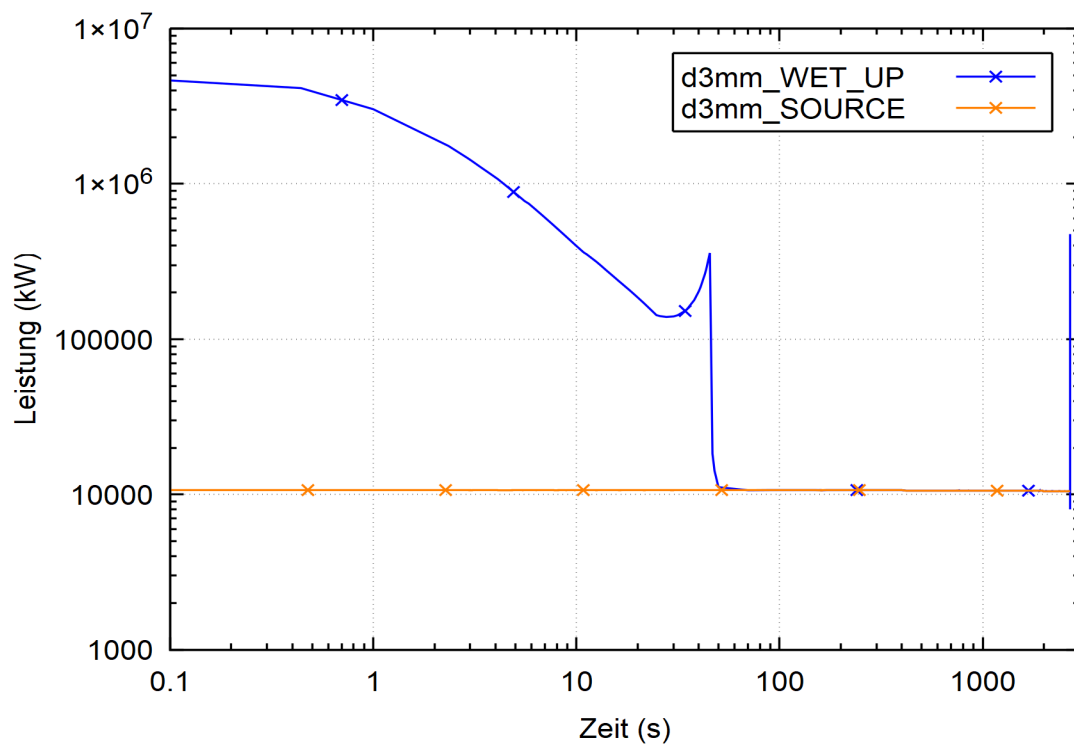


Abb. 4.9 Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung

Der starke Temperaturabfall nach 30 s in Abb. 4.8 hängt mit einem Anstieg des Wärmestroms zwischen Partikeln und Wasservorlage zusammen (Abb. 4.9), bedingt durch den Übergang vom Filmsieden zum Blasensieden. Bei Temperaturrückgang der Schmelze auf ca. 2 Kelvin über Sättigungstemperatur fällt dann der Wärmeübertrag ab (→ Wärmeübergang durch freie Konvektion).

Weitere Testrechnungen hatten die Untersuchung des Einflusses der Schüttbettparameter (Partikeldurchmesser, Porosität) sowie des vom Anwender vorgegebenen (virtuellen) Dampfgehaltes auf die Simulation zum Ziel.

Bei Variation des Partikeldurchmessers (Abb. 4.10 – Abb. 4.12) unter Beibehalt der Porosität von 40 % und einem Dampfgehalt von 40 % zeigt sich erwartungsgemäß ein größerer Wärmestrom für kleinere Partikeldurchmesser. Später kommt der Einfluss der Temperaturdifferenz auf den Wärmeübergang hinzu, so dass ein Austrocknen und damit der nicht-kühlbare Zustand in der Simulation mit 30 cm Partikeldurchmesser sogar früher errechnet wird als in der Rechnung mit 3 cm Durchmesser (Abb. 4.12).

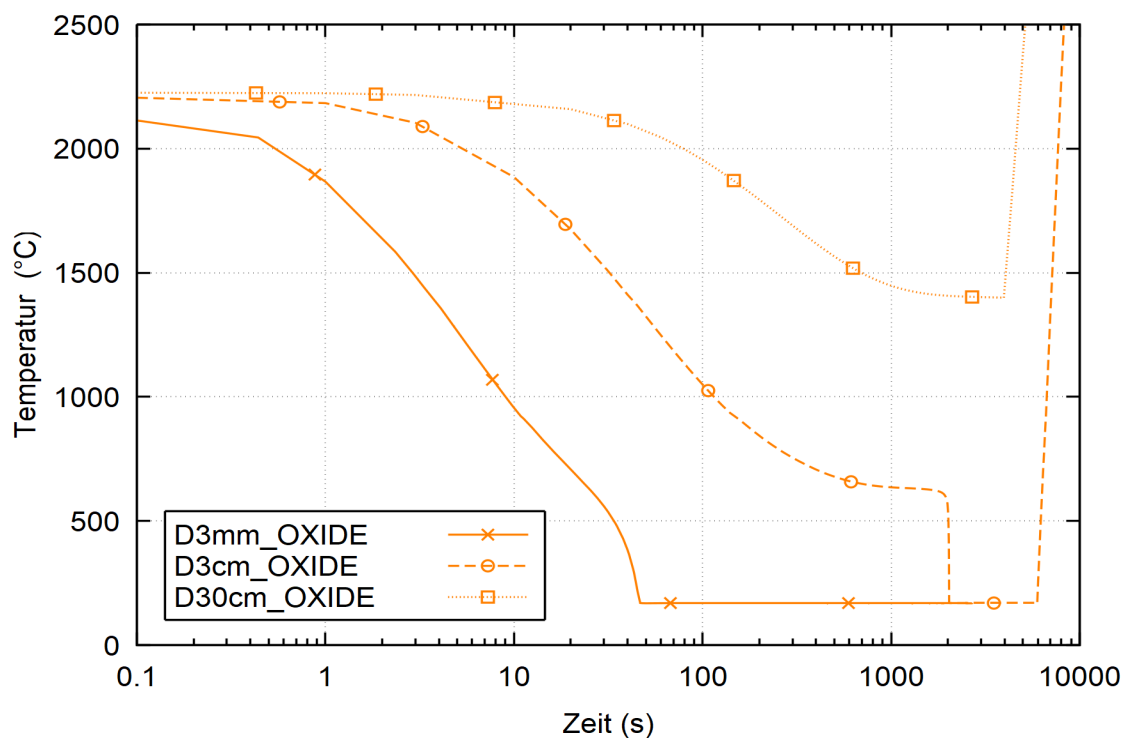


Abb. 4.10 Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm

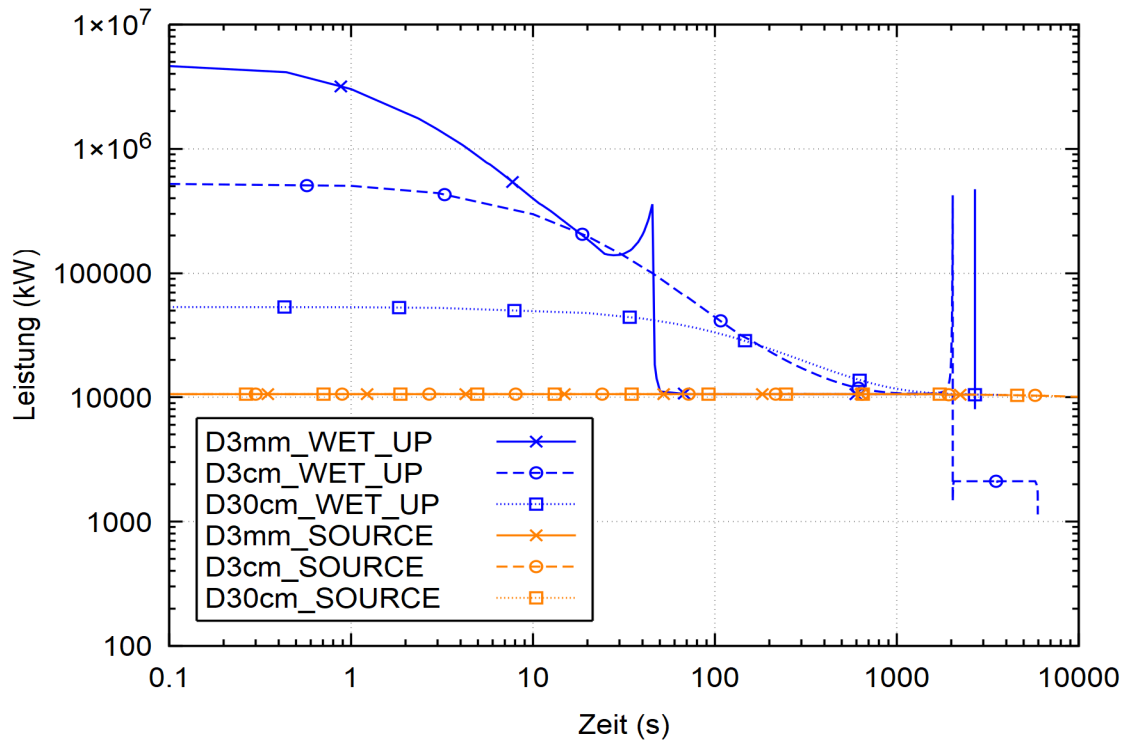


Abb. 4.11 Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung

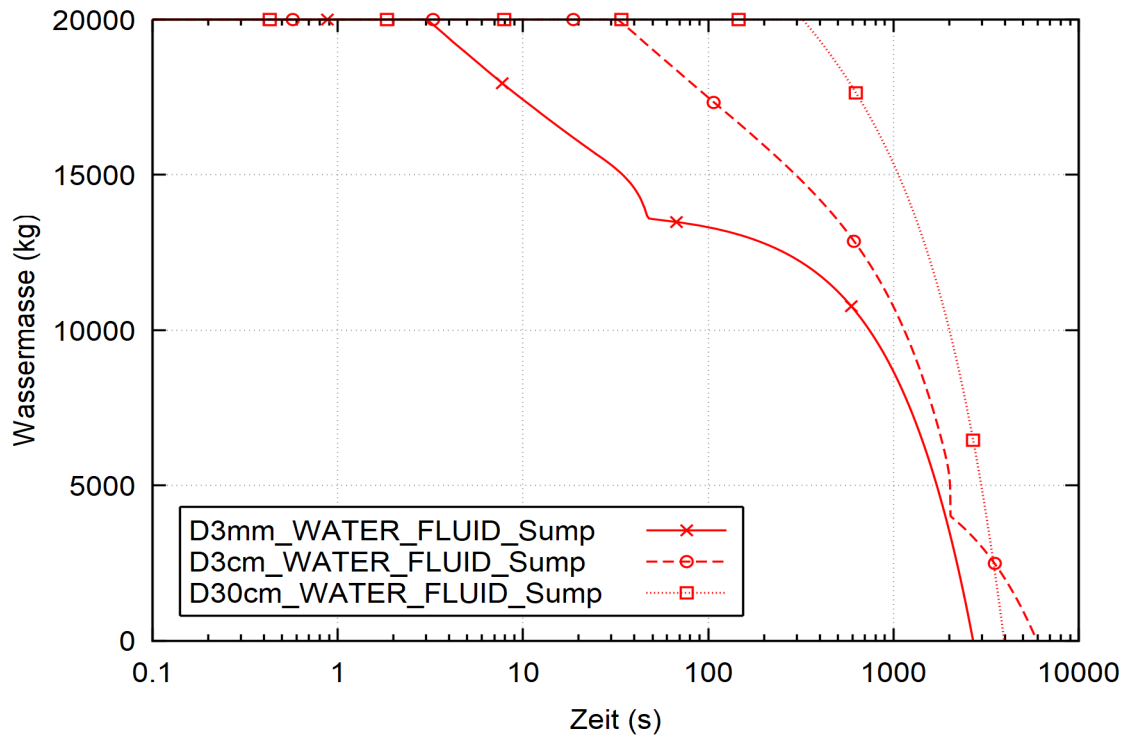


Abb. 4.12 Wassermasse als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm

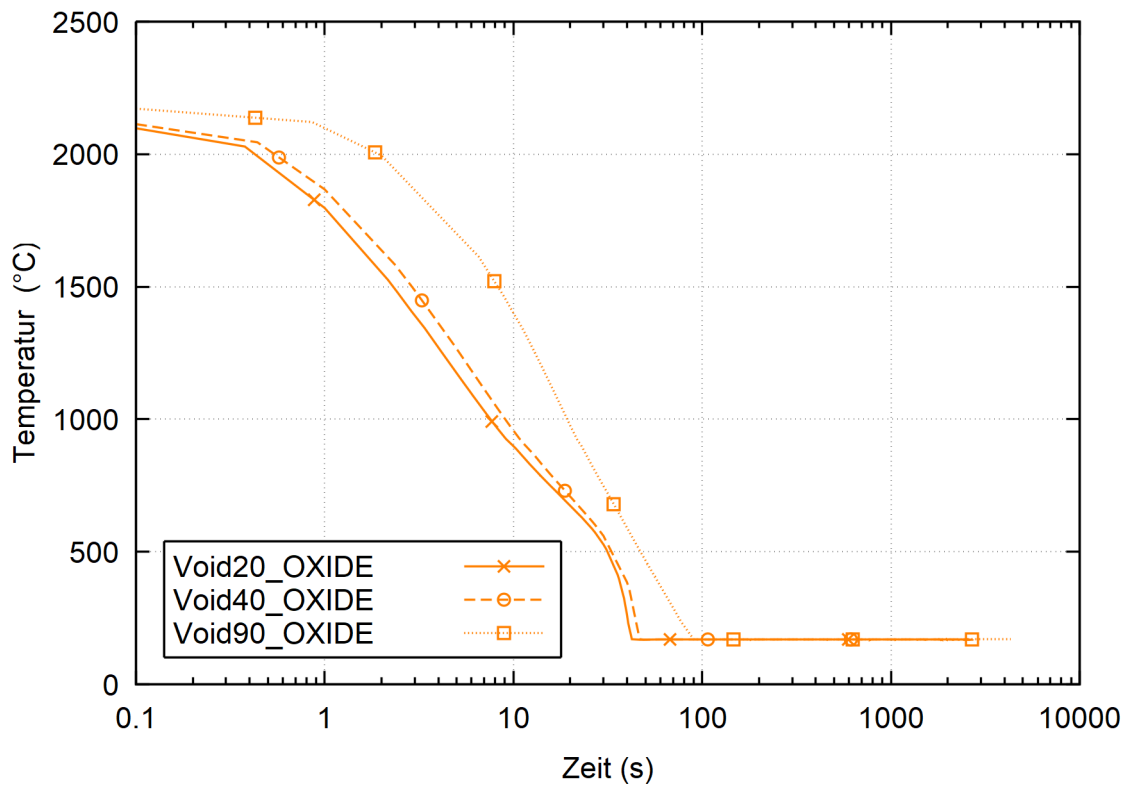


Abb. 4.13 Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 %, und 90 %

Bei Variation des vorgegebenen konstanten Dampfgehaltes (Abb. 4.13 – Abb. 4.15) unter Annahme der Porosität = 40 % und des Partikeldurchmessers = 3 mm zeigt sich ein ähnlicher Einfluss wie beim Partikeldurchmesser: Kleinere (virtuell vorgegebene) Dampfgehalte erhöhen bei ähnlicher Temperaturdifferenz den integralen Wärmestrom zwischen Partikeln und Fluid. Zur Erinnerung: in COCOSYS werden derzeit beide von DEMON berechneten Wärmeüberträge – in die Wasserphase und in die Dampfphase – in der Summe dem Wasser in der COCOSYS-Zone zugeführt. Im späteren Verlauf der Rechnung macht sich der Einfluss der Temperaturdifferenz auf die übertragene Leistung bemerkbar, und das komplette Austrocknen des Schüttbettes wird unter den gegebenen Bedingungen zu ähnlichen Zeiten berechnet.

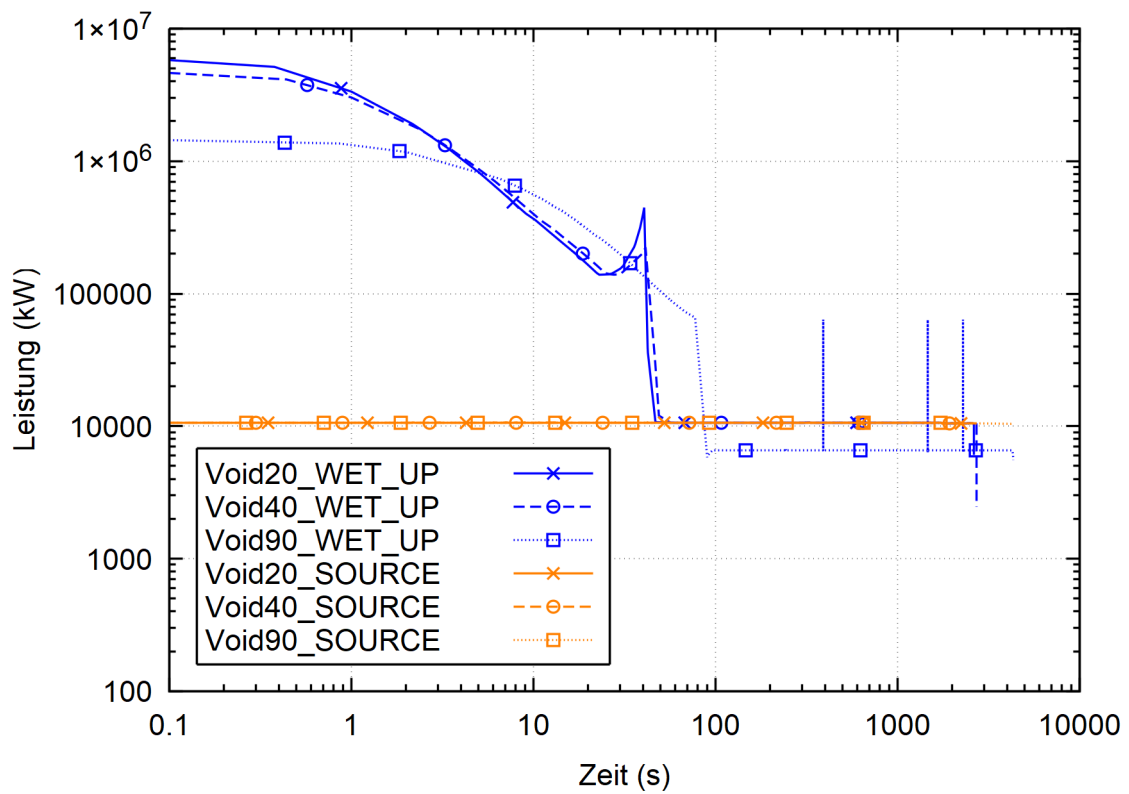


Abb. 4.14 Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 % und 90 %. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung

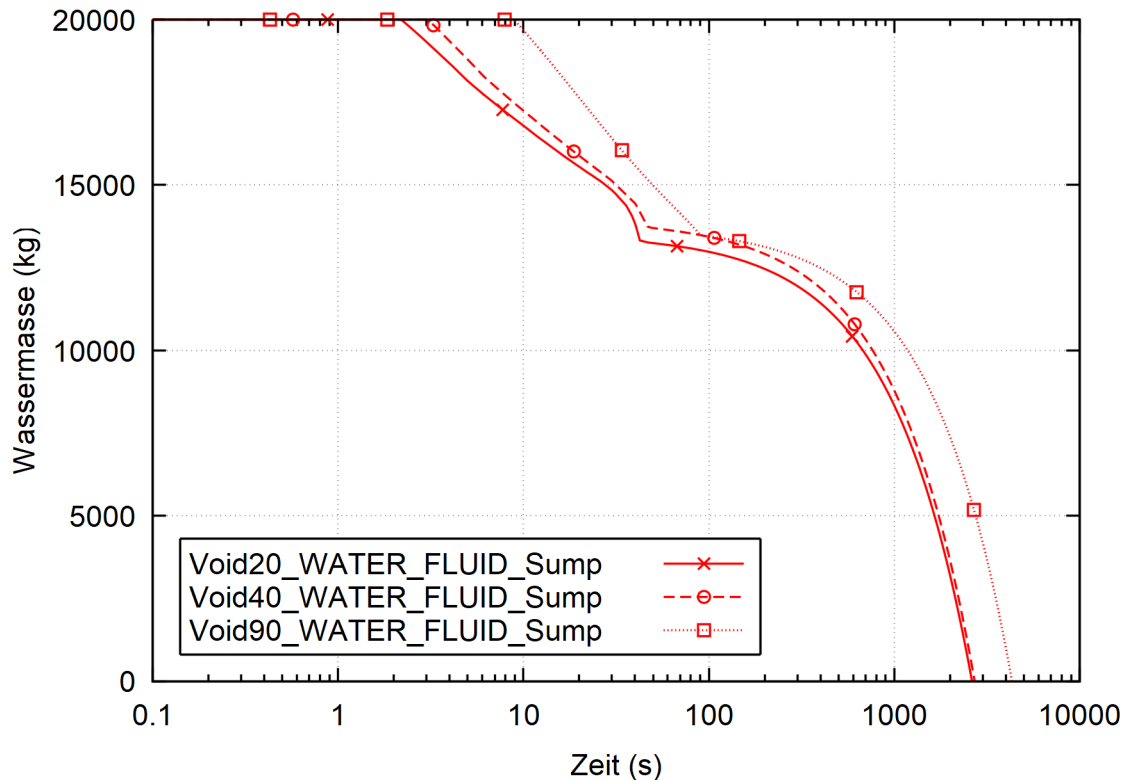


Abb. 4.15 Wassermasse als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 % und 95 %

Die Variation der Porosität zeigt keinen Einfluss auf die Rechnung. Die Ursache wird in dem jetzigen Zustand der Anbindung an COCOSYS gesehen: Einerseits würde in DEMON die Porosität auf die Befüllung von lokalen Kontrollvolumina einwirken, was aber hier keinen Einfluss nimmt, da das gesamte Volumen in einer COCOSYS-Zelle repräsentiert ist. Andererseits hat die Porosität Einfluss auf die Strömungsgeschwindigkeit von Wasser und Dampf in den Zwischenräumen der Partikel. Auch hier schlägt sich dieser Einfluss nicht wieder, da es keine Rückkopplung mit COCOSYS zur Strömung in der Kontrollzelle gibt.

4.1.4 Zusammenfassung und offene Punkte für Verbesserungen

Das Schüttbettmodell DEMON, das von der AG PSS der Ruhr-Universität Bochum für ATHLET-CD, Teilmodell LHEAD, in AC² entwickelt wurde, ist in diesem Arbeitspaket für die thermohydraulische Simulation an COCOSYS zur Darstellung eines Ex-Vessel-Schüttbettes verfügbar gemacht worden. Es erfolgten erste Testrechnungen unter Variation der wichtigsten Parameter. Die vorläufigen Ergebnisse erweisen sich als plausibel.

Das Schüttbett-Modell leistet für COCOSYS die Berechnung der übertragenen Wärmeleistung an das Wasser unter Annahme einer bestimmten Konfiguration des Schüttbettes (Partikeldurchmesser, konstante Annahme eines virtuellen Dampfgehaltes). Es wird die entsprechende Abkühlung der Schmelzepartikel berechnet. Ferner kann die Wasserverdampfung bei fehlender Einspeisung zur möglichen Austrocknung der gesamten Wasservorlage führen.

Das Modell kann im Zustand der jetzigen Anbindung an COCOSYS aber kein instationär auftretendes, lokales Austrocknen des Schüttbettes simulieren, da das gesamte Schüttbett in einer COCOSYS-Zone repräsentiert ist und COCOSYS keinen transienten Dampfgehalt in der Wasserphase berechnet.

Offene Punkte zur Implementierung und Anpassung des Modells sind:

- Einbau des Kriteriums für die Kühlbarkeit eines Schüttbettes unter den angenommenen Randbedingungen. Der Simulationsmodus Schüttbett soll nur nach positiver Beurteilung aktiviert werden.
- Umschalten zwischen Schüttbett-Modell und MCCI bei globalem Austrocknen des Schüttbettes.
- Die Porosität hat im aktuellen Zustand der Anbindung keinen Einfluss auf die Simulation in DEMON. Es ist zu prüfen, ob in diesem Punkt eine Verbesserung nötig ist, da auch die Unsicherheiten bei der Prognose der Porosität groß sind.
- Weil in den Routinen EDEBIN bzw. EDEBOUT die in DEMON benötigten Variablen im Falle von IMODE=1 mit Inhalten von Variablen aus ATHLET-CD überschrieben werden bzw. in diese zurückkopiert werden, müssen formal alle hier herangezogenen ATHLET-CD-Variablen deklariert und ggf. initialisiert sein. Auch wenn im Fall von COCOSYS (IMODE=3) die lokalen DEMON-Variablen mit einem komplett anderen Variablensatz, nämlich dem von COCOSYS, gefüllt werden, müssen die ATHLET-CD-Variablen aus formalen Gründen (für das Kompilieren der Quelltexte) alle bekannt sein. Hier wäre es sinnvoller, einen Satz generischer Variablen zu definieren und diesen in der Schnittstelle mit entsprechenden Inhalten, nämlich denen von ATHLET-CD oder denen von COCOSYS, zu füllen. Dann müssten in EDEBIN bzw. EDEBOUT nicht so viele codespezifische Variablen formal deklariert werden.

- Wenn das Schüttbett austrocknet, d. h., wenn sich die Wassermasse in der Schüttbett-Zone in COCOSYS reduziert, wird aufgrund der sehr groben Repräsentation (das komplette Schüttbett ist in einer Zone) weiterhin angenommen, dass im gesamten Schüttbett Wasser solange vorhanden ist, wie die globale Wassermasse des Wasserpools größer null bleibt. Hierbei wird ständig ein Wärmestrom an das flüssige Kühlmittel (Wasser) berechnet sowie ein Wärmestrom an den virtuell angenommen Dampf-Gehalt. Dieser Dampf wird mangels einer derzeit fehlenden eigenständigen Modellierung in COCOSYS für die Ermittlung der anteiligen Wärmeströme in den Testrechnungen konstant vorgegeben. Beide Wärmeströme werden gegenwärtig in die Wasserphase in THY eingespeist. Wenn die Wassermasse in der Zone auf null sinkt, ist das Modell streng genommen nicht mehr anwendbar. In den aktuellen Testrechnungen wird der Wärmestrom gleich null gesetzt und die Temperatur des Schüttbettes steigt aufgrund fortgesetzter Nachzerfallswärmeleistung wieder deutlich an. Zukünftig muss an dieser Stelle zwischen (kühlbarer) Schüttbettsimulation und (nicht-kühlbarer) MCCI-Simulation umgeschaltet werden. Ferner könnte das Modell von den Fortschritten im Projekt RS1604 SIWAP im Hinblick auf die Modellierung vom Dampfgehalt im Wasser profitieren.
- Das, was das Modell DEMON in der ATHLET-CD-Anbindung zusätzlich leistet, nämlich die Verdrängung von Wasser in einem nodalisierten Rechengebiet, wird in der COCOSYS-Anbindung derzeit nicht genutzt. Hier wäre es zukünftig sinnvoll, sowohl für die Repräsentation der Schmelze als MCCI-Pool wie auch als Schüttbett, in der entsprechenden COCOSYS-Zone die Schmelze in einem gesonderten Zonenteil abzubilden, der auch Volumen einnimmt (Zonenteil SOLID im THY-Hauptmodul) und damit den Wasserhöhenstand in der Zone beeinflusst.

4.2 Rückflüsse aus der Begleitung der MCCI-Fachgruppe zu MCCI (Gruppe 3) im Projekt OECD-ARC-F

Für die Interpretation des realistischen Verhaltens einer Ex-Vessel-Kernschmelze sind die Aktivitäten der Gruppe 3 im Projekt OECD ARC-F zu MCCI von hohem Interesse. Dort werden unter Beteiligung der GRS (siehe auch den Abschnitt 6.1.2 zur Mitwirkung in internationalen Arbeitsgruppen) Analysen durchgeführt, um zu klären, inwieweit eine Schmelze-Beton-Wechselwirkung unter den Randbedingungen des Unfallablaufes in Block 1 des KKW Fukushima von den Rechencodes übereinstimmend prognostiziert wird. In Abgrenzung zu den Bedingungen in den anderen Blöcken, wo eine stärker

fragmentierte Schüttbett-Situation erwartet wird, wird in Block 1 die Präsenz eines kompakten Schmelzepools im Containment und eine entsprechende Betonzerstörung als wahrscheinlich angenommen. Nach Diskussion im Rahmen der Gruppe 3 in ARC-F wurden Randbedingungen für einen bereits zuvor gemeinsam durchgeführten Rechenfall (Exercise) zu den Vorgängen im Sumpf des Pedestal beim Unfallablauf in Fukushima, Block 1, unter MCCI-Bedingungen revidiert und die Simulationen mit den beteiligten Rechen-codes erneut durchgeführt. Die GRS beteiligte sich hier mit COCOSYS.

Die COCOSYS-Ergebnisse des Exercise, Teil 2, wurden an die Universität Tokio zur Auswertung übermittelt und die gemeinschaftlichen Ergebnisse wurden für die Konferenz NURETH-19 aufbereitet und diskutiert /PEL 22/. Es zeigte sich, dass die Randbedingung des Wärmeverlustes an der freien Oberfläche der Schmelze, welche Gegenstand der Revision im Hinblick auf die Vorgabe von Randbedingungen war, sehr bedeutsam für die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse der verschiedenen Codes ist. Die Codes zeigen mit gleicher Annahme dieses Wärmeverlustes einvernehmlich eine fortgesetzte Betonzerstörung über einen Zeitraum von 10 Tagen, während dessen die ins Containment freigesetzte Ex-Vessel-Kernschmelze ohne Wasserkühlung war. Nach aktuellem Stand der Auswertungen zum Unfallablauf im Containment von Block 1 wird davon ausgegangen, dass die Codes die tatsächliche Betonzerstörung überschätzen. Als mögliche Ursache für die Überschätzung werden verschiedene Parameter vermutet:

- Annahme über die Zerstörungstemperatur des Betons. Die Zerstörungstemperatur wurde in früheren Analysen mit dem MCCI-Modell in COCOSYS als sensibler Parameter für die Berechnung des aufgeschmolzenen Betonvolumens identifiziert /SPE 18/. Sie beeinflusst die absolute Ausdehnung der Betonzerstörung über zwei Mechanismen: Eine höhere Zerstörungstemperatur, die zuletzt basierend auf Analysen der MOCKA-Experimente beim KIT für Nachrechnungen mit COCOSYS empfohlen wurde, erhöht die berechnete Temperatur der Schmelze während des Betonaufschmelzens und damit den an der freien Oberfläche durch Strahlung abgeführten Teil der Wärmeverluste in Relation zu demjenigen Teil, der in das Aufschmelzen des Betons fließt. Andererseits können die Wärmeverluste auf dem erhöhten Temperaturniveau zusätzlich dazu führen, dass die Temperatur der Schmelze frühzeitiger unter die Zerstörungstemperatur abfällt und es damit zu einem frühzeitigen Stopp der Betonzerstörung kommt.

- Ein Teil der von der Schmelze an den Beton übertragenen Wärme kann über Wärmeleitung im Bereich einer sich kontinuierlich ausdehnenden Temperaturgrenzschicht, die der bewegten Grenzfläche zwischen Schmelze und Beton im Beton vorausseilt, abgeführt werden. Dieser abgeführte Wärmestrom steht nicht für das Aufschmelzen des Betons zur Verfügung.
- Annahme über die Nachzerfallswärmeleistung in der Schmelze

Im Projekt OECD-FACE, das als Nachfolger zu OECD-ARC-F im Juni 2022 gestartet ist, wird die Fachgruppe zu MCCI unter Task 1c fortgeführt und im Rahmen des BMUV-Vorhabens UMRS1609 „Analytische Untersuchungen zu den Unfallabläufen in Fukushima Daiichi im Rahmen des OECD/NEA Projektes FACE“ explizit mit fachlichen Arbeiten der GRS begleitet. Dabei wurden zunächst weitere Untersuchungen zu den oben genannten Einflussparametern auf die Prognose der Betonzerstörung im Fundamentbereich von Fukushima, Block 1, durchgeführt. Als konkrete Konsequenz für das MCCI-Modell in COCOSYS deutet sich an, dass für Unfallverläufe mit Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung im Bereich kleiner Wärmestromdichten eine Modellerweiterung für die Berücksichtigung der Wärmeleitung im Bereich der sich ausweitenden, thermischen Grenzschichtdicke im Beton benötigt wird. Eine Umsetzung dieser Modellerweiterung soll in einem zukünftigen Vorhaben erfolgen.

5 Aktualisierung von Kopplungen in COCOSYS bzw. AC²

5.1 Vervollständigung des Wärmedurchgangs an Strukturen zwischen Kühlkreislauf und Containment

5.1.1 Ausgangslage

In gekoppelten AC²-Analysen für Kernkraftwerke verbessert die Berücksichtigung des Energieaustausches zwischen Strukturoberflächen des Reaktorkühlkreislaufes und des umgebenden Containments die Genauigkeit der Simulationen. Um diesem Sachverhalt Rechnung zu tragen, wurde die Kopplung von Strukturen zwischen ATHLET und COCOSYS im Vorläufervorhaben erweitert /SPE 21/. Statt wie bisher auf der Seite des Containments feste Wärmeübergangskoeffizienten vorzugeben, können diese nun dynamisch berechnet werden. Dazu mussten sukzessiv Wärmeübertragungsmodelle für die Kopplung mit ATHLET ertüchtigt werden. Diese Ertüchtigung sieht vor, dass die Wärmeleitung in der Struktur nicht mehr in COCOSYS gerechnet wird, sondern in ATHLET, und dass die von ATHLET übermittelte Oberflächentemperatur der Struktur für die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten im jeweiligen Wärmeübergangsmodell in COCOSYS verwendet wird. Am Ende des Vorläufervorhabens war das für die Wärmeübergangsmodelle für Konvektion (FRC und FOC) und Kondensation (COD) möglich. Die Implementierung für das kombinierte Konvektions- und Kondensationsmodell CO1 und die Wand-Strahlungsmodelle WGR und WWR stand noch aus.

Im neuen Kopplungs-Konzept werden die wärmeleitenden Strukturen von Heat Conduction Objects (HCO) in ATHLET weiterhin in ATHLET simuliert, dort werden auch die erforderlichen geometrischen Daten und Materialeigenschaften definiert. Den Wärmeübergang vom Fluid in die Struktur auf der inneren "linken" Seite des Reaktorkühlkreislaufs berechnet ATHLET ebenso wie die Wärmeleitung durch die Struktur. Neu in dem Konzept ist, dass die HCO-Strukturen nicht mehr an eine COCOSYS-Zone, sondern an COCOSYS-Strukturen gekoppelt werden. In COCOSYS wird dann eine entsprechende Dummy-Struktur angelegt, bei der nur die äußere "rechte" Seite funktional ist, also keine Lösung von Wärmeleitungsgleichungen innerhalb der Struktur erfolgt. Somit müssen für diese Seite in der COCOSYS-Eingabe idealerweise nur das Wärmeübergangsmodell, der ATHLET-Name der HCO-Struktur und die verbundene Zone definiert werden (siehe auch Abb. 5.1). Der Wärmeübergangskoeffizient auf der rechten Seite wird dann durch COCOSYS unter Nutzung der von ATHLET ermittelten Wandoberflächentemperatur bestimmt und an ATHLET zurückgegeben. ATHLET wiederum berechnet mit diesem

Koeffizienten und der von COCOSYS übermittelten Fluidtemperatur einen entsprechenden Wärmestrom während des nächsten Rechenzeitschritts.

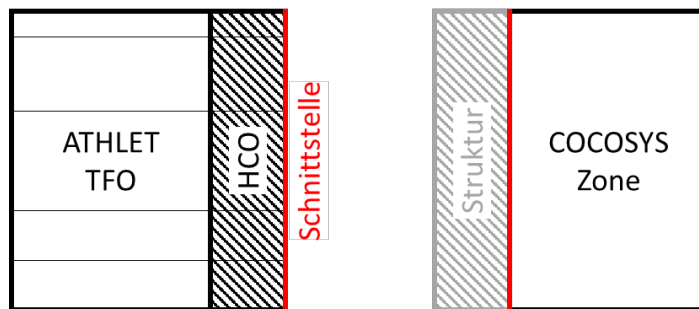


Abb. 5.1 Schema zur Kopplung eines ATHLET-HCO (bestehend aus 5 Kontrollvolumina) mit einer COCOSYS-Struktur

5.1.2 Durchgeführte Arbeiten

5.1.2.1 Verbesserung der Nutzerschnittstelle zur Vorgabe der Kopplung an Strukturen

Im Projektzeitraum wurden mögliche Eingabefehler und nicht notwendige Eingaben entfernt, um redundante Eingaben auf der ATHLET- und COCOSYS-Seite zu vermeiden. Letzteres betrifft zum Beispiel die Größen der Oberflächen der Strukturen. ATHLET wurde so erweitert, dass auch die Größe der Oberfläche einer gekoppelten Struktur in der Schnittstelle zur Verfügung steht. Diese Größen werden an COCOSYS übertragen und, neben THY, nun auch in den Modulen AFP und AFP2 verwendet. Eine Eingabe der Größe der Strukturfläche auf der Seite von COCOSYS ist nicht mehr erlaubt. Ferner wurde ATHLET um einen Kontrollmechanismus erweitert, der prüft, ob alle Teilelemente einer ATHLET-seitig als gekoppelt markierten Struktur auch auf der COCOSYS-Seite entsprechend definiert wurden. Anderenfalls würde auf der Seite von ATHLET ein HCO mit offener Schnittstelle existieren, das nicht mit Daten versorgt wird.

5.1.2.2 Kombiniertes Konvektions- and Kondensationsmodell CO1

Das Wärmeübergangsmodell CO1 liefert die Funktionalität, die vorher mit den Modellen FRC und FOC für freie bzw. erzwungene Konvektion und dem COD-Modell für Kondensation abgebildet werden konnte. Es soll diese Modellvarianten langfristig ersetzen.

Die für die Kopplung mit ATHLET vorgenommenen Änderungen wurden anhand eines einfachen Beispiels getestet. Das Beispiel ist so gestaltet, dass die reine COCOSYS-

Rechnung (COC) dieselben Ergebnisse liefert, wie die mit ATHLET gekoppelte Rechnung (AC²). So können beide Rechnungen direkt miteinander verglichen werden.

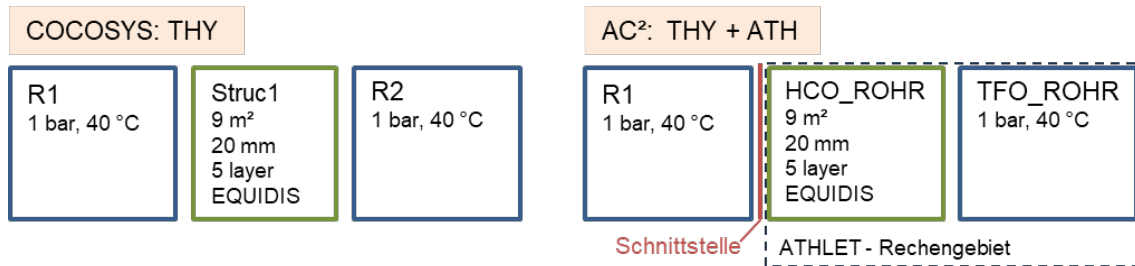


Abb. 5.2 Aufbau der Testdatensätze für die reine COCOSYS-Rechnung (links) und die mit ATHLET gekoppelte Rechnung (rechts)

Der COCOSYS-Datensatz besteht aus den zwei Zonen R1 und R2, die durch eine Struktur miteinander verbunden sind. Auf der Strukturseite mit der Zone R1 wird das CO1-Modell verwendet. Im Verlauf der Rechnung werden in dieser Zone durch Einspeisung von heißem Dampf Bedingungen herbeigeführt, die zur Kondensation an dieser Seite der Wandstruktur führen. Die Zone R2 dient als Wärmesenke, in die die Kondensationsenergie abgeführt wird. Auf dieser Seite der Wandstruktur wird ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient verwendet. Im Fall der mit ATHLET gekoppelten Rechnung werden die Zone R2 durch das TFO TFO_ROHR und die COCOSYS-Wandstruktur durch ein ATHLET-HCO ersetzt: HCO_ROHR. Auch für letzteres wird ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient auf der Seite des TFOs verwendet. Die Zone R2 und das TFO TFO_ROHR werden mit gleicher Größe, Gaszusammensetzung und Anfangsbedingungen definiert, um in beiden Rechnungen dieselben thermodynamischen Eigenschaften zu gewährleisten.

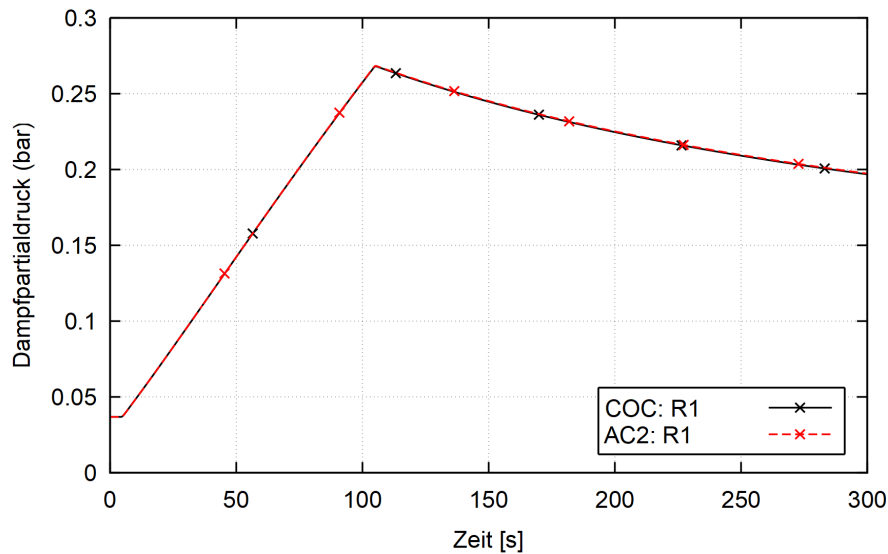


Abb. 5.3 Testrechnung mit CO1-Modell, COCOSYS vs. gekoppelt mit ATHLET
Dampfpartialdrücke in der Zone R1 aus einer Rechnung nur mit COCOSYS (COC) und aus einer Rechnung gekoppelt mit ATHLET (AC²).

Die Abbildungen Abb. 5.3 und Abb. 5.4 zeigen den thermodynamischen Zustand der Zone R1 anhand von Dampfpartialdruck und Gastemperatur. Die anfängliche Phase der Dampfeinspeisung erkennt man am Anstieg von Temperatur und Dampfpartialdruck. Nach Ende der Dampfeinspeisung wird der Verlauf der Temperatur und der des Dampfpartialdrucks allein durch Kondensation und Wärmeleitung durch die Struktur bzw. das HCO bestimmt, von diesem Zeitpunkt an sinken Dampfpartialdruck und Temperatur.

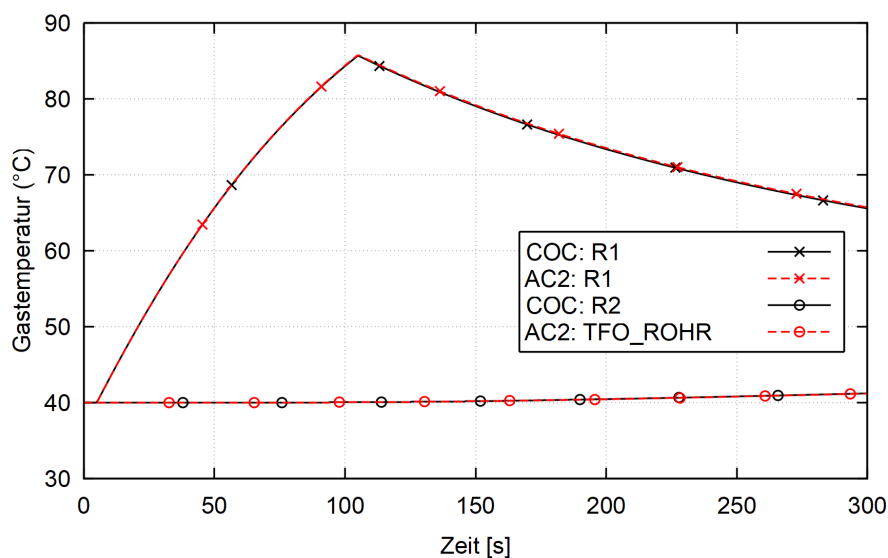


Abb. 5.4 Testrechnung mit CO1-Modell, COCOSYS vs. gekoppelt mit ATHLET
Temperaturen in der Gasphase in den Zonen R1 und R2 (bzw. dem ATHLET TFO TFO_ROHR) aus einer Rechnung nur mit COCOSYS (COC) und aus einer Rechnung gekoppelt mit ATHLET (AC²).

Auf der Seite von Zone R1 bestimmt in beiden Fällen das CO1-Modell den Wärmeübergang. Die gute Übereinstimmung der beiden Rechnungen zeigt die korrekte Implementierung der Kopplung für dieses Modell. Die hier gezeigten Ergebnisse sind dabei exemplarisch, andere Rechnungen bei anderen Gastemperaturen oder Sättigungsbedingungen in der Zone R1 zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung.

5.1.2.3 Strahlungsmodell WGR

Bei hohen Temperaturen im Reaktorsystem, wie sie bei Unfällen auftreten, gewinnt auch die Wärmestrahlung an Bedeutung. Im aktuellen Vorhaben wurden deshalb Arbeiten durchgeführt, um eines der Strahlungsmodelle aus COCOSYS auch für gekoppelte Strukturen mit ATHLET verfügbar zu machen.

Neben den bereits verfügbaren ausgewählten Korrelationen für den Wärmeübergang durch Konvektion und Kondensation wurde hier die Verwendung des WGR-Strahlungsmodells aus COCOSYS /ARN 23a/ für den Energieaustausch zwischen der Oberfläche eines HCO und der anliegenden Containment-Zone ermöglicht.

Im Quelltext des WGR-Modells in COCOSYS wurden dazu spezielle Anpassungen für gekoppelte HCO-Strukturen vorgenommen: im Unterschied zu "normalen" Containment-Strukturen wird nur eine virtuelle Bestimmung der ausgetauschten Wärmeströme vorgenommen, aus denen sich dann der Wärmeübergangskoeffizient durch Strahlung ergibt. Analog zu normalen Containment-Strukturen wird die Wärmestrahlung nur berücksichtigt, wenn die HCO-Oberfläche mit dem Atmosphären-Teil einer Zone verbunden ist (GAS-Zonenteil). Zur Berechnung der Wärmestrahlung wird der materialabhängige Emissionsgrad der Oberfläche im Containment benötigt. Als Dummy-Struktur ist dieser nicht automatisch mit den allgemeinen COCOSYS-Materialeigenschaften verknüpft und muss deshalb in der Eingabe für die Oberfläche einer HCO-Struktur vorgegeben werden. Hier ist ein Emissionswert oder alternativ der Verweis auf den Namen eines COCOSYS-Materials möglich.

Die Überprüfung des für HCO-Strukturen verfügbar gemachten WGR-Modells erfolgte anhand eines einfachen Testbeispiels mit 2 Zonen (Abb. 5.5) im Vergleich einer COCOSYS- mit einer AC²-Rechnung. Das Testbeispiel ist bewusst einfach gehalten, um möglichst gleiche Ergebnisse zu erhalten. Beide Zonen (R2 bzw. TFO_ROHR und R1) sind über eine Struktur (Struc1 bzw. HCO_ROHR) thermisch gekoppelt. Die Struktur ist in COCOSYS und in AC² (d. h. HCO in ATHLET) als Platte mit 5 äquidistanten Schichten definiert. Die Atmosphärentemperatur in Zone R2 ist mit 250 °C angesetzt. Der Wärmeübergang an der linken Oberflächenseite der Struktur Struc1 erfolgt mit einem hoch angenommenen konstanten Koeffizienten von 1 000 W/(m²K). Auf der rechten Seite wird nur Wärmestrahlung (Modell WGR) unterstellt. Da im Standardfall die Berechnung des Anfangs-Temperaturprofils über eine Struktur in COCOSYS und ATHLET nicht identisch ist, wurde in der COCOSYS-Rechnung das von ATHLET ermittelte Profil in Struc1 per Eingabeoption INITIAL vorgegeben, um Einflüsse auf die Berechnung des Strahlungsaustausches zu vermeiden.

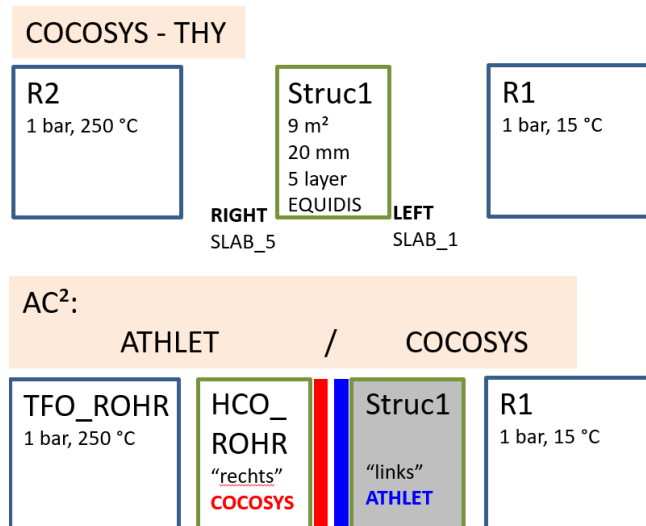


Abb. 5.5 2-Zonen – Testbeispiel für COCOSYS bzw. AC²

Die Ergebnisse beider Simulationen sind in den Abb. 5.6 – Abb. 5.8 verglichen. Aus den Bildern ist ersichtlich, dass der berechnete Wärmeübergangskoeffizient auf der Außenseite der Struktur S1 = Struc1 in Zone R1 in beiden Simulationen im Prinzip identisch ist (Abb. 5.6). Damit sind dann auch der in R1 abgestrahlte Wärmestrom (Abb. 5.7) und die Erhöhung der Atmosphärentemperatur in R1 (Abb. 5.8) gleich. Dies belegt die korrekte Implementierung des WGR-Strahlungsmodells für HCO-Strukturen.

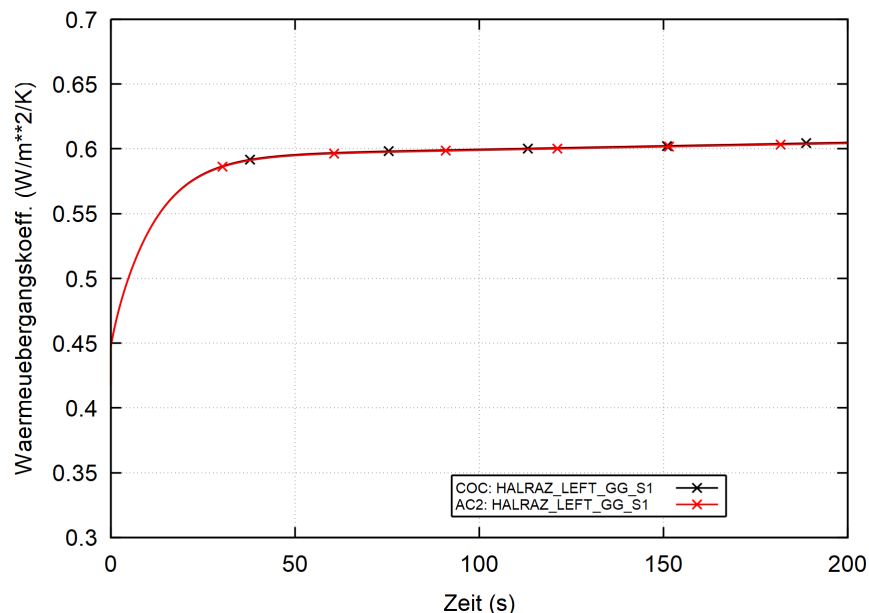


Abb. 5.6 Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC²
 Wärmeübergangskoeffizient durch Strahlung auf der Außenseite der Struktur S1 in Zone R1.

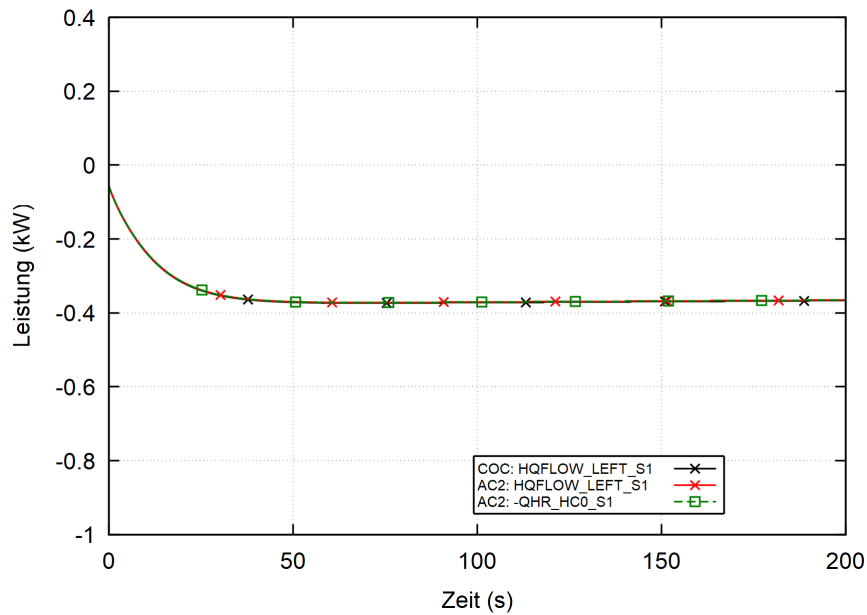


Abb. 5.7 Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC²
Übertragene Strahlungsleistung auf der Außenseite der Struktur S1 in Zone R1.

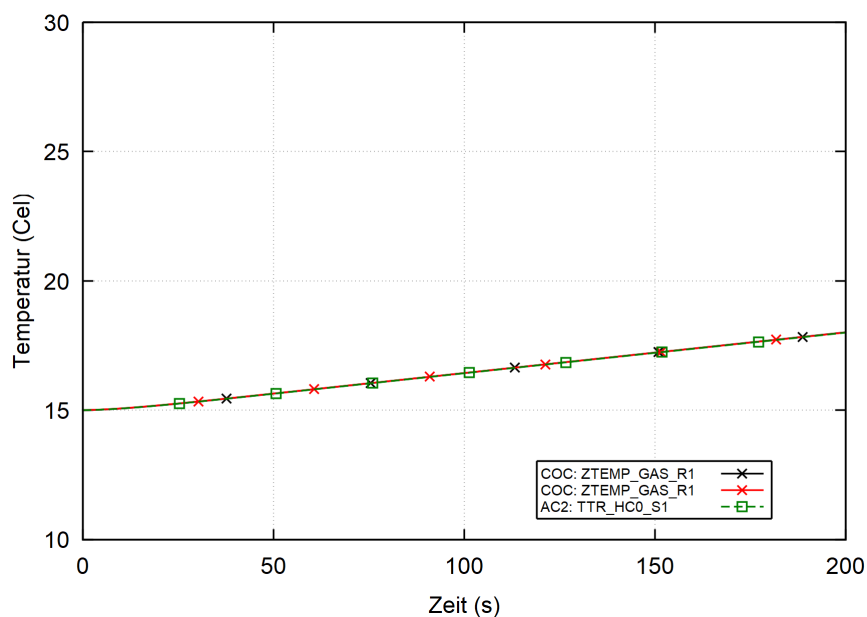


Abb. 5.8 Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC²
Atmosphärentemperatur in Zone R1.

Eine detailliertere Auflösung der in beiden Simulationen berechneten Schichttemperaturen ist in Abb. 5.9 gegeben. Es ist zu sehen, dass die Schichttemperaturen in der AC²-Simulation generell um ca. 0,2 K niedriger liegen als in der COCOSYS-Rechnung. Das gleiche trifft für die Temperatur der Oberfläche in Zone R1 zu. Eingehendere Untersuchungen zeigten, dass dies nicht auf einen Implementierungsfehler zurückzuführen ist, sondern auf die Kopplung zwischen ATHLET und COCOSYS über die Makro-

Schrittweite von AC². Im Gegensatz zu COCOSYS, wo im THY-Hauptmodul die Differentialgleichungen in einer Matrix implizit mit den Zonengleichungen gelöst werden, erfolgt dies in AC² mit über die Makro-Schrittweite jeweils konstanten Randbedingungen. In der Testrechnung führt dies zu den etwas geringeren Temperaturen (Vergleiche schwarze mit roter Kurve in Abb. 5.10). In einem AC²-Testlauf mit einer reduzierten Makroschrittweite (von 0,5 auf 0,1 s) liegt die AC²-Lösung (blaue Kurve) damit näher an COCOSYS. Die Reduzierung der Makro-Schrittweite geht aber deutlich zu Lasten der Rechenzeit. Zur Bewertung dieser Verbesserung wurde dann in einem COCOSYS-Testlauf die Lösung der Wärmeleitgleichungen auf ein Zeitschritt-nachgezogenes Verfahren geändert (FEBE_HECU Option /ARN 23a/) mit einer maximalen Schrittweite von 0,5 s, das der AC²-Kopplung entspricht. Die berechnete Schichttemperatur (orange Kurve in Abb. 5.10) liegt noch etwas unter dem AC²-Ergebnis und bestätigt damit, dass die Art der Kopplung Ursache für die Unterschiede ist.

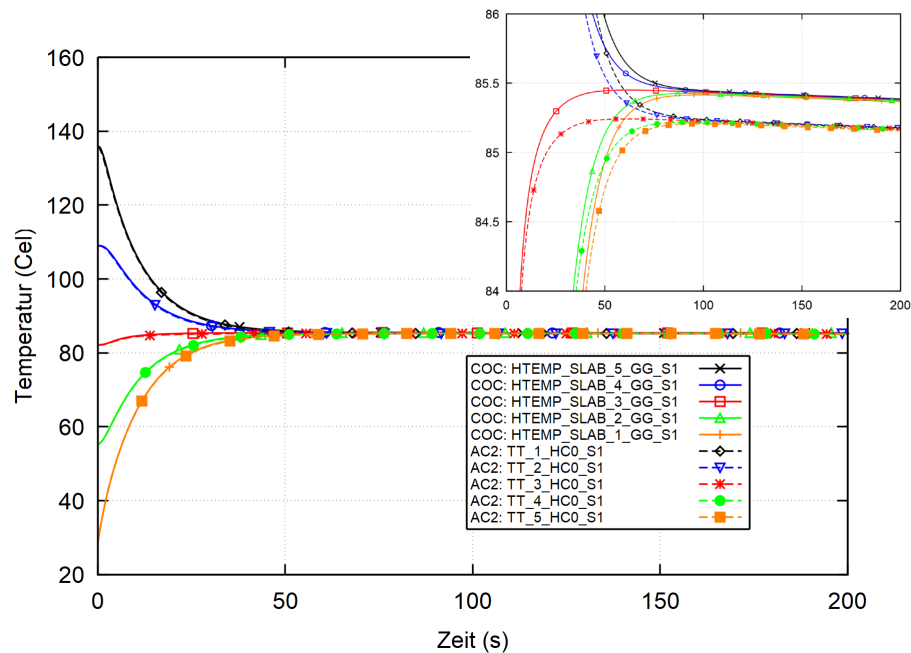


Abb. 5.9 Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC², Temperaturen der 5 Materialschichten in Struktur S1

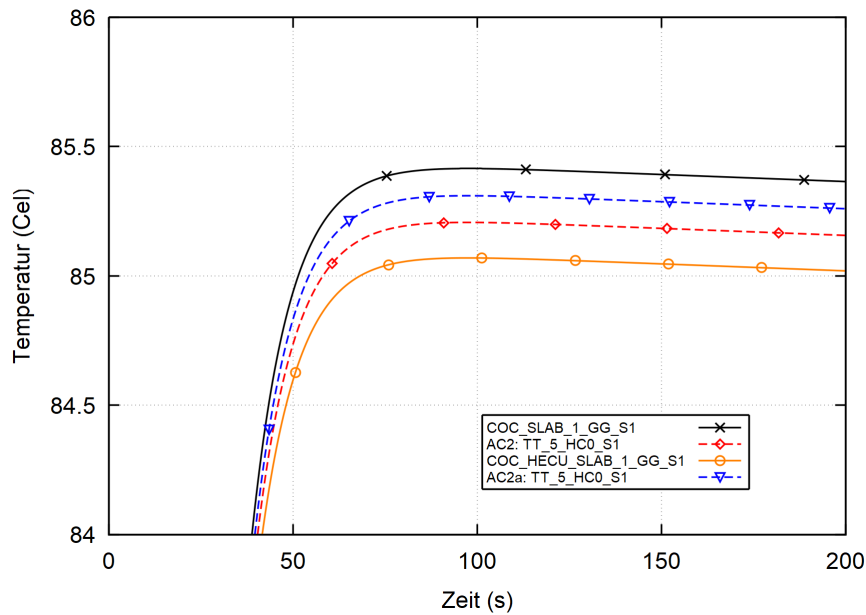


Abb. 5.10 Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC², Einfluss der Kopplung auf die berechnete Temperatur in der äußersten Materialschicht

Die Modellerweiterung sowie der Testdatensatz sind über das Quellcodeverwaltungssystem GitLab in AC² eingebracht und stehen mit dem nächsten Release AC²-2023.2 Anwendern zur Verfügung.

Das WGR-Strahlungsmodell kann derzeit nicht für HCO-Strukturen in Verbindung mit der Struktursegmentierung (dynamische Unterteilung der Fläche entsprechend Wasserhöhenstand) angewendet werden. Hier sind, ebenso für die anderen gekoppelten Modelle, generelle Erweiterungen in der Schnittstelle/Datenübergabe zwischen ATHLET und COCOSYS erforderlich. Im Weiteren ist auch das zweite COCOSYS-Strahlungsmodell WWR (Wand-Wand-Strahlung) inklusive der vom Nutzer definierten Sichtfaktoren für HCO-gekoppelte Strukturen zwischen ATHLET und COCOSYS verfügbar zu machen.

5.2 Kopplungen mit ATHLET-CD entsprechend dem Fortschritt des Lower-Plenum-Modells LHEAD

Es existieren zwei verschiedene Möglichkeiten der Simulation des unteren Plenums im Modul ATHLET-CD, die sich bezüglich der Anbindung an ATHLET bzw. ATHLET-CD unterscheiden. Das erste im Modul ATHLET-CD verfügbare Modell zur Modellierung von Vorgängen im unteren Plenum nach Verlagerung von Schmelze innerhalb des Reaktor-druckbehälters ist AIDA. AIDA ist in der Lage, den Energiefluss aus dem Schmelzepool

nach oben (z. B. in das Fluid in einem Siedewasserreaktor) oder durch die Behälterwand zu berechnen und somit auch die Veränderung der Temperatur des Schmelzepools bis hin zum Versagen des RDB und dem Austrag der Schmelze in den Sicherheitsbehälter zu simulieren. Weil AIDA ein an ATHLET angekoppelter Code ist, muss der Anwender bei der Erstellung des Datensatzes für beide Modelle Verständnis entwickeln und besondere Sorgfalt aufwenden. Ohne dies kann es z. B. passieren, dass die Energie, die von der Schmelze nach oben in die Atmosphäre bzw. das Kühlmedium im RDB oder durch die Behälterwand zur Seite abgegeben wird, aufgrund von Anwenderfehlern nicht weiter berücksichtigt wird. Weitere Problempunkte sind, dass die Repräsentationen der Wand vom RDB-Boden in ATHLET und die der entsprechenden Struktur in AIDA nicht identisch sind und dass die Verlagerung von Schmelze in das untere Plenum in ATHLET kein Volumen einnimmt.

Daher wurde vom CD-Entwicklungsteam ein neues Modell mit dem Namen LHEAD entwickelt, das ein integraler Bestandteil von ATHLET-CD ist, und von daher deutlich stärker mit der Berechnung der Kernzerstörung wechselwirkt.

In diesem Projekt wurden Arbeiten durchgeführt, um seitens COCOSYS die Anbindung von LHEAD in gekoppelten Rechnungen mit AC² inklusive der Unfall-Phänomenologie beim Durchschmelzen des RDB und einem Austrag von Schmelze in das Containment mit nachfolgender Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) zu unterstützen. Der Datenaustausch zwischen LHEAD und COCOSYS erfolgt über eine Schnittstelle, die analog zu derjenigen für die Kopplung zwischen COCOSYS und AIDA aufgebaut ist: Es werden im Wesentlichen folgende Daten als Funktion der Zeit übertragen:

- Massenstrom der Schmelze aus dem RDB
- Temperatur der freigesetzten Schmelze
- Zusammensetzung des Massenstroms nach Isotopen
- Nachzerfallswärmeleistung der freigesetzten Schmelze

Zielsetzung der weiteren Arbeiten im Folgenden war, die Funktionalität dieser Kopplung mit LHEAD zu überprüfen.

5.2.1 Erprobung von LHEAD in gekoppelten Anlagen-Datensätzen

Zu diesem Zwecke wurden zunächst einmal bestehende gekoppelte Datensätze im Anlagenmaßstab, die für die Verwendung des Lower-Head-Modells AIDA erstellt worden waren, auf die Verwendung von LHEAD umgestellt. Betrachtet wurden Datensätze für einen DWR (Konvoi) und für einen SWR (Fukushima). Gerade aufgrund des tieferen Wasserpools, der zum Zeitpunkt der Verlagerung im unteren Plenum eines SWR vorhanden sein kann, können sich die Phänomene im Vergleich zum DWR deutlich unterscheiden.

Die Umstellung der Datensätze erfolgte in drei Schritten:

- AIDA vollständig aus dem Datensatz entfernen.
- Die notwendigen Eingaben für LHEAD vornehmen: Volumina, die das untere Plenum darstellen, und Strukturen, die dann mit der Schmelze wechselwirken, müssen angegeben werden. Zusätzlich werden noch Angaben bzgl. der Feinheit der Simulation gemacht. Für jeden Brennstab wird angegeben, wohin das Material verlagert wird.
- Für die Strukturen des unteren Plenums müssen Versagenskriterien definiert werden. Die thermische und mechanische Belastung einer Struktur kann in der Simulation ein RDB-Versagen im Bereich des unteren Plenums auslösen.

Allerdings zeigten sich in ersten Testrechnungen mit beiden auf LHEAD umgestellten Datensätzen unerklärliche Ergebnisse:

So fiel beispielsweise im Konvoi-Datensatz die Temperatur im unteren Plenum nach der Einspeisung von Wasser aus den Druckspeichern (bis ca. 12 200 s) stark ab (siehe Abb. 5.11), aber auch nach Ende der Wassereinspeisung stieg die Temperatur dort nicht wieder an. Dafür heizte sich die Schmelze immer weiter auf (siehe Abb. 5.12).

Bei der Verwendung des LHEAD-Modells im Fukushima-Datensatz kam es bei 288 760 s zu einem unrealistisch hohen kurzen Energieeintrag aus der Schmelze in das untere Plenum (etwas über 20 GW, Abb. 5.13), ohne dass sich die Temperatur der Schmelze änderte; diese stieg kurz danach sogar kurzzeitig um mehr als 160 °C an, um dann wieder auf ca. 2 360 °C zu fallen (Abb. 5.14). Auch wenn diese Prozesse die nötige Zeitschrittweite in der Testrechnung so weit reduzierten, dass die Rechnung kurz danach aufgrund zu kleiner Zeitschrittweite beendet wurde, zeigten die Ergebnisse der

Testrechnung im Zeitbereich davor schon ein nicht zu erwartendes Verhalten: Bis 288 734 s wurde eine Wärmestromleistung von ca. 4,5 MW aus der Schmelze an das Fluid im unteren Plenum übertragen, dann kehrt sich der Energiefluss abrupt um, und es fließt Wärme aus dem Fluid in die Schmelze.

Weitere Untersuchungen dazu sind in diesem Vorhaben nicht durchgeführt worden, da die Ursachen für das nicht-erwartete Verhalten der Rechenergebnisse im Bereich des Einzel-Modells LHEAD liegen und dessen Verbesserung Gegenstand eines anderen Projekts der GRS (Entwicklung von ATHLET-CD) ist. Die Entwickler von ATHLET-CD wurden entsprechend informiert.

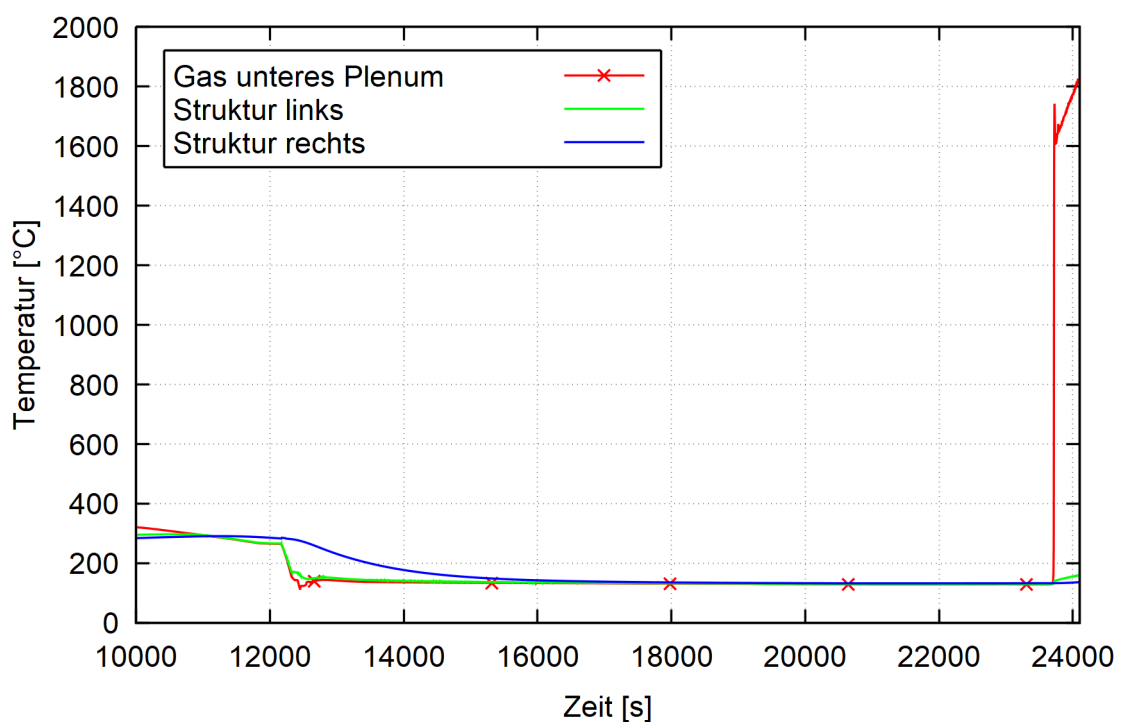


Abb. 5.11 Entwicklung der Gas- und Strukturtemperaturen im unteren Plenum bei Verwendung des LHEAD-Modells im Konvoi-Datensatz

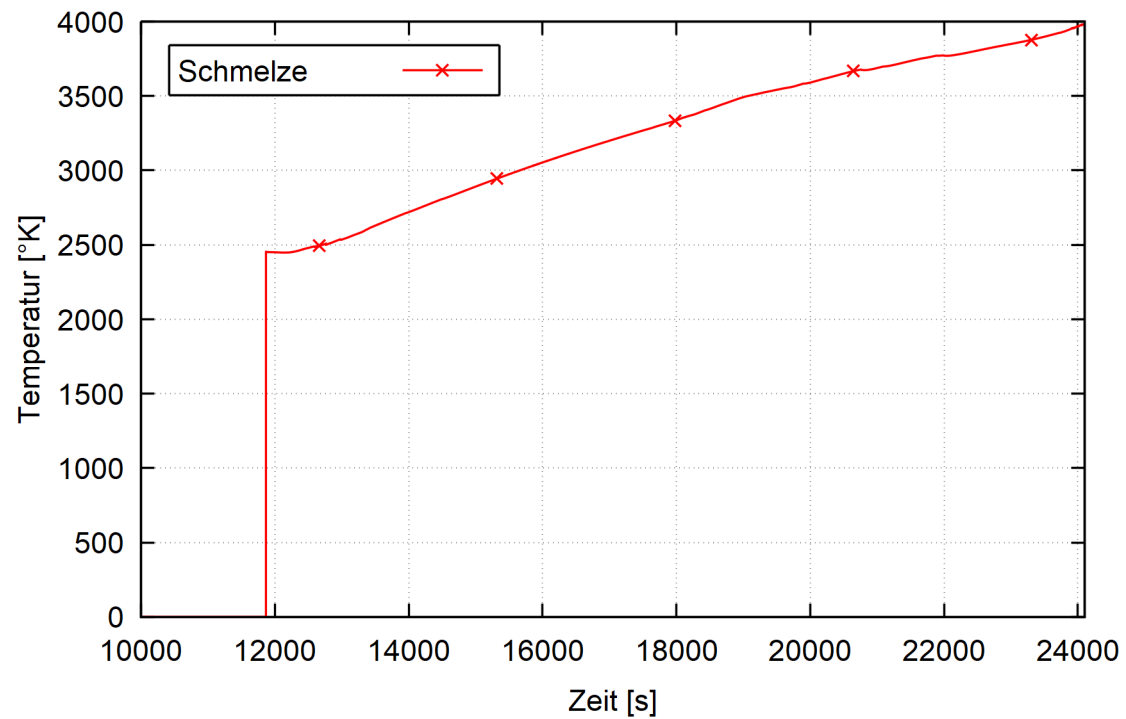


Abb. 5.12 Zeitlicher Verlauf der Schmelzetemperatur im unteren Plenum bei Verwendung des LHEAD-Modells im Konvoi-Datensatz

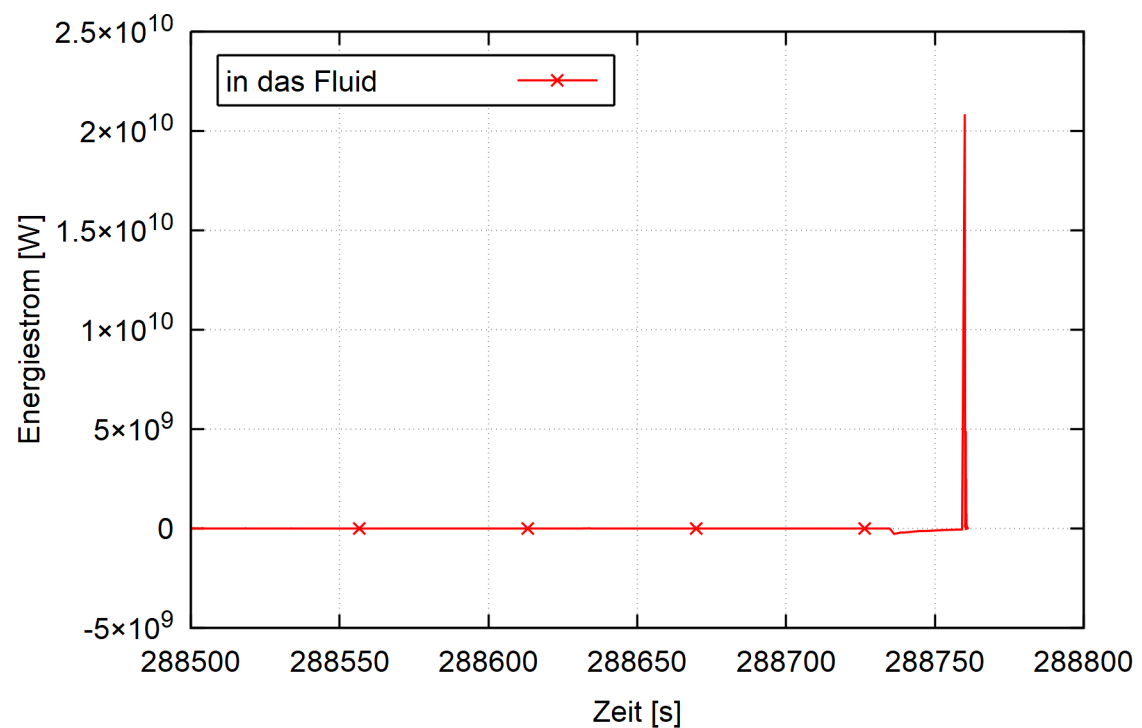


Abb. 5.13 Energiefluss von der Schmelze ins Fluid im Fukushima-LHEAD-Test

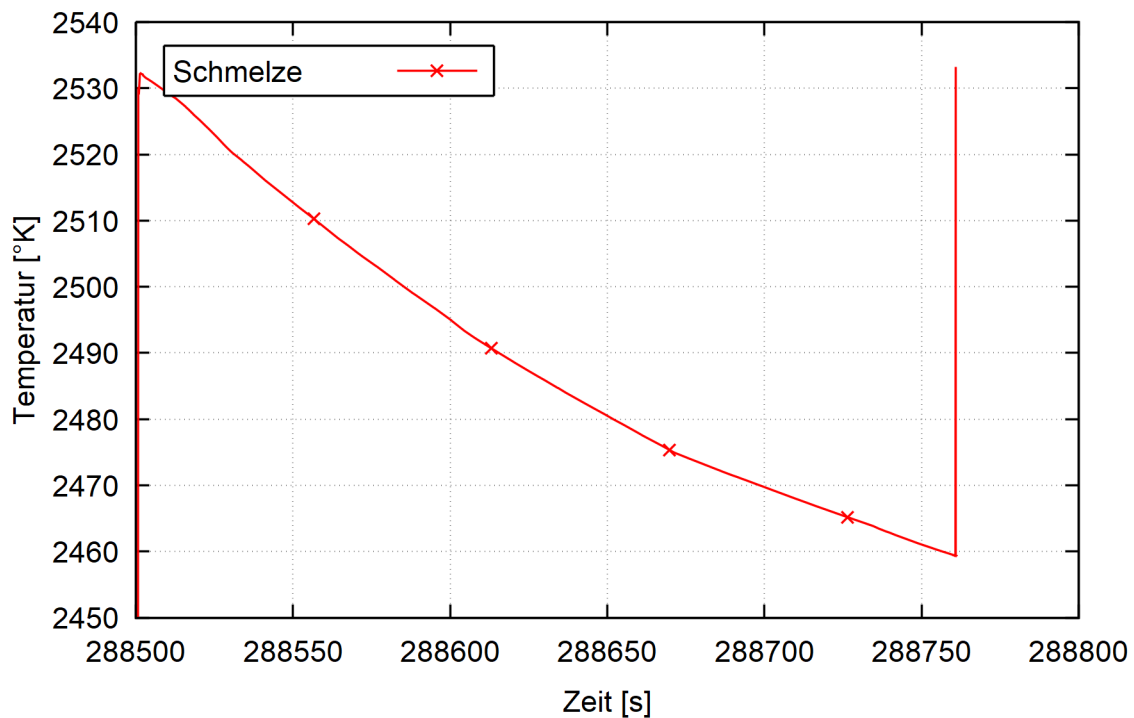


Abb. 5.14 Temperaturverlauf der Schmelze im Fukushima-LHEAD-Test

5.2.2 Erprobung und Ertüchtigung für einen schnell laufenden gekoppelten Datensatz mit Kernschmelzen

Vielmehr wurde die Korrektheit und Plausibilität im Hinblick auf die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS an anderen Datensätzen für eine gekoppelte Rechnung weiter untersucht und ertüchtigt. Diese Datensätze sind künstlich zu Testzwecken auf ein schnelles Laufzeitverhalten getrimmt worden, um alle erwarteten Phänomene bezüglich der Kopplung mit COCOSYS bei RDB-Versagen und Schmelzefreisetzung ins Containment in der Simulation abzudecken.

Es wurden folgende weitere Datensätze für die gekoppelte Simulation von Schmelzefreisetzung aus dem RDB erstellt bzw. untersucht: Zum einen ein akademischer Testrechenfall ähnlich des in dem internen Qualitätssicherungsverfahren GitLab-CI hinterlegten S8-Orest-Rechenfalls, der in der gekoppelten Rechnung mit ATHLET-CD-COCOSYS zu einem unterstellten raschen Kernschmelzen und entsprechender frühzeitiger Freisetzung von Kernschmelze in das Containment führt, sowie ein auf der Simulation des TMI-2-Unfalls beruhender Datensatz, in dem Parameter modifiziert wurden, um ein Versagen des RDB zu bewirken und geeignete Bedingungen für die Untersuchung der Kopplung mit COCOSYS hinsichtlich des Schmelzeaustrags zu erhalten.

Dabei wurden weiterhin kleinere Probleme zum Verständnis bzw. zur Plausibilität des LHEAD-Modells identifiziert, die mit dem ATHLET-CD-Entwicklerteam diskutiert wurden. Entsprechende Fehlermeldungen wurden im GitLab, der IT-Plattform für das Management der Softwareentwicklung und der Versionsverwaltung in der GRS, angelegt und vom ATHLET-CD-Entwicklerteam bearbeitet und gelöst. Dazu wurde vereinbart, dass seitens ATHLET-CD auch im Falle der Verwendung von LHEAD anstelle von AIDA sichergestellt wird, dass ein Satz entsprechender Variablen in der Kopplungsschnittstelle zu COCOSYS (vgl. Einleitung zu Abschnitt 5.2) existiert, aktualisiert und an COCOSYS übermittelt wird, der die Bedingungen der Schmelzefreisetzung ins Containment nach RDB-Versagen charakterisiert. In der Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS wurde zu diesem Zeitpunkt bereits ein solcher Variablensatz von AIDA in der Schnittstelle bereitgestellt und von COCOSYS während der Rechnung ausgewertet. Nachdem vom CD-Entwicklerteam entsprechende Änderungen nachgezogen wurden, stehen für die Kopplung jetzt alle notwendigen Daten für die Übertragung auch dann zur Verfügung, wenn in ATHLET-CD LHEAD anstelle von AIDA verwendet wird. Notwendige Änderungen am COCOSYS-Code für den Übertrag der Schmelze wurden umgesetzt und sind im Hauptentwicklungszweig sowie im Release AC²-2023.0 verfügbar.

Die Funktionsfähigkeit des Schmelzeübertrags in einer gekoppelten Rechnung zwischen COCOSYS und dem Modell LHEAD in ATHLET-CD wurde mit einer Rechnung eines auf dem TMI-2-Unfall beruhenden Datensatzes erfolgreich überprüft. Mit dem verwendeten Datensatz kommt es in der gekoppelten Rechnung nach ca. 25 200 s zu einem Massenausstrag von etwa 100 t Schmelze aus dem RDB in die Reaktorgrube (Cavity 1) im Containment. Nach einer gewissen Zeitdauer der Wechselwirkung zwischen Schmelze und Beton in der Cavity 1 wird die Wand zwischen Cavity 1 und einem benachbarten Raum (Cavity 2) im Containment durchgeschmolzen, so dass ein Teil der Schmelze dorthin überfließt. Abb. 5.15 zeigt die in Cavity 1 und Cavity 2 bilanzierten Schmelzemassen sowie den integralen Austrag aus dem Modell LHEAD.

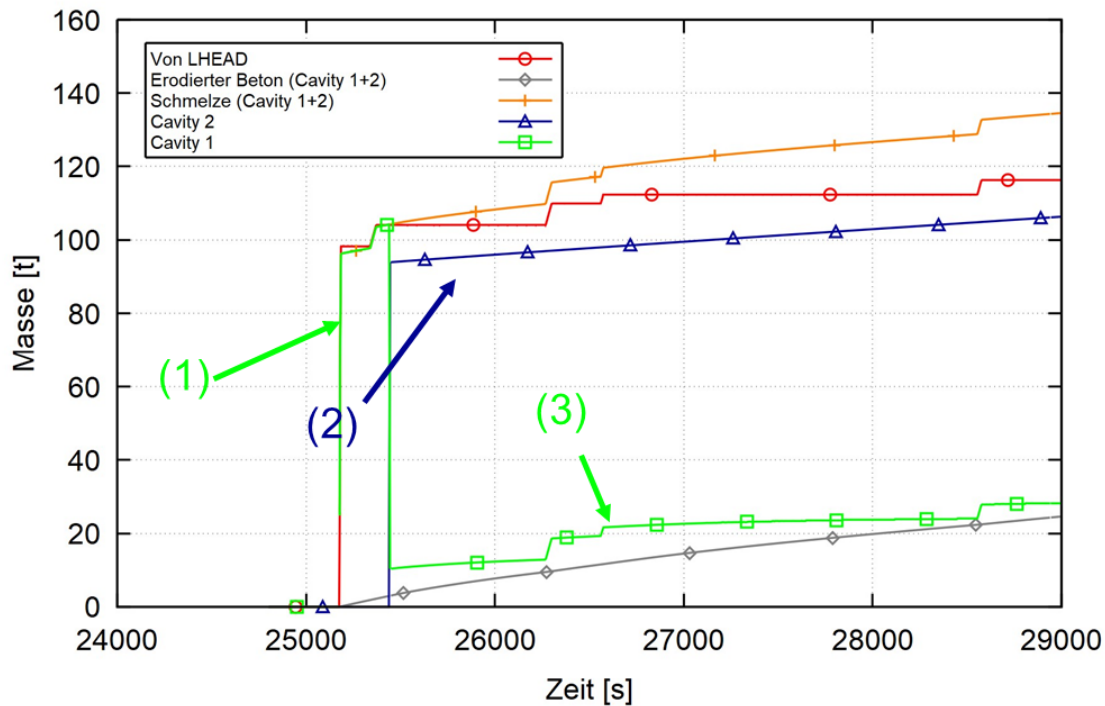


Abb. 5.15 Schmelzefreisetzung ins Containment in gekoppelter Rechnung zwischen LHEAD und COCOSYS

(1) Schmelze wird zuerst in Cavity 1 freigesetzt. (2) Nach Erosion bis zur Grenze von Cavity 1 wird ein Teil nach Cavity 2 übertragen. (3) Schmelze läuft aus LHEAD in Cavity 1 nach.

5.3 Nutzung einheitlicher Module in AC²

Die Nutzung konsistenter Daten und Methoden in den drei Codes COCOSYS, ATHLET und ATHLET-CD des AC²-Programms ist sehr wichtig, um Fehler bei der Stoffwert- oder Energie-Übertragung zwischen Codes zu vermeiden.

5.3.1 Anbindung der Stoffwertpakete für Wasser/Dampf der Hochschule Zittau-Görlitz in COCOSYS

Die Hochschule Zittau-Görlitz (HSZG) entwickelt für AC² fortschrittliche Berechnungsmethoden für die wärmetechnischen Stoffeigenschaften von Wasser und Wasserdampf. Die von HSZG entwickelte Bibliothek zu Stoffwerten von Wasser und Wasserdampf kann in ATHLET verwendet werden. Um die Erweiterung von COCOSYS zur Nutzung dieses Stoffwertpaketes einzuleiten, wurde eine aktuelle Quellcode-Version von COCOSYS auf dem externen GitLab-Server der GRS der HSZG zur Verfügung gestellt. Nach Durchsicht des Codes durch die HSZG und entsprechender Rücksprache mit GRS wurden nötige Vorarbeiten durch die GRS zum Aufräumen des Codes und sukzessiver

Auslagerung der Stoffwertberechnungen auf eine zentrale Stelle durchgeführt. Zur Überprüfung der geänderten COCOSYS-Version wurde ein einfaches thermohydraulisches Testbeispiel generiert (mit einer Wärmequelle im Wasservolumen und nachfolgender Verdampfung, Kondensation und Rücklauf des Kondensats). Zahlreiche Stoffwertberechnungen wurden umstrukturiert und mit einer zentralisierten Schnittstelle (Interface) verbunden. Der aktuelle Entwicklungsstand ermöglicht eine Umschaltung von bisherigen Korrelationen für Stoffwertberechnungen auf das Stoffwertpaket der Hochschule Zittau-Görlitz für den Zweck grundlegender thermohydraulischer Rechnungen und entsprechender erster Validierung. Datensätze für die Überprüfung/Validierung der neuen Stoffwerte wurden HSZG bereitgestellt. Der Einbau in die vorbereitete Codeversion und eine erste Validierung erfolgt durch die HSZG.

5.3.2 Implementierung des HDF5-Ausgabeformats in COCOSYS

Das wissenschaftliche Datenformat HDF5 ermöglicht das effiziente und optimierte Speichern und Lesen von wissenschaftlichen Dateien /HDF 24/. HDF ist die Abkürzung für **H**ierarchical **D**ata **F**ormat.

Die zwei Codes ATHLET und ATHLET-CD im Programmpaket AC² unterstützen eine Ausgabe der Simulationsergebnisse im HDF5-Format entweder zusätzlich (zu den alten *.pd-Dateien) oder als alleinige Ausgabe. Das neue Visualisierungsprogramm ATLAS-neo ist ein Bestandteil des Programmpakets AC² und visualisiert aktuell ausschließlich HDF5-Dateien. Die Auswertung mittels anderer verfügbarer HDF5-Viewer ist ebenso möglich.

COCOSYS ist um die optionale Datenausgabe im HDF5-Format erweitert worden. Alle hierfür ergänzten relevanten Daten und Methoden sind in einem neuen FORTRAN-Modul HDF5_OUT bereitgestellt worden. Der sogenannte Plot-Vektor enthält alle benötigten Ausgabedaten als Funktion der Zeit (Zeitreihen). In COCOSYS wird in dem Unterprogramm, in dem die Referenzliste der Variablen für den Aufbau des Plot-Vektors erstellt wird, das neue Unterprogramm 'check_table' aufgerufen, um eine bestimmte COCOSYS-Variable, die als Teil des Plot-Vektors identifiziert ist, innerhalb einer internen Darstellung aller HDF5-Ausgabetabellen in HDF5_OUT zu registrieren. Jede Variable ist danach Teil einer solchen Tabelle. Diese Tabellen werden in einer dynamischen Liste gespeichert. Jede Tabelle wird durch einen HDF5-Pfad definiert und enthält eine Liste von Variablen, beginnend mit der Zeit als erster Variable, und einen entsprechenden Index für jede Variable in dem Plot-Vektor. Wenn nun zu jedem Ausgabezeitpunkt

(optional) HDF5-Ausgabedaten geschrieben werden, wird die neue Funktion 'write_rows' aufgerufen und schreibt für jede Tabelle den neuen Inhalt (neuer Zeitschritt und neue Werte der Variablen, wie sie aus dem Plot-Vektor entnommen werden) ergänzend in die bereits vorhandene HDF5-Datei. Vorher wird jedoch geprüft, ob die Tabellen bereits in der HDF5-Datei angelegt worden sind. Das Schreiben der Daten selbst erfolgt technisch auf die übliche Weise, um Daten an bestehende HDF5-Datensätze anzuhängen.

Die HDF5-Ausgabe kann benutzergesteuert durch additiven Gebrauch des Schlüsselwortes HDF5 im Eingabebereich für die Plot-Option (CPSTY) entweder einzeln oder zusätzlich zum bisherigen Datenformat, der sogenannten *.plt-Datei, erfolgen. Die Funktionalität wurde für kleine Beispiel-Datensätze sowie große, komplexere Datensätze für Kernkraftwerksanlagen verifiziert. Die Kompatibilität der COCOSYS-Ausgaben mit ATLASneo wurde überprüft und bestätigt.

Die Implementierung dieses neuen Datenformats wurde mit dem alten Ausgabeformat verglichen. Aufgrund des nicht unbeträchtlichen Mehraufwandes an Verarbeitungsschritten bei dem Anhängen von Zeitschritten an bestehende HDF5-Datensätze im Vergleich zu anderen Plot-Optionen, insbesondere aber aufgrund der Vielzahl von zu erstellenden bzw. zu aktualisierenden Tabellen, ist die HDF5-Ausgabe aktuell – abhängig von dem Rechenfall – mehr oder weniger deutlich verlangsamt gegenüber der Standard-Option. Hier gibt es noch Verbesserungspotential. Dieses technische Design, wie in COCOSYS die auszugebenen Dateien gespeichert werden, ist sehr stark in Anlehnung an die originale Ausgabestrategie (im Datenformat *.plt) angelehnt. Um die Ausgabe von HDF5 zu ermöglichen, wird intern eine Umstrukturierung von Dateien durchgeführt. Deswegen benötigt die HDF5-Ausgabe aktuell mehr Arbeitsspeicher (RAM) und mehr Zeit. Für kleine Datensätze sind die größeren Anforderungen der HDF5-Ausgabe nicht gravierend. Bei großen Datensätzen wie für Kernkraftwerksanlagen wird bis zu 100 % mehr Zeit für die Durchführung einer Simulation benötigt (mit regelmäßiger Speicherung der Ergebnisse) als im Vergleich unter Verwendung des originalen Datenformats *.plt. Weitere Optimierungen sind notwendig, um die Anwendung des HDF5-Formats für große Datensätze praktikabel darzustellen.

6 Querschnittsaktivitäten und Benutzerberatung

6.1 Mitwirkung in internationalen Arbeitsgruppen und Aktivitäten

6.1.1 OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS, IPRESKA

Für die Erweiterung der Modellierung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens in AFP2 war die Beteiligung an den Projekten OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS sowie am IPRESKA in-kind-Projekt von besonderer Bedeutung.

Das Themengebiet des Pool-Scrubbing ist dabei sowohl in THEMIS als auch in BCAPFIS und IPRESKA bearbeitet worden. In IPRESKA beteiligen sich alle Organisationen mit eigenen Mitteln an Fragestellungen zum Pool-Scrubbing aus den Bereichen neuester Experimente, der Modellierung in CFD-Codes als auch der Ableitung von einfachen Korrelationen, die in Systemcodes wie COCOSYS benutzt werden können. So ist auf experimenteller Basis eine Datenbank von in der Vergangenheit durchgeführten Experimenten erstellt worden mit einer Bewertung, inwieweit diese für die Modellbildung wertvoll sind. Auf theoretischer Seite hat sich der Fokus in der Entwicklung von Modellen in Richtung CFD-Codes verschoben, hieran arbeiten international vor allem universitäre Einrichtungen. International scheint es ein verstärktes Interesse an der Fortführung dieser Arbeiten zu geben. Allerdings ist es bis heute nicht gelungen, vollumfängliche Korrelationen für die Verwendung in Systemcodes abzuleiten. Daher ist eine direkte Umsetzung in COCOSYS derzeit nicht absehbar, womit hier das SPARC-Modul weiterhin die einzige Option der Modellierung bleibt. Zum aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik wird in der OECD-Arbeitsgruppe BCAPFIS ein noch zu veröffentlichender NEA-Bericht erstellt. Die GRS hat hier an allen Kapiteln mitgearbeitet, und für das Kapitel über die theoretischen Beschreibungen die Leitungsrolle übernommen. Im Rahmen des THEMIS-Projekts sind die WH-Versuche zur Spaltproduktrückhaltung in Wasserpools begleitet worden, in denen insbesondere das Verhalten des gesamten Versuchsbehälters untersucht wurde, um nicht nur den Einfluss der Wasservorlage zu berücksichtigen, sondern das vollständige Bild in Pool-Scrubbing-Experimenten zu erfassen. So zeigte sich, dass die Berücksichtigung der Aufenthaltszeiten über der Pooloberfläche zu einem geänderten Partikelspektrum bei der Messung in der Filterstrecke außerhalb des Behälters führt.

In ESTER wird die Remobilisierung von abgelagerten Spaltprodukten im Kühlkreislauf als auch im Containment in den Anlagen VERDON, CHIP und EPICUR untersucht. Für

die Entwicklung der Containmentmodelle sind vor allem die Versuche in der EPICUR-Anlage relevant. So ist bei dem Versuch LOCOV Csl-Aerosol auf einem Coupon durch Strahlung zerstört und die entstandenen Spezies sind in einer nachgelagerten Filterstrecke untersucht worden. Um den Einfluss von luftgetragenen organischen Verbindungen auf die Iodchemie zu untersuchen, fand dieser Test unter der Zugabe von Methan in der Atmosphäre statt. Zwei weitere Versuche (LOCOV2 und LOCOV3) zu dieser Thematik stehen noch aus.

Ein weiteres Thema in THEMIS war das Verhalten von feinem IO_x^- -Aerosol, das sich im Störfall aus I_2 mit durch Strahlung erzeugtem Ozon in der Atmosphäre bildet. In Iod-36 ist dabei die Wechselwirkung mit einem Hintergrundaerosol aus Silberpartikeln untersucht worden, während in Iod-37 die thermische Zersetzung von IO_x^- bei hohen Temperaturen gemessen worden ist. Diese Zersetzung tritt auch in dem realistischen Rekombinatorversuch HR-59 auf, in dem zusätzlich organische Stoffe aus einer Pyrolyse von verbrannten Kabeln auf die Rekombinatorplatten aufgebracht worden sind.

Auf die Verwertbarkeit dieser internationalen Arbeiten für Rückflüsse auf die chemischen Einzelmodelle wird im folgenden Abschnitt sowie für das Pool-Scrubbing in Abschnitt 3.1.4 näher eingegangen.

Im Rahmen des THEMIS-Projekts hat die GRS die Meetings der Programm Review Group (PRG) fachlich begleitet, wobei die GRS den Chair der Analytical Working Group übernommen hat. Das Management Board (MB) fand im Anschluss an das PRG-Meeting statt. Zunächst waren diese Meetings vor dem Hintergrund der Covid-19-Pandemie noch als Online-Meetings durchgeführt worden. Das 4. Meeting fand in hybrider Form am 7. und 8. November 2022 in Boulogne-Billancourt statt. Das 5. und 6. Meeting fanden dann am 4. und 5. Juli 2023 in Frankfurt am Main bzw. am 29. und 30. April 2024 in Boulogne-Billancourt statt.

Die IPRESKA-Meetings waren schon vor der Pandemie mit den OECD-THAI III bzw. THEMIS-Meetings zusammengelegt worden. So fand am 6. und 7. Juli 2023 im Anschluss an das THEMIS-Meeting auch ein IPRESKA-Meeting statt.

Auch die ersten BCAPFIS-Treffen wurden zunächst online durchgeführt. Das 4. BCAPFIS-Meeting fand dann am 13. und 14. Juni in Boulogne-Billancourt statt.

Das 6. ESTER Meeting ist am 16. und 17. April 2024 in Aix-en-Provence durchgeführt worden.

6.1.2 OECD-ARC-F

Die Aufarbeitung des Unfallablaufes in Fukushima trägt zu einem wichtigen Erkenntnisgewinn für die in COCOSYS vorhandenen Modelle zur Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens bei. Daher wurde die ARC-F-Fachgruppe zu den Phänomenen der Schmelze-Beton-Wechselwirkung beim Unfallablauf in Fukushima, Block 1, im Rahmen des COCOSYS-Entwicklungsprojektes begleitet. Diese Mitwirkung ist explizit abgegrenzt vom Arbeitsprogramm des parallel durchgeführten BMWi-Vorhabens RS1573 mit dem Titel „Sensitivitätsanalysen zu Unfallablauf und Quellterm zu den Ereignissen in Fukushima, Blöcke 2 und 3 im Rahmen des OECD/NEA Projektes ARC-F“. Dort sind Arbeiten zum Unfallablauf in Block 1 nicht Bestandteil des Arbeitsprogramms. In RS1598 wurde die Mitwirkung in der MCCI-Fachgruppe von OECD-ARC-F, die bereits während des Projektes RS1561 begonnen wurde, mit der Interpretation der Vergleichsrechnungen zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) bei Fukushima, Block 1, mit Beiträgen der GRS (inhaltliche Diskussionen und Aufbereitung der Rechenergebnisse und der Modellbeschreibungen) fortgesetzt. Die Ergebnisse wurden im Rahmen einer gemeinsamen Veröffentlichung zur Konferenz NURETH-19 durch die Universität Tokio zusammengefasst /PEL 22/. Details der erzielten Rückflüsse für den Modellstand in COCOSYS werden in Kapitel 4 diskutiert.

6.1.3 ERMSAR-Konferenz und NUGENIA TA2

Auf der ERMSAR-Konferenz, die als periodische Fachtagung zum internationalen Fortschritt der Reaktorsicherheitsforschung im Bereich schwerer Störfälle von der EU im SARNET-Projekt des 6. Rahmenprogramms initiiert wurde, wurde der aktuelle Stand des Core-Catcher-Modells in COCOSYS einem Expertenpublikum präsentiert. Das Interesse an diesem Modell war groß und der Beitrag wurde vom wissenschaftlichen Komitee der Konferenz für die Aufnahme in eine Sonderausgabe (Virtual Special Issue, VSI) der Zeitschrift 'Annals of Nuclear Energy' ausgewählt /SPE 23a/. Ferner wurde an dem Workshop der NUGENIA Technical Area (TA) 2 auf dem NUGENIA TA2 Meeting vom 13. – 16.02.2023 teilgenommen. TA2 umfasst die Teilgruppen TA2.1 „In-vessel Corium/Debris Coolability“ und TA2.2 „Ex-vessel Corium Interactions and Coolability“. In TA2.2 wurde der aktuelle Modellstand in den von der GRS entwickelten Codes (COCOSYS, LAVA) zum Ex-Vessel-Schmelzeverhalten den an der Fachgruppe

teilnehmenden Partnern vorgestellt und mit ihnen diskutiert /SPE 23b/. Ferner informierten die fachlichen Partner über eigene fachliche Fortschritte in ihren Projekten mit Bezug zu TA2.1 und TA2.2. Daran anknüpfend wurden Vorschläge für zukünftige Forschungsaktivitäten diskutiert, die möglicherweise auf den bevorstehenden EU-Call in Form von Anträgen für Verbundprojekte eingereicht werden können.

6.2 Verwertung von Rückflüssen auf chemische Einzelmodelle in AFP2

Im Bereich Aerosol-Iod-Wechselwirkung und Freisetzung kleiner Partikel sind, wie bereits oben erwähnt, die THEMIS-Versuche THAI Iod-36 und Iod-37 nachgerechnet und die Ergebnisse im internationalen Rahmen vorgestellt worden. Der Versuch Iod-36 untersuchte die Wechselwirkung von IO_x^- mit Hintergrundaerosolen, wobei die Ergebnisse gut mit den in COCOSYS vorhandenen Modellen berechnet werden konnten. Der Versuch Iod-37 hingegen untersuchte die Zersetzung kleiner IO_x^- -Partikel bei hohen Temperaturen. In diesem Versuch zeigte sich, dass die Wechselwirkung des Ozons mit den Stahloberflächen einen großen Einfluss hat. In diesem Bereich ist eine rechnerische Parameterstudie durchgeführt worden, die zeigt, dass die Menge des gebildeten IO_x^- durch die Zerstörungsrate von Ozon an den Wänden bestimmt wird. Das THEMIS-Projekt ist noch nicht beendet und die experimentellen Daten für diese Versuche sind noch nicht vollständig veröffentlicht worden. Daher ist eine abschließende Übernahme der geänderten Reaktionskoeffizienten noch nicht erfolgt. Der Versuch Iod-37 zeigt hingegen deutlich, dass kleine IO_x^- -Partikel durch einen thermischen Einfluss in gasförmige Spezies zersetzt werden können. Dieser Einfluss lässt sich ebenfalls in dem komplexen Rekombinatorversuch HR-59 beobachten. Offen ist, ob dieser Effekt auch mit Containment-typischen Mehrkomponenten-Aerosolen auftritt. Typischerweise agglomerieren die kleinen durch Strahlung erzeugten Partikel mit dem Hintergrundaerosol in der Atmosphäre. In diesen größeren Partikeln mit Durchmessern von einigen μm können die IO_x^- -Moleküle abgeschirmt sein und deshalb eventuell nicht in derselben Menge zerstört werden wie in den Versuchen mit reinem IO_x^- .

Die Freisetzung von gasförmigem Iod aus Aerosolen durch Strahlung ist in dem Versuch LOCOV untersucht worden, der im Rahmen des OECD-Projekts ESTER in der EPICUR-Anlage von IRSN durchgeführt worden ist. In diesem Versuch ist auf einem Coupon abgelagertes Csl unter Strahlung zersetzt worden. Dieses ist in einer methanhaltigen Atmosphäre mit 2 Vol.-% geschehen, um den Einfluss von organischen Stoffen in der Atmosphäre auf die Organoiodbildung zu untersuchen. Im Gegensatz zu der in der

Vergangenheit hauptsächlich untersuchten Bildung von Organoiod auf Farbanstrichflächen befinden sich diese organischen Verbindungen infolge von z. B. Kabelbränden bereits in der Containment-Atmosphäre. In der englischen Fachsprache hat sich der Begriff Volatile Organic Compounds mit der Abkürzung VOC eingebürgert. Dabei zeigt sich, dass die Berücksichtigung der Organoiodbildung an den Stahloberflächen der EPICUR-Anlage einen starken Einfluss hat, auch wenn IRSN die elektropolierten Oberflächen für chemisch inert hält. Solche Reaktionen sind aus der Erfahrung mit dem Stahlbehälter der THAI-Anlage bereits lange in COCOSYS enthalten. Jedoch zeigte sich in Variationsrechnungen mit geänderter Modellierung, dass diese Reaktionen mit einem geänderten Reaktionsmechanismus besser dargestellt werden können. Der geänderte Reaktionsmechanismus ist in Abb. 6.1 dargestellt.

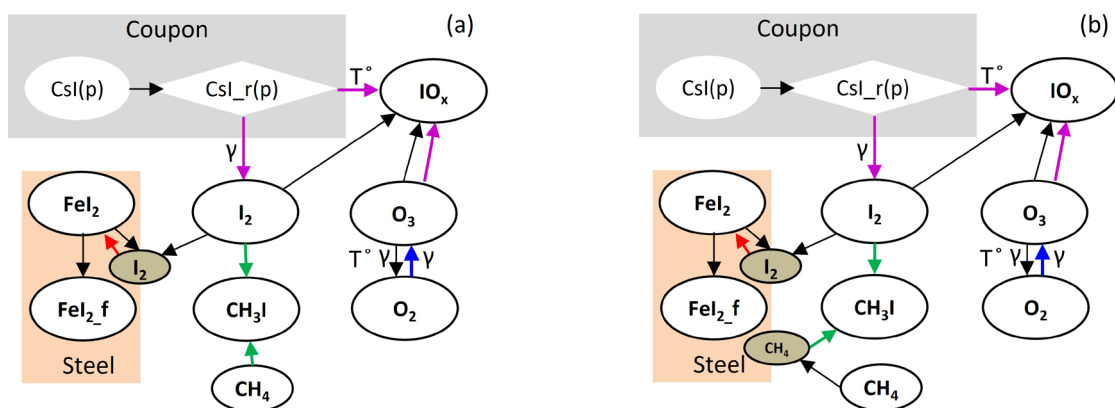


Abb. 6.1 Vergleich des alten (a) zu dem geänderten (b) Modell für die Bildung von Organoiod an Stahloberflächen

Der im Folgenden beschriebene Prozess wird in den Bildern durch die grünen Pfeile dargestellt. Im Originalmodell erfolgt die Organoiod-Bildung (CH_3I) aus einer Reaktion von I_2 und Methan in der Atmosphäre, bei der die Stahloberfläche als Reaktionsfläche dient. In der geänderten Version (rechts) ist das Methan direkt auf der Stahloberfläche adsorbiert und reagiert mit dem I_2 in der Atmosphäre. In der Simulation des Einzelversuchs LOCOV zeigt dieses Verhalten eine verbesserte Bildung von Organoiod. Von besonderer Bedeutung ist dabei auch die Konkurrenzreaktion des adsorbierten I_2 mit der Bildung von chemisorbiertem Iod (FeI_2) auf den Stahloberflächen, das dort chemisch festgebunden wird. Diese Modelländerungen können eventuell an den noch in ESTER geplanten Versuchen LOCOV2 und LOCOV3 überprüft werden und – falls bestätigt – dauerhaft in den Code übernommen werden.

Das Thema Abwaschen (Wash-Down) von Aerosolen ist aufgrund des verspäteten Starts des VEKOCO-Projekts bis auf einige beratende Tätigkeiten für die Angebotserstellung des VEKOCO-Projekts unbearbeitet geblieben, wie in Abschnitt 3.1.1 erläutert wird. Das Thema der nassen Resuspension wird in Abschnitt 3.1.5.1 behandelt. Aufgrund der Erfahrungen aus der Uncertainty-and-Sensitivity-Analysis (UaSA) im EU-Projekt MUSA sind keine weiteren Rückflüsse entstanden. Diskussionen kamen hingegen bzgl. der Simulation des Sprühversuchs THAI Iod-31 im AMICO-Projekt auf. Dabei ging es aber weniger um das Sprühen selbst als um die Anwendung der ATM_FULL-Verbindungen im Sumpfvolumen, das das Ziel des Sprühsystems ist. Dort ist mit einer thermischen Schichtung aufgrund des Sprühwassers zu rechnen, das eine andere Temperatur haben kann. Die Lauffähigkeit von AFP2 mit ATM_FULL ist sichergestellt worden, wofür einige Entwicklungsarbeiten nötig waren.

6.3 Unterstützung der Weiterentwicklung von COCOSYS durch externe Partner

6.3.1 Unterstützung der AG Plant Simulation and Safety (PSS) Ruhr-Universität Bochum

Mit der AG PSS (Plant Simulation and Safety) bei der Ruhr Universität Bochum wurden regelmäßige fachliche Treffen durchgeführt, um Informationen über Arbeitsfortschritte auszutauschen und daraus abgeleitete Fragestellungen zu diskutieren. Darüber hinaus wurde eine kontinuierliche Unterstützung in fachlichen Fragestellungen zur Modellentwicklung für COCOSYS durch jeweilige fachliche Experten der GRS in individuellem Kontakt zu Experten der AG PSS geleistet. Dies betraf die Punkte Wasserstoffverbrennung, Pool-Scrubbing und Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI). Um die Weiterentwicklung von COCOSYS in der Gruppe PSS auch im Hinblick auf QS-Anforderungen seitens der IT zu unterstützen, wurde von der GRS im März 2024 eine Online-Schulung zu den Themen git und GitLab organisiert. COCOSYS-Entwickler bei der AG PSS wurden über grundlegende Prinzipien von git geschult. Weiterhin wurden Grundlagen für den Umgang mit dem Software-Archiv von AC²/COCOSYS erklärt, auf das die AG PSS über den externen GitLab-Server der GRS zugreifen kann. Zur Schulung des Umgangs mit dem Software-Archiv bei der Code-Entwicklung gehört auch die Fragestellung, wie die von AG PSS durchgeführten Änderungen zurückgespeist werden sollten und so an die GRS zurückfließen. Ein weiterer Schwerpunkt der Schulung lag auf der Verwendung von graphischen Oberflächen für die Arbeit mit lokalen Software-Archiven und deren Synchronisierung im Sinne des Konzepts von git. GitLab bietet auf der Basis des git-

Konzeptes zur Versionierung und Verwaltung von Software-Entwicklungen eine einfach zu bedienende Plattform für den fachlichen Austausch und die Zusammenarbeit. Das Einpflegen von neuen Software-Entwicklungszweigen durch die AG PSS in dem von der GRS zur Verfügung gestellten GitLab-Projekt soll zukünftig die Zusammenarbeit zwischen GRS und AG PSS vereinfachen. Alle neuen Entwicklungen von PSS, die mit git verwaltet werden und zukünftig im GitLab-Projekt zur Verfügung stehen, können dann mit deutlich reduziertem Aufwand in die GRS-Entwicklungsprojekte übernommen werden.

6.3.2 Unterstützung der Entwicklungsarbeiten beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

In enger Abstimmung mit KIT wurde der Bedarf für Modellverbesserungen und Erweiterungen an den ersten verfügbaren Versionen der von KIT entwickelten Wasserfilmmodelle in COCOSYS ermittelt, vgl. Abschnitt 3.1.1. Das Projekt VEKOCO, das einen Hauptteil der bestehenden Defizite durch eine gezielte Weiterentwicklung seitens KIT beseitigen soll, kann aufgrund haushaltstechnischer Randbedingungen erst nach Ende der Laufzeit von RS1598 starten. Eine Begleitung der externen Codeentwicklung in enger Abstimmung mit KIT ist daher für das Nachfolgeprojekt zu RS1598, UMRS1626, seitens der GRS geplant.

6.4 Beratung von Nutzern und Verwertung weiterer Rückflüsse aus der Nutzung von COCOSYS

6.4.1 Review der Implementierung von Sprühsystemen im THY-Hauptmodul

Im Rahmen der Validierung von COCOSYS nahm die GRS an einem Benchmark zum Versuch HR57 an der THAI-Versuchsanlage teil /FRE 21/. In diesem Versuch ist auch eine Sprühphase enthalten, für deren Simulation das IVO-Sprühmodell von COCOSYS /ARN 23a/ zur Anwendung kam. Vom durchführenden GRS-Bearbeiter wurde festgestellt, dass sich nach Erweiterung des Datensatzes um das Sprühsystem die benötigte Rechenzeit signifikant erhöhte.

Daraufhin erfolgte ein Review der Implementierung der Sprühmodelle im THY-Hauptmodul von COCOSYS. Die erste Prüfung ergab, dass die Rechenzeiterhöhung bereits bei Definition eines Sprühsystems im Datensatz zu verzeichnen ist und nicht nur,

wenn das Sprühen im Prozessverlauf aktiviert wurde. Im HR57-Datensatz wird Sprühen in Zusammenhang mit einer Einspeisung (INJECTION) simuliert und nicht als klassisches Pumpensystem, was aber als Ursache auch ausgeschlossen wurde. Letztendlich stellte sich als Ursache eine übermäßige Definition von Abhängigkeiten zwischen den Differentialgleichungen für Zonen heraus, die Teil der Sprühpfade sind. Solche Abhängigkeiten werden für das FEBE/FTRIX-Integrationspaket zur numerischen Lösung des Differentialgleichungssystems in COCOSYS automatisch in Abhängigkeit vom aktuellen Datensatz über sogenannte Objekt-Objekt-Kopplungen definiert. Bei der Berechnung der Jakobi-Matrix müssen dann mehr Auswertungen der Differentialgleichungen erfolgen (Anzahl NFKT), da mit mehr Abhängigkeiten im Differentialgleichungssystem weniger Gleichungen parallel ausgewertet werden können. Das führt zu einem wachsenden Rechenaufwand. Da bei der ursprünglichen Implementierung von Sprühsystemen noch keine entsprechenden Erfahrungen vorlagen, wurden alle Zonen, die in einem Sprühpfad angegeben sind, direkt miteinander gekoppelt. Dies wurde nun so weit reduziert, dass nur noch direkt übereinander liegende Zonen gekoppelt werden (Fall von Tropfen aus einer in die darunter liegende Zone). Da solche Zonen in der Regel bereits über Atmosphärenverbindungen miteinander verbunden sind, werden somit keine zusätzlichen Abhängigkeiten durch das Sprühsystem eingeführt.

Im oben genannten HR57-Datensatz reduzierte sich damit die Anzahl der pro Update der Jakobi-Matrix ausgeführten Auswertungen der Differentialgleichungen NFKT von ca. 800 auf 260, was eine deutliche Verringerung der benötigten Rechenzeit auf ein Viertel zur Folge hat (173 min auf 44 min). Auf die physikalischen Ergebnisse selbst zeigt dies keinen Einfluss – vernachlässigbare Unterschiede sind auf geänderte Integrations-schrittweiten zurückzuführen.

Zur weiteren Überprüfung und Absicherung der Modelländerung wurde die Nachrechnung des MISTRA-Versuches MASP1 wiederholt /ARN 23b/. In Abb. 6.2 – Abb. 6.4 repräsentieren die mit "old" bezeichneten Kurven jeweils das bisherige Verfahren (bis COCOSYS Version 3.1.0) und "new" die geänderte COCOSYS-Version (ab 3.1.1).

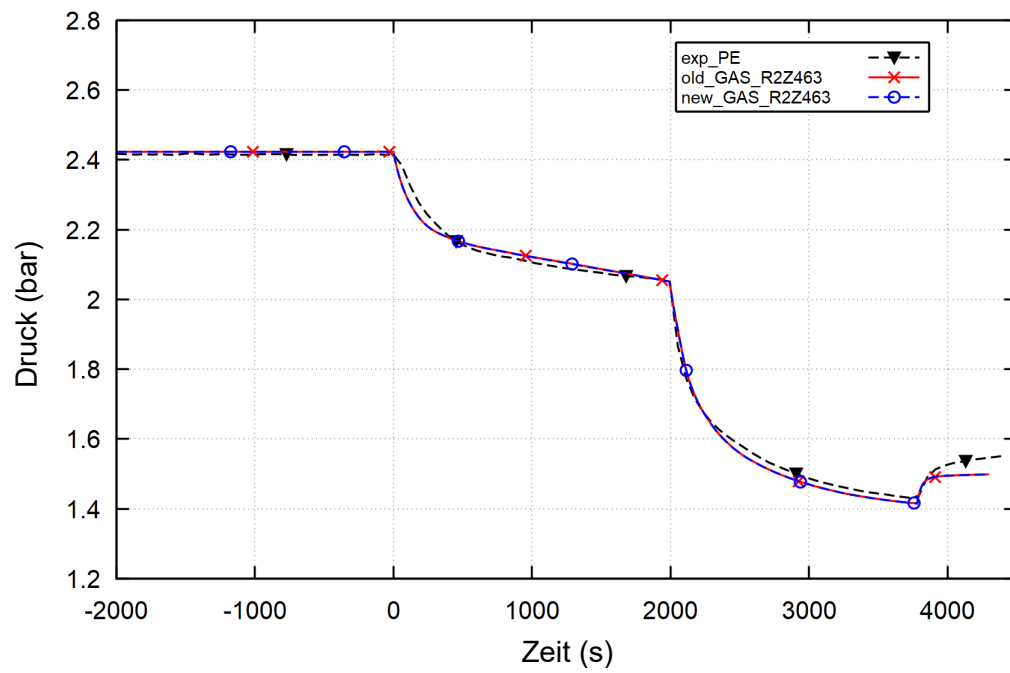


Abb. 6.2 THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Druckverlauf im Versuchsbehälter
(Sprühen zwischen 1 993 und 3 780 s)

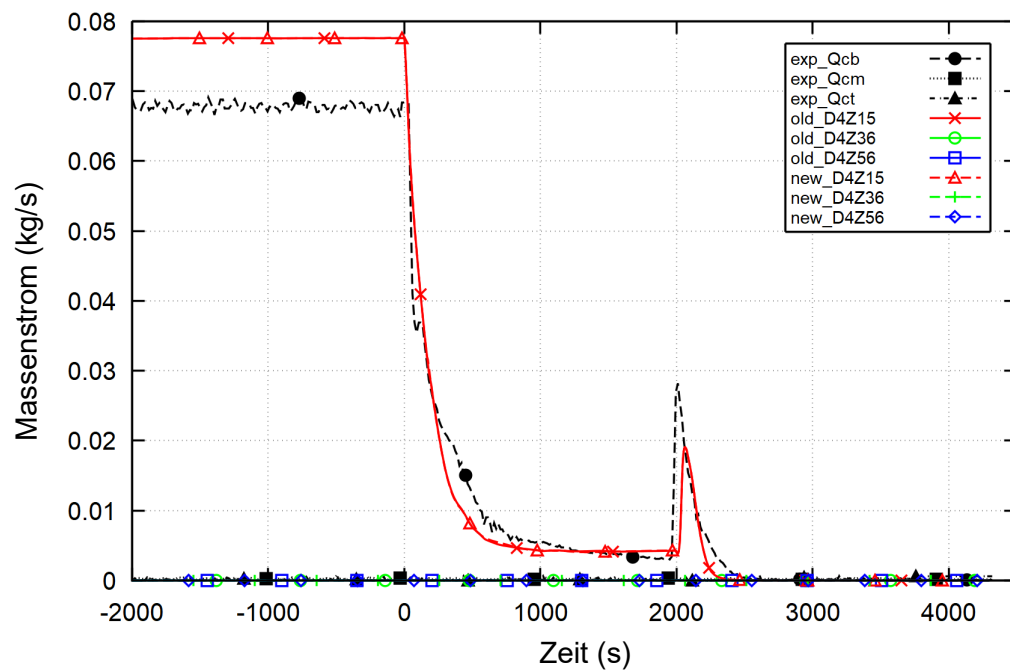


Abb. 6.3 THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Kondensatmassenströme

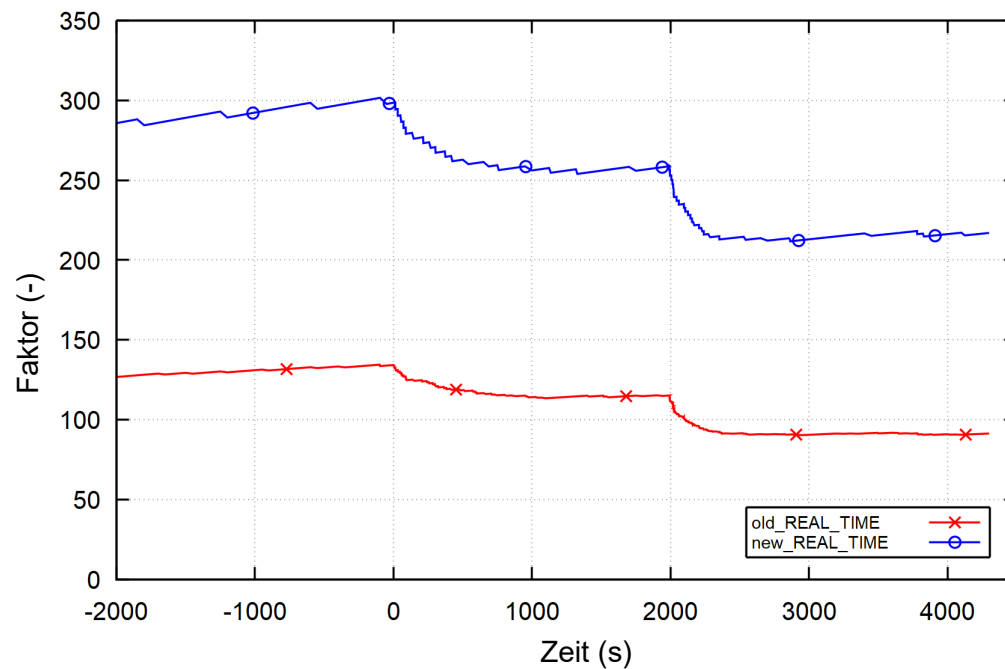


Abb. 6.4 THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Real Time Factor (RTF > 1 bedeutet schneller als Echtzeit)

Daneben wurde zur Überprüfung der Programmänderungen auch das ST3-2-Experiment an der PANDA-Anlage genutzt, das von der Ruhr Universität Bochum bei der Entwicklung des Atmosphären-Entrainment-Modells durch Sprühstrahlen verwendet wurde /RIS 15/ als auch durch die GRS bei der Modellübernahme von RUB in COCOSYS /SPE 17/.

Sowohl in der MISTRA- als auch in der PANDA-Versuchsnachrechnung waren mit der modifizierten Programmversion keine relevanten Unterschiede in den physikalischen Ergebnissen zu sehen, aber eine Beschleunigung der Simulationen um ca. 50 % (MISTRA, Abb. 6.4) bzw. 25 % in der PANDA-Rechnung. Die zu erwartende Rechenzeitreduzierung hängt direkt von der Definition der Anzahl und Länge der Sprühpfade im jeweiligen Datensatz ab (im HR57 Datensatz sind das 8 parallele Sprühpfade durch jeweils bis zu 17 Zonen).

Die Programmänderungen wurden in die COCOSYS-Entwicklerversion bzw. den zu diesem Zeitpunkt nächsten Patch AC²-2021.1 (d. h. COCOSYS 3.1.1) übernommen und damit für Anwender verfügbar.

6.4.2 Verifizierung der Anwendung von ATM_FULL-Verbindungen zusammen mit Pumpen-Systemen und Sprühsystemen

Auf Nutzeranfragen wurde die Anwendung von ATM_FULL-Verbindungen zusammen mit Pumpen-Systemen und Sprühsystemen verifiziert. Eine Sumpfvorteilung von mehreren mit ATM_FULL verbundenen Zonen in der vertikalen Richtung (ohne horizontale Unterteilung) wurde auch untersucht. Auf Basis der in der GRS durchgeführten Verifikationen wurden Nutzerempfehlungen an eine Partnerorganisation übermittelt.

6.4.3 Erweiterung der Berechnung von Sigma-Kriterium

Nach Rückmeldung von Anwendern wurde die Berechnung von dem sogenannten Sigma-Kriterium um die Wahrscheinlichkeit einer Flammenbeschleunigung im Fall von Wasserstoffverbrennung erweitert. Ein neues optionales Modell für das Sigma-Kriterium wurde entwickelt und in COCOSYS 2.4 sowie in COCOSYS 3.1 und weiteren Releases integriert. Die Berechnung von charakteristischen Volumina und Gaskonzentrationen wurde von konkreten auf allgemeine Anlagen erweitert.

6.4.4 Erweiterung der Definition von externen Ereignissen mit arithmetischen Operationen

Mit einer neuen optionalen Eingabe für externe Ereignisse (Kontrollwort EXT_EVENTS) ist es möglich, in COCOSYS die Steuerung von Sicherheitssystemen wie Pumpen- und Sprühsystemen, Ventilen oder auch Einspeisungen zu erweitern. In der komplexen Anwendung auf Kraftwerksanlagen hatte sich die Notwendigkeit gezeigt, solche Sicherheitssysteme auch anhand von Differenzen zwischen zwei Werten zu steuern.

Durch die neu implementierte Option zur Nutzung von arithmetischen Operationen kann jetzt in COCOSYS ein simulierter Wert mit einer vorgegebenen Konstante oder einem zweiten Wert verglichen werden. Neben der Differenz zwischen zwei Werten (wie z. B. Wasserstanddifferenz oder Druckdifferenz) können auch die arithmetischen Operationen Summe, Multiplikation und Division verwendet werden. Die Codeerweiterung wurde anhand von Testbeispielen verifiziert.

6.4.5 Verbesserung des Tools WALL_LAYER

Das separate Hilfsprogramm WALL_LAYER /ARN 23a/ bietet Anwendern Unterstützung, um eine optimale Unterteilung von wärmeleitenden Strukturen in Materialschichten

(Layer) zu finden. Optimal bedeutet, einen Kompromiss zwischen der erforderlichen Unterteilung für eine "exakte" und numerisch stabile Berechnung des Temperaturverhaltens und einer möglichst geringen Anzahl von Schichten zu finden, um die benötigte Rechenzeit zu minimieren.

In einer Anwendung durch einen Nutzer kam es zu Programmabbrüchen ohne Meldungen bzw. mit nicht zielführenden Informationen. Die Überprüfung führte zur Identifizierung folgender Probleme: Durch fehlende Leerzeilen in der Eingabedatei *material_in.dat* wurden weniger Materialien als beabsichtigt eingelesen, was aber für den Nutzer nicht direkt ersichtlich war. Der vorgegebene Wandaufbau (Vorgabe verschiedener Materialien inklusive eines Luftspaltes) führte zu mehr als 50 Schichten, was gegenwärtig als max. Dimension in COCOSYS erlaubt ist. Die Kombination beider Fakten (Überschreitung von 50 plus Anzahl der definierten Materialien < Anzahl der Materialschichten in der Struktur) sowie einer fehlerhaften Programmierung (falsche Dimension eines lokalen Speicherfeldes) mündete dann im nicht abgefangenen Programmabbruch durch Verletzung von Feldgrenzen.

Neben der Fehlerkorrektur wurde die Flexibilität der Eingabe erhöht (optionale Leerzeichen in Eingabedateien). Die maximalen Feld-Dimensionen in WALL_LAYER wurden erhöht und ihre Einhaltung wird nun geprüft. Der Nutzer erhält eine Warnung, wenn die aktuelle Begrenzung von 50 Schichten in COCOSYS überschritten ist. Die Ausgabe wurde erweitert, so dass ein Nutzer alle eingegebenen Daten und die verwendeten Optionen überprüfen kann.

6.4.6 Organisation der GRS-internen AC²-Seminarreihe

Um den Austausch zwischen Anwendern und Entwicklern des Programmpakets AC² (ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und weitere Codes) zu fördern, wurde eine GRS-interne AC²-Seminarreihe organisiert. Für die Termine sind in der Regel 45 Minuten vorgesehen. Kollegen aus unterschiedlichen Organisationseinheiten stellen ihre aktuellen Arbeiten vor. Die anschließende Diskussion fördert den weiteren Austausch. Es wurden im Jahr 2022 drei Seminare organisiert. Ab Juni 2023 finden die Seminare in monatlichem Rhythmus statt (mit wenig Ausnahmen). Die Veranstaltungen finden online statt, um die Teilnahme von Entwicklern und Anwendern in allen GRS-Standorten zu erleichtern. Das Format von GRS-internen Veranstaltungen ermöglicht Diskussionen nicht nur über neue Entwicklungen und Anwendungen, sondern auch über Themen wie aktuelle Defizite im Programmpaket AC² und dringend benötigte Verbesserungen.

Um weiteren GRS-internen Austausch zu fördern, wurde eine GRS-interne Community „AC²-Seminar“ gegründet. Die Folien der Vorträge in der Seminarreihe werden dieser Community auf der GRS-Intranet-Webseite zur Verfügung gestellt.

6.5 Sicherung von Qualitätsstandards bei der Codeentwicklung

6.5.1 Internes Audit zur Qualitätssicherung bei der Softwareentwicklung

Für COCOSYS ist gemäß den GRS-Vorgaben für die Durchführung von Software-Entwicklungsprojekten ein Code-Audit durchgeführt worden. Dieses wurde am 28.03.2022 als internes Audit durchgeführt. Solche internen Code-Audits werden seit 2021 regelmäßig durchgeführt und dienen zur Ermittlung des Umsetzungsstandes der QS-Vorgaben in den einzelnen GRS-Softwareentwicklungsprojekten (SWEP). Das SWEP COCOSYS ist Teil des Codesystems AC², das als Gesamt-SWEP bestimmte übergreifende Aspekte abdeckt. Das interne Audit basierte auf den QS-Vorgaben für den Teilkernprozess TKP 03-05 und einer Checkliste, die in einen entwicklungstechnischen Teil und einen fachlich-technischen Teil unterteilt ist. Im Rahmen des SWEP-Audits wurden der QS-Plan sowie verschiedene Berichtsbände der Codedokumentation eingesehen. Der QS-Plan ist wie der Code für COCOSYS auf dem GRS-GitLab-Server hinterlegt. Die GitLab-Plattform wird bei der Programmentwicklung und deren Dokumentation konsequent genutzt. Das interne Audit des Softwarecodes hat gezeigt, dass die Vorgaben des Teilkernprozesses TKP 03-05 vorbildlich umgesetzt sind. Das SWEP ist in einem sehr guten Zustand. Alle Punkte der Checkliste erhielten die Bewertung 'erfüllt' oder 'akzeptabel'. Es wurden keine Abweichungen festgestellt. Es wurden Verbesserungsmöglichkeiten identifiziert, die sich in einer leichten Anpassung des QS-Plans niedergeschlagen haben.

6.5.2 Umstellung auf das freie Quelltext-Format in THY

In Rahmen der kontinuierlichen Konsolidierung der Quelltextdateien von COCOSYS wurden ca. 350 Quellcodedateien auf das freie Quelltext-Format f90 umgestellt. Damit sind nun das thermohydraulische Modul THY und der COCOSYS Haupttreiber komplett auf das freie Quelltext-Format umgestellt. Ebenfalls komplett umgestellt sind die Modul-Bibliothek, deren Funktionalität von allen COCOSYS-Modulen verwendet wird, sowie die System-Bibliothek, die von Modulen und Haupttreibern verwendet wird. Die Verwendung des neueren Fortran-Standards erlaubt Optimierungen bei den Compiler-Einstellungen und ermöglicht eine bessere Strukturierung des Codes bei künftigen Entwicklungen.

6.5.3 Umstrukturierung des CO1-Moduls

Das Wärmeübergangsmodell CO1 bietet eine zentralisierte gemeinsame Berechnung des Wärmeübergangs aufgrund freier Konvektion, erzwungener Konvektion und Kondensation. Dieses Modell ist ferner eng mit der Berechnung des Wasserfilmtransports (homogen oder als Rinnsalströmung) verbunden. Der zum CO1-Modell zugehörige Quelltext hat sich bisher über eine einzige Datei erstreckt. Diese Datei ist in den letzten Jahren sehr groß geworden, und die gewachsene Struktur erschwerte die Nachvollziehbarkeit des Programmablaufs. Um weitere Entwicklungen im CO1-Modell zu erleichtern, wurde diese ursprünglich einzelne Datei auf sieben kleinere Dateien mit 14 verschiedenen und klar strukturierten Unterprogrammen aufgeteilt. Die neue Codestruktur wurde grafisch dargestellt und dokumentiert.

6.5.4 Diverse Verbesserungen des Codes

Im Rahmen der kontinuierlichen Verbesserung des Codes wurden diverse kleine Verbesserungen durchgeführt. Einige Beispiele von solchen Verbesserungen sind die folgenden Optimierungen und Bug-Fixes:

- Die Überprüfungen von Nutzereingaben unter „Balance Groups“ wurden erweitert, um Fehlermeldungen bei leeren „Balance Groups“ im Laufe einer Simulation zu vermeiden.
- Die numerische Stabilität für die Berechnung der Wasserfilmdicke auf unterteilten Strukturen wurde verbessert.
- Erweiterung der Eingabe für die Rohsenow-Korrelation: Der Struktur-Flüssigkeit-Faktor kann vom Nutzer definiert werden.
- Die Berechnung von Struktur-Flächen und charakteristischen Konvektionsschleife-Längen für Strukturen, die teils oder komplett mit Wasserfilm bedeckt sind, wurde erweitert, um Fehler bei Böden (BOTTOM-Typ Strukturen) im CO1-Modell zu vermeiden.
- Nicht eindeutige Fehlermeldungen bei DRAIN_WALL-Verbindungen mit BOTTOM-Typ-Strukturen wurden mit besserer Beschreibung der Fehler und entsprechender Nutzer-Empfehlung erweitert.
- Die Überprüfung von Nutzereingaben bei ATM_FULLL-Verbindungen wurde erweitert, so dass Massenbilanzfehler bei Fehleingaben vermieden werden.

6.5.5 Veröffentlichung von Release-Versionen

Im Rahmen dieses Projektes sind folgende Versionen von COCOSYS für interne und externe Anwender freigegeben und auf dem Portal <https://user-codes.grs.de> veröffentlicht worden:

- COCOSYS 3.1.0 mit der Distribution AC2-2021.0
- COCOSYS 3.1.1 mit der Distribution AC2-2021.1
- COCOSYS 3.2.0 mit der Distribution AC2-2023.0

Für alle Releases sind im Rahmen der Qualitätssicherung notwendige Arbeiten für die Erstellung eines jeweiligen Release-Kandidaten zu Testzwecken durchgeführt worden.

7 Zusammenfassung

In diesem Vorhaben wurden im AC²-Programm COCOSYS ausgewählte Modelle verbessert oder ergänzt, um das Containmentverhalten und Freisetzungspfade aus dem Containment in die Umgebung in Bezug auf ein breites Spektrum von Fragestellungen für die gängigen KKW (Generation II – III+) sowie Forschungsreaktoren und zukünftige LWR (Generation IV und SMR) sicherzustellen und nach aktuellem Stand von W&T simulieren zu können.

COCOSYS bündelt die Modelle zu den verschiedenen phänomenologischen Themengebieten mit Bezug zum Containmentzustand in verschiedenen Programmeinheiten (Module). Die drei Hauptmodule sind: Thermohydraulik (Thermal Hydraulics, THY), Aerosol- und Spaltproduktverhalten (Aerosols & and Fission Products, AFP bzw. AFP2) sowie die Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung (Corium-Concrete-Interaction, CCI).

Im Modellstand von COCOSYS wurden bedeutsame Verbesserungen für die Simulation der Containmentphänomene erreicht. Mit den im Rahmen dieses Projektes durchgeführten Arbeiten ist gewährleistet, dass das Programmpaket AC² das fortschreitende Modellwissen sowie die gesamte Erfahrung auf dem Gebiet der Stör- und Unfallanalysen seit Bestehen der GRS integriert. Der aktuelle Status des Rechenprogramms im Hinblick auf die durchgeführten Arbeiten ist nachfolgend erläutert.

Gebäudekondensatoren. Zur Simulation des Containment-Druckabbaus mit Gebäudekondensatoren, die z. B. im WWER-1200 oder im HPR1000 als Sicherheitssystem auf der Sicherheitsebene 3 vorkommen, werden unter dem Dach von AC² COCOSYS (Containment) und ATHLET (Strömung im Wasser/Dampf-Kreislauf) gekoppelt genutzt. Dazu wurde in diesem Vorhaben das kombinierte COCOSYS-Wärmeübergangsmodell CO1, das die freie und erzwungene Konvektion in der Gasphase sowie Kondensation geschlossen behandelt, für die Berücksichtigung von Spezifika bei Gebäudekondensatoren erweitert. Dies beinhaltet die Simulation von horizontalen und vertikalen Wärmeübertragerröhren, gesättigte Dampfatosphäre und Bündelfaktoren (Faktoren zur Übertragung von Gleichungen für Rohre auf Rohrbündel). Parallel wurden relevante COCOSYS-Wärmeübergangsmodelle (inkl. CO1) an Strukturen für die Kopplung mit ATHLET (an ATHLET-Strukturen) verfügbar gemacht. Diese neue Simulationsmöglichkeit (CO1 in gekoppelten Rechnungen ATHLET-COCOSYS) wurde in diesem Vorhaben bereits erfolgreich einem ersten entwicklungsnahe Testen unterzogen sowie an einer Experimentnachrechnung erprobt. Zur Erlangung einer Anwendungsreife der gekoppelten

Simulationstechnik ist es geplant, abschließende Arbeiten hierzu im Nachfolgeprojekt UMRS1626 durchzuführen.

Wasserpools. In den Sicherheitskonzepten einiger fortschrittlicher Reaktoranlagen ist auf der Sicherheitsebene 3 die (zeitweise) Abfuhr von Nachwärme an große Wasser-pools, die innerhalb oder außerhalb des Containments angeordnet sind, zur Stör- und Unfallbeherrschung vorgesehen, z. B. in den „Residual Heat Removal“-Systemen beim AP1000 oder HPR1000. Des Weiteren sind thermohydraulische Phänomene in Wasser-pools von Forschungsreaktoren und im Brennelementlagerbecken während eines Un-fallablaufes für eine Quelltermbestimmung von Bedeutung. In diesem Vorhaben wurden Arbeiten zur Erweiterung des kombinierten Gas-Wasser-Strömungsmodells ATM_FULL durchgeführt. Wenn eine Temperaturverteilung im Wasserpool (d. h. durch mehrere Re-chenknoten) oder ein komplettes Auffüllen von ursprünglich leeren Raumbereichen mit Wasser simuliert werden soll, kann dies in COCOSYS mit Hilfe einer Unterteilung der Kontrollvolumina im Bereich des Wassers unter Nutzung der Strömungsverbindungen des ATM_FULL-Modells simuliert werden. Über ATM_FULL-Verbindungen wird sowohl Gas als auch Wasser zwischen COCOSYS-Zonen transportiert. In diesem Vorhaben wurden u. a. die Initialisierung einer Rechnung mit einer Zonenunterteilung im Bereich gefüllter Pools ermöglicht, ein Konzept für die numerische Stabilisierung beim Erreichen von Gleichgewichtszuständen untersucht sowie fehlende Terme in Modellgleichungen ergänzt.

Verhalten von Spaltprodukten und Aerosolen. Eine im Rahmen der COCOSYS-Entwicklung langfristig verfolgte Zielsetzung ist der Ersatz des früheren Modells AFP zur Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens in COCOSYS durch die Neuentwicklung AFP2 (ehemaliger Arbeitstitel: „NewAFP“), welche die Hauptkritikpunkte an AFP eliminiert und nun zentrale Bilanzen für Stoffmengen auf verschiedenen Ebenen (chemischen Verbindungen, Elementen oder Isotopen) führt. In diesem Vorhaben ist die Integration der relevanten noch fehlenden Teilmodelle in AFP2 weitgehend abgeschlos-sen worden, u. a. ist der Einbau des pH-Wert-Modells in AFP2 erfolgt. In diesem Teil-modell wurde bisher u. a. der Einfluss von Salpetersäure (HNO_3) berücksichtigt. HNO_3 wird durch die während eines Unfallszenarios vorhandene Strahlung kontinuierlich ge-bildet. Unter solchen Bedingungen kann Salpetersäure dominierend für den pH-Wert werden. Die korrekte Berücksichtigung des Einflusses von Salpetersäure im pH-Wert-Modell ist zurzeit in Diskussion: Eine ggf. benötigte Simulation des Abwaschvorgangs von Salpetersäure in AFP2 bedarf weiterer Arbeiten, die im Nachfolgevorhaben UMRS1626 durchgeführt werden sollen. Ferner wurde der Transport von Spaltprodukten

und Aerosolen über ATM_FULL-Verbindungen vollständig in der Bilanzierung im neuen Spaltproduktmodul AFP2 in COCOSYS ergänzt. Mit dem im Rahmen von AC² auch an externe Nutzer weitergegebenen AFP2 können im Unterschied zu AFP nun realistische, unterschiedliche Randbedingungen auf realen Strukturen für die relevanten Phänomene bei Wärmeübergängen (z. B. Kondensation) und Aerosoltransportprozessen (z. B. Abwaschen von Aerosolen) und bei der Iodchemie betrachtet werden. Die Geometrie wird dabei konsistent zur Thermohydraulik behandelt. Aufgrund der detaillierteren Anlage von Bilanzierungsgrößen und Bilanzierungsobjekten sind mit AFP2 weitaus detailliertere Informationen als mit AFP verfügbar, allerdings ist in AFP2 auch die absolute Anzahl von zu aktualisierenden Bilanzgrößen enorm gegenüber AFP gestiegen. Dieses führt zu einem gestiegenen Rechenaufwand, weshalb im Nachfolgeprojekt UMRS1626 die Numerik verbessert werden soll. Im Hinblick auf die Errechnung des Nuklidinventars von Reaktorkernen und die Zerfallsprozesse wird die GRS-Rechenkette AC² zurzeit auf die Nutzung eines separat entwickelten Zerfallscodes umgestellt. Hierzu ist der von GRS und PSI gemeinsam entwickelte Rechencode VENTINA vorgesehen. Dies hat Auswirkungen auf die Schnittstelle zwischen COCOSYS und ATHLET-CD bzgl. des Isotopenverhaltens. In diesem Projekt ist der größte Teil der Erstellung dieser Schnittstelle durchgeführt worden. Ausstehende Arbeiten sollen im Nachfolge-Vorhaben UMRS1626 fertiggestellt werden.

Verhalten der Ex-Vessel-Kernschmelze. Für die Simulation einer nicht-kühlbaren, kompakten Kernschmelze bzw. der Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) ist das Modell COCOSYS / CCI verfügbar, das ursprünglich auf der gemeinsam von IRSN und COCOSYS getragenen Entwicklung ASTEC / MEDICIS basiert. CCI ist umfangreich validiert. Die GRS hat an den wichtigsten nationalen und internationalen F&E-Vorhaben hierzu über einen langen Zeitraum teilgenommen. Basierend auf diesen Rückflüssen und auf denen aus dem Feedback von interner und externer Nutzung wurden im Rahmen dieses Vorhabens zahlreiche Verbesserungen an existierenden Teilmodellen durchgeführt. Der Hauptaspekt der Arbeiten zum Ex-Vessel-Schmelzeverhalten lag auf der Ergänzung eines Ansatzes, um in Unfallsimulationen im Unterschied zu MCCI auch eine potenziell kühlbare Schüttbettkonfiguration zu berücksichtigen. Hierzu wurde in diesem Vorhaben das vereinfachte thermohydraulische Modell DEMON in COCOSYS eingebaut, das von der AG PSS an der Ruhr-Universität Bochum ursprünglich für die Simulation von In-Vessel-Schüttbett-Szenarien für die zukünftige Einbindung in ATHLET-CD sowie anderen Codes entwickelt worden war. Das rein thermohydraulische Modell DEMON ist zunächst vereinfachend an die Bedingungen (und Unsicherheiten) bei Ex-Vessel-Szenarien angepasst und in der Einbettung in COCOSYS erprobt worden. Im

Nachfolgeprojekt UMRS1626 sind vervollständigende Arbeiten zur materialspezifischen Charakterisierung von Schüttbettszenarien geplant.

Kopplungen in COCOSYS bzw. AC². Neben der bereits zum Punkt Wasserpools genannten Erweiterung der Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET für den Wärmeübergang an Strukturen zur Nutzung des kombinierten Wärmeübergangsmodells CO1 (freie und erzwungene Konvektion sowie Kondensation) auf der COCOSYS-Seite wurde hier die Verwendung des WGR-Strahlungsmodells aus COCOSYS für den Energieaustausch zwischen der Oberfläche einer Wärmeleitstruktur in ATHLET und der anliegenden Containment-Zone ermöglicht. Des Weiteren ist COCOSYS um die optionale Datenausgabe im HDF5-Format erweitert worden, so dass ein Datenformat für die Simulationsergebnisse mit COCOSYS existiert, das mit frei verfügbaren Werkzeugen lesbar ist. Ferner wurde COCOSYS für die Nutzung der Wasser-/Dampf-Stoffwertdatenbank der Hochschule-Zittau-Görlitz weitestgehend vorbereitet. Der Einbau in die speziell vorbereitete Codeversion und eine Validierung erfolgt durch die HSZG. Die Nutzung des Modells LHEAD in ATHLET-CD für die Simulation der Vorgänge im unteren Plenum des Reaktordruckbehälters bei der Kernzerstörung wurde für die gekoppelte Rechnung mit COCOSYS ermöglicht, eine inhaltliche Verbesserung von Einzelmodellen in LHEAD erfolgt nicht im Rahmen des vorliegenden Vorhabens.

Support und Beratung von Anwendern. Die Nutzerrückflüsse aus der Anwendung von COCOSYS im Rahmen der Ressortforschung des BMUV werden für eine spezifische Weiterentwicklung des Codesystems mit Blick auf anwendungsbezogene Fragestellungen genutzt. Ferner nutzen viele nationale Forschungseinrichtungen im Bereich der Reaktorsicherheitsforschung die „deutsche Rechenkette“ AC² insbesondere für die Ausbildung des kerntechnischen Nachwuchses (z. B. für Masterarbeiten und Dissertationen) und die Beteiligung in internationalen Forschungsprogrammen. Internationale Forschungseinrichtungen nutzen AC² für eine unabhängige Behördenunterstützung. In den Jahren 2021 und 2022 erfolgten 38 bzw. 17 Code-Transfers an andere Organisationen, davon ca. 2/3 ins Ausland. In diesem Vorhaben wurden Nutzerrückflüsse kontinuierlich erfasst, um den Code zu verbessern. Nur mit dieser fachlichen Vernetzung ist ein vertiefter Kenntnissgewinn zu ausländischen Anlagen möglich. Der Kontakt zu Anwendern und das Feedback aus COCOSYS-Anwendungen ist daher essenziell, um die Qualität des Codes stetig auch bei international fortentwickeltem Stand von W&T sowie für neue Typen von Kernanlagen zu bewahren bzw. zu verbessern.

Dokumentation. Für COCOSYS wurden Handbücher gepflegt, welche die in der jeweiligen Version aktuell enthaltenen Modelle und ihre Grundlagen („Models and Methods“) sowie ihre Handhabung bei der Eingabedatensatzerstellung („User Manual“) beschreiben.

Code-Management. Mit Blick auf gestiegene Standards zur Qualitätssicherung (QS) bei der Codeentwicklung wurden die Vorgaben der GRS gemäß Management-Handbuch, welche auch internationale Vorgaben berücksichtigen, für die QS bei der Codeentwicklung im Projekt umgesetzt. Dies umfasst z. B. die Nutzung aktueller Methoden und Tools des Softwaremanagements, die durch den im Jahr 2020 erfolgten Umstieg zum Softwaremanagementsystem GitLab verfügbar geworden sind, die Nutzung der regelmäßigen Überprüfung des Codeentwicklungsfortschrittes im Rahmen einer Continuous-Integration-Methodik (CI), das Regressionstesten sowie QS-Audits. Da COCOSYS als Modul des Programmpakets AC² verteilt wird, rückte hierbei auch die QS für gekoppelte Anwendungen stärker ins Blickfeld.

Fachlicher Austausch. Eine wichtige Zielsetzung dieses Projektes war der fachliche Austausch mit nationalen und internationalen Expertengruppen. Dadurch kann der internationale Stand von W&T durch die GRS mitgestaltet und dieser kontinuierlich in die Codeentwicklung der GRS eingebracht werden. Aus diesem Grund wurde die Beteiligung der GRS in verschiedenen, vorwiegend internationalen Fachgruppen und Forschungsvorhaben fortgesetzt (OECD-THEMIS, OECD-ESTER, OECD-BCAPFIS, IPRESKA). Dies betraf die Mitwirkung an von der OECD/WGAMA initiierten Fachgruppen oder Expertengruppen zu Themen mit engem Bezug zum Projekt. Ferner wurde an periodischen Fortschrittsstreifen des NUGENIA-Netzwerkes, Fachbereich 2 (Technical Area 2) zu Unfällen, partizipiert. Bei diesen NUGENIA-Treffen wurden Arbeitsfortschritte der Partner zu Unfällen sowie darüber hinaus identifizierter Bedarf für gemeinschaftliche Forschungsprojekte diskutiert.

Literaturverzeichnis

- /AKK 21/ Akkus, Y., Gurer, A. T., Bellur, K.: Drifting mass accommodation coefficients: in situ measurements from a steady state molecular dynamics setup. *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, Nr. 25, S. 25–45, DOI 10.1080/15567265.2020.1861139, 2021.
- /ANS 24/ Anschütz, L., Bendiab, M., Nowack, H.: Assessment of pH-values in water pools during severe accidents in PWR using the lumped parameter code COCOSYS. In: Gabrielli, F., Herranz, L. E., Paci, S. (Hrsg.): *The 11th European Review Meeting on Severe Accidents Research, Book of Abstracts. ERMSAR 2024*, Stockholm, Sweden, 13. - 16. Mai 2024, 2024.
- /ARN 21/ Arndt, S., Band, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G.: *COCOSYS 3.1 User Manual*. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 1, 2021.
- /ARN 23a/ Arndt, S., Band, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H., Reinke, N., Spengler, C., Klein-Heßling, W., Sonnenkalb, M., Weber, G.: *COCOSYS 3.2.0 User Manual*. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 1, 2023.
- /ARN 23b/ Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H., Spengler, C., Reinke, N.: *COCOSYS Regression Testing, Regression Testing of Version 3.2.0 vs. Version 3.1.1*. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 4: Köln, November 2023.
- /BAE 96/ Baehr, H. D., Stephan, K.: *Wärme- und Stoffübertragung*. Springer-Lehrbuch, 2. Aufl., 697 S., ISBN 3540603743, DOI 10.1007/978-3-662-10837-6, Springer: Berlin, 1996.
- /BEA 92/ Beahm, E. C., Weber, C. F., Kress, T. S., Parker, G. W.: *Iodine Chemical Forms in LWR Severe Accidents*. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), NUREG/CR-5732, Oak Ridge, TN 37831-6285, 1992.

- /BUC 16/ Buck, M., Pohlner, G.: Ex-Vessel Debris Bed Formation and Coolability – Challenges and Chances for Severe Accident Mitigation. In: ANS (Hrsg.): International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP) 2016. San Francisco, California, 2016.
- /CRU 95/ Crutel, V.: Methodology for the pH prediction in a PWR sump water under severe accident conditions. In: ACE Extension Task 5. 1995.
- /ECK 11/ Eckel, J., Weber, G.: Einbau des pH-Modells von AREVA in COCOSYS/AIM, Techreport. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH (GRS), GRS-V-RS 1185-2/2011, 2011.
- /FRE 21/ Freitag, M., Schmidt, E., Nowack, H.: Specification Report for Blind Simulation of HR-57, "PAR performance behaviour in H₂-CO containing atmosphere". Becker Technologies GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 150 1613 - SR - HR-57, 2021.
- /FRE 24/ Freitag, M., Schmidt, E., Nowack, H.: Fission products retention in water pools: "Pool Scrubbing", Test WH-33, Comparison Report. Becker Technologies GmbH, 150 1613 – CR – WH-33: Eschborn, 2024.
- /FUN 07/ Funke, F.: Model to predict the pH of PWR sumps in severe accidents, Techreport. AREVA NP GmbH (AREVA), NTR-G/2006/en/0118 (restricted), 2007.
- /GAU 00/ Gauntt, R. O., Cole, R. K., Erickson, C. M., Gido, R., Gasser, R. D., Rodriguez, S. B., Young, M. F.: MELCOR Computer Code Manuals: Reference Manuals Version 1.8.5, Techreport. Sandia National Laboratories, NUREG/CR-6119, Volume 2, Revision 2, 2000.
- /GRS 20/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): AC² - Overview. Erreichbar unter "<https://user-codes.grs.de/AC2>", Stand von 2020.

- /HAN 17/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: MOTIVE - A New Modular Burn-up Code. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. M&C 2017, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017, ISBN 978-1-5108-5645-5, Curran Associates, Inc.: Red Hook, NY, USA, 2017.
- /HDF 24/ The HDF Group: The HDF5 library and file format. Erreichbar unter <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5>, abgerufen am 3. Mai 2024.
- /HEL 67/ Helgeson, H. C.: Thermodynamics of complex dissociation in aqueous solution at elevated temperatures. The Journal of Physical Chemistry, Bd. 71, S. 3121–3136, 1967.
- /HOT 20/ Hotta, A., Akiba, M., Morita, A., Konovalenko, A., Villanueva, W., Bechta, S., Komlev, A., Thakre, S., Hoseyni, S. M., Sköld, P., Matsumoto, T., Sugiyama, T., Buck, M.: Experimental and Analytical Investigation of Formation and Cooling Phenomena in High Temperature Debris Bed. Journal of Nuclear Science and Technology, Bd. 57, Nr. 4, S. 353–369, DOI 10.1080/00223131.2019.1691078, 2020.
- /IAEA 24/ IAEA, International Atomic Energy Agency: IAEA PRIS Power Reactor Information System. Erreichbar unter <https://pris.iaea.org/PRIS/home.aspx>, abgerufen am 2024-03.
- /INA 75/ Inayatov, A.: Correlation of Data on Heat Transfer. Flow Parallel to Tube Bundles at Relative Tube Pitches of $1.1 < s/d < 1.6$. Heat Transfer - Soviet Research, Vol. 7, No. 3, S. 84–88, 1975.
- /KLE 10/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Erdmann, W., Luther, W., Nowack, H., Reinke, N., Schramm, B., Schwarz, S., Spengler, C., Stewering, J., Weber, G.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie generische Anwendungsrechnungen mit diesen Rechenprogrammen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH (GRS), GRS-A-3489, 2010.

- /MAR 22/ Marchetto, C., Ha, K. S., Herranz, L. E., Hirose, Y., Jankowski, T., Lee, Y., Nowack, H., Pellegrini, M., Sun, X.: Overview and main outcomes of the pool scrubbing lumped-parameter code benchmark on hydrodynamic aspects in IPRESKA project, Submitted for publication. In: American Nuclear Society (ANS), SCK-CEN (Hrsg.): 19th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. NURETH 19, virtual, 6. - 11. März 2022, 2022.
- /MES 70/ Mesmer, R. E.: Boric acid equilibria and pH in PWR coolants. In: Annual Meeting of International Water Conference. Pittsburgh, Pennsylvania, 1970.
- /NOW 08/ Nowack, H.: Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter beim Einsatz von Rekombinatoren und nach Wasserstoffverbrennungen. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum: Bochum, 2008.
- /NUS 16/ Nusselt, W.: Die Oberflächenkondensation des Wasserdampfes. Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure, Bd. 60, Nr. 27, S. 541-546, 569-575, 1916.
- /PEL 22/ Pellegrini, M., Journeau, C., Seiler, N., Herranz, L. E., Bocanegra, R., Spengler, C., Tsuzuki, N., Kino, C., Dolganov, K., Kapustin, A., Bouillet, C., Barrachin, M., Luxat, D.: Analytical Benchmark On The Long Term Interaction Of Molten Core And Dry Concrete At Fukushima Daiichi Unit 1. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): 19th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19). NURETH-19, Brussels, Belgium (virtual), 6. - 11. März 2022, ISBN 9789076971261, 2022.
- /PES 23/ Peschel, J., Koch, M. K.: Entwicklung eines Modells zur Simulation von Schüttbetten in AC2, Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMWi 1501629. Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-25, 2023.
- /PES 24a/ Peschel, J.: Erweiterung der Spätphasen-Modellbasis des Systemcodes AC² zur Simulation von Schüttbetten. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum: Bochum, 2024.

- /PES 24b/ Peschel, J.: Weiterentwicklung der AC²-Modellbasis zur Simulation von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum, Arbeitstreffen GRS – PSS, Bochum, Mittwoch 22. Mai 2024. Hrsg.: Ruhr-Universität Bochum, 2024.
- /RIS 15/ Risken, T.: Modellierung des sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitrisses zur Analyse seines Einflusses auf die Gasverteilung in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken mit dem Code COCOSYS. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Lehrstuhl Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-Universität Bochum (LEE), Ruhr-Universität Bochum (RUB): Bochum, 2015.
- /SPE 14/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eckel, J., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Techreport. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH (GRS), GRS 358, 2014.
- /SPE 17/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung von Modellen für Stör- oder Unfallabläufe im Sicherheitsbehälter, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), ISBN 978-3-946607-67-0: Köln, 2017.
- /SPE 18/ Spengler, C., Bakalov, I., Reinke, N., Sonnenkalb, M.: Uncertainty and Sensitivity Analyses in Support of Model Development and Validation of the Containment Module COCOSYS of the AC² Code – Application for Molten Corium/Concrete Interaction (MCCI). In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 14. - 18. Oktober 2018, 2018.
- /SPE 21/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H.: Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC² (ATHLET/CD/COCOSYS). GRS-Bericht, Bd. 629, GRS-629, 169 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, März 2021.
- /SPE 23a/ Spengler, C., Bakalov, I.: A simplified core catcher model for the containment code AC2/COCOSYS. Annals of Nuclear Energy, Nr. 188, 2023.

- /SPE 23b/ Spengler, C.: Status of Modelling and Simulation Activities for Ex-Vessel Core Melt Behaviour at GRS. In: NUGENIA (Hrsg.): NUGENIA TA2.1 and TA2.2 Workshop. KIT, Karlsruhe, Germany, 13. - 14. Februar 2023, 2023.
- /VDI 13/ Verein Deutscher Ingenieure (VDI), VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC): VDI-Wärmeatlas, Mit 320 Tabellen. VDI-Buch, 11. Aufl., 1760 S., ISBN 978-3-642-19981-3, DOI 10.1007/978-3-642-19981-3, Springer Vieweg: Berlin, 2013.
- /WAG 16/ Wagner, T.: Dokumentation der Einzeleffektversuche für das Projekt EASY, Arbeitsbericht. AREVA NP GmbH (AREVA): Karlstein, Juli 2016.
- /WAG 17/ Wagner, T., Herbst, V., Mull, T.: Instrumentation Report on the INKA test facility for the EASY experiments, Report: D02-ARV-01-110-199. AREVA NP GmbH (AREVA): Karlstein, April 2017.
- /WAN 19/ Wang, F., Cheng, X.: Modeling approach of flowing condensate coverage rate on inclined wall for aerosol wash down. Nuclear Engineering and Design, Bd. 355, S. 110349, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110349, 2019.
- /WAN 20/ Wang, F., Cheng, X.: Extension and validation of aerosol wash-down model on inclined wall. Annals of Nuclear Energy, Bd. 2020, 2020.
- /WAN 21/ Wang, F., Cheng, X., Gupta, S.: COCOSYS analysis on aerosol wash-down of THAI-AW3 experiment and generic containment. Annals of Nuclear Energy, Bd. 153, S. 108076, DOI 10.1016/j.anucene.2020.108076, 2021.
- /WEB 14/ Weber, G.: Erweiterung des pH-Modells in COCOSYS-AIM, Bildung von HNO₃ in der Containmentatmosphäre und Transport in den Reaktorsumpf. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, 2014.
- /WEY 19/ Weyermann, F., Spengler, C., Schöffel, P. J., Buchholz, S., Steinhoff, T., Sonnenkalb, M., Wielenberg, A., Schaffrath, A.: Development of AC² for the simulation of advanced reactor design of Generation 3/3+ and light water cooled SMRs. Kerntechnik, Bd. 84, Nr. 5, S. 357–366, DOI 10.3139/124.190068, 2019.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schematische Darstellung des Datensatzes	7
Abb. 2.2	Zeitverlauf des Dampf-Volumenanteils in Zone A1	8
Abb. 2.3	Vertikal abfließender Wasserfilm entlang einer Struktur.....	10
Abb. 2.4	Einfluss der Modellerweiterung für reine Dampfatosphäre auf den berechneten Wärmeübergangskoeffizienten.....	12
Abb. 2.5	Einfluss der Mittelungsart auf den berechneten Wärmeübergangskoeffizienten	15
Abb. 2.6	Wärmeübergangskoeffizient über Dampf-Volumenanteil	16
Abb. 2.7	Vergleich von Literaturdaten /VDI 13/ mit dem berechneten WÜK	16
Abb. 2.8	Einfluss der Rohrneigung auf den berechneten WÜK	18
Abb. 2.9	Kondensat tropft auf fluchtend tiefergelegene Rohre	19
Abb. 2.10	Eingabebeispiel für Rohr- und Bündelgeometrien zum aktuellen Stand	20
Abb. 2.11	Die Modellerweiterung für reine Dampfatosphäre wurde auch für CDW implementiert und führt zu einer Angleichung der mit CO1 und CDW berechneten WÜK.....	21
Abb. 2.12	ATHLET/COCOSYS-Nodalisierungsschema (nicht maßstäblich)	23
Abb. 2.13	Beispiel der Eingabe für die Kopplung des gesamten ATHLET-HCO (HCC1-HX) mit der HECU-Struktur (HCO1N1) in COCOSYS	24
Abb. 2.14	Zeitlicher Druckverlauf im Behälter bei konstanter Einspeisung gesättigten Dampfes in den Wasserpool.....	25
Abb. 2.15	Zeitlicher Verlauf des Massenstroms durch den Gebäudekondensator	26
Abb. 2.16	Zeitlicher Verlauf der Kühlleistung des Gebäudekondensators	27
Abb. 2.17	Wassertemperatur im unteren Plenum des Absetzbeckens	28
Abb. 2.18	ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage.....	30
Abb. 2.19	Flutbehälter mit Messstellen für den Druck und die Temperatur (links /WAG 17/) und die COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters (rechts)	31

Abb. 2.20	INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich der berechneten Atmosphärentemperatur mit der im Experiment gemessenen Atmosphärentemperatur im Flutbehälter	33
Abb. 2.21	INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich des berechneten Massenstroms mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom durch den Gebäudekondensator.....	34
Abb. 2.22	INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators	35
Abb. 2.23	INKA-Test CCC_050_030_20_1: Vergleich des von ATHLET sowie von COCOSYS berechneten Energieeintrags durch die gekoppelten HCO-Strukturen.....	36
Abb. 2.24	Geschichtete Nodalisierung eines Wasserpools	37
Abb. 2.25	Verlauf des Drucks beim Volllaufen einer Zone; die Gasphase wird hier bei einer Zeit von 3,34 s gelöscht.....	41
Abb. 2.26	Geschichtete Nodalisierung eines Wasserpools; Pfeile an den Verbindungen vA bis vD zeigen die Strömungsrichtung bei positivem Massenstrom	42
Abb. 2.27	Vergleich einer Rechnung ohne die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte (Referenz) mit einer Rechnung mit erweiterter Modellierung ($\tau dT_w/dt$)	43
Abb. 3.1	Molare Konzentrationen der Spezies im Sumpf	48
Abb. 3.2	Berechnete CO ₂ -Stoffmengen	49
Abb. 3.3	pH-Wert in der Testrechnung.....	50
Abb. 3.4	Molare Massen der Spezies im Sumpf.....	51
Abb. 3.5	Berechnete CO ₂ -Mengen.....	52
Abb. 3.6	Konzentrationen der Carbonate in Abhängigkeit des pH-Werts	54
Abb. 3.7	Vergleich berechneten CO ₂ -Konzentrationen.....	55
Abb. 3.8	Vergleich der pH-Werte	56
Abb. 3.9	Vergleich der Konzentrationen zwischen AFP und AFP2.....	58
Abb. 3.10	Vergleich der pH-Werte zwischen AFP und AFP2	59
Abb. 3.11	Vergleich der Temperaturen oberhalb des Pools in WH-33.1 nach /FRE 24/	63

Abb. 3.12	Vergleich des Dampfpartialdrucks oberhalb des Pools in WH-33.1 nach /FRE 24/.....	64
Abb. 3.13	Vergleich des Entrainment-Faktors in TH-14 zwischen AFP und AFP2	66
Abb. 3.14	Vergleich der Aerosolkonzentration in TH-14 zwischen AFP und AFP2	67
Abb. 3.15	Vergleich des Massenmedians in TH-14 zwischen AFP und AFP2.....	67
Abb. 3.16	Schemazeichnung der THAI Aer-Versuche.....	69
Abb. 3.17	Vergleich der Aerosolkonzentrationen in THAI Aer-4	71
Abb. 3.18	Vergleich der Aerosolkonzentrationen in der Resuspensionszone.....	72
Abb. 3.19	Nuklidkarte mit den von VENTINA benutzten Nukliden	74
Abb. 3.20	Speziesbaum in AFP2	75
Abb. 3.21	Beispielhafte Einbindung in den Speziesbaum	76
Abb. 3.22	Nodalisierung der Filterstrecke im ACE-Versuch	79
Abb. 3.23	Isotopenmasse auf Filterstruktur.....	80
Abb. 3.24	Temperaturen im Filter-Testbeispiel.....	81
Abb. 3.25	Eintrag der Nachzerfallsleistung in die Strukturen.....	82
Abb. 3.26	Real-Zeit-Faktor im Filter-Testbeispiel	83
Abb. 3.27	Ausgabe der Spaltproduktmassen, oben: alte Ausgabe, unten: Nutzerdefinierte Zonengruppen und ausgewählte Spaltproduktisotope und Elemente	85
Abb. 4.1	Schematische Darstellung einer Partikelschüttung in der Reaktorgrube.....	88
Abb. 4.2	Implementierung des Modells DEMON in ATHLET-CD /PES 24b/.....	90
Abb. 4.3	Kumulative Verteilungsfunktion der COCOMO-Rechenfälle bezogen auf die spezifische Dryout-Wärmestromdichte (aus /SPE 21/)	96
Abb. 4.4	Wassermasse als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm	97
Abb. 4.5	Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm.....	98

Abb. 4.6	Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei originaler Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung	98
Abb. 4.7	Wassermasse als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm	99
Abb. 4.8	Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm	100
Abb. 4.9	Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei angehobener Leistungsdichte und mittlerem Partikeldurchmesser von 3 mm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung	100
Abb. 4.10	Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm	101
Abb. 4.11	Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung ..	102
Abb. 4.12	Wassermasse als Funktion der Zeit bei Variation des mittleren Partikeldurchmessers zwischen 3 mm, 3 cm und 30 cm	102
Abb. 4.13	Temperatur der Partikel als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 %, und 90 %	103
Abb. 4.14	Wärmestrom zwischen Partikeln und Wasser (blau) als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 % und 90 %. Orange dargestellt: Nachzerfallswärmeleistung	104
Abb. 4.15	Wassermasse als Funktion der Zeit bei Variation des Dampfgehaltes (Void) zwischen 20 %, 40 % und 95 %	105
Abb. 5.1	Schema zur Kopplung eines ATHLET-HCO (bestehend aus 5 Kontrollvolumina) mit einer COCOSYS-Struktur	112
Abb. 5.2	Aufbau der Testdatensätze für die reine COCOSYS-Rechnung (links) und die mit ATHLET gekoppelte Rechnung (rechts)	113
Abb. 5.3	Testrechnung mit CO1-Modell, COCOSYS vs. gekoppelt mit ATHLET	114
Abb. 5.4	Testrechnung mit CO1-Modell, COCOSYS vs. gekoppelt mit ATHLET	114
Abb. 5.5	2-Zonen – Testbeispiel für COCOSYS bzw. AC ²	117
Abb. 5.6	Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC ²	117

Abb. 5.7	Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC ²	118
Abb. 5.8	Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC ²	118
Abb. 5.9	Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC ² , Temperaturen der 5 Materialschichten in Struktur S1	119
Abb. 5.10	Testrechnung WGR mit 2 Zonen-Beispiel, COCOSYS – AC ² , Einfluss der Kopplung auf die berechnete Temperatur in der äußersten Materialschicht.....	120
Abb. 5.11	Entwicklung der Gas- und Strukturtemperaturen im unteren Plenum bei Verwendung des LHEAD-Modells im Konvoi-Datensatz	123
Abb. 5.12	Zeitlicher Verlauf der Schmelztemperatur im unteren Plenum bei Verwendung des LHEAD-Modells im Konvoi-Datensatz	124
Abb. 5.13	Energiefluss von der Schmelze ins Fluid im Fukushima-LHEAD-Test....	124
Abb. 5.14	Temperaturverlauf der Schmelze im Fukushima-LHEAD-Test.....	125
Abb. 5.15	Schmelzefreisetzung ins Containment in gekoppelter Rechnung zwischen LHEAD und COCOSYS	127
Abb. 6.1	Vergleich des alten (a) zu dem geänderten (b) Modell für die Bildung von Organoiod an Stahloberflächen.....	135
Abb. 6.2	THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Druckverlauf im Versuchsbehälter (Sprühen zwischen 1 993 und 3 780 s)	139
Abb. 6.3	THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Kondensatmassenströme	139
Abb. 6.4	THY-Sprühsysteme, MISTRA MASP1, Real Time Factor (RTF > 1 bedeutet schneller als Echtzeit)	140

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Anfangs- und Randbedingungen des ausgewählten INKA-Experimentes mit Dampf-Luft-Gemisch im Flutbehälter /WAG 16/	29
Tab. 3.1	Massenanteile für die Cs-Isotopen.....	79
Tab. 4.1	Schüttbettparameter des Testrechenfalls.....	95

**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

ISBN 978-3-910548-70-1