

# Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)

Paul Fuchs,  
Maximilian Hoffmann,  
Johannes Hoffrichter,  
Tobias Jankowski,  
Florian Krist,  
Jan Peschel,  
Nicole Richter,  
Gregor Stahlberg,  
Marco K. Koch

Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629:  
Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)



# Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)

Paul Fuchs,  
Maximilian Hoffmann,  
Johannes Hoffrichter,  
Tobias Jankowski,  
Florian Krist,  
Jan Peschel,  
Nicole Richter,  
Gregor Stahlberg,  
Marco K. Koch

Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629:  
Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)

Final Report of the Project BMUV 1501629:  
Analysis and external validation of the AC<sup>2</sup> model basis (AVAMO)

Projektleitung/Project Leader: M. K. Koch

August 2024

PSS-TR-35

Ruhr-Universität Bochum  
Fakultät Maschinenbau  
Institut für Energietechnik  
AG Plant Simulation and Safety  
Prof. Dr.-Ing. Marco K. Koch  
44780 Bochum



**Anmerkung:**

Das diesem Bericht zu Grunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz unter dem Förderkennzeichen BMUV 1501629 gefördert. Die Zuständigkeit für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren. Eine Haftung für Folgen aus der Verwendung oder Weiterverarbeitung durch Dritte bleibt jedoch grundsätzlich ausgeschlossen.

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit  
und Verbraucherschutz

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

Während der Erstellung des Berichts, haben mehrere Institutionen wichtige Unterstützung geleistet, für die sich die Autoren herzlich bedanken.

Dem Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz sowie der Ruhr-Universität Bochum danken wir für die Förderung des Vorhabens.

Seitens der GRS standen insbesondere Herr L. Lovasz, Herr P. Pandazis, Herr Dr.-Ing. T. Hollands, Herr P. Schöffel, Herr S. Band sowie Herr Dr.-Ing. C. Spengler durch die Unterstützung bei programmtechnischen Fragen zum Programmpaket AC<sup>2</sup> hilfreich zur Seite.

Bochum, im August 2024

Die Autoren

## Kurzfassung

Der vorliegende Bericht ist der Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben „Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)“, welches durch das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Kennzeichen BMUV 1501629 gefördert und in der Arbeitsgruppe Plant Simulation and Safety (PSS) der Ruhr-Universität Bochum (RUB) bearbeitet wird. Das Ziel des Vorhabens ist die gezielte Analyse und Validierung des Programmpaket AC<sup>2</sup> und der darin enthaltenen Programmteile COCOSYS, ATHLET und ATHLET-CD zur Berechnung störfallrelevanter In- und Ex-Vessel-Phänomene. In diesem Bericht werden die wichtigsten Ergebnisse der einzelnen Arbeitspunkte dargestellt.

Im Rahmen des Arbeitspunktes AC<sup>2</sup> - COCOSYS wird der Code zum einen auf seine Eignung zur Abbildung der Verbrennung von Wasserstoff und Kohlenmonoxid untersucht. Dabei werden neue Korrelationen der Brenngeschwindigkeit getestet und ein Konzept für die Trennung von unverbrannter und verbrannter Atmosphäre entwickelt. Zum anderen wird die Abbildung von Phänomenen während Schmelze-Beton-Wechselwirkungen unter Berücksichtigung einer gefluteten Schmelze untersucht. Zudem wird das Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter mit dem neuen Modul AFP2 (vormals NEWAFP) auf Basis der Nachrechnung des Experiments PHEBUS FPT3 mit der aktuellen Code-Version überprüft und analysiert. Die Arbeiten ergänzen die vom Codeentwickler GRS durchgeführten Validierungsarbeiten anhand des Experiments PHEBUS FPT1 (BMUV RS1579). Neben der Validierung des Moduls AFP2 werden Simulationen mit der GRS-Software SUSANA, sowie Analysen des Unfalls in Block 3 des Kraftwerks Fukushima Daiichi durchgeführt.

Für AC<sup>2</sup> - ATHLET wird eine vertiefte Analyse der implementierten Kondensationsmodelle sowie die Untersuchung der Eignung der Modelle in Bezug auf die Simulation von Druckstoßphänomenen in zweiphasigen Strömungsbedingungen durchgeführt. Dabei werden eine Harmonisierung der Modellbasis geprüft und Entwicklungspotential für AC<sup>2</sup> - ATHLET mithilfe von unterstützenden CFD-Simulationen abgeleitet.

Hinsichtlich der durchgeführten Arbeiten mit AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD liegt der Fokus auf der Validierung und Weiterentwicklung des Codes für die Abbildung von Kernzerstörungsphänomenen. Dies umfasst zum einen die Abbildung der Spaltproduktfreisetzung aus Schmelzepools im unteren Reaktorplenum. Zum anderen werden neue vorläufige Modelle und Korrelationen zur Simulation von unfalltoleranten Brennelementkonzepten weiter- bzw. neu-entwickelt und analysiert. Darüber hinaus wird der Code für die Abbildung von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum erweitert.



---

## Abstract

This report is the final report of the research project “Analysis and external validation of the AC<sup>2</sup> model basis (AVAMO)” funded under the grant number BMUV 1501629 by the Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation, Nuclear Safety and Consumer Protection and performed by PSS group at RUB. The aim of the project is the detailed analysis and validation of the program package AC<sup>2</sup> and the modules COCOSYS, ATHLET and ATHLET-CD contained therein for the calculation of accident-relevant in- and ex-vessel phenomena. The most important results of the separate work packages are presented in this report.

As part of the AC<sup>2</sup> - COCOSYS work package, the capability of the code for modelling the combustion of hydrogen and carbon monoxide is investigated. New correlations of the burning rate are tested and a concept for the separation of unburnt and burnt atmospheres is developed. Further on, the simulation of phenomena during molten core concrete interaction is carried out considering a flooded melt. In addition, the aerosol behaviour in the containment is verified and analysed with the newly implemented AFP2 module (formerly known as NEWAFP) by the simulation of the PHEBUS FPT3 experiment with the current code version. The work complements the validation work carried out by the code developer GRS using the PHEBUS FPT1 experiment (BMUV RS1579). In addition to validating the AFP2 module, simulations will be carried out using the GRS software SUSA, and analyses of the accident in block 3 of the nuclear power plant Fukushima Daiichi are conducted.

For AC<sup>2</sup>-ATHLET, a detailed analysis of the implemented condensation models and an investigation of the capability of the models regarding the simulation of water hammer phenomena in two-phase flow conditions will be carried out. A harmonisation of the model basis is examined and development potential for AC<sup>2</sup> - ATHLET is derived based on accompanying CFD simulations.

Regarding the work carried out with AC<sup>2</sup>-ATHLET-CD, the focus is on the validation and further development of the code for simulating core degradation phenomena. This includes the simulation of fission product release from melt pools in the lower reactor plenum. Further on, new preliminary models and correlations for the simulation of accident tolerant fuel (ATF) concepts are further developed and analysed. In addition, the code will be extended for modelling debris beds in the lower reactor plenum.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung.....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der COCOSYS-Modellbasis .....</b>	<b>5</b>
2.1	AFP2.....	5
2.1.1	Best-estimate Simulation von PHEBUS FPT3 .....	5
2.1.2	SUSA .....	12
2.1.3	Fukushima Daiichi Block 3.....	15
2.1.4	Zusammenfassung .....	18
2.2	MCCI.....	19
2.2.1	Reduzierung des Benutzereinflusses des CCI-Moduls .....	19
2.2.2	Geflutete Schmelze-Beton-Wechselwirkung .....	25
2.2.3	Zusammenfassung .....	34
2.3	Verbrennung .....	36
2.3.1	Konzept zur Modellerweiterung .....	36
2.3.2	Korrelationen für die Flammenfrontgeschwindigkeit.....	44
2.3.3	Experimente .....	48
2.3.4	Modellierung.....	49
2.3.5	Ergebnisse .....	50
2.3.6	Zusammenfassung .....	59
<b>3</b>	<b>Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der ATHLET-Modellbasis.....</b>	<b>60</b>
3.1	Analyse der Kondensationsmodellbasis .....	60
3.1.1	Weiterentwicklung der AC <sup>2</sup> -ATHLET Kondensationsmodellbasis.....	60
3.1.2	Experimente .....	63
3.1.3	Modellierung.....	65
3.1.4	Ergebnisse .....	68
3.1.5	Vergleichende CFD-Untersuchungen .....	71
3.1.6	Zusammenfassung .....	75
<b>4</b>	<b>Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der ATHLET-CD Modellbasis.....</b>	<b>77</b>
4.1	Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzepool .....	77
4.1.1	Experimente .....	78
4.1.2	Modellierung.....	82
4.1.3	Ergebnisse .....	86
4.1.4	Zusammenfassung .....	89

4.2	ATF – Simulation unfalltoleranter Brennstoffe .....	91
4.2.1	Weiterentwicklung der AC <sup>2</sup> Modellbasis.....	91
4.2.2	Experimente .....	95
4.2.3	Modellierung.....	96
4.2.4	Ergebnisse .....	98
4.2.5	Zusammenfassung.....	100
4.3	Schüttbetten im unteren Plenum .....	102
4.3.1	Modellentwicklung .....	102
4.3.2	Experimente .....	105
4.3.3	Modellierung.....	106
4.3.4	Ergebnisse .....	108
4.3.5	Simulation des Unfalls im Kernkraftwerk TMI-2 .....	112
4.3.6	Zusammenfassung.....	116
<b>5</b>	<b>Bewertung der Modellbasis.....</b>	<b>118</b>
<b>6</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>123</b>
<b>7</b>	<b>Anhang.....</b>	<b>136</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1	Skizze der PHEBUS Versuchsanlage .....	6
Abbildung 2.2	Nodalisierung des Containments der Phebús Versuchsanlage .....	9
Abbildung 2.3	Abgelagerte Masse Cäsium im Versuch FPT3 und in der Simulation .....	10
Abbildung 2.4	Abgelagerte Masse Iod im Versuch FPT3 und in der Simulation .....	11
Abbildung 2.5	Suspendierte Masse Cäsium im Versuch FPT3 und in der Simulation .....	11
Abbildung 2.6	Suspendierte Masse Iod im Versuch FPT3 und in der Simulation .....	12
Abbildung 2.7	Standardisierte Regressionskoeffizienten (Pearson) der Unsicherheitsparameter für die suspendierte Masse Cäsium .....	14
Abbildung 2.8	Nodalisierung für die Simulation von Fukushima Daiichi Block 3 .....	15
Abbildung 2.9	Druckverlauf der ersten 180.000 s nach RESA im Drywell des FD-3 .....	16
Abbildung 2.10	Mit AFP2 simulierte komponentenspezifische (CsI, CsOH, Cs <sub>2</sub> MoO <sub>4</sub> ) Elementmassen (links: Cs; rechts: Iod) .....	17
Abbildung 2.11	Parameterstudie zur Sedimentationsgeschwindigkeit in der Kondensationskammer .....	17
Abbildung 2.12	Anteile der Bestandteile an der berechneten Zerstörungsenthalpie von Beton und gesamte berechnete Zerstörungsenthalpie über die Temperatur am Beispiel der BETA-Experimenten .....	22
Abbildung 2.13	Die effektiven Wärmeübergangskoeffizienten in Abhängigkeit von der Zerstörungstemperatur .....	23
Abbildung 2.14	Die effektive Wärmeübergangskoeffizienten in Anhängigkeit von der durchschnittlichen Heizleistung der BETA-Experimente .....	25
Abbildung 2.15	Simulationsergebnisse des COTELS C5a Experiments mit AC <sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR .....	26
Abbildung 2.16	Simulationsergebnisse des COTELS C5 Experiments mit AC <sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR .....	27
Abbildung 2.17	Simulationsergebnisse des COTELS C6 Experiments mit AC <sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR .....	28
Abbildung 2.18	Simulationsergebnisse des COTELS C10 Experiments mit AC <sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR .....	29

---

Abbildung 2.19	Berechnete Flutungsparameter aus dem implementierten Modell am Beispiel des ACE-L2 Experiments.....	32
Abbildung 2.20	Spaltproduktfreisetzung des ACE-L6 Experiments.....	32
Abbildung 2.21	Spaltproduktfreisetzung ACE-L7 Experiments.....	33
Abbildung 2.22	Prinzipskizze des Konzeptes zur Erweiterung des Verbrennungsmodells FRONT .....	38
Abbildung 2.23	Nodalisierungsskizze THAI+ Versuchsanlage für Verbrennungsversuche .....	49
Abbildung 2.24	Druckverlauf im Experiment HD-39 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2EM).....	51
Abbildung 2.25	Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD39 und der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2EM) .....	52
Abbildung 2.26	Temperaturverlauf in der Mitte des PAD im Experiment HD-39 (EXP) und den entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 EM) .....	52
Abbildung 2.27	Druckverlauf im Experiment HD-15 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20).....	53
Abbildung 2.28	Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-15 (EXP) und in den entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20) .....	54
Abbildung 2.29	Druckverlauf im Experiment HD-16 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20).....	54
Abbildung 2.30	Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-16 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20) .....	55
Abbildung 2.31	Druckverlauf im Experiment HD-22 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20).....	56
Abbildung 2.32	Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-22 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20) .....	57
Abbildung 2.33	Druckverlauf im Experiment HD-39 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20).....	58

---

Abbildung 2.34	Flammenausbreitung entlang der Mittelachse der Versuchsbehälter im Experiment HD-39 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20) .....	59
Abbildung 3.1	Schematische Darstellung der PPP Testanlage .....	64
Abbildung 3.2	Skizze der Experimentanlage Cold Water Hammer Test Facility .....	65
Abbildung 3.3	AC <sup>2</sup> -Nodalisierung der PPP-Testanlage .....	66
Abbildung 3.4	Nodalisierung der CWHTF .....	67
Abbildung 3.5	Druckverlauf und Dampfgehalt nach Ventilschluss - exp262 .....	68
Abbildung 3.6	Zwischenphasenfläche, Massentransferrate und Wassersäulengeschwindigkeit nach Ventilschluss - exp262 .....	69
Abbildung 3.7	Druckverlauf nach Ventilöffnung - exp015 .....	70
Abbildung 3.8	Zwischenphasenfläche, Massentransferrate und Wassersäulengeschwindigkeit nach Ventilöffnung – exp015 .....	71
Abbildung 3.9	Gitternetz der PPP-Anlage und CWHTF .....	72
Abbildung 3.10	Druckverlauf und Dampfgehalt nach Ventilschluss mit OpenFOAM und AC <sup>2</sup> -ATHLET – exp329 .....	73
Abbildung 3.11	Wasser-Wasserdampfanteil hinter dem Ventil - exp329 .....	74
Abbildung 3.12	Druckverlauf nach Ventilöffnung mit OpenFOAM und AC <sup>2</sup> -ATHLET – exp329 .....	74
Abbildung 3.13	Wasser-Wasserdampfanteil im Steigrohr – exp150 .....	75
Abbildung 4.1	Schematischer Aufbau der Rasplav-2 Testanlage im Rahmen des EU-Projekts LPP .....	79
Abbildung 4.2	Schematischer Aufbau des Schmelzofens für die Versuchsreihe LPP WP2 .....	80
Abbildung 4.3	Schematischer Aufbau Rasplav-3 Testanlage im Rahmen des EVAN-Projekts (links), numerische Simulation der Gasströmung oberhalb des Schmelzepools (rechts) .....	82
Abbildung 4.4	Schematische Darstellung der Einflussgrößen an der Phasengrenzschicht .....	84
Abbildung 4.5	Experimentelle und simulierte Bariumfreisetzung, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2 .....	87

---

Abbildung 4.6	Simulierter Verlauf der Barium-Freisetzungsrates, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2.....	88
Abbildung 4.7	Experimentelle und simulierte Molybdänfreisetzung, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2.....	88
Abbildung 4.8	Experimentelle und simulierte Bariumfreisetzung (links) und Rutheniumfreisetzung (rechts), Versuch EVAN-1FP .....	89
Abbildung 4.9	Oxidationsraten für Cr (li.) und Aktivierungsenergie (re.) .....	93
Abbildung 4.10	Oxidationskinetiken für Cr (grün), FeCrAl (gelb / grau) und Zr (blau).....	94
Abbildung 4.11	Versuchsphasen der Experimente Q-L3HT (li.) und Q-19 (re.) .....	95
Abbildung 4.12	Vereinfachte Darstellung der Quench-Anlage am KIT .....	96
Abbildung 4.13	AC <sup>2</sup> Simulationsmodell und Bündelquerschnitt.....	97
Abbildung 4.14	L3HT-Temperaturverteilung bei 950 mm und H <sub>2</sub> -Freisetzung.....	98
Abbildung 4.15	ATF-1-Temperaturverlauf bei 950 mm und H <sub>2</sub> -Freisetzung .....	99
Abbildung 4.16	Q-19 Temperaturverlauf bei 950 mm, 850 mm und H <sub>2</sub> -Freisetzung.....	100
Abbildung 4.17	Programmstruktur des Modells DEMON und Implementierung in ATHLET-CD.....	103
Abbildung 4.18	Umwandlung der Schmelze in ein poröses Schüttbettvolumen .....	103
Abbildung 4.19	Abbildung von Wärmetransfervorgängen in Schüttbetten.....	104
Abbildung 4.20	Schematische Darstellung der DEBRIS Versuchsanlage .....	105
Abbildung 4.21	Modellierung der DEBRIS Versuchsanlage mit AC <sup>2</sup> , ASTEC und COCOMO .....	107
Abbildung 4.22	Thermisches Verhalten auf einer Höhe von 0,09 m (links) bzw. 0,49 m (rechts) in der Schüttbettmitte.....	108
Abbildung 4.23	Temperaturprofile 150 s nach Beginn des Abkühlvorgangs.....	109
Abbildung 4.24	Temperaturprofile 250 s nach Beginn des Abkühlvorgangs.....	110
Abbildung 4.25	Temperaturprofile 400 s nach Beginn des Abkühlvorgangs.....	111
Abbildung 4.26	Verlauf der Quenchfront.....	111
Abbildung 4.27	Nodalisierung des Primärkreislaufs des Kernkraftwerks TMI-2.....	112
Abbildung 4.28	Primärdruckverlauf während des Unfalls in TMI-2 .....	114
Abbildung 4.29	Detailansicht Primärdruckverlauf in Phase 4 und 5 .....	114

---

Abbildung 4.30	Simulierte Temperaturen zerstörter Kernmaterialien im unteren Reaktorplenum auf einer Höhe von 0,131 m (links) und 0,393 m (rechts).....	115
Abbildung 4.31	Konfiguration verlagelter Kernmaterialien in TMI-2 .....	116



## Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1	Zieltemperaturen der Heizelemente in der Degradation-Phase und der Aerosol-Phase .....	8
Tabelle 2.2	In SUSA für FPT3 verwendete Unsicherheitsparameter.....	13
Tabelle 2.3	Anteile der hauptsächlichen Betonbestandteile .....	20
Tabelle 2.4	Berechnete Anteile der Verbindungen von $\text{CaCO}_3$ und $\text{Ca(OH)}_2$ .....	21
Tabelle 2.5	Berechnete Zerstörungsenthalpien für verschiedene Temperaturen .....	21
Tabelle 2.6	Testmatrix der COTELS-Experimente .....	26
Tabelle 2.7	Für die Modellerweiterung in der Subroutine FRONT_FLAG neu zu berechnende Größen und deren Verwendung .....	41
Tabelle 2.8	Für die Modellerweiterung in anderen Subroutinen neu zu berechnende Größen und deren Verwendung .....	42
Tabelle 2.9	Potenzielle Konflikte der vorgeschlagenen Modellerweiterung mit anderen Modellen in COCOSYS .....	43
Tabelle 2.10	Für die Validierung der Korrelation herangezogene Versuche .....	48
Tabelle 3.1	Modelle zur Berechnung der DKK Massentransferrate.....	63
Tabelle 3.2	Randbedingungen der PPP-Experimente exp262 und exp329.....	66
Tabelle 3.3	Randbedingungen der CWHTF-Experimente exp015 und exp040a .....	67
Tabelle 4.1	Randbedingungen der betrachteten LPP-Experimente .....	81
Tabelle 4.2	Koeffizienten für Arrhenius-Funktion in Abbildung 4.10 .....	95



## Abkürzungsverzeichnis

<b>Abkürzung</b>	<b>Erläuterung</b>
AC <sup>2</sup> /AC2	ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS (Programmpaket)
AFP2	Aerosol and Fission Products 2 (Modul von AC <sup>2</sup> )
AG	Arbeitsgruppe
AICC	Adiabatic isochoric complete combustion
AIDA	Analysis of the Interaction between Core Debris and the RPV during severe Accidents
AMHYCO	Towards an enhanced accident management of the hydrogen/CO combustion risk
AMMD	Aerodynamic Mass Median Diameter
AP	Arbeitspaket
ARC-F	Analysis of Information from Reactor Buildings and Containment Vessels of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station
ASTEC	Accident Source Term Evaluation Code
ATF	Accident Tolerant Fuel
ATHLET	Analysis of Thermal-hydraulics of Leaks and Transients
ATHLET-CD	Analysis of Thermal-hydraulics of Leaks and Transients with Core Degradation
AVAMO	Analyse und externe Validierung der AC <sup>2</sup> Modellbasis
BETA	Beton-Schmelze-Anlage
BF	Fluten von unten (engl. bottom-flooding)
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
BMUV	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
BSAF	Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station
CCI	Core-Concrete Interaction

CFD	Computational Fluid Dynamics
CWHTF	Cold Water Hammer Test Facility
CO1	Combined free and forced convective and condensation model
COCOSYS	Containment Code System
DCH	Direct containment heating
DECOR	Deflagration in a chain of rooms
DEMON	Debris Model for Late Phase Phenomena
DF	Dekontaminierungsfaktor
DKK	Direktkontaktkondensation
EU	Europäische Union
EVA3A	Externe Validierung und Analyse ausgewählter Modelle der Störfallanalysecodes ASTEC, ATHLET und ATHLET-CD
EXP	Experiment
FACE	Fukushima Daiichi Nuclear Power Station Accident Information Collection and Evaluation
FD-3	Fukushima Daiichi Block 3
FEBE	Forward Euler Backward Euler
FP	Fission Product
FPT	Fission Product Test
FRONT	Flame front propagation model
FTP	Filmpenetrationstheorie
FSI	Fluid-Struktur Interaktion
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
GS	Gitternetzsensor
HAMMERFOAM	Simulation und Analyse von Wasserhammer Phänomenen mit OpenFOAM und ATHLET
HD	Hydrogen Deflagration
HEFF	Effektive Wärmetransferkoeffizienten
HPCI	High Pressure Coolant Injection

---

HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf
IKE	Institut für Kernenergetik und Energiesysteme
INST	Instationär
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
JRC	Joint Research Centre of the European Commission
KEK	Kompetenzerhalt in der Kerntechnik
KIT	Karlsruher Institut für Technologie
KoKa	Kondensationskammer
KV	Kontrolvolumen
LHEAD	Lower Head
LB	Großes Leck (engl. Large Break)
LOCA	Kühlmittelverluststörfall (engl. Loss of Coolant Accident)
LP	Unteres Reaktorplenum (engl. lower plenum)
LPP	Late Phase Source Term Phenomena
LWR	Leichtwasserreaktor
MCCI	Molten Corium Concrete Interaction
MCS	Monte Carlo Simulation
MMD	Mass-Median-Diameter (Massenbezogener Äquivalenzdurchmesser)
mod	Modifiziert
MUSA	Management and Uncertainties of Severe Accidents
NEA	Nuclear Energy Agency
NewAFP	New Aerosol and Fission Products Modul
NKG	Nicht-kondensierbares Gas
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
PAD	Parallel Attachable Drum
PORV	Druckhalterabblaseventil (engl. pilot-operated relief valve)
PPP	Pilot Plant Pipework
PSS	Plant Simulation and Safety

PZS	Plesset-Zwick und Sideman
RCIC	Reactor Core Isolation Cooling System
RDB	Reaktordruckbehälter
REPF502	Containmentbehälter
RF	Reduktionsfaktor
RUB	Ruhr-Universität Bochum
SBLOCA	Kühlmittelverluststörfall mit kleiner Leckage (engl. small break loss of coolant accident)
SP	Spaltprodukt
SST	Shear Stress Transport
SUSA	Software for Uncertainty and Sensitivity Analyses
TC	Thermoelement (engl. thermocouple)
TF	Fluten von oben (engl. top-flooding)
TFO	Thermo-Fluid Objekt
THAI	Thermal-Hydraulics, Hydrogen, Aerosol, and Iodine
TMI	Three-Mile-Island
TRL	Technologiereifegrad
TTV	THAI Test Vessel
UMSICHT	Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik
VAMOCAAD	Externe Validierung und Modellanalyse der Codesysteme AC <sup>2</sup> und ASTEC mit unterstützenden CFD-Detailanalysen
VOF	Volume-of-Fluid
WASA-BOSS	Weiterentwicklung und Anwendung von Severe Accident Codes – Bewertung und Optimierung von Störfallmaßnahmen
WH	Wasserhammer
ZPF	Zwischenphasenfläche
Zry	Zircalloy

## Formelzeichen

### Lateinische Formelzeichen

Symbol	Einheit	Erläuterung
$A$	[-]	Hilfsgröße in der effektiven Lewis-Zahl (Kapitel 2.3)
$A$	[m <sup>2</sup> ]	Fläche (Kapitel 3.1, 4.1)
$A$	[g <sup>2</sup> /cm <sup>4</sup> s]	Präexponentieller Faktor (Kapitel 4.2)
$B$	[-]	Versuchsanlagenspezifischer Einflussfaktor
$CFR$	[-]	Konstante in der Turbulenzintensität
$c$	[mol/m <sup>3</sup> ]	Konzentration
$c_p$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> K]	Spezifische Wärmekapazität
$c_s$	[m/s]	Schallgeschwindigkeit
$D$	[m <sup>2</sup> /s]	Diffusionskoeffizient
$E$	[J/mol]	Aktivierungsenergie
$F$	[-]	Dimensionsloser Faktor
$G$	[kgm <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Gibbs-Energie
$h$	[m]	Höhe
$H$	[kJ/kg]	Enthalpie
$htc$	[kg/s <sup>3</sup> K]	Wärmeübertragungskoeffizient
$k$	[-]	Freisetzungskoeffizient
$K$	[-]	Gleichgewichtskonstante
$K_p$	[g <sup>2</sup> /cm <sup>4</sup> s]	Oxidationsrate
$\mathcal{L}$	[m]	Markstein-Länge
$L_c$	[m]	Charakteristische Länge
$m$	[kg]	Masse
$\dot{m}$	[kg/s]	Massenstrom
$M$	[kg/mol]	Molmasse
$\dot{M}$	[kg/s]	Kondensationsrate

---

$\bar{M}$	[kg/mol]	Mittlere Molmasse
$n$	[m <sup>-3</sup> ]	Anzahl pro Kubikmeter
$N$	[mol]	Stoffmenge
$NFR$	[-]	Konstante in der Turbulenzintensität
$p$	[kg/ms <sup>2</sup> ]	Druck
$p_s$	[kg/ms <sup>2</sup> ]	Sättigungsdampfdruck
$Q$	[kJ]	Wärmemenge
$\dot{Q}$	[kJ/s]	Wärmestrom
$S$	[m/s]	Brenngeschwindigkeit
$T$	[K]	Temperatur
$u'$	[m/s]	Turbulenzintensität
$U$	[m/s]	Geschwindigkeit
$r$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	Spezifische Verdampfungsenthalpie
$R$	[kJ/(molK)]	Universelle Gaskonstante für ideale Gase
$RF$	[-]	Reduktionsfaktor
$t$	[s]	Zeit
$T$	[K]	Temperatur
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen
$w$	[m/s]	Strömungsgeschwindigkeit
$x$	[mol/mol]	Stoffmengenanteil (Kapitel 2.2, 2.3, 4.1)
$X$	[cm]	Schichtdicke (Kapitel 4.2)
$Y$	[kg/kg]	Gewichtsanteil

### Griechische Formelzeichen

Symbol	Einheit	Erläuterung
$\alpha$	[-]	Exponent der Temperaturabhängigkeit (Kapitel 2.3)
$\alpha$	[-]	Phasenanteil (Kapitel 3.1)
$\alpha$	[-]	alpha-Aluminium, FeCrAl-Oxidation (Kapitel 4.2)

---

$\beta$	[-]	Exponent der Druckabhängigkeit (Kapitel 2.3)
$\beta$	[-]	Massentransferkoeffizient (Kapitel 4.1)
$\Delta$	[-]	Rechengitter (Kapitel 2.3)
$\Delta$	[-]	Differenz (Kapitel 4.1)
$\kappa$	[-]	Isentropenexponent
$\lambda$	[kgm/s <sup>3</sup> K]	Wärmeleitfähigkeit
$\mathcal{E}$	[-]	Flammenfaltung
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\sigma$	[-]	Vergrößerung der Flammenoberfläche durch Turbulenz
$\eta$	[kg/(ms)]	Dynamische Viskosität
$\phi$	[-]	Äquivalenzverhältnis

### Indizes

Symbol	Erläuterung
0	Unverbrannter Zustand (Kapitel 2.3)
0	Standardgröße (Kapitel 4.1)
1	Verbrannter Zustand
$\infty$	Bulk
<i>AICC</i>	Adiabatic Isochoric Complete Combustion
<i>B</i>	Blase
<i>cond</i>	Konduktion (engl. conduction)
<i>conv</i>	Konvektion (engl. convection)
<i>dec</i>	Radioaktiver Zerfall (engl. decay)
<i>deco</i>	Zersetzung/Zerstörung (engl. decomposition)
<i>DKK</i>	Direktkontaktkondensation
<i>eff</i>	Effektiv
<i>eq</i>	Gleichgewicht
<i>Falt</i>	Flammenfaltung

---

<i>F</i>	Brennstoff (engl. Fuel)
<i>g</i>	Gas
<i>i</i>	Komponentenspezifisch (Kapitel 2.3)
<i>i</i>	Zwischenphase (Kapitel 3.1)
<i>J</i>	Junction
<i>KV</i>	Kontrollvolumen
<i>l</i>	Flüssigkeit (engl. liquid)
<i>L</i>	Laminar
<i>Luft</i>	in Luft
<i>pool</i>	Schmelzpool
<i>pow</i>	Leistung (engl. power)
<i>p</i>	Druck
<i>Ph</i>	Phasengrenze
<i>PZ</i>	Plesset-Zwick
<i>PZS</i>	Plesset-Zwick und Sideman
<i>rad</i>	Strahlung (engl. radiation)
<i>ref</i>	Referenz
<i>s</i>	Sättigung
<i>S</i>	Sideman
<i>Streck</i>	Flammenstreckung
<i>SZ</i>	Source Zone
<i>T</i>	Turbulent/Turbulenz
<i>Thermo</i>	Temperatur und Druck
<i>TZ</i>	Target Zone
<i>v</i>	Dampf
<i>VA</i>	Dampf
<i>X</i>	Spaltprodukt/Komponente
<i>Z</i>	Zone

**Superskripte**

0 Ungestreckt

**Chemische Elemente und Verbindungen**

Ag	Silber
Al	Aluminium
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Aluminiumoxid
Ba	Barium
BaO	Bariumoxid
CO	Kohlenstoffmonoxid
Cr	Chrom
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Chromoxid
Cs	Cäsium
Fe	Eisen
I	Iod
In	Indium
Mo	Molybdän
MoO <sub>3</sub>	Molybdän(VI)-oxid
Ru	Ruthenium
Sr	Strontium
Zr	Zirconium

**Dimensionslose Kennzahlen**

<i>Le</i>	Lewis-Zahl
<i>Gr</i>	Grashof-Zahl
<i>Re</i>	Reynolds-Zahl
<i>Sc</i>	Schmidt-Zahl
<i>Sh</i>	Sherwood-Zahl



# 1 Einleitung

Der vorliegende Bericht ist der Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben „Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup> Modellbasis (AVAMO)“, welches durch das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Kennzeichen BMUV 1501629 gefördert und in der Arbeitsgruppe (AG) Plant Simulation and Safety (PSS) der Ruhr-Universität Bochum (RUB) bearbeitet wird. Das Ziel des Vorhabens ist die gezielte Analyse, Validierung und Weiterentwicklung des Programmsystems AC<sup>2</sup> und der darin enthaltenen Module COCOSYS (Containment Code System), ATHLET (Analysis of Thermal-Hydraulic of Leaks and Transients) und ATHLET-CD (Analysis of Thermal-Hydraulic of Leaks and Transients – Core Degradation) zur Berechnung störfallrelevanter In- und Ex-Vessel-Phänomene. Das Programmsystem AC<sup>2</sup> wird von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH zur Simulation aller wesentlichen Vorgänge und Zustände während des Betriebs und im Rahmen auslegungsüberschreitender Störfälle in Leichtwasserreaktoren (LWR) entwickelt. Der Code wird darüber hinaus für die Durchführung generischer Anlagenrechnungen eingesetzt.

Die Thematik der zu untersuchenden Ex-Vessel Arbeitspunkte umfasst die Validierung, Bewertung und Weiterentwicklung der in der aktuellen Version von AC<sup>2</sup> - COCOSYS implementierten Modelle zur Beschreibung von Verbrennungsphänomenen sowie von Phänomenen während Schmelze-Beton-Wechselwirkungen (MCCI, engl. Molten Core Concrete Interaction). Darüber hinaus sollen Untersuchungen zum Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter mit dem neu implementierten Modul AFP2 (vormals NEWAFP) durchgeführt werden. Mit dem ATHLET Modul erfolgt eine Analyse der Kondensationsmodellbasis. ATHLET-CD wird hinsichtlich der Abbildung der Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzpool sowie der Simulation unfalltoleranter Brennstoffe (ATF, engl. accident tolerant fuels) untersucht. Darüber hinaus wird das Modul für die Simulation von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum erweitert.

In Kapitel 2 werden die Ergebnisse des Arbeitspunktes „Analyse und Validierung der COCOSYS-Modellbasis“ dargestellt. Die Untersuchungen zum Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter mit dem neu implementierten Modul AFP2 umfassen die Nachrechnung des Experiments PHEBUS FPT3. Die Arbeiten ergänzen die vom Codeentwickler GRS durchgeführten Validierungsarbeiten anhand des Experiments PHEBUS FPT1 (BMW RS1579). Neben der Validierung des Moduls AFP2 werden Simulationen mit der GRS-Software SUSA durchgeführt. Darüber hinaus wird das Modul auf ein reales Unfallszenario in Nachrechnungen des Containments des Kernkraftwerks Fukushima Daiichi 3 angewandt. Hinsichtlich der Beschreibung von Verbrennungsphänomenen erfolgt eine Analyse und Validierung von neu bzw.

weiterentwickelten Korrelationen zur Beschreibung der Brennbarkeitsgrenzen sowie der laminaren und turbulenten Flammengeschwindigkeit. Darüber hinaus wird ein Konzept für eine Modellerweiterung erstellt, wodurch die zonenübergreifende Vermischung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre verhindert werden soll. Der Themenbereich der Schmelze-Beton-Wechselwirkung beschäftigt sich mit der Untersuchung einer gefluteten Schmelze anhand der Nachrechnung von vier ausgewählten Experimenten aus der MACE- bzw. COTELS-Versuchsreihe sowie dem Versuch COMET-L. Darüber hinaus wird für eine tiefergehende Beurteilung der Codeperformance von AC<sup>2</sup> der Störfallsimulationscode MELCOR für einen Code-to-Code Vergleich herangezogen.

In Kapitel 3 erfolgt eine vertiefende Analyse der in AC<sup>2</sup> - ATHLET implementierten Kondensationsmodelle sowie die Untersuchung der Eignung der Modelle in Bezug auf die Simulation von Druckstoßphänomenen in zweiphasigen Strömungsbedingungen. Dabei soll eine Harmonisierung der Modellbasis sowie die Notwendigkeit einer möglichen Fallunterscheidung bezüglich der Dampfblasenbeschaffenheit geprüft werden und entsprechendes Entwicklungspotential abgeleitet werden. Zur Simulation von Druckstößen infolge eines Ventilschlusses bzw. einer Ventilöffnung werden Experimente ausgewählt, die in der Cold Water Hammer Test Facility (CWHTF) und in der Versuchsanlage Pilot Plant Pipework (PPP) durchgeführt wurden. Durch unterstützende CFD-Simulationen mit dem Programm OpfenFOAM sollen weitere Verbesserungspotentiale in der ATHLET-Modellbasis identifiziert werden.

In Kapitel 4 werden Analysen, Validierungs- sowie Entwicklungsarbeiten zur Simulation von Spätphasenphänomenen mit AC<sup>2</sup>-ATHLET-CD vorgestellt. Zur Abbildung der Freisetzung von Spaltprodukten aus Schmelzepools im unteren Reaktorplenum ist eine Erweiterung des Codes anhand eines neuen Modells vorgesehen. Dazu wird vorab geprüft ob die Erweiterung basierend auf bestehenden Modellen realisiert werden kann oder ob eine Neuentwicklung von Freisetzungsmoellen notwendig ist. Für Validierungssimulationen wird ein geeignetes Experiment aus dem Late-Phase Source Term Phenomena Projekt (LPP) sowie der Versuch EVAN1-FP nachgerechnet. Im zweiten Teil des Arbeitspunktes werden neue vorläufige Modelle und Korrelationen zur Simulation von unfalltoleranten Brennelementkonzepten weiter- bzw. neuentwickelt und analysiert. Zur Validierung wird das Experiment QUENCH-ATF-1 nachgerechnet, welches im Rahmen des NEA-Gemeinschaftsprojekts „QUENCH-ATF“ durchgeführt worden ist. Vergleichende Analysen erfolgen anhand der Nachrechnung von zwei weiteren QUENCH Experimenten, die unter vergleichbaren Randbedingungen durchgeführt worden sind. Des Weiteren umfasst der Arbeitspunkt die Entwicklung eines schnellrechenden Modells zur Simulation von Schüttbetten. Neben der Umwandlung der Schmelze in ein poröses Schüttbettvolumen kann mit dem Modell der Wärmetransfer im Schüttbett abgebildet

---

werden. Darüber hinaus wird das Modell im Rahmen eines Promotionsverfahrens zur Abbildung von reibungsinduzierten Druckverlusten in porösen Medien erweitert. Das Modell wird zur Anwendung im unteren Reaktorplenum in den AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD Quellcode implementiert.

In Kapitel 5 wird auf Basis der erarbeiteten Ergebnisse eine zusammenfassende Bewertung der Modellbasen sowie eine Beurteilung des spezifischen Entwicklungspotentials gegeben.

Für eine ausführliche Dokumentation aller erzielten Ergebnisse sei hier auf die entsprechenden Technischen Fachberichte zu den einzelnen Arbeitspunkten des Forschungsvorhabens [BRA22; HOF23A; HOF23B; KRI24; PES23; STA24B] verwiesen. Im Anhang (siehe Abschnitt 7) ist eine detaillierte Auflistung der Veröffentlichungen aufgeführt, die im Laufe des Forschungsvorhabens erstellt worden sind.



## 2 Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der COCOSYS-Modellbasis

In den nachfolgenden Unterkapiteln 2.1, 2.2 und 2.3 werden die zur Validierung von COCOSYS durchgeführten Arbeiten in den Themenbereichen NEWAFP (*seit Codeversion AC<sup>2</sup>2023 AFP2 genannt und nachfolgend im Rahmen dieses Berichts ebenfalls als AFP2 bezeichnet*), Molten Core Concrete Interaction sowie Wasserstoffverbrennung beschrieben. Detaillierte Beschreibungen der durchgeführten Arbeiten zu den Themen AFP2 und MCCI sind in den Technischen Fachberichten [HOF23A; HOF23B] dokumentiert.

### 2.1 AFP2

Die externen Validierungsarbeiten zu AFP2 beziehen sich zum einen auf die Nachrechnung des Versuchs PHEBUS FPT3 als Ergänzung zu den Arbeiten der GRS an PHEBUS FPT1 (vgl. [REI19]) auch im Rahmen des EU Vorhabens MUSA [Boc22]. Zum anderen werden im Rahmen dieses Arbeitspunktes nach einer erfolgreichen Datensatzerstellung und Erarbeitung einer best-estimate Simulation des Versuchs FPT3 erste Rechnungen unter Verwendung der GRS-Software SUSA durchgeführt. Zur weiterführenden Bewertung der AFP2 Modellbasis wird AC<sup>2</sup> COCOSYS auf ein reales Unfallszenario (Containment des Kernkraftwerks Fukushima Daiichi 3) angewandt.

#### 2.1.1 Best-estimate Simulation von PHEBUS FPT3

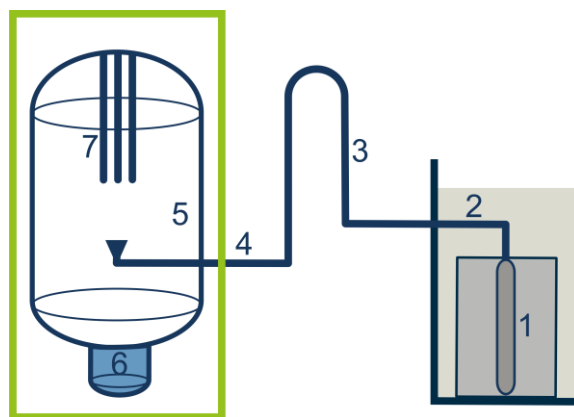
Das PHEBUS-FP (Fission Product) Programm wurde 1988 vom französischen Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) und der Gemeinsamen Forschungsstelle der Europäischen Kommission (JRC) initiiert. Es wurde zu einem bedeutenden Experimentalprogramm in der Sicherheitsforschung für Leichtwasserreaktoren (LWR). Das PHEBUS-Versuchsprogramm umfasst fünf integrale, sogenannte In-Pile-Experimente, in denen die Teststrecke nuklear beheizt wird. Diese wurden zwischen 1993 und 2004 durchgeführt. Das primäre Ziel dieser Versuche ist eine möglichst detaillierte und integrale Abbildung aller relevanten Phänomene der Kernzerstörung, der Spaltproduktfreisetzung und des -transports sowie der Spaltprodukt-Wechselwirkung. Dies ermöglicht es, die physikalischen und chemischen Vorgänge bei einem schweren Störfall zu analysieren. Die gewonnenen Erkenntnisse können zur Bewertung von Mitigationsmaßnahmen, zur Modellentwicklung, oder für die Validierung von Störfallanalysecodes wie AC<sup>2</sup> genutzt werden. [IRS11]

## Versuchsbeschreibung

Die Testanlage der PHEBUS-Versuchsreihe bildet in stark vereinfachter Form einen 900 MW<sub>e</sub> Druckwasserreaktor im Maßstab 1:5.000 ab und beinhaltet alle wesentlichen Bestandteile des Primärkreises und des Containments. Der Maßstabsfaktor bezieht sich auf das ursprüngliche Kerninventar und die Konzentration im Primärkreis sowie im Sicherheitsbehälter. [IRS11]

Die einzelnen Versuche unterscheiden sich durch den Brennstoffabbbrand, die Geometrie, die Steuerstabbeschaffenheit, die thermohydraulischen Bedingungen im Bündel und durch weitere Variationen am Primärkreislauf und dem Containment. Der fünfte und letzte Versuch der Versuchsreihe, Versuch FPT3, ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Er wurde wie die Versuche FPT1 und FPT2 unter Verwendung von bestrahltem Brennstoff durchgeführt und zur Untersuchung des Einflusses eines Borcarbid (B<sub>4</sub>C) Steuerstabs auf die betrachteten Phänomene konzipiert. [HAS11], [HAS13], [KRU10]

Die erste Komponente der Teststrecke der PHEBUS-Versuchsanlage ist die in einem Wasserbad befindliche Testanordnung (1), welche das Testbündel enthält. Im Wasserbad außerhalb der Testanordnung befindet sich der Treiberkern („driver core“), welcher eine kritische Anordnung ermöglicht. Die während des Versuchs freigesetzten Aerosole und Spaltprodukte strömen durch das obere Plenum der Testanordnung in den heißen Strang (2). Von dort gelangen sie in das U-Rohr (3), das den Dampferzeuger abbildet und weiter in den kalten Strang (4) bis sie schließlich in den Behälter (5) gelangen, der das Containment abbildet. In diesem Behälter befindet sich ein mit Wasser gefüllter Sumpf (6) und drei lackierte Kondensatoren (7). [IRS07; IRS11]



**Abbildung 2.1** Skizze der PHEBUS Versuchsanlage nach [IRS11]

Das Containment wird durch einen Stahlbehälter (REPF502) mit einem Volumen von ca. 10 m<sup>3</sup> abgebildet. Die Höhe des Containments beträgt etwa 5 m und der innere Durchmesser des zylindrischen Teils des Containments 1,77 m. Die drei darin installierten Kondensatoren werden für die gezielte Erzeugung von Wärmeübertragungs- und Dampfkondensations-

phänomenen im Reaktorsicherheitsbehälter und damit zur Einstellung von thermohydraulischen Bedingungen verwendet. Sie sind 2,58m lang und besitzen einen äußeren Durchmesser von 15 cm. Die Kondensatoren sind aktiv gekühlt und mit Epoxidfarbe lackiert, um eine mögliche Einfangquelle für molekulares Jod zu erzeugen. Die oberen zwei Drittel bilden den nassen Teil der Kondensatoren, welcher im Regelfall bei einer Temperatur von 90 °C betrieben wird. Das untere Drittel bildet den trockenen Teil des Kondensators und hat eine Betriebstemperatur von 120 °C. Die Außenwände des Containments sind leicht überhitzt, um Dampfkondensation zu verhindern und Aerosolabscheidung zu minimieren. Das Wasser im Sumpf besitzt einen initialen pH-Wert von 5 und wird durch eine Hilfsschleife zirkuliert, wobei eine Atmosphären-Wasser-Austauschfläche reproduziert wird. Der Druck im gesamten Kreislauf und im Containment beträgt 2bar und es herrschen dampfarme atmosphärische Bedingungen. [IRS07; IRS11]

Die Ziele des Versuchs FPT3 mit Bezug auf Kern und Primärkreis sind unter anderem die Charakterisierung der Stofffreisetzung, des Stofftransports und der Stoffablagerung bei niedrigem Druck (2 bar), sowie die Korrelierung der Kernzerstörungsprozesse und der Spaltproduktfreisetzungskinetik. Dabei sollen beispielsweise Rückhalteprozesse an Orten im Primärkreis, an denen hohe Temperaturgradienten auftreten quantifiziert werden. [IRS11]

Hauptziel bei der Untersuchung des Containmentverhaltens ist die Vergrößerung des Verständnisses des Spaltproduktverhaltens unter Anwesenheit von bor- und kohlenstoffhaltigen Stoffen in der Containmentatmosphäre. Besonderer Fokus liegt dabei auf der Iodchemie im Sumpf und in der Atmosphäre. Hierfür sind lackierte Oberflächen an den Kondensatoren und im Sumpf installiert, die als Quelle für organische Iodverbindungen dienen. Die thermohydraulischen Bedingungen im Containment werden für eine optimale Untersuchung des Iodverhaltens eingestellt. Auch das Sumpfwasser wird zur Untersuchung des Iodverhaltens auf einen pH-Wert von 5 eingestellt. Weitere Ziele der Untersuchungen im Containment sind die Erfassung der Größenverteilung und die Charakterisierung des Depositionsverhaltens der Aerosole, sowie die Untersuchung einer möglichen Vergiftung von Katalysatoroberflächen zur Rekombination von Wasserstoff und Kohlenmonoxid. Die meisten der für den Versuch FPT3 gesteckten Ziele wurden erreicht. [IRS11]

Die fünf Versuchsphasen des Versuchs FPT3 sind:

1. Wiederbestrahlungsphase (engl. re-irradiation phase)
2. Zerstörungsphase (engl. degradation phase)
3. Aerosolphase (engl. aerosol phase)
4. Waschphase (engl. washing phase)
5. Chemiephase (engl. chemistry phase)

Das Ziel der Wiederbestrahlungsphase ist es, kurzlebige Spaltprodukte zu erzeugen, um ein repräsentatives Spaltproduktinventar zu erlangen. Sie dauert 8,5 Tage und endet mit einer Transitionsphase von 37 h, während derer das Testbündel getrocknet wird. [IRS11]

In der Zerstörungsphase wird die Temperatur des Treiberkerns schrittweise erhöht und die Heizung im Anschluss abgeschaltet. Die Dampfeinspeisungsrate in das Testbündel wird auf 0,5 g/s eingestellt. In dieser etwa fünf Stunden dauernden Phase erfolgt die Kernzerstörung. Die Spaltprodukte werden abhängig von ihrer Flüchtigkeit nach und nach aus dem Kern freigesetzt, durch den Primärkreis transportiert und zum Teil in das Containment eingetragen. Durch die Zirkon-Wasserdampf-Reaktion wird Wasserstoff und durch die Zerstörung des Bor-carbid Steuerstabs werden kohlenstoffhaltige Verbindungen freigesetzt. Nach Abschalten des Treiberkerns wird das Testbündel etwa eine Stunde durch die Dampfeinspeisung heruntergekühlt. Nach Abschalten der Dampfeinspeisung wird das Containment isoliert. Während der Zerstörungsphase werden die Wände des Containments entsprechend Tabelle 2.1 beheizt. Der Systemdruck von ca. 2 bar wird während der Zerstörungsphase durch das Containment aufgeprägt. [IRS11]

**Tabelle 2.1** Zieltemperaturen der Heizelemente in der Degradation-Phase und der Aerosol-Phase nach [IRS11]

Ort/Struktur	Zerstörungs- und Aerosol-phase	Wasch-phase	Chemie-phase
Sumpf	90 °C	70 °C	100 °C
Seitenwände	110 °C	120 °C	110 °C
Bodenstrukturen	110 °C	100 °C	110 °C
Nasser Teil der Kondensatoren	90 °C	70 °C	61-65 °C
Trockener Teil der Kondensatoren	120 °C	120 °C	110 °C

Die dritte Phase des Versuchs ist die Aerosolphase, bei der der Containment-Behälter vom Rest der Teststrecke isoliert wird und quasi-stationäre thermohydraulische Bedingungen eingestellt werden. In dieser Phase lagern sich die Aerosole im Wesentlichen im Sumpf und auf der Bodenwölbung des Containments ab. Die Aerosolphase dauert 37 h, wobei die Dampfkondensation an den Kondensatoren bereits nach zwei Stunden zum Erliegen kommt. Die relative Feuchte in der Atmosphäre nimmt während dieser Phase von ca. 70 % auf ca. 55 % ab. [IRS11]

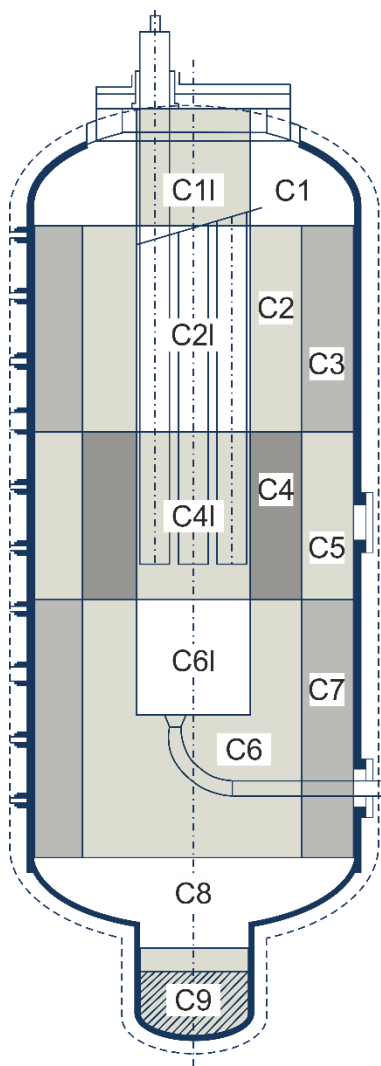
Die vierte Phase des Versuchs ist die Waschphase, während der die abgelagerten Aerosole von den Behälterstrukturen abgewaschen werden. Diese Phase ermöglicht in der letzten

Phase des Versuchs die Charakterisierung der Aerosole im Sumpfwasser. Für die Waschphase werden die Temperaturen nach Tabelle 2.1 neu eingestellt und es wird Sumpfwasser auf die unteren Strukturen des Containments gesprüht. Nach 13 Minuten wird ein stationärer Zustand hinsichtlich Cäsiumaktivität im Sumpf gemessen und die Waschphase wird beendet. [IRS11]

In der letzten Versuchsphase, der zweitägigen Chemiephase, werden Sumpfwasser und Atmosphäre analysiert. Von besonderem Interesse sind hier die Eigenschaften von Iod unter Radiolysebedingungen. Für diese Phase werden die Temperaturen der Strukturen erneut angepasst (vgl. Tabelle 2.1). [IRS11]

## Modellierung

In der vorliegenden Arbeit wird eine Containmentsimulation der Zerstörungsphase und der Aerosolphase durchgeführt, da diese zur Untersuchung des Spaltproduktverhaltens entscheidend sind. Diese beiden Phasen erstrecken sich über etwa 153.000 s. Die Modellierung in COCOSYS erfolgt in Anlehnung an Arbeiten der GRS zum Versuch FPT1 (vgl. [RE19]). Diese Herangehensweise ermöglicht eine bessere Vergleichbarkeit der Arbeiten. Die Nodalisierung umfasst 13 Zonen auf sechs Ebenen (vgl. Abbildung 2.2).



**Abbildung 2.2** Nodalisierung des Containments der Phebús Versuchsanlage

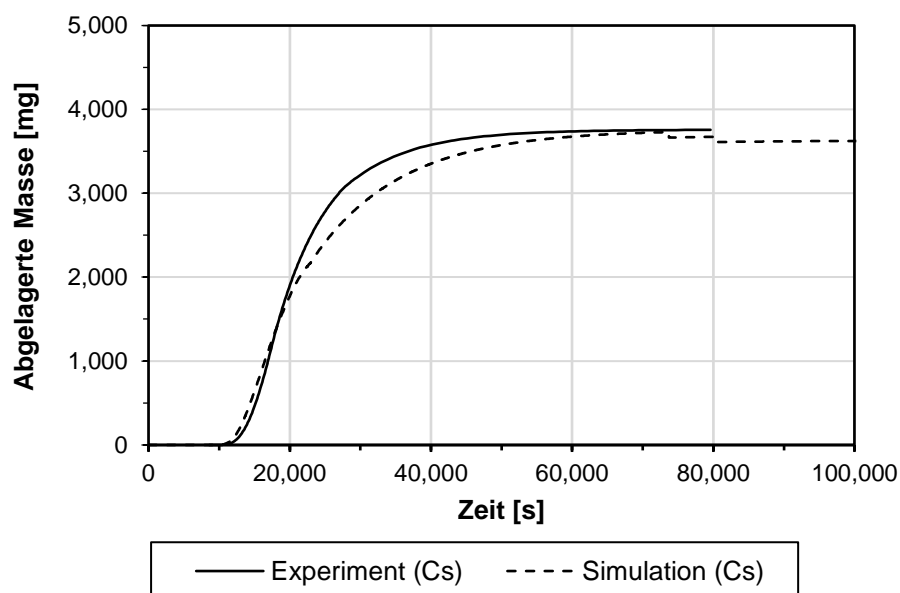
Die Containment-Wände sind als Stahlstrukturen modelliert und von einem Thermalöl-Mantel umgeben, um die Energieeinspeisung zu simulieren. Die Wandstärke beträgt 15 mm im vertikalen Wandbereich und 20 mm im oberen und unteren Bereich. Der Deckel ist 85 mm stark und die Strukturen im Bereich des Sumpfes 8 mm. Zentriert an der Decke des Behälters befinden sich die drei lackierten Kondensatoren mit einem Durchmesser von 150 mm und einem eigenen Kühlkreislauf. Ebenfalls mittels Energieeinspeisung mit Zieltemperatur werden die oberen zwei Drittel auf 90 °C gehalten und repräsentieren den nassen Teil der Kondensatoren. Das untere Drittel wird auf 120 °C beheizt und entspricht dem trockenen Teil der Kondensatoren. Der Behälter ist von außen mit einer 120 mm Mineralwolle isoliert. Als Wärmeübertragungsmodell wird das kombinierte Modell CO1, welches freie Konvektion, erzwungene Konvektion und Kondensationseffekte berücksichtigt, verwendet.

Zur Ermöglichung von Massentransport zwischen den Zonen sind atmosphärische Junctions (ATMOS\_JUN) für den Gastransport und Drainage-Junctions (DRAIN\_BOT und DRAIN\_WALL) für den Transport des Kondensats definiert.

Zwischen ca. 8.000 und ca. 18.000s wird den experimentellen Ergebnissen entsprechend Wasserstoff eingespeist. Dies entspricht einer integralen Stoffmenge von ca. 57 mol. Die Einspeisung von Dampf erfolgt zwischen 0 und ca. 22.000s. Die Aerosoleinspeisung startet bei ca. 9.000s und endet bei 20.000s. Die Einspeisungen sind als Punkteinspeisungen in die Zone C6I modelliert. In der Simulation wird Iod gemäß Species tree zur Berücksichtigung von CsI ausschließlich als Aerosol eingespeist, wohingegen die Einspeisung im Experiment sowohl in Aerosol- als auch in Gasform erfolgte.

### Ergebnisse

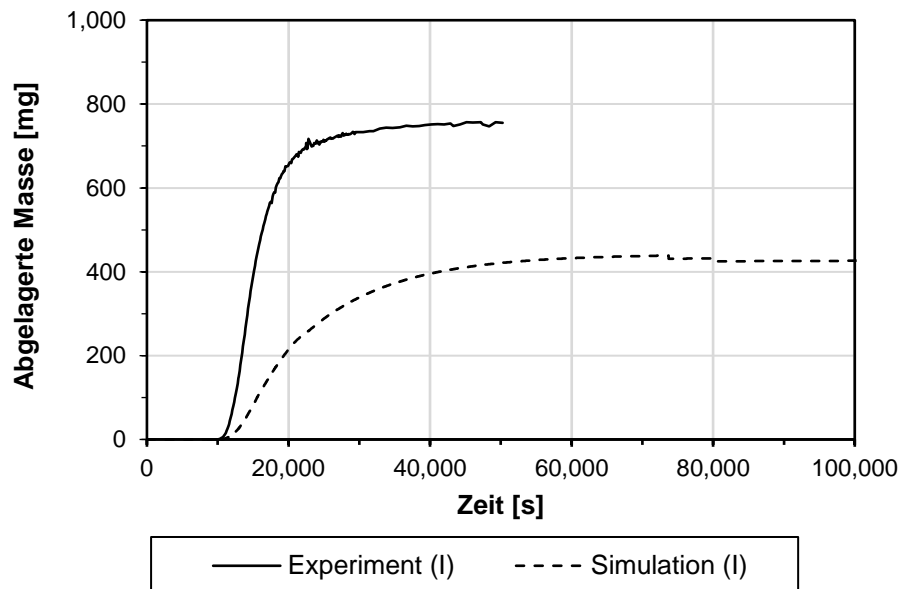
In Abbildung 2.3 ist die in der Simulation abgelagerte Masse Cäsium im Vergleich mit dem experimentellen Ergebnis über der Zeit aufgetragen. Sowohl im Versuch als auch der Simulation werden etwa 3700mg Cäsium abgelagert. Die Ablagerung beginnt mit dem Eintrag des Cäsiums in das Containment ab ca. 10.000s und erreicht bei ca. 60.000s das Maximum, wonach keine weitere Ablagerung mehr stattfindet. Das experimentelle Ergebnis wird gut durch die Simulation wiedergegeben, es ergeben sich lediglich geringe Abweichungen in der Geschwindigkeit der Ablagerung.



**Abbildung 2.3** Ablagerte Masse Cäsium im Versuch FPT3 und in der Simulation; Versuch nach [IRS11]

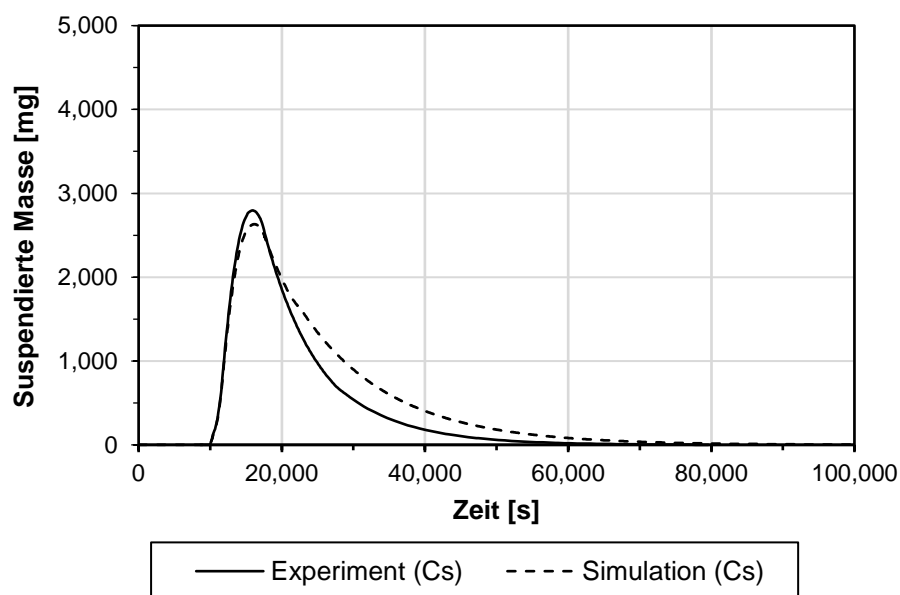
In Abbildung 2.4 ist die abgelagerte Masse Iod über den Versuchsverlauf aufgetragen. Die im Experiment abgelagerte Masse beträgt etwa 750 mg und wird nach 50.000s erreicht. Die in der Simulation abgelagerte Masse liegt mit ca. 450 mg um 300 mg niedriger als im Experiment

und wird erst nach ca. 70.000 s und damit später als im Experiment erreicht. Die Analyse der quantitativen Abweichung weist auf einen Fehler in der Modellbasis hin, welcher nach Durchführung der vorliegenden Arbeiten durch den Codeentwickler mit der Veröffentlichung der neuen Version von AC<sup>2</sup>, der Version 2023.0, behoben wurde.



**Abbildung 2.4** Abgelagerte Masse Iod im Versuch FPT3 und in der Simulation; Versuch nach [IRS11]

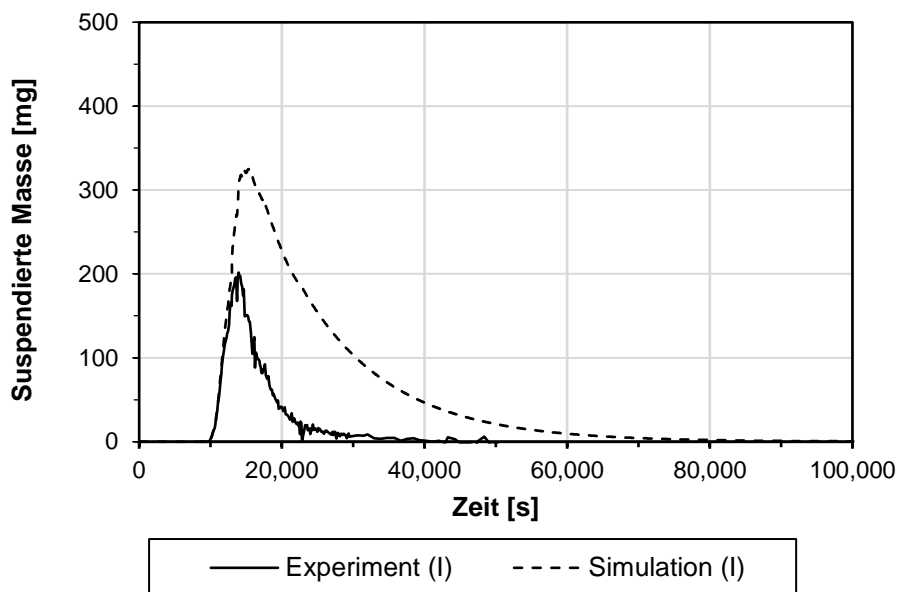
Die in der Simulation suspendierte Masse Cäsium ist in Abbildung 2.5 über der Zeit im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen aufgetragen.



**Abbildung 2.5** Suspendierte Masse Cäsium im Versuch FPT3 und in der Simulation; Versuch nach [IRS11]

Die experimentellen Ergebnisse werden quantitativ und qualitativ gut wiedergegeben, lediglich der Abfall der Masse nach Erreichen des Maximums bei ca. 15.000 s erfolgt etwas langsamer, was gut mit dem ebenfalls verzögerten Anstieg der abgelagerten Masse (vgl. Abbildung 2.3) korrespondiert.

In Abbildung 2.6 ist die suspendierte Masse Iod im Verlauf der Simulation vergleichend mit der im Experiment aufgetragen. Der qualitative Verlauf der suspendierten Masse Iod wird mit Ausnahme eines etwas langsameren Abfalls gut durch die Simulation wiedergegeben. Das Maximum der suspendierten Masse wird durch die Simulation jedoch mit 325 mg um ca. 125 mg überschätzt.



**Abbildung 2.6** Suspendierte Masse Iod im Versuch FPT3 und in der Simulation; Versuch nach [IRS11]

### 2.1.2 SUSAS

Im vorliegenden Kapitel des Berichtes wird eine erste Sensitivitätsanalyse des Spaltproduktverhaltens im Containment des Versuchs PHEBUS FPT3 unter Verwendung der GRS-Software SUSAS (Software for Uncertainty and Sensitivity Analyses) und COCOSYS (AC<sup>2</sup> 2021.1) beschrieben und ausgewertet.

Das von der GRS entwickelte Programm SUSAS dient der Analyse von Simulationsergebnissen mittels einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. SUSAS nutzt eine Monte-Carlo-Simulation (MCS), um die Unsicherheitsfortpflanzung zu untersuchen. Prinzipiell kann eine MCS als eine Art Stichprobenverfahren verstanden werden. Über eine entsprechend große, repräsentative Stichprobe wird auf die Grundgesamtheit geschlossen [GLE19]. Die Stichproben werden dabei unter Beachtung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung generiert. In SUSAS werden diese mittels eines Pseudozufallszahlengenerators erzeugt. Diese nutzen algorithmische, reproduzierbare

Verfahren und erzeugen daher bei gleichen Eingabegrößen und gleicher Verteilung die gleichen Zufallszahlen. [FEC08; KLO21]

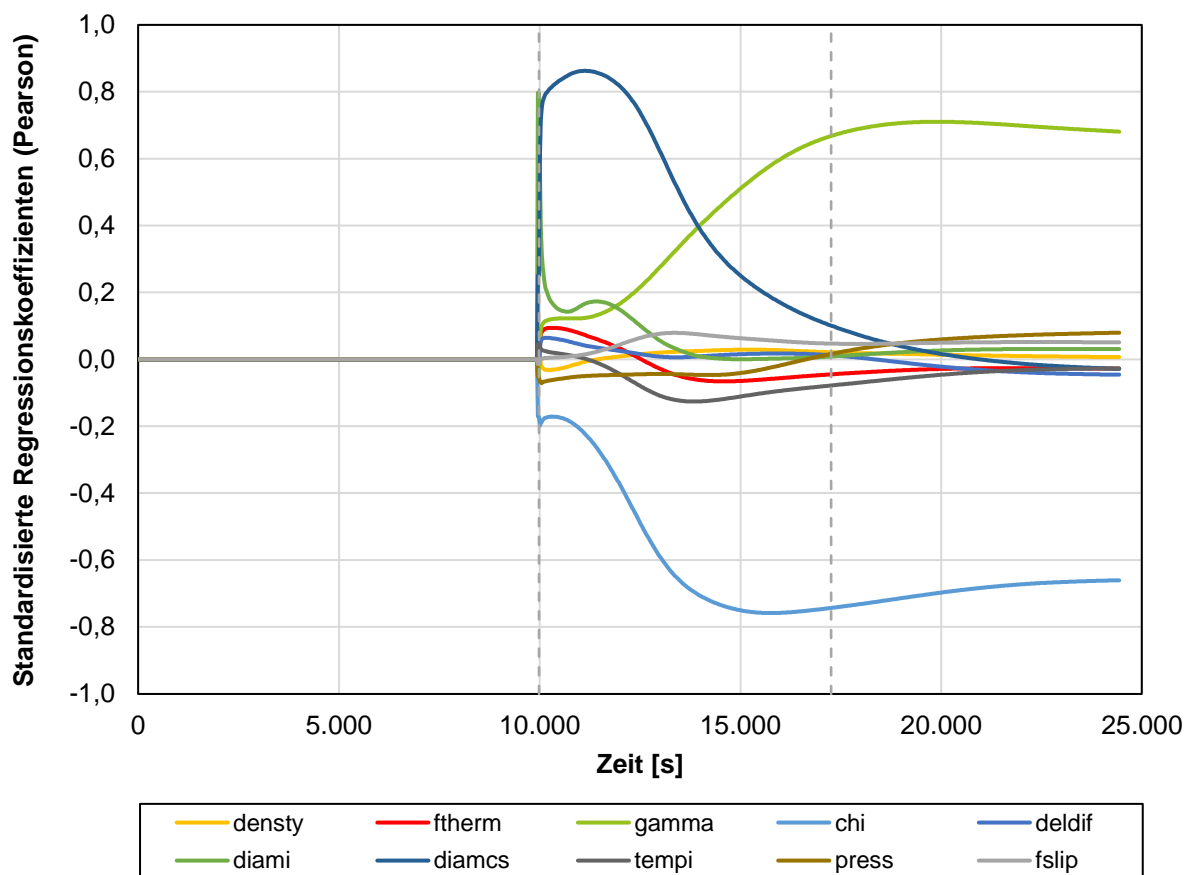
In Tabelle 2.2 sind die für die vorliegende Analyse ausgewählten Unsicherheitsparameter mit Unsicherheitsbereich und „best-estimate“-Wert sowie gewählter Verteilung aufgeführt. Der thermische Akkomodationsfaktor, der Agglomerationsformfaktor, der dynamische Formfaktor, der Schlupffaktor und die Diffusionsgrenzschichtdicke werden dabei an im Rahmen des EU-Forschungsvorhaben MUSA durchgeführte Arbeiten zum Integralversuch PHEBUS FPT1 angelehnt [BOC22]. Die „best-estimate“-Werte der AMMDs (MMD: Mass-Median-Diameter bzw. Massenbezogener Äquivalenzdurchmesser) werden in Anlehnung an die im Experiment gemessenen Werte gewählt und für die entsprechenden Unsicherheitsbereiche werden Erfahrungswerte herangezogen [IRS11]. Für die Aerosoldichte („best-estimate“-Wert und Unsicherheitsbereich) werden ebenfalls Erfahrungswerte herangezogen. Außerdem werden mit den Parametern Containmenttemperatur und -druck zwei thermohydraulische Parameter ausgewählt, da hier ebenfalls Unsicherheiten bestehen.

**Tabelle 2.2** In SUSA für FPT3 verwendete Unsicherheitsparameter; in Anlehnung an [BOC22]

Parameter	Name	Bereich		Best-estimate	Verteilung
Aerosoldichte [kg/m <sup>3</sup> ]	densty	500	5000	4100	Normal
Therm. Akkomodationsfaktor [-]	ftherm	1	3	2,25	Dreieck
Agglomerationsformfaktor [-]	gamma	1	10	1,75	Dreieck
Dynamischer Formfaktor [-]	chi	0,5	10	2	Beta
Schlupffaktor [-]	fslip	1,01	1,51	1,26	Beta
Diffusionsgrenzschichtdicke [m]	deldif	5E-06	8E-03	1E-05	Dreieck
AMMD von Barium [m]	diamba	1E-08	7E-06	7,8E-07	Log. Norm.
AMMD von Restaerosolen [m]	diamae	1E-08	7E-07	5E-07	Log. Norm.
AMMD von Iod [m]	diami	1E-08	7E-06	5E-07	Log. Norm.
AMMD von Silber [m]	diamag	1E-08	7E-06	8E-07	Log. Norm.
AMMD von Tellur [m]	diamte	1E-08	7E-06	7,7E-07	Log. Norm.
AMMD von Cäsium [m]	diamcs	1E-08	7E-06	8,5E-07	Log. Norm.
Containmenttemperatur [°C]	tempi	100	120	110	Normal
Containmentdruck [bar]	press	2	3	2,2	Normal

Für die vorliegende Arbeit werden mit SUSA 100 Datensätze mit zufallsgenerierten Parametern, basierend auf den in Tabelle 2.2 aufgeführten Bereichen, erstellt und die Simulationen werden auf dem Rechencluster der Arbeitsgruppe durchgeführt.

Für die Analyse der Ergebnisse werden die standardisierten Pearson-Regressionskoeffizienten der untersuchten Unsicherheitsparameter herangezogen. Für die suspendierte Cäsiummasse sind diese in Abbildung 2.7 aufgetragen. Der Zeitraum der Cäsium-Einspeisung ist durch vertikale gestrichelte Linien eingegrenzt (ca. 10.000 bis 17.000 s). In der Anfangsphase der Einspeisung (bis ca. 13.000 s) weist die suspendierte Masse die höchste Sensitivität gegenüber dem AMMD von Cäsium (diamcs) auf. Dies ist erwartbar, da größere Partikel eine höhere Ablagerungsgeschwindigkeit aufweisen. Nach einem Maximum von 0,85 sinkt der Pearson Regressionskoeffizient dieses Parameters ab ca. 12.000 s und weist zum Ende der Einspeisung nur noch einen Wert von 0,1 auf.



**Abbildung 2.7** Standardisierte Regressionskoeffizienten (Pearson) der Unsicherheitsparameter für die suspendierte Masse Cäsium

Der dynamische Formfaktor (chi) weist dagegen zunächst einen geringen negativen Regressionskoeffizienten von ca. -0,2 auf. Anschließend steigt die Sensitivität der suspendierten Cäsiummasse gegenüber dem dynamischen Formfaktor auf einen Regressionskoeffizienten

von -0,75. Damit hat dieser Parameter zwischen 13.000 s und dem Ende der Einspeisung bei 17.000 s den größten Einfluss auf die suspendierte Cäsium-Masse.

Nach dem Ende der Einspeisung weisen der Agglomerationsformfaktor ( $\gamma$ ) und der dynamische Formfaktor den höchsten und bis 25.000 s fast konstanten Regressionskoeffizienten von -0,7 bzw. 0,7 auf. Alle anderen Unsicherheitsparameter weisen lediglich niedrige Regressionskoeffizienten von unter 0,2 auf und haben damit nur einen geringen Einfluss auf die suspendierte Cäsiummasse. Diese Ergebnisse decken sich überwiegend gut mit den im EU-Projekt MUSA erzielten Ergebnissen hinsichtlich des Integralversuchs PHEBUS FPT1. Der AMMD, welcher im Rahmen der vorliegenden Arbeit als wichtiger Einflussfaktor identifiziert wurde, wird im Projekt MUSA nicht variiert. [BOC22].

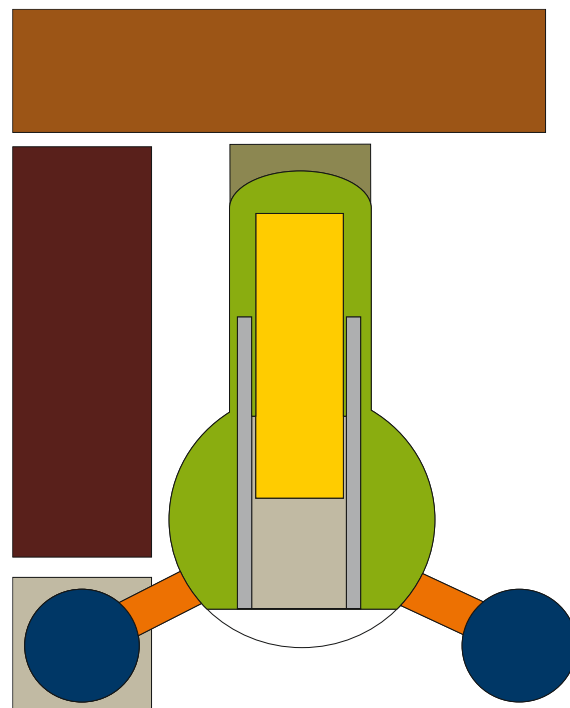
### 2.1.3 Fukushima Daiichi Block 3

Für eine Beschreibung zu den Vorgängen und dem aktuellen Erkenntnisstand zum Unfallablauf ausgehend von den Ereignissen am 11. März 2011 im Kernkraftwerk Fukushima Daiichi sei u. a. auf die Veröffentlichungen im Rahmen der Vorhaben BSAF I & II sowie ARC-F, beispielsweise von Sonnenkalb et al. oder Lind et al., verwiesen [LIN21; SON18].

#### Modellierung

Die am PSS erstellte Modellierung des Fukushima Daiichi Block 3 (FD-3) Containments wurde vollständig auf Basis öffentlich zugänglicher Literatur durchgeführt. Die daraus hervorgegangene Nodalisierung am PSS ist in Abbildung 2.8 schematisch dargestellt.

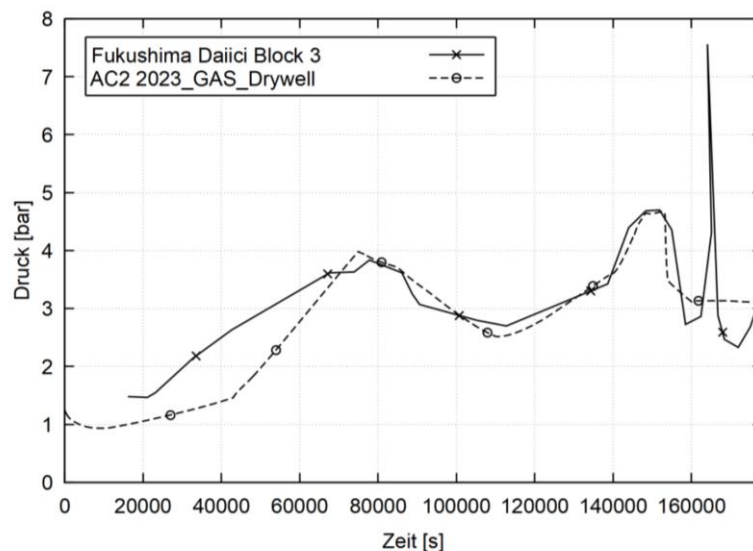
Die Werte für Massen- und Energieströme des Kühlkreislaufs in den Sicherheitsbehälter basieren auf den PSS-Arbeiten aus dem abgeschlossenen Forschungsvorhabens WASA-BOSS (FKZ: BMBF 02NUK028G, [BRA16]) sowie dem Bericht GRS-485 [SON18]. Das angenommene Spaltproduktinventar wurde Lind et al. [LIN21] und Fernandez-Moguel et al. [FER19] im Zusammenhang mit weiteren Werken aus öffentlicher Literatur abgeleitet.



**Abbildung 2.8** Nodalisierung für die Simulation von Fukushima Daiichi Block 3

## Ergebnisse

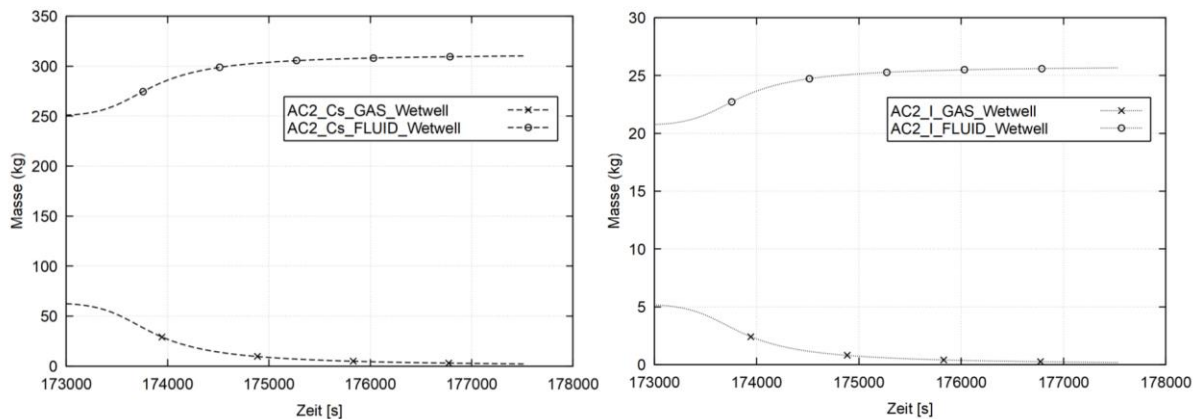
Als ausgewählte Ergebnisse zur Simulation von FD-3 mit AFP2 werden hier der Druckverlauf im Drywell, die komponentenspezifischen Elementmassen und die chemische Masse in der Flüssigkeitsvorlage der Kondensationskammer (KoKa) dargestellt. Der simulierte Druckverlauf in Abbildung 2.9 ist maßgeblich durch die folgenden Ereignisse geprägt: Die Kernkühlung durch das *Reactor Core Isolation Cooling System* (RCIC) [BAN16] im Zeitraum von 1.110 s bis 75.000 s, die Aktivität des Sprühsystems in der KoKa im Zeitraum zwischen 76.700 s und 115.000 s, die Hochdruckkühlmitteleinspeisung (HPCI) zwischen 110.000 s und 139.000 s und die Freisetzung von Wasserstoff aus dem Kühlkreislauf in die KoKa im Zeitraum von 139.000 s bis 152.500 s. Da zum derzeitigen Zeitpunkt keine gesicherten Erkenntnisse über den Erfolg der durchgeführten Ventingoperationen während des Unfalls vorliegen, wurde hier iterativ auf eine erfolgreiche Ventingoperation im Zeitraum von 153.240 s bis 160.000 s basierend auf dem simulierten Druckverlauf geschlossen.



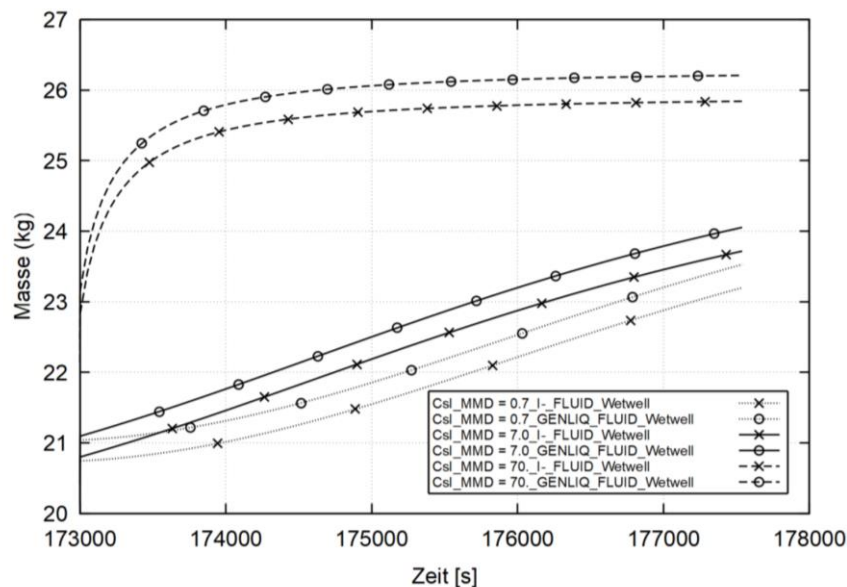
**Abbildung 2.9** Druckverlauf der ersten 180.000 s nach RESA im Drywell des FD-3

In Abbildung 2.10 sind die komponentenspezifischen Massen von Cäsium und Iod für CsI, CsOH und Cs<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub> im Gasraum sowie in der Flüssigkeitsvorlage der KoKa dargestellt. Es zeigt sich sowohl für Cäsium als auch für Iod, dass ein Großteil der in die KoKa eingespeisten Masse in der Flüssigkeitsvorlage durch Pool Scrubbing zurückgehalten wird. Der in den Gasraum freigesetzte Anteil wird durch Sedimentation kontinuierlich reduziert und steigt entsprechend in der Flüssigkeitsvorlage an. Ausgehend von den Erkenntnissen der SUSAR-Rechnungen zu FPT3 wurde hier für FD-3 eine begrenzte Parameterstudie bzgl. des Einflusses des CsI MMDs auf die Masse an Cäsium und Iod in der Flüssigkeitsvorlage der KoKa durchgeführt. Die Simulationsergebnisse sind in Abbildung 2.11 dargestellt.

In Abbildung 2.11 werden die Simulationsergebnisse für drei verschiedene MMDs des CsI dargestellt:  $0,7 \mu\text{m}$ ,  $7 \mu\text{m}$  sowie  $70 \mu\text{m}$ . Wie zu erwarten, steigt die Sedimentation mit zunehmendem Partikeldurchmesser an. Bemerkenswert ist allerdings der Verlauf der Funktionen. Während für den kleinsten untersuchten Partikeldurchmesser die in der Flüssigkeitsvorlage vorhandene Partikelmasse über der Zeit einen zu Beginn leicht exponentiellen Verlauf aufweist und für einen Durchmesser von  $7 \mu\text{m}$  einen nahezu linearen Verlauf, folgt die zeitabhängige Partikelmasse für den größten hier untersuchten Durchmesser einer logarithmischen Funktion.



**Abbildung 2.10** Mit AFP2 simulierte komponentenspezifische (CsI, CsOH, Cs<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub>) Elementmassen (links: Cs; rechts: Iod)



**Abbildung 2.11** Parameterstudie zur Sedimentationsgeschwindigkeit in der Kondensationskammer

### 2.1.4 Zusammenfassung

Die geplanten Arbeiten zum Aerosolverhalten konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Dies umfasst die best-estimate Containmentsimulation des Integralversuchs FPT3, eine erste Sensitivitätsstudie auf Basis der best-estimate Simulation und die Untersuchungen zum Unfall in Block 3 des Kraftwerks Fukushima Daiichi. Die best-estimate Simulation zeigt gute Ergebnisse hinsichtlich Thermohydraulik und überwiegend gute Ergebnisse zum Aerosolverhalten. Es konnte ein Fehler in der Massenbilanzierung von Iod identifiziert werden, welcher durch den Codeentwickler GRS mit der aktuellen Version von COCOSYS behoben wurde. Die Sensitivitätsstudie zeigt eine hohe Sensitivität der suspendierten Cäsiummasse auf den Aerodynamic Mass Median Diameter, den dynamischen Formfaktor und den Agglomerationsformfaktor auf. Dieses Ergebnis deckt sich gut mit den im Rahmen des EU Vorhabens MUSA erzielten Ergebnissen hinsichtlich des Versuchs FPT1.

Die Simulationen zum Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter des Kraftwerks Fukushima Daiichi Block 3 zeigen zunächst eine gute Reproduktion des Druckverlaufs im Drywell der Anlage. Es wird von einer erfolgreich durchgeführten Ventingoperation innerhalb des hier betrachteten Zeitraums ausgegangen. Es zeigt sich, dass schon bei einem Partikeläquivalenzdurchmesser von  $0,7 \mu\text{m}$  von einer raschen Sedimentation der maßgeblichen Cäsium und Iod tragenden Komponenten ( $\text{CsI}$ ,  $\text{CsOH}$  und  $\text{Cs}_2\text{MoO}_4$ ) auszugehen ist. Bei einer Erhöhung des Durchmessers steigert sich die Sedimentationsgeschwindigkeit nochmals nennenswert. Der Flüssigkeitspool der KoKa kann im Rahmen der hier durchgeführten Simulationen nicht als Quelle für die im weiteren Verlauf des Unfallhergangs gemessene, hohe Cäsium Konzentration in bestimmten Bereichen des Sicherheitsbehälters und/oder Reaktorgebäudes identifiziert werden.

## 2.2 MCCI

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse zum Thema MCCI dargestellt (AP 2.1.2.). Dies umfasst die Reduzierung des Benutzereinflusses des CCI-Moduls von AC<sup>2</sup> - COCOSYS in Bezug auf den Wärmetransfer zwischen Schmelze und Beton sowie der Bestimmung der Zerstörungsenthalpie von Beton. Zudem wird der Einfluss der Flutung von Schmelzen während einer MCCI auf die Rückhaltung von Aerosolen und die resultierende Erosion des Betons mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS bewertet. Darüber hinaus werden vergleichende Simulationen mit MELCOR dargestellt. Für die Simulationen werden ausgewählte Experimente der BETA, MOCKA, OECD-CCI, COTELS und ACE-Versuche, die mit silikatischem Beton durchgeführt wurden, herangezogen [AGE17; ALS86; ALS95A; ALS95B; FAR04; FAR06; FAR10A; FAR10B; FIN92; GAU22; NAG99; SAK00]. Der Modellansatz zur Berechnung der Zerstörungsparameter von Beton und der effektiven Wärmetransferkoeffizienten wird im Rahmen eines Promotionsvorhabens weiterentwickelt. Detaillierte Informationen sind in der dazugehörigen Dissertationsschrift von Maximilian Hoffmann zu finden, deren Veröffentlichung für das Jahr 2025 geplant ist.

### 2.2.1 Reduzierung des Benutzereinflusses des CCI-Moduls

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Arbeiten konzentrieren sich auf die Zerstörung von silikatischem Beton und den Wärmetransfers zwischen Schmelze und Beton unter Verwendung von AC<sup>2</sup> - COCOSYS. Ziel ist es, einen Ansatz zu entwickeln, der den Einfluss des Nutzers im CCI-Modul von AC<sup>2</sup> - COCOSYS minimiert. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Parametern, die in Bezug auf die Simulation einer MCCI in AC<sup>2</sup> - COCOSYS am einflussreichsten sind, die im Rahmen einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse von der GRS identifiziert werden konnten [SPE18]. Dabei wurden die Zerstörungstemperatur und Zerstörungsenthalpie des Betons sowie die effektiven Wärmeübergangskoeffizienten (HEFF) zwischen Schmelze und Beton analysiert. In früheren Untersuchungen wurde ein Zusammenhang zwischen HEFF und der Heizleistung festgestellt, der in dieser Arbeit weiter vertieft wird [HOF20].

#### Berechnung der Zerstörungsenthalpie $H_{DECO}$

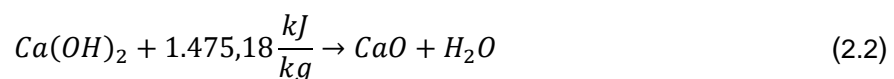
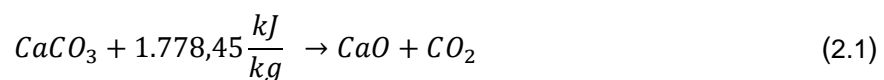
Beton ist ein komplexes aus mehreren Stoffen bestehendes Baumaterial. In Abhängigkeit von der Zusammensetzung weist Beton variierende Eigenschaften auf, welche mit einer Änderung der Dichte, der Zerstörungstemperatur und der Zerstörungsenthalpie des Betons einhergehen, dass die beiden zentralen Zerstörungsparameter von Beton nur experimentell abgeschätzt werden können [PEE79]. Eine allgemeingültige Berechnungsmethode existiert nicht, weshalb dazu ein erster Ansatz in Bezug auf die Zerstörungsenthalpie entwickelt wird.

In einem ersten Schritt werden dazu die Bestandteile des Betons bestimmt, die den hauptsächlichen Massenanteil an der Zusammensetzung haben. Neben  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$  und  $\text{CO}_2$ , zählen dazu  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{MgO}$  und  $\text{SiO}_2$ . Die Betonzusammensetzungen der betrachteten Versuche sind in Tabelle 2.3 aufgeführt.

**Tabelle 2.3** Anteile der hauptsächlichen Betonbestandteile

Betonbestandteile	BETA V1.5 - V1.8 / V2.1	MOCKA 5.1 / 5.5	MOCKA 5.4	OECD-CCI 1	OECD-CCI 3
$\text{Al}_2\text{O}_3$ [m-%]	0,0416	0,1217	0,1383	0,0079	0,0367
$\text{CaO}$ [m-%]	0,1405	0,1148	0,1304	0,0873	0,1748
$\text{CO}_2$ [m-%]	0,0440	0,0299	0,0339	0,0092	0,1020
$\text{Fe}_2\text{O}_3$ [m-%]	0,0104	0,1200	0,0000	0,0081	0,0155
$\text{H}_2\text{O}$ [m-%]	0,0383	0,0612	0,0696	0,0381	0,0384
$\text{MgO}$ [m-%]	0,0073	0,0329	0,0374	0,0061	0,0088
$\text{SiO}_2$ [m-%]	0,7179	0,5196	0,5904	0,8433	0,6237

Silikatischer Beton besteht neben den in Tabelle 2.3 aufgeführten Bestandteilen auch aus Verbindungen wie  $\text{CaCO}_3$  und  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ . Die Anteile dieser beiden Verbindungen sind in der Regel nicht direkt in den Betonzusammensetzungen angegeben und werden daher aus den Betonzusammensetzungen berechnet.  $\text{CaCO}_3$  und  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  benötigen aufgrund der hohen Bildungsenthalpien eine erhebliche Menge an Energie, um gelöst zu werden. Die folgenden Gleichungen geben die Energiemengen an, die zum Lösen der jeweiligen Verbindungen benötigt werden. Diese ergeben sich aus den Unterschieden der Bildungsenthalpien.  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  löst sich zwischen 673 – 873 K und  $\text{CaCO}_3$  zwischen 873 – 1.173 K [BAZ96; MAS86].



$\text{CaCO}_3$  wird aus dem  $\text{CO}_2$ -Anteil im Beton berechnet, weil  $\text{CO}_2$  in Beton ausschließlich in Verbindung mit  $\text{CaCO}_3$  vorkommt [GHO10]. Der verbleibende Teil des  $\text{CaO}$ , der nicht zur Bildung von  $\text{CaCO}_3$  benötigt wird, kann zur Bildung von  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  verwendet werden, vorausgesetzt, es ist ausreichend  $\text{H}_2\text{O}$  im Beton vorhanden. Die berechneten Anteile sind in Tabelle 2.4 dargestellt. Im Experiment MOCKA 5.4 wurde der Anteil an  $\text{CaCO}_3$  mit 7,8 Gew.-% bestimmt, was sehr gut mit dem berechneten Wert von 7,71 Gew.-% übereinstimmt.

**Tabelle 2.4** Berechnete Anteile der Verbindungen von  $\text{CaCO}_3$  und  $\text{Ca(OH)}_2$ 

Betonbestandteile	BETA V1.5 - V1.8 / V2.1	MOCKA 5.1 / 5.5	MOCKA 5.4	OECD-CCI 1	OECD-CCI 3
$\text{CaCO}_3$ [m-%]	0,1001	0,0679	0,0771	0,0210	0,2320
$\text{Ca(OH)}_2$ [m-%]	0,1116	0,1014	0,1152	0,0999	0,0592

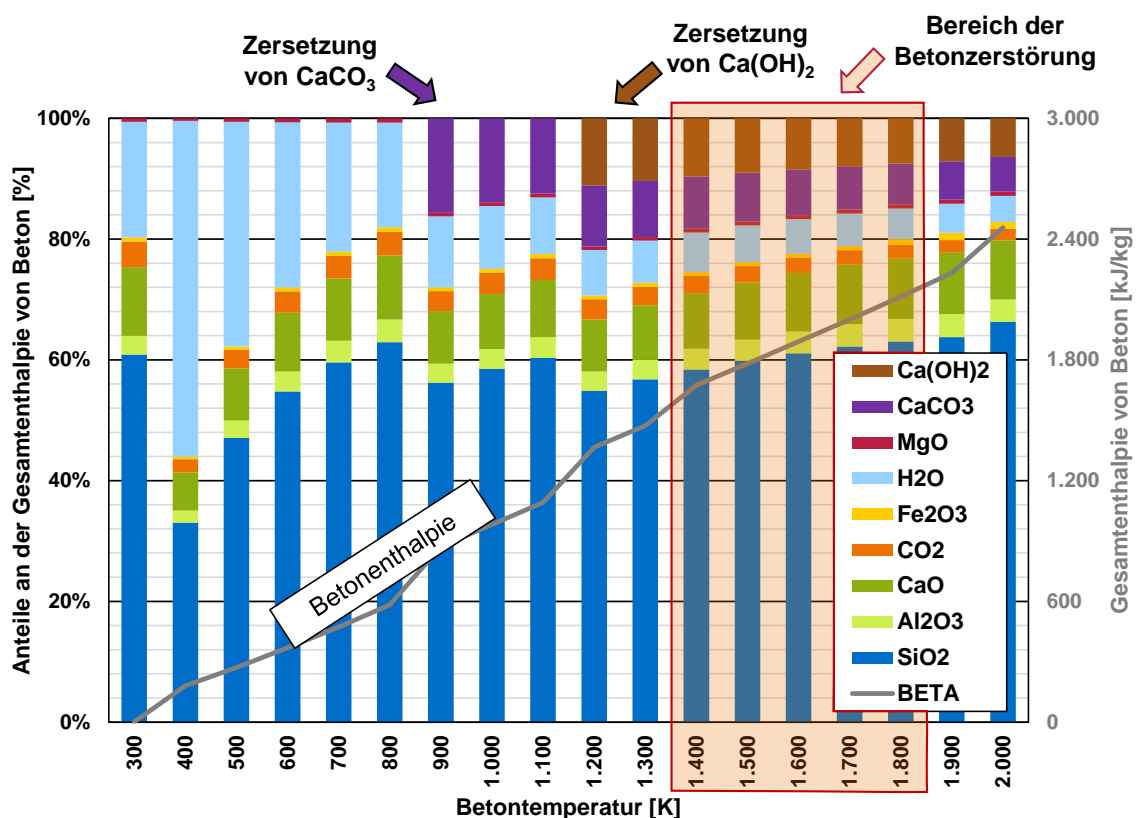
Neben den Bildungsenthalpien werden die Enthalpien der einzelnen Bestandteile des Betons bis zu einer Temperatur von 2.000 K mithilfe der Shomate-Gleichung berechnet, wobei temperaturabhängige Umwandlungen und Reaktionen der jeweiligen Komponenten berücksichtigt werden [CHA98]. Die Enthalpien werden mit den entsprechenden Mengenanteilen der Bestandteile multipliziert und anschließend summiert, um die Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Temperatur zu bestimmen. Es wird dabei angenommen, dass das bei der Zersetzung von  $\text{CaCO}_3$  und  $\text{Ca(OH)}_2$  entstehende  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CO}_2$  den Beton verlässt und somit bei steigender Temperatur nicht mehr zur Enthalpie beiträgt.

Ein weiterer zentraler Aspekt ist die Festlegung der Temperatur, bei der der Beton zersetzt wird. Die exakte Bestimmung dieser sogenannten Zerstörungstemperatur bedarf weiterer Untersuchungen. Basierend auf Angaben der Experimentatoren und aktuellen Erkenntnissen, die Zerstörungstemperaturen von bis zu 1.800 K annehmen, wurde für die Zerstörungstemperatur ein Bereich von 1.400 K bis 1.800 K festgelegt [FOI19; SPE18]. In Tabelle 2.5 sind die daraus resultierenden Zerstörungsenthalpien für den definierten Temperaturbereich aufgeführt, wobei die Ergebnisse der betrachteten Experimente mit den Daten der Experimentatoren verglichen werden. Es zeigt sich, dass die berechneten Zerstörungsenthalpienwerte gut mit den von den Experimentatoren in den OECD-CCI-Versuchen angegebenen Werten übereinstimmen.

**Tabelle 2.5** Berechnete Zerstörungsenthalpien für verschiedene Temperaturen [FAR06; GAU22]

Zerstörungsenthalpie [kJ/kg]	BETA V1.5 - V1.8 / V2.1	MOCKA 5.1 / 5.5	MOCKA 5.4	OECD-CCI 1	OECD-CCI 3
Bei 1400 [K]	1.674,03	1.595,44	1.678,38	1.566,85	1.783,61
Bei 1500 [K]	1.782,18	1.700,62	1.785,65	1.680,12	1.883,82
Bei 1600 [K]	1.890,95	1.806,43	1.893,59	1.794,02	1.984,63
Bei 1700 [K]	2.000,28	1.912,83	2.002,12	1.908,47	2.085,97
Bei 1800 [K]	2.114,92	2.075,10	2.111,21	2.027,14	2.194,95
Experimentelle Werte	-	2.380,00	2.380,00	1.600,00	1.720,00

Abbildung 2.12 veranschaulicht anhand der Betonzusammensetzung aus den BETA-Versuchen den Anteil der einzelnen Betonbestandteile an der Gesamtenergie (linke Achse) sowie die summierte Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Temperatur (rechte Achse). Der betrachtete Zerstörungsbereich ist dabei hervorgehoben. In diesem Bereich tragen  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  und  $\text{CaO}$  gemeinsam bis zu 80 % zur Gesamtenergie bei. Die Abbildung verdeutlicht zudem, ob und wie  $\text{CaCO}_3$  und  $\text{Ca(OH)}_2$  die Gesamtenergie beeinflussen. Die Auflösung von  $\text{CaCO}_3$  wird ab 900 K sichtbar, während die Zersetzung von  $\text{Ca(OH)}_2$  ab 1.200 K einsetzt. Diese Verbindungen tragen im betrachteten Temperaturbereich 14 % bis 17 % zur Gesamtenergie bei und dürfen daher bei der Berechnung nicht vernachlässigt werden.

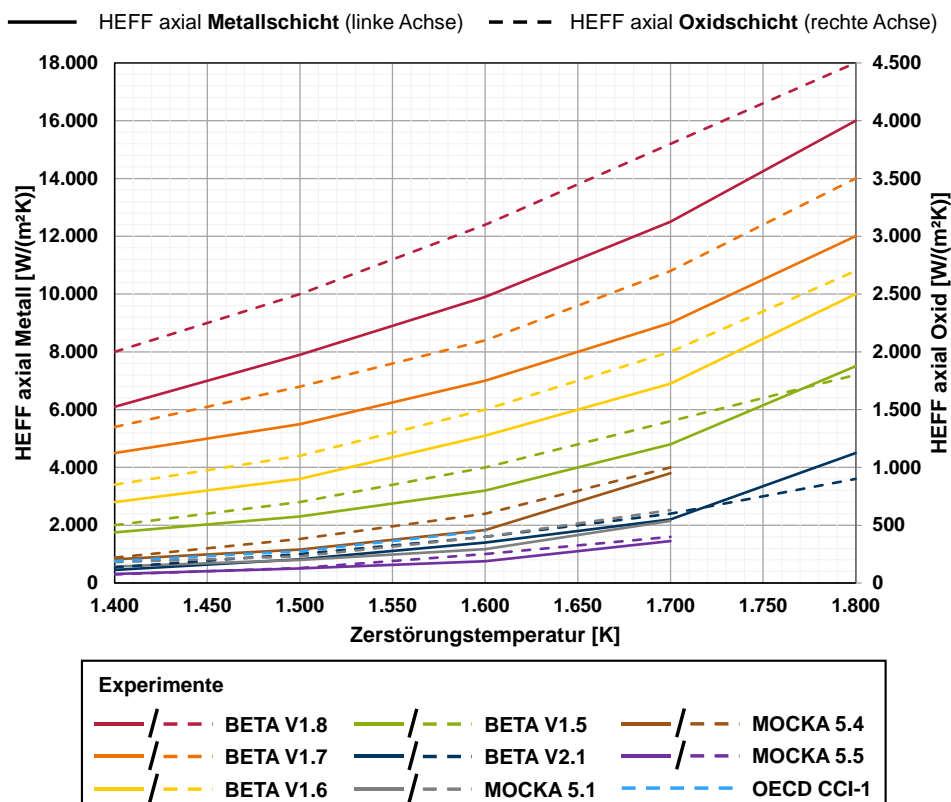


**Abbildung 2.12** Anteile der Bestandteile an der berechneten Zerstörungsenthalpie von Beton und gesamte berechnete Zerstörungsenthalpie über die Temperatur am Beispiel der BETA-Experimenten

Die durchgeführten Analysen zeigen, dass die Zerstörungsenthalpie in Abhängigkeit von der Zerstörungstemperatur definiert werden muss. Um dies zu ermöglichen, soll in zukünftigen Arbeiten eine Methode zur Berechnung der Zerstörungstemperatur entwickelt werden. Die daraus resultierenden Modelle zur Bestimmung der Zerstörungsparameter könnten in das AC<sup>2</sup> - COCOSYS-System integriert werden, wodurch der Benutzereinfluss im CCI-Modul weiter verringert werden kann.

### Bestimmung der effektiven Wärmetransferkoeffizienten

Die Ermittlung der HEFF-Werte erfolgt durch die Simulation von neun unterschiedlichen Experimenten mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS. Dabei werden Kombinationen aus der Zerstörungstemperatur und der berechneten Zerstörungsenthalpie entsprechend der Betonzusammensetzung zugrunde gelegt. Jedes dieser Experimente wird für jede festgelegte Zerstörungstemperatur unter Verwendung der entsprechenden Zerstörungsenthalpie simuliert, was insgesamt zu 45 Simulationen führt, die anschließend miteinander verglichen werden. Validierungsarbeiten haben gezeigt, dass die in AC<sup>2</sup> simulierten Erosionen aus verschiedenen Experimenten, insbesondere bei variierender Heizleistung, nicht mit konstanten und identischen HEFF-Werten modelliert werden können, wie es dem Ansatz in der aktuellen Modellbasis von AC<sup>2</sup> - COCOSYS entspricht [HOF23A]. In den Simulationen werden daher die HEFF-Werte in der Art angepasst, dass die zuletzt experimentell ermittelten Erosionen präzise wiederzugeben. Die unterschiedlichen Heizleistungen in den BETA-Experimenten ermöglichen es, den Einfluss der Heizleistung in die Modellentwicklung einzubeziehen. Die aus diesen Simulationen abgeleiteten Werte bilden die Grundlage für die Entwicklung eines Modells, das darauf abzielt, den Einfluss des Benutzers weiter zu minimieren. Abbildung 2.13 zeigt die resultierenden axialen HEFF-Werte für die metallischen Schichten (linke Achse) und die Oxidschicht (rechte Achse) in Abhängigkeit von der Zerstörungstemperatur in den simulierten Experimenten.

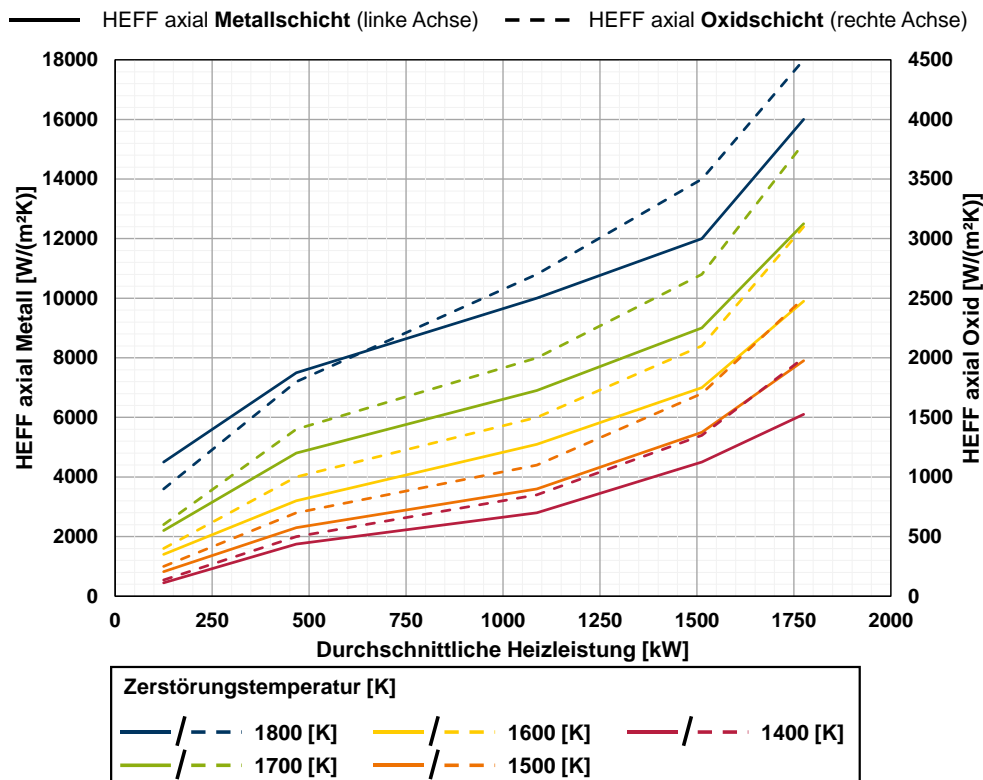


**Abbildung 2.13** Die effektiven Wärmeübergangskoeffizienten in Abhängigkeit von der Zerstörungstemperatur

Mit steigender Temperatur nehmen die HEFF-Werte zu. Bei höheren Zerstörungstemperaturen ist es erforderlich, dem Beton mehr Energie zuzuführen, um dessen Zersetzung zu erreichen. Die axialen HEFF-Werte der Metallschicht liegen dabei im Bereich von 315 W/(m<sup>2</sup>K) bis 16.000 W/(m<sup>2</sup>K), während die Werte für die Oxidschicht zwischen 75 W/(m<sup>2</sup>K) und 4.500 W/(m<sup>2</sup>K) variieren. Es zeigt sich erwartungsgemäß ein Zusammenhang zwischen der Heizleistung und den HEFF-Werten, wobei die HEFF in den metallischen und oxidischen Schichten mit steigender Heizleistung zunehmen. Bei geringen Heizleistungen liegen die HEFF-Werte dichter beieinander, während sie bei höheren Heizleistungen größere Unterschiede aufweisen. Diese Analysen bestätigen, dass die Berechnung der Zerstörungsenthalpie erfolgreich auf verschiedene Experimente angewendet werden kann. Durch die Anpassung der HEFF-Werte lässt sich die Erosionstiefe für unterschiedliche Zerstörungseigenschaften modellieren. Zudem ermöglicht die Entwicklung einer Methode zur Berechnung der Zerstörungstemperatur die Erstellung eines Modells, welches den Benutzereinfluss im CCI-Modul weiter reduziert.

In Abbildung 2.14 sind die HEFF-Werte in Abhängigkeit von der Heizleistung dargestellt, um den Einfluss der Heizleistung auf die BETA-Experimente bei verschiedenen Zerstörungstemperaturen zu veranschaulichen. Andere Experimente wurden hier nicht berücksichtigt, da der untersuchte Bereich der Heizleistungen begrenzt ist. Es zeigt sich ein kontinuierlicher Anstieg der HEFF-Werte sowohl in den metallischen als auch in den oxidischen Schichten. Bei einer Zerstörungstemperatur von 1.400 K beträgt der Unterschied zwischen den HEFF-Werten der metallischen Schicht etwa 5.650 W/(m<sup>2</sup>K) und der Oxidschicht etwa 1.865 W/(m<sup>2</sup>K). Bei 1.800 K steigt die Differenz der HEFF-Werte auf etwa 11.500 W/(m<sup>2</sup>K) für die metallische Schicht und auf etwa 3.600 W/(m<sup>2</sup>K) für die Oxidschicht.

Die Untersuchungen belegen, dass die Berechnung der Zerstörungsenthalpie erfolgreich auf verschiedene Experimente angewendet werden kann. Die Erosionstiefe, eine entscheidende Kenngröße, lässt sich durch die Anpassung der HEFF-Werte für unterschiedliche Zerstörungseigenschaften präzise einstellen, um so weitere Erkenntnisse und Parameter untersuchen und analysieren zu können. Durch die Entwicklung einer Methode zur Berechnung der Zerstörungstemperatur kann ein Modell erstellt werden, das die wichtigsten Parameter einer MCCI automatisch ermittelt und somit eine manuelle Eingabe durch den Benutzer überflüssig macht.



**Abbildung 2.14** Die effektive Wärmeübergangskoeffizienten in Anhängigkeit von der durchschnittlichen Heizleistung der BETA-Experimente

## 2.2.2 Geflutete Schmelze-Beton-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt wird untersucht, inwieweit die Auswirkungen einer Flutung von Schmelzen, während einer MCCI mit dem Simulationsprogramm AC<sup>2</sup> - COCOSYS abgebildet werden können. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der resultierenden Betonerosion sowie der Rückhaltung von Aerosolen durch die darüberliegende Wasserschicht. Zur Durchführung der Simulationen werden ausgewählte Experimente aus den COTELS- und ACE-Versuchen herangezogen.

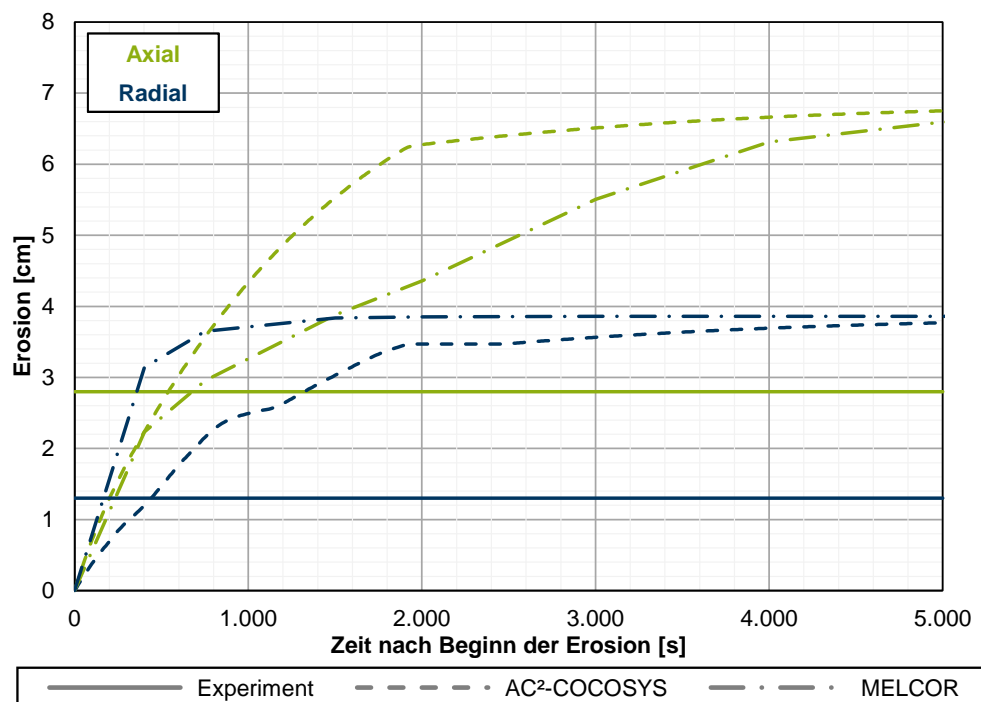
### Einfluss von gefluteten Schmelzen auf die Erosion während MCCI

Um den Einfluss der Flutung einer Schmelze auf die Betonerosion während einer MCCI zu bewerten, werden ausgewählte Experimente aus der COTELS-Reihe herangezogen. In diesem Kapitel stehen die Experimente 5a, 5, 6 und 10 im Fokus. Durch Variation des Cavity-Durchmessers und des Zeitpunkts der Flutung, wie in Tabelle 2.6 beschrieben, werden die Experimente miteinander verglichen, um Rückschlüsse auf die Abbildbarkeit der Phänomene mit dem Simulationsprogramm AC<sup>2</sup> - COCOSYS zu ziehen. Da während der Experimente keine detaillierten Messdaten zur Erosion vorliegen, werden die maximalen axialen und radialen Erosionen als Grundlage der Untersuchungen verwendet. Die Ergebnisse werden zusätzlich mit dem amerikanischen Integralcode MELCOR verglichen.

**Tabelle 2.6** Testmatrix der COTELS-Experimente [SAK00]

Varierte Parameter	Experimente			
	C-5a	C-5	C-6	C-10
Schmelzetyyp	DWR	DWR	DWR	DWR
Cavitydurchmesser [cm]	26	26	36	36
Geplante Heizleistung [kW]	0	75	0	75
<b>Wasserzufuhr</b>				
Massenstrom [kg/min]	0	2	2	2
Temperatur [K]	-	293	293	293
Verzögerung der Wasserzufuhr [min]	-	8	8	15

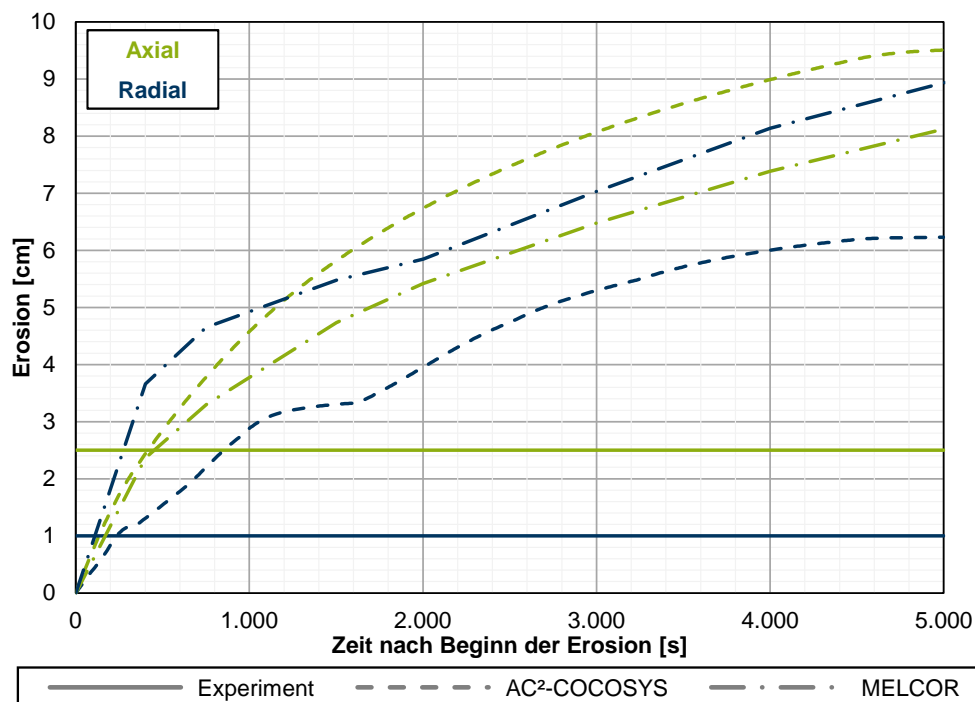
Abbildung 2.15 zeigt die maximal gemessenen Erosionen sowie die Simulationsergebnisse des COTELS-Experiments 5a. In diesem Experiment wird weder externe Energie zugeführt noch die Schmelze mit Wasser geflutet, weshalb es als Referenzexperiment dient, um die grundlegende Modellierfähigkeit von AC<sup>2</sup> - COCOSYS zu bewerten.

**Abbildung 2.15** Simulationsergebnisse des COTELS C5a Experiments mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR

Sowohl die Simulationen mit AC<sup>2</sup> als auch mit MELCOR liefern vergleichbare Ergebnisse, wobei beide die tatsächlich gemessenen, geringen Erosionen überschätzen. Das grundlegende Erosionsverhalten, bei dem die axiale Erosion stärker ausgeprägt ist als die radiale, kann jedoch in beiden Simulationen adäquat nachgebildet werden.

Eine mögliche Ursache für die Überschätzung der Erosion könnte in der Vernachlässigung der Wärmeleitung im Beton liegen, die weder in AC<sup>2</sup> - COCOSYS noch in MELCOR berücksichtigt wird. Durch die Wärmeleitung würden auch Betonbereiche erwärmt, die nicht direkt an der Grenzfläche zur Schmelze liegen, was zu einer Vorzerstörung des Betons führen könnte. Diese Vorzerstörung würde zusätzliche Energie erfordern, wodurch weniger Energie für die tatsächliche Erosion verfügbar wäre, was zu einer geringeren Erosion führen würde.

Abbildung 2.16 zeigt die Ergebnisse des COTELS-Experiments 5, bei dem der Schmelze Energie zugeführt und nach 480 s eine Flutung durchgeführt wird. Da die experimentelle Heizleistung nicht direkt verfügbar ist, wurde die der Schmelze tatsächlich zugeführte Energie anhand der Effizienz der Induktionsanlage abgeschätzt, welche in einem vorhergehenden Experiment auf 47 % bestimmt wurde [NAG99]. Daraus ergibt sich eine effektive Heizleistung von 35,25 kW, die dem metallischen Anteil der Schmelze zugeführt wird. Die Simulationen sowohl mit AC<sup>2</sup> als auch mit MELCOR überschätzen die Erosionen stärker als im COTELS-Experiment 5a. Zudem zeigt sich in den AC<sup>2</sup>-Simulationen ein Erosionsprofil mit einer ausgeprägteren axialen Erosion, wie es auch im Experiment beobachtet wurde, während MELCOR ein homogenes Erosionsprofil liefert.

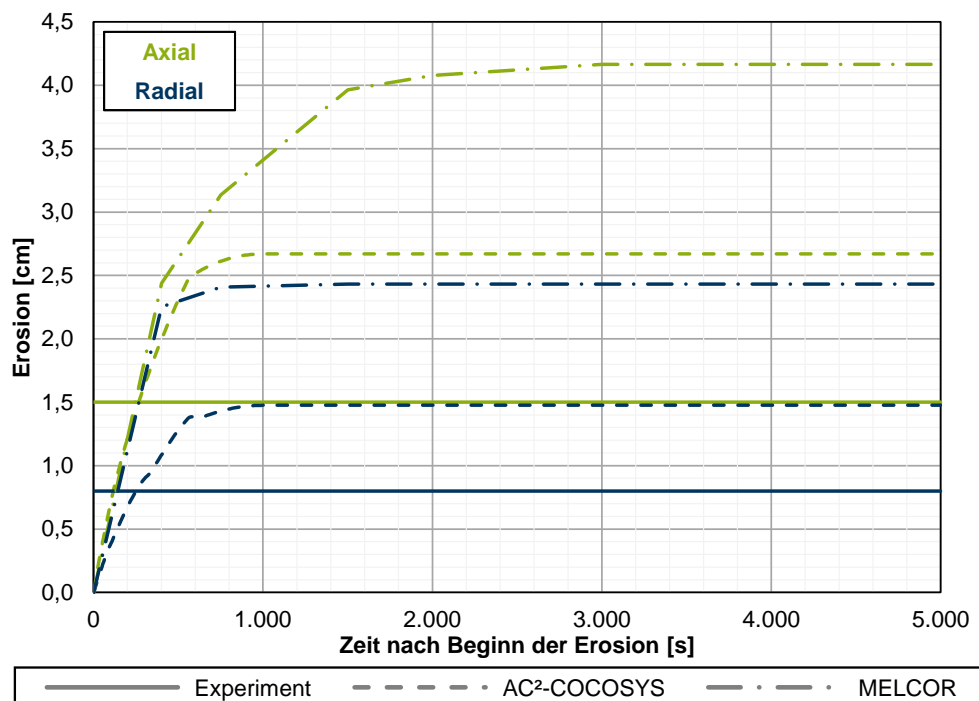


**Abbildung 2.16** Simulationsergebnisse des COTELS C5 Experiments mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR

Der Einfluss der Flutung nach 480 s ist mit AC<sup>2</sup> kaum ersichtlich. Mit MELCOR zeigt sich dagegen der Einfluss des Wassers durch eine Verringerung der Erosionsgeschwindigkeit sowohl in axialer als auch in radialer Richtung. Die Verringerung der Erosionsgeschwindigkeit kann über eine zusätzliche Wärmeabgabe von der Schmelze an die überdeckende Wasserschicht

erklärt werden. Bezüglich  $AC^2$  zeigt sich demnach ein Verbesserungspotential der Wärmetransfers für geflutete Schmelzen während MCCI. Zudem ist erkennbar, dass die Wasserschicht nicht ausreicht, um die Energie der Schmelze abzuführen, da die Erosion nach der Flutung nicht stagniert. Die Überschätzung der Erosionen entwickelt sich allerdings bereits vor der Flutung aus und daher kann eine zu geringe Wärmeabgabe von der Schmelze an die überdeckende Wasserschicht nicht der alleinige Grund für die Überschätzung sein.

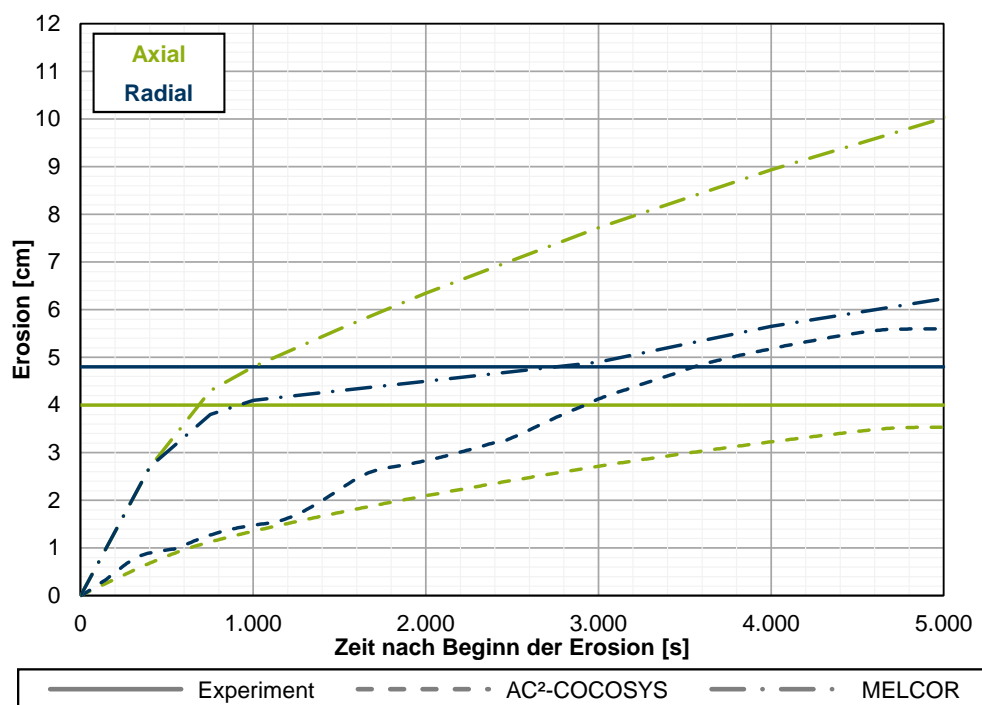
Das COTELS-Experiment 6 ist in Abbildung 2.17 dargestellt. Bei diesem wurde der Schmelze keine Energie zugeführt und nur eine Flutung der Schmelze nach 480 s vorgenommen. Die sich in den Simulationen entwickelte Überschätzung der Erosionen zeigt sich mit MELCOR deutlicher als mit  $AC^2$ . Es zeigt sich zudem eine unterschiedlich starke Ausprägung des Einflusses der Flutung der Schmelze in Abhängigkeit von der Erosionsrichtung bei beiden Codes.



**Abbildung 2.17** Simulationsergebnisse des COTELS C6 Experiments mit  $AC^2$  - COCOSYS und MELCOR

Mit  $AC^2$  zeigt sich der Einfluss auf die axiale und radiale Richtung gleichermaßen, wogegen in MELCOR der Einfluss der radialen gegenüber der axialen Erosion ausgeprägter ist. Nach Flutung der Schmelze wird die Erosionsgeschwindigkeit zunächst stark reduziert und anschließend wird die Schmelze so abgekühlt bzw. so viel Wärme abgeführt, dass keine weitere Erosion mehr dargestellt wird. Im Gegensatz zum vorherigen Experiment stagniert die Erosion. Zurückzuführen ist das auf die nicht vorhandene Beheizung der Schmelze und somit weniger Energie in der Schmelze vorhanden ist.

Die Simulationsergebnisse des COTELS-Experiment 10, sind in Abbildung 2.18 dargestellt. In diesem erfolgt ebenfalls eine Beheizung der Schmelze und eine Flutung dieser nach 900 s. Im Gegensatz zu den vorherigen Experimenten zeigt sich ein Erosionsprofil, in dem die radiale Erosion stärker ausgeprägt ist als die axiale Erosion. Mit MELCOR können die Erosionen nicht abgebildet werden und zudem erfolgt erneut eine starke Überschätzung insbesondere der axialen Erosion. Mit AC<sup>2</sup> kann das Erosionsprofil nur aufgrund einer durchgeführten Anpassung der HEFF zwischen Schmelze und Beton abgebildet werden. Die Anpassungen wurden durchgeführt, um den Einfluss der HEFF in AC<sup>2</sup> in Bezug auf die resultierenden Erosionen zu zeigen. Diese einfachen und direkten Anpassungen des Wärmetransfers in AC<sup>2</sup> sind mit MELCOR nicht möglich. In den vorherigen Experimenten wurden die HEFF konstant gehalten, um eine direkte Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Der Einfluss der Flutung zeigt sich in diesem Experiment in den Simulationen mit MELCOR durch eine Reduzierung der Erosionsgeschwindigkeit. Aufgrund der zusätzlichen Heizleistung stagniert die Erosion nicht, wie es im COTELS-Experiment 5 bereits festzustellen war.



**Abbildung 2.18** Simulationsergebnisse des COTELS C10 Experiments mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR

Zusammenfassend zeigt sich der Einfluss einer Flutung, während MCCI mit MELCOR konsistenter als mit AC<sup>2</sup>, weshalb sich in AC<sup>2</sup> deutliches Verbesserungspotential in Bezug auf den Wärmetransfer zwischen Schmelze und Wasser zeigt. Daher werden weitere Simulationen und Analysen mit vergleichenden Simulationscodes wie MELCOR oder auch ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) hinsichtlich des Einflusses der Flutung als sinnvoll erachtet, um weiteres Verbesserungspotential herausarbeiten zu können.

### **Aerosolfreisetzung bei gefluteter Schmelze-Beton-Wechselwirkung**

Nachfolgend wird die Freisetzung von Spaltprodukten während einer gefluteten MCCI detailliert untersucht. Unter trockenen Bedingungen dominieren zwei Mechanismen die Freisetzung von Spaltprodukten: Die Verdampfung an der Oberfläche der Schmelze und die mechanische Freisetzung von Aerosolen durch Gasblasen, die aus der Schmelze aufsteigen. Bei einer Flutung der Schmelze wird der Freisetzungsprozess jedoch deutlich komplexer. Die Wasserschicht, die sich über der Schmelze ansammelt, verhindert eine direkte Freisetzung der Spaltprodukte in die Atmosphäre. Stattdessen erfolgt die Freisetzung in zwei Schritten. Zunächst werden die Spaltprodukte aus der Schmelze in die Wasserschicht freigesetzt, in der sie sich u.a. durch Pool Scrubbing Phänomene anreichern können. Anschließend erfolgt die Freisetzung aus der Wasserschicht in den darüberliegenden Gasraum durch ein Aufsieden der Flüssigkeitsvorlage und der damit einhergehenden nassen Resuspension. Die nicht kondensierbaren Gase, die aus dem Beton freigesetzt werden, durchströmen sowohl die Schmelze als auch die Wasserschicht, wodurch die Spaltprodukte durch den Gasblasenstrom aus der Wasserschicht transportiert werden können. Zusätzlich kommt es durch die Wasserschicht zum sog. *Pool Scrubbing*, bei dem die Spaltprodukte ausgewaschen werden. Um die ggf. nachfolgende nasse Resuspension quantitativ adäquat abbilden zu können, ist eine Kenntnis der durch Pool Scrubbing in die Flüssigkeitsvorlage abgeschiedenen Spaltproduktmassen unerlässlich. In AC<sup>2</sup> - COCOSYS wird das *Pool-Scrubbing* bei gefluteten Schmelzen bisher nicht berücksichtigt. Um die Rückhaltung der Spaltprodukte durch die Wasserschicht zu modellieren, wird ein Modell von [LI21] in AC<sup>2</sup> - COCOSYS integriert, da es lediglich den Mechanismus der Kondensation sowie die Abscheidung in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers und des Höheneinflusses der Flüssigkeitsvorlage adressiert. Eine Vielzahl an Modellen berücksichtigt sinnvollerweise thermohydraulische Prozessgrößen, die bspw. häufig durch die Weberzahl abgebildet werden. Diese können in der derzeitigen MCCI-Modellierung jedoch nicht quantifiziert werden, da keine Informationen über die Anzahl, die Querschnittsfläche oder die Gasgeschwindigkeiten der einzelnen „Gasöffnungen“ in der Schmelze verfügbar sind.

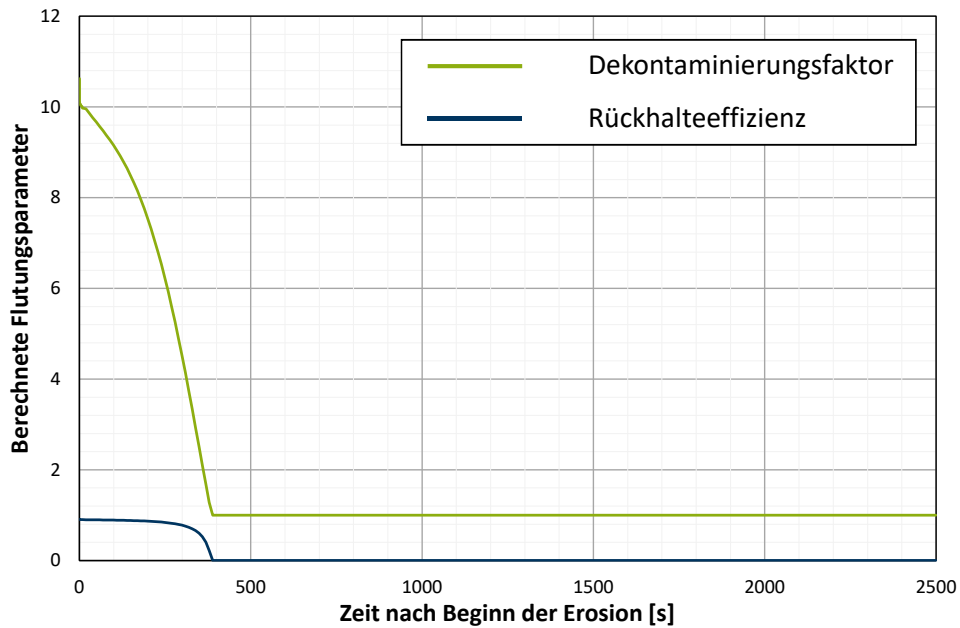
Das Modell wurde anhand von sieben Experimenten auf Basis eines vereinfachten Modells in [Esc95] entwickelt. Die Rückhaltung der Spaltprodukte kann über den sog. Dekontaminierungsfaktors (DF) abgebildet werden. Der DF ist das Verhältnis von einströmendem zu ausströmendem Partikelmassenstrom und gibt daher an, wie viel Masse in der Wasserschicht abgeschieden bzw. ausgewaschen werden. In dem Modell wird die Rückhaltung in zwei Bereiche unterteilt wird: Den Einspeisebereich und den Aufstiegsbereich. Im Einspeisebereich bilden sich große Blasen, die beim Aufsteigen in kleinere Blasen zerfallen. Dabei kondensiert der Dampf, wodurch Aerosole in das Wasser übergehen. Die Dampfkondensation führt zu einer inhomogenen Aerosolkonzentration innerhalb der Blasen, was den Transport der Partikel

ins Wasser intensiviert. Das Modell berücksichtigt zusätzlich den Mechanismus der Trägheit, der durch die Stokes-Zahl beschrieben wird. Während des Aufstiegs der Blasen werden Aerosole durch Schwerkraft, Zentrifugalkraft und Brownsche Diffusion abgeschieden. Ein vereinfachtes Modell zur Berechnung des DF entsteht aus der Summe der aus den verschiedenen Mechanismen berechneten DFs [Esc95].

Die Implementierung erfolgt in AC<sup>2</sup> - COCOSYS über einen zusätzlich implementierten Parameter WETCALC unter CALC\_OPT. Darüber besteht die Möglichkeit das vorgestellte Modell für die Rückhaltung in der Wasserschicht zu berücksichtigen. Über WETCALC=1 kann das Modell aktiviert werden und für WETCALC=0 bleibt die Simulation identisch zu der aktuellen Modellbasis.

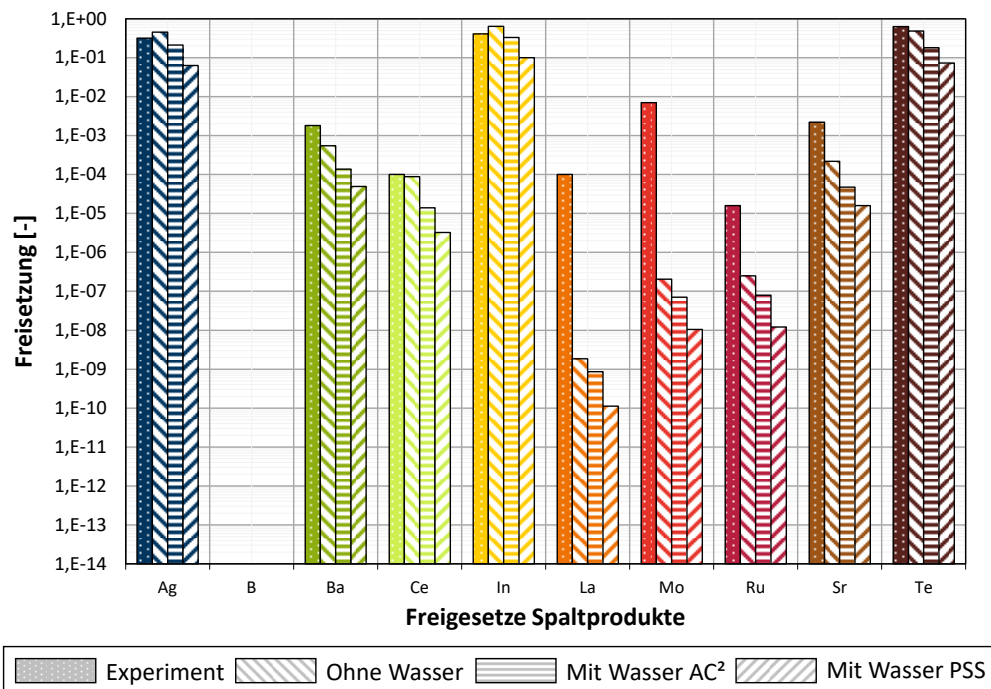
Aufgrund von fehlenden Experimenten zur Validierung der Spaltproduktrückhaltung, während einer gefluteten MCCI, kann nur eine Plausibilitätsanalyse durchgeführt werden. Dazu werden die ACE-Experimente herangezogen. In den ACE-Experimenten wurden die freigesetzten Spaltprodukte unter trockenen Bedingungen gemessen. Für die Bewertung des Effekts der Rückhaltung der Spaltprodukte durch die Wasservorlage wird für die ACE-Experimente in den Simulationen eine fiktive Flutung angenommen.

In Abbildung 2.19 sind die berechneten Modellparameter am Beispiel des ACE-L2 Versuchs dargestellt. Für DF ergibt sich mit dem Modell zu Beginn ein Wert von etwa 10. Der sichtbare starke Abfall kann über die Erwärmung der Wasserschicht erklärt werden. Durch die Schmelze wird das Wasser stetig aufgeheizt. Bei höheren Wassertemperaturen steigt der Dampfanteil  $x_{s,eq}$  und nähert sich einem Wert von 1 an, wodurch DF kleiner wird. Beim Erreichen einer Wassertemperatur von 100 °C würde DF unter eins fallen. Das würde bedeuten, dass durch die Wasserschicht keine Spaltprodukte ausgewaschen werden, sondern noch zusätzlich Spaltprodukte freigesetzt werden. Daher ist DF nach unten auf einen Wert von 1 limitiert. Im ACE-L2 Versuch erreicht das Wasser nach etwa 380 s eine Temperatur von 100 °C. Der Zeitraum der Erhitzung ist dabei maßgeblich abhängig von der Wassermasse, auf die nicht weiter eingegangen wird, da durch das Erreichen einer Wassertemperatur von 100 °C lediglich das korrekte Verhalten des Modells dargestellt werden soll. Die Rückhalteeffizienz sinkt zu dem Zeitpunkt auf Null ab, so dass keine Spaltprodukte mehr durch die Wasserschicht ausgewaschen werden.



**Abbildung 2.19** Berechnete Flutungsparameter aus dem implementierten Modell am Beispiel des ACE-L2 Experiments

Exemplarisch ist das ACE-L6 Experiment in Abbildung 2.20 dargestellt. Den Messwerten sind die Simulationsergebnisse für die Freisetzung der Spaltprodukte mit und ohne überdeckende Wasserschicht dargestellt. Für den Fall mit Wasserüberdeckung sind die Ergebnisse der aktuellen Release Version von AC<sup>2</sup> (kurz AC<sup>2</sup>) sowie einer internen Entwicklerversion (kurz PSS) abgebildet.



**Abbildung 2.20** Spaltproduktfreisetzung des ACE-L6 Experiments

Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass gegenüber der trockenen MCCI weniger Spaltprodukte bei einer Wasserüberdeckung freigesetzt werden. Der Effekt der Wasserschicht hängt in erster Linie mit der Kühlung der Schmelze und der dadurch verringerten Erosion zusammen. Es werden demnach weniger Gase aus dem Beton freigesetzt, welche entscheidend für die Spaltproduktfreisetzung in AC<sup>2</sup> - COCOSYS sind. Aus diesem Grund wird in den Simulationen ein Hauptaugenmerk daraufgelegt, dass die Erosionen der trockenen MCCI adäquat abgebildet werden. Der Effekt des Pool Scrubbing Modells zeigt sich im Vergleich der beiden hinteren Säulen. Durch die Berücksichtigung der Spaltproduktrückhaltung durch die Wasserschicht werden nochmal weniger Spaltprodukte freigesetzt. Allerdings ist der Effekt nicht durchgehend bei allen Freisetzungen gleichermaßen zu beobachten, was auf weiteres Verbesserungspotential hindeutet. Grundsätzlich zeigen die Simulationen die erfolgreiche Implementierung und Anwendung des Modells, welches in Zukunft durch weitere Modelle ergänzt und verbessert werden kann.

In Abbildung 2.21 ist zu erkennen, dass im ACE-L7 Versuch Bor freigesetzt wurde. In den Simulationen ist es nicht möglich B<sub>4</sub>C einzubinden, da Bor nicht in der *Poolcav.mdb* vorhanden ist. Somit kann die Freisetzung auch nicht abgebildet werden. [AGE17] hat einen Ansatz für die Erweiterung der *Poolcav.mbd* bezüglich der Borfreisetzung bereits vorgestellt und implementiert. Die Erweiterung beinhaltet die Berücksichtigung der Spezies Borcabid B<sub>4</sub>C und Dibortrioxid B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Ein ähnliches Bild zeigt sich in den Freisetzungsraten von Lanthan und Ruthenium. Die Freisetzungsraten der beiden Spezies werden in den Simulationen unterschätzt. Auch dazu hat [AGE17] eine Erweiterung vorgeschlagen, die sich mit der Freisetzung durch Verdampfung für die oxidischen Spezies Lanthan und Ruthenium auseinandersetzt.

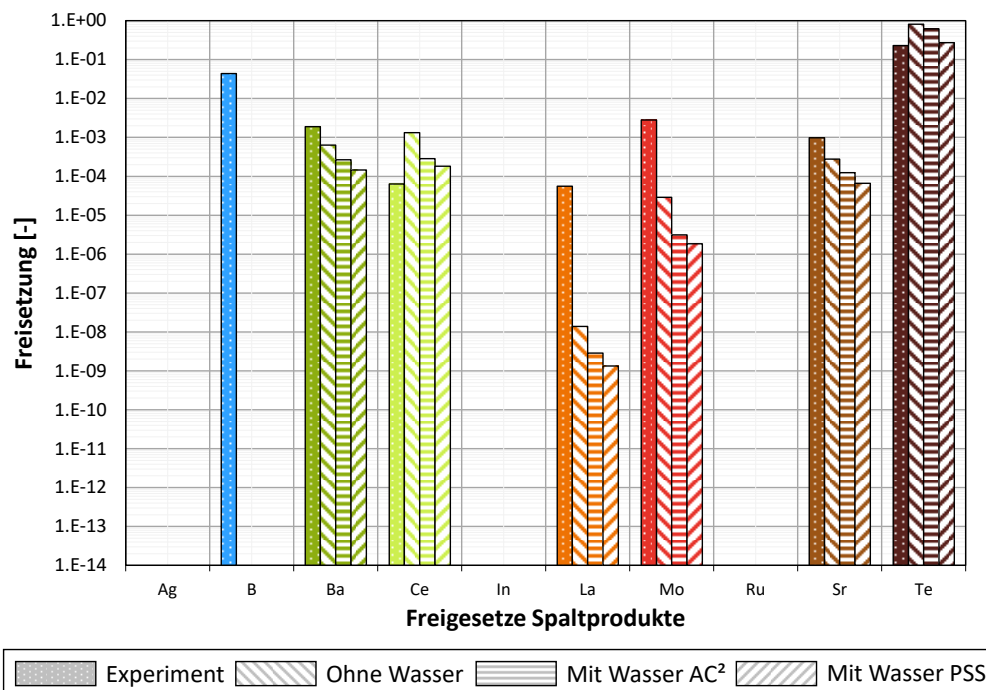


Abbildung 2.21 Spaltproduktfreisetzung ACE-L7 Experiments

Bezüglich des Freisetzungsmechanismus des Entrainments konnte [AGE17] ebenfalls einen Ansatz recherchieren und verfügbar machen. Das Entrainment gehört zu den beiden zentralen Freisetzungsmechanismen bezüglich einer trockenen MCCI und sollte berücksichtigt werden. Zudem wird der Freisetzungsmechanismus an der Schnittstelle zwischen Wasserschicht und Gasraum auch bei einer gefluteten Schmelze auftreten, sodass eine Berücksichtigung in beiden Fällen von Interesse ist. Es gilt zu prüfen, ob die Erweiterungen und Ansätze in der aktuellen Modellbasis von AC<sup>2</sup> berücksichtigt werden.

### 2.2.3 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes werden die Ergebnisse zum Thema MCCI unter Nutzung des CCI-Moduls in AC<sup>2</sup> - COCOSYS präsentiert. Es wird ein erster Ansatz für ein Modell entwickelt, um den Benutzereinfluss auf das CCI-Modul zu minimieren, insbesondere in Bezug auf den Wärmetransfer zwischen Schmelze und Beton sowie die Bestimmung der Zerstörungsenthalpie von Beton. Mit ausgewählten Experimenten der BETA, MOCKA, und OECD-Experimentreihen werden die Auswirkungen der Heizleistung auf die effektiven Wärmetransferkoeffizienten untersucht und ein Modell zur Berechnung der Zerstörungsenthalpie entwickelt. Das Modell umfasst die wesentlichen Betonbestandteile und ihre Auswirkungen auf die Zerstörungsenthalpie. Es werden Simulationen für die Zerstörungsenthalpie bei verschiedenen Zerstörungstemperaturen durchgeführt und mit experimentellen Daten verglichen. Diese Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den in den OECD-CCI-Versuchen gemessenen Werten. Bezüglich eines Modells ist die Definition der Zerstörungstemperatur durch weitergehende Arbeiten notwendig, um den Benutzereinfluss im CCI-Modul zu reduzieren. Bezüglich der Bestimmung der effektiven Wärmetransferkoeffizienten zeigt sich, dass sie mit steigender Zerstörungstemperatur zunehmen. Die Werte variieren für metallische Schichten von 315 bis 16.000 W/(m<sup>2</sup>K) und für Oxidschichten von 75 bis 4.500 W/(m<sup>2</sup>K). Der Einfluss der Heizleistung ist ebenfalls signifikant. Die Entwicklung eines Modells zur automatischen Berechnung effektiven Wärmetransferkoeffizienten ist demnach sinnvoll, um den Benutzereinfluss im CCI-Modul ebenfalls zu minimieren.

Zusätzlich wird der Einfluss einer Flutung der Schmelze während MCCI auf die Betonerosion und die Aerosolrückhaltung untersucht. Es werden ausgewählte COTELS- und ACE-Experimente zur Validierung und Verifikation der Simulationsergebnisse herangezogen. Die Simulationen überschätzen die geringen gemessenen Erosionen, können jedoch das grundsätzliche Erosionsverhalten, bei dem die axiale Erosion stärker ausgeprägt ist als die radiale, abbilden. Eine mögliche Ursache für die Überschätzung könnte in der fehlenden Berücksichtigung der Wärmeleitung im Beton liegen, die sowohl von AC<sup>2</sup> - COCOSYS als auch von MELCOR nicht berücksichtigt wird. Diese Wärmeleitung führt zu einer Erwärmung des Betons,

wodurch weniger Energie für die tatsächliche Erosion zur Verfügung stünde. Zusammenfassend zeigt sich, dass der Einfluss, der Flutung einer Schmelze während MCCI auf den Erosionsfortschritt, von MELCOR konsistenter abgebildet wird als von AC<sup>2</sup> - COCOSYS. Dies weist auf Verbesserungspotential bei AC<sup>2</sup> - COCOSYS hin. Weitere Simulationen und Analysen mit vergleichenden Simulationscodes wie MELCOR oder ASTEC sind daher sinnvoll, um weiteres Verbesserungspotential zu identifizieren.

In Bezug auf die Aerosolfreisetzung während einer gefluteten Schmelze, wird in einem ersten Schritt ein Modell zur Rückhaltung von Spaltprodukten durch Pool Scrubbing in AC<sup>2</sup> - COCOSYS implementiert, da dieser Effekt in der aktuellen Modellbasis nicht berücksichtigt wird. Die Rückhaltung der Spaltprodukte wird über den Dekontaminierungsfaktor beschrieben. Das Modell unterscheidet zwischen Einspeise- und Aufstiegsbereich und berücksichtigt Mechanismen wie Dampfkondensation und Trägheit. Die Berechnungen zeigen, dass bei höheren Wassertemperaturen die Rückhalteeffizienz sinkt und der Dekontaminierungsfaktor auf einen Wert von 1 limitiert ist. Simulationen zeigen, dass bei einer Wasserüberdeckung weniger Spaltprodukte freigesetzt werden. Dennoch besteht Verbesserungspotential, da die Simulationsergebnisse nicht konsistent sind, da die Modellierung bestimmter Spaltprodukte wie Bor, Lanthan und Ruthenium unvollständig ist, was auf die Notwendigkeit weiterer Erweiterungen hinweist.

## 2.3 Verbrennung

Im vorliegenden Abschnitt werden die Ergebnisse zum Themenfeld Verbrennung (AP 2.1.3) beschrieben. Dies umfasst sowohl die Konzepterstellung zur Erweiterung des Verbrennungsmodells FRONT in AC<sup>2</sup> – COCOSYS (Version 2021.0) um eine Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre, als auch die Implementierung von alternativen Korrelationen für die Flammengeschwindigkeit in eine PSS-interne Entwicklungsversion von AC<sup>2</sup> 2021.0 und deren erste Validierung anhand von Wasserstoffverbrennungsversuchen, welche in der THAI-Versuchsanlage durchgeführt wurden. Im letzten Unterabschnitt werden die relevantesten Erkenntnisse der durchgeführten Arbeiten kurz zusammengefasst.

### 2.3.1 Konzept zur Modellerweiterung

Diesem Vorhaben bei PSS vorausgegangene Arbeiten zur Validierung und Modellanalyse des Verbrennungsmodells FRONT weisen auf Modelllücken hin, welche unter Umständen dazu führen, dass die Flammenfrontausbreitung vorzeitig zum Erliegen kommt [BRA21; HOF21]. Dies tritt insbesondere bei Versuchen mit einer vergleichsweise niedrigen Wasserstoffkonzentration von unter 10 Vol.-% oder bei Versuchen mit einer vergleichsweise niedrigen Sauerstoffkonzentration auf. Der Effekt konnte zu einem großen Teil auf die nicht vorhandene Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre durch das Modell zurückgeführt werden. Während in der Realität verbranntes und unverbranntes Gas größtenteils durch die Flammenfront getrennt vorliegen, liegt durch das Lumped Parameter Konzept in COCOSYS in einer brennenden Zone stets ein Gemisch aus verbrannter und unverbrannter Atmosphäre vor. Ein Teil dieses Gemisches wird in den meisten Fällen aufgrund durch die Verbrennung verursachter Volumenexpansion über atmosphärische Junctions in umliegende Zonen transportiert. Dort verringert es sowohl die Konzentration brennbarer Gase als auch die Sauerstoffkonzentration und kann zu einem unterschreiten der richtungsabhängigen Flammenausbreitungskriterien des Modells führen. Hier ist insbesondere das Kriterium für die abwärts gerichtete Flammenfrontausbreitung zu nennen, welches eine Mindestkonzentration von ca. 8,5 Vol.-% Wasserstoff vorsieht [ARN21]. Gleichzeitig kann auch ein Teil des unverbrannten Gases in bereits ausgebrannte Zonen transportiert werden und zu einer Verringerung des Ausbrandes und damit auch zu einem geringeren Druckanstieg und einer Unterschätzung der Belastung von Gebäudestrukturen und für die Unfallmitigation relevanten technischen Einrichtungen beitragen.

In diesem Abschnitt wird daher ein im vorliegenden Forschungsvorhaben erarbeitetes Konzept für die Erweiterung des Modells um eine Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre vorgeschlagen. Die Konzepterstellung, die Konzeptumsetzung für ein ausgewähltes

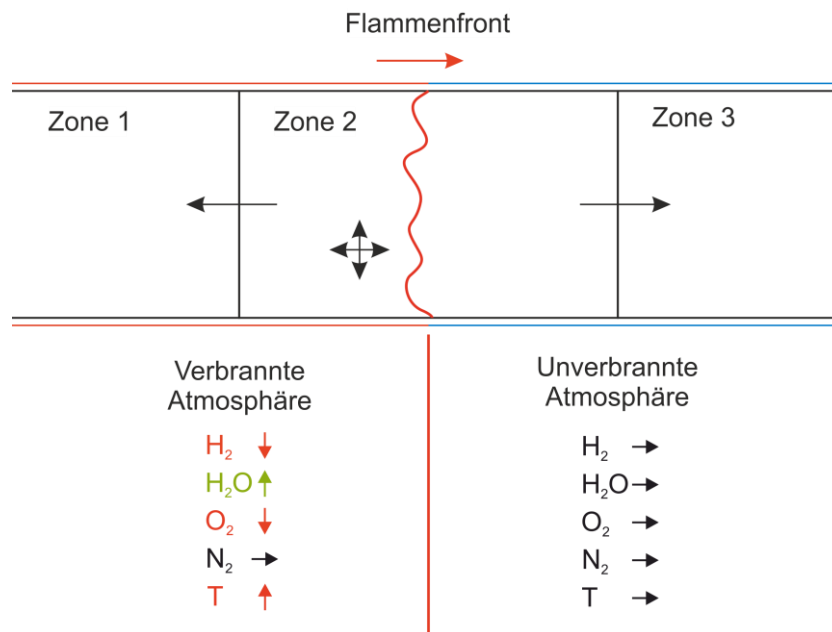
Junctionmodell und erste Validierungsarbeiten wurden bereits durch die Autoren in einem Zeitschriftenartikel veröffentlicht, daher werden diese lediglich zusammenfassend beschrieben. Für eine detaillierte Beschreibung sei auf [HOF23C] verwiesen. Besonderes Augenmerk liegt hier dagegen auf der umfassenden Darstellung der Limitationen der vorgeschlagenen Erweiterung und etwaigen Konflikten mit anderen Modellen, sowie einer möglichen Erweiterung auf andere Junctionmodelle.

Der naheliegendste Weg eine Trennung vorzunehmen ist eine Modifizierung der Zonenmodelle. Hierfür wäre eine Abkehr vom Lumped Parameter Konzept des Codes, oder zumindest eine Unterteilung der individuellen Zonen in zwei Subzonen veränderlicher Größe notwendig. Für die jeweiligen Subzonen sind dann auch die Erhaltungsgleichungen zu lösen. Dies bedeutet einen sehr tiefen Eingriff in das Codesystem und eine starke Erhöhung der Komplexität. COCOSYS enthält mit dem Modell DECOR bereits ein Modell, welches auf diesem Ansatz beruht. Dieses benötigt jedoch mit dem Zonenmodell DEFLA.\_MOD (vgl. [HEI95]) ein eigenes Zonenmodell und hat sich daher in der Anwendung als sehr sperrig herausgestellt.

Ein zweiter Ansatz die Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre vorzunehmen, führt über die Junctionmodelle. Bewegt sich eine Flammenfront durch den Raum und über mehrere Zonen hinweg, so liegen vor der Flamme noch nicht gezündete, unverbrannte Zonen vor und hinter der Flamme bereits gezündete, verbrannte Zonen. Nun ist es möglich den Atmosphärentransport durch diese Junctions abhängig vom Status der Zonen zu machen (unverbrannt, brennend und ausgebrannt), sodass von einer brennenden Zone in bereits ausgebrannte Zonen („hinter der Flammenfront“) verbranntes Gas und von brennenden Zonen in noch nicht gezündete Zonen („vor der Flammenfront“) unverbranntes Gas transportiert wird (vgl. Abbildung 2.22). Die Unterscheidung der Zonen erfolgt anhand des Parameters IZUEND, welcher einen vom Zustand der Zone abhängigen Wert annimmt. [HOF23C]

Dadurch wird eine Vermischung von verbranntem und unverbranntem Gas vor der Flammenfront verhindert, ohne einen komplexen Eingriff in die Zonenmodelle, wie beim Modell DECOR, vorzunehmen. Da die Erhaltungsgleichungen und Massenbilanzen auf Ebene der Zonen gelöst werden bleiben diese beim beschriebenen Ansatz ebenfalls unberührt. Die Eingangsgrößen der Differenzialgleichung des Massenstroms (vgl. [JAH80]) durch die jeweilige Junction müssen entsprechend des momentanen Zustands der durch sie verbundenen Zonen (unverbrannt/brennend/ausgebrannt) neu berechnet werden. Dies ist im Folgenden skizziert. [HOF23C]

Für die Modellerweiterung, welche auch Teil eines laufenden Promotionsvorhabens ist, wird zunächst das Junctionmodell ATMOS\_JUN vom Typ INST (instationär) ausgewählt, da dieses erfahrungsgemäß das meistverwendete Junctionmodell für atmosphärische Verbindungen ist.



**Abbildung 2.22** Prinzipskizze des Konzeptes zur Erweiterung des Verbrennungsmodells FRONT [HOF23C]

In einem ersten Schritt ist für dieses Konzept eine Speicherung der Zusammensetzung und Temperatur der Atmosphäre in einer Zone zum Zeitpunkt ihrer Zündung vorzusehen. Diese erfolgt in den Subroutinen COMB\_CHG, FRONT\_FLAG und FRONT\_CHG. Alle zonenbezogenen Größen werden dabei im Modul CRZONE gespeichert. Die Modellerweiterung kann dabei durch einen neuen Eingabeparameter „SEPA“ an und aus geschaltet werden. Der Parameter ist zunächst als globaler Parameter vorgesehen, es ist jedoch auch denkbar, diesen als zusätzlichen Inputparameter für die individuelle Junction vorzusehen, um das Modell auch in komplexen Nodalierungen und mit unterschiedlichsten Junctiontypen nutzbar zu machen und die Deaktivierung für einzelne Junctions zu ermöglichen, um Modellkonflikte zu vermeiden. Mögliche Modellkonflikte werden am Ende dieses Abschnitts dargelegt. [HOF23C]

Bei Zündung einer Zone muss darüber hinaus auch die Zusammensetzung und Temperatur des verbrannten Gases auf Basis der Zusammensetzung und Temperatur der Zone zum Zeitpunkt der Zündung und des prognostizierten Ausbrandes berechnet werden. Der Ausbrand von Wasserstoff wird bereits durch das Modell FRONT berechnet, wodurch dieser für die Berechnungen zur Verfügung steht. Für den Ausbrand von CO gibt es im bestehenden Modell keine Berechnung, weshalb dieser zunächst als vollständig angenommen wird. Um eine spätere Implementierung eines nicht vollständigen Ausbrands von CO zu ermöglichen, wird der Ausbrand von CO jedoch bereits im Konzept berücksichtigt. [HOF23C]

Für alle folgenden Überlegungen wird ein ideales Gas angenommen. Dies ist unter Störfalltypischen Bedingungen mit Drücken bis maximal 8,5 bar eine zulässige Vereinfachung, da dies

hinreichend weit vom kritischen Punkt der Atmosphärenkomponenten entfernt ist und die Realgasfaktoren der Komponenten dementsprechend sehr nahe bei eins liegen. [HOF23C]

Die Verbrennung von Wasserstoff und Kohlenmonoxid führt entsprechend der Reaktionsgleichungen (vgl. Gl. (2.3) und (2.4)) zu einer Reduktion der Stoffmenge, welche in den Berechnungen zur Zusammensetzung des verbrannten Gases berücksichtigt werden muss. Dies lässt sich als Reduktionsfaktor  $RF$  gemäß Gl. (2.5) ausdrücken. [HOF23C]



$$RF = \frac{N_1}{N_0} = \frac{1 - 0.5 \cdot (X_{H_2,0} + X_{CO,0})}{1 - 0.5 \cdot (X_{H_2,1} + X_{CO,1})} \quad (2.5)$$

Die Molenbrüche bzw. Volumenanteile der Komponenten in der verbrannten Zone können unter Zuhilfenahme des Reduktionsfaktors  $RF$  durch die Gleichungen (2.6) bis (2.9) in der Subroutine FRONT\_FLAG berechnet werden. [HOF23C]

$$X_{H_2O,1} = \frac{X_{H_2O,0} + X_{H_2,0}}{RF} - X_{H_2,1} \quad (2.6)$$

$$X_{CO_2,1} = \frac{X_{CO_2,0} + X_{CO,0}}{RF} - X_{CO,1} \quad (2.7)$$

$$X_{O_2,1} = \frac{X_{O_2,0} - 0.5 (X_{H_2,0} + X_{CO,0})}{RF} + 0.5 (X_{H_2,1} + X_{CO,1}) \quad (2.8)$$

$$X_{i,1} = \frac{X_{i,0}}{RF} \quad (2.9)$$

Die berechnete volumetrische Zusammensetzung des verbrannten Gases wird bei der Zündung einer Zone gespeichert, und die Volumenanteile der einzelnen Komponenten werden in der Subroutine FRONT\_FLAG mit Hilfe von Gl. (2.10) sowohl für die verbrannte als auch für die unverbrannte Zusammensetzung in die Massenanteile umgerechnet. Für diese Berechnung werden die durchschnittliche molare Masse des verbrannten Gases und die durchschnittliche molare Masse des unverbrannten Gases benötigt (vgl. Gl. (2.11)), welche ebenfalls in vorangehend genannter Subroutine berechnet werden.

Die Massenanteile gehen in die Berechnung des komponentenspezifischen Massen- und Volumenstroms sowie des Energietransports in der Subroutine VDER1 und in die nachfolgend beschriebene Berechnung der prognostizierten Temperatur des verbrannten Gases in der Subroutine FRONT\_FLAG ein. Für die Berechnung der Temperatur wird mit Gl. (2.12) vereinfachend eine isobare Verbrennung angenommen, welche näherungsweise für

Nodalisierungen gilt, in denen alle Zonen nur einen kleinen Anteil am Gesamtvolumen einnehmen. Die Temperatur des verbrannten Gases wird für die Berechnung der komponentenspezifischen Enthalpie und Viskosität in der Subroutine MPFUN sowie der Dichte in der Subroutine VDERI verwendet. [HOF23C]

$$Y_{i,0} = \frac{M_i}{\bar{M}_0} \cdot X_{i,0}; \quad Y_{i,1} = \frac{M_i}{\bar{M}_1} \cdot X_{i,1} \quad (2.10)$$

$$\bar{M}_0 = \sum_{i=1}^n M_i \cdot X_{i,0}; \quad \bar{M}_1 = \sum_{i=1}^n M_i \cdot X_{i,1} \quad (2.11)$$

$$T_1 = \frac{Q_{01}}{\bar{c}_{p,1} \cdot m} + T_0 \quad (2.12)$$

Für die Berechnung der Temperatur wird die bei der Verbrennung freiwerdende Wärmemenge benötigt, die nach Gl. (2.13) unter Verwendung der Heizwerte von Wasserstoff und Kohlenmonoxid berechnet werden kann. Darüber hinaus wird die mittlere Wärmekapazität benötigt, welche sich aus Gl. (2.14) ergibt. In einem ersten Ansatz wird hierbei die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität vernachlässigt. [HOF23C]

$$Q_{01} = m \left( (Y_{H_2,0} - Y_{H_2,1}) H_{O,H_2} + (Y_{CO,0} - Y_{CO,1}) H_{O,CO} \right) \quad (2.13)$$

$$\bar{c}_{p,1} = \sum_{i=1}^n c_{p,i} \cdot Y_{i,1} \quad (2.14)$$

Die Dichte des unverbrannten und des verbrannten Gases werden unter Verwendung des idealen Gasgesetzes nach Gl. (2.15) in der Subroutine VDERI berechnet. [HOF23C]

$$\rho_0 = \frac{p \cdot \bar{M}_0}{R \cdot T_0}; \quad \rho_1 = \frac{p \cdot \bar{M}_1}{R \cdot T_1} \quad (2.15)$$

Da die Strömung in einer Junction auf die Schallgeschwindigkeit limitiert ist, ist unter Verwendung der vorangehend beschriebenen Größen ebenfalls eine neue Schallgeschwindigkeit zu berechnen. [HOF23C]

Die neu eingeführten Berechnungen und deren Anwendungen sind in Tabelle 2.7 zusammenfassend dargestellt. Mit diesen sind alle Eingabegrößen der Differenzialgleichung für den Massenstrom durch die Junction definiert. Die Terme für die Differenzialgleichung werden in der Subroutine VDERI zusammengestellt und die Gleichung wird durch den COCOSYS zu Grunde liegenden Löser FEBE (Forward Euler Backward Euler) gelöst. Da die Größen Viskosität und Dichte über die Reynolds-Zahl und die Turbulenzintensität ebenfalls in die Berechnung der Flammenfrontgeschwindigkeit eingehen, wird diese ebenfalls neu berechnet.

**Tabelle 2.7** Für die Modellerweiterung in der Subroutine FRONT\_FLAG neu zu berechnende Größen und deren Verwendung [Hof23c]

Größe	Formelzeichen	Subroutine	Verwendung
Reduktionsfaktor	$RF$	FRONT_FLAG	- Molenbrüche
Molenbrüche	$X_{i,1}$		- Massenbrüche - mittlere Molmasse
Massenbrüche	$Y_{i,1}$		- Komponentenspezifische Massen - mittlere isobare Wärmekapazität - Wärmemenge - komponentenspez. Massenstrom
Mittlere Molmasse	$\bar{M}_0; \bar{M}_1$		- Massenbrüche - Dichte
Temperatur	$T_1$		- Dichte - dynamische Viskosität - Enthalpie
Wärmemenge	$Q_{01}$		- Temperatur

**Tabelle 2.8** Für die Modellerweiterung in anderen Subroutinen neu zu berechnende Größen und deren Verwendung [HOF23C]

Größe	Formelzeichen	Subroutine	Verwendung
Dichte	$\rho_0; \rho_1$	VDERI	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Dichte des Mediums in der Junction</li> <li>- Reynolds-Zahl</li> <li>- Gewichtsterm in der Differenzialgleichung</li> <li>- Volumenstrom</li> <li>- Strömungsgeschwindigkeit</li> </ul>
Komponentenspezifische dynamische Viskosität	$\eta_{i,0}; \eta_{i,1}$	MPFUN	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Dynamische Viskosität</li> </ul>
Dynamische Viskosität	$\eta_0; \eta_1$	VDERI	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Reynolds-Zahl</li> </ul>
Schallgeschwindigkeit des Gases	$c_s$	VDERI	<ul style="list-style-type: none"> <li>- maximaler Massenstrom und Limitierung auf diesen</li> </ul>
Isentropenexponent der Ursprungszone	$\kappa_{SZ}$	MPKAP	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Schallgeschwindigkeit</li> </ul>
Komponentenspezifische Enthalpie der Ursprungszone	$H_{i,SZ}$	MPFUN	<ul style="list-style-type: none"> <li>- komponentenspezifischer Wärmestrom</li> </ul>

### Potenzielle Konflikte mit anderen Modellen

Im Rahmen der Konzepterstellung wurden potenzielle Konflikte mit anderen Modellen festgestellt. Diese liegen insbesondere im Bereich des Junctionmodells. Hier sind das Bragg-Benedict Modell, das Direct Containment Heating Modell (DCH), das Filter Modell und das Spray Modell zu nennen. Darüber hinaus werden die Dichte und Viskosität unter Verwendung des Eingabeparameters VZEL abweichend berechnet (vgl. [ARN21]), was mit dem aktuellen Modellkonzept kollidiert bzw. noch nicht berücksichtigt ist. Da Diffusion im Vergleich zur Verbrennung ein langsamer Prozess ist, wird vorgeschlagen die Diffusion für den Zeitraum der Flammenausbreitung in einer Junction zu vernachlässigen. Dies ist in der Subroutine VDER1 vorgenommen worden.

**Tabelle 2.9** Potenzielle Konflikte der vorgeschlagenen Modellerweiterung mit anderen Modellen in COCOSYS

Subroutine	Potenzielle Modellkonflikte	Beschreibung
VDERI	Bragg-Benedict	Bei Verwendung des Bragg-Benedict Modells wird in der Differenzialgleichung für den Massenstrom in der Junction ein alternativer Strömungswiderstandsterm verwendet. Dieser wird im Konzept zur Modellerweiterung derzeit nicht beachtet.
VDERI	Adjacent Junction	Im Falle von adjacent Junctions wird ein weiterer Strömungswiderstandsbeiwert berechnet. Hier ist eine eingehende Prüfung der Auswirkungen auf die vorgeschlagene Modellerweiterung notwendig.
VDERI	Spray Entrainment	Das Spray Entrainment Modell interagiert mit dem Junction Modell. Hier ist eine eingehende Prüfung der Auswirkungen auf die vorgeschlagene Modellerweiterung notwendig. Gegebenenfalls bietet sich aufgrund der vergleichsweise kurzen Dauer von Verbrennungsvorgängen eine Deaktivierung des Spray Entrainment Modells für Junctions mit einer laufenden Flammenausbreitung an.
VDERI, VDER1	Direct Containment Heating	Das Direct Containment Heating Modell interagiert mit dem Junction Modell. Hier ist ebenfalls eine Prüfung der Auswirkungen notwendig.
VDER1	Strahlmodell	Bei Verwendung des Strahlmodells wird der durch Lösung der Differenzialgleichung berechnete Massenstrom durch den durch das Strahlmodell berechneten Massenstrom ersetzt.

### Weitere Modellverbesserungen

Die in FRONT implementierten richtungsabhängigen Flammenausbreitungskriterien wurden in Experimenten im kleinen Maßstab und in ruhender Atmosphäre ermittelt. In Experimenten haben Al-Khishali et al. und Kumar et al. festgestellt, dass eine Ausbreitung nach unten in einer Atmosphäre von 6 Vol% H<sub>2</sub> in Luft bei einer Turbulenzintensität von 1-2 m/s möglich ist. Daraus ergibt sich, dass es vernünftig und konservativ ist, die Ausbreitung nach unten bei

Turbulenzintensitäten von über 1 m/s und H<sub>2</sub>-Konzentrationen von über 6 Vol-% zuzulassen. Für niedrigere Turbulenzintensitäten werden die bestehenden Kriterien für die Ausbreitung nach unten verwendet (>8,5 Vol-% H<sub>2</sub>). Die Experimente von Kumar et al zeigten auch, dass eine horizontale Ausbreitung bei Wasserstoffkonzentrationen über 5 Vol-% und einer anfänglichen Turbulenzintensität von 1-2 m/s möglich ist. Für die Sicherheitsanalyse ist es daher sinnvoll, eine horizontale Flammenausbreitung bei und über diesen Grenzwerten zu berücksichtigen. [ALK83; HOF23C; KUM83]

Die Abhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit vom Druck, wie sie in COCOSYS implementiert ist, hat einen positiven Exponenten von 0,2. Diese Formulierung impliziert eine positive Korrelation zwischen Druck und laminarer Flammgeschwindigkeit, während Schramm et al. eine negative Korrelation zwischen Druck und laminarer Flammgeschwindigkeit sehen und einen Exponenten zwischen -0,2 und -0,5 vorschlagen. Für das erweiterte Modell wurde der Exponent auf -0,2 geändert. [HOF23C; SCH17]

### 2.3.2 Korrelationen für die Flammenfrontgeschwindigkeit

Im vorliegenden Abschnitt wird die an der Technischen Universität München im Rahmen einer Dissertation entwickelte Modellierungsstrategie für die Simulation von mageren Wasserstoff-Luft-Gemische nach Katzy zusammenfassend beschrieben und um einen Ansatz zur Berücksichtigung eines Anteils Wasserdampf an der Atmosphäre nach Schramm ergänzt [KAT20; SCH17]. Die neue Formulierung der Brenngeschwindigkeit ermöglicht die Berücksichtigung des beschleunigenden Effekts von Flammenfrontinstabilitäten auf groben Rechengittern, welche eine direkte Auflösung der Effekte nicht erlauben [KAT20]. Die Modellierungsstrategie wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit in eine Entwicklungsversion von COCOSYS (AC<sup>2</sup> 2021.0) implementiert und in den nachfolgenden Abschnitten anhand von THAI-Versuchen validiert.

Die Formulierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit nach Katzy, ergänzt um den Faktor für den Einfluss von Dampf  $F_{VA}$ , ist in Gl. (2.16) aufgetragen:

$$S_{eff.} = S_T = S_{L,ref.}^0 \cdot F_{Thermo.} \cdot F_{VA} \cdot E_{Falt.} \cdot F_p \cdot F_{Streck.} \cdot F_T \cdot F_{\Delta} \cdot B \quad (2.16)$$

Die turbulente Brenngeschwindigkeit ist demzufolge das Produkt aus neun Faktoren:

- $S_{L,ref.}^0$  Ungestreckte, laminare Brenngeschwindigkeit
- $F_{Thermo.}$  Temperatur- und Druckeinfluss auf  $S_{L,ref.}^0$ .
- $F_{VA}$  Dampfeinfluss auf  $S_{L,ref.}^0$ . nach [SCH17]

- $\mathcal{E}_{Falt.}$  Vergrößerung der Flammenoberfläche durch Flammenfaltung auf Grund von Instabilitäten
- $F_p$  Druckeinfluss auf  $\mathcal{E}_{Falt.}$
- $F_{Streck.}$  Einfluss der lokalen Flammenkrümmung und der resultierenden Flammenstreckung auf  $S_{L,ref.}^0$ .
- $F_T$  Turbulenzeinfluss
- $F_\Delta$  Einfluss des Rechengitters
- $B$  Versuchsanlagen-spezifischer Einfluss

Für die vorliegende Arbeit werden die beiden letzten Faktoren  $F_\Delta$  und  $B$  vernachlässigt, da die Übertragbarkeit des Einflusses des Rechengitters auf einen Lumped Parameter Code unklar ist und der versuchsanlagen-spezifische Faktor  $B$  von Katzy für die THAI-Anlage auf eins festgelegt wurde.

Die ungestreckte, laminare Brenngeschwindigkeit (vgl. Gl. (2.17)) ist als Polynom fünften Grades des Äquivalenzverhältnisses formuliert und wurde auf Basis von Versuchsreihen mehrerer Quellen festgelegt [KAT20]. Das Äquivalenzverhältnis ist dabei als das Verhältnis von Brennstoff zu Oxidator definiert, welches unter der Annahme des Vorliegens einer reinen Wasserstoff-Luft-Atmosphäre nach Gl. (2.18) berechnet werden kann. Die Annahme einer reinen Wasserstoff-Luft-Atmosphäre ist an dieser Stelle erforderlich, da bei Vorliegen eines Wasserdampf-Anteils in der Atmosphäre der Sauerstoffanteil niedriger ist, als bei einem Wasserstoff-Luft-Gemisch und damit das Äquivalenzverhältnis höher ist. Dies führt zu einer unphysikalischen Erhöhung der Brenngeschwindigkeit. Der verlangsamende Einfluss von Wasserdampf wird daher durch den vorangehend bereits genannten Dampfeinflussfaktor  $F_{VA}$  berücksichtigt.

$$S_{L,ref.}^0 = 4,248\phi^5 - 13,6\phi^4 + 12,34\phi^3 - 0,833\phi^2 - 0,02239\phi - 0,003956 \quad (2.17)$$

$$\phi = \frac{X_{H_2}}{2(1 - X_{H_2})X_{O_2,Luft}} \quad (2.18)$$

Der Temperatur- und Druckeinfluss wird durch den Faktor  $F_{Thermo.}$  nach Gl. (2.19) beschrieben. Dieser Faktor wiederum besteht aus einem Temperaturfaktor und einem Druckfaktor. Der Temperaturfaktor ist dabei durch das Verhältnis von der Temperatur des unverbrannten Gases zu der Referenztemperatur von 293 K mit dem Exponenten  $\alpha$ , welcher durch ein Polynom zweiten Grades in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses beschrieben wird, definiert. Der Druckfaktor besteht aus dem Verhältnis vom initialen Druck zum Referenzdruck von 1 bar mit dem Exponenten  $\beta$ , welcher ebenfalls durch ein Polynom zweiten Grades in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses beschrieben wird. [KAT20]

$$F_{Thermo.} = \left( \frac{T_u}{T_{ref.}} \right)^\alpha \left( \frac{p}{p_{ref.}} \right)^\beta \quad (2.19)$$

mit  $\alpha = 3,791 \phi^2 - 8,443 \phi + 6,35$

und  $\beta = -2,7 \phi^2 + 4,586 \phi - 2,1$

Für die Berücksichtigung des verlangsamenden Einflusses von Dampf auf die laminare Brenngeschwindigkeit wird der Faktor  $F_{VA}$  verwendet, welcher dem vereinfachten Ansatz nach Schramm entspricht (vgl. Gl. (2.20)). [SCH17]

$$F_{VA} = \frac{1 - X_{H_2} - X_{H_2O}}{1 - X_{H_2}} \quad (2.20)$$

Der Flammenfaltungsfaktor (vgl. Gl. (2.21)) nach Katzy ist abhängig von der effektiven Lewiszahl  $Le_{eff.}$ , welche unter Verwendung der Lewis-Zahl von mangelndem und der Lewis-Zahl vom überschüssigen Reaktionspartner, sowie der Zeldovich-Zahl berechnet wird. In die Zeldovich-Zahl wiederum geht die Aktivierungsenergie  $E$ , die Gaskonstante  $R$  sowie die Temperatur vor und nach der Verbrennung ein. Die Korrelation für den Faltungsfaktor ist für unterstöchiometrische Gemische und im Bereich zwischen  $Le_{eff.} = 0,35$  und  $Le_{eff.} = 0,77$  gültig und zeigt robustes Verhalten. [KAT18, KAT20]

$$\bar{\varepsilon}_{Falt.} = (Le_{eff.}^{-0,4})^2 \quad (2.21)$$

mit  $Le_{eff.} = 1 + \frac{Le_E - 1 + A(Le_D - 1)}{1 + A}$

und  $Le_E = 2,32; \quad Le_D = 0,33$

und  $A = 1 + Ze \left( \frac{1}{\phi} - 1 \right)$

und  $Ze = \frac{E(T_1 - T_0)}{RT_1^2}$

und  $E = 125.520 \text{ J/mol}$

Der Faktor für den Druckeinfluss auf die Flammenfaltung wird durch Gl. (2.22) beschrieben und besteht aus dem Verhältnis von Druck zu Referenzdruck mit einem konstanten Exponenten. [KAT20]

$$F_p = \frac{\varepsilon_{Falt.,p}}{\varepsilon_{Falt.}} = \left( \frac{p}{p_{ref.}} \right)^{0,14} \quad (2.22)$$

Für die Formulierung des Streckfaktors nach Gl. (2.23) werden die Markstein-Länge  $\mathcal{L}$  und die geometrische Krümmung  $\kappa$  verwendet. Die Marksteinlänge wird dabei von Katzy durch ein Polynom dritten Grades des Äquivalenzverhältnisses beschrieben. Die geometrische Krümmung setzt sich dabei aus einer experimentell ermittelten Referenzkrümmung, einem Anpassungsfaktor für die Anpassung der zweidimensional gemessenen Referenzkrümmung und einer Druckanpassung zusammen. Die Druckanpassung wird auf den halben AICC-Druck („Adiabatic, Isochoric, Complete Combustion“) limitiert. Abweichend von der durch Katzy festgelegten Referenzkrümmung  $\kappa_{ref.} = 500 \text{ 1/m}$  wird für die vorliegende Arbeit auf Basis der optischen Messungen durch Katzy eine Referenzkrümmung von  $450 \text{ 1/m}$  festgelegt. Der Referenzdruck liegt wie bei allen vorangegangenen Druckanpassungen bei 1 bar. [KAT20]

$$F_{Streck.} = (1 + \mathcal{L}\kappa)^{-1} \quad (2.23)$$

mit  $\mathcal{L} = 0,0007723 \phi^3 - 0,002694 \phi^2 + 0,003276 \phi - 0,001383$

und  $\kappa = \frac{\pi}{2} \kappa_{ref.} \left( \frac{\min(p; 0,5 p_{AICC})}{p_{ref.}} \right)^{0,55}$

mit  $\kappa_{ref.} = 450 \text{ 1/m}$

Zuletzt erfolgt die Berechnung des Turbulenzfaktors nach Gl. (2.24). Die Größe  $\sigma$  wird dabei unter Verwendung der Peters-Korrelation ermittelt. Diese ist bereits im Modell FRONT in COCOSYS implementiert und wird daher auch für die vorliegenden Arbeiten verwendet. [KAT20, PET99]

$$F_T = 1 + \sigma \quad (2.24)$$

Die Modellierungsstrategie nach Katzy führt zu deutlich höheren Brenngeschwindigkeiten als die bisherige Modellierung in COCOSYS. Daher werden im Folgenden die vom Codenutzer zu definierenden Eingabeparameter für die Turbulenzberechnung des Modells FRONT auf Basis von experimentellen Arbeiten aus der Literatur neu festgelegt. Hierbei handelt es sich um die Parameter CFR und NFR in Gl. (2.25), welche durch die Eingabeparameter REYFAC und REYEXP durch den Nutzer festgelegt werden können. Hier empfiehlt das COCOSYS Benutzerhandbuch für die Verwendung des exponentiellen Ansatzes (COMO = EXPO) die Standardwerte  $CFR = 1,1$  und  $NFR = -0,13$ , welche im Rahmen einer Parameterstudie von

Pelzer ermittelt wurden. Für die vorliegende Arbeit wird auf die Werte  $CFR = 0,115$  und  $NFR = -0,118$  zurückgegriffen, welche durch Abdel-Gayed und Bradley anhand von Experimenten mit einer Strömung zwischen zwei Platten ermittelt wurden. [ABD81; ARN21; PEL12]

$$u' = CFR \cdot U_J \cdot Re^{NFR} \quad (2.25)$$

### 2.3.3 Experimente

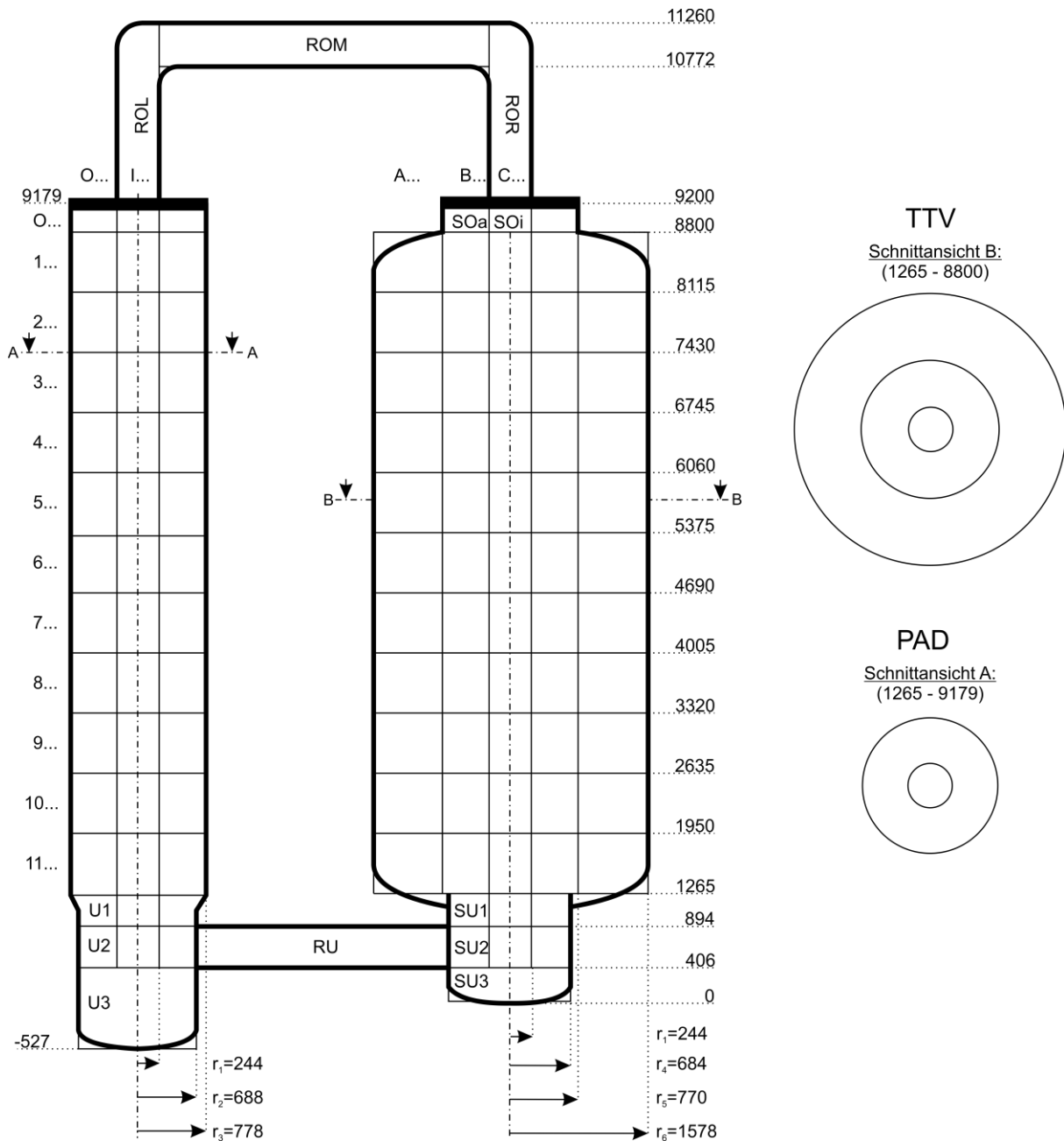
Für die Validierung der im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit werden die in Tabelle 2.10 aufgeführten, in der THAI-Versuchsanlage durchgeführten Wasserstoffverbrennungsversuche verwendet. Die ersten drei Versuche, Versuch HD-15, HD-16 und HD-22, wurden im Rahmen des ersten OECD/NEA THAI Vorhabens in der ursprünglichen Einraum-Konfiguration der THAI-Versuchsanlage durchgeführt. Versuch HD-39 wurde im Rahmen des vom BMWi geförderten Vorhabens THAI-V in der seit 2016 erweiterten THAI+-Konfiguration der Versuchsanlage und damit in der Mehrraum-Konfiguration, welche sowohl den TTV („THAI Test Vessel“) als auch den PAD („Parallel Attachable Drum“), verbunden durch das obere und untere Verbindungsrohr, umfasst, durchgeführt. Die Versuche wurden so ausgewählt, dass verschiedene Versuchsbedingungen abgedeckt werden. So variiert die Wasserstoffkonzentration zwischen 6,7 und 12,01 Vol.-%, die Dampfkonzentration zwischen 0 und 25,3 Vol.-%, die Starttemperatur zwischen 23,7 und 92,5 °C und der Zündort zwischen Deckel und Sumpf des TTV.

**Tabelle 2.10** Für die Validierung der Korrelation herangezogene Versuche [FRE17; GUP15; KAN08]

Größe	Einheit	HD-15	HD-16	HD-22	HD-39
Konfiguration	-	THAI	THAI	THAI	THAI+
Wasserstoff	Vol.-%	9,93	12,01	9,9	TTV: 9,7 PAD: 6,7
Dampf	Vol.-%	-	-	25,3	-
Temperatur	°C	92,5	92,0	91,9	23,7
Druck	Bar	1,504	1,492	1,487	1,456
Zündort	-	Sumpf	oben	Sumpf	Sumpf TTV

### 2.3.4 Modellierung

Die THAI+ Versuchsanlage, welche für die Durchführung des Versuchs HD-39 verwendet wurde, wird für die Validierung von COCOSYS in 73 Zonen auf 16 Ebenen unterteilt. Diese Nodalisierung ist in Abbildung 2.23 dargestellt. Für Versuche, welche in der Einraum-Konfiguration der Versuchsanlage, welche lediglich den größeren TTV umfasst, durchgeführt wurden wird dieselbe Nodalisierung der Versuchsanlage, jedoch ohne die Verbindungsrohre und den PAD verwendet. [HOF23]



**Abbildung 2.23** Nodalisierungsskizze THAI+ Versuchsanlage für Verbrennungsversuche [HOF23C]

Die Behälterstrukturen werden in angemessenem Detail einschließlich der Isolierung modelliert. Die Materialeigenschaften sind aus dem Bericht über die Erweiterung der Anlage auf die

THAI+ Konfiguration entnommen (siehe [FRE16]). Die Materialeigenschaften der Isolierung wurden aus dem neueren Abschlussbericht des Projekts THAI-V entnommen (siehe [GUP17]). Die innere Oberfläche und Stahlmasse des Modells sind mit Daten von Becker Technologies abgeglichen (siehe [FRE16]), um eine realistische thermische Trägheit und realistische Wärmeübertragungseigenschaften zu gewährleisten. Die Wärmeübertragungsmodelle CO1 (kombiniertes Modell für freien und erzwungenen, konvektiven Wärmeübergang sowie Kondensation) und WGR (Wand-Gas Strahlung) werden verwendet. [HOF23C]

Der Strömungswiderstandsbeiwert wird für alle Junctions, außer für die Flanschverbindungen an den Verbindungsrohren, denen ein höherer Wert zugewiesen wird, auf den Standardwert von 0,3 festgelegt. Die Atmosphärenbedingungen vor der Zündung werden aus den experimentellen Ergebnissen entnommen und als Anfangsrandbedingungen für die Simulation festgelegt. Die Zündung wird bei 0 s in der Zone SU2C im Sumpf des TTV initiiert. [HOF23C]

### 2.3.5 Ergebnisse

Im vorliegenden Abschnitt werden zunächst unter Verwendung des um die Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre erweiterten Modells erzielte Simulationsergebnisse hinsichtlich des Versuchs HD-39 ausgewertet. Anschließend erfolgt die Auswertung von Simulationsergebnissen der Versuche HD-15, HD-16, HD-22 und HD-39, welche unter Verwendung der Modellierungsstrategie für die Brenngeschwindigkeit nach Katzy erzielt wurden.

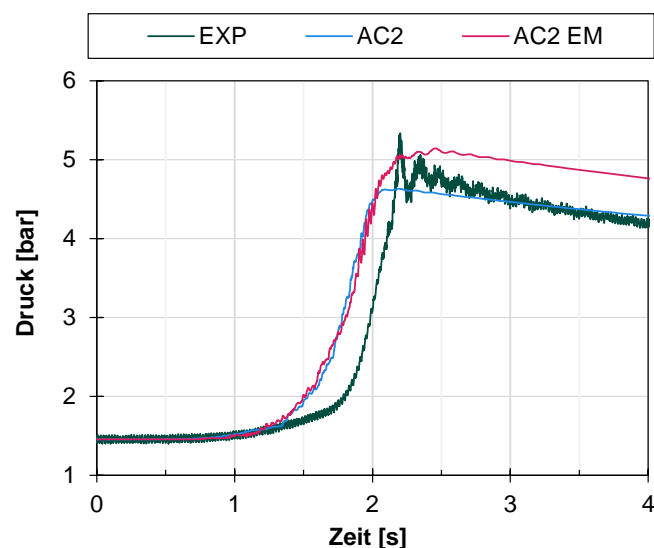
#### Erweitertes Modell

Abbildung 2.24 zeigt den Druckverlauf im Experiment (EXP) und die entsprechenden Druckverläufe der Simulation mit der Release-Version des Codes (AC2) und der Simulation mit dem erweiterten Modell (AC2 EM). Der im Experiment aufgezeichnete Maximaldruck beträgt 5,34 bar, der von der Simulation mit der COCOSYS-Release-Version unterschätzt wird (4,63 bar), aber vom erweiterten Modell recht gut vorhergesagt wird (5,15 bar). Der Gradient des Druckanstiegs zwischen 2 und 4,5 bar im Experiment wird von beiden Simulationen genau vorhergesagt ( $\sim 5,5$  bar/s). Druckschwankungen werden sowohl im Experiment als auch in den Simulationen um den Zeitpunkt des Spitzendrucks herum beobachtet, wobei die Amplitude im Experiment (über 0,4 bar) um eine Größenordnung höher ist als in den Simulationen. [HOF23C]

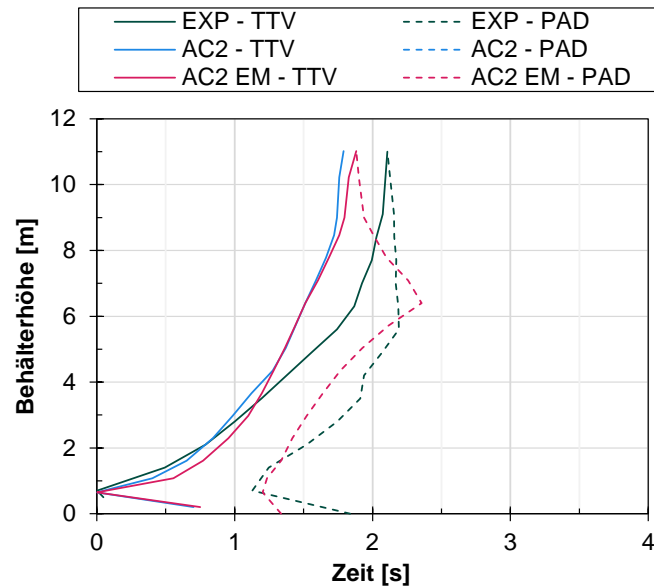
Abbildung 2.25 zeigt die Flammenausbreitung entlang der Mittellinien der Versuchsbehälter über die Zeit sowohl für den Versuch HD-39 als auch für die Simulationen. Im Versuch wandert die Flammenfront vom Sumpf des TTV nach oben und horizontal durch das untere Verbindungsrohr. Sie erreicht den Sumpf des PAD nach etwa 1,2 s. Nach 2,1 s hat die Flammenfront den TTV durchquert und tritt in das obere Verbindungsrohr ein, wo sie weiter beschleunigt wird, und es kommt zur Strahlzündung in der oberen Hälfte des PAD. Beide Flammenfronten

treffen sich in der Mitte des PAD. Bei der Simulation mit der Release-Version von COCOSYS wandert die Flammenfront nicht bis in den PAD. Die Flammenfront stoppt im unteren Verbindungsrohr und nach etwa 1,9 s im oberen Verbindungsrohr. Die mit dem erweiterten Modell erzielten Ergebnisse zeigen ein ähnliches Flammenausbreitungsverhalten im TTV, aber die Flamme wandert sowohl durch das untere als auch durch das obere Verbindungsrohr zum PAD. Der Zeitpunkt des Eintreffens der Flamme im Sumpf des PAD (etwa 1,2 s Versuchszeit) wird von der Simulation genau vorhergesagt. Die Flammenfronten treffen sich in der Mitte des PAD, aber in der oberen Hälfte des PAD wird keine Strahlzündung beobachtet. Die Geschwindigkeit der Flammenbewegung nimmt auf den letzten drei bis vier Metern deutlich ab. [HOF23C]

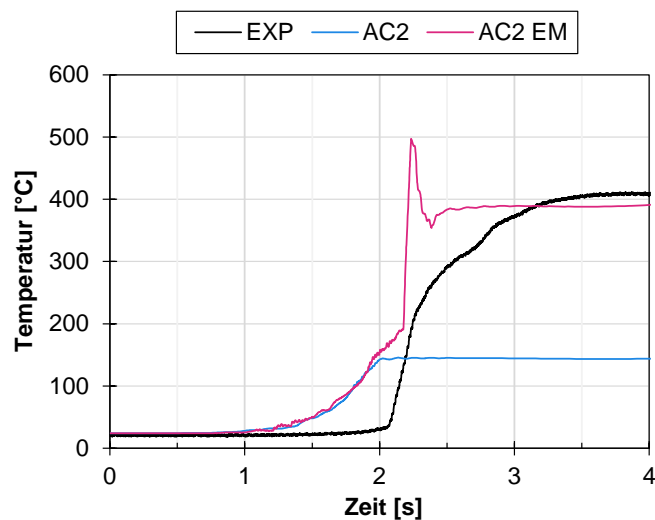
In Abbildung 2.26 ist der Temperaturverlauf über der Zeit in der Mitte des PAD sowohl für das Experiment als auch die Simulationen aufgetragen. Im Experiment bleibt die Temperatur bis ca. 2 s konstant niedrig nahe der Ausgangstemperatur. Anschließend steigt die Temperatur innerhalb von etwa einer Sekunde auf 400 °C an. In der Simulation unter Verwendung der Release-Version von COCOSYS (AC2) steigt die Temperatur dagegen zwischen 1 s und 2 s Versuchszeit von Raumtemperatur auf knapp 150 °C und bleibt anschließend nahezu konstant. Die unter Verwendung des erweiterten Modells durchgeführte Simulation (AC2 EM) weist bis 2 s Versuchsdauer einen sehr ähnlichen Verlauf auf, wie die unter Verwendung der Release-Version durchgeführte Simulation. Anschließend steigt die Temperatur jedoch weiter an und erreicht kurzzeitig bis zu 500 °C. Darauf folgend fällt sie wieder um ca. 100 °C und nähert sich damit der im Experiment gemessenen Temperatur gut an. [HOF23C]



**Abbildung 2.24** Druckverlauf im Experiment HD-39 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2EM); [HOF23C], EXP nach [FRE17]



**Abbildung 2.25** Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD39 und der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2EM); [HOF23c], EXP nach [FRE17]



**Abbildung 2.26** Temperaturverlauf in der Mitte des PAD im Experiment HD-39 (EXP) und den entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 EM); EXP nach [FRE17]

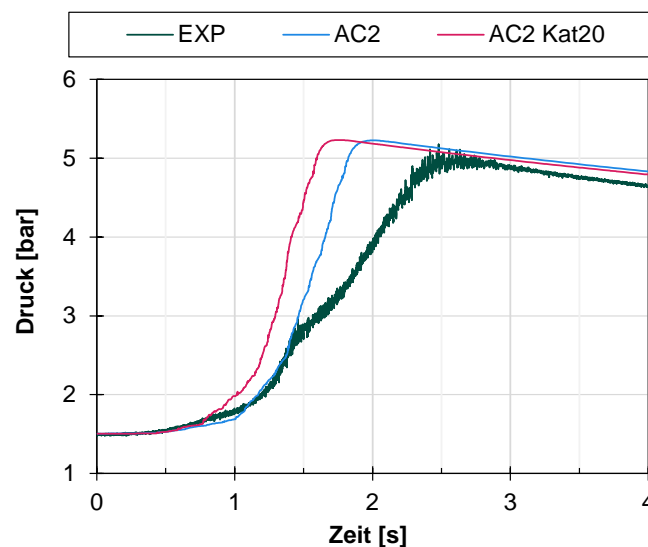
### Modellierungsstrategie nach Katzy

Die unter Verwendung der Modellierungsstrategie von Katzy erzielten Simulationsergebnisse (vgl. Abbildung 2.27, AC<sup>2</sup> Kat20) des Versuchs HD-15 zeigen hinsichtlich Druckverlauf über der Zeit einen qualitativ fast identischen Verlauf, wie die unter Verwendung der Release-Version von AC<sup>2</sup> 2021.0 erzielten Ergebnisse (AC<sup>2</sup>). Der Druckanstieg erfolgt unter Verwendung der modifizierten Version von AC<sup>2</sup> etwa 0,25 s früher. Der Maximaldruck aus dem Experiment

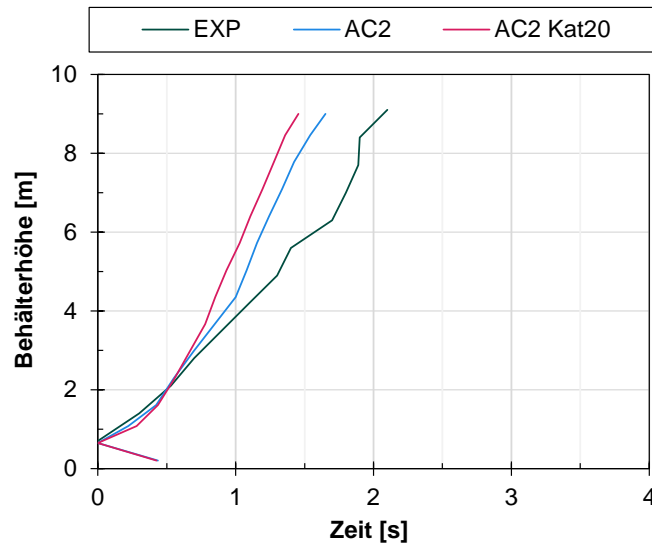
(EXP) wird durch beide Simulationen adäquat wiedergegeben, der Gradient des Drucks hingegen wird durch beide Simulationen überschätzt. Zwischen zwei bar und fünf bar beträgt der gemittelte Gradient des Drucks im Experiment 2,5 bar/s und in den Simulationen 5 bar/s.

Die Überschätzung des Gradienten des Drucks ist auf eine Überschätzung der Brenngeschwindigkeit durch den Code zurückzuführen (vgl. Abbildung 2.28). Die höhere Geschwindigkeit der Flammenfront ist dabei auf eine ausgeprägtere Flammenbeschleunigung zwischen Zündort und einer Höhe von etwa 4 m zurückzuführen. Anschließend läuft die Ausbreitung mit fast gleichbleibender Geschwindigkeit ab. Die Flamme erreicht den Deckel des Versuchsbehälters in den Simulationen nach ca. 1,7, respektive 1,5 s und im Experiment nach 2,1 s.

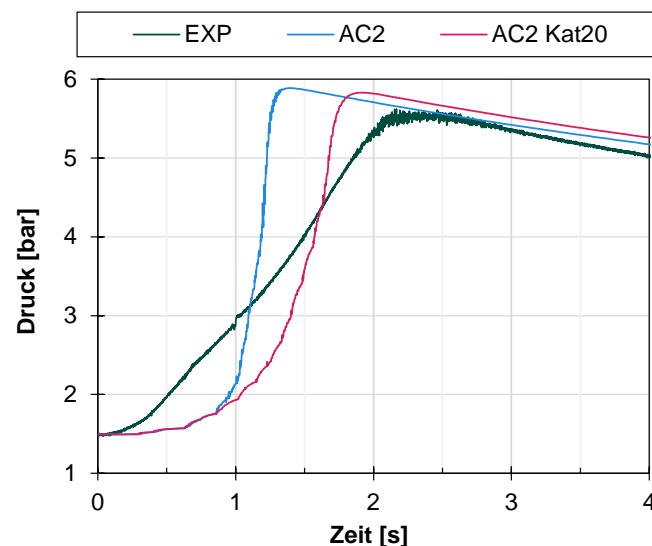
Die Experimentatoren geben den Ausbrand im Versuch HD-15 als vollständig an. Dies bedeutet, dass die Restkonzentration Wasserstoff unterhalb der Nachweisgrenze der verwendeten Instrumentation liegt. In der Simulation unter Verwendung der Release-Version beträgt die Restkonzentration 0,068 Vol.-% und in der Simulation unter Verwendung der Modellierungsstrategie von Katzy beträgt sie 0,012 Vol.-%. Beide Ergebnisse können näherungsweise als vollständiger Ausbrand angenommen werden.



**Abbildung 2.27** Druckverlauf im Experiment HD-15 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20); EXP nach [KAN08]



**Abbildung 2.28** Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-15 (EXP) und in den entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20); EXP nach [KAN08]



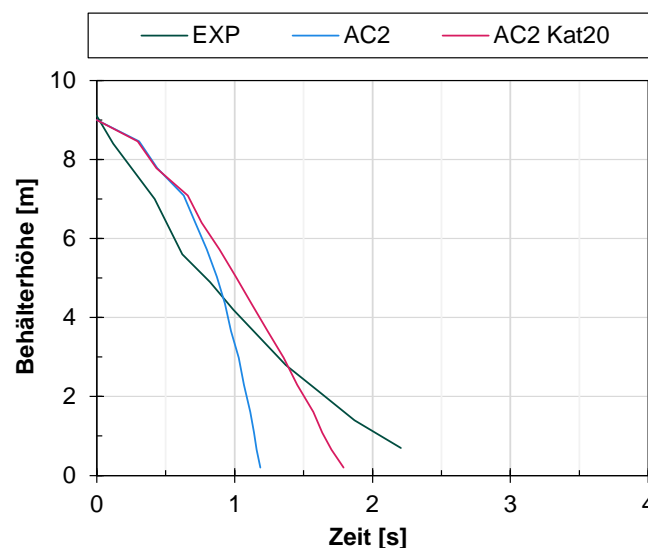
**Abbildung 2.29** Druckverlauf im Experiment HD-16 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20); EXP nach [KAN08]

Versuch HD-16 wird anders als Versuch HD-15 bei einer höheren Wasserstoffkonzentration von 12,01 Vol.-% durchgeführt und die Zündung erfolgt im Fall des HD-16 unter dem Deckel des Versuchsbehälters auf einer Höhe von 9,1 m. Die Simulationen geben den im Experiment erreichten Maximaldruck wie bereits beim HD-15 adäquat wieder und überschätzen diesen lediglich um etwa 0,3 bar. Der Gradient des Drucks zwischen 2 bar und dem Maximaldruck wird jedoch noch stärker als bereits beim HD-15 durch beide Simulationen überschätzt. Die unter der Verwendung der Release-Version von AC<sup>2</sup> erzielten Ergebnisse weisen dabei einen

höheren Gradienten von etwa 10 bar/s auf, die mit dem modifizierten Modell erzielten Ergebnisse einen Gradienten von 5 bar/s. Im Experiment wird ein Druckgradient von etwa 2 bar/s beobachtet.

Im Experiment verlangsamt sich die Flamme ab einer Höhe von ca. 5,6 m von 5,6 m/s auf etwa 3,5 m/s (vgl. Abbildung 2.30). In den Simulationen beschleunigt sich die Flamme dagegen während der Abwärtsausbreitung. Die maximal erreichte, mittlere Temperatur im Versuchsbehälter beträgt dabei im Experiment 989 °C und in den Simulationen 1259, respektive 1245 °C. Eine Überschätzung der Temperatur wird in Simulationen von THAI-Versuchen mit verschiedenen Codes (Computational Fluid Dynamics und Lumped Parameter) beobachtet [KOT12]. Eine mögliche Erklärung hierfür ist die thermische Trägheit der Thermoelemente, eine weitere ist die eingeschränkte Eignung der Modellbasis für sehr hohe Temperaturen. Im vorliegenden Fall wird die Abweichung durch die schnellere Verbrennung in der Simulation und damit geringere Wärmeverluste vergrößert.

Die Experimentatoren geben den Ausbrand im Versuch HD-16 als vollständig an. Dies bedeutet, dass die Restkonzentration Wasserstoff unterhalb der Nachweisgrenze der verwendeten Instrumentation liegt. In beiden Simulationen beträgt die Restkonzentration 0,012 Vol.-%. Die Ergebnisse können näherungsweise als vollständiger Ausbrand angenommen werden und entsprechen damit den Experimentellen Beobachtungen.



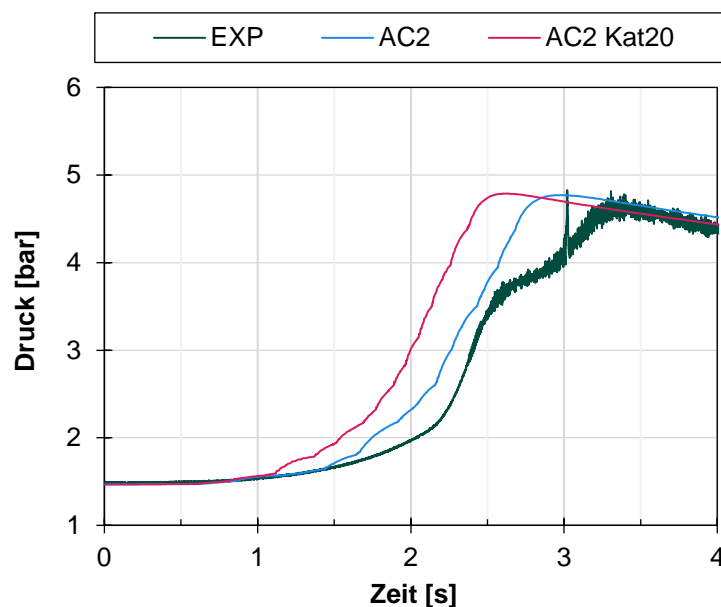
**Abbildung 2.30** Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-16 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20); EXP nach [KAN08]

In Abbildung 2.31 sind die Druckverläufe über der Zeit für Versuch HD-22 und die Simulationen aufgetragen. Der Druck im Experiment steigt zwischen der registrierten Zündung bei 0 s und

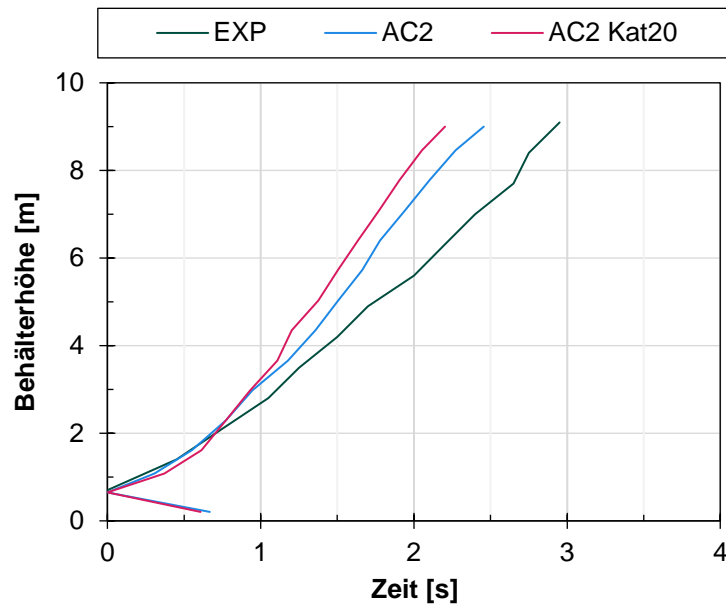
2,2 s zunächst langsam von 1,5 auf etwa 2,0 bar an. Anschließend beschleunigt sich der Druckanstieg und nach etwa 2,5 s werden bereits 3,5 bar erreicht. Zwischen 2,5 und 3,0 s verlangsamt sich der Druckanstieg. Zuletzt beschleunigt er sich wieder und nach etwa 3,3 s ist der Maximaldruck von 4,7 bar erreicht. Die Simulationen geben den im Experiment beobachteten Maximaldruck gut wieder. Wie bereits bei den Ergebnissen zum Versuch HD-15 beobachtet ist der qualitative Verlauf des Drucks über der Zeit bei beiden Simulationen sehr ähnlich, jedoch beginnt der Druckanstieg unter Verwendung der modifizierten AC<sup>2</sup>-Version etwas früher. Die zwischenzeitliche Verringerung des Gradienten des Drucks wird durch keine der beiden Simulationen wiedergegeben.

Hinsichtlich der Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters (vgl. Abbildung 2.32) ergibt sich ein ähnliches Bild wie im Falle des Versuchs HD-15. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit steigt in den Simulationen, insbesondere jedoch in der Simulation unter Verwendung der neuen Modellierungsstrategie, zunächst deutlicher als im Versuch. Anschließend bleibt die Aufstiegsgeschwindigkeit der Flamme in allen drei Fällen nahezu konstant. Die höchste beobachtete, mittlere Temperatur beträgt dabei im Falle des Experiments 791 °C und im Falle der Simulationen 965 respektive 968 °C. Die Abweichung ist damit deutlich geringer als im Versuch HD-16.

Die Experimentatoren geben die Restkonzentration Wasserstoff im Versuch HD-22 mit 0,26 Vol.-% an. In der Simulation unter Verwendung der Release-Version beträgt die Restkonzentration 0,076 Vol.-% und in der Simulation unter Verwendung der Modellierungsstrategie von Katzy beträgt sie 0,078 Vol.-%. Die Ergebnisse der Simulationen sind damit im Sinne der Containmentbelastung durch den Druckanstieg konservativ.

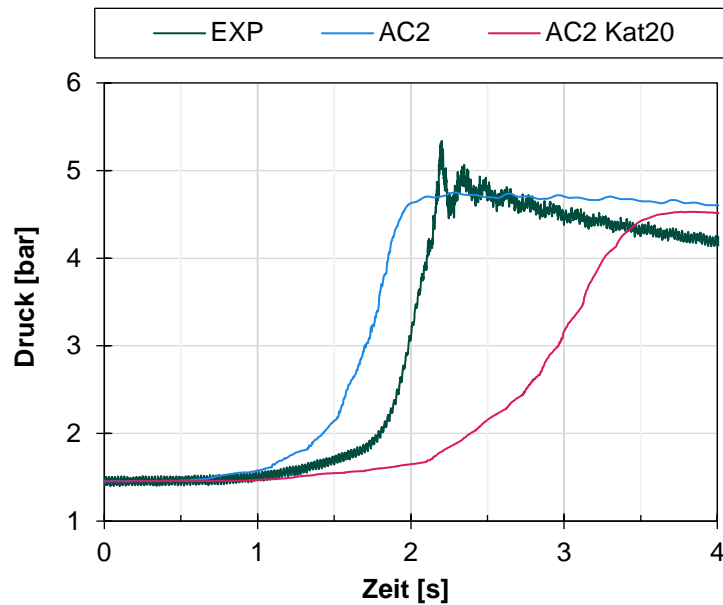


**Abbildung 2.31** Druckverlauf im Experiment HD-22 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20); EXP nach [GUP15]



**Abbildung 2.32** Flammenausbreitung entlang der Mittelachse des Versuchsbehälters im Experiment HD-22 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20); EXP nach [GUP15]

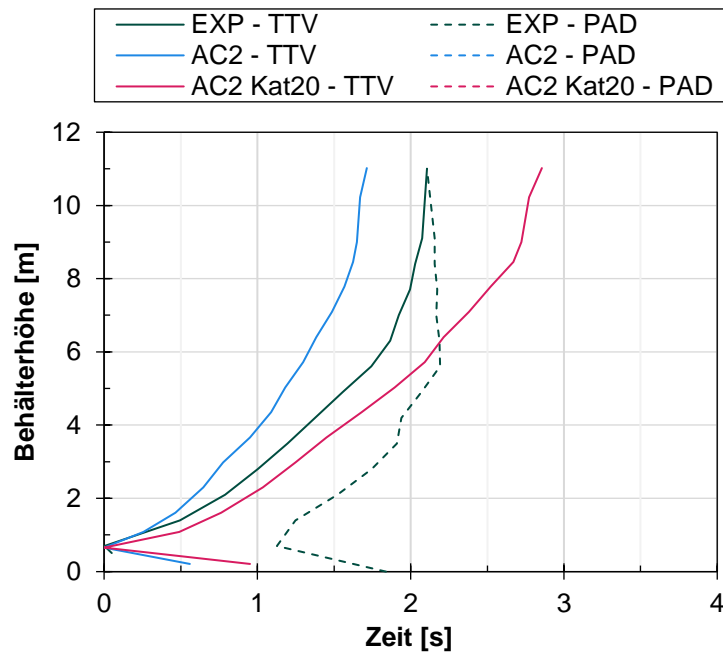
In Abbildung 2.33 ist der Druckverlauf über der Zeit für Versuch HD-39 zusammen mit den Druckverläufen aus den Simulationen des Versuchs aufgetragen. Im Experiment steigt der Druck zwischen der Zündung und 1,7 s zunächst langsam auf 2,0 bar an. Anschließend beschleunigt sich der Druckanstieg und der Maximaldruck von 5,3 bar wird bereits nach 2,2 s erreicht. Nach Erreichen des Maximums treten Oszillationen mit einer Amplitude von 0,5 bar (abnehmend) auf. Die Simulation unter Verwendung der Release-Version von AC<sup>2</sup> zeigt zunächst eine qualitativ gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen, erreicht den Maximaldruck mit 4,8 bar jedoch nicht ganz und es treten lediglich Oszillationen mit um eine Zehnerpotenz niedrigerer Amplitude auf. Die unter Verwendung der modifizierten AC<sup>2</sup>-Version erzielten Ergebnisse weisen einen konstant niedrigeren Druckgradienten auf. Der Maximaldruck wird nach 3,7 s erreicht und beträgt 4,6 bar.



**Abbildung 2.33** Druckverlauf im Experiment HD-39 (EXP) und Druckverläufe der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2 Kat20); EXP nach [FRE17]

Die Flammenausbreitung entlang der Mittelachse der beiden Versuchsbehälter ist in Abbildung 2.34 aufgetragen. Die durchgezogenen Linien zeigen dabei die Ausbreitung im größeren Behälter, dem TTV, die gestrichelte Linie die Ausbreitung im kleineren Behälter, dem PAD. In beiden Simulationen breitet sich die Flamme nicht in den PAD aus, deshalb sind für diese keine gestrichelten Linien vorhanden. Durch das Unterbleiben von Flammenausbreitung in den PAD ist die Aussagekraft des Druckverlaufs über der Zeit unklar. Hier ist eine Verbesserung durch Umsetzung des Konzeptes zur Modellerweiterung zur Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre zu erwarten (vgl. Abschnitt 2.3.1) [HOF23C].

Die Experimentatoren geben die Restkonzentration Wasserstoff im Versuch HD-39 mit 1,11 Vol.-% an. In der Simulation unter Verwendung der Release-Version beträgt die Restkonzentration 0,74 Vol.-% und in der Simulation unter Verwendung der Modellierungsstrategie von Katzy beträgt sie 0,2 Vol.-%. Die Ergebnisse der Simulationen sind damit im Sinne der Containmentbelastung durch den Druckanstieg konservativ, jedoch ist der Ausbrand unter Verwendung der Modellierungsstrategie nach Katzy deutlich zu vollständig.



**Abbildung 2.34** Flammenausbreitung entlang der Mittelachse der Versuchsbehälter im Experiment HD-39 (EXP) und Ergebnisse der entsprechenden Simulationen (AC2 und AC2Kat20); EXP nach [FRE17]

### 2.3.6 Zusammenfassung

Die im Rahmen des vorliegenden Vorhabens geplanten und genehmigten Arbeiten zum Themenfeld Verbrennung konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Da Ergebnisse aus einem EU-Vorhaben nicht rechtzeitig verfügbar waren, wurde für einen Teil der Arbeiten erfolgreich mit Genehmigung des Projektträgers erfolgreich auf eine alternative Korrelation für die Brenngeschwindigkeit zurückgegriffen.

Die Konzepterstellung für die Modellerweiterung konnte erfolgreich abgeschlossen werden und wurde bereits im Rahmen einer Zeitschriftenveröffentlichung publiziert. Es wurden mögliche Modellkonflikte identifiziert, welche berücksichtigt werden müssen.

Außerdem wurde eine an der Technischen Universität München entwickelte Modellierungsstrategie für die Brenngeschwindigkeit in mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen erfolgreich in einer Entwicklungsversion von COCOSYS umgesetzt. Hierdurch konnte die von Liu und MacFarlane entwickelte Korrelation für die laminare Brenngeschwindigkeit, welche bei den Randbedingungen in der Reaktorsicherheit häufig außerhalb ihres Gültigkeitsbereichs liegt, ersetzt werden. Die Korrelation konnte erfolgreich anhand mehrerer THAI-Versuche validiert werden.

### 3 Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der ATHLET-Modellbasis

Im folgenden Kapitel wird die Validierung und Analyse für die aktuell in AC<sup>2</sup> - ATHLET implementierten Modelle zur Abbildung von Druckstoßphänomenen und Kondensationseffekten beschrieben. Eine detaillierte Beschreibung der durchgeführten Validierungsarbeiten ist im technischen Fachbericht [BRA22] dokumentiert.

#### 3.1 Analyse der Kondensationsmodellbasis

Die Analyse und Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup>-ATHLET Kondensationsmodellbasis umfasst die Bewertung, Weiterentwicklung und Validierung der AC<sup>2</sup>-ATHLET Modellbasis zur Berechnung von Direktkontaktkondensation (DKK) im freien Fluid. Direktkontaktkondensationsphänomene treten in Wasser-Wasserdampfströmungen auf, wenn das thermische Gleichgewicht durch Kühlung oder Druckentlastung unterschritten wird. Der resultierende schnelle Kollaps von Dampfblasen führt zur Beschleunigung des umgebenden Wassers entlang der Wasser-Wasserdampf Phasengrenze und letztendlich zu kurzzeitigen Druckspitzen, welche strukturelle Komponenten beschädigen können. Die präzise Berechnung der Kondensationsraten während der DKK ist notwendig zur Berechnung der Druckspitzen und somit relevant zur Bewertung der Anlagensicherheit. Diese Phänomene treten in kerntechnischen Anlagen beispielsweise als Flashing bei Leckagen im Kühlkreislauf (LOCA) auf oder resultieren unter anderem aus schnell schließenden Ventilen als kondensationsinduzierter Wasserhammer.

Das Kapitel ist in die Beschreibung der Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup>-ATHLET Kondensationsmodellbasis, eine Übersicht der für die Validierung genutzten Experimente, die durchgeführte Modellierung mit AC<sup>2</sup>-ATHLET und die Analyse der Simulationsergebnisse unterteilt. Zusätzlich erfolgt ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit OpenFOAM und eine abschließende Zusammenfassung. Eine detaillierte Beschreibung der in diesem AP durchgeführten Arbeiten kann dem Technischen Fachbericht [BRA22] entnommen werden.

##### 3.1.1 Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup>-ATHLET Kondensationsmodellbasis

Die Berechnung der DKK erfolgt in AC<sup>2</sup>-ATHLET mit dem von der GRS entwickelten Direktkontaktkondensationsmodell. Abhängig von dem Wärmeübertragungskoeffizienten (WÜK)  $htc$ , der Zwischenphasenfläche (ZPF) zwischen Wasser und Wasserdampf  $A_i$ , der Differenz zwischen lokaler Temperatur und Sättigungstemperatur  $\Delta T_l$  sowie der spezifischen Verdampfungsenthalpie  $r$  ist die Kondensationsrate [GRS21]:

$$\dot{M}_{DKK} = \frac{htc A_i \Delta T_l}{r} \quad (3.1)$$

Der WÜK wird anhand der Oberflächenerneuerungstheorie und Filmpenetrationstheorie oder alternativ mit dem Wasserhammermodell berechnet. Neben dem WÜK ist die ZPF eine wesentliche Einflussgröße zur Bestimmung der Kondensationsrate. Die Bestimmung der ZPF erfolgt mithilfe der Strömungskarten unter Berücksichtigung des Strömungsregimes, der turbulenten Intensität bzw. der Dissipationsrate sowie geometrischer Parameter. Eine Unterscheidung des vorliegenden Strömungsregimes erfolgt zwischen disperser Blasen- und Schwallströmung sowie separierter Pfropfen-, Strömung, Ring- und stratifizierter Strömung in Abhängigkeit des Dampfanteils  $\alpha_v$ :

- $\alpha_v < 0,5$ : disperse Blasenströmung
- $0,5 < \alpha_v < 0,75$ : Stratifizierte Strömung oder Pfropfenströmung
- $\alpha_v > 0,75$ : Ringströmung oder Ring-Nebelströmung

Für disperse Strömungen wird die ZPF mit einem gemittelten, konstanten Blasendurchmessers in Abhängigkeit der Weber-Zahl, der turbulenten Intensität, der Oberflächenspannung und der Fluidichte berechnet. Bei hybriden Strömungsformen ( $\alpha_v > 0,5$ ) wird der Anteil der dispersen und separierten Phase mithilfe eines Gewichtungsfaktors bestimmt. Die ZPF der großen separierten Strukturen (Slugs, Pfropfen, Ringe, Stratifizierung) wird entsprechend des Phasenanteils der großen Strukturen und geometrischen Randbedingungen berechnet. [GRS21]

In den vom PSS abgeschlossenen Arbeiten [BRA19]; [BRA21] zeigten sich bei der Simulation von kondensationsinduzierten Druckstößen mit AC<sup>2</sup>-ATHLET Abweichungen des Druckverlaufs im Vergleich zu verschiedenen Experimenten. Diese Unterschiede sind auch durch abweichende Kondensationsraten der DKK während dem schnellen Dampfblasenkollaps zu erklären. Aktuelle Experimente [ZHA20] zeigen, dass in horizontalen Leitungssystemen während kondensationsinduzierter Druckstöße Dampf vollständig oder teilweise als fein zerstäubte Dampfblasen vorliegen kann. Folglich ist die ZPF durch die Präsenz mikroskopischer Dampfblasen im Vergleich zur herkömmlichen Berechnung mithilfe der Strömungskarten stark erhöht und die Kondensationsrate der DKK wird unterschätzt.

Zur potenziellen Verbesserung der Kondensationsraten wird die ZPF des DKK-Modells aufgrund der Präsenz der fein dispersen Blasen erweitert. Die Blasengröße wird an die Keimgröße der Verdampfungsmodelle von Plesset-Zwick und Sideman angepasst [SCH11]. Aus der Anzahl der Blasen pro Einheitsvolumen  $n_B = 5 \cdot 10^9 \text{ m}^{-3}$  [GRS21] wird die ZPF einer Einzelblase über geometrische Beziehungen wie folgt definiert:

$$A_B = 4\pi \left( \frac{3}{4\pi n_B} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.2)$$

Die ZPF aller Blasen innerhalb eines Kontrollvolumens  $V_{KV}$  mit dem volumetrischen Dampfanteils  $\alpha_v$  lautet somit:

$$A_i = A_B n_B V_{KV} \alpha_v \quad (3.3)$$

Mit dieser Annahme liegt die Dampfphase während der DKK vollständig fein zerstäubt vor, wodurch die ZPF und analog die Kondensationsrate im Vergleich zum aktuellen DKK-Modell deutlich erhöht ist. Im Rahmen zukünftiger Untersuchung sollte mithilfe einer Fallunterscheidung der Bereich, in dem Dampf fein dispers vorliegt, eingeschränkt werden.

Zusätzlich zu dem modifizierten DKK-Modell (DKK\_mod) wird das Verdampfungsmodell von Plesset-Zwick und Sideman (PZS) für die DKK als weitere Berechnungsoption angepasst. Die Kondensationsrate nach Plesset-Zwick für ruhende Blasen ist dann in Abhängigkeit des Wasservolumenanteils  $\alpha_l$ , der Wasser- und Wasserdampfdichte  $\rho_l$ ,  $\rho_v$ , der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_l$  und spezifischen Wärmekapazität  $c_{p,l}$  von Wasser [GRS21]:

$$\dot{M}_{PZ} = 24 \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} V_{KV} \alpha_l^{1/3} n_B^{2/3} \frac{\rho_l \lambda_l c_{p,l} \Delta T_l^2}{\rho_v r^2} \quad (3.4)$$

Wie für DKK\_mod erfolgt die Berechnung anhand der Anzahl der Blasen pro Einheitsvolumen  $n_B = 5 \cdot 10^9 \text{m}^{-3}$ . Die zusätzliche Kondensationsrate nach Sideman  $\dot{M}_S$  aufgrund von konvektivem Wärmetransport wird nach Gleichung (3.1) berechnet. Die Gesamtkondensationsrate nach Plesset-Zwick und Sideman setzt sich aus den Einzelraten wie folgt zusammen:

$$\dot{M}_{PZS} = \dot{M}_{PZ} + \dot{M}_S \quad (3.5)$$

Für die Validierung stehen somit fünf verschiedene, in Tabelle 3.1 gelistete Modelle zur Berechnung der DKK zur Verfügung. Die Kürzel DKK und WH entsprechen den aktuell verfügbaren Modellen. Der Zusatz \_mod steht für die jeweils modifizierte Version. PZS ist das Synonym für das angepasste Kondensationsmodell nach Plesset-Zwick und Sideman.

**Tabelle 3.1** Modelle zur Berechnung der DKK Massentransferrate

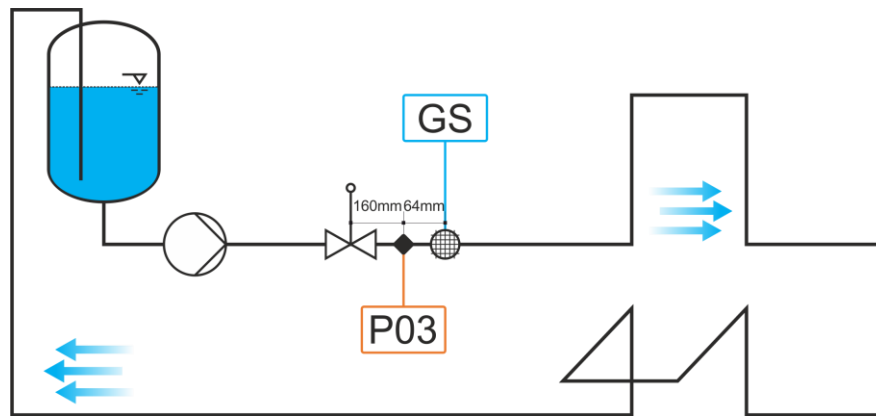
Name	Modell	Anmerkung
DKK	Direktkontaktkondensation	Standard AC <sup>2</sup> Modell für Kondensationsberechnung, Zwischenphasenflächenberechnung in Abhängigkeit von Strömungsregime/Turbulenz/Geometrie
DKK_mod	modifiziertes DKK	In AC <sup>2</sup> -Testversion implementiertes Modell, wie DKK jedoch mit modifizierter Zwischenphasenflächenberechnung nach PZS
PZS	Plesset-Zwick und Sideman	In AC <sup>2</sup> nicht mehr verfügbares Modell, in AC <sup>2</sup> -Testversion implementiertes Modell, Zwischenphasenflächenberechnung in Abhängigkeit einer konstanten Blasenanzahl pro Einheitsvolumen
WH	Wasserhammer	In AC <sup>2</sup> verfügbares Modell, Zwischenphasenflächenberechnung nach DKK, zusätzliche Berechnung des Wärmetransferkoeffizienten in Abhängigkeit der Turbulenz
WH_mod	modifiziertes WH	In AC <sup>2</sup> -Testversion implementiertes Modell, wie WH jedoch mit modifizierter Zwischenphasenflächenberechnung nach PZS

### 3.1.2 Experimente

Im Rahmen der Validierung der Modellentwicklung werden jeweils zwei an der PPP und CWHTF durchgeführte Experimente simuliert. Schwerpunkt der Experimente beider Testanlagen ist die Untersuchung von kondensationsinduzierten Druckstößen. Eine präzise Berechnung des experimentellen Druckverlaufs setzt gleichermaßen eine präzise Berechnung der Direktkontaktkondensationsraten voraus. Dementsprechend eignen sich die Experimente zur Validierung der angepassten DKK-Modellbasis.

#### Pilot Plant Pipework

Die PPP-Testanlage wurde im Rahmen des EU-geförderten Projektes WAHALoads zur Untersuchung von kondensationsinduzierten Druckstößen erbaut und vom Fraunhofer-Institut UMSICHT betrieben [GIO04]. Das durch Flansche verbundene 170 m lange Rohrsystem besteht in der untersuchten Konfiguration aus DN100 Edelstahlrohren mit 3 mm Wandstärke. Über einen Druckbehälter wird das System zu einem Kreislauf geschlossen. Ca. 14 m stromabwärts der Pumpe ist ein Schnellschlussventil installiert, mit dem die Transiente initiiert wird. Nach weiteren 35 m folgt die vertikale 10 m hohe Rohrbrücke und die anschließende 180° Umlenkung auf die Rücklaufstrecke mit der zweiten horizontal versetzten Rohrbrücke. Mit Kompressoren, Durchlauferhitzern und einer Pumpe können unterschiedliche Experimentbedingungen eingestellt werden. [DUD03] Eine schematische Darstellung der PPP Testanlage ist in Abbildung 3.1 gezeigt.

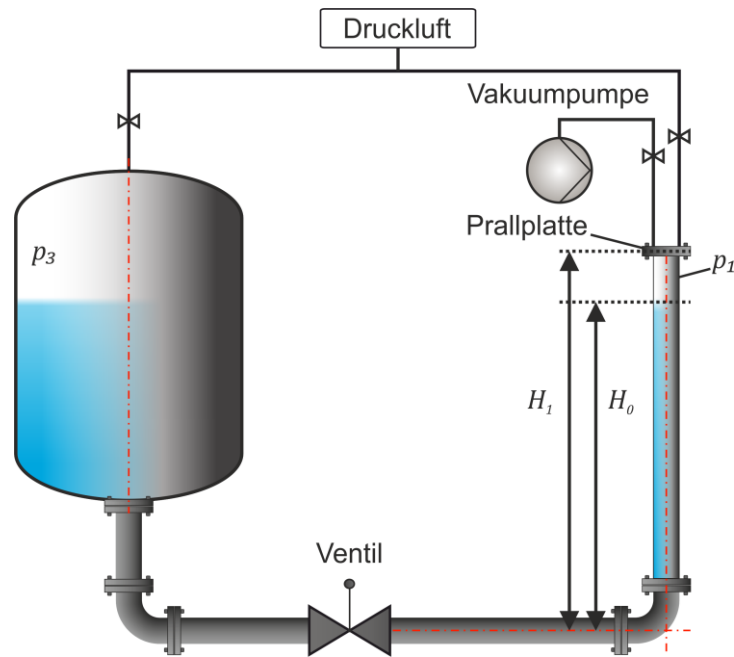


**Abbildung 3.1** Schematische Darstellung der PPP Testanlage

Für jedes Experiment wird zunächst ein stationäres Strömungsfeld initiiert und die gewünschte Wassertemperatur und der Systemdruck realisiert. Nach Experimentbeginn schließt das Schnellschlussventil und aufgrund der Massenträgheit der Wassersäule kommt es zu einem vollständigen oder teilweisen Abriss der Wassersäule stromabwärts des Ventils. Aufgrund der schnellen Verdampfung und anschließenden DKK schlägt die Wassersäule gegen das Ventil und eine Druckwelle läuft durch das Leitungssystem. Der Druckverlauf wird an verschiedenen Rohrpositionen aufgezeichnet. Fokus der Analysen ist der Druckverlauf des Sensors P03 unmittelbar hinter dem Ventil. Zur Bestimmung des Dampfanteils steht zusätzlich der Gitternetzsensor GS zur Verfügung. Obwohl keine Messung der Kondensationsraten erfolgt, ist der Druckverlauf und der Dampfanteil eine direkte Folge der DKK und kann somit indirekt zur Validierung der angepassten DKK-Modellbasis genutzt werden.

### **Cold Water Hammer Test Facility**

Die CWHTF wurde am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) zur Untersuchung kondensationsinduzierter Druckstoßphänomene im Rahmen der nuklearen Sicherheitsforschung betrieben und weist im Gegensatz zur PPP-Testanlage eine deutlich kompaktere Anlagengeometrie auf. Die in Abbildung 3.2 dargestellte Testanlage besteht aus einem Druckbehälter mit einem angeschlossenen, ca. 3,3 m langem, U-förmigen Edelstahlrohr. Der Rohrdurchmesser ist 0,207 m bei einer Wandstärke von 6 mm. [ALT03]



**Abbildung 3.2** Skizze der Experimentanlage Cold Water Hammer Test Facility, nach [ALT03]

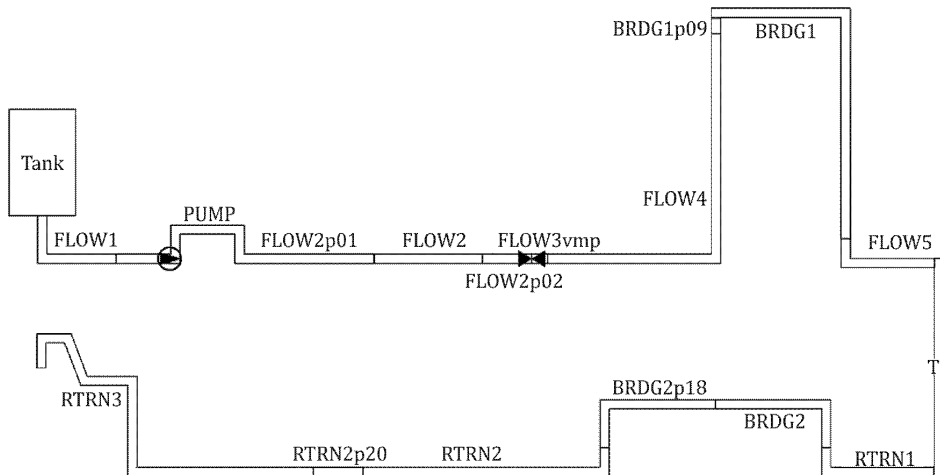
Mittig des Rohrs ist ein über einen Federmechanismus vorgespanntes Ventil mit Öffnungszeiten von ca. 0,02 s installiert. Über einen an der Tankoberseite und am Flanschdeckel des Rohrendes angeschlossenen Kompressor wird der Systemdruck  $p_3$  angepasst. Ein Unterdruck im Steigrohr wird über die am Flanschdeckel zusätzlich angeschlossene Vakuumpumpe realisiert. Beim Erreichen des Sättigungsdampfdrucks  $p_v$  wird so eine Dampfsäule mit der Höhe  $H_1 - H_0$  eingestellt. Zum Experimentbeginn öffnet das Ventil und durch den Druckausgleich zwischen Tank und Steigrohr kondensiert die Dampfblase und die Wassersäule wird Richtung Flanschdeckel beschleunigt. Beim Aufprall der Wassersäule entsteht eine Druckwelle, die an verschiedenen Rohrpositionen über Drucksensoren gemessen wird. [ALT03] Der für die Validierung relevante Drucksensor (MP1) befindet sich unmittelbar unter dem Flanschdeckel. Im Gegensatz zur PPP-Anlage ist kein Gitternetzsensor zur Aufzeichnung des Wasserdampfanteils positioniert, weshalb die Kondensationsraten lediglich indirekt anhand des Druckwellenverlaufs bewertet werden können.

### 3.1.3 Modellierung

Im Rahmen der Arbeiten werden die Experimente 262 und 329 der PPP-Anlage und die Experimente 150601 und 040701a der CWHTF modelliert. Die Experimente unterscheiden sich im Wesentlichen durch den anfänglichen Systemdruck bzw. die Systemtemperatur und weisen sonst keine geometrischen Modellierungsunterscheide auf.

### PPP

Die in Abbildung 3.3 dargestellte Modellierung der PPP-Anlage erfolgt mit 18 Thermo Fluid Objects (TFO). Der zweiphasige Bereich unmittelbar hinter dem Ventil wird mit einem Längen zu Durchmesser Verhältnis von  $L/D = 1$  modelliert, sodass die Kontrollvolumina (KV) ca. 0,1 m lang sind. Alle anderen KV werden mit einer Länge zwischen 0,5 -1 m modelliert. Das Wasser wird vom Tank entlang der TFO *FLOW1* bis *RTRN3* in einem geschlossenen Kreislauf gepumpt.



**Abbildung 3.3** AC<sup>2</sup>-Nodalisierung der PPP-Testanlage

Zur Modellierung der Rohrkrümmen werden Druckverlustbeiwerte vorgegeben. Die Modellierung des Schnellschlussventils erfolgt ebenfalls über tabellarisch vorgegebene Druckverlustbeiwerte in Abhängigkeit des Öffnungswinkels. Vor dem Beginn der Transiente wird eine 10 s Vorkalkulation zum Erreichen des stationären Zustands durchgeführt. Die Simulation der Transiente erfolgt für 12 s. Analog zur Messfrequenz von 2.000 Hz werden die Simulationsergebnisse alle  $5 \cdot 10^{-4}$  s geplottet.

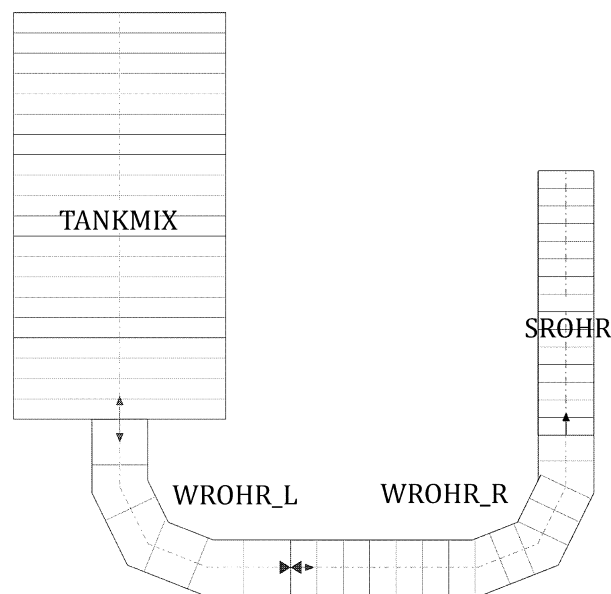
Die relevanten Start- und Randbedingungen beider PPP-Experimente sind Tabelle 3.2 zu entnehmen.

**Tabelle 3.2** Randbedingungen der PPP-Experimente exp262 und exp329

Experiment	Druck [bar]	Temperatur [°C]	Geschw. [m/s]	Ventilschluss [s]
exp262	1,17	78,8	4	0,02
exp329	10,18	146,6	4	0,02

**CWHTF**

Die in Abbildung 3.4 dargestellte CWHTF wird in AC<sup>2</sup>-ATHLET mit vier TFO modelliert, die den Tank (TANKMIX), das angeschlossene Rohr (WROHR\_L, WROHR\_R und SROHR) und das Ventil repräsentieren. Im Tank wird ebenfalls ein Gemischtspiegel modelliert, über dem die Gasphase mit den jeweiligen Randbedingungen der Experimente definiert wird. Das Wasser im horizontalen Rohrabschnitt linksseitig des Ventils (WROHR\_L) steht im Gleichgewicht mit dem Tankvolumen. Rechtsseitig vom Ventil (WROHR\_R und SROHR) wird ein Unterdruck initiiert und die Dampfsäulenhöhe über einen zweiten Gemischtspiegel mit Wasserdampf definiert. Das vertikale Rohr wird mit einem Verhältnis von  $L/D = 0,3$  modelliert, um die exakten Positionen der Messstellen zu definieren.



**Abbildung 3.4** Nodalisierung der CWHTF

Die simulierten Experimente 150601 und 040701a (exp015 und exp040a) unterscheiden neben dem initialen Systemdruck durch die Evakuierungshöhe im vertikalen Rohrabschnitt, dargestellt in Tabelle 3.3.

**Tabelle 3.3** Randbedingungen der CWHTF-Experimente exp015 und exp040a

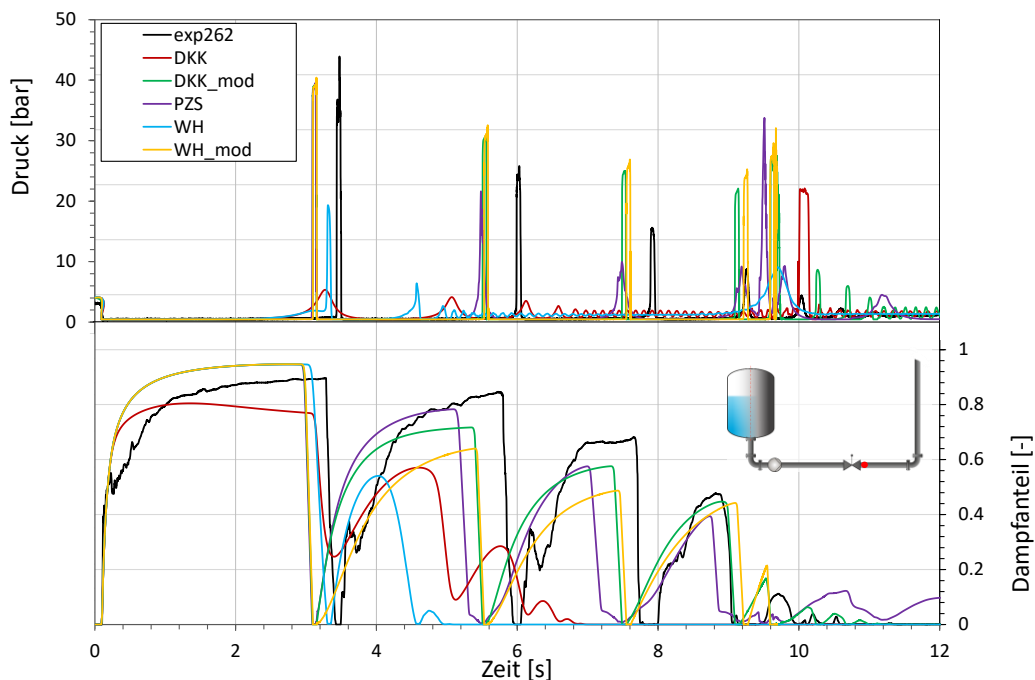
Experiment	Druck [bar]	Temperatur [°C]	H <sub>1</sub> -H <sub>0</sub> [m]	Ventilöffnung [s]
exp015	1	20	0,15	0,02
exp040a	1	20	0,3	0,02

### 3.1.4 Ergebnisse

Die mit der aktuell verfügbaren und angepassten DKK-Modellbasis erzielten Simulationsergebnisse werden in diesem Kapitel vorgestellt und analysiert. Schwerpunkt der Analysen ist die Untersuchung des Zeitpunkts und der Amplitude der durch die DKK auftretenden Druckspitzen. Darüber hinaus steht zur Bewertung der DKK-Modelle bei den PPP-Experimenten der lokal begrenzte durchschnittliche Wasserdampfanteil im Rohrquerschnitt zur Verfügung.

#### PPP-Experiment exp262

In Abbildung 3.5 ist der Druckverlauf (P03) und der Dampfgehalt (GS) des Experiments exp262 und der Simulationen geplottet. Im Experiment kommt es nach Ventilschluss (0,1 s) zum Druckabfall auf Sättigungsdampfdruck und durch die Verdampfung zu einem fast vollständigen Abriss der Wassersäule. Der vollständige Blasenkollaps bei ca. 3,5 s bewirkt bei Aufschlag der beschleunigten Wassersäule eine Druckspitze von 43 bar.

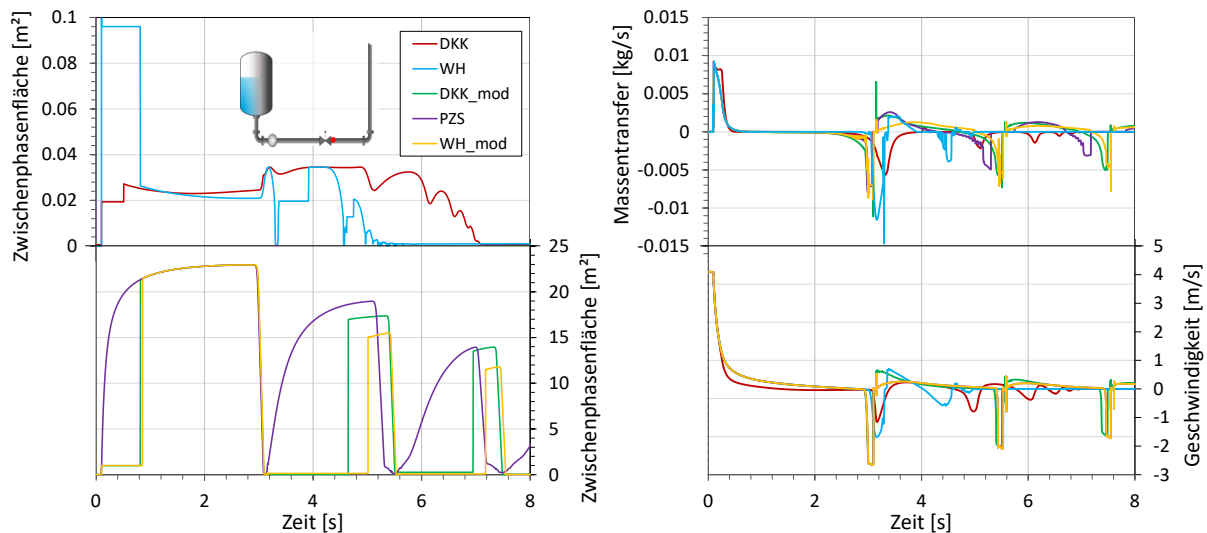


**Abbildung 3.5** Druckverlauf und Dampfgehalt nach Ventilschluss - exp262

Anschließend sind weitere Verdampfungs- und Kondensationszyklen mit erneuten Druckspitzen sichtbar, die aufgrund dissipativer Reibungseffekte abschwächen. Die Simulationsergebnisse zeigen mit der verfügbaren Modellbasis (DKK und WH) deutlich reduzierte Druckspitzen (4 bar und 19 bar) als das Experiment. Für die aktuelle DKK-Modellbasis kann die deutliche Abweichung als direkte Folge des unvollständigen Blasenkollaps bewertet werden. Mit der angepassten Modellbasis (DKK\_mod, PZS und WH\_mod) werden dagegen gute Ergebnisse bezüglich der wiederkehrenden Druckspitzen und des Dampfanteils erzielt. Die initial Druckspitze wird mit allen angepassten Modellen bei 39-40 bar berechnet und auch

der weitere Verlauf zeigt die Abschwächung der erneuten Druckspitzen bis hin zum Erreichen des nahezu stationären Endzustands bei 12 s. Dabei sind DKK\_mod und WH\_mod besser als PZS zu bewerten, da die wiederkehrenden Druckspitzen im Vergleich konservativ überschätzt anstatt unterschätzt berechnet werden.

Der Verlauf der Wasser-Wasserdampf ZPF, der Massentransferraten und letztendlich der Wassersäulengeschwindigkeit im KV unmittelbar hinter dem Ventil sind zur weiteren Analyse in Abbildung 3.6 dargestellt.



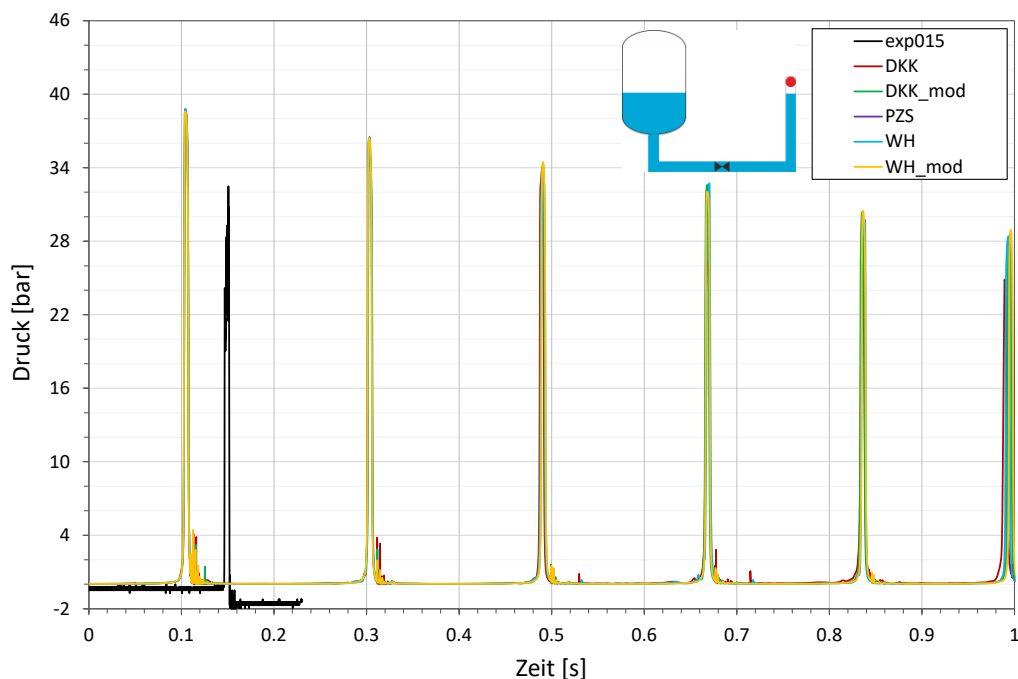
**Abbildung 3.6** Zwischenphasenfläche, Massentransferrate und Wassersäulengeschwindigkeit nach Ventilschluss - exp262

Wie erwartet, ist die ZPF bei den angepassten Modellen durch die Berechnung mikroskopischer Dampfblasen im Vergleich zu der aktuellen Modellbasis mit den verfügbaren Strömungskarten stark erhöht. Die bis zu 250-fach höhere ZPF führt dagegen nicht zu einer analogen Erhöhung der negativen Massentransferrate (Kondensationsrate), da diese durch die Abweichung vom Sättigungszustand limitiert wird. Im Vergleich zum DKK-Modell ist die Massentransferrate mit der angepassten Modellbasis um ca. 80 % erhöht. Die höchste Massentransferrate wird mit dem WH-Modell ausgegeben, was im Widerspruch zu den aus den Kondensationsraten resultierenden Geschwindigkeiten steht. Konsistent zu dem Druckverlauf werden die höchsten Wassersäulengeschwindigkeiten mit den angepassten Modellen simuliert.

Für das PPP-Experiment 329 bei höherem Druck und höherer Temperatur werden analoge Ergebnisse zu Experiment 262 erzielt. Details zu Experiment 329 können dem Technischen Fachbericht [BRA22] entnommen werden.

## CWHTF

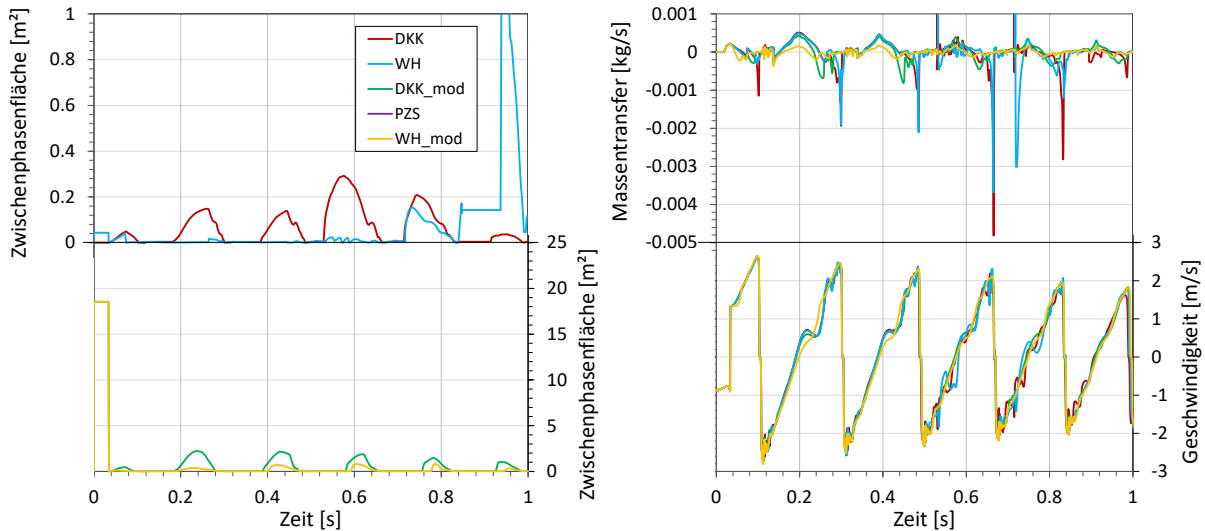
Im Gegensatz zu den PPP-Experimenten werden mit der angepassten Modellbasis keine Verbesserungen für die Simulation der CWHTF-Experimente erzielt. Der in Abbildung 3.7 dargestellte Druckverlauf an MP1 unmittelbar unter dem Flanschdeckel zeigt keine signifikanten Unterschiede zwischen den aktuellen und angepassten Modellen. Alle Simulationen berechnen eine verfrühte sowie überschätzte initiale Druckstoßamplitude mit 38 bar anstatt 32 bar und weitere wiederkehrende kondensationsinduzierte Druckspitzen mit abgeschwächter Amplitude. Die Aufzeichnung an MP1 bricht bei 0,22 s ab, weshalb kein direkter Vergleich mit dem Experiment an dieser Position möglich ist. Messungen an anderen Positionen zeigen, dass zu dem Zeitpunkt die zweite Druckspitze mit lediglich 12 bar auftritt und schon bei ca. 0,3 s ein stationärer Zustand erreicht ist. Dementsprechend sind unabhängig von der verwendeten Modellbasis deutliche Abweichungen zum Experiment erkennbar. Für Experiment 040601a werden vergleichbare Ergebnisse berechnet, die dem Technischen Fachbericht [BRA22] entnommen werden können.



**Abbildung 3.7** Druckverlauf nach Ventilöffnung - exp015

Die Analyse der Zwischenphasenfläche zeigt vergleichbar zu den PPP-Simulationen den Anstieg um ein bis zwei Größenordnungen mit den angepassten Modellen. Eine konsequente Erhöhung der Massentransferraten ist dagegen mit der angepassten Modellbasis nicht sichtbar, wie in Abbildung 3.8 dargestellt. Die temporär höchsten Massentransferraten sind mit der aktuellen Modellbasis kurz vor dem vollständigen Dampfblasenkollaps sichtbar. Mit der angepassten Modellbasis setzt die Kondensation bei jedem Verdampfungs- und

Kondensationszyklus aufgrund der erhöhten ZPF früher ein, da auch bei niedriger Unterschreitung der Sättigungsbedingung bereits signifikante Kondensationsraten berechnet werden. Insgesamt ist die Simulation hauptsächlich durch den Impuls der oszillierenden Wassersäule bestimmt, der nicht wesentlich durch Kondensation und Verdampfung beeinflusst wird. Dementsprechend ist die Wassersäulengeschwindigkeit für alle Simulation nahezu identisch und es sind analog keine Unterschiede im Druckverlauf erkennbar.



**Abbildung 3.8** Zwischenphasenfläche, Massentransferrate und Wassersäulengeschwindigkeit nach Ventilöffnung – exp015

Die Ergebnisse legen nahe, dass zwischen kondensationsinduzierten Druckstößen in horizontalen und vertikalen Rohren unterschiedliche Mechanismen relevant sind. In horizontalen Rohren führt eine Erhöhung der ZPF durch die Präsenz mikroskopischer Dampfblasen, die auch in Experimenten festgestellt wird, zu einer deutlichen Verbesserung der Simulationsergebnisse. Für horizontale Rohre gibt es aktuell keine Experimente mit optischen Messungen, sodass keine Aussagen zum Mehrphasenregime getroffen werden können. Weitere Einflussgrößen sind die Fluid-Struktur Interaktion (FSI) mit der Rohrwand sowie die Präsenz von nicht kondensierbaren Gasen (NKG). Beide Mechanismen führen generell zu einer Abschwächung des Druckstoßamplituden und des Fluidimpuls und können somit auch die temporäre Abweichung vom Sättigungszustand und letztendlich die Kondensationsraten beeinflussen.

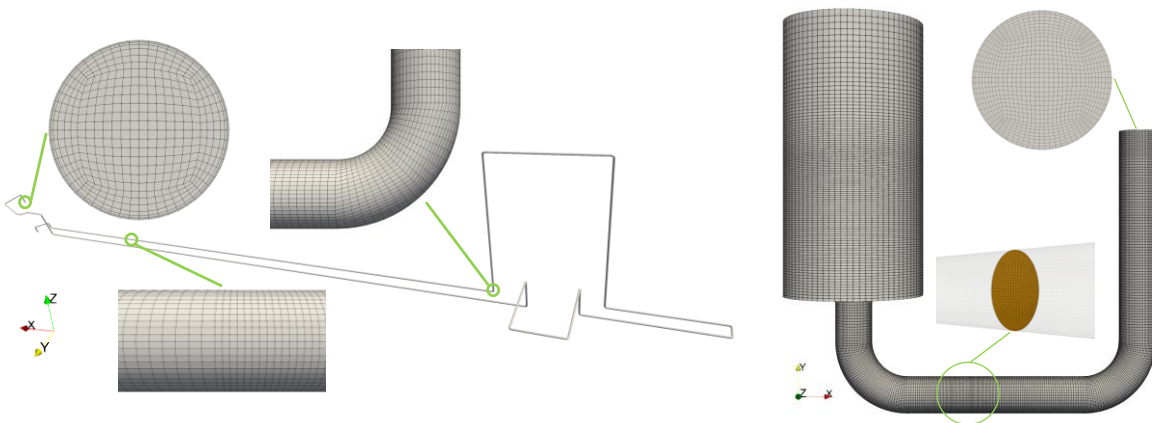
### 3.1.5 Vergleichende CFD-Untersuchungen

Die vergleichenden Untersuchungen mit OpenFOAM erlauben eine dreidimensionale Auflö- sung des Strömungsfelds und somit unter anderem eine Bewertung des vorliegenden Mehrphasenregimes während des kondensationsinduzierten Druckstoßes. Im Rahmen des APs wird jeweils ein Experiment der PPP-Anlage (exp329) und der CWHTF (exp015) simuliert. Fokus der Analysen ist die Untersuchung des Mehrphasenregimes während der Verdampfung

und insbesondere während der DKK zur weiteren Bewertung der AC<sup>2</sup>-ATHLET Modellerweiterungen. Die angewandte Mehrphasenmethodik eignet sich insbesondere zur Auflösung separierter Strukturen wie Pfropfen, Wellen oder freien Wasseroberflächen. Für disperse Strömungen kann in der Regel keine Auflösung der Phasengrenzen realisiert werden und es wird keine Relativgeschwindigkeit der Blasen oder Tröpfchen berechnen. Bereiche ohne Auflösung der Phasengrenze können also als disperse Bereiche identifiziert werden.

### Modellierung

Für beide Anlagen erfolgt die Vernetzung der gesamten Anlagengeometrie, da für die Berechnung der kondensationsinduzierten Druckstöße die Druckwellenreflexion im Leitungssystem abgebildet werden muss. Das PPP-Gitternetz umfasst den Bereich zwischen der Pumpe und dem Anschluss an den Drucktank mit acht Million Zellen. Die CWHTF wird aufgrund der kleineren Anlagengeometrie mit nur knapp einer Million Zellen vernetzt. Beide Netze sind in Abbildung 3.9 dargestellt.

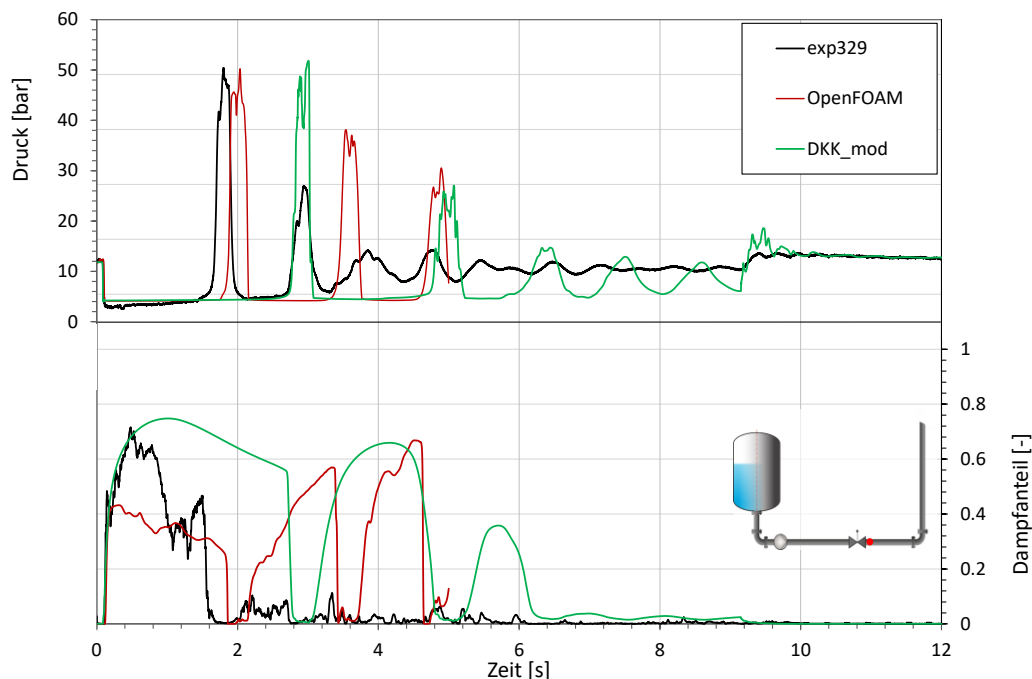


**Abbildung 3.9** Gitternetz der PPP-Anlage und CWHTF

Für die Simulationen wird ein homogener Mehrphasenansatz mit der Volume of Fluid (VOF) Methode zur Auflösung der Phasengrenzen verwendet. Die Berechnung des Phasenwechsels erfolgt mit einem angepassten Kavitationsmodell von Kunz. Zur Berücksichtigung der FSI wird ein semi-numerischer Ansatz mit Berechnung der effektiven Kompressibilität in Abhängigkeit der Struktur verwendet. Als Turbulenzmodell wird das  $k-\omega$ -SST Modell von Menter mit einer Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichung und turbulenten Wandfunktionen genutzt. Die Ventilschlussmodellierung erfolgt mit einer angepassten *activeBaffleVelocity* Randbedingung. Mehr Details zu dem am PSS weiterentwickelten Löser und der Modellierung können dem Abschlussbericht des Forschungsprojekts HAMMERFOAM – KEK [FUC21] und dem Technischen Fachbericht [BRA22] entnommen werden.

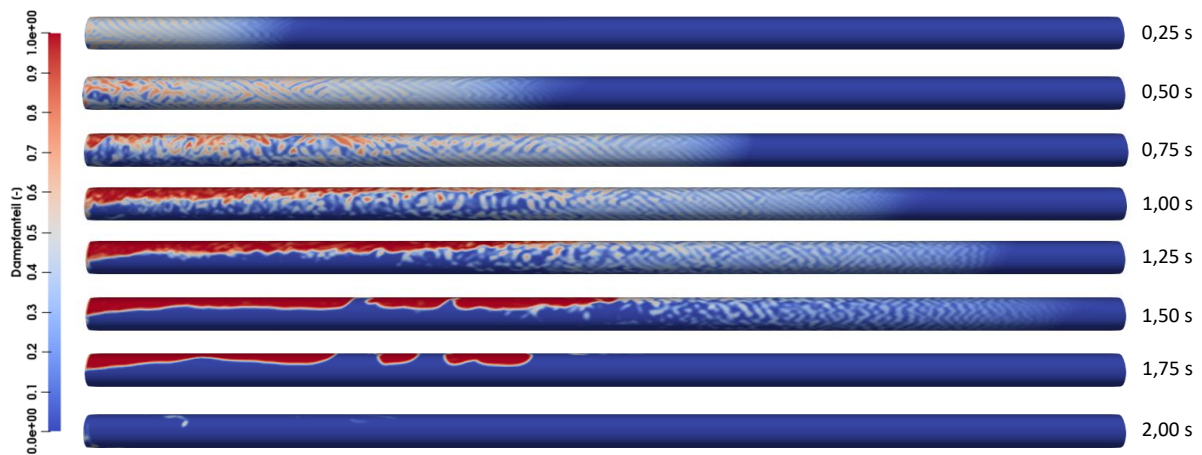
## Ergebnisse

Die in Abbildung 3.9 geplotteten OpenFOAM und AC<sup>2</sup>-ATHLET Simulationsergebnisse von PPP-Experiment 329 zeigen beide eine insgesamt gute Wiedergabe des Druckstoßes. Mit OpenFOAM und AC<sup>2</sup>-ATHLET wird die initiale Druckspitze wie im Experiment mit ca. 50 bar berechnet. Der Zeitpunkt wird mit AC<sup>2</sup>-ATHLET deutlich verzögert abgebildet, dafür ist die Amplitude der zweiten Druckspitze ebenfalls in guter Annäherung an das Experiment wiedergegeben. Mit OpenFOAM erfolgt die Dämpfung der zweiten Druckspitze nicht stark genug. Die Analyse der Dampfanteils zeigt für beide Simulationen eine deutliche Überschätzung nach dem initialen Druckstoß.



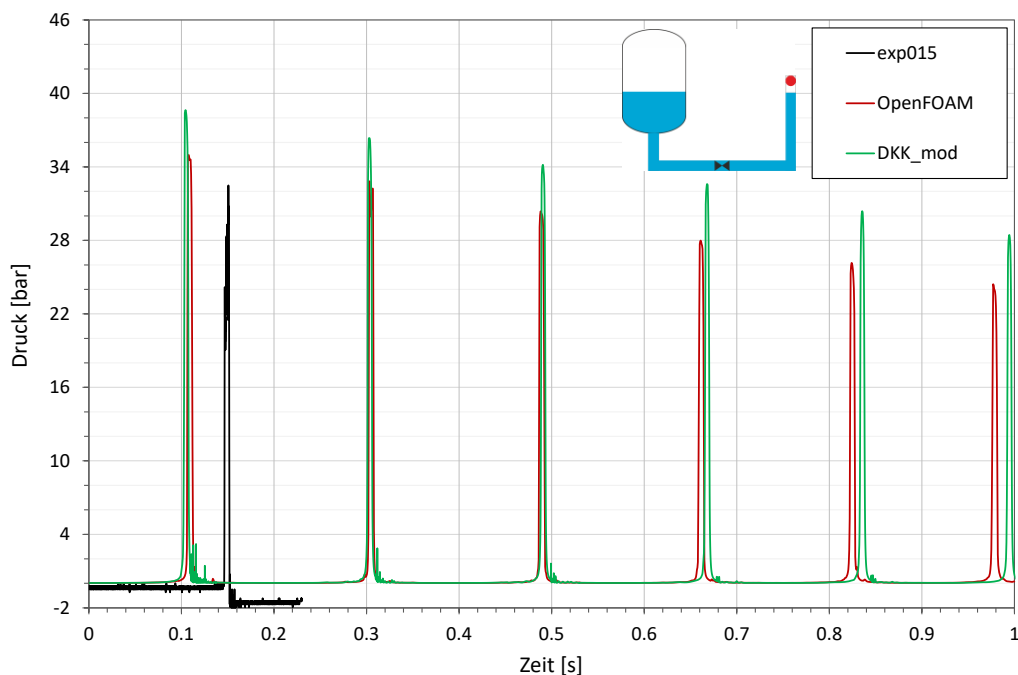
**Abbildung 3.10** Druckverlauf und Dampfgehalt nach Ventilschluss mit OpenFOAM und AC<sup>2</sup>-ATHLET – exp329

Abbildung 3.11 zeigt die Wasser-Wasserdampfverteilung im Abschnitt stromabwärts des Ventils für den ersten Verdampfungs- und Kondensationszyklus bei unterschiedlichen Zeitpunkten. Bis 0,5 s prägen sich keine größeren separierten Strukturen aus und die Strömung ist dispers. Das ‚Verteilungs-Muster‘ resultiert aus der Verwendung des Zwischenphasenkompressionsterms, der zur Auflösung separierter Strukturen aktiv ist. Zwischen 0,75 s und 1,25 s prägt sich lokal in Ventilnähe eine separierte Strömung mit dispersen Strukturen im Bereich der separierten Phasengrenze und aus. Bei Beginn des Kollapses ab 1,50 s zeigt sich die Kondensation der dispersen Strukturen in der Nähe der separierten Phasengrenze und die Bildung von Pfropfen durch ein welliges Strömungsregime. Weiter stromabwärts liegt die Strömung dispers vor. Der vollständige Dampfblasenkollaps ist bis 2 s abgeschlossen und der nächste Verdampfungs- und Kondensationszyklus beginnt.



**Abbildung 3.11** Wasser-Wasserdampfanteil hinter dem Ventil - exp329

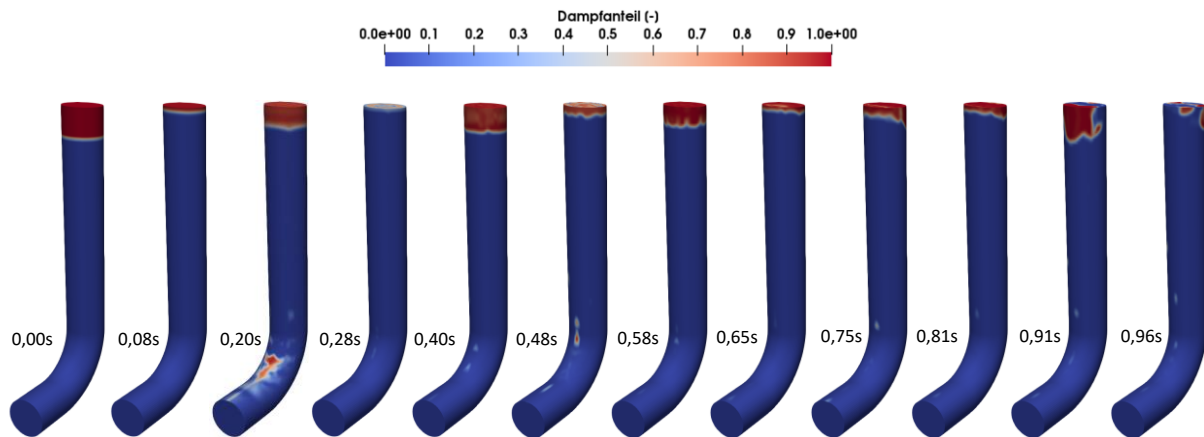
Die Ergebnisse unterstützen die DKK-Modellanpassung durch eine Erhöhung der ZPF durch die Präsenz mikroskopischer Dampfblasen in horizontalen Rohren und decken sich mit den experimentellen Erkenntnissen von [ZHA20]. Für eine Bewertung des Strömungsregimes während kondensationsinduzierter Druckstöße in vertikalen Rohren erfolgt zusätzlich eine vergleichende Analyse des CWHTF-Experiments 015, dargestellt in Abbildung 3.12.



**Abbildung 3.12** Druckverlauf nach Ventilöffnung mit OpenFOAM und AC<sup>2</sup>-ATHLET – exp329

Der Druckverlauf lässt lediglich Abweichung der kondensationsinduzierten Druckstoßamplitude erkennen, die mit OpenFOAM aufgrund der Modellierung der FSI geringer berechnet wird. Die initiale Druckspitze wird so in guter Annäherung an das Experiment wiedergegeben. Alle weiteren Amplituden sind ebenfalls reduziert.

Die Wasser-Wasserdampfverteilung im Steigrohr ist von 0-1 s in Abbildung 3.13 dargestellt und zeigt die aufeinanderfolgenden Verdampfungs- und Kondensationszyklen. Im Gegensatz zu PPP-Experiment 329 sind keine dispersen Blasen erkennbar und die initiierte Dampfblase verdampft und kondensiert bis 0,9 s entlang der näherungsweise horizontalen Wasser-Wasserdampf Phasengrenze. Erst bei dem letzten Verdampfungs- und Kondensationszyklus bildet sich eine größere ungleichförmige Dampfblase, die beim Kollaps in kleinere Blasen zerfällt.



**Abbildung 3.13** Wasser-Wasserdampfanteil im Steigrohr – exp150

### 3.1.6 Zusammenfassung

Die durchgeführte Weiterentwicklung und Validierung der AC<sup>2</sup>-ATHLET DKK-Modellbasis mit unterstützenden OpenFOAM Vergleichssimulationen zeigt deutliche Verbesserungen der Simulationsergebnisse von kondensationsinduzierten Druckstößen. Bisherige von PSS durchgeführte Arbeiten zu kondensationsinduzierten Druckstößen [BRA19], [BRA21] zeigen, dass Druckstoßphänomene mit AC<sup>2</sup>-ATHLET oftmals nur qualitativ wiedergegeben werden. Die aus der DKK resultierenden Amplituden der Druckspitzen sowie deren Zeitpunkt werden dagegen abweichend von den Messergebnissen berechnet.

Als Basis der Modellerweiterungen dienen aktuelle experimentelle Untersuchungen von kondensationsinduzierten Druckstößen in horizontalen Rohren. Im Rahmen der Experimente wird festgestellt, dass während der DKK in Abhängigkeit der Randbedingungen fein zerstäubte Dampfblasen präsent sind. Die aktuelle DKK-Modellbasis berücksichtigt disperse Strömungsregime lediglich mit moderaten Blasengrößen, wodurch die Wasser-Wasserdampf ZPF potenziell deutlich unterschätzt wird. Eine Unterschätzung der ZPF führt analog zu einer Unterschätzung der DKK-Kondensationsrate und letztendlich zu abweichenden Druckverläufen für kondensationsinduzierte Druckstöße. Zur Berücksichtigung der fein zerstäubten Dampfblasen während der DKK wird die ZPF in Abhängigkeit eines konstanten Blasendurchmessers erweitert. Die Berechnung des Blasendurchmessers richtet sich nach der Blasenanzahl pro Einheitsvolumen aus dem PZS-Verdampfungsmodell.

Mit der angepassten Modellbasis werden für zwei PPP-Experimente in horizontalen Rohren deutlich bessere Ergebnisse des kondensationsinduzierten Druckverlaufs erzielt. Durch die erhöhten Kondensationsraten kommt es zu einer vollständigen Kondensation der Dampfblasen und die induzierten Druckstoßamplituden entsprechen den Experimenten. Mit der aktuellen Modellbasis werden die Amplituden um 50-85 % unterschätzt. Die Simulationen der CWHTF-Experimente zeigen dagegen keine signifikante Verbesserung mit der angepassten Modellbasis. Für die CWHTF-Experimente scheinen die Druckverläufe hauptsächlich durch den Impuls der oszillierenden Wassersäule limitiert zu sein und nur unwesentlich durch die Kondensationsraten. Die vergleichenden Analysen mit OpenFOAM bestätigen die lokale und temporäre Präsenz fein disperser Blasen eines PPP-Experiments in Übereinstimmung mit den Untersuchungen von [ZHA20]. Dagegen werden für die CWHTF in vertikalen Rohren keine dispersen Blasen im Steigrohr simuliert. Dementsprechend wird festgestellt, dass potenziell grundlegend unterschiedliche Strömungsregime in horizontalen und vertikalen Geometrien bei kondensationsinduzierten Druckstößen vorliegen können.

Für weitere Verbesserungen bei der Simulation von kondensationsinduzierten Druckstoßphänomenen mit AC<sup>2</sup>-ATHLET sollten die Strömungskarten für die Präsenz fein zerstäubter Dampfblasen angepasst werden, sodass nicht zwangsläufig die gesamte Dampfphase fein dispers vorliegt. Voraussichtlich ist außerdem eine Unterscheidung der Regime für horizontale und vertikale Rohre notwendig. Diesbezüglich sind experimentelle Untersuchungen in vertikalen Rohren mit optischen Messmethoden notwendig. Für die präzise Berechnung der Druckstoßamplituden ist außerdem die Berücksichtigung der FSI oder die Präsenz von NKG relevant. Derzeitig ist noch keine Methode zur Berechnung der FSI in AC<sup>2</sup>-ATHLET verfügbar und die NKG-Ausgasungsmodelle sind nicht Teil der Untersuchungen, sollten aber in zukünftigen Analysen berücksichtigt werden.

## 4 Analyse, Validierung und Weiterentwicklung der ATHLET-CD Modellbasis

In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die im Rahmen dieses Forschungsvorhaben durchgeführten Validierungs- und Entwicklungsarbeiten für das AC<sup>2</sup> Modul ATHLET-CD beschrieben. Detaillierte Beschreibungen der durchgeführten Arbeiten sind nach erfolgter Veröffentlichung in den jeweiligen Technischen Fachberichten der einzelnen Arbeitspunkte [KRI24; PES23; STA24B] und bezüglich der Entwicklung eines Schüttbettmodells für AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD in der dazugehörigen Dissertationsschrift [PES24] zu finden.

### 4.1 Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzpool

Zur Bestimmung der Freisetzung von flüchtigen Spaltprodukten (SP) aus einer intakten Brennstabgeometrie verfügt AC<sup>2</sup> über Modelle, deren Validierung in zahlreichen Berichten und Publikationen dokumentiert ist (vgl. u. a. [BRA21; KRU12]). Für die Berechnung der Freisetzung von SP aus einer Brennstabgeometrie existieren etablierte Modelle und thermochemische Datenbanken (vgl. [BAK10; WRI94]). Bezüglich der Modelle kann grundsätzlich zwischen mechanistischen und empirischen Ansätzen unterschieden werden. Während mechanistische Modelle wie das MFPR-Modell (vgl. [VES06] oder ELSA in ASTEC, vgl. [BRI13]) physikalische Zusammenhänge und die verschiedenen Einflussfaktoren auf den Freisetzungsprozess abbilden, haben empirische Modelle in der Regel eine kompaktere Struktur und beruhen auf der Qualität der in ihnen enthaltenen empirischen Konstanten (z. B. CORSOR Modelle, vgl. [LOR95]). Beide Ansätze können im Allgemeinen adäquate Ergebnisse erzielen. So kann insbesondere das Freisetzungsverhalten von flüchtigen SP mit empirischen Modellen in ATHLET-CD überwiegend adäquat dargestellt werden (vgl. [KRI21]). Im Gegensatz dazu ist die Kenntnis über das Freisetzungsverhalten von weniger flüchtigen SP aus degradiertem Kernmaterial begrenzt. Auch die verfügbaren Daten zur Freisetzung von mittel- und schwerflüchtigen SP aus stark degradiertem Kernmaterial sind begrenzt. Der Quelltermbeitrag von Kernschmelzmaterial im unteren Reaktorplenum wird derzeit nicht simuliert, da die verfügbaren Freisetzungsmodelle dafür nicht vorgesehen sind. In Hinblick auf diesen Entwicklungsbedarf wird die Entwicklung eines neuen Modells erarbeitet, das die Freisetzung aus einem Schmelzpool während der späten Unfallphase abbildet. Die Modellentwicklung, die zur Erweiterung der aktuellen ATHLET-CD Spaltproduktmodellbasis dienen soll, ist in Kapitel 4.1.2 dokumentiert. In Kapitel 4.1.3 werden ausgewählte Ergebnisse des entwickelten Modells in Gegenüberstellung zu Ergebnissen von aktuell in ATHLET-CD implementierten Modellen und experimentellen Messdaten gezeigt. Im ersten Unterkapitel (4.1.1) werden zunächst die berücksichtigten Experimente vorgestellt.

### 4.1.1 Experimente

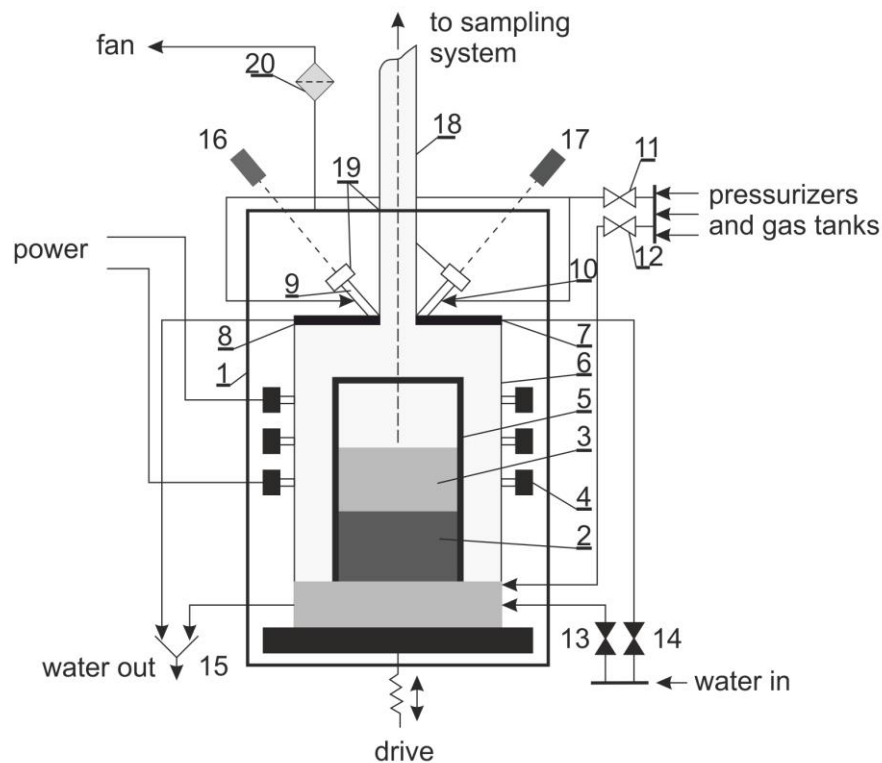
Für eine erste Validierung des entwickelten Modells werden Ergebnisse der Nachrechnung von Experimenten des 2003 abgeschlossenen EU-Projekts „Late Phase Source Term Phenomena“ (LPP) analysiert, das Teil des 5. Euratom-Rahmenprogramms war. Darüber hinaus wird das Experiment 1FP des von der Europäischen Kommission geförderten und unter Schirmherrschaft des International Science and Technology Centre (ISTC) durchgeführten „EVAN“ Projekts für eine weitere Validierung herangezogen.

#### Late Phase Source Term Phenomena (LPP)

Die LPP-Experimente wurden in der Testanlage „Rasplav-2“ durchgeführt. Im LPP-Projekt wurden Vorarbeiten geleistet, die für die spätere Implementierung eines Modells zur Berechnung der SP- und Strukturmaterialfreisetzung aus Schmelzpoolen in der Modulversion ELSA V2.1 in ASTEC V1 genutzt wurden [BER03A]. Die im Rahmen des Projekts durchgeführten keramischen Schmelzpoolversuche bieten die Möglichkeit, die Modellentwicklung in einer vergleichenden Analyse bei jeweils näherungsweise konstanten thermodynamischen Randbedingungen zu überprüfen, und die Modellansätze sowie die zugrunde liegenden Annahmen anhand realer Daten zu bewerten.

Die LPP-Experimente umfassen vier Testreihen: WP1-Metallic-Melt Experiments, WP2-Ceramic-Melt Experiments, WP3-Chemistry Experiments und WP4-Immersed-Core Experiments. Im Rahmen der Versuchsreihe WP2 wurde u.a. der Einfluss der Schmelztemperatur sowie des Trägergasmassenstroms in der Poolatmosphäre auf die Freisetzung von SP- und Uranoxiden aus einer  $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ -Schmelze untersucht. Dazu wurden keramische Schmelzen unter Bedingungen erzeugt, die den Bedingungen während eines schweren Unfalls hinsichtlich der Zusammensetzung, Temperatur und des Oxidationspotentials nahekommen. [BER03B, KHA02]

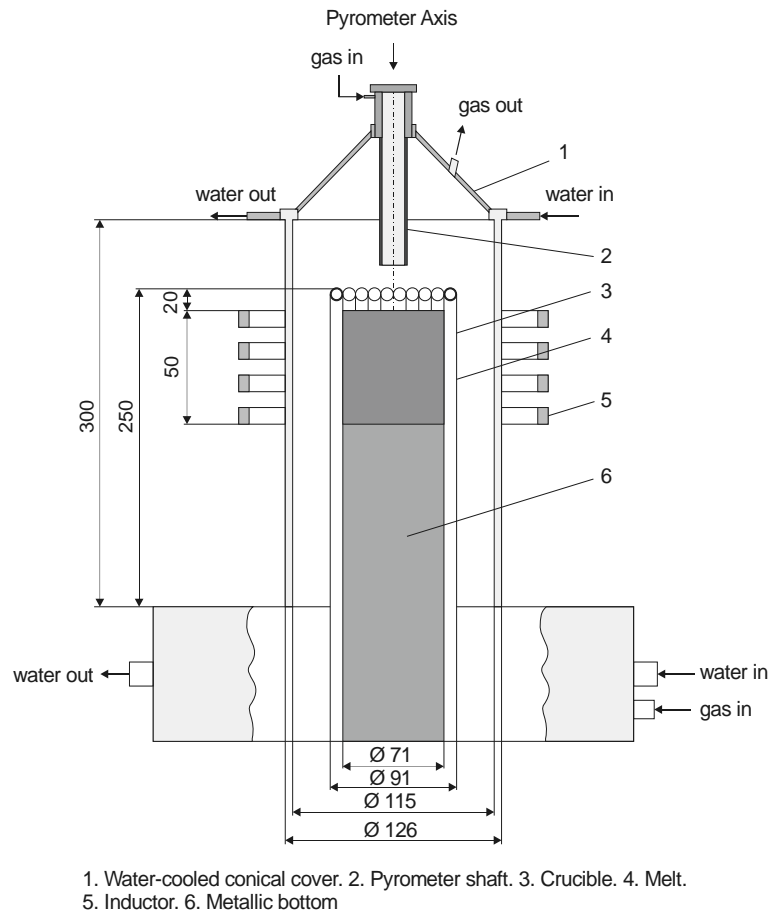
Die „Rasplav-2“ Testanlage wurde auf Basis eines 250 kV Hochfrequenzgenerators entwickelt. Der schematische Aufbau ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Der Induktionsofen, bestehend aus dem metallischen wassergekühlten Schmelztiegel (5) ist mittig innerhalb des Induktors platziert. Der Ofen ist in einer sog. Glove-Box (1) auf einem Arbeitstisch installiert, welcher mit einem Antrieb (17) für die vertikale Verschiebung des Tiegels ausgestattet ist. Der Tiegel befindet sich innerhalb eines Quarzrohrs (6) und wird mit einem wassergekühlten Deckel (8) verschlossen. Das Gasreinigungssystem, ausgestattet mit einem Hochleistungslüfter, ist mit der Box (1) verbunden, sodass ein stabiler Unterdruck aufrechterhalten werden kann. Das Trägergassystem sorgt über den Feinfilter und den Trockner für die Zufuhr von Luft oder Stickstoff in das Quarzrohr. Die Durchflussrate wird über die Ventile (13, 14) reguliert. [KHA02]



1. Shielded Box. 2. Metallic bottom. 3. Molten corium. 4. Inductor
5. Cold crucible. 6. Quartz tube. 7. Cooling water in and out.
8. Water-cooled cover. 9. Pyrometer access port. 10. Gas out.
- 11,2,13,14 Valves. 15. Funnel. 16. Spectral ratio pyrometer.
17. IR pyrometer. 18. Main aerosol line. 19. Access port lids.
20. Main filter

**Abbildung 4.1** Schematischer Aufbau der Rasplav-2 Testanlage im Rahmen des EU-Projekts LPP nach [KHA02]

Während der Durchführung des FPR-MP-Projekts [BEN99], welches ebenfalls Experimente zur Freisetzung von SP aus oxidischen Schmelzen umfasste, wurde der sog. "Cold Crucible-Effekt" beobachtet. Krusten bildeten sich dort u. a. aufgrund der Kondensation von verdampften Schmelzebestandteilen an den gekühlten Tiegelsektionen und fielen zurück in die Schmelze. Aufgrund dieser Erkenntnisse wurde das Design und das experimentelle Verfahren der LPP-Tests modifiziert, da dieses Phänomen die quantitativen Messungen beeinflussen könnte. Mit dem im Rahmen des LPP-Projekts neu entwickelten Aufbau (Abbildung 4.2) wird der Schmelzepool im oberen Teil des Tiegels erzeugt, um die Aerosolablagerung an den Tiegelwänden über der Schmelze zu verringern. Darüber hinaus wurde die Form und das Design des wassergekühlten Deckels modifiziert, um den Gasfluss des Ofens zu optimieren. [BEN99, KHA02]



**Abbildung 4.2** Schematischer Aufbau des Schmelzofens für die Versuchsreihe LPP WP2, nach [KHA02]

In Tabelle 4.1 sind die experimentellen Randbedingungen für die Versuche WP2-1, WP2-2/1 und WP2-2/2 dargestellt. Die Temperatur der Schmelze und das Trägergas wurden in der Versuchsreihe variiert, aber innerhalb eines Versuchs konstant gehalten. Ein Versuchsverlauf umfasste ca. 6.000 s. In Versuch WP 2-1 variierte die Gaszufuhr während der Versuchsdauer und wurde bei 10 l/min, 40 l/min bzw. 70 l/min gehalten. Die Versuche WP2-2/1 und WP2-2/2 wurden analog zu WP2-1 durchgeführt. Sie unterscheiden sich durch die höheren Schmelztemperaturen, die Wahl des Trägergases sowie des Volumenstroms. Im Gegensatz zu WP2-1 wurde bei WP2-2/1 und WP2-2/2 Stickstoff mit einem konstanten Volumenstrom von 10 l/min verwendet. [BER03B, KHA02]

**Tabelle 4.1** Randbedingungen der betrachteten LPP-Experimente, nach [BER03B, KHA02]

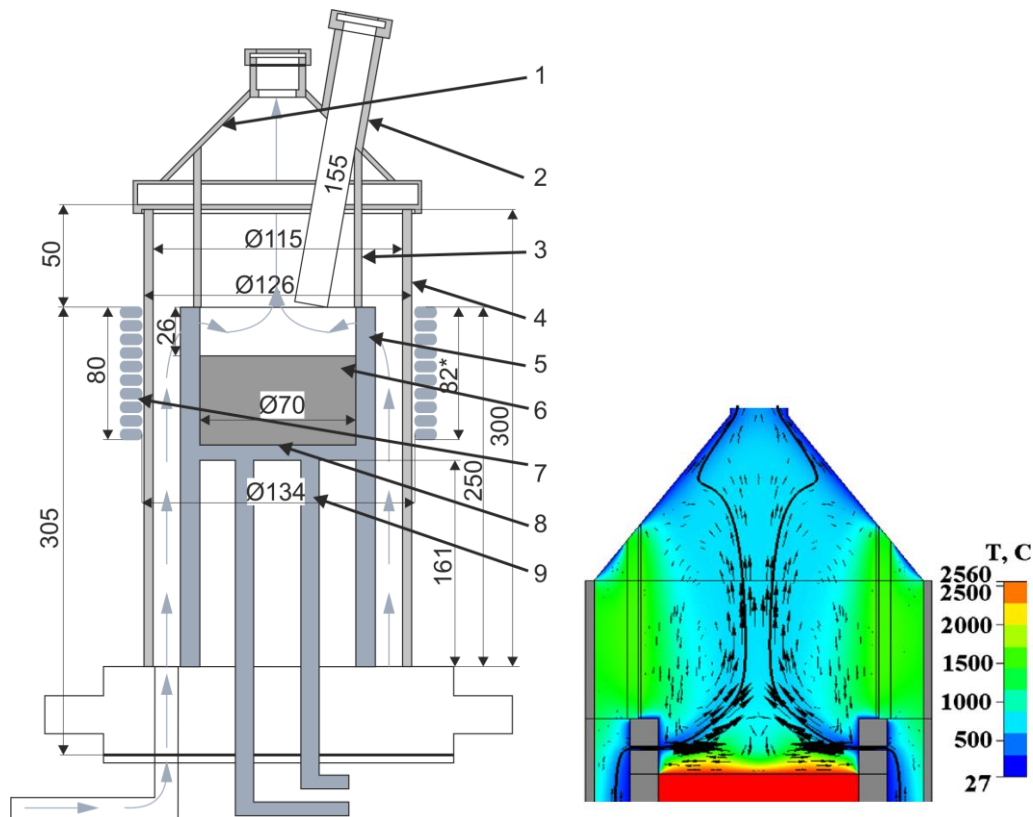
	<b>WP2-1</b>	<b>WP2-2/1</b>	<b>WP2-2/2</b>
Pool Durchmesser [m]	0,071		
Kühlmedium (Gas)	Luft	N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
$\dot{m}_{Gas}$ [l/min]	10 → 40 → 70	10	10
$T_{Gas}$ [K]	300		
$T_{Melt}$ [K]	2.870	2.930	3.050
Zusammensetzung w.-%	UO <sub>2</sub> :ZrO <sub>2</sub> : 71:29		
SP Simulationsstoffe	SrO, BaO, CeO <sub>2</sub> , B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , LaO <sub>3</sub> , Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , MoO <sub>3</sub>		

### EVAN-1FP

Der Test EVAN-1FP diente der Bestimmung der Freisetzung von schwerflüchtigen SP, Uran und Zirkonium aus geschmolzenem Kernbrennstoff und wurde in der mittelgroßen Versuchsanlage Rasplav-3, welche eine Weiterentwicklung der Rasplav-2 Anlage darstellt, mit einer Befüllung von ca. 2 kg eines Schmelzesimulationsstoffs durchgeführt. Im Verlauf des Versuchs wurde eine Abfolge von Regimen gefahren. Die drei stationären Regime wurden in Argonatmosphäre sowie bei abschnittsweise konstanter Temperatur und einem definierten Oxidationsgrad der Schmelze (70 %, 85 % bzw. 100 %) durchgeführt. Während der Übergangsregime wurde der Oxidationsgrad der Schmelze durch die Etablierung einer Argon-Sauerstoffatmosphäre erhöht. Für den Transport des freigesetzten Dampfes aus der verdampfenden Schmelze wurde die Kehrgasströmungsmethode eingesetzt. Bei dieser Methode wurde das Trägergas bei konstantem Massenstrom (10 l/min) über die Schmelzeoberfläche geleitet und mit dem Dampf der untersuchten Substanz gesättigt. Entlang des Transportweges wurden die verflüchtigten Stoffe als Aerosolpartikel auf den inneren Oberflächen der Komponenten des Ofens, des Probenahmesystems und der Analysefilter abgelagert. Die Aerosole wurden an jeder Stelle angesammelt und mit verschiedenen Methoden analysiert, um die Menge der aus dem Schmelzepool freigesetzten Spaltprodukte zu bestimmen.

In Abbildung 4.3 ist auf der linken Seite der schematische Aufbau der Versuchsanlage dargestellt. Die konstante Gasströmung sorgt für den Transport der freigesetzten Spaltprodukte von der Oberfläche der Schmelze. Entlang des Transportwegs werden die verdampften Stoffe als Aerosolpartikel auf Oberflächen innerhalb des Induktionsofens, des Probensystems und der analytischen Filter abgelagert und anschließend messtechnisch erfasst. Die Struktur des Gasflusses im Ofen wurde optimiert, um Ablagerungen von Aerosolen durch die Ofenkonstruktion zu reduzieren. Die Optimierungen basieren auf einer direkten numerischen Simulation der

Strömung des Trägergases innerhalb des Ofens, welche auf der rechten Seite von Abbildung 4.3 anhand der Verteilung der Gasgeschwindigkeit und Gastemperatur dargestellt ist. [BEC10]



**Abbildung 4.3** Schematischer Aufbau Rasplav-3 Testanlage im Rahmen des EVAN-Projekts (links), numerische Simulation der Gasströmung oberhalb des Schmelzepools (rechts), nach [BEC10]

### 4.1.2 Modellierung

In diesem Kapitel werden zunächst ein Überblick über den derzeitigen Stand der Freisetzungsbasis in ATHLET-CD gegeben und anschließend die in diesen Vorhaben durchgeführte Modellentwicklung beschrieben. Auf diese Weise können insbesondere Unterschiede der verschiedenen Modellansätze herausgestellt werden. Da in dieser Arbeit die Freisetzung von SP aus einem Kernschmelzepool, der ein Mehrkomponenten-Gemisch darstellt, betrachtet wird, werden die Spaltprodukte im Folgenden auch als Komponenten bezeichnet.

#### Derzeitige Spaltprodukt-Modellbasis in ATHLET-CD

In der aktuellen AC<sup>2</sup> Release-Version werden empirische Modelle zur Simulation der Freisetzung von SP verwendet. Aufgrund der darin enthaltenen Annahmen und Idealisierungen können mit empirischen Modellen im Allgemeinen geringere Rechenzeiten gegenüber mechanistischen Modellen erreicht werden (vgl. [WR194]). In den derzeitigen Freisetzungsmodellen

in ATHLET-CD wird die im Brennstoff verbleibende SP-Masse über die Zeit  $m_{FX}(t)$  durch einen exponentiellen Verlauf beschrieben [WR194]:

$$m_{FX}(t) = m_{FX,0} \cdot e^{-k_X t}. \quad (4.1)$$

Hierbei wird  $k_X$  als Freisetzungskoeffizient bezeichnet, welcher ein Maß für die pro Zeit freigesetzte Masse darstellt. In diesem Modellansatz beschreibt der Freisetzungskoeffizient das spezifische Freisetzungsverhalten der jeweiligen Komponente unter gegebenen thermohydraulischen Bedingungen. Im aktuellsten Modell der derzeitigen Release Version von AC<sup>2</sup>, welches im Rahmen dieser Arbeit betrachtet wird, wird bei der Beschreibung des Freisetzungskoeffizienten angenommen, dass die Freisetzungsrates einer Komponente proportional zum Verhältnis des Dampfdrucks  $p_{Xs}$  einer Komponente in der Schmelze zum Systemdruck  $p_0$  ist. Zudem besteht eine nicht-lineare Proportionalität zur Temperatur:

$$k_X(T, p) = K_X T^{0,75} \frac{p_{Xs}}{p_0}. \quad (4.2)$$

Das entsprechende in ATHLET-CD implementierte Freisetzungsmodell wird im Folgenden als Dampfdruckmodell bezeichnet. Eine wesentliche Vereinfachung in diesem Modell ist, dass die jeweiligen SP nicht als Komponente im Stoffgemisch, sondern als Reinstoff betrachtet werden. Entsprechend werden die Dampfdrücke in Gleichung (4.2) für Reinstoffe berechnet. Die Berechnung erfolgt mit Hilfe der Antoine-Gleichung: [TRA04]

$$\log p_X(T) = A_X - \frac{B_X}{C_X + T_{ph}} \quad (4.3)$$

mit den empirischen Koeffizienten A, B und C, welche im ATHLET-CD Quellcode implementiert sind.

$K_X$  in Gleichung (4.2) stellt eine Materialkonstante dar. Da für einen großen Teil der in ATHLET-CD berücksichtigten SP einheitliche Werte genutzt werden, hat  $K_X$  lediglich eine begrenzte Möglichkeit, SP-spezifische Stoffeigenschaften abzubilden:

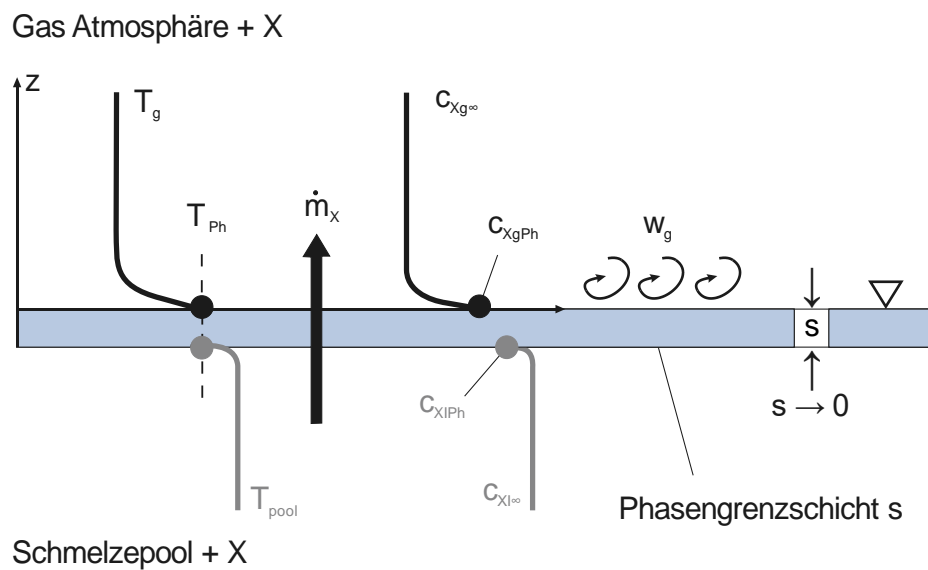
$$K_X = \begin{cases} 6 \cdot 10^{-6} & \text{für } X = In \\ 3 \cdot 10^{-6} & \text{für } X = Sr, Ag \\ 1 \cdot 10^{-6} & \forall X \setminus X = In, Sr, Ag \end{cases} \quad (4.4)$$

Bei der Analyse des ATHLET-CD Dampfdruckmodells zeigt sich, wie in vorangegangenen Arbeiten dargestellt, dass die Simulationsgüte in hohem Maß von der Eignung der im Quellcode implementierten SP-spezifischen empirischen Koeffizienten in Bezug auf den Anwendungsbereich abhängig ist, welche durch umfassende Validierungsarbeiten festgestellt werden muss. Der jeweilige Anwendungsbereich ist durch die vorliegende Unfallphase charakterisiert, insbesondere durch die Geometrie und den Degradationsgrad des Brennstoffs. Die Entwicklung eines neuen Freisetzungsmodells zur Anwendung auf einen Schmelzpool im unteren Plenum

zielt daher darauf ab, ein umfassenderes phänomenologisches Spektrum abzubilden, um die spezifischen Prozesse während dieser späten In-Vessel-Unfallphase zu berücksichtigen.

### Modellentwicklung

Ausgehend von der Annahme einer starken natürlichen Konvektion im Schmelzepool wird der Konzentrationsgradient an der gasseitigen Grenzschicht des Kühlmittels als ein maßgeblicher Faktor für den Freisetzungsprozess identifiziert. Die diffusiven Transportvorgänge, die den Ausgleich der Konzentrationsunterschiede in Schmelze und Kühlmittel anstreben, überlagern sich mit konvektivem Stofftransport, welcher durch die Strömung entlang der gasseitigen Grenzschicht bestimmt wird. Abbildung 4.4 skizziert die Temperatur- ( $T$ ) sowie Konzentrationsprofile ( $c$ ) auf beiden Seiten der Phasengrenze (Flüssigseite: Index  $l$ , Gasseite: Index  $g$ , Phasengrenze Index  $Ph$ ), den Freisetzungsmassenstrom des Spaltproduktes  $X$ , sowie die Strömungsgeschwindigkeit ( $w$ ) und veranschaulicht den Modellierungsansatz. Der Konzentrationsgradient innerhalb des Schmelzepools wird aufgrund der angenommenen starken Konvektion in der weiteren Betrachtung zunächst nicht berücksichtigt.



**Abbildung 4.4** Schematische Darstellung der Einflussgrößen an der Phasengrenzschicht

Die grundlegende Gleichung zur Beschreibung des aus der Schmelze freigesetzten Massenstroms eines SP, bzw. einer Komponente  $X$  ist vom ersten Fick'schen Gesetz abgeleitet (nach [BAE19]). Der freigesetzte Massenstrom einer Komponente ergibt sich zu

$$\dot{m}_X = \beta_{Xg} A \Delta c_{Xg}, \quad (4.5)$$

mit dem binären Stoffübergangskoeffizienten  $\beta_{Xg}$  der Komponente  $X$  in Wasserdampf ( $g$ ) und der freien Oberfläche  $A$ . Unter Anwendung der idealen Gasgleichung ergibt sich folgende Schreibweise:

$$\dot{m}_X = \beta_{Xg} M_X A \left( \frac{p_{XgPh}}{RT_{Ph}} - \frac{p_{Xg\infty}}{RT_g} \right), \quad (4.6)$$

mit der molaren Masse  $M_X$  sowie der universellen Gaskonstanten  $R$ . Der Partialdruck in der gasförmigen Masse  $p_{Xg\infty}$  kann aufgrund der geringen Masse des SP im Verhältnis zur Masse des Kühlmediums als annähernd Null angenommen werden. Hinsichtlich des binären Stoffübergangskoeffizienten der jeweiligen Komponente  $\beta_{Xg}$  im Kühlmittel sowie des Partialdampfdrucks der jeweiligen Komponente an der Phasengrenze  $p_{XgPh}$  ist eine spezifische Modellierung erforderlich.

Als Näherungsansatz zur Bestimmung von  $p_{XgPh}$  wird in einem ersten Schritt das Henry'sche Gesetz herangezogen. Demnach ist für eine im Gleichgewichtszustand mit einem Flüssigkeitsgemisch stehende Gasphase der Partialdruck  $p_{XPh}$  einer nur gering konzentrierten gelösten Komponente des Gemischs gleich dem Produkt aus deren Molenbruch  $x_X$  im Pool und einer Proportionalitätskonstanten [ATK06]. Unter der vereinfachten Annahme einer idealen Mischung findet keine Dissoziation oder Assoziation statt, und die Beziehung vereinfacht sich (nach [HAA56]) zu:

$$p_{XgPh}(T_{Ph}, t) = p_{Xs}(T_{Ph}) \cdot x_X(t), \quad (4.7)$$

mit dem Sättigungsdampfdruck  $p_{Xs}$ . Diese Näherung ist durch das Raoult'schen Gesetz beschrieben (vgl. [ATK06]). Hierbei wird angenommen, dass die Komponenten nicht miteinander wechselwirken. Da der Anteil einer betrachteten Komponente in der flüssigen Phase mit der Zeit abnimmt, besteht eine Zeitabhängigkeit.

Der Sättigungsdampfdruck  $p_{Xs}$  wird anhand zweier verschiedener Methoden berechnet. Eine Option besteht in der Nutzung der Antoine Gleichung, welche auch im aktuellsten Freisetzungmodell der derzeitigen ATHLET-CD Release Version genutzt wird, vgl. Gl. (4.3). Eine andere Berechnungsmethode von  $p_{Xs}$  wird anhand des Prinzips der Minimierung der freien Enthalpie (Gibbs-Energie) in Bezug auf den Phasenwechsel des jeweiligen SP genutzt. Der Sättigungsdampfdruck  $p_{Xs}$  ergibt sich durch die Anwendung der Gibbs-Helmholtz-Gleichung für ideales Gas [ATK06],

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln K, \quad (4.8)$$

auf den Gleichgewichtszustand an der Phasengrenze ( $\Delta G = 0$ ) mit der Gleichgewichtskonstanten  $K$ , die das Druckverhältnis  $p_{Xs}/p_0$  beschreibt, zu

$$p_{Xs}(T_{Ph}) = p_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_X^0}{RT_{Ph}}\right), \quad (4.9)$$

mit der Standard-Gibbsenergie  $G_X^0$ . Im Phasengleichgewicht gilt für die Gibbsenergiedifferenz nach [HEA92]:

$$\Delta G_X^0 = G_{X, gas}^0 - G_{X, kondensiert}^0 \quad (4.10)$$

Die Standard-Gibbsenthalpien können über Polynome der Phasengrenztemperatur und mithilfe tabellierter Stoffkonstanten berechnet werden, vgl. [HEA92].

Der Stoffübergangskoeffizient  $\beta_{Xg}$  ist definiert durch den binären Diffusionskoeffizienten  $D_{Xg}$ , die Sherwood-Zahl  $Sh$  und eine charakteristische Länge  $L_c$ , die sich durch den Durchmesser des Schmelzepools ergibt [INC07].

$$\beta_{Xg} = Sh \cdot \frac{D_{Xg}}{L_c} \quad (4.11)$$

Für die Berechnung von  $D_{Xg}$  wird die Korrelation von Fuller angewendet (vgl. [FUL52]).  $Sh$  kann mithilfe der Analogie von Wärme- und Stoffübergang bestimmt werden. Zur Beschreibung des Stoffübergangs werden gängige Korrelationen, die den Wärmeübergang durch die Berechnung von Nusselt-Zahlen beschreiben, durch die Verwendung der Schmidt-Zahl ( $Sc$ ) anstelle der Prantl-Zahl, angewendet. Die erzwungene Konvektionsströmung wird mithilfe der Reynolds-Zahl ( $Re$ ) und die freie Konvektion mithilfe der Grashof-Zahl ( $Gr$ ) beschrieben. Während  $Re$  vor allem durch die Gasgeschwindigkeit  $w_g$  beeinflusst wird, wird  $Gr$  durch die Temperaturdifferenz  $T_{ph} - T_g$  und  $L_c$  bestimmt. [INC07, POW86]

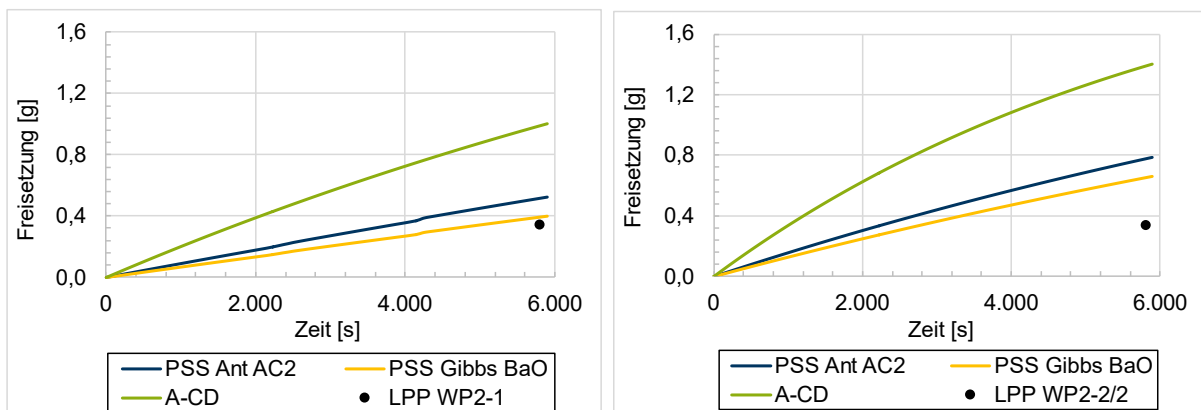
Zur Berechnung von  $Sh$  werden die von Pohlhausen und Gnielinski beschriebenen Korrelationen für erzwungene Konvektion, und die von Al-Arabi und El-Riedy für freie Konvektion verwendet. Sowohl freie und erzwungene Konvektion als auch kombinierte Konvektion können in den Berechnungen berücksichtigt werden. (vgl. [ALA76; GNI75; POL21])

$$Sh = \begin{cases} f(Re, Sc) & \text{für erzwungene Konvektion} \\ f(Gr, Sc) & \text{für freie Konvektion} \\ (Sh_{erzw.}^2 + Sh_{frei}^2)^{1/2} & \text{für kombinierte Konvektion} \end{cases} \quad (4.12)$$

### 4.1.3 Ergebnisse

Im Folgenden werden ausgewählte Ergebnisse des entwickelten PSS-Modells (nachfolgend „PSS“) in den zwei Modelloptionen „Ant“, bei der die Antoine-Gleichung zur Dampfdruck-Berechnung genutzt wird, und „Gibbs“, bei der das Prinzip der Minimierung der Gibbs-Energie angewendet wird, dargestellt. Die Ergebnisse des PSS-Modells sind den Ergebnissen des neuesten ATHLET-CD SP-Freisetzungmodells (nachfolgend „A-CD“) und den experimentellen Daten gegenübergestellt. Die Gesamtfreisetzung pro SP entspricht der Summe aller Spezies, die das jeweilige SP enthalten.

Abbildung 4.6 zeigt die gemessene und berechnete freigesetzte Bariummasse für die LPP-Versuche WP2-1 und WP2-2/2. Für beide Experimente wurden identische Messwerte für Barium (Ba) ermittelt. Die mit dem ATHLET-CD Dampfdruckmodell durchgeführte Berechnung zeigt eine Überschätzung der Freisetzung. Bei der Berechnung mit dem PSS-Modell ist mit beiden Modelloptionen eine verbesserte Wiedergabe der Messwerte zu erkennen, wobei deren Ergebnisse in enger Übereinstimmung liegen. In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass die in ATHLET-CD implementierten Koeffizienten für Ba für die Antoine-Gleichung ebenfalls im PSS-Modell verwendet werden (PSS Ant AC2). Demnach sind die Unterschiede in den Ergebnissen hier auf den Modellansatz und nicht auf die Antoine-Koeffizienten zurückzuführen. Im PSS-Modell Gibbs BaO werden Stoffkonstanten für Bariumoxid genutzt, welches diejenige Stoffspezies, die experimentell als Simulationsstoff genutzt wird, darstellt. Die enge Übereinstimmung der Ergebnisse der PSS-Modellvarianten trotz der verschiedenartigen genutzten Modellparameter bestätigt die Plausibilität des Modellansatzes. Im Vergleich der zwei Experimente sind leichte Unterschiede in den Ergebnissen der jeweiligen Modelle zu erkennen. Diese sind auf die höhere Temperatur der Schmelze in Experiment WP2-2/2 zurückzuführen.



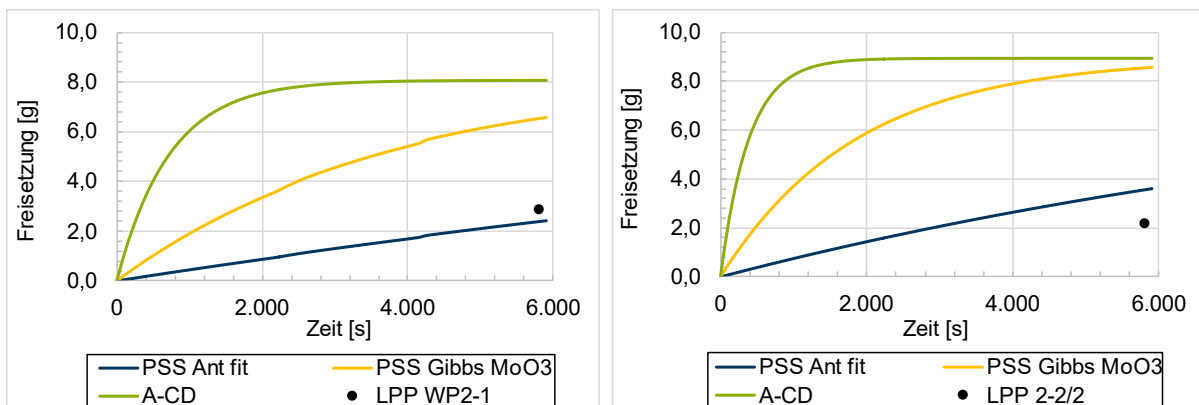
**Abbildung 4.5** Experimentelle und simulierte Bariumfreisetzung, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2

In Abbildung 4.6 ist der mit dem PSS-Modell berechnete Verlauf der Freisetzungsrates für Barium dargestellt. Das Diagramm zeigt den Einfluss des konvektiven Stofftransports, der bei der Modellierung berücksichtigt und plausibel wiedergegeben wird. Während in WP 2-2/2 ein konstanter Durchfluss des Trägergases gegeben ist, wird der Gasdurchfluss während des Versuchs in WP 2-1 nach 2.160 s und 4.020 s der Versuchsdauer jeweils erhöht, was im Verlauf der Freisetzungsrates zu erkennen ist.



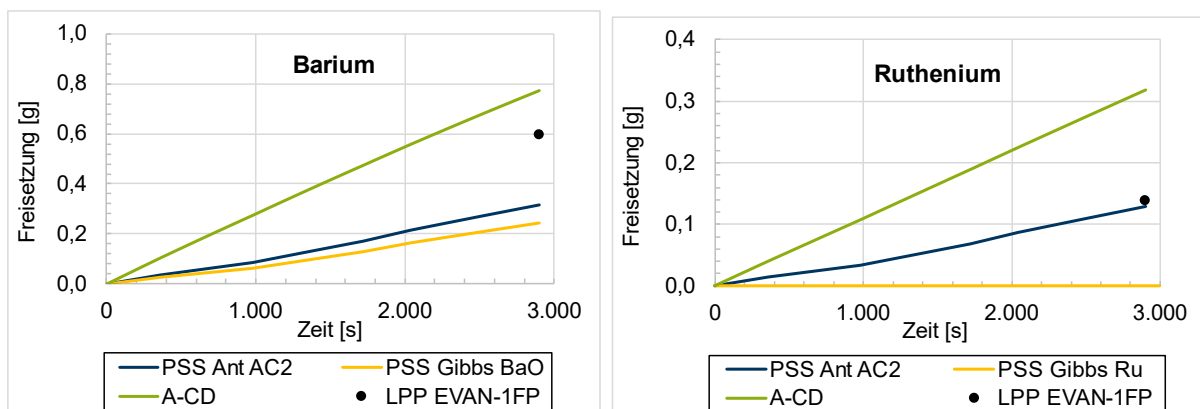
**Abbildung 4.6** Simulierter Verlauf der Barium-Freisetzungsrates, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2

In Abbildung 4.7 ist die gemessene und berechnete freigesetzte Molybdänmasse für die LPP-Versuche WP2-1 und WP2-2/2 dargestellt. In den Experimenten werden mit 2,9 g bzw. 2,2 g ähnliche Werte für die Freisetzung von Molybdän (Mo) ermittelt. Diese werden mit dem Modell A-CD signifikant überschätzt. Mit dem PSS-Modell Gibbs MoO<sub>3</sub>, in dem Stoffkonstanten für Molybdän(VI)-oxid entsprechend der experimentellen Schmelzezusammensetzung genutzt werden, wird die Freisetzungsrates deutlich reduziert, wie in den Diagrammen anhand der reduzierten Gradienten zu erkennen ist. Folglich ist die Überschätzung der freigesetzten Mo-Masse mit Gibbs MoO<sub>3</sub> reduziert, jedoch weiterhin groß. Da für den Temperaturbereich der Schmelze (>2.800 K) keine geeigneten Koeffizienten für die Antoine-Gleichung vorliegen, wird für eine adäquate Abbildung der Mo-Freisetzung ein Fit der Koeffizienten anhand der experimentellen Messdaten durchgeführt. Entsprechend wird in der Modellvariante PSS Ant fit eine enge Übereinstimmung mit den Messdaten erreicht. Die erhaltenen neuen Antoine-Koeffizienten für Mo sollten in anschließenden Arbeiten getestet und die entsprechende Modelloption anhand weiterer Experimente validiert werden.



**Abbildung 4.7** Experimentelle und simulierte Molybdänfreisetzung, Versuche LPP WP2-1 und WP2-2/2

Abbildung 4.8 zeigt die gemessene und berechnete freigesetzte Ba-Masse (links) bzw. Ru-Masse (rechts) für das Experiment EVAN-1FP. Für Ba beträgt die gemessene Freisetzung 0,60 g. Dieser Wert wird mit ATHLET-CD geringfügig überschätzt und mit den PSS-Modellen leicht unterschätzt, wobei auch hier für Ba eine enge Übereinstimmung der Ergebnisse zu erkennen ist (vgl. Abbildung 4.5). Für Ru beträgt die experimentell ermittelte Freisetzung 0,14 g. Die Ergebnisse des PSS-Modells Ant AC2, in dem die in ATHLET-CD implementierten Koeffizienten für Ru verwendet werden, liegen in enger Übereinstimmung mit dem Messwert, wohingegen die Freisetzung mit dem in ATHLET-CD implementierten Modell überschätzt wird. Die mit dem Modell Gibbs Ru kalkulierten Ergebnisse, in dem die Stoffkoeffizienten für Ru genutzt werden, liegen näherungsweise bei null. Dies ist dadurch zu begründen, dass elementares Ru schwerflüchtig ist und erst bei noch höheren Temperaturen in relevanten Mengen freigesetzt wird. Im Experiment EVAN-1FP ist zu erwarten, dass das sich in der Argon-Sauerstoffatmosphäre Ru-Oxide gebildet haben, die signifikant flüchtiger als elementares Ru sind. Die Experimentatoren verweisen darauf, dass Ru-Tetroxide bzw. weitere (semi-) volatile Ru-Spezies im Bereich der messtechnischen Nachweisgrenze erfasst wurden [BEC10]. Die genaue Zusammensetzung der Ru-Spezies liegt nicht vor. Folglich kann der Einfluss der flüchtigeren Ru-Spezies in dieser Modellierung nicht berücksichtigt werden und sollte in anschließenden Arbeiten näher untersucht werden.



**Abbildung 4.8** Experimentelle und simulierte Bariumfreisetzung (links) und Rutheniumfreisetzung (rechts), Versuch EVAN-1FP

#### 4.1.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Abbildung der SP-Freisetzung aus degradiertem und geschmolzenem Kernmaterial während der späten Phase eines schweren Reaktorunfalls untersucht. Während in der internationalen Forschung vergleichsweise viel Erfahrung hinsichtlich der Simulation der Freisetzung von flüchtigen SP aus einer Stabgeometrie während der frühen Kernzerstörungsphase vorliegt und für die Anwendung der aktuellen SP-Modellbasis in ATHLET-CD auf Bündelversuche ein erheblicher Umfang an Validierungsarbeiten durchgeführt

wurde, ist der Kenntnisstand hinsichtlich der SP-Freisetzung aus Schmelzepools deutlich geringer. Im Hinblick auf die begrenzten Materialeigenschaften von mittel- und schwerflüchtigen SP einerseits und die Anforderungen an die Entwicklung schnell laufender (semi-) empirischer Modelle andererseits ist insbesondere die Verfügbarkeit adäquater empirischer Koeffizienten und experimenteller Daten eine Herausforderung. In diesem Zusammenhang wird ein neues SP-Freisetzungsmodell entwickelt, das die spezifischen Anforderungen an die Abbildung der späten SP-Freisetzung im unteren Reaktorplenum berücksichtigt. Durch die Entwicklung des SP-Freisetzungsmodells unter Berücksichtigung zusätzlicher Abhängigkeiten von den thermofluidynamischen Randbedingungen unter Verwendung gängiger Korrelationen kann ein umfassenderes Verständnis des Freisetzungsverhaltens erreicht werden, wodurch die Genauigkeit der Modellierung verschiedener SP-Spezies in unterschiedlichen Atmosphären potenziell verbessert werden kann. Erste Validierungsarbeiten anhand der Nachrechnung von LPP und EVAN Experimenten zeigen plausible Ergebnisse und eine tendenziell verbesserte Wiedergabe der experimentellen Messdaten im Vergleich zum aktuellsten ATHLET-CD Modell.

Neben einer weiterführenden Validierung besteht im Rahmen anschließender Arbeiten die Möglichkeit, das Modell weiterzuentwickeln. In erster Linie sollte die Datenbank der empirischen Koeffizienten, die auf der Grundlage verschiedener Quellen entwickelt wurde (vgl. Kapitel 4.1.2), kontinuierlich überprüft und erweitert werden. Für eine sinnvolle Erweiterung sollten weitere relevante SP-Verbindungen und ggf. Wechselwirkungen zwischen SP identifiziert werden. Darüber hinaus wird als sinnvoll eingeschätzt, in zukünftigen Arbeiten eine direkte Abhängigkeit der empirischen Koeffizienten von den atmosphärischen Bedingungen zu implementieren, um den Einfluss oxidierender oder reduzierender Bedingungen auf das Freisetzungsverhalten genauer berücksichtigen zu können.

## 4.2 ATF – Simulation unfalltoleranter Brennstoffe

Aktuelle Forschung und Entwicklung hinsichtlich leichtwassergekühlter Reaktoren zielt darauf ab, die Sicherheit und Effizienz von Kernreaktoren fortlaufend zu verbessern. Unfalltolerante Brennelementkonzepte (Accident Tolerant Fuel, ATF) sollen unter Unfallbedingungen beständiger sein als herkömmliche Brennelemente. Zwei vielversprechende ATF-Konzepte, die als Alternativen zu Zircalloy (Zry) oder anderen Zirconium (Zr)-basierten Hüllrohren erforscht werden, sind Chrom (Cr)-beschichtetes Zr und FeCrAl (Eisen (Fe)-Chrom (Cr)-Aluminium (Al)). Beide ATF-Konzepte weisen einen hohen technologischen Reifegrad (Technology Readiness Level, TRL) auf und werden als verbesserte Hüllrohrkonzepte vorgeschlagen. Der potenzielle Nutzen liegt in der Verringerung bzw. dem zeitlichen Versatz der Wasserstoff- und Wärmefreisetzung bei Unfallszenarien, wodurch sich die Karenzzeit für Unfallschutzmaßnahmen verlängern kann. [TER18; ZIN14]

Im Rahmen des OECD/NEA QUENCH-ATF-Projekts, mit PSS als technischem Experten, wird u.a. in QUENCH-ATF-1 (ATF-1) das chemische, mechanische und thermische Verhalten von Cr-beschichteten Hüllrohren in auslegungs- und auslegungsüberschreitenden Störfallszenarien in der QUENCH-ATF-Versuchsreihe untersucht. Darüber hinaus wurde 2018 bereits QUENCH-19 (Q-19) unter Verwendung von FeCrAl-Legierungen für relevante Kern-Komponenten durchgeführt. Im Rahmen der von PSS durchgeführten Simulationen und Analysen wird die Modellbasis des Systemcodes AC<sup>2</sup> im Hinblick auf die genannten ATF-Konzepte analysiert und bewertet. Dabei erfolgt u.a. die Erweiterung um ein neues Modell zur Cr-Oxidation, welches auf relevante Experimente angewendet wird. [OEC24; STA23A; STU22]

Für die vergleichenden Analysen der verschiedenen ATF-Versuche und der verwendeten Materialien, werden bereits durchgeführte Versuche mit ähnlichen Randbedingungen verwendet. Dies sind beispielsweise die Versuche QUENCH-LOCA-3HT (L3HT) sowie QUENCH-15 (Q-15) für ATF-1 bzw. Q-19. Für die Simulationen wird die Freigabeversion AC<sup>2</sup> 2021 und eine intern bei PSS weiterentwickelte Version des Programmteils AC<sup>2</sup>-ATHLET-CD verwendet. Die Experimentdaten und quantitative Darstellungen von ATF-1 Ergebnissen unterliegen einem Sperrvermerk. Es werden daher zusätzlich ausgewählte Analysen zum Referenzversuch L3HT gezeigt.

### 4.2.1 Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup> Modellbasis

Die Analyse der Modellbasis zeigt Defizite in der Modellierung des Oxidationsverhaltens der beiden ATF-Konzepte, Cr-Beschichtung und FeCrAl als Ersatzmaterial, auf. In einem ersten Schritt werden daher für die Nachrechnung relevanter Versuche der QUENCH-Versuchsanlage am Karlsruher Institut für Technologie (KIT), neue Korrelationen untersucht oder bei Bedarf neu modelliert. Die Korrelationen werden auf geeignete Experimente angewendet.

Der Korrosionsschutz durch eine Cr-Schicht auf Zr-basierten Hüllrohren in Dampfatamosphären ist abhängig von der Interaktion zwischen Beschichtung und Hüllrohr. Die Cr-Schicht bzw. dessen Oxid dient als Sauerstoffdiffusionsbarriere und damit dem Schutz der darunterliegenden Metallschicht. Allgemein weisen beschichtete Hüllrohre eine geringe Massenzunahme durch Oxidationsprozesse auf. Während der Oxidation finden verschiedene Zersetzungsprozesse statt, die zu einem Versagen führen können. Im Wesentlichen handelt es sich um eine eutektische Wechselwirkung, die Zr-Cr-Interdiffusion sowie die Reduktion der schützenden  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -Schicht. Das Versagen und die danach folgende schnelle Oxidation treten spätestens bei 1.573-1.623 K auf. [LIU21; YUA23]

Bezüglich verschiedener FeCrAl-Legierungen weist eine aktuelle Studie des KIT [KIM22] auf unterschiedlich dominierende Oxidationskinetiken in Abhängigkeit des Temperaturbereichs hin. Dies ist auf die Zusammensetzung zurückzuführen. Aktuelle Untersuchungen zeigen, dass bei etwa 873 K überwiegend Fe und eine stärkere Fe-Kinetik vorliegt, während die Oxidschicht bei 1.073 K gleichmäßig Al, Cr und Fe enthält. Mit steigender Temperatur ändert sich das Oxidationsverhalten. Oberhalb von 1.273-1.473 K bilden FeCrAl-Legierungen einen schützenden Aluminiumoxidfilm ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), der für ihre Oxidationsbeständigkeit entscheidend ist. Oberhalb von 1.623-1.673 K versagt diese Oxidschicht und es bilden sich wiederum Fe-Oxide, begleitet von einer signifikant höheren Oxidationskinetik. [KIM22]

Zur analytischen und numerischen Beschreibung des Oxidationsverhaltens werden geeignete Oxidationsraten basierend auf dem Widerstand gegen die Sauerstoffdiffusion angewendet. In AC<sup>2</sup> wird eine parabolische Gleichung verwendet, um die Diffusion von Sauerstoff durch eine Oxidschicht in das nicht oxidierte Metall darzustellen. Die Kinetik des Oxidschichtwachstums (Gleichung 4.13), d.h. der Verlauf der Oxidationsrate, nimmt hierbei aufgrund der schützenden Wirkung der gebildeten Oxidschicht (X) mit der Zeit ab. [BRA20; KIM22; LOV23]

$$X = (K_p^X \cdot t)^{1/2} \text{ [cm]} \quad (4.13)$$

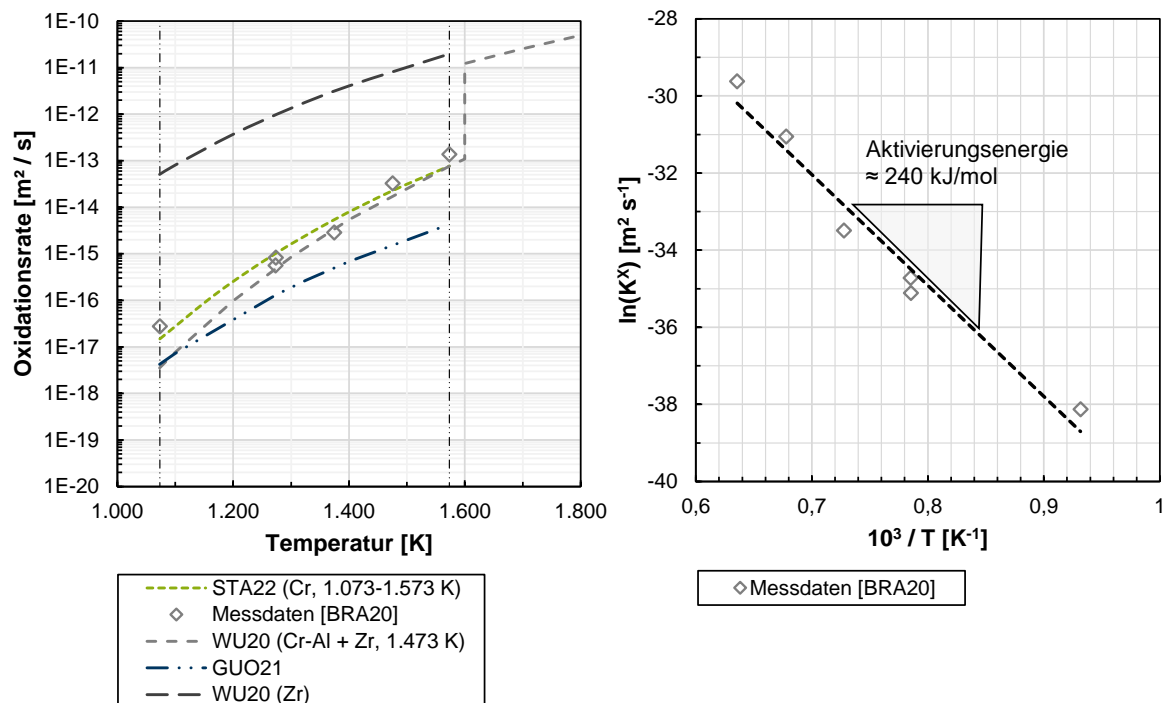
Für FeCrAl und die neue Modelloption für Cr-Beschichtungen wird die spezifische oxidative Reaktion anhand eines temperaturabhängigen Arrhenius-Ansatzes modelliert (Gleichung 4.14). Der Faktor  $K_p$  beschreibt mithilfe des Koeffizienten  $A_i$  und der Aktivierungsenergie  $E_i$  dabei das Wachstum der Oxidschicht ( $K^X$ ) oder die Massenzunahme ( $K^m$ ) durch Sauerstoffaufnahme, je nach Anforderungen des Programmsystems. Für Simulationen in ASTEC sind beispielsweise durch den Benutzer zwei Korrelationen, für Massenzuwachs und Schichtwachstum, zu definieren, während AC<sup>2</sup> den Massenzuwachs in eine Oxidschichtdicke umrechnet [LOV23; TOP21].

$$K_p(T) = A_i \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{R \cdot T}\right) \quad (4.14)$$

Für die Oxidation von Cr gibt es verschiedene vorgeschlagene Korrelationen, z. B. in [GUO21; WU20], welche auf älteren Untersuchungen [MIC05; WAG18], oder einem Mehrkomponenten-Aufbau aus z. B. Cr-Al [KIM16] basieren. Die in Gleichung 4.15 neu modellierte Korrelation [STA22, STA23A] wird hingegen aus aktuellen experimentellen Messdaten [BRA20] zum Oxid-schichtwachstum abgeleitet, von denen angenommen wird, dass sie die beste Übereinstimmung mit dem Verhalten aktueller Beschichtungs-Generationen zeigen:

$$K_p^X(T) = 7,085 \cdot 10^{-6} \exp\left(-\frac{240.000 \text{ J/mol}}{R \cdot T}\right) \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right] \quad (4.15)$$

Abbildung 4.9 zeigt in [K] den Verlauf der Korrelation im Bereich der Experimentdaten von 1.073 bis 1.573 K (links) sowie die Bestimmung der Aktivierungsenergie über die Steigung der reziproken Darstellung der Messwerte (rechts).

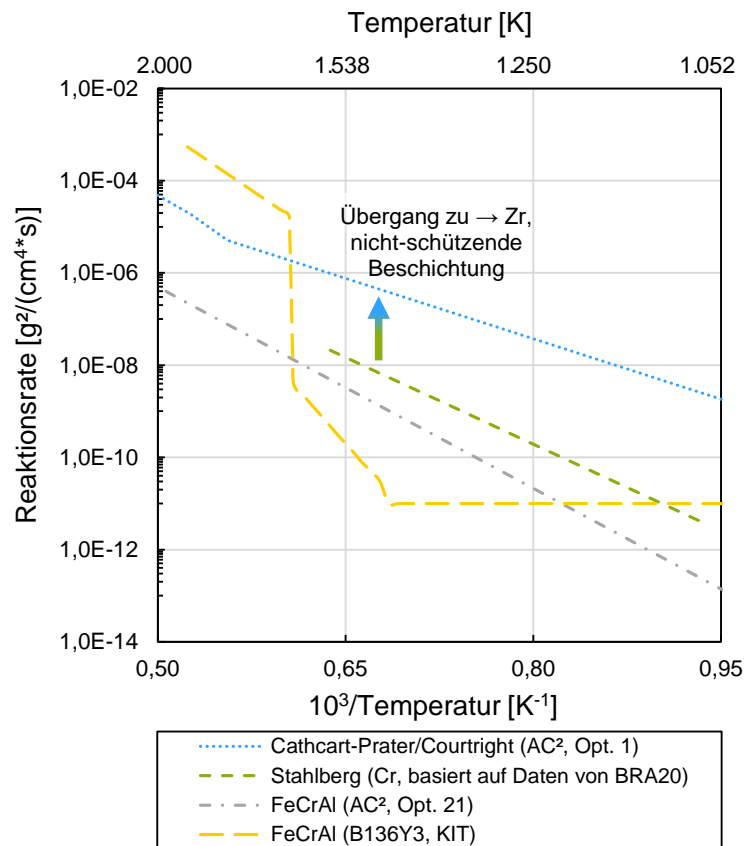


**Abbildung 4.9** Oxidationsraten für Cr (li.) und Aktivierungsenergie (re.)

Für die Modellentwicklung im Rahmen des Projektes wird für die Cr-Oxidation die neue Korrelation (Gleichung 4.15) verwendet. Diese wird mit Hilfe von [KHA21] aufgrund der Anforderungen von AC<sup>2</sup> in Massenzuwachs umgerechnet. Sie wird in einer Modelloption implementiert, die einen temperaturgestützten Ansatz zum Versagen der Cr-Beschichtung verwendet (Gleichung 4.16).

$$K_{p,Stahlberg}^m = \begin{cases} A_{Cr} \cdot \exp\left(\frac{-E_{Cr}}{R \cdot T}\right), T < 1573 \text{ K} \\ A_{Zr} \cdot \exp\left(\frac{-E_{Zr}}{R \cdot T}\right), T \geq 1573 \text{ K} \end{cases} \left[\frac{\text{g}^2}{\text{cm}^4 \text{s}}\right] \quad (4.16)$$

Die Oxidationswärme, die bei Cr ca. 3,5-3,6 MJ/kg<sub>Cr</sub> beträgt [STA23A], wird in Abhängigkeit des Temperaturbereichs berechnet und in Übergangsbereichen interpoliert. Oberhalb von 1.573 K wird die Zr-Kinetik postuliert. Die Korrelation selbst bietet eine gute Übereinstimmung mit öffentlich zugänglichen Daten [STA23B]. Das in Entwicklung befindliche Modell wird darüber hinaus in Benchmark-Rechnungen für QUENCH-ATF-Bündeltests im Rahmen eines OECD/NEA-Projekts verwendet [STA23A]. Die für die Experimente angewendeten Oxidationskinetiken in Dampfatosphären sind in Abbildung 4.10 dargestellt.



**Abbildung 4.10** Oxidationskinetiken für Cr (grün), FeCrAl (gelb / grau) und Zr (blau)

Neben der in AC<sup>2</sup> verfügbaren Modelloption Opt. 21 (Gleichung 4.17,  $\alpha$ -Aluminium, grau) für FeCrAl [LOV23] wird die neue Korrelation (Gleichung 4.18, FeCrAl-Legierung B136Y3, gelb) in einer internen Version am PSS getestet. Die Koeffizienten der Arrhenius-Gleichung, basierend auf [KIM22], sind in Tabelle 4.2 aufgeführt.

$$K_{p,AC^2,Opt.21}^m = A_{Opt.21} \cdot \exp\left(\frac{E_{Opt.21}}{R \cdot T}\right), \quad \forall T \left[ \frac{g^2}{cm^4s} \right] \quad (4.17)$$

$$K_p^m = \begin{cases} 9,62 \cdot 10^{-12}, & T \leq 1.473 \text{ K} \\ A \cdot \exp\left(\frac{-E}{R \cdot T}\right), & 1.473 \text{ K} < T < 1.648 \text{ K} \\ A_{Fe} \cdot \exp\left(\frac{-E_{Fe}}{R \cdot T}\right), & T \geq 1.648 \text{ K} \end{cases} \left[ \frac{g^2}{cm^4s} \right] \quad (4.18)$$

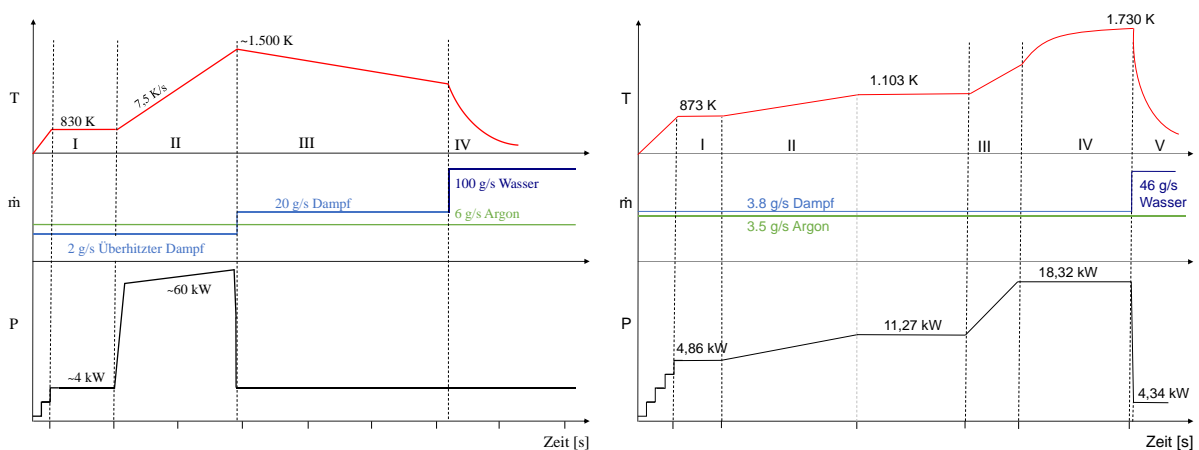
**Tabelle 4.2** Koeffizienten für Arrhenius-Funktion in Abbildung 4.10

Korrelation	Koeffizient [ $\text{g}^2/\text{cm}^4\text{s}$ ]	Aktivierungsenergie [ $\text{J}/\text{mol}$ ]
Cr	$A_{\text{Cr}} = 207,1$	$E_{\text{Cr}} = 240.000$
FeCrAl (AC <sup>2</sup> , Opt. 21)	$A_{\text{Opt. 21}} = 300 \cdot (3,1 \cdot 10^{-2})$	$E_{\text{Opt. 21}} = 278.500$
FeCrAl (KIT)	$A = 3,0 \cdot 10^9$	$E = 594.354$
	$A_{\text{Fe}} = 2,4 \cdot 10^6$	$E_{\text{Fe}} = 352.513$

## 4.2.2 Experimente

Der Ablauf sowie die Charakteristika der relevanten QUENCH-Experimente werden in diesem Kapitel kurz erläutert. Die transiente Phase umfasst jeweils eine Voroxidations- und veränderliche Sequenzen mit spezifischen aufgetragenen elektrischen Leistungen (Abbildung 4.11).

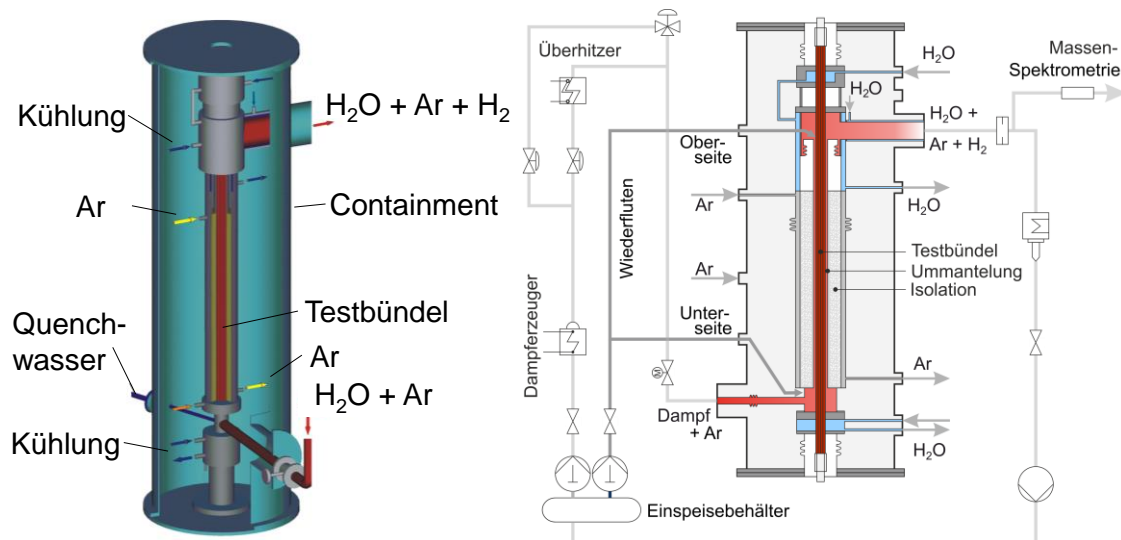
Die QUENCH-LOCA-Versuchsreihe (engl. Loss Of Coolant Accident, LOCA) zielt darauf ab, den Einfluss des sekundären Hydrierens auf die Anwendbarkeit der Kriterien für die Versprödung der Zr-basierten Hüllrohre bei Kühlmittelverlust zu untersuchen. Das Experiment QUENCH-LOCA-3HT ist Teil des LOCA-Programms und wurde unter Annahme einer Large Break Loss of Coolant Accident (LBLOCA)-Transiente durchgeführt. Der Versuch ist aufgrund von unvorhergesehenen technischen Defekten während der Durchführung als nicht-prototypisch einzustufen. Aufgrund einer Leckage an einer Dichtung sowie des Versagens einer Elektrodenbeschichtung wurde eine unerwartete Temperaturskalation aufgezeichnet [STU14]. Die maximale Temperatur in L3HT beträgt nach der Aufheizphase ca. 1.473 - 1.573 K und liegt damit nahe der eutektischen Temperatur von ca. 1.605 K (1.332°C) des binären Cr/Zr-Systems. Aufgrund der erreichten Temperaturen dient das Experiment L3HT daher als Referenzversuch für den Bündeltest ATF-1. Relevante Komponenten in ATF-1 sind mit einer Cr-Beschichtung ausgestattet, während in L3HT unbeschichtete Zr-basierte Legierungen verwendet werden. [STU14, STU18, STA23A, OEC24]

**Abbildung 4.11** Versuchsphasen der Experimente Q-L3HT (li.) und Q-19 (re.)

Innerhalb der QUENCH-Versuchsreihe, zu der Q-19 gehört, liegt der Fokus auf dem Verhalten und der Analyse der Phänomene, die bei der schnellen Kühlung überhitzter Kerne unter Unfallbedingungen auftreten. Q-19 wurde unter Verwendung von ATF-Material konzipiert, wobei der Schwerpunkt auf FeCrAl liegt. Der Hauptzweck bestand darin, das Verhalten des Materials mit herkömmlichen Zr-basierten Hüllrohren zu vergleichen, die im Referenztest Q-15 unter ähnlichen Bedingungen verwendet wurden. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass FeCrAl in Bezug auf die Wasserstoff ( $H_2$ )-Freisetzung vorteilhaft ist, wobei der integrale  $H_2$ -Wert etwa 9,2 g verglichen mit 47,6 g in Q-15 beträgt. Darüber hinaus ist die gemessene Höchsttemperatur trotz einer längeren Phase der Leistungszufuhr von 1.728 K in Q-19 gegenüber  $\sim 2.153$  K in Q-15 niedriger. [STU22]

### 4.2.3 Modellierung

Die Versuchsanlage (Abbildung 4.12) besteht im Wesentlichen aus dem Anlagenteil mit einem elektrisch beheizten Bündel, einem umgebenden Containment und einer Isolierung. Unter anderem ermöglichen Thermoelemente, Durchflussmesser, Drucksensoren und ein Massenspektrometer eine Überwachung der Experimente. [STU18]

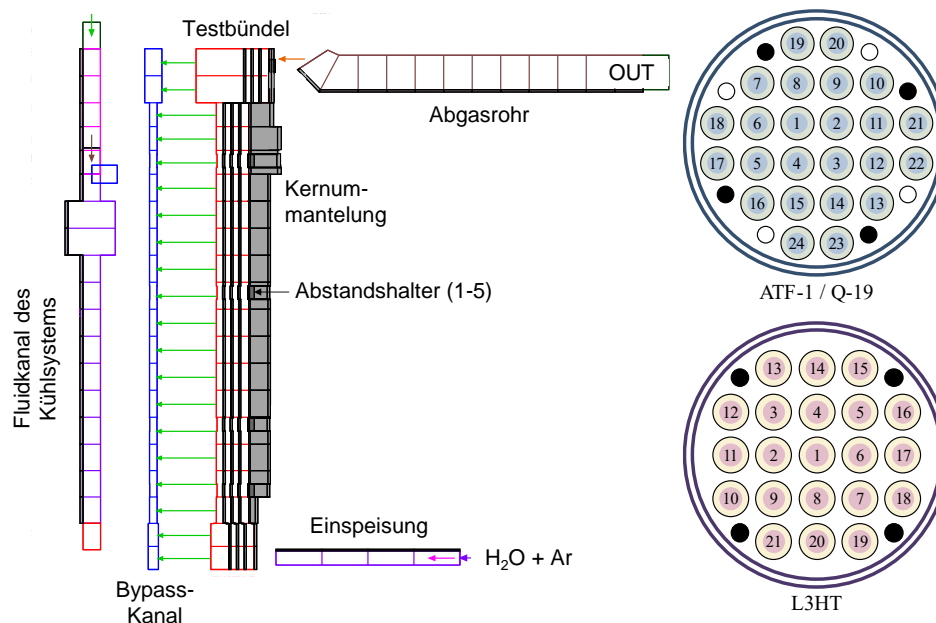


**Abbildung 4.12** Vereinfachte Darstellung der Quench-Anlage am KIT, nach [STU18]

Jedes Bündel enthält Eckstäbe und ist von einer Kernummantelung umgeben. Durch die Anpassung der Kühlmittelkanalfläche mit Eckstäben können die QUENCH-Experimente die thermohydraulischen Bedingungen durch eine gleichbleibende Strömungsfläche abbilden. Das Massenspektrometer für die Erfassung von Wasserstoff oder Wasserdampf befindet sich am Bündelausgang, dargestellt durch ein Abgasrohr. Der separate Einlass am Boden des Testbündels ermöglicht die Wiederflutung, das den Notkühlprozess darstellt. [STU18]

In Abbildung 4.13 ist das entwickelte Simulationsmodell für AC<sup>2</sup> dargestellt. Die Thermofluid-Objekte sind so positioniert, dass ein Strömungspfad entsteht, der mit der *Einspeisung* beginnt

und anschließend durch *Testbündel* und *Bypass-Kanal* führt. Mit Hilfe des AC<sup>2</sup>-Moduls Core Degradation wird das Bündel in konzentrische Kernsektionen eingeteilt, die die elektrisch beheizten Brennstabsimulatoren abbilden. Die Randbedingungen sind entsprechend der Umgebungsbedingungen während des jeweils postulierten Störfalls modelliert.



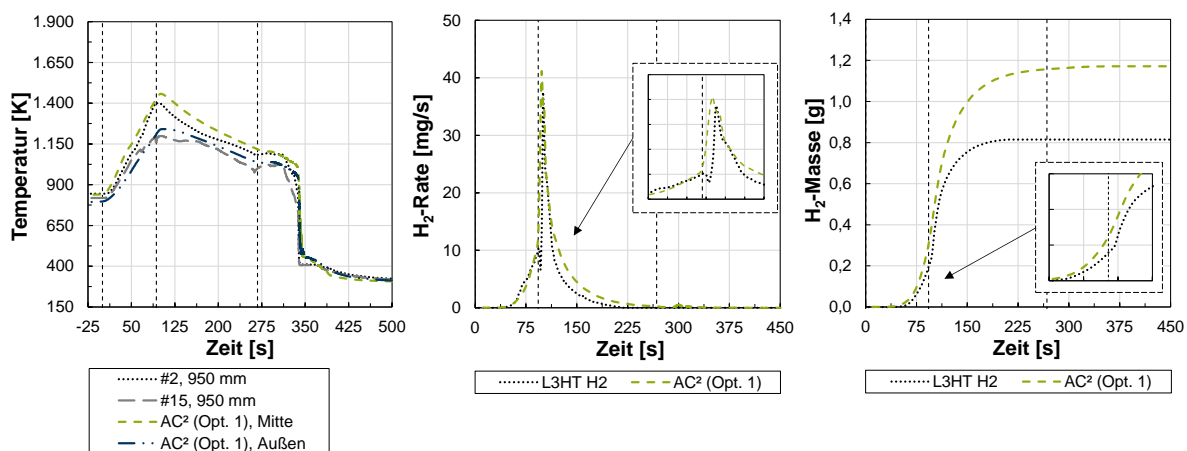
**Abbildung 4.13** AC<sup>2</sup> Simulationsmodell und Bündelquerschnitt, nach [STA24A]

Im Unterschied zu Q-19 und ATF-1 besteht das Bündel von L3HT aus 21 beheizten Brennstabsimulatoren. Außerdem werden aufgrund der gewählten Konfiguration statt sieben nur vier Eckstäbe eingesetzt (Abbildung 4.13). Der Grundaufbau der L3HT-Modellierung ähnelt dem der anderen Simulationsmodelle. Aufgrund der Codevorgaben und der Modellierung in konzentrische Kernsegmente können jedoch keine lokalen Phänomene abgebildet werden. Aufgrund der in Kapitel 4.2.2 beschriebenen Besonderheiten des Versuchs werden daher zusätzliche Modifikationen angewandt, um die ungleichmäßige Temperaturentwicklung im Bündel abzubilden. Während Q-19 und ATF-1 einen Strömungskanal nutzen, werden die Kernsektionen für den L3HT-Aufbau auf zwei Strömungskanäle aufgeteilt, sodass sich im inneren neun und im äußeren Kanal 12 Stäbe befinden. Zusätzlich wird die Anzahl der Kernsektionen im ECORE Modul von drei auf neun erhöht. Die elektrische Gesamtleistung des Experiments wird mit geeigneten Faktoren auf die modellierten Kernsektionen aufgeteilt. Querverbindungen ermöglichen den Strömungsaustausch zwischen allen Strömungskanälen und dem Bypass. Unter Annahme einer modellierten Leckage sowie einer lokal verringerten Leistung an ausgewählten äußeren Brennstäben können die Experimentwerte des Versuchs gut abgebildet werden [STA22, STA23A].

## 4.2.4 Ergebnisse

### QUENCH-L3HT

In Abbildung 4.14 sind die Messdaten der Thermoelemente „TFS 2/13“ (#2, 950 mm) und „TFS 15/13“ (#15, 950 mm) nahe der Oberseite des L3HT-Bündels dargestellt. Die gestrichelten Linien trennen die einzelnen Phasen der Transiente. Ein innerer ROD des AC<sup>2</sup>-Modells ist zum Vergleich ausgewählt und entspricht #2 bei 950 mm Bündelhöhe. Für die Temperaturverteilung von der Mitte zu den äußeren Brennstabsimulatoren wird zusätzlich #15 bei 950 mm gewählt. Die Simulationsdaten zeigen eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der stationären Phase, des Beginns der Aufheiz- und Quenchphase sowie der radialen Temperaturverteilung. Eine leichte Verzögerung des experimentellen Anstiegs ist zu erkennen.



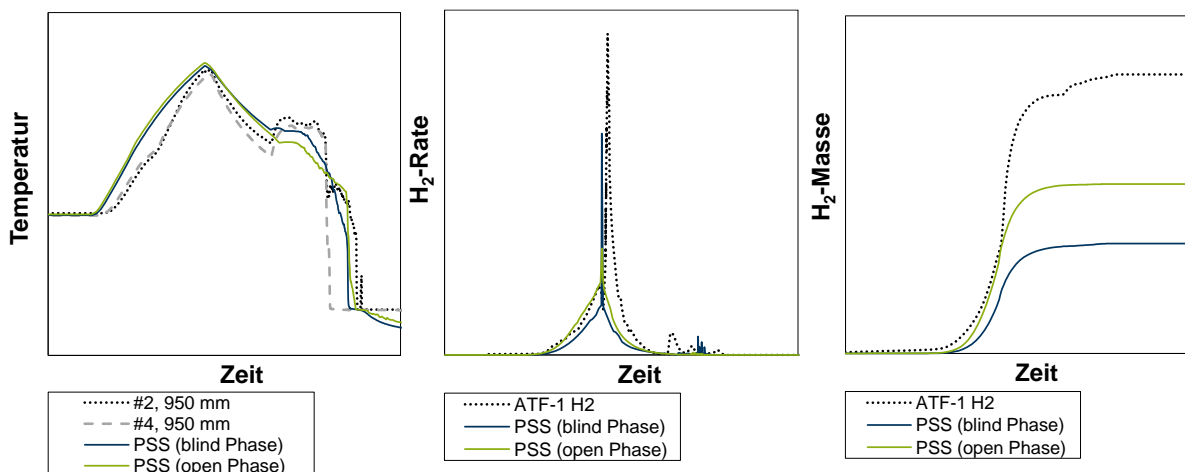
**Abbildung 4.14** L3HT-Temperaturverteilung bei 950 mm und H<sub>2</sub>-Freisetzung, nach [STA23A]

Bei #2 wird die maximale Temperatur bei 950 mm um 50 K überschätzt und der Temperaturverlauf während der Dampfabkühlungsphase zwischen etwa 93 und 268 s weist einen abweichenden Gradienten auf. Unmittelbar vor dem Quenchen gibt es einen Temperaturanstieg durch die abgeschaltete Dampfkühlung, der nur geringfügig berechnet wird, bis das Thermoelement abgeschreckt wird und sich beide Temperaturen 300 K nähern. Technische Defekte, wie sie in [STU14] zusammengefasst sind, wirken sich erheblich auf das thermische Verhalten aus und scheinen auch lokal #15 zu beeinflussen. Die Defekte sind im Datensatz mit einer verringerten Aufheizrate für äußere RODs und einer Dampfleckage modelliert. Das thermische Verhalten der modellierten Isolierung konnte trotz einer verfügbaren Option von AC<sup>2</sup>-ATHLET nicht beeinflusst werden. Zusätzlich sammelte sich während des Experimentverlaufs Kondensat in einer Leitung zwischen dem Ausgang eines installierten Überhitzers und einem Dreiwegeventil. Für die Simulation wird die Kondensatmasse iterativ ermittelt. Bei den Versuchsberechnungen hatte das eingespritzte Kondensat einen Einfluss auf die gesamte H<sub>2</sub>-Masse sowie auf den Zeitpunkt der maximalen Freisetzung. Sowohl der Integralwert als auch

die Freisetzungsraten sind in Abbildung 4.14 dargestellt. Unter Berücksichtigung des thermischen Verhaltens zeigt sich ein Zusammenhang mit der überschätzten  $H_2$ -Masse. Insgesamt wird der Integralwert um ca. 40 % überschätzt, wohingegen die Zeit der Freisetzung mit guter Übereinstimmung berechnet wird. Es gibt eine zusätzliche  $H_2$ -Freisetzung, die hauptsächlich während der Dampfabkühlungsphase berechnet wird und erheblich zur Überschätzung der Simulation beiträgt.

### QUENCH-ATF-1

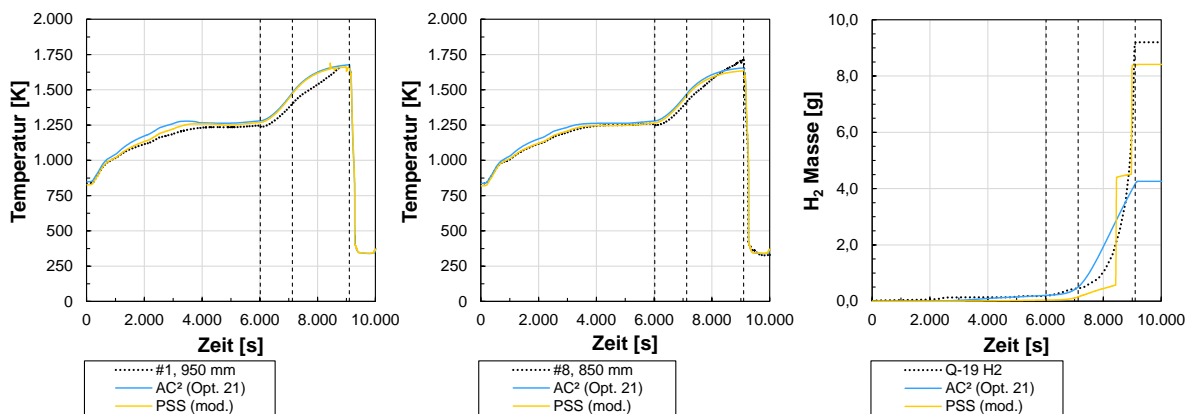
Abbildung 4.15 zeigt ausgewählte Ergebnisse der simulierten ATF-1 Transiente. Aufgrund der Bestimmungen des OECD-Projektes bezüglich der Messdaten erfolgt die Darstellung rein qualitativ. Dargestellt sind zwei Thermoelemente in der Mitte des Bündels auf der Bündelhöhe 950 mm sowie die  $H_2$ -Freisetzung. Die zwei dargestellten Simulationen zeigen unterschiedliche Stände der Entwicklung der neuen Modelloption bezüglich Cr-Beschichtungen sowie des Simulationsmodells der Versuchsanlage. *PSS (open Phase)* stellt die aktuellen und *PSS (blind Phase)* frühere Ergebnisse dar. Das thermische Verhalten der LOCA-Transiente bei 950 mm wird insgesamt überwiegend in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten berechnet. Trotz der weitgehend korrekten Berechnung des Temperaturverlaufs wird die freigesetzte  $H_2$ -Masse unterschätzt. Dies führt zu einer integralen  $H_2$ -Masse von ca. 65 % des experimentellen Wertes. Es ist möglich, dass ein früher als erwartetes lokales Versagen der Beschichtung ein Faktor sein könnte. Alle Abweichungen vom erwarteten Verhalten oder ein vorzeitiges lokales Versagen sollten weiterführend untersucht werden. Darüber hinaus könnte die Weiterentwicklung des numerischen Ansatzes die Ergebnisse möglicherweise verbessern.



**Abbildung 4.15** ATF-1-Temperaturverlauf bei 950 mm und  $H_2$ -Freisetzung, nach [STA23A]

## QUENCH-19

Die berechneten Ergebnisse von Q-19 sind in Abbildung 4.16 für die Höhen 850 und 950 mm dargestellt. Darüber hinaus ist die H<sub>2</sub>-Masse abgebildet. Neben den Messdaten sind zwei verschiedene Simulationsdurchläufe zu erkennen. Zum einen die Freigabeversion AC<sup>2</sup> 2023 mit Opt. 21 ( $\alpha$ -Al) und zum anderen eine modifizierte Version mit der neuen Korrelation für die Oxidation der FeCrAl-Legierung B136Y3 (*PSS (mod.)*). Hinsichtlich des thermischen Verhaltens sind keine signifikanten Unterschiede bei der Verwendung der verschiedenen Korrelationen für die Oxidation erkennbar. Lediglich in der Vor-Oxidationsphase bis 6.000 s ist eine bessere Übereinstimmung mit den Messdaten zu erkennen. Es ist zu erwähnen, dass die Berechnung der freigesetzten Oxidationswärme für *PSS (mod.)* begrenzt werden musste, da sonst ein unphysikalischer Temperaturverlauf berechnet wird. Dies unterstreicht den vorläufigen Charakter der Ergebnisse mit der neuen FeCrAl-Korrelation. Hierzu steht PSS mit dem Codeentwickler in engem Austausch.



**Abbildung 4.16** Q-19 Temperaturverlauf bei 950 mm, 850 mm und H<sub>2</sub>-Freisetzung

Insgesamt werden die Messwerte mit Ausnahme der Maximaltemperatur gut reproduziert. In Bezug auf H<sub>2</sub> werden mit Opt. 21 etwa 50 % des experimentellen Integralwerts unter der Annahme einer  $\alpha$ -Al-Kinetik berechnet. Unter Berücksichtigung dieser Vereinfachung, d.h. einer gleichbleibenden Kinetik für alle Temperaturbereiche, werden die berechneten Werte adäquat wiedergegeben, obwohl die Zusammensetzung der FeCrAl Legierung vernachlässigt wird. Bei Verwendung der modifizierten Version mit der temperaturabhängigen Korrelation wird deutlich, dass derzeit keine geeignete Interpolation zwischen den verschiedenen dominanten Kinetiken modelliert ist (siehe Verlauf der H<sub>2</sub>-Masse). Der Integralwert wird jedoch in angemessener Übereinstimmung mit den experimentellen Daten berechnet.

### 4.2.5 Zusammenfassung

Im Rahmen des Arbeitspunktes wurden zwei ATF-Konzepte mit hohem TRL, FeCrAl als Ersatz-Legierung und Cr als Beschichtung, analysiert. Das Verhalten unter Bedingungen, die

über den Normalbetrieb hinausgehen, sowie die dabei relevante Oxidationskinetik wird numerisch modelliert. Hierbei werden bestehende Ansätze von FeCrAl testweise erweitert und ein neues Modell für die Cr-Oxidation entwickelt. Zur Validierung wird ein Simulationsmodell der QUENCH-Anlage erstellt und mit experimentellen Daten relevanter Experimente getestet. Dabei wurden beispielsweise die QUENCH-Serie unter (schweren) Unfallbedingungen sowie das LOCA-Programm unter Auslegungsbedingungen betrachtet. Insgesamt zeigt der derzeitige Entwicklungsstand bezüglich der Abbildung komplexer thermischer Phänomene in großskaligen Bündelversuchen plausible Ergebnisse. Hinsichtlich der ATF-Konzepte in AC<sup>2</sup> steht mit den verfügbaren bzw. neu entwickelten Modelloptionen eine erste gute Möglichkeit zur Verfügung, relevante Konzepte und Experimente nachzurechnen. Weiterentwicklungsbedarf ist bezüglich des Oxidations- und mechanischen Verhaltens erforderlich. Die verfügbaren FeCrAl-Optionen weisen hinsichtlich der korrekten Berücksichtigung der einzelnen FeCrAl-Komponenten Verbesserungspotential auf. Weiteres mögliches Potential ist in Kapitel 5 dargestellt. Die Ziele des Arbeitspunktes wurden erreicht. Bezüglich einer detaillierteren Abbildung des Versagensprozesses einer Cr-Beschichtung sowie die Analyse / Weiterentwicklung des Oxidationsverhaltens oberhalb der eutektischen Temperatur, z.B. basierend auf geplanten experimentellen Untersuchungen in OECD/NEA „QUENCH-ATF“, könnten das dargestellte Oxidations-Modell ertüchtigen. Dies könnte im Rahmen eines zukünftigen nationalen Forschungsvorhabens durch PSS geprüft und ggf. durchgeführt werden. Erste Ergebnisse hierzu wurden bereits anhand der Q-15 Transiente mit Temperaturen oberhalb der Versagertemperatur der Beschichtung gezeigt (vgl. [HOL23]).

## 4.3 Schüttbetten im unteren Plenum

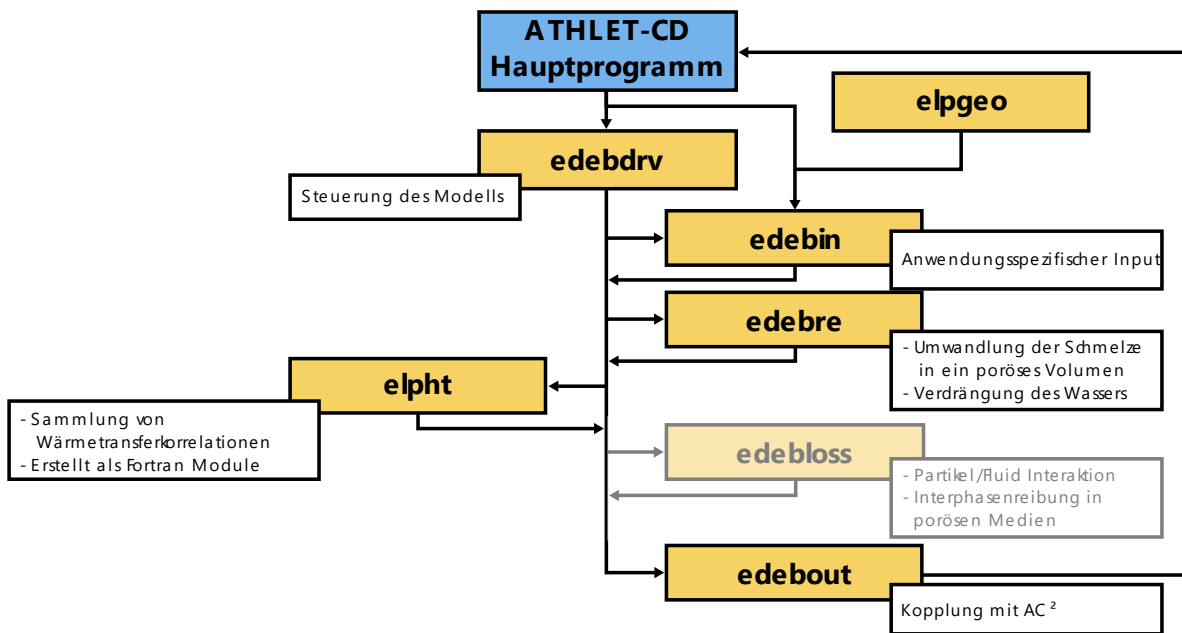
Für die Simulation von Spätphasen-Phänomenen im unteren Reaktorplenum (LP, engl. Lower Plenum) stehen in AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD die beiden schnellrechnenden Module AIDA (Analysis of the Interaction between Core Debris and the RPV during severe Accidents) und LHEAD (Lower Head) zur Verfügung. Trotz der sehr weit entwickelten Modellbasis beider Module können Schüttbetten aktuell nicht adäquat abgebildet werden. In vergangenen Arbeiten von PSS, z. B. im Rahmen des Forschungsvorhabens „Externe Validierung und Modellanalyse der Codesysteme AC<sup>2</sup> und ASTEC mit unterstützenden CFD-Detailanalysen (VAMOCAAD)“ ([BRA21; PES20]), konnte die Relevanz von Schüttbetten für den Verlauf eines postulierten schweren Reaktorunfalls und ein damit einhergehender Weiterentwicklungsbedarf für das AC<sup>2</sup> Programmpaket bereits herausgestellt werden.

Zur Erweiterung der AC<sup>2</sup> Modellbasis wird in diesem Unterkapitel die Entwicklung eines schnellrechnenden Modells zur Abbildung von Schüttbetten beschrieben. Durch das Modell soll es fortan möglich sein die Umwandlung der Schmelze in ein poröses Schüttbettvolumen anhand eines vereinfachenden parametrischen Ansatzes abbilden zu können. Darüber hinaus

### 4.3.1 Modellentwicklung

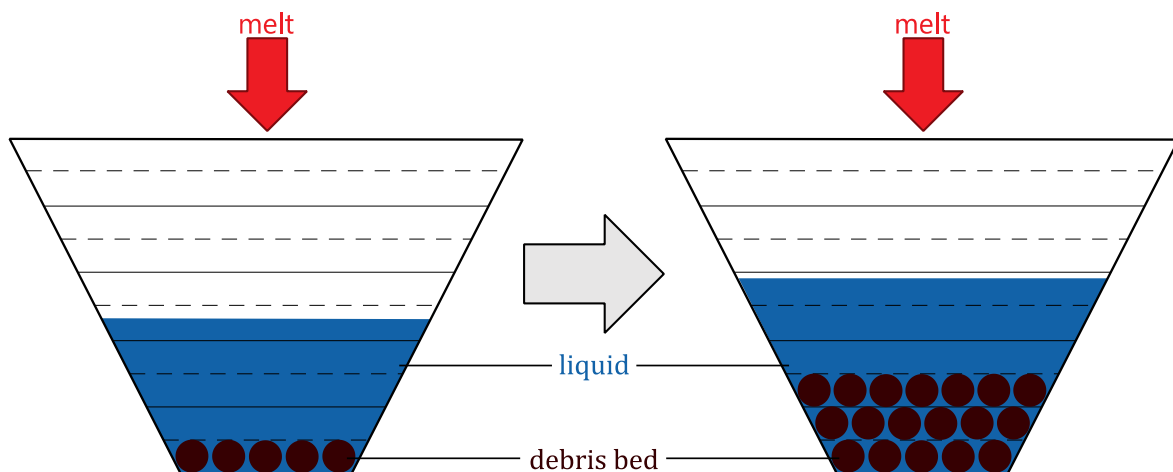
Das Konzept des Modells, dargestellt durch die Programmstruktur in Abbildung 4.17, basiert auf der Zielsetzung, eine Modellumgebung unabhängig vom Ort der Partikelschüttung im Kernkraftwerk zu entwickeln, da diese während eines postulierten Reaktorunfalls prinzipiell in unterschiedlichen Geometrien (Reaktorkern, unteres Plenum, Sicherheitsbehälter) entstehen können. Der Fokus bei der Anwendung des entwickelten Modells liegt in diesem Vorhaben auf Schüttbetten im LP.

Der Aufruf (engl. call) des mit DEMON (Debris Model for Late Phase Phenomena) bezeichneten Modells erfolgt direkt über das ATHLET-CD Hauptprogramm. Diese ist eine Driver Routine, mit der der Wärmetransfer, Kernzerstörungsphänomene und die Wärmeentwicklung berechnet werden. Mit dem call der Driver-Routine *edebdrv* werden bereits wichtige Parameter für die Berechnungsumgebung, in der das Modell angewendet wird, und dazugehörige Nodalierungsvariablen der betrachteten Struktur übergeben. In der Subroutine *edebin* wird zu Beginn der anwendungsspezifische Input, in diesem Fall für die Anwendung des unteren Plenums, an die Driver-Subroutine zurückgeleitet. Dazu zählen auch nodalisierungsspezifische Informationen, die durch die Subroutine *el/geo* berechnet werden.



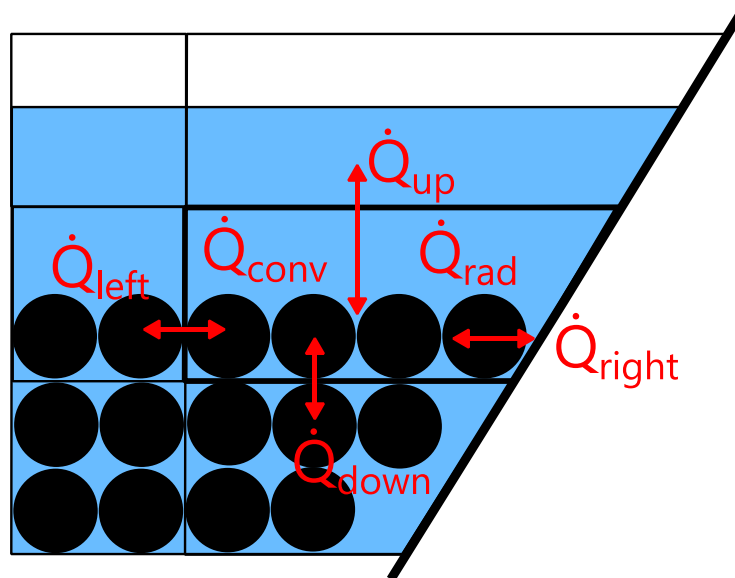
**Abbildung 4.17** Programmstruktur des Modells DEMON und Implementierung in ATHLET-CD

Mit der Subroutine *edebre* wird die Umwandlung der verlagerten Schmelzemasse in ein poröses Schüttbettvolumen durch einen vereinfachten parametrischen Ansatz berechnet. Darüber hinaus wird durch den implementierten Ansatz die Verdrängung des Kühlmittels in die weiter oben liegenden Nodes berücksichtigt. Da mit dem Thermohydraulikmodul ATHLET aktuell keine porösen Volumen abgebildet werden können ist es notwendig das geometrische Volumen des unteren Plenums um das entstandene Schüttbettvolumen zu reduzieren. In den vorliegenden Validierungsarbeiten können keine negativen Auswirkungen auf die Berechnungen der thermohydraulischen Modelle in ATHLET festgestellt werden. Bei einer künftigen Verfügbarkeit eines Modellansatzes zur Abbildung poröser Volumen sollte der implementierte Ansatz dennoch überarbeitet werden. Abbildung 4.18 stellt die Berechnungen des Modellansatzes exemplarisch und schematisch dar.



**Abbildung 4.18** Umwandlung der Schmelze in ein poröses Schüttbettvolumen

Für die Berechnung des Wärmetransfers ist die Subroutine `elph` entwickelt worden. Darin sind verschiedene Korrelationen implementiert, mit denen der Wärmetransfer in einem Schüttbett sowohl durch Konvektion ( $\dot{Q}_{conv}$ ), Wärmeleitung ( $\dot{Q}_{left}$ ,  $\dot{Q}_{right}$ ,  $\dot{Q}_{up}$  und  $\dot{Q}_{down}$  zusammengefasst zu  $\dot{Q}_{cond}$ ) als auch Strahlung ( $\dot{Q}_{rad}$ ) berechnet werden kann (siehe Abbildung 4.19). In Bezug auf die Wärmeleitung wird dabei sowohl der Wärmeübergang zwischen den Partikeln selbst sowie zwischen den Partikeln und der Behälterwand berücksichtigt.



**Abbildung 4.19** Abbildung von Wärmetransfervorgängen in Schüttbetten

Zusätzlich ist eine Aufheizung des Schüttbetts durch die Definition einer externen Leistungsquelle ( $\dot{Q}_{pow}$ ), vorrangig für experimentelle Anwendungen, sowie die entstehende Nachzerfallswärme ( $\dot{Q}_{dec}$ ) möglich.

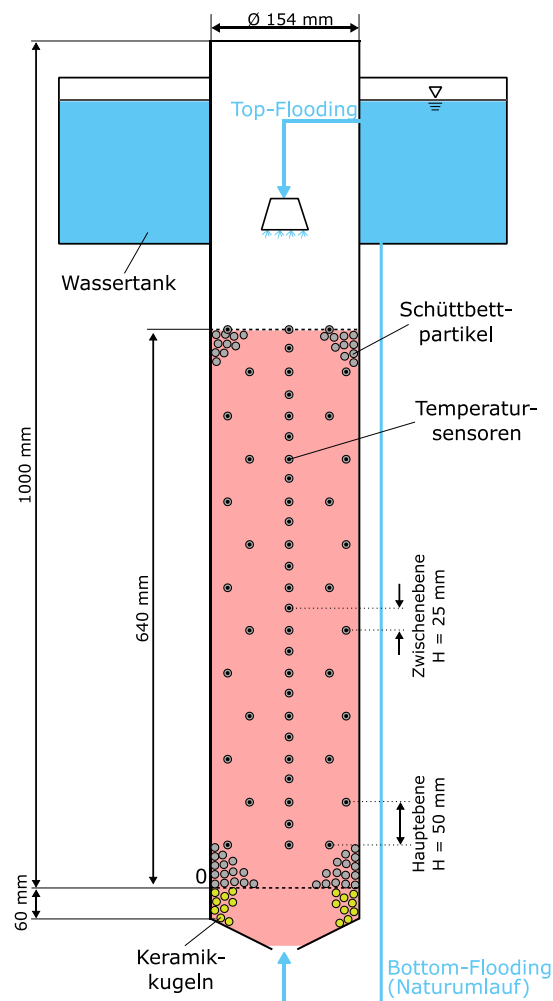
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho \cdot c_p \cdot V} \cdot (\dot{Q}_{cond} - \dot{Q}_{conv} - \dot{Q}_{rad} + \dot{Q}_{pow} + \dot{Q}_{dec}) \quad (4.1)$$

In der Subroutine `edebloss` werden die reibungsbedingten Druckverluste durch Interaktion zwischen den Partikeln und dem strömenden Fluid berechnet. Darüber hinaus wird die Reibung zwischen den beiden Fluidphasen berücksichtigt. Dieser Teil des Modells ist im Rahmen eines Promotionsvorhabens entwickelt worden. Für detaillierte Informationen sei aus diesem Grund auf die dazugehörige Dissertation [PES24] verwiesen, für die eine Veröffentlichung noch im Jahr 2024 geplant ist.

In der Subroutine `edebout` erfolgt die Kopplung mit anderen ATHLET und ATHLET-CD Modellen, wodurch die Berechnung des thermodynamischen Verhaltens des Kühlmittels ermöglicht wird. So kann dann auch die Ausgabe von Simulationsergebnissen generiert werden.

### 4.3.2 Experimente

Zur grundlegenden Überprüfung der Funktionalität des entwickelten Schüttbettmodells sowie zur Validierung der darin implementierten Modelle werden Simulationen der DEBRIS Experimente vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) an der Universität Stuttgart durchgeführt. Hauptbestandteil der Versuchsanlage, dargestellt in Abbildung 4.20, ist die in einen Druckbehälter integrierte Edelstahl Teststrecke in der sich das zu untersuchende Schüttbett befindet.



**Abbildung 4.20** Schematische Darstellung der DEBRIS Versuchsanlage, nach [LE17]

Der Aufbau der Versuchsanlage erlaubt Versuchsbedingungen von bis zu  $1.000 \text{ K}$  und  $0,5 \text{ MPa}$ . Die vorliegenden Versuche sind entweder mit gleichförmigen Edelstahlzylindern oder mit unregelmäßig geformten Partikeln aus den PREMIX Experimenten des KIT durchgeführt worden [KA101]. Das jeweilige Schüttbett erstreckt sich über eine Höhe von  $640 \text{ mm}$  und kann induktiv beheizt werden. Unter dem Schüttbett befindet sich ein Bett aus Keramik-Kugeln

das zum einen der Strömungsführung und zum anderen der Positionierung der darüberliegenden Partikel dient. Zur Aufzeichnung des thermischen Verhaltens sind in der gesamten Anlage 82 Thermolemente (TC, engl. Thermocouple) installiert. Innerhalb des Schüttbetts sind die TC an drei verschiedenen radialen Positionen, dem Zentrum (C), dem halben Radius (HR) und in Wandnähe (W) auf unterschiedlichen Höhen installiert. [LEI16; LEI17]

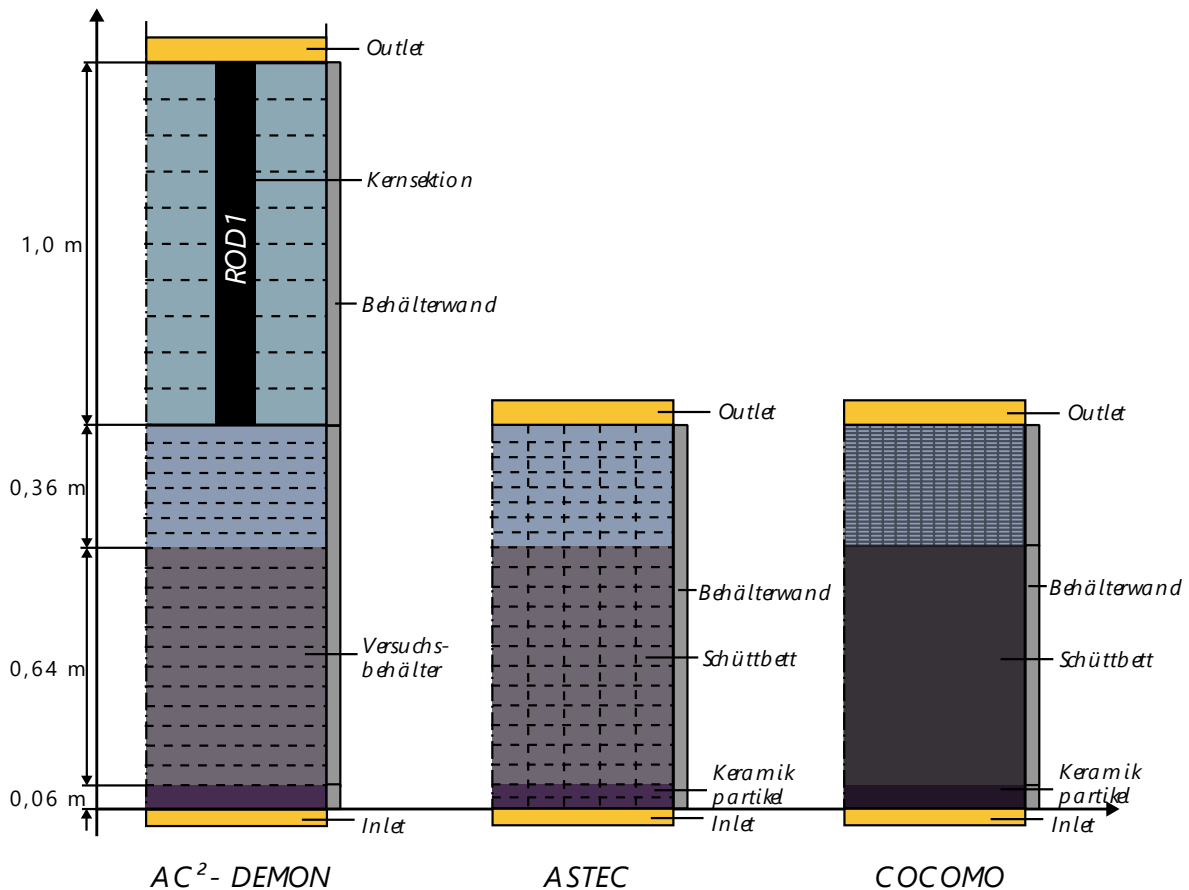
Die Kühlung der Partikel erfolgte entweder von unten (BF, engl. Bottom Flooding) oder von oben (TF, engl. Top Flooding). Die Experimente können grundsätzlich in die folgenden drei Phasen unterteilt werden:

- I        Aufheizen der Partikel bei zunehmender Leistung
- II       Stabilisierung auf einem konstanten Temperaturniveau
- III      Kühlung der trockenen und überhitzten Partikel

In der vorliegenden Arbeit wird die Simulation eines BF-Experiments mit zylindrischen Partikeln bei einem Druck von 1 bar simuliert und ausgewertet. Da die Informationen über das induktive Heizsystem nicht ausreichen, wird in den folgenden Untersuchungen nur die Kühlphase (III) betrachtet. [LEI17]

### 4.3.3 Modellierung

Die Modellierung und Nodalisierung der DEBRIS-Versuchsanlage zur Durchführung der Validierungssimulationen ist in Abbildung 4.21 dargestellt. Neben den Simulationen mit DEMON werden darüber hinaus Vergleichssimulationen mit dem französischen Integralcode ASTEC des französischen IRSN, sowie dem Detailcode COCOMO, der am IKE entwickelt wird, durchgeführt. Die beiden Codes verfügen über eine sehr weitentwickelte Modellbasis zur Abbildung von Schüttbettphänomenen und eignen sich entsprechend für den geplanten Vergleich. Die Abbildung zeigt die wesentlichen Unterschiede in Bezug auf die Modellierung der DEBRIS Experimente mit den drei Codes. Im Vergleich zu ASTEC und COCOMO muss mit DEMON ein weiteres Strömungsobjekt oberhalb des eigentlichen Versuchsbehälters modelliert werden, da Schüttbetten nicht im Eingabedatensatz modelliert werden können sondern im Verlauf der Simulation durch das Schmelzen und die Verlagerung einer Kernsektion entstehen können. In einem ersten zeitlichen Abschnitt der Simulationen wird die Schmelze in das untere Plenum verlagert, in ein poröses Volumen umgewandelt und anschließend das anfängliche thermische Niveau eingestellt. Im zweiten Abschnitt wird das Schüttbett dann durch das einströmende Wasser gekühlt. Dieser Abschnitt ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit.



**Abbildung 4.21** Modellierung der DEBRIS Versuchsanlage mit AC<sup>2</sup>, ASTEC und COCOMO

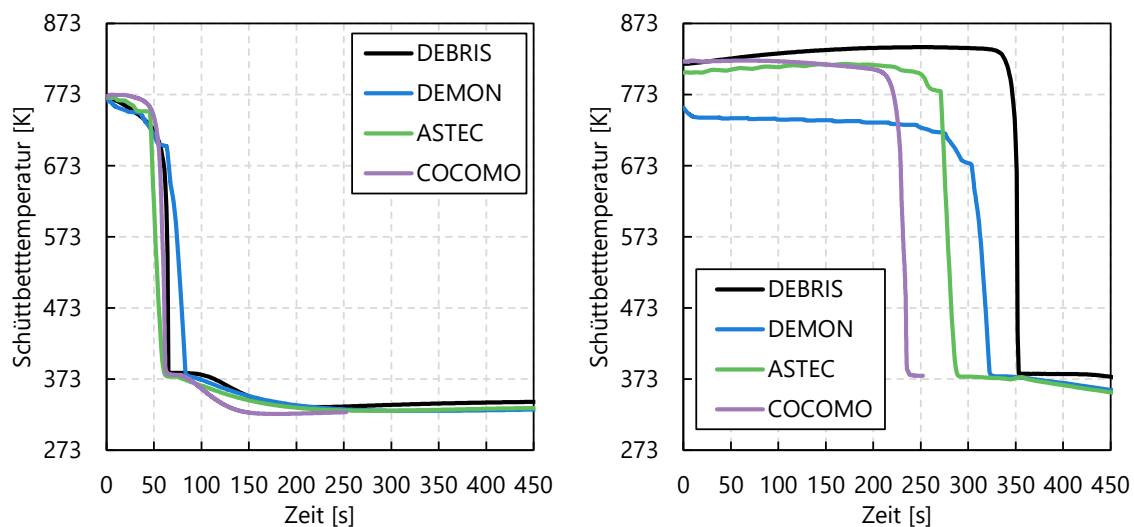
Ein weiterer Unterschied zeigt sich hinsichtlich der Nodalisierung des Strömungsobjektes, welches den Versuchsbehälter sowie das darin befindliche Schüttbett abbildet. In der Simulation mit DEMON ist dieser axial in 21 Nodes unterteilt. Davon werden zwölf Nodes zur Abbildung des Schüttbetts verwendet. Eine radiale Nodalisierung ist darüber hinaus aktuell nicht berücksichtigt. Dies ist dadurch begründet, dass die radiale Nodalisierung des unteren Plenums mit DEMON (analog zu LHEAD) in ATHLET-CD durchgeführt wird und im Thermohydraulikmodul ATHLET nicht berücksichtigt wird. Da der Fokus in den vorliegenden Quenchversuchen auf der konvektiven Wärmeabfuhr aus dem Schüttbett durch das Kühlmittel liegt sind die Wärmeverluste über die Behälterwand aufgrund der installierten Isolierung sehr gering. Dementsprechend zeigt sich auch bei Berücksichtigung einer radialen Nodalisierung mit ATHLET-CD nur ein sehr geringer Einfluss auf die Simulationsergebnisse.

Mit ASTEC und COCOMO wird die radiale Nodalisierung durch das Verwenden weiterer Strömungskanäle sowohl in den Kernzerstörungsmodellen zur Abbildung von Schüttbettphänomenen sowie in den thermohydraulischen Modellen berücksichtigt. Durch eine Aufteilung in fünf radiale Strömungskanäle wird das Schüttbett in der Simulation mit ASTEC durch insgesamt 60 Nodes abgebildet. COCOMO verwendet im Vergleich zu den beiden Lumped Parameter Codes einen Quasi-Kontinuums Ansatz und ermöglicht eine feinere

Auflösung des verwendeten Gitters. So ist im Rahmen dieser Arbeit ein 2D Modell erstellt worden in dem das Schüttbett mit 2.828 Nodes abgebildet wird.

#### 4.3.4 Ergebnisse

Abbildung 4.22 zeigt das experimentelle sowie simulierte thermische Verhalten im unteren Bereich des Schüttbetts auf einer Höhe von 0,09 m (links) bzw. im oberen Bereich auf einer Höhe von 0,49 m (rechts) in der Schüttbettmitte für das ausgewählte DEBRIS Experiment. Die Ergebnisse zeigen, dass das thermische Verhalten durch das entwickelte Schüttbettmodell DEMON sowohl qualitativ als auch quantitativ in guter Übereinstimmung zum experimentellen Verhalten abgebildet werden kann. Dies zeigt auch ein Vergleich mit den durchgeführten Vergleichscodes ASTEC und COCOMO. In den mit COCOMO durchgeführten Simulationen kommt es nach ca. 250 s zu einem Simulationsabbruch, der auf eine Unterschreitung des minimalen Zeitschritts zurückzuführen ist und im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter aufgelöst werden kann.

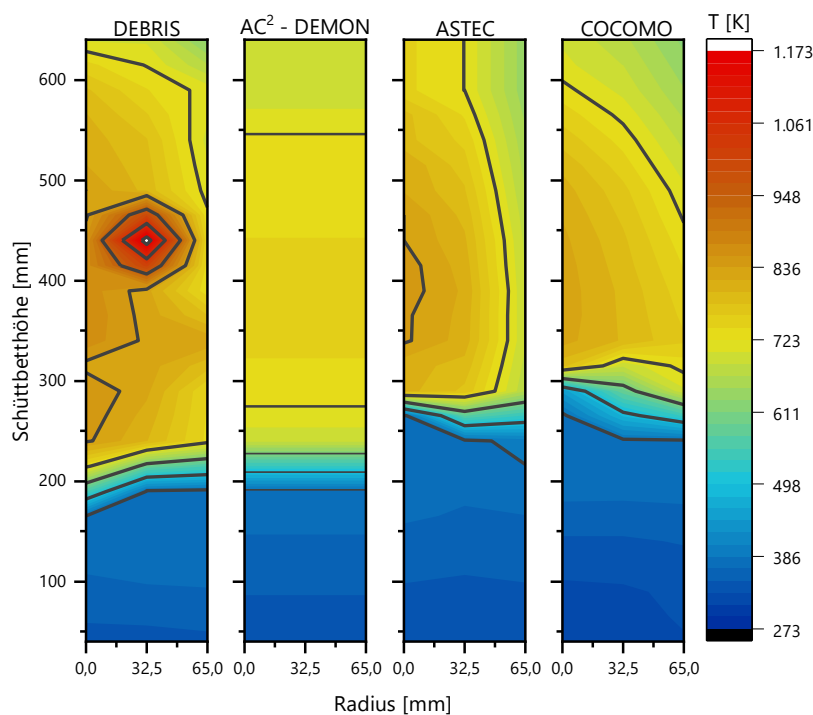


**Abbildung 4.22** Thermisches Verhalten auf einer Höhe von 0,09 m (links) bzw. 0,49 m (rechts) in der Schüttbettmitte

Im unteren Bereich des Schüttbetts wird die vollständige Abkühlung der Partikel, also der Zeitpunkt, zu dem Sättigungsbedingungen erreicht werden (ca. 376 K), durch DEMON mit einer Verzögerung von ca. 18 s berechnet. Im oberen Bereich wird die Kühlung hingegen um ca. 30 s zu früh berechnet. Während die Ergebnisse der beiden anderen Codes im unteren Bereich geringfügiger abweichen (ca. 3-4 s), weichen diese im oberen Bereich deutlich stärker von den experimentellen Ergebnissen ab (ASTEC ca. 65 s und COCOMO ca. 117 s). Auffällig ist darüber hinaus, dass das initiale Temperaturniveau im oberen Bereich der Schüttung mit DEMON unterschätzt wird. Während mit ASTEC und COCOMO das initiale Temperaturniveau

detailliert im Eingabedatensatz vorgegeben werden kann, ist dies mit DEMON aktuell nicht möglich. Dies ist dadurch zu begründen, dass DEMON vorrangig zur Simulation von Anlagenrechnungen konzipiert ist und die Entstehung des Schüttbetts an die Verlagerung geschmolzenen Kernmaterials gekoppelt ist.

Ergänzend zu dem dargestellten Temperaturverläufen in Abbildung 4.22 zeigt Abbildung 4.23 die Temperaturprofile für Experiment und Simulationen 150 s nach Beginn des Abkühlvorgangs. Zu diesem Zeitpunkt ist die Quenchfront im Experiment bereits auf eine Höhe von ca. 200 mm vorangeschritten. Durch die Simulationen wird dieses Verhalten in guter Näherung abgebildet. Dies gilt insbesondere mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Schüttbettmodell DEMON. In den Simulationen mit ASTEC und COCOMO ist die Quenchfront durch die Überschätzung des Wärmeübergangs zwischen Partikeln und Kühlmittel bereits etwas weiter vorangeschritten. In beiden Simulationen ist ein Temperaturgradient zwischen Schüttbettmitte und Behälterwand erkennbar. Dieser wird durch eine verlangsamte Abkühlung im Wandbereich aufgrund thermischer Interaktionen mit der Behälterwand hervorgerufen. Im Experiment hat sich zum dargestellten Zeitpunkt ebenfalls ein Temperaturgradient ausgebildet, allerdings beschreibt dieser ein schnelleres Voranschreiten der Quenchfront in der Nähe der Wand. Dies ist vorrangig auf lokale Inhomogenitäten der Schüttbettporosität zurückzuführen. [LEI17]

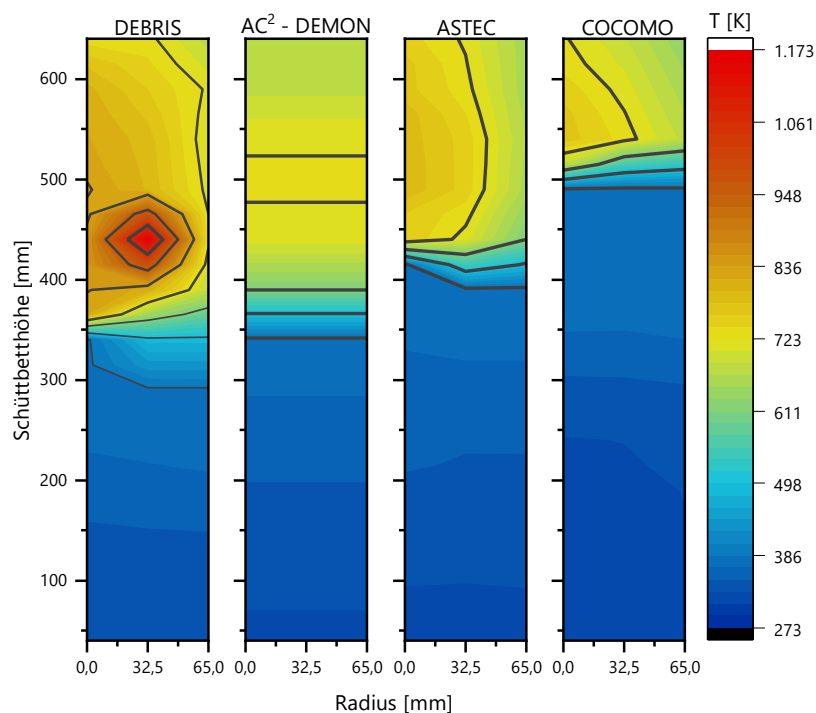


**Abbildung 4.23** Temperaturprofile 150 s nach Beginn des Abkühlvorgangs

Im oberen Bereich des Schüttbetts zeigt sich in den Experimenten ein lokaler Bereich mit stark erhöhter Temperatur im Vergleich zu den umliegenden Partikeln. Es ist davon auszugehen, dass es sich bei diesem Bereich um eine durch einen Messfehler hervorgerufene Abweichung

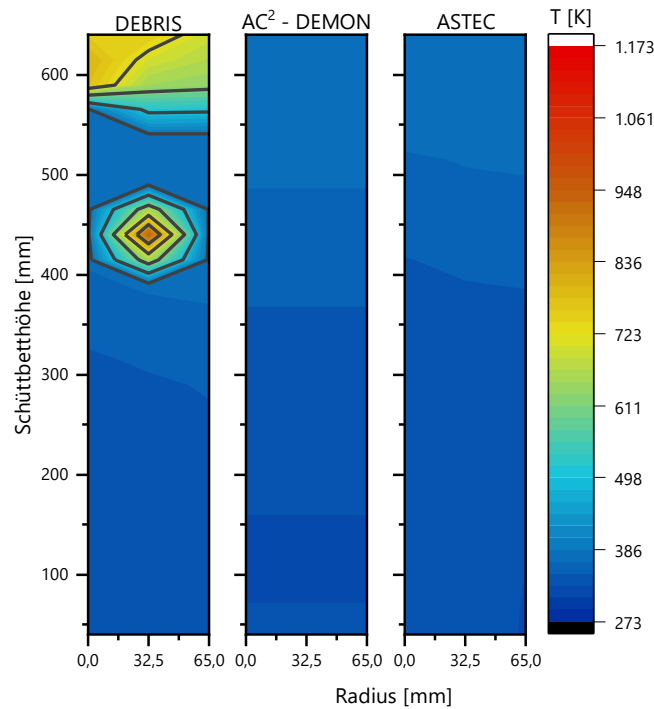
handelt, die aus diesem Grund auch in der Modellierung des initialen thermischen Verhaltens in den Simulationen keine Berücksichtigung findet. [LE17]

In Abbildung 4.24 ist der thermische Zustand im Experiment und den drei durchgeführten Simulationen 250 s nach Beginn des Quenchvorgangs dargestellt. Zu diesem Zeitpunkt kommt es zu dem genannten Abbruch der mit COCOMO durchgeführten Nachrechnungen des ausgewählten Experiments. Mit DEMON wird der Anstieg der Quenchfront weiterhin in guter Übereinstimmung zum Experiment simuliert. Mit den anderen beiden Codes zeigen sich hingegen zunehmende Abweichungen in Form einer zunehmenden Überschätzung der Abkühlgeschwindigkeit.



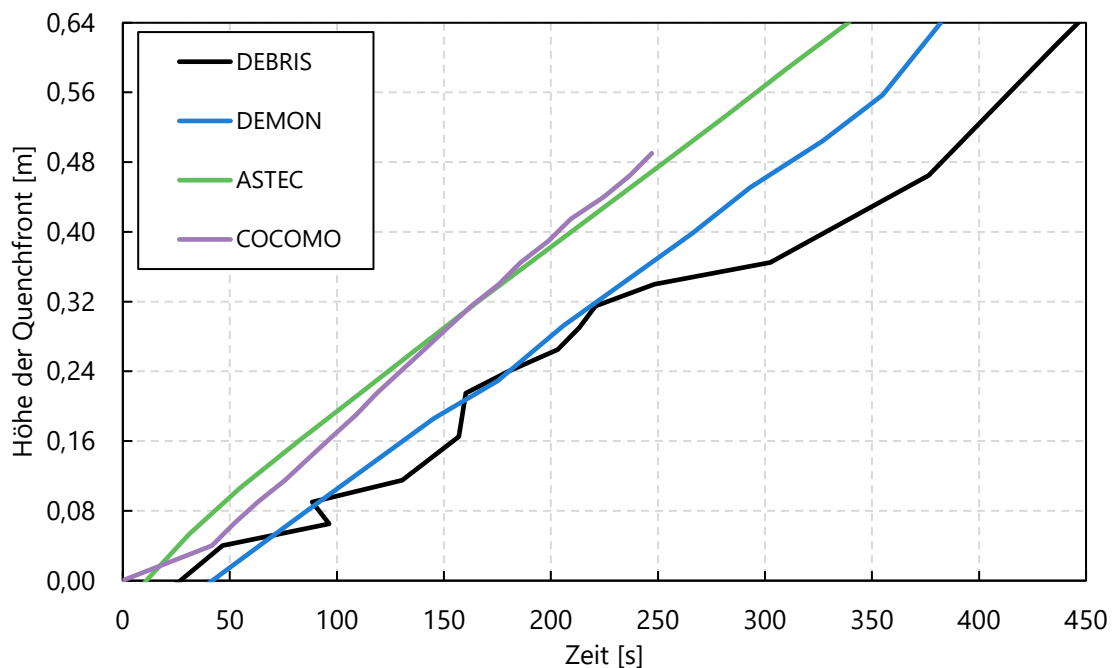
**Abbildung 4.24** Temperaturprofile 250 s nach Beginn des Abkühlvorgangs

Nach weiteren 150 s, dargestellt in Abbildung 4.25, ist das Schüttbett im Experiment nahezu vollständig gekühlt. Aufgrund des Simulationsabbruchs in der COCOMO Simulation sind hier nur noch die Ergebnisse mit DEMON und ASTEC dargestellt. In beiden Codes ist das Schüttbett zu diesem Zeitpunkt bereits vollständig gekühlt, dementsprechend ergibt sich eine Überschätzung des experimentellen Verhaltens.



**Abbildung 4.25** Temperaturprofile 400 s nach Beginn des Abkühlvorgangs

Eine weitere Möglichkeit zur Beurteilung des Abkühlverhaltens ist eine Analyse des Quenchfrontverlaufs. Dieser ist in Abbildung 4.26 für das ausgewählte DEBRIS Experiment dargestellt. Da der Wasserlevel in den Experimenten nicht aufgezeichnet wird, ist dieser anhand der aufgezeichneten Temperaturen in der Schüttbettmitte berechnet worden. Das Kriterium für die vollständige Kühlung ist wie zuvor das Unterschreiten der Sättigungstemperatur.

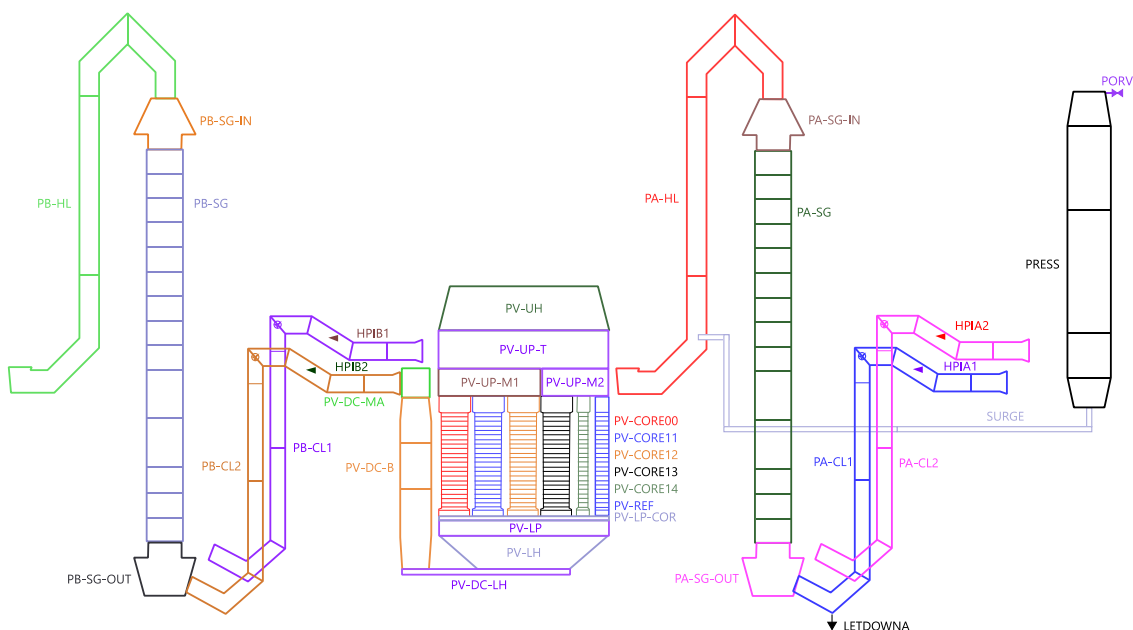


**Abbildung 4.26** Verlauf der Quenchfront

Die Darstellung zeigt, dass das qualitative Verhalten, welches in dem Experiment beobachtet werden kann, insbesondere bis zur Schüttbettmitte durch die Simulationen in guter Näherung abgebildet wird. Mit DEMON zeigen sich darüber hinaus nur geringfügige Abweichungen in Bezug auf die Abbildung des quantitativen Verhaltens. Ab der Schüttbettmitte steigt die Quenchfront im Experiment langsamer an als zuvor, was auf die höheren Temperaturen in diesem Bereich zurückzuführen ist. Dieses Verhalten wird mit den Codes nicht abgebildet, was zu einer Vergrößerung der zeitlichen Abweichungen führt. Mit einem Anstieg des Wasserlevels auf eine Höhe von 0,64 m ist das Schüttbett als vollständig geflutet. Dieser Zeitpunkt wird mit DEMON mit ca. 60,4 s und mit ASTEC mit ca. 107,5 s Abweichung simuliert.

#### 4.3.5 Simulation des Unfalls im Kernkraftwerk TMI-2

Neben den beschriebenen Validierungsarbeiten der DEBRIS Experimente wird das Modell zusätzlich zur Anwendbarkeit im Rahmen von Anlagensimulation erprobt. Dazu werden Nachrechnungen des Unfalls in Reaktorblock 2 im Kernkraftwerk Three-Mile-Island (TMI-2) durchgeführt. Eine ausführliche Beschreibung des Unfallverlaufs und eine Analyse des Kernzustands zu unterschiedlichen Zeitpunkten ist beispielsweise in [BR089; LIN98] aufgeführt. Zur Durchführung der Simulationen wird ein Eingabedatensatz des AC<sup>2</sup> Codeentwicklers GRS verwendet, der auch im Rahmen der Code Validierung, u. a. für das AC<sup>2</sup> Modul LHEAD, und für internationale Code Benchmarks verwendet wird [AUS15; HOL21]. Eine schematische Darstellung der abgebildeten Komponenten und der gewählten Nodalisierung zeigt Abbildung 4.27.



**Abbildung 4.27** Nodalisierung des Primärkreislaufs des Kernkraftwerks TMI-2 nach [HOL21]

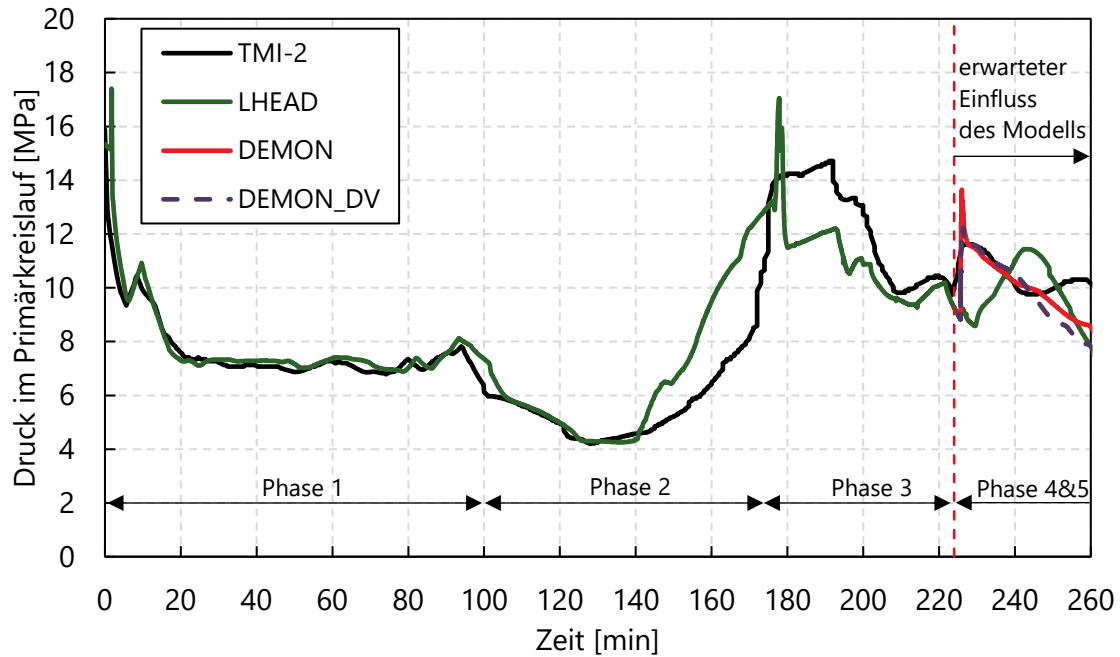
Der Datensatz umfasst alle relevanten Komponenten des Primär- und Sekundärkreislaufs. Dazu gehören der RDB, die Kühlkreisläufe A und B mit jeweils einem heißen und zwei kalten Strängen, die Hauptkühlmittelpumpen, die Dampferzeuger, vier Hochdruckeinspeiseleitungen an den kalten Strängen, die Rücklaufleitung des Kühlmittelreinigungssystems am kalten Strang A1, den Druckhalter mit Volumenausgleichsleitung am heißen Strang A, Heizung, Sprühsystem und dem Druckhalterabblaseventil (PORV, engl. pilot-operated relief valve). Anpassungen werden lediglich in Bezug auf die Modellierung des unteren Reaktorplenums vorgenommen. Im ursprünglichen Datensatz werden hier BRANCH-Objekte eingesetzt, die in ATHLET als einzelne Kontrollvolumen ohne interne Junctions betrachtet werden. So wäre es nicht möglich Teile des neu entwickelten Schüttbettmodells zu verwenden. [HOL21; LOV21]

Neben einem Vergleich mit den während des Unfalls aufgezeichneten Messdaten werden darüber hinaus Vergleichssimulationen mit dem AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD Modul LHEAD durchgeführt. Um hier eine möglichst hohe Vergleichbarkeit zu erreichen, werden die im vorherigen Absatz beschriebenen Anpassungen des unteren Reaktorplenums auch in den Simulationen mit LHEAD berücksichtigt. Die mit DEMON durchgeführten Simulationen werden sowohl mit (*DEMON\_DV*) als auch ohne (*DEMON*) Berücksichtigung des implementierten Modellansatzes für Druckverluste in porösen Medien durchgeführt.

Der Ablauf des Unfalls ist vergleichbar mit einem postulierten Kühlmittelverluststörfall mit kleiner Leckage (SBLOCA, engl. small break loss of coolant accident) und kann in die folgenden fünf Phasen eingeteilt werden:

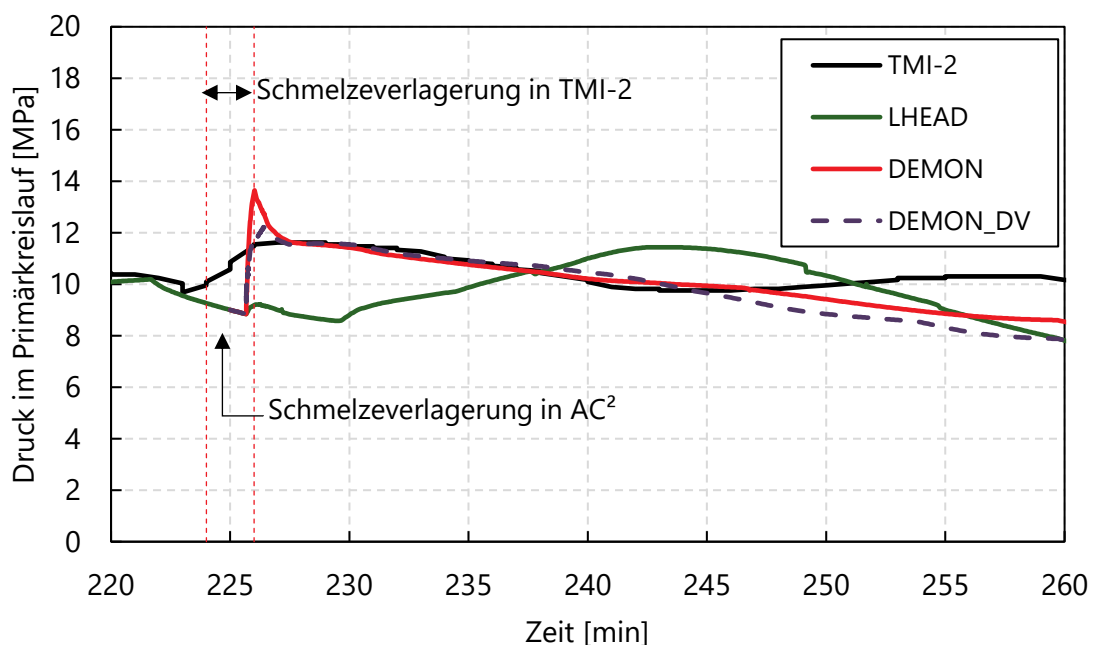
- Phase 1 – Kühlmittelverlust (0 bis 100 min)
- Phase 2 – Aufheizung des Reaktorkerns (100 bis 174 min)
- Phase 3 – Aufheizung zerstörter Kernstrukturen (174 bis 224 min)
- Phase 4 – Materialverlagerung ins untere Plenum (224 bis 226 min)
- Phase 5 – Kühlung zerstörter Kernstrukturen (226 min bis 15,5 h)

Diese Phasen sind in Abbildung 4.28 zusätzlich anhand des charakteristischen Druckverlaufs im Reaktordruckbehälter dargestellt. Bis zur Verlagerung der Schmelze in das untere Plenum sind die Verläufe der drei Simulationen identisch, weshalb nur der Verlauf von LHEAD sichtbar ist. Bis zu diesem Zeitpunkt wird der Druckverlauf vor allem bis zum Schließen des PORV nach 139 min in guter Übereinstimmung zum Unfall simuliert. Den darauffolgenden Anstieg des Drucks durch die verstärkte Aufheizung des Reaktorkerns und die einsetzenden Oxidationsvorgänge wird durch AC<sup>2</sup> insgesamt überschätzt. Die erneute Wiedereinspeisung von Kühlmittel nach 174 min führt zu einer Überschätzung des Druckanstiegs und die daran anschließende Druckentlastung nach 193 min zu einem zu starken Absinken des Druckniveaus im Primärkreislauf.



**Abbildung 4.28** Primärdruckverlauf während des Unfalls in TMI-2

Mit Beginn der Materialverlagerung in das LP nach 224 min zeigt sich erwartungsgemäß ein erstes abweichendes Verhalten der drei Simulationen untereinander. Die letzten beiden Phasen sind dazu für eine detailliertere Ansicht in Abbildung 4.29 separat dargestellt.

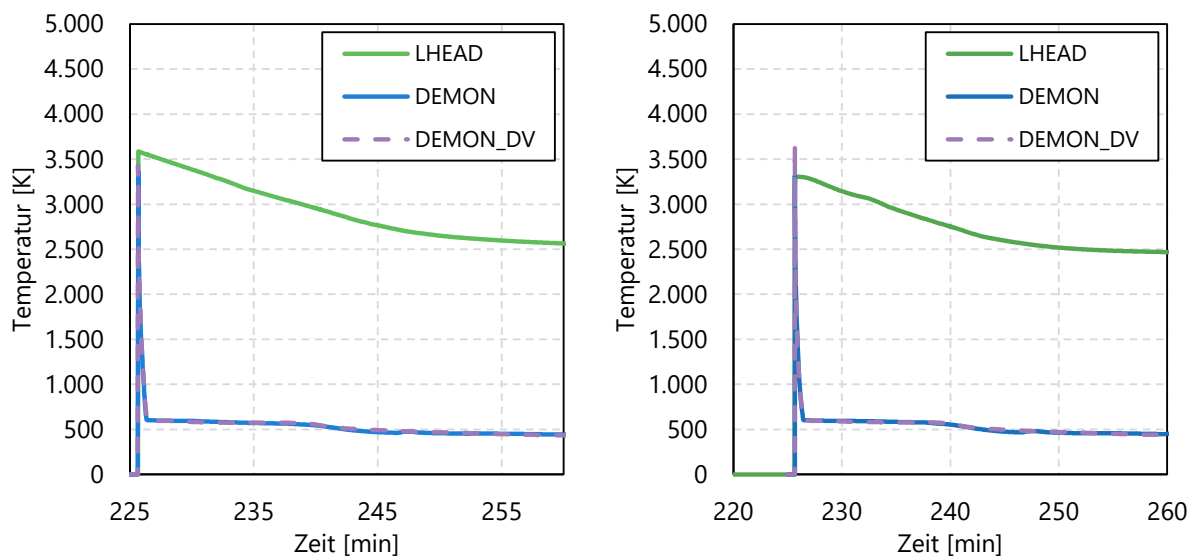


**Abbildung 4.29** Detailansicht Primärdruckverlauf in Phase 4 und 5

Der Verlauf der mit LHEAD durchgeführten Simulation zeigt mit Beginn der Verlagerung einen kurzzeitigen Druckanstieg um ca. 0,34 MPa und anschließend einen sinkenden Druckverlauf.

Im Weiteren Verlauf nimmt der Druck dann aufgrund der Wärmeübertragungsvorgänge zwischen Schmelze und der darüberliegenden Wasservorlage stetig, und dementsprechend im Vergleich zum Unfallverlauf deutlich verzögert, zu. Mit DEMON wird der Verlauf hingegen insgesamt in guter Übereinstimmung zum Unfall simuliert. Dies betrifft vor allem den aus der Interaktion von Kühlmittel und Schüttbett resultierenden Druckanstieg. Ohne die Berücksichtigung des Modellansatzes für Druckverluste (DEMON) wird der Anstieg mit ca. 4,7 MPa leicht überschätzt. In der Simulation DEMON\_DV wird der Unfallverlauf mit einem Anstieg um ca. 3,1 MPa deutlich verbessert abgebildet.

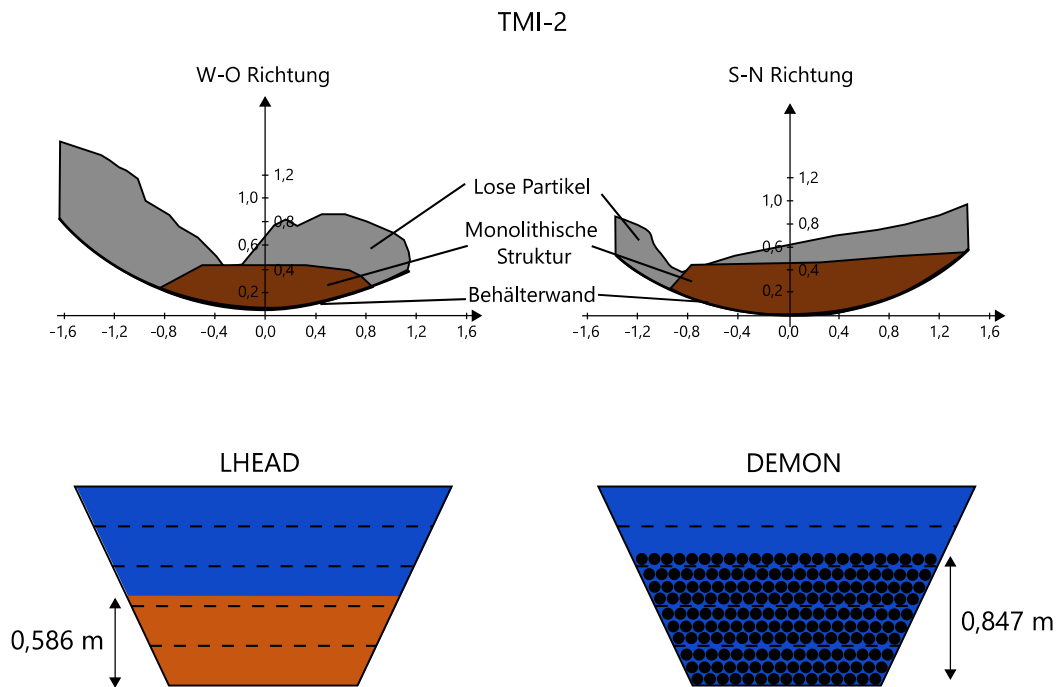
Abbildung 4.30 zeigt die Verläufe der thermischen Bedingungen innerhalb des simulierten Schüttbetts bzw. Schmelzepools exemplarisch auf zwei unterschiedliche Höhen im unteren Reaktorplenum. Ein Vergleich mit dem Unfall ist hier nicht möglich, da keine Daten zur Verfügung stehen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Temperaturen in den simulierten Schüttbetten sehr schnell fallen. Dies ist auf die hohen Wärmeströme zwischen Schüttbett und Wasservorlage zurückzuführen. Aufgrund der vereinfachten Annahmen wie der vollständigen Umwandlung der Schmelze in eine homogene Partikelschüttung wird der Wärmetransfer für eine sehr große Oberfläche berechnet. Mit LHEAD erfolgt die Wärmeabfuhr aus dem Schmelzepool über die Wasservorlage lediglich über die obere ausgebildete Kruste und ist im Vergleich entsprechend deutlich limitiert.



**Abbildung 4.30** Simulierte Temperaturen zerstörter Kernmaterialien im unteren Reaktorplenum auf einer Höhe von 0,131 m (links) und 0,393 m (rechts)

Die Ergebnisse von DEMON und LHEAD sind dementsprechend nur bedingt miteinander vergleichbar. Dies zeigt auch Abbildung 4.31, in der die unterschiedlichen Kernkonfigurationen im unteren Reaktorplenum in LHEAD und DEMON schematisch im Vergleich zum Unfall dargestellt sind. Während es in TMI-2 zur Ausbildung einer monolithischen Schicht mit einem

darüberliegenden Bett aus losen Partikeln gekommen ist, wird dies durch LHEAD bzw. DEMON stark vereinfacht anhand eines Schmelzepools bzw. einem vollständig umgewandelten Schüttbett simuliert.



**Abbildung 4.31** Konfiguration verlagelter Kernmaterialien in TMI-2 nach [MÜL06]

### 4.3.6 Zusammenfassung

Zur Erweiterung der AC<sup>2</sup> Modellbasis ist im Rahmen dieses Arbeitspunktes das Modell DEMON zur Abbildung von Schüttbetten entwickelt worden. Die Struktur des Modells soll es grundsätzlich erlauben sämtliche Schüttbetten, die während eines postulierten Unfalls potenziell entstehen können, abzubilden. Zur Anwendung im unteren Reaktorplenum konnte DEMON erfolgreich in den AC<sup>2</sup> - ATHLET-CD Quellcode implementiert werden.

Die Validierung des Modellumfangs erfolgte durch Simulationen der DEBRIS Versuchsreihe. Diese bestätigen eine grundsätzliche Eignung zur Simulation der Wiederflutung von trockenen und überhitzten Partikelschüttungen geeignet ist. Das thermische Verhalten, welches im Rahmen der DEBRIS Versuche beobachtet werden konnte, kann sowohl qualitativ als auch quantitativ in guter Näherung abgebildet werden. Dies unterstreicht auch ein Vergleich mit etablierten Codes wie ASTEC und COCOMO, die beide über eine weitentwickelte Modellbasis zur Abbildung von Schüttbetten verfügen. Ein Defizit lässt sich allerdings in Bezug auf die

Abbildung radialer Effekte herausstellen. Diese können mit DEMON aktuell noch nicht abgebildet werden, da die radiale Nodalisierung in den thermodynamischen Berechnungen durch das AC<sup>2</sup> Modul ATHLET aktuell noch nicht berücksichtigt wird.

Zur Überprüfung der Modellfunktionalität im Anlagenmaßstab sind zudem Nachrechnungen des Unfalls in Reaktorblock 2 des Kernkraftwerks TMI durchgeführt worden. Die Ergebnisse zeigen, dass die sich das Druckverhalten im Reaktordruckbehälter in Folge der Schmelzeverlagerung in das untere Reaktorplenum und der dadurch bedingten Interaktion von Schmelze und Kühlmittel im Vergleich zur aktuellen AC<sup>2</sup> - Modellbasis verbessert wiedergegeben wird. Dies gilt insbesondere für die Simulation unter Berücksichtigung reibungsbedingter Druckverluste in porösen Medien.

Für eine vertiefende Validierung sollten mit dem neu entwickelten Schüttbettmodell weitere experimentelle Nachrechnungen durchgeführt werden. Dies umfasst sowohl weitere Wiederrückflutungsexperimente sowie Versuche unter Siede- und Dryoutbedingungen, in denen ein bereits geflutetes Schüttbett schrittweise aufgeheizt wird. Geeignete Versuchsreihen sind, abgesehen von den DEBRIS Experimenten, die FLOAT Versuche, die ebenfalls am IKE in Stuttgart durchgeführt worden sind, sowie die PEARL und PRELUDE Experimente des IRSN. [LEI16; LEI17; PET24; REP13]

Weiterentwicklungspotential lässt sich vorrangig durch die Berücksichtigung weiterer physikalischer Phänomene identifizieren. Durch den Codeentwickler GRS wird aktuell an einem Modell zur Abbildung von Fragmentierungsvorgängen gearbeitet. Durch eine Erweiterung von DEMON könnte so der stark vereinfacht abgebildete Umwandlungsvorgang verbessert werden. Des Weiteren ist für den Fall einer unzureichenden Wärmeabfuhr aus dem Schüttbett ein potenzielles Wiederaufschmelzen zu berücksichtigen. Entsprechende Arbeiten werden durch PSS im Rahmen des neuen BMUV-Forschungsvorhabens „Modellierung Risikorelevanter Spätphasenphänomene in Leichtwasserreaktoren (MORIS)“ durchgeführt.

## 5 Bewertung der Modellbasis

Im Rahmen des hier bearbeiteten Vorhabens werden detaillierte Analysen der AC<sup>2</sup>-Modellbasis zur Abbildung störfallrelevanter In- und Ex-Vessel-Phänomene durchgeführt. Die zu untersuchenden Ex-Vessel-Phänomene umfassen dabei das Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Containment, Schmelze-Beton-Wechselwirkungen sowie Verbrennungsphänomene im Containment. Darüber hinaus werden Untersuchungen zu Druckstoßphänomenen und Kondensationseffekten im Primärkreislauf, der Freisetzung von Spaltprodukten aus einem Schmelzepool, unfalltoleranter Brennstoffe und von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum durchgeführt.

Die Ergebnisse zeigen, dass AC<sup>2</sup> bereits über eine weitentwickelte Modellbasis zur Abbildung der genannten Phänomene verfügt. Im Einzelnen werden Verbesserungs- und Weiterentwicklungspotentiale erkannt, die z. T. bereits im Rahmen des Vorhabens bearbeitet wurden. Die daraus resultierenden Erkenntnisse werden im Folgenden dargestellt und erläutert.

### *AFP2*

Im Rahmen des Vorhabens wurde Verbesserungspotential an den Modellen von AFP2 festgestellt und dem Codeentwickler mitgeteilt. Dies betrifft unter anderem das Rivulet-Modell, welches zu starken Instabilitäten in der Simulation führte. Dies konnte auf die niedrige Feuchte in Versuch FPT3 zurückgeführt werden. Darüber hinaus wurde ein Fehler in der Massenbilanz von Iod gefunden, welcher vom Codeentwickler mit der neuen Version 2023 bereits behoben wurde.

### *MCCI*

Bezüglich der Modellierung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung müssen vom Benutzer Parameter definiert werden, die einen erheblichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben. Dazu zählen zum einen die Zerstörungsparameter von Beton und die effektiven Wärmetranskoeffizienten, die den Wärmetransfer zwischen der Schmelze und dem Beton maßgeblich bestimmen. Damit die Parameter nicht mehr vom Benutzer bestimmt werden müssen, befindet sich ein entsprechendes Modell derzeit im Rahmen einer Dissertation in der Entwicklung. Für geflutete Schmelzen und die Zurückhaltung von Aerosolen durch die Wasserschicht ist aktuell kein Modell in AC<sup>2</sup> implementiert. Ergänzend zu dem beispielhaft implementierten Modell von Li et al. sollten weitere Modelle eingebunden werden, damit diese miteinander verglichen und besser bewertet werden können. Bezüglich der zu hoch abgebildeten Erosionen der COTELS-Experimente kann die in AC<sup>2</sup> nicht abgebildete Wärmeleitung im Beton ein möglicher Grund sein. Dazu sind weitere Analysen notwendig. Zudem werden weitere Vergleichsrechnungen zwischen AC<sup>2</sup> und MELCOR empfohlen.

### *Verbrennung*

Im Rahmen des vorliegenden Vorhabens wurden einige Vorschläge zur Verbesserung der Modellbasis von AC<sup>2</sup> - COCOSYS hinsichtlich der Verbrennung von Wasserstoff und Kohlenmonoxid gemacht. Dies umfasst die Konzepterstellung für die Erweiterung des Modells FRONT um eine Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre und die Einführung von alternativen Korrelationen für die Flammgeschwindigkeit.

Dennoch besteht weiteres Potenzial zur Verbesserung der Modellbasis. So fehlt beispielsweise weiterhin eine konsequente Berücksichtigung von Kohlenmonoxid im Modell FRONT. Kohlenmonoxid kann zum aktuellen Zeitpunkt durch das Modell FRONT unter Einsatz von Luftsauerstoff und Freisetzung von Wärme zu Kohlendioxid umgewandelt werden. Darüber hinaus wird Kohlenmonoxid ebenfalls im vorangehend genannten Konzept zur Modellerweiterung als brennbares Gas berücksichtigt und es liegen aus dem EU-Projekt AMHYCO neue Daten zur Flammgeschwindigkeit und zu Zündgrenzen von Gemischen mit Kohlenmonoxid vor, welche verwendet werden könnten. Weiterhin fehlen jedoch Daten zur konzentrationsabhängigen Ausbreitungsrichtung (aufwärts, horizontal, abwärts) in Atmosphären mit einem Brennstoffgemisch aus Wasserstoff und Luft. Weiterhin zeigt sich in der Validierung anhand von THAI-Versuchen eine konsequente Überschätzung der während der Verbrennung auftretenden Maximaltemperaturen durch COCOSYS um teilweise mehrere Hundert Grad Celsius, während gleichzeitig jedoch die erreichten Maximaldrücke adäquat wiedergegeben werden. Hier ist weitere Ursachenforschung notwendig. Hier ist beispielsweise eine limitierte Eignung der Stoffdatenbank von COCOSYS für die bei der Verbrennung auftretenden Temperaturbereiche zu vermuten.

### *Analyse der Kondensationsmodellbasis*

Die AC<sup>2</sup>-ATHLET Kondensationsmodellbasis im Bulk berechnet die Kondensationsraten insbesondere in Abhängigkeit des Wärmetransferkoeffizienten und der ZPF zwischen Wasser und Wasserdampf. Bei der Berechnung der ZPF werden die hinterlegten Strömungskarten zur Bestimmung des vorliegenden Mehrphasenregimes (dispers, Pfropfenströmung, Ringströmung, Übergangsströmung) verwendet. Hierbei werden fein zerstäubte Dampfblasen, die laut Experimenten von [ZHA20] während kondensationsinduzierten Druckstößen in horizontalen Leitungen vorliegen, aktuell nicht berücksichtigt und somit die ZPF und analog die Kondensationsraten potenziell unterschätzt. Zur Berücksichtigung der fein zerstäubten Dampfblasen während der Bulk-Kondensation wird die Berechnung der ZPF in Anlehnung an die im vorhandenen Verdampfungsmodell von Plesset und Zwick definierte Keimanzahl pro Einheitsvolumen angepasst. Durch diese Anpassung werden deutliche Verbesserungen bei der Simulation von kondensationsinduzierten Druckstoßexperimenten der Pilot-Plant-Pipe-work Testanlage erzielt. Für weitere Verbesserungen sollten die Strömungskarten bei der

Berechnung der Bulk-Kondensation entsprechend der fein zerstäubten Dampfblasen angepasst werden, da bei der vorgenommenen Anpassung die ganze Dampfphase als fein zerstäubt vorliegend angenommen wird.

#### *Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzpool im unteren Plenum*

Die Analyse der derzeitigen AC<sup>2</sup> Modellbasis wurde hinsichtlich der Frage, in welchem Maß sich die derzeit in ATHLET-CD verfügbaren Freisetzungsmodelle für eine Anwendung auf einen Schmelzpool eignen, durchgeführt. Anhand der Analyse der Simulationen der Schmelzpool-Experimente der Versuchsreihe LPP WP2-1 wurde Weiterentwicklungsbedarf hinsichtlich der SP-Modellbasis festgestellt. Mit den verwendeten Modellen besteht bei der Vorhersage der SP-Freisetzung eine hohe Unsicherheit. Insgesamt stellt sich heraus, dass die bestehenden Freisetzungsmodelle, welche die Freisetzung aus Brennstäben beschreiben, nicht für die Anwendung auf eine Schmelzpool-Konfiguration geeignet sind. Bei der eingehenden Untersuchung des derzeit implementierten Partialdruck-Modells wird eine hohe Abhängigkeit der Simulationsgüte von der Eignung der im Quellcode implementierten SP-spezifischen empirischen Koeffizienten in Bezug auf den Anwendungsbereich festgestellt. Darüber hinaus kann der Ursprung und die Gültigkeit wesentlicher Modellparameter nicht vollständig überprüft werden. Aus diesem Grund eignet sich dieses Freisetzungsmodell nicht für eine direkte Weiterentwicklung auf Basis der darin verwendeten Korrelationen.

Mit der Neuentwicklung eines SP-Freisetzungsmodells für eine Anwendung auf Schmelzepools, wie in Kapitel 4.1 dokumentiert, kann durch die Einbeziehung zusätzlicher Abhängigkeiten von den thermodynamischen Randbedingungen unter Verwendung gängiger Korrelationen und Gleichungen ein umfassenderes Verständnis des Freisetzungsverhaltens erreicht werden. Dies trägt zur Genauigkeit der Abbildung der Freisetzung relevanter SP-Spezies über den gesamten Unfallverlauf eines Kernschmelzeunfalls einschließlich der späten Unfallphase bei.

#### *ATF – Simulation unfalltoleranter Brennstoffe*

Die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten Analysen zeigen, dass die aktuelle AC<sup>2</sup>-Modellbasis Defizite bei der Abbildung von ATF-Konzepten wie FeCrAl-Legierungen und Cr-Beschichtungen aufweist. Für die Abbildung dieser Konzepte sind daher Neu- und/oder Weiterentwicklungen erforderlich. Aktuell ist ein vereinfachtes Modell für eine FeCrAl-Legierung mit definierter Zusammensetzung im aktuellen Release AC<sup>2</sup> 2021 verfügbar. Neuere Untersuchungen [KIM22] zeigen, dass die Oxidationskinetik je nach Temperaturniveau bedingt durch die unterschiedliche Oxidation der Bestandteile Cr, Al und Fe signifikant variiert. Insbesondere in höheren Temperaturbereichen wird die Oxidation unterschätzt. Eine Erweiterung um Oxidationskonstanten für relevante Temperaturbereiche würde eine dem aktuellen Forschungs- und Entwicklungsstand entsprechende Modellbasis für FeCrAl-Legierungen gewährleisten. Eine

aktuelle Korrelation ist daher in eine PSS interne Testversion von AC<sup>2</sup> implementiert worden und hebt den Einfluss der unterschiedlich dominierenden Kinetik hervor. Die gewonnenen Erkenntnisse sind dem Codeentwickler GRS kommuniziert worden und es wird aktuell an der Weiterentwicklung bei GRS gearbeitet.

Zur Abbildung der Oxidation anderer Materialien, wie z.B. Cr, muss im aktuellen Release die Modelloption 22 für die ATHLET/-CD Routinen IOXMOD für Kernkomponenten und MODOXI für wärmeleitende Strukturen genutzt werden. Diese sind jedoch nur eingeschränkt nutzbar, da die Molmassen von FeCrAl verwendet werden und es auf eine Oxidationskonstante limitiert ist. Eine entsprechend aktualisierte Modellbasis für Cr-Beschichtungen würde die adäquate Untersuchung sicherheitstechnischer Fragestellungen, aktueller Entwicklungen und Experimente ermöglichen.

Die Neuentwicklung eines ersten Modells zur Oxidation von Cr-beschichteten Hüllrohren ist im Rahmen dieses Vorhabens erfolgreich abgeschlossen worden. Im Bereich 1.073 K bis ca. 1.573 K erfolgt die Oxidation von Cr, anschließend die Oxidation des darunter liegenden Zr-basierten Hüllrohrs. Temperaturabhängig findet daher ein gradueller Wechsel der Kinetik von Cr zu Zr statt. Dies stellt den komplexen Prozess des Schichtversagens nahe der eutektischen Temperatur vereinfacht dar. Zusätzlich erfolgt analog die Berechnung der reaktionsspezifischen Oxidationswärme von Cr und Zr. Weiterentwicklungspotential bietet beispielsweise eine detailliertere Abbildung des Versagensprozesses und die Analyse sowie ggf. Weiterentwicklung des Oxidationsverhaltens oberhalb der eutektischen Temperatur bei Verfügbarkeit entsprechender experimenteller Untersuchungen.

#### *Schüttbetten im unteren Plenum*

Die AC<sup>2</sup> Modellbasis ist im Rahmen dieses Vorhabens zur Abbildung von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum durch das Modell DEMON erweitert worden. Mit den aktuell in AC<sup>2</sup> vorhandenen schnellrechnenden LP-Modulen LHEAD und AIDA ist dies nicht bzw. nur in eingeschränktem Umfang möglich. Die Umwandlung der Schmelze in ein Schüttbett wird durch das Modell anhand eines vereinfachten Ansatzes abgebildet. Die Berechnung des entstehenden Schüttbettvolumens erfolgt dabei anhand einer Reduzierung des geometrischen Volumens. Der Codeentwickler GRS arbeitet derzeit an Codeerweiterungen zur Abbildung von Fragmentierungsphänomenen sowie zur Berücksichtigung poröser Volumen in den thermohydraulischen Modellen des Codemoduls ATHLET. Mit Fertigstellung der Arbeiten können diese künftig auch in dem vorliegenden Schüttbettmodell genutzt werden. Darüber hinaus kann mit dem Modell der Wärmeübergang durch Konvektion, Wärmeleitung sowie Strahlung abgebildet werden. Im Rahmen eines Promotionsverfahrens ist das Modell zudem durch die Berücksichtigung reibungsinduzierter Druckverluste in porösen Medien erweitert worden [PES24].

Weiterentwicklungspotential lässt sich in Bezug auf die Simulation thermohydraulischer Vorgänge im unteren Plenum ableiten, welche derzeit nur vereinfacht von ATHLET abgebildet werden können. Dazu wurde die Erweiterung der radialen Nodalisierung des Kernbereichs anhand mehrerer Strömungspfade auf das untere Plenum diskutiert. Des Weiteren sind im Rahmen des Forschungsvorhabens „Modellierung Risikorelevanter Spätphasenphänomene in Leichtwasserreaktoren (MORIS)“, welches unter dem Kennzeichen BMUV 1501683 gefördert wird, Arbeiten von PSS für ein erneutes Aufschmelzen des Schüttbetts geplant. Dies ist relevant für Szenarien, in denen eine ausreichende Kühlung der entstandenen Partikel nicht möglich ist. Darüber hinaus ist eine weiterführende Validierung des entwickelten Modells geplant. Die Entwicklung einer eigenständigen Modellumgebung zur Abbildung von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum konnte erfolgreich abgeschlossen werden.

## 6 Literaturverzeichnis

- [ABD81] Abdel-Gayed, R. G.; Bradley, D.: *A two-eddy theory of premixed turbulent flame propagation*, in: Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 301. Jg., 1981, H. 1457, S. 1 - 25.
- [AGE17] Agethen, K.: *Erweiterung der Systemcodes ASTEC und COCOSYS zur Analyse der Spaltproduktfreisetzung während Schmelze-Beton-Wechselwirkung*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2017.
- [ALK83] Al-Khishali, K.; Bradley, D.; and Hall, S.: *Turbulent combustion of near-limit hydrogen-air mixtures*. Combust. Flame 54: 61–70, 1983. DOI: 10.1016/0010-2180(83)90022-6.
- [ALS86] Alsmeyer, H. et al.: *BETA experiments in Verification of the Wechsl Code: Experimental Results on the Melt-Concrete Interaction*. Bd. 103(1) S. 115-125, Nuclear Engineering and Design, DOI: 10.1016/0029-5493(87)90289-5, 1986.
- [ALS92] Alsmeyer, H. et al.: *Second OECD (NEA) Specialist Meeting on Molten Core Debris-Concrete Interactions*. NEA/CSNI/R-(1992)10, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, 1992.
- [ALS95A] Alsmeyer, H.; Cenerino, G.; Cordfunke E.H. P.; Fioravanti, D.; Fischer, M.; Foit, J. J.; Howe, L.D.; Huntelaar, M.E.; Locatelli, S; Parozzi, F.; Szabo, I.; Turland, B.D.; Vidard, M.; Wegener, D.: *Molten corium/concrete interaction and corium coolability – A state of the art report*. Report, EUR 16649 EN, European Commission - Nuclear Science and Technology, Brüssel, Belgien, 1995.
- [ALS95B] Alsmeyer, H.; Adelhelm, C.; Dillmann, H.-G.; Foit, J.J.; Heinle; M.; Ratajczak, W.; Schneider, H.; Schumacher, G.; Skokan, A.; Stiefel, S.; Tromm, W.: *BETA experiments on melt-concrete interaction: the role of Zirconium and the potential sump water contact during melt-down accidents*. Bd. 154, S. 61-68, Nuclear Engineering and Design, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, DOI: 10.1016/00295493(94)00898-9, 1995.
- [ALT03] Altstadt, E.; Carl, H.; Weiss, R.: *Fluid-Structure Interaction Investigations for Pipelines*. Technischer Fachbericht FZR-393, Forschungszentrum Rossendorf, Dresden, ISSN 1437-322X, 2003.

- [ARN21] Arndt, S.; Band, S.; Beck, S.; Eschricht, D.; Iliev, D.; Klein-Heßling, W.; Nowack, H.; Reinke, N.; Sonnenkalb, M.; Spengler, C.; Weber, G.; Brückner, N.: *COCOSYS 3.1 User Manual*. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-P-3 / Vol. 1, Köln, 2021.
- [AUS15] Austregesilo, H.: *Modelling of the lower head of a BWR with the code ATHLET-CD*. Technische Notiz, GRS, TN-AUH-01/15, 2015.
- [BAK10] Bakardjieva, S.; Barrachin, M.; Bechta, S.; Bottomley, D.; Brissoneau, L.; Cheynet, B.; Fischer, E.; Journeau, C.; Kiselova, M.; Mezentseva, L.; Piluso, P.; Wiss, T.: Improvement of the European thermodynamic database NUCLEA. *Progress in Nuclear Energy*, 52(1), 84-96, 2010.
- [BAN16] Band, S. et al.: *Fukushima Daiichi, Unfallablauf | Radiologische Folgen. 5. Auflage*, GRS-S-56, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2016. ISBN 978-3-944161-86-0.
- [BAZ96] Bažant, Z.P.; Kaplan, M.F.: *Concrete at High Temperatures: Material Properties and Mathematical Models*. Essex: Longman Group. S. 412, ISBN 0-582-08626-4, 1996.
- [BEN99] Benson C G, Bechta S, B R Bowsher et al. Fission Product Release from Molten Pools: Final Report, AEAT-5893, August, 1999.
- [BER03A] Berlepsch, T. v.; Kissane, M. P.; Kleinhietpaß, I.; Plumecocq, W.; Reinke, N.; Koch, M. K.; Unger, H.; Wagner, H.-J.: Late Phase Source Term Phenomena – Model Development Final Report –, FIKS-CT-1999-00005, Bochum, Cadarache, SAM-LPP-D29, 2003.
- [BER03B] Berlepsch, T. v., Kissane, M. P., Kleinhietpaß, I., Plumecocq, W., Reinke, N., Koch, M. K., "Late-Phase Source-Term Phenomena: Analysis of Experiments: Note Technique SEMAR 03/29," IRSN, Cadarache, SAM-LPP-D30, 2003.
- [BOC22] Bocanegra, R.; Herranz, L. E.: *CIEMAT's outcomes from the PHEBUS-FPT1 un-certainty analysis in the framework of the EU-MUSA project*. The 10th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR2022), Karlsruhe, 2022. DOI: 10.5445/IR/1000151444.
- [BRA16] Bratfisch, C.; Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Simulation des Unfalls in Fukushima Daiichi zur Bewertung von ATHLET-CD*. Abschlussbericht zum Vorhaben BMBF 02NUK028G (WASA-BOSS), Lehrstuhl Energiesysteme und Energiewirtschaft, AG Reaktorsimulation und -sicherheit, LEE-97, Februar 2016.

- [BRA19] Bratfisch, C.; Stahlberg, G.; Koch M.K.: *Simulation von Druckstoßphänomenen in kerntechnischen Anlagen mit ATHLET*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501522, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-6, 2019.
- [BRA20] Brachet, J. C. et al.: *High temperature steam oxidation of chromium-coated zirconium-based alloys: Kinetics and process*. Corrosion Science 167, 2020. DOI: 10.1016/j.corsci.2020.108537.
- [BRA21] Bratfisch, C.; Hoffmann, M.; Hoffrichter, J.; Jankowski, T.; Krist, F.; Peschel, J.; Stahlberg, G. T.; Koch, M.K.: *Externe Validierung und Modellanalyse der Codesysteme AC<sup>2</sup> und ASTEC mit unterstützenden CFD-Detailanalysen*. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501568, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-19, 2021.
- [BRA22] Bratfisch, C.; Fuchs, P.; Koch, M. K.: *Analyse, Weiterentwicklung und Validierung der AC<sup>2</sup>-Kondensationsmodellbasis*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-23, 2022.
- [BRI13] Brilliant, G.; Marchetto, C.; Plumecocq, W.: *Fission product release from nuclear fuel I. Physical modelling in the ASTEC code*. Annals of Nuclear Energy, 61, 88-95, 2013.
- [BRO89] Broughton, J. M.; Kuan, P.; Petti, D. A.; Tolman, E. L.: *A Scenario of the Three Mile Island Uni 2 Accident*. Idaho National Engineering Laboratory, EG&G Idaho Inc., 1989.
- [DUD03] Dudlik, A.: *Data Evaluation Report on PPP water hammer tests, cavitation caused by rapid valve closing*. Fraunhofer Institut Umwelt-, Sicherheits-, Energietechnik UMSICHT, 2003.
- [ESC95] Escudero Berzal, M.; Marcos Crespo, M. J.; Swiderska-Kowalczyk, M.; Martin Espigares, M.; Lopez Jimenez, J.: *State-of-the-art Review on Fission Products Aerosol Pool Scrubbing under Severe Accident Conditions*. Report EUR-16241-EN, Luxembourg, Belgium, 1995.
- [FAR04] Farmer, M.T.; Lomperski, S.: *OECD MCCI Project Long-Term 2-D Molten Core Concrete Interaction (CCI) Test: CCI-1 Test Data Report-Thermalhydraulic Results*. Rev. 0, OECD/MCCI-2004-TR01, Reactor Analysis and Engineering Division, Argonne National Laboratory, U.S. Nuclear Regulatory Commission, USA, 2004.

- [FAR06] Farmer, M.T.; Lomperski, S.; Kilsdonk, J.; Aeschlimann, W.: *OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: Final Report*. OECD/MCCI-2005-TR05, Argonne National Laboratory, 2006.
- [FAR10A] Farmer, M.T.; Aeschlimann, W.; Kilsdonk, J.; Lomperski, S.: *OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: CCI-4 Final Report*. OECD/MCCI-2007-TR06, Argonne National Laboratory, 2010.
- [FAR10B] Farmer, M.T.; Kilsdonk, J.; Aeschlimann, W.; Lomperski, S.: *OECD MCCI Project Category 4 Integral Test to Validate Severe Accident Codes: Core-Concrete Interaction Test Six (CCI-6) Final Report*. OECD/MCCI-2010-TR04, Argonne National Laboratory, 2006.
- [FEC08] Feck, N.: *Monte-Carlo-Simulation bei der Lebenszyklusanalyse eines Hot-Dry-Rock-Heizkraftwerkes*, Zugl.: Bochum, Univ., Diss., 2008. Schriftenreihe des Lehrstuhls für Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-Universität Bochum, Bd.20, LEE, Bochum, 2008, ISBN: 978-3-934951-22-8.
- [FER19] Fernandez-Moguel, L., A. Rydl, and T. Lind: *Updated analysis of Fukushima Unit 3 with MELCOR 2.1. Part 2: Fission product release and transport analysis*. *Annals of Nuclear Energy* 130 (2019): 93-106. DOI: 10.1016/j.anucene.2019.02.017.
- [FIN92] Fink, J.K.; Thompson, D.H.; Spencer, B.W.; Sehgal, B. R.: *Aerosol released during large-scale integral MCCI tests in the ACE program*. ANL/CP-74552, Argonne National Laboratory, 1992.
- [FOI19] Foit, J.J.; Cron, T.; Fluhrer, B.: *Melt/Concrete Interface Temperature relevant to MCCI Process*. Proceedings of ERMSAR2019, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Prag, Tschechien, 2019.
- [FRE16] Freitag, M.; Kühnel A.; Langer, G.: *Extension of the THAI test facility by a second vessel: THAI+*. Technical Report - Reactor Safety Research - Project No. 1501455. Becker Technologies GmbH, 1501455 – FB/TR – THAIPLUS, Esch-born, 2016.
- [FRE17] Freitag, M.; Laufenberg, B. von; Schmidt, E: *Wasserstoffdeflagrationsversuche in einer Zweiraumversuchsanlage Versuchsserie HD-36 – HD-39. Ein- und Mehrraumversuche zum Spaltprodukt- und Wasserstoffverhalten im Sicherheitsbehälter, (THAI V)*. Becker Technologies GmbH, 1501455 – TR – HD36-39, Eschborn, 2017.

- [FUC21] Fuchs, P.H.; Koch, M.K.: *Simulation und Analyse von Wasserhammer Phänomenen mit OpenFOAM und ATHLET – KEK*. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501579, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-21, 2021.
- [GAU22] Xiaoyang; G.-L.; Cron, T.; Bottomley, D.; Fluhrer, B.: *MCCI on Siliceous and LCS Concrete with Oxide and Metallic Melt: Re-Evaluation of MOCKA Experiments*. Proceedings of NURETH-19, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Brüssel, Belgien, 2022.
- [GHO10] Ghoshal, S.; Zeman, F.: *Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) capture and storage technology in the cement and concrete industry*. Woodhead Publishing Series in Energy, Developments and Innovation in Carbon Dioxide (CO<sub>2</sub>) Capture and Storage Technology, Woodhead Publishing, Vol. 1, S. 469-491, ISBN 978-1-845695-33-0, 2010.
- [GIO04] Giot, Michael: *Two-Phase flow water hammer transient and induced loads on materials and structures of nuclear power Plants (WAHALoads)*. Abschlussbericht zum EU-Forschungsprojekt WAHALoads, FIKS-CT-2000-00106, 2004.
- [GRS21] Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: *ATHLET Models and Methods v3.3*. Theoriehandbuch, GRS-P-1/Vol. 4, Rev. 6, 2021.
- [GUO21] Guo, Z.; Dailey, R.; Feng, T.; Zhou, Y.; Sun, Z.; Corradini, M. L.; Wang, J.: *Uncertainty analysis of ATF Cr-coated-Zircaloy on BWR in-vessel accident progression during a station blackout*. Reliability Engineering & System Safety 213, 2021. DOI: 10.1016/j.ress.2021.107770
- [GUP15] Gupta, S.; Poss, G.; Freitag, M.; Schmidt, E.; Colombet, M.; Laufenberg, B. von; Kühnel A.; Langer, G.; Funke, F.; Langrock, G.; Weber, G.; Sonnenkalb, M.: *Aerosol and Iodine Issues and Hydrogen Mitigation under Accidental Conditions in Water Cooled Reactors (Restricted Version)*. OECD-NEA THAI-2 Project - Final Report. Becker Technologies GmbH, Report No. 1501420-FR-1, Eschborn, 2015.
- [GUP17] Gupta, S.; Freitag, M.; Schmidt, E.; Colombet, M.; Laufenberg, B. von; Kühnel A.; Langer, G.; Funke, F.; Langrock, G.: *Ein- und Mehrraumversuche zum Spaltprodukt- und Wasserstoff-Verhalten im Sicherheitsbehälter – THAI-V*. Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben-Nr.: 1501455. Becker Technologies GmbH; AREVA GmbH, 1501455-FR, Eschborn, Erlangen, 2017.

- [HAS11] Haste, T.; Payot, F.; Manenc, C.; Clément, B.; March, P.; Simondi-Teisseire, B.; Zeyen, R.: *FPT3: Overview of Main Results Concerning the Behaviour of Fission Products and Structural Materials in the Containment*. 20<sup>th</sup> International Conference Nuclear Energy for New Europe, Bovec, Slovenia, 2011.
- [HAS13] Haste, T.; Payot, F.; Manenc, C.; Clément, B.; March, P.; Simondi-Teisseire, B.; Zeyen, R.: *Phébus FPT3: Overview of main results concerning the behaviour of fission products and structural materials in the containment*, in: *Nuclear Engineering and Design*, 261. Jg., S. 333 - 345, 2013.
- [HEI95] Heitsch, M.: *Das Verbrennungsmodell DECOR für das Programmsystem RALOC mod4.0*, GRS-A-2292, 1995.
- [HOF20] Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Ex-Vessel Phänomene während MCC1 mit COCOSYS*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501568. PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-13, Bochum, 2020.
- [HOF21] Hoffrichter, J.; Koch, M. K.: *Simulation von Wasserstoffdeflagration in einer Mehrraumgeometrie mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS*, Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMWi 1501568. PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-16, Bochum, 2021.
- [HOF23A] Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Aerosolfreisetzung bei gefluteten Schmelzen und Weiterentwicklung des Wärmetransfers zwischen Schmelze und Beton mit AC<sup>2</sup>*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-24, Bochum, 2023.
- [HOF23B] Hoffrichter, J.; Jankowski, T.; Richter, N.; Koch, M. K.: *Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup>-Modellbasis hinsichtlich des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitsbehälter mit ergänzender Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-26, 2023.
- [HOF23C] Hoffrichter, J.; Koch, M. K.: *An approach for an extension of the deflagration model in containment code system COCOSYS to separate burned and unburned atmosphere via junctions*, in: *Kerntechnik*, 88. Jg., 2023, H. 4, S. 385 - 398.
- [HOL21] Hollands, T.; Austregesilo, H.; D'Alessandro, C.; Lovasz, L.; Pandazis, P.; Tiborcz, L.; Wielenberg, A.: *ATHLET-CD 3.3 - Validation*. GRS, GRS-P-4 / Vol. 3, 2021.

- [HOL23] Hollands, T.; Stahlberg, G. T.; Gabrielli, F.; Koch, M. K.: *Simulation of QUENCH-03 and -15 Scenarios with the Code AC<sup>2</sup> modified for Cr-coated Claddings compared with ASTEC*. Proceedings of the 28th International QUENCH Workshop, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, September 2023.
- [INC07] Incropera, F. P.; DeWitt, D. P.; Bergman, T. L.; Lavine, A. S.: *Fundamentals of heat and mass transfer*, 6<sup>th</sup> ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2007.
- [IRS07] IRSN - Institut de radioprotection et de surete nucleaire: *PHEBUS FP – Data Book FPT3*, PHEBUS PF Document IP/07/575, Note technique NT 2007-253, 2007.
- [IRS11] IRSN - Institut de radioprotection et de surete nucleaire: *Final Report FPT3 - PHEBUS PF*. Institut de radioprotection et de surete nucleaire (IRSN), IRSN Document PF IP/10/587, Saint Paul-lez-Durance Cedex, Frankreich, 2011.
- [JAH80] Jahn, H. L.: *Zur Wasserstoffverteilung nach einem Kühlmittelverlust-Störfall in unterteilten Sicherheitsbehältern von Leichtwasser-Reaktoren*. Dissertation an der Fakultät für Maschinenwesen, Technische Universität München, München, 1980.
- [KAI01] Kaiser, A.; Schütz, W.; Will, H.: *PREMIX experiments PM12-PM18 to investigate the mixing of a hot melt with water*. Wissenschaftlicher Bericht, FZKA Karlsruhe, FZKA-6380, Karlsruhe, 2001, DOI: 10.5445/IR/270050172.
- [KAN08] Kanzleiter, T.; Langer, G.: *Hydrogen Deflagration Tests HD-15, HD-16, HD-17, HD-18, HD-19, HD-20 and HD-24*. Quick Look Report, OECD-NEA THAI Project. Becker Technologies GmbH, Report No. 150 1326–HD-QLR 3, 2008.
- [KAT18] Katzy, P.; Sattelmayer, T.: *Entwicklung und Validierung eines effizienten Modellierungskonzeptes für die Wasserstoffverbrennung mit hohem Luftüberschuss*, Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung - Vorhaben Nr. 151485. Technische Universität München, München, 2018.
- [KAT20] Katzy, P.: *Combustion Model for the Computation of Flame Propagation in Lean Hydrogen-Air Mixtures at Low Turbulence*. Dissertation, Technische Universität München, Sattelmayer, T.; Koch, M. K., München, 23.12.2020.
- [KHA02] Khabensky, V. B.; Gusarov, V. V.; Bechta, S. V. et al.: *Late Phase Source Term Phenomena: Oxidic Melt Experiments (WP2)*. Leningrad Specialised Integrated Plant (LSK) "Radon", 5th Euratom Framework Programme 1998-2002, SAM-LPP-D10, 2002.

- [KHA21] Khatib-Rahbar, M.; Kral, A.; Yuan, Z.; Zavisca, M.: *Review of Accident Tolerant Fuel Concepts with Implications to Accident Progression and Radiological Releases*. NUREG/CR-7282, Energy Research Inc., 2021.
- [KIM16] Kim, H.; Kim, I.; Jung, Y.; Park, D.; Yang, J.; Koo, Y.: *Development of Surface Modified Zr Cladding by Coating Technology for ATF*. Top Fuel 2016 - LWR Fuels with Enhanced Safety and Performance, Boise, Vereinigte Staaten, 2016.
- [KIM22] Kim, C.; Tang, C.; Grosse, M.; Maeng, Y.; Jang, C.; Steinbrueck, M.: *Oxidation mechanism and kinetics of nuclear-grade FeCrAl alloys in the temperature range of 500 °C-1500 °C in steam*. Journal of Nuclear Materials 564, 2022. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2022.153696.
- [KOT12] Kotchourko, A.; Bentaib, A.; Fischer, K.; Chaumeix, N.; Yanez, J.; Benz, S.; Kudriakov, S.: *ISP-49 on Hydrogen Combustion*, Final Report, NEA/CSNI/R(2011)9, 2012.
- [KRI24] Krist, F.; Koch, M. K.: *Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzpool*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, im internen Review, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-32, 2024.
- [KRU10] Kruse, P.; Koch, M. K.: *Simulation of the In-Pile Test Phebús FPT-3 Using the System Codes ASTEC and ATHLET-CD*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501356, Ruhr-Universität Bochum, LEE-62, Bochum, 2010.
- [KUM83] Kumar, R. K.; Tamm, H.; Harrison, W. C.: *Combustion of Hydrogen-Steam-Air Mixtures near Lower Flammability Limits*, in: Combustion Science and Technology, 33. Jg., 1983, 1-4, S. 167 - 178.
- [LEI16] Leininger, S.; Kulenovic, R.: *Experimentelle Untersuchungen zu Kühlbarkeit und Fluten prototypischer Schüttbett-Konfigurationen - Phase I: Siede- und Dryoutexperimente*. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501507, Universität Stuttgart, IKE 5-267, 2016.
- [LEI17] Leininger, S.; Kulenovic, R.: *Experimentelle Untersuchungen zu Kühlbarkeit und Fluten prototypischer Schüttbett-Konfigurationen - Phase II: Flutexperimente*. Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501507, Universität Stuttgart, IKE 5-269, 2017.
- [LI21] Li, Y.; Tong, I.; Cao, X.: *Experimental Study on Influencing Factors of Aerosol Retention by Pool Scrubbing*. School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China, 2021.

- [LIN98] Linnemann, T.; Koch, M. K.; Unger, H.: *Review of the TMI-2 Accident and Late Phase SFD Code Modeling with View on Material Movement to and Behaviour in the Lower Head*. Technischer Bericht, RUB, Department for Nuclear and New Energy Systems, RUB E-193, INV-COBE(98)-D008, 1998.
- [LIN21] Lind, T. et al.: *Overview and outcomes of the OECD/NEA benchmark study of the accident at the Fukushima Daiichi NPS (BSAF), Phase 2-Results of severe accident analyses for unit 3*. Nuclear Engineering and Design 376 (2021): 111138.
- [LIU21] Liu, Junkai; Tang, Chongchong; Steinbrück, Martin; Yang, Jianqiao; Stegmaier, Ulrike; Große, Mirco; Di Yun; Seifert, Hans Jürgen: *Transient experiments on oxidation and degradation of Cr-coated Zircaloy in steam up to 1600 °C*. Corrosion Science, 192, 2021. DOI: 10.1016/j.corsci.2021.109805.
- [LOR95] Lorenz, R. A.; Osborne, M. F.: *A Summary of ORNL Fission Product Release Tests With Recommended Release Rates and Diffusion Coefficients*, NUREG/CR-6261, ORNL/TM-12801. Oak Ridge, USA, 1995.
- [LOV21] Lovasz, L.; Austregesilo, H.; Bals, C.; Hollands, T.; Köllein, C.; Luther, W.; Pandazis, P.; Schubert, J.-D.; Tiborcz, L.; Weber, S.; Wielenberg, A.: *ATHLET-CD 3.3 - User's Manual - Input Data Description*. Benutzerhandbuch, GRS-P-4 / Vol. 1, 2021.
- [LOV23] Lovasz, L., Austregesilo, H., Bals, C., D'Alessandro, C., Hollands, T., Lu, C., Pandazis, P., Tiborcz, L., Weber, S.: *ATHLET-CD 3.4 Models and Methods*. GRS-P-4/Vol. 2 Rev. 0, November 2023.
- [MAS86] Masterton, W.L.; Slowinski, W.J.; Stanitski, C.L.: *Chemical principles with qualitative analysis*. CBS College Publishing, ISBN 978-0-030-62646-3, 1986.
- [MIC05] Michalik, M.; Hänsel, M.; Zurek, J.; et al.: *Effect of water vapour on growth and adherence of chromia scales formed on Cr in high and low pO<sub>2</sub>-environments at 1000 and 1050°C*. Materials at High Temperatures 22 (3-4), 213-221, 2005. DOI: 10.1179/mht.2005.025
- [MÜL06] Müller, C. W.: *Review of debris bed cooling in the TMI-2 accident*. Nuclear Engineering and Design, Vol. 236, S. 1965-1975, 2006, DOI: 10.1016/j.nucengdes.2006.03.028.
- [NAG99] Nagasaka, H., et al.: *COTELS Project (1): Overview of Project to study FCI and MCCI during a Severe Accident*. OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability. Forschungszentrum Karlsruhe, 15-18. November 1999.

- [OEC24] OECD NEA: *QUENCH-ATF project*. [https://www.oecd-neo.org/jcms/pl\\_36597/quench-atf-project](https://www.oecd-neo.org/jcms/pl_36597/quench-atf-project), Zugriff am 20. Februar 2024.
- [PEL12] Pelzer, M.: *Validation of ASTEC CPA: FRONT Module Parameter Study on Hydrogen Deflagration Experiments*, Rev 0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH; Institut de radioprotection et de surete nucleaire (IRSN), ASTEC/DOC/12-04, 2012.
- [PES20] Peschel, J.; Koch, M. K.: *Wiederflutung zerstörter Kerne mit ASTEC*. Technischer Fachbericht, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-11, 2020.
- [PES23] Peschel, J.; Koch, M. K.: *Entwicklung eines Modells zur Simulation von Schüttbetten in AC<sup>2</sup>*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-25, 2023.
- [PES24] Peschel, J.: *Erweiterung der Spätphasen-Modellbasis des Systemcodes AC<sup>2</sup> zur Simulation von Schüttbetten*. Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2024 (das Promotionsvorhaben wird voraussichtlich am 1.8.2024 beendet).
- [PET99] Peters, N.: *The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence*, in: *Journal of Fluid Mechanics*, 384. Jg., 1999, vol. 384, S. 107 - 132, Cambridge University Press.
- [PET24] Petroff, M.: *Untersuchung der Kühlbarkeitsgrenzen von Schüttungen im PostDryout Siedebereich sowie beim Fluten in Anwesenheit nicht-kondensierbarer Gase zur Validierung von COCOMO-3D*. Dissertation, Institut für Kernenergetik und Energiesysteme, IKE 2-171, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2024.
- [REI19] Reinke, N.; Arndt, S.; Bakalov, I.; Band, S.; Beck, S.; Buchholz, S.; Eschricht, D.; Klein-Heßling, W.; Iliev, D.; Nowack, H.; Spengler, C.; Stewering, J.; Sonnenkalb, M.: *Validierung & Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC*. GRS-551, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2019. ISBN: 9783947685363.
- [REP13] Repetto, G.; Garcin, T.; Eymery, S.; Fichot, F.: *Experimental program on debris reflooding (PEARL) – Results on PRELUDE facility*. *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 264, S. 176–186, 2013, DOI: 10.1016/j.nucengdes.2012.11.024.

- [SAK00] Sakaki, I.; Kato, M.; Nagasaka, H.: *COTELS Ex-Vessel Debris Coolability Tests*. JAERI-Conf 2000-015, S. 286 – 293, Systems Safety Department, Nuclear Power Engineering Corporation, Japan, 2000.
- [SCH11] Schmelzer, J.W.P; Röpke G.; Priezzhev V.B.: *Nucleation Theory and Applications*. Joint Institute for Nuclear Research (JINR), 2011, ISBN: 978-5-9530-0301-8.
- [SCH17] Schramm, B. A.; Stewering, J.; Sonnenkalb, M.: *Einsatz von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss. Validierung und gezielte Modellerweiterung*, Bd.GRS-472, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2017, ISBN: 9783946607557.
- [SON18] Sonnenkalb, M.; Band, S.; Richter, C.; Sogalla, M.: *Unfallablauf- und Quelltermanalysen zu den Ereignissen in Fukushima im Rahmen des OECD/NEA BSAF-Projektes Phase II*. GRS-485, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, April 2018. ISBN 978-3-946607-69-4.
- [SPE18] Spengler, C.: *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 Proceedings of NUTHOS-12, Qingdao, China, 2018.
- [STA22] Stahlberg, G. T.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Preliminary simulation results of the experiments QUENCH-L3HT and QUENCH-ATF-1 regarding high-temperature oxidation mechanisms using the system code AC<sup>2</sup>*. 27th International QUENCH Workshop Proceedings, 2022. DOI 10.5445/ir/1000152245
- [STA23A] Stahlberg, G. T.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Comparative analyses of the QUENCH experiments L3HT and ATF-1 on high temperature oxidation mechanisms using AC<sup>2</sup>*. Proceedings of the NURETH-20, Washington, D.C., S. 5450–5461, 2023. DOI: 10.13182/nureth20-39989.
- [STA23B] Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *Development of a preliminary model for Cr-coated Claddings for System Codes*. 28<sup>th</sup> International QUENCH Workshop Proceedings. 2023. DOI: 10.5445/IR/1000165938.

- [STA24A] Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *Modeling of Oxidation Behavior of Accident Tolerant Fuel by using AC<sup>2</sup>*. Proceedings of the 11th European Review Meeting on Severe Accidents Research (ERMSAR 2024), KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, 2024. DOI: 10.5445/IR/1000174165/v2.
- [STA24B] Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *ATF - Simulation unfalltoleranter Brennstoffe*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, im internen Review, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-31, 2024.
- [STU14] Stuckert, J.; Grosse, M.; Moch, J.: *First results of the high temperature bundle test QUENCH-L3HT with optimized ZIRLO claddings*. 20th International QUENCH Workshop, Karlsruhe, 2014. DOI: 10.5445/IR/240097756
- [STU18] Stuckert, J. et al.: *Results of the LOCA bundle test QUENCH-L3 with optimized ZIRLO™ claddings (SR-7737)*, 2018. DOI: 10.5445/IR/1000083087.
- [STU22] Stuckert, J. et al.: *Results of the bundle test QUENCH-19 with FeCrAl claddings*. 2022. DOI: 10.5445/IR/1000148370.
- [TER18] Terrani, Kurt A.: *Accident tolerant fuel cladding development: Promise, status, and challenges*. Journal of Nuclear Materials 501, 2018. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.12.043
- [TOP21] Topin, V.; Carenini, L.; Coindreau, O.; Laborde, L.: *ASTEC ICARE module. User Manual v220*. Report IRSN/2021-00300, 2021.
- [TRA04] Trambauer, K.; Austregesilo, H.; Bals, C.; Cester F.; Deitenbeck, H.; Hora, A.; Lerchl, G.; Schubert J. D.; Voggenberger, T., „Weiterentwicklung des Rechenprogrammsystems ATHLET/ATHLET-CD: Abschlussbericht“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH, München, GRS-A-3215, 2004.
- [VES06] Veshchunov, M. S.; Ozrin, V. D.; Shestak, V. E.; Tarasov, V. I.; Dubourg, R.; Nicaise, G.: *Development of the mechanistic code MFPR for modelling fission-product release from irradiated UO<sub>2</sub> fuel*. Nuclear Engineering and Design, 236(2), 179-200, 2006.
- [WAG18] Wagih, M.; Spencer, B.; Hales, J.; et al.: *Fuel performance of chromium-coated zirconium alloy and silicon carbide accident tolerant fuel claddings*. Annals of Nuclear Energy 120, 304–318, 2018. DOI: 10.1016/j.anucene.2018.06.001

- 
- [Wu20] Wu, Xu; Shirvan, K.: *System code evaluation of near-term accident tolerant claddings during boiling water reactor short-term and long-term station blackout accidents*. Nuclear engineering and design, 2020. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2019.110362.
- [YUA23] Yuan, G. et al.: *In situ X-ray computed micro-tomography imaging of failure processes in Cr-coated Zircaloy nuclear fuel cladding materials*. Materials & Design 234, 2023. DOI 10.1016/j.matdes.2023.112373
- [ZHA20] Zhao, L. et al.: *An Experimental Study on the Water Hammer with Cavity Collapse under Multiple Interruptions*. MPDI, Water, Ausgabe 12, 2020, doi:10.3390/w12092566.

## 7 Anhang

### Veröffentlichungen innerhalb des Vorhabens

#### 2022

- Bratfisch, C.; Fuchs, P.; Koch, M. K.: *Analyse der AC<sup>2</sup>-Kondensationsmodellbasis anhand von Simulationen der PPP-Versuchsanlage*. KERNTECHNIK 2022, Leipzig, Juni 2022.
- Freitag, M.; Schmidt, E.; Schramm, B.; Stewering, J.; Kelm, S.; Janda, T.; Kotouč, M.; Povilaitis, M.; Lane, J. W.; Winter, S. D.; George, T. L.; Hoffrichter, J.; Koch, M. K.; Kljenak, I.: *Simulation benchmark based on THAI-experiment on generation and dissolution of a light gas stratification by natural convection*, in 19<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19), Virtuelle Konferenz, März 2022.
- Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Calculation of Decomposition Properties of Silicate Concrete and Applying them in Simulations of Several Experiments with AC<sup>2</sup> - CO-COSYS*. KERNTECHNIK 2022, Leipzig, Juni 2022.
- Hoffrichter, J.; Koch, M. K.: *Validation of AC<sup>2</sup> – COCOSYS regarding light gas stratification build-up and dissolution*. KERNTECHNIK 2022, Leipzig, Juni 2022.
- Hoffrichter, J.; Koch, M. K.: *An approach for an extension of the deflagration model in containment code system COCOSYS to separate burned and unburned atmosphere via junctions*. Kerntechnik (Journal), 2023. DOI: 10.1515/kern-2023-0021
- Krist, F.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Analysis and validation of fission product release and distribution by simulations of Phébus FPT1 and FPT3 with AC<sup>2</sup>*, in 19<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19), Virtuelle Konferenz, März 2022.
- Krist, F.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Analysis of the AC<sup>2</sup> model basis regarding the fission product release by simulations of Phébus experiments*. KERNTECHNIK 2022, Leipzig, Juni 2022.
- Peschel, J.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Simulation of Debris Bed Cooling within the DEBRIS Test Facility conducted with the Severe Accident Analysis Codes ASTEC V2.1 and COCOMO*, in 19<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19), Virtuelle Konferenz, März 2022.

- Peschel, J.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Simulation of the bundle test QUENCH-07 with the Severe Accident Analysis Code ASTEC V2.2*. 11<sup>th</sup> ASTEC Users' Club Meeting, Fontenay-aux-Roses, September 2022.
- Stahlberg, G. T.; Hoffmann, M.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *ASTEC V2.2 simulations of postulated accident sequences applied to a generic KONVOI PWR*. 4<sup>th</sup> ASCOM Workshop / 11<sup>th</sup> ASTEC Users' Club Meeting, Fontenay-aux-Roses, September 2022.
- Stahlberg, G. T.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Preliminary simulation results of the experiments QUENCH-L3HT and QUENCH-ATF-1 regarding high-temperature oxidation mechanisms using the system code AC<sup>2</sup>*. 27<sup>th</sup> International QUENCH Workshop, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, September 2022. DOI: 10.5445/IR/1000152245

## 2023

- Bratfisch, C.; Fuchs, P.; Koch, M. K.: *Analyse, Weiterentwicklung und Validierung der AC<sup>2</sup>-Kondensationsmodellbasis*. Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-23, 2023.
- Hoffmann, M.: *Erweiterung der CCI-Modellbasis des Systemcodes AC<sup>2</sup> zur Simulation von Schmelze-Beton-Wechselwirkungen*. Doktorandentagung in Neustadt an der Weinstraße, August 2023.
- Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Determination of effective heat transfer coefficient using the decomposition parameters of silicate concrete, the melt composition, and the heating power with AC<sup>2</sup> - COCOSYS*. 20<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-20), Washington D.C., 2023.
- Hoffrichter, J.: *Erweiterung des Deflagrationsmodells FRONT in AC<sup>2</sup> COCOSYS zur Trennung von verbrannter und unverbrannter Atmosphäre*. Doktorandentagung in Neustadt an der Weinstraße, August 2023.
- Hollands, T.; Stahlberg, G. T.; Gabrielli, F.; Koch, M. K.: *Simulation of QUENCH-03 and -15 Scenarios with the Code AC<sup>2</sup> modified for Cr-coated Claddings compared with ASTEC*. Proceedings of the 28<sup>th</sup> International QUENCH Workshop, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Dezember 2023.
- Krist, F.: *Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup> Modellbasis hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung aus Schmelzepools*. Doktorandentagung in Neustadt an der Weinstraße, August 2023.

- Krist, F.: Gemeinsam die Zukunft der Kerntechnik gestalten: Durch Wissensaustausch, persönliche Kontakte und spannende Erlebnisse. Nachwuchstagung der Jungen Generation der Kerntechnischen Gesellschaft, Garching b. München, 13.-15.11.2023.
- Krist, F.; Koch, M. K.: *Overview of Current Activities at RUB PSS on the Validation and Further Development of ATHLET and ATHLET-CD*. AC<sup>2</sup> User Meeting, Garching b. München, November 2023.
- Krist, F.; Jankowski, T.; Koch, M. K.: *Current Activities at RUB PSS using CO-COSYS*. AC<sup>2</sup> User Meeting, Garching b. München, November 2023.
- Peschel, J.; Koch, M. K.: *Entwicklung eines Modells zur Simulation von Schüttbetten in AC<sup>2</sup>*. Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum PSS-TR-25, 2023.
- Peschel, J.: *Weiterentwicklung der AC<sup>2</sup> Modellbasis zur Simulation von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum*. Doktorandentagung in Neustadt an der Weinstraße, August 2023.
- Peschel, J.; Koch, M. K.: *Development of a Fast-Running Approach for the Simulation of Debris Beds in the Nuclear Severe Accident Analysis Code AC<sup>2</sup>*. 14<sup>th</sup> International Conference on Computational Heat and Mass Transfer (ICCHMT) in Düsseldorf, September 2023.
- Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *Modelling essentials for ATF-1 experiment in the frame of the analysis of AC<sup>2</sup> with regard to accident-tolerant concepts*. Virtual Workshop of the QUENCH-ATF Analytical Benchmark of the QUENCH-ATF Project (NEA/OECD), 2023.
- Stahlberg, G. T.: *Potenzielle Sicherheitsmargen durch innovative Hüllrohrkonzepte – Erweiterung von AC<sup>2</sup> zur Anwendung von Accident Tolerant Fuel (ATF)*. Doktorandentagung in Neustadt an der Weinstraße, August 2023.
- Stahlberg, G. T.; Bratfisch, C.; Koch, M. K.: *Comparative analyses of the QUENCH experiments L3HT and ATF-1 on high temperature oxidation mechanisms using AC<sup>2</sup>*. 20<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-20), Washington D.C., September 2023.
- Stahlberg, G. T.; Hollands, T.; Koch, M. K.: *Pre-Test calculations of QUENCH-ATF-2 scenario based on QUENCH-15 transient and modelling updates of in-house AC<sup>2</sup>*. 6<sup>th</sup> Program Review Group (PRG) Meeting of the QUENCH-ATF Project (NEA/OECD), 2023.

- Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *Development of a model for Cr-coated Claddings for System Codes*. Proceedings of the 28<sup>th</sup> International QUENCH Workshop, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Dezember 2023.

## 2024

- Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Aerosolfreisetzung bei gefluteten Schmelzen im AC<sup>2</sup>-CCI-Modul und Weiterentwicklung des Wärmetransfers zwischen Schmelze und Beton*. Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum PSS-TR-24, 2024.
- Hoffmann, M.; Koch, M. K.: *Simulation ausgewählter COTELS-Experimente bei gefluteter MCCI mit AC<sup>2</sup> - COCOSYS und MELCOR*. KERntechnik 2024, Leipzig, Juni 2024.
- Hoffrichter, J.; Jankowski, T; Richter, N.; Koch, M. K.: *Analyse und externe Validierung der AC<sup>2</sup>-Modellbasis hinsichtlich des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Sicherheitsbehälter mit ergänzender Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-26, 2024.
- Hoffrichter, J.: *Extension of the Deflagration Model FRONT in AC<sup>2</sup> to Separate Burned and Unburned Atmosphere*. Doktorandentagung in Bad Kreuznach, Juli 2024.
- Krist, F.; Koch, M. K.: *Model Development for the Simulation of Fission Product Release from Molten Pools*. Proceedings of the 11th European Review Meeting on Severe Accidents Research (ERMSAR 2024), KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, 2024. DOI: 10.5445/IR/1000174165/v2.
- Krist, F.: *Model Development for the Simulation of Fission Product Release from Molten Pools*. Doktorandentagung in Bad Kreuznach, Juli 2024.
- Krist, F.; Koch, M. K.: *Modelling and Simulation of Fission Product Release from Melt Pools*. Proceedings of the 14<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation, and Safety (NUTHOS-14), Canadian Nuclear Society (CNS), Vancouver, Kanada, 2024. (in Veröffentlichung)
- Krist, F.; Koch, M. K.: *Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzepool*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-32, 2024. (im internen Review)
- Peschel, J; Koch, M. K.: *Erweiterung des Programmpakets AC<sup>2</sup> zur Simulation von Schüttbetten im unteren Reaktorplenum*. KERntechnik 2024, Leipzig, Juni 2024.

- Peschel, J.; Hoffmann, M.; Krist, F.; Koch, M. K.: *Simulation of Late Phase Phenomena with the System Code AC<sup>2</sup>*. ENERGY (Journal), 2024.
- Stahlberg, G. T.: *Advanced Cladding Designs for Enhanced Safety Margins, Expanding AC<sup>2</sup> Capabilities to Incorporate Accident Tolerant Fuel*. Doktorandentagung in Bad Kreuznach, Juli 2024.
- Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *Modeling of Oxidation Behavior of Accident Tolerant Fuel by using AC<sup>2</sup>*. Proceedings of the 11th European Review Meeting on Severe Accidents Research (ERMSAR 2024), KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, 2024. DOI: 10.5445/IR/1000174165/v2.
- Hollands, T.; Stahlberg, G. T.; Gabrielli, F.; Cazado, M.; Balbuena, Z.: *Application of AC<sup>2</sup>/ATHLET-CD and ASTEC for ATF experiments in the frame of ongoing international projects*. Proceedings of the 11th European Review Meeting on Severe Accidents Research (ERMSAR 2024), KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden, 2024. DOI: 10.5445/IR/1000174165/v2.
- Stahlberg, G. T.; Krieger, J.; Koch, M. K.: *Analyses of an integral Pressurized Water Reactor during postulated Accident Conditions using the System Code Package AC<sup>2</sup>*. Proceedings of the 14<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation, and Safety (NUTHOS-14), Canadian Nuclear Society (CNS), Vancouver, Kanada, 2024. (in Veröffentlichung)
- Stahlberg, G. T.; Koch, M. K.: *ATF – Simulation unfalltoleranter Brennstoffe*. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMUV 1501629, PSS, Ruhr-Universität Bochum, PSS-TR-31, 2024. (im internen Review)

#### **Aus dem Vorhaben zu erwartende Promotionen in 2024/2025**

- Fuchs, P.: *Numerical modelling of condensation induced water hammer phenomena*. Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, (diese Arbeiten sind zudem maßgeblich durch das KEK-Vorhaben HAMMERFOAM [BMUV 1501579] gefördert worden, mündliche Prüfung am 18.12.2024).
- Hoffmann, M.: *Erweiterung der CCI-Modellbasis des Systemcodes AC<sup>2</sup> zur Simulation von Schmelze-Beton-Wechselwirkungen*. Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Bochum. (Dissertationsschrift liegt dem Erstgutachter vor)
- Hoffrichter, J.: Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Bochum.

- 
- Peschel, J.: *Erweiterung der Spätphasen-Modellbasis des Systemcodes AC<sup>2</sup> zur Simulation von Schüttbetten*. Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, (das Promotionsvorhaben ist am 1.8.2024 beendet worden, die Veröffentlichung der Dissertation ist für Ende 2024 geplant).