



KfK 2824
September 1979

Entwicklung eines Rechencodes zur Beschreibung von Natrium- Spritz- und Flächenbränden

**I.: Die Codes SOFIRE II und
NABRAND im Vergleich**

A. Alexas
Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik
Projekt Schneller Brüter

KfK 2824

Entwicklung eines Rechencodes zur Beschreibung
von Natrium-Spritz- und Flächenbränden

I.: Die Codes SOFIRE II und NABRAND im Vergleich

A. Alexas

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Im Rahmen der Arbeiten zur Erstellung eines kombinierten Flächen- und Spritzbrand-Rechencodes für die Vorausberechnung des Ablaufes und der Auswirkungen von Natriumbränden wurden die bereits vorhandenen Natrium-Flächenbrand-Codes SOFIRE II und NABRAND auf die IBM 370/165 implementiert und miteinander verglichen.

Es zeigte sich, daß der NABRAND-Code vom programmiertechnischen Standpunkt aus das bessere Rechenprogramm darstellt. Allerdings enthält der Code einige Konservatismen bzw. Ungenauigkeiten, sowohl von den Modellannahmen wie auch von den verwendeten Transportkoeffizienten her gesehen.

Zur realistischeren Abschätzung der Folgen von Natriumbränden erscheint es daher angebracht, den NABRAND-Code auf der Basis neuerer Erkenntnisse zu verbessern. Sodann wird überprüft, ob eine Koppelung zwischen dem modifizierten NABRAND-Code und vorhandenen Spray-Brand-Modellen (z.B. der amerikanischen SPRAY-Code) sinnvoll ist.

Abstract

Development of a code for description of sodium spray and pool fires

Part I: Comparison between the codes SOFIRE II and NABRAND

In the scope of the development of a code to describe both, sodium pool- and spray fires, the well-known codes SOFIRE II and NABRAND have been compared.

Regarding the program technique of both codes, the NABRAND-code seems to be the better one, though it includes some conservatisms in the modelling and in the transport coefficients used.

For a realistic estimation of the consequences of large sodium fires in an LMFBR, an elimination of these conservatisms is necessary. After that it must be investigated if a combination of the modified version of the NABRAND-code and of a spray fire-code (for example the code SPRAY) is efficient.

<u>Inhalt</u>	<u>Seite</u>
1. Einleitung	1
2. Theoretische Modelle zur Beschreibung von Natrium-Bränden	1
3. Das SOFIRE II-Modell	2
3.1 Das Ein-Zellen-Modell	2
3.2 Das Zwei-Zellen-Modell	9
4. Das NABRAND-Modell	10
5. Vergleich der beiden Modelle	15
5.1 Berechnung der Brandrate	15
5.2 Modellmäßige Unterschiede zwischen SOFIRE II und NABRAND	21
5.3 Unterschiede in den Wärmeübergangskoeffizienten und Stoffkonstanten	22
6. Schlußfolgerungen	23

1. Einleitung

Die Auslegung von Containmentsystemen schneller natriumgekühlter Brutreaktoren (SBR's) wird unter anderem auch von den Auswirkungen möglicher Natriumbrände, die infolge eines Rohrleitungsbruchs oder eines Lecks entstehen können, bestimmt.

Natriumbrände stellen in vielerlei Hinsicht ein Sicherheitsproblem für ein SBR-Containment und dessen Umgebung dar:

- sie führen zur Temperatur- und Druckerhöhung im Containment und gefährden damit die Integrität und Stabilität des Reaktorgebäudes
- sie tragen zur Bildung chemisch aggressiver Verbindungen bei und erhöhen die korrosive Belastung für die Strukturmaterialien
- sie ermöglichen die Bildung von Natrium- und Natriumbrand-Aerosolen, deren Gefährdungspotential sehr hoch sein kann, insbesondere, wenn es sich hierbei um kontaminiertes oder aktiviertes Primär-Natrium handelt.

Die theoretische Erfassung und Beschreibung des dynamischen Ablaufes von Natrium-Bränden und deren Auswirkungen stellt daher ein komplexes Problem dar, das umso schwieriger ist, als die Kenntnis einzelner physikalischer Größen und Transport-Koeffizienten teilweise auf ungenügend abgesicherten Ermittlungsmethoden basiert.

Im Hinblick auf eine realistische Abschätzung der Folgen von Natrium-Bränden für die Gebäude-Strukturen eines SBR erscheint es daher unerlässlich, eine Überprüfung der Modell-Annahmen und der verwendeten Stoffdaten bzw. Transportkoeffizienten der gebräuchlichen Rechencodes auf der Basis neuerer Erkenntnisse vorzunehmen.

2. Theoretische Modelle zur Beschreibung von Natrium-Bränden

Die Auswirkungen * von Natrium-Bränden auf die Stabilität und Integrität eines SBR-Containments hängen in erster Linie von folgenden Randbedingungen ab:

1. Art des Brandes (Spray-Brand, Pool-Brand)

*Darunter werden im Rahmen dieses Berichtes lediglich die thermodynamischen Belastungen der Strukturen verstanden.

2. Geometrie des Brandherdes bzw. der Brandquelle (Durchmesser des Lecks, Oberfläche und Tiefe der Lache)
3. Physikalisch-chemischer Zustand des Brandraumes (O_2 -Konzentration, relative Feuchte, Druck im Brandraum).

Zur theoretischen Beschreibung des Ablaufes und der Auswirkungen von Natriumbränden sind weltweit eine Reihe von mehr oder weniger umfangreichen Programm-Systemen entwickelt worden. Ein Gesamt-Überblick über Möglichkeiten und Grenzen einiger dieser analytischen Modelle wird in [1] gegeben. Im Rahmen dieses Berichtes werden 2 Modelle ausführlich behandelt und gegenübergestellt, der Atomic International-Code SOFIRE II [2] und der Interatom-Code NABRAND [3].

3. Das SOFIRE II-Modell

3.1 Das Ein-Zellen-Modell

Der SOFIRE II-Code berechnet Druck- und Temperaturverläufe, die sich infolge eines schlagartig einsetzenden Pool-Brandes in einem SBR-Containment ausbilden. Der Code unterscheidet zwischen Ein-Zelle- und Zwei-Zellen-Geometrie (Abb. 1, 2). Im folgenden werden die Modell-Annahmen und Berechnungsmethoden dargestellt.

1. Natrium-Brandrate:

Die Brandrate, B_R , wird wie folgt definiert:

$$B_R(t) = \frac{1}{F_B} \cdot \frac{dm}{dt} = H_G \cdot \rho_G \frac{M_{O_2}(t)}{M_{Luft}(t)} \cdot S \quad [kg/m^2/hr] \quad (1)$$

mit H_G = Gastransport-Koeffizient [m/h]

$M_{O_2}(t)/M_{Luft}(t)$ = O_2 -Anteil in der Verbrennungsluft [kg- O_2 /kg-Luft]

ρ_G = Dichte des Gases [kg/m³]

S = Stöchiometrische Verbrennungsrate [kg-Na/kg- O_2]

F_B = Brandfläche [m²]

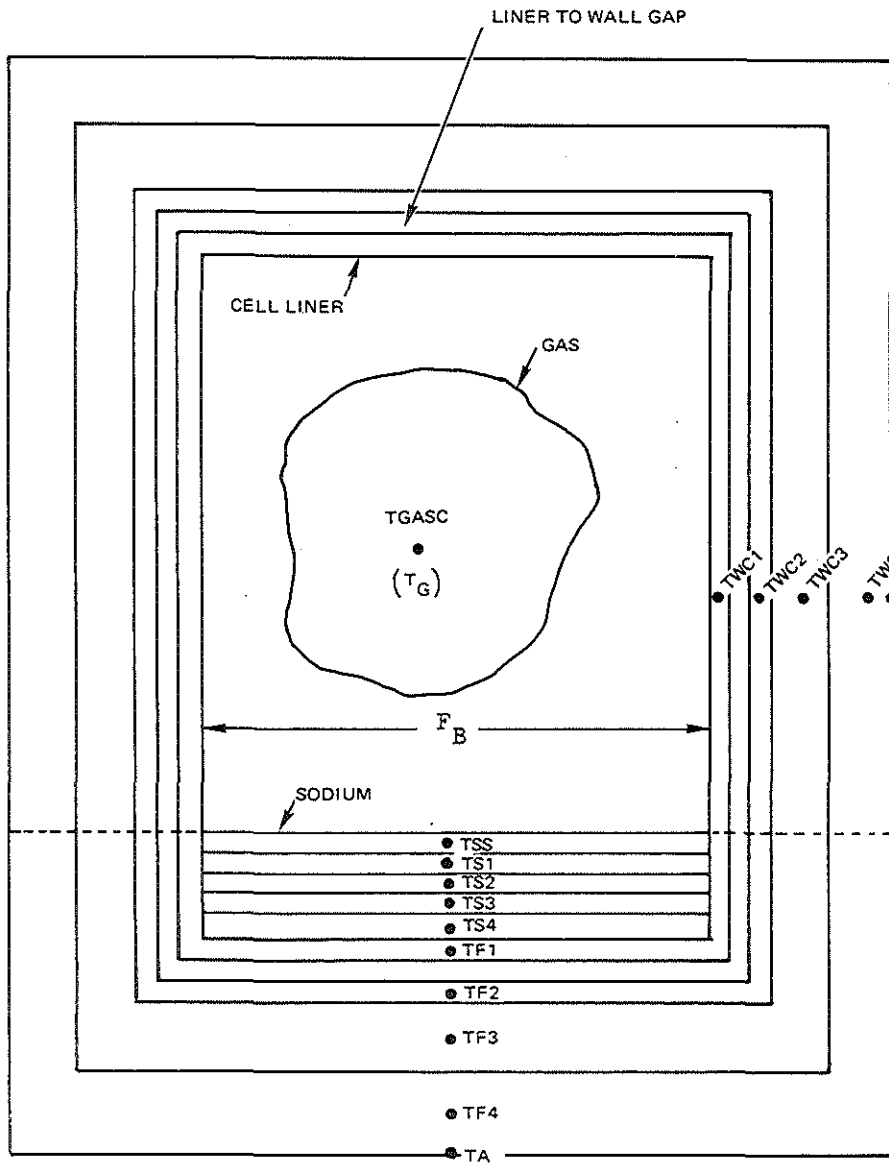


Abb. 1 SOFIRE-II : 1 - Zellen - Geometrie

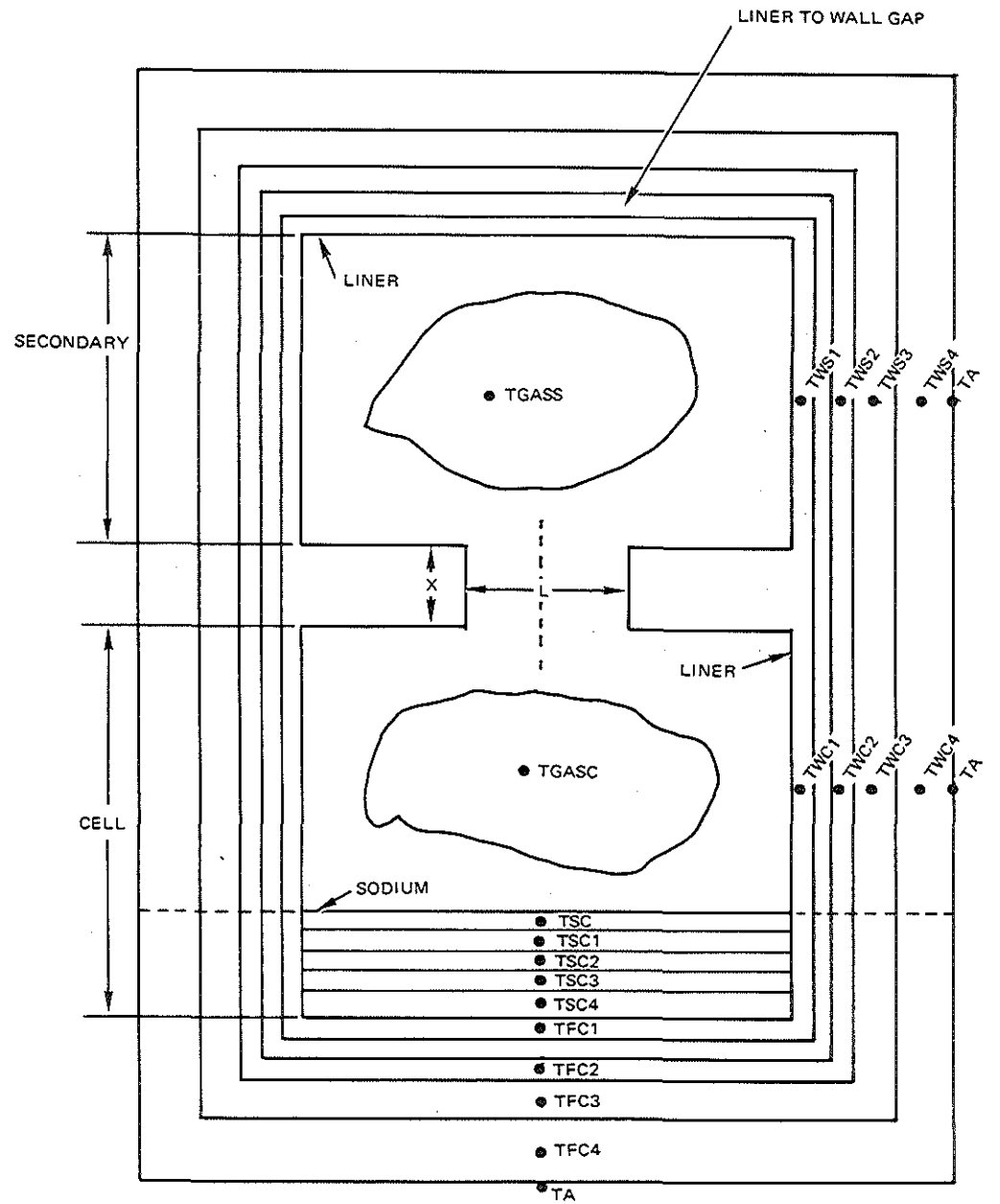


Abb. 2 SOFIRE-II : 2 - Zellen - Geometrie

Während die Definition von S und ρ_G selbsterklärend ist, bedarf die von S und H_G einer näheren Erläuterung. S wird definiert als

$$S = k \cdot 2.88 + (1-k) \cdot 1.44 \quad (2)$$

mit k = O_2 -Anteil zur Bildung von Na_2O

2.88 = Verbrennungsrate für Na_2O

1.44 = Verbrennungsrate für Na_2O_2

Somit gibt S die prozentuale Zusammensetzung der bei der Verbrennung von Natrium entstehenden Natriumoxide an.

Der Gas-Transport-Koeffizient H_G wird abgeleitet aus der Beziehung für die freie Konvektion zur Bestimmung der Wärmeübergangszahl unter Ausnutzung der Analogie zwischen Wärmetransport und Stoffaustausch:

$$H_G = 0.14 D \left\{ g \cdot Sc \frac{\beta}{\nu^2} (T_{Na} - T_G) \right\}^{1/3} \quad [m/h] \quad (3)$$

D = Diffusionskoeffizient m^2/h

g = Gravitationskonstante m/s^2

Sc = Schmidt-Zahl -

β = Gasausdehnungskoeffizient K^{-1}

ν = Viskosität S^2/m

T = Temperatur K

Index Na = Natrium

G = Gas

Auf diese Analogie (zwischen Wärmetransport und Stoffaustausch) wird im Abschnitt 5 noch genauer eingegangen.

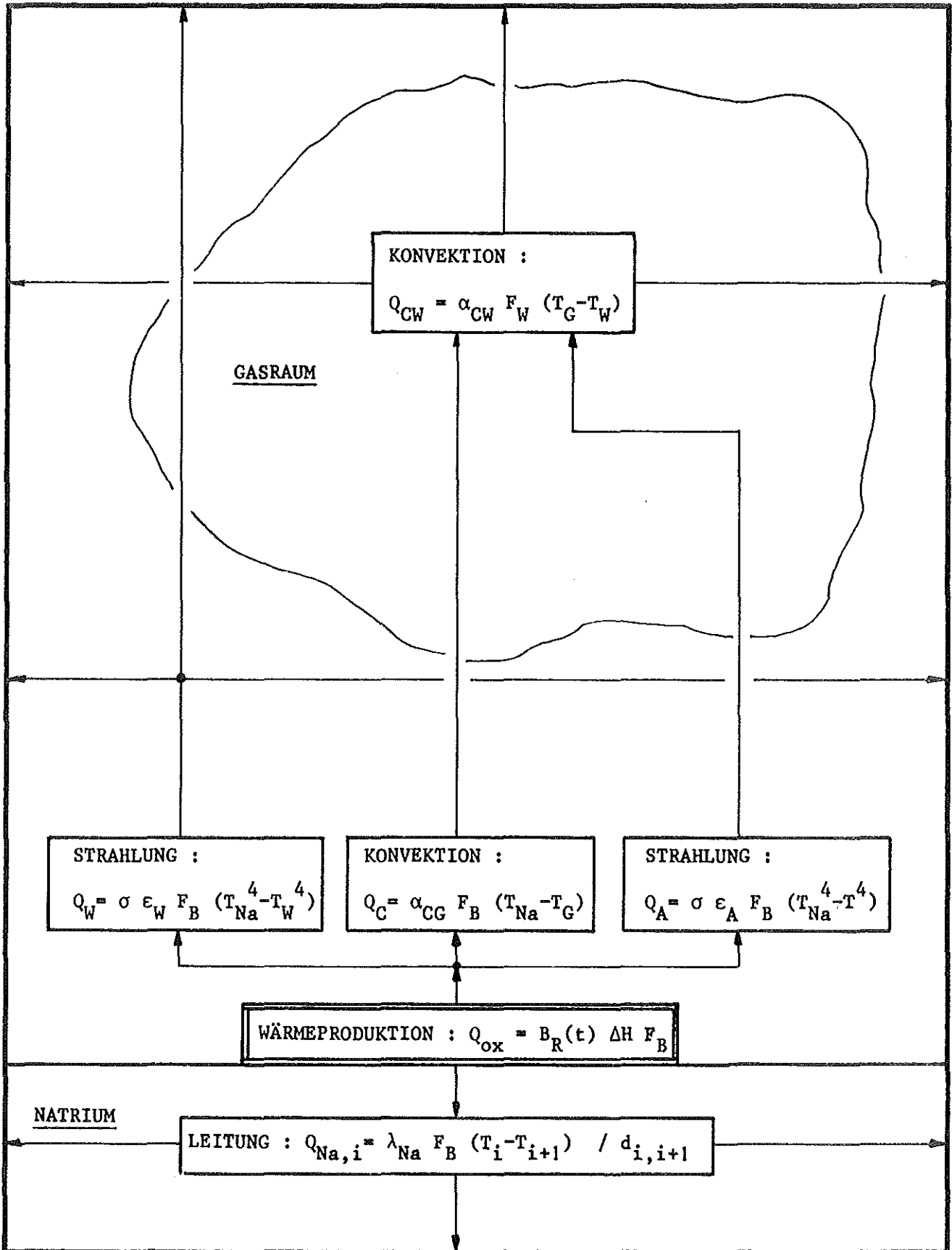


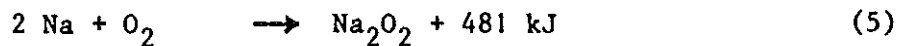
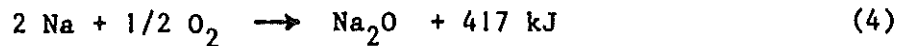
Abb. 3: Energieverteilung nach dem SOFIRE-II-Modell

SOFIRE II - 1 - Zellen-Modell		NABRAND-Modell	
Brandrate	$B_R(t) = H_G \int_G \frac{M_{O_2}(t)}{M_{Luft}(t)} S$	$B_R(t) = B_{R,o} \frac{M_{O_2}(t)}{M_{O_2,o}} \left(\frac{T_G(t)}{T_{G,o}} \right)^{1/2}$	
Energieproduktion	$Q_{ox} = B_R(t) \Delta H F_B$	$Q_{ox} = B_R(t) \Delta H F_B > Q'_{ox}$	$Q_{ox} = Q'_{ox} = Q'_C + Q'_A + \sum Q'_{W,i}$
Energietransport			
1. zum Natrium	—	$Q_{Na} = \alpha_D F_B (T_{VD} - T_{Na})$	—
2. im Natrium	$Q_{Na,i} = \lambda_{Na} F_B (T_i - T_{i+1}) / \bar{d}_{i,i+1}$	$Q_{Na,i} = \lambda_{Na} F_B (T_i - T_{i+1}) / \bar{d}_{i,i+1}$	0
3. zum Gas	$Q_C = \alpha_{CG} F_B (T_{Na} - T_G)$	$Q_C = \alpha_{FG} F_B (T_F - T_G)$	$Q'_C = \alpha_{FG} F_B (T_{Na} - T_G)$
4. zum Aerosol	$Q_A = \sigma \epsilon_A F_B (T_{Na}^4 - T_G^4)$	$Q_A = \sigma \epsilon_{FG} F_B (T_F^4 - T_G^4)$	$Q'_A = \sigma \epsilon_{FG} F_B (T_{Na}^4 - T_G^4)$
5. zur Wand			
5.1 vom Brandherd	$Q_W = \sigma \epsilon_W F_B (T_{Na}^4 - T_W^4)$	$\sum Q_{W,i} = \sigma \epsilon_F \epsilon_W \sum (T_F^4 - T_{W,i}^4) \phi_i$	$\sum Q'_{W,i} = \sigma \epsilon_F \epsilon_W \sum (T_{Na}^4 - T_{W,i}^4) \phi_i$
5.2 vom Gas			
5.2.1 per Konvektion	$Q_{CW} = \alpha_{CW} F_W (T_G - T_W)$	$\sum Q_{CW,i} = \alpha_{KW} \sum F_i (T_G - T_{W,i})$	
5.2.2 per Strahlung	—	$\sum Q_{SW,i} = \sigma \epsilon_G \epsilon_W \sum (T_G^4 - T_{W,i}^4) \phi_i$	

Tab. 1: Vergleich der Natrium-Flächenbrand Codes SOFIRE II und NABRAND

2. Wärmetransport und Energiebilanz

Die Energie, die in Form von Wärme während der Verbrennung von Natrium dem Gesamtsystem zugeführt wird, hängt von der Art der Reaktion ab, die das Natrium mit dem Sauerstoff eingeht:



Umgerechnet auf Joule pro kg-Natrium bedeuten Gl. 4 und Gl. 5, daß bei der Monoxid-Bildung

$$Q_{\text{Na}_2\text{O}} : 9071 \text{ kJ/kg} \quad (4a)$$

und bei der Peroxid-Bildung

$$Q_{\text{Na}_2\text{O}_2} : 10467 \text{ kJ/kg} \quad (4b)$$

dem Gesamtsystem zugeführt werden. Die gesamte Bildungswärme, ΔH , läßt sich nun unter Zuhilfenahme von (2), (4a) und (4b) zu

$$\Delta H = (k \cdot 2088 \cdot 9071 + (1-k) \cdot 1,44 \cdot 10467) / s \quad [\text{kJ/kg}] \quad (6)$$

errechnen.

Die gesamte Energieproduktion Q_{ox} ist dann

$$Q_{\text{ox}} = B_R \cdot \Delta H \cdot F_B \quad \text{kJ/h} \quad (7)$$

Diese Energie verteilt sich im SOFIRE II-Modell nach allen Seiten (Abb.3, Tab. 1. Hierbei wird eine homogene Durchmischung im Gasraum und eine gleichmäßige Wandaufheizung vorausgesetzt.

Energietransport

Im Natrium: $Q_{Na,i} = \lambda_{Na} \cdot F_B \cdot (T_i - T_{i+1}) / \bar{d}_{i,i+1} \text{ kJ/h} \quad (8)$

Zum Gas per Konvektion: $Q_c = \alpha_{CG} \cdot F_B \cdot (T_{Na} - T_G) \text{ kJ/h} \quad (9)$

Zum Aerosol per Strahlung: $Q_A = \sigma \cdot \epsilon_A \cdot F_B \cdot (T_{Na}^4 - T_W^4) \text{ kJ/h} \quad (10)$

Zur Wand per Strahlung vom Brandherd aus: $Q_W = \sigma \cdot \epsilon_W \cdot F_B \cdot (T_{Na}^4 - T_W^4) \text{ kJ/h} \quad (11)$

Schließlich wird ein Teil der dem Gas zugeführten Wärme (Gl. 9 und Gl. 10) per Konvektion auch an die Wände abgegeben:

Zur Wand per Konvektion vom Gas aus: $Q_{CW} = \alpha_{CW} \cdot F_B \cdot (T_G - T_W) \text{ kJ/h} \quad (12)$

Die Wärmebilanzgleichungen, die das transiente thermische Verhalten beschreiben, werden wie folgt angesetzt:

1) Wärmebilanz im Gasraum:

$$\rho_G (c_v)_G \int_{V_G} \frac{dT_G}{dt} dV_G = F_B \alpha_{CG} \cdot (T_{Na} - T_G) + F_B \sigma \epsilon_A (T_{Na}^4 - T_G^4) - F_B \alpha_{CW} (T_G - T_W) \quad (13)$$

2) Wärmebilanz an den Wänden:

$$\rho_W \int_{V_W} (c_p)_W \frac{dT_W}{dt} dV_W + \rho_{in} \int_{V_{in}} (c_p)_{in} \frac{dT_{in}}{dt} dV_{in} = \alpha_{CW} F_B (T_G - T_W) \quad (14)$$

3) Wärmebilanz in der Brandpfanne:

$$\rho_{Na} \int_{V_{Na}} (c_p)_{Na} \frac{dT_{Na}}{dt} dV_{Na} + \rho_p \int_{V_p} (c_p)_p \frac{dT_p}{dt} dV_p + \rho_{in} \int_{V_{in}} (c_p)_{in} \frac{dT_{in}}{dt} dV_{in}$$

$$= Q_{\text{ox}} - F_B \alpha_{\text{CG}} \cdot (T_{\text{Na}} - T_G) - \epsilon_A F_B \sigma (T_{\text{Na}}^4 - T_G^4) - \epsilon_W F_B \cdot \sigma (T_{\text{Na}}^4 - T_G^4) \quad (15)$$

3.2 Das Zwei-Zellen-Modell

Beim Zwei-Zellen-Modell findet der Natrium-Brand im unteren Raum statt (Abb. 2). Das sich erwärmende Gas strömt durch die Öffnung in den oberen Raum. Gleichzeitig strömt kaltes Gas vom oberen in den unteren Raum. Die Transportvorgänge finden infolge der unterschiedlichen Dichten, der Wärmetransport aufgrund von Natur-Konvektion statt.

Die Beziehung zur Beschreibung des Massen-Transports vom oberen in den unteren Raum basiert auf einer empirischen Korrelation von Braun [4,7]:

$$\text{Nu} = 0.0546 \text{Gr}^{0.55} \cdot \text{Pr} \cdot \left(\frac{L}{X}\right)^{1/3} \quad (16)$$

gültig für Grashof-Zahlen von 10^4 bis $5 \cdot 10^7$.

Mit

$$\text{Gr} = \frac{g \cdot \beta \cdot (T_{Z1} - T_{Z2}) \cdot X^3}{\nu^2} \quad (\text{Grashof-Zahl})$$

$$\text{Nu} = \frac{\alpha_T \cdot X}{\lambda_G} \quad (\text{Nusselt-Zahl})$$

$$\alpha_T = \frac{1}{2} \bar{J} c_p \cdot \nu \quad (\text{Wärmeüberganskoeffizient im Bereich der Öffnung})$$

$$D = \frac{\lambda_G}{\bar{J} c_p} \quad (\text{Diffusionskoeffizient})$$

T_{Z1} : Gastemperatur in der unteren Zelle

T_{Z2} : Gastemperatur in der oberen Zelle

L und X aus Abb. 2

Daraus läßt sich die Geschwindigkeit v errechnen:

$$v = \frac{0.07753}{X} \left(\frac{L}{X}\right)^{1/3} \cdot D \left\{ X^3 g \frac{\beta}{\nu^2} (T_{Z1} - T_{Z2}) \right\}^{0.55} \quad [\text{m/h}] \quad (17)$$

Der Massen-Transport von Z2 nach Z1 ist dann

$$W_D = \rho_{Z2} A_x v_{DTMIN} \quad [kg] \quad (18)$$

DTMIN: Integrationszeitintervall

Der Massen-Transport von Z1 nach Z2 hängt von der Temperatur und dem Druck in Z1 ab.

Unter Ausnutzung der Bernoulli'schen Gleichung gilt

$$P_{Z1} = P_{Z2} - 1.5 \rho_{Z2} \frac{v^2}{2g} + \rho_{Z2} x \quad [kg/m^2] \quad (19)$$

und der Massen-Transport errechnet sich dann aus der Gas-Gleichung zu

$$W_u = \frac{P_c \cdot V_c}{R \cdot T_c} \quad [kg] \quad (20)$$

mit

$$R = \text{Gaskonstante} \frac{m}{K}$$

4. Das NABRAND-Modell

Ebenso wie das SOFIRE II-Modell berechnet NABRAND Druck- und Temperaturverlauf in einem Containment infolge eines Natrium-Flächen-Brandes. Das Programm ist sehr auf die Spezifikationen des SNR-300 ausgerichtet und nicht ohne weiteres auf beliebige Containments übertragbar. Im folgenden sollen die für einen Vergleich mit SOFIRE II notwendigen Modell-Annahmen beschrieben werden.

1. Natrium Brandrate

Die Brandrate wird nach der kinetischen Gastheorie für ideale Gase bestimmt:

$$B_R(t) = B_{R,o} M_{O_2}(t)/M_{O_2,o} \cdot (T_G(t)/T_{G,o})^{1/2} \quad (21)$$

mit $B_{R,o} = 35 \text{ kg/m}^2/\text{h}$, Brandrate zu Beginn des Brandes

$T_G(t)$ = Gastemperatur im Brandraum $[K]$

$M_{O_2}(t)$ = O_2 -Gewichtskonzentration $[\%]$

Index 0: Werte zu Beginn des Brandes

Für die gesamte Energie-Produktion (vgl. Gl. 7) gilt ebenfalls

$$Q_{\text{ox}} = B_R \cdot \Delta H \cdot F_B \quad (7)$$

wobei angenommen wird, daß nur Na_2O gebildet wird, so daß

$$\Delta H = 9071 \text{ kJ/kg}$$

gilt.

Diese Energie-Produktion findet jedoch - anders als im SOFIRE II-Modell - nicht auf der Natrium-Oberfläche sondern im Raum oberhalb der Natrium-Oberfläche statt. Nach diesem Modell bildet sich über der Oberfläche eine dünne Schicht aus Natriumdampf aus, die zusammen mit dem darüberliegenden Flamment Teppich etwa 10 mm stark ist (Abb. 4). Für den Natriumdampf wird eine Temperatur von $T_{\text{VD}} = 1150 \text{ K}$ und für den Flamment Teppich eine Temperatur von $T_{\text{F}} = 1253 \text{ K}$ angenommen.

Es gilt nun

$$Q_{\text{ox}} = Q_{\text{Na}} + Q_{\text{C}} + Q_{\text{A}} + Q_{\text{W}} \quad \text{kJ/hr} \quad (22)$$

Hierbei ist Q_{Na} die Wärmemenge, die entsprechend der Wärmeübergangsgleichung

$$Q_{\text{Na}} = \alpha_{\text{D}} \cdot F_B \cdot (T_{\text{VD}} - T_{\text{Na}}) \quad \text{kJ/h}$$

ins Natrium geht.

Q_{C} und Q_{A} entsprechen der Definition nach Gl. 9 und Gl. 10:

Energietransport:

$$\text{Zum Gas per Konvektion: } Q_{\text{C}} = \alpha_{\text{FG}} \cdot F_B \cdot (T_{\text{F}} - T_{\text{G}}) \quad \text{kJ/h} \quad (9a)$$

$$\text{Zum Aerosol per Strahlung: } Q_{\text{A}} = \sigma \cdot \epsilon_{\text{FG}} \cdot F_B \cdot (T_{\text{G}}^4 - T_{\text{G}}^4) \quad \text{kJ/h} \quad (10a)$$

Die Aufheizung der Wände durch Wärmetransport vom Flamment Teppich zum einen und vom Gas zum anderen wird etwas komplizierter als im SOFIRE II-Modell

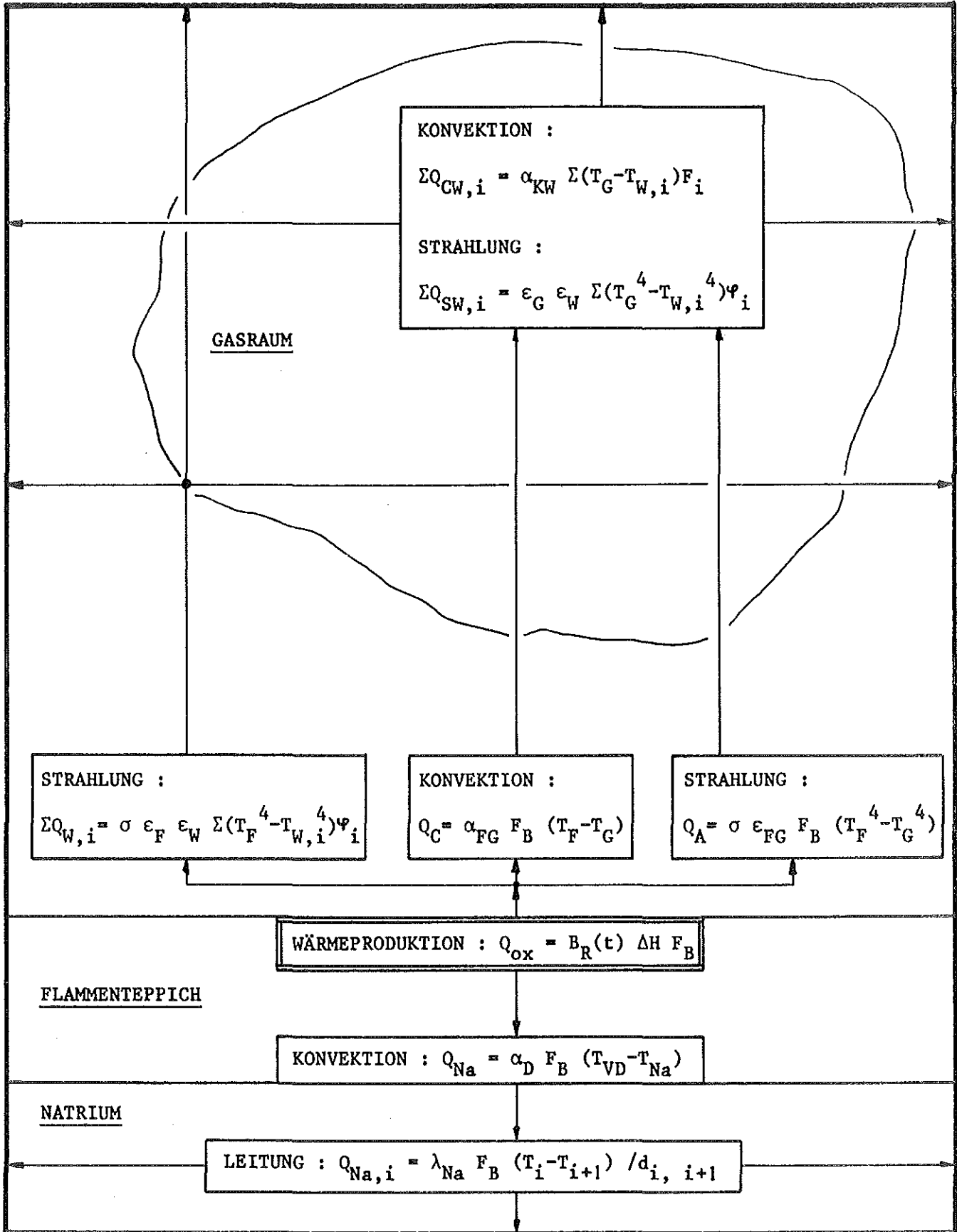


Abb. 4: Energieverteilung nach dem NABRAND-Modell

berechnet, dafür auch genauer und ortsabhängig.

Der integrale Wärmetransport vom Flammenteppich an die Wände ist

$$\sum_{i=1}^N Q_{W,i} = Q_{\text{ox}} - Q_{\text{Na}} - Q_{\text{C}} - Q_{\text{A}} \quad \text{kJ/h} \quad (22)$$

$Q_{W,i}$ berechnet sich nach

$$Q_{W,i} = \epsilon_F \cdot \epsilon_B \cdot \sigma \cdot (T_F^4 - T_{B,i}^4) \cdot \phi_i \quad \text{kJ/h} \quad (23)$$

mit $\epsilon_F \approx 0.4$

$\epsilon_B \approx 0.8$

$$\phi_i = \frac{1}{\pi} \int_{F_i} \int_{F_B} \frac{\cos \beta_1 \cdot \cos \beta_2}{S^2} dF_i \cdot dF_B$$

F_i = i-te Wandzone

$\beta_{1,2}$ = Winkel zwischen den Flächennormalen und den Verbindungslinien zwischen den Flächenelementen

S = Abstand der Flächenelemente dF_i und dF_B

Neben dieser direkten Strahlung von der Brandzone wird den Wänden auch Wärme aus dem Rauchgas durch Konvektion und Strahlung zugeführt. Hierfür gelten die folgenden Beziehungen:

Wärmetransport per Konvektion:

$$Q_{\text{CW},i} = \alpha_{\text{KW}} \Sigma F_{W,i} (T_G - T_{W,i}) \quad (24)$$

Wärmetransport per Strahlung:

$$Q_{\text{SW},i} = \sigma \epsilon_G \cdot \epsilon_W \Sigma (T_G^4 - T_{W,i}^4) \cdot \phi_i \quad (25)$$

mit $\epsilon_G \cdot \epsilon_W \approx 0.6$

Die bisherige Betrachtungsweise basiert auf der Berechnung von $B_R(t)$ und Q_{Na} mit Hilfe von Daten, die streng genommen nur für den Anfangszustand gelten. Um die Verschiebung der Verhältnisse während des Brandes - Abnahme von Q_{ox} und Q_{Na} wegen der O_2 -Abnahme bzw. wegen der Erhöhung der Oberflächentemperatur des Natriums, T_{Na} - zu berücksichtigen und gleichzeitig konservativ hinsichtlich der thermischen Wandbelastung zu bleiben, wird im NABRAND wie folgt vorgegangen: sobald für die an den Raum abgegebene Wärme

$$Q = Q_C + Q_A + Q_W = Q_{ox} - Q_{Na} \quad (26)$$

die Beziehung

$$Q < \frac{Q_{ox,o} - Q_{Na,o}}{Q_{ox,o}} \cdot Q_{ox}$$

gilt, werden Q , $Q_{FG} = Q_C + Q_A$ und Q_{Na} wie folgt neu berechnet:

$$Q = \frac{Q_{ox,o} - Q_{Na,o}}{Q_{ox,o}} \cdot Q_{ox} \quad (27)$$

$$Q_{FG} = \frac{Q_{FG,o}}{Q_o} \cdot Q \quad (28)$$

$$Q_{Na} = Q_{ox} - Q \quad (29)$$

wobei die Werte mit dem Index Null (o) die Werte zu Beginn des Brandes sind.

Diese Betrachtungsweise - auch "Flammen-Modell" genannt - gilt jedoch nur solange, wie die vom Flamment Teppich an den Raum abgegebene Wärmemenge Q größer ist als die Wärme Q' , die von der heißen Natriumlache an den Raum abgegeben würde, wenn keine Flamme darüber brennen würde.

Diese Wärmemenge Q' läßt sich entsprechend den Gleichungen 9a, 10a und 23 berechnen, wobei statt der Flammentemperatur T_F die Natrium-Oberflächentemperatur T_{Na} einzusetzen ist. Es gilt also:

$$Q' = Q'_C + Q'_A + Q'_{W,i} \quad (30)$$

mit $Q'_C = \alpha_{FG} \cdot F_B \cdot (T_{Na} - T_G) \quad (31)$

$$Q'_A = \sigma \cdot \epsilon_{FG} \cdot F_B \cdot (T_{Na}^4 - T_G^4) \quad (32)$$

$$\sum_{i=1}^N Q'_{W,i} = \sigma \cdot \epsilon_F \cdot \epsilon_B \sum (T_{Na} - T_{W,i}) \cdot \phi_i \quad (33)$$

Wird der Zustand $Q = Q'$ erreicht, so wird weiter mit den Gleichungen 31, 32 und 33 gerechnet, wobei dann auch

$$Q_{Na} = Q_{Ox}$$

gesetzt wird.

Einen Gesamtüberblick der in den Codes SOFIRE II und NABRAND verwendeten Gleichungen und Modellvorstellungen gibt die Tabelle 1.

5. Vergleich der beiden Modelle

Beim Vergleich der theoretischen Basis SOFIRE II und NABRAND stellt man fest, daß sich die Codes in zwei Punkten voneinander unterscheiden:

1. Unterschiedlicher Ansatz bei der Berechnung der Brandrate,
2. Einführung des "Flammen-Modells" beim NABRAND,

Darüberhinaus sind die verwendeten α -Zahlen, die Stoffkonstanten λ und c_p , wie auch die ϵ -Faktoren nicht in beiden Modellen identisch.

5.1 Berechnung der Brandrate

Im SOFIRE II-Modell wird - wie auch bei vielen anderen Autoren [ref.in 3] - angenommen, daß die Brandrate der O_2 -Konzentration im Brandraum proportional ist und durch den O_2 -Transport zu der Brandfläche hin kontrolliert wird:

$$B_R(t) \sim \frac{dm_{Na}}{dt} \sim \frac{dm_{O_2}}{dt}$$

Ferner ist die Brandrate auch der stöchiometrischen Verbrennungsrate proportional. Somit gelangt man über das 1. Fick'sche Gesetz zur Gleichung 1. Dadurch wird im SOFIRE II das Problem der Bestimmung der Brandrate auf die Bestimmung des O_2 -Massentransports über die Natrium-Oberfläche reduziert. Hierbei wird die Analogie zwischen Wärme- und Stoffübertragung zugrundegelegt. Demnach läßt sich die allgemeine Nusselt-Gleichung

$$Nu = f(Gr \cdot Pr), \quad (34)$$

die den konvektiven Wärmetransport entlang einer senkrechten Platte beschreibt, auch für die Stoffübertragung verwenden. Dazu wird die Nusselt-Zahl

$$\text{Nu} \equiv \frac{\alpha \cdot d}{\lambda}$$

durch die Sherwood-Zahl

$$\text{Sh} \equiv \frac{H_G \cdot d}{D}$$

und die Prandl-Zahl

$$\text{Pr} \equiv \frac{\nu}{a}$$

durch die Schmidt-Zahl

$$\text{Sc} \equiv \frac{\nu}{D}$$

ersetzt.

Die allgemeine Wärmetransport-Gleichung (34) entspricht sodann der Beziehung

$$\text{Sh} = f (\text{Gr} \cdot \text{Sc}). \quad (35)$$

Im SOFIRE II-Modell wird Gl. (34) durch eine von McAdams [4] stammende Beziehung spezifiziert. Demnach gilt für den Wärmeübergang an senkrechten Platten und $\text{Gr} \cdot \text{Pr} > 10^8$ (turbulente Strömung)

$$\text{Nu} = 0.14 (\text{Gr} \cdot \text{Pr})^{1/3} \quad (36)$$

sodaß auch gilt

$$\text{Sh} = 0.14 (\text{Gr} \cdot \text{Sc})^{1/3} \quad (37)$$

Einsetzen der Stoffwerte in die dimensionslosen Kennzahlen führt zu der Beziehung

$$\frac{H_G \cdot d}{D} = 0.14 \left\{ \frac{d^3 \cdot g \cdot \beta \cdot (T_{Na} - T_G)}{\nu \cdot D} \right\}^{1/3} \quad (38)$$

die mit Gl. 1 identisch ist und den besonderen Vorteil aufweist, daß der Massentransport-Koeffizient unabhängig von der Form der Brandfläche (d kürzt sich weg) berechnet werden kann.

In Gl. 38 ist nunmehr nur der Diffusionskoeffizient D zu bestimmen. Im SOFIRE II-Modell wird er nach der Sutherland-Gleichung [5]

$$D = D_0 \frac{C + T_0}{C + T_G} \left(\frac{T_G}{T_0}\right)^{5/2} \quad (39)$$

bestimmt und lautet

$$D = \frac{241.57}{132 + T_G} \left(\frac{T_G}{273.15}\right)^{5/2} \quad (40)$$

Diese zahlenmäßige Erfassung von D impliziert, daß für die Sutherland-Konstante C , Gl. (39), und die Diffusionskonstante D_0 folgende Werte angenommen wurden:

$$\begin{aligned} C &= 132 \\ D_0 &= 0.1524 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad (300 \text{ K}, 10^5 \text{ Pa}) \end{aligned}$$

Dies widerspricht allerdings den in [5] über C gemachten Angaben, wonach

$$\begin{aligned} C_{O_2} &= 138 \text{ für } 17 \leq T_G \leq 186 \\ C_{O_2} &= 260 \text{ für } 27 \leq T_G \leq 278 \end{aligned}$$

woraus dann

$$D_{O_2 + N_2} = 0.181 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad (300 \text{ K}, 10^5 \text{ Pa})$$

folgt. Über die Eigenschaften von D_0 konnten keine Angaben gefunden werden.

An dieser Stelle soll jedoch erwähnt werden, daß das Sutherland-Modell zur Ermittlung von D nicht die letzte und auch nicht die genaueste Methode auf diesem Gebiet darstellt. Auf der Basis der Chapman-Enskog-Theorie [6] wurden von Hirschfelder et al. und Wilke and Lee (ref. in [7]) neuere Darstellungen entwickelt. Als letzten Stand der Wissenschaft auf diesem Gebiet darf man die Beziehung

$$D = B \frac{T_G^{3/2}}{P r_{12}^2 \cdot J_D} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{1/2} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (41)$$

ansehen.

Die genaue Nomenklatur kann man folgender Tabelle entnehmen :

$$D_G = \frac{BT^{3/2} \sqrt{(1/M_1) + (1/M_2)}}{Pr_{12}^2 I_D}$$

where D_G = gas diffusivity, sq. cm./sec.

$$B = (10.7 - 2.46 \sqrt{1/M_1 + 1/M_2}) \times 10^{-4}$$

T = absolute temperature, °K.

M_1, M_2 = molecular weights of components 1 and 2

P = absolute pressure, atm.

r_{12} = collision diameter, angstroms

$$= \frac{(r_0)_1 + (r_0)_2}{2}$$

$r_0 = 1.18 V_0^{1/3}$ (see Table 14-44)

V_0 = molal volume of liquid at normal boiling point, cc./g.-mole

I_D = collision integral for diffusion, function of kT/ϵ_{12}

$$\frac{\epsilon_{12}}{k} = \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1}{k}\right) \left(\frac{\epsilon_2}{k}\right)}$$

k = Boltzmann constant = 1.38×10^{-6} erg/°K.

ϵ_{12} = energy of molecular interaction, ergs

Tab. 2 Nomenklatur zur Gl. 41

Im Falle des Systems $O_2 \rightarrow N_2$ gilt (Werte nach [7]):

$$P = \text{Druck} \quad [\text{atm}]$$

$$T_G = \text{Temperatur} \quad [\text{K}]$$

$$B = 0.0010063$$

$$M_1 = 32$$

$$M_2 = 28$$

$$r_{12} = 3.557$$

$$J_D = 0.4593$$

Daraus folgt

$$D_{O_2 \rightarrow N_2} = 4.48 \cdot 10^{-5} \frac{T_G^{3/2}}{P} \text{ cm}^2/\text{S}$$

und für $T_G = 300$ K, $P = 10^5$ Pa läßt sich $D_{O_2 \rightarrow N_2}$ zu

$$D_{O_2 \rightarrow N_2} = 0.232 \text{ cm}^2/\text{S}$$

errechnen. Ein Vergleich dieser Theorien ist für das System $O_2 \rightarrow N_2$ auf der Abb. 5 zu sehen. Er zeigt, daß im Temperaturbereich zwischen 300 K

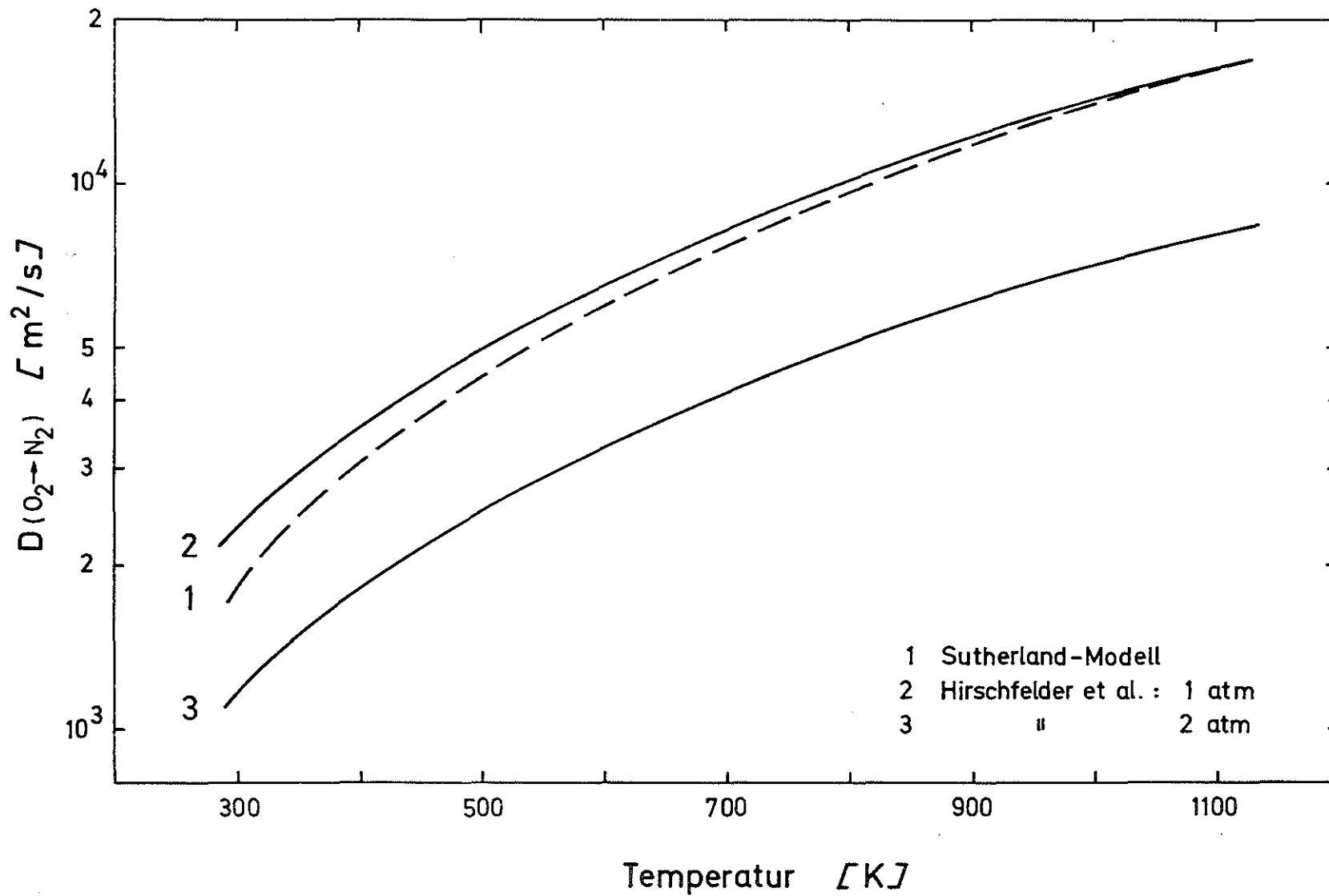


Abb. 5 Einfluß von Temperatur und Druck auf die Diffusionskonstante D für das System $\text{O}_2 \text{ N}_2$

und 500 K Unterschiede bis zu 25% auftreten. Noch gravierender ist allerdings die Abweichung, wenn der Einfluß des Systemdrucks auf den Diffusionskoeffizienten mitberücksichtigt wird (Unterschiede bis zu 100%). Da

$$B_R(T) \sim H_G$$

und

$$H_G \sim D$$

sind, machen sich diese Unterschiede direkt und in gleicher Höhe auch bei der Berechnung der Brandrate bemerkbar.

Aus den Gl. 1, 3, sowie den bekannten Relationen

$$\beta \approx \frac{1}{T_G} \quad (42)$$

$$\nu \sim T_G^{3/2} \quad (\text{Sutherland-Modell})$$

folgt

$$H_G \sim T_G^{1/2} T_{Na}^{1/3} p^{-1} \quad (43)$$

und daraus folgt für die Brandrate, wie sie im SOFIRE II angesetzt wird, die Proportionalität

$$R_R(t) \sim T_G^{1/2} T_{Na}^{1/3} p^{-1} \quad (44)$$

Im NABRAND-Modell geht die Berechnung der Brandrate von der kinetischen Gastheorie aus. Dazu ist die Kenntnis eines Diffusionskoeffizienten entbehrlich. Stattdessen benötigt man allerdings eine Anfangsbrandrate:

$$R_R(t) = B_{R,o} \left(\frac{M_{O_2}(t)}{M_{O_2,o}} \right) \left(\frac{T_G(t)}{T_{G,o}} \right)^{1/2} \quad (21)$$

Im NABRAND-Modell wird $B_{R,o}$ mit

$$B_{R,o} = 35 \text{ kg/m}^2/\text{h}$$

angesetzt. Dieser Wert basiert auf Experimenten der Firma INTERATOM [8] und stimmt mit anderen Literatur-Angaben [9,10] recht gut überein. Allerdings sind diese Experimente bei Natriumtemperaturen von ~ 800 K Normaldruck

und Normalatmosphäre (21 Vol.% O₂) durchgeführt worden, und somit ist die Verwendung dieses Wertes nicht ohne weiteres auch bei anderen Randbedingungen zulässig. Insbesondere bleibt dabei die Abhängigkeit der Brandrate von

- a) O₂-Konzentration
- b) Na-Temperatur und
- c) Systemdruck

unberücksichtigt. Aus Gl. 21 folgt lediglich die Relation

$$B_R(t) \sim T_G^{1/2} \quad (45)$$

die wesentlich informationsärmer als die Relation 44 (SOFIRE II-Modell) ist.

5.2 Modellmäßige Unterschiede zwischen SOFIRE II und NABRAND

Modellmäßig unterscheiden sich die beiden Codes in einem Punkt. Während im SOFIRE II-Modell die Natriumoberfläche den Brandherd darstellt, wird im NABRAND das sog. "Flammen-Modell" eingeführt.

Im SOFIRE II-Modell geht die auf der Natriumoberfläche produzierte Wärme in den Gasraum per Konvektion und Strahlung und in den Natrium-Pool per Wärmeleitung. Im NABRAND-Modell dagegen verteilt sich die im Volumen

Natriumoberfläche x 10 mm

produzierte Wärme in Richtung Gasraum und Natriumoberfläche per Konvektion und Strahlung, wobei die Strahlung in Richtung Natrium vernachlässigt wird. In beiden Modellen geht auch ein Teil der produzierten Wärme per Strahlung direkt an die Wände.

Das Flammen-Modell wird unterstützt durch neuere experimentelle Arbeiten auf diesem Gebiet [11], worin allerdings auch von relativ niedrigen Brandraten - zwischen 16 und 24 kg/m²/h - berichtet wird. Diese unterschiedliche Betrachtungsweise führt zwangsläufig dazu, daß im NABRAND-Modell die thermische Belastung der Wände bei sonst gleichen Randbedingungen höher ist als im SOFIRE II-Modell.

5.3 Unterschiede in den Wärmeübergangskoeffizienten und Stoffkonstanten

Bei der Berechnung bzw. Verwendung der Wärmeübergangszahlen zwischen dem Brandherd und dem Rauchgas zum einen und zwischen dem Rauchgas und den Wänden zum anderen gibt es in den zwei Modellen theoretische und zahlenmäßige Unterschiede.

Im SOFIRE II werden die zwei Zahlen temperaturabhängig wie folgt berechnet:

$$\text{Na-Oberfläche - Rauchgas: } \alpha_{CG} = 0.14 \lambda_G \left\{ \text{Pr} \frac{g \cdot \beta \cdot (T_{Na} - T_G)}{\nu^2} \right\} \quad (12)$$

$$\text{Rauchgas - Wand: } \alpha_{CW} = 0.27 \lambda_G \left\{ \text{Pr} \frac{g \cdot \beta \cdot (T_G - T_W)}{\nu^2} \right\} \quad (13)$$

Im NABRAND-Modell dagegen werden diese Zahlen konstant angenommen:

$$\text{Flamme - Rauchgas: } \alpha_{FG} = 6.98 \text{ W/m}^2/\text{K} \quad (14a)$$

$$\text{Rauchgas - Wand: } \alpha_{KW} = 5.82 \text{ W/m}^2/\text{K} \quad (14b)$$

Als Vergleich für die zahlenmäßige Differenz wurde ein Rechenbeispiel durchgeführt mit den Anfangsdaten

$$T_{Na} = 900 \text{ K}$$

$$T_G = 650 \text{ K}$$

$$T_W = 350 \text{ K}$$

Es ergaben sich folgende Werte:

$$\text{Na-Oberfläche - Rauchgas: } \alpha_{CG} = 2.18 \text{ W/m}^2/\text{K}$$

$$\text{Rauchgas - Wand: } \alpha_{CW} = 4.46 \text{ W/m}^2/\text{K}$$

Hierbei muß man allerdings berücksichtigen, daß nur die Zahlen α_{KW} und α_{CW} direkt miteinander vergleichbar sind. Dagegen differieren die Zahlen α_{FG} und α_{CG} auch theoretisch insofern, als zum einen die Natrium-Oberfläche

als Brandherd, zum anderen dagegen die Funktion des Brandherds der Natrium-Flammen-Teppich übernimmt.

Fast erwartungsgemäß treten auch bei den Stoffkonstanten - insbesondere für die Luft-Werte - Unterschiede in den zwei Modellen auf:

	SOFIRE II (300 K)	NABRAND (300 K)
$c_{p_{Luft}} \text{ [} \overline{\text{J/kg/K}} \text{]}$	712	1010
$\lambda_{Luft} \text{ [} \overline{\text{W/m/K}} \text{]}$	0.027	0.029

Diese Abweichungen wirken sich jedoch unwesentlich auf die essentiellen Rechnungen aus.

6. Schlußfolgerungen

Der Vergleich der beiden Rechencodes SOFIRE II und NABRAND erlaubt folgende Aussagen:

- Der Rechencode NABRAND ist vom programmiertechnischen Standpunkt aus gesehen genauer und feiner. Er erlaubt daher eine genauere Berechnung der Belastung der Wände als dies im Rechenprogramm SOFIRE II der Fall ist.
- Der Rechencode NABRAND ist verglichen mit dem Code SOFIRE II konservativ. Dies liegt zum einen in der Einführung des sogenannten Flammen-Modells. Durch die Einführung des Flammen-Teppichs greift die Wärmekapazität des Natriums nicht auf die gesamte Wärme $Q_{ox} = B_R(t) \cdot \Delta H \cdot F_B$, sondern nur auf den Teil $Q_{Na} = \alpha_D \cdot F_B \cdot (T_{VD} - T_{Na})$, der per Konvektion auf die Natrium-Oberfläche ankommt und maximal ca. 30% von Q_{ox} beträgt.

Zum anderen ist NABRAND auch deshalb konservativ, weil stets die ungünstigsten α -Zahlen verwendet wurden. So wurde für α_D der Wert $79 \text{ W/m}^2/\text{K}$ verwendet, obwohl es experimentelle Werte gibt, die um den Faktor 2 und mehr höher liegen [12]. Ebenfalls weichen die empirischen Werte von α_{KG} und α_{FG} von den theoretischen Werten, die im SOFIRE II verwendet werden, ab, im Falle von α_{FG} sogar um den Faktor 3.

Daher liegen die mit NABRAND berechneten Wandtemperaturen höher als die für ähnliche Rechenbeispiele mit SOFIRE II berechneten Werte. Zieht man

in Betracht, daß SOFIRE II sowohl die Natriumtemperatur als auch die Rauchgastemperatur im Vergleich zu Experimenten [10] konservativ (hoch) berechnet, so scheint, daß eine Kopplung der Modellannahmen beider Codes eine Verbesserung des Standes der Modelltheorie auf dem Gebiet der Vorausberechnung der Auswirkungen von Natrium-Flächen-Bränden auf die Containment-Strukturen eines schnellen Natrium-gekühlten Brutreaktors bringen wird.

- [1] B.U.B. Surma et al. Review of Current Sodium Fire Analytical Methods
GEAP - 14148, 1976
- [2] K. Freudenstein 1978, unveröffentlicht
- [3] P. Beiringer et al. SOFIRE II-User's Report
AI-AEC 13055, 1973
- [4] W.F. Brown Natural Convection through Rectangular Openings in Partitions
J. Heat and Mass Transfer, 5, 1962
- [5] J.H. Perry (Ed.) Chemical Engineer's Handbook
3rd Edition, 1950, pp. 370 and 539
- [6] S. z.B. Transport Phenomena by Bird, Stewart and Lightfoot,
N.Y., London, John Wiley & Sons, Inc., pp. 508 - 513
- [7] J.H. Perry (Ed.) Chemical Engineer's Handbook
4th Edition, 1963, pp. 14-19 - 14-24
- [8] R. Hübner, G. Dörner 1972, unveröffentlicht
- [9] L. Böhm, S. Jordan Aerosolerzeugung und Filterverhalten bei Natriumbränden, KfK-Bericht 2202, Nov. 75
- [10] R.K. Hilliard Summary of HEDL Sodium Fire Tests
HEDL-SA-1669, 1978
- [11] G. Casselmann Liquid Sodium Pool Fires
IAEA/IWGFR Specialists' Meeting on Sodium Fires and Prevention
Cadarache, France, Nov. 20-24, 1978
- [12] G. Fritsching 1974, unveröffentlicht