

**Inhaltsverzeichnis**

**1        Einleitung ..... 1**

**2        Vervollständigung der ATHLET Modellierung für die Simulation  
         von Leichtwasserreaktoren..... 7**

2.1       Berechnung kritischer Leckströmraten..... 7

2.1.1     Umstellung des zugrunde liegenden Gleichungssystems ..... 7

2.1.2     Berücksichtigung eines fluiddynamischen Nichtgleichgewichts ..... 11

2.1.3     Neue Arbeitsmedien ..... 12

2.1.4     Vergrößerter Gültigkeitsbereich ..... 13

2.1.5     Überkritischer Druck ..... 14

2.1.6     Erhöhte Benutzerfreundlichkeit ..... 16

2.1.7     Berechnung der Ausströmraten aus Rissen..... 16

2.1.8     Zusammenfassung ..... 19

2.2       Verbesserung des Gemischspiegelmodells für schnelle und  
         dynamische Vorgänge ..... 19

2.2.1     Verbesserung der Impulsgleichung..... 21

2.2.2     Verbesserung der Berechnung des sprungfreien KV-Drucks der  
         Programmausgabe ..... 23

2.2.3     Verbesserung der Druckberechnung beim Migrieren des MLs..... 25

2.2.4     Simulationsfälle ..... 26

2.2.5     Zusammenfassung ..... 33

2.3       Transport und Ablagerung von Zinkborat..... 33

2.4       Transportgleichung für die Zwischenphasenfläche – Massen- und  
         Wärmeübergang bei kondensationsinduzierten Wasserschlägen ..... 34

2.5       Freisetzung und Absorption von Stickstoff in Wasser ..... 40

2.5.1     Erweiterung des Modells zur Berechnung der maximalen Löslichkeit ..... 41

2.5.2     Kinetik der Freisetzung von gelöstem Gas..... 45

2.5.3     Plötzliche Freisetzung: Klassische Theorie der Keimbildung ..... 45

2.5.4     Langsame Freisetzung und Absorption: 2-Film-Theorie..... 48

2.5.5     Zusammenfassung und mögliche Weiterentwicklung..... 54

|          |                                                                                                                    |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.6      | Wärmeübergang an Außen- und Innenseite horizontaler Wärmetauscherrohrbündel von passiven Sicherheitssystemen ..... | 55        |
| 2.6.1    | Gesättigtes und unterkühltes konvektives Blasensieden an der Rohraußenseite .....                                  | 57        |
| 2.6.1.1  | Unterdrückungsfaktor .....                                                                                         | 57        |
| 2.6.1.2  | Thom-Korrelation .....                                                                                             | 58        |
| 2.6.2    | Kondensation an der Rohrrinnenseite .....                                                                          | 59        |
| 2.6.3    | Validierung .....                                                                                                  | 63        |
| 2.7      | Wärmeübergang in Brennstabbüdln .....                                                                              | 64        |
| 2.8      | 2D Wärmeleitung in Strukturen .....                                                                                | 66        |
| 2.9      | Weiterentwicklung des Wärmestrahlungsmodells .....                                                                 | 69        |
| 2.10     | Simulation elektrischer Heizleiter .....                                                                           | 74        |
| 2.11     | Erweiterung des Turbinenmodells .....                                                                              | 75        |
| 2.11.1   | Ausgangssituation .....                                                                                            | 75        |
| 2.11.2   | Durchgeführte Arbeiten .....                                                                                       | 76        |
| 2.11.3   | Erzielte Ergebnisse .....                                                                                          | 77        |
| 2.11.4   | Fazit .....                                                                                                        | 79        |
| 2.12     | Verbesserung und Optimierung weiterer Modelle .....                                                                | 79        |
| <b>3</b> | <b>Entwicklung eines ATHLET internen 2D/3D Modells .....</b>                                                       | <b>85</b> |
| 3.1      | Die mehrdimensionalen Erhaltungsgleichungen .....                                                                  | 86        |
| 3.1.1    | Die Massenerhaltungsgleichung .....                                                                                | 86        |
| 3.1.2    | Die dreidimensionale Impulsbilanz in ATHLET .....                                                                  | 87        |
| 3.1.2.1  | Finite-Volumen Methode für versetzte Gitter .....                                                                  | 87        |
| 3.1.2.2  | Semi-konservative Formulierung der Impulserhaltungsgleichung .....                                                 | 89        |
| 3.1.3    | Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in kartesischen Koordinaten .....                                           | 90        |
| 3.1.4    | Diskretisierung der 3D Impulsgleichung in Zylinderkoordinaten .....                                                | 96        |
| 3.2      | Integration des 3D-Modells in ATHLET .....                                                                         | 97        |
| 3.2.1    | 2D/3D Gittergenerierung .....                                                                                      | 97        |
| 3.2.2    | Spezifikation zylindrischer Gitter .....                                                                           | 100       |
| 3.2.3    | Erweiterte Anwenderunterstützung .....                                                                             | 101       |
| 3.2.3.1  | Automatisiertes BRANCH2M .....                                                                                     | 101       |

|          |                                                                         |            |
|----------|-------------------------------------------------------------------------|------------|
| 3.2.3.2  | Detaillierte Objektgeometrie für zylindrische Gitter.....               | 102        |
| 3.2.3.3  | Bereitstellung generischer Datensätze.....                              | 103        |
| 3.2.4    | Druckrückgewinn in zylindrischen Gittern .....                          | 103        |
| 3.3      | Validierungsergebnisse.....                                             | 106        |
| 3.3.1    | UPTF-TRAM C1 .....                                                      | 107        |
| 3.3.1.1  | Versuchsbeschreibung .....                                              | 108        |
| 3.3.1.2  | Beschreibung der Nodalisierung .....                                    | 109        |
| 3.3.1.3  | Ergebnisse Run 3b1 .....                                                | 110        |
| 3.3.1.4  | Zusammenfassung und Bewertung.....                                      | 113        |
| 3.3.2    | TALL Test T01 .....                                                     | 114        |
| 3.3.2.1  | Ergebnisse der Vorausrechnung.....                                      | 116        |
| 3.3.2.2  | Bewertung .....                                                         | 120        |
| 3.4      | Reibungsbehaftete Modellgleichungen .....                               | 121        |
| 3.4.1    | Erhaltungsgleichungen und Turbulenzmodell .....                         | 121        |
| 3.4.1.1  | Viskose Scherkräfte.....                                                | 121        |
| 3.4.1.2  | Turbulenzmodell .....                                                   | 123        |
| 3.4.2    | Anwendungsbeispiele .....                                               | 125        |
| 3.4.2.1  | 2D-Kanalströmung.....                                                   | 125        |
| 3.4.2.2  | 2D- und 3D-Rohrströmung.....                                            | 130        |
| 3.5      | Zusammenfassung und Ausblick .....                                      | 132        |
| <b>4</b> | <b>Methodenqualifizierung für Unsicherheitsanalysen mit ATHLET ....</b> | <b>135</b> |
| 4.1      | Phase 1: Vorbereitung des Benchmarks.....                               | 137        |
| 4.2      | Phase 2: Identifizierung wichtiger Modellunsicherheiten .....           | 139        |
| 4.2.1    | ATHLET Modell der FEBA-Anlage.....                                      | 139        |
| 4.2.2    | Auswahl der wichtigen unsicheren Eingangsparameter .....                | 141        |
| 4.3      | Phase 3: Quantifizierung der Modellunsicherheiten .....                 | 143        |
| 4.3.1    | Beschreibung der Quantifizierungsmethode .....                          | 144        |
| 4.3.2    | Experimentelle Datenbasis .....                                         | 146        |
| 4.3.3    | Quantifizierung der unsicheren Modellparameter.....                     | 147        |
| 4.4      | Phase 4: Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten .....     | 157        |
| 4.4.1    | Unsicherheitsanalysen zu FEBA Versuchen .....                           | 157        |

|          |                                                                                                           |            |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.4.2    | Unsicherheitsanalysen zu PERICLES Versuchen.....                                                          | 161        |
| 4.4.2.1  | ATHLET-Modell der PERICLES Versuchsanlage .....                                                           | 161        |
| 4.4.2.2  | Eingabeparameter der Unsicherheitsanalysen zum PERICLES<br>Experiment .....                               | 164        |
| 4.4.2.3  | Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen .....                                                                | 167        |
| 4.5      | Schlussfolgerungen .....                                                                                  | 173        |
| <b>5</b> | <b>Querschnittsaufgaben.....</b>                                                                          | <b>175</b> |
| 5.1      | Effiziente Kopplung von ATHLET mit MCDET für umfassende<br>Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen ..... | 175        |
| 5.1.1    | Konzept zur Kopplung von MCDET mit einem Rechenprogramm.....                                              | 176        |
| 5.1.1.1  | MCDET-Module und ihre Aufgaben .....                                                                      | 176        |
| 5.1.1.2  | Ablauf einer MCDET Analyse .....                                                                          | 178        |
| 5.1.1.3  | Anforderung an das Rechenprogramm .....                                                                   | 179        |
| 5.1.1.4  | Datenverwaltung.....                                                                                      | 180        |
| 5.1.2    | Programmerweiterungen in ATHLET und MCDET zur effizienten<br>Kopplung beider Programme .....              | 181        |
| 5.1.2.1  | Programmerweiterungen in MCDET Modulen.....                                                               | 183        |
| 5.1.2.2  | ATHLET-Treiber .....                                                                                      | 184        |
| 5.1.2.3  | Programmerweiterungen in ATHLET .....                                                                     | 184        |
| 5.1.3    | Grafische Aufbereitung der mit ATHLET und MCDET gewonnenen<br>Ergebnisse.....                             | 186        |
| 5.1.3.1  | Ergebnisstruktur von MCDET-Simulationen.....                                                              | 186        |
| 5.1.3.2  | Grafische Darstellung von Zeitverläufen von Prozessgrößen.....                                            | 189        |
| 5.1.4    | Demonstrationsbeispiele der grafischen Darstellung zeitlicher Verläufe<br>von Prozessgrößen.....          | 193        |
| 5.1.5    | Zusammenfassung und Ausblick .....                                                                        | 196        |
| 5.2      | Neue Sparse-Matrix Lösungsverfahren.....                                                                  | 198        |
| 5.2.1    | Startrechnung .....                                                                                       | 198        |
| 5.2.1.1  | Gleichungslöser .....                                                                                     | 198        |
| 5.2.1.2  | Implementierung in ATHLET .....                                                                           | 198        |
| 5.2.1.3  | Ergebnisse.....                                                                                           | 199        |
| 5.2.1.4  | Fazit.....                                                                                                | 200        |

5.2.2      PETSc für transiente Rechnungen..... 200

5.3        Anwenderunterstützung ..... 203

5.3.1      Entwicklung eines Werkzeugs zur Unterstützung der  
Eingabedatenerzeugung und -kontrolle ..... 204

5.3.2      3D Visualisierung von ATHLET Rechenergebnissen ..... 205

5.3.3      Visualisierung der CDR1D-Ergebnisse ..... 206

5.3.4      Verwendung von Parametern im Eingabedatensatz ..... 208

5.3.5      PYTHON Schnittstelle ..... 209

5.3.6      Zusammenarbeit mit externen Partnern ..... 214

5.4        Qualitätssicherung und Versionsmanagement..... 216

5.5        Freigabe der Programmversion ATHLET 3.0A..... 217

5.6        Einfrieren der ATHLET-Version 3.0 B ..... 219

  

**6        Zusammenfassung und Bewertung ..... 221**

6.1        Weiterentwicklung der ATHLET Modellbasis ..... 221

6.2        Entwicklung eines ATHLET internen 3D Modells ..... 224

6.3        OECD Benchmark PREMIUM..... 225

6.4        Querschnittaufgaben ..... 226

6.5        Fazit..... 226

**Literatur..... 231**

**Abbildungsverzeichnis..... 243**

**Tabellenverzeichnis..... 251**