

KfK 3363

Juli 1982

**CALIPSO —
Ein Programm zur Berechnung
von Fluidodynamik,
Thermodynamik und
Geometrieänderungen in
versagenden Brennelementen
eines schnellen Brutreaktors**

F. Kedziur

Institut für Reaktorentwicklung
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Reaktorentwicklung
Projekt Schneller Brüter

KfK 3363

*CALIPSO = Calculation Program for fuel sodium
interaction*

CALIPSO - Ein Programm zur Berechnung von Fluiddynamik,
Thermodynamik und Geometrieänderungen in versagenden
Brennelementen eines schnellen Brutreaktors

F. Kedziur

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

ZUSAMMENFASSUNG

Zur Nachrechnung eines hypothetischen Störfalles in einem schnellen, natriumgekühlten Brutreaktor, bei dem das Versagen von Brennstäben unterstellt wird, wurde das Rechenprogramm CALIPSO entwickelt. Es berechnet zweidimensional die Thermodynamik, Fluiddynamik und Geometrieänderungen eines Einzelbrennstabes und des zugehörigen Kühlkanals im Zeitraum zwischen Versagen des Stabes und einem Zustand, bei dem die Geometrie weitgehend zerstört ist. Die Bestimmung von Temperaturprofilen in Brennstabhülle und Kanalwand ermöglichen die Berücksichtigung von Schmelz- und Ausfriervorgängen. Weitere Eigenschaften von CALIPSO sind der variable Strömungsquerschnitt im Kühlkanal zur Modellierung von Störungen der Kanalgeometrie sowie die Berechnung zweier Geschwindigkeitsfelder mit Berücksichtigung virtueller Masseneffekte. In der dokumentierten Version ist CALIPSO besonders geeignet zur Nachrechnung der im Kernforschungszentrum Karlsruhe durchgeführten SIMBATH-Versuche, die den obigen Störfall simulieren. Der Bericht enthält die komplette Programmdokumentation von CALIPSO: die Modellierung der Geometrie, die verwendeten Gleichungen, den Programmaufbau und das Lösungsverfahren sowie die Benutzungsanleitung mit einem Anwendungsbeispiel.

ABSTRACT

CALIPSO - A Computer Code for the Calculation of Fluidynamics, Thermohydraulics and Changes of Geometry in Failing Fuel Elements of a Fast Breeder Reactor

The computer code CALIPSO was developed for the calculation of a hypothetical accident in an LMFBR (Liquid Metal Fast Breeder Reactor), where the failure of fuel pins is assumed. It calculates two-dimensionally the thermodynamics, fluidynamics and changes in geometry of a single fuel pin and its coolant channel in a time period between failure of the pin and a state, at which the geometry is nearly destroyed. The determination of temperature profiles in the fuel pin cladding and the channel wall make it possible to take melting and freezing processes into account. Further features of CALIPSO are the variable channel cross section in order to model disturbances of the channel geometry as well as the calculation of two velocity fields including the consideration of virtual mass effects. The documented version of CALIPSO is especially suited for the calculation of the SIMBATH experiments carried out at the Kernforschungszentrum Karlsruhe, which simulate the above-mentioned accident. The report contains the complete documentation of the CALIPSO code: the modeling of the geometry, the equations used, the structure of the code and the solution procedure as well as the instructions for use with an application example.

<u>INHALT</u>	<u>Seite</u>
1. Einleitung	1
2. Formelzeichen, Programmvariable	3
3. Geometriemodellierung	9
4. Beteiligte Komponenten und deren Zustände	17
5. Gleichungen	18
5.1 Erhaltungsgleichungen , <i>Constant</i> S. 37/38 + 63	21
5.2 Zustandsgleichungen	38
5.3 Konstitutive Gleichungen	46
5.3.1 Fluiddynamik (Reibkräfte)	46
5.3.2 Thermodynamik (Wärmeübergänge)	50
5.3.3 Geometrieveränderungen (Ausfrieren, Abbröckeln etc.)	53
6. Programm	57
6.1 Lösungsverfahren (Prediktor-Korrektor)	57
6.2 Programmstruktur (Flußdiagramm, Unterprogramme)	58
6.3 Maschennetz und Differenzgleichungen	64
7. Besonderheiten von CALIPSO	72
7.1 ABC-Technik (Artificial Bubbling Concept)	72
7.2 Semiimplizite Formulierung der Zwischenphasenreibungskraft	73
7.3 Virtuelle Massen	75
7.4 Zeitschrittabhängiger Abbau des Druckgradienten	75
8. Benutzungsanleitung (Eingabe, Save, Plot, Restart)	82
9. Anwendungsbeispiel: SIMBATH Versuch V71/2	86
10. Möglichkeiten der Weiterentwicklung	97
11. Literatur	99
Anhang A1 : Zur Energiegleichung	103
Anhang A2 : Phasenübergang	112
Anhang A3 : Querschnittsveränderungen	114

1. EINLEITUNG

Bei der Sicherheitsanalyse natriumgekühlter Brutreaktoren werden auch Störfälle mit außerordentlich geringer Eintrittswahrscheinlichkeit untersucht. Zwei Störfälle, die nur beim gleichzeitigen Versagen aller Abschaltssysteme auftreten können, werden in diesem Zusammenhang einfach unterstellt:

- Beim Kühlmitteldurchsatzstörfall (engl. LOF = loss of flow) bewirkt der Ausfall aller Umwälzpumpen eine Kühlungsstörung der Brennelemente.
- Beim Leistungsstörfall (engl. TOP = transient overpower) erhöht das unbeabsichtigte Ausfahren der Regelstäbe die nukleare und damit die thermische Leistung.

In der Folge dieser angenommenen, sehr unwahrscheinlichen Störfälle kann es zur Überhitzung von Brennelementen und schließlich zum Versagen einzelner oder mehrerer von ihnen kommen. Dabei entsteht im Reaktorkern eine sogenannte Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömung^{*)} aus festem und flüssigem Brennstoff, festem und flüssigem Stahl, Spaltgas sowie flüssigem und dampfförmigem Natrium.

Die Zusammensetzung, Bewegung und Massenumverteilung dieses Gemisches ist entscheidend für den Störfallablauf.

Im CABRI- [1] bzw. TREAT- [2] Programm werden entsprechende Experimente in-pile, d.h. in Versuchsreaktoren, durchgeführt. Sie sind jedoch sehr aufwendig und liefern aufgrund begrenzter Zugänglichkeit nur wenig Aufschluß über einzelne physikalische Phänomene. Da die Versuche nicht prototypisch für den Reaktor sind, ist eine Übertragung der Ergebnisse auf Reaktorverhältnisse erforderlich. Eine entsprechende Modellierung der physikalischen Phänomene basiert jedoch gerade auf einem detaillierten Verständnis der wichtigen Vorgänge.

Aus diesem Grund wird das Versuchsprogramm SIMBATH [3] mit Thermit zur Simulation des Brennstoffes durchgeführt. Die in SIMBATH angewandte

^{*)} Gemisch verschiedener Stoffe (= Komponenten), die fest, flüssig und/oder gasförmig (= Phasen) vorliegen können

nichtnukleare Versuchstechnik zur Nachbildung des Brennstabverhaltens und der Massenbewegung ermöglicht im Gegensatz zu in-pile-Versuchen eine weitgehende Verfolgung der wesentlichen thermohydraulischen Details. Die nukleare Wärmeerzeugung wird durch eine exotherme Thermitreaktion zwischen Aluminium und Eisenoxid ersetzt. Die entstehenden Schmelzmassen sind dem schmelzflüssigen UO_2 -Brennstoff-Stahlgemisch ähnlich. Die Geometrie wird durch einen Einzelstab oder ein Stabbündel repräsentiert. Die Materialbewegungen nach dem Stabversagen werden auf einem Hochgeschwindigkeits-Röntgenfilm festgehalten, darüber hinaus werden verschiedene Drücke, Temperaturen und Strömungsgeschwindigkeiten registriert [4, 5].

Somit bilden die SIMBATH-Versuche eine geeignete Grundlage, um mit einer entsprechenden Theorie - realisiert im Rechenprogramm CALIPSO - Modelle für die beobachteten Phänomene zu entwickeln und zu überprüfen. Das Ziel, mit CALIPSO den realen Reaktorstörfall berechnen zu können, wird mit folgender Strategie verfolgt:

Die in CALIPSO integrierten Modelle zu Fluidodynamik, Thermodynamik und Geometrieänderungen werden zunächst anhand der SIMBATH-Experimente entwickelt und überprüft. Seinerseits hilft CALIPSO bei der Interpretation der Versuchsergebnisse. Im zweiten Schritt soll das gleiche mit entsprechenden in-pile-Versuchen geschehen. Geht man nun davon aus, daß die dominierenden physikalischen Vorgänge in den verschiedenen Versuchen und im Reaktor sich entsprechen, so ist das derart ertüchtigte Programm geeignet, auf den zu untersuchenden Reaktorstörfall angewendet zu werden. Integriert in einem den gesamten Störfall berechnenden Systemcode, wie z.B. SAS [6], übernimmt CALIPSO die Berechnung von Thermohydraulik und Materialbewegungen in der Zeitspanne zwischen erstem Brennstabversagen und einem späteren Zustand, der durch die weitgehende Zerstörung der Brennstabgeometrie gekennzeichnet ist.

Rechenprogramme mit ähnlicher Zielsetzung sind unter anderem EPIC [7], der bislang unveröffentlichte PLUTO 2/LEVITATE-Code und EULFCI [8]. CALIPSO unterscheidet sich von EPIC und EULFCI nicht nur wesentlich im Detaillierungsgrad der Modellierung, sondern vor allem in der Grundkonzeption der Lösung: Durch die zweidimensionale Geometriedarstellung ist es möglich, das gesamte Fluid im Brennstab und Kühlkanal einem

zusammenhängenden Bereich zuzuordnen. Damit wird das Aufteilen der Berechnung, z.B. in Brennstab, Ejektionsknoten, Kanal-Reaktionszone und Kanal-Einphasenzone mit anschließender, problematischer Kopplung vermieden. Gemeinsamkeiten sind die (der experimentellen Strategie entsprechende) repräsentative Modellierung eines Einzelstabes im zugehörigen Kühlkanal sowie die Grundzüge des numerischen Verfahrens.

Wesentliche Besonderheiten von CALIPSO sind also:

- Ein einziger, zusammenhängend behandelte Fluidbereich
- Zweidimensionale (2D) Geometrie (Zylinderkoordinaten)
- Variabler Strömungsquerschnitt im Natrium-Kühlkanal
- Berechnung von Temperaturprofilen in Brennstabhülle und Kanalwand
- (dadurch möglich:) Berücksichtigung von Abschmelz- und Ausfriervorgängen sowie Abstandshaltern und anderen Störungen der Kanalgeometrie
- Zwei Geschwindigkeitsfelder (in der hier dokumentierten Version; eine Version mit 3 Geschwindigkeitsfeldern und einer Anzahl verschiedener Strömungsformen ist in Arbeit)
- Kompressible Behandlung des flüssigen Natriums
- Berücksichtigung virtueller Massen.

Auf Einzelheiten wird im folgenden eingegangen.

2. FORMELZEICHEN, PROGRAMMVARIABLE

Die folgende Liste enthält alle Programmvariablen, die in einem COMMON (s. 6.2) stehen. Neben dem (meist handschriftlichen) Variablennamen, der im Bericht verwendet wird, findet sich die zugehörige Programmvariable mit dem Namen des COMMONS, in dem sie steht, ihrer Erklärung und Dimension. Entgegen der üblichen Gepflogenheit sind die Gleichungen in diesem Bericht als Zahlenwertgleichungen formuliert, sie entsprechen daher unmittelbar den FORTRAN-Anweisungen in CALIPSO. Ein Stern gibt an, daß die betreffende Variable nicht rein explizit, sondern semiimplizit berechnet wird und daher im Code noch zusätzlich die Indizes 1, 2 und 3 hat (Erklärung in 6.1). Der Zusatz ... (J) bzw. ... (I,J) kennzeichnet eindimensionale bzw. zweidimensionale Felder. Bei Eingabegrößen sind zusätzlich Kartenummer und Stelle angegeben.

Die zweite Liste enthält die verwendeten Indices. Es fällt auf, daß sowohl "th" (für Thermit) als auch "s" (für Stahl) und "f" (für fuel = Brennstoff) existiert. Da CALIPSO zunächst auf Thermit-Experimente angewendet wird, bietet sich die Zusammengruppierung von Stahl und Oxid ($\hat{=}$ fuel) bezüglich gemeinsamer Geschwindigkeit an. Sonst werden die Komponenten natürlich getrennt behandelt (s. auch 4.).

LISTE DER COMMON-VARIABLEN

Schreibweise

im

Bericht	Code	COMMON	Bedeutung	Dimension	Eingabe
A	A(I,J)	GEOM	STROEMUNGSQUERSCHNITTSFLAECHE KANAL/PIN	M**2	
A _c	AC(J)	GEOM	QUERSCHNITTSFLAECHE HUELLE	M**2	
A _{cs}	ACS(J)	GEOM	QUERSCHNITTSFLAECHE HUELLE/STAHL	M**2	
A _{cv}	ACV(J)	GEOM	VERTIKALE FLAECHE HUELLE	M**2	
α _{fn}	ALFFN	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL OXIDSCHICHT/NA	W/(M**2*K)	
α _{fh}	ALFFTH	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL OXIDSCHICHT/THERM.	W/(M**2*K)	
α _{sf}	ALFSF	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL STAHL OXIDSCHICHT	W/(M**2*K)	#11/1
α _{sn}	ALFSN	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL STAHL NATRIUM	W/(M**2*K)	
α _{so}	ALFSNO	MAT	DTO., ANFANGSWERT	W/(M**2*K)	#11/3
α _{sth}	ALFSTH	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL STAHL THERMIT	W/(M**2*K)	
α _{sto}	ALFSTO	MAT	DTO., ANFANGSWERT	W/(M**2*K)	#11/4
α _{su}	ALFSU	MAT	WAERMEUEBERGANGSZAHL STAHL UMGEBUNG	W/(M**2*K)	#11/2
A _w	AW(J)	GEOM	QUERSCHNITTSFLAECHE WAND	M**2	
A _{ws}	AWS(J)	GEOM	QUERSCHNITTSFLAECHE WAND/STAHL	M**2	
A _{wv}	AWV(J)	GEOM	VERTIKALE FLAECHE WAND	M**2	
ca	CD	UP	REIBBEIWERTE F. KUGELN	-	#15/4
COMP	COMP	MAT	NATRIUMKOMPRESSIBILITAET S.42	M**2/N	#16/1
COUR	COUR	MISC	COURANTZAHL	-	
COURL	COURL	MISC	UNT. GRENZE COURANTZAHL F. ZEITSCHRITT	-	#4/1
COURU	COURU	MISC	OBERE GRENZE COURANTZAHL F. ZEITSCHRITT	-	#4/2
cpf	CPF	MAT	SPEZ. WAERME OXID	J/(KG*K)	#13/1
cpnl	CPNL	MAT	SPEZ. WAERME NATRIUM FLUESSIG	J/(KG*K)	#13/3
cpnv	CPNV	MAT	SPEZ. WAERME NATRIUM DAMPFF.	J/(KG*K)	#13/4
cps	CPS	MAT	SPEZ. WAERME STAHL	J/(KG*K)	#13/2
cv	CV	UP	KOEFF. F. VIRTUELLE MASSE (KUGEL)	-	#15/5
DCF	DCF	MISC	DONORCELL FAKTOR 0<DCF<1	-	#2/5
δ	DELTA(I,J)	GEOM	FILMSTAERKE	M	
D _H	DH(I,J)	GEOM	HYDRAULISCHER DURCHMESSER	M	
∂p _n /∂T	DPNDT(T)	F	STEIGUNG D. DAMPFDRUCKKURVE NATRIUM	N/(M**2*K)	
∂p _m /∂T	DPTHDT(T)	F	STEIGUNG D. DAMPFDRUCKKURVE THERMIT	N/(M**2*K)	
Δr	DR(I,J)	GEOM	DELTA R	M	
Δt	DT	MISC	ZEITSCHRITT	SEC	#2/1
ΔTPRI...	DTPRI1/2/3	MISC	ZEITABSTAENDE FUER AUSDRUCK	SEC	#3/1,3,5
ΔZ	DZ(J)	GEOM	DELTA Z	M	#18+
EMATOT	EMATOT	RO	GESAMTE EJEZIERTE MASSE	KG	
e _n	EN(I,J)	* TEMP	SPEZIF. INNERE ENERGIE NATRIUM	J/KG	
e _{ns}	ENLS(T)	F	SPEZ. INN. EN. FLUESS. NA, SAETT.ZUSTD.	J/KG	
e _{nvs}	ENVS(T)	F	SPEZ. INN. EN. DAMPFF. NA, SAETT.ZUSTD.	J/KG	
E	EPS(J)	GEOM	EPS=ALFA/(2*PI) OEFFNGSWINKEL DEFEKT	-	#17+
EPSi	EPSI	MISC	GENAUEIGKEITSPARAMETER (UNBENUTZT)	-	#2/6
e _m	ETH(I,J)	* TEMP	SPEZIF. INNERE ENERGIE THERMIT	J/KG	
FK	FK(I,J)	* UP	ZWISCHENPHASENREIBFAKTOR (KRAFT=FK*UR)	KG/(M**3*SEC)	
λ	FLAMDA	UP	REIBBEIWERTE AXIAL	-	
F _{MACF}	FMACF(J)	RO	AUSGEFRORENE MASSE HUELLE OXID	KG	
F _{MACS}	FMACS(J)	RO	AUSGEFRORENE MASSE HUELLE STAHL	KG	
F _{MAF}	FMAF	RO	GESAMTE AUSGEFRORENE MASSE OXID	KG	
F _{MAS}	FMAS	RO	GESAMTE AUSGEFRORENE MASSE STAHL	KG	
F _{MATOT}	FMATOT	RO	GESAMTE AUSGEFRORENE MASSE	KG	
F _{MAWF}	FMAWF(J)	RO	AUSGEFRORENE MASSE WAND OXID	KG	
F _{MAWS}	FMAWS(J)	RO	AUSGEFRORENE MASSE WAND STAHL	KG	
F _{url}	FVRL(J)	* UP	REIBKRAFT RADIAL, SCHWERE PHASE	N/(M**3)	
F _{rv}	FVRV(J)	* UP	REIBKRAFT RADIAL, LEICHTE PHASE	N/(M**3)	
F _{val}	FVZL(I,J)	* UP	REIBKRAFT AXIAL, SCHWERE PHASE	N/(M**3)	
F _{vzv}	FVZV(I,J)	* UP	REIBKRAFT AXIAL, LEICHTE PHASE	N/(M**3)	
g	G	UP	ERDBESCHLEUNIGUNG	M/(SEC**2)	
g _{cf}	GACF(J)	RO	AUSFRIER-/ABBROECKELRATE HUELLE-OXID	KG/(M**2*SEC)	

\dot{Q}_{cs}	GACS(I,J)	RO	AUSFRIER-/SCHMELZRATE HUELLE-STAHL	KG/(M**2*SEC)	
\dot{Q}_n	GAN(I,J)	* RO	VERDAMPFUNGSRATE NATRIUM	KG/(M**3*SEC)	
\dot{Q}_{wuf}	GAWF(J)	RO	AUSFRIERRATE WAND-OXID	KG/(M**2*SEC)	
\dot{Q}_{wus}	GAWS(J)	RO	AUSFRIERRATE WAND-STAHL	KG/(M**2*SEC)	
λ_f	HCF	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT OXID	W/(M*K)	#12/1
λ_{fg}	HCFG	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT SPALTGAS	W/(M*K)	
λ_{ne}	HCNL	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT NA/FLUESSIG	W/(M*K)	#12/5
λ_{no}	HCVN	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT NA/DAMPF	W/(M*K)	#12/6
λ_s	HCS	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT STAHL	W/(M*K)	#12/2
λ_{th}	HCTH	MAT	WAERMELEITFAEHIGKEIT THERMIT	W/(M*K)	#12/3
IFLOW	IFLOW(I,J)	MISC	FLOW REGIME 0/HOM 1/ANN 2/BUBB	-	
IMAX	IMAX	GEOM	AEUSSERSTE REELLE KANALMASCHE	-	
IMIN	IMIN	GEOM	INNERSTE REELLE PINMASCHE	-	
IPASS	IPASS	MISC	ZAEHLER FUER ITERATIONSSCHRITTE	-	
JCL	JCL	GEOM	UNTERSTE REELLE KANALMASCHE	-	#6/1
JCU	JCU	GEOM	OBERSTE REELLE KANALMASCHE	-	#6/2
JDL	JDL	GEOM	UNTERSTE REELLE DEFEKTMASCHE ZU BEGINN	-	#6/5
JDU	JDU	GEOM	OBERSTE REELLE DEFEKTMASCHE ZU BEGINN	-	#6/6
JPL	JPL	GEOM	UNTERSTE REELLE PINMASCHE	-	#6/3
JPU	JPU	GEOM	OBERSTE REELLE PINMASCHE	-	#6/4
LPLCL	LPLCL	GEOM	1: KANAL UNTEN VERSCHL., SONST=0	-	#6/10
Nc	NC	GEOM	ANZAHL DER RAD. HUELL-UNTERTEILUNGEN	-	#6/8
Nch	NCH	GEOM	ANZAHL DER RAD. KANAL-UNTERTEILUNGEN	-	#6/9
NCYC	NCYC	MISC	ANZAHL DER ZEITSCHRITTE	-	
NFCIL	NFCIL	GEOM	UNTERSTE REAKTIONSZONENMASCHE	-	
NFCIU	NFCIU	GEOM	OBERSTE REAKTIONSZONENMASCHE	-	
Np	NP	GEOM	ANZAHL DER RAD. PIN-UNTERTEILUNGEN	-	#6/7
NPLT	NPLT	MISC	0/1: PLOTDATEN WERDEN (NICHT) GESCHRBN.	-	#1/3
NPRALL	NPRALL	MISC	0/1: JEDER SCHRITT WIRD GEDRUCKT	-	#1/2
NPRT	NPRT	MISC	ANZ. D. ZEITSCHRITTE ZW. AUSDRUCKEN	-	#1/1
NRCVAR	NRCVAR	MISC	0: KONST. RC, SONST =1	-	#5/5
NTCVAR	NTCVAR	MISC	0: KONST. ANF.TEMP. IM KANAL; SONST =1	-	#5/2
NTPVAR	NTPVAR	MISC	0: KONST. ANF.TEMP. IM PIN; SONST =1	-	#5/1
NUPL	NUPL	GEOM	ANZ. MASCHEN UP MIT VAR. RW	-	#5/4
NVOIDL	NVOIDL	GEOM	UNTERSTE VOIDMASCHE	-	
NVOIDU	NVOIDU	GEOM	OBERSTE VOIDMASCHE	-	
NVOIDV	NVOIDV	MISC	0: KONST. VOID ZU BEGINN; SONST =1	-	#5/3
Nw	NW	GEOM	ANZ. DER RAD. WAND-UNTERTEILUNGEN	-	
NWARN	NWARN	MISC	OVERCOMPACTION WRNG. AUS MASS (NR.D.M.)	-	
P	P(I,J)	* UP	GESAMTDRUCK	N/(M**2)	
Pg	PGF(RO,T)	F	DRUCK SPALTGAS	N/(M**2)	
Qtp	PHITP	UP	ZWEIPHASENMULTIPLIKATOR F. FVIS	-	#16/2
Ti	PI	GEOM	KREISZAHL	-	
PLPL	PLPL	UP	DRUCK UNTERES PLENUM	N/(M**2)	#10/2
pn	PN(T)	F	SATTDAMPFDRUCK NATRIUM	N/(M**2)	
pth	PTH(T)	F	SATTDAMPFDRUCK THERMIT	N/(M**2)	
PUPL	PUPL	UP	DRUCK OBERES PLENUM	N/(M**2)	#10/3
Qcfn	QCFN(J)	TEMP	WAERMESTROM OXIDSCHICHT/HUELLE-NA/KANAL	W	
Qcfnh	QCFTH(J)	TEMP	WAERMESTROM OXIDSCHICHT/HUELLE-TH/KANAL	W	
Qcn	QCN(I,J)	TEMP	WAERMESTROM HUELLE-NATRIUM	W	
Qcsf	QCSF(J)	TEMP	WAERMESTROM ST-OXIDSCHICHT (HUELLE)	W	
Qcth	QCTH(I,J)	TEMP	WAERMESTROM HUELLE-THERMIT	W	
Qnth	QNTH(I,J)	TEMP	WAERMESTROM NATRIUM-THERMIT	W	
Qwfn	QWFN(J)	TEMP	WAERMESTROM OXIDSCHICHT/WAND-NA	W	
Qwfs	QWFS(J)	TEMP	WAERMESTROM OXIDSCHICHT/WAND-STAHL	W	
Qwfnh	QWFTH(J)	TEMP	WAERMESTROM OXIDSCHICHT/WAND-THERMIT	W	

<i>Q_{wn}</i>	QWN(J)	TEMP	WAERMESTROM WAND-NATRIUM	W	
<i>Q_{won}</i>	QWSU(J)	TEMP	WAERMESTROM WAND-UMGEBUNG	W	
<i>Q_{wth}</i>	QWTH(J)	TEMP	WAERMESTROM WAND-THERMIT	W	
<i>r</i>	R(I, J)	GEOM	MITTLERER RADIUS DER MASCHE I, J	M	
<i>r_a</i>	RA	GEOM	AEUSSERER RADIUS WAND	M	#7/4
<i>r_c</i>	RC(J)	GEOM	AEUSSERER RADIUS HUELLE/OXIDSCHICHT	M	#25+
<i>r_{cs}</i>	RCS(J)	GEOM	AEUSSERER RADIUS HUELLE/STAHL	M	
<i>r_{co}</i>	RCO	GEOM	ANFANGS(AUSSEN)RADIUS DER HUELLE	M	#7/2
<i>Re</i>	RE	UP	REYNOLDSZAHL	-	
<i>r_n</i>	REN	MAT	VERDAMPFUNGSWAERME NATRIUM	J/KG	#14/2
<i>R_{fg}</i>	RFG	MAT	GASKONSTANTE SPALTGAS	NM/(KG*K)	#13/5
<i>r_i</i>	RI	GEOM	INNERER RADIUS HUELLE	M	#7/1
<i>r_{mf}</i>	RMF	MAT	SCHMELZWAERME OXID	J/KG	#13/6
<i>r_{ms}</i>	RMS	MAT	SCHMELZWAERME STAHL	J/KG	#14/1
<i>r_{nl}</i>	RNL	GEOM	RADIUS DER NATRIUMTROPFEN	M	#8/1
<i>r_{nv}</i>	RNV	GEOM	RADIUS DER NATRIUMBLASEN/DAMPFBLASEN	M	#8/2
<i>S_f</i>	ROF(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE OXID ('FUEL')	KG/(M**3)	
<i>S_{fg}</i>	ROFG(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE SPALTGAS	KG/(M**3)	
<i>S_f</i>	ROFP(T)	F	PHYS. DICHTHE OXID ('FUEL')	KG/(M**3)	
<i>S_{ink}</i>	ROINK(T)	F	PHYS. NATRIUMDICHTHE FLUESS./INKOMPR.	KG/(M**3)	
<i>S_m</i>	ROM(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE GEMISCH	KG/(M**3)	
<i>S_n</i>	RON(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE NATRIUM	KG/(M**3)	
<i>S_{nl}</i>	RONL(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE NATRIUM/FLUESSIG	KG/(M**3)	
<i>S_{nl}</i>	RONLP(P, T)	F	PHYS. DICHTHE NATRIUM/FLUESSIG	KG/(M**3)	
<i>S_{nv}</i>	RONV(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE NATRIUM/DAMPF	KG/(M**3)	
<i>S_{nv}</i>	RONVP(T)	F	PHYS. SAETT.DICHTHE NATRIUM/DAMPF	KG/(M**3)	
<i>S_o</i>	ROS(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE STAHL	KG/(M**3)	
<i>S_f</i>	ROSP(T)	F	PHYS. DICHTHE STAHL	KG/(M**3)	
<i>S_{th}</i>	ROTH(I, J) *	RO	SCHMIERDICHTHE THERMIT	KG/(M**3)	
<i>r_{th}</i>	RTH	GEOM	RADIUS DER BRENNSTOFFPARTIKEL	M	#8/3
<i>r_w</i>	RW(J)	GEOM	INNERER RADIUS WAND/OXIDSCHICHT	M	#24+
<i>r_{ws}</i>	RWS(J)	GEOM	INNERER RADIUS WAND/STAHL	M	
<i>r_{wo}</i>	RWO	GEOM	ANFANGS(INNEN)RADIUS DER WAND	M	#7/3
<i>t</i>	T	MISC	ZEIT	SEC	
<i>Q_{gas}</i>	TAGAS(I, J) *	RO	VOLUMENANTEIL GAS (NA-DAMPF+FG)	-	#23+
<i>Q_{nl}</i>	TANL(I, J) *	RO	VOLUMENANTEIL NATRIUM FLUESSIG	-	
<i>Q_{nmin}</i>	TANMIN	RO	GRENZWERT FUER VOIDZONE	-	#8/4
<i>Q_{th}</i>	TATH(I, J) *	RO	VOLUMENANTEIL THERMIT	-	
<i>Q_{th}</i>	TATHST(J)	RO	KRIT. THERMITVOLUMENANTEIL: TEMP.BER.	-	
<i>T_{ca}</i>	TCA(J)	* TEMP	TEMP. HUELLE, RAND	K	
<i>T_{ci}</i>	TCI(J)	* TEMP	TEMP. HUELLE, INNEN	K	
<i>T_{cm}</i>	TCM(J)	* TEMP	TEMP. HUELLE, MITTE	K	
<i>T_{cn}</i>	TCN(J)	* TEMP	TEMP. HUELLE, AUSSEN (=TCA, KEIN OXID)	K	
<i>t_{end}</i>	TEND	MISC	ENDE DER PROBLEMZEIT	SEC	#2/2
<i>T_{fg}</i>	TFG(I, J) *	TEMP	TEMP. SPALTGAS	K	
<i>TFGOTH</i>	TFGOTH	TEMP	TEMP.VERH. TFG/TTH IM PIN	-	#10/1
<i>T_{mf}</i>	TMF	MAT	SCHMELZTEMPERATUR OXID	K	#14/3
<i>T_{ms}</i>	TMS	MAT	SCHMELZTEMPERATUR STAHL	K	#14/4
<i>T_n</i>	TN(I, J) *	TEMP	TEMP. NATRIUM	K	#20+
<i>T_{no}</i>	TNO	TEMP	KONST. ANFANGSTEMP. NATRIUM IM KANAL	K	#9/5
<i>TPRALL</i>	TPRALL	MISC	AB T=TPRALL WIRD JEDER STEP GEDRUCKT	SEC	#2/3
<i>TREST</i>	TREST	MISC	ZEIT, AB DER RESTARTDATEN GESCHR. WERD.	SEC	#3/6
<i>T_{th}</i>	TTH(I, J) *	TEMP	TEMP. THERMIT	K	#19,21,22+
<i>T_{tho}</i>	TTHO	TEMP	KONST. ANFANGSTEMP. THERMIT IM PIN	K	#9/4
<i>T_u</i>	TU	TEMP	UMGEBUNGSTEMPERATUR	K	#9/6
<i>T_{wa}</i>	TWA(J) *	TEMP	TEMP. WAND, AUSSEN	K	

<i>T_{wi}</i>	TWI(J)	* TEMP	TEMP. WAND, RAND	K	
<i>T_{wm}</i>	TWM(J)	* TEMP	TEMP. WAND, MITTE	K	
<i>T_{wn}</i>	TWN(J)	* TEMP	TEMP. WAND, INNEN (=TWI, KEIN OXID)	K	
<i>t₁</i>	T1	MISC	BIS T1 WIRD ALLE DTPR1 SEC GEDRUCKT	SEC	#3/2
<i>t₂</i>	T2	MISC	BIS T2 WIRD ALLE DTPR2 SEC GEDRUCKT	SEC	#3/4
<i>u₂</i>	UL(I,J)	* UP	RAD. GESCHWINDIGKEIT SCHWERE PHASE	M/SEC	
<i>u_n</i>	UN(I,J)	* UP	NA-GEMISCHGESCHWINDIGKEIT RADIAL	M/SEC	
<i>u_v</i>	UV(I,J)	* UP	RAD. GESCHWINDIGKEIT LEICHTE PHASE	M/SEC	
<i>v₂</i>	VL(I,J)	* UP	AX. GESCHWINDIGKEIT SCHWERE PHASE	M/SEC	
<i>v_a</i>	VN(I,J)	* UP	NA-GEMISCHGESCHWINDIGKEIT AXIAL	M/SEC	
<i>VOID</i>	VOID	RO	ANF.-VOID IM KANAL(FALLS KONST)/OB.PLEN.-	-	#10/5
<i>v_v</i>	VV(I,J)	* UP	AX. GESCHWINDIGKEIT LEICHTE PHASE	M/SEC	
<i>v_o</i>	VO	UP	AX. ANFANGSGESCHWINDIGKEIT IM KANAL	M/SEC	#10/4
<i>x_{fg}</i>	XFG	RO	MASSEANTEIL SPALTGAS (=MFG/MTH)	-	#9/2
<i>x_s</i>	XS(I,J)	RO	MASSEANTEIL STAHL (=MS/MTH)	-	#9/1
<i>z</i>	Z(J)	GEOM	AXIALE POSITION DER MASCHEN J (MITTE)	M	
<i>z_{fg}</i>	ZDFG	MAT	DYNAM. ZAEHIGKEIT SPALTGAS	KG/(M*SEC)	#14/6
<i>z_{nl}</i>	ZDNL	MAT	DYNAM. ZAEHIGKEIT NATRIUM FLUESSIG	KG/(M*SEC)	#15/1
<i>z_{nv}</i>	ZDNV	MAT	DYNAM. ZAEHIGKEIT NATRIUM DAMPFFOERM.	KG/(M*SEC)	#15/2
<i>z_{th}</i>	ZDTH	MAT	DYNAM. ZAEHIGKEIT BRENNSTOFF	KG/(M*SEC)	#14/5
<i>z_r</i>	ZETAR	UP	REIBBEIWERT RADIAL	-	#15/3
<i>z_{ax}</i>	ZETAX(J)	UP	REIBBEIWERT AXIAL IN DEN KANALMASCHEN	-	#26+
<i>ZKONST</i>	ZKONST	GEOM	0: VARIABLES DZ; SONST: DZ=ZKONST=KONST.M	-	#2/4

Benutzte Indices in CALIPSO

a	OUTER	AUSSEN
c	CLAD	HUELLE
cf	CLAD,FUEL	HUELLE,OXID
cs	CLAD,STEEL	HUELLE,STAHL
cv	CLAD,VERTICAL	HUELLE,VERTIKAL
f	FUEL	BRENNSTOFF (BEI THERMIT: OXID)
fg	FISSION GAS	SPALTGAS
i	INNER	INNEN
l	LIQUID	FLUESSIG/SCHWERE PHASE
m	MELT/MEDIUM	SCHMELZ/MITTEL
n	SODIUM	NATRIUM
o	INITIAL	ANFANGS...
p	PHYSICAL (TOP)	PHYSIKALISCH (OBEN)
rel	RELATIVE	RELATIV
s	STEEL	STAHL (BEI THERMIT: STAHL)
sat	SATURATION	SAETTIGUNGS...
th	THERMITE	THERMIT
u	AMBIENT	UMGEBUNG
v	VAPOR	DAMPF/LEICHTE PHASE
vis	VISCOUS	ZAEHIGKEITS...
w	WALL	WAND
wf	WALL,FUEL	WAND,OXID
ws	WALL,STEEL	WAND,STAHL
wv	WALL,VERTICAL	WAND,VERTIKAL

3. GEOMETRIEMODELLIERUNG

Die Hauptmerkmale der verwendeten Geometrie sind in Abb. 3.1 dargestellt. Sie zeigt die Modellierung eines Brennstabes im zugehörigen Kühlkanal. Dicke Linien kennzeichnen Strukturgrenzen, die Struktur selbst (Hülle/Wand) ist schraffiert, dünne Linien kennzeichnen das Rechengitter.

Folgende Annahmen werden getroffen:

- Es wird ein einzelner Brennstab mit seinem zugehörigen Natrium-Kühlkanal modelliert. Seine Umgebung wird zunächst durch die Kanalwand abgeschlossen.
- Variationen in Umfangsrichtung werden vernachlässigt. Daraus folgt eine zweidimensionale Modellierung in Zylinderkoordinaten (r, z-Geometrie).
- Der Innenradius der Brennstabhülle r_i ist konstant. Etwaige Schmelz- und Ausfriervorgänge wirken sich nur auf den Außenradius der Hülle aus. Dasselbe gilt für den Außenradius der Kanalwand r_a . Damit ist auch der Strömungsquerschnitt im Brennstab konstant.
- Der Strömungsquerschnitt A des Kühlkanals ist variabel, jedoch allein von der axialen Koordinate abhängig. Seine zeitliche Ableitung (wie auch die aller mit ihm gekoppelten Querschnittsflächen, Gln. (3.1) bis (3.6), werden vernachlässigt.

Der Brennstab besteht aus der Brennstoff- (=Thermit-) zone (Rechenmaschen "P" wie Pin) und der davon getrennten oberen und unteren Brutzone (Rechenmaschen "D" wie Dummy - so wird dieser Bereich in den SIMBATH-Versuchen genannt). In der Brutzone findet im Gegensatz zur Brennstoffzone kein Transport statt; es werden nur thermodynamische Berechnungen durchgeführt. Alle Maschen "P" und "D" sind zu Beginn mit Brennstoff (bzw. Thermit) und Spaltgas (bzw. Luft/Argon) in beliebigem Verhältnis gefüllt.

Der Brennstab wird radial begrenzt durch die Stabhülle. Ihre Feinmodellierung wird anhand Abb. 3.2 weiter unten beschrieben. Die Hülle kann zu Beginn der Rechnung an verschiedenen, vorgegebenen Stellen Defekte haben.

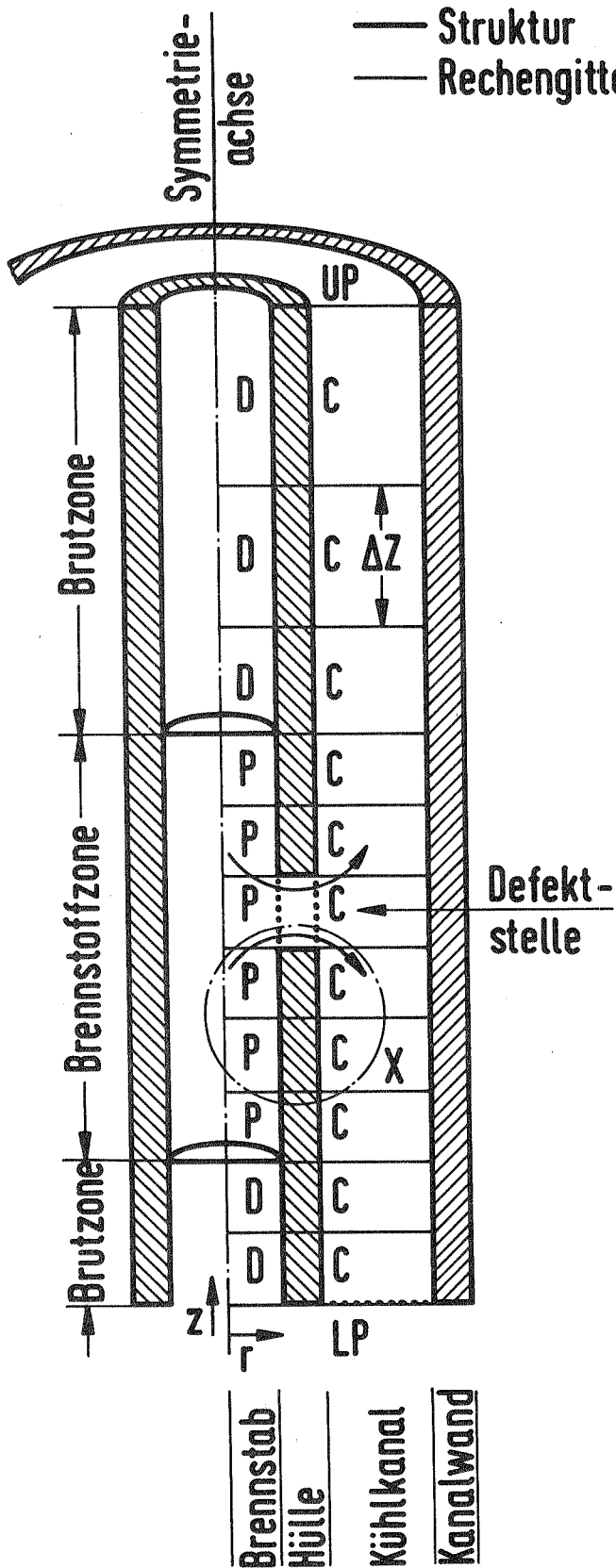


Abb. 3.1: CALIPSO Geometrie

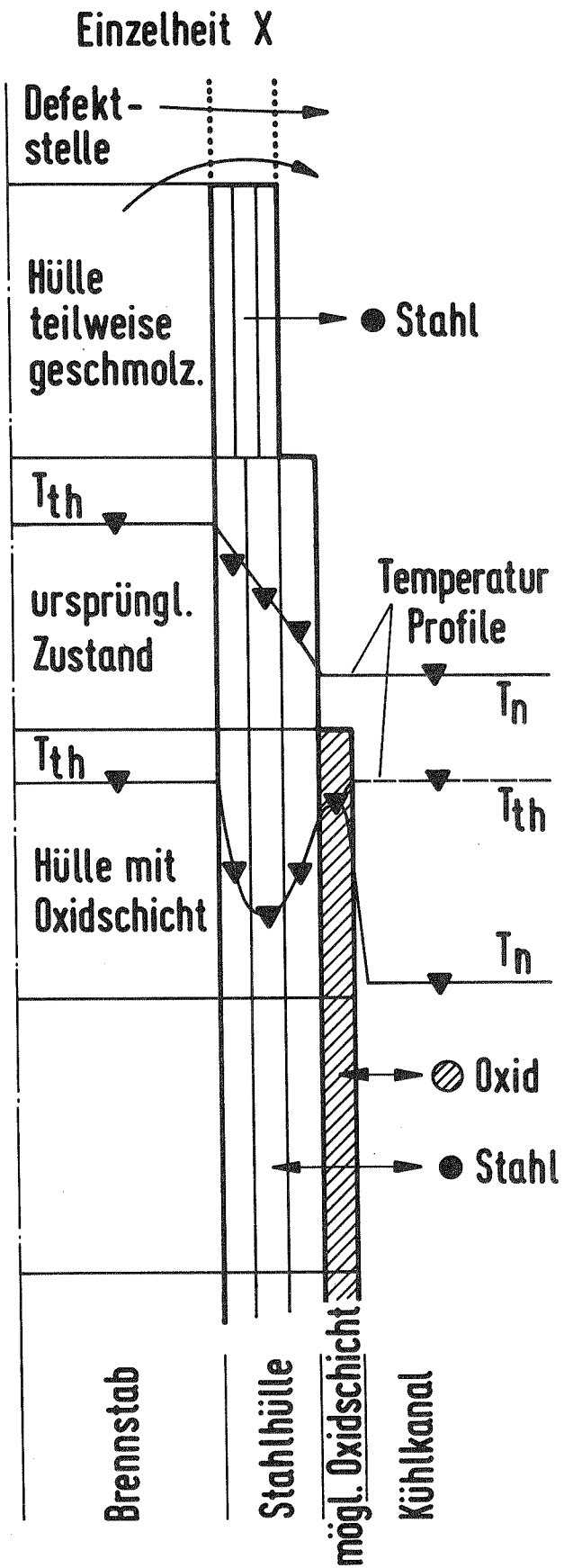


Abb. 3.2: Modellierung von Hülle
und Wand

Hier ist ein Materialaustausch zwischen Brennstab und Kühlkanal möglich. Um Defekte mit kleinerer Querschnittsfläche, als sie der vollen Zylinderfläche einer Maschenhöhe Δz entspricht, nachzubilden, hat jeder Defekt eine Porosität ϵ zwischen 0 und 1. 0 bedeutet geschlossen, 1 bedeutet völlig offen. Die Defektstellen können sich im Fall des Schmelzens der Stahlhülle ausweiten. Ebenso ist es möglich, ein vorgegebenes Versagensverhalten $\epsilon = \epsilon(z,t)$ aufzuprägen. Die Defekte münden in den Na-Kühlkanal (Rechenmaschen "C" wie Channel). Diese Maschen sind anfänglich mit Natrium gefüllt. Das Natrium kann eine Anfangsgeschwindigkeit haben oder stagnieren. Es kann unterkühlt einphasig oder bereits teilweise verdampft sein. Zur Anpassung an SIMBATH-Versuche kann der Kühlkanal beim unteren Plenum "LP" (= Lower Plenum) verschlossen werden. Zum oberen Plenum (UP = Upper Plenum) ist der Kanal stets geöffnet.

Die Kanalmaschen haben einen veränderlichen Strömungsquerschnitt A. Das ist notwendig, um Abschmelz- und Ausfriervorgänge an Hülle und Kanalwand nachbilden zu können. Darüber hinaus können so Strukturen wie Abstandshalter, Drosseln etc. berücksichtigt werden.

Die Brutzone "D" kann im Verhältnis zur aktiven Brennstoffzone "P" lang sein. Eine hohe Auflösung der Vorgänge in der Brutzone ist nicht erforderlich, weil hier keine starken, lokal begrenzten Erscheinungen zu erwarten sind. Daher ist die Maschenhöhe Δz variabel. Es kann so z.B. in der Brutzone mit größeren und damit weniger Maschen gerechnet werden.

Sowohl das Brennstabinnere als auch der Kühlkanal wird gegenwärtig durch je eine Masche in radialer Richtung modelliert. Dies erscheint sinnvoll in Anbetracht realer geometrischer Verhältnisse (Maschenbreite in radialer Richtung zu Maschenhöhe charakteristisch 2 mm : 30 mm) und der Möglichkeiten experimenteller Überprüfbarkeit. Prinzipiell ist aber eine Erweiterung auf mehrere radiale Fluidmaschen in Brennstab und Kühlkanal möglich, da sämtliche Erhaltungsgleichungen zweidimensional formuliert sind. Dies ist notwendig, denn im Fall einer völlig geschmolzenen Hülle über die Länge der Brennstoffzone ergibt sich ohnehin ein zweidimensionaler Fluidbereich. Es muß betont werden, daß in jedem Fall die Brennstoffzone, die Defektstelle(n) und der Kühlkanal einen einzigen, zusammenhängenden

Fluidbereich bilden. Bei entsprechenden physikalischen Verhältnissen wird so eine kritische Ausströmung ("Schallgeschwindigkeit") aus der Defektstelle von selbst aus den Erhaltungsgleichungen berechnet.

Die Modellierung der Stahlhülle ist aus Abb. 3.2 ersichtlich; Abb. 3.2 ist der Ausschnitt x aus Abb. 3.1. Die Kanalwand wird völlig analog behandelt und daher hier nicht beschrieben.

Die Abb. 3.2 zeigt einige charakteristische Zustände der Hülle, die jeweils über eine Maschenhöhe Δz konstant sind, aber durchaus nebeneinander existieren können. Beginnen wir oben:

- An einer Defektstelle wird natürlich keine Hüllberechnung durchgeführt.
- Im nächsten Abschnitt sei die Hülle aufgrund der Temperaturverhältnisse teilweise geschmolzen. Der zuvor feste und nun flüssige Stahl verschwindet aus der Massenbilanz der Hülle und wird dem Fluid zugeschlagen. Schmilzt die Hülle so weit, daß eine bestimmte Mindestwandstärke unterschritten wird, wird auch der Rest dem Fluid zugeschlagen. Es entsteht ein neuer Defekt.
- Um ein Temperaturprofil darstellen zu können, ist eine radiale Unterteilung der Hülle nötig. Hier sind es drei gleichstarke Zylinderschalen. Jeder ist eine Temperatur zugeordnet. Ein charakteristisches Profil ist z.B. in dem Abschnitt eingezeichnet, in dem die Hülle noch ihren ursprünglichen Zustand hat. Diese Zylinderschalen verändern ihre Stärke gleichmäßig entsprechend dem Ausfrieren oder Schmelzen von Stahl (siehe darüberliegenden Abschnitt).
- Im untersten Abschnitt in Abb. 3.2 ist eine ausgefrorene Oxidschicht dargestellt. Ihre Temperatur wird getrennt ermittelt. Dadurch kann z.B. eine sehr heiße Oxidschicht den darunterliegenden Stahl anschmelzen und so sich wieder lösen. Entsprechend dem Stahl besitzt die Oxidschicht eine bestimmte Mindeststärke. Das ausfrierende Oxid wird in der Massenbilanz beim Fluid abgezogen und der (festen) Oxidschicht zugeschlagen. Schmilzt die darunterliegende Stahlhülle, so wird die Oxidschicht proportional dem Verhältnis der Wandstärken Oxid/Stahl abgebaut. Dieser Vorgang macht deutlich, warum es notwendig ist, ein Temperaturprofil darzustellen und nicht nur eine mittlere Temperatur.

Folgende Ergänzungen sind noch zur Kanalwand zu machen:

- Die Außentemperatur wird als Konstante vorgegeben (Umgebungstemperatur).
- Das Schmelzen und Ausfrieren an der Wand ist unabhängig von den Vorgängen an der Brennstabhülle. Maßgebend sind die lokalen Verhältnisse an der Wand. So ist theoretisch auch die Ausbildung eines "schlangenförmigen" Kühlkanals denkbar.
- Ein Durchschmelzen der Wand führt zum Programmabbruch.

In den Abbildungen 3.3 bis 3.5 werden die Geometrievariablen (vgl. 2., COMMON/GEOM/) erklärt.

Zu Abb. 3.3: Der dargestellte Geometrieausschnitt ist eine Maschenhöhe Δz hoch. Die vordere Hälfte der Kanalwand ist zur Übersichtlichkeit weggeschnitten worden, dies ist bei den horizontal orientierten Flächen A_w und A_{ws} zu berücksichtigen, sie beziehen sich natürlich auf das gesamte Rohr. Die hier beispielhaft gezeichnete, teilweise Öffnung α der Hülle ist nur eine Ersatzvorstellung für die in der zweidimensionalen, rotationssymmetrischen Rechnung verwendeten Defekt-Porosität $\epsilon = \alpha/2\pi$. Die Trennungslinie zwischen dem freien Strömungsquerschnitt des Brennstabes und dem des Kühlkanals (ebenfalls horizontal orientierte Flächen) ist die gestrichelt gezeichnete Linie $r_i = \text{const}$. A_{wv} und A_{cv} hingegen sind die vertikal orientierten Oberflächen von Wand bzw. Hülle. Es gilt:

$$A_c = \pi (r_c^2 - r_i^2) \cdot (1 - \epsilon) \quad (3.1)$$

$$A_{cs} = \pi (r_{cs}^2 - r_i^2) \cdot (1 - \epsilon) \quad (3.2)$$

$$A_{cv} = 2\pi r_c \Delta z (1 - \epsilon) \quad (3.3)$$

$$A_w = \pi (r_a^2 - r_w^2) \quad (3.4)$$

$$A_{ws} = \pi (r_a^2 - r_{ws}^2) \quad (3.5)$$

$$A_{wv} = 2\pi r_w \Delta z \quad (3.6)$$

$$A = \pi r_i^2 \quad (\text{Brennstab}) \quad (3.7)$$

$$A = \pi [(r_w^2 - r_c^2) + \epsilon (r_c^2 - r_i^2)] \quad (\text{Kanal}) \quad (3.8)$$

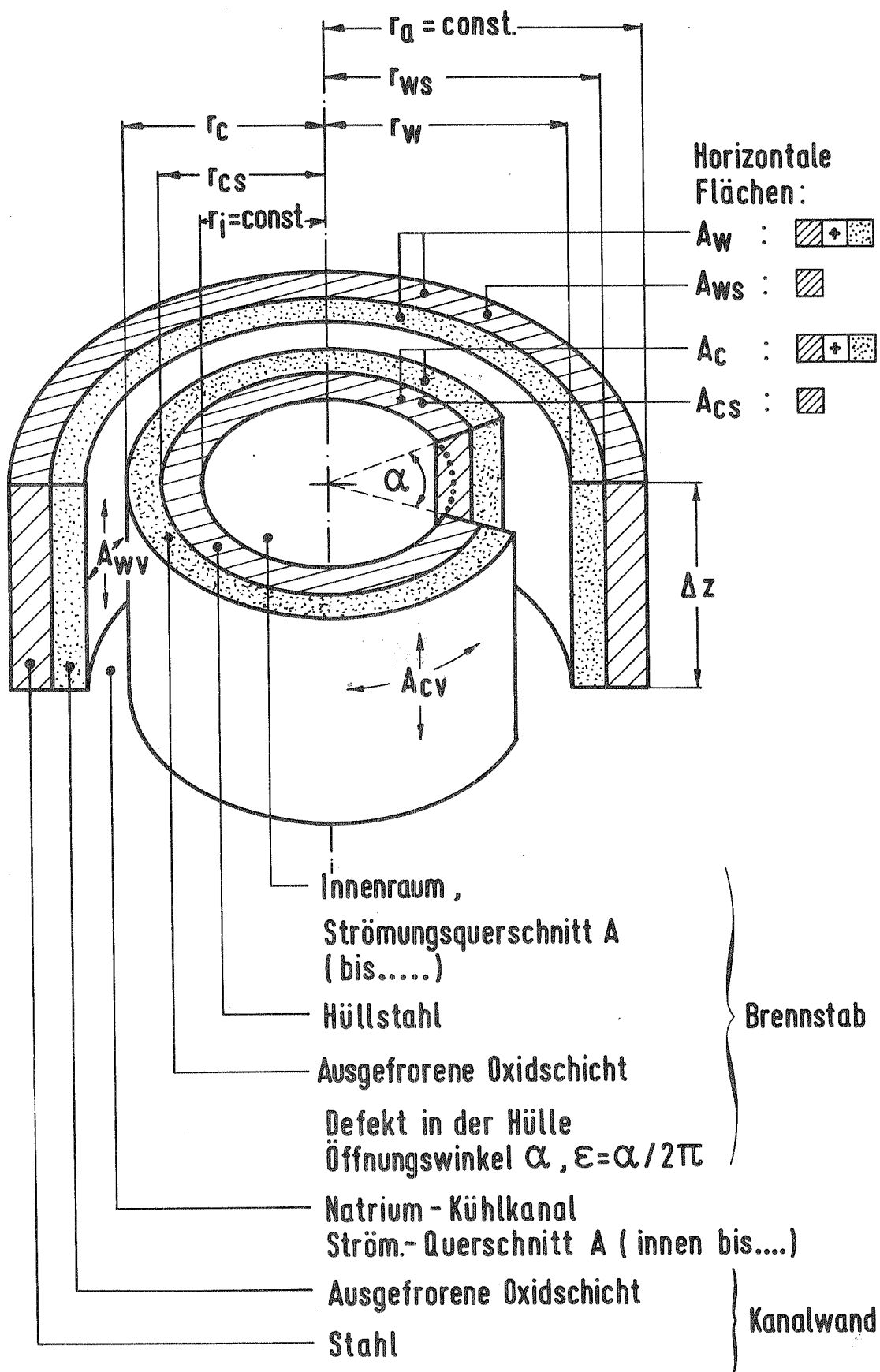


Abb. 3.3: Geometrieausschnitt der Teststrecke bei einer Defektstelle des Brennstabes (vordere Hälfte der Kanalwand weggeschnitten)

Nicht in Abb. 3.3 sichtbar sind der mittlere Radius r und der hydraulische Durchmesser D_H des Kühlkanals:

$$r = \frac{r_w + r_e}{2} \quad (3.9)$$

$$D_H = \frac{2[(r_w^2 - r_e^2) + \epsilon(r_e^2 - r_i^2)]}{r_w + r_e(1 - \epsilon) + r_i \cdot \epsilon} \quad , \quad \text{näherungsweise}$$

$$D_H \approx 2(r_w - r_e) \quad (3.10)$$

Zu Abb. 3.4: Neben einigen Geometrie Größen sind hier die einem beispielhaften Temperaturprofil zugehörigen Bezeichnungen aufgeführt.

Die Radien von Blasen, Tropfen und Partikeln im Fluid sind Eingabewerte:

Ist die Flüssigkeit die kontinuierliche Phase (hier im Brennstab flüssiger Brennstoff), gibt es Gas- oder Natrium-Dampf-Blasen mit dem Radius r_{nv} . Ist die Gasphase die kontinuierliche Phase, können Thermit-tropfen oder -partikel mit r_{th} sowie Natriumtropfen und r_{nl} existieren.

Zu Abb. 3.5: Die Zusammensetzung der Volumenanteile in einer Rechenmasche ist in Abb. 3.5 dargestellt. Es ist zu beachten, daß sowohl Spaltgas als auch Natrium-Dampf das gleiche Volumen θ_{gas} einnehmen. Die gezeichnete Aufteilung in Schichten dient nur der Verdeutlichung, bei der Rechnung wird von einer Kontinuumsvorstellung ausgegangen.

Es gilt:

$$\theta_{gas} + \theta_{nl} + \theta_{th} = 1 \quad (3.11)$$

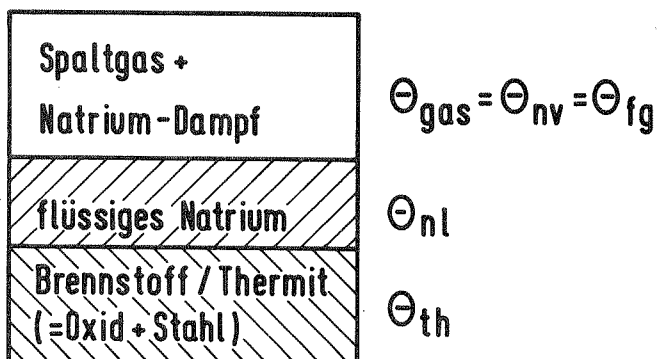


Abb. 3.5: Volumenanteile θ im Kontrollraum

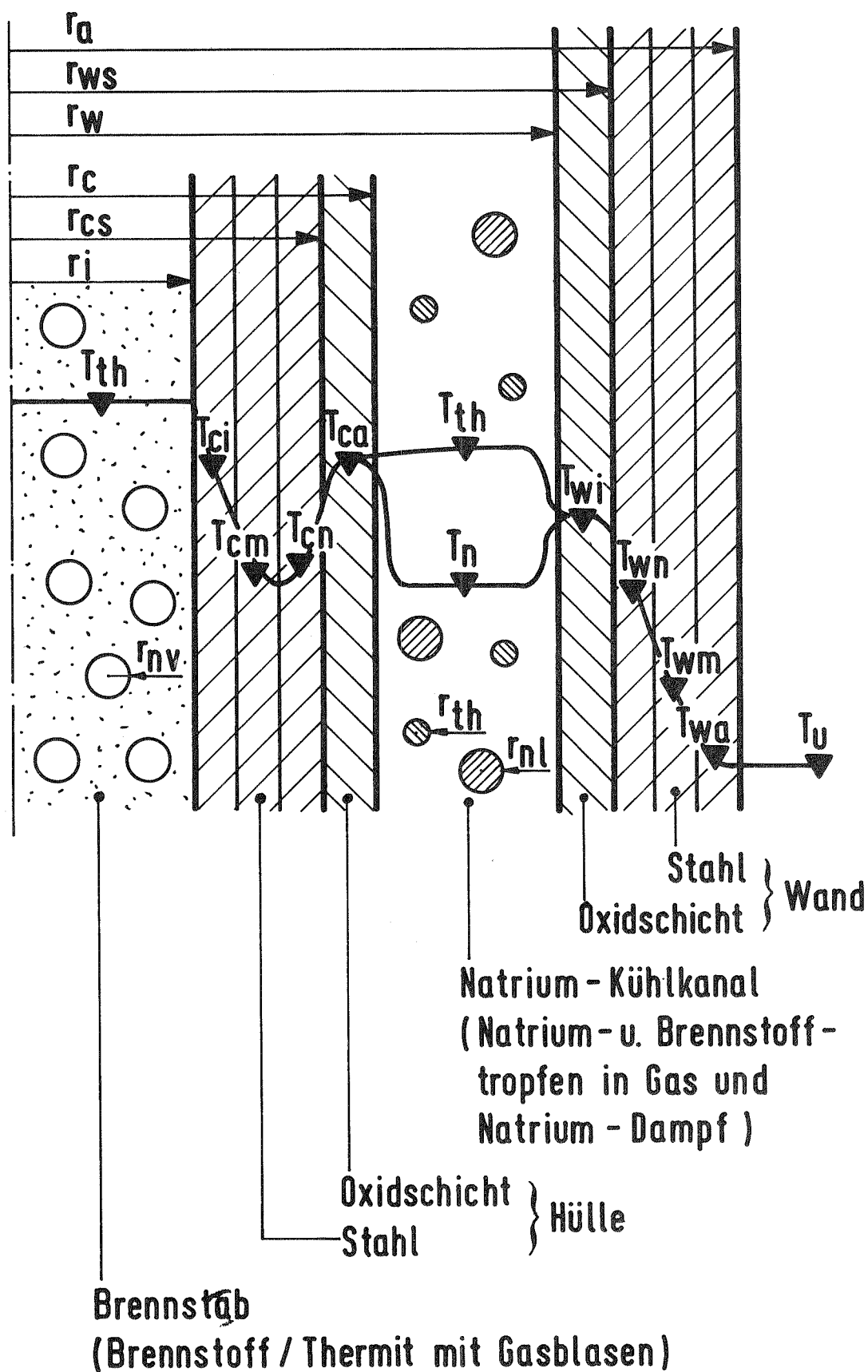


Abb. 3.4: Abmessungen von Hülle, Wand und Tropfen (Blasen) sowie Temperaturen in Fluid und Struktur

4. BETEILIGTE KOMPONENTEN UND DEREN ZUSTÄNDE

Übersicht:

- | | | |
|--|---|---|
| ● Oxid/Stahl-Gemisch | fest, flüssig | bewegt (im Fluid)
unbewegt (in der Struktur) |
| | | |
| → bei SIMBATH/Thermit: Al_2O_3 | | |
| → beim Reaktor: UO_2 (Zustandsgleichung z.Z. noch nicht verfügbar) | | |
| | | |
| ● Natrium | flüssig (kompressibel)
dampfförmig (Sättigungszustand) | } bewegt |
| | | |
| ● Spaltgas (ideales Gas) | gasförmig | bewegt |

Das Ausgangs-Mischungsverhältnis von Oxid und Stahl im Thermit ist variabel vorgebar. Die Unterteilung des Thermits in Oxid und Stahl ist in zweierlei Hinsicht bedeutend:

- Die Erstarrungstemperaturen von Stahl und Oxid (UO_2 oder Al_2O_3) sind sehr unterschiedlich. Entsprechend verschieden ist das Ausfrierverhalten dieser Komponenten (Separation).
- Die vorläufige Anwendung von CALIPSO auf SIMBATH-Versuche mit Thermit berücksichtigt dennoch bereits die Verhältnisse für den realen Anwendungsfall: dort besteht das "Thermit", der Brennstoff, völlig aus Oxid. Stahl kann sich durch Schmelzvorgänge dazumischen.

Das Natrium kann einphasig entweder unterkühlt bzw. überhitzt oder im Sättigungszustand sein. Liegt es zweiphasig vor, so wird thermodynamisches Gleichgewicht angenommen. Es kann bei entsprechender Energiezufuhr verdampfen oder kondensieren. Das flüssige Natrium ist kompressibel.

Das Spaltgas wird als ideales Gas betrachtet. Es wird durch seine Gas-konstante charakterisiert. Es hat weder Wärmekapazität noch

Wärmeleitungseigenschaften. Seine Temperatur wird volumetrisch gemittelt aus den Temperaturen der umgebenden Fluid-Komponenten. (Eine eigene Energiegleichung wäre leicht aufzustellen, dort wäre aber der hier gemachte Fehler nur verlagert durch Unsicherheiten in der Vielzahl der Wärmeübergänge zum Spaltgas.) Zu Beginn der Rechnung (= Zeitpunkt des ersten Stabversagens) sind Brennstab und Brutzone mit Brennstoff/Thermit bei vorgegebenem Mischungsverhältnis $x_s = \text{Masse Stahl/Masse Thermit}$ sowie Spaltgas im Mischungsverhältnis $x_{fg} = \text{Masse Spaltgas/Masse Thermit}$ gefüllt. Das Fluid ruht. Der Brennstoff liegt in der Brutzone fest vor, in der Brennstoffzone schmelzflüssig. Dies beinhaltet die Annahme, daß im Fall der Thermit-Versuche die chemische Reaktion bei Stabversagen abgeschlossen ist. Im Kühlkanal befindet sich anfangs flüssiges oder flüssiges und dampfförmiges Natrium, das ruht oder fließt. Bereits an dieser Stelle wird darauf hingewiesen, daß es somit Fluidbereiche gibt, in denen eine Komponente zunächst nicht existiert und später hinkommt oder sie umgekehrt zunächst in einem Bereich vorhanden ist und später verschwindet. Diese Tatsache wirft numerische Probleme auf, die in Abschnitt 6.2, ENERG, besprochen werden.

Die Vielzahl verschiedener Komponenten mit ihren Zuständen werden für die Impulsgleichungen zur Berechnung der Geschwindigkeiten zusammengefaßt zu einer

"leichten Phase" : Spaltgas und Natrium-Dampf

und einer

"schweren Phase" : Brennstoff/Thermit, Stahl (bewegt) und Natrium flüssig.

Es gibt somit zwei Geschwindigkeitsfelder. Der leichten Phase sind die Geschwindigkeiten u_v (radial) und v_v (axial, $v = \text{vapor}$) zugeordnet, der schweren Phase die Geschwindigkeiten u_l und v_l ($l = \text{liquid}$).

5. GLEICHUNGEN

Tabelle 5.1 gibt eine Übersicht über die verwendeten, in den folgenden Abschnitten im einzelnen beschriebenen Gleichungen und ihrem jeweiligen Ergebnis. Insgesamt sind etwa 60 Felder zu berechnen, entsprechend groß ist die Zahl der Gleichungen. Die Tabelle 5.1 enthält nur die wichtigen; unmittelbar einsichtige Beziehungen sind nicht besonders aufgeführt.

TABELLE 5.1: Die wichtigsten CALIPSO-Gleichungen

1. ERHALTUNGSGLEICHUNGEN *****	ERGEBNIS *****	GLEICHUNGSNR. *****
Massenerhaltung Brst.(Oxid) bewegt	ROF	5.1.1
Massenerhaltung Stahl bewegt	ROS	5.1.2
Massenerhaltung Natrium Gemisch	RON	5.1.3
Massenerhaltung Natrium Dampf	GAN	5.1.4
Massenerhaltung Spaltgas	ROFG	5.1.5
Massenerhaltung Wand (St.+Ox.)	RW;RWS	5.1.6; 5.1.7
Massenerhaltung Huelle (St.+Ox.)	RC;RCS	5.1.8; 5.1.9
Energieerhaltung Brst. (St.+Ox. bew.)	ETH	5.1.10
Energieerhaltung Natrium	EN	5.1.11
Energieerhaltung Huelle (Stahl)	TC;GACS wenn>0	5.1.12...5.1.17
Energieerhaltung Wand (Stahl)	TW;GAWS wenn>0	5.1.19...5.1.21
Energieerhaltung Oxid ausgefr. (C+W)	TCA;TWI	5.1.18; 5.1.22
Impulserhaltung schwere Phase (r+z)	UL;VL	5.1.23; 5.1.24
Impulserhaltung leichte Phase (r+z)	UV;VV	5.1.25; 5.1.26
 2. ZUSTANDSGLEICHUNGEN *****	 ERGEBNIS *****	
kalorische Zustandsgl. Natrium	TN	5.2.9; 5.2.10
kalor. Zustandsgl. Brst.(Ox.+St.)	TTH	5.2.11
Spaltgastemp. aus Mittelung	TFG	-
Therm. Zustandsgl. Natrium fluessig	RONLP	5.2.2; 5.2.3
Therm. Zustandsgl. Natrium dampff.	RONVP	5.2.4
Therm. Zustandsgl. Brst. (St.+Ox.bew.)	ROFP;ROSP	5.2.7; 5.2.8
Therm. Zustandsgl. Spaltgas (id. Gas)	PFG	5.2.5
Dampfdruckkurven Na, Ox, St	PN;PF+PS=PTH	5.2.12...5.2.15
Druck=Summe d. Partialdruecke	P	-
 3. KONSTITUTIVE GLEICHUNGEN etc. *****	 ERGEBNIS *****	
Volumen-/Massenanteile aus Mittelg.	TATH;TAGAS;TANL;XS	3.11
Gemischdichten aus Mittelung	ROM;ROV;ROL;ROTH	5.3
Gl. fuer Querschnittsflaeche	A;ACV;AWV;DH	3.1...
	AC;ACS;AW;AWS	...3.10
WUE. Huelle/Thermit Wand/Thermit	QCTH;QWTH	5.3.8/10/12
WUE. Huelle/Natrium Wand/Natrium	QCN;QWN	5.3.9/11/13
WUE. Brst.(Ox.+St. bewegt)/Natrium	QNTH	5.3.6
WUE. Oxidschicht/Stahl u. /Fluid	QCSF;QWFS;QCFTH	5.3.14...
	QCFN;QWFTH;QWFN	...5.3.19
WUE. Wand/Umgebung	QWSU	5.3.7
Ausfrieren Brst./St.	GAWF,S;GACF,S (<0)	5.3.22
Rohrreibkraft Dampf u. Fluessigphase	FVIS,r,ax	5.3.2...5.3.5
Zwischenphasenreibkraft	FK	5.3.1
Gemisch-/Na-Geschwind. aus Mittelg.	VM;UN;VN	5.4; 5.5
Abbroeckelrate Oxidschicht	GACF wenn GACS>0	5.3.23

Bemerkung:

Sämtliche Dichten ρ und Volumenanteile θ beziehen sich auf das aktuelle Maschenvolumen $V = A \cdot \Delta z$. Es handelt sich also um sogenannte Schmierdichten. In manchen Fällen werden die realen, physikalischen Dichten benötigt - diese werden durch ein hochgestelltes p gekennzeichnet: ρ^p . Entsprechend ist V^p das wirklich eingenommene Volumen. Somit gilt allgemein:

$$\text{Volumenanteil} \quad \theta = V^p / V \quad (5.1)$$

$$\text{Schmierdichte} \quad \rho = \theta \cdot \rho^p \quad (5.2)$$

Sind mehrere Stoffe in einem Kontrollvolumen, so kann eine mittlere Schmierdichte ρ_m definiert werden:

$$\rho_m = \sum_i \rho_i \quad (5.3)$$

Ähnlich werden mittlere Geschwindigkeiten errechnet. So z.B. für Natrium:

$$\rho_n \underline{u}_n = \rho_{ne} \underline{u}_e + \rho_{nv} \underline{u}_v \quad \text{ergibt:}$$

$$\underline{u}_n = \frac{\rho_{ne} \underline{u}_e + \rho_{nv} \underline{u}_v}{\rho_n} \quad (5.4)$$

oder eine mittlere Geschwindigkeit für das gesamte Gemisch entsprechend:

$$\underline{u}_m = \frac{(\rho_{ne} + \rho_{th}) \underline{u}_e + (\rho_{nv} + \rho_{tz}) \underline{u}_v}{\rho_m} \quad (5.5)$$

$$\rho_m = \rho_{th} + \rho_{ne} + \rho_{nv} + \rho_{tz} \quad \text{nach (5.3)}$$

In den folgenden Erhaltungsgleichungen wurde jeweils die "ausführliche" Schreibweise gewählt, in der der Divergenzoperator und die Konvektionsgeschwindigkeit durch ihre Komponenten dargestellt werden.

Beispiel (Massenerhaltung):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho A) + \nabla (\rho A \underline{u}) = \dot{\Gamma}$$

Der Divergenzoperator in Zylinderkoordinaten lautet:

$$\nabla = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

und $\underline{u} = (u, v)$

Damit folgt die gewählte Schreibweise:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho A u) + \frac{\partial}{\partial z} (r \rho A v) = \dot{\Gamma}$$

5.1 Erhaltungsgleichungen

Massenerhaltung des bewegten Oxids:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_f A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_f A u_e) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_f A v_e) = \dot{\Gamma}_{cf} \frac{A_{cv}}{\Delta z} + \dot{\Gamma}_{wf} \frac{A_{wv}}{\Delta z} \quad (5.1.1)$$

Die Terme der rechten Seite berücksichtigen Schmelzen bzw. Ausfrieren von einer Oxidschicht an der Hülle und/oder der Kanalwand.

Massenerhaltung des bewegten Stahls:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_s A u_e) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_s A v_e) = \dot{\Gamma}_{cs} \frac{A_{cv}}{\Delta z} + \dot{\Gamma}_{ws} \frac{A_{wv}}{\Delta z} \quad (5.1.2)$$

Die Terme der rechten Seite berücksichtigen Schmelzen bzw. Ausfrieren von Stahl an der Hülle und/oder der Kanalwand. Hier wie in (5.1.1) wird $\dot{\Gamma}$ für den Fall des Schmelzens ($\dot{\Gamma} > 0$) aus der Energiegleichung für Hülle/Wand (5.1.12 bis 5.1.21) gewonnen, für den Fall des Ausfrierens ($\dot{\Gamma} < 0$) aus einem Ausfriermodell (5.3.22, 5.3.23).

Massenerhaltung des Natriums (Gemisch):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_n A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_n A u_n) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_n A v_n) = 0 \quad (5.1.3)$$

\underline{u}_n ergibt sich nach Gl. (5.4).

Massenerhaltung des Natrium-Dampfes:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{nv} A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_{nv} A u_v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_{nv} A v_v) = \dot{\Gamma}_n A \quad (5.1.4)$$

$\dot{\Gamma}_n$ ist die Phasenübergangsrate (Verdampfungsrate) des Natriums, Dimension $[\text{kg}/(\text{m}^3 \text{sec})]$. \dot{S}_{nv} wird aus der thermischen Zustandsgleichung des dampfförmigen Natriums, Gl. (5.2.4) unter Annahme des Sättigungszustandes (thermodynamisches Gleichgewicht) gewonnen, aus (5.1.4) wird deshalb $\dot{\Gamma}_n$ berechnet.

Massenerhaltung des Spaltgases:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_f A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_f A u_v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_f A v_z) = 0 \quad (5.1.5)$$

Massenerhaltung der Wand

Anteil Stahl:
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s^p A_{ws}) = - \dot{\Gamma}_{ws} \frac{A_{ws}}{\Delta z}$$

Anteil Oxid:
$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_f^p (A_w - A_{ws})] = - \dot{\Gamma}_{wf} \frac{A_{ws}}{\Delta z}$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (3.4) bis (3.6) erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t} r_w = \frac{\dot{\Gamma}_{wf}}{\rho_f^p} + \frac{\dot{\Gamma}_{ws}}{\rho_s^p} \quad (5.1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} r_{ws} = \frac{\dot{\Gamma}_{ws}}{\rho_s^p} \quad (5.1.7)$$

Massenerhaltung der Hülle

Anteil Stahl:
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s^p A_{cs}) = - \dot{\Gamma}_{cs} \frac{A_{cs}}{\Delta z}$$

Anteil Oxid:
$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_f^p (A_c - A_{cs})] = - \dot{\Gamma}_{cf} \frac{A_{cs}}{\Delta z}$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (3.1) bis (3.3) erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t} r_c = - \left(\frac{\dot{\Gamma}_{cf}}{\rho_f^p} + \frac{\dot{\Gamma}_{cs}}{\rho_s^p} \right) \quad (5.1.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} r_{cs} = - \frac{\dot{\Gamma}_{cs}}{\rho_s^p} \quad (5.1.9)$$

Beim Unterschreiten einer bestimmten Mindesthüllstärke im Falle des Schmelzens wird der Rest der Hülle dem Fluid im Kanal zugeschlagen und $\epsilon = 1$ als Zeichen für die Öffnung gesetzt.

Zur Energieerhaltung des Brennstoffs und des Natriums:

Es wird explizit die innere Energie erhalten. Aufgrund einer Vielzahl möglicher Darstellungsformen in der Literatur wird im Anhang A1 eine eigene Betrachtung angestellt. An dieser Stelle wird nur das Ergebnis mit den getroffenen Annahmen genannt:

- Keine axiale Wärmeleitung.
- Die sogenannte "Verschiebeenergie" wird vernachlässigt.
- Die gesamte Wandreibungswärme bleibt zunächst im Fluid; erst durch die entstehende Temperaturdifferenz Fluid-Wand stellt sich ein Wärmestrom ein.
- Die Zwischenphasenreibungswärme wird proportional zu den jeweiligen Volumenanteilen der Phasen zwischen diesen aufgeteilt.
- Die Reibungswärme beim Phasenübergang wird voll in der "Empfängerphase" frei (auch hier läßt die entstehende Temperaturdifferenz einen Wärmestrom fließen).
- Der auf die Wand übertragene Impuls durch die Wandreibung wird proportional zu den jeweiligen Volumenanteilen der Phasen auf diese verteilt.

Energieerhaltung des Brennstoffs (Oxid und Stahl):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_{st} e_{st} A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_{st} e_{st} A u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_{st} e_{st} A v_z) = \\ & = \frac{A_{cv}}{\Delta z} \left\{ \dot{q}_{cs} (h_s + r_{ms}) + \frac{1}{2} (|\dot{q}_{cs}| + \dot{q}_{cs}) \cdot \frac{u_c^2}{2} + \dot{q}_{cf} (h_f + r_{mf}) + \frac{1}{2} (|\dot{q}_{cf}| + \dot{q}_{cf}) \left(\frac{u_c^2}{2} - r_{mf} \right) \right\} \\ & + \frac{A_{wv}}{\Delta z} \left\{ \dot{q}_{ws} (h_s + r_{ms}) + \frac{1}{2} (|\dot{q}_{ws}| + \dot{q}_{ws}) \cdot \frac{u_c^2}{2} + \dot{q}_{wf} (h_f + r_{mf}) + \frac{1}{2} (|\dot{q}_{wf}| + \dot{q}_{wf}) \left(\frac{u_c^2}{2} - r_{mf} \right) \right\} \\ & + \frac{1}{\Delta z} (\dot{Q}_{wth} + \dot{Q}_{wft} + \dot{Q}_{cth} + \dot{Q}_{cft} + \dot{Q}_{nth}) + \rho_{st} A [FK (u_c - u_u)^2 + f_{vis} \cdot u_c] \end{aligned}$$

Der erste Term der rechten Seite beschreibt die Reibungswärme beim Hüllschmelzen von Stahl bzw. Abbröckeln der Oxidschicht von der Hülle sowie die direkt durch Phasenwechsel gewonnene oder verlorene innere Energie des Fluids. Im Fall des Schmelzens ($\dot{\Gamma} > 0$) ist $h_s = c_{ps} \cdot T_{cn}$ (Temperatur der Hülle), im Fall des Ausfrierens ist $h_s = c_{ps} \cdot T_{cn}$ (Temperatur des Brennstoffs im Fluid). Entsprechendes gilt für h_f mit einem Unterschied für den Fall, daß Oxid von der Hülle zum Fluid übergeht: Hier wird die Schmelzwärme r_{mf} nicht der Hülle abgezogen, da es sich vor und nach dem Abbröckelvorgang um festes Oxid handelt.

Der zweite Term gilt völlig analog für die Kanalwand.

Der dritte Term beschreibt die Wärmeströme zur Wand, zur Hülle und zum Natrium (s. Abb. 5.1).

Der letzte Term enthält die durch Zwischenphasenreibung und Wandreibung entstehende Wärme.

Energieerhaltung des Natrium-Gemisches:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_n e_n A) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_n e_n A u_n) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_n e_n A v_n) =$$

$$= \frac{1}{A z} (\dot{Q}_{wn} + \dot{Q}_{wfn} + \dot{Q}_{zn} + \dot{Q}_{cfn} - \dot{Q}_{nth}) + (1 - \theta_{rn}) A [FK (\underline{u}_c - \underline{u}_v)^2 + f_{vis} \cdot \underline{u}_n] \quad (5.1.11)$$

Auf der rechten Seite stehen wiederum die Wärmeströme zur Wand, zur Hülle und zum Thermit. Der Aufteilungsfaktor für die Reibungswärmen ist

$$\theta_n = (1 - \theta_{rn}) \quad \text{gemäß Abb. 3.5.}$$

Energieerhaltung der Hülle:

(vgl. Abbn. 3.4 und 5.1)

- Annahmen:
- Keine axiale Wärmeleitung
 - Wärmeleitfähigkeit $\lambda = \text{const.}$ und spezifische Wärme $c_p = \text{const.}$
 - Die zeitliche Änderung des Kontrollvolumens wird vernachlässigt (siehe auch Anhang A2)

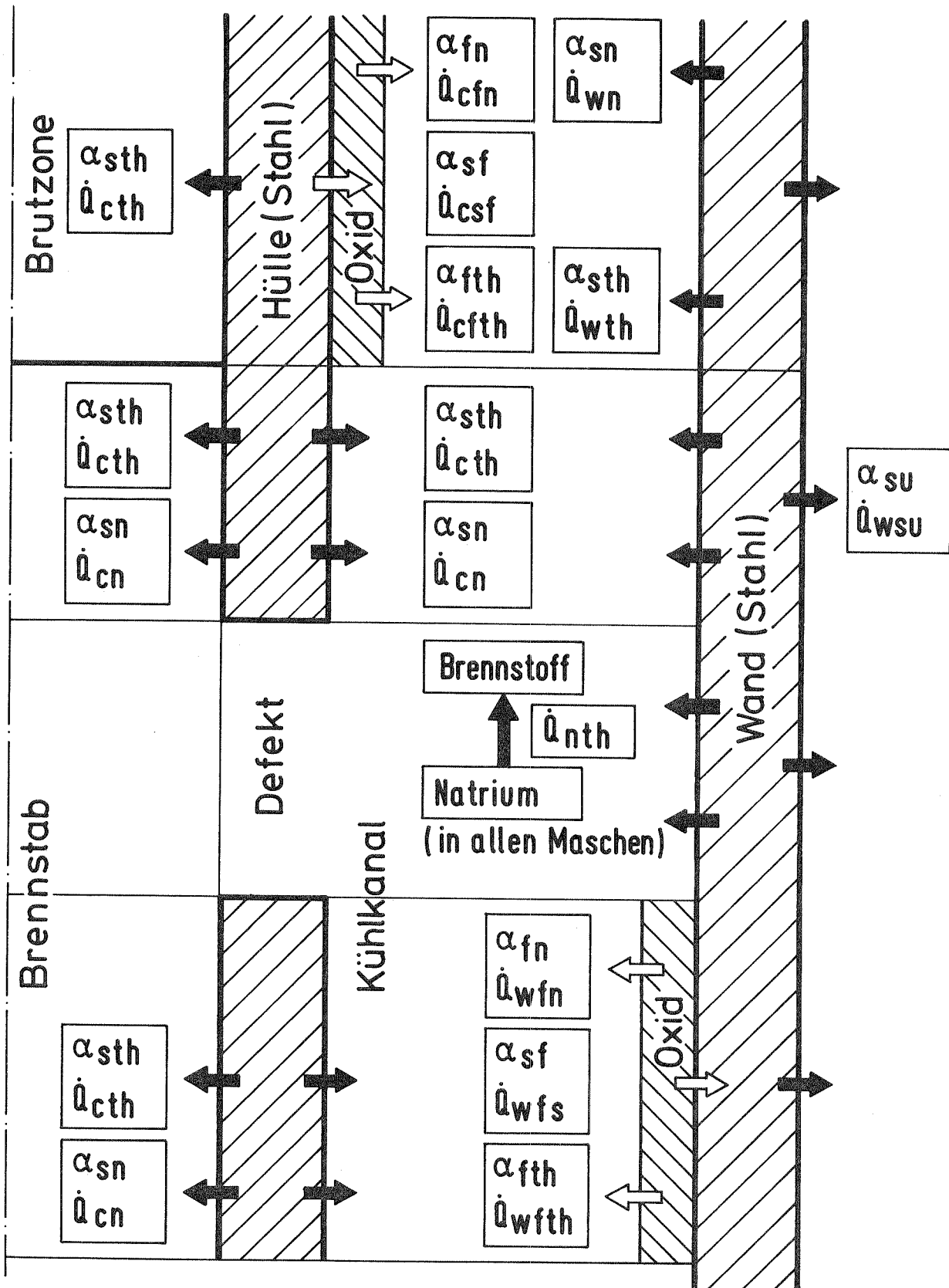


Abb. 5.1: Wärmeübergangs-Terme für die Energiegleichungen (Wahl der Maschen mit ausgefrorenem Oxid willkürlich; im Brennstab kann sich zu späteren Zeiten auch Natrium befinden). Die Richtung und Farbe der Pfeile sind ohne Bedeutung. Die positive Richtung des Wärmestromes wird durch die Reihenfolge der \dot{Q} -Indices festgelegt.

- Bei Ausfrieren wird die gesamte Erstarrungswärme in der Struktur frei.

Bei der inneren Wärmequelle $L(r)$ muß im folgenden unterschieden werden zwischen Ausfrieren und Schmelzen. Beim Ausfrieren wird die Erstarrungswärme in der Struktur frei (s.o.), $\dot{\Gamma} < 0$ wird durch ein Ausfriermodell berechnet (siehe Abschnitt 5.3.3). Beim Schmelzen geht die Gesamthalpie zum Fluid, $\dot{\Gamma} > 0$ folgt aus der Energiebilanz der Struktur.

Es gilt [9, Gl. 10.37_7] allgemein für die Schicht i der Stahl-Hülle ($N_c = 3$ Schichten insgesamt):

$$\underbrace{\frac{A_{cs} \cdot \Delta z}{N_c} \nabla(\lambda_s \nabla T_{ci})}_{\text{Wärmeleitung}} + \underbrace{L(r)}_{\text{inn. Wärmequelle}} = \underbrace{c_{ps} \rho_s^p \frac{\Delta z}{N_c} \frac{\partial}{\partial t} (A_{cs} T_{ci})}_{\text{Aufheizung}}$$

Mit obigen Annahmen folgt für die zentrale Schicht (T_{cm}):

$$\lambda_s \frac{\partial^2 T_c}{\partial r^2} + \frac{\lambda_s}{r} \frac{\partial T_c}{\partial r} = c_{ps} \rho_s^p \frac{\partial T_{cm}}{\partial t} \quad (5.1.12)$$

Für die Innen- bzw. Außenschicht wird der Term "Wärmeleitung" ersetzt unter Beachtung des Wärmeübergangs zu den angrenzenden Materialien.

Auf der Innenseite der Hülle besteht Kontakt zu Brennstoff, es gilt [9, Gl. 10.48_7]:

$$-\lambda_s \left. \frac{\partial T_c}{\partial r} \right|_i = \alpha_{sth} (T_{h,i} - T_{ci}) \quad (A)$$

Außen besteht entweder Kontakt zum Kühlkanal ($\alpha_{sf} = 0$) oder zur ausgefrorenen Oxidschicht ($\alpha_{sn} = \alpha_{sth} = 0$):

$$-\lambda_s \left. \frac{\partial T_c}{\partial r} \right|_a = \alpha_{sn} (T_{cn} - T_n) (1 - \theta_{ka}) + \alpha_{sth} (T_{cn} - T_{ka,a}) \theta_{ka} + \alpha_{sf} (T_{cn} - T_{ca}) \quad (B)$$

Damit gilt für die innenliegende Hüllschicht (T_{ci}):

$$\underbrace{\alpha_{sth} (T_{th,i} - T_{ci}) 2\pi r_c \Delta z \Theta_{th} (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{ein}} + \underbrace{\lambda_d \left. \frac{\partial T_c}{\partial r} \right|_i \cdot 2\pi (r_2 + \Delta r) \Delta z (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{aus}} = \underbrace{c_{ps} s_s^p \frac{\Delta z}{N_c} A_{cs} \frac{\partial T_{ci}}{\partial t}}_{\text{Aufheizung}} \quad (5.1.13)$$

und für die außenliegende Hüllschicht (T_{cn}):

$$\underbrace{-\lambda_d \left. \frac{\partial T_c}{\partial r} \right|_a \cdot 2\pi (r_{cs} - \Delta r) \Delta z (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{ein}} - \underbrace{R.S.Gl. (A) \cdot 2\pi r_{cs} \Delta z (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{aus}} + \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{cs}| - \dot{\Gamma}_{cs}) \cdot A_{cv} \left(h_s + \frac{u_e^2}{2} \right)}_{\text{Gewinn (Ausfrieren)}} =$$

$$= \underbrace{c_{ps} s_s^p \frac{\Delta z}{N_c} A_{cs} \frac{\partial T_{cn}}{\partial t}}_{\text{Aufheizung}} \quad (5.1.14)$$

h_s wird konsistent zu (5.1.10) bestimmt: $h_s = c_{ps} \cdot T_{th}(\text{flüssig}) + r_{ms}$

Die Gleichungen (5.1.12) bis (5.1.14) gelten nur für $T_{c...} \leq T_{ms}$, andernfalls schmilzt Stahl. Die Schmelzrate $\dot{\Gamma}_{cs}$ und damit auch die Abbröckelrate $\dot{\Gamma}_{cf}$ (Abschnitt 5.3.3, Gl. (5.3.23)) wird bestimmt durch:

$$T_c = T_{ms} \quad (C)$$

$$\dot{Q}_{ein} - \dot{Q}_{aus} - \text{Verlust über Phasengrenze} = \Delta \text{Energie} = \Delta (s^p V^p h^+) \quad (D)$$

Diese Gleichung wird im Anhang A2 erläutert mit einer zusätzlichen Bemerkung zur Vernachlässigung des Volumenänderungsterms.

Unter Berücksichtigung von (C) und (D) folgt für den Fall des Schmelzens aus Gln. (5.1.12 bis 5.1.14):

Zentrale Hüllschicht, Schmelzen ($\dot{\Gamma}_{csm}$):

$$\underbrace{\frac{A_{cs} \cdot \Delta z}{N_c} \left(\lambda_d \frac{\partial^2 T_c}{\partial r^2} + \frac{\lambda_d}{r} \frac{\partial T_c}{\partial r} \right)}_{\dot{Q}_{ein} - \dot{Q}_{aus}} - \underbrace{\dot{\Gamma}_{csm} \cdot A_{cv} \cdot h_s}_{\text{Schmelzwärme} + \text{Verlust } \Delta E} = 0 \quad (5.1.15)$$

Innenliegende Hüllschicht, Schmelzen ($\dot{\Gamma}_{csi}$):

$$\alpha_{sth}(\bar{T}_{hi} - T_{ci}) 2\pi r_i \Delta z \theta_{th} (1-\epsilon) + \lambda_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial r} \right|_i 2\pi (r_i + \Delta r) \Delta z (1-\epsilon) - \dot{\Gamma}_{csi} A_{cv} h_s = 0 \quad (5.1.16)$$

Außenliegende Hüllschicht, Schmelzen ($\dot{\Gamma}_{csn}$):

$$-\lambda_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial r} \right|_a 2\pi (r_{cs} - \Delta r) \Delta z (1-\epsilon) - R.S.Gl. (B) \cdot 2\pi r_{cs} \Delta z (1-\epsilon) - \dot{\Gamma}_{csn} A_{cv} h_s = 0 \quad (5.1.17)$$

für (5.1.15) bis (5.1.17) gilt: $h_s = c_{ps} \cdot T_{ms} + r_{ms}$

Die Zuteilung der Schmelzmassen - ob zum Brennstab oder zum Kühlkanal - wird in Abschnitt 5.3.3, Geometrieänderungen b), beschrieben.

Für eine eventuell vorhandene Oxidschicht (T_{ca}) gilt entsprechend der Gleichung für T_{cn} Gl. (5.1.14):

$$\underbrace{\alpha_{sf} (\bar{T}_{cn} - \bar{T}_{ca}) 2\pi r_{cs} \Delta z (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{ein}} - \underbrace{[\alpha_{fn} (\bar{T}_{ca} - \bar{T}_n) (1-\theta_{th}) + \alpha_{fh} (\bar{T}_{ca} - \bar{T}_{th}) \theta_{th}] 2\pi r_c \Delta z (1-\epsilon)}_{\dot{Q}_{aus}}$$

$$- c_{pf} S_f^p \Delta z (A_c - A_{cs}) \frac{\partial T_{ca}}{\partial t} - \underbrace{\dot{\Gamma}_{cf} A_{cv} \left(h_f + \frac{u_e^2}{2} \right)}_{\text{Gewinn/Verlust}} = 0 \quad (5.1.18)$$

Aufheizung

Gewinn/Verlust

$$\text{mit } h_f = \begin{cases} c_{pf} \bar{T}_{th} + r_{mf}, & \dot{\Gamma}_{cf} < 0 & \text{(Ausfrieren)} \\ c_{pf} \bar{T}_{ca} - \frac{u_e^2}{2}, & \dot{\Gamma}_{cf} > 0 & \text{(Abbröckeln, Oxid bleibt fest)} \end{cases}$$

Energieerhaltung der Wand:

(vgl. Abbn. 3.4 und 5.1, die Wand ist in $N_w = 3$ Schichten unterteilt)

Es gelten die gleichen Annahmen wie für die Hülle, das Vorgehen ist analog. Es fehlen die ϵ -Terme, die vom Hüllrohrdefekt stammen. Die

dokumentierte Programmversion druckt bei Temperaturen $T_w > T_{ms}$ eine Warnung aus, es wird kein Schmelzen ($\dot{\Gamma}_w > 0$) berechnet, da es in Einstabversuchen mit wenigen Ausnahmen nicht aufgetreten ist und bei Mehrstabversuchen die Wand ohnehin verschwindet. Ausfrieren ($\dot{\Gamma}_w < 0$) wird hingegen wie bei der Hülle behandelt.

Für die zentrale Wandschicht (T_{wm}) gilt:

$$\lambda_s \frac{\partial^2 T_w}{\partial r^2} + \frac{\lambda_s}{r} \frac{\partial T_w}{\partial r} = c_{ps} S_s^p \frac{\partial T_{wm}}{\partial t} \quad (5.1.19)$$

Auf der Innenseite der Wand besteht Kontakt entweder zum Kühlkanal ($\alpha_{sf} = 0$) oder zur ausgefrorenen Oxidschicht ($\alpha_{sn} = \alpha_{sth} = 0$):

$$-\lambda_s \frac{\partial T_w}{\partial r} \Big|_i = \alpha_{sf} (T_{wi} - T_{wn}) + \alpha_{sth} (T_{th} - T_{wi}) \Theta_{th} + \alpha_{sn} (T_n - T_{wi}) (1 - \Theta_{th}) \quad (E)$$

Auf der Außenseite der Wand besteht Kontakt zur Umgebung mit der konstanten Temperatur T_u :

$$-\lambda_s \frac{\partial T_w}{\partial r} \Big|_a = \alpha_{su} (T_{wa} - T_u) \quad (F)$$

Für die innenliegende Wandschicht (T_{wn}) gilt:

$$\underbrace{R.S.Gl.(E) \cdot 2\pi r_{ws} \Delta z}_{\dot{Q}_{ein}} + \underbrace{\lambda_s \frac{\partial T_w}{\partial r} \Big|_i \cdot 2\pi (r_{ws} + \Delta r) \Delta z}_{-\dot{Q}_{aus}} + \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{ws}^i| - \dot{\Gamma}_{ws}) A_{ws} (h_s + \frac{u_s^2}{2})}_{\text{Gewinn (Ausfrieren)}} =$$

$$= \underbrace{c_{ps} S_s^p \frac{\Delta z}{N_w} A_{ws} \frac{\partial T_{wn}}{\partial t}}_{\text{Aufheizung}} \quad (5.1.20)$$

Für die außenliegende Wandschicht (T_{wa}) gilt:

$$\underbrace{-\lambda_s \frac{\partial T_w}{\partial r} \Big|_a 2\pi(r_a - \Delta r) \Delta z}_{\dot{Q}_{\text{ein}}} - \underbrace{\alpha_{au} (T_{wa} - T_u) 2\pi r_a \Delta z}_{\dot{Q}_{\text{aus}}} = \underbrace{c_{pd} S_a^p \frac{\Delta z}{N_w} A_{ws} \frac{\partial T_{wa}}{\partial t}}_{\text{Aufheizung}} \quad (5.1.21)$$

Für eine eventuell vorhandene Oxidschicht (T_{wi}) gilt entsprechend der Gleichung (5.1.20) für T_{wn} :

$$\underbrace{\alpha_{fn} (T_n - T_{wi}) \cdot 2\pi r_w \Delta z (1 - \theta_{re}) + \alpha_{fte} (T_{re} - T_{wi}) 2\pi r_w \Delta z \theta_{re}}_{\dot{Q}_{\text{ein}}} - \underbrace{\alpha_{sf} (T_{wi} - T_{wn}) 2\pi r_{ws} \Delta z}_{\dot{Q}_{\text{aus}}} - \underbrace{c_{pf} S_f^p \Delta z (A_w - A_{ws}) \frac{\partial T_{wi}}{\partial t}}_{\text{Aufheizung}} - \underbrace{\dot{m}_{wf} A_{ws} (h_f + \frac{u_f^2}{2})}_{\text{Gewinn}} = 0 \quad (5.1.22)$$

mit $h_f = c_{pf} \cdot T_{re} + r_{mf}$

Zur Berechnung der Temperaturprofile in Hülle und Wand zu Beginn der Rechnung werden die Randbedingungen [Gln. (A) und (B) der Energieerhaltung für die Hülle bzw. (E) und (F) der Energieerhaltung für die Wand] unter der Annahme radial linearer Temperaturprofile benutzt. Es gilt wiederum Abb. 3.4.

$$-\lambda_s \frac{T_{en} - T_{em}}{r_e - r_i} N_c = \alpha_{sn} (T_{en} - T_n) \quad (G)$$

$$-\lambda_s \frac{T_{em} - T_{ei}}{r_e - r_i} N_c = \alpha_{sth} (T_{re} - T_{ei}) \quad (H)$$

$$T_{em} = \frac{T_{ei} + T_{en}}{2} \quad (I)$$

Die Natriumtemperatur T_n , die Thermittemperatur T_{th} , die Stoffwerte und die geometrischen Daten sind bekannt, es kann nach den drei Unbekannten T_{cn} , T_{cm} und T_{ci} aufgelöst werden.

$$T_{cn} = \frac{-\frac{2\alpha_{sn}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) T_n \left[\frac{1}{\lambda} + \frac{\alpha_{sth}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) \right] - \frac{\alpha_{sth}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) T_{th}}{\frac{1}{\lambda} - \left[\frac{2\alpha_{sn}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) + 1 \right] \left[\frac{1}{\lambda} + \frac{\alpha_{sth}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) \right]} \quad (J)$$

$$T_{ci} = \frac{\frac{\alpha_{sth}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i) T_{th} + \frac{T_{ca}}{2}}{\frac{1}{\lambda} + \frac{\alpha_{sth}}{\lambda_s N_c} (r_c - r_i)} \quad (K)$$

T_{cm} aus Gl. (I).

Völlig analog wird das Anfangstemperaturprofil in der Kanalwand ermittelt. Es können ebenfalls die Gleichungen (G) bis (K) benutzt werden, wenn man die Analogie der folgenden Größen beachtet:

<u>Wand</u>	<u>Hülle</u>
T_{wn}	T_{ci}
T_{wa}	T_{cn}
T_{wm}	T_{cm}
T_n	T_{th}
T_u	T_n
α_{sn}	α_{sth}
α_{su}	α_{sn}
$r_a - r_w$	$r_c - r_i$
N_w	N_c

Daraus ergeben sich mit den Gleichungen (I), (J), (K) die Wand-Anfangstemperaturen T_{wn} , T_{wm} und T_{wa} .

Impulserhaltungsgleichungen

Es gibt die "leichte Phase" (Natrium-Dampf und Spaltgas, Geschwindigkeit \underline{u}_v) und die "schwere Phase" (Brennstoff/Thermit und flüssiges Natrium, Geschwindigkeit \underline{u}_1), die r- und die z-Richtung; daraus resultieren vier Impulsgleichungen.

Es wird der Effekt sogenannter virtueller Massen berücksichtigt. Unter dem Begriff virtueller Masse versteht man folgendes: Wird z.B. eine Blase in einer kontinuierlichen Flüssigkeit beschleunigt, so muß (zusätzlich zur Zwischenphasenreibung) ein gewisser Anteil der Flüssigkeit (virtuelle Masse) mit der Relativgeschwindigkeit mitbeschleunigt werden [10]. Daraus resultieren Zusatzterme in den Impulsgleichungen:

$$\frac{d}{dt} (\rho_v \underline{u}_v A) + \frac{d}{dt} (\tilde{\rho} \underline{u}_{rel} A) = \text{Druckgradient} + \dots \text{ (leichte Phase)}$$

$$\frac{d}{dt} (\rho_e \underline{u}_e A) - \frac{d}{dt} (\tilde{\rho} \underline{u}_{rel} A) = \text{Druckgradient} + \dots \text{ (schwere Phase)}$$

\underline{u}_{rel} ist die Relativgeschwindigkeit, $\tilde{\rho}$ ist die virtuelle Dichte. Für den geschilderten Fall ist $\tilde{\rho} = C_v \rho_{gas} \rho_e^p$, $C_v = 0,5$ für kugelförmige Blasen.

Auflösung der $\frac{d}{dt}$'s (nur leichte Phase, eindimensional):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_v \underline{u}_v A) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_v \underline{u}_v A u_v) + \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \underline{u}_{rel} A) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} \underline{u}_{rel} A u_z) = \dots$$

transportierende Geschwindigkeit

transportierter Impuls

Für die transportierende Geschwindigkeit u_z könnte zunächst rein formal zu u_{rel} angenommen werden. Dies führt z.B. bei der stationären Durchströmung einer Erweiterung zu physikalisch falschen Ergebnissen. In der Literatur gibt es eine Vielzahl verschiedener Ansätze [11 bis 14], von denen einige $u_z = u_v$ vorschlagen. Dies führt jedoch dazu, daß die

Relativbeschleunigungskraft nicht invariant gegenüber einer Galilei-
transformation des Koordinatensystems ist (Abhängigkeit von der Größe
der Grundgeschwindigkeit) und daß keine Symmetrie mehr in den Impuls-
gleichungen für die leichte und schwere Phase herrscht (in beiden steht
entweder u_v oder u_l , aber für welches wird argumentiert?). Deshalb
wird hier als transportierende Geschwindigkeit

$$u_z = \frac{u_v + u_e}{2}$$

vorgeschlagen. Sie erfüllt beide genannten Bedingungen. Damit:

$$\frac{d}{dt} (\tilde{\rho} u_{rel} A) \stackrel{def.}{=} \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} u_{rel} A) + \nabla (\tilde{\rho} u_{rel} A \otimes \frac{u_v + u_e}{2})$$

" \otimes " = dyadisches Produkt

Impulsgleichung für die schwere Phase (Brennstoff, flüssiges Natrium)

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\rho_e u_e A) + \nabla (\rho_e u_e A \otimes u_e)}_{\text{Beschleunigung}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} u_{rel} A) + \nabla (\tilde{\rho} u_{rel} A \otimes \frac{u_v + u_e}{2})}_{\text{virtuelle Masse}} =$$

$$= \underbrace{-(1-\theta_{gas}) A \nabla p}_{\text{Druckgradient}} + \underbrace{f_{vis} \cdot A \cdot (1-\theta_{gas})}_{\text{Wandreibung}} + \underbrace{\rho_e g A}_{\text{Gravitation}} + \underbrace{FK \cdot A (u_v - u_e)}_{\text{Zwischenphasenreibung}}$$

$$- \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| + \dot{\Gamma}_n) u_e A}_{\text{Natrium-Verdampfung}} + \underbrace{\frac{1}{2} (\dot{\Gamma}_n - |\dot{\Gamma}_n|) u_v A}_{\text{Natrium-Kondensation}}$$

$$- \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{wf}| - \dot{\Gamma}_{wf} + |\dot{\Gamma}_{ws}| - \dot{\Gamma}_{ws}) \frac{A_{wv}}{\Delta z} u_e}_{\text{Ausfrieren an der Wand}} - \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{ef}| - \dot{\Gamma}_{ef} + |\dot{\Gamma}_{es}| - \dot{\Gamma}_{es}) \frac{A_{ev}}{\Delta z} u_e}_{\text{Ausfrieren an der Hülle}}$$

Es folgt die Auflösung der Vektorgleichung in je eine skalare Gleichung
für die r- und z-Richtung, wobei schließlich noch wegen der virtuellen

Massen jeweils unterschieden werden muß, welches die kontinuierliche Phase ist.

Impulsgleichung der schweren Phase, r-Richtung

$$\begin{aligned}
 & A \frac{\partial}{\partial t} (\rho_e \mu_e) + \rho_e \mu_e \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{A}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_e \mu_e^2 r) + \rho_e \mu_e^2 \frac{\partial A}{\partial r} + A \frac{\partial}{\partial z} (\rho_e \mu_e v_e) + \rho_e \mu_e v_e \frac{\partial A}{\partial z} - \\
 & - A \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \mu_{rel}) - \tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{A}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2} \right) - \tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2} \frac{\partial A}{\partial r} - A \frac{\partial}{\partial z} \left(\tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2} \right) \\
 & - \tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2} \frac{\partial A}{\partial z} = R_{S,r}
 \end{aligned}$$

Die mit ~~~~ gekennzeichneten Terme fallen aufgrund der Annahme heraus, daß $A = A(z)$ ist. Die unterstrichenen Terme werden vernachlässigt, da sie bei der hier verwendeten Geometriemodellierung (nur jeweils eine radiale Masche in Brennstab und Kühlkanal) nur stark fehlerbehaftet zu diskretisieren sind. Das gleiche gilt im folgenden auch für die leichte Phase bzw. sinngemäß für die axiale Richtung.

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_e \mu_e) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_e \mu_e v_e) - \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \mu_{rel}) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2} \right) = \\
 & = -(1 - \theta_{g_{gr}}) \left(\frac{\partial p}{\partial r} - f_{vis,r} \right) + FK(\mu_v - \mu_e) - \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| + \dot{\Gamma}_n) \mu_e + \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| - \dot{\Gamma}_n) \mu_v
 \end{aligned}$$

(5.1.23)

In (5.1.23) fehlt der Ausfrierterm, da aufgrund des Modelles Ausfrieren nur in axialer Richtung von Bedeutung ist (vgl. Abbn. 3.1 und 3.2).

Impulsgleichung der schweren Phase, z-Richtung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_e v_e) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_e v_e \mu_e r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_e v_e^2) + \frac{\rho_e v_e^2}{A} \frac{\partial A}{\partial z} - \\ & - \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} v_{rel}) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\tilde{\rho} v_{rel} r \frac{\mu_v + \mu_e}{2}) - \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} v_{rel} \frac{v_v + v_e}{2}) - \frac{\tilde{\rho} v_{rel}}{A} \cdot \frac{v_v + v_e}{2} \cdot \frac{\partial A}{\partial z} = \\ & = -(1 - \theta_{gas}) \left(\frac{\partial p}{\partial z} - f_{vis,z} \right) + FK (v_v - v_e) - \rho_e g - \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| + \dot{\Gamma}_n) v_e + \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| - \dot{\Gamma}_n) v_v - \\ & - \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{wf}| - \dot{\Gamma}_{wf} + |\dot{\Gamma}_{ws}| - \dot{\Gamma}_{ws}) \frac{A_{wv}}{A \Delta z} v_e - \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_{cf}| - \dot{\Gamma}_{cf} + |\dot{\Gamma}_{cs}| - \dot{\Gamma}_{cs}) \frac{A_{cv}}{A \Delta z} v_e \end{aligned} \quad (5.1.24)$$

Impulsgleichung für die leichte Phase (Spaltgas, Natrium-Dampf)

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\rho_v \mu_v A) + \nabla (\rho_v \mu_v A \otimes \underline{\mu}_v)}_{\text{Beschleunigung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \mu_{rel} A) + \nabla (\tilde{\rho} \mu_{rel} A \otimes \frac{\mu_v + \mu_e}{2})}_{\text{virtuelle Masse}} = \\ & = - \underbrace{\theta_{gas} A \nabla p}_{\text{Druckgradient}} + \underbrace{f_{vis} A \theta_{gas}}_{\text{Wandreibung}} + \underbrace{\rho_v g A}_{\text{Gravitation}} - \underbrace{FK (\mu_v - \mu_e) A}_{\text{Zwischenphasenreibungkraft}} + \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| + \dot{\Gamma}_n) \mu_e A}_{\text{Natrium-Verdampfung}} - \underbrace{\frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| - \dot{\Gamma}_n) \mu_v A}_{\text{Kondensation}} \end{aligned}$$

Die Auflösung in skalare Gleichungen erfolgt völlig analog zur schweren Phase.

Impulsgleichung der leichten Phase, r-Richtung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_v \mu_v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_v \mu_v v_v) + \frac{\partial}{\partial r} (\tilde{\rho} \mu_{rel}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} \mu_{rel} \frac{v_v + v_e}{2}) = \\ & = -\theta_{gas} \left(\frac{\partial p}{\partial r} - f_{vis,r} \right) - FK (\mu_v - \mu_e) + \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| + \dot{\Gamma}_n) \mu_e - \frac{1}{2} (|\dot{\Gamma}_n| - \dot{\Gamma}_n) \mu_v \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

Impulsgleichung der leichten Phase, z-Richtung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_v v_v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_v v_v r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_v v_v^2) + \frac{\rho_v v_v^2}{A} \frac{\partial A}{\partial z} + \\ & + \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} v_{rel}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\tilde{\rho} v_{rel} \frac{u_v + u_v}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\tilde{\rho} v_{rel} \frac{v_v + v_v}{2} \right) + \frac{\tilde{\rho} v_{rel}}{A} \frac{u_v + u_v}{2} \frac{\partial A}{\partial z} = \\ & = -\theta_{gas} \left(\frac{\partial p}{\partial z} - f_{vis,z} \right) - FK(v_v - v_v) - \rho_v g + \frac{1}{\lambda} (\dot{\Gamma}_n^+ + \dot{\Gamma}_n^-) v_v - \frac{1}{\lambda} (|\dot{\Gamma}_n^+| - \dot{\Gamma}_n^-) v_v \end{aligned} \quad (5.1.26)$$

Für die Gleichungen (5.1.23) bis (5.1.26) müssen noch folgende beiden Fälle unterschieden werden:

- a) Die schwere Phase bildet die kontinuierliche Phase, Gas ist in Form von kugelförmigen Blasen verteilt. $0 < \theta_{gas} \leq 0.5$

Damit ist die virtuelle Dichte

$$\tilde{\rho} = c_v \rho_c^p \theta_{gas} \quad ,$$

$$c_v = 0.5 \quad , \quad \rho_c^p = \frac{\rho_{nl} + \rho_{fl}}{1 - \theta_{gas}}$$

- b) Gas bildet die kontinuierliche Phase, Flüssigkeit ist in Form kugelförmiger Tropfen enthalten. $0.5 < \theta_{gas} < 1$

Damit ist die virtuelle Dichte

$$\tilde{\rho} = c_v \rho_v^p (1 - \theta_{gas}) \quad ,$$

$$c_v = 0.5 \quad , \quad \rho_v^p = \frac{\rho_{nv} + \rho_{fl}}{\theta_{gas}}$$

In beiden Fällen ist $\underline{u}_{rel} = \underline{u}_v - \underline{u}_l$

Stabilitätskriterium aus der Impulsgleichung

Die radiale Impulsgleichung für die leichte Phase erweist sich aufgrund der besonderen Verhältnisse (L/D-Verhältnis der Maschen, hohe Druckunterschiede innen/außen) als die für die Stabilität kritischste

Gleichung. Es wird daher im folgenden aus dieser Gleichung eine COURANT-Zahl abgeleitet, die zur Zeitschrittsteuerung benutzt wird.

Die radiale Impulsgleichung für die leichte Phase Gl. (5.1.26) wird auf ihre kritischen Bestandteile reduziert:

$$\frac{\partial \mu_v}{\partial t} = \frac{1}{\hat{\rho}_v} \left[-\hat{\theta}_{gas} \frac{\partial p}{\partial r} - FK(\mu_v - \mu_e) \right] \quad \begin{matrix} + \text{Wandreibung!} \\ \hat{\quad} : \text{räuml. Mittelwert} \end{matrix}$$

$$\frac{\partial \mu_v}{\partial t} = \frac{1}{\hat{\rho}_v} \left[-\hat{\theta}_{gas} \frac{p_{kanal} - p_{brennstab}}{\Delta r} - FK(\mu_v - \mu_e) \right]$$

$$\frac{\partial \mu_v}{\partial t} = -\frac{1}{\hat{\rho}_v} \left[\hat{\theta}_{gas} \frac{p_{kanal,0} + \frac{\partial p_{kanal}}{\partial t} \Delta t - p_{brennstab,0} - \frac{\partial p_{brennstab}}{\partial t} \Delta t}{\Delta r} + FK(\mu_v - \mu_e) \right]$$

Annahme: Für die Innen- bzw. Außenmasche an der Defektstelle wird der Druck im wesentlichen durch das Spaltgas bestimmt. Über den Zeitschritt ändern sich θ_{gas} und T_{fg} relativ wenig. Mit der idealen Gasgleichung gilt dann:

$$p = \frac{\rho_{fg}}{\theta_{gas}} R T_{fg}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx \frac{1}{\theta_{gas}} \cdot \frac{\partial \rho_{fg}}{\partial t} \cdot R \cdot T_{fg}$$

Mit der Massenerhaltung für Spaltgas:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx -\frac{1}{\theta_{gas}} \cdot R \cdot T_{fg} \cdot \frac{\partial (\rho_{fg} \mu_v)}{\partial r}$$

wegen $\frac{\partial \mu_v}{\partial r} = 0$ mit nur einer radialen Impulsmasche:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx -\frac{1}{\theta_{gas}} \cdot R \cdot T_{fg} \cdot \mu_v \frac{\partial \rho_{fg}}{\partial r}$$

Damit wird aus obiger Gleichung nach Entfernung der Konstanten:

$$\frac{\partial \mu_v}{\partial t} \approx \mu_v \frac{1}{\hat{\rho}_v} \left[\hat{\theta}_{gas} \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\frac{T_{brennstab}}{\theta_{gas, brennstab}} - \frac{T_{kanal}}{\theta_{gas, kanal}} \right) R \frac{\partial \rho_v}{\partial r} + FK \right]$$

Daraus folgt als COURANT-Bedingung:

$$COUR = \left| \frac{\Delta t}{\hat{\rho}_v} \left[\hat{\theta}_{gas} \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(\frac{T_{Brennstab}}{\theta_{gas, Br.}} - \frac{T_{Kanal}}{\theta_{gas, K.}} \right) \cdot R \frac{\partial \rho_v}{\partial r} + FK \right] \right| < 1 \quad (5.1.27)$$

5.2 Zustandsgleichungen

Das Ziel ist es, aus bekannten inneren Energien und Dichten zunächst mittels kalorischer Zustandsgleichungen die Temperaturen zu ermitteln und dann mit thermischen Zustandsgleichungen und Dampfdruckkurven den Gesamtdruck im System.

Aufgrund der Vielzahl der beteiligten Komponenten und Phasen und ihrer unterschiedlichen Kombinationsmöglichkeiten gibt es keine universelle Zustandsgleichung, die stets für einen bestimmten Ort angewendet werden kann. Es muß vielmehr in Abhängigkeit vom jeweiligen lokalen Zustand (Abfrage nach Dichten oder Volumenanteilen) entschieden werden, welche Gleichungen benutzt werden. Abb. 5.2 gibt eine Übersicht über die Entscheidungskriterien und das jeweilige Vorgehen, Tabelle 5.1 über die verwendeten Gleichungen.

Abb. 5.2 zeigt die Aufspaltung in drei Haupt-Zweige: Einen für Spaltgas und Thermit (hauptsächlich im Brennstab), einen für Natrium (anfänglich im Kühlkanal) und einen für das Gemisch aller Komponenten. Allen Zweigen ist gemeinsam, daß zuerst die Temperaturen mit den entsprechenden kalorischen Zustandsgleichungen und dann mit den thermischen Zustandsgleichungen und Dampfdruckkurven der Druck berechnet wird. Das ist jedoch nicht immer auf direktem Weg möglich. Ist kompressibles, flüssiges Natrium beteiligt, so bewirkt ein errechneter Druck eine Volumenänderung im flüssigen Natrium, was wiederum den Druck beeinflusst usw. Wie weiter unten gezeigt wird, kann dieses Problem ohne Iteration gelöst werden. Das in Abb. 5.2 auftretende Abfragekriterium " $\rho_n, \rho_{th} < 1 \text{ kg/m}^3$ " ist willkürlich gewählt, der Grenzwert θ_{th}^* ist gegeben durch die Anwesenheit mindestens eines Thermit-Partikels vom Radius r_{th} .

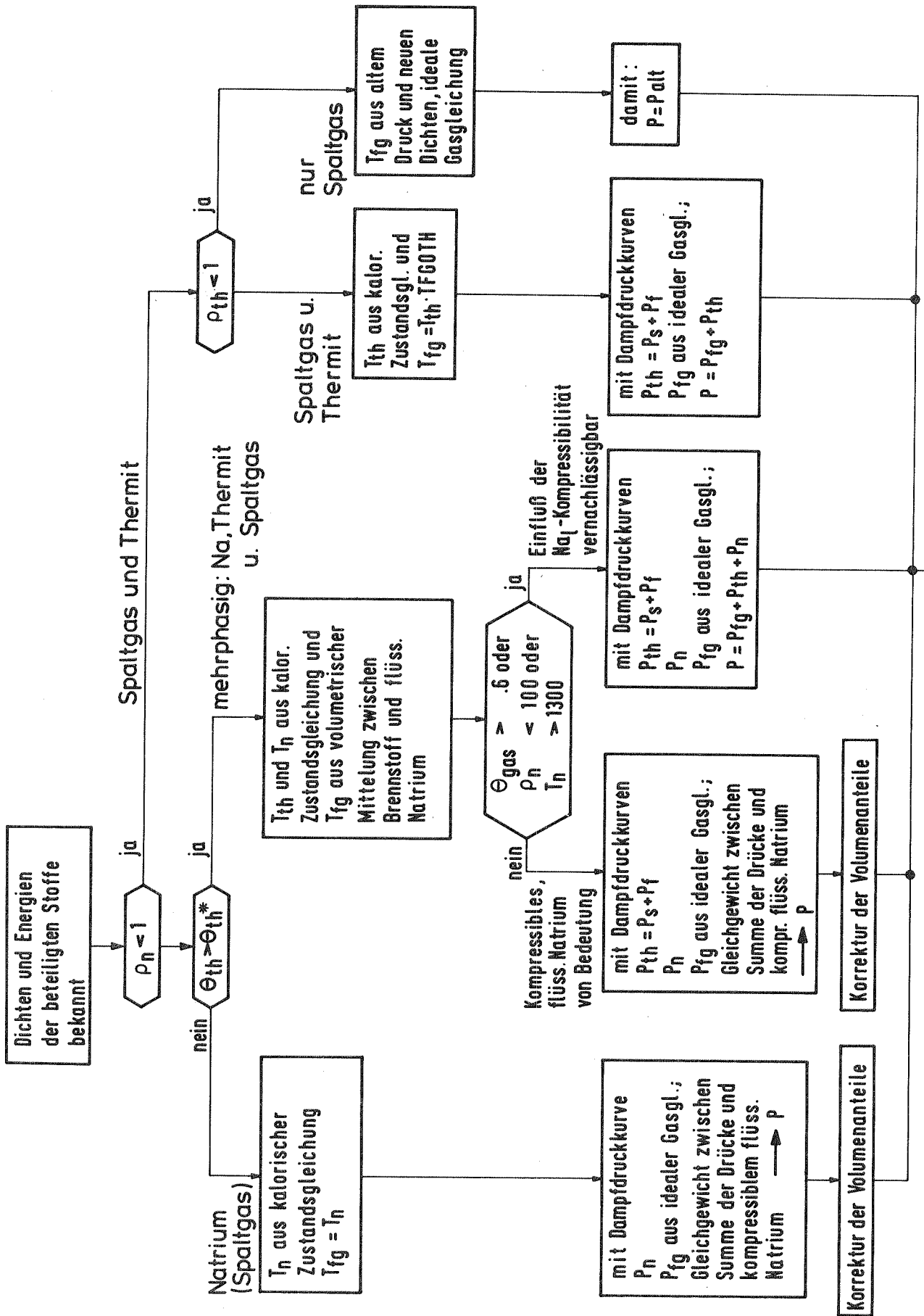


Abb. 5.2: "Zustandsgleichung" von CALIPSO

Tabelle 5.1: Zustandsgleichungen, Übersicht

	thermische Zustandsgl.	kalorische Zustandsgl.	Dampfdruckkurve
Natrium, unterkühlt	$\rho_{nl}^P = \rho_{nl}^P(T_n, p)$ (kompressibel!) Gl. (5.2.2)	_____	$p_n = p_{sat}(T_n)$ Gl. (5.2.12)
flüss. Natrium,	$\rho_{nl}^P = \rho_{nl}^P(T_n)$ inkompr. Gl. (5.2.3)	$e_{nl} = e_{nl, sat}(T_n)$ Gl. (5.2.9)	$p_n = p_{sat}(T_n)$ u. Gl. (5.2.12)
zweiphasig dampf.	$\rho_{nv}^P = \rho_{nv}^P(T_n, p)$ Gl. (5.2.4)	$e_{nv} = e_{nv, sat}(T_n)$ Gl. (5.2.10)	$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{sat}$ Gl. (5.2.13)
Spaltgas	$p_{fg} = p_{fg}(\rho_{fg}^P, T_{fg})^{id. Gas}$ Gl. (5.2.5)	s. Annahmen	_____
Thermit $\left\{ \begin{array}{l} \text{Stahl} \\ \text{Oxid} \end{array} \right.$	$\rho_s^P = \rho_s^P(T_{th})$ inkompr. Gl. (5.2.7) $\rho_f^P = \rho_f^P(T_{th})$ inkompr. Gl. (5.2.8)	$e_{th} = e_{th}(T_{th})$ Gl. (5.2.11)	$p_s = p_{sat}(T_{th})$ Gl. (5.2.14) $p_f = p_{sat}(T_{th})$ Gl. (5.2.15)

Annahmen:

- Das Spaltgas kann als ideales Gas behandelt werden, charakterisiert durch seine Gaskonstante R_{fg} (siehe auch Kapitel 4).
- Der Natrium-Dampf hat immer Sättigungsdichte (thermodynamisches Gleichgewicht).
- Alle Stoffe haben konstante spezifische Wärmen.
- Die Kompressibilität des flüssigen Natriums COMP ist temperaturunabhängig.
- Oxid- und Stahl-Anteil des Thermits haben gleiche Temperatur.
- Die Eigenschaften erstarrter und flüssiger Partikel von Oxid und Stahl, insbesondere die spezifische Wärme sei gleich.
- Für Gase gilt das Dalton'sche Gesetz. Sie nehmen gleiche Volumina ein und ihre Partialdrücke addieren sich.

Wie bereits erwähnt, wird zur Druckbestimmung in den beiden linken Zweigen der Abb. 5.2 (kompressibles flüssiges Natrium beteiligt) ein besonderes Verfahren notwendig. Das Verfahren bedingt jedoch in jedem Falle einen gewissen Anteil an Gas, der jedoch außerordentlich klein sein kann. Daher wird in Maschen, die physikalisch ausschließlich mit flüssigem Natrium gefüllt sind, ein künstlicher Anteil Spaltgas (z.B. Volumenanteil 10^{-5}) eingefüllt und dort festgehalten, bis durch Konvektion wirkliches Spaltgas in die Masche kommt ("artificial bubbling concept", ABC-Technik, siehe Abschnitt 7.1).

In jedem Fall wird nun ein Gleichgewicht gebildet zwischen dem Gaspolster und dem kompressiblen Natrium.

$$\text{Gl. (5.2.5): } p = \frac{s_{fg}}{\theta_{gas}} R_{fg} T_{fg} + p_{n,nat} + p_{th} \quad (\text{A})$$

* Dalton

$$\text{Gl. (5.2.2): } s_{ne}^p = s_{ink} [1 + \text{COMP}(p-p_0)] \quad (\text{B})$$

$$\text{Gl. (5.2): } \theta_{ne} = s_{ne} / s_{ne}^p \quad (\text{C})$$

$$\text{Abb. 3.5: } \theta_{gas} = 1 - \theta_{th} - \theta_{ne} \quad (\text{D})$$

Für die vier Unbekannten θ_{gas} , ρ_{n1}^p , θ_{n1} und p stehen also vier Gleichungen zur Verfügung. Es ergibt sich eine quadratische Gleichung für den Gesamtdruck p :

$$p^2 + p \left(\underbrace{\frac{(1-\text{COMP} \cdot p_0)}{\text{COMP}} - p_{n,nat} - p_{th} - \frac{s_{fg} R_{fg} T_{fg}}{1 - \theta_{th}} - \frac{s_{ne}^p}{(1 - \theta_{th}) s_{ink} \cdot \text{COMP}}}_{\text{A}} \right) + \underbrace{\frac{(p_{n,nat} + p_{th}) s_{ne}^p}{(1 - \theta_{th}) s_{ink} \text{COMP}} - \frac{s_{fg} (1 - \text{COMP} \cdot p_0) R_{fg} T_{fg}}{(1 - \theta_{th}) \cdot \text{COMP}} - \frac{(p_{n,nat} + p_{th}) (1 - \text{COMP} \cdot p_0)}{\text{COMP}}}_{\text{B}} = 0 \quad (5.2.1)$$

Die Gleichung (5.2.1) hat als einzige physikalisch sinnvolle Lösung:

$$p = -\frac{A}{2} + \sqrt{\frac{A^2}{4} - B}$$

Da sich im allgemeinen durch den neu berechneten Druck der Volumenanteil des flüssigen Natriums geändert hat, stimmen die in der Massenerhaltung berechneten Volumenanteile nicht mehr. Sie werden mit den Gleichungen (A) und (D) aktualisiert - θ_{th} ändert sich aufgrund der Inkompressibilitätsannahme des Thermits nicht. Wie aus Abb. 5.2 zu entnehmen ist, wird die Aktualisierung für kleine Volumengehalte von flüssigem Natrium nicht durchgeführt.

Die verwendeten Gleichungen lauten im einzelnen (alle Dimensionen in den in Abschnitt 2. festgelegten Einheiten):

$$\rho_{ne}^p(p, T_n) = \rho_{ink}(T_n) [1 + COMP(p - p_0)] \quad (5.2.2)$$

Dabei ist p_0 ein konstanter Bezugsdruck, $\rho_{ink}(T_n)$ die in Gl. (5.2.3.) definierte, inkompressible Natriumdichte und COMP die Kompressibilität [15, S. 289]:

$$COMP = -\rho_0 \left[\frac{\partial(-\frac{1}{\rho})}{\partial p} \right]_T \approx \frac{1}{\rho_{ink} \cdot c^2} \quad (\text{hier konstant})$$

1 5,88 Karte 16, 1,800.

Aus [16]:

$$\rho_{ink}(T_n) = -0.24121 \cdot T_n + 1018.58031 \quad (5.2.3)$$

Aus [7] (abgeleitet aus Clausius-Clapeyron-Gleichung):

$$\rho_{nv}^p = \frac{1}{4.99 \cdot 10^6 \left(1 - \frac{T_n}{2733}\right)^{0.42} \cdot \frac{1}{T_n} \left(\frac{dp}{dT}\right)_{sat} + \frac{1}{\rho_{ink}}} \quad (5.2.4)$$

Die ideale Gasgleichung liefert

$$p_A = \frac{\rho_A}{\theta_{gas}} \cdot R_A \cdot T_A \quad (5.2.5)$$

$$s_{th}^p = \frac{1}{\frac{1}{s_f^p} + x_s \left(\frac{1}{s_a^p} - \frac{1}{s_f^p} \right)} \quad (5.2.6)$$

x_s = Massenanteil Stahl am Thermit

Aus [17, 18]:

$$s_a^p = -0.110 \cdot T + 7560 \quad (5.2.7)$$

$$s_f^p = -6.684 \cdot 10^{-2} \cdot T + 3854 \quad (5.2.8)$$

Für die inneren Energien von Natrium gilt:

$$e_{ne} = c_{pne} \cdot T_n \quad (5.2.9)$$

$$e_{nv} = c_{pnv} \cdot T_n \quad (5.2.10)$$

Für die innere Energie des Thermit-Gemisches muß nach Abb. 5.3 in drei Gebiete unterteilt werden:

1. Stahl und Oxid fest,
2. Stahl flüssig, Oxid fest und
3. Stahl flüssig, Oxid flüssig.

Bei Abb. 5.3 wird eine Breite des jeweiligen Schmelzintervalls von 1 K angenommen. Ferner gilt:

$$x_s = \frac{\text{Masse Stahl}}{\text{Masse Stahl} + \text{Masse Oxid}}$$

$$e_{th} = e_f + x_s (e_a - e_f)$$

$$c_{pth} = c_{pf} + x_s (c_{pa} - c_{pf})$$

Abb. 5.3 ist also als Gl. (5.2.11) zu verstehen. (5.2.11)

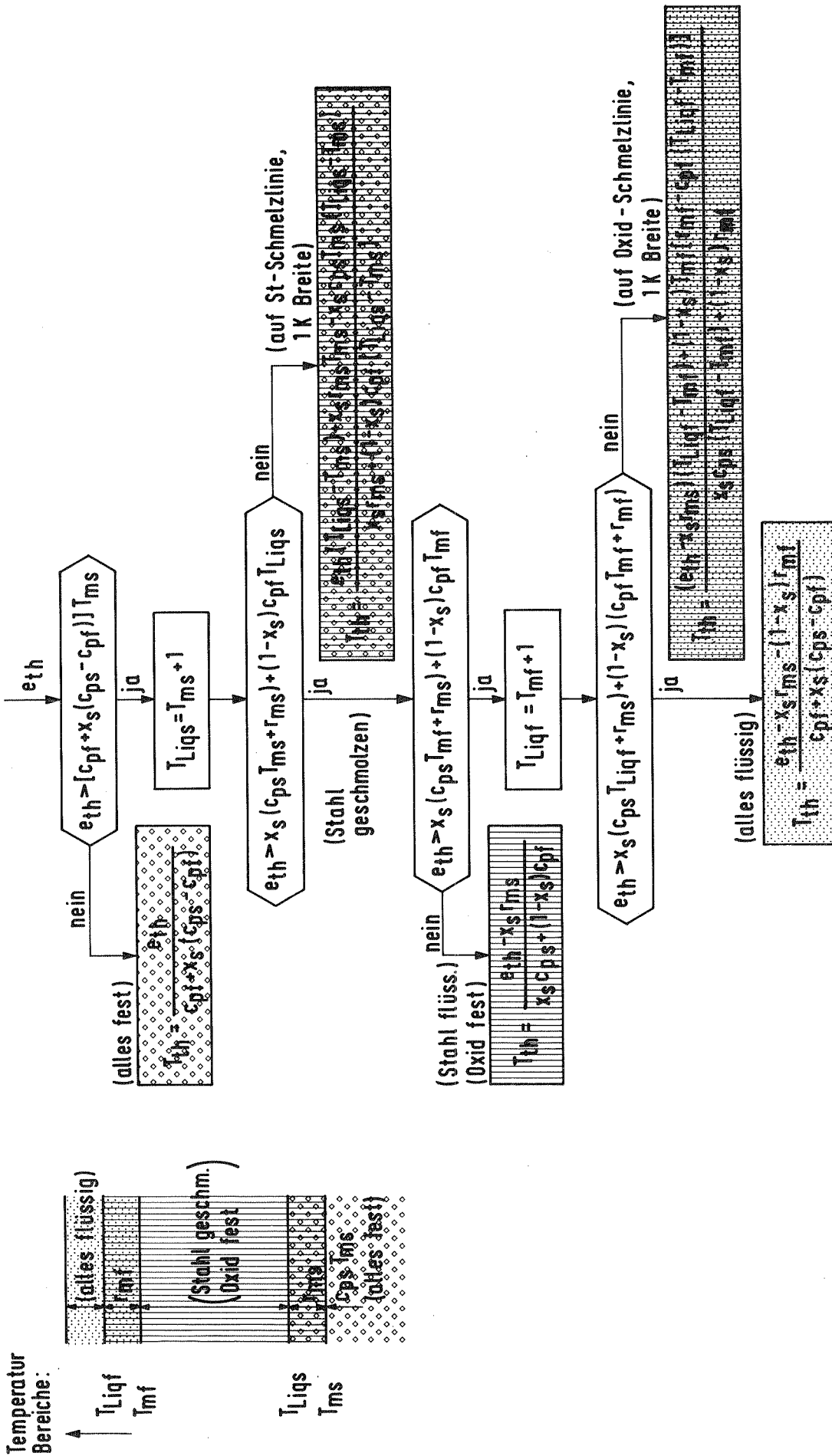


Abb. 5.3: Kalorische Zustandsgleichung des Thermit- bzw. Brennstoff-Stahl-Gemisches

Die Dampfdruckkurve von Natrium und deren Temperaturableitung wird leicht modifiziert von [7] übernommen:

$$p_n = \exp \left[\left(A_i - \frac{B_i}{1.8 T_n} \right) \ln 10 \right] \cdot (1.8 T_n)^{C_i} \cdot 1.013 \cdot 10^5 \quad (5.2.12)$$

A_i , B_i , C_i sind Konstante für 3 Temperaturintervalle:

	A_i	B_i	C_i
$300 \text{ K} \leq T_n \leq 1144 \text{ K}$	6.4818	10 020.6	-0.5
$1144 \text{ K} < T_n < 1644 \text{ K}$	6.8377	9 980.94	-0.61344
$1644 \leq T_n$	1.36041	8 178.27	0.789

$$\left(\frac{\partial p_n}{\partial T} \right)_{\text{nat}} = \exp \left[\left(A_i - \frac{B_i}{1.8 T_n} \right) \ln 10 \right] \left[C_i (1.8 T_n)^{C_i-1} + (1.8 T_n)^{C_i-2} \cdot B_i \ln 10 \right] \cdot 1.013 \cdot 10^5 \cdot 1.8 \quad (5.2.13)$$

Ebenfalls von [7] übernommen sind die Dampfdruckkurven von Stahl und Oxid:

$$p_s = \exp \left[\left(\frac{A_s}{T_{\text{th}}} + B_s \right) \ln 10 \right] / C \quad (5.2.14)$$

$$A_s = -18200.438, \quad B_s = 8.904, \quad C = 7.50062 \cdot 10^{-3}$$

$$p_f = \exp \left[\left(\frac{A_f}{T_{\text{th}}} + B_f \right) \ln 10 \right] / C \quad (5.2.15)$$

$$A_f = -27359.17, \quad B_f = 11.299831$$

5.3 Konstitutive Gleichungen

Die konstitutiven Gleichungen, die zur Schließung des Gleichungssystems notwendig sind, enthalten die wesentlichen Modellvorstellungen des Programms sowie die empirischen Parameter, die experimentell festzulegen sind. Sie berechnen die Kopplungsterme der Erhaltungsgleichungen.

Die vorliegende Dokumentation beschreibt die CALIPSO-Version mit zwei Geschwindigkeitsfeldern und einer gleichmäßig verteilten Blasen- bzw. Tröpfchen-/Partikel-Strömung. Eine Version mit drei Geschwindigkeitsfeldern und verschiedenen anderen Strömungsformen ist im Aufbau. Ebenso beschränkt sich diese Fassung auf konstante Wärmeübergangskoeffizienten und ein relativ einfaches Ausfriermodell.

5.3.1 Konstitutive Gleichungen zur Fluiddynamik

Bei der homogen verteilten Blasen- bzw. Tröpfchen-/Partikel-Strömung entscheidet der Volumenanteil von Gas θ_{gas} über die kontinuierliche Phase. Die jeweils andere Phase ist in Form von Kugeln mit vorgegebener Größe in der kontinuierlichen Phase verteilt. Die Kugeln beeinflussen sich nicht gegenseitig. Die Größe der Blasen und Tropfen ist in Abb. 3.4 aufgeführt, der oben beschriebene Zusammenhang sowie die Zuordnung zu den Geschwindigkeiten in Abb. 5.4.

Abb. 5.4 dient auch als Grundlage für die Berechnung der Zwischenphasenreibkraft. Ähnlich wie in [19, 20, 21] ergibt sich die Zwischenphasenreibkraft pro Volumen aus der Reibkraft einer bewegten Kugel in einem unendlichen Fluid und der Anzahl der Kugeln pro Volumen.

Es wird der Ansatz gemacht

$$\frac{\text{Reibkraft}}{\text{Vol.}} = \frac{1}{2} c_d S_m (N_n \cdot \pi r_n^2 + N_w \cdot \pi r_w^2) \cdot \underline{u} \cdot |\underline{u}|$$

$$|\underline{u}| = \text{Betrag der Relativgeschwindigkeit} = |\underline{u}_v - \underline{u}_1|$$

$$N_x = \text{Anzahl der x-Partikel pro Volumen}$$

ρ_m = mittlere Dichte aller beteiligten Stoffe
(eigentlich Dichte der kontinuierlichen Phase;
dies ergibt aber Sprünge, während ρ_m einen
glatten Übergang von der Blasenströmung zur
Tröpfchenströmung gewährleistet).

r_x = Radius der x-Blase / des x-Tropfens.

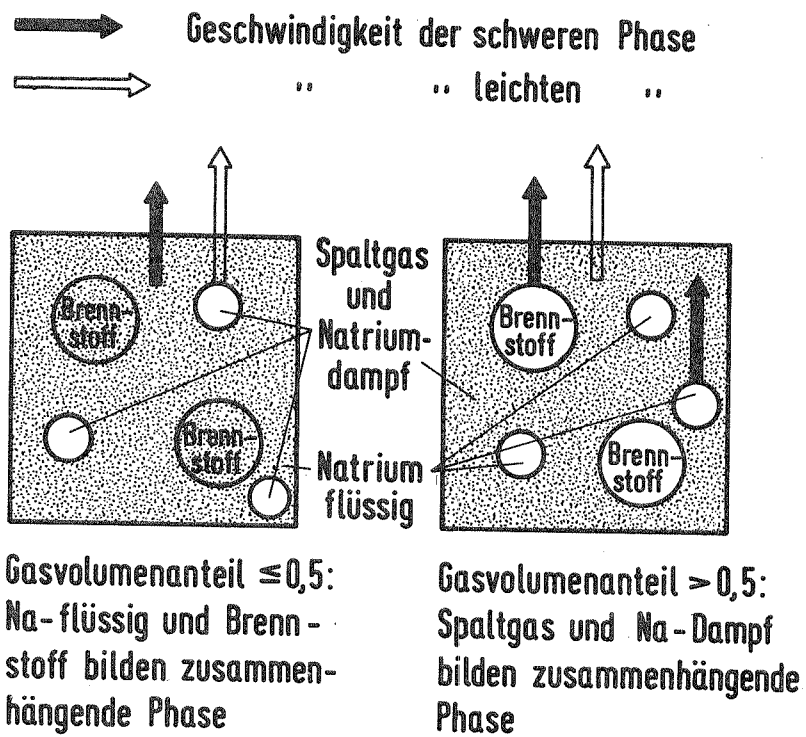


Abb. 5.4: Modell zur Berechnung der Zwischenphasenreibungskraft

In den Impulsgleichungen, Gl. (5.1.23 bis 5.1.26), wurde der Ansatz gemacht

$$\frac{\text{Reibkraft}}{\text{Vol.}} = FK \cdot (\underline{u}_v - \underline{u}_e)$$

$$\Rightarrow FK = \frac{1}{2} c_d S_m \Pi (N_n r_n^2 + N_{th} r_{th}^2) |\underline{u}_v - \underline{u}_e|$$

ferner gilt für

$$\theta_{gas} \leq 0.5 : \quad N_n = \frac{3\theta_{gas}}{4\pi r_{nv}^3}$$

$$N_{th} = 0$$

$$\theta_{gas} > 0.5 : \quad N_n = \frac{3\theta_{ne}}{4\pi r_{ne}^3}$$

$$N_{th} = \frac{3\theta_{th}}{4\pi r_{th}^3}$$

Damit ist

$$FK = \frac{3}{8} c_d S_m \left(\frac{\theta_n^*}{r_{nv}} + \frac{\theta_{th}^*}{r_{th}} \right) |\underline{u}_v - \underline{u}_e| \quad (5.3.1)$$

$$\theta_n^* = \begin{cases} \theta_{gas} & \text{für } \theta_{gas} \leq 0.5 \\ \theta_{ne} \cdot \frac{r_{nv}}{r_{ne}} & \text{für } \theta_{gas} > 0.5 \end{cases}$$

$$\theta_{th}^* = \begin{cases} 0 & \text{für } \theta_{gas} \leq 0.5 \\ \theta_{th} & \text{für } \theta_{gas} > 0.5 \end{cases}$$

$$|\underline{u}_v - \underline{u}_e| = |\underline{u}_{rel}| = \left| \begin{pmatrix} u_v \\ v_v \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_e \\ v_e \end{pmatrix} \right| = \left| \begin{pmatrix} u_v - u_e \\ v_v - v_e \end{pmatrix} \right| = \sqrt{(u_v - u_e)^2 + (v_v - v_e)^2}$$

c_d ist der Reibbeiwert für Kugeln, $c_d = 0.5$

Die Zwischenphasenreibungskraft/Volumen ergibt sich dann aus $FK \cdot u_{rel}$.

Für die Wandreibungskraft/Volumen wird der übliche Reibansatz gemacht [15, S. 320; 22_7]:

$$f_{vis,z} = - \left(\frac{\lambda(Re)}{D_H} + \frac{\xi_{ax}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{1}{2} s_m v_m |v_m| \Phi_{TP} \quad (z\text{-Richtung}) \quad (A)$$

beziehungsweise

$$f_{vis,r} = - \xi_r \frac{1}{2 \Delta r} s_m u_m |u_m| \Phi_{TP} \quad (r\text{-Richtung}) \quad (B)$$

Es wird in CALIPSO aufgrund der besonderen Geometrieverhältnisse in radialer Richtung ausschließlich ein Drosselverlust (ξ_r) angenommen, in axialer Richtung die übliche Rohrreibung plus einem zusätzlichen Verlustbeiwert (ξ_{ax}) von plötzlichen Querschnittsveränderungen etc. ξ_{ax} kann lokal variieren.

Darüber hinaus wird bei der Berechnung der Wandreibungskräfte/Volumen gleich an dieser Stelle die Aufteilung der Kraft auf die leichte und schwere Phase (gemäß Abschnitt 5.1) vorgenommen.

Die Größen v_m , s_m und u_m ergeben sich nach den Gleichungen (5.3, 5.5), der hydraulische Durchmesser D_H nach Gleichung (3.10). Die Reynoldszahl wird so gebildet:

$$Re = \frac{s_m \cdot D_H \cdot |v_m|}{\eta_m} \quad (C)$$

wobei die mittlere Zähigkeit η_m durch eine Volumenwichtung gebildet wird:

$$\eta_m = \theta_{th} \eta_{th} + \theta_{gas} (\eta_g + \eta_{nv}) + \theta_{nl} \cdot \eta_{nl} \quad (D)$$

Der Reibbeiwert wird nach Blasius [9, Gl. 6.77_7] gebildet:

$$\lambda(Re) = a \cdot Re^b \quad (E)$$

$$\lambda(Re) = 0.3164 \cdot Re^{-0.25}$$

Der Zweiphasenmultiplikator θ_{TP} wird jeweils so bestimmt, daß statt der mittleren Geschwindigkeit die jeweilige Phasengeschwindigkeit erscheint. Eine Öffnung $\epsilon > 0$ wird vernachlässigt.

Wandreibkraft/Vol. in r-Richtung, leichte Phase:

$$f_{rvl} = - \int_r \frac{S_m}{2 \Delta r} \mu_v |\mu_m| \theta_{gas} \quad (5.3.2)$$

Wandreibkraft/Vol. in r-Richtung, schwere Phase:

$$f_{vre} = - \int_r \frac{S_m}{2 \Delta r} \mu_e |\mu_m| (1 - \theta_{gas}) \quad (5.3.3)$$

Wandreibkraft/Vol. in z-Richtung, leichte Phase:

$$f_{zvl} = - \left(\frac{\lambda(Re)}{D_H} + \frac{f_{ax}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{1}{2} S_m v_v |v_m| \theta_{gas} \quad (5.3.4)$$

Wandreibkraft/Vol. in z-Richtung, schwere Phase:

$$f_{zve} = - \left(\frac{\lambda(Re)}{D_H} + \frac{f_{ax}}{\Delta z} \right) \cdot \frac{1}{2} S_m v_e |v_m| (1 - \theta_{gas}) \quad (5.3.5)$$

5.3.2 Konstitutive Gleichungen zur Thermodynamik

In der dokumentierten Version werden die Wärmeübergänge im Fluid und diejenigen zur Struktur mit konstanten Wärmeübergangskoeffizienten α berechnet. Zum Spaltgas findet kein Wärmeübergang statt. Eine aufwendigere Version mit strömungsform- und temperaturabhängigen α 's existiert bereits, wird aber erst bei der Beschreibung der CALIPSO-Version mit Modellierung verschiedener Strömungsformen beschrieben.

Unter Bezugnahme auf Abb. 5.1 werden im folgenden die auftretenden Wärmeströme beschrieben.

- a) Wärmeströme, die stets auftreten (die Reihenfolge der \dot{Q} -Indizes gibt die Richtung des Wärmestromes an):

Der Wärmestrom von Natrium zu den Brennstoffpartikeln wird mit dem Cho-Wright-Wärmeübergangskoeffizienten [23] berechnet:

$$\dot{Q}_{nth} = \underbrace{4\pi r_{th}^2}_{\text{Oberfläche eines Partikels}} \cdot \underbrace{V_{Stm}}_{\text{Brennstoff u. Stahlmasse}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_{th}^3 \cdot \rho_{Stm}}}}_{\substack{\text{Masse eines} \\ \text{Partikels}}} \cdot \underbrace{\Theta_{nl}}_{\text{Kontakt zu flüss. Na}} \cdot \underbrace{\frac{\lambda_{th}}{r_{th}}}_{\text{Cho-Wright "}\alpha_{nth}\text{"}} \cdot \underbrace{(\bar{T}_n - \bar{T}_{th})}_{\Delta T_{Na - \text{Brennstoff}}} \quad (5.3.6)$$

Anzahl der Brennstoffpartikel

Wärmestrom von der Kanalwand zur Umgebung:

$$\dot{Q}_{wau} = 2\pi r_a \Delta z \cdot \alpha_{su} (\bar{T}_{wa} - \bar{T}_u) \quad (5.3.7)$$

Wärmestrom von der Hülle zum Thermit im Brennstab (wird auch für die Brutzone berechnet):

$$\dot{Q}_{eth(\text{Brennstab})} = 2\pi r_i \Delta z \alpha_{sth} (\bar{T}_{ci} - \bar{T}_{th}) \Theta_{th} (1 - \epsilon) \quad (5.3.8)$$

Wärmestrom von der Hülle zu eventuell im Brennstab vorhandenem Natrium:

$$\dot{Q}_{cn(\text{Brennstab})} = 2\pi r_i \Delta z \alpha_{sn} (\bar{T}_{ci} - \bar{T}_n) \Theta_{nl} (1 - \epsilon) \quad (5.3.9)$$

- b) Zusätzlich gelten bei nicht vorhandener Oxidschicht im Kanal:

Wärmestrom von der Hülle zum Thermit im Kanal:

$$\dot{Q}_{eth(\text{Kanal})} = 2\pi r_{c1} \Delta z \alpha_{sth} (\bar{T}_{cn} - \bar{T}_{th}) \Theta_{th} (1 - \epsilon) \quad (5.3.10)$$

Wärmestrom von der Hülle zum Natrium im Kanal:

$$\dot{Q}_{cn(\text{Kanal})} = 2\pi r_{c1} \Delta z \alpha_{sn} (\bar{T}_{cn} - \bar{T}_n) (1 - \Theta_{th}) (1 - \epsilon) \quad (5.3.11)$$

Wärmestrom von der Kanalwand zum Thermit:

$$\dot{Q}_{wth} = 2\pi r_{ws} \Delta z \alpha_{sth} (T_{wn} - T_{th}) \Theta_{th} \quad (5.3.12)$$

Wärmestrom von der Kanalwand zum Natrium:

$$\dot{Q}_{wn} = 2\pi r_{ws} \Delta z \alpha_{sn} (T_{wn} - T_n) (1 - \Theta_{th}) \quad (5.3.13)$$

c) Anstelle von b) treten bei vorhandener Oxidschicht:

Wärmestrom von der Stahlhülle zur Oxidschicht:

$$\dot{Q}_{sof} = 2\pi r_{cs} \Delta z \alpha_{sof} (T_{cn} - T_{ca}) (1 - \epsilon) \quad (5.3.14)$$

Wärmestrom von der Wand-Oxidschicht zur Kanalwand:

$$\dot{Q}_{wfo} = 2\pi r_{ws} \Delta z \alpha_{sof} (T_{wi} - T_{wn}) \quad (5.3.15)$$

Wärmestrom von der Hüll-Oxidschicht zum Thermit:

$$\dot{Q}_{cftth} = 2\pi r_c \Delta z \alpha_{fth} (T_{ca} - T_{th}) \Theta_{th} (1 - \epsilon) \quad (5.3.16)$$

Wärmestrom von der Hüll-Oxidschicht zum Natrium:

$$\dot{Q}_{cnth} = 2\pi r_c \Delta z \alpha_{fn} (T_{ca} - T_n) (1 - \Theta_{th}) (1 - \epsilon) \quad (5.3.17)$$

Wärmestrom von der Wand-Oxidschicht zum Thermit:

$$\dot{Q}_{wftth} = 2\pi r_w \Delta z \alpha_{fth} (T_{wi} - T_{th}) \Theta_{th} \quad (5.3.18)$$

Wärmestrom von der Wand-Oxidschicht zum Natrium:

$$\dot{Q}_{wfn} = 2\pi r_w \Delta z \alpha_{fn} (T_{wi} - T_n) (1 - \Theta_{th}) \quad (5.3.19)$$

5.3.3 Konstitutive Gleichungen zu Geometrieänderungen

Geometrieänderungen können sich ergeben aufgrund von:

- a) Ausfrieren von Stahl und/oder Oxid (Ausfriermodell)
- b) Schmelzen von Stahl (Schmelzrate ergibt sich aus der Energieerhaltung der Wand, nur für Verteilung der Schmelzmassen ist eine konstitutive Gleichung nötig)
- c) Abbröckeln von einer Oxidschicht (verursacht durch Schmelzen von unterliegendem Stahl)
- d) Von außen vorgegebenes Versagensverhalten der Hülle $[\bar{\epsilon} = \epsilon(z,t)]$.

Zu a): Ein einfaches Ausfriermodell wurde zum Testen des Algorithmus erstellt, ein aufwendigeres ist in Arbeit.

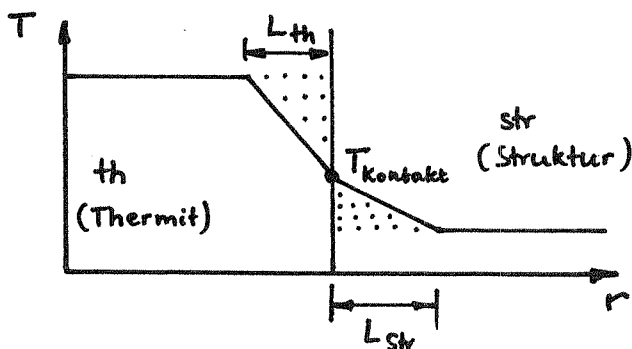
Das einfache Ausfriermodell arbeitet in zwei Stufen: zunächst wird geprüft, ob die folgenden Bedingungen für Ausfrieren (von Oxid und Stahl an Hülle und Wand, jeweils getrennt) erfüllt sind:

1. Es muß sein: T_{th} (Temp. im Fluid) $>$ T_m (Schmelzpunkt)
 (Sonst bereits erstarrte Partikel im Fluid)

2. Es muß sein: $T_{\text{Kontakt}} < T_m$

$$T_{\text{Kontakt}} = \frac{T_{th} + \beta T_{\text{Struktur}}}{1 + \beta} \quad (5.3.20)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{(\lambda \rho c_p)_{\text{Struktur}}}{(\lambda \rho c_p)_{th}}} \quad (5.3.21)$$



Die Gleichungen (5.3.20, 21) folgen aus der Annahme eines linearen Temperaturverlaufs (siehe Skizze) bis zur jeweiligen Wärmeeindringtiefe L sowie den Gleichungen

$$\int_{th} \rho c (T - T_{th}) dr = - \int_{sh} \rho c_p (T - T_{sh}) dr$$

und

$$\lambda_{th} \frac{T_{\text{kontakt}} - T_{th}}{L_{th}} = \lambda_{str} \frac{T_{sh} - T_{\text{kontakt}}}{L_{str}}$$

3. Es bestehe Wandkontakt zwischen einem Fluidpartikel von Radius r_{th} und der Wand über eine Weglänge $n \cdot r_{th}$ (n Eingabeparameter).

Daraus ergibt sich eine

$$\text{Verweilzeit } t^* = \frac{n \cdot r_{th}}{v_e}$$

Diese Zeit wird verglichen mit der Zeit t_{krit}^* , die nötig ist, um die Kugel über die Hälfte ihres Radius erstarren zu lassen.

Mit der Annahme einer ebenen Platte gilt nach [24] für kurze Zeiten t :

$$\frac{\dot{Q}}{A} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{(\lambda \rho c_p)_{th}}}{\sqrt{t}} \cdot (T_{th} - T_{\text{kontakt}})$$

Durch Vergleich mit der abzuführenden Wärme

$$Q = \frac{4}{3} \pi \left[r_{th}^3 - \left(\frac{r_{th}}{2} \right)^3 \right] \cdot \rho_{th} \cdot [c_{p,th} (T_{th} - T_m) + r_m]$$

ergibt sich für t_{krit}^* :

$$t_{\text{krit}}^* = \left\{ \frac{\frac{4}{3} \pi r_{th}^3 \rho_{th} [c_{p,th} (T_{th} - T_m) + r_m]}{4 \sqrt{\pi} r_{th}^2 \sqrt{(\lambda \rho c_p)_{th}} (T_{th} - T_{\text{kontakt}})} \right\}^2$$

Zum Ausfrieren muß die Abkühlzeit t_{krit}^* kleiner als die Verweilzeit t^* sein.

4. Es darf nicht bereits aus der Energieerhaltung eine Abbröckelrate für Oxid $\dot{r}_f > 0$ berechnet worden sein. In diesem Fall

ist Ausfrieren des Oxids nicht sinnvoll und wird unterdrückt. Für Stahl ist es hingegen durchaus möglich, daß z.B. an der Hülle innen Stahl schmilzt und außen ausfriert. Dann werden die Stahl-Ausfrier- und -Schmelzrate addiert.

Sind die Bedingungen 1. bis 4. erfüllt, wird eine Ausfrierrate $\dot{\Gamma} < 0$ berechnet:

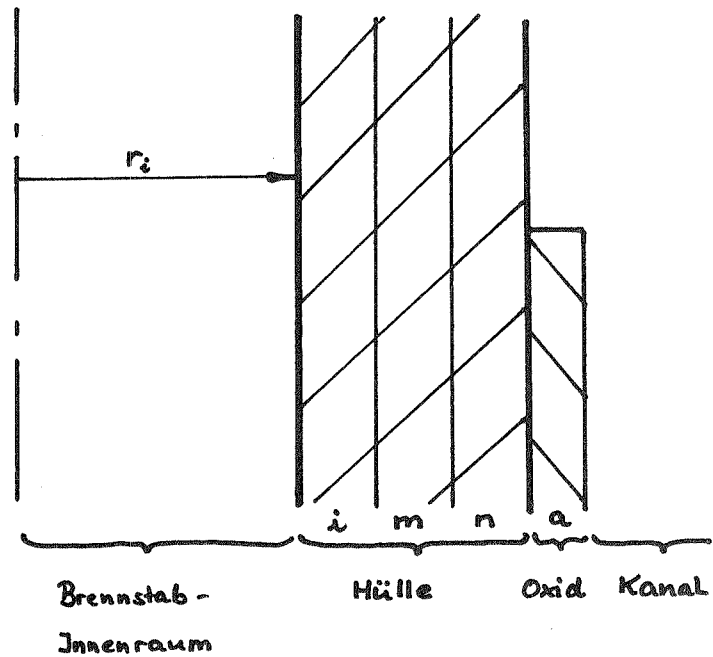
$$\dot{\Gamma}_{\text{alf}} = T_u \cdot S_{\text{alf}} \cdot v_e \cdot t^* / t_{\text{kit}}^* \quad (5.3.22)$$

Diese Ausfrierrate (ausgefrorene Masse pro Zeit und Fläche A_{cv} bzw. A_{wv}) ist proportional zu einem empirisch zu bestimmenden Turbulenzgrad (je größer T_u , umso wahrscheinlicher kommen Tropfen zur Wand), der Massenstromdichte und dem Verhältnis aus Verweilzeit an der Struktur und Abkühlzeit.

Abschließend wird überprüft, ob die ausgefrorene Masse nicht einen bestimmten, vorgegebenen Anteil der in dem Kontrollvolumen enthaltenen Masse übersteigt.

Zu b): Schmelzen

Aus der Energieerhaltung der Hülle (Gln. 5.1.15 bis 5.1.17) ergibt sich bei entsprechenden Bedingungen für eine oder mehrere der Wandschichten eine Schmelzrate $\dot{\Gamma}_{\text{a...}} > 0$. Im folgenden wird die Verteilung dieser Stahl-Schmelzmassen zum Brennstab und/oder zum Kanal hin erläutert.



- r_i bleibt konstant.
- Die Verteilung der Stahlschmelzmassen zum Brennstab oder Kühlkanal ist unabhängig vom Vorhandensein einer Oxidschicht.
- Geschmolzener Stahl kommt sofort zum Fluid.
- Geschmolzener Stahl aus Schicht i kommt immer in den Brennstab.
- Geschmolzener Stahl aus Schicht n kommt immer in den Kühlkanal.
- Geschmolzener Stahl aus Schicht m kommt in den
 - Brennstab, wenn $\dot{\Gamma}_{csi} > 0$ und $\dot{\Gamma}_{c sn} \leq 0$
 - Kühlkanal, wenn $\dot{\Gamma}_{c sn} > 0$ und $\dot{\Gamma}_{csi} = 0$
 - Brennstab/Kühlkanal je zur Hälfte, wenn $\dot{\Gamma}_{csi}$ und $\dot{\Gamma}_{c sn} > 0$

Zu c): Abbröckeln der Oxidschicht

Für eine etwa vorhandene Oxidschicht wird für den Fall, daß die Stahlhülle schmilzt, eine "Abbröckelrate" $\dot{\Gamma}_{cf} > 0$ berechnet, die proportional zur gesamten Stahl-Schmelzrate $\dot{\Gamma}_{cs}$ und zum Volumenverhältnis Oxidschicht/Stahlhülle ist:

$$\dot{\Gamma}_{cf} = \dot{\Gamma}_{cs} \frac{A_c - A_{cs}}{A_{cs}}$$

ergibt mit Gln. (3.1) und (3.2):

$$\dot{\Gamma}_{cf} = \dot{\Gamma}_{cs} \frac{r_c^2 - r_{cs}^2}{r_{cs}^2 - r_i^2} \quad (\text{für } \dot{\Gamma}_{cs} > 0) \quad (5.3.23)$$

Zu d): Vorgegebenes Versagensverhalten der Hülle

Um Versuche realistisch nachrechnen zu können, ist es oft zweckmäßig, das (statistisch auftretende) mechanische Versagen der Hülle vorzugeben in Form einer Funktion $\epsilon = \epsilon(\bar{\epsilon}, t)$. Der hierbei freiwerdende (feste) Hüllstahl und eventuell auch eine Oxidschicht werden dem Fluid im Kanal zugeschlagen.

6. PROGRAMM

6.1 Lösungsverfahren

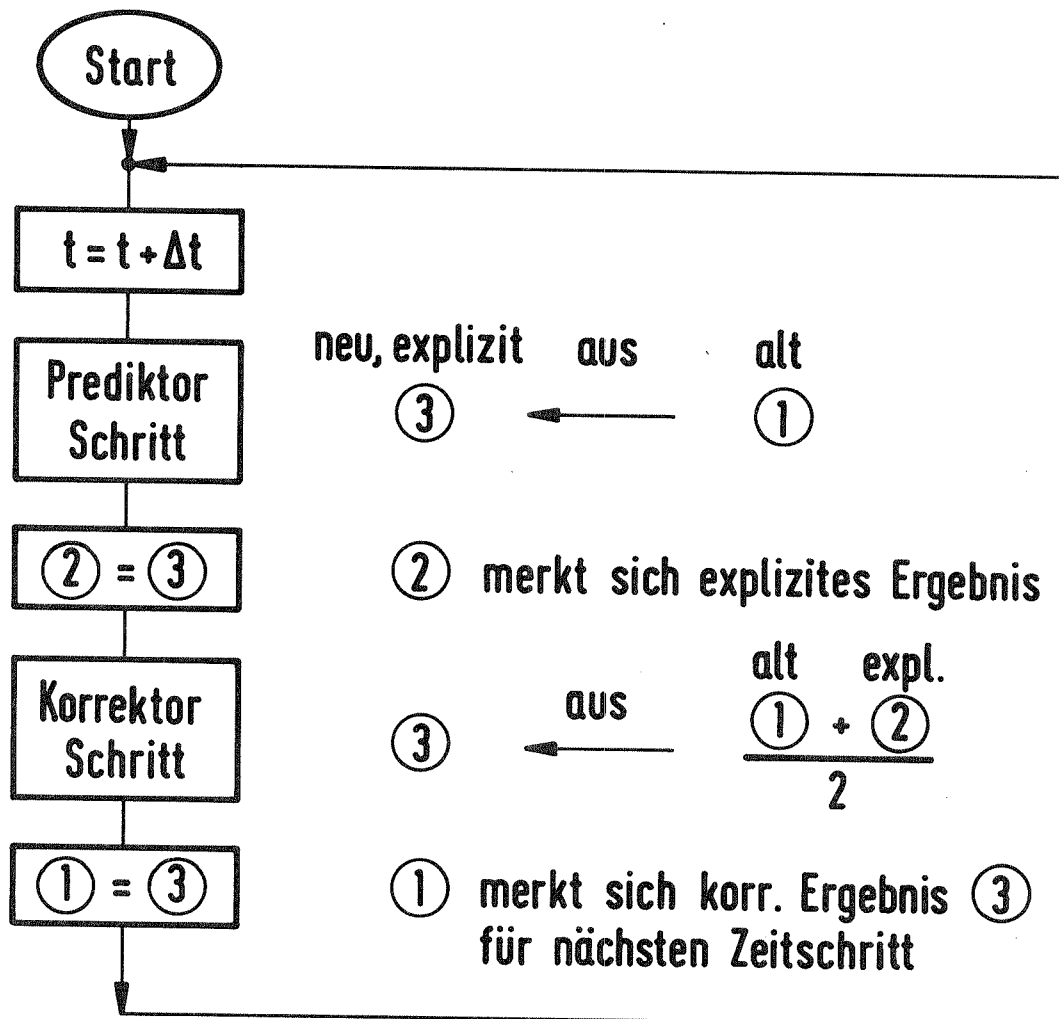


Abb. 6.1: Flußdiagramm des Prediktor-Korrektor-Verfahrens (Zeitintegration)

In CALIPSO wird ein sogenanntes PREDIKTOR-KORREKTOR-Verfahren gemäß Abb. 6.1 verwendet. Zu Beginn werden die zeitabhängigen Feldgrößen mit dem Index ① eingelesen bzw. initialisiert. Index ① bezeichnet einen Wert zum alten Zeitschritt. In der expliziten Rechnung, dem Prediktor-Schritt, werden nun mit dem Gleichungssystem aus den alten ①er-Werten neue, explizite ③er-Werte berechnet. Die expliziten ③er-Werte werden nun in den ②er-Werten gespeichert. Im folgenden semi-impliziten Korrektor-Schritt werden aus den gemittelten alten ①er- und den expliziten ②er-Werten die neuen, für diesen Zeitschritt endgültigen ③er-Werte mit demselben Gleichungssystem errechnet. Vor dem nächsten Zeitschritt müssen nur noch die neuen ③er-Werte wieder in Form von nun alten ①er-Werten gespeichert werden.

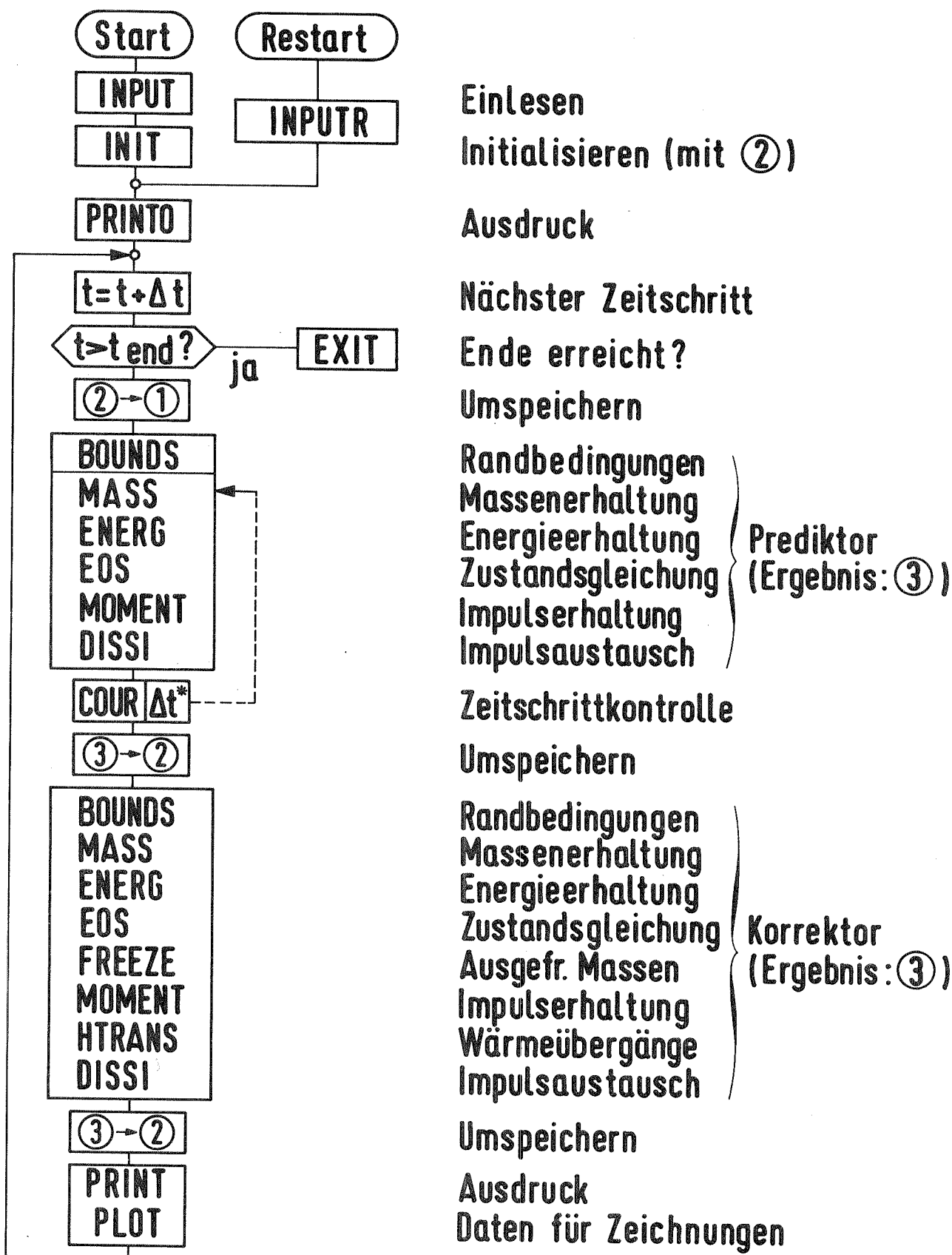
Nach dem Prediktor-Schritt wird der Zeitschritt Δt mit einer Courant-Bedingung überprüft, gegebenenfalls verdoppelt oder halbiert und der Prediktor-Schritt wiederholt.

Ursprünglich wurde dieses Grundkonzept auf sämtliche zeitabhängigen Variablen angewandt. Eine beachtliche Einsparung an Speicherplatz sowie Rechenzeit (charakteristisch: 30 %) konnte jedoch dadurch erreicht werden, daß Größen, die sich nur langsam ändern, rein explizit berechnet werden. So genügt es zum Beispiel, Wärmeströme, Radian, Querschnittsflächen etc. nur einmal pro Zeitschritt zu berechnen - ohne daß diese Vereinfachung sich spürbar im Gesamtergebnis bemerkbar macht.

6.2 Programmstruktur

CALIPSO ist in FORTRAN programmiert. Es wird doppelt genau gerechnet; Namen, die mit den Buchstaben I bis N beginnen, sind Integer-Zahlen zugeordnet.

In Abb. 6.2 ist der Ablauf des Hauptprogramms von CALIPSO ("MAIN") dargestellt. Anhand dieses Flußdiagramms werden CALIPSO's Aufbau, Ablauf und Inhalt der einzelnen Unterprogramme beschrieben. Ein großgeschriebener Name wie z.B. "INPUT" bedeutet den Aufruf des Unterprogramms INPUT.



Einlesen
Initialisieren (mit ②)

Ausdruck

Nächster Zeitschritt

Ende erreicht?

Umspeichern

Randbedingungen
Massenerhaltung
Energieerhaltung
Zustandsgleichung
Impulserhaltung
Impulsaustausch } Prediktor
(Ergebnis: ③)

Zeitschrittkontrolle

Umspeichern

Randbedingungen
Massenerhaltung
Energieerhaltung
Zustandsgleichung
Ausgefr. Massen
Impulserhaltung
Wärmeübergänge
Impulsaustausch } Korrektor
(Ergebnis: ③)

Umspeichern

Ausdruck
Daten für Zeichnungen

Abb. 6.2: Flußdiagramm von CALIPSO

Der Datenaustausch zwischen den Unterprogrammen und dem Hauptprogramm geschieht ausschließlich über die sechs jeweils vorangestellten COMMONs (global geltende Variable). Die Zuordnung der Variablen zu den COMMONs geschieht logisch (z.B. Geometrie Größen zu COMMON/GEOM/ etc.) und ist im einzelnen der Variablenliste, Abschnitt 2., zu entnehmen.

Das Programm beginnt mit dem Aufruf des Unterprogramms INPUT. Hier werden sämtliche Daten zur Programmsteuerung, zur Beschreibung der Geometrie und des physikalischen Anfangszustandes sowie die Materialdaten eingelesen und - wie gelesen - zur Kontrolle ausgedruckt.

Es folgt der Aufruf des Unterprogramms INIT zur Initialisierung der abhängigen Variablen. Nach den Geometrie Größen folgen Temperaturen, innere Energien und Wärmeströme. Es wird dafür gesorgt, daß stets ein Gasvolumengehalt von mindestens 10^{-5} gemäß Abschnitt 5.2 und 7.1 ("ABC-Technik") vorhanden ist. Die mit den Gleichungen (I) bis (K) aus Abschnitt 5.1, Energieerhaltung von Hülle und Wand, ermittelten Anfangstemperaturprofile von Hülle und Wand werden festgelegt. Dichten, Volumenanteile, Wechselwirkungsterme und Geschwindigkeiten werden initialisiert, wobei nur im Kühlkanal eine Anfangsgeschwindigkeit $\neq 0$ möglich ist. Alle Größen, die nach dem Prediktor-Korrektor-Verfahren berechnet werden, besitzen die Indices ①, ② und ③. (Ein * kennzeichnet diese Größen in der Variablenliste.) Hier wird jeweils die Größe mit dem Index ② initialisiert.

Für den Fall eines Restarts (einer Rechnung, die nicht zum Zeitpunkt 0 beginnt, sondern an eine vorangehende Rechnung anknüpft) übernimmt das Unterprogramm INPUTR das Einlesen der notwendigen Daten (größtenteils vom vorangegangenen Rechenlauf, nur einige Parameter zur Programmsteuerung können durch Neueingabe verändert werden) sowie die Initialisierung von nicht direkt übernommenen Größen.

In jedem Fall folgt der Ausdruck des Anfangszustandes mit dem Unterprogramm PRINTO.

Die Hauptschleife des Programms beginnt mit der Festlegung der neuen Zeit durch Addition des Zeitschrittes Δt zur alten Zeit. Falls die vorgegebene Endzeit erreicht ist, wird das Unterprogramm EXIT aufgerufen. Die wichtigen Daten werden abgespeichert, um einen Restart zu ermöglichen.

Es folgt die Umspeicherung der Variablen mit Index ② nach ①. Damit steht für den nun folgenden, expliziten Prediktorschritt in ① und ② der gleiche ("alte") Wert, so daß sich der "neue" ③er-Wert rein aus dem alten $\frac{① + ②}{2} = ①$ ergibt.

Das Unterprogramm BOUNDS zu Beginn des Prediktorschrittes setzt die Randbedingungen in den sogenannten fiktiven Randmaschen des Fluidbereiches (vgl. Abb. 6.5 und Abschnitt 6.3). Da der Fluidbereich auf allen vier Seiten auf diese Weise mit Randbedingungen versehen werden muß, ergibt sich bei der speziellen Geometrie ein Problem beim Übergang von der Brennstoffzone zu den Brutzonen im Brennstab: Einerseits ist die erste Brutzonenmasche Randmasche für den Brennstoff-Fluidbereich und muß also dessen Randbedingungen enthalten, andererseits ist sie gleichzeitig Problemmasche und enthält eigenständige, physikalische Werte. Das Problem wird gelöst, indem prinzipiell mit den physikalischen Problemwerten der ersten Brutzonenmasche gerechnet wird; nur an Programmstellen, wo der Fluidbereich Randbedingungswerte benötigt, werden die realen Problemwerte in eine zweite Ebene ausgelagert. Das Problem wird noch zusätzlich dadurch erschwert, daß die Brutzone im Gegensatz zum Fluidbereich nur einmal pro Zeitschritt (also rein explizit) berechnet wird.

Zu den Randbedingungen selbst:

An geschlossenen Rändern werden alle Gradienten (Druck, Dichten, innere Energien, Volumenanteile, Temperaturen) zu Null gesetzt, ebenso die Normalgeschwindigkeit. Beim Natrium-Kühlkanal muß unterschieden werden, ob unten verschlossen oder offen ist. Wenn er oben und unten offen ist, muß ferner unterschieden werden zwischen Ein- und Ausströmung. Prinzipiell werden die oben erwähnten Werte im Fall der Einströmung (der Druck immer) fest vorgegeben, im Fall der Ausströmung werden sie hinkopiert.

Es folgt der Aufruf von MASS, welcher die Massenerhaltungsgleichungen (5.1.1) bis (5.1.9) enthält. Zunächst werden die Massen der Fluidkomponenten erhalten. Im Zusammenhang mit der hier nötigen thermischen Zustandsgleichung (5.2.4) für Natrium-Dampf (Annahme: Sättigungsdichte) wird die Verdampfung auf die gesamte vorhandene Natriummasse beschränkt.

Die mittlere Dichte ρ_m und die vorläufigen Volumenanteile werden berechnet (eine spätere Korrektur in EOS durch neuen Druck und kompressibles Natrium ist meist nötig). Anschließend folgt die explizite Masenerhaltung der Strukturen wie Hülle und Wand. Die neue Geometrie wird festgelegt (Radien, Flächen etc.). Unterschreitet die Hüllwandstärke einen bestimmten Minimalwert, so wird die restliche Hülle dem Fluid zugeschlagen und $\xi = 1$ als Signal für eine neue Defektstelle /einen erweiterten Defekt gesetzt. Ferner wird bilanziert über die gesamte ausgefrorene Stahl-/Oxid-Masse, die Ober- und Untergrenzen der Brennstoff-Natrium-Wechselwirkungszone sowie der mit "schwerem" Material entleerten ("gevoideten") Zone werden bestimmt.

Das Unterprogramm ENERG beinhaltet die Energieerhaltungsgleichungen von Thermit (5.1.10), vom Natrium-Gemisch (5.1.11) sowie die der Hülle (5.1.12 und 5.1.17), der Wand (5.1.19 und 5.1.21) und der ausgefrorenen Oxidschichten (5.1.18 und 5.1.22).

Die im Zusammenhang mit BOUNDS erwähnte Umlagerung der angrenzenden Brutzonengrößen geschieht an dieser Stelle.

Darüber hinaus erfordert das verwendete Differenzenverfahren ein Hinauskopieren der inneren Energie von Thermit oder Natrium aus einer mit diesem Stoff beladenen Masche in eine benachbarte, ihn nicht enthaltende Masche.

Die inneren Energien von Thermit und Natrium werden nur ab einem bestimmten Masse-/Volumenwert berechnet.

Die Temperaturen der Brutzone, der Hülle und der Wand werden rein explizit, also nur im Korrektorschritt berechnet. Dasselbe gilt für die Schmelz- bzw. Abbröckelrate im Fall des Schmelzens von Stahl.

Aus den nun ermittelten Dichten und inneren Energien werden in EOS ("Equation of State") die entsprechenden Temperaturen und Drücke berechnet. Der Ablauf ist Abb. 5.2 zu entnehmen.

Das Unterprogramm MOMENT beinhaltet die Impulsgleichungen für die leichte und schwere Phase, in radialer und axialer Richtung (5.1.23 bis 5.1.26). Aufgrund des versetzten Maschengitters (siehe Abschnitt 6.3) ist eine Wichtung der skalaren Größen in radialer und (wegen

der variablen Maschenlänge Δz) axialer Richtung entsprechend dem jeweiligen Volumenanteil nötig. Beim Druckgradienten wird für die radiale Richtung eine physikalische Dämpfung gemäß Abschnitt 7.4 eingeführt. Diese Dämpfung berücksichtigt, daß der Druckgradient durch Konvektion während des Zeitschrittes Δt abgebaut wird und trägt somit zur Stabilität des Programms bei.

Aufgrund der besonderen Geometrieverhältnisse stellt die Impulsgleichung für die Dampfphase in radialer Richtung mit der Zwischenphasenreibungskraft FK für weite Bereiche die stabilitätsempfindlichste Gleichung dar. Daher wird aus ihr eine COURANT-Zahl gemäß Abschnitt 5.1, Impulsgleichungen, Gl. 5.1.27, gebildet, die zur Zeitschrittsteuerung benutzt wird.

Im allgemeinen lohnt sich der hohe Rechenaufwand für die virtuellen Massen (s. Abschnitt 5.1) nicht für die axiale Richtung [25]. Es kann daher wahlweise eine Version mit und eine ohne virtuelle Massenterme in axialer Richtung benutzt werden.

Am Ende von MOMENT wird die gesamte ausgespritzte Thermitmasse aufsummiert.

Im nun folgenden DISSI werden die Zwischenphasenreibungskraft FK , Gl. (5.3.1), und die Reibkräfte durch Wandreibung/Stoßverluste, Gln. (5.3.2. bis 5.3.5), berechnet.

Nun ist die explizite Rechnung des Prediktor-Schrittes beendet, der Zeitschritt Δt wird überprüft. Zunächst wird diejenige Masche mit der größten Zahl $COUR = \left(\left(\frac{u_v}{\Delta r} + \frac{v_v}{\Delta z} \right) \Delta t \right)$ gesucht und diese schließlich mit der in MOMENT gebildeten Zahl, Gl. (5.1.27), verglichen. COUR darf sich zwischen den Grenzen COURL und COURU bewegen. Liegt es darüber, wird Δt halbiert, liegt es darunter - und zwar bereits seit 10 Zeitschritten -, wird Δt verdoppelt. Für den Fall der Veränderung wird die neue Zeit mit dem neuen Δt gebildet und die explizite Rechnung vom Aufruf von MASS ab wiederholt.

Die Ergebnisse des Prediktorschrittes mit dem Index ③ werden nun nach ② kopiert. Damit ist ③ frei für die Ergebnisse des folgenden Korrekorschrittes, der als Eingabe [① (= alt) + ② (= explizit)]/2 hat.

Im Korrektorschritt werden die gleichen Unterprogramme wie im Prediktorschritt aufgerufen. Zusätzlich treten FREEZE und HTRANS auf: Ausfrieren und Wärmeübergang werden nur einmal pro Zeitschritt, also rein explizit, gerechnet.

In FREEZE wird überprüft, ob die Bedingungen für Ausfrieren an der Hülle und der Wand erfüllt sind und gegebenenfalls nach Gl. (5.3.22) eine Ausfrierrate für Stahl und/oder Oxid an der jeweiligen Struktur berechnet.

HTRANS berechnet die Wärmeströme der Abb. 5.1 nach den Gleichungen (5.3.6 bis 5.3.19).

Als Ergebnis des Korrektorschrittes sind die Werte mit dem Index ③ die endgültigen Werte dieses Zeitschrittes. Sie werden nach ② kopiert.

Abschließend erfolgt - durch Eingabeparameter gesteuert - der Ausdruck der Daten sowie das Abspeichern von Daten für einen Restart und das Anfertigen von Diagrammen. Das Abspeichern für den Restart erfolgt alternativ auf zwei Files, so daß bei einem unbeabsichtigten Programmabbruch stets ein vollständiger Datensatz vorhanden ist.

6.3 Maschennetz und Differenzgleichungen

Die Differentialgleichungen des Abschnittes 5.1 werden durch finite Differenzgleichungen in Eulerscher Schreibweise approximiert. Die dazu notwendige Diskretisierung der Geometrie erfolgt mit einem versetzten Netz ("staggered grid") mit variablen Maschenweiten.

Abb. 6.3 zeigt ein Kontrollvolumen für die skalaren Größen, Abb. 6.4, die versetzten Kontrollvolumina für die vektoriellen Größen. Schließlich enthält Abb. 6.5 die Bezeichnungen des Diskretisierungsgitters.

In r-Richtung zählt der Laufindex I, in z-Richtung der Laufindex J. Um den realen Fluidbereich herum sind sogenannte fiktive Maschen zum Setzen der Randbedingungen erforderlich; an der Unterseite zwei, sonst eine. Eine Rechenmasche hat die Abmessungen $DR(I,J)$ und $DZ(J)$, ihr Mittelpunkt hat die Koordinaten $R(I,J)$ und $Z(J)$.

In der dokumentierten CALIPSO-Version wird immer der Brennstab sowie der Kühlkanal durch eine Maschenreihe dargestellt. Daher bedeutet hier immer $I = I_{MIN} = \text{Brennstab} = 2$ und $I = I_{MAX} = \text{Kühlkanal} = 3$ (s. Abb. 6.5).

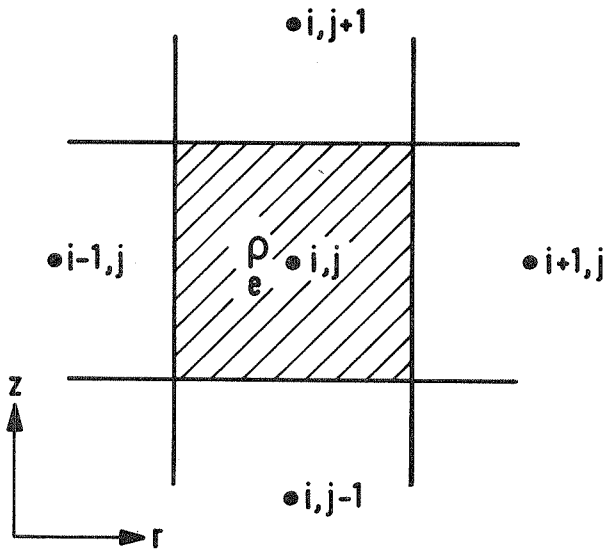


Abb. 6.3:
Kontrollvolumen für skalare Größen

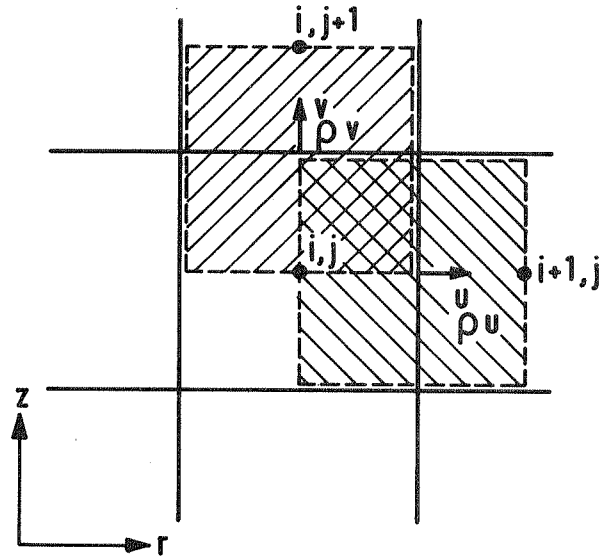


Abb. 6.4:
Kontrollvolumina für vektorielle Größen
("staggered grid")

Zum Verständnis der Abkürzungen sei noch angefügt:

- UP = Upper Plenum = oberes Plenum (Randbedingung)
- LP = Lower Plenum = unteres Plenum (Randbedingung)
- JCL = J von Channel, Lower End = unterste reelle Kanalmasche
- JPL = J von Pin, Lower End = unterste Brennstabmasche
- JDL = J von Defect, Lower End = unterste Defektmasche
- JCLM1 (entsprechend JPLM1) = JCL Minus 1
- JCU = J von Channel, Upper End = oberste reelle Kanalmasche
- JDU, JPU entsprechend
- JCUP1 (entsprechend JPUP1) = JCU Plus 1

Für die konvektiven Terme der Erhaltungsgleichungen wird aus Stabilitätsgründen die bekannte DONOR-cell Interpolation (gewichtete Aufwind-Differenzen [26]) angewendet.

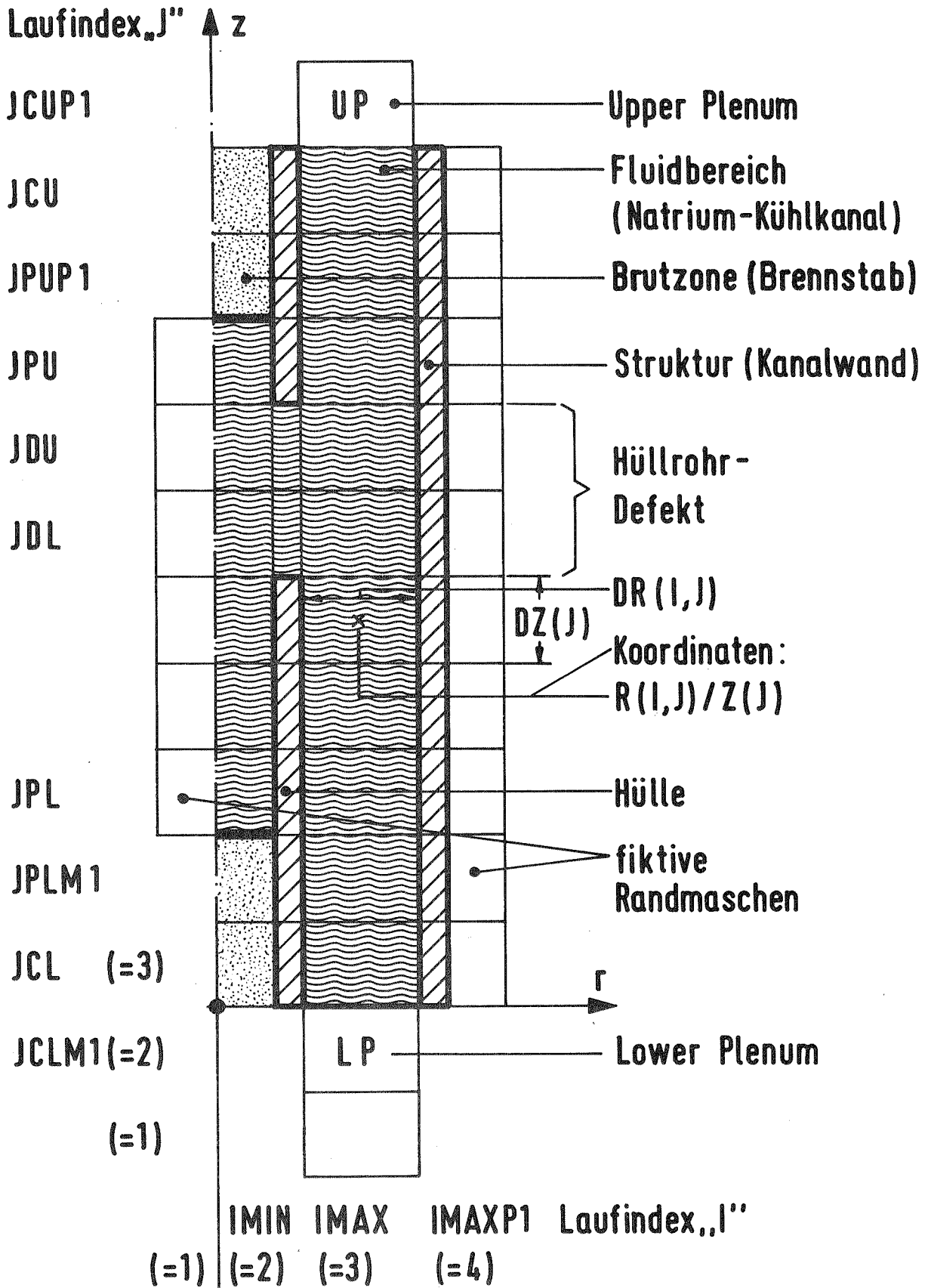


Abb. 6.5: Bezeichnungen des Diskretisierungsgitters

So gilt z.B. für den Transportterm des rechten Randes der Masche i, j in r -Richtung (Abb. 6.3):

$$\langle Qu \rangle_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i,j} \left\{ \xi Q_{i,j} + (1-\xi) Q_{i+1,j} \right\} ,$$

$$\xi = \frac{DCF}{2} \left\{ \text{sign}(u_{i,j}) + 1 \right\} + (1-DCF) \frac{\Delta r_{i+1}}{\Delta r_i + \Delta r_{i+1}}$$

Q ist die zu erhaltende, transportierte Quantität in Maschenmitte, u ist die Geschwindigkeit an der Maschenbegrenzung (transportierende Geschwindigkeit). Man beachte, daß u_i an der rechten und v_i an der oberen Seite der Masche definiert ist.

DCF ist der DONOR-cell-Faktor $0 \leq DCF \leq 1$. Für 0 ergeben sich (numerisch instabile) zentrale Differenzen, für 1 volle Aufwind-Differenzen.

Zur Demonstration der Umsetzung von Differential- in Differenzengleichung wurden die Massenerhaltungsgleichung des Oxids (5.1.1) und die axiale Impulserhaltungsgleichung der leichten Phase (5.1.26) ausgewählt. Die Diskretisierung der Energieerhaltungsgleichungen von Brennstoff und Natrium ist wegen der Länge der Gleichungen zwar wesentlich komplizierter, erfolgt aber im Prinzip ebenso wie die der Massenerhaltungsgleichungen, da Dichte und innere Energie am gleichen Ort definiert sind (siehe Abb. 6.3).

a) Massenerhaltung Oxid

Zunächst wird die zeitliche Ableitung ausdifferenziert und durch A dividiert:

$$\frac{\partial g_f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r g_f u_e) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} (g_f v_e A) = \dot{\Gamma}_{cf} \frac{A_{cv}}{A \Delta z} + \dot{\Gamma}_{wf} \frac{A_{wv}}{A \Delta z}$$

Hierbei sind bereits die Ableitungen $\frac{\partial A}{\partial t}$ und $\frac{\partial A}{\partial r}$ den Voraussetzungen entsprechend beseitigt worden. Der $\frac{\partial}{\partial z}$ -Term darf nicht ausdifferenziert werden, da sonst im allgemeinen keine Konsistenz zwischen Fläche und Geschwindigkeit (aus der Impulsgleichung mit versetztem Maschengitter, s. Anhang A3) besteht.

Die entsprechende Differenzengleichung, aufgelöst nach der "neuen" Oxiddichte, lautet:

$$S_{f,i,j}^{n+1} = S_{f,i,j}^n + \Delta t \left\{ \left(\Gamma_{cf} \frac{A_{cv}}{A \Delta z_{ij}} \right) + \left(\Gamma_{wf} \frac{A_{wv}}{A \Delta z_{ij}} \right) - \frac{\epsilon_j}{r_{i,j} \Delta r_{i,j}} \left[\langle \rho_f u_e r \rangle_{i+\frac{1}{2},j} - \langle \rho_f u_e r \rangle_{i-\frac{1}{2},j} \right] - \frac{1}{A_{i,j} \Delta z_j} \left[\langle \rho_f v_e A \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} - \langle \rho_f v_e A \rangle_{i,j-\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (6.3.1)$$

Die Multiplikation beider Anteile des konvektiven Termes in radialer Richtung mit ϵ_j ist nur für die vorliegende Geometrie (zwei Maschen in r-Richtung) zulässig. Nur dann ist jeweils ein Anteil gleich Null und derjenige, der ungleich Null ist, wird mit dem Öffnungsverhältnis ϵ_j multipliziert (Berücksichtigung einer nur teilweisen Öffnung).

Die DONOR-cell-Ausdrücke heißen im Code in der Reihenfolge ihres Auftretens DRFR(I,J), DRFL(I,J), DRFT(I,J), DRFB(I,J): D = DONOR; R = RHO; F = FUEL (Oxid); R,L,T,B = Right, Left, Top, Bottom.

Es ist

$$\langle \rho_f u_e r \rangle_{i+\frac{1}{2},j} = DRFR(I,J) = r_r \cdot \bar{u}_{e,i,j} \cdot \left[\xi \cdot \bar{\rho}_{f,i,j} + (1-\xi) \bar{\rho}_{f,i+1,j} \right] \quad (6.3.2)$$

wobei

$$\xi = \frac{DCF}{2} \left\{ \text{sign}(\bar{u}_{e,i,j}) + 1 \right\} + (1-DCF) \frac{\Delta r_{i+1,j}}{\Delta r_{i,j} + \Delta r_{i+1,j}}$$

$$r_r = \begin{cases} r_w & \text{für Kanalmaschen} \\ r_i & \text{für Brennstabmaschen} \end{cases}$$

"-" bedeutet den Mittelwert aus Größen mit Index ① und ②

und

$$\langle \rho_f v_e A \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} = DRFT(I,J) = \bar{v}_{e,i,j} \cdot \left[\xi \cdot \bar{\rho}_{f,i,j} + (1-\xi) \bar{\rho}_{f,i,j+1} \right] \frac{A_{i,j} + A_{i,j+1}}{2}$$

(6.3.3)

wobei

$$\gamma = \frac{DCF}{2} \left\{ \text{sign}(\bar{v}_{l,i,j}) + 1 \right\} + (1-DCF) \frac{\Delta z_{j+1}}{\Delta z_j + \Delta z_{j+1}}$$

b) Axiale Impulserhaltung der leichten Phase ($0 < \theta_{\text{gas}} < 0.5$)

Zunächst wird Gl. (5.1.26) unverändert in diskretisierter Form angegeben, um diese Gleichung dann nach dem mehrfach auftretenden v_v aufzulösen:

$$\begin{aligned} & \frac{(\hat{p}_v v_v)^{n+1}_{i,j} - (\hat{p}_v v_v)^n_{i,j}}{\Delta t} + c_v \frac{[\hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v - v_c)]^{n+1}_{i,j} - [\hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v - v_c)]^n_{i,j}}{\Delta t} = \\ & = - \frac{\langle \hat{p}_v v_v \mu v r \rangle_{i,j}^{n+1} - \langle \hat{p}_v v_v \mu v r \rangle_{i,j}^n + \frac{c_v}{2} [\langle \hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v - v_c)(\mu_v + \mu_c) r \rangle_{i,j}^{n+1} - \langle \dots \rangle_{i,j}^n]}{r_{i,j} \cdot \Delta r_{i,j}} \\ & - \frac{\langle \hat{p}_v v_v^2 \rangle_{i,j}^{n+1} - \langle \hat{p}_v v_v^2 \rangle_{i,j}^n + \frac{c_v}{2} [\langle \hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v^2 - v_c^2) \rangle_{i,j}^{n+1} - \langle \hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v^2 - v_c^2) \rangle_{i,j}^n]}{\frac{1}{2}(\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} \\ & - \frac{(\overline{\hat{p}_v v_v^2})_{i,j} + \frac{c_v}{2} [\overline{\hat{p}_c^p \hat{\theta}_{\text{gas}}(v_v^2 - v_c^2)}]_{i,j}}{\frac{1}{2}(A_{i,j} + A_{i,j+1})} \cdot \frac{A_{i,j+1} - A_{i,j}}{\frac{1}{2}(\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} \\ & - \overline{\hat{\theta}_{\text{gas}}}_{i,j} \frac{\bar{p}_{i,j+1} - \bar{p}_{i,j}}{\frac{1}{2}(\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} + (\overline{f_{vev}})_{i,j} - \overline{FK}(v_v - \bar{v}_c)_{i,j} - (\overline{\hat{p}_v q})_{i,j} \\ & + (|\hat{\Gamma}_{n,i,j}| + \hat{\Gamma}_{n,i,j}) \bar{v}_c - \frac{1}{2} (|\hat{\Gamma}_{n,i,j}| - \hat{\Gamma}_{n,i,j}) \bar{v}_v \end{aligned}$$

Es bedeutet: "-" = Mittelwert aus Größen mit Index ① und ② ,
 " " = räumlicher Mittelwert aus den Maschen i und i+1,
 gewichtet mit dem jeweiligen Maschenvolumen.

Die Geschwindigkeit v_v erscheint zweimal links vom Gleichheitszeichen.
 In Abschnitt 7.2 wird erläutert, warum es sich darüber hinaus empfiehlt,
 FK mit v_v^{n+1} und nicht \bar{v}_v zu multiplizieren. Damit lautet die Gleichung
 für die Axialgeschwindigkeit der leichten Phase:

$$\begin{aligned}
 v_{v,i,j}^{n+1} = & \frac{1}{\hat{\rho}_v^{n+1} + c_v (\hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas})_{i,j}^{n+1} + \overline{FK} \cdot \Delta t} \left\{ (\hat{\rho}_v v_v)_i^n + c_v \left[(\hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} v_c)_{i,j}^{n+1} + (\hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} (v_v - v_c))_{i,j}^n \right] \right. \\
 & - \Delta t \left[\frac{\langle \rho_v v_v u_{vr} \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} - \langle \rho_v v_v u_{vr} \rangle_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{c_v}{2} \langle \hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} (v_v - v_c) (u_v + u_c) \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} - \langle \dots \rangle_{i,j-\frac{1}{2}}} {r_{i,j} \cdot \Delta r_{i,j}} \right. \\
 & + \frac{\langle \rho_v v_v^2 \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} - \langle \rho_v v_v^2 \rangle_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{c_v}{2} \langle \hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} (v_v^2 - v_c^2) \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} - \langle \hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} (v_v^2 - v_c^2) \rangle_{i,j-\frac{1}{2}}} {\frac{1}{2} (\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} \\
 & + \frac{\overline{(\hat{\rho}_v v_v^2)}_{i,j} + \frac{c_v}{2} \overline{[\hat{\rho}_c^p \hat{\theta}_{gas} (v_v^2 - v_c^2)]}_{i,j}} {\frac{1}{2} (A_{i,j} + A_{i,j+1})} \cdot \frac{A_{i,j+1} - A_{i,j}} {\frac{1}{2} (\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} \\
 & + \hat{\theta}_{gas,i,j} \frac{\bar{P}_{i,j+1} - \bar{P}_{i,j}} {\frac{1}{2} (\Delta z_j + \Delta z_{j+1})} - (\bar{f}_{vzv})_{i,j} - (\overline{FK} \cdot \bar{v}_c)_{i,j} + (\bar{\rho}_v g)_{i,j} \\
 & \left. - \frac{1}{2} (|\hat{\Gamma}_{n,i,j}| + \hat{\Gamma}_{n,i,j}) \bar{v}_c + \frac{1}{2} (|\hat{\Gamma}_{n,i,j}| - \hat{\Gamma}_{n,i,j}) \bar{v}_v \right\} \quad (6.3.4)
 \end{aligned}$$

Im Code wird der Druckgradient mit einem Faktor DAMP, Gl. (7.4.1), multipliziert, der, wie in Abschnitt 7.4 beschrieben, den Abbau des Druckgradienten über den Zeitschritt berücksichtigt.

Von den zahlreichen DONOR-cell-Termen sei beispielhaft

$$\langle \rho_e^p \theta_{gas} (v_v^i - v_e^i) \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} = DRVVRT(I,J) \quad \text{angegeben}$$

(DONOR / RHOV / V_RELATIV / TOP) :

$$\langle \rho_e^p \theta_{gas} (v_v^i - v_e^i) \rangle_{i,j+\frac{1}{2}} = 2 \underbrace{\langle \rho_e^p \theta_{gas} (v_v - v_e) \rangle}_{\text{transportierte Größe}} \cdot \underbrace{\frac{v_v + v_e}{2}}_{\text{transportierende Geschwindigkeit}} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} =$$

$$= \overline{(v_v + v_e)}_{i,j} \left\{ \xi \frac{(\hat{S}_{ne} + \hat{S}_{ne}) \hat{\theta}_{gas}}{1 - \hat{\theta}_{gas}} \Big|_{i,j} (\bar{v}_v - \bar{v}_e)_{i,j} + (1 - \xi) \frac{(\hat{S}_{ne} + \hat{S}_{ne}) \hat{\theta}_{gas}}{1 - \hat{\theta}_{gas}} \Big|_{i,j+i} (\bar{v}_v - \bar{v}_e)_{i,j+i} \right\}$$

7. BESONDERHEITEN IN CALIPSO

Das für einen Teil der Größen rein explizite Lösungsverfahren in CALIPSO in Verbindung mit der speziellen Geometrie erfordert ohne besondere Maßnahmen außerordentlich kleine Zeitschritte. Die Faustregel, daß der Transport pro Zeitschritt kleiner als eine Maschenweite (typisch $\Delta r = 2 \dots 3 \text{ mm!}$) sein muß, wird noch durch den dominierenden Einfluß der Zwischenphasenreibungskraft in der Impulsgleichung um den Faktor ~ 10 verschärft.

In diesem Abschnitt werden die Maßnahmen zur Stabilisierung bzw. Zeitschrittvergrößerung der Rechnung vorgestellt. Es wurde hierbei weitgehend erreicht, dämpfende physikalische Effekte zu nutzen, so daß auf zusätzliche numerische Eingriffe verzichtet werden konnte.

7.1 ABC-Technik (Artificial Bubbling Concept)

In allen Mehrphasen-Rechenprogrammen stellt der Übergang vom Einphasen- zum Mehrphasenbereich ein besonderes Problem bei der Druckbestimmung dar. In CALIPSO ist diese Situation gegeben, wenn zunächst der Natrium-Kühlkanal mit einphasig flüssigem Natrium gefüllt ist, das sich dann mit Brennstoff, Stahl und Spaltgas vermischt und zusätzlich verdampft.

Die Druckbestimmung im Einphasen-Natrium geschieht nun, wie in Abschnitt 5.2 beschrieben, durch ein Gleichgewicht zwischen dem kompressiblen Natrium und einer winzigen Menge künstlich eingeführten, nicht kondensierbaren Spaltgases. Dieses pro Masche künstlich eingeführte Bläschen (Volumenanteil typisch $\theta_{\text{gas}} = 10^{-5}$) bewirkt für die Rechnung, daß die Druckbestimmung prinzipiell wie im Zweiphasengebiet geschehen kann, ohne jedoch den physikalischen Zustand wesentlich zu verändern. Die Verlangsamung der Schallgeschwindigkeit beträgt etwa 20 %, die akustische Phase des Vorganges ist aber ohnehin nur von untergeordnetem Interesse. Ohnehin sind oft auch in Wirklichkeit geringe Mengen nicht-kondensierbarer Gase im Natrium enthalten.

Das Gasbläschen wird in der Masche so lange festgehalten, bis "echtes" Gas durch Transport oder Verdampfung in die Masche gelangt, d.h. bis

zu diesem Zeitpunkt ist $v_v = 0$. Gleichzeitig wird die - wenn auch kleine - virtuelle Masse des Bläschens in bezug auf die flüssige Phase unterdrückt.

7.2 Semiimplizite Formulierung der Zwischenphasenreibungskraft

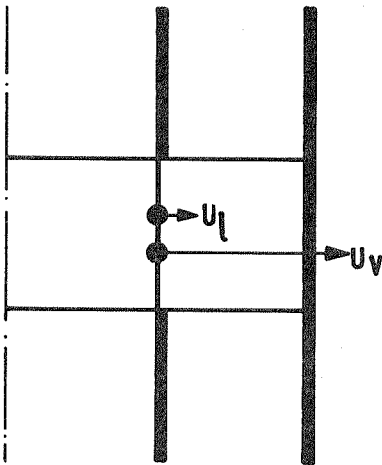
In den Impulsgleichungen (5.1.23 bis 5.1.26)

$$\frac{d}{dt} u_{v/l} = - \text{Druckgradient} \mp \text{Zwischenphasenreibungskraft } (FK \cdot u_{rel}) + \dots$$

fällt die Zwischenphasenreibungskraft $FK \cdot u_{rel}$ in der Praxis durch die Tendenz zur Instabilität auf. Dies kommt folgendermaßen zustande:

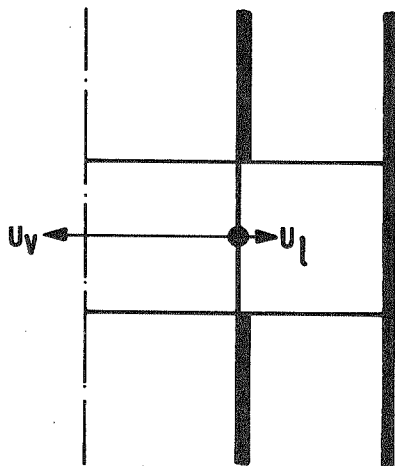
$$\text{Es ist die Reibkraft} = FK \cdot u_{rel} = c_d \cdot \frac{\rho}{2} \cdot A \cdot |u_{rel}| \cdot u_{rel}$$

mit $u_{rel} = u_v - u_l$, siehe Gl. (5.3.1).



Brennstab Kühlkanal
Druck: groß Druck: klein

Zu Beginn der Rechnung ist $u_v = u_l = 0$ an der Versagensstelle, damit auch die Reibkraft $FK \cdot u_{rel} = 0$. Die Impulsgleichungen errechnen im Prediktor-Schritt allein aus dem Druckgradienten eine große Geschwindigkeit u_v (geringe Trägheit des Dampfes) und eine kleine Geschwindigkeit u_l (große Trägheit der Flüssigphase). Daraus folgt eine große Relativgeschwindigkeit u_{rel} und eine Reibkraft, die wegen des quadratischen Auftretens von u_{rel} größer als der Druckgradient sein kann.



Brennstab Kühlkanal
 Druck: groß Druck: klein

Mit einer derart großen Reibkraft wird nun im Korrektorschritt aus den Impulsgleichungen ein u_1 errechnet, was nur wenig größer ist als im Prediktorschritt (Trägheit!), u_v jedoch ist entgegengesetzt und womöglich dem Betrag nach noch größer als im Prediktorschritt. Es ergibt sich eine entgegengesetzte, sehr große Reibkraft.

Der beschriebene Vorgang wiederholt sich mit jedem Zyklus und führt zur Instabilität, wenn nicht sehr kleine Zeitschritte gewählt werden.

Dieses Verhalten ist verständlich, da die Impulsgleichung über die Zwischenphasenreibkraft immer erst einen Schritt später "merkt", was für eine Geschwindigkeit u_v sie errechnet hat. Diese Geschwindigkeit wäre nicht errechnet worden, hätte die Gleichung im gleichen Schritt schon von der entsprechenden Reibkraft "gewußt". Es liegt daher nahe, in der Impulsgleichung für die leichte Phase im Term

$$FK \cdot \mu_{rel} = c_d \cdot \frac{\rho}{2} \cdot A \cdot |\mu_v - \mu_e| \cdot (\mu_v - \mu_e)$$

die Dampfgeschwindigkeit u_v zum neuen Zeitschritt zu wählen. Dies führt jedoch zu einer quadratischen Gleichung, deren Lösung aufwendige Fallunterscheidungen erfordert. Ein akzeptabler Kompromiß ist es,

$$FK = c_d \cdot \frac{\rho}{2} \cdot A \cdot |\mu_v - \mu_e|$$

zum alten bzw. expliziten (Zeit)schritt zu nehmen und die Geschwindigkeit u_v im Term $(u_v - u_1)$ zum neuen.

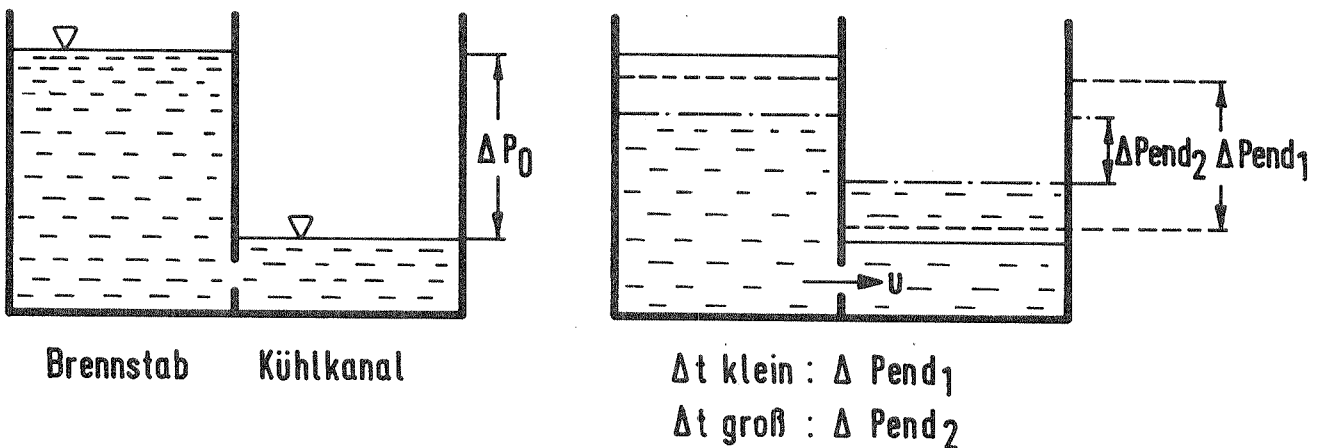
Dies wird mit semiimpliziter Formulierung der Zwischenphasenreibkraft bezeichnet; der Vorgang der Auflösung nach u_v (entsprechend auch v_v

in axialer Richtung) ist bei der Herleitung der Differenzgleichung (6.3.4) demonstriert worden.

7.3 Virtuelle Massen

In zahlreichen Veröffentlichungen [11 bis 14] wird der Berücksichtigung virtueller Massen bei Mehrphasen-Rechenprogrammen ein großer numerisch stabilisierender Effekt bei einer gleichzeitig nur schwachen Beeinflussung der physikalischen Ergebnisse zugeschrieben. Aus diesem Grund wurde der Effekt auch in CALIPSO berücksichtigt und wird nur der Vollständigkeit halber an dieser Stelle erwähnt. Die Einzelheiten, insbesondere die Problematik der transportierenden Geschwindigkeit, wurden in Abschnitt 5.1, Impulserhaltungsgleichungen, diskutiert (s.auch [25]).

7.4 Zeitschrittabhängiger Abbau des Druckgradienten



Die Skizze zeigt Brennstab und Kühlkanal vor und nach einem Zeitschritt Δt . Die Verbindung stellt ein Leck dar, der Ausgangszustand ist mit der Druckdifferenz Δp_0 und $u = 0$ am Leck gekennzeichnet. Zur Anschaulichkeit werden Drücke durch Wasserspiegelhöhen in einem unten geschlossenen Behälter dargestellt.

Ist der Zeitschritt Δt klein, baut sich nur eine kleine Geschwindigkeit u auf und die Druckdifferenz Δp_{end1} unterscheidet sich nur wenig von Δp_0 . Hier ist die üblicherweise in CALIPSO entsprechenden Rechencodes gemachte Annahme eines über den Zeitschritt konstanten Druckgradienten akzeptabel. Anders ist es im Fall eines großen Zeitschrittes Δt : Δp_{end2} kann erheblich von Δp_0 abweichen, d.h. es wurde zur Berechnung von u zu lange mit einer zu hohen treibenden Kraft gerechnet.

Anknüpfend an den vorigen Abschnitt über virtuelle Massen demonstriert Abb. 7.1 deren Effekt:

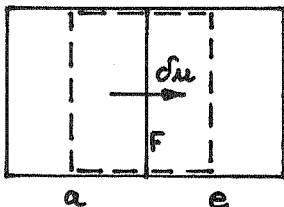
Ohne Berücksichtigung virtueller Massen ist der Schlupf zwischen beiden Phasengeschwindigkeiten in der Anfangsphase recht groß, er baut sich langsam durch Zwischenphasenreibung ab. Die Annäherung von Innen- und Außendruck geschieht allmählich, der Innendruck liegt stets über dem Außendruck.

Mit virtuellen Massen jedoch ist der Schlupf wesentlich kleiner, dadurch die Geschwindigkeit der schweren Phase (mit ihrer großen Trägheit) höher, was zu einem "Überschießen" des Außendrucks über den Innendruck führt, wenn gleiche Zeitschritte benutzt werden.

Dieses Phänomen wäre dann zu verhindern, wenn das Druckgefälle zum Zeitschrittende von den Geschwindigkeiten "vorhergesehen" werden und sie entsprechend korrigiert werden könnten.

Im folgenden wird gezeigt, wie der Effekt, daß der Druckgradient sich während des Zeitschrittes verändert, berücksichtigt wird.

Vereinfachungen:



- Gültigkeit beschränkt auf positives u_1
- alle Kräfte außer dem Druckgradienten werden vernachlässigt
- das Ausström-Volumen a und Einström-Volumen e ist nach außen abgeschlossen
- \hat{S}_1 und $\hat{\theta}_{\text{gas}}$ sind im (gestrichelten) Impuls-Kontrollvolumen definiert und sind konstant
- p ist nur durch (idealen) Gasdruck bestimmt, $T = \text{const.}$
- die Gasphase wird ebenfalls mit u_1 transportiert
- die flüssige Phase ist inkompressibel.

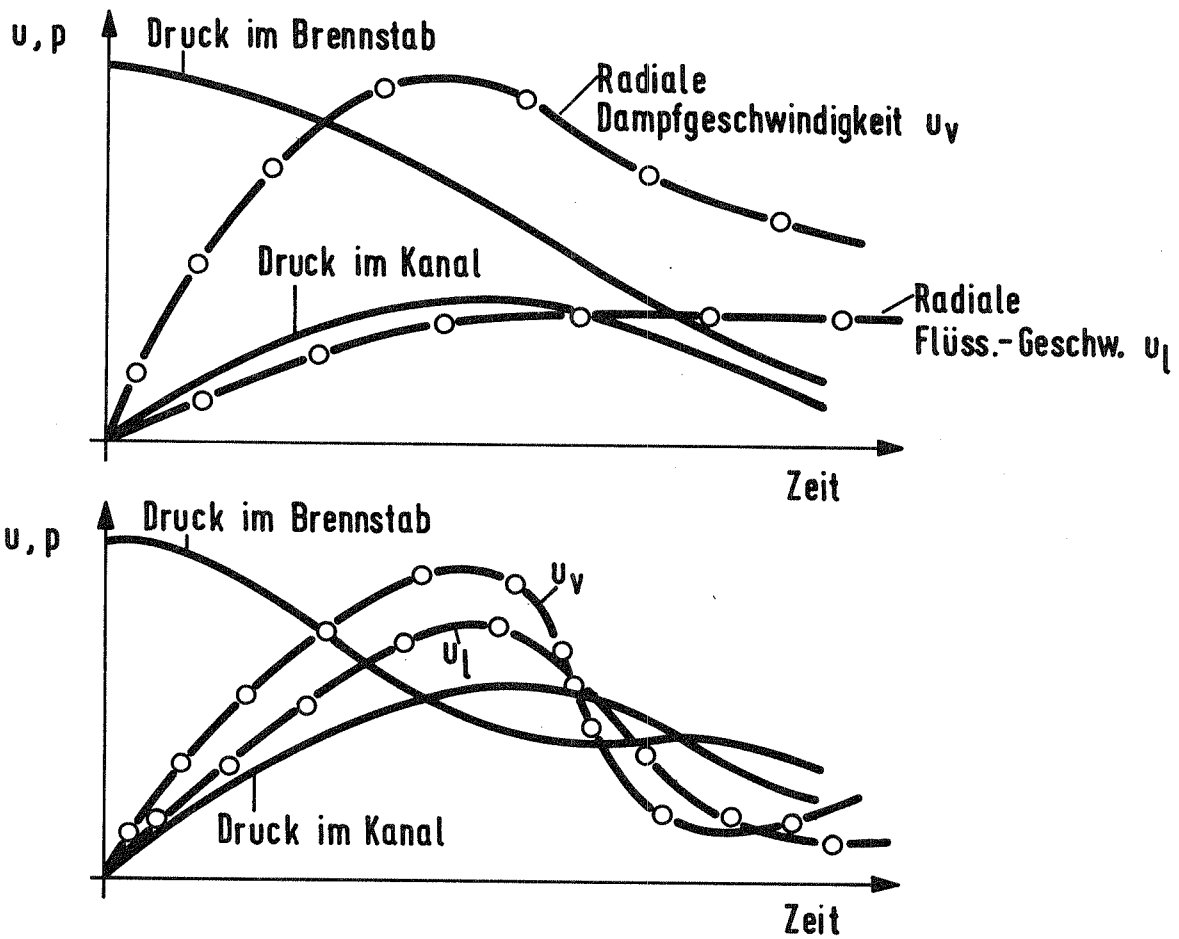


Abb. 7.1: Qualitativer Verlauf von Druck im Brennstab und im Kühlkanal an der Versagensstelle sowie der entsprechenden Radialgeschwindigkeiten der leichten (u_v) und schweren (u_l) Phase: oben ohne, unten mit Berücksichtigung virtueller Massen

Vereinfachte Impulsgleichung der flüssigen Phase, r-Richtung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{g}_e \mu_e) = -(1 - \hat{\theta}_{gas}) \frac{\partial p}{\partial r}$$

Eine Variation von u_1 bewirkt Variation in p :

$$d \frac{\partial}{\partial t} (\hat{g}_e \mu_e) = - d \left[(1 - \hat{\theta}_{gas}) \frac{\partial p}{\partial r} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{g}_e d\mu_e) = -(1 - \hat{\theta}_{gas}) \frac{\partial}{\partial r} dp \quad (A)$$

Mit der idealen Gasgleichung ist

$$dp = d(g_v^0 RT) = d\left(\frac{g_v}{\theta_{gas}} \cdot R \cdot T\right)$$

$$dp = \frac{\theta_{gas} dg_v - g_v d\theta_{gas}}{\theta_{gas}^2} \cdot R \cdot T \quad (B)$$

Ferner gilt

$$dm_e^a = -d\mu_e g_e^a F \Delta t$$

$$dm_e^e = d\mu_e g_e^a F \Delta t$$

$$d(g_e^a V^a) = -d\mu_e g_e^a F \Delta t$$

$$d(g_e^e V^e) = d\mu_e g_e^a F \Delta t$$

$$dg_e^a = -d\mu_e g_e^a \frac{F}{V_a} \Delta t$$

$$dg_e^e = d\mu_e g_e^a \frac{F}{V_e} \Delta t$$

$$d\theta_e^a = -d\mu_e \theta_e^a \frac{F}{V_a} \Delta t$$

$$d\theta_e^e = d\mu_e \frac{g_e^a}{g_e^{e,p}} \cdot \frac{F}{V_e} \Delta t$$

$$\underline{d\theta_{gas}^a = d\mu_e (1 - \theta_{gas}^a) \frac{F}{V_a} \Delta t} \quad (C)$$

$$\underline{d\theta_{gas}^e = -d\mu_e \frac{g_e^a}{g_e^e} (1 - \theta_{gas}^e) \frac{F}{V_e} \Delta t} \quad (D)$$

$$dm_v^a = -d\mu_e g_v^a F \Delta t$$

$$dm_v^e = d\mu_e g_v^a F \Delta t$$

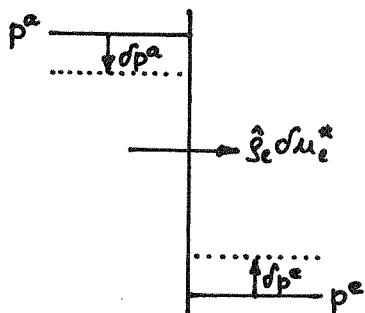
$$d(g_v^a V^a) = -d\mu_e g_v^a F \Delta t$$

$$d(g_v^e V^e) = d\mu_e g_v^a F \Delta t$$

$$\underline{dg_v^a = -d\mu_e g_v^a \frac{F}{V_a} \Delta t} \quad (E)$$

$$\underline{dg_v^e = d\mu_e g_v^a \frac{F}{V_e} \Delta t} \quad (F)$$

Es findet in Wirklichkeit eine Überlagerung aus konstantem Druckgradienten und Variation dp statt. Damit wird aus (A):



$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\hat{g}_e d\mu_e^*) &= -\frac{1-\hat{\theta}_{gas}}{\Delta r} \{p^e + dp^e - (p^a + dp^a)\} \\ &= -\frac{1-\hat{\theta}_{gas}}{\Delta r} (p^e - p^a) - \frac{1-\hat{\theta}_{gas}}{\Delta r} (dp^e - dp^a) \quad (G) \\ & \quad * = \text{"effektiv"} \end{aligned}$$

Durch Einsetzen von (B) bis (F) in (G) erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hat{g}_e d\mu_e^*) = -(1-\hat{\theta}_{gas}) \left\{ \frac{p^e - p^a}{\Delta r} + \frac{R}{\Delta r \hat{g}_e} \left[\frac{T^e}{\theta_{gas}^2} \frac{F}{V} (\theta_{gas}^e \hat{g}_{sv}^e + \hat{g}_{sv}^e \frac{\hat{g}_e^a}{\hat{g}_e^e} (1-\theta_{gas}^e)) + \frac{T^a}{\theta_{gas}^a} \frac{F}{V} \hat{g}_{sv}^a \right] \right\} \hat{g}_e d\mu_e^* \quad (H)$$

$$\dot{f} = -(g + at \cdot f)$$

Gesucht: Lösung f, $(1-\hat{\theta}_{gas})$ unterdrückt

Lösung der homogenen Dgl. (ohne g): $f = C e^{-\frac{a}{2} t^2}$

nun Variation der Konstanten C : $C = C(t)$

$f = C(t) e^{-\frac{a}{2} t^2}$ einsetzen in

$$\dot{f} = -(g + at f) :$$

$$e^{-\frac{a}{2} t^2} \cdot \dot{C}(t) + C(t) (-at) e^{-\frac{a}{2} t^2} = -(g + at C(t) e^{-\frac{a}{2} t^2})$$

$$\Rightarrow C(t) = -g \int e^{\frac{a}{2} t^2} dt$$

$$f = -g \int_{-k}^t e^{\frac{a}{2} t^2} dt \cdot e^{-\frac{a}{2} t^2}$$

Qualitativ hat die Lösung folgenden Verlauf:

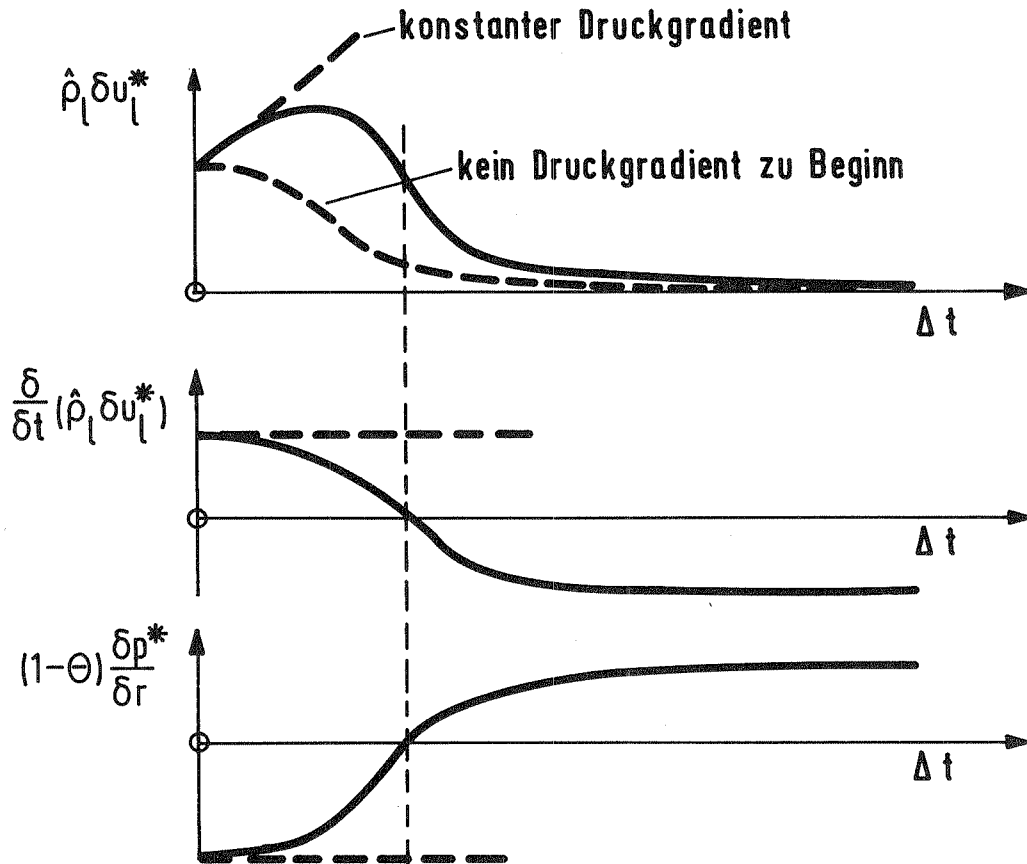


Abb. 7.2: Allgemeine Lösung der Gleichung (H)

Anf. Bed.: $f(t=0) = (\hat{p}_e \mu_e)^n$

$$\Rightarrow (\hat{p}_e \mu_e)^n = -g \int_{-k}^0 e^{\frac{a}{\lambda} t^2} dt$$

für $\frac{(\hat{p}_e \mu_e)^n}{g} > 0$:

$$\int_{-k}^0 e^{\frac{a}{\lambda} t^2} dt = -\frac{(\hat{p}_e \mu_e)^n}{g}$$

$$\int_{+k}^0 e^{\frac{a}{\lambda} t^2} dt = -\frac{(\hat{p}_e \mu_e)^n}{g}$$

Probe: $\dot{f} = -g \left[e^{-\frac{a}{2}t^2} e^{\frac{a}{2}t^2} + \int_{-k}^t e^{\frac{a}{2}t^2} dt (-at) e^{-\frac{a}{2}t^2} \right]$

$$\dot{f} = -g + atg \int_{-k}^t e^{\frac{a}{2}t^2} dt e^{-\frac{a}{2}t^2}$$

$$\dot{f} = -(g + atf) \quad \checkmark$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{\rho}_e \dot{u}_e^*) = -g \left[1 - at \left(-\frac{(\hat{\rho}_e \mu_e)^n}{g} + \int_0^t e^{\frac{a}{2}t^2} dt \right) e^{-\frac{a}{2}t^2} \right] \quad (I)$$

$$\hat{\rho}_e \dot{u}_e^* = -g \left[-\frac{(\hat{\rho}_e \mu_e)^n}{g} + \int_0^t e^{\frac{a}{2}t^2} dt \right] e^{-\frac{a}{2}t^2}$$

$$\hat{\rho}_e \dot{u}_e^* = \left[(\hat{\rho}_e \mu_e)^n - g \int_0^t e^{\frac{a}{2}t^2} dt \right] e^{-\frac{a}{2}t^2} \quad (K)$$

Durch Vergleich von (A) mit (I) ergibt sich ein vor den Druckgradienten der radialen Impulsgleichungen zu schreibender Faktor

$$DAMP = 1 - a \cdot \Delta t \left(-\frac{(\hat{\rho}_e \mu_e)^n}{\nabla p} + \int_0^{\Delta t} e^{\frac{a}{2}t^2} dt \right) e^{-\frac{a}{2}(\Delta t)^2} \quad (7.4.1)$$

$$\alpha = \frac{R_{h_2}}{\Delta r \hat{\rho}_e} \left[\frac{T_{h_2}^e}{\theta_{ga_2}^{e2}} \cdot \frac{F}{v_e} (\theta_{ga_2}^e \rho_v^a + \rho_v^e \frac{\rho_e^a}{\rho_e^e} (1 - \theta_{ga_2}^e)) + \frac{T_{h_2}^a}{\theta_{ga_2}^{a2}} \cdot \frac{F}{v_a} \rho_v^a \right]$$

Das Integral $\int_0^{\Delta t} e^{\frac{a}{2}t^2} dt$ muß numerisch ausgewertet werden.

Für die axiale Richtung könnte prinzipiell ein entsprechender Dämpfungsfaktor bestimmt werden. Die bei den speziellen Geometrieverhältnissen für die radiale Richtung getroffenen Vereinfachungen sind jedoch hier nicht mehr zulässig und so müßte eine Vielzahl von Fällen unterschieden werden, wofür sich der Aufwand nicht lohnt, da die Stabilität in axialer Richtung unkritisch ist.

8. BENUTZUNGSANLEITUNG

Für eine CALIPSO-Rechnung ist folgendes erforderlich (siehe auch Steuerkarten des Anwendungsbeispiels in Abschnitt 9):

- der vollständige CALIPSO-Code
- eine Eingabedatei (FORTRAN-FILE 5)
- eine Datei, auf die Daten zum Plotten geschrieben werden können (FORTRAN-FILE 7)
- zwei Dateien, auf die abwechselnd Daten für einen Restart geschrieben werden können (FORTRAN-FILES 8 und 9)
- eine Datei zum Ausdrucken der Daten (FORTRAN-FILE 6).

Zur Eingabedatei (Liste siehe unten):

Die Eingabe der Problem- und Steuerdaten erfolgt in den Fortran-Formaten (10I6) für Integer-Zahlen und (6D12.5) für Real-Zahlen. Die Variablenliste, Abschnitt 2, gibt an, welche Größe an welcher Stelle eingegeben werden muß. Die physikalischen Daten sind dort ausreichend erläutert, hier werden noch einige Steuergrößen erklärt:

- Ausdruck der Daten (es werden die wichtigsten Größen wie Zeit, Zeitschritt, Zyklus, gesamte ausgefrorene Massen etc. sowie maschenweise für Brennstab und Kühlkanal die verschiedenen Dichten, Temperaturen, Geschwindigkeiten, Volumenanteile etc. ausgedruckt):
 - 1.) NPRALL = 1 : jeder Schritt (Prediktor und Korrektor) wird gedruckt
 - 2.) NPRALL = 0 & NPRT = N : jeder Nte Korrektorschritt wird gedruckt
 - 3.) NPRALL = 0 & NPRT = 0 & (T1,T2,DTPR1...3) ≠ 0 :
bis zur Problemzeit T1 wird alle DTPR1 (Problemsekunden) ein Ausdruck des Korrektorschrittes gemacht, für T1 < T < T2 alle DTPR2 und danach konstant alle DTPR3 sec ein Ausdruck.
- Schreiben von Plot-Daten
 - 1.) NPLT = 0 : keine Plot-Daten
 - 2.) NPLT = 1 : Plot-Daten werden von SAVE bzw. SAVEO geschrieben, wenn ein Ausdruck (s.o.) gemacht wird.

Schreiben von Restart-Daten

Für $T > TREST$ werden mit EXIT die Restart-Daten alternativ auf die beiden Restart-Dateien geschrieben, wenn ein Ausdruck (s.o.) gemacht wird.

Für verschiedene Größen, die für alle Maschen gleich sind, kann die Eingabe durch einen einzigen Wert erfolgen. Ist dies nicht der Fall, bewirken folgende Steuerparameter das maschenweise Einlesen:

ZKONST $\left\{ \begin{array}{l} = 0 : \text{ Maschenhöhe } \Delta z \text{ variabel, muß für JCL bis JCU maschenweise} \\ \text{ eingegeben werden (s. Abb. 6.5)} \\ = A : \Delta z = A \text{ für alle Maschen} \end{array} \right.$

NTPVAR $\left\{ \begin{array}{l} = 1 : \text{ Anfangstemperatur des Thermits im } \underline{\text{Pin}} \text{ (Brennstab)} \\ \text{ variiert, muß für JPL bis JPU eingegeben werden.} \\ = 0 : \text{ konstante Anfangstemperatur TTHO im Brennstab} \end{array} \right.$

NTCVAR $\left\{ \begin{array}{l} = 1 : \text{ Anfangstemperatur des Natriums im } \underline{\text{Channel}} \text{ (Kanal)} \\ \text{ variiert, muß von JCL bis JCU eingegeben werden.} \\ = 0 : \text{ konstante Anfangstemperatur TNO im Kühlkanal} \end{array} \right.$

NVOIDV $\left\{ \begin{array}{l} = 1 : \text{ Anfangs-} \underline{\text{Void}} \text{ (Gasvolumenanteil) im Kanal variiert,} \\ \text{ muß von JCL bis JCU eingegeben werden} \\ = 0 : \text{ konstanter Gasvolumenanteil VOID im Kühlkanal (wird} \\ \text{ wegen ABC-Technik auf } 10^{-5} \text{ gesetzt, wenn VOID} < 10^{-5} \text{)} \end{array} \right.$

NRCVAR $\left\{ \begin{array}{l} = 1 : \text{ Der Anfangs-Hüll-Radius } \underline{r_c} \text{ variiert, muß für JCL bis JCU} \\ \text{ eingegeben werden.} \\ = 0 : \text{ konstanter Hüll-Radius } r_{co} \end{array} \right.$

NUPL = N : N Maschen bis zum Upper Plenum (oberen Plenum) haben einen variablen Anfangs-Wand-Radius r_w , r_w ist somit = r_{wo} für alle Maschen bis auf die Maschen (JCU-NUPL+1) bis JCU, für die r_w maschenweise eingegeben werden muß.

Es können maximal 97 Problem-maschen in axialer Richtung benutzt werden (= 100 - 3 fiktive Rand-maschen). In der dokumentierten Version ist die Anzahl der radialen Maschen in Brennstab und Kanal zu NP = NCH = 1 festgelegt, ebenso die Anzahl der Hüll- und Wandschichten zu NC = NW = 3.

Ein Restart wird in der Job Control Language (Programmsteuerkarten) dadurch bewirkt, daß über den FORTRAN-FILE 15 die Variable KREST = 1 eingelesen wird. Für einen Anfangs-lauf ist KREST = 0. Der Restart erwartet zusätzlich über den FORTRAN-FILE 3 den von seinem Vorrechner beschriebenen Datensatz (bei jenem über Files 8 und 9 beschrieben).

Das Plotten der Daten, ausgehend von der über den FORTRAN-FILE 7 beschriebene Datei wird mit dem REGENT-Subsystem CALIPSO PLOT [27] ermöglicht. Jede errechnete Größe kann in Form von Diagrammen bzw. Multi-grammen über Ort und Zeit gezeichnet werden.

Es folgt die Liste der Eingabekarten:

EINGABEKARTEN FUER CALIPSO - RESTART:

KARTE # 1: NPRT,NPRALL,NPLT
KARTE # 2: DT,TEND,TPRALL,DCF,EPSI
KARTE # 3: DTPR1,T1,DTPR2,T2,DTPR3,TREST
KARTE # 4: COURL,COURU

EINGABEKARTEN VON CALIPSO :

PROGRAMM STEUERUNG

KARTE # 1: NPRT,NPRALL,NPLT
KARTE # 2: DT,TEND,TPRALL,ZKONST,DCF,EPSI
KARTE # 3: DTPR1,T1,DTPR2,T2,DTPR3,TREST
KARTE # 4: COURL,COURU
KARTE # 5: NTPVAR,NTCVAR,NVOIDV,NUPL,NRCVAR

GEOMETRIE

KARTE # 6: JCL,JCU,JPL,JPU,JDL,JDU,NP,NC,NCH,LPLCL
KARTE # 7: RI,RCO,RWO,RA
KARTE # 8: RNL,RNV,RTH,TANMIN

ANFANGSZUSTAND

KARTE # 9: XSO,XFG,TATHO,TTHO,TNO,TU
KARTE #10: TFGOTH,PLPL,PUPL,VO,VOID

MATERIALDATEN

KARTE #11: ALFSF,ALFSU,ALFSNO,ALFSTO
KARTE #12: HCF,HCS,HCTH,HCFG,HCNL,HCNV
KARTE #13: CPF,CPS,CPNL,CPNV,RFG,RMF
KARTE #14: RMS,REN,TMF,TMS,ZDTH,ZDFG
KARTE #15: ZDNL,ZDNV,ZETAR,CD,CV
KARTE #16: COMP,PHITP

EINGABE MASCHENWEISE

KARTE #17 : EPS(J) FUER J=JDL,JDU
FALLS ZKONST=0 :
KARTE #18+: DZ(J) FUER J=JCL,JCU
FALLS NTPVAR=1 :
KARTE #19+: TTH2(IMIN,J) FUER J=JPL,JPU
FALLS NTCVAR=1 :
KARTE #20+: TN2(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU
KARTE #21+: TTH2(IMIN,J) FUER J=JCL,JPLM1
KARTE #22+: TTH2(IMIN,J) FUER J=JPUP1,JCU
FALLS NVOIDV=1 :
KARTE #23+: TAGAS2(IMAX,J) FUER J=JCL,JCU
FALLS NUPL>0 :
KARTE #24+: RW(J) FUER J=(JCU-NUPL+1),JCU
FALLS NRCVAR=1 :
KARTE #25+: RC(J) FUER J=JCL,JCU
KARTE #26+: ZETAX(J) FUER J=JCL,JCU

9. ANWENDUNGSBEISPIEL: SIMBATH-VERSUCH V71/2

Als Beispiel für eine CALIPSO-Anwendung wurde die Nachrechnung des in [28, 29] dokumentierten SIMBATH-Versuches V71/2 gewählt. Dabei handelt es sich um einen Einstabversuch in fließendem Natrium mit wohlbekannten Anfangsbedingungen, insbesondere, was die anfängliche Größe und Ausbreitung der Versagensstelle betrifft.

Druck und Temperatur des Spaltgases im Brennstab zu Beginn bei Stabversagen können nur abgeschätzt werden, für die Rechnung wurde $TFGOTH = T_{fg}/T_{th} = 0.625$ gesetzt. Die Versuchsgeometrie - stark vereinfacht in Abb. 9.1 dargestellt - wurde entsprechend Abb. 9.2 modelliert. Die Ausbreitung der Versagensstelle wurde folgendermaßen vorgegeben:

$$\begin{aligned} 0 \leq t \leq 17 \text{ msec} &: \epsilon(15) = 0.5 \\ 17 < t \leq 35 \text{ msec} &: \epsilon(15) = 1.0 \\ t > 35 \text{ msec} &: \epsilon(15) = 1.0, \quad \epsilon(16) = 1.0 \end{aligned}$$

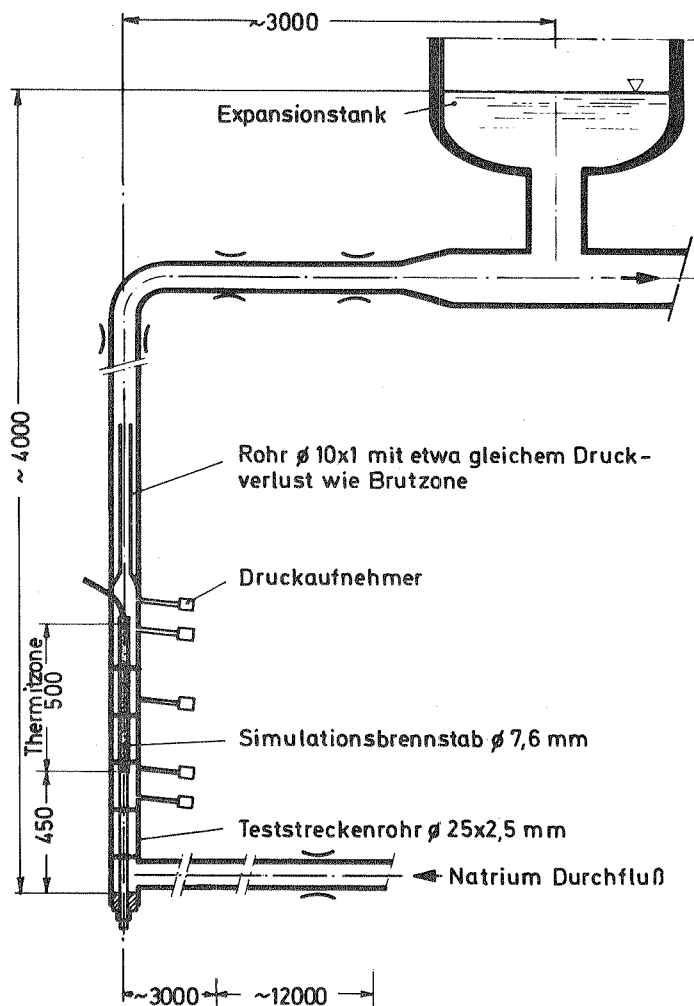


Abb. 9.1: SIMBATH-Versuch V71/2; Kreislauf (ohne Pumpe)

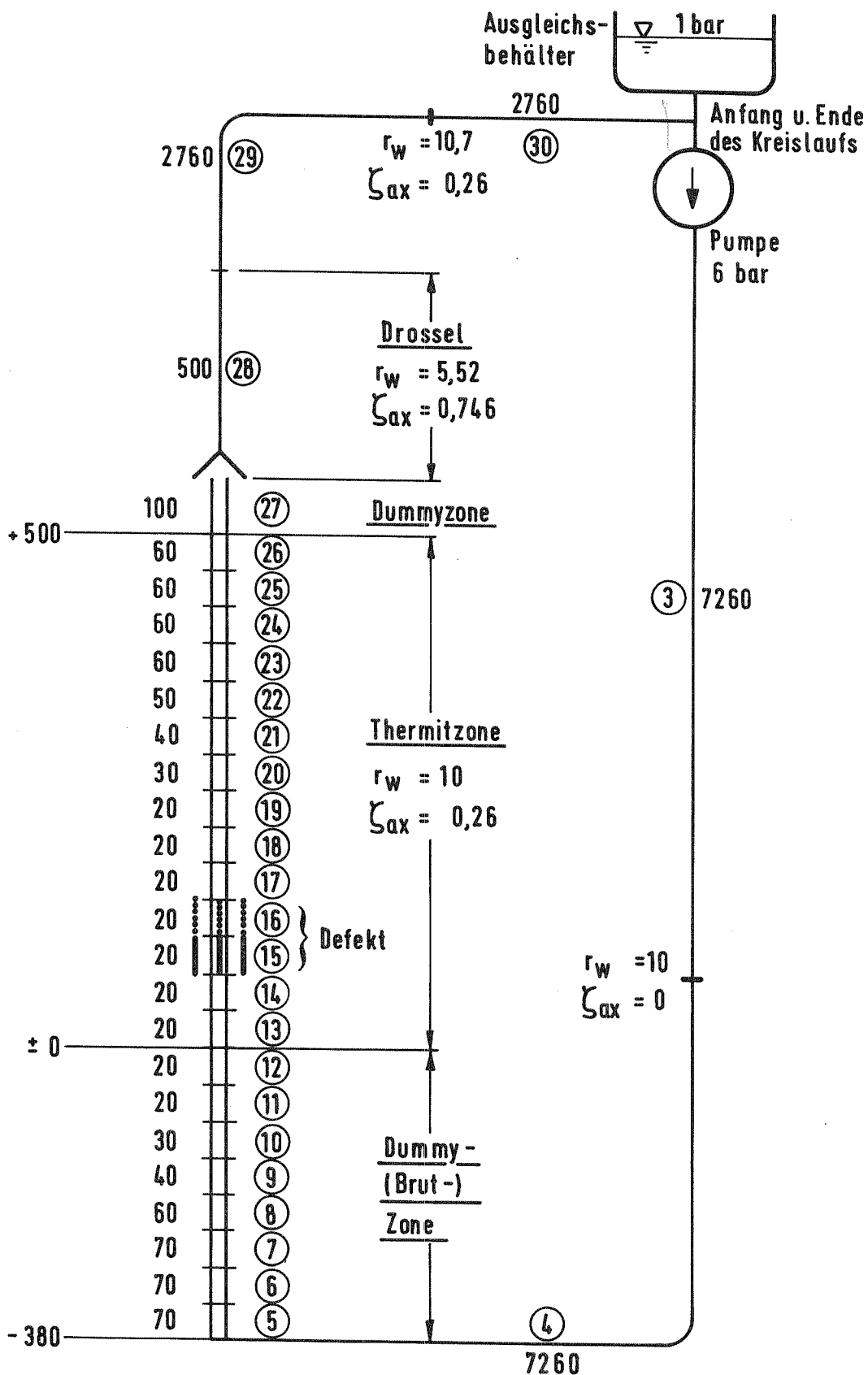


Abb. 9.2: CALIPSO-Modellierung des SIMBATH-Versuches V71/2. Für die Maschen (3) bis (30) sind jeweils die Länge Δz , der Wandradius r_w (beide in mm) und der axiale Verlustbeiwert ζ_{ax} angegeben. Die Erweiterung des Defekts von (15) auf (16) wird dem Experiment entsprechend vorgegeben

Zur realistischen Versuchsnachrechnung ist es insbesondere aufgrund der großen Kreislaufträgheit und Reibungsverluste notwendig, über den im Bericht beschriebenen Problembereich (Thermit- und Dummyzone) hinaus auch den Kreislauf mitzumodellieren. Dies geschah für die Maschen (3), (4) und (28) bis (30) durch die Vorgabe entsprechender Verlustbeiwerte und derart gewählter Radien, daß unter Berücksichtigung des im Modell auch dort (fälschlicherweise) vorhandenen Dummystabes der gleiche Strömungsquerschnitt wie im Versuch vorhanden ist.

Die Eingabedaten stammen - soweit sie nicht Abb. 9.2 zu entnehmen sind - aus dem SIMBATH-Versuchsbericht [29] und sehen entsprechend Abschnitt 8 folgendermaßen aus:

# 1 :	0	0	1					
# 2 :	1.D-7		4.D-2	4.D-2	0.D0	1.D0	0.D0	
# 3 :	1.D-6		1.D-5	1.D-5	5.D-5	5.D-4	2.D-2	
# 4 :	.1D0		.2D0					
# 5 :	1	0	0	3	0			
# 6 :	3	30	13	26	15	15	1	3
# 7 :	3.5D-3		3.8D-3		10.D-3	12.5D-3	1	0
# 8 :	.3D-3		.5D-3		.25D-3	.8D0		
# 9 :	.589D0		4.86D-3		.514D0	3520.D0	673.D0	673.D0
#10 :	.625D0		6.D5		1.D5	4.D0	0.D0	
#11 :	1.D0		1.05D1		8.D4	1.6D4		
#12 :	7.D0		3.35D1		1.7D1	.11D0	57.D0	6.5D-2
#13 :	1.32D3		7.88D2		9.2D2	2.370D3	286.8D0	1.0676D6
#14 :	2.774D5		4.025D6		2313.D0	1700.D0	2.9D-3	6.8D-5
#15 :	1.79D-4		1.93D-5		1.8D0	.5D0	.5D0	
#16 :	3.678D-10		1.D0					
#17 :	.5D0							
#18+:	7.26D0		7.26D0		7.D-2	7.D-2	7.D-2	6.D-2
	4.D-2		3.D-2		2.D-2	2.D-2	2.D-2	2.D-2
	2.D-2		2.D-2		2.D-2	2.D-2	2.D-2	3.D-2
	4.D-2		5.D-2		6.D-2	6.D-2	6.D-2	6.D-2
	1.D-1		.5D0		2.76D0	2.76D0		
#19+:	3520.D0		3520.D0		3520.D0	3520.D0	3520.D0	3520.D0
	3520.D0		3520.D0		3520.D0	3520.D0	3520.D0	3520.D0
	3520.D0		3520.D0					
#21+:	673.D0		673.D0		673.D0	673.D0	673.D0	673.D0
	673.D0		673.D0		673.D0	673.D0		
#22+:	673.D0							
#24+:	5.5172D-3		10.698D-3		10.698D-3			
#26+:	0.D0		0.D0		0.D0	.26D0	.26D0	.26D0
	.26D0		.26D0		.26D0	.26D0	.26D0	.26D0
	.26D0		.26D0		.26D0	.26D0	.26D0	.26D0
	.26D0		.26D0		.26D0	.26D0	.26D0	.26D0
	.5D0		.746D0		.26D0	.26D0	.26D0	.26D0

Folgende Programmsteuerkarten wurden benutzt:

```
① //IRE800C JOB (0800,330,P6N6Y),KEDZIUR,REGION=1024K,TIME=120,  
// NOTIFY=IRE800  
// *NET ID=IRE800C,RL=IRE8001  
// *MAIN LINES=30  
② // EXEC PGM=FORTPROC  
③ //CARDS DD DSN=IRE800.CALIPSO.DATA(MAIN),DISP=SHR  
④ // DD DSN=IRE800.CALIPSO.DATA(MASS),DISP=SHR  
⑤ // DD DSN=IRE800.CALIPSO.DATA(ENERG),DISP=SHR  
⑥ // DD DSN=IRE800.CALIPSO.DATA(MOMENT),DISP=SHR  
⑦ /*  
⑧ //FORTMAC DD DSN=IRE800.COMMON.DATA,DISP=SHR  
⑨ //OUTPUT DD DSN=&&TEMP,UNIT=SYSDA,SPACE=(TRK,50),  
// DISP=(NEW,PASS),DCB=(LRECL=80,BLKSIZE=3200,RECFM=FB)  
⑩ // EXEC FHCLG,PARM.C='NOMAP'  
⑪ //C.SYSIN DD DSN=&&TEMP,DISP=(OLD,DELETE)  
⑫ //L.LIB DD DSN=IRE800.CALIPSO.LOAD,DISP=SHR  
⑬ //L.SYSIN DD *  
INCLUDE LIB(INPUT)  
INCLUDE LIB(INIT)  
INCLUDE LIB(INPUTR)  
INCLUDE LIB(BOUNDS)  
INCLUDE LIB(EOS)  
INCLUDE LIB(HTRANS)  
INCLUDE LIB(FREEZE)  
INCLUDE LIB(DISSI)  
INCLUDE LIB(DONOR)  
INCLUDE LIB(FUNCT)  
INCLUDE LIB(PRINT0)  
INCLUDE LIB(PRINT)  
INCLUDE LIB(SAVE)  
INCLUDE LIB(SAVE0)  
INCLUDE LIB(EXIT)  
ENTRY MAIN  
⑭ //G.SYSIN DD DSN=TS0800.INPUT.DATA(V712),DISP=SHR  
⑮ //G.FT07F001 DD DSN=IRE800.CALPLOT.DATA,DISP=SHR  
⑯ //G.FT08F001 DD DSN=IRE800.CRRST8.DATA,DISP=SHR  
⑰ //G.FT09F001 DD DSN=IRE800.CRRST9.DATA,DISP=SHR  
⑱ //G.FT15F001 DD *  
0  
/*
```

Karte ① : Jobkarte (die Rechnung benötigte für 40 msec Problemzeit
29 900 Cyclen und 56 min CPU-Zeit)

Karte ② : Das Programm FORTPROC [30] fügt zu den noch nicht über-
setzten und geladenen Unterprogrammen (Karten ③ bis ⑥)
die COMMONs (Karte ⑧) hinzu und schreibt das Ergebnis
auf eine temporäre Datei (Karte ⑨).

Karte ⑩ : Der FORTRAN H-Compiler übersetzt die Routinen ③ bis ⑥ von der temporären Datei (Karte ⑪), linkt sie über File SYSIN (Karte ⑬) mit den restlichen, bereits übersetzten und geladenen Unterprogrammen von der LOAD-Datei (Karte ⑫).

Karte ⑭ : Eingabedaten über File SYSIN

Karte ⑮ : Datei für Plotdaten über File 7

Karten ⑯
und ⑰ : Dateien für Restart-Daten (alternierende Benutzung)

Karte ⑱ : KREST = 0 wird über File 15 eingelesen: Ursprungslauf (1 wäre Restart).

Die mit CALIPSO PLOT [27] erzeugten Abbildungen 9.3 bis 9.14 illustrieren die Ergebnisse der Rechnung.

Es wurden die (interessantesten) ersten 40 Millisekunden des Versuches nachgerechnet. Entsprechend einer Untersuchung über virtuelle Massen [25] wurden diese nur in radialer, nicht aber in axialer Richtung beachtet. Die vorliegende Rechnung benötigte 56 min CPU-Zeit, das sind pro Masche und Zeitschritt $5.45 \cdot 10^{-4}$ sec.

Im berechneten Zeitraum traten sowohl im Versuch als auch in der Rechnung nur unwesentliche Ausfrier- und Schmelzvorgänge auf; ein Beispiel für die ausgefrorene Oxidschicht an der Wand in der Umgebung des Defektes ist in Abb. 9.14 gegeben.

Eine vorhandene Programmversion, in der alle zeitveränderlichen Größen dem vollen Prediktor-Korrektor-Verfahren unterworfen waren, benötigte bei fast identischen Ergebnissen ca. 30 % mehr Speicherplatz und Rechenzeit. (Die hier dokumentierte Version behandelt nur die mit "*" in der Variablenliste, Abschnitt 2, bezeichneten Größen so, die anderen werden rein explizit nur im Korrektorschritt berechnet.)

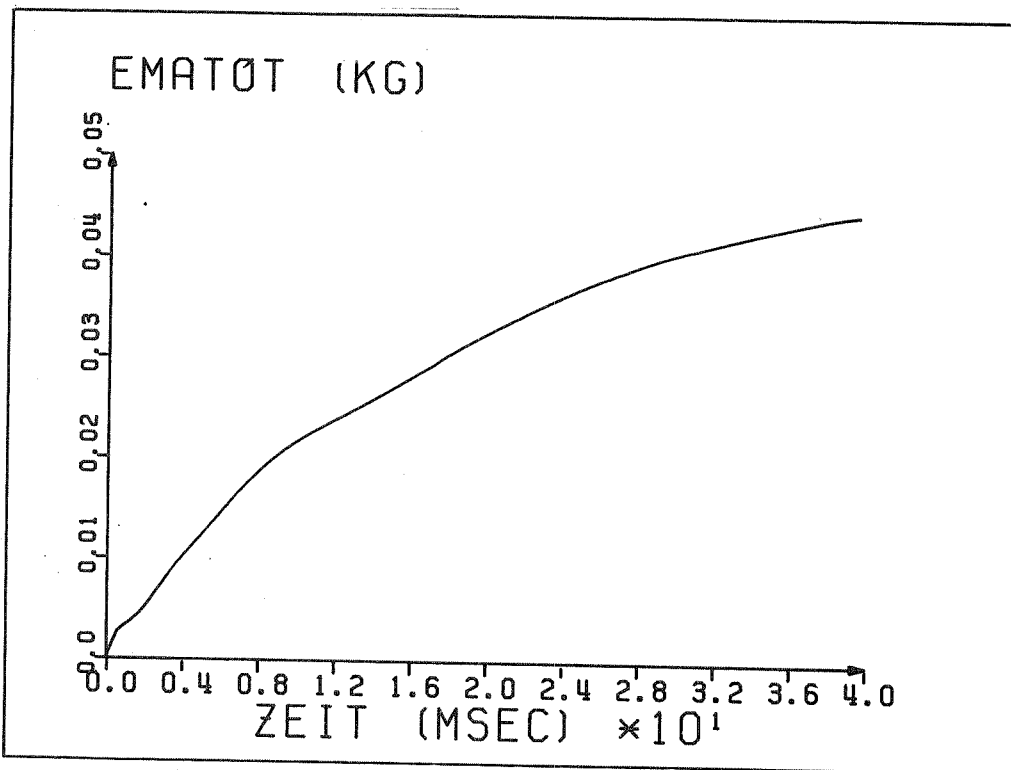


Abb. 9.3: CALIPSO-Rechnung V71/2: Gesamte, aus dem Brennstab ausgespritzte Thermitmasse über der Zeit

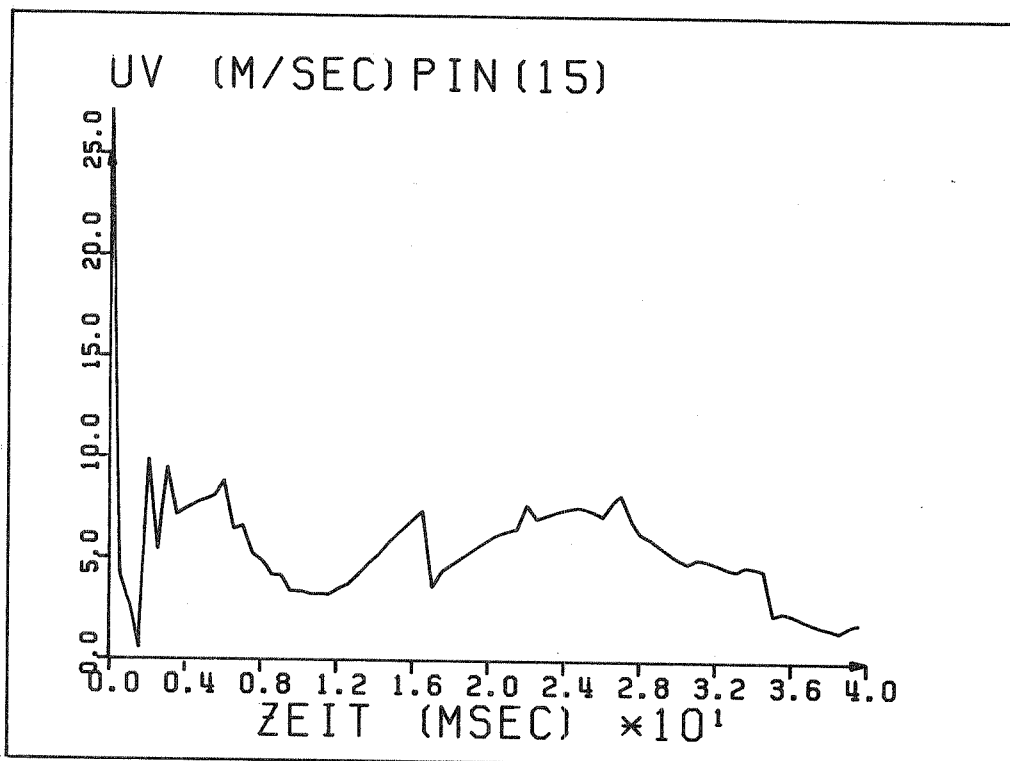


Abb. 9.4: CALIPSO-Rechnung V71/2: Radialgeschwindigkeit der leichten Phase in Defektmasche (15) (die Sprünge bei 17 bzw. 35 msec rühren von der vorgegebenen Defekterweiterung der Maschen (15) und (16) her). Die Schwingungen zu Beginn sind durch Druckoszillationen im Kühlkanal bedingt (s. Abb. 9.8)

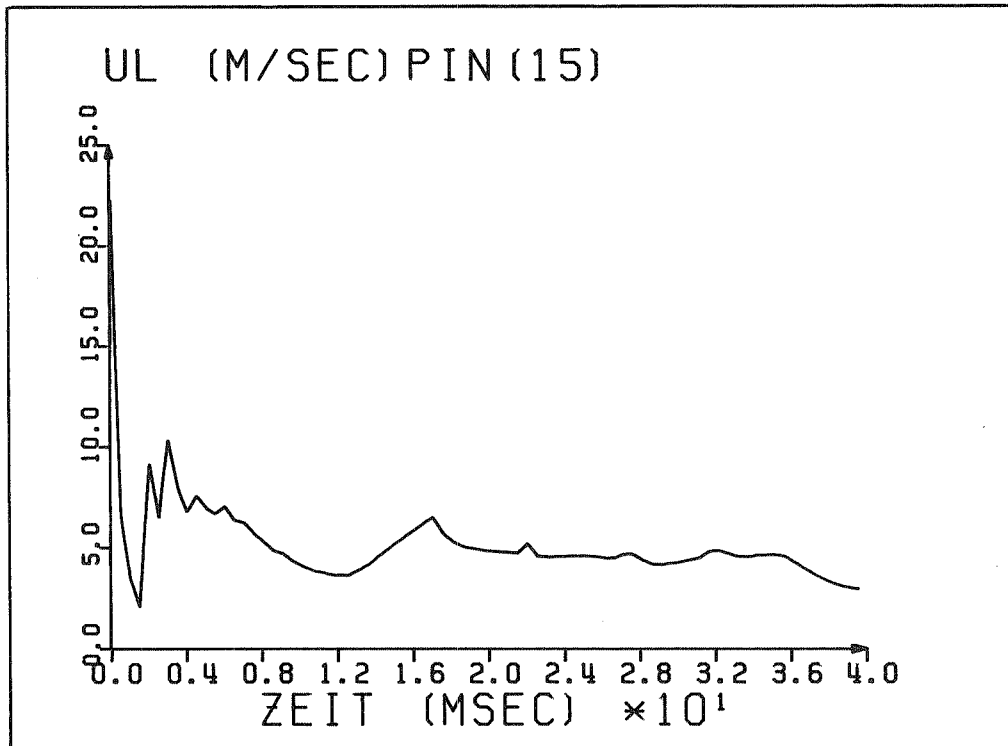


Abb. 9.5: CALIPSO-Rechnung V71/2: Radialgeschwindigkeit der schweren Phase in Defektmasche (15). Die Schwingungen zu Beginn sind durch Druckoszillationen im Kühlkanal bedingt (s. Abb. 9.8)

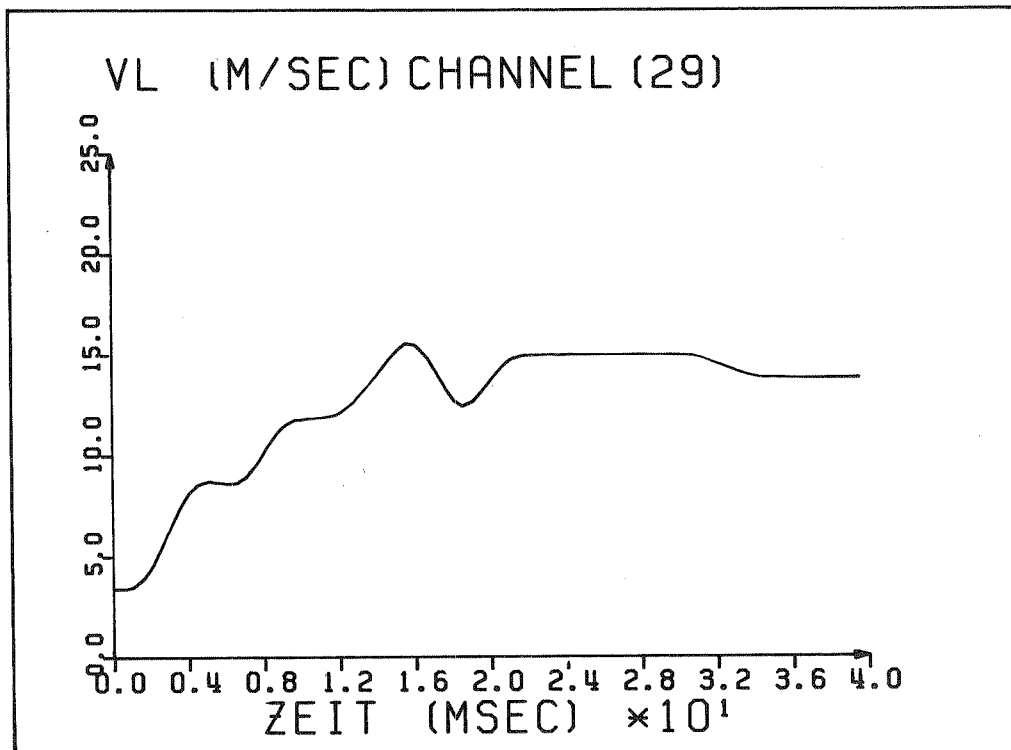


Abb. 9.6: CALIPSO-Rechnung V71/2: Axialgeschwindigkeit in der Teststrecke kurz vor dem oberen Plenum (Masche (29)) = Geschwindigkeit des Natrium-Kolbens. Die Schwingungen sind durch die im Verhältnis zur Thermitzone extrem große Maschenlänge zu erklären

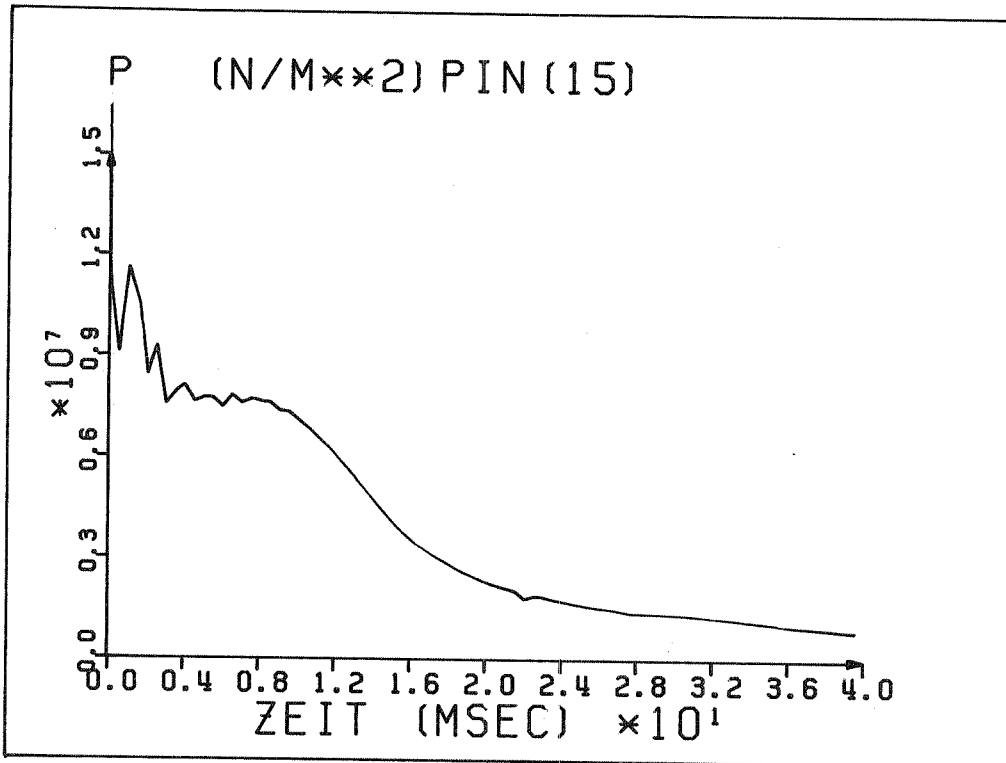


Abb. 9.7: CALIPSO-Rechnung V71/2: Druck im Brennstab an der Defekstelle (Masche 15)

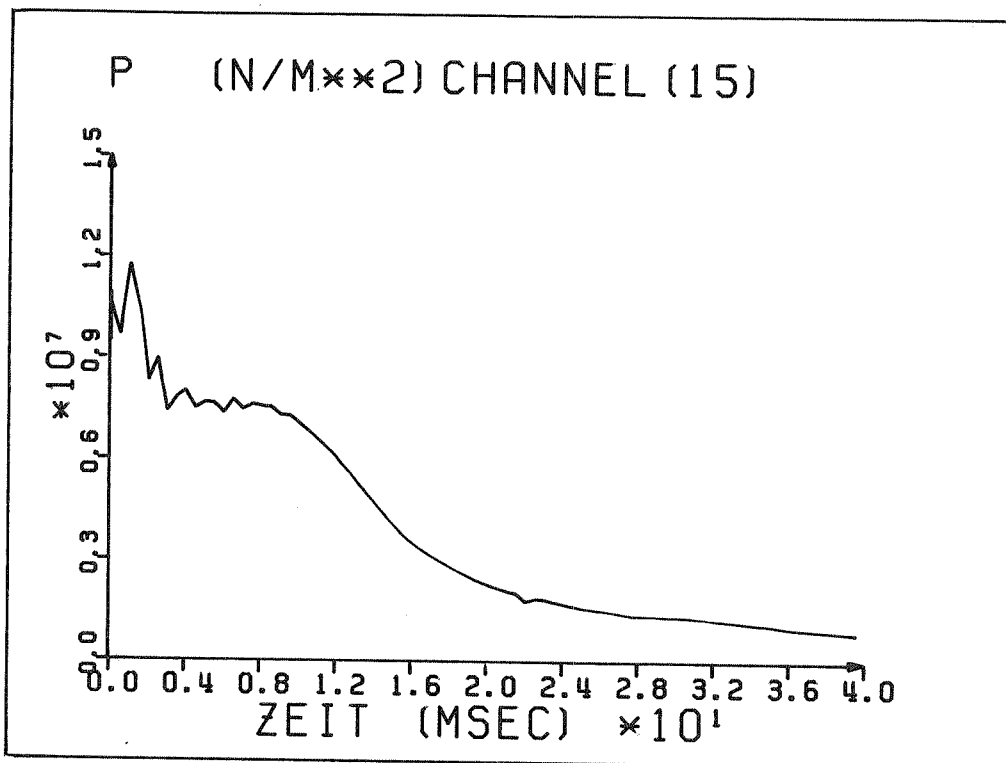


Abb. 9.8: CALIPSO-Rechnung V71/2: Druck im Kühlkanal an der Defekstelle (Masche 15). Die Oszillationen rühren von Druckreflektionen am Ende des unteren Plenums, wo ein plötzlicher Übergang zu sehr langen Kreislaufmaschen erfolgt

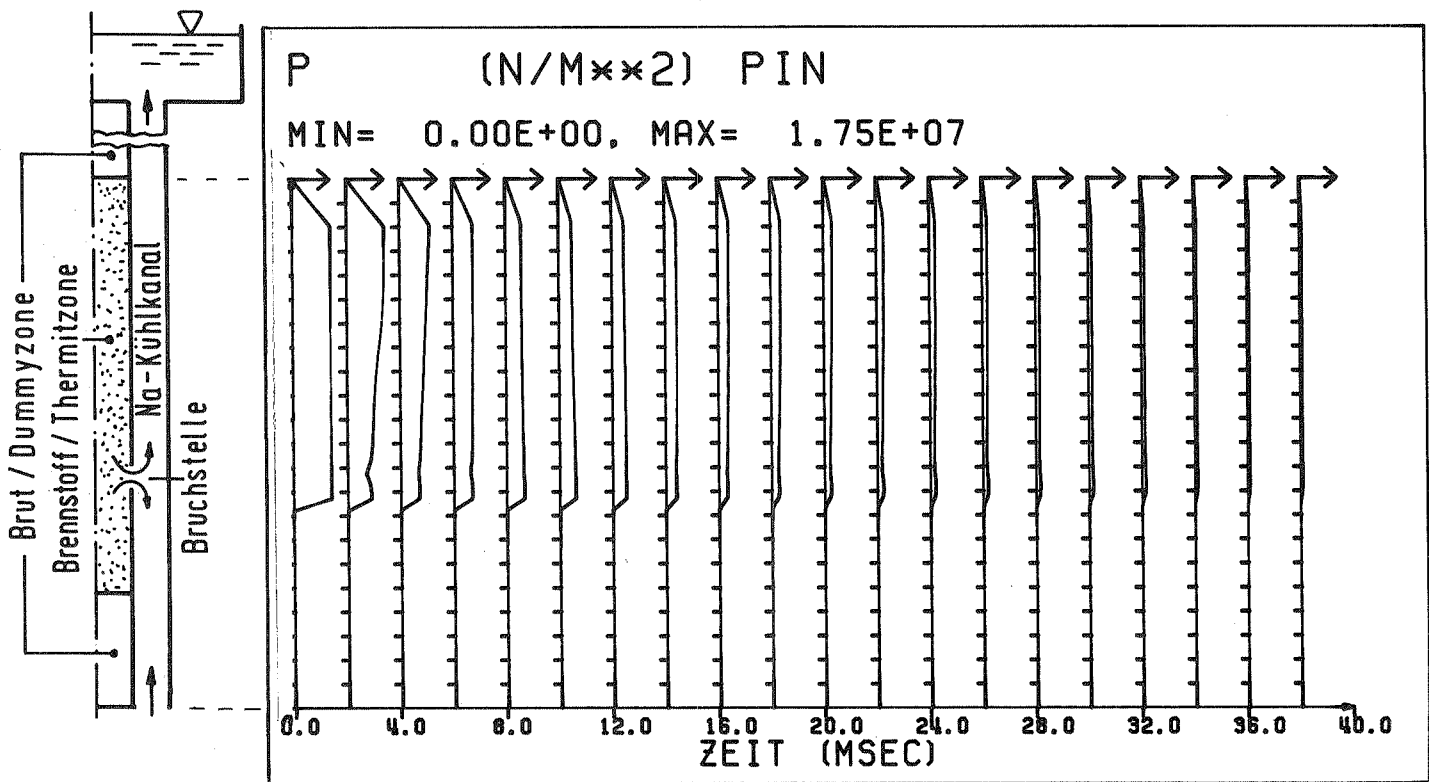


Abb. 9.9: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm vom Druck im Brennstab über der Zeit: alle 2 msec wird der Druck von Masche ⑤ bis ⑳ (s. Abb. 9.2), also über der Brennstoff- und Dummyzone, aufgetragen

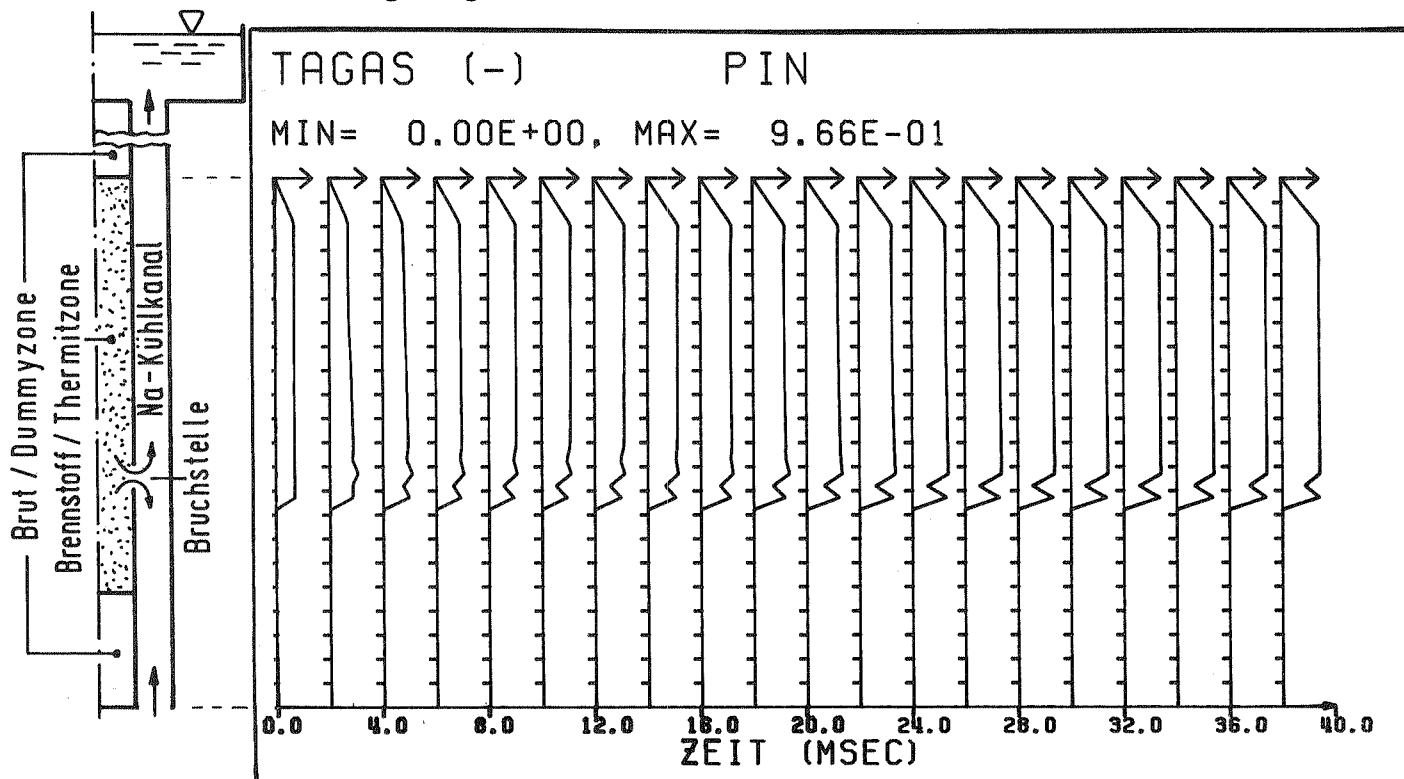


Abb. 9.10: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm vom Gasvolumenanteil im Brennstab über der Zeit: alle 2 msec wird θ_{gas} von Masche ⑤ bis ⑳ (s. Abb. 9.2), also über der Brennstoff- und Dummyzone, aufgetragen. Das "Loch" an der Defektstelle (Masche ⑮) rührt von einer dort durch den Schlupf bedingten Ansammlung von Thermit

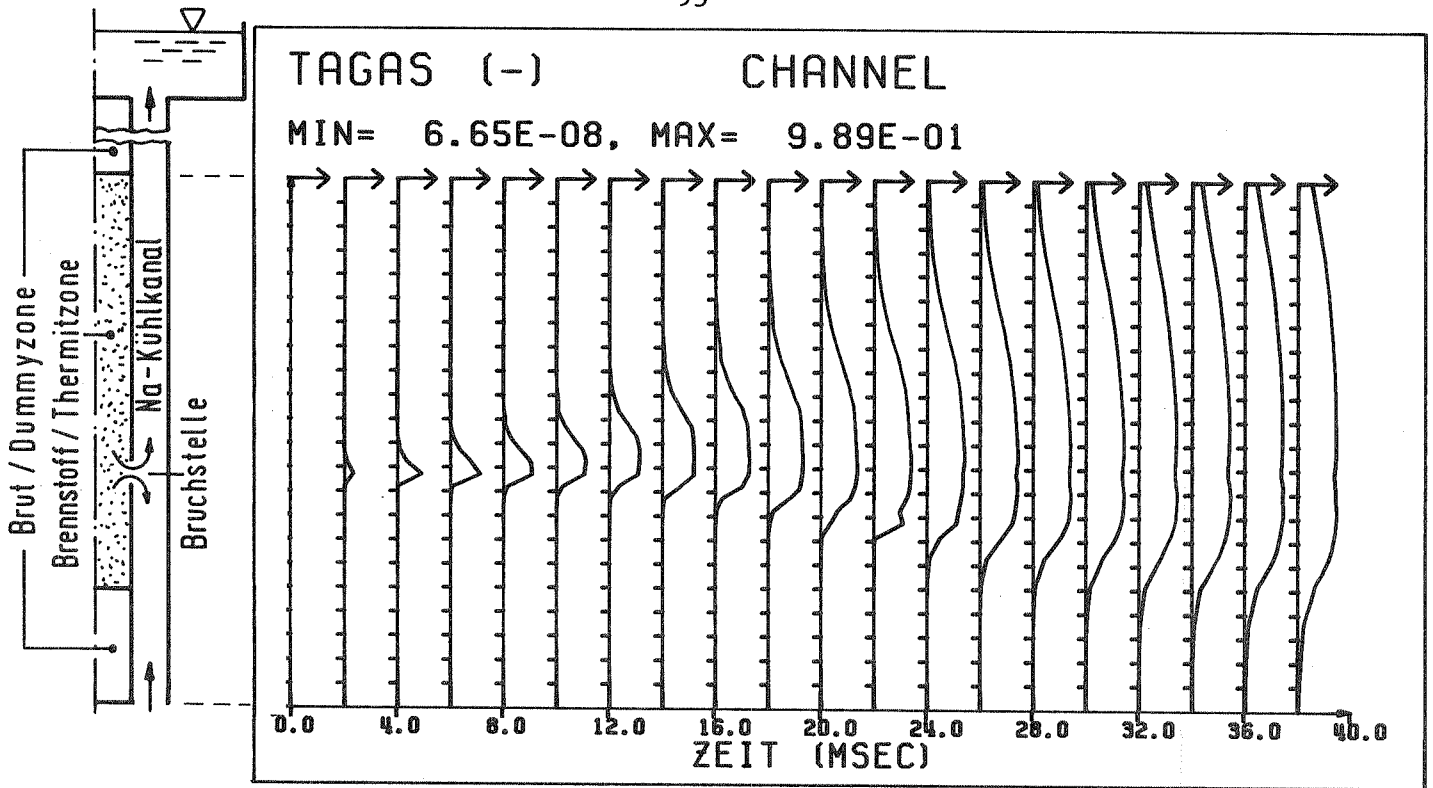


Abb. 9.11: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm vom Gasvolumenanteil im Kanal über der Zeit. Die Ausbreitung des Gasvolumens von der Leckstelle erfolgt durch die nach oben gerichtete Anfangsgeschwindigkeit überwiegend zum oberen Plenum hin

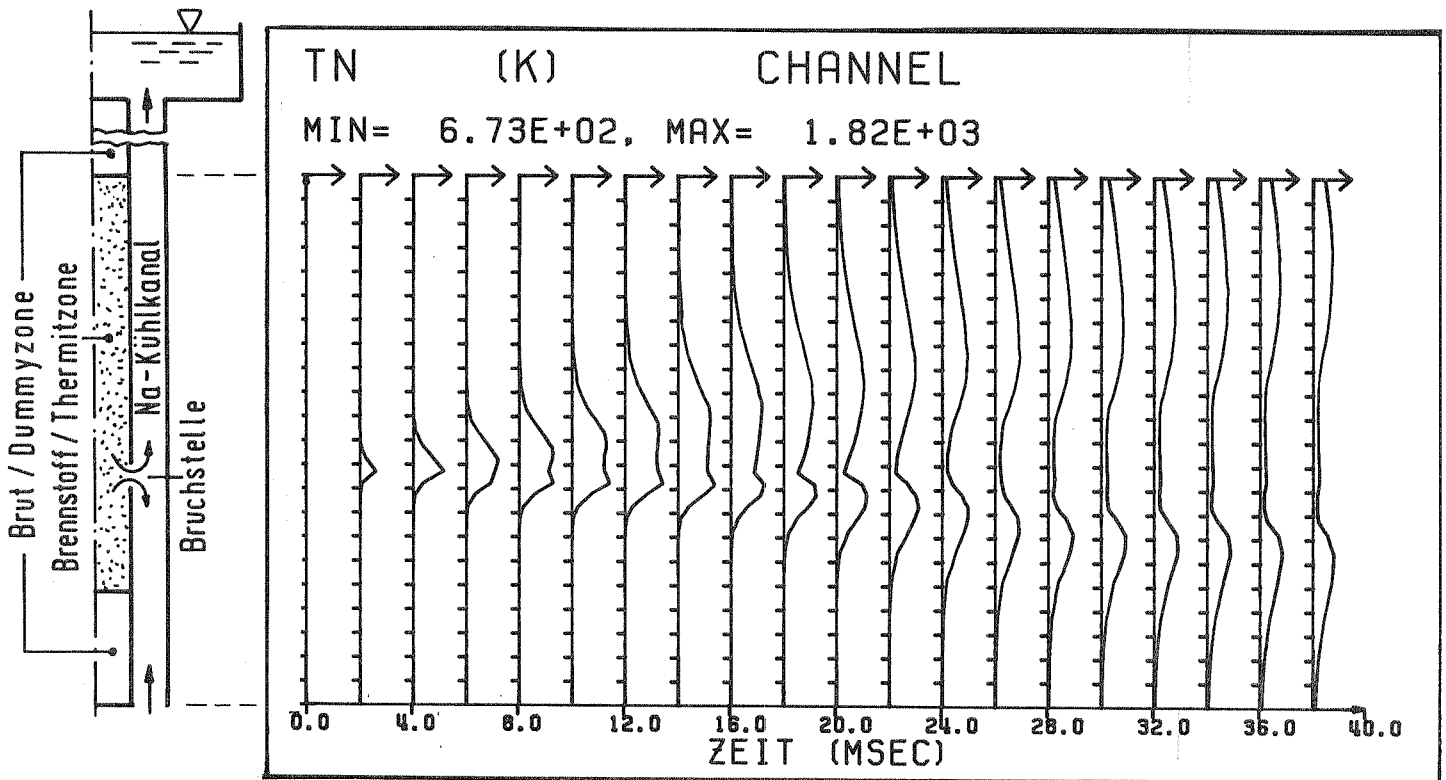


Abb. 9.12: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm der Natrium-Temperatur im Kanal über der Zeit. Die Erwärmung des Natriums erfolgt zum Teil durch die Hülle, überwiegend jedoch durch das ausgetretene Thermit. Es kühlt an der kalten Wand wieder ab, wenn die Nachfuhr heißen Thermits stagniert

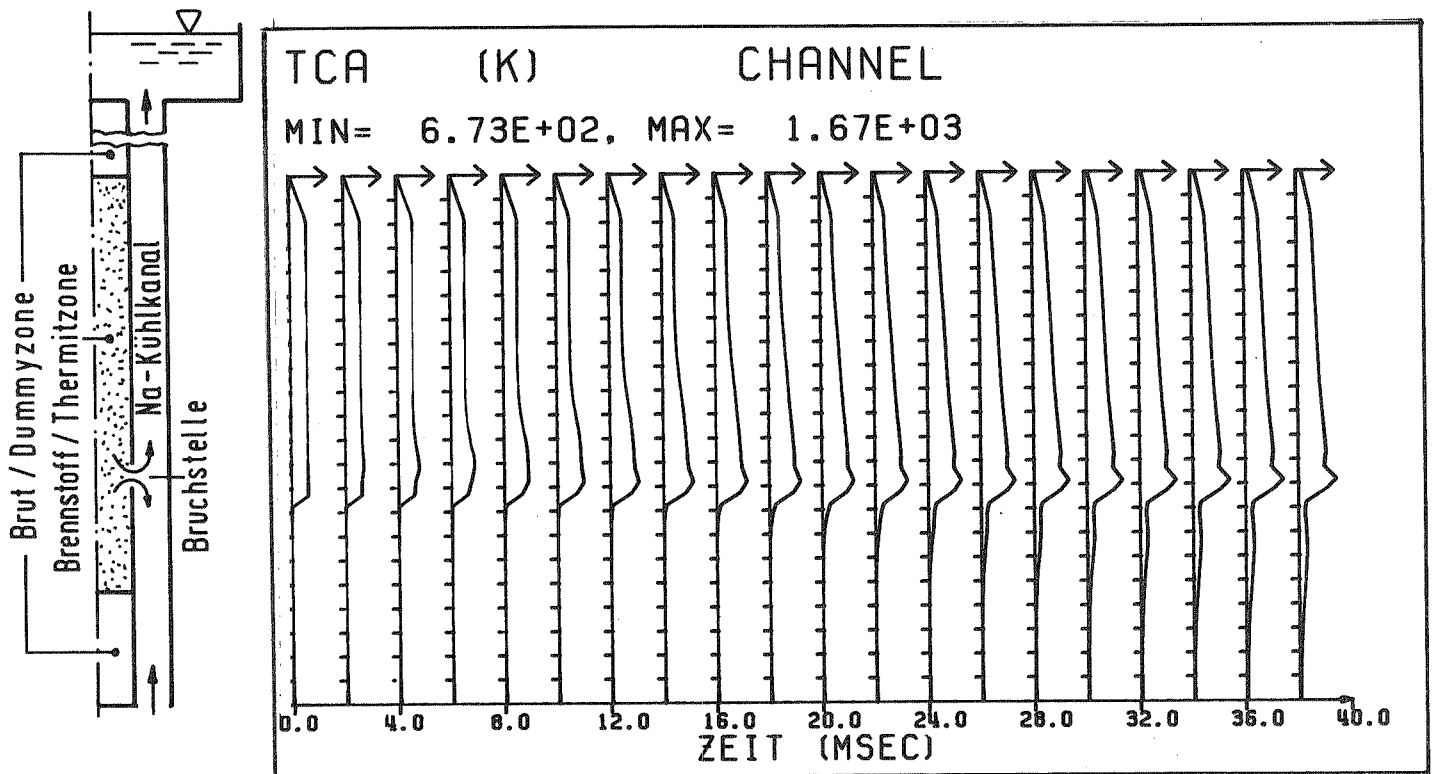


Abb. 9.13: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm der äußeren Hülltemperatur über der Zeit. Die stärkere Erwärmung unterhalb des Defektes ist auf die dort vorliegende, hohe Konzentration heißen Thermit's sowohl innen als auch außen zurückzuführen.

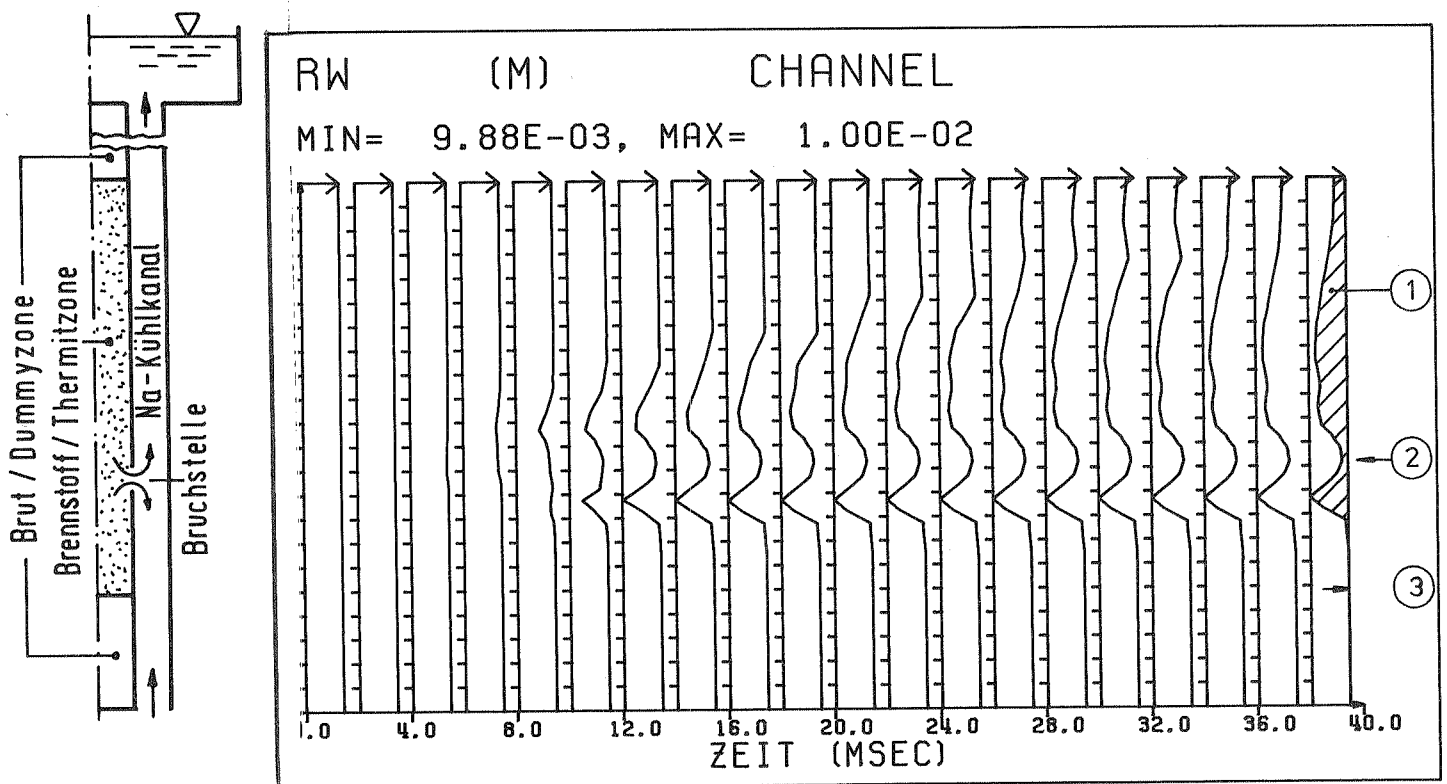


Abb. 9.14: CALIPSO-Rechnung V71/2: Multigramm des Innenradius der Kanalwand über der Zeit. Die Verteilung der hier ausgefrorenen Schicht zeigt beim Defekt ein relatives Minimum und aufgrund der von unten nach oben überlagerten Natriumströmung eine unsymmetrische axiale Verteilung. ①: ausgefrorene Oxid- und Stahlschicht; ②: Position gegenüber Versagensstelle; ③: ursprünglicher Radius r_w der Wand.

10. MÖGLICHKEITEN DER WEITERENTWICKLUNG

Die hier dokumentierte CALIPSO-Version gestattet die Nachrechnung von Einstab-Thermit-Versuchen in einem Natrium-Kühlkanal einschließlich der Berücksichtigung des angeschlossenen Kreislaufes.

Ohne die bereits in der Einleitung erwähnten Vorteile zu wiederholen, sei in diesem Zusammenhang auf bestehende Einschränkungen hingewiesen:

- Nachrechnung eines einzelnen Stabes
- Annahme, daß Thermit bei Stabversagen vollkommen schmelzflüssig vorliegt
- Annahme, daß die Phasen und Komponenten homogen über den Strömungsquerschnitt verteilt sind
- Brennstabdefekt-Erweiterung nur durch Schmelzen oder durch Vorgabe.

Diese Einschränkungen in Verbindung mit der in der Einleitung dargelegten Strategie beim Einsatz von CALIPSO lassen folgende Entwicklungen

- aufbauend auf der hier dokumentierten Version - als sinnvoll erscheinen:

- Mit der Bereitstellung dreier Geschwindigkeitsfelder (3 Impulsgleichungen) für Thermit/Brennstoff, Natrium flüssig und die Gasphase ist die Grundlage geschaffen, verschiedene nichthomogene Strömungsformen zu modellieren. So können beispielsweise in manchen Versuchen eine Natrium- bzw. Thermit-Ringströmung beobachtet werden. Außer in den unveröffentlichten PLUTO2/LEVITATE-Codes [31] ist nach Kenntnis des Autors noch kein entsprechender Ansatz gemacht worden.
- Auch Mehrstabbindel sollten mit CALIPSO nachrechenbar sein. Bei diesem Problem muß die Wand des Kühlkanals durch geeignete Randbedingungen ersetzt werden, die den Einfluß der Nachbarstäbe wiedergeben. Offen ist hierbei - ähnlich wie beim Stabversagen - die Frage der statistischen örtlichen Verteilung, mit der die Defekte auftreten.
- Aus diesem Grund und unter Beachtung der Tatsache, daß das Hüllversagen bei den gegebenen Temperatur- und Druckverhältnissen außerordentlich komplex ist, besteht wenig Hoffnung, ein Versagensmodell

zu erstellen. Vielmehr sollte die Strategie verfolgt werden, durch Variation der Versagensparameter (bei zukünftigen Vorausrechnungen für den Reaktor) den "schlimmsten" Fall zu isolieren.

- Die notwendige Umstellung von Thermit auf UO_2 -Brennstoff ist nicht nur eine Frage geänderter Materialdaten, sondern vor allem spielt die Brennstoffdynamik im Brennstab bei Stabversagen eine wesentliche Rolle. Auch hier handelt es sich um sehr komplexe Vorgänge, und es erscheint eine Kopplung mit anderen, in Entwicklung befindlichen Rechenprogrammen [32] sinnvoll.
- Der letzte Schritt der Entwicklung wäre die Integration von CALIPSO in einen Systemcode, wie z.B. SAS [6], der den gesamten Störfall berechnet.

Selbstverständlich sollte jede Entwicklungsstufe gesondert an geeigneten Experimenten überprüft werden.

11. LITERATUR

- [1_] Kuczera, B. et al.: The CABRI Experimental Programme. Reaktor-tagung Düsseldorf, 1976
- [2_] Dickermann, C.E. et al.: Status and Summary of TREAT In Pile Experiments on LMFBR Response to Hypothetical Core Disruptive Accidents. ASME Symp. on the Thermal and Hydraulic Aspects of Nuclear Reactor Safety, Vol. 2, pp. 19-50, Atlanta, Nov. 1977
- [3_] Menzenhauer, P., Peppler, W., Struwe, D., Will, H.: Out of Pile Simulation of Mild TOP's; Development of Pin Failure, Material Movement and Relocation in Bundle Geometry. International Meeting on Fast Reactor Safety Technology, Seattle, August 1979
- [4_] Menzenhauer, P., Misu, St., Peppler, W., Will, H.: Simulation of Mild TOP Accidents in Fast Breeder Reactor using Thermite Filled Fuel Rod Simulators. Fuel Rod Simulator (FRS) Symposium, Gatlinburg, USA, Oct. 1980
- [5_] Will, H., Menzenhauer, P., Peppler, W.: Investigation of Material Movement within Steel Test Sections by Means of High Speed X-Ray Photography. Conf. on Cine Radiography with Photons or Particles, Paris, May 1981
- [6_] Calahan, J.E., Ferguson, D.R. et al.: A Preliminary User's Guide to Version 1.0 of the SAS3D Accident Analysis Computer Code. ANL-SR 239831, July 1977
- [7_] Pizzica, P.A. et al.: A User's Guide to EPIC, a Computer Program to Calculate the Motion of Fuel and Coolant Subsequent to Pin Failure in a LMFBR. ANL-80-47, Oct. 1979
- [8_] Shimegi, N.: EULFCI Code: Numerical Method for Coolant Dynamics in one Dimension. J. of Nucl. Sci. & Technology 16, p. 869, Dec. 1979

- [9] Smidt, D.: Reaktortechnik I u. II. G. Braun, Karlsruhe, 1971
- [10] Prandtl, L.: Strömungslehre. Vieweg-Verlag, 1965
- [11] Soo, S.L.: Equations of Multiphase Multidomain Mechanics.
in: Multiphase Transport, Vol. 1, Mc Graw Hill, 1981
- [12] Schumann, U: Virtual Density and Speed of Sound in a Fluid-Solid Mixture with Periodic Structure. Int. J. Multiphase Flow 7, No. 6, p. 619, 1981
- [13] Lahey, R.T. et al.: The Effect of Virtual Mass on the Numerical Stability of Accelerating Two-Phase Flows. Int. J. Multiphase Flow 6, p. 281, 1980
- [14] Drew, D. et al.: The Analysis of Virtual Mass Effects in Two-Phase Flow. Int. J. Multiphase Flow 5, p. 233, 1979
- [15] Dubbel: Taschenbuch für den Maschinenbau, Bd. 1, Springer-Verlag, 1970
- [16] Schuster, R. Zimmerer, W.: Darstellung der Stoffdaten des Systems MAPLIB in tabellarischer und graphischer Form. KfK-Ext. 8/77-1, 1977
- [17] Touloukian, Y.S.: Thermophysical Properties of High Temperature Solid Materials. Mc Millan, New York, 1967
- [18] Barin, I., Knacke, O.: Thermochemical Properties of Inorganic Substances. Springer, 1973
- [19] Rivard, W.C., Torrey, M.D.: K-Fix: A Computer Program for Transient, Two-Dimensional, Two-Fluid Flow. LA-NUREG-6623, April 1977
- [20] Hirt, C.W., Romero, N.C.: Application of a Drift-Flux Model to Flashing in Straight Pipes. Los Alamos, Report LA-6005-MS, 1975
- [21] Mösinger, H.: Zweidimensionale numerische Experimente zur instationären Zweiphasen-Wasser-Strömung am Beispiel der HDR-Blowdownversuche mit DRIX-2D. KfK 2853, 1979

- [22] Huhn, J., Wolf, J.: Zweiphasenströmung. VEB Fachbuchverlag Leipzig, 1975
- [23] Cho, D.H. et al.: Pressure Generation under LMFBR Accident Conditions. Conf. New Developments in Reactor Mathematics and Applications, Idaho Falls, March 1971
- [24] Schlünder, E.U.: Einführung in die Wärme- und Stoffübertragung. Vieweg Verlag, 1975
- [25] Kedziur, F.: Untersuchungen zu virtuellen Massen in CALIPSO (unveröffentlicht), 1982
- [26] Enderle, G.: FLUST-2D - Ein Programm zur Berechnung der zweidimensionalen Strömung eines kompressiblen Mediums in aneinandergekoppelten Rechteckbereichen. KfK 2679, 1979
- [27] Bechler, K.H.: CALIPSO PLOT - ein REGENT-Subsystem zur graphischen Darstellung von Daten aus CALIPSO-Rechnungen als Diagramme und Multigramme. (unveröffentlicht), Sept. 1981
- [28] Menzenhauer, P. et al.: Simulationsexperimente in Brennelementattrappen mit Thermit, SIMBATH. Einzelstabexperimente in Natrium. (unveröffentlicht), Juli 1981
- [29] Misu, S.: Simulationsexperimente in Brennelementattrappen mit Thermit, SIMBATH. Der Versuch V71/2, Referenzfall für die Nachrechnung mit CALIPSO. (unveröffentlicht), Jan. 1982
- [30] Sauter, S.: FORTPROC, Programmbeschreibung Nr. 332, Abteilung Datenverarbeitung und Instrumentierung, KfK, 1975
- [31] Wider, H.U.: PLUTO 2: A Computer Code for the Analysis of Overpower Accidents in LMFBRs. Trans. Am. Nucl. Soc. 27, p. 533, 1977
- [32] Lassmann, K.: Stand und Problematik der Brennstab-Strukturanalyse. KfK 2875, Feb. 1980

- [33] Reed, W.H., Stewart, H.B.: THERMIT: A Computer Program for Three-dimensional Thermal-hydraulic Analysis of Light-Water Reactor Cores. Electric Power Research Institute, Palo Alto, Calif., 1980
- [34] Agee, L.J.: Multi-fluid Models for Transient Two-Phase Flow. Electric Power Research Institute, Palo Alto, Calif., 1978
- [35] Thompson, P.A.: Compressible Fluid Dynamics. Mc Graw Hill, 1972
- [36] Köberlein, K.: Die verzögerte Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts als Grundlage eines Rechenmodells für die Druckwellenausbreitung in der Zweiphasenströmung von Wasser. Techn. Universität München, MRR 106, April 1972

ANHANG A1: Zur Energiegleichung

In der Literatur findet man eine Vielzahl unterschiedlicher Ansätze für die Energiegleichungen der Flüssig- und Dampfphase in einer Zweiphasenströmung [19,21,33,34,35,36,7]. Je nach Problem werden verschiedene Terme vernachlässigt, ohne daß dies stets begründet oder kommentiert würde. Für die Energieerhaltung kommt hinzu, daß es prinzipiell gleichwertig ist, die innere Energie, die Enthalpie oder die Gesamtenergie (= innere Energie + kinetische Energie) zu erhalten, wenn die lokalen Bilanzgleichungen für Masse und Impuls als erfüllt betrachtet werden.

Um vor diesem Hintergrund die in CALIPSO verwendeten Gleichungen zur Erhaltung der inneren Energie etwas zu durchleuchten, werden im folgenden für zwei Phasen ① und ② - eindimensional - aus der Erhaltung der inneren Energie und der modifizierten Impulsgleichung (= Erhaltung der kinetischen Energie) die Gleichungen für die Gesamtenergie erstellt.

Festlegung: Geschwindigkeit u , Ortskoordinate x sind positiv, wenn nach oben gerichtet, Gravitation g und Reibkraft f_{vis} entgegengesetzt.

α : Wärmeaufteilungsfaktor für Zwischenphasenreibungswärme \dot{Q}_{ZR} : ① - ②

$\dot{\Gamma}_{12}$: Phasenübergang von ① \rightarrow ② (entsprechend $\dot{\Gamma}_{21}$)

δ : Wärmeaufteilungsfaktor für Reibungswärme vom Phasenübergang \dot{Q}_r : ① - ②

γ : Impulsaufteilungsfaktor für Wandreibung; entstehende Wärme \dot{Q}_{WR} : ① - ②

ϵ : Wärmeaufteilungsfaktor für gesamte Reibung:
Fluid-Wand

a) Impulsgleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2) = -\theta \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_1 g + (\dot{\Gamma}_{21} u_2 - \dot{\Gamma}_{12} u_1) - K(u_1 - u_2) - \gamma f_{vis} \quad (A1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 u_2^2) = -(1-\theta) \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_2 g - (\dot{\Gamma}_{21} u_2 - \dot{\Gamma}_{12} u_1) + K(u_1 - u_2) - (1-\gamma) f_{vis} \quad (A2)$$

(A1)*u₁: Gleichung für kinetische Energie

linke Seite ausdifferenziert mit Kontinuitätsgleichung:

$$u_1 \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 u_1) + u_1 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 u_1^2 / 2) + \frac{\partial}{\partial x} (u_1 \rho_1 u_1^2 / 2) + \frac{1}{2} (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) u_1^2$$

⇒

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 \frac{u_1^2}{2}) + \frac{\partial}{\partial x} (u_1 \rho_1 \frac{u_1^2}{2}) = & -u_1 \theta \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_1 u_1 g + \underbrace{(\dot{\Gamma}_{21} u_2 - \dot{\Gamma}_{12} u_1) u_1 - \frac{1}{2} (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) u_1^2}_{-\dot{\Gamma}_{12} \frac{u_1^2}{2} + \dot{\Gamma}_{21} (u_1 u_2 - \frac{u_1^2}{2})} - K(u_1 - u_2) u_1 - \gamma u_1 f_{vis} \end{aligned} \quad (A1')$$

(A2)*u₂ entsprechend:

$$-\dot{\Gamma}_{21} \frac{u_2^2}{2} + \dot{\Gamma}_{12} (u_1 u_2 - \frac{u_2^2}{2}) \quad (A2')$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 \frac{u_2^2}{2}) + \frac{\partial}{\partial x} (u_2 \rho_2 \frac{u_2^2}{2}) = -u_2 (1-\theta) \frac{\partial p}{\partial x} - \rho_2 u_2 g - \underbrace{(\dot{\Gamma}_{21} u_2 - \dot{\Gamma}_{12} u_1) u_2 + \frac{1}{2} (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) u_2^2}_{\Sigma = -\dot{Q}_\Gamma} + K(u_1 - u_2) u_2 - (1-\gamma) u_2 f_{vis}$$

$\Sigma = -\dot{Q}_\Gamma$

$\Sigma = -\dot{Q}_{ZR}$

$\Sigma = -\dot{Q}_{WR}$

b) Erhaltung der inneren Energien:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 e_1) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{p \cdot \theta}{\rho_1} \right) \right] = \theta \mu_1 \frac{\partial p}{\partial x} - p \frac{\partial \theta}{\partial t} - \underbrace{\dot{Q}_{12}}_{\text{WL zw. ① u. ②}} + \underbrace{(\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1}_{\text{WÜ durch Phasenwechsel}}$$

$$+ \underbrace{\left[(1-\sigma_2) \dot{\Gamma}_{12} + \sigma_1 \dot{\Gamma}_{21} \right] \cdot \frac{1}{2} (u_1 - u_2)^2}_{\text{Reibungswärme durch Phasenwechsel}} + \underbrace{\alpha K (u_1 - u_2)^2}_{\text{Zwischenphasenreibung}} + \underbrace{\epsilon \gamma f_{vis} \cdot \mu_1}_{\text{Wandreibung}} + \dot{Q}_{ext1} \quad (A3)$$

Reibungswärme durch Phasenwechsel Zwischenphasenreibung Wandreibung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 e_2) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_2 u_2 \left(e_2 + \frac{p(1-\theta)}{\rho_2} \right) \right] = (1-\theta) \mu_2 \frac{\partial p}{\partial x} - p \frac{\partial (1-\theta)}{\partial t} + \dot{Q}_{12} - \underbrace{(\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1}_{h_2 + v_{21}}$$

$$+ \underbrace{\left[\sigma_2 \dot{\Gamma}_{12} + (1-\sigma_1) \dot{\Gamma}_{21} \right] \cdot \frac{1}{2} (u_1 - u_2)^2}_{\Sigma = \dot{Q}_\Gamma} + \underbrace{(1-\alpha) K (u_1 - u_2)^2}_{\Sigma = \dot{Q}_{ZR}} + \underbrace{\epsilon (1-\gamma) f_{vis} \cdot \mu_2}_{\Sigma = \dot{Q}_{WR}} + \underbrace{\dot{Q}_{ext2}}_{\Sigma = \dot{Q}_{ext}} \quad (A4)$$

Bei Addition von (A1') und (A2') bzw. (A3) und (A4) fällt auf, daß sämtliche Reibleistungen

$$\begin{aligned} \dot{Q}_\Gamma &= (\dot{\Gamma}_{12} + \dot{\Gamma}_{21}) 1/2 (u_1 - u_2)^2 \\ \dot{Q}_{ZR} &= K (u_1 - u_2)^2 \\ \dot{Q}_{WR} &= \epsilon \{ \gamma u_1 + (1-\gamma) u_2 \} f_{vis} \end{aligned}$$

eine Umwandlung von kinetischer in thermische Energie darstellen.

Erhaltung der Gesamt-Energie:

(A1') + (A3):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{p\theta}{\rho_1} + \frac{u_1^2}{2} \right) \right] = \dot{Q}_{ext_1} - p \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho_1 u_1 g - \dot{Q}_{12} + (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1$$

(A5)

$$\boxed{-\dot{\Gamma}_{12} \frac{u_1^2}{2} + \dot{\Gamma}_{21} (u_1 u_2 - \frac{u_1^2}{2}) + [(1-\sigma_2)\dot{\Gamma}_{12} + \sigma_1 \dot{\Gamma}_{21}] \cdot \frac{1}{2} (u_1 - u_2)^2} + \boxed{K(u_1 - u_2) [\alpha(u_1 - u_2) - u_1]} + \boxed{(\epsilon-1)\gamma u_1 f_{vis}}$$

Phasenwechsel-Term

Zwischenphasen-
reibungsterm

Wandrei-
bungsterm

(A2') + (A4):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_2 \left(e_2 + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_2 u_2 \left(e_2 + \frac{p(1-\theta)}{\rho_2} + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] = \dot{Q}_{ext_2} - p \frac{\partial(1-\theta)}{\partial t} - \rho_2 u_2 g + \dot{Q}_{12} - (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1$$

$$\boxed{-\dot{\Gamma}_{21} \frac{u_2^2}{2} + \dot{\Gamma}_{12} (u_1 u_2 - \frac{u_2^2}{2}) + [\sigma_2 \dot{\Gamma}_{12} + (1-\sigma_1)\dot{\Gamma}_{21}] \cdot \frac{1}{2} (u_1 - u_2)^2} + \boxed{K(u_1 - u_2) [(1-\alpha)(u_1 - u_2) + u_2]} + \boxed{(\epsilon-1)(1-\gamma) u_2 f_{vis}}$$

(A6)

(A5) + (A6): Erhaltung der Gesamtenergie für das Gemisch:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + \rho_2 \left(e_2 + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{p\theta}{\rho_1} + \frac{u_1^2}{2} \right) + \rho_2 u_2 \left(e_2 + \frac{p(1-\theta)}{\rho_2} + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] =$$

$$= - (\rho_1 u_1 + \rho_2 u_2) g + \boxed{(\epsilon-1) f_{vis} [\gamma u_1 + (1-\gamma) u_2]}$$

(A7)

Folgende Annahmen werden für $\varepsilon, \alpha, \delta_1, \delta_2$ und γ gemacht:

$\alpha=0$: die Zwischenphasenreibungswärme wird proportional zum Volumenanteil aufgeteilt

$\delta_{1,2}=1$: die Reibungswärme bei $\dot{\Gamma}_{12}$ wird in ② frei und umkehrt, danach Wärmeübergang zwischen den Phasen

$\gamma=0$: (entsprechend α)

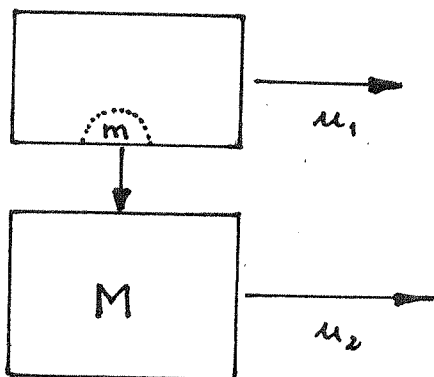
$\varepsilon=1$: die gesamte Reibungswärme bleibt zunächst im Fluid (dann getrennt Wärmeübergang zur Wand)

Damit aus (A5) und (A6):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{p\theta}{\rho_1} + \frac{u_1^2}{2} \right) \right] = -p \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho_1 u_1 g - \dot{Q}_{12} + (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1 + \dot{\Gamma}_{21} \frac{u_2^2}{2} - \dot{\Gamma}_{12} \frac{u_1^2}{2} + K(u_1 - u_2) \left[\theta(u_1 - u_2) - u_1 \right] + \dot{Q}_{ext1} \quad (A5')$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_2 \left(e_2 + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_2 u_2 \left(e_2 + \frac{p(1-\theta)}{\rho_2} + \frac{u_2^2}{2} \right) \right] = -p \frac{\partial(1-\theta)}{\partial t} - \rho_2 u_2 g + \dot{Q}_{12} - (\dot{\Gamma}_{21} - \dot{\Gamma}_{12}) h_1 - \dot{\Gamma}_{21} \frac{u_2^2}{2} + \dot{\Gamma}_{12} \frac{u_1^2}{2} + K(u_1 - u_2) \left[(1-\theta)(u_1 - u_2) + u_2 \right] + \dot{Q}_{ext2} \quad (A6')$$

Wieviel Reibungswärme wird beim Phasenübergang frei?



- völliger Ausgleich der Geschwindigkeiten
- Rechnung wie unelastischer Stoß

Impulssatz:

$$m \cdot u_1 + M u_2 = (m+M) u_2' \quad \Rightarrow \quad u_2' = \frac{m u_1 + M u_2}{m+M}$$

Die Differenz der kinetischen Energien vorher und nachher ist gleich der erzeugten Wärme:

$$\frac{1}{2} (M+m) u_2'^2 - \frac{1}{2} m u_1^2 - \frac{1}{2} M u_2^2 + W = 0$$

$$\frac{1}{2} (M+m) \frac{(m u_1 + M u_2)^2}{(m+M)^2} - \frac{1}{2} m u_1^2 - \frac{1}{2} M u_2^2 + W = 0$$

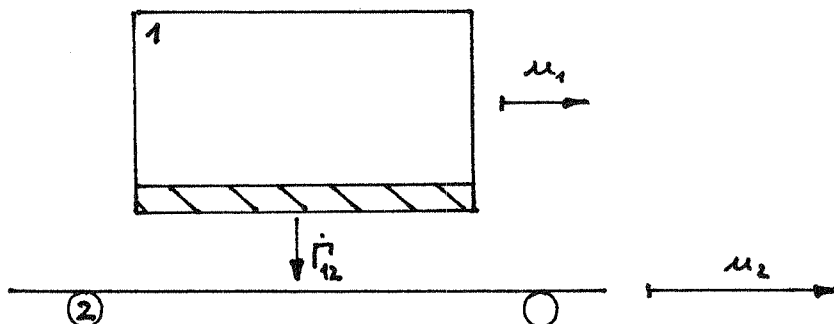
$$\frac{\frac{1}{2} m^2 u_1^2 + m M u_1 u_2 + \frac{1}{2} M^2 u_2^2 - \frac{1}{2} m^2 u_1^2 - \frac{1}{2} M m u_2^2 - \frac{1}{2} M m u_1^2 - \frac{1}{2} M^2 u_2^2}{m+M} + W = 0$$

$$W = \frac{m M}{(m+M) \cdot 2} \cdot (u_1 - u_2)^2$$

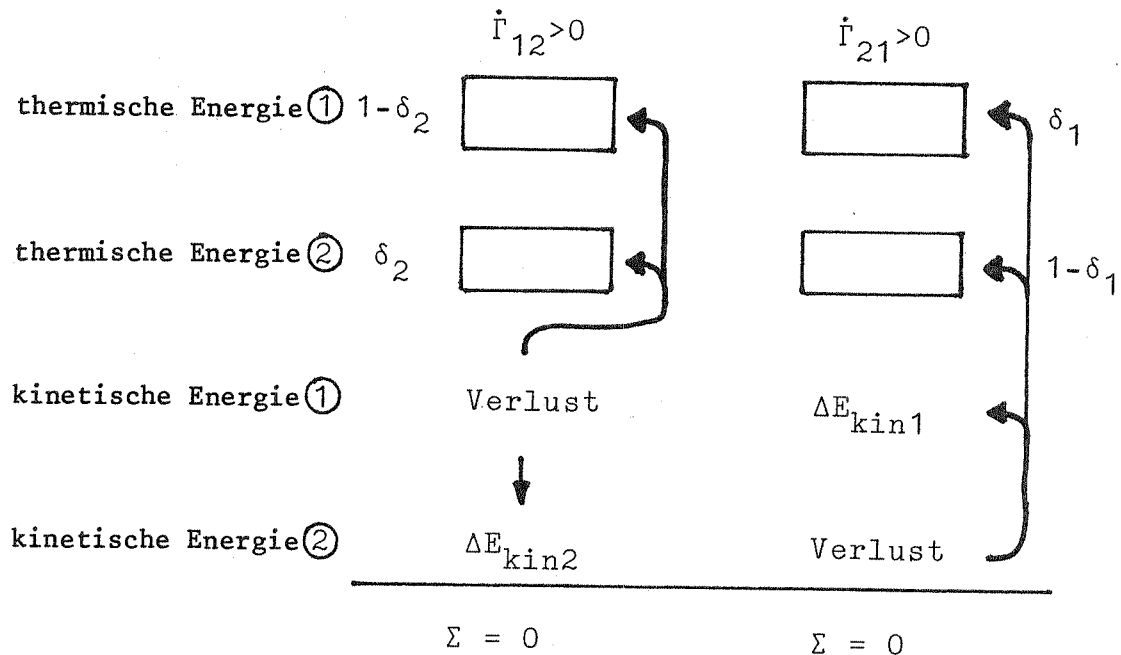
für $m \ll M$ und $m = \dot{\Gamma} \Delta t$:

$$\underline{W = \frac{1}{2} \cdot \dot{\Gamma} \Delta t (u_1 - u_2)^2}$$

Anschaulicher Weg zur Berechnung von Umwandlung kinetischer in Wärmeenergie beim Phasenübergang



Annahme: Die freiwerdende Reibungswärme wird im Fall von $\dot{\Gamma}_{12}$ zum Anteil δ_2 in ② frei, zu $(1-\delta_2)$ in ①. Im Fall von $\dot{\Gamma}_{21}$ zum Anteil δ_1 in ① und $(1-\delta_1)$ in ② (Reibungswärme s.o.).



Separate Betrachtung:

a) $\dot{\Gamma}_{12} > 0$

b) $\dot{\Gamma}_{21} > 0$

$$e_1 \quad 1/2(u_1 - u_2)^2 \{ (1 - \delta_2) \dot{\Gamma}_{12} + \delta_1 \dot{\Gamma}_{21} \}$$

$$e_2 \quad 1/2(u_1 - u_2)^2 \{ \delta_2 \dot{\Gamma}_{12} + (1 - \delta_1) \dot{\Gamma}_{21} \}$$

$$k_1 \quad -\dot{\Gamma}_{12} u_1^2 / 2 + \Delta E_{kin1}$$

$$k_2 \quad -\dot{\Gamma}_{21} u_2^2 / 2 + \Delta E_{kin2}$$

$$1/2(\dot{\Gamma}_{12} + \dot{\Gamma}_{21})(u_1 - u_2)^2 + \begin{cases} \Delta E_{kin1} = \dot{\Gamma}_{21} u_2^2 / 2 \\ \Delta E_{kin2} = \dot{\Gamma}_{12} u_1^2 / 2 \end{cases}$$

$$\Delta E_{kin2} = \dot{\Gamma}_{12} (u_1 u_2 - u_2^2 / 2)$$

$$\Delta E_{kin1} = \dot{\Gamma}_{21} (u_1 u_2 - u_1^2 / 2)$$

d.i. das gleiche Ergebnis, das man durch Multiplikation der Impulsgleichung (A1) bzw. (A2) mit u_1 bzw. u_2 erhält.

Bemerkung zur Reibkraft $FK(\underline{u}_1 - \underline{u}_2)$ bei zweidimensionaler Betrachtung:

In Gleichung (A1) wäre der Zwischenphasenreibterm $-FK(\underline{u}_1 - \underline{u}_2)$ bei mehrdimensionalen Problemen ein Vektor. In Gl. (A1'), der Gleichung für die kinetische Energie, steht die 1. Komponente des Skalarproduktes.

Aus den Vektoren $-FK(\underline{u}_1 - \underline{u}_2) \cdot \underline{u}_1$

folgt für die erste Richtung:

$$-FK(u_1 - u_2) \cdot u_1$$

und für die zweite:

$$-FK(v_1 - v_2) \cdot v_2$$

Um die gesamte kinetische Energie in ① zu erhalten, sind die Gleichungen für beide Richtungen zu addieren.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\beta_1 \left(\frac{u_1^2}{2} + \frac{v_1^2}{2} \right) \right] + \dots = \dots - FK \left[(u_1 - u_2) u_1 + (v_1 - v_2) v_1 \right]$$

($\hat{=}$ Vektorgleichung (A1')^{*})

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\beta_1 \frac{u_1^2}{2} \right] + \dots = \dots - FK (u_1 - u_2) u_1$$

Hinzu kommt von (A3), wieder als Summe beider Richtungen

$$\alpha \dot{Q}_{2R} = \alpha FK \left[(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2 \right]$$

($\hat{=}$ Vektorgleichung (A3)^{*})

$$\alpha \dot{Q}_{2R} = \alpha FK (u_1 - u_2)^2$$

Daraus folgt für (A5):

$$\text{Änderung der gesamten Energie in ①} = \dots FK \left\{ (u_1 - u_2) \left[\alpha (u_1 - u_2) - u_1 \right] + (v_1 - v_2) \left[\alpha (v_1 - v_2) - v_2 \right] \right\}$$

Fazit: Bezüglich der Energieumwandlung bei der Zwischenphasenreibung sind die Geschwindigkeitskomponenten bei mehrdimensionaler Betrachtung additiv.

Ebenso verhält es sich bei zweidimensionaler Betrachtung der Gleichungen für die kinetische Energie (aus den Impulsgleichungen):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 \underline{u}_1) + \nabla (\rho_1 \underline{u}_1 \otimes \underline{u}_1) =$$

⇒

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_1 u_1 v_1) = -K(u_1 - u_2) + \dots \quad (\text{A7})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 v_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_1 v_1^2) = -K(v_1 - v_2) + \dots \quad (\text{A8})$$

(A7) · u₁ und (A8) · v₁ ⇒

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_1 \frac{u_1^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \frac{u_1^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_1 v_1 \frac{u_1^2}{2} \right) = -K(u_1 - u_2) u_1 \dots$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_1 \frac{v_1^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \frac{v_1^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_1 v_1 \frac{v_1^2}{2} \right) = -K(v_1 - v_2) v_1 \dots$$

Σ ⇒

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_1 \left(\frac{u_1^2}{2} + \frac{v_1^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho_1 u_1 \left(\frac{u_1^2}{2} + \frac{v_1^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho_1 v_1 \left(\frac{u_1^2}{2} + \frac{v_1^2}{2} \right) \right] = -K[(u_1 - u_2)u_1 + (v_1 - v_2)v_1] + \dots$$

In CALIPSO wurde zunächst für Thermit und Natrium die Erhaltung der Gesamtenergie angesetzt. Die hier enthaltenen, länglichen Terme ließen später auf die explizite Erhaltung der inneren Energie umschwenken. Beide Formulierungen führten zu gleichen Rechenergebnissen.

Der Volumenänderungsterm $-p \left[\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla (\theta \underline{u}) \right]$ wird in CALIPSO vernachlässigt, weil er für das inkompressible Thermit ohnehin ≈ 0 wäre und für Na eine Abschätzung ergeben hat, daß er vernachlässigbar ist.

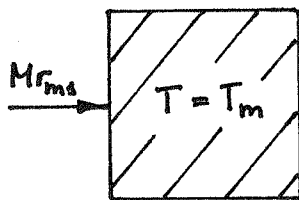
ANHANG A2: Phasenübergang

Die in Abschnitt 5 benutzte Gleichung für das Schmelzen von Struktur (D) soll hier anhand einiger Beispiele illustriert werden.

Fall

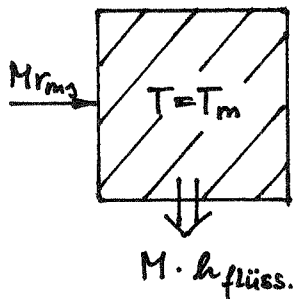
$\dot{Q}_{\text{ein}} - \dot{Q}_{\text{aus}} - \text{Verlust über Phasen-Grenze} = \Delta(\rho^p V p_h^+)$
--

- a) Eisklotz der Masse M auf Schmelztemp.,
nur Schmelzen



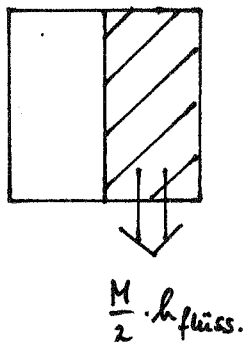
$$\begin{aligned} Mr_{ms} - 0 &= g^p V \Delta h \\ &= g^p V r_{ms} \\ &= Mr_{ms} \end{aligned}$$

- b) Eis schmilzt und Flüss.
wechselt zur anderen Phase



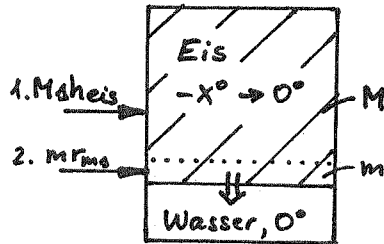
$$\begin{aligned} \underbrace{Mr_{ms} - M \cdot h_{\text{flüss}}}_{-M \cdot h_{\text{fest}}} &= -h_{\text{fest}} \cdot g^p \cdot V \\ &= -M \cdot h_{\text{fest}} \end{aligned}$$

- c) Wasser, 50 % verläßt das
Kontrollvol., T=const.



$$\begin{aligned} 0 - \frac{M}{2} h_{\text{flüss.}} &= -g^p \frac{V}{2} h_{\text{flüss.}} \\ - \frac{M}{2} h_{\text{flüss.}} &= - \frac{M}{2} h_{\text{flüss.}} \end{aligned}$$

- d) Eis $< 0^{\circ}\text{C}$ (Masse M), Wasser 0°C ,
Schmelzen von m

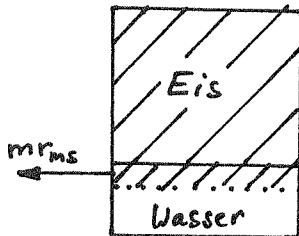


$$M \cdot h_{\text{eis}} + m r_{ms} - m \cdot h_{\text{flüss.}} = \rho V_{\text{eis}} \Delta h_{\text{eis}} + \rho h_{\text{eis}, 0^{\circ}} \cdot \Delta V$$

$$= M \Delta h_{\text{eis}} - m \cdot h_{\text{eis}, 0^{\circ}}$$

(Kontrollvol. = Eisvolumen)

- e) Wasser + Eis, 0°C , Ausfrieren
von m



$$-m r_{ms} + m \cdot h_{\text{flüss.}} = \rho h_{\text{eis}} \Delta V$$

$$= m h_{\text{eis}}$$

Aus den Beispielen folgt insbesondere für den aktuellen Anwendungsfall, daß

- im Aufheizungsterm die Volumenänderung durch Massengewinn oder -verlust berücksichtigt werden muß,
- die Enthalpie der höher energetischen Phase in den Verlustterm eingeht.

Gerade der erste Punkt wird in der dokumentierten CALIPSO-Version verletzt, da die zeitliche Änderung der Volumina in den Energiegleichungen für die Strukturen nicht berücksichtigt wird. Vergleichsrechnungen mit einer Version, die den Effekt berücksichtigt, ergaben, daß sich nur für einen fiktiven Beispielfall mit 70fach überhöhtem Wärmeübergang zur Struktur wesentliche Unterschiede ergaben. Die Berücksichtigung der Volumenabnahme über den Zeitschritt führte hier zu einer schnelleren Aufheizung, da hier jeweils weniger Volumen vom gleichen Wärmestrom aufgeheizt wird. Für "normale" (experimentell ermittelte) Wandstärkenänderungsgeschwindigkeiten erscheint also eine Vernachlässigung der Volumenänderungsterme als zulässig.

ANHANG A3: Konsistenz von Geschwindigkeiten und Flächen bei Querschnittsänderungen

Bei einer quasi eindimensionalen Modellierung eines Strömungskanals mit dem sogenannten "staggered grid" können Probleme auftreten, wenn Strömungsquerschnitt $A(z)$ und Δz variieren.

Die Diskretisierung eines Ausschnitts des Kühlkanals in CALIPSO könnte wie in Abb. A3 gezeigt aussehen.

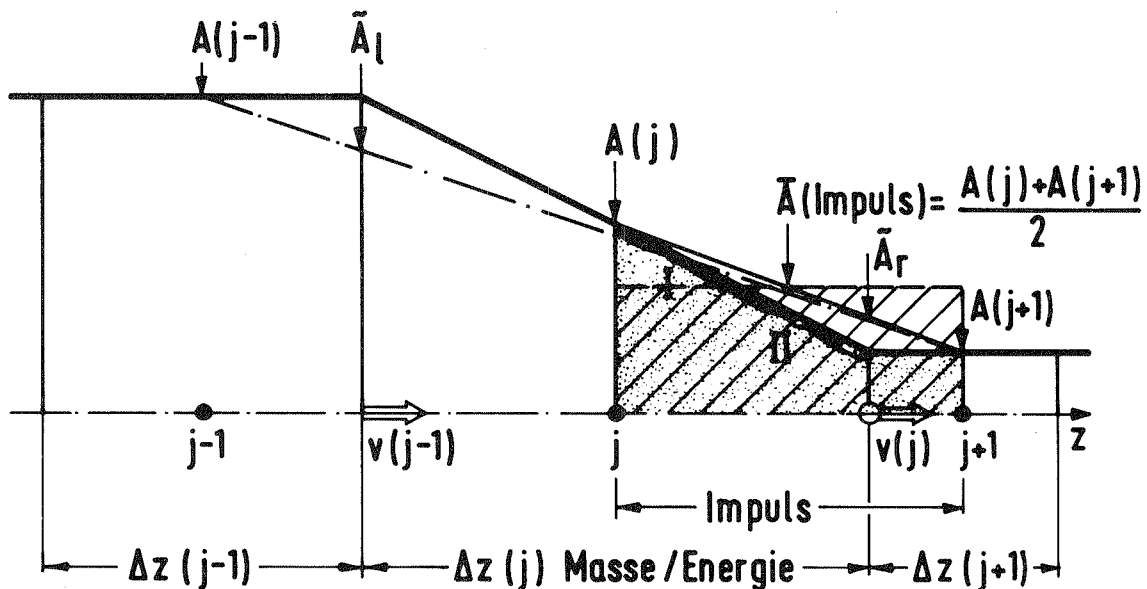


Abb. A3: Kontrollvolumina für Masse und Energie [über $\Delta z(j)$] mit Querschnitt $A(j)$ und Impuls (dunkel angelegte Fläche) mit Querschnitt $\bar{A}(\text{Impuls}) = \bar{A}_I$

Folgendes liegt der CALIPSO-Modellierung zugrunde:

- Es gibt keine Sprünge im Querschnittsverlauf $A(z)$, insbesondere nicht an den Maschengrenzen.
- Das eigentliche Kontrollvolumen für den Impuls der Masche j (dunkel angelegte Fläche) wird approximiert durch das rechteckige, schraffierte Volumen. Das bedeutet wegen $\bar{A}_I \frac{\partial p}{\partial z}$, daß an der Kegels stumpf-Mantelfläche I $p(j)$ anliegt und an II $p(j+1)$.

- $\bar{A}(\text{Impuls}) = \frac{A(j) + A(j+1)}{2}$ liegt nur bei konstantem Δz über $v(j)$, der zugehörigen Geschwindigkeit.
- Die Ableitung $\partial A / \partial z$ wird gebildet für die Massen-/Energieerhaltung

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{A(j+1) - A(j-1)}{\Delta z(j) + \frac{1}{2}[\Delta z(j-1) + \Delta z(j+1)]} \quad (\text{strichpunktierte Linie}),$$

für die Impulserhaltung

$$\frac{\partial \bar{A}_I}{\partial z} = \frac{A(j+1) - A(j)}{\frac{1}{2}[\Delta z(j) + \Delta z(j+1)]} \quad (\text{durchgezogene Linie}).$$

Daraus folgt zunächst die Regel für CALIPSO, möglichst bei Querschnittsänderungen konstante Maschenweiten zu verwenden.

Wird diese Regel nicht befolgt, so kommt es in Massen- und Energieerhaltung zu konvektiven Verlusten, wenn hier - ebenso wie in der Impulserhaltung - die konvektiven Terme bezüglich $A(z)$ ausdifferenziert werden.

Anschaulich kann dies erklärt werden durch die unterschiedliche Bildung der Ableitungen $\partial A / \partial z$ bzw. $\partial \bar{A}_I / \partial z$. In der Impulsgleichung wird eine Geschwindigkeit $v(j)$ berechnet, die zur Querschnittsfläche \bar{A}_I "gehört". Wird in Massen- und Energieerhaltung der konvektive Term bezüglich $A(z)$ ausdifferenziert, so wird von einem Kontrollvolumen ausgegangen, das die durch $\partial A / \partial z$ gebildete, strichpunktierte Berandung besitzt. Damit verläßt die Masche j (transportierte Größe x Querschnitt x Geschwindigkeit): $Q_j \times \tilde{A}_r \times v_j$, es kommt in j hinein: $\dot{Q}_{j-1} \times \tilde{A}_l \times v_{j-1}$. \tilde{A}_r ist der durch die strichpunktierte Linie am rechten Rand der Masche vorgegebene Austrittsquerschnitt, \tilde{A}_l der entsprechende Eintrittsquerschnitt. \tilde{A}_r ist aber nicht mehr mit dem mit \bar{A}_I gebildeten v_j konsistent, ebenso verhält es sich mit \tilde{A}_l .

Beispiel folgt diese Regel ja auch nicht.

Abhilfe:

Die konvektiven Terme von Massen- und Energieerhaltung sind konsistent mit der Impulserhaltung, wenn sie nicht ausdifferenziert werden und mit \bar{A}_I gerechnet wird.

$$\text{Impuls: } \frac{\partial}{\partial t} (\hat{p}v) + \frac{\partial}{\partial z} (\hat{p}v\hat{v}) + \frac{\hat{p}v\hat{v}}{\bar{A}_I} \cdot \frac{\partial \bar{A}_I}{\partial z} = -\theta \frac{\partial p}{\partial z} + \dots$$

(v wird mit \bar{A}_I berechnet, " $\hat{\quad}$ " = räumlicher Mittelwert)

Masse; statt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hat{p}\hat{v}}{A} \cdot \frac{\partial A}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho v) = 0$$

besser:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} (\rho v \bar{A}_I) = 0$$

Energie: entsprechend Massenerhaltung.