

KfK 4093  
Oktober 1986

# **Numerische Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten- Strömungen nach Brennstabversagen in einem natriumgefüllten Kühlkanal**

**St. Misu**  
Institut für Reaktorentwicklung  
Projekt Schneller Brüter

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Reaktorentwicklung

Projekt Schneller Brüter

KfK 4093

Numerische Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen  
nach Brennstabversagen in einem natriumgefüllten Kühlkanal

Stefan Misu

Dissertation genehmigt von der Fakultät  
für Maschinenbau der Universität Karlsruhe

Kernforschungszentrum Karlsruhe G.m.b.H., Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003



## Zusammenfassung

Zur theoretischen Beschreibung von thermo- und fluiddynamischen Vorgängen in natriumgefüllten Kühlkanälen schneller Brutreaktoren nach Brennstabversagen wurde das Programm CALIPSO entwickelt. Eine früher veröffentlichte Programmversion wurde in wesentlichen Teilen überarbeitet und verbessert. Die jetzt verfügbare Version wurde überprüft anhand der Ergebnisse ausgewählter Experimente aus der SIMBATH-Versuchsreihe zur Simulation der Materialumverteilungen nach Brennstabversagen.

Die im einzelnen verfolgten Aspekte der Weiterentwicklung der CALIPSO-Moduln umfaßten die folgenden Punkte: Das Geometriemodell wurde überarbeitet, um eine realitätsnahe Abbildung der SIMBATH-Teststreckengeometrie sowie der des angeschlossenen Kreislaufs zu ermöglichen. Um eine detaillierte Berücksichtigung von Ungleichgewichtseffekten innerhalb der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen und der daraus resultierenden Materialumverteilungen zu erreichen, wurden die Impulserhaltungsgleichungen separat für den Brennstoff (Thermit), für das flüssige Natrium und für die gasförmigen Stoffe formuliert. Für das nicht kondensierbare Gas ist eine zusätzliche Energieerhaltungsgleichung in das Modell eingeführt worden. Ausgehend von Erkenntnissen aus der Zweiphasendynamik sind Modelle zur Beschreibung unterschiedlicher Strömungsformen eingeführt worden. Innerhalb dieser Modelle wurden Korrelationen zur Bestimmung der Wandreibung, der Reibung zwischen den Strömungskomponenten und des Wärmeübergangs formuliert und ihre Anwendbarkeit im Rahmen des Möglichen überprüft. Auf der Grundlage einer geeignet gewählten Strömungsbilderkarte wurde ermittelt, welche Strömungsformen sich orts- und zeitabhängig im Kühlkanal und im Stabinneren einstellen. Die diskretisierte Form der Erhaltungsgleichungen ist im zweidimensionalen Maschennetz mit variablen Maschenweiten und Maschenlängen neu formuliert worden. Ein Verfahren zur korrekten Wiedergabe der Druckgradienten bei Querschnittssprüngen für Rechenmaschen mit versetztem Gitter wurde eingeführt.

Die jetzt verfügbare Programmversion von CALIPSO wurde durch Nachrechnung zweier typischer SIMBATH-Einzelstabversuche überprüft. Der Analyse beider Versuche liegen der gleiche Modellparametersatz, jedoch versuchsspezifische Anfangsbedingungen und eine Zeitfunktion der Defektstellenausbreitung zugrunde. Für beide Versuche wurde im Zeitraum bis 40 ms nach Stabversagen Übereinstim-

mung der Zeitverläufe wichtiger gemessener und berechneter Größen wie Druck, Voidsausbreitung, Thermikumverteilungen im Stabinneren und im Kühlkanal, Ausbreitung der Versagensstellen u.a. aufgezeigt. Die erzielten Ergebnisse bei der Nachrechnung beider Versuche zeigten, daß die wichtigsten physikalischen Phänomene und Wechselwirkungen innerhalb der angegebenen Zeitspanne im erweiterten CALIPSO-Modell in geeigneter Weise berücksichtigt waren. Im besonderen konnte die Relevanz der berücksichtigten Strömungsformen in CALIPSO anhand des Vergleichs von Rechenergebnissen mit experimentellen Daten aufgezeigt werden. Die Ursachen für die Abweichungen von experimentellen und berechneten Werten nach etwa 40 ms wurden erkannt und Vorschläge für Modellerweiterungen erarbeitet.

#### Numerical Simulation of Multiphase-Multicomponent-Flow after Fuel Rod Failure in a Sodium Filled Coolant Channel

##### Abstract

The CALIPSO-code has been developed for theoretical description of thermal - and fluiddynamic phenomena occurring after clad failure in sodium filled channels of fast breeder reactors. Important parts of a published code version were improved. The new code version was tested by means of experimental results from selected SIMBATH experiments simulating material relocation after pin failure.

The CALIPSO code was extended in the following main aspects: The geometry model was improved in order to allow for realistic representation of the SIMBATH test section and of its sodium loop. Separate momentum equations were solved for the fuel (thermite), the liquid sodium, and the gasphase in order to have a detailed consideration of nonequilibrium effects and of material relocations inside the multicomponent-multiphase flows. An energy equation for the noncondensable gases was added to the model. Based on knowledge from two-phase flow dynamics different flow regime models were included. Flow regime

depended correlations for calculation of wall and intercomponent friction forces as well as of heat transfer rates were added to these models. The time dependent spacial distribution of different flow regimes inside the pin and in the coolant channel is determined by an appropriate flow regime map. A new formulation of the discretized form of conservation equations for mesh cells with variable width and length was implemented. The numerical method also accounts correctly for the total pressure variation at positions with abrupt area changes.

The version of CALIPSO now available was tested by calculating two typical SIMBATH single-pin experiments. For this analysis the same set of model parameters, specific initial conditions, and functions for the transient extension of clad failure area were specified. Both tests showed agreement between calculated and measured data for pressure, void distribution, thermite relocation inside the pin and in the channel during the first 40 ms after pin failure. The results indicate that the main physical phenomena were accounted for in an appropriate manner during this time span. In particular comparisons between experimental data and calculations showed the relevance of modeled flow regimes. Reasons for the discrepancies between experiment and calculation for time periods greater than 40 ms were identified and recommendations were made for model improvements.



Inhaltsverzeichnis

Liste der Tabellen	IV
Liste der Abbildungen	V
1. Einleitung	1
1.1 Problemstellung	1
1.2 Modelle für die numerische Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen beim Leistungsstörfall	3
1.3 Ziel der Arbeit	8
2. Geometriemodell von CALIPSO	11
3. Betrachtete Komponenten und Phasen	13
4. Erhaltungsgleichungen und konstitutive Gleichungen des CALIPSO-Modells	15
4.1 Erhaltungsgleichungen	16
4.2 Konstitutive Gleichungen	22
4.2.1 Zustandsgleichungen	23
4.2.2 Annahmen zur Topologie	24
4.2.2.1 Modellierete Strömungsformen	24
4.2.2.2 Strömungsbilderkarten	29
4.2.2.3 Radiusmodell	32
4.2.2.4 Berechnung der Filmstärken	35
4.2.3 Austauschfunktionen	37
4.2.3.1 Impulsaustausch	39
4.2.3.1.1 Reibungskräfte mit Strukturen	41
4.2.3.1.2 Reibungskräfte zwischen Strömungskomponenten	45
4.2.3.2 Energieaustausch	53
4.2.3.2.1 Energieaustausch mit Strukturen	55
4.2.3.2.2 Energieaustausch zwischen Strömungskomponenten	62
4.2.3.3 Massenaustausch	70

5. Numerisches Lösungsverfahren in CALIPSO	71
5.1 Zeitintegrationsverfahren der Erhaltungsgleichungen	71
5.2 Das Maschennetz	71
5.3 Das Zwei-Geschwindigkeits- und Zwei-Drücke-Konzept	73
5.4 Diskretisierte Form der Erhaltungsgleichungen	75
5.5 Randbedingungen	80
5.6 Programmierungsdetails	81
6. Validierung des CALIPSO-Modells	84
6.1 Testprobleme	84
6.1.1 Einstellung einer stationären Strömung	84
6.1.2 Fortpflanzung von Druckwellen	86
6.1.3 Verfolgen von Phasengrenzen	87
6.2 Validierung einzelner Modelle	88
6.2.1 Strömungsbilderkarte	88
6.2.2 Impulsaustauschfunktionen für stationäre Strömungen	92
6.2.2.1 Einphasige Einkomponentenströmung	92
6.2.2.2 Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung	93
6.2.2.2.1 Blasenströmung	93
6.2.2.2.2 Übergangsströmung	94
6.2.2.2.3 Filmströmung	95
6.2.2.2.4 Zusammenwirken aller Strömungsformen	97
6.2.3 Wärmeaustauschfunktionen	100
6.2.3.1 Einphasige Einkomponentenströmung	100
6.2.3.2 Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung	100
6.2.3.2.1 Natriumfilmströmung	101
6.2.3.3.2 Wärmeaustausch Thermit-flüssiges Natrium	102
6.3 Gesamtvalidierung anhand von SIMBATH Einzelstabversuchen	105
6.3.1 Einzelstab Referenzversuch $V_{th}$ 71/2	106
6.3.1.1 Versuchsaufbau	106
6.3.1.2 Versuchsablauf und Ergebnisse	108
6.3.1.3 Anfangsbedingungen für die Nachrechnung mit CALIPSO	113
6.3.1.4 Ergebnis der Nachrechnung	118
6.3.1.4.1 Vergleich Rechnung-Experiment	118
6.3.1.4.2 Einfluß modellierter Strömungsformen	125
6.3.1.5 Ergebnis der Parametervariation	132

6.3.1.5.1 Einfluß von Anfangsbedingungen	133
6.3.1.5.2 Einfluß von Modellparametern	138
6.3.1.5.3 Einfluß numerischer Aspekte	143
6.3.2 Einzelstab Versuch $V_{th}^{71/4}$	143
6.3.2.1 Versuchsaufbau	144
6.3.2.2 Versuchsablauf und Ergebnisse	145
6.3.2.3 Anfangsbedingungen für die Nachrechnung mit CALIPSO	148
6.3.2.4 Ergebnis der Nachrechnung	149
 7. Abschließende Diskussion	 153
 Nomenklatur	 158
 Literaturverzeichnis	 163
 Anhang	
A1 Berechnungsformeln für Geometriedaten	175
A2 Stoffeigenschaften	177
A3 Impulserhaltungsgleichungen für eine stationäre Zweiphasenströmung	180
A4 Eingabedaten und Modellparameter für die Nachrechnung von $V_{th}^{71/2}$ und $V_{th}^{71/4}$	181

Liste der Tabellen

Tabelle 3.1	Gemische von Komponenten
Tabelle 4.1	In CALIPSO gelöste Gleichungen
Tabelle 4.2	Strömungsformabhängige Austauschfunktionen in CALIPSO
Tabelle 4.3	In CALIPSO betrachtete Reibungskräfte
Tabelle 4.4	Wärmeübergangsbeziehungen in CALIPSO
Tabelle 6.1	Wichtige Daten für die CALIPSO-Abbildung des SIMBATH- Versuchs $V_{th}$ 71/2 zum Stabversagenszeitpunkt
Tabelle A2.1	Stoffeigenschaften



## Liste der Abbildungen

- Abbildung 2.1 Geometriemodell von CALIPSO
- Abbildung 4.1 Modellvorstellung der Strömungsformverteilung  
im Stabinneren und im Kühlkanal
- Abbildung 4.2 Modellierung von Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung
- Abbildung 4.3 Modellvorstellung für Thermitpartialfilme
- Abbildung 4.5 Strömungsbilderkarte auf der Basis von Gasvolumenanteil-  
kriterien
- Abbildung 4.6 Reibbeiwertkorrelationen für die Übergangsströmung einer  
Thermit-Gas-Mischung ( $D_h = 7 \cdot 10^{-3}$  m,  $v_{th} = 5$  m/s,  
 $r_{th} = 1 \cdot 10^{-3}$  m)
- Abbildung 4.7 Von Chen /79/ gegebene Abhängigkeit des Reynoldszahlfaktors  $F$   
(Gl. 4.70) vom Lockhart Martinelli-Parameter  $X_{tt}$  (Gl. 4.66).  
Vergleich mit der CALIPSO-Beziehung für Natriumfilm- und für  
Thermitfilmströmungen
- Abbildung 4.8 Modellvorstellung des Wärmeübergangs Thermit/Natrium
- Abbildung 5.1 Integrationsvolumen entsprechend der "staggered grid" Konvention
- Abbildung 5.2 Maschennetz für den Kühlkanal mit Querschnittsänderungen
- Abbildung 5.3 Programmstruktur von CALIPSO
- Abbildung 6.1 Transiente Berechnung nach der automatischen Korrektur der  
-Werte
- Abbildung 6.2 Transiente Berechnung nach dem Einschalten der Pumpe
- Abbildung 6.3 Numerische Diffusion beim Füllen eines Rohres mit flüssigem  
Natrium
- Abbildung 6.4 Vergleich der auf Gasvolumenanteilwerten basierenden Strö-  
mungsbilderkarte mit Daten der SIMBATH-Versuche für Thermit-  
Gas-Strömungen
- Abbildung 6.5 Vergleich des Mishima-Ishii-Modells für aufwärtsgerichtete  
Strömungen mit CALIPSO-Rechenergebnissen des SIMBATH-Versuchs  
 $V_{th} 71/2$
- Abbildung 6.6 Berechnungsmethoden der Reibbeiwerte in Ringspaltgeometrie für  
einphasige Strömung von flüssigem Natrium. Die Korrelationen  
stammen aus /58, 59/
- Abbildung 6.7 Gemessene und errechnete physikalische Größen einer Gas-Wasser-  
Blasenströmung ( $D_h = 92 \cdot 10^{-3}$ ,  $0.5 \cdot 10^{-3} \leq r_p \leq 1.5 \cdot 10^{-3}$ )

- Abbildung 6.8 Gemessene und berechnete physikalische Größen einer Übergangsströmung. Die Daten stammen aus Versuchen mit Wasser/Luft- /68/, Natrium/Kalium/Stickstoff- /94/ und Wasser/Wasserdampf-Gemischen /95/
- Abbildung 6.9 Gemessener und errechneter Reibungsdruckverlustmultiplikator  $\phi_2^2$  einer Natriumfilmströmung als Funktion des Lockhart-Martinelli Parameters  $X_{tt}$ . Die Versuchsdaten stammen aus Natriumsiedeexperimenten:  $\circ$  = /72/,  $\bullet$  = /98/,  $\times$  = /99/ sowie aus Kaliumversuchen  $\Delta$  = /102/
- Abbildung 6.10 Gemessener und errechneter Gavolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Natrium-Zweiphasenströmung. Die Daten stammen aus Natriumsiedeexperimenten  $\circ$  = /100/,  $\bullet$  = /98/,  $\blacktriangle$  = /101/,  $\times$  = /99/ und aus Kaliumsiedeversuchen  $\Delta$  = /102/
- Abbildung 6.11 Gemessener und errechneter Gasvolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Thermit-Gas-Strömung. Die Versuchsdaten entsprechen denen in Abb. 6.10.
- Abbildung 6.12 Gemessener und errechneter Gasvolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Zweiphasen-Natriumströmung. Die Versuchsdaten entsprechen denen in Abb. 6.10. Die Berechnungen wurden mit dem Impulsaustauschmodell aus /14/ durchgeführt.
- Abbildung 6.13 Verhältnis der Wärmeübergangszahlen  $\alpha/\alpha_{1ph}$  als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters  $X_{tt}$ . Die Versuchsdaten stammen aus Natrium-Siedeexperimenten  $\circ$  = /79/,  $\bullet$  = /103/ und Kaliumsiedeversuchen  $\Delta$  = /104/. Die Korrelationen sind aus den Literaturstellen /36, 105, 106/ entnommen.
- Abbildung 6.14 Vergleich unterschiedlicher Korrelationen für die Berechnung des Wärmestromes von Thermit zum flüssigen Natrium
- Abbildung 6.15 Schematischer Versuchsaufbau für SIMBATH-Test  $V_{th}$  71/2
- Abbildung 6.16 Versuchsergebnisse vom SIMBATH-Test  $V_{th}$  71/2
- Abbildung 6.17 Diskretisierung der SIMBATH-Teststrecke und des angeschlossenen Natriumkreislaufes für die Nachrechnung von  $V_{th}$  71/2
- Abbildung 6.18 CALIPSO-Nachrechnung von  $V_{th}$  71/2. Vergleich mit Versuchsergebnissen
- Abbildung 6.19 Berechnete Druckverläufe im Kühlkanal an der Position der Versagensstelle (Masche 24, Lage + 0,05 m)

- Abbildung 6.20 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Gasvolumenanteils im Kühlkanal
- Abbildung 6.21 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Thermitvolumenanteils im Stabinneren
- Abbildung 6.22 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal
- Abbildung 6.23 Berechnete axiale Verteilung der Strömungsformen im Kühlkanal
- Abbildung 6.24 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen auf berechnete physikalische Größen im Stabinneren. Alle Daten entsprechen der Masche 27 (Höhe + 0.1 m)
- Abbildung 6.25 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen auf berechnete physikalische Größen im Kühlkanal. Alle Daten entsprechen der Masche 27 (Höhe + 0.1 m)
- Abbildung 6.26 Einfluß der größeren Öffnung der Versagensstelle auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Masche 24, Höhe + 0.05 m) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmenge
- Abbildung 6.27 Einfluß der größeren Öffnung der Versagensstelle auf die Thermitumverteilung im Kühlkanal
- Abbildung 6.28 Einfluß der verzögerten Gasfreisetzung auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Höhe + 0.05 m, Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse
- Abbildung 6.29 Einfluß einer großen Versagensstelle und gleichzeitig des Nachgasens von Thermit auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Höhe + 0,05 m entsprechend Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse
- Abbildung 6.30 Einfluß der Anwendung der EPIC-Wärmeübergangsmodells Thermit-Natrium auf den berechneten Druckaufbau im Kühlkanal (Höhe + 0,05, Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse
- Abbildung 6.31 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen-Modelle auf einige berechnete Größen
- Abbildung 6.32 Berechnete Verteilung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal für unterschiedliche Strömungsformen-Modelle
- Abbildung 6.33 Versuchsergebnisse von SIMBATH-Test  $V_{th}$  71/4
- Abbildung 6.34 Vergleich Rechnung und Experiment für den SIMBATH-Versuch  $V_{th}$  71/4

Abbildung 6.35 Berechnete Materialumverteilung von Thermit und Gas im  
Versuch  $V_{th}$  71/4

Abbildung A1.1 Geometrieausschnitt der Teststrecke bei einer Defektstelle  
des Stabes (vordere Hälfte der Kanalwand weggeschnitten)

## 1. Einleitung

### 1.1 Problemstellung

Bei Untersuchungen zur Abschätzung des Risikos, das mit dem Betrieb schneller, natriumgekühlter Brutreaktoren verbunden ist, werden unter anderem auch Konsequenzen sogenannter hypothetischer Unfälle ermittelt, d.h. Konsequenzen von Einleitungsereignissen, deren Eintrittswahrscheinlichkeit extrem niedrig ist. Im besonderen haben bei derartigen Analysen die Untersuchungen von Einleitungsereignissen eine große Bedeutung, bei denen postuliert wird, daß die beiden unabhängigen Abschaltssysteme des Reaktorschutzsystems bei Anforderung versagen. Typische Beispiele hierfür sind /1, 2/:

- der unkontrollierte Kühlmitteldurchsatzstörfall, bei dem bei Reaktorschnellabschaltung die Primärpumpen zwar abgeschaltet werden, die beiden unabhängigen Abschaltssysteme aber versagen,
- der unkontrollierte Leistungsstörfall, bei dem z.B. als Folge eines Ausfahrens einer Regelstabbank eine Reaktivitätsrampe in den Reaktorkern eingeleitet wird, die beiden unabhängigen Abschaltssysteme die dadurch eingeleitete Leistungsexkursion aber nicht begrenzen, da sie versagen.

Als Folge derartiger Einleitungsereignisse kommt es zu unkontrollierten Leistungsexkursionen im Kern eines schnellen, natriumgekühlten Brutreaktors. Die Brennstäbe werden überhitzt und versagen. Als Folge dieses Brennstabversagens werden Brennstoff und Spaltgas in die Kühlkanäle ausgespritzt und es bilden sich in den Brennelementen Mehrphasen-Mehrkomponenten-Zonen aus Brennstoff, Stahl, Natrium und Spaltgas, deren transientes Verhalten entscheidend für den weiteren Unfallablauf ist. Dominieren in größeren Bereichen des Kerns über längere Zeiträume kompaktive Brennstoffbewegungen zur Versagensstelle hin, so könnten sich große positive Reaktivitätsrampen aufbauen, die eine energetische Kernzerlegungsphase (energetic disassembly) einleiten. Dominieren demgegenüber in größeren Bereichen des Kerns dispersive Bewegungen des Brennstoffs, die zu einer frühen Brennstoffentladung aus dem Kernbereich führen, läuft der Unfallablauf in eine sogenannte frühe Übergangsphase (early transition phase) ein, d.h. der Kern wird unterkritisch.

Um im Rahmen von Unfallanalysen Aussagen ableiten zu können, wie sich der Unfall nach Brennstabversagen entwickelt, ist es notwendig, Programmoduln zu entwickeln, die in der Lage sind, das transiente Verhalten der sich bildenden Mehrphasen-Mehrkomponenten-Zonen theoretisch zu beschreiben. Als wesentliche Randbedingung ist hierbei der Zustand des Brennelements zu dem Zeitpunkt zu berücksichtigen, zu dem Brennstabversagen einsetzt. Die komplexen Wechselwirkungsphänomene sind davon abhängig, ob die Kühlkanäle des Brennelements zum Zeitpunkt des Versagens noch mit flüssigem Natrium gefüllt sind oder aber das Natrium schon teilweise oder vollständig verdampft ist. Die in dieser Arbeit betrachteten Phänomengruppen konzentrieren sich auf die Randbedingung, daß die Kühlkanäle zum Zeitpunkt des Brennstabversagens noch vollständig mit flüssigem Natrium gefüllt sind.

Die nachfolgend einsetzenden komplexen Wechselwirkungs- und Transportphänomene können nur in enger Wechselwirkung zwischen der Auswertung geeigneter Experimente und theoretischen Programmentwicklungen erfaßt werden.

Bedeutende experimentelle Programme zur integralen Untersuchung von derartigen Phänomengruppen in Versuchsreaktoren sind die TREAT- /3/ und die CABRI-Versuche /4/. In geeignet konzipierten Teststrecken wird das Verhalten von Einzelstäben oder kleinen Bündeln (nur TREAT) untersucht. Parallel dazu werden auch out-of-pile-Experimente durchgeführt, die ungeachtet einiger Simulationsnachteile die Möglichkeit bieten, in vergleichsweise einfacheren Experimenten, mit umfangreicher Instrumentierung verschiedene Einflußgrößen getrennt voneinander zu untersuchen. Von besonderer Bedeutung sind dabei die CAMEL- /5/ und die SIMBATH-Experimente /6/. Die im Kernforschungszentrum Karlsruhe durchgeführten SIMBATH-Versuche simulieren die Vorgänge nach Brennstabversagen bei natriumgekühlten Kühlkanälen in Ein- und Mehrstabanordnungen. Dafür werden Stäbe mit brennstabähnlichen Abmessungen mit einer Aluminium-Eisenoxid-Thermitmischung gefüllt und als Einzelstab oder als Bündel in eine natriumdurchströmte Teststrecke eines Kreislaufes eingebracht. Nach dem Einleiten der exothermen chemischen Thermitreaktion entstehen innerhalb der Stäbe eine Schmelze sowie nicht kondensierbare Gase. Die Hüllrohre versagen örtlich. Dadurch wird die überhitzte Schmelze in die natriumgefüllten Kühlkanäle ausgespritzt und es entstehen anschließend transiente Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen. Die Materialumverteilungen können mit Hilfe einer Röntgenkinematographieanlage verfolgt werden.

Die theoretische Untersuchung von Leistungsstörfällen in natriumgekühlten Brutreaktoren erfolgt durch Modellierung der Wechselwirkungen innerhalb der auftretenden Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen. Bedeutende Rechenprogrammmoduln für die Untersuchung derartiger Vorgänge sind SAS-FCI /7/, EPIC /8/, EULFCI /9/ und PLUTO2 /10/. Zur Berechnung der Materialumverteilungsprozesse für spätere Abschnitte im Störfallablauf nach wesentlicher Zerstörung der Brennstäbe eignen sich vom Ansatz her Teilmodelle von Rechenprogrammen, die speziell zur Untersuchung dieser Störfallphasen entwickelt wurden, wie z.B. KANDI /11/, LEVITATE /12/, SIMMER II /13/. Die Rechenprogramme PLUTO2 /10/ und LEVITATE /12/, die nach heutigem Kenntnisstand zu den fortgeschrittensten gehören, sind nicht frei verfügbar. Einige der Modellannahmen bzw. Modellparameter von /10, 12/ sind noch nicht im Detail veröffentlicht, bzw. befinden sich nach wie vor in der Entwicklung.

Im Kernforschungszentrum Karlsruhe wird das Rechenprogramm CALIPSO /14/ für die theoretische Interpretation der SIMBATH-Experimente sowie für die Übertragung der experimentell gewonnenen Erkenntnisse auf Reaktorbedingungen entwickelt. CALIPSO ist in die Gruppe der theoretischen Modelle einzugliedern, die zur Analyse von transienten Materialumverteilungen in der frühen Phase nach Brennstabversagen eingesetzt werden, wie z.B. auch SAS-FCI /7/, EPIC /8/, EULFCI /9/, PLUTO2 /10/. In seiner derzeitigen Entwicklungsstufe berücksichtigen die Materialzusammensetzung, die entsprechenden Stoffdaten sowie die Modellierung der mit Brennstoff und Gas gefüllten Kavität im Stabinneren (s. Kap. 1.2) die spezifischen Gegebenheiten der SIMBATH-Versuche (s. Kap. 6.3). Eine erste Version von CALIPSO ist in /14/ dokumentiert.

## 1.2 Modelle für die numerische Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen beim Leistungsstörfall

In den Programmen SAS-FCI /7/, EPIC /8/, EULFCI /9/, PLUTO2 /10/ und in der CALIPSO-Version /14/ beginnt die Rechnung bei Stabversagen. Sie endet zu einem Zeitpunkt, bei dem die ursprüngliche Stabgeometrie weitgehend zerstört ist und der Kühlkanal praktisch kein flüssiges Natrium mehr enthält. Weiterführende Rechnungen können mit LEVITATE /12/ oder u.U. mit SIMMER II /13/ erfolgen.

Die betrachtete Geometrie in /7 bis 10/ sowie in /14/ umfaßt einen Brennstab und den dazugehörigen Kühlkanal mit einer Kühlkanalwand. Jeder Bereich wird eindimensional diskretisiert. Nach örtlichem Versagen der Stabhülle sind die Bereiche des Stabinneren und des Kühlkanals bei /7 bis 10/ mittels eines Ejektionsmodells gekoppelt. In CALIPSO /14/ ist ein derartiges Modell nicht notwendig, da an der Ausspritzstelle alle Erhaltungsgleichungen in einer zweidimensionalen r-z-Geometrie gelöst werden. Der Massentransport aus dem Kühlkanalbereich in das Stabinnere ist in allen Rechenprogrammen /7, 8, 9, 10, 14/ unterbunden.

Die Modellierung der Phänomene im Stabinneren ist für reaktorspezifische Situationen aufwendig /7 bis 10/. Die Leistungsverteilung im Brennstoff und die Entwicklung einer Kavität mit geschmolzenem Brennstoff und Gas müssen transient berechnet werden. Im CALIPSO-Modell /14/ bleibt, den Gegebenheiten der SIMBATH-Versuche Rechnung tragend, die axiale und die radiale Ausdehnung der Kavität zeitlich unverändert. Es wird darüber hinaus davon ausgegangen, daß die exotherme Reaktion vor Stabversagen abgeschlossen ist.

In SAS-FCI /7/, EPIC /8/, EULFCI /9/ und in PLUTO2 /10/ hat der modellierte Kühlkanal um den Brennstab einen konstanten Strömungsquerschnitt. In axialer Richtung werden drei Bereiche unterschieden, und zwar der kompressible Reaktionsbereich mit der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung und die sich darüber bzw. darunter befindlichen Zonen mit flüssigem Natrium. Die Natriumsäulen simulieren durch Vorgabe von Trägheitslängen den Einfluß der oberen und unteren Plena. Die Natriumsäulen werden mit Ausnahme von EULFCI /9/ als inkompressibel angenommen. Der Strömungsquerschnitt der Natriumsäulen ist nur in PLUTO2 /10/ variabel. Im CALIPSO-Modell /14/ wird zur Abbildung der SIMBATH-Teststrecke sowie des angeschlossenen Kreislaufs ein senkrechter, ringförmiger Kühlkanal mit variablem Rohrdurchmesser betrachtet. Das flüssige Natrium wird auf der gesamten Kühlkanallänge kompressibel berechnet.

Die thermo- und fluiddynamischen Modelle dieser Rechenprogramme unterscheiden sich in den Annahmen über Strömungsformen der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung und dadurch in der Komplexität betrachteter strömungsformspezifischer Wechselwirkungen.



- In SAS-FCI /7/ werden im Stabinneren der Brennstoff und das Spaltgas zu einem homogenen Gemisch zusammengefaßt und als einphasige kompressible Strömung behandelt. Im Mehrphasengebiet des Kühlkanals werden Brennstoff, Gas und Natrium zu einem homogenen Gemisch zusammengefaßt. Der Schlupf zwischen diesen Komponenten wird nicht simuliert.
- In EPIC /8/ und EULFCI /9/ ist die Modellierung der Strömung im Stabinneren ähnlich wie in SAS-FCI realisiert. Im Kühlkanalbereich wird von einer Brennstoff-Partikelströmung ausgegangen, bei der sich die Tropfen relativ zum Gemisch aus zweiphasigem Natrium und Spaltgas bewegen können.
- Die Modellierung der Strömung im Stabinneren geht in PLUTO2 /10/ und LEVITATE /12/ ebenfalls von einem homogenen Brennstoff-Gas-Gemisch aus. In /12/ ist zusätzlich ein vereinfachtes Filmmodell für diesen Bereich vorgesehen. Für den Brennstoff im Kühlkanal sind in /10, 12/ die Blasen-, die Tropfen- und die Filmströmung modelliert. Dadurch kann die Relativbewegung zwischen dem Brennstoff und einem Gemisch aus zweiphasigem Natrium und Spaltgas detaillierter als in /7, 8/ betrachtet werden. In /10/ sind auf den Strukturen auch statische Natriumfilme berücksichtigt.
- In der vorherigen Version von CALIPSO /14/ werden im Stabinneren und im Kühlkanal die Blasen- und die Tropfenströmung modelliert. Blasen und Tropfen können sich relativ zum Gemisch aller Phasen und Komponenten bewegen.

In den oben genannten Rechenprogrammen wird transiente Entwicklung von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen auf der Grundlage eines Mehrfeldkonzeptes berechnet. Die Stoffe innerhalb der Strömungen bzw. auf und in den Strukturen werden unterschiedlich zusammengefaßt und einzelnen Feldern (Komponenten) zugewiesen. Für jedes Feld sind im Modell separate Erhaltungsgleichungen, geeignete Zustandsgleichungen sowie strömungsformabhängige Korrelationen für die Wechselwirkungsfunktionen von Masse, Impuls und Energie formuliert.

Die Anzahl der in den betrachteten Programmen zu lösenden Gleichungen ist geringer als die der berücksichtigten Materialien. Es werden vereinfachende Annahmen getroffen. Ein Beispiel dafür ist die Berechnung der Spaltgastemperatur in /8, 9, 10, 14/, die statt aus einer Energieerhaltungsgleichung entweder mit Hilfe eines Mittelungsverfahrens /8, 9, 14/ oder durch Gleichsetzen der

Gastemperatur entweder mit der Temperatur von Brennstoff oder mit der des Natriums /10/ bestimmt wird.

Bei der Berechnung der Relativbewegungen im Mehrphasen-Mehrkomponenten-Gebiet werden Stoffe zu Gemischen mit jeweils einer zugeordneten Geschwindigkeit zusammengefaßt. Die Rechenprogramme /7, 8, 9, 10, 14/ enthalten maximal zwei Geschwindigkeitsfelder bzw. Impulserhaltungsgleichungen. Die Gruppierung der Stoffe ist unterschiedlich. In EPIC /8/, EULFCI /9/ und PLUTO2 /10/ werden im Kühlkanal das flüssige Natrium, der Natriumdampf und die Spaltgase zu einem Gemisch zusammengefaßt. Dieses Gemisch kann sich relativ zum Brennstoff bewegen. Eine ins einzelne gehende Begründung für diese Zusammenfassung wird nicht gegeben. In CALIPSO /14/ werden in ähnlicher Weise wie in LEVITATE /12/ und in SIMMER II /13/ alle gas- und dampfförmigen Stoffe zu einem "leichten Feld" zusammengefaßt. Das flüssige Natrium und das Thermit bilden das "schwere Feld". Für jedes Feld ist eine separate Impulserhaltungsgleichung gelöst. An dieser Stelle ist zu erwähnen, daß LEVITATE /12/ drei Impulserhaltungsgleichungen löst, da es ein weiteres Impulsfeld für Brennstoffbrocken berücksichtigt.

In den Rechenprogrammen /7 bis 13/ sind für die Impuls- bzw. Energieaustauschkorrelationen für Mehrphasen-Mehrkomponenten-Gemische bekannte Beziehungen der Zweiphasendynamik klassischer Flüssigkeits-Dampf- bzw. Flüssigkeits-Gas-Gemische übernommen worden. Es werden zusätzlich vereinfachende Annahmen getroffen, wie z.B. das Zerteilen des Brennstoffs in Kugeln von gleichbleibendem Durchmesser /7, 8, 10, 14/ oder die Vernachlässigung des Wärmeübergangs durch Strahlung. Die zugrunde gelegten Modellvorstellungen des Impulsaustausches und des Wärmeübergangs sind untereinander nicht immer konsistent. Als Beispiel sei die in /10/ dargestellte Berechnungsweise des Wärmeübergangs von Brennstoff zum Natrium für eine Brennstoff-Filmströmung erwähnt. Für dieses Strömungsbild wird der Energieaustausch ausgehend von der Modellvorstellung errechnet, daß Brennstofftropfen im Natrium eingebettet sind.

In der veröffentlichten Version von CALIPSO /14/ sind die berücksichtigten Austauschfunktionen von Impuls bzw. Energie weiter vereinfacht, da der Reibbeiwert für die Zwischenphasenreibung wie auch die Wärmeübergangszahlen konstant gehalten werden.

Die Veröffentlichungen zu den oben genannten Rechenprogramme /7 bis 14/ geben wenig Information über die zugrunde liegenden Strömungsbilderkarten, die in Verbindung mit der Untersuchung von Leistungsstörfällen in natriumgekühlten Brutreaktoren anwendbar sind. Die Relevanz der Abbildung unterschiedlicher Strömungsformen für den berechneten Ablauf eines Leistungsstörfalls ist ebenfalls nicht detailliert dargestellt. In /10/ wird angegeben, daß die Einführung eines Brennstoff-Filmmodells im Kühlkanal die berechnete Materialumverteilung in Richtung einer geringeren Dispersion des Brennstoffes im Kühlkanal beeinflusst.

Ein weiterer Aspekt der Modellierung in /7, 8, 9, 10, 14/ betrifft die Blockadebildungen durch Erstarren von Brennstoff und/oder Stahl auf kalten Strukturen. SAS-FCI /7/ und EPIC /9/ enthalten diesbezüglich kein spezielles Modell, d.h. ausgefrorene Teilchen bleiben innerhalb der Strömung. Diese Betrachtungsweise gilt de facto auch für CALIPSO, da das vorgeschlagene Krustenbildungsmodell /14/ als nicht ausreichend detailliert anzusehen ist. PLUTO2 /10/, LEVITATE /12/ und SIMMER II /13/ enthalten dagegen aufwendige und detaillierte Blockadebildungsmodelle.

Die numerischen Verfahren zur Approximation der Differenzgleichungen basieren mit Ausnahme von SAS-FCI /7/ auf einer Eulerschen Schreibweise und auf Rechenmaschen mit versetztem Gitter (staggered grid). Das ursprüngliche CALIPSO-Modell /14/ betrachtet im gesamten Kühlkanalbereich, im Gegensatz zu /7, 8, 9, 10/, Netze mit ungleichförmigen Maschenweiten. Die Maschenlängen können dabei ebenfalls variabel sein. Die diskretisierten Erhaltungsgleichungen sind in einer ersten Version für die CALIPSO-Netze vereinfachend hergeleitet worden. Dies führt u.a. dazu, daß die berechneten Druckverluste von der gewählten räumlichen Diskretisierung abhängen können. LEVITATE /12/ enthält ein spezielles numerisches Verfahren, das eine korrekte Erfassung der Druckverluste bei unsteten Querschnittsänderungen ermöglicht.

Ein weiterer Aspekt der räumlichen Diskretisierung liegt in der Anwendung von Maßnahmen zur genauen Verfolgung der Phasengrenzen, um auf diese Weise die numerisch bedingte Massendiffusion zu minimieren. EPIC /8/, PLUTO2 /10/ und LEVITATE /12/ enthalten diesbezüglich spezielle numerische Verfahren. Derartige Maßnahmen werden in SIMMER II /13/ und in CALIPSO /14/ zur Zeit nicht berücksichtigt.

Das Zeitintegrationsverfahren in EPIC /8/, EULFCI /9/, PLUTO2 /10/ und CALIPSO /14/ basiert auf Varianten eines sogenannten Prediktor-Korrektor-Verfahrens. Die Numerik in CALIPSO /14/ ist diesbezüglich nicht in dem Maße optimiert wie z.B. die des PLUTO2-Rechenprogramms /10/.

### 1.3 Ziel der Arbeit

Die Ziele der in diesem Bericht dokumentierten Arbeit umfassen:

1. Die Erweiterung der theoretischen Modelle von CALIPSO für eine detaillierte Simulation der transienten Materialumverteilung und Wechselwirkungen innerhalb der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen, die in der Brennelementgeometrie eines schnellen Brutreaktors bei einem Leistungsstörfall entstehen können.
2. Die Überprüfung der getroffenen Annahmen anhand ausgewählter SIMBATH-Experimente.

Die im einzelnen verfolgten Aspekte der Weiterentwicklung der CALIPSO-Modelle entsprechen den gewonnenen Erkenntnissen beim Vergleich der ursprünglichen Programmversion /14/ mit Rechenprogrammen, die den "Stand der Technik" dokumentieren, wie SAS-FCI /7/, EPIC /8/, PLUTO2 /10/ (s. Kap. 1.2) und berücksichtigen insbesondere die aus den SIMBATH-Experimenten /6/ gewonnenen Erkenntnisse.

Ein erster Aspekt betrifft die Erweiterung von CALIPSO (s. Kap. 1.2), mit dem Ziel reale Geometrieverhältnisse besser abzubilden.

- a) Das Geometriemodell in CALIPSO wurde überarbeitet, um eine realitätsnahe Abbildung der SIMBATH-Teststreckengeometrie sowie die des angeschlossenen Kreislaufs zu ermöglichen.

Eine detaillierte Berücksichtigung von Ungleichgewichtseffekten innerhalb der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen und der daraus resultierenden Materialumverteilungen kann durch Erweiterung der zu lösenden Erhaltungsgleichungen erreicht werden (s. Kap. 1.2). In /7, 8, 9, 10, 14/ sind nur zwei Impulserhal-

tungsgleichungen (also Geschwindigkeitsfelder) zur Beschreibung der über die Reaktivitätsrückwirkungen bedeutsamen Relativbewegungen zwischen dem Brennstoff, dem flüssigen Natrium und den gasförmigen Stoffen vorgesehen. In den o.a. Rechenprogrammen wird ferner die Gastemperatur nur durch ein Mittelungsverfahren berechnet. Für Stäbe mit hoher Gasladung (Stäbe mit hohem Abbrand oder SIMBATH-Thermitstäbe) ist dieses Berechnungsverfahren sicherlich vereinfachend. Dadurch bedingt ist die Ermittlung des Gasdruckanteils am gesamten Druckaufbau nur approximativ. Die o.g. Gründe führten zur Notwendigkeit folgender Erweiterungen des CALIPSO-Modells:

- b) CALIPSO sieht die Lösung dreier separater Impulserhaltungsgleichungen für den Brennstoff (Thermit), für das flüssige Natrium und für die gasförmigen Stoffe vor. Für die Gasphase ist eine zusätzliche Energieerhaltungsgleichung in das Modell eingebracht worden.

Die Erkenntnisse der Untersuchung von Zweiphasenströmungen zeigen, daß die fluid- und thermodynamischen Wechselwirkungen sowohl innerhalb der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung als auch mit den begrenzenden Strukturen strömungsformabhängig sind. In den existierenden Rechenprogrammen zur Analyse von Leistungsstörfällen /7 bis 14/ werden jedoch nicht alle aus der Zweiphasendynamik bekannten Strömungsbilder (s. z.B. /15/) berücksichtigt (s. Kap. 1.2). Die Modellierung beschränkt sich meistens auf charakteristische Strömungsformen des Brennstoffs. Im Stabinneren wird in keinem der Modelle detailliert auf die Filmströmung eingegangen. Das Übergangsgebiet zwischen Blasen und Filmströmung ist ebenfalls nicht berücksichtigt. Über die anzuwendenden Strömungsbilderkarten für Mehrphasen-Mehrkomponenten-Gemische, die bei einem Leistungsstörfall in einem schnellen Brutreaktor entstehen, sind nur wenige Angaben bekannt. Den o.a. Betrachtungen entsprechend ist CALIPSO folgendermaßen erweitert worden:

- c) Ausgehend von Ergebnissen aus der Zweiphasenfluiddynamik sind Modelle zur approximativen Beschreibung unterschiedlicher Strömungsformen im Code eingebracht worden. Innerhalb dieser Modelle sind Korrelationen zur Bestimmung der Wandreibung, der Reibung zwischen den Strömungskomponenten und des Wärmeübergangs vorgesehen. Eine geeignete Strömungsbilderkarte ist im CALIPSO-Modell verfügbar.

Ein weiterer Aspekt der Erweiterung des CALIPSO-Modells betrifft Fragen der numerischen Lösungsverfahren. Den Ausführungen im Kap. 1.2 entsprechend sind prioritär folgende Verbesserungen vorgenommen worden:

- d) Die diskretisierte Form der Erhaltungsgleichungen ist in Verbindung mit einem zweidimensionalen Maschennetz mit variablen Maschenweiten und variablen Maschenlängen neu formuliert worden.
- e) Ein Verfahren zur korrekten Wiedergabe der Druckgradienten bei Querschnittssprüngen für Rechenmaschen mit versetztem Gitter (s. /12/) mußte in CALIPSO eingeführt werden.

Die bislang dargestellten Arbeiten befassen sich mit der Erweiterung der theoretischen Modellierung in CALIPSO. In Ergänzung dazu besteht ein zweiter Arbeitsschwerpunkt der Zielsetzung aus der Überprüfung des erweiterten Rechenprogramms anhand ausgewählter SIMBATH-Experimente /6/. Im Zusammenhang mit der Untersuchung von Vorgängen nach Brennstabversagen in natriumgefüllten Kühlkanälen wird in Kap. 1.2 gezeigt, daß es nur wenig veröffentlichte Information über die Relevanz der Modellierung unterschiedlicher Strömungsformen gibt (z.B. /10/). Daraus folgen die Zielsetzungen:

- f) Überprüfung des gesamten CALIPSO-Modells anhand ausgewählter SIMBATH-Experimente.
- g) Aufzeigen der Relevanz der Abbildung unterschiedlicher Strömungsformen im Zusammenhang mit den berechneten Materialumverteilungen nach Brennstabversagen in natriumgefüllten Kühlkanälen.

In den folgenden Kapiteln wird die überarbeitete Version von CALIPSO dokumentiert und der Stand der Arbeiten in bezug auf die Überprüfung einzelner Modelle und des Gesamtkonzeptes dargestellt. Die Frage der Relevanz der abgebildeten Strömungsformen wird behandelt. In der abschließenden Diskussion wird ein Überblick über weiterführende Arbeiten gegeben.

## 2. Geometriemodell von CALIPSO

Das Geometriemodell von CALIPSO umfaßt einen Einzelstab, einen Kühlkanal und ein äußeres Strömungsführungsrohr (Abb. 2.1).

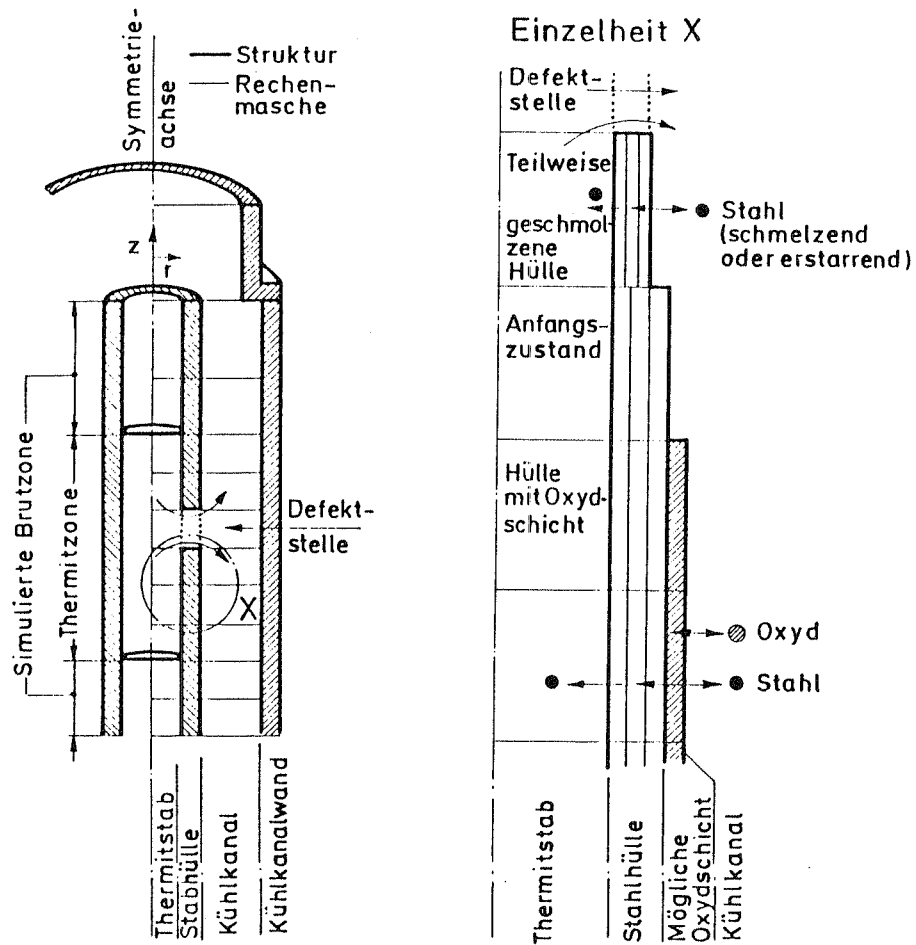


Abb. 2.1 Geometriemodell von CALIPSO

Der Stab ist axial in eine Thermitzone (Thermit = Brennstoff) und in simulierte obere und untere Brutzonen unterteilt. In Anlehnung an die SIMBATH-Versuche wird keine Wechselwirkung zwischen diesen Bereichen angenommen.

Die Stabhülle hat einen örtlich und zeitlich variablen Außenradius und einen konstanten Innenradius. Sie kann an mehreren axialen Positionen Defektstellen

aufweisen, durch die Material aus dem Stabinneren in den Kühlkanal ausgespritzt wird. Eine Defektstelle erstreckt sich stets über die gesamte Länge der betroffenen Rechenmasche. In azimuthaler Richtung wird mit Hilfe einer Porosität  $0 \leq \xi \leq 1$  die Dynamik der Defektausbreitung simuliert. Die Propagation jeder der Versagensstellen in axialer Richtung kann auch durch Schmelzangriff erfolgen (s. Abb. 2.1, Detail X). Auf der Kühlkanalseite können erstarrte Oxidkrusten mitberücksichtigt werden.

Der Kühlkanal, der radial nach außen hin durch die Kühlkanalwand begrenzt ist, hat einen örtlich und zeitlich veränderlichen Strömungsquerschnitt. Dies erlaubt die Simulation von Strukturen, wie z.B. Abstandshalter oder Drosseln, sowie von transienten Querschnittsänderungen durch Abschmelz- und Erstarungsvorgänge. Über den Stabbereich hinaus wird ein Natrium-Kreislauf mit einem dazugehörigen Plenum modelliert. Der Radius der Kühlkanalwand ist auch in diesem Bereich variabel, um auf diese Weise Querschnittsänderungen im SIMBATH-Kreislauf möglichst genau nachzubilden. Die maschenweise Vorgabe der axialen Komponente der Erdbeschleunigung ermöglicht ferner die Simulation eines geschlossenen Kreislaufes. Der Förderdruck einer elektromagnetischen Pumpe kann an beliebiger Stelle im Kreislauf vorgegeben werden. Örtlich auftretende Strömungshindernisse, wie Ventile, Rohrkrümmer, Kompensatoren u.a., werden durch die maschenweise Eingabe von Stoßverlustbeiwerten berücksichtigt.

Berechnungsformeln einiger charakteristischer geometrischer Größen des Stabes und des Kühlkanals, die in den folgenden Kapiteln dieses Berichtes angewendet werden, sind im Anhang A1 zusammengefaßt. Ein Geometrieabschnitt der Teststrecke bei einer Defektstelle des Stabes ist in der Abb. A1.1 dieses Anhanges gegeben.



### 3. Betrachtete Komponenten und Phasen

Im CALIPSO-Modell werden bewegliche Komponenten (im folgenden auch Strömungskomponenten genannt) und unbewegliche (Strukturen) betrachtet. Strömungskomponenten und Strukturen können unterschiedliche physikalische Zustände (Phasen) aufweisen wie: fest, flüssig und gasförmig.

Zu den Strömungskomponenten gehören:

- Aluminiumoxid: Dieser Stoff entsteht in den SIMBATH-Versuchen bei der chemischen Reaktion des Thermits und entspricht unter Reaktorbedingungen dem Uranoxid. Im Modell kann es geschmolzen sein oder sich in Form von erstarrten, aber beweglichen Partikeln befinden.
- Stahl: Diese Strömungskomponente umfaßt das bei der chemischen Reaktion entstehende Eisen, vermischt mit abgeschmolzenem Stahl der Zündvorrichtung und der Strukturen. Die Phasen dieser Komponente entsprechen denen von Aluminiumoxid.
- Natrium: Diese Komponente liegt als kompressible Flüssigkeit oder in Form von gesättigtem Dampf vor.
- Nicht kondensierbare Gase: Sie werden zur Simulation eines Abbrandzustandes dem Stabinneren vor Versuchsbeginn zugeführt oder entstehen während der chemischen Thermitreaktion.

Im Modell werden die Strömungskomponenten zu verschiedenen Gemischen zusammengefaßt (Tab. 3.1). Eine Komponente wurde neu in CALIPSO eingeführt. Sie entspricht dem homogenen Gemisch von Oxid und Stahl. In Anlehnung an die SIMBATH-Versuche wird es Thermit genannt.

Die Strukturen umfassen die Stabhülle, die Kühlkanalwand sowie die auf diesen Strukturen erstarrten Oxidkrusten.

Die wichtigsten Materialeigenschaften der Komponenten und Gemische, wie sie in CALIPSO benutzt werden, sind im Anhang A2 eingetragen.

Tabelle 3.1 Gemische von Komponenten

Benennung	Indi- zes	Zusammensetzung	Gemisch betrachtet für:	
			Erhaltungsgln.	konstitutive Gln.
Thermit	th	Aluminiumoxid, Eisen u. Stahl	Impuls (z-Richtung) Energie	Impulsaustausch  Wärmeaustausch
Natrium- gemisch	n	flüssiges Na- trium u. Na- triumdampf	Energie	Zustandsgln.
Gasphase	v	Gase und Na- triumdampf	Impuls (r-Richtung)	Impulsaustausch
flüssige Phase	l	Thermit u. flüs- siges Natrium	Impuls (r-Richtung)	Impulsaustausch
Gemisch aller Kom- ponenten	mix	Thermit, Na- trium, Gas	-	Impulsaustausch

#### 4. Erhaltungsgleichungen und konstitutive Gleichungen des CALIPSO-Modells

Das theoretische Modell von CALIPSO gehört zu den sogenannten "working models" /16 bis 25/. Das sind vereinfachte mathematische Modelle der Erhaltungsgleichungen und der dazugehörigen konstitutiven Gleichungen, die eine bestimmte Klasse von physikalischen Phänomenen approximativ beschreiben können. Dabei stellen die Erhaltungsgleichungen allgemeingültige Gesetzmäßigkeiten dar. Die konstitutiven Gleichungen beschreiben die spezifischen physikalischen Merkmale der simulierten Phänomene unter Berücksichtigung der Geometrie, der auftretenden Stoffe, der Strömungsformen u.a.

Für Mehrphasenströmungen gibt es wegen der komplexen, mathematisch schwer zu beschreibenden physikalischen Zusammenhänge kein theoretisches Modell, das als allgemein gültig angesehen wird /23, 26 bis 31/. Für praktische Anwendungen müssen deshalb vereinfachende Annahmen getroffen werden. Einige der wichtigsten Annahmen, die dem CALIPSO-Modell zugrunde liegen, sind:

1. Die Differenzenformulierung der Erhaltungsgleichungen wird durch das Zeit-Volumen-Mittelungsverfahren aus entsprechenden, örtlich und instantan gültigen Gleichungen abgeleitet. Die gemittelten Gleichungen werden in einer zweidimensionalen, axialsymmetrischen Geometrie gelöst. Es ist daher zu beachten, daß errechnete physikalische Größen, wie Dichten, Geschwindigkeiten, Drücke, Temperaturen u.a., Mittelwerte über Integrationsvolumina (für CALIPSO das Maschenvolumen) darstellen. Durch die Mittelung bedingt entsteht u.a. als neue Unbekannte der Volumenanteil jeder Komponente im Maschenvolumen.
2. Der Druck in allen Phasen und Komponenten ist immer gleich der Summe aller Partialdrücke. D.h., Oberflächenspannungseffekte und Druckfluktuationen werden vernachlässigt.
3. Die Zustandsgleichungen werden in unveränderter Form auch für gemittelte Größen angewendet. Für die flüssige und für die dampfförmigephase eines Stoffes ist thermodynamisches Gleichgewicht angenommen. Nicht kondensierbare Gase werden als ideales Gas behandelt.

4. Die Grenzen zwischen den einzelnen Strömungskomponenten haben keine eigenen Geschwindigkeiten oder Temperaturen. Ferner werden die Wärmeleitung und die rein viskosen Scherkräfte im Inneren ("bulk") der Komponenten vernachlässigt. Lediglich die Übertragungsraten von Impuls bzw. Energie der Komponenten untereinander und mit den Strukturen sind im Modell berücksichtigt.
5. Für die Ermittlung der Impuls- bzw. Energieaustauschfunktionen wird von typischen und völlig ausgebildeten Strömungsformen ausgegangen. Die verwendeten Korrelationen entsprechen meistens Erkenntnissen aus eindimensionalen, stationären und isothermen Zweiphasenströmungen klassischer Flüssigkeits-Dampf- bzw. Flüssigkeits-Gas-Gemische. Die Übertragbarkeit auf Stoffkombinationen und auf transiente Strömungen, wie sie in den SIMBATH-Versuchen typischerweise auftreten, wird vorausgesetzt.

Diese Annahmen gelten als "Stand der Technik" für die Klasse von Modellen, zu denen CALIPSO durch seine Aufgabenstellung gehört z.B. /10, 12 u.a/ (siehe Kap. 1.2).

In den folgenden Kapiteln werden im einzelnen die Erhaltungsgleichungen und die konstitutiven Gleichungen des CALIPSO-Modells angesprochen. Erhaltungsgleichungen und konstitutive Gleichungen des Modells sind in der Tab. 4.1 zusammengestellt.

#### 4.1 Erhaltungsgleichungen

Die Herleitung der Komponenten-Erhaltungsgleichungen aus entsprechenden ungemittelten örtlich und instantan gültigen Gleichungen /32/ erfolgt über ein Zeit-Volumen-Mittelungsverfahren /32, 33, 34 /. Folgende Mittelungsoperatoren werden angewendet:

- für eine physikalische Größe G (Druck, Geschwindigkeit, Temperatur u.a.)

$$\frac{1}{V_M \Delta t} \int_{V_M} \int_{\Delta t} G dt dV = \langle G \rangle_{t,3} \quad (4.1)$$

Tabelle 4.1 In CALIPSO gelöste Gleichungen

Gleichung	Ergebnis
<b>1. Erhaltungsgleichungen (Kap. 4.1)</b>	
<b>1.1 Massenerhaltung</b>	
bewegtes Oxid	$\dot{Q}_{ox}$
bewegter Stahl	$\dot{Q}_s$
Natriungemisch	$\dot{S}_n$
Natriumdampf	$\dot{S}_{nv}$
Gase	$\dot{S}_{fg}$
Stabhülle (separat f. Stahl u. Oxid)	$r_c; r_{cs}$
Kühlkanalwand (separat f. Stahl u. Oxid)	$r_w; r_{ws}$
<b>1.2 Impulserhaltung</b>	
flüssiges Natrium (r-z)	$\mu_n; v_{nl}$
Thermit (r-z)	$\mu_t; v_{th}$
Gasphase (r-z)	$\mu_v; v_v$
<b>1.3 Energieerhaltung</b>	
Thermit (Oxid + Stahl)	$e_{th}$
Natriungemisch	$e_n$
Gase	$e_{fg}$
Stabhülle	$T_c$ (Profil)
Kühlkanalwand	$T_w$ (Profil)
Oxidkrusten (separat f. Hülle u. Wand)	$T_c; T_w$
<b>2. Konstitutive Gleichungen (Kap. 4.2)</b>	
<b>2.1 Zustandsgleichungen (Zugl)</b>	
kalorische Zugl Natriungemisch	$T_n$
kalorische Zugl Thermit (Oxid+Stahl)	$T_{th}$
kalorische Zugl Gas	$T_{fg}$
thermische Zugl flüss.Natrium	$\dot{S}_{nl}^p$
thermische Zugl Natriumdampf	$\dot{S}_{nv}^p$
thermische Zugl Oxid	$\dot{S}_{ox}^p$
thermische Zugl Stahl	$\dot{S}_s^p$
thermische Zugl Gas	$\dot{p}_{fg}$
Dampfdruckkurven von Natrium, Oxid, Stahl	$p_n, p_s; p_{ox};$ $p_{th} = p_s + p_{ox}$
Druck=Summe d.Partialdrücke	$p$
<b>2.2 Austauschfunktionen</b>	
Natrium Phasenwechselrate	$\Gamma_n$
Stahl,Oxid Phasenwechselrate	$\Gamma_s, \Gamma_{ox}$
Energieaustausch (zwischen Kom- ponenten u. mit Strukturen)	$Q; F \cdot \underline{u}$
Impulsaustausch mit Strukturen (r-z)	$F^{vis} \cdot \underline{u}$
Impulsaustausch zwischen Komponenten (r-z)	$\vec{r}^k \cdot \underline{u}_{rel}; F \cdot \underline{u}$

- für die Zeitableitung

$$\frac{1}{V_M \Delta t} \int_{V_M} \int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (s^P \Psi) dt dV = \langle s^P \Theta \Psi \rangle_{t,3} \quad (4.2)$$

- für die konvektiven Terme durch die begrenzenden Flächen (oben, unten, rechts, links) des Integrationsvolumens

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_M \Delta t} \int_{V_M} \int_{\Delta t} \nabla (s^P \Psi \underline{u}) dt dV &= \frac{1}{V_M} \int_{A_{V_M}} \langle s^P \Theta \Psi \underline{u} \underline{n} \rangle_t dA = \\ \frac{1}{V_M} [ &\langle s^P \Theta \Psi v A \rangle_{t,2}^{\text{oben}} - \langle s^P \Theta \Psi v A \rangle_{t,2}^{\text{unten}} + \langle s^P \Theta \Psi u A \rangle_{t,2}^{\text{rechts}} - \langle s^P \Theta \Psi u A \rangle_{t,2}^{\text{links}} ] \end{aligned} \quad (4.3)$$

In diesen Gleichungen zeigt das Symbol  $\langle \quad \rangle$  einen Mittelwert über Zeit und Maschenvolumen (Index t,3), über Zeit und Begrenzungsflächen  $A_{V_M}$  des Maschenvolumens (Index t,2) bzw. nur über der Zeit (Index t) an. Die betrachtete positive Richtung im Koordinatensystem entspricht der Konvention in Abb. 2.1. Die Größe  $\Psi$  ist zu ersetzen durch 1 für die Massenerhaltung, durch den Geschwindigkeitsvektor  $\underline{u}$  für die Impulserhaltung und durch die innere Energie  $e$  für die Energieerhaltung. Die in Gl. 4.2 und 4.3 auftretende Größe  $\Theta$  ist der Volumenanteil einer Strömungskomponente im Integrationsvolumen  $V_M$ . Für die Komponente  $k$  gelten folgende Beziehungen:

$$\Theta_k = V_k / V_M \quad (4.4)$$

$$S_k = s_k^P \Theta_k \quad (4.5)$$

$$\sum_k \Theta_k = 1 \quad (4.6)$$

Die Größe  $V_k$  ist das Gesamtvolumen der Komponente  $k$  im Volumen  $V_M$ .  $S_k$  wird als Schmierdichte bezeichnet. In den nachfolgend gegebenen Gleichungen wird vielfach das Produkt  $s_k^P \Theta_k$  entsprechend Gl. 4.5 durch die Schmierdichte  $S_k$  ersetzt.

Die Anwendung des o.a. Mittelungsverfahrens führt zu einer Formulierung der diskretisierten Form von konvektiven Termen, die es ermöglicht, Änderungen des Strömungsquerschnittes in radialer und in axialer Richtung korrekt zu berücksichtigen (s. auch Kap. 5.4).

In den folgenden Formulierungen der Erhaltungsgleichungen wird der Einfachheit halber das Symbol  $\langle \rangle_{t,z}$  weggelassen und der Zeit-Flächenmittelwert ohne Index aufgeführt. Ferner ersetzt  $\sum^* \langle \rho \psi \underline{u} A \rangle$  die Summe aller konvektiven Terme (Gl. 4.3).

### Massenerhaltung

Für die Strömungskomponenten  $k = \text{Oxid, Stahl, Natriungemisch, Natriumdampf oder Gas}$  gilt:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{1}{V_M} \sum^* \langle \rho_k \underline{u}_k A \rangle = \Gamma_k \quad (4.7)$$

D.h., die Summe aus zeitlicher Änderung der Schmierdichte und gesamten konvektiven Massentransport ist gleich dem Massen-Quellterm  $\Gamma$ .

Im Falle der Gasphase kann durch Vorgabe einer Zeitfunktion für  $\Gamma_{fg}$  das Nachgasen des Thermits bzw. die Spaltgasfreisetzung im Brennstoff berücksichtigt werden.

Für Strukturen bzw. Oxidkrusten ist im Modell folgende Massenerhaltungsgleichung angewendet /14/:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k^p A_{st,k} \Delta z) = \sum \Gamma_k A_{st}^v \quad (4.8)$$

$k = \text{Stahl, Oxidkruste}$

ist die Fläche der Strukturen in horizontaler Richtung

ist die Mantelfläche.

Die entsprechenden Massen-Quellterme  $\Gamma_k$  sind im Gegensatz zu Gl. 4.7 flächenbezogen.

### Energieerhaltung

Die Erhaltungsgleichung der inneren Energie ( $e = c_v T$ ) der Strömungskomponenten  $k = \text{Natriungemisch, Thermit oder Gas}$  hat in CALIPSO folgenden Aufbau:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (s_k e_k) + \frac{1}{V_M} \sum^* \langle s_k e_k \underline{u}_k A \underline{n} \rangle &= \frac{1}{V_M} \left[ \underbrace{\sum_j^! Q_{k,j}}_{\text{wü. zw. Komponenten}} + \underbrace{\sum_{st} Q_{k,st}}_{\text{Wü mit Strukturen}} \right. \\
 &+ \underbrace{\sum_j^! \theta_k / (\theta_k + \theta_j) F_{j,k}^k (\underline{u}_j - \underline{u}_k)}_{\text{Wü Reibung zw. Komponenten}} + \underbrace{\sum_{st}^! F_{-k,st}^{vis} \underline{u}_k}_{\text{Wü Reibung Strukturen}} + \underbrace{\sum_{st}^! Q^r}_{\text{Wü Phasenwechsel}} \left. \right] \\
 - p \left[ \frac{\partial}{\partial t} \theta_k + \frac{1}{V_M} \sum^* \langle \theta_v \underline{u}_v A \underline{n} \rangle \right] & \\
 \text{Expansionsarbeit} &
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

↓  
(5.M) 5.75  
diskutiert

Die Einführung einer Energieerhaltungsgleichung für die Gasphase wurde bei den Nachrechnungen von SIMBATH-Versuchen mit CALIPSO notwendig (s. Kap. 6.3). Die Rechenergebnisse zeigen, daß der Ausspritzvorgang weniger durch die Dampfdrücke der heißen Flüssigkeit, als vielmehr durch den Gasdruck dominiert wird. Damit ist der transiente Gasdruckaufbau im Stabinneren und im Kühlkanal von großer Bedeutung für den Versuchsablauf. Die Berechnung der Gastemperatur nur aufgrund eines Mittelungsverfahrens zwischen den Temperaturen von Thermit und Natrium erscheint deshalb als zu vereinfachend.

Die Energieerhaltungsgleichungen für Strukturen bzw. für Oxidkrusten sind /14/:

$$\underbrace{c_{p,k} s_k^p A_{st,k} \Delta z / N_k \frac{\partial}{\partial t} (T_k)}_{\text{Aufheizung}} = \underbrace{\sum Q_{ein} - \sum Q_{aus}}_{\text{Wärmeleitung u. Konvektion}} + \underbrace{\sum Q^r}_{\text{Phasenwechsel}}
 \tag{4.10}$$

k = Stahlschicht, Oxidkruste

### Impulserhaltung

In radialer Richtung gilt die Annahme, daß Thermit und das flüssige Natrium als Folge eines intensiven Vermischungsvorganges die gleiche Geschwindigkeit haben. Es werden nur zwei Impulserhaltungsgleichungen gelöst, und zwar für das Gemisch Thermit-flüssiges Natrium (= flüssige Phase) und für das Gemisch Gas-Natriumdampf (= Gasphase). Der Aufbau dieser Gleichungen lautet /14/:



$$\underbrace{\frac{\partial (\rho_k u_k)}{\partial t} + \frac{1}{V_M} \sum_i^* \langle S_k u_k \underline{u}_k A \underline{n} \rangle}_{\text{Beschleunigung}} + \underbrace{\frac{\partial \tilde{S} u_{rel}}{\partial t} + \frac{1}{V_M} \sum_i^* \langle \tilde{S} u_{rel} \frac{u_l + u_w}{2} A \underline{n} \rangle}_{\text{virtuelle Masse}} \quad (4.11)$$

$$= \underbrace{-\theta_k \frac{\partial p}{\partial r}}_{\text{Druckgradient}} + \frac{1}{V_M} \left( \underbrace{-F_k^{vis}}_{\text{Reibung Struktur}} + \underbrace{\sum_j F_{j,k}^k}_{\text{Reibung zw. Komponenten}} + \underbrace{F^r}_{\text{Phasenwechsel}} \right)$$

k = flüssige Phase, Gasphase

Einschränkend sind im Modell derzeit nur radiale Geschwindigkeiten größer oder gleich Null zugelassen. Sie entsprechen einer Ejektion aus dem Stabinneren in den Kühlkanal.

In axialer Richtung werden drei Impulserhaltungsgleichungen gelöst: für das Thermit, für das flüssige Natrium und für die Gasphase. Auf diese Weise werden schlupfbehaftete Strömungen dieser Komponenten, die besonders für Filmströmungen bedeutend sein können, berücksichtigt. Die Methodik geht von der Vorstellung einer existierenden geometrischen Trennung dieser Stoffe durch das vorhandene Gas und durch entstehende Dampfschichten aus. Folgende Impulserhaltungsgleichungen werden in axialer Richtung gelöst:

$$\underbrace{\frac{\partial (\rho_k v_k)}{\partial t} + \frac{1}{V_M} \sum_i^* \langle S_k v_k \underline{u}_k A \underline{n} \rangle}_{\text{Beschleunigung}} = \underbrace{-\theta_k \frac{\partial p}{\partial z}}_{\text{Druckgradient}} - \underbrace{\rho_k g_z}_{\text{Schwerkraft in z-Richtung}} \quad (4.12)$$

$$+ \frac{1}{V_M} \left( \underbrace{-\sum_{st} F_{k,st}^{vis}}_{\text{Reibung mit Strukturen}} + \underbrace{\sum_j F_{j,k}^k}_{\text{Reibung zw. Komponenten}} + \underbrace{F^r}_{\text{Impulsaust. bei Phasenwechsel}} \right)$$

k = Thermit, flüssiges Natrium, Gasphase

Die Gleichungen 4.12 enthalten standardmäßig, entsprechend einer in /14/ ausgesprochenen Empfehlung, keinen Term der virtuellen Masse.

Details über die Berechnungsweise einzelner Terme der Impulserhaltungsgleichungen für beide axiale Richtungen werden in Kap. 5.4 gegeben.

Die angegebenen Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls werden in unveränderter Form für alle betrachteten Strömungsformen eingesetzt. Es verändern sich lediglich die angenommenen strömungsformabhängigen Austauschfunktionen von Impuls und Energie der Strömungskomponenten untereinander und mit den begrenzenden Strukturen.

#### 4.2 Konstitutive Gleichungen

Diese Gleichungen lassen sich in folgende Kategorien unterteilen:

- Zustandsgleichungen, die Zeit-Volumen-gemittelte physikalische Eigenschaften der berücksichtigten Materialien beschreiben.
- Sogenannte topologische Gesetze /23/. Diese liefern Informationen über die tatsächliche Struktur der Grenzen zwischen den Strömungskomponenten (= Strömungsformen). Diese Information geht durch die volumetrische Mittelung der Erhaltungsgleichungen verloren. Sie ist notwendig, da Impuls- und Energieaustauschfunktionen nur für bestimmte geometrische Anordnungen bekannt sind. Zu den topologischen Gesetzen werden auch Strömungsbilderkarten sowie Modelle zur Berechnung von geometrischen Daten der Phasengrenzen (Tropfen- bzw. Blasenradien, Filmstärken) gezählt.
- Austauschfunktionen von Impuls, Energie und Masse der Strömungskomponenten untereinander und mit den begrenzenden Strukturen.

Die Bestimmung geeigneter konstitutiver Gleichungen ist die Hauptschwierigkeit bei der Modellierung von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen. Ein allgemein gültiger mathematischer Ausdruck des konstitutiven Gleichungssatzes ist nicht bekannt /23, 29 bis 32/. Die SIMBATH-Versuche ermöglichen ihrerseits keine Aufstellung komplexer konstitutiver Gleichungen wegen des stark transienten Ablaufes, den lokal auftretenden Wechselwirkungen und der beschränkten Möglichkeiten der Meßdatenerfassung. Dadurch bedingt entsteht die Notwendigkeit vereinfachter Annahmen und empirischer Ansätze.

#### 4.2.1 Zustandsgleichungen

Die berücksichtigten Zustandsgleichungen in CALIPSO (s. Tab. 4.1) sind:

- Thermische Zustandsgleichungen:

$$p_k = f(p_k, T_k) \quad (4.13)$$

k = flüssiges Natrium, Natriumdampf, Aluminiumoxid, Stahl, Gas

- Kalorische Zustandsgleichungen:

$$e_k = f(T_k) \quad (4.14)$$

k = Natriumgemisch, Thermit, Gas

- Druckberechnung:

$$p_k = f(T_k) ; \quad p = \sum p_k \quad (\text{Dalton'sches Gesetz}) \quad (4.15)$$

k = Natriumgemisch, Aluminiumoxid, Stahl, Gas

Mit Ausnahme der kalorischen Zustandsgleichung von Gas sind alle anderen Funktionen aus /14/ übernommen worden.

Wegen seiner Bedeutung für die Rechenergebnisse wird an dieser Stelle das Berechnungsverfahren des Gesamtdruckes in einer Rechenmaschine angesprochen. Für einphasige Strömungen des kompressiblen flüssigen Natriums beruht die Berechnung auf einem Gleichgewichtsprinzip zwischen dem Druck in der Flüssigkeit und dem Druck in einer kleinen, künstlich eingeführten Blase (Artificial Bubbling Concept = ABC Technik). Die Blase ist zu Beginn des Zeitintegrationsverfahrens mit einer Gasmenge entsprechend einem typischen Volumenanteil von  $10^{-5}$  gefüllt. Dieses Gas wird so lange festgehalten, bis "echtes" Gas oder Dampf durch Transport oder Verdampfung in der entsprechenden Masche vorliegt. Die Druckberechnung kann dadurch auch bei einphasiger Natriumströmung wie im Falle einer Zweiphasenströmung vollzogen werden. Das Verfahren, das in /14/ im Detail beschrieben ist, bewirkt beim Durchgang einer Druckwelle durch eine Re-

chenmasche ein Zusammendrücken des Bläschens. Umgekehrt vergrößert sich das Gasvolumen bei einer Entlastungswelle.

Der angesprochene Algorithmus ermöglicht die Umgehung der Schwierigkeiten, die sich ansonsten beim Übergang zwischen einphasiger und mehrphasiger Strömung ergeben /8/. Die Methodik benötigt aber höhere Rechenzeiten als es für eine inkompressible Behandlung des einphasigen, flüssigen Natriums der Fall wäre. Ferner kann die Überlagerung von Druckwellen zur Berechnung von zeitlich begrenzten Druckauslöschungen führen. Verfahrensbedingt hat dies die Bildung von "künstlichen" Zweiphasen-Zonen zur Folge (s. Kap. 6.3.1.4.1).

Diese Druckberechnungsmethode kann auch für einphasige Strömungen mit flüssigem Natrium und geringem (bis etwa 20 %) Thermitvolumenanteil angewendet werden. Für größere Volumenanteile dieser als inkompressibel betrachteten Komponente kann das Verfahren zu unrealistisch hohen Druckspitzen führen.

In den Bereichen der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen wird entsprechend dem Daltonschen Prinzip der Gesamtdruck durch Aufsummierung der Partialdampfdrücke von Gas, Stahl, Oxid und Natrium ermittelt.

#### 4.2.2 Annahmen zur Topologie

##### 4.2.2.1 Modellierte Strömungsformen

In den SIMBATH Experimenten werden die auftretenden Materialumverteilungen auf Filmen festgehalten. Die Aufnahmen zeigen, daß im Stabinneren und im Kühlkanal an verschiedenen axialen Positionen unterschiedliche Strömungsbilder zum selben Zeitpunkt vorkommen können. Den qualitativen Erkenntnissen dieser Versuche /38, 39/ entsprechend, kann sich eine Strömungsformverteilung ergeben, wie sie in Abb. 4.1 skizziert ist.

Im Stabinneren befinden sich Bereiche mit Filmströmung, mit Tropfenströmung und mit einer Übergangsströmung zwischen Blasen und Filmströmung. Im Kühlkanal entsteht nach Stabversagen eine Gasblase mit einer unregelmäßigen Gas-Flüssigkeits-Grenze und mit homogen verteilten Tropfen. Auf beiden Strukturen bilden sich zeitweilig Natrium- und später Thermitfilme aus.

Die in Abb. 4.1 gezeigte axiale Staffelung der räumlichen Komponentenverteilungen wird in CALIPSO durch Zuordnung einer Strömungsform für jede Rechenmasche und für jeden Zeitschritt simuliert.

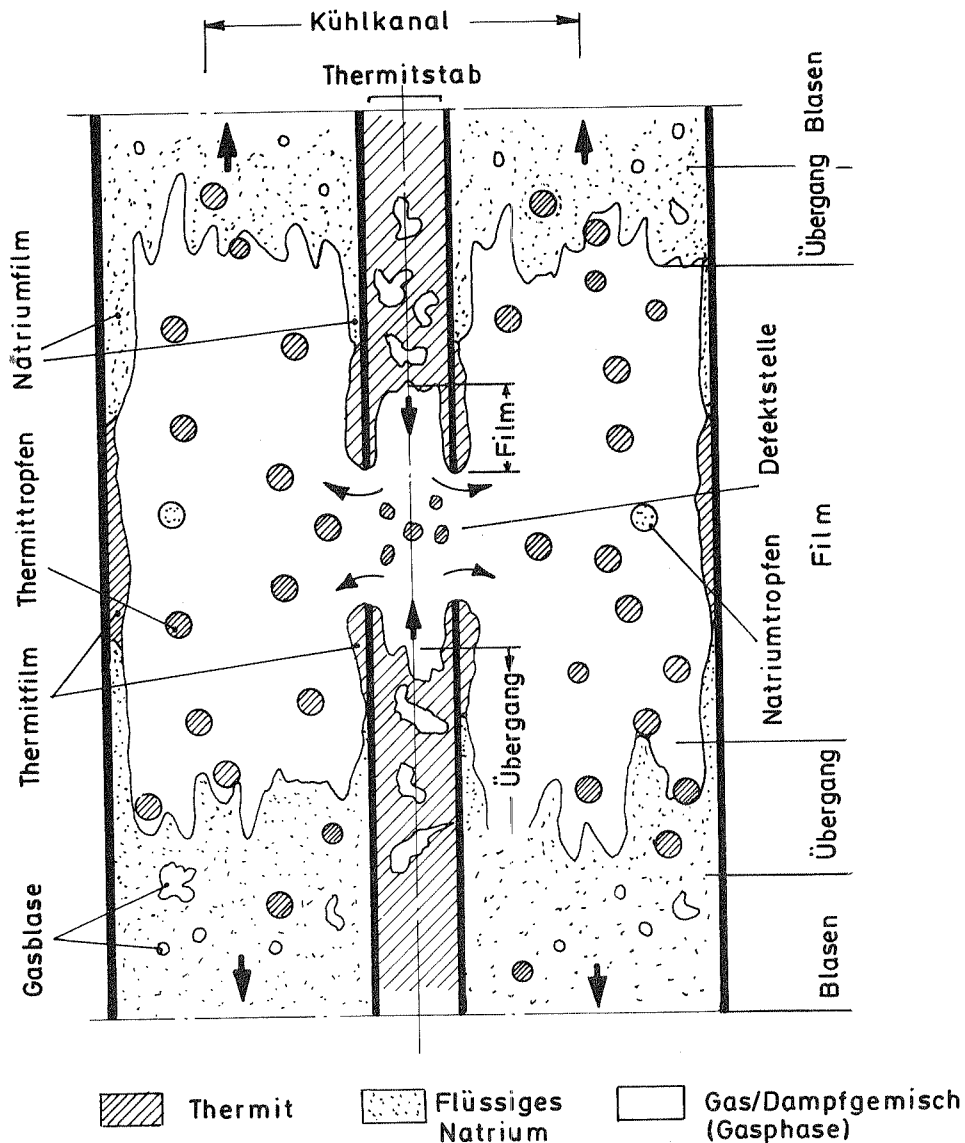


Abb. 4.1 Modellvorstellung der Strömungsformverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal

Die derzeitige CALIPSO-Version enthält approximative Modelle für die Beschreibung von Blasenströmung, von Übergangsströmung, die eine Zusammenfassung der Pfropfen- (engl. slug) und der Schwall- (engl. churn) Strömung darstellt, von Filmströmung und von Tropfenströmung. Alle Strömungsformen treten sowohl im Stabinneren als auch im Kühlkanal auf.

Die Modelle entsprechen typischen räumlichen Verteilungen der Strömungskomponenten für Zweiphasenströmungen /35, 36, 37/. Es werden vereinfachte Geometrien der Grenzen zwischen diesen Komponenten betrachtet (wie z.B. starre, kugelförmige Blasen/Tropfen, glatte Filme), weil nur dafür Impuls- bzw. Energieaustauschfunktionen bekannt sind. Folgende Modellvorstellungen liegen den in einem axialen Abschnitt auftretenden Strömungsformen zugrunde:

1. Im Blasenströmungsmodell (s. Abb. 4.2) wird vorausgesetzt, daß die aus Natriumdampf und Gasen gebildete Gasphase in Form von Kugeln gleichen Durchmessers homogen innerhalb eines Gemisches aus Thermit und flüssigem Natrium (= flüssige Phase) verteilt ist.
2. Für die Übergangsströmung (s. Abb. 4.2) wird als "kontinuierliche Phase" das Gemisch aller Phasen und Stoffe angenommen. Für Gasvolumenanteile unter 0,5 bildet die Gasphase die disperse Phase, bei größeren Voidanteilen sind es die Thermit- und die Natriumtropfen.
3. Bei der Modellierung der Tropfenströmung (s. Abb. 4.2) wird davon ausgegangen, daß Natrium- und Thermittropfen in der Gasphase homogen verteilt sind.

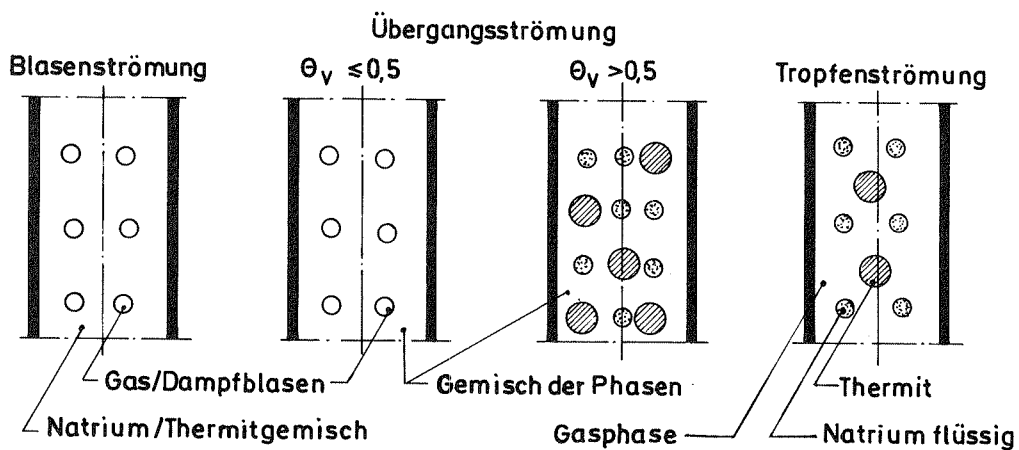


Abb. 4.2 Modellierung von Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung

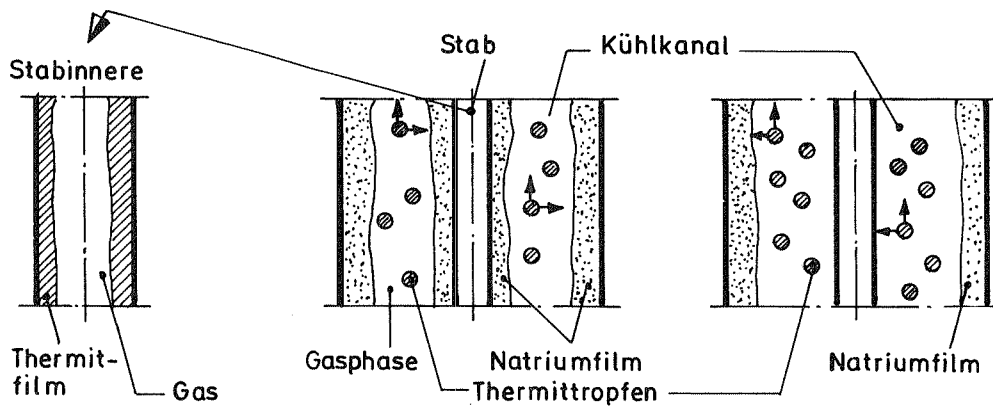
4. Im Filmmodell des Stabinneren werden ein glatter, kontinuierlicher Thermitfilm auf der Hüllrohrinnenseite und eine Gasphase betrachtet (Abb. 4.3, a).

Im Filmmodell des Kühlkanals werden die Filme, die auf der Stabhülle und auf der Kühlkanalwand haften, getrennt betrachtet (Abb. 4.3, b, c). Es wird zwischen einer reinen Natriumfilmströmung, einer reinen Thermitfilmströmung und dem Übergang zwischen diesen Verteilungen unterschieden. Im Gasbereich des Kühlkanals befinden sich stets Flüssigkeitstropfen (Abb. 4.3). In dieser Abbildung ist auch die Modellvorstellung für die zeitliche Reihenfolge der Filmmodelle eingetragen.

Für die Natriumfilmströmung (Abb. 4.3b) wird angenommen, daß zunächst das gesamte Inventar an flüssigem Natrium auf beiden Strukturen gleich starke Filme bildet. Im weiteren Verlauf bestimmen für jede Struktur der Phasenwechsel und der Materialtransport die entsprechende Filmstärkedynamik. Thermit befindet sich in Form von Kugeln homogen in der Gasphase verteilt. Es kann durch Niederschlag mit den Filmen in Kontakt kommen, aber nur nach Austrocknen eines Filmes auf der entsprechenden Struktur haften bleiben. Der Entzug von Natriumtropfen aus den Filmen ist nicht berücksichtigt, da man von der vereinfachenden Annahme ausgeht, daß alle dem Film entzogenen Tropfen sich im gleichen Rechenzeitschritt wieder auf den Filmen niederschlagen. Diese Annahme ist durch die begrenzte Anzahl gelöster Impulserhaltungsgleichungen und Geschwindigkeitsfeldern in CALIPSO bedingt.

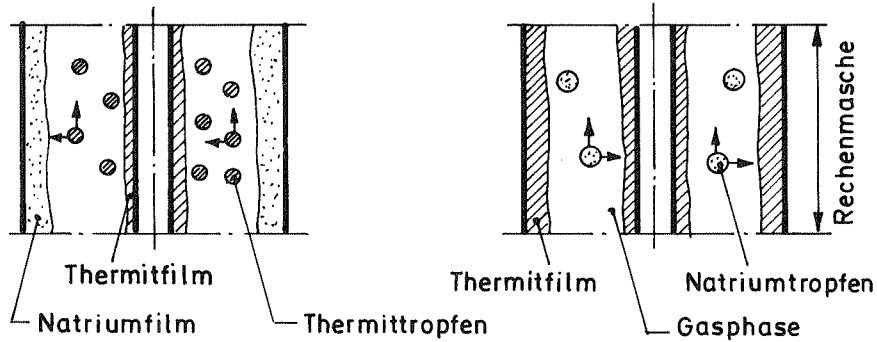
Nach Abbau des Natriumfilmes auf dem heißen Hüllrohr (Abb. 4.3,b) können sich durch Tropfenniederschlag zunächst Thermitpartialfilme auf dieser Struktur bilden. Es wird angenommen, daß Partialfilme mit einer vorgegebenen Minimalstärke azimuthal nur einen Bruchteil der Struktur bedecken und daß sie sich bei genügend vorhandenem Thermit zunächst in dieser Richtung ausbreiten (s. Abb. 4.4).

Während auf der Stabhülle ein Thermitfilm vorhanden ist, kann möglicherweise auf der meist kälteren Kühlkanalwand der Natriumfilm noch nicht abgetragen sein (Abb. 4.3,c).



a) Thermitfilm - Modell im Stabinneren

b) Natriumfilm-Modell im Kühlkanal



c) Thermitfilm-Modell im Kühlkanal

Abb. 4.3 Modellvorstellung für die Filmströmung

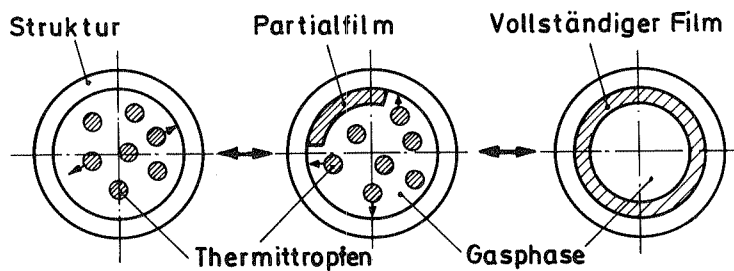


Abb. 4.4 Modellvorstellung für Thermitpartialfilme



Später, nachdem der Natriumfilm auf der Kühlkanalwand ebenfalls ausgetrocknet ist, bilden sich auch auf dieser Struktur zunächst partielle, dann vollständige Thermitfilme aus. Flüssiges Natrium, das möglicherweise aus anderen Bereichen herantransportiert wurde oder durch Dampfkondensation entsteht, ist in Tropfenform im Gasbereich homogen verteilt.

Für jeden der Filme, wie auch für jede in Tropfenform auftretende Komponente, werden die Masse und auch die entsprechenden Wärmeaustauschtermen und Reibungskräfte ermittelt. Die Lösung der Erhaltungsgleichungen von Energie bzw. Impuls, Gl. 4.9 bis 4.12, erfolgt unter Berücksichtigung dieser Austauschtermen und ergibt für jede der betrachteten Strömungskomponenten eine mittlere Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur innerhalb der entsprechenden Rechenmasche.

#### 4.2.2.2 Strömungsbilderkarten

Strömungsbilderkarten sind Abbildungen von physikalischen Kriterien, mit deren Hilfe bestimmt werden kann, welche Strömungsform sich in einem Teststreckenabschnitt einstellt.

Für senkrecht gerichtete, stationäre und isotherme Zweiphasenströmungen, insbesondere von Wasser-Luft- und Wasser-Wasserdampf-Gemischen, sind mehrfach Strömungsbilderkarten veröffentlicht worden /z.B. 36, 40, 41, 42, 43/. Die Autoren gehen dabei entweder semiempirisch vor, indem sie ausgewählte Versuchsergebnisse auswerten /36, 41, 42, 44, 45/, oder versuchen, die Physik der Übergangsbedingungen zwischen Strömungsformen /40, 43, 46/ theoretisch zu beschreiben.

Strömungsbilderkarten, die auf einer semiempirischen Vorgehensweise beruhen, haben den Vorteil, recht genau im Rahmen der getesteten Bedingungen zu sein. Es werden meistens unterschiedliche Koordinatensysteme angewendet. Die Definition einzelner Strömungsformen ist ebenfalls nicht einheitlich. Für Aufwärts-, Abwärts- oder Gegenströmungen weichen die Strömungsbilderkarten z.T. beachtlich voneinander ab /47/. Weissmann /41/ und Hewitt /36/ meinen deshalb, daß die Übertragung einzelner Kriterien auf andere Bedingungen als die getesteten zu nicht quantifizierbaren Fehlern führen könnte.

Für Strömungsbilderkarten, die auf theoretischer Modellierung basieren, ist prinzipiell eine Übertragbarkeit zu erwarten, solange sich auch die zugrunde gelegten physikalischen Überlegungen verallgemeinern lassen. In Wirklichkeit führt jedoch der Vergleich dieser Verfahren mit experimentellen Daten nicht immer zu einer zufriedenstellenden Übereinstimmung /48/. Ferner beschränken sich die meisten Modelle auf aufwärtsgerichtete Strömungen beider Phasen. Taitel und Barnea /46/ haben auch für die Gegenstrom-Richtung entsprechende Gleichungen vorgeschlagen. Bei abwärtsgerichteten Strömungen gibt es z.Z. keine zuverlässigen Korrelationen.

Für CALIPSO müssen Strömungsbilderkarten von Zweiphasenströmungen übernommen werden, da die Aufstellung einer Strömungsbilderkarte anhand der SIMBATH-Versuchsergebnisse nicht möglich ist. Es fehlen die dafür notwendigen Detailinformationen über lokale Strömungsverhältnisse (z.B. Geschwindigkeiten und Temperaturen der Komponenten), über physikalische Stoffeigenschaften (z.B. Zähigkeit) und auch über die relativen Volumenanteile von Thermit und Natrium in einem axialen Teststreckenabschnitt.

Die Übertragung von Strömungsbilderkarten auf die spezifischen Verhältnisse der SIMBATH-Versuche ist nur beschränkt möglich. In diesen Versuchen treten unübliche Stoffe und Stoffkombinationen auf (z.B. Thermit). Die Strömungen in den Mehrphasen-Mehrkomponenten-Gebieten sind stark transient. Einzelne Komponenten haben keine bevorzugte Bewegungsrichtung. Ferner gibt es in diesen Gebieten stets zwei Flüssigkeiten, Thermit und flüssiges Natrium, die meistens durch Gas/Dampf-Bereiche getrennt sind.

Aus den genannten Gründen wird für die Analyse der SIMBATH-Versuche mit CALIPSO eine Strömungsbilderkarte, die auf Gasvolumenanteil-Kriterien beruht, angewendet. Diese basiert auf theoretischen und experimentellen Erkenntnissen, die besagen, daß der Gasvolumenanteil eine der charakteristischen Größen einer Strömungsform ist /35, 42, 43, 49/. Unter der Voraussetzung, daß der Gasvolumenanteil unabhängig von anderen physikalischen Größen ein eindeutiges Strömungsformkriterium darstellt, kann auf dieser Grundlage eine Strömungsbilderkarte aufgestellt werden. Versuchsergebnisse mit siedendem Wasser /44, 50/ bestätigen diese Annahme. Empfohlene Wertebereiche des Gasvolumenanteils beim Übergang von einer Strömungsform in eine andere sind /35, 43, 44, 49 u.a./:

- Für den Wechsel von Blasen- zur Übergangsströmung liegt der Gasvolumenanteil zwischen 0,25 und 0,32. Der wahrscheinlichste Wert von 0,3 kann auch durch theoretische Überlegungen ermittelt werden /49/.
- Filmströmungen existieren ab Gasvolumenanteilen von 0,65 bis 0,75.
- Reine Tropfenströmungen entstehen nur bei hohen Gasvolumenanteilen d.h. über 0,92 bis 0,97.

Die anhand der o.a. Kriterien aufgestellte Strömungsbilderkarte (Abb. 4.5) hat den Vorteil der direkten Überprüfbarkeit anhand der SIMBATH-Versuchsergebnisse (s. Kap. 6.2.1).

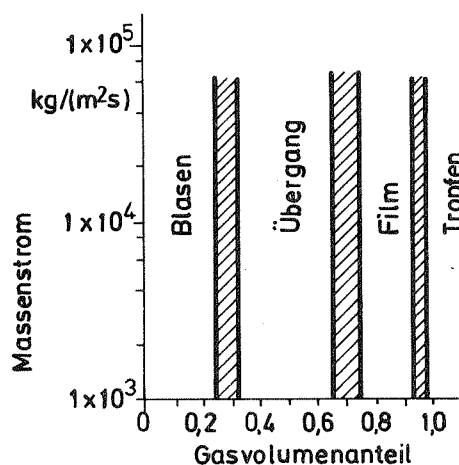


Abb. 4.5 Strömungsbilderkarte auf der Basis von Gasvolumenanteilskriterien

Aus dem Vergleich der empfohlenen Übergangsbereiche mit SIMBATH-Versuchsdaten lassen sich die in CALIPSO einzusetzenden Grenzwerte des Gasvolumenanteils entnehmen (s. Kap. 6.2.1, Abb. 6.4). Der Übergang von der Gas- zur Übergangsströmung wird bei  $\theta_v = 0,3$  angenommen. Filmströmung entsteht für Gasvolumenanteile größer als 0,65, und Tropfenströmungen ab  $\theta_v = 0,95$ . Diese Strömungsbilderkarte ist übersichtlich und einfach im Programm umzusetzen, stellt aber eine vereinfachte Modellierung der physikalischen Zusammenhänge des Übergangs zwischen Strömungsformen dar.

Im CALIPSO-Modell sind auf der Stabhülle und auf der Wand des Kühlkanals sowohl Natrium- als auch Thermitfilme berücksichtigt. Die Strömungsbilderkarte zeigt die Filmströmung an, ohne zwischen den einzelnen Kombinationen von Fil-

men zu unterscheiden (s. Abb. 4.2). Ein weiterer Entscheidungsalgorithmus ist notwendig. Im Verfahren wird zuerst die Filmstärke eines Natriumfilmes berechnet. Bei Unterschreitung einer Mindeststärke wird Thermitpartialfilmströmung angenommen. Die Anwendung des Algorithmus erfolgt separat für die beiden Strukturen des Kühlkanals.

#### 4.2.2.3 Radiusmodell

Bei der Modellierung der Strömungsformen in CALIPSO (s. Kap. 4.2.2.1) wird angenommen, daß einzelne Strömungskomponenten als kugelförmige Blasen oder als Tropfen auftreten. Blasen und Tropfen sind in der jeweils kontinuierlichen Phase homogen verteilt. In den Korrelationen für die Bestimmung des Impuls- bzw. Energieaustauschs zwischen einer dispersen und einer kontinuierlichen Phase stellt der Kugelradius einen der wichtigsten Parameter dar (s. Kap. 4.2.3). In einer Zweiphasenströmung ist dieser Radius zeitlich veränderlich, da es sowohl für Blasen als auch für Tropfen Zerteilungs- und Anlagerungsprozesse gibt (z.B. /15/). In den SIMBATH-Versuchen /6, 38, 39/ sind derartige Phänomene sowohl im Stabinneren als auch im Kühlkanal beobachtet worden. Rechenprogramme wie EPIC /8/, PLUTO2 /10/ und die veröffentlichte CALIPSO-Fassung /14/ berücksichtigen nur einen konstanten Wert des Radius. SIMMER II /13/ enthält ein Modell für die Berechnung der transienten Änderungen von Tropfenradien. Auf diese Grundlage aufbauend, ist für CALIPSO ein parametrisches Modell zur Berechnung der Dynamik von Blasen- bzw. Tropfenradien entwickelt worden. Dieses Modell, das sowohl das Zusammenfügen einzelner Teilchen nach erfolgter Kollision als auch das Zerteilen der Teilchen durch hydrodynamische Effekte betrachtet, basiert auf folgenden Überlegungen:

Die Partikel stoßen durch turbulente Fluktuation zusammen. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit entsteht anschließend ein neues Teilchen mit größerem Radius. Das Wachstum des Teilchenvolumens  $V_p = 4/3 \pi r_p^3$  innerhalb des Zeitraumes  $\Delta t$  ist:

$$V_p = V_{p,in} + NS \cdot \omega_p \cdot V_{p,in} \quad (4.16)$$

Dabei ist NS die Gesamtzahl der Stöße eines Teilchens mit anderen Teilchen des gleichen Stoffes während des betrachteten Zeitraumes

$$NS = 0,5 (N_p / V_M) V_p^* \quad (4.17)$$

In Gl. 4.17 ist  $V_p^*$  das während  $\Delta t$  von einem Teilchen durchwanderte Volumen.  $N_p / V_M$  ist die Gesamtzahl von Teilchen pro Volumen. Der Faktor 0,5 berücksichtigt, daß an einem Stoß zwei Teilchen beteiligt sind.

$V_p^*$  ergibt sich aus der Multiplikation der Teilchen-Projektionsfläche mit dem Betrag der Fluktuationsgeschwindigkeit  $v_{pf}$  und mit dem Zeitintervall  $\Delta t$  zu:

$$V_p^* = \pi r_p^2 |v_{pf}| \Delta t \quad (4.18)$$

Es wird angenommen, daß die Fluktuationsgeschwindigkeit  $v_{pf}$  proportional zur Geschwindigkeit in Hauptbewegungsrichtung ist /51, 52/. Der entsprechende Koeffizient  $C_{dep}$  wurde in /51, 52/ auf 0.15 geschätzt.

Die Anzahl der Teilchen pro Volumeneinheit ( $N_p / V_M$  in Gl. 4.17) ergibt sich durch Gleichsetzen des Gesamtvolumens aller Teilchen in einer Rechenmasche mit dem Gesamtvolumen des betreffenden Stoffes (Gl. 4.4) zu:

$$N_p / V_M = 3 \Theta_p / (4\pi r_p^3) \quad (4.19)$$

Aus den Gln. 4.16 bis 4.19 läßt sich folgender Ausdruck für das durch Kollisionen erfolgte transiente Wachstum eines Blasen- oder eines Tropfenradiuses ermitteln:

$$r_p = \sqrt[3]{r_{p,in}^2 (r_{p,in} + 0,375 C_{dep} \omega_p |v_p| \Theta_p \Delta t)} \quad (4.20)$$

Die Wahrscheinlichkeit  $\omega_p$  der Partikelanlagerung nach erfolgtem Zusammenstoß wird als Funktion des Volumenanteils der Blasen bzw. Tropfen angenommen. Für geringe Volumenanteile  $\Theta_p$  geht man davon aus, daß die Teilchen für einen Zusammenstoß zu weit auseinanderliegen. Ab einem Schwellenwert für  $\Theta_p$  wird die Wahrscheinlichkeit der Teilchenkollision größer. Die gewählte Funktion  $\omega_p = f(\Theta_p)$  entspricht der von Radovici und Moisis durch Berechnung der Teilchenstoßfrequenz hergeleiteten Abhängigkeit /49/:

$$\begin{aligned} \omega_p &= 0 & \theta_p &\leq \theta^* \\ \omega_p &= 1 - 1/\exp[(\theta_p - \theta^*)/\tau] & \theta_p &\geq \theta^* \end{aligned} \quad (4.21)$$

Für  $\theta_p^*$  wird der Wert 0,25 und für  $\tau$  der Wert 0,1 eingesetzt.

Der Partikelradius ist auf der anderen Seite bestimmt durch hydrodynamische Wechselwirkungen infolge der Relativbewegung zwischen den Phasen, die bei Überschreiten eines bestimmten Kriteriums zur Fragmentation führt. Als Kriterium wird die Weber-Kennzahl verwendet, die das Verhältnis der Trägheitskraft zur Oberflächenspannungskraft ausdrückt /53, 54/:

$$We = \rho_{co} v_{rel}^2 r_{p,max} / \sigma \quad (4.22)$$

Dabei sind  $\rho_{co}$  die Dichte der als kontinuierlich angenommenen Phase (s. Kap. 4.2.2.1),  $v_{rel}$  die Relativgeschwindigkeit und  $\sigma$  die Oberflächenspannung. Die in der Literatur angegebene Werte für  $We_{crit}$  /35, 51, 53, 54/ zeigen einen breiten Streubereich. Die hier verwendeten kritische Weberzahlen 8 für Blasen und 13 für Tropfen sind als Mittelwerte der in der Literatur angegebenen Zahlen zu interpretieren.

Einschränkungen für den Partikelradius sind geometrisch bedingt: Der Durchmesser eines kugelförmigen Teilchens kann nicht größer als der hydraulische Durchmesser sein. Ferner darf das Verhältnis des Partikelvolumens zum Maschenvolumen nicht größer als der entsprechende Wert des Volumenanteils sein.

Für jede Strömungskomponente wird ein maximaler und ein minimaler Radiuswert spezifiziert. Durch Gleichsetzen dieser beiden Werte können auch Parametervariationen unter der Annahme von konstanten Partikelradien vorgenommen werden.

Für Natriumvolumenanteilen größer als ein Schwellenwert wird der maximale Thermittropfenradius auf einen in der Eingabe vorzugebenden Wert gesetzt. Für diesen maximalen Radius wurde aus der Post-Mortem-Analyse der SIMBATH-Versuche der Wert 0,5 mm abgeleitet.

#### 4.2.2.4 Berechnung der Filmstärken

Im Stabinneren wird im Falle der Filmströmung angenommen, daß sich das gesamte noch verbliebene Thermitinventar im Film auf der Innenseite der Hülle befindet (Kap. 4.2.2.1). Das Volumen des Thermits in einer Rechenmasche läßt sich sowohl aus einfachen Geometriebetrachtungen herleiten als auch als Funktion des Volumenanteils (Gl. 4.4) bestimmen. Für die Filmstärke des Thermits auf der Hüllrohrinnenseite ergibt sich daraus folgender Ausdruck /35/:

$$\delta_{th,i} = r_i (1 - \sqrt{1 - \theta_{th,i}}) \quad (4.23)$$

In Gl. 4.23 ist  $r_i$  der Hüllrohrinnenradius und  $\theta_{th,i}$  der Thermitvolumenanteil im Stabinneren.

Für die Natrium- und für die Thermitfilme auf der Außenseite der Stabhülle bzw. auf der Kühlkanalwand werden separate, eindimensionale Massenerhaltungsgleichungen gelöst. Die Gleichungen haben folgenden Aufbau:

$$\frac{\partial m_k}{\partial t} + \frac{\partial (m_k v_k)}{\partial z} = \Gamma_k V_M \quad (4.24)$$

k = Thermit, flüssiges Natrium

Die Beziehungen zwischen der Masse im Film und den Filmstärken sind für die Stabhülle:

$$m_{k,c} = \pi [(r_c + \delta_{k,c})^2 - r_c^2] \Delta z S_k^P (1 - \varepsilon) \beta_{k,c} \quad (4.25)$$

und für die Kühlkanalwand:

$$m_{k,w} = \pi [r_w^2 - (r_w - \delta_{k,w})^2] \Delta z S_k^P \beta_{k,w} \quad (4.26)$$

Die relative azimuthale Ausdehnung der Partialfilme auf den Strukturen,  $\beta$ , ist 1,0 für die Natriumfilme. Im Falle der Thermitpartialfilme, für die stets eine Mindeststärke angenommen wird, ergibt sich  $\beta$  aus der Gl. 4.25.

Die Ermittlung des Massenquellterms  $\Gamma$  für einen Natriumfilm auf einer der Strukturen erfolgt mit Hilfe der Energieerhaltungsgleichung für den entsprechenden Film:

$$\underbrace{\frac{\partial(m_{ne} e_{ne})}{\partial t} + \frac{\partial(m_{ne} e_{ne} v_{ne})}{\partial z}}_{\text{Erwärmung}} = \underbrace{\sum Q}_{\substack{\text{Wü Struktur,} \\ \text{Thermit, Gas}}} + \underbrace{\Gamma_{ne} V_M (c_{v,ne} T_{ne} + h)}_{\text{Phasenwechsel}} \quad (4.27)$$

Dabei ist  $e$  die innere Energie ( $e = c_v T$ ) und  $h$  die Verdampfungswärme.

Der Massenquellterm für die Thermitfilme ist gleich der Summe der Phasenwechselrate durch Schmelzen bzw. Erstarren und der Rate, mit der sich Thermit-tropfen aus dem Gasbereich auf der betreffenden Struktur niederschlagen. Dieser zuletzt erwähnte Term wird konsistent mit dem Modell aus Kap. 4.2.2.3 wie folgt berechnet:

$$\Gamma_{th,dep} = \underbrace{C_{dep}}_{\text{Niederschlagsrate}} \underbrace{|v_{th}|}_{\text{Tropfendichte}} \underbrace{S_{th}^p}_{\text{Fläche}} \underbrace{\theta_{th,p}}_{\text{Volumen}} \underbrace{A^{fv}}_{\text{Fläche/Volumen}} \quad (4.28)$$

Für  $C_{dep}$  wurde der Wert 0,15 gewählt /51, 56, 57/. Die Niederschlagsfläche  $A^{fv}$  entspricht der Mantelfläche des Thermitfilmes (s. Anhang A1).



#### 4.2.3 Austauschfunktionen

In diesem Kapitel werden die Impuls- bzw. Energieaustausch-Korrelationen, die zur Zeit in CALIPSO verwendet werden, erläutert. Für jede Strömungsform (Blasen-, Tropfen-, Übergangs- und Filmströmung) und für jede Komponente (Thermitegemisch aus Aluminiumoxid und Eisen, flüssiges Natrium, Natriumdampf und Gase) sind Beziehungen für die Wandreibung, für die Reibung zwischen den einzelnen Komponenten sowie für den Wärmeübergang zu den Strukturen und zwischen den Komponenten eingeführt worden. Die in CALIPSO betrachteten strömungsformabhängigen Wechselwirkungen sind in der Tabelle 4.2 zusammengefaßt.

Die Bestimmung geeigneter Austauschfunktionen ist eine der Hauptschwierigkeiten bei der Modellierung von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen. Ein allgemein gültiger mathematischer Ausdruck des konstitutiven Gleichungssatzes ist nicht bekannt [23, 29, 31]. Für die in CALIPSO betrachteten komplexen Strömungen und unübliche Stoffzusammensetzung gibt es in der Literatur keine genau zutreffenden Korrelationen. Die Auswertung der SIMBATH-Versuche ermöglicht ihrerseits keine Aufstellung komplexer konstitutiver Gleichungen wegen des stark transienten Ablaufes, der lokal auftretenden Wechselwirkungen und der beschränkten Möglichkeiten der Meßdatenerfassung. Dem derzeitigen Kenntnisstand entsprechend muß für die Auswahl geeigneter Korrelationen für CALIPSO pragmatisch vorgegangen werden, d.h. die Auswahl basiert auf Plausibilitätsargumenten.

Im Kap. 4.2.2.1 sind für jedes Strömungsbild die Annahmen über die geometrische Anordnungen der Strömungskomponenten erläutert worden. Für diese Anordnungen wird ein Teil der angewendeten Wechselwirkungskorrelationen, ausgehend von vereinfachenden Vorstellungen über die Austauschmechanismen für Impuls bzw. Energie, hergeleitet. Ein weiterer Teil der Korrelationen stammt aus Erkenntnissen über stationäre Zweiphasenströmungen klassischer Flüssigkeit/Gas (Dampf)-Gemische. Bei der Auswahl der Korrelationen wird, über die Betrachtung des physikalischen Hintergrundes und des Gültigkeitsbereiches hinaus, darauf geachtet, daß diese Beziehungen anhand möglichst vieler experimenteller Daten erfolgreich überprüft wurden und in der Fachliteratur als "good estimate" gelten. Ferner wurde besonderer Wert auf konsistente Modellvorstellungen für den Austausch von Impuls bzw. Energie gelegt. Im Kap. 6.2 wird für einzelne Korrelationen darüber hinaus überprüft, in wieweit diese für die in CALIPSO

Tabelle 4.2 Strömungsformabhängige Austauschfunktionen in CALIPSO

	Thermit	Natrium (flüssig)	Natrium (Dampf)	Gas	Hülle	Kühlkanal- wand
Thermit	-	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie
Natrium (flüssig)	Impuls Energie	-	Impuls	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie
Natrium (Dampf)	Impuls Energie	Impuls	-	Energie	Impuls Energie	Impuls Energie
Gas	Impuls Energie	Impuls Energie	Energie	-	Impuls Energie	Impuls Energie
Hülle	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	-	-
Kühlkanal- wand	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	Impuls Energie	-	-

simulierten Strömungen anwendbar sind. Die Verifikation des gesamten CALIPSO-Modells und dadurch indirekt die seiner Einzelmodelle erfolgt anhand der experimentellen SIMBATH-Datenbasis (Kap. 6.3). Die erzielten Ergebnisse bei der Nachrechnung dieser Versuche mit CALIPSO liefern zusätzliche Anhaltspunkte, die Gültigkeit der angewendeten Korrelationen zu überprüfen.

Der beschriebene Weg zur Auswahl von Austauschfunktionen wird in den Rechenprogrammen /7 bis 13/ mit ähnlicher Zielsetzung wie CALIPSO in analoger Weise verfolgt. Im Unterschied zu /7 bis 13/ ist in CALIPSO die Anzahl der betrachteten Austauschkorrelationen, die strömungsformabhängig unterschiedliche Ergebnisse liefern, erweitert worden. Auf diese Weise können die gegenseitigen Wechselwirkungen innerhalb der Strömungen detaillierter beschreiben werden (vergl. Kap. 1.2 und Kap. 4.2.2.1).

#### 4.2.3.1 Impulsaustausch

Bei Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen in Kanälen finden Impulsaustauschvorgänge durch Reibung mit den begrenzenden Strukturen, durch Reibung zwischen den einzelnen Strömungskomponenten sowie infolge von Phasenwechsel statt. Die nachfolgenden Kapitel befassen sich mit den in CALIPSO berücksichtigten Reibungskräften innerhalb einer Rechenmasche. Die angewendeten Korrelationen und die ihnen zugrundeliegenden Modellvorstellungen sind in der Tab. 4.3 zusammengefaßt. Der Impulsaustausch durch Phasenwechsel entspricht den Modellvorstellungen aus /14/, Kapitel 5.1, und wird deshalb an dieser Stelle nicht wiedergegeben.

Tabelle 4.3 In CALIPSO betrachtete Reibungskräfte

Strömungsform	Reibung mit Strukturen			Reibung zwischen Komponenten		
	Modellvorstellung	Korrelation	Gleichung	Modellvorstellung	Korrelation	Gleichung
Einphasig	Homogene Str. $\theta_v \rightarrow 0$	Stokes/Blasius	4.29 4.32	F:F Kollision zw. Tropfen	Soo /66/	4.49
Blasen	Homogene Str.	Stokes/Blasius	4.36 4.40	G:F Blasen in Flüssigkeit	Clift /65/	4.41 4.42
Übergang	Homogene Str.	Stokes/Blasius	4.36 4.40	F:F Kollision zw. Tropfen	Soo /66/	
Tropfen	Homogene Str.	Stokes/Blasius	4.36 4.40	G:F Blasen/Tropfen im Phasengemisch	Ishii /37/ Zuber /68/	4.41,4.45 4.47
Film	Filme auf Strukturen Topfen im Gasbereich	Stokes/Blasius	4.36 4.40	F:F Kollision zw. Tropfen	Soo /66/	4.49
		Wallis /35/	4.38 4.40	G:F Tropfen in Gas	Clift /65/	4.41,4.42
				G:F Reibung auf rauhe Wand	Wallis /35/	4.51
				G:F Topfen in Gas	Clift /65/	4.41,4.42
				F:F Niederschlag von Tropfen	-	4.55

F = Flüssigkeit (Thermit, flüssiges Natrium) G = Gas, Dampf

#### 4.2.3.1.1 Reibungskräfte mit Strukturen

Für einphasige Einkomponenten Strömungen wird die Reibungskraft auf eine Struktur durch Multiplikation der Schubspannung mit der entsprechenden Reibungsfläche ermittelt /58 bis 60/:

$$F_k^{vis} = \underbrace{0,125 C_{f,k} S_k^p |v_k| v_k}_{\text{Schubspannung}} \underbrace{A}_{\text{Reibungsfläche}} \quad (4.29)$$

k = Thermit, flüssiges Natrium, Gasphase

Die Berechnungsweise des Reibungsfaktors  $C_{f,k}$  setzt isotherme, stationäre und völlig ausgebildete Strömungen voraus. Korrekturfunktionen der stationären Reibungsfaktoren für Einlaufströmungen und für stark beschleunigte Strömungen sind derzeit in CALIPSO nicht berücksichtigt. Die diesbezüglichen theoretischen und experimentellen Arbeiten /61, 62/ können nur in wenigen Spezialfällen verbindliche Empfehlungen geben. Zur Berechnung von  $C_{f,k}$  wird in CALIPSO die Gleichung von Stokes für den laminaren Bereich und die Gleichung von Blasius für den turbulenten Bereich in folgender Weise kombiniert:

$$C_{f,k} = \max \left( 64 / Re_k, 0,316 / Re_k^{0,25} \right) \quad (4.30)$$

$$Re_k = S_k^p |v_k| D_h / \eta_k \quad (4.31)$$

Der Blasius-Beziehung wurde gegenüber anderen Verfahren /58, 59, 60/ Vorrang gegeben, weil sie ausreichend genau, einfach und explizit ist und weil sie sich vielfach auch bei der Druckverlustberechnung für Mehrphasenströmungen bewährt hat /15, 35/.

Im Ringspalt zwischen Stabhülle und Kühlkanalwand, werden die Reibungskräfte an beiden Begrenzungen separat berechnet. Diese Betrachtungsweise wird bei allen modellierten Strömungsformen beibehalten. Sie ermöglicht die Berechnung der Reibungskraft auch für Fälle, in denen sich die Hüllrohroberfläche eines SIMBATH-Stabes durch den Schmelzangriff oder durch Abbröckeln verringert.

Die Berechnungsformeln für die Reibungsfaktoren entsprechen den Gln. 4.30 und 4.34. Die jeweils einzusetzenden hydraulischen Durchmesser und Reibungsflächen

sind im Anhang A1 angegeben. Im Vergleich zu anderen Verfahren, z.B. /58/, führt die o.a. Methode im turbulenten Gebiet zu Abweichungen von 10 % (s. Kap. 6.2.2.1).

Das CALIPSO-Modell berücksichtigt zusätzlich irreversible Druckverluste durch Strömungshindernisse, wie Abstandshalter, Ventile, Querschnittsänderungen u.a. /63/. Die entsprechende Kraft ergibt sich durch Multiplikation des Druckverlustes mit der Strömungsquerschnittsfläche zu:

$$F_k^{vis} = 0,5 \xi \sum_k^p |v_k| v_k A \quad (4.32)$$

Die Widerstandsbeiwerte  $\xi$  müssen vorgegeben werden.

Für einphasige Mehrkomponenten-Strömungen wie auch für Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung existieren mehrere Verfahren zur Berechnung des Reibungsdruckverlustes (bzw. der Reibungskraft), z.B. /15, 35/. Die bekanntesten davon sind die homogene Methode /15/ und das Lockhart-Martinelli-Verfahren /64/. Die homogene Methode geht davon aus, daß sich das Gemisch aller Strömungskomponenten wie eine Einphasen- Einkomponenten-Flüssigkeit verhält. Beim Lockhart-Martinelli-Verfahren wird zunächst der Reibungsdruckverlust der flüssigen Phase berechnet unter der Annahme, daß diese mit dem Massendurchsatz, den sie in der Zweiphasenströmung hat, allein durch das Strömungsführungsrohr fließt. Dieser Druckverlust, multipliziert mit einem Zweiphasenmultiplikator, ergibt den Reibungsdruckverlust des Gemisches. Für die Ermittlung des Zweiphasenmultiplikators gibt es unterschiedliche Korrelationen /15, 35, 64/.

Für die o.a. Strömungsbilder gibt das Lockhart-Martinelli-Verfahren in Einzelfällen (insbesondere für die Übergangsströmung) den gemessenen Gesamtdruckverlust besser wieder als die homogene Methode, z.B. /15/. Ein wesentlicher Nachteil ihrer Anwendung in CALIPSO liegt in der Notwendigkeit empirischer Funktionen zur Aufteilung der Gesamtreibungskraft auf die einzelnen Strömungskomponenten. Derartige Korrekturfunktionen, z.B. /13/, sind bei Anwendung der homogenen Methode nicht notwendig (s.u.), und deshalb wird diese Berechnungsweise in CALIPSO eingesetzt.

Den Annahmen der homogenen Strömung entsprechend ergibt sich analog zu Gl. 4.29 folgender Ausdruck der gesamten Reibungskraft an einer Struktur:

$$F_{mix}^{vis} = 0,125 C_{f,mix} \rho_{mix} |v_{mix}| v_{mix} A^V \quad (4.33)$$

Die Dichte, die Geschwindigkeit und die Zähigkeit des Gemisches sind:

$$\rho_{mix} = \sum \rho_k ; v_{mix} = \sum (\rho_k v_k) / \sum \rho_k ; \eta_{mix} = \sum \eta_k \theta_k \quad (4.34)$$

k = Thermit, flüssiges Natrium, Gas

Der Reibungskoeffizient  $C_{f,mix}$  wird aus den Gln. 4.30 und 4.31 gewonnen. Die Dichte, Geschwindigkeit und Zähigkeit sind jeweils  $\rho_{mix}$ ,  $v_{mix}$ ,  $\eta_{mix}$ .

Für die Aufteilung dieser Kraft werden in Gl. 4.33 die Beziehungen aus Gl 4.34 eingesetzt.

$$F_{mix}^{vis} = 0,125 C_{f,mix} |v_{mix}| \sum (\rho_k^P v_k \theta_k) A^V \quad (4.35)$$

Nimmt man in Anlehnung an Gl. 4.29 an, daß die Reibungskraft einer jeden Strömungskomponente mit einer Struktur proportional zu seiner Dichte, seiner Geschwindigkeit und zu der Reibungsfläche ist, dann folgt aus Gl. 4.35 für  $F_k^{vis}$  der Ausdruck:

$$F_k^{vis} = 0,125 C_{f,mix} \rho_k^P |v_{mix}| v_k \theta_k A^V \quad (4.36)$$

Für Filmströmungen reibt nur die Flüssigkeit im Film an der entsprechenden Struktur. Die Reibungskraft in einer Rechenmasche kann aus dem gesamten Reibungsdruckverlust wie folgt gewonnen werden:

$$F_k^{vis} = (\Delta p / \Delta z)_{2Ph} A \Delta z = (\Delta p / \Delta z)_{1Ph} \phi_\ell^2 A \Delta z \quad (4.37)$$

In Gl. 4.37 ist A die Strömungsquerschnittsfläche,  $\Delta z$  die Maschenlänge und  $\phi_\ell^2$  der Zweiphasenmultiplikator für die flüssige Phase. Der Index 2Ph bezieht sich auf den Reibungsdruckverlust der Zweiphasenströmung und der Index 1Ph auf den Druckverlust der flüssigen Phase, wenn diese allein den Gesamtströmungsquerschnitt einnehmen würde. Zur Berechnung von  $(\Delta p / \Delta z)_{1Ph}$  und  $\phi_\ell^2$  gibt es verschiedene Verfahren, z.B. /35, 36, 51, 64/. In CALIPSO wird die von Wallis /35/ empfohlene Methode angewendet. Der Autor geht von dem Modell separater Film- und Gasströmungen, d.h. ähnlichen Vorstellungen wie in CALIPSO, aus.

Seine Korrelation ist ferner konsistent mit einer Beziehung zur Berechnung der Zwischenphasenreibung, die ebenfalls in CALIPSO eingesetzt wird. Gegenüber dem Lockhart-Martinelli-Verfahren ergibt die Wallis-Beziehung bei gleichem Gasvolumenanteil eine Streubreite von 10% /35/. In Kap. 6.2.2.2.3 werden ferner einige gemessene Druckverluste für Filmströmungen von flüssigen Metallen mit CALIPSO-Rechenergebnissen für Filmströmungen von zweiphasigem Natrium bzw. von Thermit-Gas verglichen. Für beide Fälle liegen die Rechenergebnisse innerhalb der Streubreite der Versuchsdaten. Alle diese Argumente zeigen, daß die Korrelation von Wallis zwischen Film und Struktur zur Berechnung der Reibungskraft innerhalb des CALIPSO-Modells sinnvoll anzuwenden ist.

Die Wallis-Korrelation für die Reibungskraft lautet /35/:

$$F_k^{vis} = \underbrace{0,125 C_{f,k} S_k^p |j_k| j_k A^v}_{\text{Reibung der Flüssigkeit alleine}} \underbrace{1 / (1 - \theta_v^2)}_{\text{Multiplikator}} \quad (4.38)$$

k = Thermit, flüssiges Natrium

Die Größe  $j_k$  ist der Volumenstrom der Flüssigkeit im Film, bezogen auf den gesamten Strömungsquerschnitt. Unter der Annahme eines turbulenten Films mit einem 1/7 Potenzgesetz des Geschwindigkeitsprofils ergibt sich folgender Ausdruck für  $j_k$  /35/:

$$j_k = (1 - \sqrt{\theta_v})^{8/7} (1 + 8/7 \sqrt{\theta_v}) v_k \quad (4.39)$$

Der Reibungskoeffizient wird aus Gl. 4.30 gewonnen. In der Reynoldszahl wird dabei der Volumenstrom  $j_k$  (Gl. 4.39) eingesetzt.

Bei Thermitpartialfilmen wird für den benetzten Umfang der Struktur die Gl. 4.38 und für den unbenetzten Teil die Gl. 4.29 (entsprechend einer Tropfenströmung) angewendet.

Die Ermittlung der zusätzlichen Kraft durch Strömungshindernisse erfolgt für alle Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen auf der Basis der homogenen Methode. D.h., in Gl. 4.32 werden die Geschwindigkeit und die Dichte des Gemisches (Gl. 4.34) eingesetzt. Die Aufteilung dieser Kraft auf die einzelnen



Komponenten erfolgt analog zur gesamten Reibungskraft. Für die Komponenten  $k = \text{Thermit, flüssiges Natrium und Gasphase}$  gilt dann der Ausdruck:

$$F_{-k}^{vis} = 0,5 \zeta S_k |v_{mix}| v_k A \quad (4.40)$$

Die Bestimmung von Reibungskräften, die in radialer Richtung beim Ausströmen aus dem Stabinneren entstehen, erfolgt mit einer Gleichung gleichen Aufbaus wie Gl. 4.40. Der angenommene Widerstandsbeiwert  $\zeta$  liegt bei 1,8 /14/.

#### 4.2.3.1.2 Reibungskräfte zwischen Strömungskomponenten

Die in CALIPSO eingebauten Korrelationen zur Berechnung der Reibungskräfte zwischen den Komponenten sowie die den Beziehungen zugrunde liegenden Modellvorstellungen sind in der Tabelle 4.3 zusammengefaßt dargestellt. In dem nachfolgenden Kapitel werden die einzelnen Beziehungen dargestellt.

Die Modelle der Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmungen sind durch das Auftreten einer kontinuierlichen Phase, in der eine disperse Phase verteilt ist, gekennzeichnet. Die Phasen bewegen sich relativ zueinander. Folgende, an der Phasengrenze auftretenden Kräfte, werden in CALIPSO berücksichtigt:

1. Gesamtwiderstandskraft (drag force), die bei stationärer Relativbewegung der Phasen entsteht.
2. Kraft durch virtuelle Masse. Diese ergibt sich durch die beschleunigte Relativbewegung eines Teilchens im Verhältnis zur umgebenden trägen Flüssigkeit. Insbesondere bei stark beschleunigten Blasenströmungen wirkt sie im Sinne einer verstärkten Phasenkopplung. Das CALIPSO-Modell berücksichtigt standardmäßig diese Kraft nur in radialer Richtung.

Die nachfolgenden Betrachtungen beziehen sich ausschließlich auf die Berechnung der Gesamtwiderstandskraft zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase in einer Rechenmasche. Die Berücksichtigung der Kraft durch virtuelle Masse erfolgt analog zu /14/ und wird daher hier nicht wiederholt.

Die Modellvorstellungen bezüglich der Komponenten, die die kontinuierliche bzw. die disperse Phase bei Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung bilden, sind ausführlich in Kap. 4.2.2.1 beschrieben. Es wird ferner von der Annahme ausgegangen, daß die disperse Phase (Blasen oder Tropfen) als starre kugelförmige Teilchen vorliegen. Die Partikel tauschen Impuls und Energie mit der sie umströmenden kontinuierlichen Phase aus.

Die Gesamtwiderstandskraft für ein derartiges Mehrpartikelsystem wird durch Multiplikation der Kraft auf einem Teilchen mit der Gesamtzahl von Teilchen gewonnen werden.

Die Kraft auf eine umströmte Kugel wird entsprechend den Literaturangaben, z.B. /37, 65, 66/, proportional zur Dichte der kontinuierlichen Phase, zur Teilchenprojektionsfläche und zum Quadrat der Relativgeschwindigkeit angenommen. Die Anzahl der Teilchen pro Volumen ist in Gl. 4.19 gegeben. Für die Gesamtwiderstandskraft folgt der Ansatz:

$$F_{di,co}^k = 0,375 C_D \theta_{di} / r_{di} S_{co}^p |v_{di} - v_{co}| (v_{di} - v_{co}) V_M \quad (4.41)$$

Der Index co bezieht sich auf die kontinuierliche Phase, der Index di bezeichnet die disperse Phase. Die Reihenfolge der Indizes zeigt die positive Richtung an, in der die Kraft ausgeübt wird. Diese Konvention gilt für alle in diesem Kapitel angesprochenen, doppelt indizierten Größen.  $F_{di,co}^k$  ist eine vektorielle Größe, d.h. es hat eine axiale und eine radiale Komponente.

Die Bestimmung der Gesamtwiderstandskraft für die Mehrpartikelsysteme der Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung erfolgt im Einklang mit den Modellannahmen dieser Strömungsbilder, anhand von Gl. 4.41. Nur der Widerstandsbeiwert  $C_D$  ist strömungsformabhängig vorzugeben. Diese Berechnungsweise der Gesamtwiderstandskraft liegt ebenfalls Modellen zur Sicherheitsuntersuchung von Leichtwasserreaktoren, z.B. TRAC /17/ und RETRAN /18/, wie auch Modellen zur Störfalluntersuchung von schnellen Brutreaktoren /10, 12, 13/ zugrunde.

Theoretische Überlegungen und experimentelle Daten zeigen, daß der Widerstandsbeiwert bei Blasen und Tropfen von der Reynoldszahl abhängig ist /65, 66/. Die in CALIPSO derzeit angewendete Korrelation zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes  $C_D$  für eine Blase oder einen Tropfen wurde als "best

estimate" einer Vielzahl von Korrelationen und Meßwerten sowohl im laminaren als auch im turbulenten Strömungsbereich /37, 65, 66, 67/ gewonnen.

Die Beziehung lautet:

$$C_D^* = 24/Re_p (1 + 0,15 Re_p^{0,627}) + 0,42 / (1 + 4,25 \cdot 10^4 / Re_p^{1,16}) \quad (4.42)$$

Die anzuwendende Reynoldszahl ist:

$$Re_p = 2 r_p S_{co}^\uparrow |v_{di} - v_{co}| / \eta_{co} \quad (4.43)$$

In Strömungen mit hoher Teilchendichte beeinflussen sich diese gegenseitig. Der sich dadurch ergebende Widerstandsbeiwert liegt höher als derjenige für ungestörte Teilchen. Literaturangaben zufolge, z.B. /35, 65, 66/, ist die Korrekturfunktion von  $C_D$  für ein Mehrpartikelsystem, vom Volumenanteil der dispersen Phase abhängig:

$$C_D = C_D^* \theta_{di}^n \quad (4.44)$$

Für den Koeffizienten  $n$  ergibt sich als Mittelwert aus mehreren Literaturhinweisen, z.B. /35, 66/, der Wert  $n = -2,7$ .

Für Übergangsströmungen müssen im CALIPSO-Modell ebenfalls Korrelationen für den Widerstandsbeiwert  $C_D$  spezifiziert werden. Diese Korrelationen berücksichtigen, den Modellannahmen für dieses Strömungsbild folgend ( s. Kap.4.2.2.1 ), die Kräfte aus der Relativbewegung von Blasen oder Tropfen zu dem sie umströmenden Gemisch aller Komponenten. Der Verlauf von  $C_D$  muß ferner mit wachsendem Gasvolumenanteil abnehmen. Auf diese Weise läßt sich der Verlauf der Gesamtwiderstandskraft zwischen dem hohen Wert bei einer Blasenströmung und dem niedrigen Wert bei einer Filmströmung simulieren.

In der Literatur gibt es bezüglich der Berechnung der Widerstandsbeiwerte für Übergangsströmungen bislang wenig Veröffentlichungen /37, 43/. Zunächst wurde die von Ishii und Zuber /37/ bei der Berechnung von  $C_D$  getroffenen Modellannahmen auf die Übergangsströmungen in CALIPSO übernommen. Die Autoren gehen von großen Blasen aus, die sich gegenseitig beeinflussen. Die Blasen bewegen

sich relativ zum Phasengemisch. Ishii und Zuber nehmen ferner an, daß die Widerstandskräfte für Blasen in der Größenordnung der hydrodynamischen Zerteilungskräfte durch die Relativbewegung sind. Die angegebene Korrelation für  $C_D$  als Funktion des Gasvolumenanteils wurde in /37, 43/ an Zweiphasenströmungen mit unterschiedlichen Stoffpaaren getestet. Sie lautet:

$$C_D = 8/3 (1 - \theta_v) \quad (4.45)$$

Die Anwendung dieser Korrelation bei der Nachrechnung von Zweiphasenströmungen mit CALIPSO liefert aber bei Gasvolumenanteilen größer als 0,5 Abweichungen, die einem zu großen  $C_D$ -Wert entsprechen (s. Kap. 6.2.2.2.2).

Deshalb wurde in CALIPSO ein neues Verfahren zur Bestimmung des Reibbeiwertes für eine Übergangsströmung eingeführt. Es basiert auf folgendem Gedankengang: Für stationäre Zweiphasenströmungen mit dispersen Teilchen wird üblicherweise, z.B. /37/, ein Widerstandsbeiwert angenommen und aus der Lösung der Impulserhaltungsgleichungen eine Beziehung zwischen den Phasengeschwindigkeiten (Schlupfkorrelation, Driftgeschwindigkeit) ermittelt. Diese Beziehung wird dann anhand experimenteller Daten überprüft. Man kann auch umgekehrt vorgehen, d.h. eine Beziehung zwischen den Phasengeschwindigkeiten annehmen und sich aus den Impulserhaltungsgleichungen den entsprechenden Reibungskoeffizienten errechnen. Dieses Verfahren wird in CALIPSO für die Bestimmung der Widerstandsbeiwerte bei Übergangsströmungen mit hohem Voidanteil angewendet.

Eine vielfach zitierte Driftkorrelationen, z.B. /35, 37, 50/, ist die Zuber-Findlay-Beziehung /68/. Sie wurde auf theoretischem Wege ermittelt und berücksichtigt die Variation der Blasenkonzentrationen und der Phasengeschwindigkeiten innerhalb einer Strömungsquerschnittsfläche. Die aufgestellte Beziehung ist sowohl für klassische Flüssig/Gas-Gemische als auch für Zweiphasenströmungen von Flüssigmetallen überprüft worden z.B. /35, 37, 47/.

Die Beziehung von Zuber und Findlay /68/ lautet:

$$v_v = C (v_v \theta_v + v_l \theta_l) + 1,53 [\sigma g (s_l^p - s_v^p) / (s_l^p)^2]^{0,25} \quad (4.46)$$

Der Index  $v$  in Gl. 4.46 bezieht sich auf die Gasphase und der Index  $l$  auf die flüssige Phase. Der Proportionalitätsfaktor  $C$  kann Werte zwischen 1 und 1,5 haben. Sein wahrscheinlichster Wert liegt bei 1,2 /26, 43/.

Die Gl. 4.46 wird gekoppelt mit den Impulserhaltungsgleichungen einer senkrechten, eindimensionalen, stationären und isothermen Gas-Flüssigkeitsströmung in Rohren mit konstantem Querschnitt (s. Anhang A3). Aus dem entstehenden Gleichungssystem und unter Berücksichtigung der Korrelation zur Berechnung der Zwischenphasenreibung (Gl. 4.41) kann folgende Beziehung für den Reibbeiwert bei einer Übergangsströmung hergeleitet werden:

$$C_D = [g/v_{di}^2 + c_{f,mix} \theta_{di} / (2D_h)] / [0,375 G / r_{di} (1 + \theta_{di} / \theta_{co})] \quad (4.47)$$

$$G = \left\{ [C \theta_{di} + 2,71 / |v_{di}| (\sigma / \rho_{di}^p)^{0,25}] / (1 - C \theta_{co}) - 1 \right\}^2 \quad (4.48)$$

Der Vergleich unterschiedlicher Reibbeiwertskorrelationen für die Übergangsströmung ist in Abb. 4.6 eingetragen.

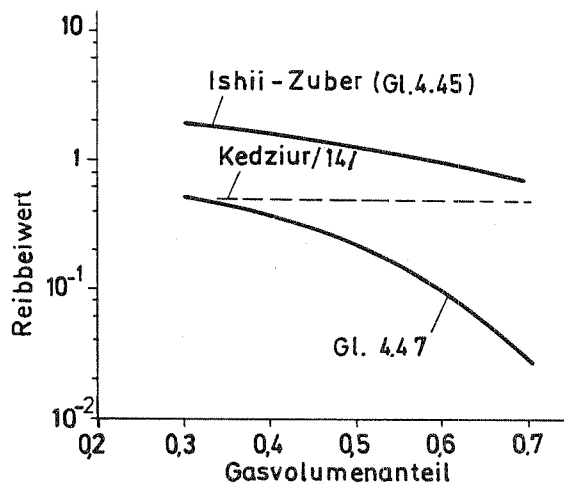


Abb. 4.6 Reibbeiwertskorrelationen für die Übergangsströmung einer Thermit-Gas-Mischung ( $D_h = 7 \cdot 10^{-3}$  m,  $v_{th} = 5$  m/s,  $r_{th} = 1 \cdot 10^{-3}$  m)

Die Korrelation in Gl. 4.47 zeigt bei Erhöhung des Gasvolumenanteils eine ausgeprägte Abnahme des Widerstandsbeiwertes. Dies führt zu einem glatten Übergang der berechneten Gesamtwiderstandskräfte beim Wechsel von Übergangsströmung zur Filmströmung. Bei der Gegenüberstellung von errechneten und gemessenen Daten für Übergangsströmungen ist mit Gl. 4.47 eine gute Übereinstimmung erzielt worden (s. Kap. 6.2.2.2).

Für Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmungen müssen auch die Kräfte zwischen Thermit und flüssigem Natrium bestimmt werden. Für die Blasenströmung und für die Übergangsströmung mit geringem Volumenanteil werden lt. Modellannahmen (s. Kap. 4.2.2.1) die o.g. Stoffe in vermischem Zustand innerhalb der flüssigen Phase angenommen. Die Geometrie der Grenze zwischen Thermit und Natrium wird nicht explizit angegeben. Bei der Übergangsströmung mit hohem Gasvolumenanteil sowie bei Tropfenströmung liegen diese zwei Komponenten in Tropfenform vor. Zur Berechnung der Zwischenphasenreibung zwischen Thermit und dem flüssigen Natrium wird vereinfachend angenommen, daß beide Stoffe auch im Falle der Blasen- und der Übergangsströmung in Tropfenform auftreten. Die Natrium- und die Thermittropfen tauschen durch Stöße Impuls bzw. Wärme aus. Die Reibungskraft zwischen derartigen Partikelwolken kann unter der Annahme von Impulsaustausch durch elastische Stöße und bei Vernachlässigung sekundärer Stöße wie folgt berechnet werden /66/:

$$F_{th,ne}^k = 3/4 C^k S_{th} S_{ne} G |v_{th} - v_{ne}| (v_{th} - v_{ne}) \quad (4.49)$$

$$G = (r_{th} + r_{ne})^2 / (S_{th} r_{th}^3 / \theta_{th} + S_{ne} r_{ne}^3 / \theta_{ne}) V_M \quad (4.50)$$

Der Koeffizient  $0 \leq C^k \leq 1$  wird "fraction of impaction" genannt. Er ist u.a. eine Funktion des Stoßwinkels zwischen den Partikeln. Sein wahrscheinlicher Wert liegt bei 0,75 /66/.

Der Aufbau der von Soo angegebenen Beziehung in den Gln. 4.49 und 4.50 wird leicht verständlich, wenn man annimmt, daß eine der Komponenten, z.B. das Natrium, als Kontinuum vorliegt, also  $r_{ne} \rightarrow \infty$ . Die Gl. 4.49 gibt für diesen Fall den Ausdruck der Gesamtwiderstandskraft für ein disperses Mehrpartikelsystem wieder (Gl. 4.41). Somit wird deutlich, daß die Kraft zwischen Thermit und Natrium (Gl. 4.49), wie auch zu erwarten ist, proportional zu den Stoßflächen, den Dichten, der Teilchenzahl und der Relativgeschwindigkeit ist.

Bei einer Filmströmung existieren zwei kontinuierliche Phasen, und zwar die Film- und die Gasphase. Es werden sowohl Thermit- als auch Natriumfilme betrachtet. Im Gasbereich befinden sich stets Tropfen von Thermit oder Natrium (s. Kap. 4.2.2.1). Reibungskräfte treten an folgenden Stellen auf: zwischen einem Film und der Gasphase, zwischen den Tropfen im Gasbereich und dem Film, zwischen den Tropfen und der Gasphase sowie zwischen den Tropfen untereinander.

Die Reibungskraft zwischen einem Film und der Gasphase wirkt nur in axialer Richtung. Die Kraft kann durch analytische Verfahren durch Annahme von Geschwindigkeitsprofilen im Film und in der Gasphase ermittelt werden, z.B. /51, 55, 69, 70/. Es gibt auch semiempirische Verfahren, die den Film als feste, "rauhe" Struktur betrachten, z.B. /35, 51/. Die analytischen Verfahren führen nicht unbedingt zu besseren Ergebnissen als die semiempirischen Korrelationen. Sie sind ferner rechnerisch aufwendig. In der derzeitigen Version von CALIPSO wird deshalb nach den semiempirischen Verfahren vorgegangen. Diesen Algorithmen entsprechend (s.o.), kann die Reibungskraft zwischen Film und Gasphase wie folgt ermittelt werden:

$$F_{k,v}^k = \underbrace{0,125 C_{f,v} S_v^p}_{\text{Scherkraft}} |v_k - v_v| \underbrace{(v_k - v_v)}_{\text{Reibungsfläche}} A_k^{fv} \quad (4.51)$$

Zur Berechnung des Reibbeiwertes  $C_f$  wird angenommen /35, 51, 69/, daß der Film eine raue Oberfläche hat. Verglichen mit Versuchsdaten, liegt die Streubreite der Rechenergebnisse bei Anwendung unterschiedlicher Korrelationen bei etwa 30 % /35, 51/. In CALIPSO wird die von Wallis gegebene Beziehung /35/ verwendet, weil sie sowohl bei Natrium-Zweiphasenströmungen, z.B. /69/, als auch bei Zweiphasenströmungen gängiger Flüssig/Gas-Gemische /36, 53/ zu sinnvollen Ergebnissen führt. Für Filme aus geschmolzenem Stahl ist diese Beziehung ebenfalls anwendbar /71/.

Die Korrelation zur Berechnung des Reibbeiwertes  $C_f$  in Gl. 4.51 lautet /35/:

$$C_f = C_{f,v} (1 + 300 \delta / D_h) \quad (4.52)$$

Der Term  $C_{f,v}$  stellt den Reibbeiwert der Gasphase unter der Annahme dar, daß diese den gesamten Strömungsquerschnitt einnehmen würde.  $C_{f,v}$  wird mit Hilfe der Gl. 4.30 ermittelt. Die entsprechende Reynoldszahl (Gl. 4.31) wird mit der über den Querschnitt gemittelten Gasgeschwindigkeit ( $v_{\theta} \theta_v$ ) gebildet. Das Verhältnis  $\delta/D_e$  ist als dimensionslose Rauigkeit anzusehen.

Bei der Ermittlung der Reibungskraft zwischen den Tropfen im Gasbereich und dem Film wird berücksichtigt, daß die Tropfen nicht nur eine axiale, sondern auch eine radiale Geschwindigkeitskomponente haben (s. auch Abb. 4.2). Diese Annahme ist durch viele experimentelle Beobachtungen (z.B. /51, 56/) bestätigt worden. Sie ist auch konsistent mit der vorausgesetzten physikalischen Grundlage bei der Bildung von Thermitfilmen (s. Kap. 4.2.2.1) und bei der Anlagerung einzelner Tropfen nach dem Zusammenstoß. Die radiale Komponente der Geschwindigkeit wird proportional zur Geschwindigkeit in Hauptbewegungsrichtung angenommen /51, 52/. Als Folge der radialen Bewegung kommen in jedem Zeitabschnitt Tropfen mit dem Film in Berührung. Dabei findet ein Austausch von Impuls und Wärme statt (vergl. Kap. 4.2.3.2.2). Die entstehende Kraft zwischen der Flüssigkeit im Film (Thermit oder flüssiges Natrium, Index k) und den Tropfen (flüssiges Natrium und/oder Thermit, Index j) ist:

$$F_{k,j}^k = N \cdot m_{p,j} / \Delta t (v_k - v_j) \quad (4.53)$$

Die Größe  $N \cdot m_{p,j} / \Delta t$  ist die Gesamtmasse der N Tropfen, die pro Zeiteinheit mit dem Film in Berührung kommen. Sie wird folgendermaßen berechnet:

$$\underbrace{N \cdot m_{p,j} / \Delta t}_{\text{Masse eines Tropfens}} = \underbrace{C_{dep}}_{\text{Niederschlagskoef.}} \underbrace{|v_j|}_{\text{Tropfendichte}} \underbrace{\frac{\rho_j^p}{\rho_j}}_{\text{Filmoberfläche}} \underbrace{\theta_j}_{\text{Filmoberfläche}} A_k^{fv} \quad (4.54)$$

Aus den Gln. 4.53 und 4.54 folgt für die Reibungskraft zwischen den Tropfen im Gasbereich und dem Film die Beziehung:

$$F_{k,j}^k = C_{dep} \cdot \frac{\rho_j^p}{\rho_j} \theta_j |v_j| A_k^{fv} (v_k - v_j) \quad (4.55)$$

Für den Film auf der Stabhülle bzw. auf der Kühlkanalwand werden jeweils die Reibungskraft zwischen Film und Gasphase sowie diejenige zwischen Film und Tropfen unter Anwendung der Gl. 4.51 bzw. 4.55 separat berechnet.



Für die Filmströmung erfolgt die Ermittlung der Kräfte zwischen den Tropfen und der Gasphase sowie zwischen den Tropfen untereinander mit den für eine Tropfenströmung gültigen Korrelationen, d.h. mit dem sinngemäßen Einsatz der Gl. 4.41 bzw. Gl. 4.49.

#### 4.2.3.2 Energieaustausch

Im Kapitel 4.2.3.2.1 werden die in CALIPSO verwendeten strömungsformabhängigen Korrelationen zur Berechnung des Wärmeaustausches zwischen den Strömungskomponenten (Thermit, flüssiges Natrium, Natriumdampf und Gase) und den Strukturen (Kühlkanalwand und/oder Stabhülle) dargestellt. Die Wärmeaustauschbeziehungen zwischen den Strömungskomponenten untereinander sind im Kapitel 4.2.3.2.2 beschrieben. Tabelle 4.4 gibt einen Überblick über alle in CALIPSO verwendeten Korrelationen zur Berechnung der Wärmeaustauschprozesse sowie über die den Beziehungen zugrunde liegenden Modellvorstellungen.

Die Vorgehensweise bei der Auswahl dieser Korrelationen ist ausführlich zu Beginn des Kap. 4.2.3 beschrieben: Es wird von im Kap. 4.2.2.1 angegebenen geometrischen Verteilungen einzelner Strömungskomponenten, bzw. von den Strömungsformen, ausgegangen. Für diese Verteilungen wird, konsistent mit den Annahmen für den Impulsaustausch, auch für den Wärmeaustausch von vereinfachten, aber auf CALIPSO übertragbaren Modellvorstellungen ausgegangen. Einige Beziehungen für den Wärmeübergang lassen sich daraufhin direkt herleiten. Andere der angewendeten Korrelationen stammen aus Literaturangaben über den Wärmeübergang bei Zweiphasenströmungen. Die Anzahl der Wärmeübergangsbeziehungen für klassische Gemische, die sich auf die in CALIPSO betrachteten Stoffkombinationen und Strömungsbilder übertragen lassen, ist geringer als im Falle der Impulsaustauschfunktionen. Die Wärmeaustauschbeziehungen für Zweiphasenströmungen gängiger Flüssig/Gas-Gemische gelten im Gegensatz zu den Impulskorrelationen nicht für Zweiphasenströmungen mit Flüssigmetallen wie Natrium oder Stahl. In diesem Kapitel werden deshalb auch Beziehungen, die in anderen Rechenprogrammen mit ähnlicher Zielsetzung wie CALIPSO verwendet wurden, übernommen. Die Gültigkeit dieser Beziehungen für die in CALIPSO betrachteten Strömungen wird aus den Ergebnissen, die diese Rechenprogramme bei der Nachrechnung von Experimenten liefern, abgeleitet.

Tabelle 4.4 Wärmeübergangsbeziehungen in CALIPSO

Strömungsform	Wü zu Strukturen			Wü zwischen Komponenten		
	Modellvorstellung	Korrelation	Gleichung	Modellvorstellung	Korrelation	Gleichung
Einphasig	Konvektion	Seban-Shimaz. Dittus-Boelter	4.56, 4.58 4.56, 4.59	F:F Partikelzusammenstoß G:G Temperaturausgleich durch Vermischung	SIMMER /13/ -	4.78 - 4.81 4.82
Blasen, Übergang, Tropfen	Konvektion. Alle Komponenten haben Kontakt zur Struktur. Strahlung durch Gasphase	Seban-Shimaz. Dittus-Boelter. Strahlung durch Gasphase	4.62, 4.58 4.62, 4.59 4.63	G:F Blasen in Flüssigkeit, Tropfen in Gas F:F Partikelzusammenstoß. Strahlung durch Gasphase G:G Temperaturausgleich durch Vermischung	Froessling /58/ SIMMER /13/ -	4.77, 4.72 4.78 - 4.81 4.82
Film	Konvektion vom Film	Seban-Shimaz. Dittus-Boelter	4.69, 4.58 4.69, 4.59	G:F Konvektion zum Film Tropfen in Gas F:F Wärmeleitung nach Niederschlag von Tropfen G:G Temperaturausgleich durch Vermischung	Dittus-Boelter Froessling /58/ -	4.56, 4.59 4,77, 4.72 4.86 4.82

F = Flüssigkeit (Thermit oder flüssiges Natrium), G = Gas oder Natriumdampf.

Die Validierung der Wärmeübergangsmodelle in CALIPSO erfolgt im Rahmen der Nachrechnung von SIMBATH-Versuchen und der dabei erzielten Ergebnisse (Kap. 6.3). Für einige der angewendeten Wärmeaustauschbeziehungen ist zusätzlich in Kap. 6.2.3 die Gegenüberstellung mit gemessenen Daten und mit anderen Korrelationen gezeigt und der Gültigkeitsbereich der Korrelationen in bezug auf ihre Anwendung für das CALIPSO-Modell angesprochen.

#### 4.2.3.2.1 Energieaustausch mit Strukturen

Der Wärmestrom von der Stabhülle bzw. Kühlkanalwand zu der einphasigen Strömung einer Komponente,  $k = \text{Stahl, Oxid, flüssiges Natrium, Natriumdampf oder Gas}$ , wird aus ähnlichen Gründen wie für den Impulsaustausch (s. Kap. 4.2.3.1) für jede Struktur separat berechnet. Die Gleichung lautet:

$$Q_{st,k} = \alpha^* A_{st}^v (T_{st} - T_k) \quad (4.56)$$

In Gl. 4.56 sind  $\alpha^*$  die Wärmeübergangszahl,  $A_{st}$  die Strukturmantelfläche und  $T_{st}$  die Temperatur in der Mitte der Strukturmasche, die Kontakt zum Fluid hat. Die Konvention der mit Komma getrennten Indizes wurde im vorherigen Kapitel festgelegt. Dementsprechend beschreibt  $Q_{st,k}$  den Wärmestrom, der von der Struktur st zu einer der Komponenten k fließt.

Bei der Berechnung von  $\alpha^*$  werden die Wärmedurchgangszahl  $\lambda_{st} / \delta_{st}$  der Strukturschicht und die konvektive Wärmeübergangszahl  $\alpha_{st,k}$  von der Oberfläche zum Fluid berücksichtigt:

$$1/\alpha^* = 1/\alpha_{st,k} + \delta_{st}/\lambda_{st} \quad (4.57)$$

Die Wärmeübergangszahl einer jeden Komponente  $\alpha_{st,k}$  wird in Abhängigkeit der Prandtlzahl des Fluids aus einer Nusselt-Beziehung gewonnen.

Für vollständig ausgebildete Strömungen von Flüssigmetallen, wie Natrium oder Stahl ( $Pr \ll 1$ ), gelten nach /58, 72, 73/ die Nusselt-Korrelationen von Seban und Shimazaki /74/ und die von Lyon /75/ als "best estimate". Für Pecletzahlen ( $Pe = Re Pr$ ) kleiner als 100 gibt die Beziehung von Seban und Shimazaki die

gemessenen Nusseltzahlen besser als die Lyon-Gleichung wieder /72/. Für Pecletzahlen größer als 200 unterscheiden sich die Ergebnisse beider Gleichungen nur geringfügig voneinander. Aus den genannten Gründen und in Anbetracht der in /72/ ausgesprochenen Empfehlung wird für CALIPSO die Wärmeübergangszahl bei der Strömung von flüssigen Metallen aus der Korrelation von Seban und Shimazaki /74/ gewonnen:

$$\alpha_{st,k} D_h / \lambda_k = 5 + 0,025 (|v_k| D_h S_k^p \rho_{p,k} / \lambda_k)^{0,8} \quad (4.58)$$

Für Fluide mit Prandtlzahlen im Bereich  $0,7 < Pr < 100$ , wie Aluminiumoxid, Natriumdampf und Gase, wird zur Berechnung der Wärmeübergangszahl zu Strukturen für turbulente Strömungen die Dittus-Boelter-Beziehung als "best estimate" einer Vielzahl von Korrelationen, z.B. /58/, herangezogen. Für laminare Strömungen ist die Nusseltzahl auf 4 begrenzt /58/:

$$\alpha_{st,k} D_h / \lambda_k = \max [ 4 ; 0,023 (|v_k| D_h S_k^p / \eta_k)^{0,8} (Pr_k)^{0,33} ] \quad (4.59)$$

Die Wärmeübergangszahlen der beiden Thermitkomponenten Aluminiumoxid und Stahl werden wegen der stark unterschiedlichen Prandtlzahlen (s. Anhang A2.1) zunächst separat berechnet und dann volumengewichtet addiert:

$$\alpha_{th} = (\alpha_{ox} \theta_{ox} + \alpha_s \theta_s) / (\theta_{ox} + \theta_s) \quad (4.60)$$

Eine Alternative dazu wäre es, bei Thermit mit den Mischstoffwerten von Aluminiumoxid und Stahl zu arbeiten. In Anbetracht der geplanten Modellerweiterungen zur Beschreibung von Reaktorbedingungen, bei denen Brennstoff und Stahl auch im unvermischten Zustand vorkommen können, läßt sich die derzeitige Berechnungsmethode der Wärmeübergangszahl leichter als die o.a. Alternative umstellen.

Bei Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung wird, konsistent mit der Berechnung der Reibungsfaktoren, von der Annahme ausgegangen, daß jede Komponente Kontakt zur Struktur hat (s. Kap. 4.2.3.1.1). Die gleiche Annahme liegt auch dem SIMMER II-Wärmeübergangsmodell /13/ zugrunde. Sie wird in anderen Veröffentlichungen, z.B. /52, 55/, ebenfalls als sinnvoller Ansatz zur Berechnung des Wärmeübergangs bei den erwähnten Strömungsbildern empfohlen. Für den Fall der SIMBATH-Experimente zeigen sowohl die Röntgenfilme als auch die Post-

Mortem-Untersuchungen, daß bei den o.g. Strömungsbildern jede Strömungskomponente, infolge der auftretenden stark beschleunigten und verwirbelten Strömungen, Kontakt zu den Strukturen bekommt.

In einigen Veröffentlichungen, z.B. /51, 72/, wird zur Berechnung der Wärmeübergangszahl für stationäre Blasen- und Pfropfenströmungen von zweiphasigem Natrium, das von einer beheizten Wand Wärme aufnimmt, eine Beziehung mit folgendem Aufbau angegeben:

$$\alpha_{st,nl} = K Q_{st,nl}^m p^n \quad (4.61)$$

In dieser Gleichung ist  $Q_{st,nl}$  der Wärmestrom von der Struktur zum flüssigen Natrium,  $p$  der Systemdruck.  $K, m$  und  $n$  sind Konstanten, die durch Experimentauswertung korreliert werden. Die Anwendbarkeit dieses Gleichungstyps auf die in CALIPSO betrachteten transienten Strömungen ist jedoch nicht gesichert. Im Teststreckenbereich der SIMBATH-Versuche befinden sich sowohl eine beheizte als auch eine kalte Struktur, und zwar die Stabhülle bzw. die Kühlkanalwand. Im Kreislauf, der an die Teststrecke angeschlossen ist, existiert dagegen nur die wärmeaufnehmende Kühlkanalwand. Die Temperaturen der Strukturen wie auch die des Natriums ändern sich während der transienten Versuchsphase. Ferner entstehen bei einem SIMBATH-Versuch im Kühlkanal Blasen- oder Übergangsströmungen nicht nur durch Natriumsieden, sondern auch infolge der Ausbreitung von Blasen aus nicht kondensierbarem Gas (s. Kap. 6.3.1 u. Kap. 6.3.2). Inwiefern eine Beziehung wie Gl. 4.61 auch für den Fall einer Mehrkomponentenströmung mit Natrium, Thermit und Gas gilt, ist ebenfalls ungeklärt.

Aus den o.g. Gründen wurde in CALIPSO nicht nach dem durch Gl. 4.61 bestimmten Verfahren vorgegangen. Statt dessen wird, unter der Annahme des Kontaktes einer jeden Strömungskomponente mit der Struktur (s.o.) sowie der Empfehlung aus /13, 52, 55/ folgend, der Wärmeübergang mit den für einphasige Einkomponenten-Strömungen geltenden Beziehungen berechnet. Die jeweilige Kontaktfläche wird proportional zum Volumenanteil der betreffenden Strömungskomponente angenommen. Der Wärmefluß von einer der Strukturen, Stabhülle oder Kühlkanalwand, zu einer der Komponenten ( $k$  = Thermit, flüssiges Natrium, Natriumdampf oder Gas) ist in Anlehnung an Gln. 4.56 und 4.57:

$$Q_{st,k} = 1 / (1 / \alpha_{st,k} + \delta_{st} / \lambda_{st}) A_{st}^v \theta_k (T_{st} - T_k) \quad (4.62)$$

Bei Strömungen mit Thermit und Gas kann Thermit durch die Gasphase hindurch Wärme durch Strahlung mit den Strukturen austauschen. Dieser Wärmeaustauschmechanismus wird in EPIC /8/ oder PLUTO2 /10/ nicht berücksichtigt. Der Anteil der Strahlung am gesamten Wärmeübergang kann für den Fall der SIMBATH-Experimente nicht vernachlässigbar sein, da Thermit über längere Zeiten hohe Temperaturen hat (über 2500 K, s. Kap. 6.3.1.4.1). Die Nachrechnung dieser Versuche mit CALIPSO ergibt einen Strahlungsanteil im gesamten Wärmeübergang von Thermit zu den Strukturen in der Größenordnung von 10 - 15 %. Der Wärmeübergang durch Strahlung wird in CALIPSO wie folgt berechnet:

$$Q_{th,st}^* = C_{rad} A_{rad} (T_{th}^4 - T_{st}^4) \quad (4.63)$$

wobei  $C_{rad}$  der Strahlungskoeffizient und  $A_{rad}$  die Strahlungsfläche sind. Aus den Emissionswerten von Thermit und Stahl wurde für  $C_{rad}$  der Wert  $4 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$  ermittelt.  $A_{rad}$  wird gleich der Mantelfläche der Struktur, die Kontakt zur Gasphase hat, angenommen:

$$A_{rad} = A_{st}^v \theta_v \quad (4.64)$$

Im Filmströmungsmodell von CALIPSO werden Natrium- und Thermitfilme sowohl auf der Stabhülle als auch auf der Kühlkanalwand betrachtet (s. Kap. 4.2.2.1). Die nachfolgend dargestellten Gleichungen geben die Korrelationen zur Berechnung des Wärmeübergangs zwischen jedem dieser Filme und der entsprechenden Struktur wieder.

Die Natriumfilme entstehen in den SIMBATH-Versuchen durch das Austreiben des Natriums aus dem Kühlkanal, sowohl durch die Ausbreitung einer Gasblase als auch durch Verdampfen dieses Stoffes. Da Natrium eine hohe Wärmeleitfähigkeit und eine gute Benetzbarkeit hat, ist es wahrscheinlich, daß der Wärmeaustausch zwischen einer Struktur und einem Natriumfilm unabhängig von dessen Entstehungsprozeß durch Wärmeleitung erfolgt. Diese Annahme ist auch im Rechenprogramm BLOW-3A /70/ getroffen worden. Siedephänomene bei einer Natrium-Zweiphasenströmung konnten mit BLOW-3A erfolgreich nachgebildet werden. Die o.a. Annahme kann auch für den Wärmeübergang zwischen Wasserfilmen und Strukturen

gelten /52/.

Für Filmströmungen klassischer Flüssigkeiten wird verschiedentlich der Wärmeübergangskoeffizient vom Film zur Struktur wie folgt berechnet, z.B. /51, 76, 77/:

$$\alpha = K \alpha_{1Ph} \left( 1 / X_{tt} \right)^n \quad (4.65)$$

Der Term  $\alpha_{1Ph}$  ist die Wärmeübergangszahl der flüssigen Phase des Gemisches, wenn diese den gesamten Strömungsquerschnitt einnehmen würde. Die Größen K und n werden anhand von Versuchsergebnissen korreliert (z.B. /51/).  $X_{tt}$  ist der Lockhart-Martinelli-Parameter /64/ für turbulente Strömungen beider Phasen:

$$X_{tt} = \left[ \frac{(1-x)/x}{x} \right]^{0,9} \left( \frac{\rho_v^p}{\rho_l^p} \right)^{0,5} \left( \frac{\eta_l}{\eta_v} \right)^{0,1} \quad (4.66)$$

In Gl. 4.66 sind x der Dampfmassenanteil,  $\rho_l^p$  und  $\rho_v^p$  die physikalischen Dichten der flüssigen und der Dampfphase und  $\eta$  die dynamische Zähigkeit.

Die Korrelation in Gl. 4.65 ergibt gute Übereinstimmung mit Versuchsdaten für die Filmströmungen von Wasser-Gas- und Wasser-Wasserdampfgemischen /51, 76/. Ihre Anwendung auf Natriumfilmströmungen ist weniger erfolgreich ( s. Kap. 6.2.3.2.1) Dies ist verständlich, wenn man bedenkt, daß die für gängige Flüssigkeiten bestehende Analogie zwischen Wärmeübergang und Impulsaustausch (die implizit in Gl. 4.65 enthalten ist /77/) sich nur bedingt auf flüssige Metalle übertragen läßt.

Eine weitere Korrelation zur Berechnung des Wärmeübergangs bei einer Filmströmung ist die von Chen /78, 79/. Er postuliert, daß der Wärmeübergang bei einer siedenden Flüssigkeit sowohl durch Makro-Konvektion, d.h. infolge der Flüssigkeitsbewegung, als auch durch Mikro-Konvektion durch Blasentransport von der Struktur zur Filmoberfläche stattfindet. Er postuliert ferner, daß diese Mechanismen auch für Flüssigmetalle gelten /79/. Der mikrokonvektive Term ist für diese Stoffe von geringerer Bedeutung als für andere Flüssigkeiten. Die Korrelation von Chen wurde für verschiedene Flüssig-Gas-Gemische getestet und für gültig befunden /51, 78, 79/. Auch im Falle von flüssigen Metallen liegen die Ergebnisse innerhalb der Streubreite von Versuchs-

daten /79/. Die Korrelation von Chen für die Nusseltzahl beim konvektiven Wärmeübergang zwischen einem Flüssigmetallfilm und einer Struktur basiert auf der Lyonschen Beziehung /75/. Sie lautet /79/:

$$Nu = 7 + 0,025 F (Re_{1ph})^{0,8} Pr^{0,8} \quad (4.67)$$

In dieser Gleichung ist  $Re_{1ph}$  die Reynoldszahl für die flüssige Phase, wenn diese den gesamten Querschnitt einnehmen würde. Die Größe F wird von Chen Reynoldszahlfaktor genannt. Seine Definition ist /78, 79/:

$$F = (Re / Re_{1ph})^{0,8} \quad (4.68)$$

Die Größe Re stellt in Gl. 4.68 eine geeignete Reynoldszahl für die Zweiphasenströmung dar. Chen hat in /78, 79/ für den Reynoldszahlfaktor F eine Abhängigkeit vom Lockhart-Martinelli-Parameters  $X_{tt}$  gegeben (s. Abb. 4.7).

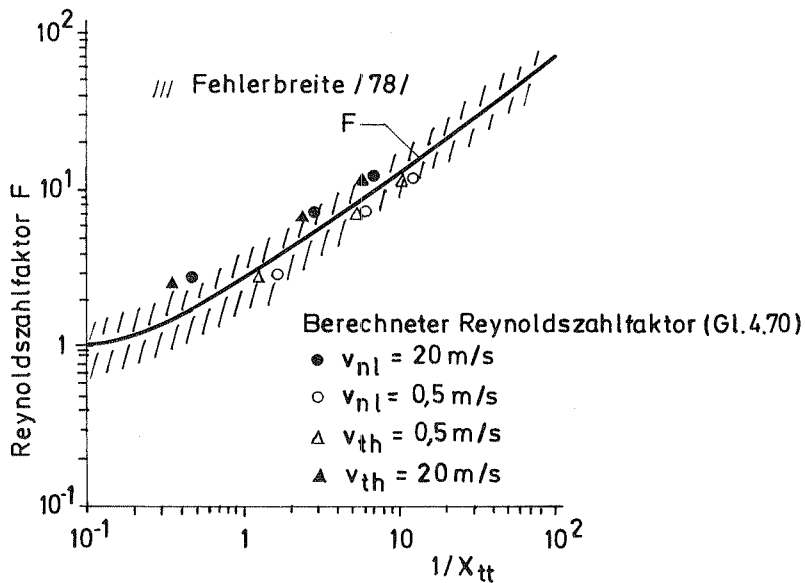


Abb. 4.7 Von Chen /79/ gegebene Abhängigkeit des Reynoldszahlfaktors F (Gl. 4.70) vom Lockhart Martinelli-Parameter  $X_{tt}$  (Gl. 4.66). Vergleich mit der CALIPSO-Beziehung für Natriumfilm- und für Thermitfilmströmungen.



Den o.a. Überlegungen folgend, wird in CALIPSO zur Berechnung der Wärmeübergangszahl  $\alpha_{st,nl}$  im Falle eines Natriumfilms auf einer Struktur (Stabhülle oder Kühlkanalwand) der maximale Wert, der sich aus dem Vergleich zwischen der Wärmedurchgangszahl durch Wärmeleitung im Film  $\lambda_{nl}/\delta_{nl}$  und der konvektiven Wärmeübergangszahl  $\alpha^*$  ergibt, gewählt. Der Wärmewiderstand  $\delta_{st}/\lambda_{st}$  der Struktur, die Kontakt zum Film hat, wird bei der Berechnung der Wärmeübergangszahl ebenfalls berücksichtigt. Für  $\alpha_{st,nl}$  folgt die Gleichung:

$$1/\alpha_{st,nl} = 1/\max(\lambda_{nl}/\delta_{nl}, \alpha^*) + \delta_{st}/\lambda_{st} \quad (4.69)$$

Zur Berechnung der konvektiven Wärmeübergangszahl  $\alpha^*$  eines Natriumfilms auf eine Struktur wird in CALIPSO die Nusseltbeziehung in Gl. 4.58 in der von Chen /79/ vorgeschlagenen Weise eingesetzt. Aus der Definition des Reibungsfaktors, Gl. 4.68, wurde folgende Abhängigkeit abgeleitet:

$$F = (1/\Theta_{nl})^{0,8} \quad (4.70)$$

In Abb. 4.7 wird die Gegenüberstellung der von Chen /79/ gegebenen Korrelation  $F = f(1/X_{tt})$  und der Gl. 4.70 gezeigt. Die Abhängigkeit  $\Theta_{nl} = g(X_{tt})$  wurde für zwei Grenzwerte der Geschwindigkeiten von Natriumfilmen in den SIMBATH-Versuchen berechnet und anhand von Versuchsergebnissen überprüft (s. Kap. 6, Abb. 6.11). Die Korrelation (Gl. 4.70) liefert einen Verlauf, der gut die von Chen /79/ gegebene Abhängigkeit  $F = f(1/X_{tt})$  wiedergibt. In Kap. 6.2.3.2.1 wird ferner die mit dem CALIPSO-Modell ermittelte Wärmeübergangszahl bei einer Natriumfilmströmung Versuchsergebnissen gegenübergestellt. Die dabei erzielte Genauigkeit ist zufriedenstellend.

Für Thermitfilmen wird, wie im Falle der einphasigen Einkomponenten-Strömung, zunächst die Wärmeübergangszahlen für die Komponenten Stahl und Aluminiumoxid berechnet. Die Werte werden volumengewichtet addiert (s. Gl. 4.60). Für Stahlfilme ist, aus ähnlichen Gründen wie für Natriumfilme (s.o.), die Anwendung von Gl. 4.69 gerechtfertigt.

Für Aluminiumoxidfilme wäre die Anwendung von Gl. 4.65 bei der Ermittlung des konvektiven Wärmeübergangs denkbar. Die Übernahme der für gängige Flüssigkeiten ermittelten Konstanten in Gl. 4.65 ist für Aluminiumoxid jedoch nicht

gesichert. In Anbetracht dessen, daß die Korrelationsmethode von Chen /78/ auch für gängige Flüssigkeiten gilt, wurde dieses Verfahren für die Berechnung der Wärmeübergangszahl im Falle von Aluminiumoxidfilmen auf Strukturen übernommen. Die eingesetzte Nusseltbeziehung entspricht Gl. 4.59. Für  $F$  wird in erster Näherung ebenfalls die Abhängigkeit aus Gl. 4.70 gewählt. Die Berechtigung für diese Vorgehensweise liefern die in Abb. 4.7 dargestellte Abhängigkeit  $F = f(1/X_{tt})$  für eine Thermitfilmströmung und der Vergleich mit der Korrelation von Chen /79/. Die für den Vergleich notwendige Abhängigkeit  $\Theta_{th} = g(X_{tt})$  entspricht den Angaben in Kap. 6.2.3.2.1.

#### 4.2.3.2.2 Energieaustausch zwischen Strömungskomponenten

In Tabelle 4.4 sind die im CALIPSO-Modell berücksichtigten Wärmeübergangskorrelationen zwischen den Strömungskomponenten sowie die den Beziehungen zugrundeliegenden Modellannahmen eingetragen. Bei der Auswahl von Korrelationen wurde nach den zu Beginn des Kap. 4.2.3 diskutierten Kriterien vorgegangen. Ein wichtiges Kriterium liegt in der Forderung nach konsistenten Modellvorstellungen für die Austauschprozesse von Impuls (s. Kap. 4.2.3.1.2) bzw. Energie.

Bei der Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung werden, den Annahmen in Kap. 4.2.2.1 entsprechend, die Strömungskomponenten in disperse Phasen (Blasen oder Tropfen) und in kontinuierliche Phasen (flüssige Phase oder Phasengemisch) eingeteilt. Die Phasen bewegen sich relativ zueinander. In gleicher Weise wie bei der Berechnung des Impulsaustausches wird die gesamte ausgetauschte Wärme für ein derartiges Mehrpartikelsystem durch Multiplikation der zwischen einem Teilchen und der umgebenden Flüssigkeit ausgetauschten Wärme mit der Anzahl von Teilchen in einer Masche gewonnen.

Die Wärmeübergangszahl für ein Teilchen, das von einer Flüssigkeit umströmt wird, ergibt sich aus der Wärmeübergangszahl der Teilchenoberfläche zum Fluid und aus dem Wärmewiderstand der Kugel  $0,2 r_{di} / \lambda_{di}$  zu:

$$1/\alpha_{di,co} = 1/\alpha_p + 0,2 r_{di} / \lambda_{di} \quad (4.71)$$

Die Indizes di und co bezeichnen die disperse bzw. die kontinuierliche Phase. Von den in der Literatur existierenden Nusselt-Beziehungen zur Berechnung von  $\alpha_p$  ist entsprechend /52, 58, 66/ die Korrelation von Froessling /80/ sowohl für Blasen als auch für Tropfen anwendbar. Die Gleichung gilt für laminare und für turbulente Strömungen ( $1 < Re < 70\ 000$ ):

$$Nu = 2 + 0,6 Re^{0,5} Pr^{0,33} \quad (4.72)$$

Dabei sind die Nusselt-, die Reynolds- und die Prandtlzahl wie folgt definiert /58/:

$$Nu = 2 r_{di} \alpha_p / \lambda_{co} \quad (4.73)$$

$$Re = 2 r_{di} \rho_{co} |v_{co} - v_{di}| / \eta_{co} \quad (4.74)$$

$$Pr = \rho_{co} \eta_{co} / \lambda_{co} \quad (4.75)$$

Für die Ermittlung der Austauschfläche zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase muß, in ähnlicher Weise wie beim Impulsaustausch, der gegenseitige Kontakt zwischen den Teilchen berücksichtigt werden. In Anlehnung an die Annahmen für den Wärmeübergang zu Strukturen wird die Austauschfläche, die ein Teilchen gegenüber der umgebenden Flüssigkeit besitzt, proportional zur Teilchenoberfläche und zum Volumenanteil der kontinuierlichen Phase angenommen:

$$A = 4\pi r_{di}^2 \theta_{co} \quad (4.76)$$

Die gesamte Anzahl von Teilchen im Maschenvolumen ist in Gl. 4.19 gegeben. Aus Gln. 4.71, 4.76 und 4.19 ergibt sich für die gesamte ausgetauschte Wärme zwischen einer Mehrzahl von Partikeln und einem sie umströmenden Fluid folgende Beziehung:

$$Q_{co,di} = \underbrace{\alpha_{co,di}}_{\text{Wü-Zahl}} \underbrace{3 \theta_{di} \theta_{co} / r_{di} V_M}_{\text{gesamtaustauschfläche}} \underbrace{(T_{co} - T_{di})}_{\text{Temperaturdifferenz}} \quad (4.77)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung und mit dem sinngemäßen Einsatz der Stoffdaten für die kontinuierliche und für die disperse Phase (s. Kap. 4.2.2.1) wird der Wärmeübergang zwischen Thermit und Gas, zwischen Thermit und Natriumdampf sowie zwischen flüssigem Natrium und Gas berechnet.

Für die Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung muß in CALIPSO auch der Wärmeaustausch zwischen Thermit und dem flüssigen Natrium berechnet werden. Beim direkten Kontakt dieser Stoffe ist eine heftige thermische Wechselwirkung zu erwarten, da die Temperatur des Thermits weit höher als die Sättigungstemperatur des Natriums liegt. Es kann zu einer sogenannten Brennstoff-Natrium-Reaktion kommen /1, 2, 81, 82/. Die Phänomene eines derartigen Vorganges sind äußerst komplex und noch nicht in allen Details geklärt. Die Versuchsergebnisse diesbezüglicher Grundlagenexperimente, z.B. /81/, liefern Erkenntnisse über die Auswirkungen des Wärmeübergangs, wie Druckaufbau oder Geschwindigkeiten, aber keine primären Daten, mit deren Hilfe Korrelationen aufgestellt oder überprüft werden könnten.

In den SIMBATH-Versuchen sind keine kohärenten heftigen Thermit-Natrium-Wechselwirkungen festgestellt worden /38, 39/. Dies ist die Folge der Präsenz größerer nichtkondensierbarer Gasmengen. Dieses Gas bewirkt eine räumliche Trennung der wärmeaustauschenden Flüssigkeiten.

Die Berechnung der ausgetauschten Wärme zwischen Brennstoff und dem flüssigen Natrium erfolgt, ausgehend von vereinfachenden Modellvorstellungen, mit Hilfe parametrischer Modelle /13, 82/.

Das von Cho und Wright aufgestellte Modell /82/ geht von Brennstoffkugeln aus, die stets im flüssigen Natrium eingebettet sind. Der Wärmeübergang findet dabei durch quasistationäre Wärmeleitung statt. Die Wärmeübergangszahl ergibt sich allein aus der Wärmedurchgangszahl der Brennstoffkugel. Auf parametrische Weise werden die Zerteilung von Brennstoffkugeln als Folge der Brennstoff-Natrium-Reaktion und die transiente Änderung der Temperaturen von Brennstoff und Natrium nach erfolgtem Kontakt berücksichtigt. Diese Modellvorstellung für den Wärmeübergang zwischen Brennstoff und Natrium ist in den Rechenprogrammen SAS-FCI /7/, EPIC /8/ und PLUTO2 /10/ übernommen worden. Auf parametrische Weise wird in /7, 8, 10/ auch der zusätzliche Wärmewiderstand der dabei entstehenden Dampfschichten berücksichtigt.

Das im Rechenprogramm SIMMER II /13/ realisierte Modell zum Wärmeübergang zwischen Brennstoff und Natrium betrachtet beide Flüssigkeiten als kugelförmige Partikelwolken. Die Kugeln stoßen durch turbulente Fluktuation aufeinander. Während der Kontaktzeit findet Energieaustausch durch Wärmeleitung statt. Die gesamte ausgetauschte Wärme ergibt sich als Produkt der Anzahl von Stößen pro Zeiteinheit, der Zeitdauer eines Stoßes, der Stoßfläche, der Wärmeübergangszahl und der Temperaturdifferenz /13/.

In CALIPSO wird bei der Berechnung des Kontaktwärmeübergangs von Thermit zum flüssigen Natrium nach dem Verfahren des SIMMER II-Modells /13/ vorgegangen. Dafür gibt es zwei Gründe: Die Modellvorstellung, die der Cho-Wright-Korrelation zugrunde liegt, und zwar Thermitkugeln, die in Natrium eingebettet sind, entspricht i.a. nicht den Gegebenheiten der SIMBATH-Experimente, z.B. /38/. Durch die Anwesenheit größerer Gasmengen findet in diesen Versuchen ein lokal begrenzter Kontakt zwischen Natrium und Thermitkugeln statt. Ein weiterer Grund für die Übernahme der SIMMER-Korrelation in CALIPSO besteht darin, daß die ihr zugrunde liegende Modellvorstellung von Energieaustausch beim Zusammenstoß von Kugeln konsistent mit dem in Kap. 4.2.3.1.2 angenommenen Impulsaustauschmechanismus zwischen Thermit und dem flüssigen Natrium ist.

Die Modellvorstellung für den Wärmeübergang zwischen Thermit und Natrium ist in der Abb. 4.8 dargestellt. Zusätzlich zu dem in SIMMER II /13/ angegebenen Wärmeaustausch während der Kontaktzeit wird in CALIPSO zwischen Thermit und Natriumkugeln auch der Wärmeübergang durch Strahlung durch die Gasphase betrachtet (s. Abb. 4.8). Der Anteil des Energieaustausches durch Strahlung zum gesamten Wärmeaustausch liegt in der Größenordnung von 10 %.

Die Herleitung der Korrelation für den Wärmeaustausch durch Kontakt ist ausführlich in /13/ beschrieben und wird daher an dieser Stelle nicht wiederholt.

Die Korrelationen für die Wärmeübergangszahl  $\alpha_{th,nl}$  geht vom Energieaustausch durch Wärmeleitung im Thermit und in den Natriumkugeln aus:

$$\alpha_{th,nl} = (1 - \theta_v)^3 / (0,2 \Gamma_{nl} / \lambda_{nl} + 0,2 \Gamma_{th} / \lambda_{th}) \quad (4.78)$$

Der Term  $0,2 r/\lambda$  ist der angenommene Wärmewiderstand einer Kugel (vergl. mit Gl. 4.71). In Anlehnung an die Vorgehensweise in SAS-FCI /7/ und PLUTO2 /10/ berücksichtigt  $(1 - \theta_v)^3$  in Gl. 4.78 die Verminderung des Wärmeaus-tauschkoeffizienten Thermit/Natrium als Folge von entstehenden Dampfschichten.

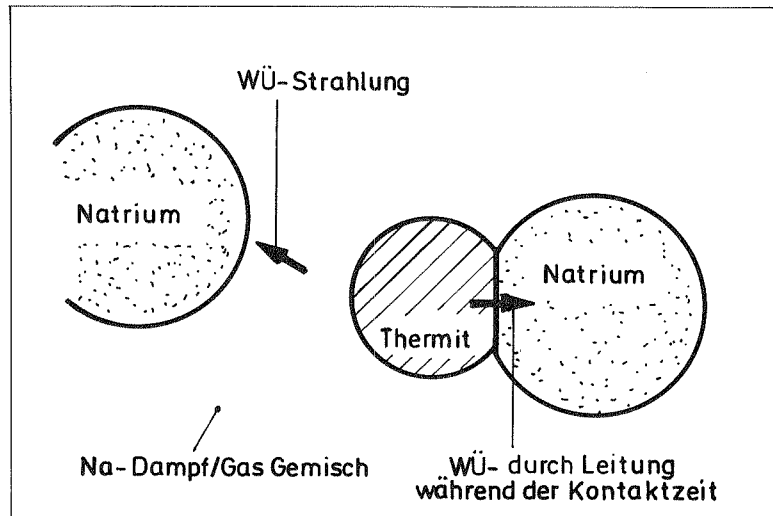


Abb. 4.8 Modellvorstellung des Wärmeübergangs Thermit/Natrium

Die Austauschfläche für den Wärmeübergang ist:

$$A_{th, nl} = 1,77 (r_{nl} + r_{th}) (r_{nl}^2 + r_{th}^2) \min(r_{th}^2, r_{nl}^2) / (r_{th}^3 r_{nl}^3) \theta_{th} \theta_{nl} V_M \quad (4.79)$$

Der Aufbau dieser Gleichung kann durch Vergleich mit dem Ausdruck für die Austauschfläche in Gl. 4.77 verdeutlicht werden.  $A_{nl, th}$  ist proportional zum Volumenanteil der wärmeaustauschenden Stoffe (hier die des Thermits und die des Natriums), sowie zum Maschenvolumen. Sie ist umgekehrt proportional einem auf etwas komplexe Art aus den Radien von Thermit und Natriumkugeln gemittel-ten Radius. Würde einer der Stoffe, z.B. das Natrium, die kontinuierliche Phase werden ( $r_{nl} \rightarrow \infty$ ), in der der andere Stoff, also Thermit, als disperse Phase eingebettet ist, dann führt Gl. 4.79 zum Ausdruck der gesamten Aus-tauschfläche, der auch in Gl. 4.77 gegeben ist.

Wie bereits erwähnt, können Thermit- und Natriumkugeln durch die Gasphase hindurch Wärme durch Strahlung austauschen. Die Kontaktfläche einer jeden Kugel mit der Gasphase wird proportional zur Kugeloberfläche und zum Gasvolumenanteil angenommen (vergl. Gl. 4.62). Als strahlungsaustauschende Fläche wird die kleinste der Gesamtoberflächen der Thermit- und Natriumkugeln, die im Maschenvolumen Kontakt zur Gasphase haben, gewählt:

$$A_{rad} = 3 V_M \min(\theta_{th}/r_{th}, \theta_{nl}/r_{nl}) \theta_v \quad (4.80)$$

Die gesamte ausgetauschte Wärme zwischen Thermit und Natrium wird mit folgender Beziehung berechnet:

$$Q_{th,nl} = C_{wü} \alpha_{th,nl} A_{th,nl} (T_{th} - T_{nl}) + C_{rad} A_{rad} (T_{th}^4 - T_{nl}^4) \quad (4.81)$$

wobei die Größen  $\alpha_{th,nl}$ ,  $A_{th,nl}$  und  $A_{rad}$  den Gln. 4.78 bis 4.80 entsprechen. Der Koeffizient  $C_{wü}$  in Gl. 4.81 ist ein Parameter, der in approximativer Weise die Verminderung des Wärmeübergangs Thermit/Natrium durch die zusätzliche Existenz von Gasschichten berücksichtigt. Er wurde bei der Nachrechnung von SIMBATH-Einzelstabversuchen auf den Wert 0,1 eingestellt. Der Strahlungskoeffizient hat, den Emissionswerten von Thermit und Natrium entsprechend, den Wert  $4 \cdot 10^{-9} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ .

In Kap. 6.2.3.3.1 wird der anhand von Gl. 4.81 berechnete Wärmefluß zwischen Thermit und dem flüssigen Natrium mit Ergebnissen unter Anwendung der Modelle aus EPIC /8/ bzw. EULFCI /9/ und PLUTO2 /10/ verglichen. Für den Fall von gleichgroßen Radien des Thermits und des Natriums ergibt Gl. 4.81 Werte, die um 10 - 20 % niedriger als die der Modelle in /8, 10/ liegen.

In CALIPSO wird auch der Wärmeaustausch zwischen den nicht kondensierbaren Gasen und dem Natriumdampf berechnet. Dem liegt die Modellvorstellung zugrunde, daß beide Komponenten sich stets vermischen und dabei zu einer einheitlichen Temperatur tendieren. Durch Bilanzierung der Energien beider Gase und unter Annahme einer Zeitverzögerung  $\Delta t/C$  für den Temperatúrausgleich läßt sich folgende Gleichung aufstellen:

$$Q_{fg,nv} = C / \Delta t S_{fg} S_{nv} / (S_{fg} + S_{nv}) V_M c_{p,fg} (T_{fg} - T_n) \quad (4.82)$$

Für die im Kap. 6.3 gezeigten Nachrechnungen von SIMBATH-Versuchen liegt die angenommene Zeitverzögerung bei  $1,25 \cdot 10^{-5}$  s entsprechend einem Zeitraum von fünf Rechenzyklen bis zum Temperatenausgleich der gasförmigen Komponenten. Die in Gl. 4.82 als  $\Delta t/C$  definierte Zeitverzögerung ( $C = \text{Konstante}$ ,  $\Delta t = \text{Rechenzeitschritt}$ ) ist zwischenzeitlich durch die sinnvollere Vorgabe eines äquivalenten Gesamtzeitintervalls ersetzt worden.

Bei den in CALIPSO betrachteten Filmströmungsmodellen (s. Kap. 4.2.2.1) können sich im Gasbereich Thermittropfen, Natriumtropfen, Natriumdampf und nichtkondensierbare Gase befinden. Der Wärmeübergang dieser Strömungskomponenten untereinander wird mit den für eine reine Tropfenströmung geltenden Beziehungen (Gln. 4.77 und 4.81) ermittelt.

Bei der Berechnung des Wärmeflusses von Gas bzw. Natriumdampf zu einem der Filme wird, konsistent mit den Annahmen beim Impulsaustausch, die Filmoberfläche als starre Struktur angenommen. Die Wärmeübergangszahl von Gas bzw. Natriumdampf zum Film ist:

$$1/\alpha^* = 1/\alpha_{f,v} + 0,5 \delta_f / \lambda_f \quad (4.83)$$

Der Term  $\alpha_{f,v}$  ist die konvektive Wärmeübergangszahl. Sie wird in Anbetracht des bei 0,7 liegenden Prandtlwertes dieser Stoffe (s. Anhang A2.1) mit Hilfe der Nusselt-Beziehung aus Gl. 4.59 mit angepaßten charakteristischen geometrischen Längen (s. Anhang A1) berechnet. Der zweite Term der Gleichung ist der Wärmewiderstand der Flüssigkeit im Film. Die zwischen Gas und Film ausgetauschte Wärme wird durch sinngemäße Anwendung der Gl. 4.56 ermittelt.

Wie bereits erwähnt, befinden sich bei den betrachteten Filmströmungen (s. Kap. 4.2.2.1) Tropfen im Gasbereich und Filme auf dem Hüllrohr und auf der Kühlkanalwand. Bei der Bestimmung des Impulsaustausches zwischen einem Film und den Tropfen im Gasbereich wurde von einem Tropfenniederschlagsmodell ausgegangen (s. Kap. 4.2.3.1.2). In Übereinstimmung mit dieser Modellvorstellung wird auch für den Wärmeaustausch angenommen, daß pro Rechenzeitschritt eine Anzahl von Tropfen durch turbulente Fluktuation mit dem Film in Kontakt kommen. Die Tropfen tauschen Wärme durch Wärmeleitung aus. Sie kehren anschließend in den Gasbereich zurück, wo sie das thermodynamische Gleichgewicht mit den dort verbliebenen den Teilchen erlangen. Die Anzahl der Tropfen, die innerhalb  $\Delta t$



in Kontakt mit dem Film kommen, ist entsprechend Gl. 4.54:

$$N = 3 C_{dep} |v_j| \theta_j \Delta t A_k^{fv} / (4\pi r_j^3) \quad (4.84)$$

Der Index j bezeichnet die Tropfen, der Index k den Film. Die Wärmeaustauschfläche eines Tropfens mit dem Film wird, wie im Falle des Impulsaustausches (Gl. 4.41), proportional zur Projektionsfläche der Kugel eingesetzt. Die Wärmeübergangszahl zwischen Tropfen und Film wird in Anlehnung an Gl. 4.71 wie folgt berechnet:

$$1/\alpha_{k,j} = 0,2 r_j / \lambda_j + 0,5 \delta_k / \lambda_k \quad (4.85)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gl. 4.85 ist der Wärmewiderstand einer Kugel (s. auch Gl. 4.71). Der zweite Term ist der angenommene Wärmewiderstand des Films.

Für die gesamte ausgetauschte Wärme zwischen Natrium- bzw. Thermitropfen im Gasbereich und einem Thermit- bzw. Natriumfilm wird auch der Wärmeübergang durch Strahlung berücksichtigt. Aus den Gln. 4.84 und 4.85 folgt:

$$Q_{k,j} = \underbrace{0,375 C_{dep} \theta_j / r_j |v_j| \Delta t A_k^{fv} \alpha_{k,j} (T_k - T_j)}_{Wü \text{ nach Kontakt}} + \underbrace{C_{rad} \theta_j A_k^{fv} (T_k^4 - T_j^4)}_{Wü \text{ durch Strahlung}} \quad (4.86)$$

Die Strahlungsfläche zwischen Film und Tropfen in Gl. 4.86 wird, ausgehend von einer vereinfachten Betrachtung paralleler Platten, proportional zur Filmmantelfläche und zum Volumenanteil der Tropfen im Gasbereich angenommen.

#### 4.2.3.3 Massenaustausch

In CALIPSO werden Massenaustauschfunktionen zur Berechnung der Verdampfungs- und Kondensationsrate von Natrium sowie der Schmelz- und Erstarrungsrate von Stahl und Oxid aus dem Thermit oder den Strukturen eingesetzt. Die Berechnungsverfahren der Austauschraten wurden unverändert aus der vorherigen CALIPSO Version /14/ übernommen.

Die Phasenwechselrate innerhalb des Natriumgemisches wird unter Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht der flüssigen und der Dampfphase berechnet.

Modellmäßig erfolgt das Schmelzen der Strukturen bzw. das Ausfrieren von Oxid oder Stahl aus dem Thermit im gesamten Volumen der jeweiligen Stoffe und nicht an den Grenzflächen. Die Phasenwechselrate wird durch die Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht zwischen der jeweiligen festen und der flüssigen Phase ermittelt. Geschmolzener Stahl der Strukturen wird in Abhängigkeit der Position der schmelzenden Schicht dem Stabinneren oder dem Kühlkanal zugeschlagen. Die teilweise oder gänzlich ausgefrorenen Komponenten bleiben weiterhin innerhalb des Mehrphasen- Mehrkomponenten-Gemisches, weil die derzeitige CALIPSO-Fassung kein spezielles Ausfriermodell enthält.

Der in /14/ beschriebene Ausfrier-Modellansatz gilt nur für eine reine Tropfenströmung des Thermits und ist aus heutiger Sicht als nicht ausreichend detailliert anzusehen. Eine strömungsformabhängige Modellierung des Ausfrier- verhaltens für die betrachteten komplexen Strömungen von Gemischen ist auf der Grundlage der in /83/ durchgeführten Untersuchungen notwendig.

Ein weiterer Massenaustausch findet beim Abbröckeln der Stabhülle statt. Dieser Austausch dient nach Stabversagen der Simulation einer axialen und azimuthalen Öffnungsvergrößerung durch mechanische Propagation. Die Austauschrate kann durch Vorgabe einer Zeitfunktion für die Porosität spezifiziert werden. Die abgebröckelte Masse der Struktur und die der darauf befindlichen Filme oder Oxidkrusten werden in Form entsprechender Massenquellterme dem Kühlkanal zugeschlagen.

## 5. Numerisches Lösungsverfahren in CALIPSO

### 5.1 Zeitintegrationsverfahren der Erhaltungsgleichungen

Das Zeitintegrationsverfahren basiert auf einem sogenannten Prediktor-Korrektor-Schema, das auch in /8, 10, 14/ angewendet wird. In dem Prediktor-Schritt werden neue Werte (Index 2) explizit, also unter Anwendung der Werte des vorherigen Zeitschrittes (Index 1), errechnet. In vereinfachter Form gilt die Gleichung:

$$X^{(2)} = X^{(1)} + \Delta t \cdot \sum F(1) \quad (5.1)$$

Die Größe  $x$  stellt die aus den Erhaltungsgleichungen zu ermittelnden Unbekannten dar (Massen, Geschwindigkeiten, Energien).  $F(1)$  entspricht der Summe aller anderen Größen dieser Gleichungen und ist eine Funktion der Werte des vorherigen Zeitschrittes.

Im semi-impliziten Korrektorschritt wird, ausgehend vom Mittelwert der alten und der explizit errechneten Werte, das Endergebnis für jeden Zeitintegrationsschritt ermittelt (Index 3):

$$X^{(3)} = \frac{X^{(1)} + X^{(2)}}{2} + \Delta t \cdot \sum F\left(\frac{(1) + (2)}{2}\right) \quad (5.2)$$

Zwischen den beiden Teilen des Integrationsverfahrens erfolgt die Überprüfung des Rechenzeitschrittes im Hinblick auf die numerische Stabilität des Verfahrens /14, 84/.

### 5.2 Das Maschennetz

Die Erhaltungsgleichungen des CALIPSO-Modells werden durch finite Differenzengleichungen in Eulerscher Schreibweise approximiert. Die Diskretisierung der Geometrie des Thermitstabes und des Kreislaufes erfolgt in axialer Richtung (Laufindex  $j$ ) mit einem Netz aus Rechenmaschen mit variablen Maschenweiten. Jede Masche hat einen konstanten Querschnitt. Im Kühlkanal kann sich diese Größe von Masche zu Masche ändern, um auf diese Weise sprunghafte Änderungen

des Querschnittes zu berücksichtigen. Zusätzliche Hilfsmaschen sind für die Randbedingungen in axialer Richtung eingeführt.

In radialer Richtung (Laufindex  $i$ ) werden, wie in /14/, nur zwei Maschen betrachtet, die eine für das Stabinnere, die andere für den Kühlkanal.

Die Diskretisierung der Strukturen zur Berechnung der Energiegleichungen erfolgt mit drei gleichstarken Schichten für die Stabhülle und für die Kühlkanalwand und mit einer Schicht für mögliche erstarrte Oxidkrusten (s. auch Abb. 4.1).

Die Position der Variablen innerhalb einer Masche entspricht der Konvention der versetzten Maschen (staggered grid) /22/. Skalare Größen, wie Dichte und innere Energie, werden der Maschenmitte zugeordnet (Abb. 5.1). Da die einzelnen Strömungsformen maschenweise auftreten, sind der Strömungsformindikator, die Wärmeübergangsraten sowie der skalare, stets positive Teil der Reibungskraft mit den Strukturen ( $F^{vis}$ ) und zwischen den Strömungskomponenten ( $F^k$ ) ebenfalls der Maschenmitte zugeordnet. Vektorielle Größen (Geschwindigkeiten) sind den Maschenrändern zugeordnet (Abb. 5.1). Die Druckverluste durch lokale Strömungshindernisse und die Pumpenförderhöhe sind ebenfalls den Maschenrändern zugewiesen.

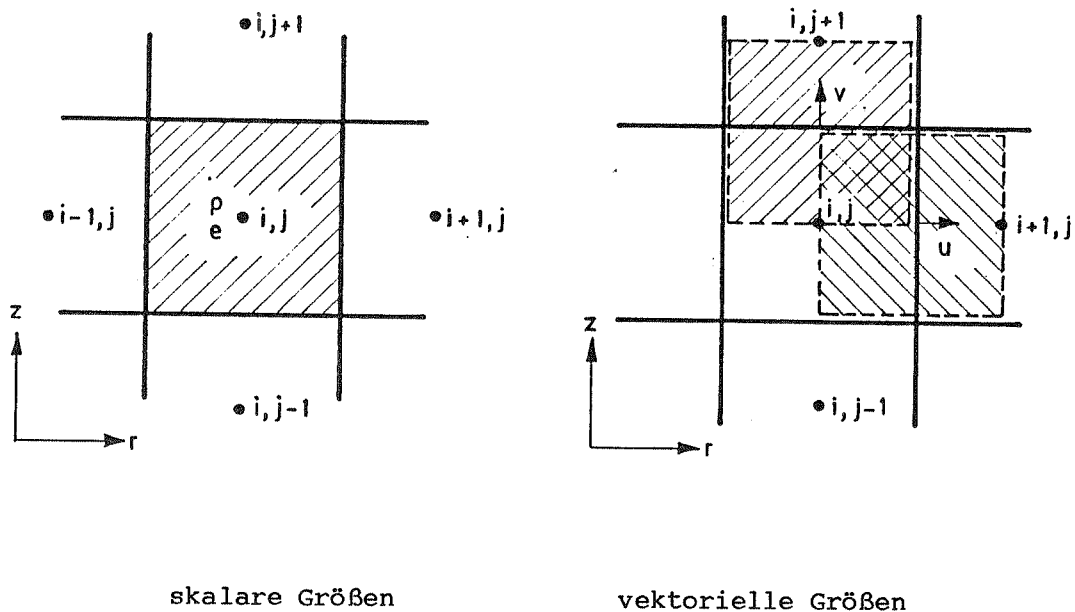


Abb. 5.1 Integrationsvolumen entsprechend der "staggered grid"-Konvention

Dieser Konvention entsprechend ergeben sich für die Volumenmittelung der Impulserhaltungsgleichung Kontrollvolumina, die gegenüber denen der Masse- bzw. Energieerhaltungsgleichung versetzt sind. Für die radiale Richtung, bei der es nur eine Masche im Stabinneren und eine Masche im Kühlkanal gibt, impliziert diese Regelung die Lösung der entsprechenden Impulserhaltungsgleichung in nur einer einzigen Rechenmasche. Sie erstreckt sich axial über die Länge einer Masche für skalare Größen (s. Abb. 5.1). Ihre radiale Ausdehnung umfaßt einen Ringspalt zwischen den Maschenmitten der Stab- und der Kühlkanalmasche, d.h. von  $r_i/2$  bis  $(r_w + r_c)/2$  (s. auch Anhang A1, Abb. A1.1).

### 5.3 Das Zwei-Geschwindigkeits-Zwei-Drücke-Konzept

Zur korrekten Simulation von Druckverlusten an Stellen mit unsteten Querschnittsänderungen auf einem versetzten Maschengitter werden die Differenzenformeln entsprechend eines Zwei-Drücke- und Zwei-Geschwindigkeits-Konzeptes /85/ formuliert. An den Maschenrändern, an denen die Querschnittssprünge auftreten, werden im Gegensatz zu der Standardtechnik des staggered grid jeweils zwei Geschwindigkeiten - vor und nach dem Sprung - und zwei Drücke berücksichtigt (Abb. 5.2).

Das Integrationsvolumen für die Impulserhaltungsgleichung (in Abb. 5.2 gestrichelt eingezeichnet) schließt, dem Konzept des versetzten Maschennetzes entsprechend, den Querschnittssprung ein. Es umfaßt ferner zwei Teilvolumina die den Hälften beider angrenzenden Maschen entsprechen. Die erwähnten Geschwindigkeiten vor und nach dem Sprung werden diesen beiden Maschenhälften zugeordnet.

Die Integration der Massen- und der Impulserhaltungsgleichung über das den Querschnittssprung einschließende Volumen  $V_\varepsilon$  liefert im Fall  $V_\varepsilon \rightarrow 0$  für jede Strömungskomponente folgende Beziehungen:

$$A_{i,j} v_{i,j}^T = A_{i,j+1} v_{i,j+1}^B \quad (S = \text{konstant}) \quad (5.3)$$

$$0,5 S_{i,j+1/2} [(v_{i,j+1}^B)^2 - (v_{i,j}^T)^2] = -\theta_{i,j+1/2} (p_{i,j+1}^B - p_{i,j}^T) \quad (5.4)$$

Die Dichte und der Volumenanteil am Maschenrand (Index  $j+1/2$ ) werden durch Wichtung mit den Maschenlängen bzw. Maschenvolumina wie folgt interpoliert:

$$S_{i,j+1/2} = (S_j \Delta z_j + S_{j+1} \Delta z_{j+1}) / (\Delta z_j + \Delta z_{j+1}) \quad (5.5)$$

$$\theta_{i,j+1/2} = (\theta_j V_{Mj} + \theta_{j+1} V_{Mj+1}) / (V_{Mj} + V_{Mj+1}) \quad (5.6)$$

Das Verfahren wird z.Z. in axialer Richtung für den Kühlkanalbereich angewendet. Im Rechenprogramm tritt dabei nur die Geschwindigkeit  $v_{i,j}^T$  auf, weil der Term  $v_{i,j}^B$  entsprechend der GL. 5.3 ersetzt werden kann.

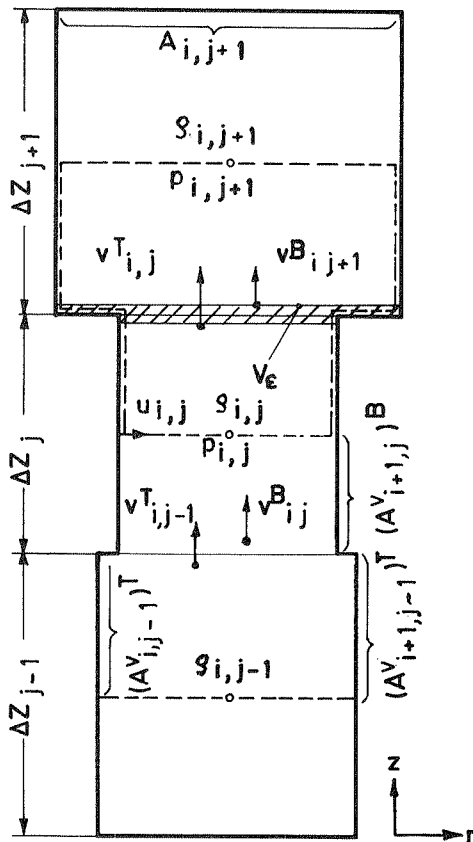


Abb. 5.2 Maschennetz für den Kühlkanal mit Querschnittsänderungen. Am linken Rand der Masche  $i,j$  existiert eine Öffnung zum Stab.

Das vorgestellte Konzept der Zuordnung zweier Geschwindigkeiten an den Maschengrenzen wurde erstmals im Rechenprogramm LEVITATE /12/ angewendet. Das in CALIPSO realisierte Verfahren ist diesem sehr ähnlich. Für CALIPSO erfolgte

jedoch die Herleitung der Druck- und Geschwindigkeitsänderung bei Querschnittsprüngen auf einem formalen Weg /85/.

#### 5.4 Diskretisierte Form der Erhaltungsgleichungen

Die Massenerhaltungsgleichung jeder Komponente wird über das Maschenvolumen integriert. Die konvektiven Terme dieser Gleichung sind, unter Berücksichtigung der Geschwindigkeiten und Querschnitte an den Maschenrändern, entsprechend einem gewichteten Aufwind-Differenzverfahren (donor-cell) formuliert. Es entsteht folgende zeitlich und räumlich diskretisierte Form der Massenerhaltungsgleichung einer Komponente (Gl. 4.4):

$$S_{i,j}^{(3)} = S_{i,j} - \Delta t [(RM_{i,j} - RM_{i-1,j} + ZM_{i,j} - ZM_{i,j-1}) / V_{M_{i,j}} + \Gamma_{i,j}] \quad (5.7)$$

mit:

$$RM_{i,j} = A_{i,j}^V \mu_{i,j} [\delta_r S_{i,j} + (1 - \delta_r) S_{i+1,j}], \quad \delta_r = 0,5 [1 + \text{sign}(\mu_{i,j})] \quad (5.8)$$

$$ZM_{i,j} = A_{i,j}^V v_{i,j} [\delta_{ax} S_{i,j} + (1 - \delta_{ax}) S_{i,j+1}], \quad \delta_{ax} = 0,5 [1 + \text{sign}(v_{i,j})] \quad (5.9)$$

$$\text{sign}(\kappa) = -1 \quad \kappa < 0 \quad ; \quad \text{sign}(\kappa) = 1 \quad \kappa \geq 0 \quad (5.10)$$

Aus Lesbarkeitsgründen wird in diesen Gleichungen der Index k, der die jeweilige Strömungskomponente bezeichnet, weggelassen. Der hochgestellte Index (3) kennzeichnet die neue Zeitebene. Alle anderen Größen entsprechen dem vorherigen Zeitschritt bzw. dem Zwischenzeitschritt. Diese Konvention wird auch für die anderen in diesem Kapitel vorgestellten Erhaltungsgleichungen beibehalten.

Für die Energieerhaltungsgleichungen ist das Integrationsvolumen identisch mit dem Maschenvolumen. Die zeitlich und räumlich diskretisierte Form einer dieser Gleichungen (Gl. 4.6) ist:

$$(S_{i,j} e_{i,j})^{(3)} = S_{i,j} e_{i,j} - \Delta t [(RE_{i,j} - RE_{i-1,j} + ZE_{i,j} - ZE_{i,j-1} + E_{i,j}) / V_{M_{i,j}} + EXP_{i,j}] \quad (5.11)$$

Der Term  $E_{i,j}$  bezeichnet die Summe aller Energieaustauschvorgänge. Für die Expansionsarbeit  $EXP_{i,j}$  gilt der Ausdruck:

$$EXP_{i,j} = p_{i,j} \left[ (\theta_{i,j}^{(3)} - \theta_{i,j}) / \Delta t + (RT_{i,j} - RT_{i-1,j} + ZT_{i,j} - ZT_{i,j-1}) / V_{M,i,j} \right] \quad (5.12)$$

Die Berechnung der konvektiven Terme in den Gln. 5.11 und 5.12 erfolgt analog zu den Beziehungen 5.8 bis 5.10, in denen die Dichten jeweils durch das Produkt Dichte mal Energie, bzw. nur durch den Gasvolumenanteil (für die Expansionsarbeit, Gl. 5.12), ersetzt werden.

Die diskretisierte Form der Energieerhaltungsgleichung für die einzelnen Strukturschichten entspricht unverändert derjenigen aus /14/.

Für die Impulserhaltungsgleichungen werden in axialer Richtung die zeitlich gemittelten Impulserhaltungsgleichungen separat über die beiden Teilvolumina integriert und anschließend mit Gl. 5.4 addiert. Es entsteht aus (Gl. 4.9) folgende Formulierung der Impulserhaltungsgleichung einer Komponente in axialer Richtung:

$$\begin{aligned} \overline{(Sv\Delta z)}_{i,j}^{(3)} &= \overline{(Sv\Delta z)} - \Delta t \left[ (Z\dot{I}_{i,j+1} - Z\dot{I}_{i,j}) + 0,5 / A_{i,j} (RI_{i+1,j}^T - RI_{i,j}^T) \right. \\ &+ 0,5 / A_{i,j+1} (RI_{i+1,j+1}^B - RI_{i,j+1}^B) + \theta_{i,j+1/2} (p_{i,j+1} - p_{i,j}) \\ &\left. + \Delta p_{i,j+1/2} + 0,5 (\Delta z_j I_{i,j} + \Delta z_{j+1} I_{j+1}) \right] \end{aligned} \quad (5.13)$$

Dabei sind:

$$\overline{Sv\Delta z}_{i,j} = 0,5 \Delta z_j S_{i,j} v_{i,j}^T + 0,5 \Delta z_{j+1} S_{i,j+1} v_{i,j+1}^B \quad (5.14)$$

$$Z\dot{I}_{i,j} = 0,5 S_{i,j} (v_{i,j}^B + v_{i,j}^T)^2 \quad (5.15)$$

$$RI_{i,j}^T = (A_{i,j}^V)^T \mu_{i,j} [\gamma_r S_{i-1,j} v_{i-1,j}^T + (1-\gamma_r) S_{i,j} v_{i,j}^T] \quad (5.16)$$

$$RI_{i,j}^B = (A_{i,j}^V)^B \mu_{i,j} [\gamma_r S_{i-1,j} v_{i-1,j}^B + (1-\gamma_r) S_{i,j} v_{i,j}^B] \quad (5.17)$$

$$\gamma_r = 0,5 (1 + \text{sign}(\mu_{i,j})) \quad (5.18)$$

$$\Delta p_{i,j+1/2} = 0,5 S_{i,j+1/2} \left[ (v_{i,j}^T)^2 - (v_{i,j+1}^B)^2 + \xi (v_{i,j}^T)^2 + (\Delta p_{\text{pump}}) \right] \quad (5.19)$$



$$\dot{I}_{i,j} = \left[ \sum_{At} (F_{i,j}^{vis})^* (v_{i,j}^T)^{(3)} + \sum (F_{i,j}^k)^* (v_{nel,i,j}^T)^{(3)} + S_{i,j} g_j + (F_{i,j}^r)^* (v_{i,j}^T)^{(3)} \right] / V_{M,i,j} \quad (5.20)$$

$$v_{i,j}^B = A_{i,j} / A_{i,j+1} v_{i,j}^T \quad (5.21)$$

Die Terme  $RI_{i,j}^B$  bzw.  $RI_{i,j}^T$  aus Gl. 5.16 u. 5.17 beschreiben den radialen Transport des axialen Impulses. Die Geschwindigkeitskomponente in radialer Richtung hat für Thermit und für das flüssige Natrium den gleichen Wert, und zwar den der flüssigen Phase (s.u.). Die Größen  $(F_{i,j}^{vis})^*$ ;  $(F_{i,j}^k)^*$  entsprechen dem skalaren, stets positiven Teil der axialen Komponenten der Wandreibungskräfte bzw. der Reibungskräfte zwischen Komponenten (s. Kap. 4.2.3.1).  $(F_{i,j}^r)^*$  ist der skalare Teil des Impulsaustausches durch Phasenwechsel /14/.

Der Term  $\Delta p_{i,j+1/2}$  (Gl. 5.19) gibt die Druckänderung an der Position des Querschnittsprunges an. Diese Formulierung erfaßt korrekt die reversiblen und die irreversiblen Druckverluste an dieser Stelle. Ferner kann, in Verbindung mit einer sinnvollen Wahl der Maschenweiten, die Pumpenförderhöhe an beliebiger Stelle im Kreislauf berücksichtigt werden.

CALIPSO enthält derzeit eine diskretisierte Form der Impulserhaltungsgleichung in radialer Richtung, die weitgehend aus der vorherigen CALIPSO-Fassung /14/ übernommen wurde. Wie bereits erwähnt, wird für diese Bewegungsrichtung das Zwei-Geschwindigkeits- und Zwei-Drücke-Konzept nicht angewendet. Der Gleichungsaufbau unterscheidet sich daher von dem der Gl. 5.13.

In radialer Richtung werden das Thermit und das flüssige Natrium zu einer schweren Phase zusammengefaßt. Das Gemisch von Gas und Natriumdampf bildet die leichte Phase (s. auch Kap. 4.1). Die Dichten, Geschwindigkeiten und Reibungskräfte zwischen diesen Phasen sind für das Stabinnere bzw. für den Kühlkanal die folgenden:

Für die flüssige Phase:

$$S_l = S_{th} + S_{nl} \quad (5.22)$$

$$v_l = (S_{th} v_{th} + S_{nl} v_{nl}) / (S_{th} + S_{nl}) \quad (5.23)$$

$$\mu_l = \mu_{th} = \mu_{nl} \quad (5.24)$$

$$F_{l,v}^k = F_{th,v}^k + F_{nl,v}^k \quad (5.25)$$

Für die Gasphase gelten die Beziehungen:

$$S_v = S_{nv} + S_{fg} \quad (5.26)$$

$$v_v = v_{nv} = v_{fg} \quad (5.27)$$

$$\mu_v = \mu_{nv} = \mu_{fg} \quad (5.28)$$

$$F_{v,l}^k = -F_{l,v}^k \quad (5.29)$$

Die Größen  $F_{th,v}^k$  und  $F_{nl,v}^k$  sind die radialen Komponenten der entsprechenden Reibungskräfte zwischen den Komponenten im Pin bzw. im Kühlkanal (s. Gl. 4.34 u. 4.43).

Die angewendete Geometriemodellierung mit nur einer Masche für die Impulserhaltungsgleichung in radialer Richtung erlaubt keine eindeutige Bestimmung des konvektiven Transportes des axialen Impulses in radialer Richtung  $\partial(Svu)/\partial r$ . Deshalb wird vereinfachend angenommen, daß der gesamte konvektive Transport des axialen Impulses in radialer Richtung, d.h. die Differenz dessen, was in die Masche hinein- und hinaus transportiert wird, Null ist /14/. Diese Annahme entspricht dem in Kauf zu nehmenden Nachteil einer zweidimensionalen Behandlung der Erhaltungsgleichungen in der vorgegebenen Geometrie von CALIPSO. Als Vorteil dieser 2D-Betrachtung der Impulserhaltungsgleichung ergibt sich der Verzicht auf ein separates Ejektionsmodell, für dessen Herleitung mehr Approximationen notwendig wären.

Der Aufbau der diskretisierten Form der Impulserhaltungsgleichung in radialer Richtung wird in Gl. 5.30 am Beispiel der flüssigen Phase aufgezeigt. Der Index 1 wurde aus Lesbarkeitsgründen weggelassen.

$$\begin{aligned} (\bar{S}\mu)_{i,j}^{(3)} = & (\bar{S}\mu)_{i,j} + (\bar{S}\mu_{rel})_{i,j}^{(3)} - (\bar{S}\mu)_{i,j} - \Delta t [(Z\dot{I}_{i,j} - Z\dot{I}_{i,j-1} \\ & + Z\dot{I}_{V_{i,j}} - Z\dot{I}_{V_{i,j-1}}) / \Delta z + \bar{\Theta}_{i,j} (p_{i+1,j} - p_{i,j})_{DAMP} / (r_{i+1,j} - r_{i,j}) + \bar{I}_{i,j}] \end{aligned} \quad (5.30)$$

Die einzelnen Terme dieser Gleichung sind wie folgt definiert:

$$(\bar{\xi} \mu)_{i,j} = (S_{i,j} V_{M i,j} + S_{i+1,j} V_{M i+1,j}) / (V_{M i,j} + V_{M i+1,j}) \mu_{i,j} \quad (5.31)$$

$$V_{M i,j} = 0,75 r_i^2 \Delta Z \quad \text{Pin-Maschenhälfte} \quad (5.32)$$

$$V_{M i+1,j} = 0,25 (r_w^2 + 2r_w r_i - 3r_i^2) \Delta Z \quad \text{Kühlkanal-Maschenhälfte} \quad (5.33)$$

$$Z \bar{I}_{i,j} = \bar{v}_{i,j} (\delta_{ax} (\bar{\xi} \mu)_{i,j} + (1 - \delta_{ax}) (\bar{\xi} \mu)_{i,j+1}) \quad (5.34)$$

$$\bar{v}_{i,j} = (v_{i,j} \Delta r_{i,j} + v_{i+1,j} \Delta r_{i+1,j}) / (\Delta r_{i,j} + \Delta r_{i+1,j}) \quad (5.35)$$

$$(\bar{\xi} \mu)_{i,j} = (S_{i,j} \Delta r_{i,j} + S_{i+1,j} \Delta r_{i+1,j}) \mu_{i,j} \quad (5.36)$$

$$\delta_{ax} = 0,5 (1 + \Delta \text{cgn}(\bar{v}_{i,j})) \quad (5.37)$$

$$I_{i,j} = [ \pm (F^k)^* (\mu_l - \mu_v)^{(3)} + (F^{vis})^* \mu_l^{(3)} + (F^r)^* (\mu_l)^{(3)} ] / V_{M i,j} \quad (5.38)$$

Für  $\bar{I}_{i,j}$  wird volumetrische Wichtung analog zu Gl. 5.31 angewendet. Für die Dichte der virtuellen Masse  $\tilde{\xi}$  gilt der Ansatz /14/:

$$\tilde{\xi} = C_{virt} \rho_l (1 - \theta_l) / \theta_l \quad \text{für } 0,5 \leq \theta_l \leq 1 \quad (5.39)$$

$$\tilde{\xi} = C_{virt} \rho_v \theta_l / (1 - \theta_l) \quad \text{für } 0,5 \leq \theta_v \leq 0 \quad (5.40)$$

Die Größe  $(\bar{\xi} \mu)$  wird entsprechend Gl. 5.31 ermittelt. Der Transportterm der virtuellen Masse,  $ZIV_{i,j}$ , kann aus den Gln. 5.34 bis 5.37 gewonnen werden. Die Dichte der virtuellen Masse  $\tilde{\xi}$  ersetzt dabei die Dichte  $\xi$  und als transportierende Geschwindigkeit muß in Gl. 5.35 für den Pin bzw. Kühlkanal der jeweilige Mittelwert der Geschwindigkeiten der flüssigen Phase und der Gasphase stehen. Der Koeffizient der virtuellen Masse  $C_{virt}$  ist gleich 0,5 /14/.

Die Größe DAMP in Gl. 5.30 berücksichtigt die Änderung des Druckgradienten in radialer Richtung während eines Zeitschrittes. Ihre Herleitung wird in /14/, Kap. 7.4, beschrieben.

## 5.5 Randbedingungen

Als Randbedingungen für die radiale Bewegungsrichtung gelten die Nullsetzung der Normalgeschwindigkeiten und der konvektiven Transportterme am linken Rand der Stabmasche bzw. am rechten Rand der Kühlkanalmasche. Beim Durchschmelzen der Kühlkanalwand wird deshalb die Berechnung unterbrochen. Eine weitere radiale Randbedingung ist die Vorgabe von axial konstanten Werten der Außentemperatur und einer Wärmeübergangszahl für die Berechnung der Wärmeverluste an die Umgebung.

In axialer Richtung werden an geschlossenen Rändern des Stabinneren alle Gradienten (Druck, Dichte, Energie) sowie die Normalgeschwindigkeit auf Null gesetzt. Die Randbedingungen für den aufgeschnittenen Natrium-Kreislauf werden anhand des Fließschemas (s. Abb. 6.15) bestimmt. Es wird nur ein Plenum betrachtet, das mit einem Zu- und einem Abflußrohr versehen ist. Die angenommenen geometrischen Abmessungen des Plenums und der Rohre entsprechen der Versuchsauslegung. Das Plenum hat eine Natriumoberfläche, über der sich nichtkondensierbare Gase bei konstant gehaltenem Druck befinden. In das Plenum können alle Strömungskomponenten gelangen. Herausfließen kann nur das flüssige Natrium, da anzunehmen ist, daß die Gase in das Gasplenum entweichen und daß Thermit durch eine im Versuchsaufbau vorgesehene Anlage herausgefiltert wird. Die Natriummenge im Plenum, dessen Temperatur sowie die ein- und ausfließenden Massenströme der einzelnen Komponenten werden mittels Erhaltungsgleichungen bilanziert. Für die Randbedingungen in axialer Richtung sind im Pin und im Kühlkanal Hilfsmaschen vorgesehen. Die axiale Ausdehnung der Plenumsmaschen ist stets gleich der Höhe des Natriumspiegels. Ihre radiale Ausdehnung entspricht dem Innendurchmesser des Plenumbehälters. Es wird angenommen, daß diese Maschen stets mit einphasigem flüssigem Natrium gefüllt sind.

Bei der Nachrechnung von SIMBATH-Versuchen mit CALIPSO ist festzustellen (s.Kap. 6.3.1.4.1), daß Druckwellen an der Natriumoberfläche fast ohne Reduzierung ihrer Amplitude reflektiert werden. An dieser Stelle sind zukünftig Maßnahmen erforderlich, um die Dissipation der Druckwellenenergie im Plenum zu erfassen.

## 5.6 Programmierungsdetails

In Abb. 5.3 ist der Ablauf des Steuerprogramms von CALIPSO dargestellt. Unterprogramme, die vom Steuerprogramm aufgerufen werden, sind mit Großbuchstaben geschrieben.

Der Datenaustausch zwischen dem Hauptprogramm und den Unterprogrammen erfolgt mit Hilfe von COMMON-Variablen, die in COMMON-Blöcken zusammengefaßt sind.

Programmiertechnisch wird das Prediktor-Korrektor-Integrationsverfahren (s. Kap. 5.1) durch Anwendung von drei Ebenen für die zeitabhängigen Feldgrößen realisiert. Der Zweck dieser Vorgehensweise liegt im Bestreben, nur einen Satz von Unterprogrammen für beide Schritte des Verfahrens anzuwenden. In diesen Subroutinen ist die Lösung der Erhaltungsgleichungen derart programmiert, daß stets die neuen mit 3 bezeichneten Werte aus dem Mittelwert der Zeitebenen 1 und 2 gewonnen werden. Durch geeignetes Umspeichern der Werte zwischen diesen Ebenen (s. Abb. 5.3) wird das Konzept des Zeit-Integrationsverfahrens wie folgt realisiert: Zu Beginn eines Rechenlaufes werden die zeitabhängigen Feldgrößen mit dem Index 2 eingelesen bzw. initialisiert. Vor dem Lösen der Erhaltungsgleichungen im Prediktor-Schritt erfolgt ein Umspeichern der Daten von Zeitebene 2 zu Zeitebene 1. Somit stehen in den Zeitebenen 1 und 2 die gleichen Werte, und zwar die des "alten Zeitschrittes". Im Prediktor-Schritt werden nun aus dem Mittelwert von 1 und 2 neue explizite 3-er Werte ermittelt. Vor dem Korrektor-Schritt erfolgt ein Umspeichern von 3 nach 2. Somit stehen in der 2-er Ebene jetzt die neuen Zwischenwerte. Im folgenden semiimpliziten Korrektor-Schritt werden aus dem Mittelwert der alten 1-er Ebene und den expliziten 2-er Werten die neuen, für diesen Zeitschritt endgültigen 3-er Werte mit demselben programmierten Gleichungssystem errechnet. Nach einem Umspeichern von 3 nach 2 kann der nächste Rechenzyklus - wie oben beschrieben - durchlaufen werden.

Nach dem Prediktor-Schritt wird der Zeitschritt  $t$  mit einer Courant-Bedingung überprüft /14/ gegebenenfalls verdoppelt oder halbiert und der Prediktor-Schritt wiederholt. Bei der Nachrechnung von typischen SIMBATH-Versuchen liegt, in Verbindung mit der kompressiblen Berechnung des Natriums und dem gewählten Maschennetz der Rechenzeitschritt in der Größenordnung  $10^{-6}$  s.

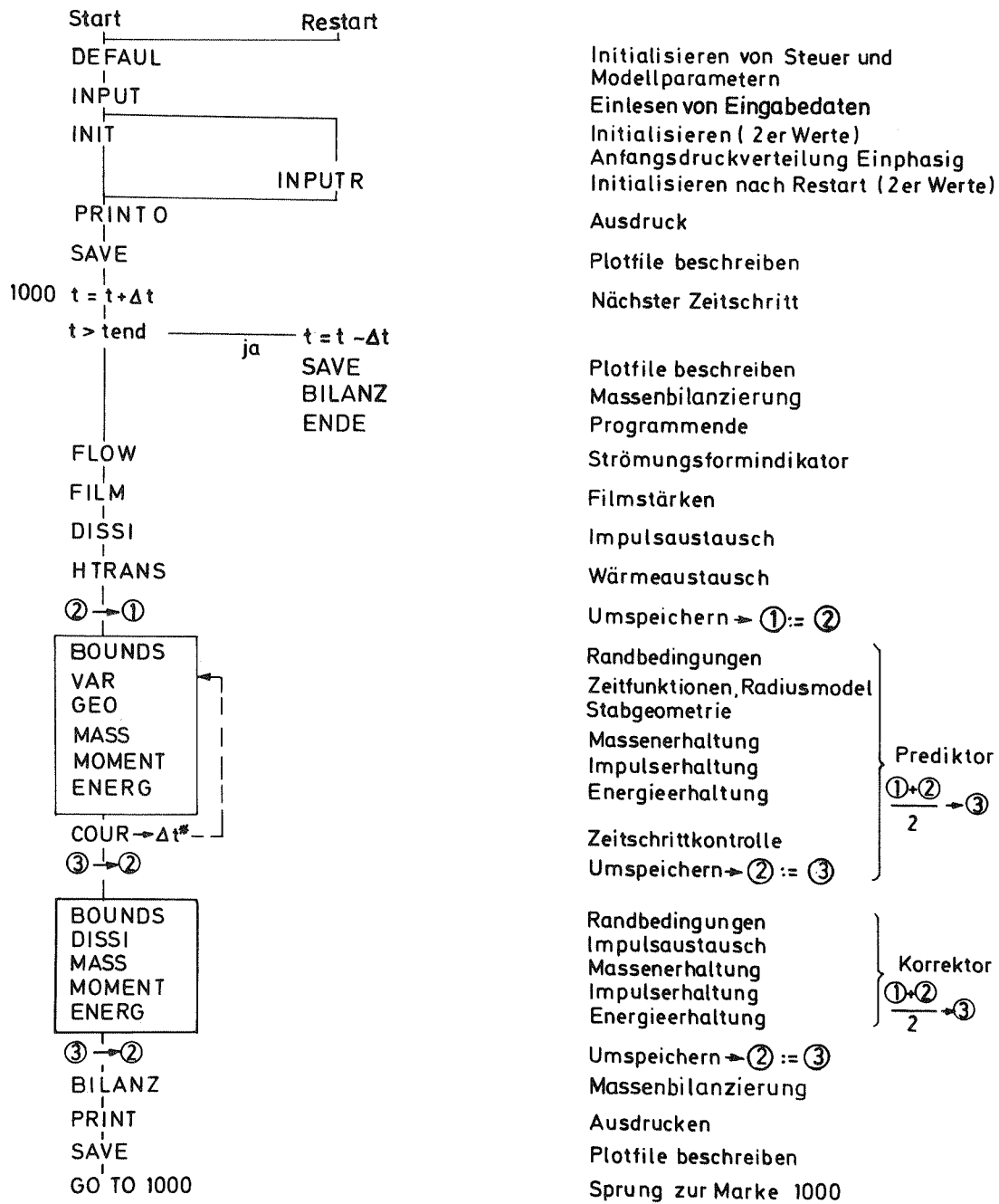


Abb. 5.3 Programmstruktur von CALIPSO

Das Prediktor-Korrektor-Verfahren wird, abweichend von /8/, für zeitabhängige Variablen, die sich nur langsam ändern, wie z.B. Radien, Querschnitte, Wärmeflüsse u.a., nicht angewendet (Abb. 5.3). Dadurch kann eine etwa 30 %ige Zeit- und Speicherplatzeinsparung erfolgen ohne wesentliche Änderung des Gesamtergebnisses. Eine weitere Abweichung gegenüber /8/, die zur Stabilisierung des numerischen Verfahrens beiträgt, besteht in der semi-impliziten Behandlung der Reibungskräfte zwischen den Komponenten und den Strukturen /14/.

Vor dem Einleiten einer transienten Rechnung ab Zeitpunkt  $t = 0$  erfolgt auf Aufforderung im Unterprogramm INIT zusätzlich zum Einlesen der Eingabedaten und zur Initialisierung aller im Modell benötigten Größen auch die Korrektur der vorgegebenen Stoßverlustbeiwerte für örtlich auftretende Strömungshindernisse. Das Verfahren /86/ basiert auf der wiederholten Lösung der Natrium-Impulserhaltungsgleichung für den stationären Kreislaufbetrieb. Es sichert konsistente Anfangswerte, bei denen die Gleichstellung Pumpenförderhöhe mit dem Gesamtdruckverlust gegeben ist. Das Verfahren liefert schließlich das korrekte axiale Anfangsdruckprofil.

Das Rechenprogramm CALIPSO ist in FORTRAN programmiert und enthält ca. 9000 Zeilen (Karten). Die einzelnen Felder für die Variablen haben eine Dimensionierung von (4,100) für zweidimensionale und (100) für eindimensionale Felder. Durch die axialen Randmaschen bedingt können jedoch nur Netze mit maximal 96 Maschen angewendet werden.

Bei der Programmierung wurde besonders auf die Lesbarkeit geachtet. Die Unterprogramme sind weitgehend nach Aufgabenbereichen unterteilt. Kommentarkarten verdeutlichen dabei die einzelnen Rechenschritte. Ein Makroprozessor ermöglicht das rasche Auswechseln einzelner Common-Blöcke sowie der Impuls bzw. Energieaustauschkorrelationen. Die Namensgebung der meisten Variablen ist auch an die Gegebenheiten der SIMBATH-Versuche gekoppelt. Deshalb ist bei Anwendung von CALIPSO auf andere Stoffkombinationen mit formalen Schwierigkeiten zu rechnen.

Typische Rechenzeiten bei der Nachrechnung eines SIMBATH-Einzelstabversuches (Kap. 6.3) mit dem Rechner SIEMENS/Fujitsu 7890 liegen bei etwa 0,70 ms/Masche/Zeitschritt.

## 6. Validierung des CALIPSO-Modells

CALIPSO ist ein ineinander verschachteltes System von im weitesten Sinne parametrischen Modellen. Deshalb wird der Modellvalidierung bzw. der Überprüfung der Modellannahmen und deren Umsetzung im Programm sowie der Bewertung seiner Fähigkeiten bei der Nachrechnung von Experimenten besondere Bedeutung beigemessen. In diesem Kapitel wird der aktuelle Stand der Validierung von CALIPSO gegeben. Die Aktivitäten auf diesem Gebiet werden fortlaufend durchgeführt. Dabei erfolgt eine Rückkopplung der erzielten Ergebnisse auf die Modellparameter, teilweise auch auf die Modellannahmen.

Die durchgeführten Arbeiten lassen sich in drei Gruppen aufteilen:

1. Testprobleme.
2. Validierung einzelner, aus dem Gesamtmodell herausgelöster Modelle.
3. Validierung des Gesamtmodells durch Nachrechnung ausgewählter SIMBATH-Einzelstabversuche.

### 6.1 Testprobleme

#### 6.1.1 Einstellung einer stationären Strömung

Die Berechnung stationärer, isothermer und einphasiger Natriumströmungen in Kanälen mit dem Programm CALIPSO wird anhand eines vereinfachten Testkreislaufes untersucht. Die gewählte Teststrecke hat eine Länge von 1,08 m und einen konstanten Querschnitt von  $2,68 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$ . Die Natriumgeschwindigkeit, der Pumpendruck sowie geschätzte Stoßverlustbeiwerte für Strömungshindernisse werden vorgegeben. Das vom Programm berechnete Anfangsdruckprofil nach erfolgter automatischer Korrektur der Widerstandsbeiwerte für lokale Strömungshindernisse /86/ erweist sich im stationären Betrieb als richtig. Der Druck und die Geschwindigkeit während der darauffolgenden transienten Rechnung bleiben unverändert. (Abb. 6.1).



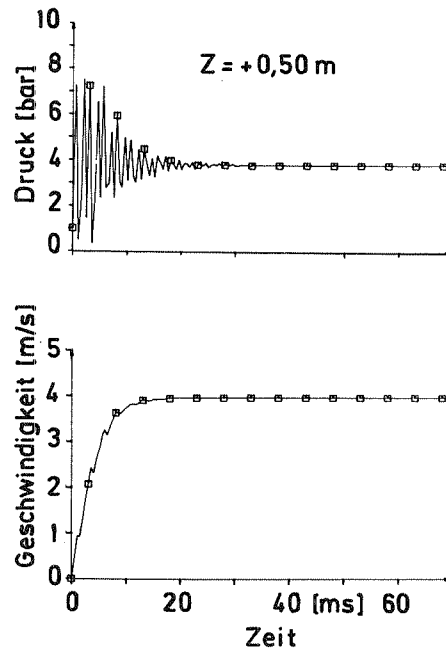
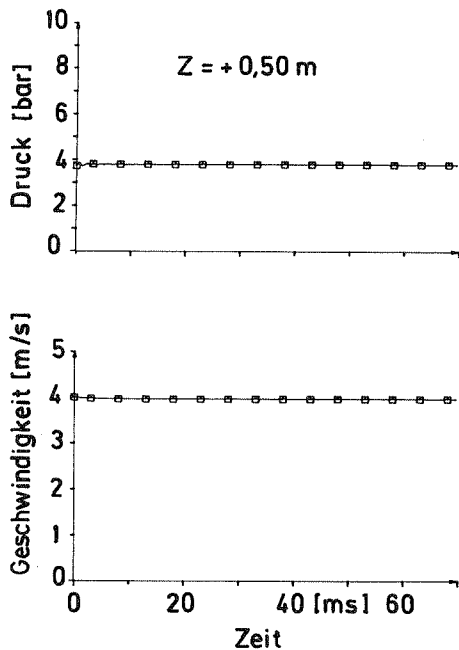


Abb. 6.1 Transiente Berechnung nach der automatischen Korrektur der  $\zeta$ -Werte

Abb. 6.2 Transiente Berechnung nach dem Einschalten der Pumpe

Für die gleiche Teststrecke mit den bereits eingestellten Stoßverlustbeiwerten und dem gleichem Pumpenförderdruck ergibt sich aus einer transienten Rechnung, die vom Ruhezustand ( $v = 0$  und einem axial konstanten Druck von  $p = 1 \cdot 10^{-5} \text{ N/m}^2$ ) ausgeht, nach etwa 15 ms der vorher ermittelte Wert des Druckes sowie die Geschwindigkeit des stationären Betriebs (Abb. 6.2). Die berechneten Druckoszillationen stammen von Kompressions- und Entlastungswellen, die durch die abrupte Erhöhung des Pumpenförderdruckes bei  $t = 0$  ausgelöst werden und an der betrachteten axialen Position vorbeilaufen.

Anhand anderer Testbeispiele konnte ferner gezeigt werden /87/, daß die mit dem Zwei-Geschwindigkeits- und Zwei-Drücke-Konzept berechneten stationären Druckverluste selbst auf Maschennetzen mit starken lokalen Änderungen des

Kanalquerschnitts und bei gleichzeitiger Variation der axialen Maschenweiten nicht mehr von der Diskretisierung abhängen, wie es in /14/ der Fall war.

Eine ähnliche Überprüfung der Impulserhaltungsgleichungen der einphasigen und Einkomponenten-Strömung von Thermit oder Gas ist bislang nicht erfolgt, da das derzeit in CALIPSO angewendete Druckberechnungsverfahren für diese Situationen nicht realisiert ist (vergl. Kap. 4.2.1).

#### 6.1.2 Fortpflanzung von Druckwellen

Die Berechnungen einphasiger kompressibler Natriumströmungen mit CALIPSO zeigen /87, 88/, daß Druckwellen ohne wesentliche Dämpfung am Kreislaufplenum, wie auch an Stellen mit hohem lokalen Druckverlust (steile Querschnittsänderungen u.a.) partiell reflektiert werden. Nach der Reflektion entstehen Entlastungswellen, die sich in entgegengesetzter Richtung ausbreiten. Der Druckverlauf an einer beliebigen Position im Kreislauf weist deshalb Druckmaxima und -minima auf (s. auch Abb. 6.2), die entsprechende Oszillationen der Geschwindigkeit hervorrufen. Die Frequenz der Oszillationen hängt nicht von der Maschenweitenverteilung ab, sondern über die Schallgeschwindigkeit von der erfaßten Kreislaufgröße bzw. von der Verteilung lokal hoher Druckverluste. Die Steilheit der Druck- und Geschwindigkeitsänderungen wird dagegen von der Länge der betrachteten Masche bestimmt.

Die von CALIPSO errechnete Dämpfung akustischer Druckamplituden liegt unterhalb des Betrages, der im SIMBATH-Kreislauf festgestellt wird. Für die Zukunft wird durch zusätzliche Modellierung der diffusiven Terme der Impulserhaltungsgleichung oder durch den Einbau spezieller numerischer Verfahren, z.B. von artificial viscosity /89/, eine realistischere Berechnung der Dämpfung von Druckwellenamplituden angestrebt.

### 6.1.3 Verfolgen von Phasengrenzen

Verfahren, die örtlich diskretisierte Feldgleichungen sowie getrennte Impulserhaltungsgleichungen benutzen, haben immer eine numerisch bedingte Diffusion der Masse (und Energie) einer Strömungskomponente in eine andere /22, 90/. Als Testproblem zur Untersuchung des Einflusses dieses Phänomens wird das Einfüllen eines Rohres mit flüssigem Natrium mit CALIPSO berechnet. Der Massenzufluß am unteren Rohrende ist konstant gehalten.

Statt dem erwarteten gleichmäßigen Auffüllen mit einer waagerechten Phasengrenze errechnet das Programm eine axiale Verteilung der Natriummenge mit einer vorauseilenden kleinen Natriumkonzentration und einem verzögerten Auffüllen bei hoher Natriumkonzentration (Abb. 6.3). Zur Zeit wird in CALIPSO keine spezielle Maßnahme zur Dämpfung dieses Effektes vorgenommen. Die zukünftige Einführung von sogenannten "marker particles", mit deren Hilfe die Phasengrenzen innerhalb der Eulerschen Rechenmaschen verfolgt werden kann /22/, ist geplant.

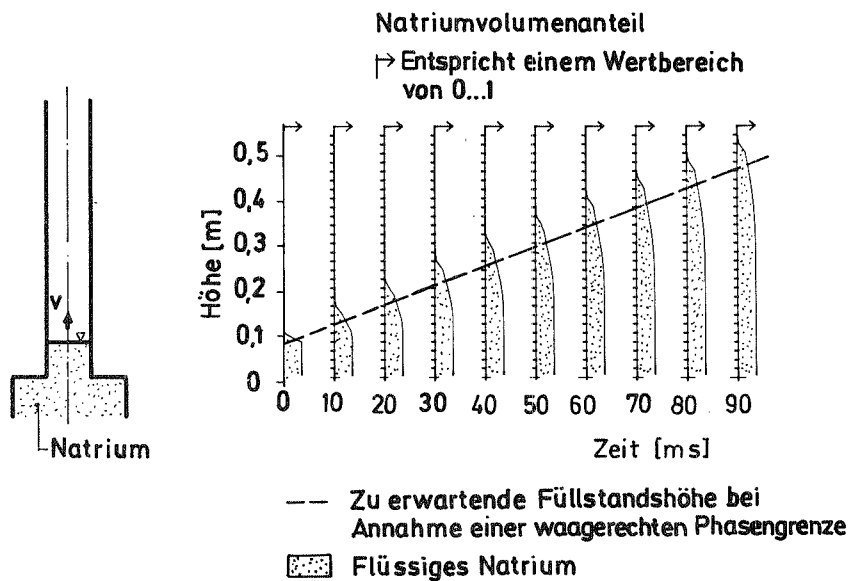


Abb. 6.3 Numerische Diffusion beim Füllen eines Rohres mit flüssigem Natrium

## 6.2 Validierung einzelner Modelle

### 6.2.1 Strömungsbilderkarte

Abb. 6.4 zeigt die in CALIPSO angewendete Strömungsbilderkarte (s. Kap. 4.2.2.2), in die einige aus den SIMBATH-Röntgenfilmen durch visuelle Auswertung gewonnenen Daten eingezeichnet sind. Die Daten gelten nur für Thermit-Gas-Strömungen im Stabinneren und im Kühlkanal, da Natriumströmungen auf den Aufzeichnungen nicht erkennbar sind. Auf den Röntgenfilmen sind Schlierenströmungen ("churn"), Tropfenströmungen mit hoher Tropfendichte, Filmströmung und Tropfenströmung mit niedriger Tropfendichte zu erkennen. Der Namensgebung der Strömungsbilder in CALIPSO entsprechend ist die Schlierströmung und die Tropfenströmung mit hoher Tropfendichte der Übergangsströmung zuzuordnen.

Durch die visuelle Auswertung sowie durch die auf den Filmen unscharf erscheinenden Phasengrenzen liegt die Fehlerbreite für die SIMBATH-Daten in der Größenordnung von 20 - 30 %.

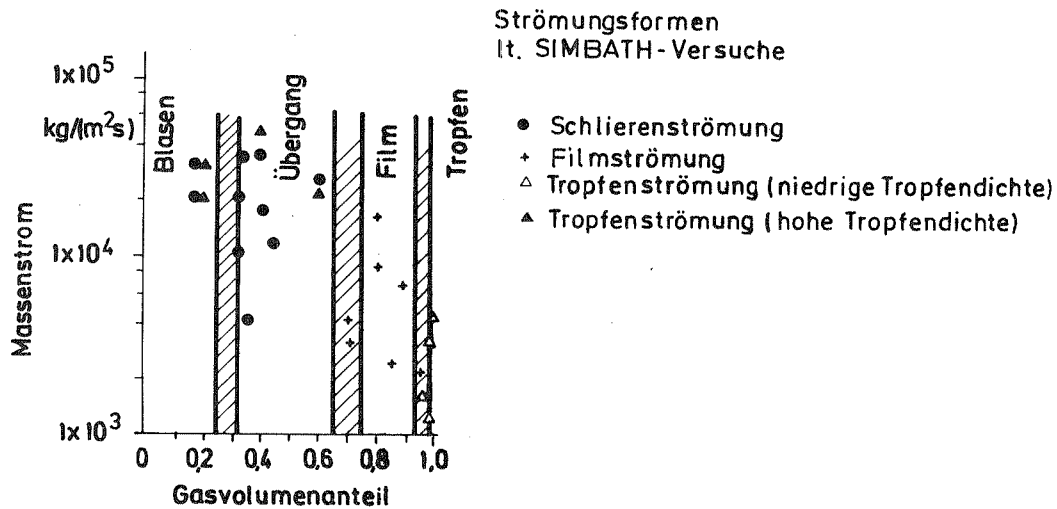


Abb. 6.4 Vergleich der auf Gasvolumenanteilwerten basierenden Strömungsbilderkarte mit Daten der SIMBATH-Versuche für Thermit-Gas-Strömungen

Aus dem Vergleich in Abb. 6.4 lassen sich folgende Grenzwerte des Gasvolumenanteils  $\Theta_{\nu}$  für Strömungsformübergänge ableiten: Für den Übergang von

Blasen- zur Übergangsströmung ist  $\Theta_v = 0,3$ , für den Wechsel von Übergangs- zur Filmströmung liegt der Wert bei  $\Theta_v = 0,65$  und für den Übergang zur Tropfenströmung ist  $\Theta_v = 0,95$ . Diese Werte werden für die Nachrechnung der SIMBATH-Versuche mit CALIPSO eingesetzt. Sie stimmen gut mit publizierten Daten von Gas-Wasser-Strömungen /91/ oder Wasser/Wasserdampf-Strömungen /45, 50/ überein.

Eine qualitative Bewertung der o.a. Strömungsbilderkarte wird erzielt durch den Vergleich einer Strömungsbilderkarte, die auf theoretischer Modellierung der Übergänge basiert, mit den sich aus einer CALIPSO-Rechnung von SIMBATH-Versuchen ergebenden Strömungsbilder. Der direkte Vergleich der SIMBATH-Versuchsergebnisse mit diesen Strömungsbilderkarten ist aus Gründen, die ausführlich im Kap. 4.2.2.2 diskutiert werden, kaum durchzuführen. Die Hauptursache dafür liegt bei den fehlenden experimentellen Daten über die örtliche Geschwindigkeiten der Gasphase sowie über die Temperaturen der flüssigen Stoffe und der Gasphase.

Für aufwärtsgerichtete Strömungen der flüssigen Phase und der Dampfphase schlagen Mishima und Ishii /43/ eine Strömungsbilderkarte vor, deren Koordinaten die über den Strömungsquerschnitt gemittelten Geschwindigkeiten der Phasen sind. Diese auch "superficial velocities" genannten Geschwindigkeiten werden aus dem Produkt der Phasengeschwindigkeit  $v_k$  und des Volumenanteils  $\Theta_k$  der jeweiligen Phase berechnet:

$$v_{sup,k} = \Theta_k v_k \quad (6.1)$$

Mishima und Ishii /43/ nehmen an, daß der Wechsel von Blasen zur Übergangsströmung bei einem Gasvolumenanteil von 0,3 stattfindet. Diese Annahme liegt gleichermaßen der Strömungsbilderkarte von Dukler und Taitel /40/, wie auch der Strömungsbilderkarte von CALIPSO (s.o.) zugrunde. In /40, 43/ wird ferner angenommen, daß im Falle der Übergangsströmung der Aufbau der von Zuber und Findlay /68/ gegebenen Beziehung zwischen den Phasengeschwindigkeiten (s. Kap. 4.2.3.1.2) gültig ist:

$$v_v = C (v_v \Theta_v + v_l \Theta_l) + 1,41 [\sigma g (s_l^p - s_v^p) / (s_l^p)^2]^{0,25} (1 - \Theta_v)^{1,75} \quad (6.2)$$

In dieser Gleichung bezeichnet der Index l die flüssige Phase und der Index v die Gasphase. Ferner sind  $\rho^P$  die physikalische Dichte,  $\sigma$  die Oberflächenspannung und C ein Faktor dessen wahrscheinlicher Wert bei 1,2 liegt /26,68/.

Aus der Definition der "superficial velocities" (Gl. 6.1) und aus Gl. 6.1 folgt, für C = 1,2,  $\Theta_v = 0,3$  und  $\rho_v^P \ll \rho_l^P$  die Gleichung:

$$v_{sup,l} = 1,777 v_{sup,v} - 0,63 (\sigma g / \rho_l^P)^{0,25} \quad (6.3)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite der Gl. 6.2 ist, den Stoffdaten für Thermit entsprechend (s. Anhang A2.1), nur für kleine Werte der "superficial velocities" von Bedeutung.

Der Wechsel von der Übergangs- zur Filmströmung wird in /43/ angenommen, wenn die Auftriebskraft in der Zweiphasenströmung die Flüssigkeitsbrücken zwischen den Blasen zerstören kann. Dies findet für "superficial velocities" der Gasphase die größer als ein Schwellenwert sind, statt. Die in /43/ gegebene Beziehung lautet /43/:

$$v_{sup,v} \gg \left[ \sigma g (\rho_l^P - \rho_v^P) / (\rho_v^P)^2 \right]^{0,25} G^{-0,2} \quad (6.4)$$

Dabei ist G:

$$G = \eta_l / \left( \rho_l^P \sigma \sqrt{\sigma / (\rho_l^P - \rho_v^P) g} \right)^{0,5} \quad (6.5)$$

Der Kurvenverlauf der Gl. 6.4 liegt nahe an dem von Dukler und Taitel formulierten Übergangskriterium. In der Modellvorstellung dieser Autoren /40/ findet bei einer aufwärtsgerichteten Filmströmung mit Tropfen im Gasbereich ein Wechsel zur Übergangsströmung statt, wenn die Gasströmung die Tropfen nicht mehr mitreißen kann.

In der Abb. 6.5 ist die Strömungsbilderkarte von Mishima und Ishii (Gln. 6.2 bis 6.3) für typische Stoffwerte einer Thermit-Gasströmung im Inneren eines SIMBATH-Stabes eingezeichnet. In der Abbildung sind ebenfalls einige der mit CALIPSO erzielten Ergebnisse bei der Nachrechnung des SIMBATH-Versuchs  $V_{Th} 71/2$  (s. Kap. 6.3.1) eingetragen.

Die Übereinstimmung beim Wechsel von Blasen zur Übergangsströmung ist zufriedenstellend. Einige der Ergebnisse für die Filmströmung und die Tropfenströmung weichen stärker von den erwarteten Werten ab. Dies ist die Folge der errechneten kurzzeitigen Beschleunigungs- und Verzögerungsprozessen der Gasphase, die durch Druck- und Entlastungswellen ausgelöst werden.

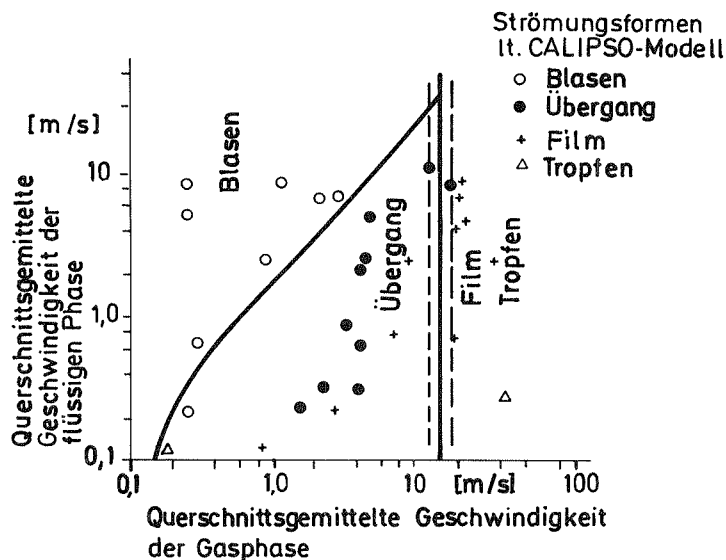


Abb. 6.5 Vergleich des Mishima-Ishii-Modells für aufwärtsgerichtete Strömungen mit CALIPSO-Rechenergebnissen des SIMBATH-Versuches  $V_{th} 71/2$

Der gezeigte Vergleich in Abb. 6.5 deutet darauf hin, daß die angewendeten Gasvolumenanteil-Kriterien der CALIPSO-Strömungsbilderkarte sinnvoll sind. Es zeigt, daß das Mishima Ishii-Modell für aufwärtsgerichtete Thermit-Gas-Strömungen zu vergleichbaren Ergebnissen führen würde. Die physikalische Grundlage dieser Strömungsbilderkarte erlaubt keine Extrapolation auf Gegenströmung oder auf abwärtsgerichteten Strömungen dieser Stoffe.

## 6.2.2 Impulsaustauschfunktionen für stationäre Strömungen

### 6.2.2.1 Einphasige Einkomponenten-Strömung

Für den Teil des Kühlkanals, der als Ringspalt vorliegt, wird im CALIPSO-Modell für jede Struktur ein separater Reibbeiwert berechnet (Kap. 4.2.3.1.1).

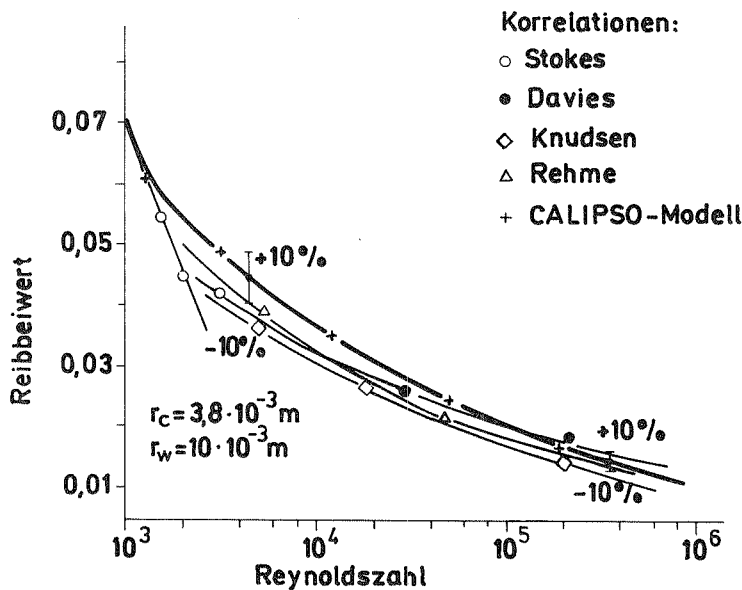


Abb. 6.6 Reibbeiwerte in Ringspaltgeometrie für die einphasige Strömung von flüssigem Natrium. Die Korrelationen stammen aus /58, 59/.

Für den Vergleich dieses Verfahrens mit anderen Korrelationen wird für eine einphasige Einkomponenten-Strömung aus der Kräftebilanz folgender äquivalenter Reibbeiwert bestimmt:

$$C_{f,\ddot{a}q} = (C_{f,c} r_c + C_{f,w} r_w) / (r_c + r_w) \quad (6.2)$$

Für den laminaren und für den turbulenten Bereich einer Natriumströmung ist der Vergleich des äquivalenten Reibbeiwertes mit den Ergebnissen anderer, speziell für Ringspalte geltenden Korrelationen in Abb. 6.6. eingetragen. Die berücksichtigten geometrischen Abmessungen entsprechen denen des Referenzversuchs  $V_{th} 71/2$ . In dem für die SIMBATH-Versuche relevanten Bereich der Rey-



noldszahl ( $5 \cdot 10^4 < Re < 10^6$ ) liegt die Abweichung in der Größenordnung von 10 %. Für Reynoldszahlen zwischen  $1 \cdot 10^3$  und  $4 \cdot 10^3$  zeigt die CALIPSO-Methodologie eine Tendenz zu höheren Werten.

#### 6.2.2.2 Mehrphasen- Mehrkomponenten-Strömung

Die Überprüfung einzelner Impulsaustauschfunktionen in CALIPSO erfolgt für eindimensionale, stationäre, isotherme und völlig ausgebildete Zweiphasenströmungen. Für derartige Strömungen werden die Impulsaustauschfunktionen in der Form, in der sie im Anhang A3 beschrieben sind, zusammen mit den konstitutiven Gleichungen des CALIPSO-Modells in einer separaten Codeversion gelöst. Die Experimente zur Zweiphasenströmung liefern i.allg. keine direkte Messung des Impulsaustausches, sondern einiger damit verbundener physikalischer Größen, wie Geschwindigkeiten, gesamter Druckverlust und Volumenanteile. Es sind diese Größen, die für den Vergleich mit den Rechenergebnissen der separaten Version von CALIPSO herangezogen werden. Auf diesem Weg kann die Bewertung der eingesetzten Korrelationen erfolgen.

##### 6.2.2.2.1 Blasenströmung

In der Abb. 6.7 ist für eine Blasenströmung die Abhängigkeit der Größe (engl. batch gas flux) als Funktion des Gasvolumenanteils eingetragen. Die Versuchsdaten stammen aus Experimenten mit perforierten Platten /92, 93/ und stellen Mittelwerte über den Strömungsquerschnitt dar. Beim Wechsel von der Blasen- zur Übergangsströmung ergibt sich ab  $\Theta_v = 0,27$  eine sprunghafte Zunahme der Relativgeschwindigkeit. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, daß die in CALIPSO getroffene Annahme des maximalen Gasvolumenanteils für die Blasenströmung von  $\Theta_v = 0,3$  sinnvoll ist. In Abb. 6.7 sind für diese Strömung Rechenergebnisse des CALIPSO-Modells ebenfalls eingetragen. Die angenommenen Blasenradien liegen innerhalb des experimentell gegebenen Bereichs. Die errechneten Kurvenverläufe stimmen für Gasvolumenanteile bis 0,3 mit den Meßdaten überein. Die Ergebnisse unterstreichen ferner die Bedeutung der richtigen Wahl des Blasenradius für die Nachrechnung von Experimenten.

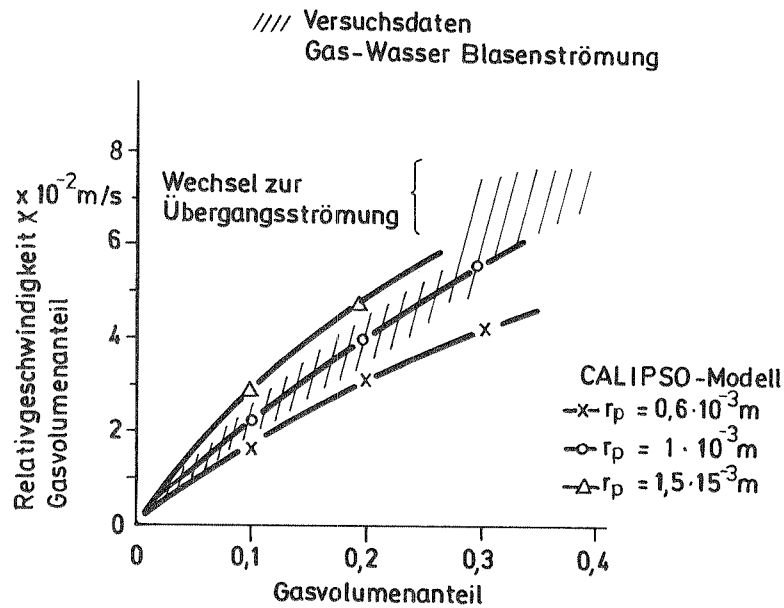


Abb. 6.7 Gemessene und errechnete physikalische Größen einer Gas- Wasser-Blasenströmung. ( $D_h = 92 \cdot 10^{-3}$ ,  $0,5 \cdot 10^{-3} \leq r_p \leq 1,5 \cdot 10^{-3}$ )

#### 6.2.2.2.2 Übergangsströmung

Für unterschiedliche Zweiphasen-Stoffgemische und Geometrien gibt es für den Bereich der Übergangsströmungen zahlreiche experimentelle Daten, z.B. /68, 94, 95/ die eine lineare Beziehung zwischen der Gasgeschwindigkeit und der Volumenstromdichte des Gemisches zeigen (s. Abb.6.8). In Abb. 6.8 sind, für einen Gasvolumenanteil von 0,5 auch entsprechende Rechenergebnisse der CALIPSO-Reibbeiwertmodelle (s. Kap. 4.2.3.1) eingetragen. Die Ishii-Zuber-Korrelation (Gl. 4.45) liefert Werte unterhalb der Bandbreite der Versuchsergebnisse. Diese Diskrepanz entsteht durch eine berechnete zu starke Phasenkopplung. Sie tritt für Gasvolumenanteile größer 0,5 verstärkt auf. Die in CALIPSO angewendete Korrelation zur Berechnung der Widerstandsbeiwerte für Gasvolumenanteile größer gleich 0,5 (Gl. 4.47) führt zur besseren Wiedergabe der Versuchsdaten.

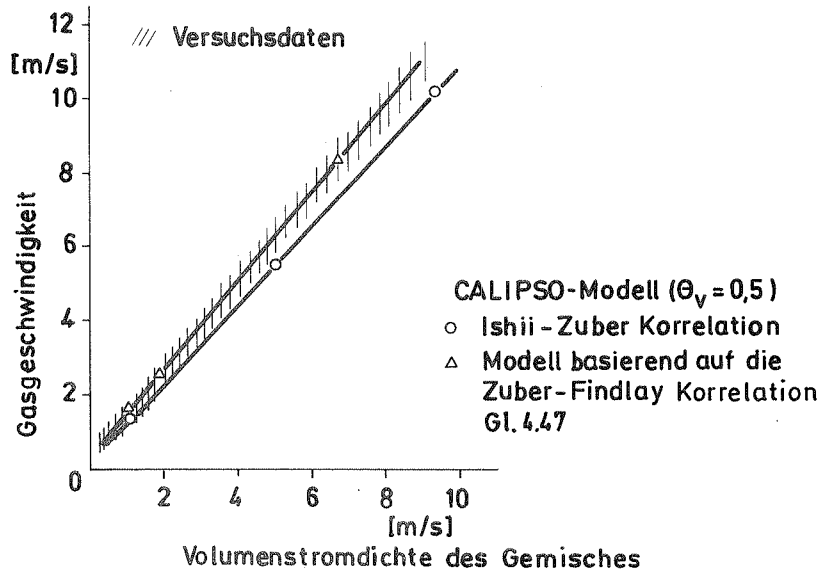


Abb. 6.8 Gemessene und berechnete physikalische Größen einer Übergangsströmung. Die Daten stammen aus Versuchen mit Wasser/Luft- /68/, Natrium/Kalium/Stickstoff- /94/ und Wasser/Wasserdampf-Gemischen /95/.

### 6.2.2.2.3 Filmströmung

Für die Berechnung des Zweiphasendruckverlustes bei Filmströmungen haben Lockhart und Martinelli /64/ folgende Größen definiert:

- Die Reibungsdruckverlust-Multiplikatoren  $\phi_l^2, \phi_v^2$ . Sie stellen das Verhältnis des Reibungsdruckverlustes jeder Phase zum gesamten Zweiphasendruckverlust dar, für den Fall, daß sie den gesamten Strömungsquerschnitt einnehmen würde.
- Der Lockhart-Martinelli-Parameter:

$$\chi^2 = \phi_l^2 / \phi_v^2 \tag{6.3}$$

Für Rohre und turbulente Strömungen beider Phasen läßt sich die Beziehung aufstellen /35/:

$$\chi_{tt} = [(1-x)/x]^{0,9} (\rho_v^f / \rho_l^f)^{0,5} (\eta_l / \eta_v)^{0,1} \quad (6.4)$$

Die Größen  $\phi_l^2$  und  $\chi_{tt}$  wurden für Zweiphasenströmungen von Wasser/Luft- und Wasser/Wasserdampf-Gemischen korreliert /35, 96, 97 u.a./.

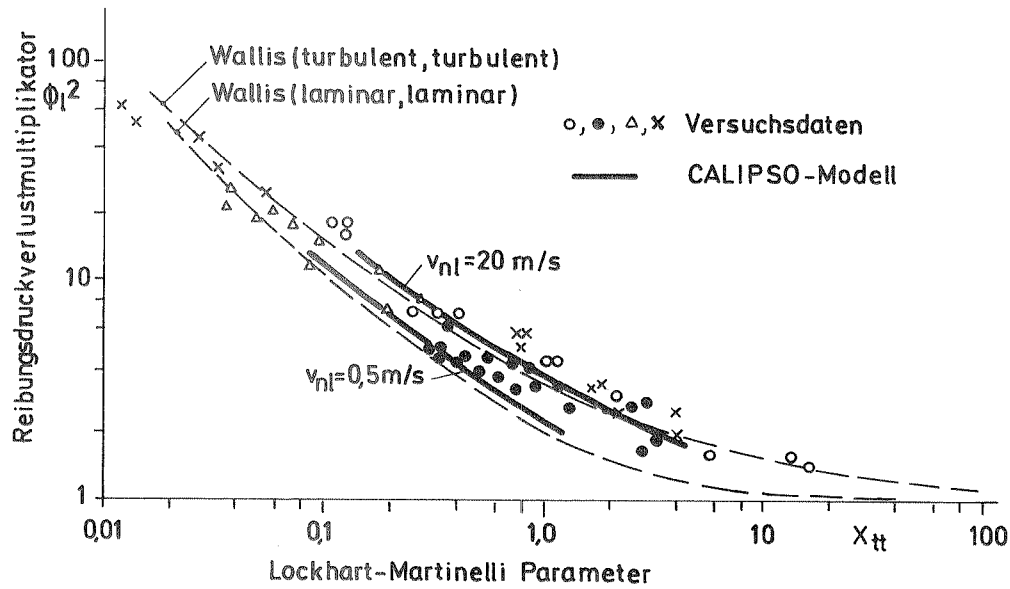


Abb. 6.9 Gemessener und errechneter Reibungsdruckverlustmultiplikator  $\phi_l^2$  einer Natriumfilmströmung als Funktion des Lockhart-Martinelli Parameters  $X_{tt}$ . Die Versuchsdaten stammen aus Natriumsiedeexperimenten:  $\circ$  = /72/,  $\bullet$  = /98/,  $\times$  = /99/ sowie aus Kaliumversuchen  $\Delta$  = /102/.

Versuchsergebnisse von Natriumsiedeexperimenten /72, 98, 99, 100, 101/ und von Kaliumsiedeexperimenten /102/ sind zusammen mit der Korrelation von Wallis für Zweiphasen-Strömungen von Wasser/Gas- (oder Dampf) Gemischen /35/ in der Abb. 6.9 eingetragen. Sie werden verglichen mit Ergebnisse der CALIPSO Korrelationen für eine aufwärtsgerichtete Zweiphasen-Strömung von Natrium bei 1300 K in der Ringspaltgeometrie des SIMBATH-Versuches  $V_{th} 71/2$  (s. Kap. 6.3.1.1). Für beide zu erwartenden extremen Werten der Natrium-Geschwindigkeit, 0,5 m/s und 20 m/s, ist die Übereinstimmung zwischen Rechnung und

Versuchsergebnissen zufriedenstellend. Ähnliche Übereinstimmung konnte auch für die Zweiphasen-Strömung von Thermit und Gas ( $T = 3000 \text{ K}$ ) im Stabinneren erzielt werden.

#### 6.2.2.2.4 Zusammenwirken aller Strömungsformen

Martinelli und Nelson /96/ haben für Wasser/Gas-Gemische einen Zusammenhang zwischen den gemessenen Volumenanteilen der flüssigen Phase und dem Druckverlust bzw. den Parameter  $X_{tt}$  festgestellt. Versuche mit siedendem Natrium /98, 99, 100, 101/ und mit siedendem Kalium /102/ wurden ebenfalls bezüglich dieser Abhängigkeit untersucht. Die Versuchsdaten (s. Abb. 6.10) zeigen eine gewisse Streuung um die Martinelli-Nelson-Beziehung, geben jedoch deren allgemeinen Verlauf qualitativ gut wieder.

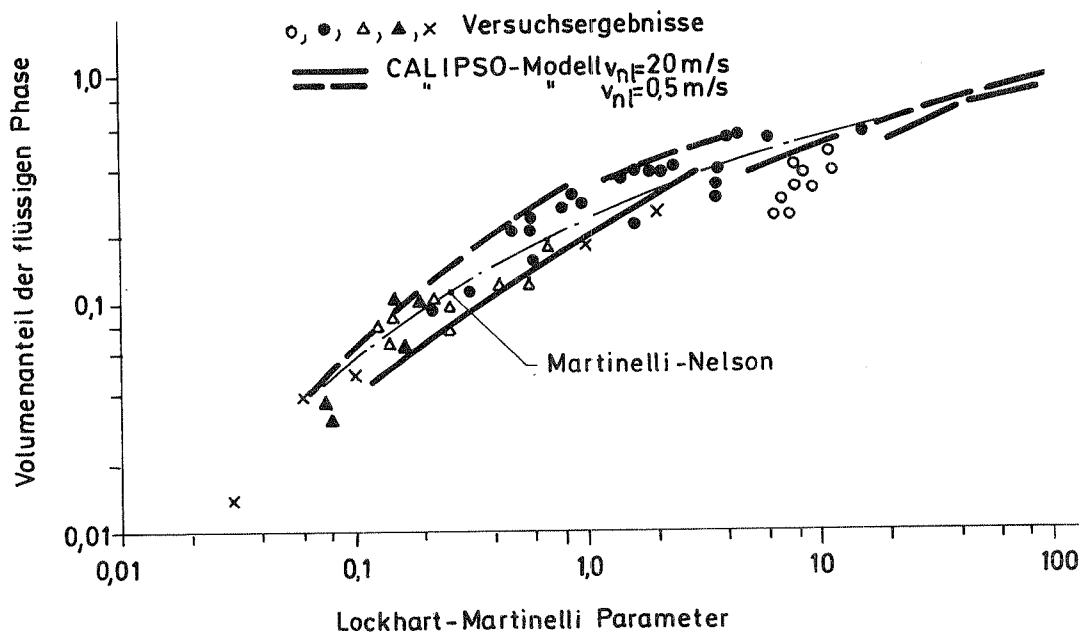


Abb. 6.10 Gemessener und errechneter Gasvolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Natrium-Zweiphasenströmung. Die Daten stammen aus Natriumsiedeexperimenten  $\circ = /100/$ ,  $\bullet = /98/$ ,  $\blacktriangle = /101/$ ,  $\times = /99/$  und aus Kaliumsiedeversuchen  $\triangle = /102/$ .

Diese Versuchsdaten werden verglichen mit Berechnungen des CALIPSO-Modells unter Berücksichtigung aller modellierten Strömungsformen und der entsprechenden konstitutiven Gleichungen. Abb. 6.10 zeigt die Ergebnisse für eine Natrium-Zweiphasenströmung ( $T_n = 1300 \text{ K}$ ) im Kühlkanal des SIMBATH-Versuchs  $V_{th} 71/2 /39/$  und Abb. 6.11 die für eine Thermit-Gas-Strömung ( $T_{th} = 3000 \text{ K}$ ) im Stabinneren. Die Berechnungen sind für jeweils zwei Geschwindigkeiten der flüssigen Phase durchgeführt worden. Die angenommenen Radienwerte für Blasen, Thermit- und Natriumtropfen von  $0,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ ,  $0,25 \cdot 10^{-3} \text{ m}$  und  $0,3 \cdot 10^{-3} \text{ m}$  entsprechen dem Standard-Parametersatz von CALIPSO, wenn das Radiusmodell nicht aktiviert ist.

Die Rechenergebnisse für die Zweiphasenströmung beider Stoffkombinationen liegen im Streubreitebereich der Versuchsdaten und geben die allgemeine Tendenz der Kurvenverläufe qualitativ gut wieder. Die auftretenden Sprünge in den Verläufen entstehen durch den Wechsel der verwendeten Impulsaustauschfunktionen beim Übergang von einer Strömungsform in eine andere. Die erzielte Übereinstimmung bestätigt gleichzeitig die Wahl der Umschaltpunkte für die Strömungsformen die - wie bereits erläutert - im CALIPSO-Modell vom Volumenanteil abhängig sind.

Für die Zweiphasenströmung von Natrium wurden auch Berechnungen mit dem homogenen Blasen/Tropfen-Modell der vorherigen CALIPSO-Version /14/ durchgeführt. Die Modellvostellung in /14/ geht davon aus, daß sich Blasen oder Tropfen stets relativ zum homogenen Gemisch aller Phasen und Komponenten bewegen. Blasenströmung wird bis zu einem Gasvolumenanteil von 0,5 angenommen. Darüber hinaus wird im Modell auf Tropfenströmung umgeschaltet. Der Vergleich zwischen Berechnungen mit dem homogenen Blasen/Tropfenmodell und Versuchsergebnisse für Zweiphasenströmungen von Flüssigmetallen ist in Abb. 6.12 gezeigt. Für Volumenanteile der flüssigen Phase kleiner als 0,5 (also im Bereich der Übergangsströmung und der Filmströmung) treten Abweichungen der berechneten Daten gegenüber der allgemeinen Tendenz der Versuchsergebnisse auf. Es lässt sich zeigen, daß bei einem vorgegebenen Wert des Lockhart-Martinelli-Parameters ein berechneter zu geringer Volumenanteil einer zu starken Kopplung zwischen den Phasen bzw. einem zu geringen Schlupf entspricht. D.h., daß ein homogenes Blasen/Tropfenmodell, wie es in /14/ formuliert ist, die für den Massentransport wichtige Schlupfabhängigkeit vom Volumenanteil nicht wiedergeben kann.

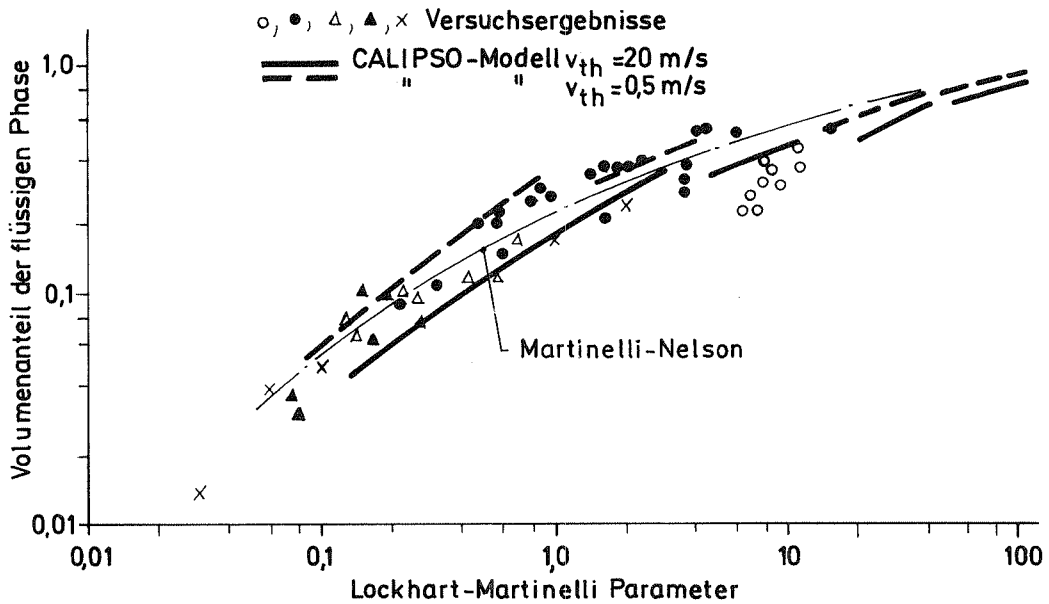


Abb. 6.11 Gemessener und errechneter Gasvolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Thermit-Gas-Strömung. Die Versuchsdaten entsprechen denen in Abb. 6.10.

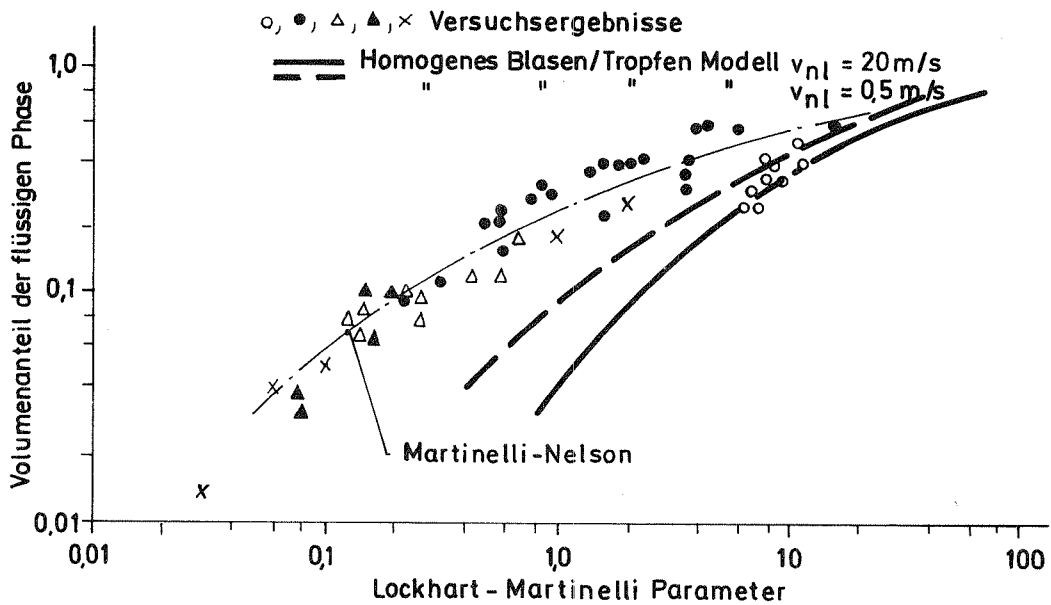


Abb. 6.12 Gemessener und errechneter Gasvolumenanteil als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters für eine Zweiphasen-Natriumströmung. Die Versuchsdaten entsprechen denen in Abb. 6.10. Die Berechnungen wurden mit dem Impulsaustauschmodell der vorherigen Fassung von CALIPSO /14/ durchgeführt.

Der Vergleich in den Abbn. 6.10 bis 6.12 weist daher auch auf die Bedeutung der Modellierung von Strömungsformen mit hohem Phasenschlupf (Übergangs- und Filmströmung) bei der numerischen Simulation von Mehrphasenströmungen hin.

### 6.2.3 Wärmeaustauschfunktionen

#### 6.2.3.1 Einphasige Einkomponentenströmung

Für stationäre, einphasige Strömungen von nur einer der betrachteten Komponenten in CALIPSO gibt es ausreichend experimentelle Daten die zeigen, daß die gewählten Wärmeübergangskorrelationen als "best estimate" anzusehen sind /58, 72, 73 u.a./. Eine zusätzliche Überprüfung auf Übertragbarkeit dieser Beziehungen erscheint deshalb aus heutiger Sicht als nicht erforderlich. Die richtige Umsetzung der Korrelationen im Rechenprogramm ist mittels Handrechnungen überprüft worden.

#### 6.2.3.2 Mehrphasen- Mehrkomponenten-Strömung

Die Überprüfung einzelner Wärmeübergangsmodelle für Mehrphasen- Mehrkomponenten-Strömungen ist bislang nicht in gleichem Umfang wie für die Impulsaustauschfunktionen erfolgt. Die Validierung ist schwieriger durchzuführen, weil auch die zur Verfügung stehende Datenbasis wesentlich schmaler ist. Ferner lassen sich Ergebnisse des Zweiphasen-Wärmeübergangs von Wasser/Gas- (Dampf) Gemischen nicht auf Flüssigmetalle übertragen, wie es z.T. bei den Impulsaustauschfunktionen der Fall war. Erschwerend kommen die Präsenz von unüblichen Stoffen in den SIMBATH-Versuchen z.B. von geschmolzenem Aluminiumoxid und die Überlagerung von Wärmeaustausch- und Massenaustauschprozessen z.B. bei der Brennstoff-Natrium-Reaktion hinzu. Aus den genannten Gründen sind bisher nur einige der Validierungsaktivitäten von Wärmeübergangsmodellen außerhalb des Datenbasis der SIMBATH-Versuche erfolgt. Der Stand dieser Bemühungen wird in den nächsten Kapiteln dokumentiert.



### 6.2.3.2.1 Natriumfilmströmung

Für die Korrelation von experimentellen Daten betreffend den Wärmeübergang bei einer Filmströmung wird häufig z.B. /51,76/ folgende Darstellung benutzt (s. auch Kap. 4.2.3.2)

$$\alpha = \alpha_{1-ph} K (1/X_{tt})^n \quad (6.5)$$

Der Term  $\alpha_{1-ph}$  ist die Wärmeübergangszahl der flüssigen Phase des Gemisches, wenn diese den gesamten Strömungsquerschnitt einnehmen würde.  $X_{tt}$  ist der Lockhart-Martinelli-Parameter (Gl. 6.4). Die Größen K und n sind experimentell angepaßte Konstanten.

Für Siedeveruche von Natrium oder Kalium wurden einige Ergebnisse in der von Gl. 6.5 gegebenen Form dargestellt /79, 103, 104, 105/. Diese Daten sind zusammen mit den Korrelationen für siedendes Natrium /105, 106/ und für siedendes Wasser /36/ in Abb. 6.13 dargestellt. Die Streubreite der Versuchsergebnisse ist recht groß. Als mögliche Gründe werden die schwierige Ermittlung lokaler Strömungsverhältnisse /79/, wie auch auftretendes instabiles Sieden /104, 105/ genannt. Alle experimentelle Daten für Zweiphasenströmungen von Flüssigmetallen liegen eindeutig unterhalb der Korrelation für siedendes Wasser.

Bei Anwendung der Wärmeübergangskorrelation aus CALIPSO auf eine Natriumfilmströmung (Gln. 4.58 und 4.70) sowie des Verhältnisses  $\Theta_v = f(X_{tt})$  aus Abb. 6.10 auf dieselbe Strömung läßt sich das in Abb. 6.13 eingetragene berechnete Verhältnis  $\alpha / \alpha_{1-ph}$  ermitteln.

Die Rechenergebnisse liegen innerhalb der Streubreite der Versuchsdaten. Sie geben approximativ den zu erwartenden Anstieg wieder. Bei der Bewertung dieser Ergebnisse ist zu beachten, daß bei der Widergabe von Versuchsergebnisse die CALIPSO-Beziehungen eine ähnliche Genauigkeit wie die anderer Korrelationen aufweisen.

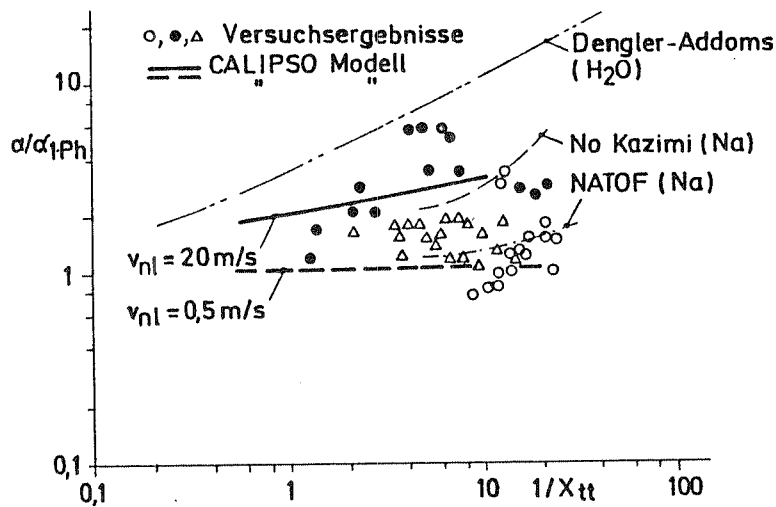


Abb. 6.13 Verhältnis der Wärmeübergangszahlen  $\alpha/\alpha_{1ph}$  als Funktion des Lockhart-Martinelli-Parameters  $X_{tt}$ . Die Versuchsdaten stammen aus Natrium-Siedeexperimenten  $\circ = /79/$ ,  $\bullet = /103/$  und Kaliumsiedeversuchen  $\Delta = /104/$ . Die Korrelationen sind aus den Literaturstellen /36, 105, 106/ entnommen.

#### 6.2.3.2.2 Wärmeaustausch Thermit/flüssiges Natrium

Die Kalibrierung und Überprüfung eines Wärmeübergangsmodells zwischen Thermit und flüssigem Natrium ist aus Gründen, die im Kap. 4.2.3.2.2 erläutert sind, im Rahmen der Analyse von SIMBATH-Versuchen sinnvoll durchzuführen und aussagekräftig. Zweckmäßig erscheint aber die Gegenüberstellung existierender Modelle und die Bewertung der Ergebnisse für einen vorgegebenen Fall. Das im CALIPSO angewandte Modell basiert auf der Annahme von Wärmeaustausch durch Kontakt zwischen den beiden in Tropfenform vorliegenden Komponenten. Die Wärmeübergangszahl, die Kontaktzeit und die Fläche entsprechen den Vorstellungen des SIMMER-Modells /13/ (s. Kap. 4.2.3.2.2, Gln. 4.78 bis 4.81). Andere bislang veröffentlichte Korrelationen, wie die von EPIC /8/, EULFCI /9/ und PLUTO2 /10/ basieren auf der Modellvorstellung von Brennstoffkugeln, die im flüssigen Natrium eingebettet sind. Der Wärmeübergang erfolgt durch Wärmeleitung.

Die EPIC-Korrelation für die gleiche Stoffkombination lautet:

$$Q_{nl,th} = 3 \theta_{th} \theta_{nl} \lambda_{th} / r_{th}^2 V_M (T_{th} - T_{nl}) \quad (6.10)$$

Die EULFCI- bzw. die PLUTO2-Korrelation ist:

$$Q_{nl,th} = 3 \theta_{th} (1 - \theta_v) \lambda_{th} / r_{th}^2 V_M (T_{th} - T_{nl}) \quad (6.11)$$

Ein Vergleich der Korrelationen in Gln. 6.10 und 6.11 mit dem CALIPSO-Modell ist in der Abb. 6.14 eingetragen. Für  $V_M$  wird der Wert  $5.376 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3$  eingesetzt. Dies ist, entsprechend der Diskretisierung der SIMBATH-Teststrecke für den SIMBATH Versuch  $V_{th} 71/2$  (s. Abb. 6.17) das Volumen der Auspritzmasche des Kühlkanals.

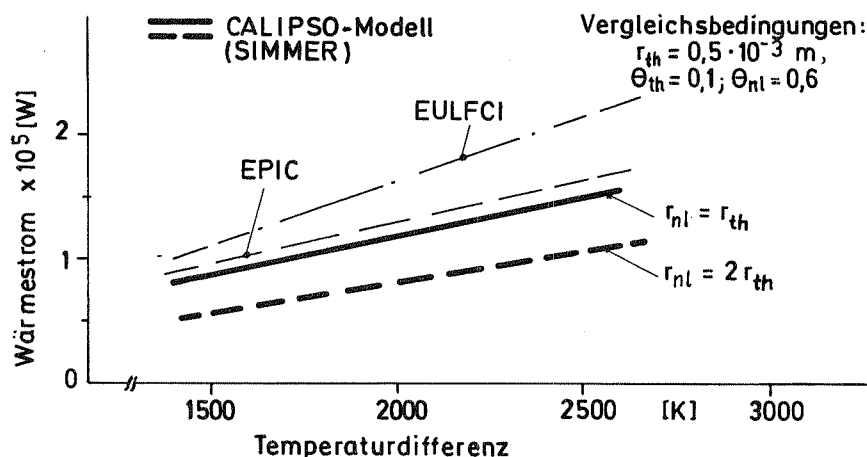


Abb. 6.14 Vergleich unterschiedlicher Korrelationen für die Berechnung des Wärmestromes von Thermit zum flüssigen Natrium

Bei gleicher Temperaturdifferenz ergibt die EULFCI-Korrelation den höchsten Wärmestrom. Die Erklärung liegt in der Überschätzung der Kontaktfläche einer Thermitkugel mit dem Natrium, da sie im Modell proportional zum Volumenanteil der flüssigen Phase ( $1 - \theta_v$ ) angenommen wird (Gl. 6.11). In Wirklichkeit können Thermitkugeln auch untereinander stoßen. Es erscheint deshalb zweckmäßiger, die Kontaktfläche der Kugel mit dem Natrium nur als Funktion zum Volumenanteils des Natriums zu betrachten. Diese Annahme wird im EPIC-, im PLUTO2- und im SIMMER-Modell getroffen.

Die CALIPSO-Korrelation ergibt für den Fall von gleichgroßen Radien des Thermit und des Natriums Werte, die etwa 10 - 20 % niedriger liegen als bei der EPIC-Korrelation. Für größere Radien des Natriums liegt deren Wärmewiderstand ebenfalls höher. Die CALIPSO Korrelation ergibt für diesen Fall einen geringeren Wärmefluß. Diese Tendenz deutet auf die Anwendbarkeitsgrenze dieses Modells hin, nämlich dann, wenn Thermitkugeln überwiegend im flüssigen Natrium eingebettet sind. Für diesen Fall erscheint die Anwendung der EPIC-Korrelation als sinnvoller.

### 6.3 Gesamtvalidierung anhand von SIMBATH-Einzelstabversuchen

Der Analyse ausgewählter SIMBATH-Einzelstabversuche mit CALIPSO ist besondere Bedeutung beizumessen, da sie eine globale Validierung des Zusammenwirkens der Einzelmodelle im Falle dieses spezifischen transienten Prozeßablaufs ermöglicht. Auch beziehen sich einige Teilmodelle der derzeitigen Codeversion, wie Geometrie, Pinmodellierung und z.T. die konstitutiven Gleichungen (Zustandsgleichungen, Wärmeübergangsmodell Thermit/flüssiges Natrium), auf spezifische Aspekte dieser Versuche.

Bisher wurden nur Einzelstabversuche mit CALIPSO analysiert. Nachrechnungen von Mehrstabexperimenten mit CALIPSO erscheinen aus heutiger Sicht als nicht sinnvoll. Ein Grund dafür liegt in der Nachbildungsschwierigkeit der mehrdimensionalen Strömung im Kühlkanal mit dem eindimensionalen, azimuthal symmetrischen Modell von CALIPSO. Einen weiteren Grund bilden die experimentellen Unsicherheiten bei der Bestimmung der Massenquellterme von Thermit und Gas in den Unterkanäle eines Bündels, in dem einzelne Stäbe zeitlich verzögert versagen.

Für die Validierung von CALIPSO wurden die SIMBATH Einzelstabexperimente mit den Versuchsnummern  $V_{th} 71/2$  und  $V_{th} 71/4$  hinzugezogen. Die Versuche stammen aus einer Reihe von Experimenten, deren Ziel die Untersuchung des unterschiedlichen Druckaufbaus im Stabinneren auf den Versuchsablauf war. Eine umfangreiche Dokumentation der Versuchsergebnisse ist in /39, 107/ gegeben. Für beide Versuche lassen sich die für CALIPSO notwendigen Anfangsbedingungen für das Stabinnere und für den Kühlkanal mit größerer Zuverlässigkeit als im Falle anderer Experimente bestimmen. Das gleiche gilt auch für einige wichtige phänomenologische Aspekte des transienten Versuchsablaufs, wie z.B. die Anzahl und die Ausdehnung der Versagensstellen oder die Bestimmung der Massenquellterme im Stabinneren. Ferner ist es in diesen Versuchen zu keiner Blockadenbildung gekommen. In bezug auf die Ergebnisauswertung dieser Experimente verliert deshalb das derzeit in CALIPSO nicht berücksichtigte Ausfrieren auf Strukturen an Bedeutung.

Die SIMBATH Versuche  $V_{th} 71/2$  und  $V_{th} 71/4$  unterscheiden sich bezüglich der Anfangsbedingungen bei Stabversagen. Im Experiment  $V_{th} 71/2$  ist in der Stabhülle nur eine Defektstelle entstanden. In  $V_{th} 71/4$  hatte die Hülle dagegen an

zwei örtlich getrennten Stellen versagt. Der Gasinnendruck bei Stabversagen war in beiden Versuchen ebenfalls unterschiedlich.

Der SIMBATH Test  $V_{th}$  71/2 dient als Referenzversuch für die Validierung von CALIPSO. Anhand der Versuchsdaten und der Rechenergebnisse werden das Zusammenwirken der Einzelmodelle des Codes untersucht aber auch einige seiner Modellparameter kalibriert. Die Rechenergebnisse bei der Untersuchung von  $V_{th}$  71/4 mit CALIPSO sollen außer der Programmvalidierung auch die Reproduzierbarkeit von experimentellen Ergebnissen im Falle von veränderten Anfangsbedingungen aufzeigen. Auf diesem Weg können Rückschlüsse bezüglich der modellierten physikalischen Phänomene im CALIPSO sowie bezüglich des Programmeinsatzes bei der Nachrechnung von SIMBATH Versuchen gezogen werden.

### 6.3.1 Einzelstab Referenzversuch $V_{th}$ 71/2

#### 6.3.1.1 Versuchsaufbau

Der schematische Versuchsaufbau für den SIMBATH-Test  $V_{th}$  71/2 ist in Abb. 6.15 dargestellt. Der Thermitstab entspricht einer üblicherweise in den SIMBATH-Versuchen verwendeten Konstruktion /108/. Im Thermitbereich des Stabes ist der Zünder, bestehend aus einem Stahlrohr mit verdichtetem Thermit, zentrisch angeordnet und elektrisch und thermisch durch isolierendes Siliziumoxidgewebe vom restlichen, ringförmig gestampften Thermit getrennt. Oberhalb des Thermitbereiches ist ein Stahlestück mit einem Kapillarrohr angebracht, durch das vor dem Versuch evakuiert oder Gas zugegeben wird. Die untere simulierte Brutzone enthält die Zündstromleitung, um die Magnesiumoxid eingestampft ist. Der Thermitstab wird im Teststreckenbereich des SIMBATH-Natriumkreislaufs mit Hilfe von Wabenabstandshaltern zentriert. Oberhalb des Stabes befindet sich im Kühlkanal eine Drossel, die den Druckverlust im Mischkopf eines Reaktorbrannelementes simuliert.

Die Teststrecke ist umfangreich instrumentiert (s. Abb. 6.15). Die Geschwindigkeiten der Natriumsäulen stromaufwärts und -abwärts (bezogen auf die Teststrecke) werden mit Permanent-Magnetdurchflußmessern gemessen. Die Meßgenauigkeit beträgt 3 %. Im Bereich der Teststrecke sind fünf piezoelektrische Druck-

aufnehmer über 0,2 m langen Temperaturabklingstrecken zur Erfassung der dynamischen Drücke angebracht. Die Meßgenauigkeit eines Druckmeßkopfes liegt bei etwa 1 % vom jeweiligen Meßwert. Weitere Druckaufnehmer mit Zeitkonstanten von etwa einer Sekunde dienen hauptsächlich der Druckmessung im stationären Betrieb. Im Kühlkanal oberhalb der Thermitzone ist ein Thermoelement von 1,0 mm Durchmesser zur Aufnahme der Temperaturänderungen des Natriums angebracht. Die Aufzeichnung dieser Meßdaten auf Magnetband erfolgt mit einer Frequenz von 6 kHz.

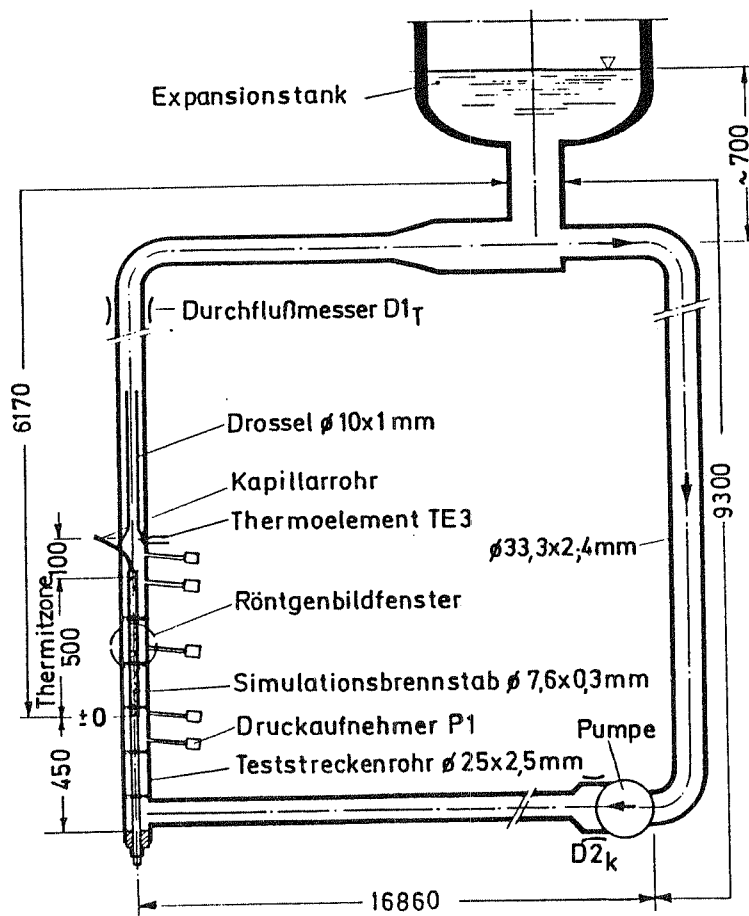
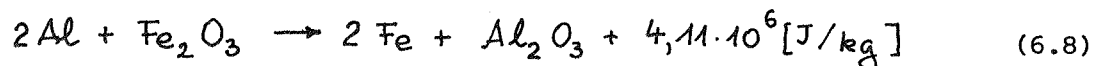


Abb. 6.15 Schematischer Versuchsaufbau für SIMBATH-Test  $V_{th} 71/2$

Die transiente Materialumverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal wird mit einer Röntgen-Kinematographie-Anlage aufgezeichnet. Sie besteht aus drei übereinander angeordneten Röntgenröhren, die die Teststrecke durchstrahlen. Das Bildfenster jeder Röntgenröhre beträgt ca. 0,180 m. Mit elektronenoptischen Bildverstärkern und Hochgeschwindigkeitskameras werden die Bewegungsvorgänge in der Teststrecke mit etwa 1000 Bildern/Sekunde auf Filmen festgehalten. Die Umverteilung von Thermit im Stabinneren und im Kühlkanal sowie die Geometrieänderungen der Stabhülle und der Kühlkanalwand sind auf den Filmen erkennbar. Natrium ist wegen der geringen Absorption von Röntgenstrahlen auf den Filmen nicht sichtbar.

#### 6.3.1.2 Versuchsablauf und Ergebnisse

Vor dem Einleiten der transienten Versuchsphase werden die Temperatur und die Geschwindigkeit des flüssigen Natriums im Teststreckenbereich auf die Werte  $T_{nl} = 673$  K bzw.  $v_{nl} = 4$  m/s eingestellt. Das Thermit ist über das Kapillarrohr mit einem Gasdruck von 0,5 MPa beaufschlagt. Dieser Druck entspricht einer Gasmenge von  $0,86 \cdot 10^{-3}$  Nm<sup>3</sup> per kg Thermit. Die transiente Versuchsphase beginnt mit dem Einschalten des Zündstromes, der über das Stahlrohr des Zünders fließt. Nach etwa 2,5 s erreicht das Thermit im Zünder die Selbstentzündungstemperatur von ca. 1300 K. Folgende exotherme chemische Reaktion findet statt:



Beim Ablauf dieser Reaktion schmelzen die Reaktionsprodukte und erreichen eine geschätzte Temperatur von 3540 K. Zeitgleich zur chemischen Umwandlung erfolgt auch das Freisetzen von angelagertem Gas (max.  $4 \cdot 10^{-3}$  Nm<sup>3</sup>/kg Thermit). Es hat eine ähnliche Zusammensetzung wie Luft. Die Dynamik der Gasfreisetzung und die Temperaturentwicklung des Gases sind weitgehend unbekannt. Neueren Erkenntnissen zufolge /109/ ist anzunehmen, daß die Hauptmasse des Gases in einigen 10 ms vollständig frei wird und nicht in Lösung geht.

Die Auswertung dieses Versuchs ergibt folgenden phänomenologischen Ablauf: Die chemische Reaktion im Stabinneren startet an mehreren axialen Positionen im Zünder und breitet sich danach über die gesamte Länge aus. Später wird auch



die Hauptmasse des ringförmig gestampften Thermits erfaßt. Ungefähr 100 ms nach der erstmals auftretenden chemischen Reaktion hat vermutlich die gesamte Thermitmasse reagiert und ist geschmolzen. Die Reaktionsprodukte bilden im Stabinneren etwa 0,5 - 1,5 cm lange Pfropfen.

Das Versagen der Stabhülle erfolgt etwa 13 ms bevor die Thermitreaktion auf der gesamten Stablänge abgeschlossen ist. Dieser Versagenszeitpunkt wird als Zeitursprung  $t = 0$  für die nachfolgende Diskussion der Versuchsergebnisse und der Nachrechnung definiert.

Die Stabhülle versagt örtlich auf der Höhe  $+ 5 \cdot 10^{-2}$  m, gemessen vom unteren Ende der Thermitzone. Die Versagensursache des ersten Defekts liegt wahrscheinlich im Zusammenwirken von lokalem Schmelzangriff und mechanischer Belastung durch den Innendruck. Im späteren Verlauf breitet sich, den Röntgenaufnahmen zufolge, die Versagensstelle azimuthal und axial hauptsächlich durch Abschmelzen aus. Ein rein mechanisches Versagen (Zerplatzen) der Stabhülle ist nicht aufgetreten. Die Größe der ursprünglichen Defektstelle, wie auch deren Ausbreitung während der ersten etwa 15 ms nach Stabversagen, ist den Röntgenaufnahmen nicht zu entnehmen.

Durch die entstandene Öffnung in der Hülle treten Reaktionsprodukte und Gas in den Kühlkanal ein. Eine kohärente, heftige thermische Wechselwirkung zwischen Thermit und flüssigem Natrium findet nicht statt. Dies hängt auch mit den großen Gasmengen zusammen, die gleichzeitig mit dem Thermit in den Kühlkanal gelangen und dort eine räumliche Trennung von flüssigem Natrium und Thermit bewirken.

Durch den Druckaufbau im Kühlkanal (Gas- und Dampfdruck) bedingt werden Thermit und Natrium von der Defektstelle wegtransportiert. Das Natrium wird in beiden axialen Richtungen ausgetrieben. Die Hauptbewegungsrichtung des Thermits ist, von der Versagensstelle aus gesehen nach oben gerichtet. Das Thermit befindet sich meistens in Tropfenform. Es bildet aber auch, wie aus der post-mortem-Analyse dieses Versuchs folgt, örtlich dünne Filme.

Im Stabinneren werden die Thermitpfropfen in Richtung zur Versagensstelle beschleunigt und zerteilen sich dabei. Danach wird zeitweise Filmströmung beobachtet. In der Nähe der Versagensstelle entstehen über kurze Zeitspannen

Zonen mit erhöhtem Thermitvolumenanteil (Verdichtungen) und mit größeren Tropfenradien.

Etwa 100 ms nach Stabversagen ist die Materialumverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal in der Hauptsache abgeschlossen. Das Stabinnere ist von Thermit entleert. Die Stabhülle ist über einer Länge von mehr als 0,25 m abgeschmolzen. Im Gasbereich des Kühlkanals befinden sich nur noch einzelne Thermitropfen. Ab  $t = 160$  ms findet ein Wiederfluten der Teststrecke mit flüssigem Natrium aus dem Bereich unterhalb der Thermitzone statt. Die Lage der Natriumfront ist in dieser Phase in den Aufzeichnungen anhand der mitgeschleppten Thermitteilchen zu erkennen. Im Teststreckenbereich kommt es durch Wärmeübergang von den heißen Reaktionsprodukten zu dem einfließenden Natrium zum Druckaufbau durch Verdampfungsprozesse. Anschließend findet ein Zurückdrängen der Natriumsäulen statt. Der Vorgang des Flutens und der Expulsion von Natrium wiederholt sich mit einer mittleren Frequenz von 6,5 Hz.

Wichtige Versuchsergebnisse des SIMBATH-Versuchs  $V_{th}$  71/2 über den für die Materialumverteilung maßgebenden Zeitraum von 100 ms nach Stabversagen ( $t = 0$ ) sind in der Abb. 6.16 zusammengestellt.

Der gemessene Druckverlauf zeigt während den ersten 5 ms einen Druckaufbau, dem einzelne nadelförmige Druckspitzen überlagert sind. Die mittlere Frequenz der Druckoszillationen beträgt 950 Hz. Eine detaillierte Interpretation der einzelnen Pulse ist nicht möglich. Nach Stabversagen entstehen Druckwellen, sowohl durch die Kompression des flüssigen einphasigen Natriums durch ejiziertes Gas und Thermit, wie auch als Folge von lokalen thermischen Wechselwirkungen zwischen Thermit und Natrium. Als weitere Ursache für die Druckpulse kommen mehrfache Druckwellenreflexionen in den Temperaturabklingstrecken der Aufnehmer sowie in der Teststrecke selbst, in Betracht.

An diese erste Phase schließt sich ein schwingender Druckaufbau und -abbau mit einer Dauer von fast 60 ms an. Die Frequenz dieser Schwingungen liegt bei etwa 45 Hz. Es waren die Ergebnisse von CALIPSO-Nachrechnungen dieses Versuchs, die gezeigt haben, daß diese langsameren Druckoszillationen wahrscheinlich nicht im Teststreckenbereich aufgetreten sind (s. Kap. 6.3.1.4.1 und 6.3.1.5.1).

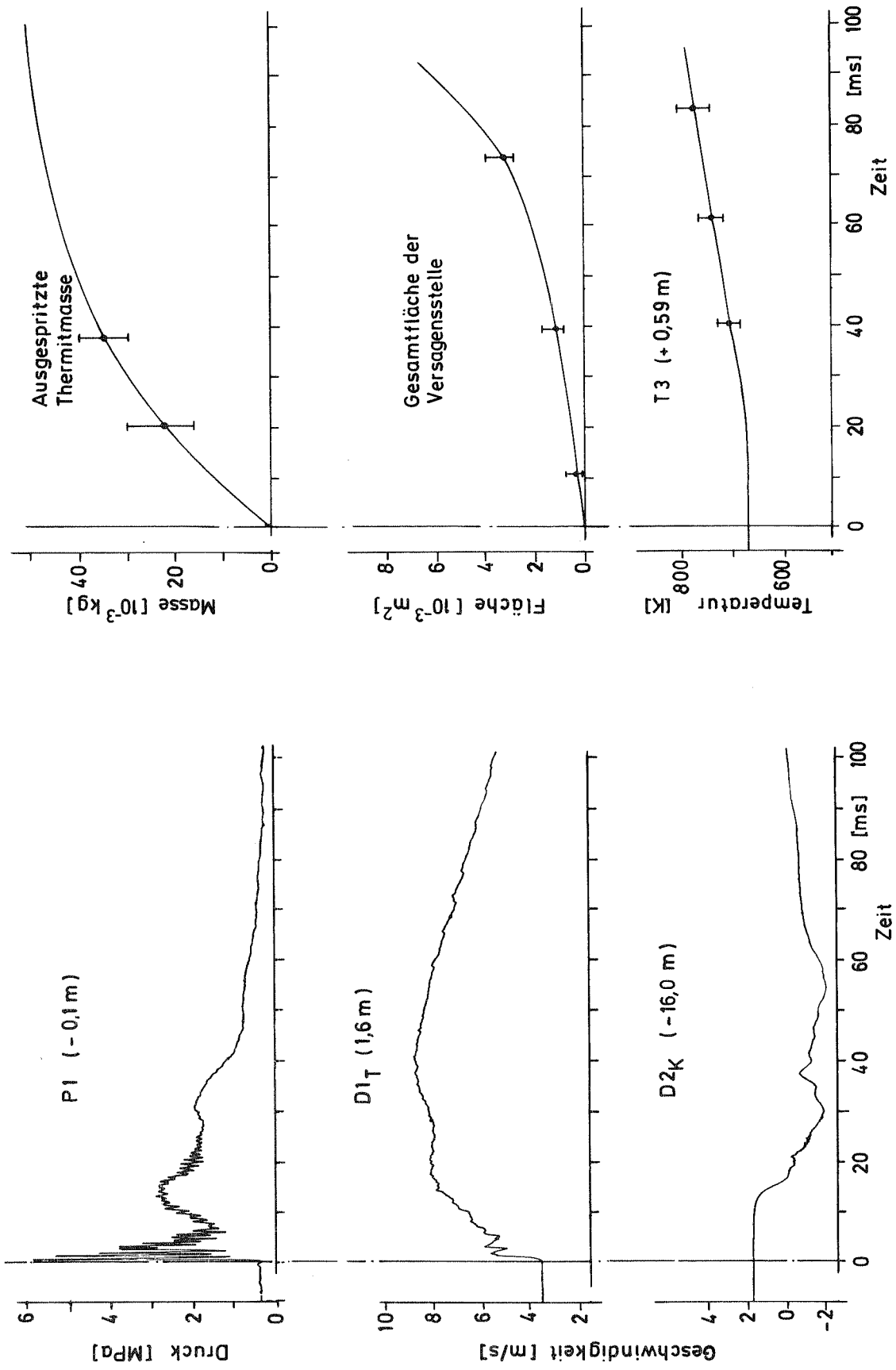


Abb. 6.16 Versuchsergebnisse vom SIMBATH-Test  $V_{Th}$  71/2

Diese Vermutung ist zwischenzeitlich durch gezielte Experimente bestätigt worden /110/. Es stellte sich heraus, daß einer der Verstärker in der Meßkette derartige Schwingungen um einen mittleren Zeitverlauf erzeugen kann. Wie der tatsächliche Druckaufbau im Versuch  $V_{th} 71/2$  ausgesehen haben könnte, ist derzeit nur qualitativ angebar /110/.

Der Druckaufbau im Teststreckenbereich bewirkt das Verdrängen der Natriumsäulen in beiden axialen Richtungen. Der registrierte zeitliche Verzug in den Ansprechzeiten der Durchflußmesser und des Druckaufnehmers P1 läßt sich mit der Laufzeit von Druckwellen im System korrelieren und ermöglicht somit die Berechnung der System-Schallgeschwindigkeit. Diese liegt mit einem Mittelwert von 1000 m/s um den Faktor 2,3 niedriger als die theoretische Schallgeschwindigkeit, bedingt durch die Elastizität der Rohre und Kompensatoren und der möglicherweise im Natrium existierenden Gasblasen.

Durch Auswertung der Röntgenfilme können der Zeitverlauf der gesamten aus dem Stab ausgetretenen Thermitmasse sowie die transiente Ausdehnung der Versagensstelle abgeschätzt werden (s. Abb. 6.16). Für beide Kurven ist der jeweilige geschätzte Unsicherheitsbereich eingezeichnet. Dieser ergibt sich durch die subjektive, nur visuell mögliche Auswertung der Filme wie auch durch den unbekanntem Verlauf in den nicht durchstrahlten Bereichen der Teststrecke. Die gezeigte zeitliche Ausdehnung der Defektöffnung in den ersten 15 ms ist durch Extrapolation unter Berücksichtigung der Erkenntnisse aus Thermitversuchen in Wasser /38/ entstanden.

Schließlich ist in Abb. 6.16 die Meßanzeige eines Thermoelementes am oberen Ende des Thermitstabes wiedergegeben. Eine Frequenzgangkorrektur der Temperatur entsprechend der in /111/ vorgeschlagenen Methode ist berücksichtigt. Der glatt verlaufende Temperaturentwurf deutet darauf hin, daß diese Meßstelle von flüssigem Natrium benetzt ist und dabei die örtliche Natriumtemperatur registriert. Andere, für den Experimentablauf relevante transiente Temperaturmeßwerte, z.B. die Temperaturen der Strukturen oder die des Thermits, sind nicht verfügbar.

Über die Thermitverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal sind außer qualitativen Angaben (siehe Beschreibung des Versuchsablaufs) keine detaillierte experimentelle Daten vorhanden. Auch über andere Größen, z.B. Gasgehalt oder

Druckaufbau im Stabinneren, die für die Nachrechnung dieses Versuchs zu spezifizieren sind (s. nächstes Kapitel), fehlen die notwendigen Meßwerte.

### 6.3.1.3 Anfangsbedingungen für die Nachrechnung mit CALIPSO

Die CALIPSO-Nachrechnung eines SIMBATH-Einzelstabexperiments beginnt bei Stabversagen. Dementsprechend müssen die Geometrie und der thermodynamische Zustand des Thermitstabes und des Kühlkanals zu diesem Zeitpunkt spezifiziert werden. Einige wichtige Daten für die Nachrechnung von  $V_{th}^{71/2}$  sind in Tab. 6.1 gezeigt. Der komplette Eingabedatensatz und die Liste der verwendeten Modellparameter sind im Anhang A4 angegeben.

Tab. 6.1 Wichtige Daten für die CALIPSO-Abbildung des SIMBATH-Versuches  $V_{th}^{71/2}$  zum Stabversagenszeitpunkt

Daten	Einheit	Wert
Stabdurchmesser	m	$7,6 \cdot 10^{-3}$
Stärke der Stabhülle	m	$3 \cdot 10^{-4}$
Hydraulischer Durchmesser des Kühlkanals	m	$1,24 \cdot 10^{-2}$
Länge der Thermitzone	m	$5 \cdot 10^{-1}$
Länge der simulierten Brutzonen oben/unten	m	$1 \cdot 10^{-2} / 4,5 \cdot 10^{-1}$
Natriumvolumenstrom	$m^3/s$	$1,075 \cdot 10^{-3}$
Natriumtemperatur	K	$6,73 \cdot 10^2$
Gasvolumenanteil im Pin	-	$4,86 \cdot 10^{-1}$
Gasmenge/kg Thermit	-	$4,86 \cdot 10^{-3}$
Gastemperatur/Thermittemperatur	-	0,71
Thermitmenge	kg	$4,98 \cdot 10^{-2}$
davon Stahlanteil	%	$5,89 \cdot 10^{-1}$
Thermittemperatur	K	$3,54 \cdot 10^3$
Hüllrohrtemperatur innen/mitte/außen	K	$1,16 \cdot 10^3 / 1,096 \cdot 10^3 / 1,030 \cdot 10^3$

Die Geometrie der Teststrecke und die des Natriumkreislaufes (Abb. 6.15) lassen sich mit dem CALIPSO-Modell in bezug auf Radien und Längen genau nachbilden.

Für die Diskretisierung des Teststreckenbereiches in radialer Richtung (s. Abb. 2.1) wird von einer Masche im Stabinneren und eine im Kühlkanal ausgegangen. Jede Struktur ist in drei gleich starke Schichten eingeteilt (s. Abb. 4.1) um radiale Temperaturprofile berechnen zu können. Die verwendete Diskretisierung in axialer Richtung (Abb. 6.17) entspricht den Empfehlungen in /88/. Die Maschenlängen liegen zwischen  $2 \cdot 10^{-2}$  m im Bereich der Versagensstelle bis 7,26 m am unteren Ende des Kreislaufes, wobei das Verhältnis der Längen benachbarter Maschen den Faktor 1,5 nicht überschreitet.

Jeder Kühlkanalmasche sind außer den geometrischen Daten auch Werte der entsprechenden Stoßverlustbeiwerte für örtliche Strömungshindernisse zugeordnet. Zusätzlich ist an der Grenze zwischen den Maschen 3 und 4, die der Lage der Pumpe im Kreislauf entspricht, der Pumpenförderdruck als Funktion des Massendurchsatzes berücksichtigt. Die Pumpenkennlinie entstammt Messungen an der elektromagnetischen Pumpe des SIMBATH-Kreislaufes:

$$\Delta\phi_{\text{pump}} = 10^{-6} [2,14 \cdot 10^{-4} U^2 + 1,05 \cdot 10^{-2} U - 0,249 + (2,25 \cdot 10^2 - 6,95 U) v_{rel} A] \quad (6.13)$$

$U = 160$  V für den Versuch  $V_{th} 71/2$

Die Lage der Versagensstelle ist entsprechend den Filmaufzeichnungen vorgegeben (s. Abb. 6.17). Seine axiale Ausdehnung wird gleich der Maschenlänge an der Versagensstelle angenommen. Die azimuthale Entwicklung der Öffnungsfläche wird in den ersten 15 ms durch Vorgabe der Zeitfunktion der Porosität  $\epsilon$  gesteuert.

Diese Funktion gibt die qualitativen Beobachtungen aus Thermitversuchen in Wasser /38/ wieder. Die tatsächlich eingesetzten Werte der Zeitfunktion für die Porosität  $\epsilon$  in der Defektmasche (Nr. 24) sind zusätzlich im Hinblick auf eine gute Wiedergabe des gemessenen Druckverlaufes angepaßt worden.

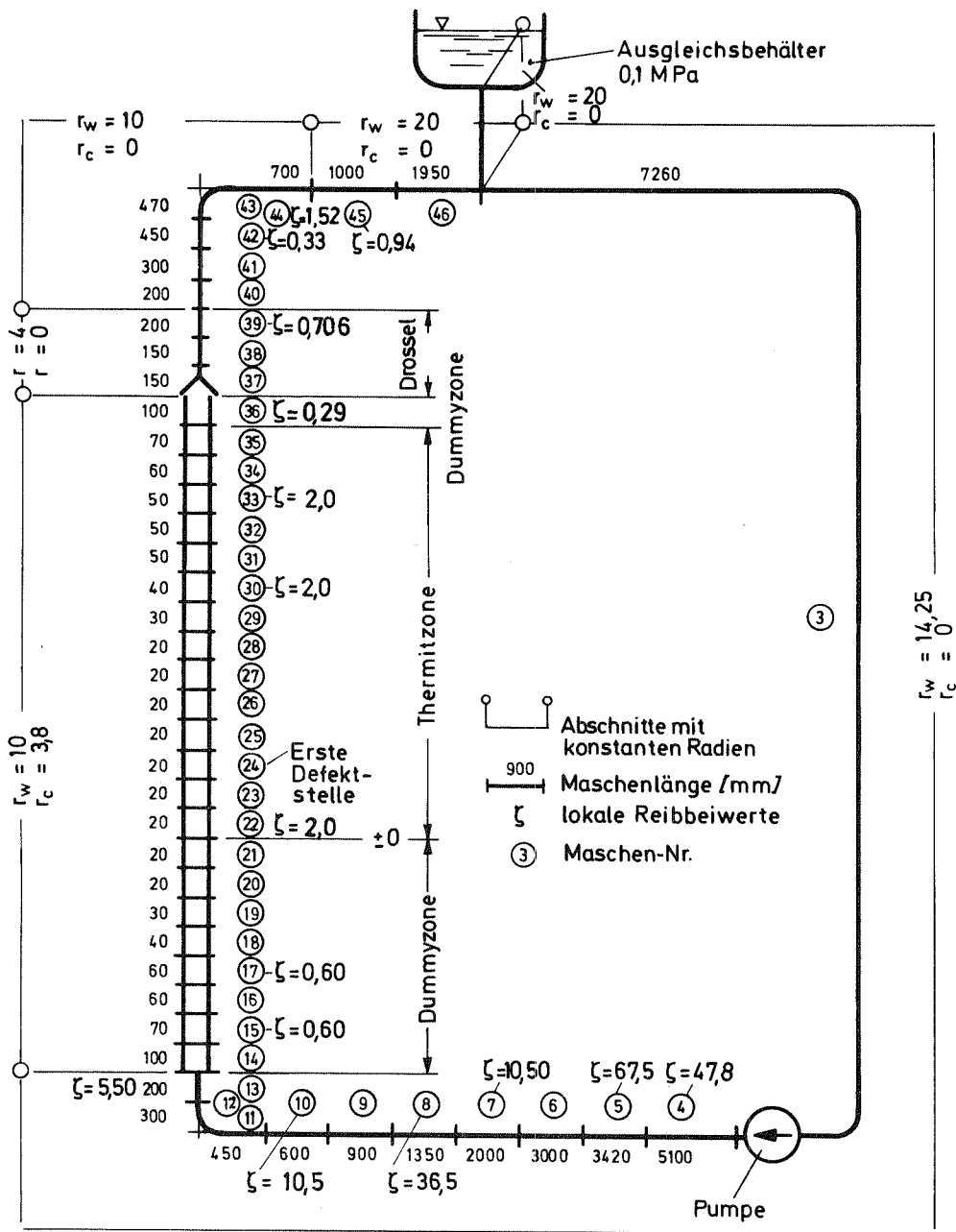


Abb. 6.17 Diskretisierung der SIMBATH-Teststrecke und des angeschlossenen Natriumkreislaufes für die Nachrechnung von  $V_{th}^{71/2}$

Die vorgegebene transiente Vergrößerung der Versagensstelle im erwähnten Zeitraum von 15 ms ist deshalb als eine Anpassungsfunktion anzusehen. Die Funktion lautet:

$$\varepsilon = 1 \cdot 10^{-2} \quad t \leq 7 \cdot 10^{-3} \text{ s} \quad (6.14)$$

$$\varepsilon = 1 \cdot 10^{-2} + 10 (t - 7 \cdot 10^{-3}) \quad t > 7 \cdot 10^{-3} \text{ s}$$

Aus der Diskretisierung des Kreislaufes ergibt sich folgende Verknüpfung zwischen der Porosität und der Fläche der Defektstelle:

$$A = 4,775 \cdot 10^{-4} \varepsilon \quad (6.15)$$

Aus heutiger Sicht erscheint die gewählte Zeitfunktion (Gl. 6.14) realistischer zu sein als der bei früheren Rechnungen eingesetzte hohe Wert der Porosität von konstant 20 % /14/. In den Rechnungen /14/ wurde ferner von einem hohen Lösungsgrad von Gas im Thermit ausgegangen (s.u.)

Die Abbildung der Thermohydraulik im Kühlkanal entspricht bei diesem Experiment weitgehend den Versuchsbeobachtungen. Das flüssige Natrium durchströmt den Teststreckenbereich mit einer Geschwindigkeit von 4 m/s. Seine mittlere Temperatur über die gesamte Stablänge beträgt 673 K.

Für die Modellierung des Zustandes der Thermitzone des Stabes bei Stabversagen ( $t = 0$ ) wird von einem Idealfall ausgegangen: Die Thermitreaktion ist auf der gesamten Länge abgeschlossen, und die Reaktionsprodukte sind geschmolzen. Die axiale Verteilung der Massen und Temperaturen von Thermit, Gas und Stabhülle ist über die gesamte Stablänge konstant. Diese Annahmen liegen beim Referenzversuch wesentlich näher an den Versuchsbeobachtungen als bei anderen SIMBATH-Einzelstabversuchen. Die Annahmen sind auch durch die schwierige Vorhersage des Stabzustandes mit Hilfe deterministischer Modelle bedingt. Der Grund dafür liegt bei der ausgeprägten Statistik im axialen Ablauf der Thermitreaktion im Stabinneren. Die Gasfreisetzungsdynamik sowie die Temperaturentwicklung in Thermit, Gas und Stabhülle sind ebenfalls einer Statistik unterworfen.

Diesen Inkohärenzen im Ablauf der Thermitreaktion sind zum großen Teil die



beobachteten Unterschiede im Versuchsablauf einzelner SIMBATH-Experimente zuzuschreiben.

Bei der Menge des freigesetzten Gases bei Stabversagen (Tab. 6.1) wird von der maximal möglichen Menge ausgegangen. Es ist nicht auszuschließen, daß ein geringer Anteil davon bei Stabversagen noch im Thermit gelöst ist und erst nach einigen 10 ms freigesetzt wird. Diese Annahme liegt, entsprechend dem derzeitigen Kenntnisstand, früheren Rechnungen mit CALIPSO zugrunde /6, 14/. Ausgangsbasis war früher ein hoher Lösungsgrad von Gas im geschmolzenen Thermit (60 % oder mehr) und ein Zeitraum von insgesamt 40 ms nach Stabversagen für dessen Freisetzung. Gleichzeitig wurde der erwähnte hohe Porositätswert von 20 % eingesetzt.

Wegen fehlender Daten bezüglich ihres Einflusses werden der Dampfdruck von Siliziumoxid, das als Isolationsmaterial im Stab vorhanden ist, sowie der Dampfdruck von Nickel, Chrom u.a., die im Zünder enthalten sind, nicht berücksichtigt.

Die Anfangstemperaturen von Thermit, Gas und Hülle bei Stabversagen (Tab. 6.1) basieren auf abschätzende Vorausrechnungen. Demzufolge hat das Gas in der Zeitspanne zwischen seiner Freisetzung bei der Reaktion und Stabversagen etwa 70 % der Thermittemperatur erreicht. Die angenommene Temperatur ist als wahrscheinlicher Mittelwert über der Stablänge anzusehen. Wegen der Statistik im Reaktionsverlauf sind im Experiment Abweichungen von diesen Angaben wahrscheinlich.

Für die Modellierung der oberen und der unteren simulierten Brutzonen des Thermitstabes wird angenommen, daß sich dort keramisches Material mit den Stoffeigenschaften des Thermits bei 673 K befindet.

Vor Einleiten der transienten Rechnung wird in CALIPSO durch Lösung der stationären Impulserhaltungsgleichung des einphasigen flüssigen Natriums im Kühlkanal das Druckprofil im stationären Kreislaufbetrieb berechnet. Die Übereinstimmung der gemessenen und der berechneten Druckverluste in Teilabschnitten des Kreislaufes ist zufriedenstellend. Diesen Rechnungen ist die Korrektur der abgeschätzten Reibbeiwerte für örtliche Hindernisse mit dem in /86/ erläuterten Verfahren vorausgegangen. Der Korrekturfaktor von 1,007 ist jedoch gering.

#### 6.3.1.4 Ergebnis der Nachrechnung

Die nachfolgend diskutierten Ergebnisse stammen aus Rechnungen, die unter Berücksichtigung des kompletten CALIPSO-Modells, d.h. mit allen in Kap. 4 dargestellten Erhaltungs- und Konstitutivgleichungen durchgeführt wurden. Die Eingabedaten für den Versuch  $V_{th}$  71/2 sind im Anhang A4 aufgeführt. Die zugrunde gelegten Modellparameter, von denen der größte Teil bereits bei der Vorstellung der Modelle oder bei deren Validierung angegeben wurden, befinden sich in zusammengefaßter Form ebenfalls im Anhang A4.

##### 6.3.1.4.1 Vergleich Rechnung-Experiment

Der berechnete Druckverlauf (der in Abb. 6.18 am Beispiel des Druckes in der Versagensmasche aufgezeigt ist) weist, ähnlich wie im Versuch, einen im Mittel ähnlichen Verlauf über die gesamte Stablänge auf. Der erste steile Druckanstieg kommt durch das Zusammendrücken des kompressiblen flüssigen Natriums durch ejizierte Produkte sowie durch den sich aufbauenden Gasdruck zustande. Die Druckerhöhung führt zu einem beschleunigten Verdrängen des Natriums in dieser Masche und zur Entstehung eines Gasvolumens. Der nachfolgende Abfall und Anstieg ist durch das Verhältnis von Druckverminderung durch Vergrößern des Gasblasenvolumens und Druckerhöhung durch Gas- und Natriumdampfdruck bestimmt. Bis etwa 7 ms ist die Öffnung der Versagensstelle gering und somit der Gas- und Thermitmassenstrom begrenzt. In dieser Zeitspanne kann sich ebenfalls kein wesentlicher Natriumdampfdruck aufbauen (s. Abb. 6.19). Insofern überwiegt zunächst die Tendenz zur Druckabnahme durch Vergrößern des Gasvolumens. Später kommt es durch zusätzlichen Gasdruck und durch Natriumverdampfung zum erneuten Druckaufbau. Bei  $t = 17$  ms versagt durch Stahlschmelzen die Stabhülle auf der gesamten Länge der Masche 25. Die Fläche der Defektstelle vergrößert sich und dadurch nimmt auch der Massenstrom des ausgespritzten Gases zu. Im Druckaufbau macht sich dadurch eine kurzzeitige Druckspitze bemerkbar.

Ferner ist aus Abb. 6.19 zu ersehen, daß der Druckaufbau im Kühlkanal nach Stabversagen größtenteils durch Gasdruck erfolgt, also von der existierenden Gasmenge und von dessen Temperatur bestimmt wird.

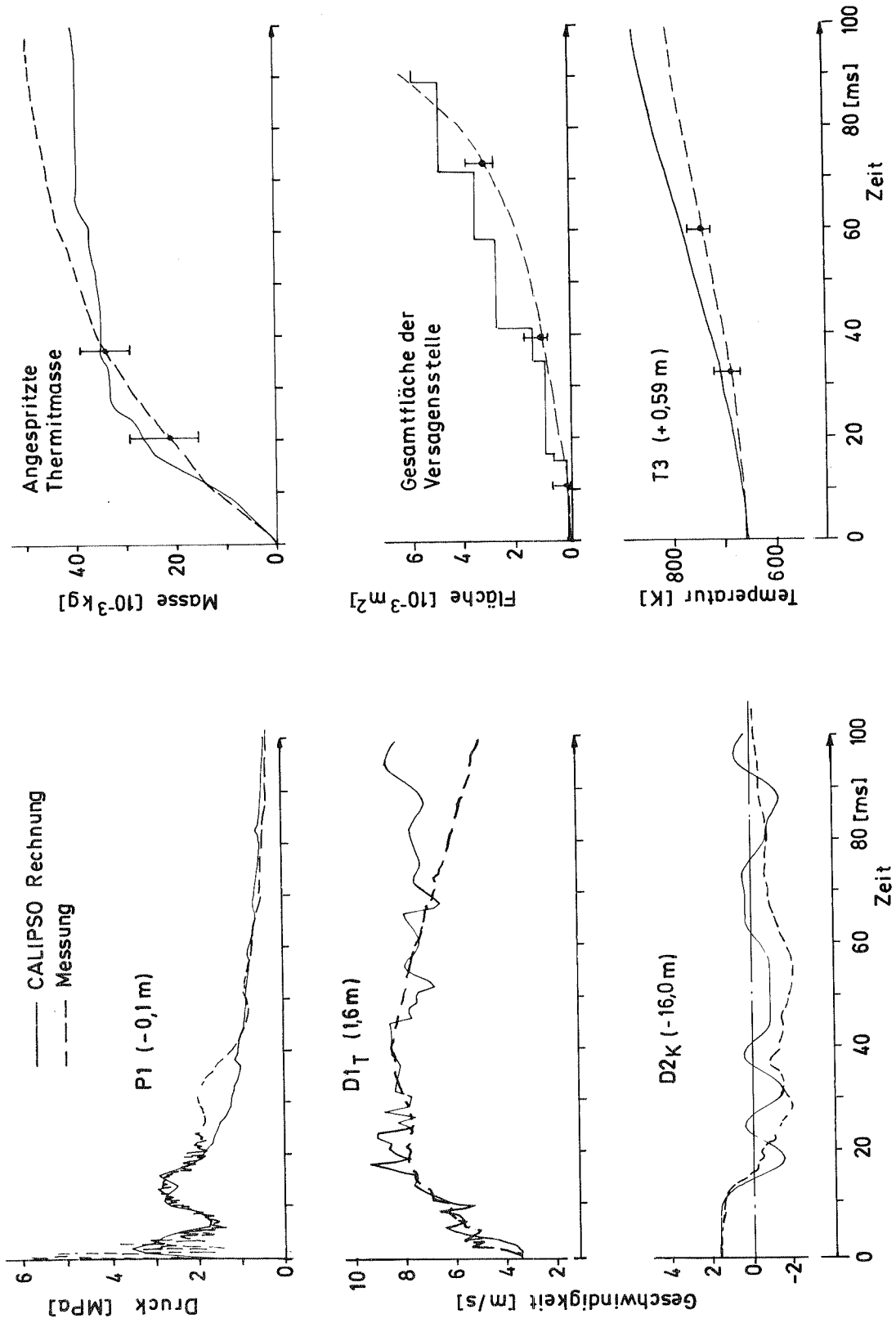


Abb. 6.18 CALIPSO-Nachrechnung von V<sub>Th</sub> 71/2. Vergleich mit Versuchsergebnissen

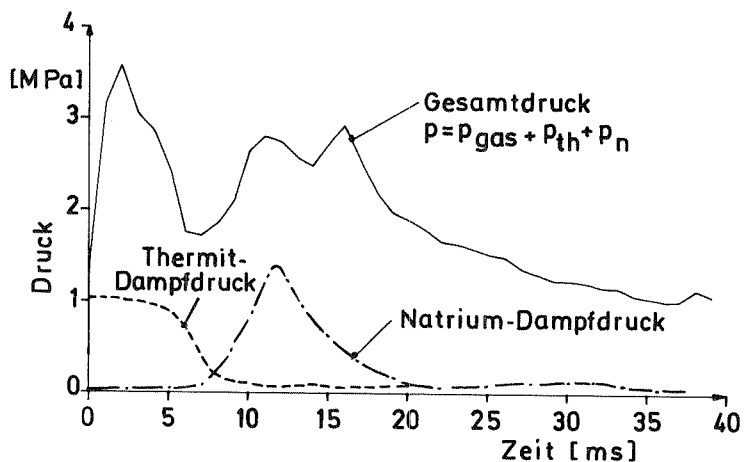


Abb. 6.19 Berechnete Druckverläufe im Kühlkanal an der Position der Versagensstelle (Masche 24, Lage + 0,05 m)

Etwa 30 ms nach Stabversagen liegt der berechnete Druck deutlich unterhalb der gemessenen Werte (s. Abb. 6.18). In den Rechnungen mit unterschiedlich eingestellten Parametern (s. Kap. 6.3.1.5) konnte die zweite im Versuch festgestellte Druckerhöhung ohne spezielle Maßnahmen (wie z.B. "Restarts" mit veränderten Modellparametern) nicht simuliert werden. Dies war der Anlaß der erwähnten Untersuchungen /110/, bei denen u.a. festgestellt wurde, daß die Amplitude dieser zweiten Druckerhöhung wahrscheinlich durch einen Verstärker der Meßkette hervorgerufen wurde. Dessen ungeachtet deutet die zusammenhängende Betrachtung der Natriumgeschwindigkeiten und des Druckaufbaus in Abb. 6.18 auf einen als zu gering berechneten Druck hin. Im späteren Verlauf liegt der berechnete wiederum etwas höher als der gemessene Druck. Dies wirkt sich z.T. auch in den abweichenden Tendenzen der Natriumgeschwindigkeiten gegenüber den Meßwerten aus.

Der Verlauf der Geschwindigkeiten der oberen Natrium-Säule stimmt in Rechnung und Messung im Mittel über mehr als 70 ms überein. Die auftretenden kurzzei-

tigen Oszillationen im berechneten Verlauf sind bedingt durch das Ausbreiten von Druckwellen, die an der freien Oberfläche des Expansionsgefäßes und am Drosselende ohne wesentliche Dämpfung reflektiert bzw. teilreflektiert werden (s. Kap. 6.1.2). Durch die Interferenz dieser Druckwellen entstehen in den einzelnen Maschen zwischen Drossel und oberem Plenum Druckspitzen und länger anhaltende Druckauslöschungen. Entsprechend dem Druckberechnungsverfahren (s. Kap. 4.2.1) entwickelt sich in diesem Abschnitt eine ausgedehnte Zweiphasenzone.

Im Falle der Geschwindigkeit der unteren Natriumsäule sind in Abb. 6.18 ebenfalls die von Druckwellen verursachten Oszillationen erkennbar. Die unterschiedliche Charakteristik gegenüber der oberen Natriumsäule ist auf größere Rohrlängen, längere Maschen und unterschiedliche lokale Druckverluste zurückzuführen. Der berechnete Geschwindigkeitsverlauf zeigt gegenüber der Messung ab  $t = 25$  ms ein früher eintretendes Wiederfluten der Teststrecke. Die Ursachen liegen sowohl in dem zu geringen Druckaufbau im Teststreckenbereich, als auch in der zu schwachen Dämpfung von reflektierten Druckwellen verglichen mit dem gemessenen Wert im Kreislauf. Die stärkere Dämpfung der Druckwellenamplituden wird in Wirklichkeit nicht nur durch den modellmäßig erfaßten Druckverlust bestimmt, sondern entsteht auch durch die Vielfachreflexion in Einbauten wie Ventilen und Filtern. Es ist ferner zu beachten, daß die verwendeten Reibbeiwertkorrelationen für stationäre Strömungen gelten und daß im Falle von stark beschleunigten Strömungen die tatsächlichen Werte höher liegen können /61/.

Die berechneten Zeiten der ersten Geschwindigkeitsänderungen gegenüber dem stationären Wert liegen für die obere und für die untere Natriumsäule versetzt gegenüber dem Meßwert (s. Abb. 6.18). Diese Verschiebung ergibt sich hauptsächlich durch die Diskretisierung des Kreislaufes mit langen Maschen im oberen und unteren Bereich, wodurch die Lage der Durchflußmesser gegenüber der entsprechenden Mitte der Rechenmasche örtlich versetzt liegt. Ein weiterer, weniger gewichtiger Grund für die Zeitverschiebung liegt bei dem Zeitabstand von 1 ms für das Herausschreiben der berechneten Daten zwecks Auswertung.

Die gesamte Thermitmenge, die aus dem Stabinneren in den Kühlkanal transportiert wird, zeigt bis  $t = 50$  ms einen Verlauf, der innerhalb der Auswertege-

nauigkeit die Versuchsergebnisse nachbildet (Abb. 6.18). Nach diesem Zeitpunkt wird in der Rechnung Thermit nicht mehr im gleichen Maße ausgespritzt. Der Grund für diese Abweichung liegt in dem berechneten, fast vollständigen Druckausgleich zwischen Stabinnerem und Kühlkanal ab  $t = 15$  ms, bedingt durch die größere Öffnung der Versagensstelle und als Folge der geringen Trägheit des Gases. Im Stabinneren ist ebenfalls ab diesem Zeitpunkt der axiale Druckgradient nur schwach entwickelt. Modellmäßig gibt es also außer der Trägheit keine ausgeprägte Kraft, die das Thermit in radialer Richtung vom Stabinneren in den Kühlkanal hineinbewegen könnte. In Wirklichkeit findet jedoch bei ausgedehnter Versagensstelle auch Massentransport infolge von Konzentrationsgradienten statt, ein Phänomen, das in CALIPSO z.Z. nicht berücksichtigt ist. Die Modellierung des Fortschreitens der Thermitreaktion nach Stabversagen einschließlich der begleitenden Gasfreisetzung könnte ebenfalls einen zusätzlichen Druckgradienten für die radiale Bewegung des Thermits liefern (vergl. Kap. 6.3.1.5.1). In CALIPSO ist ferner das Eindringen von Natrium aus dem Kühlkanal in den Stabbereich und der nachfolgende Dampfdruckaufbau unterbunden.

Der Vergleich der berechneten und gemessenen Ausdehnung der Versagensstelle (Abb. 6.18) zeigt bis  $t = 40$  ms eine verhältnismäßig gute Übereinstimmung. Später breitet sich die Versagensstelle in der Rechnung schneller aus, als es im Experiment der Fall ist. Im Modell ist angenommen, daß sich die Defektstelle nur durch Schmelzen der Stabhülle vergrößert. Die gezeigte Übereinstimmung mit Versuchsergebnissen deutet daher im Versuch auf eine ähnliche Ursache für die Vergrößerung der Versagensstelle hin.

Als letzte Größe ist in der Abb. 6.18 die Natriumtemperatur oberhalb der Thermitzone eingetragen. Die errechnete Temperatur liegt etwas höher als die Messung (z.B. 10 % nach 100 ms). Dieses Ergebnis muß nicht zwangsweise mit der richtigen Kalibrierung der Wärmeübergangsmodelle zusammenhängen, da die Temperaturentwicklung auch durch die numerische Diffusion der Masse und folglich auch der Energie beeinflusst wird (s. Kap. 6.1.3). Dieses Phänomen tritt auch bei einer einphasigen Strömung auf, bei der zu Rechenbeginn eine gut definierte thermische Schichtung quer zur Strömungsrichtung existiert. Sie bewirkt den Transport von Energie über weitere Bereiche als diejenigen die sich entsprechend der Konvektionsgeschwindigkeit ergeben würden.

In Abb. 6.20 ist die zeitliche Entwicklung des axialen Voidprofils im Kühlkanal dargestellt. Der betrachtete Abschnitt der Teststrecke liegt zwischen dem unteren simulierten Brutbereich und einer Position kurz oberhalb der Drossel. Im Bild ist auch der durch Aufintegration der Durchflußsignale errechnete Verlauf der Phasengrenze des flüssigen Natriums eingezeichnet. Die Rechenergebnisse geben die Ausbreitungstendenz der Blase hauptsächlich nach oben (stromabwärts) qualitativ gut wieder. Für den Bereich unterhalb der Versagensstelle ergibt sich, konsistent mit dem zu geringen Natriumtrieb, ein im Vergleich zum Versuchswert langsames Wachstum der Blase. Die errechnete Lage der Phasengrenze stromabwärts liegt dagegen stets vor dem experimentellen Wert

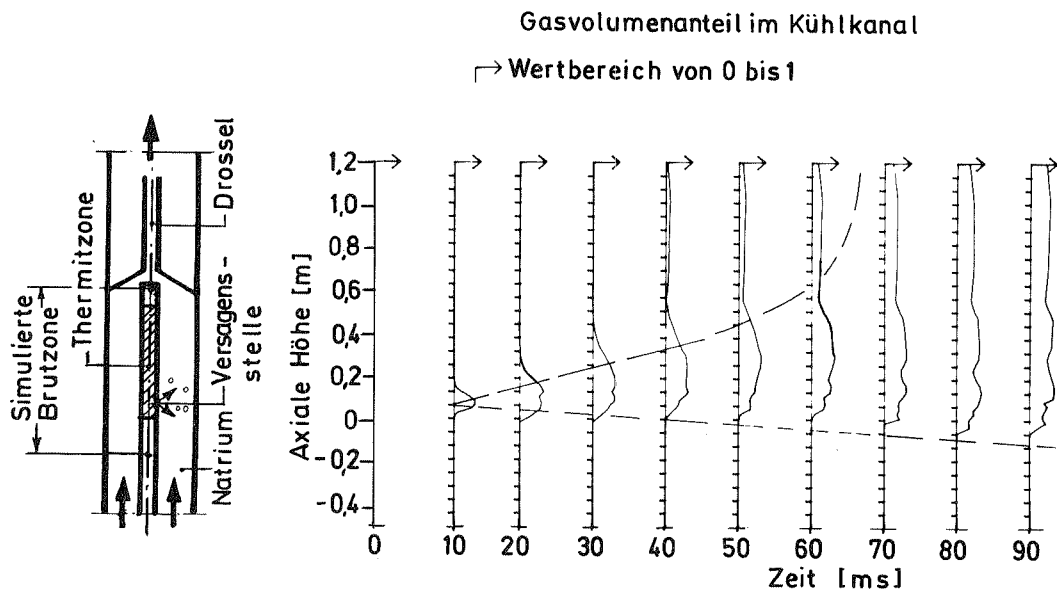


Abb. 6.20 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Gasvolumenanteils im Kühlkanal

Die Hauptursache der gezeigten Diskrepanz liegt vermutlich bei der numerischen Diffusion (s.Kap. 6.1.3). Der angesprochene Unterschied ist teilweise auch auf den getroffenen Annahmen bei der Ermittlung des experimentellen Verlaufs /39/ zurückzuführen. Diese Annahmen betreffen eine vorausgesetzte waagerechte Phasengrenze und die Vernachlässigung von Natriumfilmen, die nach Ausbreitung der Gas/Dampfblase auf Strukturen haften bleiben. Beide Effekte bewirken die Ermittlung einer zu langsamen Fortbewegung der Phasengrenze. Ein weiterer Grund

für die angesprochene Unstimmigkeit liegt bei der Darstellung der Rechenergebnisse, bei denen stets die Voidwerte der Maschenmitten mit Linien verbunden werden. Da die Maschenweiten im oberen Thermitbereich und in der Drossel eher lang sind, wird ein Vorseilen der Phasengrenze vorgetäuscht.

Im Stabinneren nimmt der berechnete Thermitvolumenanteil über weite axiale Bereiche der Thermitzone relativ homogen ab (Abb. 6.21). In der Nähe der Versagensstelle kommt es durch die ausgeprägte radiale Bewegungsrichtung des Thermits zu einer kurzzeitigen Entleerung, die später durch Massentransport aus anderen axialen Bereichen ausgeglichen wird. Es treten auch kurzzeitige Erhöhungen des Thermitvolumenanteils (Verdichtungen) in der Nähe der Versagensstelle auf. Die gezeigte Thermitumverteilung im Stabinneren einschließlich

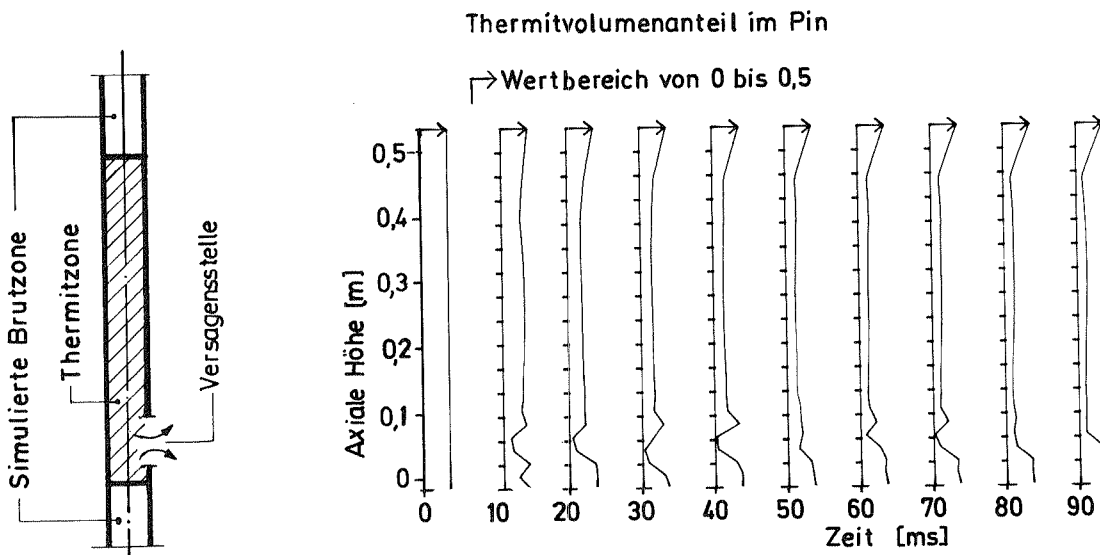


Abb. 6.21 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Thermits im Stabinneren

der kurzzeitigen Verdichtungen entspricht im qualitativen Sinne den Filmbeobachtungen (s. Kap. 6.3.1.2).

Die zeitliche Entwicklung der axialen Thermitumverteilung im Kühlkanal ist in Abb. 6.22 dargestellt. In der Nähe der Versagensstelle entsteht zunächst eine Zone mit höherer Konzentration von Thermit, die sich nach 30 - 40 ms durch Massentransport hauptsächlich nach oben ausweitet und homogenisiert. Innerhalb



der Zeitspanne von 100 ms liegt der maximale Wert des Thermitvolumenanteils meistens unterhalb 20 %. Die genaue Überprüfung der berechneten Thermitumverteilung kann nicht anhand von Versuchsdaten erfolgen und zwar aus Gründen, die im Kap. 6.3.1.2 diskutiert wurden. Die post-mortem-Untersuchungen der Teststrecke sowie Beobachtungen der Röntgenfilme lassen jedoch den Schluß zu, daß die berechnete Verteilung des Thermits der Realität sehr nahe kommt.

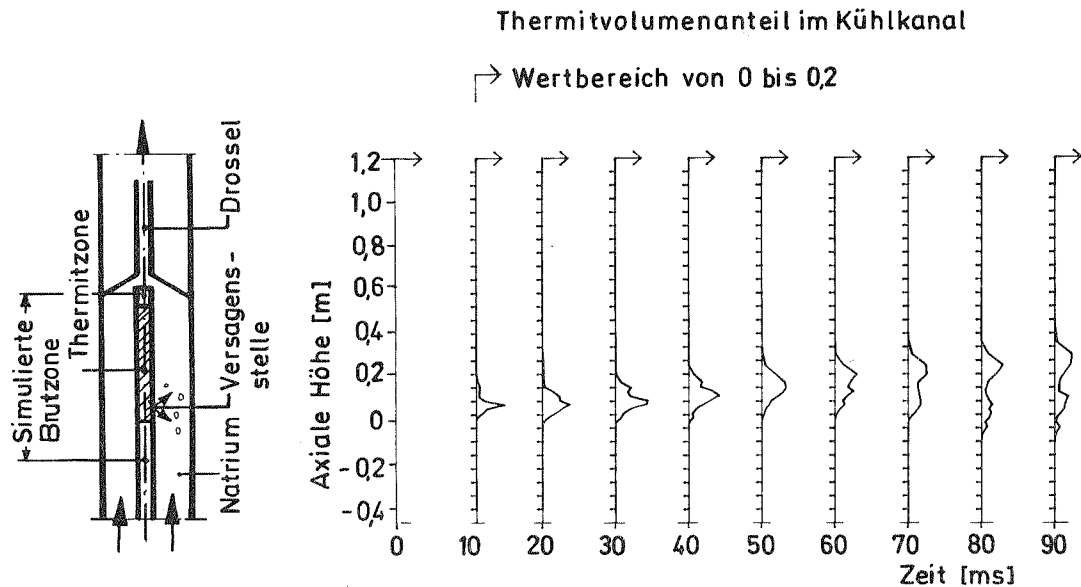


Abb. 6.22 Zeitliche Entwicklung der axialen Verteilung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal

Zusammenfassend ist festzustellen, daß der Vergleich wichtiger Versuchsdaten des SIMBATH-Experimentes  $V_{th} 71/2$  mit den CALIPSO-Ergebnissen für die ersten 40 ms nach Stabversagen für alle Größen eine relativ gute Übereinstimmung der mittleren Zeitverläufe liefert. Die erzielten Rechenergebnisse liegen insgesamt näher an den Versuchsdaten als es bei der veröffentlichten Fassung von CALIPSO der Fall ist /14, 112/.

#### 6.3.1.4.2 Einfluß modellierter Strömungsformen

Der Einfluß der in CALIPSO modellierten Strömungsformen wird in diesem Kapitel am Beispiel des berechneten zeitlichen und örtlichen Verlaufs einiger wichti-

ger physikalischer Größen aufgezeigt. Die gezeigten Daten stammen aus der bereits dargestellten Analyse des Versuchs  $V_{th}$  71/2 mit CALIPSO. Geeignete experimentelle Vergleichsdaten sind nicht verfügbar.

Die berechnete axiale Verteilung der Strömungsformen im Kühlkanal ist in der Abb. 6.23 angegeben. In der Darstellung wurde einfachheitshalber die Unterteilung in Natrium- oder Thermitfilmströmungen (s. Abb. 4.2) unterlassen.

Durch das ausströmende Gas bildet sich recht schnell in der Masche der ersten Versagensstelle eine Zone mit Filmströmung, die sich später, der Expansion der Gasblase im Kühlkanal entsprechend, hauptsächlich nach oben ausweitet. Der Filmströmungsbereich endet oben und unten mit einem axialen Abschnitt von Übergangsströmung, der dann in ein Gebiet mit Blasenströmung, das modellmäßig auch die Einphasenströmung umfaßt, übergeht. Eine ähnliche axiale Verteilung der Strömungsformen ist aus Wasser-Siedeversuchen bekannt /z.B. 35/. Für Zeiten größer als  $t = 25$  ms verschiebt sich die untere Grenze des Filmströmungsgebietes nach oben als Folge des erwähnten, zu frühen Wiederflutens der Teststrecke mit flüssigem Natrium.

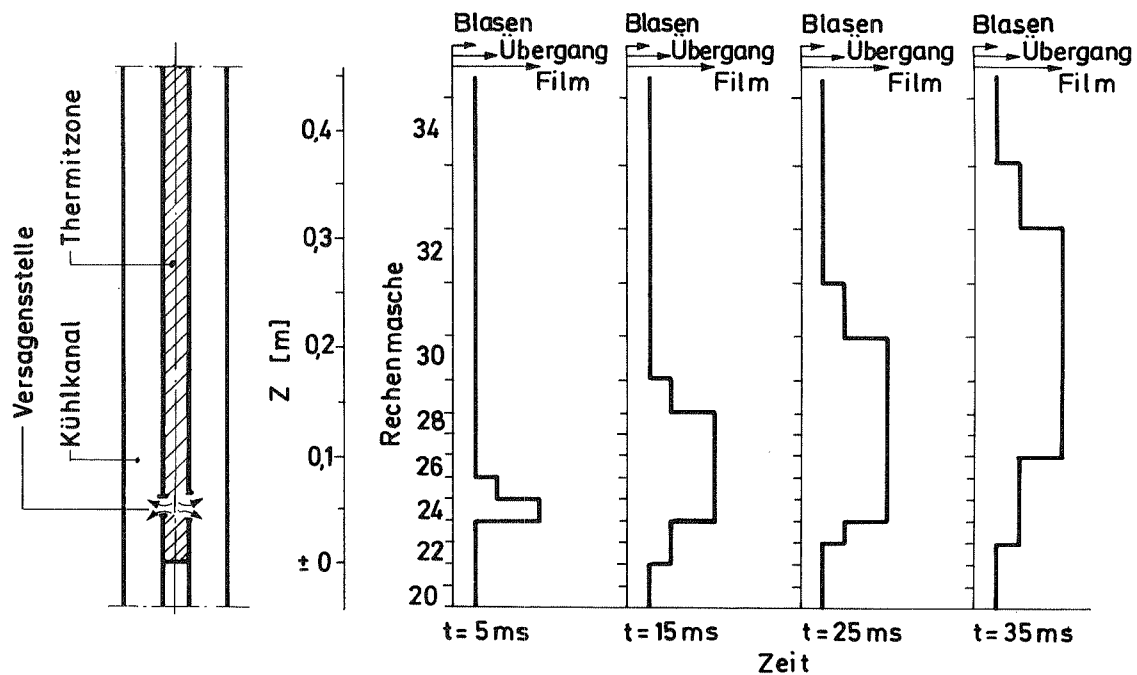


Abb. 6.23 Berechnete axiale Verteilung der Strömungsformen im Kühlkanal

Die Zeitverläufe einiger charakteristischer physikalischer Größen sind am Beispiel der berechneten Werte der Stabmasche 27 in der Abb. 6.24 zusammengefaßt. Die Strömungsform an der axialen Position ist zunächst die Übergangsströmung. Ab  $t = 12$  ms sind die Bedingungen für die Filmströmung erreicht, und sie bleiben auch bis zum Durchschmelzen der Stabhülle während der nächsten 25 ms bestehen. Nach Öffnen der Masche in radialer Richtung wird im Modell auf Tropfenströmung umgeschaltet.

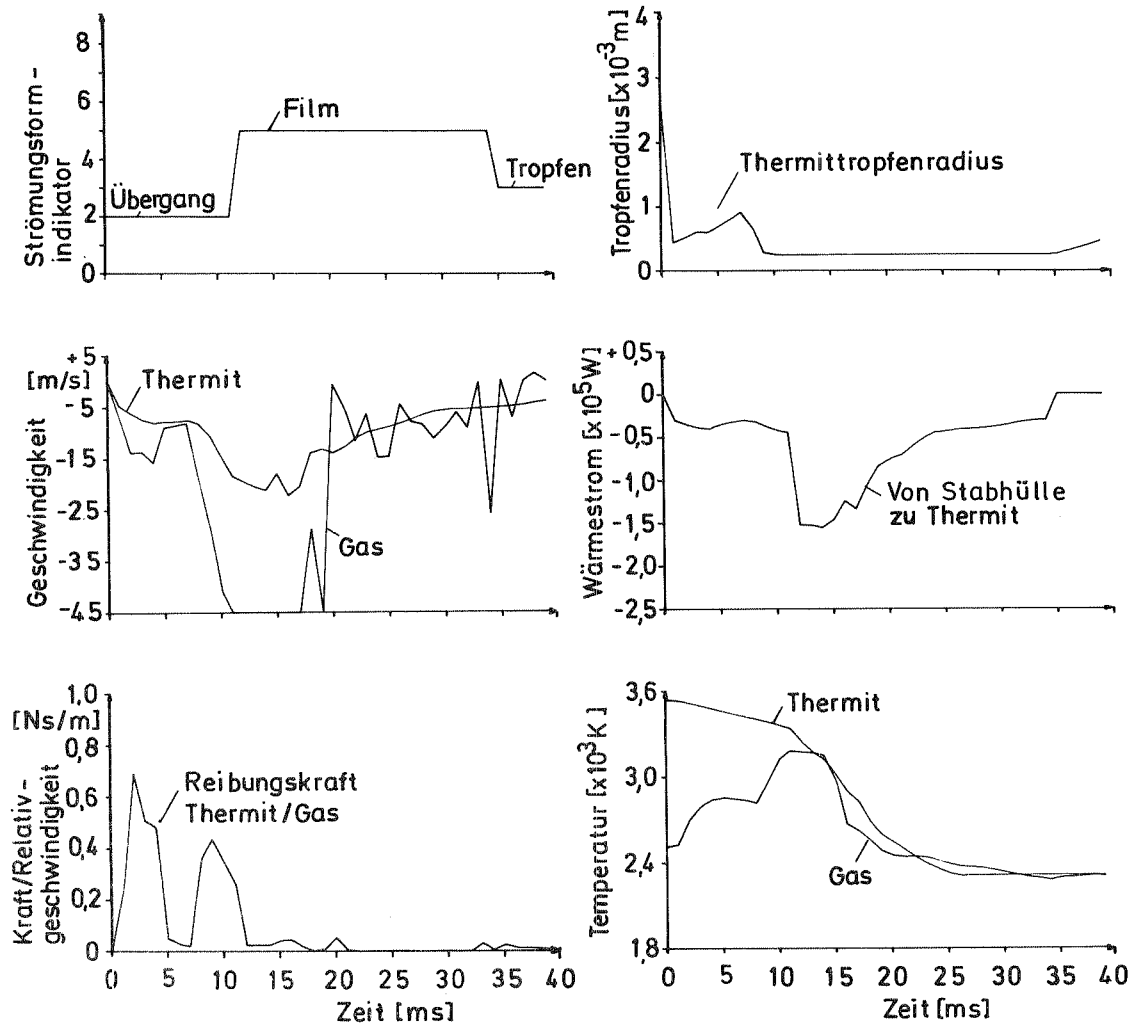


Abb. 6.24 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen auf berechnete physikalische Größen im Stabinneren. Alle Daten entsprechen der Masche 27 (Höhe + 0,1 m)

Der Verlauf der Thermit- und Gasgeschwindigkeiten zeigt durch den negativen Betrag eine Bewegung in Richtung Versagensstelle an. Dies entspricht auch dem sich einstellenden Druckgradienten nach Stabversagen. Bedingt durch die geringe Trägheit des Gases im Vergleich zum Thermit wird das Gas zunächst stärker beschleunigt. Dies führt nachfolgend zur Erhöhung der Zwischenphasenreibung (s. Abb. 6.24) und dadurch zum Abbremsen des Gases. Im weiteren Verlauf bis  $t = 7$  ms bleibt der Schlupf dieser Komponenten relativ gering. Ab diesem Zeitpunkt wächst die Öffnung der Versagensstelle an (Gl. 6.9) und Gas und Thermit werden erneut beschleunigt. Die stärkere Beschleunigung von Gas ist z.T. auf die verminderte Zwischenphasenreibung für Übergangsströmungen mit erhöhtem Gasvolumenanteil zurückzuführen.

Ab  $t = 12$  ms stellt sich Filmströmung mit der charakteristischen geringen Zwischenphasenreibung ein. Die Gasgeschwindigkeit nimmt dadurch erneut zu. Im Verlauf der Thermitgeschwindigkeit ist eine Steilheitsänderung festzustellen, die durch geringere Mitschleppwirkung des Gases bei der Filmströmung entsteht. Der rasche axiale und radiale Gastransport sowie der Gegendruckaufbau im Kühlkanal führen ab ca. 16 ms zur Verminderung der Druckgradienten in  $r$ - und  $z$ -Richtung. Zusammen mit der Wandreibung führt dies zur Abnahme der Thermitgeschwindigkeit. Die Gasgeschwindigkeit nimmt ebenfalls ab, zeigt jedoch in ihrem Verlauf Schwankungen, die durch kleine Druckgradientänderungen verursacht werden und von der zu geringen Zwischenphasenreibung nur schwach geglättet sind. Ähnliche Zusammenhänge finden auch nach der Einstellung von Tropfenströmung statt, obwohl die Reibungskraft durch die Erhöhung der Phasengrenzfläche etwas zunimmt.

Die zeitliche Entwicklung des Thermittropfenradius in dieser Masche ist ebenfalls in der Abb. 6.24 dargestellt. Infolge der erstmals auftretenden Relativbeschleunigung von Thermit und Gas findet eine rasche Zerteilung der Tropfen statt. Im weiteren Verlauf nimmt der Radius wieder zu durch Zusammenfügen einzelner Tropfen nach Kollisionen. Die Relativgeschwindigkeit der Phasen ist zu diesem Zeitpunkt zu gering, um eine ausgeprägte Zerteilung der Tropfen herbeizuführen. Nach erneuter Erhöhung der Relativgeschwindigkeit von Thermit und Gas zerteilen sich die Tropfen bis auf den vorgegebenen minimalen Radius. Bei Einsetzen der Tropfenströmung kommt es durch Tropfenzusammenfügung wiederum zu einem leichten Radiuszuwachs. Die aufgezeigte Dynamik der Tropfenradien ist im qualitativen Sinne auch auf den Röntgenfilmaufzeichnungen zu

beobachten.

In den Temperaturverläufen von Thermit und Gas (Abb. 6.24) zeigt sich der Einfluß der Änderungen von Relativgeschwindigkeit und Phasengrenzfläche auf den Wärmeübergang zwischen diesen Komponenten. So ergibt sich z.B. bei  $t = 4$  ms ein verminderter Zuwachs der Gastemperatur trotz erhöhter Relativgeschwindigkeit. Die Ursache dafür liegt im größeren Tropfenradius des Thermits, also in der geringeren Wärmeaustauschfläche. Später nehmen die sowohl die Austauschfläche (nach erfolgter Tropfenzerteilung) als auch die Relativgeschwindigkeit Thermit-Gas wieder zu, und es kommt ab  $t = 13$  ms zum Temperaturausgleich. Während des Bestehens der Filmströmung (ab  $t = 12$  ms) sind die Wärmeaustauschfläche und die Temperaturdifferenz relativ gering. Es können Abweichungen in den Temperaturverläufen auftreten, wie z.B. die schnellere Abnahme der Gastemperatur durch Expansion oder sogar zeitweilige höhere Gastemperaturen im Vergleich zum Thermit. Nach Einsetzen der Tropfenströmung ergibt sich wiederum eine stärkere Kopplung der Temperaturverläufe, die auch durch die erhöhte Austauschfläche im Vergleich zur Filmströmung bedingt ist.

Die Thermittemperatur zeigt, durch den Wärmefluß zur Stabhülle bedingt, eine stetige Abnahme. Bei Einsetzen der Filmströmung nimmt die Temperatur durch den höheren Wärmestrom zum Hüllrohr schneller ab. Ab etwa 25 ms wird die Schmelztemperatur des Aluminiumoxids aus dem Thermit erreicht. Das CALIPSO-Modell sieht ein Erstarren dieser Komponente nur innerhalb des Gemisches vor, und dementsprechend bleibt die mittlere Thermittemperatur bis zur vollständigen Abgabe der Schmelzwärme konstant.

Der zeitliche Verlauf einiger Größen im Kühlkanal ist anhand der Ergebnisse für eine typische Rechenmasche (Masche 27) in der Abb. 6.25 aufgezeigt.

Der Strömungsformindikator für diese Masche des Kühlkanals zeigt folgende Reihenfolge der Strömungsformen: Nach der Blasenströmung tritt kurzzeitig Übergangsströmung und später länger andauernde Filmströmung auf. Ab etwa 14 ms bilden sich auf der Stabhülle und auf der Teststreckenwand Natriumfilme aus. Bei  $t = 25$  ms ist der Film auf der Stabhülle ausgetrocknet. Ein Thermitfilm baut sich auf und bleibt bis zum Durchschmelzen der Stabhülle bei  $t = 34$  ms bestehen. Der Natriumfilm auf der Kühlkanalwand bleibt wegen der Kühlwirkung der "kalten" Struktur und dem gleichzeitigen geringen Wärmeübergang Thermit-

Natrium bei einer Filmströmung erhalten. Durch das frühzeitige Wiederfluten wird später flüssiges Natrium aus dem darunterliegenden Bereich in die Masche 27 befördert. Auf die Existenz von flüssigem Natrium längere Zeit nach Stabversagen in Gebieten, in denen nur Thermit und Gas vermutet wird, deutet auch der Ablauf eines SIMBATH-19-Stabversuchs hin /113/.

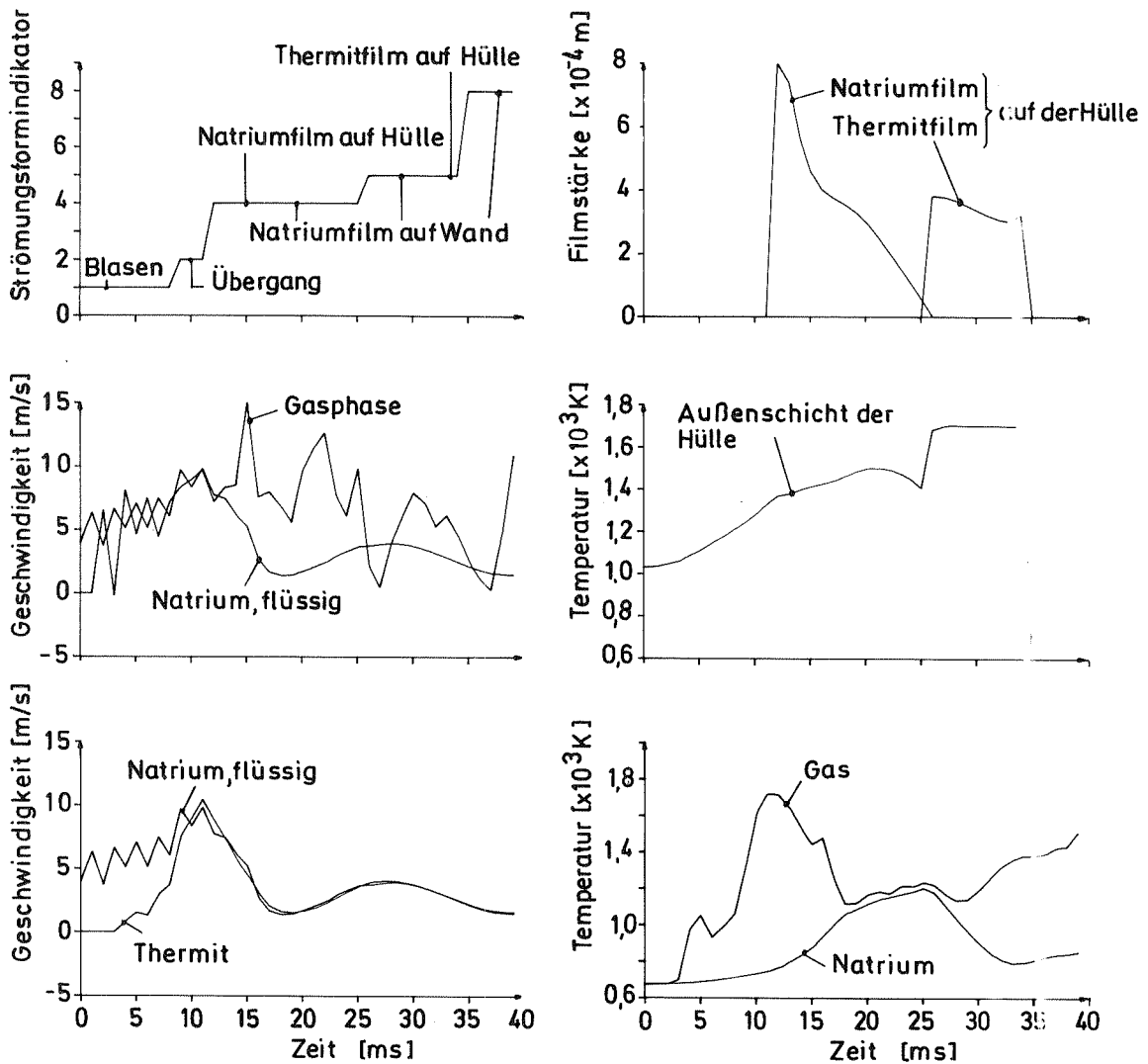


Abb. 6.25 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen auf berechnete physikalische Größen im Kühlkanal. Alle Daten entsprechen der Masche 27 (Höhe + 0,1 m)

Der Geschwindigkeitsverlauf der Gasphase zeigt erwartungsgemäß bei Blasen und bei Übergangsströmung eine recht starke Bindung an die Natriumgeschwindigkeit (Abb. 6.25). Erst das Umschalten auf Filmströmung bewirkt die Entkopplung der Verläufe durch die stark reduzierte Reibungskraft zwischen diesen Komponenten. Ein existierender axialer Druckgradient im Zusammenhang mit der unterschiedlichen Trägheit dieser Stoffe führt somit zum größeren Phasenschlupf.

Wie auch im Stabinneren werden im Kühlkanal die durch Druckwellenausbreitung verursachten Schwankungen der Gasgeschwindigkeit nur schwach von der Reibungskraft Natrium-Gas gedämpft.

Thermit tritt erst ab  $t = 4$  ms in die Masche 27 des Kühlkanals ein. Durch Einwirken des Druckgradienten und der Reibungskraft mit dem flüssigen Natrium und mit der Gasphase wird das Thermit beschleunigt, bis sich ab  $t = 10$  ms seine Geschwindigkeit an die der anderen Komponenten annähert (Abb. 6.25). Nach Eintreten der Natriumfilmströmung ist im gezeigten Beispiel der berechnete Schlupf zwischen den Thermitropfen und dem Film nicht stark ausgeprägt. Dazu tragen zwei Effekte, die sich gegenseitig aufheben, bei. Die Reibung zwischen Gas und Thermitropfen ist größer als die zwischen Gas und Natriumfilm. Dafür hat aber das Thermit eine höhere Trägheit als das Natrium. Auch bei den anderen, später einsetzenden Strömungsformen haben Thermit und flüssiges Natrium ähnlich verlaufende Geschwindigkeiten mit geringem Schlupf.

In der Abb. 6.25 ist die Filmstärke des Natrium- und des Thermitfilms auf der Stabhülle ebenfalls dargestellt. Der Natriumfilm, der bei  $t = 12$  ms initialisiert wird, nimmt sowohl durch den Abtransport wie auch durch das Verdampfen rapide ab. Nach Austrocknen dieses Films kann sich ein Thermitfilm auf der Stabhülle aufbauen. Dieser Film bleibt bis zum Durchschmelzen der Hülle bei  $t = 35$  ms bestehen und wird danach als Tropfen im Gasbereich des Kühlkanals verteilt. Die geringe Abnahme des Films trotz einer existierenden Abtragung entsteht durch den Tropfenniederschlag aus dem Gasbereich und durch die Massenzunahme infolge von hinzukommenden geschmolzenen Stahl der Stabhülle.

Die Existenz von unterschiedlichen Filmen auf einer Struktur beeinflusst auch den Wärmestrom. Als Beispiel ist in Abb. 6.25 die Temperatur der Außenschicht der Stabhülle eingetragen. Die Temperatur nimmt zunächst zu, da die Wärmezufuhr von den Innenschichten der Hülle stärker als die Kühlwirkung des Natriums

auf der Außenseite ist. Der Natriumfilm auf dieser Struktur bewirkt später ein zeitlich begrenztes Abkühlen der Stahlschicht trotz erhöhten Wärmeübergangs durch den Thermitfilm an der Innenseite (vergl. Abb. 6.24). Nachdem sich der Thermitfilm auch auf der Hüllrohräußenseite ausgebildet hat, wird der Stabhülle Wärme von beiden Seiten zugeführt und demzufolge steigt die Temperatur steil an und erreicht den Stahlschmelzpunkt. Das Durchschmelzen der Stabhülle findet bei  $t = 35$  ms statt.

Die mittlere Natriumtemperatur in der Masche 27 (Abb. 6.25) steigt durch die zugeführte Wärme von der Stabhülle und von Thermit an. Nachdem der Natriumfilm auf der Stabhülle ausgetrocknet ist, reicht der Wärmestrom von den Thermitropfen im Gasbereich nicht mehr aus, um die Kühlwirkung der "kalten" Kühlkanalwand auszugleichen. Die Temperatur des Natriums nimmt ab.

Die Gastemperatur im Kühlkanal steigt durch den Transport von heißem Gas aus der Versagensmasche zunächst an. Ab etwa  $t = 10$  ms nimmt die Gastemperatur wegen der Wärmeverluste an Strukturen und Natrium ab. Der Wärmestrom von Thermit zum Gas kompensiert diese Wärmeverluste nicht. Bei ausreichend vorhandenem Natriumdampf gleicht sich im späteren Verlauf, durch die angenommene intensive Vermischung bedingt, die Gastemperatur an die des Natriums an. Ab  $t = 28$  ms kommt es nach Kondensation des Dampfes zum Temperaturanstieg, hauptsächlich durch die Wärmezuführung vom Thermit.

Die Zeitverläufe von berechneten physikalischen Größen im Kühlkanal und im Stabinneren (Abbn. 6.24 und 6.25) zeigen, daß sich jede der Strömungsformen sowie die angenommenen Energie- und Impulsaustauschmodelle in den Rechenergebnissen in unterschiedlichster Weise widerspiegeln. Die gezeigten Zusammenhänge sind mit den Modellvorstellungen konsistent und können als indirekter Beweis von deren richtigen Umsetzung in das Programmsystem CALIPSO angesehen werden.

#### 6.3.1.5 Ergebnisse der Parametervariation

Ausgangsbasis für die nachfolgend dargestellten Auswirkungen einiger wichtiger Parameter auf die CALIPSO-Rechenergebnisse sind die angenommenen Anfangsbedingungen und der Modellparametersatz, die der bereits diskutierten Analyse des



SIMBATH-Referenzversuchs  $V_{th}$  71/2 (Referenzlauf FM) zugrunde liegen. Die betrachteten Fälle beziehen sich auf Parameter, die entweder durch die SIMBATH-Versuchsdaten nicht genügend abgesichert sind (wie die Anfangsbedingungen), oder auf Modelle, deren experimentelle Verifikation schwierig ist (wie z.B. der Wärmeübergang Thermit-Natrium oder die Auswirkungen unterschiedlich modellierter Strömungsformen auf die Rechenergebnisse eines SIMBATH-Einzelstabversuchs). Einige Aspekte, verbunden mit dem numerischen Lösungsverfahren in CALIPSO, sind ebenfalls in diesem Kapitel aufgenommen. Die analysierten Parametervariationen stellen nur eine Auswahl wichtiger Größen aus der Vielzahl von Parametern und Modellen sowie deren möglichen Kombinationen dar. Die Diskussion der Auswirkungen von Modell- und Parameteränderungen beschränkt sich auf Größen, die im SIMBATH-Versuch auch gemessen (oder abgeschätzt) werden können, da die anderen berechneten Größen nur schwerlich eine problembezogene Bewertung ermöglichen.

#### 6.3.1.5.1 Einfluß von Anfangsbedingungen

##### Größere Öffnung der Versagensstelle (Rechenlauf FR)

Im Rechenlauf FR wird für die Zeitspanne bis 15 ms nach Stabversagen von einem doppelt so hohen Porositätswert als im Referenzfall ausgegangen (s. Gl. 6.14).

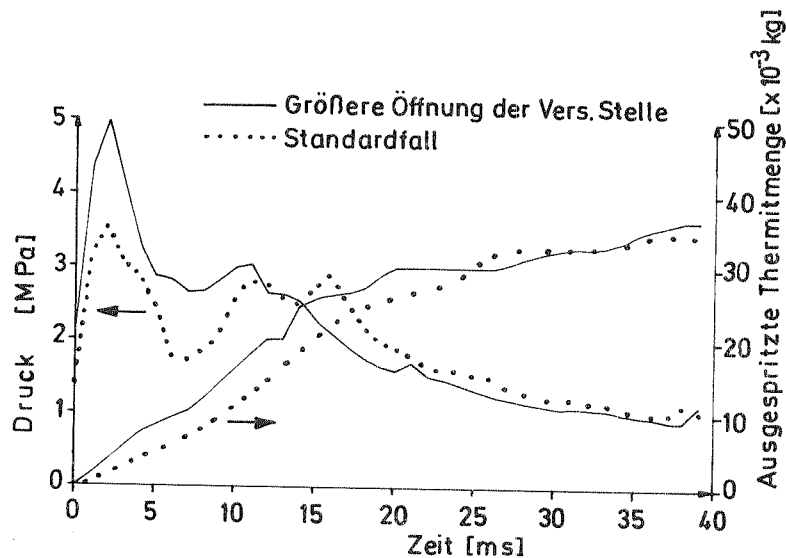


Abb. 6.26 Einfluß der größeren Öffnung der Versagensstelle auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Masche 24, Höhe + 0,05 m) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmenge

Der Druckverlauf (Abb. 6.26) in der Versagensmasche des Kühlkanals zeigt eine um 1,4 MPa höhere Anfangsdruckspitze, bewirkt durch den höheren Massenstrom von ausgespritztem Gas und Thermit. Dem höheren Druckaufbau entsprechend, werden die Natriumsäulen in beiden axialen Richtungen stärker beschleunigt bzw. wächst die Blase im Kühlkanal rascher als im Referenzfall an. Dies hat die Verminderung des Gasdruckes zur Folge, die weder durch den erhöhten Natriumdampfdruck (bedingt durch erhöhte Wärmeabgabe einer größeren Thermitmenge zum Natrium) noch durch die nachströmende Gasmenge aus dem Stabinneren abgefangen wird. Der Druckaufbau bleibt deshalb bis  $t = 40$  ms unterhalb des Verlaufs für den Standardfall.

Im Stabinneren stellt sich durch den größeren ejizierten Massenstrom von Gas ein größerer Druckgradient ein, der Gas und Thermit in Richtung Versagensstelle verstärkt beschleunigt. Die Komponenten erreichen höhere Geschwindigkeiten, der Wärmestrom in der Stabhülle nimmt zu und als Folge davon breitet sich die Versagensstelle durch Abschmelzen rascher aus, als es im Referenzlauf der Fall ist.

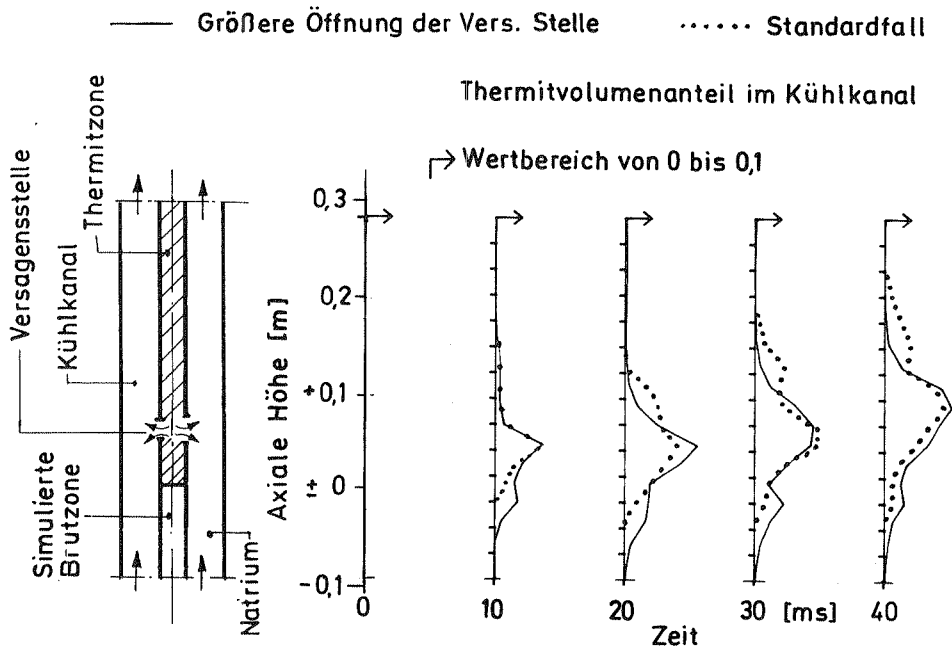


Abb. 6.27 Einfluß der größeren Öffnung der Versagensstelle auf die Thermitumverteilung im Kühlkanal

Die geänderten Strömungsbedingungen im Mehrphasenbereich des Stabinneren und des Kühlkanals führen über die sich zeitlich ergebenden unterschiedlichen Umschaltunkte der Strömungsformen teilweise zu anderen momentanen Werten der Geschwindigkeiten, Drücke, Temperaturen u.a. Die Materialumverteilung wird daher auch beeinflusst. Als Beispiel ist in Abb. 6.27 die axiale Ausbreitung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal aufgezeigt. Im Bereich unterhalb der Versagensstelle breitet sich im Lauf FR die Gasblase stärker als im Standardfall aus und ermöglicht auch ein tieferes Vordringen des Thermits in diese Richtung. Oberhalb der Versagensstelle wird im Rechenlauf FR das Thermit über eine geringere axiale Strecke transportiert und dies trotz der weiteren Ausdehnung der Blase. Die Ursache liegt in der insgesamt verminderten Mitschleppwirkung der Gasphase als Folge der früher einsetzenden und sich über weitere axiale Bereiche ausdehnenden Filmströmung. Auf der Basis der Versuchsergebnisse erscheinen beide Materialumverteilungen als möglich.

#### Gas teilweise in Thermit gelöst (Rechenlauf FS)

Nach dem Ablauf der chemischen Thermitreaktion im Stabinneren ist es nicht auszuschließen, daß ein Teil des Gases in Lösung bleibt und erst nach Stabversagen freigesetzt wird. Eine mögliche Zeitfunktion der Gasfreisetzung geht von 30 % Gasmenge aus, die bei Stabversagen in Lösung ist, und einer Zeitspanne von 30 ms für dessen Freisetzung:

$$X_{fg} = \{ 3,4 + 0,73 [\cos(\pi / 30 \cdot 10^{-3} t - \pi) + 1] \} \cdot 10^{-3} ; t \leq 30 \cdot 10^{-3} \text{ s} \quad (6.16)$$

$$X_{fg} = 4,86 \cdot 10^{-3} ; t > 30 \cdot 10^{-3} \text{ s}$$

Die geringere Gasmenge im Stabinneren bedeutet bei Stabversagen auch einen geringeren Druckaufbau (s. Abb. 6.28). Es wird weniger Gas und Thermit in den Kühlkanal injiziert, und somit ist die Amplitude der ersten Druckspitze kleiner als im Standardfall. Auch im weiteren Verlauf bis  $t = 20$  ms liegt der Druckaufbau im Kühlkanal unterhalb der Referenzkurve. Dafür ist nicht nur die geringere Gasmenge, sondern auch seine geringere Temperatur verantwortlich. Das Gas, das in den Kühlkanal eintritt, wird im Stabinneren weniger stark aufgeheizt, da auch die Relativgeschwindigkeit von Thermit und Gas durch den geringeren Druckgradienten im Stabinneren geringer ist. Im Kühlkanal wird das Gas recht schnell von Natriumdampf abgekühlt, dessen Temperatur durch die

etwas geringere ausgespritzte Thermitmenge ebenfalls niedriger als im Referenzfall liegt. Nach  $t = 15$  ms tritt verstärkt das Nachgasen des Thermits auf, und es entsteht zusätzliches Gas mit der Temperatur von Thermit. Der Druckaufbau im Rechenlauf FS gleicht sich deshalb dem Verlauf im Standardfall an.

Das Nachgasen von Thermit wirkt sich auch auf die berechnete gesamte ausgespritzte Thermitmasse in dem Kühlkanal aus (Abb. 6.28). Der geringere Druckaufbau im Stabinneren führt im Rechenlauf FS zunächst zu einer geringfügig verringerten ausgetretenen Thermitmenge. Das später freigesetzte Gas bewirkt die Entstehung zusätzlicher Druckgradienten und somit einen verstärkten Transport von Gas und Thermit axial in Richtung Versagensstelle und radial in den Kühlkanal hinein. Dieses Ergebnis zeigt die Auswirkungen einer nach Stabversagen noch nicht abgeschlossenen chemischen Reaktion und einer entsprechenden Gasfreisetzung auf den Massentransport aus dem Stabinneren. Die Berücksichtigung dieses Phänomens (das auch im Versuch  $V_{th} 71/2$  während etwa 13 ms beobachtet wurde) anstelle des angenommenen Abschlusses der Thermitreaktion auf der gesamten Stablänge könnte die Diskrepanz zwischen Rechnung und Messung bezüglich der ausgespritzten Thermitmenge (s. Abb. 6.18) verringern.

#### Gastemperatur bei Stabversagen (Rechenlauf FT)

In dem Rechenlauf FT wird, im Gegensatz zum Referenzfall, von Gleichheit der Anfangstemperaturen von Gas und Thermit ausgegangen. Der berechnete Einfluß dieses Parameters ist eher gering, da es auch im Referenzfall schnell (für Masche 27 nach 14 ms, s. Abb. 6.25) zu einem Temperatenausgleich im Stabinneren kommt. Für momentane Werte von berechneten Größen, wie Temperaturen, Geschwindigkeiten u.a., ergeben sich im Einzelfall Unterschiede zum Standardfall. Die Abweichungen sind geringer als in den anderen diskutierten Fällen.

#### Gleichzeitige Änderung mehrerer Anfangswerte (Rechenlauf FN)

Die Betrachtung von Ergebnissen bei einzeln geänderten Anfangsbedingungen zeigt, daß es mehrere Kombinationen dieser Parameter als nur den Referenzsatz geben muß, die - im Vergleich zu den Versuchsergebnissen - zu ähnlichen Verläufen führen können. Ein Beispiel ergibt sich bei der Anwendung eines Satzes von Anfangsbedingungen, die älteren CALIPSO-Rechnungen zugrunde liegen. Ausgangsbasis ist dabei eine große Öffnung der Versagensstelle bei Stabversagen

(20 % des Umfangs der Versagensmasche), aber 80 % des Gasinventars in Lösung. Die Zeitfunktion der Freisetzung ist prinzipiell die von Gl. 6.10 und hat ebenfalls eine Zeitkonstante von 30 ms. Die Berücksichtigung einer Gasfreisetzungsrates kann auch herangezogen werden, um das Nachreagieren des Thermits nach Stabversagen modellmäßig zu simulieren.

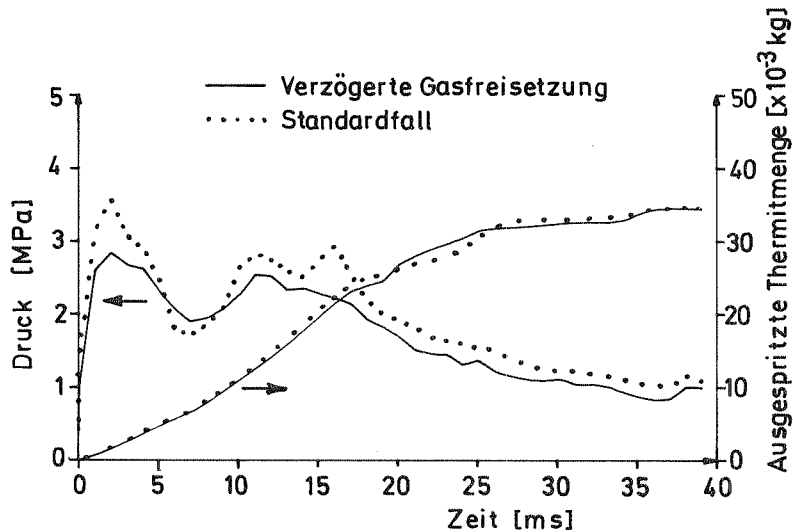


Abb. 6.28 Einfluß der verzögerten Gasfreisetzung auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Höhe + 0,05 m, Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse

Der berechnete Druckaufbau in der Versagensmasche des Kühlkanals (Abb. 6.29) liegt nahe am gemittelten Verlauf des Druckes im Standardfall und zeigt keine ausgeprägten langsameren Oszillationen, wie sie im Versuch gemessen wurden.

Der Geschwindigkeitsverlauf für die obere und für die untere Natriumsäule (hier nicht gezeigt) liegt, da er vom Zeitintegral des Druckgradienten abhängt, dagegen recht nahe an den Ergebnissen der Referenzrechnung.

Dieses Rechenergebnis gibt einen weiteren rechnerischen Hinweis auf mögliche Verfälschung des gemessenen oszillatorischen Druckverlaufs.

Der zeitliche Ablauf der Thermitumverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal zeigt im Lauf FN Unterschiede zu dem Standardfall, die im Rahmen der vorhande-

nen Versuchsergebnisse nur schwer zu bewerten sind. Der Rechenlauf FN zeigt deutlicher als die anderen Fälle die Notwendigkeit von geeigneten Versuchsdaten der SIMBATH-Experimente bezüglich der Anfangsbedingungen und der transienten Materialumverteilung für die vollständige Validierung des CALIPSO-Modells.

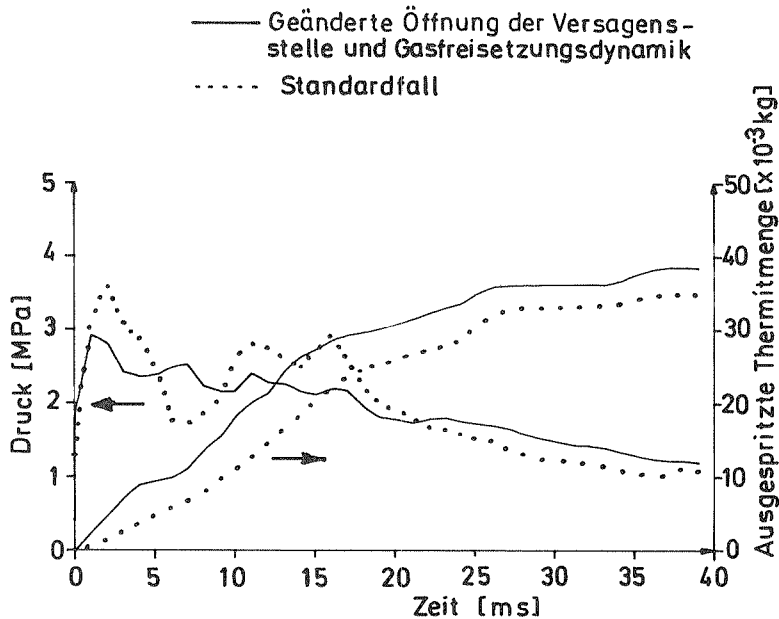


Abb. 6.29 Einfluß einer großen Versagensstelle und gleichzeitig des Nachgasens von Thermit auf den Druckaufbau im Mehrphasengebiet des Kühlkanals (Höhe + 0,05 m entsprechend Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse

#### 6.3.1.5.2 Einfluß von Modellparametern

##### Wärmeübergang Thermit-flüssiges Natrium (Rechenlauf FL)

Der Einfluß von Änderungen des Wärmeübergangsmodells von Thermit zum flüssigen Natrium auf die CALIPSO-Rechenergebnisse eines SIMBATH-Einzelstabversuchs wird im Rechenlauf FL aufgezeigt. Für Blasen-, Übergangs- und Tropfenströmung ist in diesem Rechenlauf das für CALIPSO angenommene SIMMER-Modell /13/ durch

das EPIC-Modell /8/ ausgetauscht worden. Dieses Modell führt im Einzelfall im Vergleich zur Referenzkorrelation zu einem höheren Wärmestrom von Thermit zum Natrium (s. Abb. 6.14). Trotzdem hat der Druckaufbau im Mehrphasenbereich des Kühlkanals bis  $t = 22$  ms im Mittel einen dem Referenzlauf ähnlichen Zeitverlauf (Abb. 6.30).

Dieses Ergebnis ist auf das nur über relativ kurze Zeit in dieser Masche zum Einsatz kommende EPIC-Modell zurückzuführen, da Filmströmung infolge der verstärkten Dampfbildung durch den berechneten intensiven Wärmeübergang Thermit-Natrium auch früher als im Referenzfall auftritt. Der Druckaufbau im Rechenlauf FL liegt nach etwa  $t = 3$  ms sogar niedriger als der Standardverlauf. Dieses Verhalten entsteht durch eine niedrigere Gastemperatur im Kühlkanal, die einer früher einsetzenden Kühlung des Gases durch Vermischen mit Natriumdampf entspricht. Die größeren Mengen von Natriumdampf sind ebenfalls auf den intensiven Wärmeübergang Thermit-Natrium zurückzuführen.

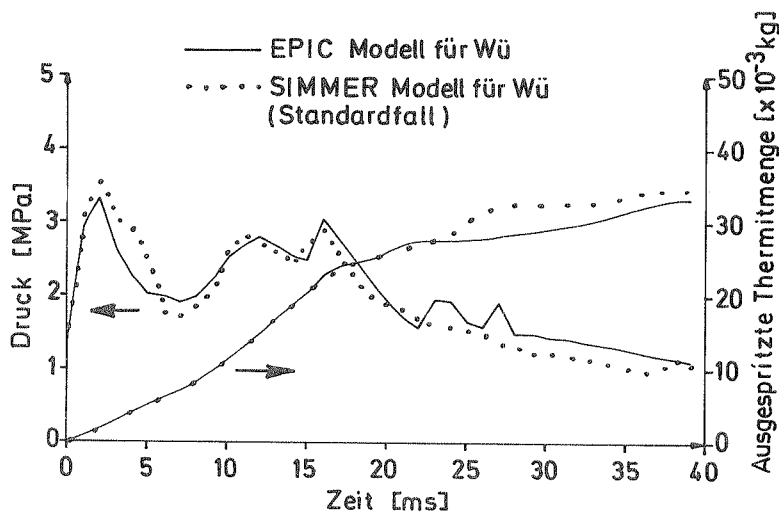


Abb. 6.30 Einfluß der Anwendung des EPIC-Wärmeübergangsmodells Thermit-Natrium auf den berechneten Druckaufbau im Kühlkanal (Höhe + 0,05, Masche 24) und auf die gesamte ausgespritzte Thermitmasse

Ab  $t = 22$  ms findet ein frühzeitiges Wiederfluten des Teststreckenbereiches statt. Die Temperatur des Natriums und sein Dampfdruck nehmen zu, was letztendlich zur Erhöhung des Gesamtdruckes führt.

Der zusätzliche Druckaufbau bewirkt aber auch die Zunahme des Gasblasenvolumens und damit die Verminderung des Gasdruckanteils zum Gesamtdruckaufbau. Der Druck nimmt wieder ab und liegt ab  $t = 40$  ms nahe am Standardverlauf.

Der Druckaufbau ab  $t = 22$  ms entspricht für das Stabinnere einem erhöhten Gegendruck. Dementsprechend verringert sich der ausgespritzte Thermitmassenstrom, kommt jedoch, wegen der hohen Trägheit dieser Komponente, nicht zum Erliegen (s. Abb. 6.30). Im späteren Verlauf begünstigt der absinkende Druck im Kühlkanal einen verstärkten Ejektionsprozeß aus dem Stabinneren in den Kühlkanal hinein.

#### Virtuelle Masse für die axiale Bewegungsrichtung (Rechenlauf F1)

Die durchgeführte CALIPSO-Berechnung unter Berücksichtigung der Kräfte durch virtuelle Masse auch für die axiale Bewegungsrichtung, beeinflusst die ermittelten Größen nicht in einem entscheidenden Maße. Diese Kräfte wirken im Sinne einer verstärkten Kopplung zwischen den flüssigen Komponenten der Strömung und der Gasphase und sind für Film- und Tropfenströmung unbedeutend. Für Blasen- und Übergangsströmung unter der Voraussetzung starker Relativbeschleunigung, wie sie nur im Stabinneren und nur für eine kurze Zeitspanne nach Stabversagen auftreten - werden die flüssigen Komponenten verstärkt vom Gas mitgeschleppt bzw. wird die Gasphase gebremst. Dies führt zeitweilig zu einer geringfügig größeren ausgespritzten Thermitmasse. Im Kühlkanal ist der Einfluß dieser Kräfte auf die Massenumverteilung nur schwach ausgeprägt, da hier die Relativbeschleunigungen meistens gering sind.

Der Rechenlauf F1 zeigt, daß die Berücksichtigung der virtuellen Masse für die axiale Bewegungsrichtung im Rahmen der Nachrechnung von SIMBATH-Versuchen mit CALIPSO nicht ausschlaggebend ist. Die diesbezüglich von Kedziur in /14/ ausgesprochene Empfehlung bezüglich der Vernachlässigung dieser Terme für die axiale Bewegungsrichtung bleibt auch für die erweiterte CALIPSO-Version gültig.

#### Berücksichtigte Strömungsformen (Rechenlauf FP)

Im Rechenlauf FP wurde bei der Nachrechnung des Referenzversuchs  $V_{th}$  71/2 das von Kedziur in der vorherigen CALIPSO-Version /14/ angewendete homogene Bla-



sen-Tropfen-Modell (s. auch Kap. 1.3) eingesetzt. Mit Ausnahme der Strömungs-  
bilderkarte und der Korrelation zur Berechnung der Zwischenphasenreibung, die  
entsprechend verändert wurden, blieben alle anderen Modelle sowie die  
Anfangsbedingungen unverändert.

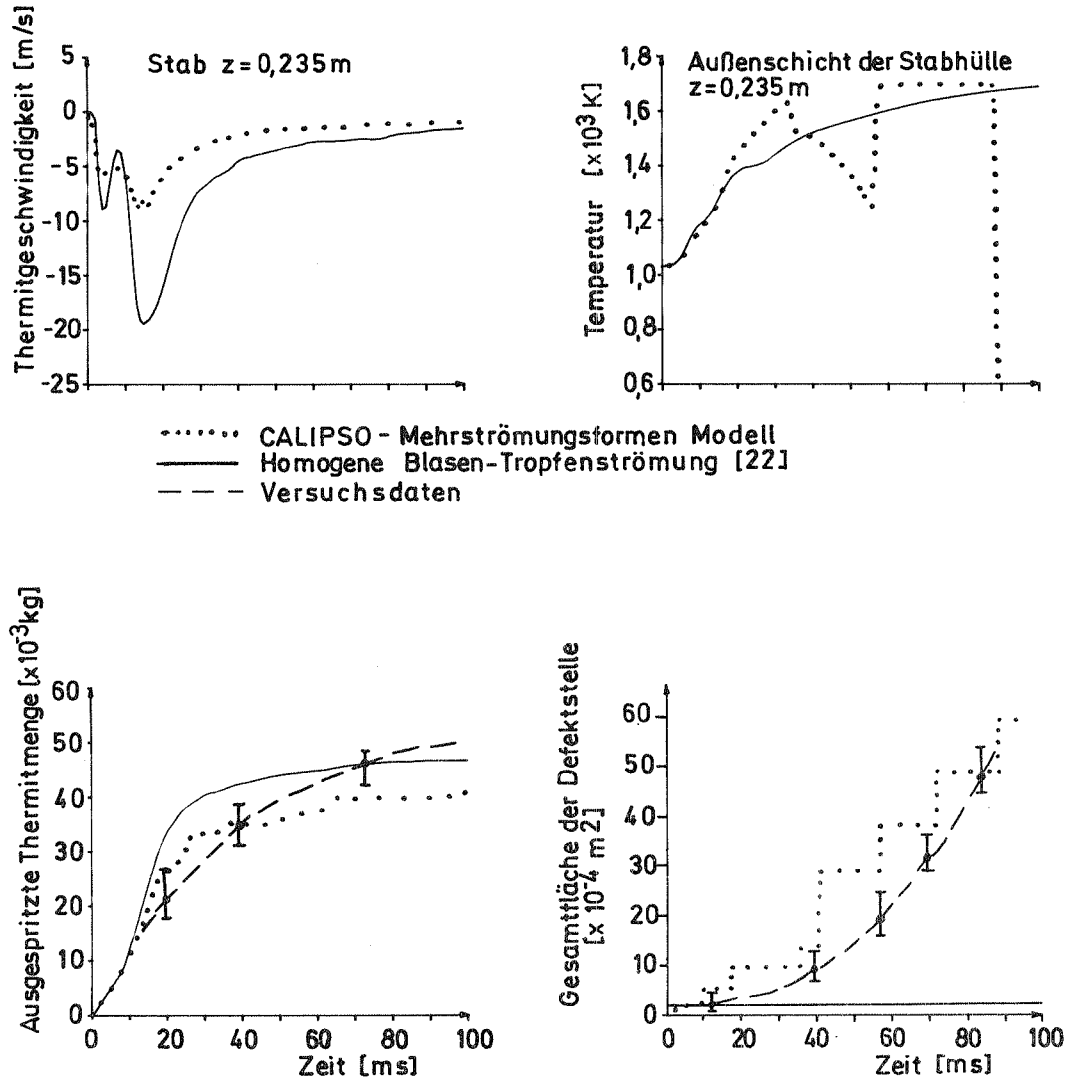


Abb. 6.31 Einfluß unterschiedlicher Strömungsformen-Modelle auf  
einige berechnete Größen

Die unterschiedlichen Ergebnisse dieses Rechenlaufes zum Referenzlauf (s. Abb. 6.31) ergeben sich als Folge der nicht betrachteten Modellierung von Filmströmung und in einem geringeren Maße von Übergangsströmung mit hohem Gasvolumenanteil. Als Konsequenz der berechneten stärkeren Phasenkopplung im homogenen Blasen-Tropfenmodell wird das Thermit im Stabinneren stärker beschleunigt, und folglich wird auch mehr Thermit (im Vergleich zu den Versuchsergebnissen zu viel) in den Kühlkanal ausgespritzt.

Der Wärmefluß zur Innenwand der Stabhülle erreicht trotz höherer Geschwindigkeit nicht den Wert für die Filmströmung. Die im Versuch festgestellte Erweiterung der Versagensstelle durch Schmelzen der Hülle wird deshalb in diesem Rechenlauf nicht wiedergegeben. Auch andere berechnete Effekte der Filmströmung, wie z.B. die Kühlwirkung der Hüllrohroberfläche durch einen verdampfenden Natriumfilm (ab  $t = 31$  ms) bzw. die rasche Temperaturzunahme dieser Struktur nach Austrocknen dieses Films (bei  $t = 56$  ms), können nicht wiedergegeben werden (s. Abb. 6.31). Es läßt sich zeigen, daß nur die zusätzliche Einbeziehung eines Filmströmungsmodells die Rechenergebnisse mit dem

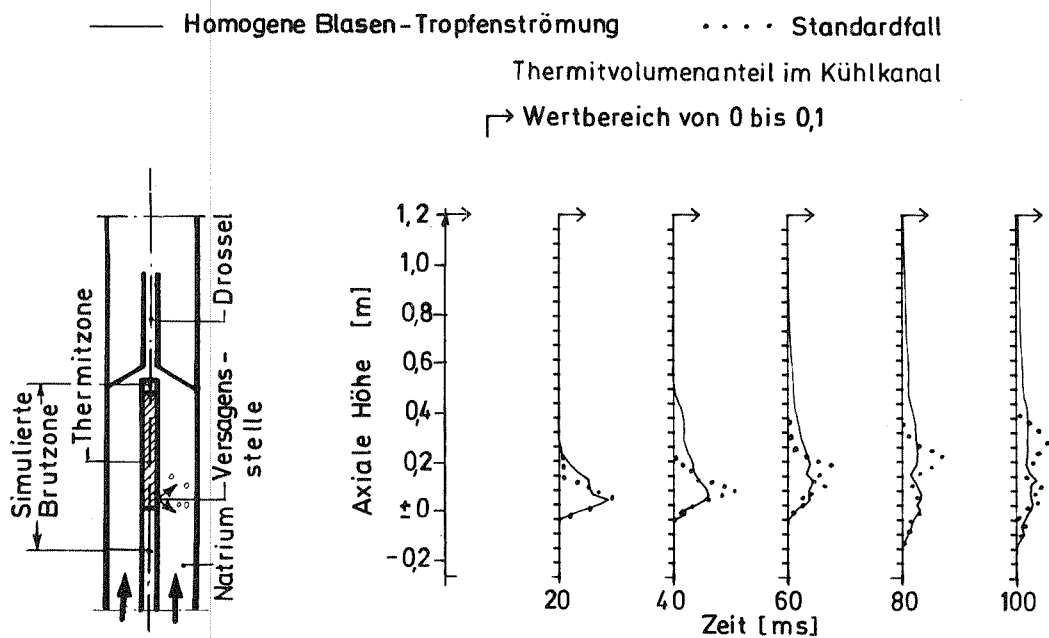


Abb. 6.32 Berechnete Verteilung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal für unterschiedliche Strömungsformen-Modelle

Kedziur-Modell derart verändern kann, daß eine notwendige gleichzeitige Verringerung der ausgespritzten Thermitmenge und Erweiterung der Defektstelle wiedergegeben wird.

Die berechnete Materialumverteilung ist, wie bereits gezeigt, von den modellierten Strömungsformen abhängig. Als Beispiel ist in Abb. 6.32 die Verteilung des Thermitvolumenanteils im Kühlkanal eingetragen. Im Rechenlauf FP wird das Thermit wegen der verstärkten Mitschleppwirkung durch die Gasphase über längere axiale Bereiche transportiert als es im Referenzlauf der Fall ist. Diese Verteilung ist weniger realitätsnah als die des Referenzlaufes.

#### 6.3.1.5.3 Einfluß numerischer Aspekte

In Verbindung mit numerischen Aspekten des CALIPSO-Modells wurde analysiert, inwiefern sich eine feinere Diskretisierung des Kreislaufes oder ein geringerer maximaler Rechenzeitschritt auf die Ergebnisse auswirkt. In beiden betrachteten Fällen werden die berechneten physikalischen Größen nur in geringem Maße beeinflusst. Die Änderungen, die sich gegenüber dem Referenzfall ergeben, sind zurückzuführen auf leicht unterschiedliche Geschwindigkeitssoszillationen bei feinerer Kreislaufdiskretisierung (s. auch /87/) und durch die Anwendung geringer Rechenzeitschritte ( $1 \cdot 10^{-6}$  s statt  $2,5 \cdot 10^{-6}$  s) auf die Aufhebung einer kurzzeitigen Druckinstabilität für Maschen von  $2 \cdot 10^{-2}$  m, die mit einphasigem Natrium gefüllt sind.

Über die in Verbindung mit der Diskretisierung auftretende numerische Diffusion der Masse (s. Kap. 6.1.3) und ihren Einfluß auf die Rechenergebnisse eines SIMBATH-Versuchs können durch fehlende Vergleichsinformationen aus den Experimenten z.Z. keine Aussagen gemacht werden.

#### 6.3.2 Einzelstabversuch $V_{th}$ 71/4

Für eine detaillierte Überprüfung der derzeitigen CALIPSO-Version eignen sich nur wenige von den bisher durchgeführten SIMBATH-Einzelstabversuchen. Das liegt z.T. an der schwierigen Bestimmung von geeigneten Anfangsbedingungen und

Zeitfunktionen für den Massenquellterm von Thermit und Gas in Versuchen, bei denen die Thermitreaktion bei Stabversagen nicht auf der gesamten Stablänge abgeschlossen ist. Die Ergebnisse der Parametervariation, die im vorherigen Kapitel dargelegt sind, zeigen deutlich den Einfluß dieser Größen auf die Rechenergebnisse. In einigen weiteren Versuchen ist bei Stabversagen über längere Zeit Natriumsieden aufgetreten. Für die Vorgabe der Anfangsbedingungen im Kühlkanal fehlen jedoch Meßdaten über die axialen Verteilungen von Void, Temperaturen und Dampfgehalt innerhalb der Siedezone. Ferner kann CALIPSO die Geometrieordnung mit einem Bypass um die Thermitzone, wie sie bei einer Anzahl von Versuchen angebracht war, sowie die sich daraus ergebende veränderte Thermohydraulik in der transienten Versuchsphase nur sehr approximativ erfassen. Schließlich ist durch Fehlen eines geeigneten Ausfriermodells in der derzeitigen Version von CALIPSO die Analyse von SIMBATH-Tests, bei denen Blockaden kurz nach Stabversagen auftreten, nicht sinnvoll durchführbar.

Als Beispiel für die Nachrechnung eines weiteren SIMBATH-Experiments mit CALIPSO sind in diesem Kapitel die Ergebnisse der Analyse von Versuch  $V_{th} 71/4 /39/$  dargestellt. Dieser Versuch erfüllt approximativ folgende wichtige Voraussetzungen für die Nachrechnung mit CALIPSO: Die Thermitreaktion ist bei Stabversagen fast abgeschlossen, im Versuchsablauf sind keine totalen Blockaden entstanden und vor Stabversagen ist der Kühlkanal größtenteils mit flüssigem Natrium gefüllt.

#### 6.3.2.1 Versuchsaufbau

Der Versuchsaufbau ist bis auf die kürzere (0,25 m) und mit größerem Innenradius (6,0 10<sup>-3</sup> m) gestaltete Drossel identisch mit dem des Referenzversuchs  $V_{th} 71/2$  (s. Kap. 6.3.1.1). Die Instrumentierung der Teststrecke entspricht ebenfalls der des Versuchs  $V_{th} 71/2$ . Infolge der größeren Gasaufladung liegt bei  $V_{th} 71/4$  der Stabinnendruck vor dem Einleiten der chemischen Thermitreaktion um 18 % höher als der entsprechende Wert des Referenzversuchs. Infolge der Gasfreisetzung von Thermit während der Reaktion beträgt der Unterschied im Druckaufbau bei Stabversagen nur noch 11,8 %.

### 6.3.2.2 Versuchsablauf und Ergebnisse

Der zeitliche Ablauf und die Versuchsergebnisse dieses Experiments haben einen qualitativ ähnlichen Verlauf wie die des Tests  $V_{th} 71/2$  (vergl. Ab. 6.33 und 6.16). Es treten jedoch einzelne Unterschiede auf, für die kein direkt erkennbarer Zusammenhang mit der geänderten Gasmenge im Stabinneren (bzw. Stabinnendruck) besteht.

Einer dieser Unterschiede, der für die Nachrechnung wesentlich ist, ergibt sich durch das gleichzeitige Auftreten zweier Versagensstellen, die eine im oberen, die andere im unteren Bereich des Thermitstabes. Die transiente Entwicklung jeder der Defektstellen ist für einen Zeitraum von etwa 15 ms nach Stabversagen unbekannt.

Weitere Abweichungen gegenüber  $V_{th} 71/2$  ergeben sich bei der Betrachtung des Druckaufbaus im Kühlkanal (vergl. Abb. 6.33 und 6.16). Im Versuch  $V_{th} 71/4$  entsteht nach einem steilen Anstieg zunächst ein über 7 ms fast konstanter Druckaufbau von etwa 0,8 MPa. Für dieses Verhalten ist möglicherweise ein kleines Leck, durch das hauptsächlich Gas in den Kühlkanal hineinströmt, verantwortlich. Diese Interpretation basiert auf Bewegungsvorgängen im Stabinneren, die in dieser Zeitspanne auf den Röntgenfilmen festzustellen sind. Die Interpretation dieses Drucksignals als Konsequenz von auftretendem Natriumfilmsieden über größere Bereiche des Thermitstabes ist ebenfalls denkbar /39/. Dem ist entgegenzuhalten, daß in diesem Falle die entsprechende Hüllrohrtemperatur über 1300 K hätte sein müssen. In Anbetracht des hohen Stabinnendrucks (etwa 23 MPa) hätte dementsprechend ein ausgeprägtes mechanisches Versagen der Hülle auftreten müssen, das aber während der erwähnten Zeitspanne von 7 ms auf den Filmen nicht beobachtet wurde.

Durch weiteres Öffnen der Versagensstellen steigt der Druck nach dieser ersten Phase steil an (s. Ab. 6.33). In den ersten 10 ms liegt er im Mittel etwas höher als der Wert im Referenzversuch. Die Abbauphase ist dafür schneller und hat ein wenig ausgeprägtes oszillatorisches Verhalten. Das schnellere Abklingen des Druckaufbaus nach anfänglich erhöhtem Wert wird im Rahmen der Parametervariation auch rechnerisch festgestellt (s. Abb. 6.26).

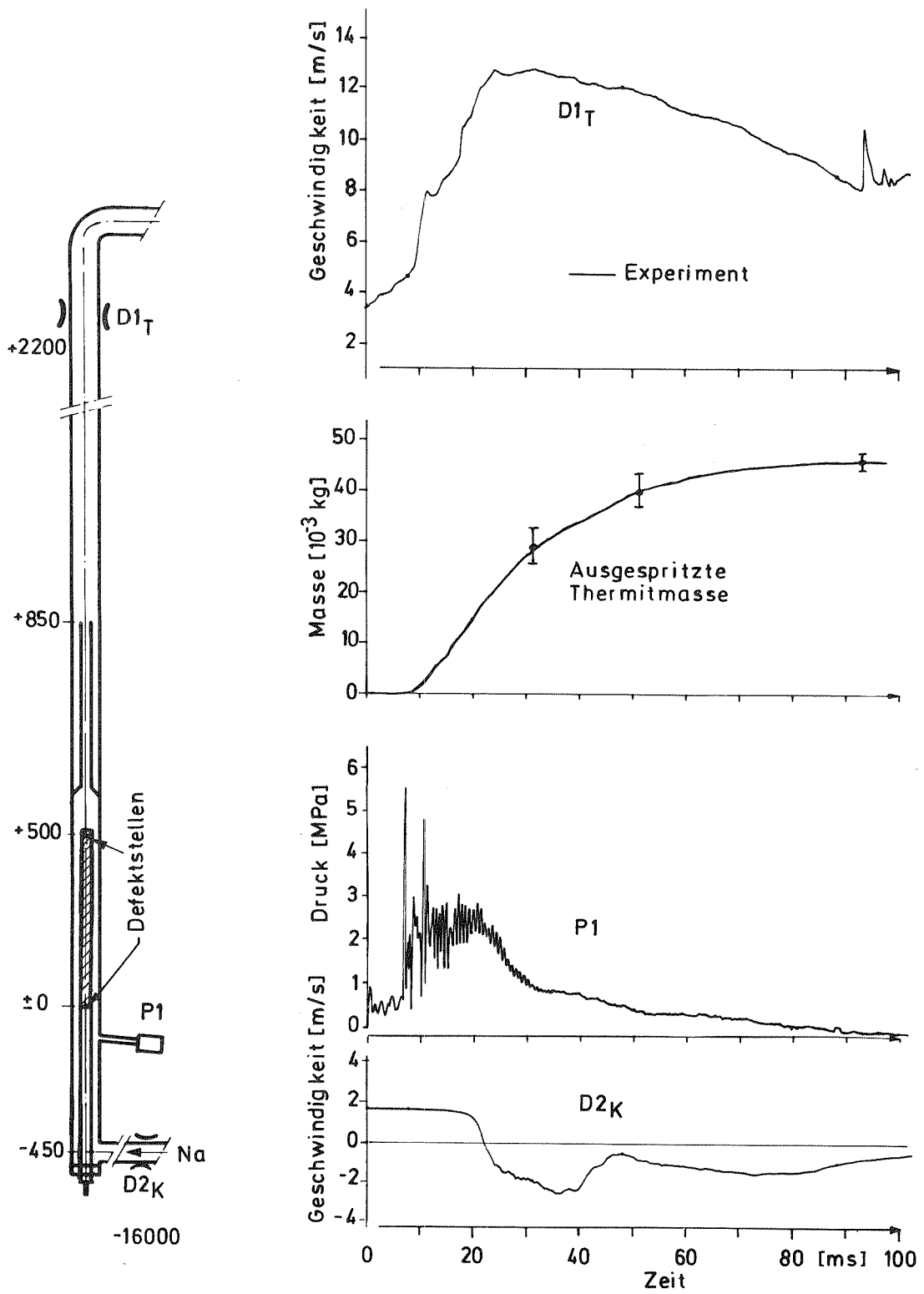


Abb. 6.33 Versuchsergebnisse von SIMBATH-Test  $V_{th}$  71/4

Sie ist auf eine größere axiale Ausdehnung der Gasblase im Kühlkanal zurückzuführen (bedingt durch den anfangs erhöhten Druck) bei etwa gleichbleibender Gasmenge. Das Ausbleiben der oszillatorischen Phase im Druckverlauf kann seinerseits als weiterer Hinweis auf induzierte Effekte in der Messung im Referenzversuch  $V_{th} 71/2$  dienen.

Die gemessenen Geschwindigkeiten der oberen und der unteren Natriumsäule zeigen gegenüber den Verläufen im Versuch  $V_{th} 71/2$  Unterschiede auf, die bei einer qualitativen Betrachtungsweise konsistent mit dem abweichenden Druckaufbau und dem geänderten Drosseldruckverlust erscheinen (vergl. Abbn. 6.33 u. 6.16).

In der Abb. 6.33 ist auch der Zeitverlauf der gesamten, aus dem Stabinneren ausgetretenen Thermitmasse eingetragen. Diese Kurve ist durch visuelle Auswertung der Röntgenfilme entstanden.

Die Ausbreitung der Versagensstellen ist auf den Röntgenfilmen weniger gut erkennbar als im Falle des Referenzversuchs. Gegenüber  $V_{th} 71/2$ , bei dem als Hauptursache des Versagens Hüllrohrschmelzen identifiziert wurde, scheint bei  $V_{th} 71/4$  ab etwa  $t = 60$  ms ein Ausbreiten der Versagensstelle durch Zusammenwirken von Hüllrohrschmelzen und durch mechanisches Versagen (Zerplatzen) erfolgt zu sein.

Versuchsergebnisse für die Materialumverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal sind nur von qualitativer Natur. Im Stabinneren bewegt sich das Thermit axial in Richtung zu den am oberen und am unteren Ende befindlichen Versagensstellen. Die großen Thermitropfen, die sich nach der chemischen Reaktion gebildet hatten, zerteilen sich dabei. Im Kühlkanal befindet sich das Thermit meistens in Tropfenform. Bei der post-mortem-Analyse des Versuchs sind auch dünne ausgefrorene Filme in der Nähe der Versagensstellen gefunden worden. Im Bereich der Drossel ist eine Teilblockade entstanden.

### 6.3.2.3 Anfangsbedingungen für die Nachrechnung mit CALIPSO

Die notwendigen Anfangsbedingungen und Zeitfunktionen für die Analyse dieses Versuchs mit CALIPSO unterliegen ähnlicher Vorgehensweise und Annahmen wie im Falle des Referenzversuchs  $V_{th} 71/2$ . Im Kühlkanal wird nach Vorgabe der Geometrie, des Massenstroms, des Pumpenförderdrucks und nach Anpassung der Widerstandsbeiwerte für Strömungshindernisse auch der gemessene Druckverlust im stationären Betrieb eingestellt. Die angenommene Kreislaufdiskretisierung gleicht bis auf den veränderten Bereich der Drossel derjenigen des Referenzversuchs (s. Abb. 6.17 und Anhang A4.2).

Für das Stabinnere wird der Abschluß der Thermitreaktion auf der gesamten Stablänge vorausgesetzt. Es wird angenommen, daß der Raum zwischen den Thermitropfen mit der maximal möglichen freigesetzten Gasmenge gefüllt ist ( $5,75 \cdot 10^{-3}$  kg Gas/kg Thermit). Für die Temperaturen von Thermit, Gas, Stabhülle und Natrium sowie für die Materialverteilung werden die entsprechenden Werte aus der Tab. 6.1 eingesetzt. Den Filmaufzeichnungen entsprechend ist an beiden Enden der Thermitzone je eine Defektstelle berücksichtigt. Für deren Flächenentwicklung während der ersten 15 ms nach Stabversagen ist eine Zeitfunktion angenommen, deren prinzipieller Aufbau derjenigen des Referenzversuchs (Gl. 6.10) entspricht. Die Koeffizienten sind im Hinblick auf die Wiedergabe des gemessenen Druckaufbaus optimiert.

Die eingesetzte Zeitfunktion für die Porosität der unteren Defektmasche ist:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 1,5 \cdot 10^{-3} + 0,1 \cdot t & t \leq 7 \cdot 10^{-3} \text{ s} & \quad (6.17) \\ \varepsilon &= 2,2 \cdot 10^{-3} + 2,8 (t - 7 \cdot 10^{-3}) & t \geq 7 \cdot 10^{-3} \text{ s} & \end{aligned}$$

Für die obere Defektmasche muß diese Zeitfunktion mit dem Verhältnis der axialen Maschenlängen korrigiert werden, um auf diese Weise für beide Defektstellen die gleiche transiente Entwicklung der Öffnungsflächen zu simulieren.

Die Eingabedaten und die spezifischen Modellparameter für diesen Versuch sind im Anhang A4 aufgelistet.



#### 6.3.2.4 Ergebnis der Nachrechnung

Bei der Rechnung des SIMATH-Tests  $V_{th}$  71/4 sind die CALIPSO-Modelle und deren Parametersatz, die für den Referenzversuch zum Einsatz kamen, beibehalten worden. Die erzielten Rechenergebnisse über einen Zeitraum von 100 ms nach Öffnen der Defektstellen sind in der Abb. 6.34 den Versuchsdaten gegenübergestellt. In ähnlicher Weise wie bei der Nachrechnung des Referenzversuchs ergibt sich während der ersten 40 ms nach Stabversagen eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen den im Versuch ermittelten Größen und Rechenergebnissen.

Nach dieser Zeitspanne ist der berechnete Druckaufbau größer als im Experiment und zeigt somit ein gegenteiliges Verhalten als beim Referenzversuch. Der höhere Druck spiegelt sich beim Vergleich der gemessenen und berechneten Geschwindigkeit der oberen Natriumsäule wieder. Der absolute Betrag der Abweichungen ist durch zwei Faktoren beeinflusst. Der eine ist verbunden mit dem konstruktiv bedingten geringen Druckverlust der Drossel und dadurch mit der errechneten stärkeren Kopplung zwischen dem Geschwindigkeitsverlauf der oberen Natriumsäule und den Druckänderungen im Teststreckenbereich. Der zweite Grund liegt in dem modellmäßig nicht erfaßten zusätzlichen Druckverlust im Drosselbereich nach der Bildung einer Teilblockade, dessen Existenz von den post-mortem-Untersuchungen der Teststrecke gezeigt wird.

Die Geschwindigkeit der unteren Natriumsäule liegt im Mittel höher als der gemessene Verlauf und zeigt somit eine ähnliche Abweichung wie im Falle des Referenzversuchs. Für diese Tendenz ist möglicherweise in beiden Versuchen eine Verminderung der Druckverluste der Filter im Kreislauf bei Rückströmung verantwortlich. Der Grund für die Zeitverschiebung der errechneten Kurve im Vergleich zum gemessenen Verlauf liegt in der Laufzeit der Druckwellen im Kreislauf in Verbindung mit dem diskretisierungsbedingten Abstand zwischen der Lage des Durchflußmessers und der Mitte der entsprechenden Masche (vergl. Kap. 6.3.1.4.1).

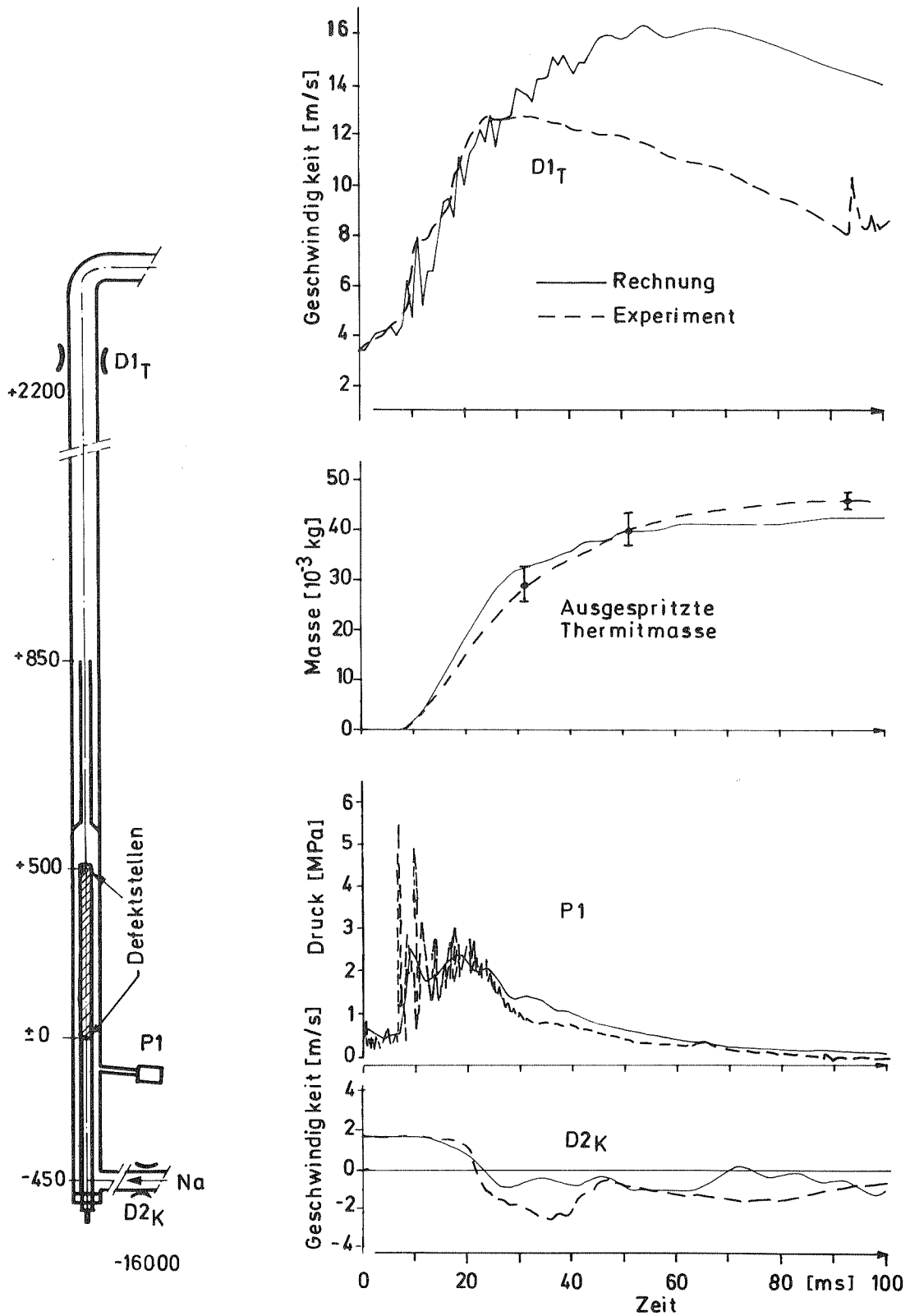


Abb. 6.34 Vergleich Rechnung und Experiment für den SIMBATH-Versuch  $V_{th}$  71/4

Im Rahmen der Unsicherheitsbandbreite der Versuchsergebnisse zeigt die gesamte ausgespritzte Thermitmenge bis  $t = 50$  ms Übereinstimmung mit dem experimentellen Verlauf. Zu späteren Zeiten findet der Entleerungsprozeß zu langsam statt aus ähnlichen Ursachen wie sie bei der Analyse von  $V_{th} 71/2$  identifiziert wurden (s. Kap. 6.3.1.4.1).

Die Existenz zweier axial versetzter Versagensstellen beeinflusst wesentlich die Materialumverteilung im Stabinneren und im Kühlkanal. Als Beispiel ist in Abb. 6.35 für vorgegebene Zeiten die Verteilung von Gas und Thermit im Kühlkanal dargestellt. An beiden Enden der Thermitzone entsteht je ein Gas/Dampfgebiet und dazwischen eine Zone mit einphasigem flüssigen Natrium. Jeder der Bereiche entwickelt sich in beiden axialen Richtungen. Die eingeschlossene einphasige Natriumzone verringert sich, bis nur noch Filme auf den Strukturen übrig bleiben. Eine ähnliche Umverteilung mit höheren Konzentrationen in der Nähe der Versagensstelle und dazwischen mit Zonen geringerer Massenbelegung ergibt sich auch für das Thermit. Die Analyse der Röntgenfilme sowie die post-mortem-Untersuchung der Teststrecke liefern ein qualitativ vergleichbares Ergebnis.

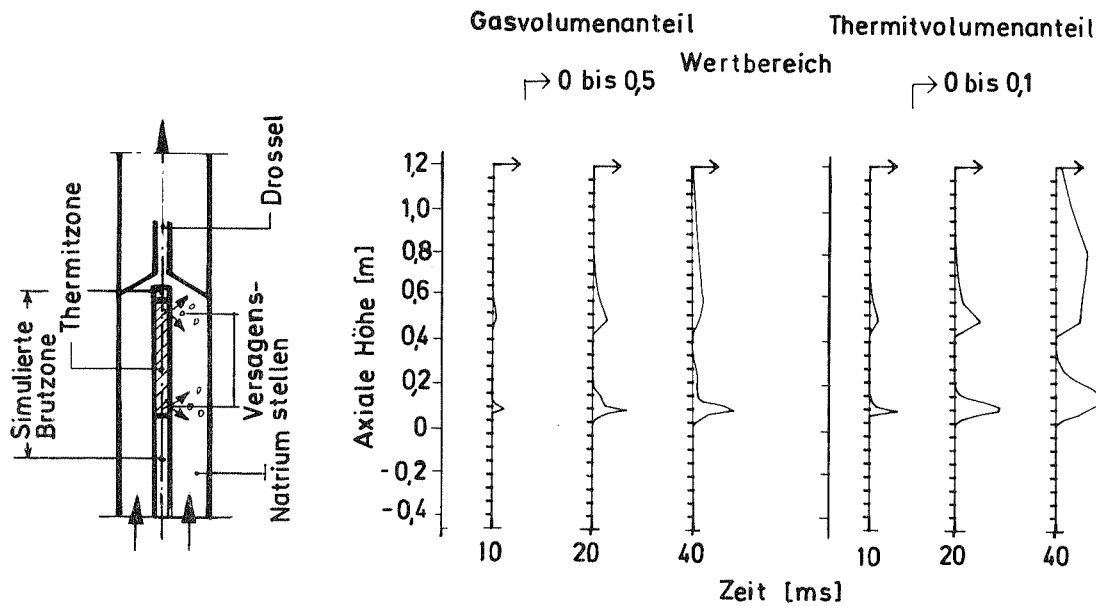


Abb. 6.35 Berechnete Materialumverteilung von Thermit und Gas im Versuch  $V_{th} 71/4$

Die berechnete gesamte Ausbreitung der Versagensstelle durch Schmelzen der Stabhülle ist im Versuch  $V_{th} 71/4$  geringer als im Referenzversuch. Im Stabinernen ist der Wärmefluß zur Hülle kleiner als für  $V_{th} 71/2$  da die Geschwindigkeit von Thermit, einem geringeren axialen Druckgradienten entsprechend, auch geringer ist. Auf der Kühlkanalseite verhindert zusätzlich das einphasige Natrium das sich zwischen den Versagensstellen befindet ein starkes Aufheizen der Stabhülle. Insgesamt ist die berechnete Defektstellenausbreitung durch Schmelzen der Hülle weniger ausgedehnt als die aus den Röntgenfilmen zu entnehmende Erweiterung der Öffnung. Dieses Ergebnis weist darauf hin, daß es bei  $V_{th} 71/4$  außer dem modellmäßig erfaßten Schmelzen der Stabhülle auch andere Phänomene gegeben haben muß, die zur Erweiterung der Versagensstelle beitragen. Tatsächlich deuten die Röntgenaufnahmen dieses Versuchs zeitweilig auf das Zusammenwirken von Hüllrohrschmelzen und mechanisch bedingter Ausbreitung der Versagensstelle hin (s. Kap. 6.3.2.2.).

Die Ergebnisse der Nachrechnung des Versuchs  $V_{th} 71/4$  mit CALIPSO zeigen, daß dieses Modell auch bei der Nachrechnung anderer SIMBATH-Experimente als der Referenzversuch ebenfalls sinnvolle Ergebnisse im Zeitraum bis 40 ms nach Stabversagen liefert. Die Fähigkeit des CALIPSO-Modells, mehrere räumlich getrennte Defektstellen zu simulieren, ist dabei hervorzuheben.

Für die Nachrechnung von  $V_{th} 71/4$  ergeben sich bezüglich der verfügbaren Versuchsdaten betreffend Anfangsbedingungen, Quelltermen und transienten Materialumverteilungen ähnliche Einschränkungen wie im Falle des Versuchs  $V_{th} 71/2$ .

Aus dem Vergleich von Rechenergebnissen und Versuchsdaten lassen sich ferner notwendige Modellerweiterungen identifizieren. Diese Erweiterungen sind weitgehend deckungsgleich mit denen, die aus der Analyse des Referenzversuches mit CALIPSO herausgestellt haben.

## 7. Abschließende Diskussion

Die numerische Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen nach Brennstabversagen in natriumgefüllten Kühlkanälen ist im Rechenprogramm CALIPSO gegenüber einer früher entwickelten Version /14/ erweitert worden. Nachfolgend werden die neu eingeführten Modellerweiterungen, der Stand der Verifikation einzelner Modellannahmen und des gesamten Rechenprogramms, die erzielten Rechenergebnisse und ein Überblick über zukünftige Arbeiten zusammenfassend dargestellt.

Mit dem überarbeiteten Geometriemodell (Kap. 2) ist die wirklichkeitsnahe Simulation eines geschlossenen Kreislaufs mit unsteten Querschnittsänderungen und mit einer an beliebiger Stelle eingebauten Pumpe möglich. Die Geometrie der im Kreislauf eingebauten Teststrecke mit Brennstab, Kühlkanal und Kühlkanalwand kann ebenfalls detailliert abgebildet werden.

Die erweiterte CALIPSO-Fassung enthält für die axiale Bewegungsrichtung separate Impulserhaltungsgleichungen für das Thermit, für das flüssige Natrium und für die Gasphase (Kap. 4.1). Dadurch besteht die Möglichkeit Relativbewegungen zwischen diesen Komponenten zu erfassen. Dies erweist sich bei der Berechnung von Materialumverteilungsprozessen in den SIMBATH-Versuchen in mehrfacher Hinsicht als besonders wichtig (Kap. 6.3). Für die spätere Übertragung auf Reaktorbedingungen ist diese Modellerweiterung ebenfalls von Bedeutung, da die Materialumverteilungsprozesse den Störfallablauf entscheidend beeinflussen.

In CALIPSO wird die Gastemperatur im Stabinneren und im Kühlkanal mit Hilfe einer neu eingeführten Energieerhaltungsgleichung statt eines Mittelungsverfahrens berechnet (Kap. 4.1). Dadurch läßt sich auch der durch das Gas bedingte Anteil am gesamten Druckaufbau wirklichkeitsnäher ermitteln.

Aufbauend auf Erkenntnissen über Zweiphasenströmungen wurde die Anzahl der betrachteten Strömungsformen in CALIPSO erhöht (Kap.4.2.2.1). Die erweiterte Fassung enthält sowohl für das Stabinnere als auch für den Kühlkanal Modelle für die Blasen-, die Übergangs-, die Film- und die Tropfenströmung. Im Kühlkanal werden im Rahmen des Filmmodells separate Thermit- und Natriumfilme sowohl auf dem Hüllrohr als auch auf der Kühlkanalwand betrachtet. Für jedes

der berücksichtigten Strömungsbilder sind, einem "best estimate" entsprechend, strömungsformabhängige Wechselwirkungen von Impuls bzw. Energie der Strömungskomponenten untereinander und mit den begrenzenden Strukturen eingebracht (Kap. 4.2.3). Für Übergangsströmungen wurde ein Algorithmus zur Ermittlung von Zwischenphasen-Reibbeiwerten unter Einbeziehung von experimentell überprüften Driftkorrelationen entwickelt (Kap. 4.2.2.1.2). Ferner wird die Dynamik der Zerteilung und des Zusammenfügens von den bei den Strömungsform-Modellen berücksichtigten Blasen und Tropfen modellmäßig erfaßt (Kap. 4.2.2.3). Die sich örtlich einstellende Strömungsform wird aus einer Strömungsbilderkarte bestimmt, die Bereichen unterschiedlicher Gasvolumenanteile bestimmte Strömungsformen zuordnet (Kap. 4.2.2.2).

Eine neue Formulierung der diskretisierten Erhaltungsgleichungen sichert die korrekte Berechnung der Massen-, Energie- und Impulsflußterme auch für Maschenetze mit unsteten Querschnittsänderungen in r- und z-Richtung. Zur räumlichen Integration der axialen Impulsgleichung in Kanälen mit unsteten Querschnittsänderungen ist ein spezielles numerisches Verfahren, basierend auf ein Zwei-Geschwindigkeits-, Zwei-Drücke-Konzept, erarbeitet worden (s. Kap. 5.3). Die mit CALIPSO berechneten Druckverluste für derartige Kanalgeometrien sind damit unabhängig von der gewählten Kreislaufdiskretisierung.

Die Modellannahmen einiger in CALIPSO neu eingebrachter Wechselwirkungsfunktionen von Impuls bzw. Energie wurden anhand von Versuchsdaten für stationäre Zweiphasenströmungen überprüft (Kap. 6.2). Die Kalibrierung der Strömungsbilderkarte erfolgte anhand der Ergebnisse von SIMBATH-Versuchen (Kap. 6.2.1).

Die Überprüfung des gesamten CALIPSO-Modells wurde durch Nachrechnung zweier typischer SIMBATH-Einzelstabversuche durchgeführt. Der Analyse beider Versuche liegen der gleiche Modellparametersatz, versuchsspezifische Anfangsbedingungen und eine Zeitfunktion der Defektstellenausbreitung zugrunde. Für beide Versuche wurde im Zeitraum bis 40 ms nach Stabversagen Übereinstimmung der Zeitverläufe wichtiger gemessener und berechneter physikalischer Größen wie Druck, Voidausbreitung, Thermitumverteilungen im Stabinneren und im Kühlkanal, Ausbreitung der Versagensstellen u.a. aufgezeigt (s. Kap. 6.3.1 und 6.3.2). Die erzielten Ergebnisse bei der Nachrechnung beider Versuche zeigen, daß die wichtigsten physikalischen Phänomene und Wechselwirkungen innerhalb der angegebenen Zeitspanne im erweiterten CALIPSO-Modell in geeigneter Weise

berücksichtigt sind.

Etwa 40 ms nach Stabversagen beginnen die berechneten und die gemessenen Werte voneinander abzuweichen. Die Ursachen der Abweichungen sind erkannt und sollen durch Verwirklichung der am Ende dieses Kapitels vorgeschlagenen Modellerweiterungen behoben werden.

Bei den Nachrechnungen der SIMBATH-Versuche mit CALIPSO wurden die Anfangsbedingungen, die Quellterme und die Öffnungsfunktion der Defektstelle einem "best estimate" entsprechend vorgegeben. Der Einfluß einiger Daten wurde innerhalb ihres Unsicherheitsbereichs auf parametrische Weise untersucht. Es stellte sich heraus, daß die transiente Entwicklung der Öffnungsflächen der Versagensstellen und die zeitlich gestreckte Gasfreisetzung aus dem Thermit von besonderer Bedeutung für den berechneten Zeitablauf charakteristischer Daten sind (Kap. 6.3.1.5).

Die Relevanz jeder der berücksichtigten Strömungsformen in CALIPSO konnte anhand der Rechenergebnisse für den SIMBATH-Referenzversuch aufgezeigt werden (Kap. 6.3.1.4.2 und 6.3.1.5.2). Die Modellierung von Filmströmung im Stabinneren und im Kühlkanal erwies sich als besonders wichtig. Das Modell berechnet im Stabinneren die Verlangsamung des Ejektionsvorgangs bei gleichzeitiger Erweiterung der Defektstelle. Auf der Kühlkanalseite des Hüllrohres hat ein existierender Natriumfilm eine abkühlende Wirkung und verzögert das Durchschmelzen. Das Thermit im Kühlkanal wird aufgrund der geringen Mitschleppwirkung durch Natrium und Gas nur über kürzere Bereiche transportiert, als es bei Anwendung anderer Strömungsform- und Impulsaustauschmodelle der Fall ist. Dadurch bleibt das ejizierte Thermit über längere Zeiten in der Nähe der Defektstelle konzentriert. Insgesamt führt die zusätzlich zu anderen Strömungsformen berücksichtigte Filmströmung zur verbesserten Wiedergabe der vorhandenen Versuchsdaten wie z.B. der zeitlichen Entwicklung der Defektstellen, der gesamten ejizierten Masse aus dem Stabinneren und der Materialumverteilungen im Stabinneren und im Kühlkanal.

Die durchgeführten Untersuchungen mit CALIPSO liefern erstmals Beiträge zur Interpretation einiger wichtiger Aspekte der SIMBATH-Versuche (Kap. 6.3). Es wird gezeigt, daß der Gasdruckaufbau im Stabinneren und im Kühlkanal entscheidend für die Materialumverteilung innerhalb der ersten 100 ms nach Stabversa-

gen ist. Als wichtiger Faktor für den Ausspritzvorgang ist die Fortpflanzung der Thermitreaktion im Stabinneren identifiziert worden. Durch die transiente Gasfreisetzung baut sich ein Druck im Stabinneren auf, der zu späteren Zeitpunkten die Ejektion von Material in den Kühlkanal überwiegt. Die anhand von Röntgenaufnahmen interpretierte Erweiterung der Defektstelle durch Schmelzen der Stabhülle kann in den Berechnungen mit CALIPSO bestätigt werden. Ferner liefert die Auswertung der Rechenergebnisse und der Vergleich mit Versuchsdaten einen wichtigen Hinweis auf Verfälschungen im gemessenen Druckverlauf.

Die neue CALIPSO-Fassung ist, verglichen mit anderen Rechenprogrammen ähnlicher Zielsetzung, z.B. SAS-FCI /7/, EPIC /8/, EULFCI /9/, PLUTO2 /10/ (s. Kap. 1.2), in einigen Bereichen der physikalischen Modellierung detaillierter. Diese Aussage bezieht sich insbesondere auf die Erhöhung der Anzahl gelöster Impulserhaltungsgleichungen (also Geschwindigkeitsfelder), auf die Berechnung der Gastemperatur aus einer separaten Energieerhaltungsgleichung und auf die detaillierte Betrachtung unterschiedlicher Strömungsformen und strömungsformabhängigen Wechselwirkungen sowohl im Stabinneren als auch im Kühlkanal. Über die Ansätze in /7 bis 10/ hinausgehend wurde in CALIPSO ebenfalls realisiert: Ein Modell zur Beschreibung der Zerteilung und der Anlagerung von Blasen bzw. Tropfen sowie die Erweiterung der Anzahl berechneter Austauschfunktionen, z.B. die Film-Tropfen-Wechselwirkung oder der Wärmeaustausch durch Strahlung. Andere Aspekte der numerischen Simulation von reaktorrelevanten Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen, wie die Modellierung der transienten geometrischen Ausdehnung und Materialzusammensetzung der Kavität im Stabinneren, sind auch in der erweiterten CALIPSO-Fassung, den Gegebenheiten der SIMBATH-Experimente entsprechend, nicht abgebildet. Die Modellierung von Blockadebildungen, die Mechanik des Hüllrohrversagens und Teile des numerischen Verfahrens sind in CALIPSO entsprechend den in PLUTO2 /10/ oder LEVITATE /12/ eingesetzten Verfahren zu integrieren.

Aus den Arbeiten zur Entwicklung und Anwendung von CALIPSO folgt, daß Detailpunkte noch zu verbessern sind:

- Zur realistischen Beschreibung akustischer Druckwellen und scharfer Phasengrenzen (numerische Diffusion) und zur Beschleunigung des Zeitintegrationsverfahrens sind modifizierte numerische Verfahren einzuführen.



- Die physikalische Modellierung ist hinsichtlich der folgenden Phänomene zu erweitern: Einbau von Ausfriermodellen, Modellierung des Massentransportes in radialer Richtung nach wesentlicher Zerstörung der ursprünglichen Stabgeometrie sowie Berücksichtigung von reaktorspezifischen Stoffen und Einzelmodellen.
  
- Im Bereich der Modell-Validierung sind weitere Tests der Einzelmodelle und des gesamten Rechenprogramms notwendig.

Nomenklatur

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	<u>Bezeichnung</u>
A	m <sup>2</sup>	Fläche
Al	-	Aluminium
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		Aluminiumoxid
C	-	Koeffizient
c	m/s	Schallgeschwindigkeit
C <sub>D</sub>	-	Widerstandsbeiwert (drag)
C <sub>f</sub>	-	Reibungsfaktor
c <sub>p</sub>	J/(kg K)	Wärmekapazität bei konstantem Druck
c <sub>v</sub>	J/(kg K)	Wärmekapazität bei konstantem Volumen
C <sub>virt</sub>	-	Koeffizient für die virtuelle Masse
COMP	m <sup>2</sup> /N	Kompressibilität
DAMP	-	Damping Koeffizient
D <sub>h</sub>	m	hydraulischer Durchmesser
dt	s	Zeitableitung
E	J/m <sup>3</sup>	Summe der Energieaustauschterme
e	J/kg	innere Energie (e = c <sub>v</sub> T)
EXP	J/(m <sup>3</sup> s)	Expansionsarbeit
F	N	Kraft
F	N/(m/s)	Kraft/Geschwindigkeit
F	-	Funktion
Fe	-	Eisen
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-	Eisenoxid
G	-	physikalische Größe
g	m/s <sup>2</sup>	Erdbeschleunigung
h	J/kg	Verdampfungswärme
I	N/m <sup>3</sup>	Summe der Impulsaustauschterme
j	m/s	Volumenstrom/Querschnittsfläche
K	-	Konstante
m	-	Konstante
m	kg	Masse
<u>n</u>	-	Einheitsvektor, normal
n	-	Konstante

N	-	Anzahl der Schichten von Strukturen
Nu	-	Nusseltzahl
p	N/m <sup>2</sup>	Druck
Pr	-	Prandtlzahl
Q	W/m <sup>2</sup>	Wärmestrom
R	m <sup>2</sup> /(s <sup>2</sup> K)	Gaskonstante
RE	J/s	konvektiver Term in r-Richtung für die Energieerhaltungsgleichung
Re	-	Reynoldszahl
RI	kgm/s <sup>2</sup>	konvektiver Term in r-Richtung für die Impulserhaltungsgleichung
RM	kg/s	konvektiver Term in r-Richtung für die Massenerhaltungsgleichung
r	m	radiale Koordinate
r	m	Radius
T	K	Temperatur
t	s	Zeit
<u>u</u>	-	Geschwindigkeitsvektor mit Komponenten (u,v)
u	m/s	radiale Geschwindigkeit
U	V	elektrische Spannung
v	m/s	axiale Geschwindigkeit
v <sub>pf</sub>	m/s	Radiale Fluktuationsgeschwindigkeit
We	-	Weberzahl
V <sub>M</sub>	m <sup>3</sup>	Maschenvolumen
V	m <sup>3</sup>	Volumen
x	-	Dampfmassenanteil
X	-	Lockhart-Martinelli-Parameter
x	-	physikalische Größe
x <sub>fg</sub>	-	freigesetzte Gasmenge/kg Thermit
y	-	Unbekannte
ZE	J/s	konvektiver Term in z-Richtung für die Energieerhaltungsgleichung
ZI	kg/ms <sup>2</sup>	konvektiver Term in z-Richtung für die Impulserhaltungsgleichung
ZIV	kg/ms <sup>2</sup>	konvektiver Term in z-Richtung der virtuellen Masse
ZM	kg/s	konvektiver Term in z-Richtung für die Massenerhaltungsgleichung

$z$	m	axiale Koordinate
$\alpha$	$W/(m^2 K)$	Wärmeübergangszahl
$\beta$	-	azimutale Ausdehnung von partiellen Filmen
$\Gamma$	$kg/m^2, kg/m^3$	Phasenwechselrate
$\Delta$	-	Differenz
$\delta$	m	Filmstärke
$\varepsilon$	-	Porosität der Defektstelle
$\xi$	-	Widerstandsbeiwert
$\eta$	$kg/(m s)$	dynamische Zähigkeit
$\theta$	-	Volumenanteil
$\lambda$	$W/(m K)$	Wärmeleitfähigkeit
$\nu$	$m^2/s$	kinematische Zähigkeit
$\rho^p$	$kg/m^3$	physikalische Dichte
$\rho$	$kg/m^3$	Schmierdichte
$\sigma$	N/m	Oberflächenspannung
$\Sigma$	-	Summe
$\Sigma^*$	-	Summe der konvektiven Terme
$\tau$	1/s	Zeitkonstante
$\phi$	-	Lockhart-Martinelli-Koeffizient
$\omega$	-	Wahrscheinlichkeit
$\Psi$	-	physikalische Größe

### Tiefgestellte Indizes

äq	äquivalent
aus	ausströmend
ax	axial
c	Hüllrohr
co	kontinuierliche Phase
crit	kritisch
cs	Stahl der Stabhülle
dep	Niederschlag
di	disperse Phase
ein	einströmend
f	Film
fg	Gas (nicht kondensierbar)

nl	Natrium flüssig
nv	Natriumdampf
ox	Oxid
p	Partikel
pump	Pumpe
r	radial
rad	Strahlung
rel	relativ
s	Stahl
sat	gesättigt
st	Struktur
sup	querschnittsgemittelt
i	im Stabinneren
i	Laufindex, r-Richtung
in	Anfangswert (initial)
j	Komponente j
j	Laufindex z-Richtung
k	Komponente k
l	flüssige Phase
max	Maximum
mix	Gemisch
n	Gemisch Na-flüssig, Na-Dampf
th	Thermit
tt	turbulent turbulent
v	Gasphase
w	Kühlkanalwand
ws	Stahl der Kühlkanalwand
Wü	Wärmeübergang
1-Ph	einphasig gemittelt über Querschnitt
2-Ph	zweiphasig

#### Hochgestellte Indizes

alt	alter Wert
B	untere Grenze
fv	Film, vertikal

K	Zwischenkomponenten
links	linker Maschenrand
n	Exponent
neu	neuer Wert
oben	oberer Maschenrand
rechts	rechter Maschenrand
unten	unterer Maschenrand
v	vertikal
vis	Reibung mit Strukturen
T	obere Grenze
$\uparrow$	Phasenwechsel
$\sim$	virtuelle Masse
*	Zwischenwert
(1)	1er Wert, alter Zeitschritt
(2)	2er Wert, Zwischenwert
(3)	3er Wert, neuer Zeitschritt

### Spezielle Zeichen

$\bar{a}$	Volumenmittelwert der Größe $a$ für die Maschenhälften $i, i+1$ bzw. $j, j+1$
$\bar{\bar{a}}$	Längenmittelwert
$\underline{a}$	vektorielle Größe
$ \underline{a} $	Betrag eines Vektors $\underline{a}$ . $ \underline{a}  = \sqrt{a_{ax}^2 + a_{rad}^2}$
$\langle \rangle_{t,3}$	Mittelwert über Zeit und Volumen
$\langle \rangle_{t,2}$	Mittelwert über Zeit und Fläche

Literaturverzeichnis

- /1/ D. Smidt: Reaktor-Sicherheitstechnik, Springer Verlag, Berlin, 1979
- /2/ D. Struwe, P. Royl und R. Fröhlich: Vessel Failure Event Tree Analysis of SNR-300 for a hypothetical Unprotected Loss-of-Flow-Accident, in: Proc. of the LMFBR Safety Topical Meeting, Vol. II, (Lyon, 1982), pp. 625 - 634
- /3/ A.B. Rothmann, R. Simms, O. McNary, G.S. Stanford and G.E. Marsch: TREAT experiments with irradiated fuel simulating hypothetical loss-of-flow accidents in large LMFBRs, in: Proc. Int. Meeting on Fast Reactor Safety Technology, Vol. II, (Seattle, 1979) pp 924 - 933
- /4/ J. Dadillon, M. Schwarz, A. Tattegrain, J.P. Chaudat, G. Heusener, B. Kuczera, G. Kussmaul and J. Wolff: CABRI project - recent progress and present status, in: Proc. of the LMFBR Safety Topical Meeting, Vol. II, (Lyon, 1982), pp. 177 - 190
- /5/ B.W. Spencer, R.E. Henry, D.R. Armstrong, L. Bova, G.T. Goldfuss und D. Raridon: Fuel Motion in the CAMEL TOP-Simulation LMFBR Safety Tests, in: Proc. Int. Meeting on Fast Reactor Safety Technology, Vol. IV, (Seattle, 1979), pp. 1756 - 1765
- /6/ F. Kedziur, P. Menzenhauer, St. Misu, W. Pepler und H. Will: Material Movement in the Bundle Region During Hypothetical Accidents in FBRs (SIMBATH out-of-pile Experiments and Code Development CALIPSO), in: Proc. of the LMFBR Safety Topical Meeting, (Lyon, 1982), pp. 409 - 420
- /7/ L.L. Smith, W.R. Bohl, M.G. Stevenson, J. Travis und G. Fischer: SAS/FCI: The SAS3A Fuel Coolant Interaction Model, Argonne Nat. Lab., Bericht ANL-RAS 75-33, Dez. 1975
- /8/ P.A. Pizzica und P.B. Abramson: A Numerical Model of Reactor Fuel and Coolant Motions Following Pin Failure, in: Nucl. Sci. and Engineering, Vol. 64, 1977, pp. 465 - 479

- /9/ N. Shimegi: EULFCI Code: Numerical Method for Coolant Dynamics in one Dimension, in: J. of Nucl. Sci. and Techn., Vol. 16, 1979, pp. 869 - 890
- /10/ H.U. Wider, A.M. Tentner und P.A. Pizzica: The PLUTO2 Overpower Excursion Code and a Comparison with EPIC, in: Int. Meeting on Fast Reactor Safety Technology, Vol. I, (Seattle, 1979), pp. 120 - 129
- /11/ K. Thurnay: KANDY - Ein physikalisches Modell zum Verständnis der Vorgänge, die in einem ausgetrockneten Brennelement eines Natriumgekühlten Schnellen Brütters auftreten können, falls die Engergieerzeugung im Reaktorkern andauert, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3671, Feb. 1984
- /12/ A.M. Tentner und H.U. Wider: Thermal Hydraulic Modeling for the Analysis of LMFBR Disrupted Code Behaviour, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 82, 1984, pp. 225 - 271
- /13/ L.L. Smith: SIMMER II, A Computer Program for LMFBR Disrupted Core Analysis, Los Alamos Lab., Bericht LA-7515-M, 1980
- /14/ K. Kedziur: CALIPSO - Ein Programm zur Berechnung von Fluidodynamik, Thermodynamik und Geometrieänderungen in versagenden Brennelementen eines schnellen Brutreaktors, Bericht KfK 3363, Juli 1982
- /15/ J. Huhn und J. Wolf: Zweiphasenströmungen Gasförmig/Flüssig, VEB Fachbuchverlag Leipzig, 1975
- /16/ R.R. Gay und D. Statile: A Flow Regime Dependent Model of Two-Phase Flow, in: Proc. ANS/ASME/NRC Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Saratoga Springs, (New York, 1980), pp. 120 - 132
- /17/ D.R. Liles: TRAC-P1: An Advanced Best Estimate Computer Program for PWR LOCA Analysis, Los Alamos Lab., Bericht LA-7777-MS, Mai 1979
- /18/ J.H. McFadden, M.P. Paulsen und G.G. Gose: RETRAN Dynamic Slip Model, in: Nucl. Technology, Vol. 54, 1981, pp. 287 - 297



- /19/ C.F. Bonilla und T.A. Jaeger: Multi Fluid Modeling of Annular Two-Phase Flow, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 50, 1978, pp. 225 - 271
- /20/ G. Enderle: FLUST-2D - Ein Programm zur Berechnung der Zweidimensionalen Strömung eines kompressiblen Mediums in aneinandergestellten Rechteckbereichen, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 2679, 1979
- /21/ D.B. Spalding: Mathematical Modeling and Computational Techniques, in: Multiphase Transport. Fundamentals, Reactor Safety Applications, Ed. T.N. Veziroglu, Hem. Publ. Corp., 1981, pp. 2839 - 2843
- /22/ F.H. Harlow und A.A. Amsden: Numerical Calculation of Multiphase Fluid Flow, in: Journal of Computational Physics, Vol. 17, 1975, pp. 19 - 52
- /23/ J. Boure: Les Lois Constitutives des Modeles d' Ecoulement Diphasiques Monodimensionels, a Deux Fluides, CEA-R-4915, 1978
- /24/ F.H. Harlow und A.A. Amsden: Flow of Interpenetrating Material Phases, in: J. of Computational Physics, Vol. 18, 1975, pp. 440 - 462
- /25/ H. B. Stewart: Two-Phase Flow: Model and Methods, in: J. of Computational Physics, Vol. 56, 1984, pp. 363 - 409
- /26/ J.M. Delhaye, M. Giot und M.L. Riethmuller: Thermohydraulics of Two-Phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering, Hemisphere Publ. Corp., 1980
- /27/ J.A. Boure und J.M. Delhaye: General Equations and Two-Phase Flow Modelling, in: Handbook of Multiphase Systems, Ed. G. Hetsroni, Hemisphere Publ. Corp., 1982, pp. 1/36 - 1/95
- /28/ L.J. Agee, S. Banarjee, R.B. Duffey und E.D. Hughes: Some Aspects of Two-Fluid Models for Two-Phase Flow and their Numerical Solution, in: Transient Two-Phase Flow, Proc. of the 2<sup>nd</sup> CSNI Specialists Meeting, (Paris, 1978) pp. 323 - 329

- /29/ D.A. Drew und R.T. Lahey Jr.: Application of General Constitutive Principles to the Derivation of Multidimensional Two-Phase Flow Equations, in: Int. J. Multiphase Flow, Vol. 5, 1979, pp. 243 - 264
- /30/ TRAC-P1A An Advanced Best-Estimate Computer Program for PWR LOCA Analysis, Los Alamos Laboratories, Report NUREG/CR-0665
- /31/ C.R. Bell: Multiphase, Multicomponent Hydrodynamics in HCDA Analysis: Present Status and Future Trends, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 68, 1981, pp. 91 - 99
- /32/ M. Ishii: Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow, Eyrolles(Paris), 1975
- /33/ W.T. Sha und J.C. Slattery: Local Volume-Time Averaged Equations of Motion for Dispersed, Turbulent, Multiphase Flows, Argonne Nat. Lab., Report ANL-80-51, Nov. 1980
- /34/ M. Bottoni, B. Dorr, Ch. Homann und D. Struwe: BACCHUS-3D/SP. A Computer Programm for the Three-Dimensional Description of Sodium Single-Phase Flow in Bundle Geometry, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3376, Juli 1983
- /35/ G.B. Wallis: One Dimensional Two-Phase Flow, Mc Graw Hill Book Co., 1969
- /36/ G.F. Hewitt: Liquid-Gas Systems in, Handbook of Multiphase Systems, Ed. G. Hetsroni, Hemisphere Publ. Corp., 1982, pp 2/3 - 2/94
- /37/ M. Ishii und N. Zuber: Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows, in: AIChE J., Vol. 25/5, 1979, pp. 843 - 855
- /38/ P. Menzenhauer, St. Misu und H. Will: unveröffentlicht, 1981
- /39/ P. Menzenhauer, W. Pepler und H. Will: unveröffentlicht, 1981

- /40/ A.E. Dukler und J. Taitel: Flow Regime Transitions for Vertical Upward Gas-Liquid Flow: A Preliminary Approach through Physical Modeling, Argonne Nat. Laboratories, Report NUREG-0162, 1977
- /41/ J. Weisman und S.Y. Kang: Flow Pattern Transitions in Vertical and Upwardly Inclined Tubes, in: Int. J. of Multiphase Flow, Vol. 7, 1981, pp. 271 - 291
- /42/ A.W. Bennett, G.F. Hewitt und K.A. Kearsey: Flow Visualisation Studies of Boiling at High Pressure, in: Proc. Inst. Mech. Eng., Vol. 180(3C), 1965, pp. 1 - 11
- /43/ K. Mishima und M. Ishii: Flow Regime Transition Criteria Consistent with Two-Fluid Model for Vertical Two-Phase Flow, Argonne Nat. Laboratories, Report NUREG/CR 3338, 1983
- /44/ G.W. Govier und K. Aziz: The Flow of Complex Mixtures in Pipes, Van Nostrand Reinhold, New York, 1972
- /45/ K. Sekoguchi, O. Tanaka, S. Esaki, N. Katsuri und M. Nakasatomi: Prediction Method of Flow Patterns in Subcooled and Low Quality Boiling Regions, in: Bulletin of the JSME, Vol. 24, No 191, Mai 1981, pp. 834 - 841
- /46/ Y. Taitel und D. Barnea: Counter Current Gas-Liquid Vertical Flow, Model for Flow Pattern and Pressure Drop, in: Int. Journal Multiphase Flow, Vol. 8, 1983, pp. 637 - 647
- /47/ A.E. Bergles, J.G. Collier, J.M. Delhaye, G.F. Hewitt und F. Mayinger: Two-Phase Flow and Heat Transfer in the Power and Process Industry, Hemisphere Publ. Corp., 1981
- /48/ J. Weismann: Two Phase Flow Patterns, in: Handbook of Fluids in Motion, Editors N.P. Cheremisinoff, R. Gupta, Ann Arbor Science Publ., 1980, pp. 409 - 425

- /49/ N.A. Radovcich und R. Moisis: The Transition from Two-Phase Bubble Flow to Slug Flow, Mass. Inst. of Techn., Report MIT 7-7673-22, 1962
- /50/ S. Kaizerman, E. Wacholder und E. Elias: A Drift-Flux Model Flow-Regime Map of Two-Phase Flows for Thermal-Hydraulic Calculations, in: Nucl. Sci. and Eng., Vol. 84, 1983, pp. 166 - 173
- /51/ G.F. Hewitt und N.S. Hall-Taylor: Annular Two-Phase Flow, Pergamon Press, 1970
- /52/ C.W. Solbrig, J.H. McFadden, R.W. Lyczkowski und E.D. Hughes: Heat Transfer and Friction Correlations Required to Describe Steam-Water Behaviour in Nuclear Safety Studies, in: AIChEJ, Vol. 174, 1978, pp. 100 - 128
- /53/ J. C. Godfrey und C. Hanson: Liquid-Liquid Systems, in: Handbook of Multiphase Systems, G. Hetsroni Ed., Hem. Publ. Corp., 1982, pp. 4/3 - 4/41
- /54/ G. F. Hewitt und J. A. Boure: Some Recent Results and Development in Gas-Liquid Flow: A Review, in: Int. J. Multiphase Flow, Vol. 1, 1973, pp. 139 - 171
- /55/ J.E. Kelly und M. S. Kazimi: Interfacial Exchange Relations for Two-Fluid Vapour-Liquid Flow: A Simplified Regime-Map Approach, in: Nucl. Sci. and Eng., Vol. 81, 1982, pp. 305 - 318
- /56/ P. Hutchinson, P.B. Whalley und G.F. Hewitt: Transient Flow Redistribution in Annular Two-Phase Flow, in: Int. J. Multiphase Flow, Vol. 1, 1974, pp. 383 - 393
- /57/ T. Saito, E.D. Hughes und M.W. Carbon: Multifluid Modelling of Annular Two-Phase Flow, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 50, 1978, pp. 225 - 271
- /58/ J.K. Knudsen und D.L. Katz, Fluid Dynamics and Heat Transfer, Mc Graw Hill Book Co., 1958

- /59/ K. Rehme: Turbulente Strömung in konzentrischen Ringspalten, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 2099, 1975
- /60/ C.F. Colebrook: Turbulent Flow in Pipes with Particular Reference to the Transition Region between the Smooth and Rough Pipe Laws, J. of the Inst. Civil Eng., Vol. 11, 1939, p. 133
- /61/ F. Casadei: Experimentelle Untersuchung der instationären einphasigen Strömung durch perforierte Platten, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3354, Juli 1982
- /62/ E.K. Kalinin und G.A. Dreitser: Heat Transfer and Hydrodynamics in Channels, in: Advances in Heat Transfer, Ed. J.P. Hartnett und T.F. Irvine Jr., Vol. 6, Academic Press N.Y., 1970, pp. 386 - 411
- /63/ F. Sass und Ch. Bouche, Herausgeber, Dubbels Taschenbuch für den Maschinenbau, Springer Verlag Berlin, 1958
- /64/ R.W. Lockhart und R.C. Martinelli: Proposed Correlation of Data for Isothermal Two-Phase Two-Component Flow in a Pipe, in: Chem. Eng. Prog., Vol. 45, 1949, pp. 39 - 48
- /65/ R. Clift, J.R. Grace und M.E. Weber: Bubbles, Drops and Particles, Academic Press N.Y., 1978
- /66/ S.L. Soo: Fluid Dynamics of Multiphase Systems, Blaisdell Publ. Co., 1967
- /67/ W. Sengpiel: unveröffentlicht, 1984
- /68/ N. Zuber und J.A. Findlay: Average Volumetric Concentration in Two-Phase Flow Systems, in: Trans. ASME J. Heat Transfer, Vol 87, Ser C, 1965, pp. 453 - 468
- /69/ H.C. No und M.S. Kazimi: Pressure Drop and Interface Drag Coefficient in Two-Phase Flow of Sodium, in: Nucl. Sci. and Eng., Vol. 82, 1982, pp. 235 - 242

- /70/ M. Bottoni und D. Struwe: BLOW-3A, A Theoretical Model to Describe Transient Two-Phase Flow Conditions in LMFBR Coolant Channel, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3317, Dez. 1982
- /71/ P. Henkel: Hüllrohrmaterialbewegung während eines Kühlmitteldurchsatz-Störfalls in einem schnellen, natriumgekühlten Reaktor, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3967, Okt. 1985
- /72/ H.M. Kottowski: Thermohydraulics in Liquid Metals, in: Lecture Series of the von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 1983 - 07, Juni 1983
- /73/ O.E. Dwyer: Liquid Metal Heat Transfer, in: Sodium-NaK Engineering Handbook, Vol. II, Editor O.J. Foust, Gordon and Breach, Science Publishers Inc., 1976, pp. 73 - 191
- /74/ R. A. Seban und T. T. Shimazaki: Heat Transfer to a Fluid Flowing Turbulently in a Smooth Pipe with Walls at Constant Temperature, in: Trans. ASME, Vol. 73, 1951, pp. 803 - 809
- /75/ R. N. Lyon: Liquid Metal Heat Transfer Coefficients, in: Chem. Eng. Progr. Symp. Series, Vol. 47, No. 2, 1951, pp. 75 - 79
- /76/ C. E. Dengler und J. A. Addoms: Heat Transfer Mechanism for Vaporisation of Water in a Vertical Tube, in: Chem. Eng. Progr. Symp. Ser. Vol. 52, 1955, pp. 95 - 101
- /77/ O. Yesin: Relation Between Heat Transfer Coefficient and Frictional Pressure Drop in Annular Two Phase Flow, in: Multiphase Transport. Fundamentals, Reactor Safety Applications, Ed. T.N. Veziroglu, Hem. Publ. Corp., 1981, pp. 1177 - 1190
- /78/ J. C. Chen: A correlation for Boiling Heat Transfer To Saturated Fluids in Convective Flow: in, Proc. ASME- AIChE Heat Transfer Conf., Boston, Aug. 11 - 14, 1963, Paper 63 - HT - 34

- /79/ J.C. Chen: A Proposed Mechanism and Method of Correlation for Convective Boiling Heat Transfer with Liquid Metals, in: Proc. Third Annual Conference on High-Temperature Liquid-Metal Heat Transfer Technology, ORNL, Sept. 1963, CONF-274-1, Brookhaven Nat. Lab., Bericht BNL-7319, Aug. 1963
- /80/ N. Froessling: The Evaporation of falling Drops, in: Gerlands Beiträge zur Geophysik, Vol 52, 1938, pp. 170 - 216
- /81/ S.G. Bankoff: Mechanism of Vapour Explosions, Final Report, Northwestern Univ., Report DOE/ET/37210-1, Mai 1984
- /82/ D.H. Cho, W.L. Chen und R.W. Wright: A Parametric Study of Pressure Generation and Sodium-Slug Energy from Molten-Fuel-Coolant Interactions, Argonne Nat. Lab., Bericht ANL-8105, Aug. 1974
- /83/ G. Grötzbach: unveröffentlicht, 1983
- /84/ G. Grötzbach: unveröffentlicht 1985
- /85/ U. Zerwas, G. Grötzbach und St. Misu: unveröffentlicht, 1985
- /86/ St. Misu, unveröffentlicht: 1984
- /87/ G. Grötzbach, St. Misu, K.L. Nissen und K.H. Bechler: unveröffentlicht, 1985
- /88/ G. Grötzbach, St. Misu und U. Zerwas, unveröffentlicht, 1983
- /89/ P.J. Roache: Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publ., 1982
- /90/ J.F. Dearing: SIMMER-II Analysis of Short-Risetime Two-Component, Transient Boiled-Up Pool Simulation Tests, Los Alamos Report, LA-9736-MS, Mai 1983

- /91/ O.C. Jones Jr. und N. Zuber: The Interrelation between Void Fraction Fluctuations and Flow Patterns in Two-Phase Flow, in: Int. J. Multiphase Flow, Vol. 2, 1975, pp. 273 - 306
- /92/ W. Siemes: Gasblasen in Flüssigkeiten, Teil II, in: Chemie-Ingenieur-Technik, Vol. 1, 1954, pp. 614 - 630
- /93/ Z. Novosad: Heat Transfer in Two-Phase Flow: Gas-Liquid, in: Chem. Listy, Vol. 48, 1954, pp. 946 - 958
- /94/ R.J. Thome: Effect of a Transverse Magnetic Field in Vertical Two-Phase Flow through a Rectangular Channel, Argonne Nat. Lab., Bericht ANL-6845, März 1964
- /95/ M. Ishii: One Dimensional Drift-Flux Model and Constitutive Equations in Various Two-Phase Flows, Argonne Nat. Lab., Bericht ANL-77-47, 1977
- /96/ R.C. Martinelli und D.B. Nelson: Prediction of Pressure Drop During Forced-Circulation Boiling of Water, in: Trans. ASME, Vol. 70, 1948, pp. 695 - 702
- /97/ D. Chisholm und L.A. Sutherland: Prediction of Pressure Gradients in Pipeline Systems During Two-Phase Flow, in: Proc. Int. Mech. Eng., Vol. 184 (3c), 1979, pp. 24 - 32
- /98/ H.K. Fauske und M.A. Grolmes: Pressure Drop for Forced Convection Flashing Sodium, in: Liquid-Metal Heat Transfer and Fluid Dynamics, Proc. of The Winter Annual Meeting of ASME, (New York, 1970), pp. 135 - 143
- /99/ A. Kaiser und W. Pepler: Sodium Boiling Experiments in a Seven Pin Bundle: Flow Patterns and Two-Phase Pressure Drop, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 43, 1977, pp. 285 - 293



- /100/ J. Costa und P. Charlety: Forced Convection Boiling of Sodium in a Narrow Channel, in: Liquid-Metal Heat Transfer and Fluid Dynamics, Proc. of The Winter Annual Meeting of ASME, (New York, 1970), pp. 172 - 178
- /101/ Yu.A. Zeigarnik und V.D. Litvinov: Heat Transfer and Pressure Drop in Sodium Boiling in Tubes, in: Nucl. Sci. and Eng., Vol. 73, 1980, pp. 19 - 28
- /102/ I.T. Alad'yev, I.G. Gorlov und L.D. Dodonov: Hydrodynamics of a Two-Phase Flow of Potassium in Tubes, ASME, Heat Transfer, Soviet Research, Vol. 1, No 4, 1969, pp. 1 - 12
- /103/ A. Kaiser: unveröffentlicht, 1985
- /104/ H.W. Hoffman und A.I. Krakoviak: Forced-Convection Boiling of Potassium at Near Atmospheric Pressure, in: Proc. of 1962 High-Temperature Liquid-Metal Heat Transfer Technology Meeting, Brookhaven Nat. Lab., Bericht ENL 756 (C-35), Mai 1962
- /105/ H.C. No und M.S. Kazimi: Wall heat transfer coefficient for condensation and boiling in forced convection of sodium in: Nucl. Sci. and Eng., Vol. 81, 1982, pp. 319 - 324
- /106/ M.R. Granziera und M.S. Kazimi: Two-Dimensional, Two-Fluid Model for Sodium Boiling in LMFBR Fuel Assemblies, Massachusetts Institute of Technology, Bericht MIT-EL-80-011, Mai 1980
- /107/ St. Misu: unveröffentlicht, 1982
- /108/ P. Menzenhauer, St. Misu, W. Peppler, H. Will: Simulation of Mild TOP Accidents in Fast Breeder Reactor Using Thermite Filled Fuel Rod Simulators, Beitrag zum Fuel Rod Simulator Symposium, (Gatlinburg, USA, 1980)
- /109/ H. Will: unveröffentlicht, 1984

- /110/ H. Will: unveröffentlicht, 1985
- /111/ G. Rittirsch: Kriterien zur Wahl der Meßfilter und Abtastfrequenz sowie Methoden zur Meßfehlerkorrektur, angewandt bei Temperaturmessungen in Natrium, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 8/71-3, August 1971
- /112/ F. Kedziur: CALIPSO - A Computer Code for Calculation of the Thermodynamics, Fluid Dynamics and Geometry Changes following Pin Failure, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 73, 1982, pp. 69 - 81
- /113/ W. Pepler, P. Menzenhauer und H. Will: Simulated Fuel Melt Movement and Relocation in Two Seven-Pin-Bundle Geometries, (SIMBATH out-of-pile Experiments  $V_{th}$  74;  $V_{th}$  79), Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 3591, Nov. 1983
- /114/ Y.S. Touloukian: Thermophysical Properties of High Temperature Solid Materials, Mc. Millan Co., N.Y., 1967
- /115/ R. Schuster und W. Zimmerer: Darstellung der Stoffdaten des Systems MAPLIB in tabellarischer und graphischer Form, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 8/77-1, 1977
- /116/ St. Misu, H. Will: unveröffentlicht, 1982
- /117/ Properties for LMFBR Safety Analysis, Argonne Nat. Lab., Report ANL-CEN-RSD 76-1, 1976
- /118/ T.C. Chawla, D.L. Graff, R.C. Borg, G.L. Bordner, D.P. Weber, D. Miller: Thermophysical Properties of Mixed Oxide Fuel and Stainless Steel Type 316 for Use in Transition Phase Analysis, in: Nucl. Eng. and Design, Vol. 67, 1981, pp. 57 - 74

Anhang A1 Berechnungsformeln für Geometriedaten

Größe	Symbol	Pin	Hüllrohrseite	Kühlkanal gesamt	Wandseite
Strömungsquerschnittsfläche (z-Richtung)	A	$\pi r_i^2$	$\pi(r_w^2 - r_c^2) + \pi \epsilon (r_c^2 - r_i^2)$		
Strömungsquerschnittsfläche (r-Richtung)	$A_r$	$2\pi r_i \Delta z \epsilon$	$2\pi(r_w - r_c) \Delta z$		
Strukturenquerschnittsfläche	A	-	$\pi(r_{cs}^2 - r_i^2)$		$\pi(r_a^2 - r_{ws}^2)$
Oxydquerschnittsfläche	$A_{ox}$	-	$\pi(r_c^2 - r_{cs}^2)$		$\pi(r_{ws}^2 - r_w^2)$
Vertikale Fläche der Strukturen	$A^v$	$2\pi r_i \Delta z (1 - \epsilon)$	$2\pi r_c \Delta z (1 - \epsilon)$		$2\pi r_w \Delta z$
Reibungsfläche für Filme	$A^{fv}$	$2\pi(r_i + \delta) \Delta z (1 - \epsilon)$	$2\pi(r_c + \delta) \Delta z (1 - \epsilon) \beta$		$2\pi(r_w - \delta) \Delta z$
Maschenvolumen	$V_M$	$A \cdot \Delta z$		$A \cdot \Delta z$	
Hydraulischer Durchmesser	$D_h$	$2 r_i$	$2(r - r_c)$	$2(r_w - r_c)$	$2(r_w - r)$
Mittlerer Radius	r	$0.5 r_i$		$0.5(r_c + r_w)$	
Symmetrieradius für Geschwindigkeitsprofil	$\bar{r}$	$0.5 r_i$		$\sqrt{(r_w^2 - r_c^2) / [2 \ln(r_w / r_c)]}$	
Gasvolumenanteil bei Filmströmung	$\theta_g$	$\theta_g$	$1 - [(r_c + \delta)^2 - r_c^2] / (r^2 - r_c^2)$	$1 - [r_w^2 - (r_w - \delta)^2] / (r_w^2 - r^2)$	

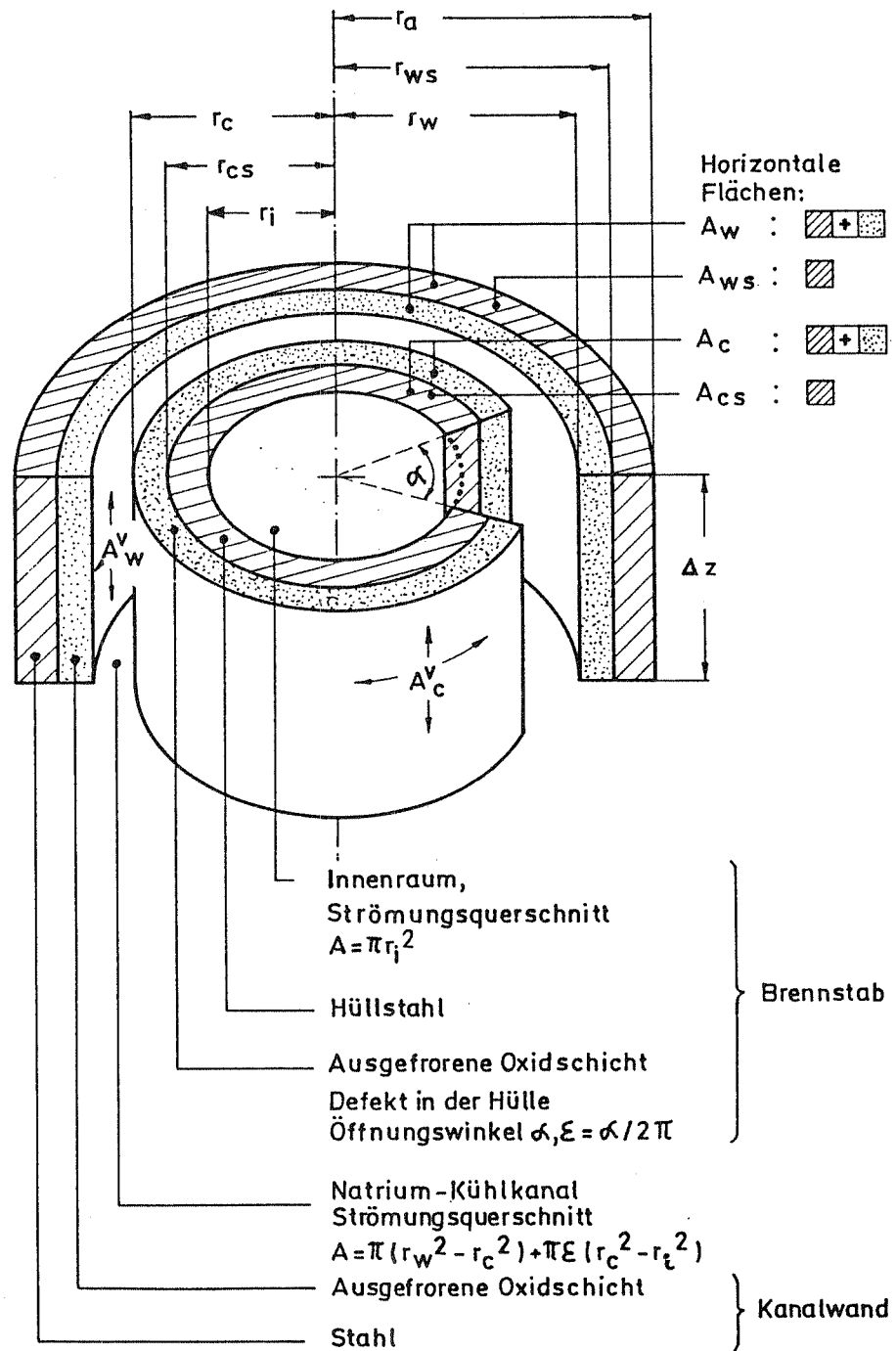


Abb. A1.1 Geometrieausschnitt der Teststrecke bei einer Defektstelle des Stabes (vordere Hälfte der Kanalwand weggeschnitten)

Anhang A2

Stoffeigenschaften

Dichte von flüssigem Natrium /8/

$$\rho_{nl}^P = (-0,2141 T_n + 1018,58031)(1 + \text{COMP}(p - p_0)) \quad \text{A2.1}$$

In dieser Gleichung ist  $p_0$  ein Bezugsdruck ( $p_0 = 0.1 \text{ MPa}$ ) und COMP die Kompressibilität des flüssigen Natriums /8/:

$$\text{COMP} = 1/\rho_{nl}^P [\partial \rho_{nl}^P / \partial p]_T \approx 1/(\rho_{nl}^P c^2) \quad \text{A2.2}$$

Die Größe  $c$  ist die Schallgeschwindigkeit

Dichte von Aluminiumoxid /115, 116/

$$\rho_{ox}^P = -6,684 \cdot 10^{-2} T_{th} + 3854 \quad \text{A2.4}$$

Dichte von Stahl /118/

$$\rho_s^P = -0,180 T_{th} + 7560 \quad \text{A2.3}$$

Dichte von Natriumdampf /8/

$$\rho_{nv}^P = 1/[4,99 \cdot 10^6 (1 - T_n/2733)^{0,42} \cdot 1/T_n \cdot 1/(\partial p / \partial T)_{sat} + 1/\rho_{nl}^P] \quad \text{A2.5}$$

Der Ausdruck ist abgeleitet aus der Clausius-Clapeyron-Gleichung unter Sättigungsannahme. Sie ergibt vernünftige Werte bis 90 % der kritischen Temperatur ( $T_{krit} = 2733 \text{ K}$ ) /8/.

Dichte von Gas (ideale Gasgleichung)

$$\rho_{fg}^P = p_{fg} / (R_{fg} T_{fg}) \quad \text{A2.6}$$

Die Gaskonstante von Natriumdampf wird entsprechend der Gleichung

$$R_{nv} = p_n / (S_{nv}^p T_n)$$

A2.7

ermittelt. Die temperatunabhängigen Daten für  $p_n$  und  $S_{nv}^p$  entsprechend den Angaben aus /117/. Folgende Funktion von  $R_{nv}$  ist in CALIPSO eingebaut:

$R = 316$	$T_n \leq 1200 \text{ K}$	A2.8
$R = 1.013 (-0.06 T_n + 388)$	$1500 \text{ K} \geq T_n > 1200 \text{ K}$	
$R = 1.013 (-0.12 T_n + 478)$	$2000 \text{ K} \geq T_n > 1500 \text{ K}$	
$R = 1.013 (-0.13 T_n + 498)$	$T_n > 2000 \text{ K}$	

Tabelle A2.1 Stoffeigenschaften

Stoffeigenschaft	Einheit	Natrium	Eisen/Stahl	Aluminiumoxyd	Natriumdampf	Gas	Gemisch
Schmelztemperatur	K	371	1700	2313	-	-	-
Siedewärme	J/kg	*					
Schmelzwärme	J/kg		$2,774 \cdot 10^5$	$1,067 \cdot 10^6$	-	-	-
Spezifische Wärme bei konst. Volumen	J(kg k)	920	788	1320	2370	1450	$\sum c_{p_i} \rho_i / \sum \rho_i$
Wärmeleitfähigkeit	W/mk	57	33.5	7	0,065	0,11	$\sum \alpha_i \theta_i / \sum \theta_i$
Dichte	kg/m <sup>3</sup>	**	**	**	**	**	$\sum \rho_i \theta_i / \sum \theta_i$
Dyn. Zähigkeit	Ns/m <sup>2</sup>	$1,79 \cdot 10^{-4}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$	$1,93 \cdot 10^{-5}$	$6,8 \cdot 10^{-5}$	$\sum \eta_i \theta_i / \sum \theta_i$
Oberflächenspannung	N/m	0,106	1,34	0,5	-	-	$\sum \sigma_i \theta_i / \sum \theta_i$
Kompressibilität	m <sup>2</sup> /N	$1,167 \cdot 10^{-9}$	-	-	-	-	-
Gaskonstante	m <sup>2</sup> /(s <sup>2</sup> k)	-	-	-	**	286,8	
Prandtlzahl		$2,89 \cdot 10^{-3}$	$3,53 \cdot 10^{-2}$	0,735	0,615	0,73	

\*  $h_n = 4,99 \cdot 10^6 \left(1 - \frac{T}{2733}\right)^{0,42} / 8 /$

Bemerkung: Literaturstellen für Stoffdaten sind /114, 116, 117/

\*\* f(p, T) siehe oben

Anhang A3

Impulserhaltungsgleichungen für eine stationäre Zweiphasenströmung

Die Impulserhaltungsgleichungen für eine stationäre, isotherme Zweiphasenströmung eines Gas-Flüssigkeits-Gemisches lauten /37/:

$$\theta_l \, dp/dz = F_{v,l}^k - F_l^{vis} - \rho_l^p \theta_l g \quad (\text{flüssige Phase}) \quad A3.1$$

$$\underbrace{\theta_v \, dp/dz}_{\text{Druckgradient}} = \underbrace{-F_{v,l}^k}_{\text{Zwischenphasenreibung}} - \underbrace{F_v^{vis}}_{\text{Wandreibung}} - \underbrace{\rho_v^p \theta_v g}_{\text{Schwerkraft}} \quad (\text{Gasphase}) \quad A3.2$$

$$\theta_l + \theta_v = 1 \quad A3.3$$

Bei der Erstellung dieser Gleichungen wurde zusätzlich angenommen, daß es sich um eine nach oben gerichtete 1D-Strömung beider Phasen handelt. Der Strömungsquerschnitt ist konstant. Unter Vorgabe der Stoffeigenschaften  $\rho_{nl}^p, \rho_{nv}^p$ , der Geschwindigkeit, der flüssigen Phase  $v_l$  und des Gasvolumenanteils entsteht folgendes Gleichungssystem mit den Unbekannten Reibungsdruckverlust  $dp/dz$  und Geschwindigkeit der Gasphase (bzw. Schlupf):

$$dp/dz = F_{v,l}^k / \theta_l - F_l^{vis} / \theta_l - \rho_l^p g \quad A3.4$$

$$F_{v,l}^k (1/\theta_l + 1/\theta_v) - (F_l^{vis} / \theta_l - F_v^{vis} / \theta_v) - g (\rho_l^p - \rho_v^p) = 0 \quad A3.5$$

$$\theta_l + \theta_v = 1 \quad A3.6$$

Diese Gleichungen können mit der von Zuber und Findlay /68/ gegebenen Beziehung zwischen der Geschwindigkeit einer kontinuierlichen und einer dispersen Phase ergänzt werden, um auf diese Weise eine Korrelation für den Widerstandsbeiwert  $C_D$  zu ermitteln (s. Kap. 4.2.3.1.2).

Für den im Kap. 6.2.2 gezeigten Vergleich zwischen Rechnung und Experiment sind ebenfalls die Gln. A3.3 bis A3.5 hinzugezogen, diesmal unter Vorgabe der in CALIPSO angenommenen strömungsformabhängigen Korrelationen für die Zwischenphasenreibungskraft und für die Wandreibungskraft.



Anhang 4 Eingabedaten und Modellparameter für die Nachrechnung

von  $V_{Th} 71/2$  und  $V_{Th} 71/4$

Eingabedaten für die Nachrechnung von  $V_{Th} 71/2$

```

C: *****CALIPSO RUN OF SIMBATH VTH71/2 DZ MIN=2.D-2 M *****
C: ** VERSION AB 5.85 ***
C-----STEUERVARIABLEN-----
1: TEND DT DTMAX KREST TREST
   1.000D-1 5.D-7 2.5D-6 0 1.D-1
2: NPRALL NPRT TPRALL
   0 0 1.0000D-1
3: DTPR1 T1 DTPR2 T2 DTPR3
   1.D-6 3.D-6 5.D-5 5.D-5 1.D-3
4: NPLALL NPLT TPLALL
   0 0 1.D-1
5: DTPL1 TPL1 DTPL2 TPL2 DTPL3
   1.D-6 3.D-6 5.D-5 5.D-5 1.D-3
6: LPR1 LPR2 LPR3 LPR4 LPR5 LPR6 LPR7 LPR8 LPR9 LPR10 LPR11 LPR12
   F F F F F F F F F F F T
7: DTPRPL COURL COURU
   1.D-4 0.1D0 0.5D0
C-----GEOMETRIE-----
8: JPL JPU JDL JDU NLPL NUPL
   22 35 24 24 11 10
9: JCL JCU JPUJP
   3 46 3
10: LPLCL NRCVAR ZKONST
   0 0 0
11: RI RCO RWO RA RPL DZPL
   3.5D-3 3.8D-3 10.D-3 14.5D-3 0.2D0 0.1D0
12: RW(J) FUER J=JCL,JCU
   1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2
   1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.000D-2
   1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
   1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
   1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
   1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 4.000D-3
   4.000D-3 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
   2.000D-2 2.000D-2
13: DRW(J) FUER J=JCL,JCU
14: RC(J) FUER J=JCL,JCU FALLS NRCVAR=1
15: DZ(J) FUER J=JCL,JCU FALLS ZKONST=0
   7.26D+0 5.10D+0 3.42D+0 3.00D+0 2.00D+0 1.35D+0
   9.00D-1 6.00D-1 4.50D-1 3.00D-1 2.00D-1 1.00D-1
   7.00D-2 6.00D-2 6.00D-2 4.00D-2 3.00D-2 2.00D-2
   2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2
   2.00D-2 2.00D-2 3.00D-2 4.00D-2 5.00D-2 5.00D-2
   6.00D-2 6.00D-2 7.00D-2 1.00D-1 1.50D-1 1.50D-1
   2.00D-1 2.00D-1 3.00D-1 4.50D-1 4.70D-1 7.00D-1
   1.00D+0 1.95D+0
16: GRAV(J) FUER J=JCL,JCU
   -4.621D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
   0.00D0 0.00D0 0.00D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
   9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
   9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
   9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
   9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
   0.00D0 0.00D0
C-----ANFANGSZUSTAND-----
17: ZETAX(J) FUER J=JCL,JCU
   47.80D0 55.00D0 67.50D0 0.00D0 10.50D0 36.50D0
   0.00D0 10.50D0 0.00D0 0.00D0 5.50D0 0.00D0
   0.60D0 0.00D0 0.60D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
   0.00D0 2.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
   0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 2.00D0 0.00D0
   2.00D0 0.00D0 0.00D0 0.29D0 0.00D0 0.00D0
   0.706D0 0.00D0 0.00D0 0.33D0 0.00D0 1.52D0
   0.94D0 0.00D0
18: EPS(J) FUER J=JDL,JDU
   0.01D0
19: NTCVAR NTPVAR NVOIDV LZETAX
   0 1 0 T
20: XSO XFG TFGP TFGC TATHO
   0.589D0 4.8600D-3 0.71D0 0.37D0 0.514D0
21: TTHO TNO TNPL PPL QPO ZETAPL
   3540.D0 673.D0 673.D0 1.D5 1.075D-3 4.1D-1
22: TTH2(IHIN,J) FUER J=JCL,NLPL,JPL-1
   673.D0 673.D0 673.D0 673.D0 673.D0 673.D0
   673.D0 673.D0
23: TTH2(IHIN,J) FUER J=JPU+1,JCU-NUPL
   673.D0
24: TTH2(IHIN,J) FUER J=JPL,JPU FALLS NTPVAR=1
   3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0
   3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0
   3540.D0 3540.D0
25: TN2(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS NTCVAR=1
26: TAGAS(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS NVOIDV=1
27: TFGOTH(IHIN,J) FUER J=JPL,JPU FALLS TFGP=0
28: TFGOTH(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS TFGC=0
LPR1=.TRUE. <=> CALL BILANZ
LPR2=.TRUE. <=> CALL CPLOTT(ZEITPLOT) WITH INCREMENT DTPRPL
LPR3,...,LPR11 CURRENTLY NOT USED
LPR12=.TRUE. <=> PRINT INCLUDING AXIAL BOUNDARY CELLS

```

Eingabedaten für die Nachrechnung von  $V_{Th}$  71/4

```
C: *****CALIPSO RUN OF SINBATH VTH71/4 DZ MIN=2.D-2 N *****
C: ** VERSION AB 01.85 **
C-----STEUERVARIABLEN-----
1: TEND DT DTMAX KREST TREST
1.000D-1 5.D-7 2.5D-6 0 1.D-1
2: NPRALL NPRT TPRALL
0 0 1.0000D-1
3: DTPR1 T1 DTPR2 T2 DTPR3
1.D-6 3.D-6 5.D-5 5.D-5 1.D-3
4: NPLALL NPLT TPLALL
0 0 1.D-1
5: DTPL1 TPL1 DTPL2 TPL2 DTPL3
1.D-6 3.D-6 5.D-5 5.D-5 1.D-3
6:LPR1 LPR2 LPR3 LPR4 LPR5 LPR6 LPR7 LPR8 LPR9 LPR10 LPR11 LPR12
F F F F F F F F F F F T
7: DTPRPL COURL COURU
1.D-4 0.1D0 0.5D0
C-----GEOMETRIE-----
8: JPL JPU JDL JDU NLPL NUPL
22 35 24 24 11 10
9: JCL JCU JPUMP
3 46 3
10: LPLCL NRCVAR ZKONST
0 0 0
11: RI RCD RWO RA RPL DZPL
3.5D-3 3.8D-3 10.D-3 14.5D-3 34.28D-3 0.1D0
12: RW(J) FUER J=JCL,JCU
1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2
1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.425D-2 1.000D-2
1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 6.000D-3
1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2 1.000D-2
2.000D-2 2.000D-2
13: DRW(J) FUER J=JCL,JCU
14: RC(J) FUER J=JCL,JCU FALLS NRCVAR=1
15: DZ(J) FUER J=JCL,JCU FALLS ZKONST=0
7.26D+0 5.10D+0 3.42D+0 3.00D+0 2.00D+0 1.35D+0
9.00D-1 6.00D-1 4.50D-1 3.00D-1 2.00D-1 1.00D-1
7.00D-2 6.00D-2 6.00D-2 4.00D-2 3.00D-2 2.00D-2
2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2 2.00D-2
2.00D-2 2.00D-2 3.00D-2 4.00D-2 5.00D-2 5.00D-2
6.00D-2 6.00D-2 7.00D-2 1.00D-1 1.00D-1 1.50D-1
2.00D-1 2.50D-1 3.00D-1 4.50D-1 4.70D-1 7.00D-1
1.00D+0 1.95D+0
16:GRAV(J) FUER J=JCL,JCU
-4.6210D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
0.00D0 0.00D0 0.00D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0 9.81D0
0.00D0 0.00D0
C-----ANFANGSZUSTAND-----
17: ZETAX(J) FUER J=JCL,JCU
10.00D0 55.00D0 67.50D0 0.00D0 70.00D0 0.00D0
0.00D0 10.50D0 0.00D0 0.00D0 5.50D0 0.00D0
0.60D0 0.00D0 0.60D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
0.00D0 0.60D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0
0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.60D0 0.00D0 0.00D0
0.60D0 0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.50D0 1.63D0
0.00D0 0.00D0 0.00D0 0.33D0 0.00D0 1.52D0
0.94D0 0.00D0
18: EPS(J) FUER J=JDL,JDU
3.00D-3
19: NTCVAR NTPVAR NVOIDV LZETAX
0 1 0 T
20: XSO XFG TFGP TFGC TATHO
0.589D0 5.7532D-3 0.71D0 0.37D0 0.514D0
21: TTHO TNO TNPL PPL QPO ZETAPL
3540.D0 673.D0 673.D0 1.D5 1.075D-3 4.1D-1
22: TTH2(IMIN,J) FUER J=JCL+NLPL,JPL-1
673.D0 673.D0 673.D0 673.D0 673.D0 673.D0
673.D0
23: TTH2(IMIN,J) FUER J=JPU+1,JCU-NUPL
673.D0
24: TTH2(IMIN,J) FUER J=JPL,JPU FALLS NTPVAR=1
3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0
3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0 3540.D0
3540.D0 3540.D0
25: TN2(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS NTCVAR=1
26: TAGAS(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS NVOIDV=1
27: TFGOTH(IMIN,J) FUER J=JPL,JPU FALLS TFGP=0
28: TFGOTH(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU FALLS TFGC=0
LPR1=.TRUE. <=> CALL BILANZ
LPR2=.TRUE. <=> CALL CPLOTT(ZEITPLOT) WITH INCREMENT DTPRPL
LPR3,...,LPR11 CURRENTLY NOT USED
LPR12=.TRUE. <=> PRINT INCLUDING AXIAL BOUNDARY CELLS
```

Bedeutung der Variablennamen in den Eingabedaten

BEDEUTUNG DER VARIABLENNAMEN IN DEN EINGABEDATEN		
*****		
COURL	UNT. GRENZE COURANTZAHL F. ZEITSCHRITT	-
COURU	OBERE GRENZE COURANTZAHL F. ZEITSCHRITT	-
DT	ANFANGS ZEITSCHRITT	SEC
DMAX	MAXIMALER ZEITSCHRITT	SEC
DRW	Z.Z. NICHT AKTIV	-
DTPRPL	ZEITABSTAND FUER PRINTER-PLOT	SEC
DTPR1/2/3	ZEITABSTAENDE FUER AUSDRUCK	SEC
DTPL1/2/3	ZEITABSTAENDE FUER PLOTTEN	SEC
DZ(J)	DELTA Z	M
DZPL	DELTA Z FUER PLENUM	M
EPS(J)	EPS=ALFA/(2*PI) OEFFNGSWINKEL DEFEKT	-
GRAV(J)	ERDBESCHLEUNIGUNG	M/(SEC**2)
JCL	UNTERSTE REELLE KANALMASCHE	-
JCU	OBERSTE REELLE KANALMASCHE	-
JDL	UNTERSTE REELLE DEFEKTMASCHE ZU BEGINN	-
JDU	OBERSTE REELLE DEFEKTMASCHE ZU BEGINN	-
JPL	UNTERSTE REELLE PINMASCHE	-
JPU	OBERSTE REELLE PINMASCHE	-
JPUMP	KUELKANALMASCHE DER PUMPE	-
KREST	1: RESTART, SONST=0	-
LPCL	1: KANAL UNTEN VERSCHL., SONST=0	-
LPR1	=.TRUE. INFO UEBER BILANZ DER MASSE	-
LPR2	=.TRUE. PRINTER-PLOT MIT DTPRPL	-
LPR12	=.TRUE. PRINT FUER AX. RANDMASCHEN	-
LZETAX	=.TRUE. AUT. KORREKTUR DER ZETA WERTE	-
NLPL	ANZ. MASCHEN LP MIT VAR. RW	-
NPLT	0/1: PLOTDATEN WERDEN (NICHT) GESCHRBN.	-
NPRALL	0/1: JEDER SCHRITT WIRD GEDRUCKT	-
NPLALL	0/1: JEDER SCHRITT WIRD GEPLOTTET	-
NPRT	ANZ. D. ZEITSCHRITTE ZW. AUSDRUCKEN	-
NRCVAR	0: KONST. RC, SONST =1	-
NTCVAR	0: KONST. ANF.TEMP. IM KANAL; SONST =1	-
NTPVAR	0: KONST. ANF.TEMP. IM PIN; SONST =1	-
NUPL	ANZ. MASCHEN UP MIT VAR. RW	-
NVOIDV	0: KONST. VOID ZU BEGINN; SONST =1	-
PPL	DRUCK IM PLENUM	N/(M**2)
QPO	VOLUMENSTROM VON NATRIUM IM KUEHLKANAL	M**3/S
RA	AEUSSERER RADIUS WAND	M
RC(J)	AEUSSERER RADIUS HUELLE/OXIDSCHICHT	M
RCO	ANFANGS(AUSSEN)RADIUS DER HUELLE	M
RI	INNERER RADIUS HUELLE	M
RPL	RADIUS DES PLENUMS	M
RW(J)	INNERER RADIUS WAND/OXIDSCHICHT	M
RWO	ANFANGS(INNEN)RADIUS DER WAND	M
TATHO	AXIAL KONST ANFANGSTHERMITVOLUMENANTEIL	-
TEND	ENDE DER PROBLEENZEIT	SEC
TFGP	TEMP.VERH. TFG/TTH IM PIN(ANFANGSWERT)	-
TFGC	TEMP.VERH. TFG/TTH IM CHAN(ANFANGSWERT)	-
TNO	KONST. ANFANGSTEMP. NATRIUM IM KANAL	K
TPLALL	AB T=TPRALL WIRD JEDER STEP GEPLOTTET	SEC
TPL1/2/3	ZEITABSTAENDE FUER PLOTTEN	SEC
TPRALL	AB T=TPRALL WIRD JEDER STEP GEDRUCKT	SEC
TPR1/2/3	ZEITABSTAENDE FUER DRUCKEN	SEC
TREST	RESTARTBEGINN BEI T>= TREST (PLOTDATEI)	SEC
TTH(I,J)	TEMP. THERMIT	K
TTHO	KONST. ANFANGSTEMP. THERMIT IM PIN	K
T1	BIS T1 WIRD ALLE DTPR1 SEC GEDRUCKT	SEC
TPL1	BIS T1 WIRD ALLE DTPL1 SEC GEPLOTTET	SEC
T2	BIS T2 WIRD ALLE DTPR2 SEC GEDRUCKT	SEC
TPL2	BIS T1 WIRD ALLE DTPL2 SEC GEPLOTTET	SEC
XFG	MASSENANTEIL SPALTGAS (=MFG/MTH)	-
XSO	MASSENANTEIL STAHL(=MS/MTH)(ANFANGSWERT)	-
ZETAX(J)	REIBBEIWERTE AXIAL IN DEN KANALMASCHEN	-
ZKONST	0: VARIABLES DZ; SONST: DZ=ZKONST=KONST.	M

Modellparameter für die Nachrechnung von V<sub>Th</sub> 71/2 und V<sub>Th</sub> 71/4

```

C C MODELLPARAMETER FUER DIE NACHRECHNUNG VON VTH 71/2 ,VTH 71/4
C C *****
C C DISSI
C C -----
C C EYA=0.2D0
C C CVI=1.0D0
C C TAGZU=0.5D0
C C CDIS=2.7D0
C C CO=1.1D0
C C LMIC=.TRUE.
C C ETA = COEFF. FOR THERM SODIUM FRICTION (SEE WORK OF SOO)
C C CVI = COEFF. FOR VIRTUAL MASS CALCULATION
C C TAGZU= GAS VOL. FRACT. FOR CHANGE IN CD CALC FOR TRANSITION
C C FLOW FROM ISHII TO ZUBER METHOD FOR LMIC=.TRUE.
C C CDIS = RISE POWER FOR VOL. FRACT. CORRECTION OF INTREPH.
C C FORCES FOR HIGH PACKING
C C CO = COEF FOR INTERPHASE FRICTION ZUBER CORRELATION
C C LMIC = .TRUE. CALCULATIN OF CD FOR PARTICLE ZUBER NISU METHOD
C C
C C HTRANS
C C -----
C C LOPTI=.TRUE.
C C RONVHI=1.0D-2
C C NRUB=1
C C NDROP=1
C C CHHS=1.0D0
C C CHNS=1.0D0
C C CHNV=0.2D0
C C CHNTH=1.0D-1
C C CHNTH=1.0D-1
C C CRAD=0.4D-8
C C CH=2.0D0
C C TAUHTR=2.5D-3
C C
C C LOPTI = .TRUE. METHODE 3 TH CLAD IN PIN (HCTH = FR. SCHULZ)
C C RONVHI = MINIMUM RONY FOR HEAT TRANSFER CALC
C C NRUB = MINUM NR OF BUBBLES IN A MESH FOR HEAT TRANSF. CALC
C C NDROP = MINUM NR OF DROPS IN A MESH FOR HEAT TRANSF. CALC
C C CH = RISE POWER FOR 1.-TAGAS CORRECTION HEAT TRANSF TH-NA
C C CHNTR = COEFF. FOR TIME CORRECTION OF HEAT TRANSF TH-NA
C C CRAD = RADIATION COEFFICIENT
C C * KOREKTION FAKTORS FOR THE EXCHANGED HEAT :
C C CHHS = THERMITE TO STRUCTURES
C C CHNS = SODIUM LIQ. AND VAP. TO STRUCTURES
C C CHNV = SOD. VAP AND GAS
C C CHNTH= SODIUM LIQ. TO THERMITE BY CONTACT(STANDARD METHOD)
C C CHNTH= SODIUM VAP. TO THERMITE
C C
C C FILM
C C -----
C C TAININ=1.0D-2
C C COEF1=1.0D0
C C RHIN=1.0D-2
C C DEP=0.15D0
C C
C C TAIN = MINIMUM VOID FRACTION FOR FILM CALCULATION
C C COEF1 = COEFFICIENT FOR INITIAL VALUE OF THERMITE FILM
C C RHIN = MINIMUM RELATIVE AZIMUTHAL EXTENSION OF THERMITE FILMS
C C DEP = RELATION RADIAL TURBULENT VELOC. TO AXIAL VELOC USED
C C FOR DEPOSITION OF DROPLETS ON FILMS
C C
C C FLOW
C C -----
C C TAGASB=.3D0
C C TAGASC=.65D0
C C TAGASD=.95D0
C C EPSHAX=0.95D0
C C TAGASB = GAS VOLUME FRACT FOR BUBBLY/CHURN
C C TAGASC = GAS VOLUME FRACT FOR CHURN/ANNULAR
C C TAGASD = GAS VOLUME FRACT FOR ANNULAR/PARTICULATE
C C
C C RADIIEN
C C -----
C C RTHMAX=1.0D
C C RTHMIN=0.25D-3
C C RNLMAX=1.0D
C C RNLMIN=0.3D-3
C C RNVMAX=1.0D
C C RNVMIN=0.5D-3
C C TAST=0.25D0
C C TAU6=.1D0
C C TAU1=.1D0
C C OH=1.0D0D0
C C WEP=8.0D0
C C WEP=13.0D0
C C TAURAD=5.D-6
C C TANFCI=0.1D0
C C RTHFCI=5.D-4
C C
C C RTHMAX = MAX RADIUS OF THERMITE
C C RTHMIN = MIN RADIUS OF THERMITE
C C RNLMAX = MAX RADIUS OF SODIUM
C C RNLMIN = MIN RADIUS OF SODIUM
C C RNVMAX = MAX RADIUS OF BUBBLES
C C RNVMIN = MIN RADIUS OF BUBBLES
C C TAST, OF COALESCENCE OF DROPS, BUBBLES AFTER COLLISION
C C TAU1, OH
C C OMEGA = PROBABILITY OF COALESCENCE
C C WEP = WEBER-NUMBER FOR BUBBLES
C C WEP = WEBER-NUMBER FOR DROPLETS
C C TAU1 = COEFF. FOR EXPONENTIAL FUNCT.(CHANGES IN R=F(TIME))
C C TANFCI = VOLUME FRACTION OF SODIUM ABOVE WHICH FCI DESINTE-
C C GRATION OF THERMITE IS ALLOWED
C C RTHFCI = MAX RADIUS OF THERMITE IF FCI OCCURS
C C
C C MOMENT
C C -----
C C ULMAX=1.D2
C C ULPHIN=0.D0
C C UVHAX=1.D2
C C UVHIN=0.D0
C C VW3HX=1.D2
C C
C C ULMAX = MAX VALUE OF UL
C C ULPHIN = MIN VALUE OF UL
C C UVHAX = MAX VALUE OF UV
C C UVHIN = MIN VALUE OF UV
C C VW3HX = MAX VALUE OF VV (-VW3HX=MIN VALUE OF VV)
C C
C C TAGASB=.3D0
C C TAGASC=.65D0
C C TAGASD=.95D0
C C EPSHAX=0.95D0
C C TAGASB = GAS VOLUME FRACT FOR BUBBLY/CHURN
C C TAGASC = GAS VOLUME FRACT FOR CHURN/ANNULAR
C C TAGASD = GAS VOLUME FRACT FOR ANNULAR/PARTICULATE
C C
C C ENERGI
C C -----
C C LEFGC=.TRUE.
C C LEFGP=.TRUE.
C C LNVEXP=.TRUE.
C C TNHAX=2.0D3
C C
C C LEFGP = .TRUE. THE ENERGY EQ OF FISS GAS IN PIN IS CALC
C C LEFGC = .TRUE. THE ENERGY EQ OF FISS GAS IN CHANN IS CALC
C C LNVEXP = .TRUE. THE EXPANSION WORK OF SOD. VAP. IS CALC
C C TNHAX =MAX ALLOWED TEMPERATURE OF SODIUM
C C
C C INIT
C C -----
C C LZETAX=.TRUE.
C C LZETAX = .TRUE. AUT. CORR. OF INPUT VALUES FRICT. COEF.
C C
C C INITIALIZATION OF COMMON VARIABLES
C C -----
C C PI=3.14159265D0
C C G=9.81D0
C C DCF=1.0D0
C C VOID=1.0D-5
C C CV=0.5D0
C C ZETAR=1.8D0
C C TU=673.D0
C C ALFSU=1.05D1
C C
C C VOID = INITIAL VOID IN THE COOLANT CHANN.
C C CV = COEF FOR VIRTUAL MASS
C C ZETAR = FRICT. COEF FOR RADIAL DIRECTION
C C TU = OUTER TEMPERATURE
C C ALFSU = HEAT TRANSF. COEF FROM TEST SECTION
C C TO OUTSIDE MEDIUM
C C
C C MODELLPARAMETER FUER DIE NACHRECHNUNG VON VTH 71/4
C C *****
C C GEGENUEBER VTH 71/2 AENDERN SICH DIE FOLGENDE PARAMETER :
C C
C C VAR714
C C -----
C C XFGF=5.7532D-3
C C XFGF = MAXIMUM VALUE OF GAS RELEASE (XFG)
C C
C C MOMENT
C C -----
C C ULMAX=.5D2
C C ULPHAX=.5D2
C C
C C ULMAX = MAX VALUE OF UL
C C ULPHAX = MAX VALUE OF UV

```