

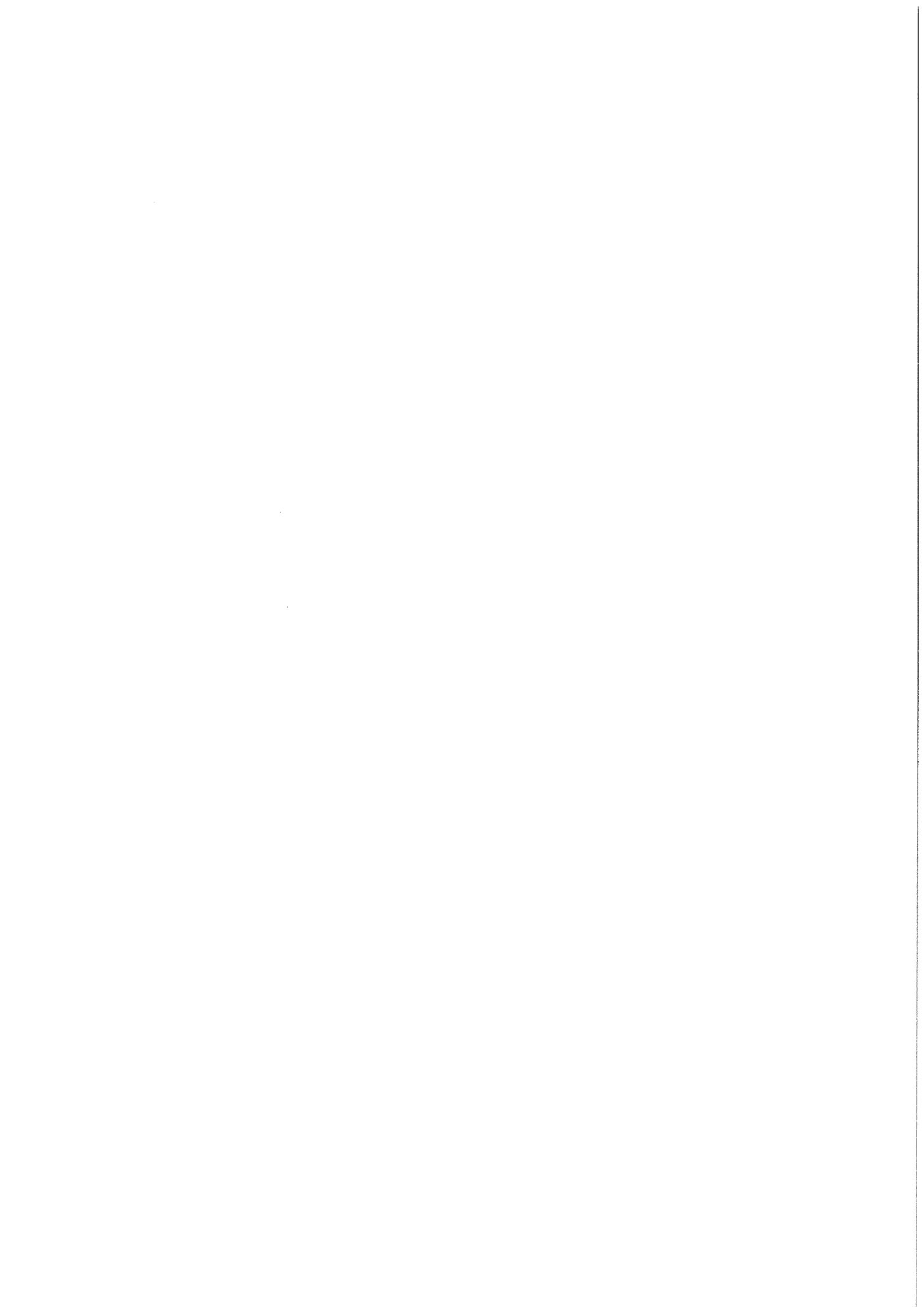


KfK 5273  
Januar 1994

# **Rechnungen mit dem Computer Code IVA3 zur Fragmentation heißer Metall- und Oxidschmelzen**

S. Mussa, W. Tromm  
Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik  
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**



# KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik  
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

KfK 5273

Rechnungen mit dem Computer Code IVA3 zur Fragmentation  
heißer Metall- und Oxidschmelzen

Sellal Mussa\*, Walter Tromm

\*seit 1993: KIKI Ingenieurbüro/Anlagenbau, Ettlingen

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0303-4003

## Kurzfassung

In dieser theoretischen Arbeit werden die Phänomene der Fragmentation von Schmelzen bei Wasserzutritt von unten mit Hilfe des Rechenprogrammes IVA3 /11,12,13/ untersucht. Mit IVA3 können 3-Komponenten-Mehrphasen-Strömungen simuliert werden. Ziel dieser Arbeit ist es, Aussagen zu den thermo- und fluiddynamischen Abläufen der Fragmentation heißer Schmelzen zu gewinnen.

Hierzu wurden zwei geometrische Modelle verwendet. In beiden Modellen wird ein zylindrischer Schmelzebehälter simuliert, der mit einem darunterliegenden, ebenfalls zylindrischen, Wasserbehälter durch eine Öffnung verbunden ist. Als Schmelzen werden Stahl- und Uranoxidschmelzen untersucht.

Bei der Durchführung der Rechnungen werden folgende Parameter variiert: die Art der Schmelze (Stahl, Uranoxid), der Flutwasservordruck und die Öffnungsgeometrie in der Bodenplatte.

Als Ergebnisse werden über der Zeit die Temperatur- und Druckverläufe sowie die Wasser- und Schmelzemasse im Integrationsgebiet aufgezeichnet. Des Weiteren werden die Volumenanteile und die Volumenströme der verschiedenen Komponenten in den Behältern sowie die Oberflächenvergrößerung und Enthalpie über der Zeit dargestellt.

Die Ergebnisse der Rechnungen lassen sich zu folgenden Beobachtungen zusammenfassen:

Bei allen Rechnungen mit Stahlschmelze steigt der Fragmentationsgrad mit dem Flutwasservordruck und der Schmelzetemperatur, wobei sich in der Schmelzeschicht Kanäle ausbilden, die stabil sind und einen geringen Strömungswiderstand bei der Durchströmung mit Dampf aufweisen. Bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze bilden sich ebenfalls Kanäle in der Schmelzeschicht, die aufbrechen und zur Zerteilung der Schmelze in Tropfen führen. Die Fragmentierung der Schmelze im Wasserbehälter ist bei Stahl geringer als bei Uranoxid.

Bei allen Rechnungen konnte in der jeweiligen Simulationszeit ( $< 2,5$  s) keine wesentliche Erstarrung, wohl aber eine geringe Abkühlung der Schmelze beobachtet werden. Ferner wird bei allen Rechnungen mit mäßigem oder keinem Flutwasservordruck ein Auslaufen der Schmelze durch den Wassereinlaufstutzen aus dem Behälter beobachtet.

Alle Prozesse verlaufen so langsam und mit so geringer Dampfentwicklung, daß trotz auftretender Druckspitzen keine Ansätze für eine Dampfexplosion zu erkennen sind.

In weiterführenden Simulationsrechnungen soll der Einfluß der Stoffgrößen auf die Fragmentation eingehender untersucht werden.

## Numerical Simulation of Fragmentation of Hot Metal and Oxide Melts with the Computer Code IVA3

### Abstract

This theoretical work investigates the phenomena of fragmentation of melts caused by water-inlet from the bottom with the computer code IVA3 /11,12,13/. With the computer code IVA3 three-component-multiphase flows can be numerically simulated. The aim of this work is to gain information on the thermo- and fluid-dynamical processes during fragmentation of hot melts. For this purpose two geometrical models are used. Both consist of a cylindrical vessel for water lying beneath a cylindrical vessel for melt. The vessels are connected to each other through a hole. Steel and uraniumdioxide melts are used for the investigations.

During the numerical simulations the following parameters were varied: the type of the melt (steel,  $\text{UO}_2$ ), the water supply pressure and the geometry of the hole in the bottom plate through which the water and melt vessels are connected.

As results of the numerical simulations temperature and pressure versus time curves are plotted. Additionally the volume flowrates and the volume fractions of the various phases in the vessels and the increase in surface and enthalpy of the melt during the time of simulation are depicted. The results of the numerical simulations can be summarized to the following observations:

In all of the numerical simulations with steel melts the rate of fragmentation increases with increasing water pressure and melt temperature, whereby stable channels are formed in the melt layer showing a very low flow resistance for steam. In the numerical simulations with uraniumdioxide the formations of channels are also observed. However, these channels are not so stable that they eventually break apart and lead to the fragmentation of the  $\text{UO}_2$  melt in drops. The fragmentation of the steel melt in water vessel is less than that of uraniumdioxide.

In all of the numerical simulations no essential solidification of the melt is observed in the respective duration of the simulations. However, a small drop in the melt temperature is observed. In all of the numerical simulations with a slight or no water pressure the melt flows from the upper vessel into the water vessel via the connecting hole.

The investigated processes take place in a very slow manner and with such a low steam production so that despite the occurring pressure peaks no sign of steam explosions could be observed.

In the future in further numerical simulations the influence of material properties on the fragmentation process should be investigated.

## Inhaltsverzeichnis

<b>Verzeichnis der Tabellen</b> .....	4
<b>Verzeichnis der Abbildungen</b> .....	5
<b>Abkürzungen</b> .....	9
<b>1. Einleitung</b> .....	11
1.1 Problemstellung .....	11
1.2 Ziel der Arbeit .....	12
<b>2. Fragmentierung von Schmelzen</b> .....	13
2.1 Übersicht .....	13
2.2 Dampfexplosion durch Kontakt zwischen Wasser und heißen Schmelzen .....	13
2.3 Bedingungen für eine Dampfexplosion .....	15
2.4 Dampfexplosions-Modellkonzepte .....	16
2.5 Fragmentations-Mechanismen .....	17
2.5.1 Beschleunigungsbedingte Tropfenfragmentation .....	17
2.5.2 Strahlfragmentation .....	19
2.5.3 Überblick der Fragmentationsmodelle in IVA3 .....	20
<b>3. Beschreibung des IVA3-Codes</b> .....	23
3.1 Übersicht .....	23
3.2 Strömungsmodell .....	23
3.3 Geometrie .....	24
3.4 Anfangs- und Randbedingungen .....	25
3.5 Eingabedaten für IVA3 .....	25
3.6 Programmstruktur .....	25
<b>4. Geometrische Modelle zum Wasserzutritt in die Schmelze</b> .....	27
4.1 Beschreibung der geometrischen Modelle .....	27
4.2 Simulierte Form der geometrischen Modelle .....	28
<b>5. Rechnungen mit IVA3 zur Fragmentierung der Schmelze</b> .....	29
5.1 Vorgenommene Ergänzungen in IVA3 .....	29
5.2 Simulationsmodell M02: Wasserzutritt durch eine freie Öffnung .....	30
5.2.1 Formulierung der Simulationsaufgabe M02 .....	30

5.2.2 Geometrie .....	30
5.2.3 Randbedingungen .....	31
5.2.4 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M02R01 ohne Überdruck .....	31
5.2.5 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M02R02 mit Wasservordruck .....	34
5.3 Simulationsmodell M03: Wasserzutritt durch eine Siebplatte .....	36
5.3.1 Formulierung der Simulationsaufgabe M03 .....	36
5.3.2 Geometrie .....	37
5.3.3 Randbedingungen .....	38
5.3.4 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R01 ohne Überdruck .....	38
5.3.5 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R02 mit Wasservordruck .....	40
5.3.6 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R03 mit Uranoxidschmelze ohne Wasservordruck .....	43
5.3.7 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R04 mit Stahlschmelze bei 3086,75 K und ohne Wasservordruck .....	45
<b>6. Diskussion der Ergebnisse .....</b>	<b>50</b>
<b>7. Zusammenfassung und Schlußfolgerung .....</b>	<b>55</b>
<b>8. Literaturverzeichnis .....</b>	<b>57</b>
<b>Anhang A Probleme mit dem IVA3 Code .....</b>	<b>153</b>
A.1 Reproduzierbarkeit der Ergebnisse .....	153
A.2 Massenerhaltung .....	153
A.3 Parameter .....	153
<b>Anhang B Neue Unterprogramme zur Darstellung der Ergebnisse .....</b>	<b>155</b>
B.1 SUBROUTINE DYNPRI .....	155
B.2 SUBROUTINE MUIPRIN .....	155
B.3 SUBROUTINE MUPRINTV .....	155
B.4 Erstellung von Diagrammen .....	155
<b>Anhang C Input-Deck .....</b>	<b>157</b>
<b>Anhang D JCL(JOB CONTROL LANGUAGE) .....</b>	<b>158</b>
D.1 Erzeugen eines Load-Moduls .....	158
D.2 Ausführung beginnend mit $\tau=0$ .....	158
D.3 Restart .....	158



D.4	Skalarplots .....	159
D.5	Vektorplot .....	159
D.6	Kopplung IVA3-PLIVA/B-Graphik .....	159
<b>Anhang E. Eingabesätze, neue Unterprogramme und JCL .....</b>		<b>161</b>
E.1	Eingabesatz für die Rechnung M02R01 (START) .....	161
E.2	Eingabesatz für die Rechnung M02R01 (RESTART) .....	163
E.3	Eingabesatz für die Rechnung M02R02 (START) .....	164
E.4	Eingabesatz für die Rechnung M02R02 (RESTART) .....	166
E.5	Eingabesatz für die Rechnung M03R01 (START) .....	167
E.6	Eingabesatz für die Rechnung M03R01 (RESTART) .....	169
E.7	Eingabesatz für die Rechnung M03R02 (START) .....	170
E.8	Eingabesatz für die Rechnung M03R02 (RESTART) .....	172
E.9	Eingabesatz für die Rechnung M03R03 (START) .....	173
E.10	Eingabesatz für die Rechnung M03R03 (RESTART) .....	175
E.11	Eingabesatz für die Rechnung M03R04 (START) .....	176
E.12	Eingabesatz für die Rechnung M03R04 (RESTART) .....	178
E.13	Programm zum Ausschreiben von benutzerdefinierten Daten .....	179
E.14	Programm zum Ausschreiben von Ausgabedaten auf ein File .....	183
E.15	Programm zum Ausschreiben von Geschwindigkeitskomponenten .....	186
E.16	Programm zum Umspeichern von Plotdaten .....	187
E.17	Programm zur Umwandlung von Geschwindigkeitsdaten .....	207
E.18	JCL für die Erstellung eines Loadmoduls .....	209
E.19	JCL für den START einer IVA3-Rechnung .....	210
E.20	JCL für den RESTART einer IVA3-Rechnung .....	210
E.21	JCL für die Umwandlung von Plotdaten .....	211
E.22	JCL für die Umwandlung von Geschwindigkeitsdaten .....	212
E.23	JCL für das Plotten von Volumenstrombildern .....	212
E.24	JCL für das Plotten von Volumenanteilen .....	212

## Verzeichnis der Tabellen

- Tab. 1: Modellierete Strömungsformen in IVA3
- Tab. 2: Gegenüberstellung der mathematischen Simulation und des physikalischen Zustandes in IVA3
- Tab. 3: Tabellarische Übersicht der durchgeführten Rechnungen

## Verzeichnis der Abbildungen

- Abb. 1: Ablauf einer Dampfexplosion im Druck (p)-Volumen (v)-Diagramm
- Abb. 2: Ereignisfolgen, die zu einer großen Dampfexplosion mit großem Schadenspotential führen, nach Cronenberg (1980)
- Abb. 3: Schema einer thermischen Detonation nach Board, Hall & Hall (1975)
- Abb. 4: Zerfallsformen bei hydrodynamischer Fragmentation nach Reinecke & Waldman (1970) (Abb. aus Benz & Schriewer 1978)
- Abb. 5: Aufbrechen eines Strahls durch Bildung eines Wirbelpaares beim Eindringen in eine Flüssigkeit. Rechenergebnis von Christiansen (1973), entnommen aus Cronenberg & Benz (1980)
- Abb. 6: Schematischer Querschnitt durch einen fragmentierenden Strahl mit charakteristischer Dicke  $s(t)$  nach Buchanan (1974a)
- Abb. 7.1: Modellierte Strömungsformen in IVA3
- Abb. 7.2: Legende zur Abb. 7.1
- Abb. 8: Zuordnung der Indizes der Elementarzellen in der diskretisierten Zylindergeometrie
- Abb. 9: Definition der geometrischen Größen und der Position der abhängigen Variablen
- Abb. 10: Das geometrische Modell M02
- Abb. 11: Simulation des geometrischen Modells M02
- Abb. 12: Das geometrische Modell M03
- Abb. 13: Simulation des geometrischen Modells M03
- Abb. 14: Volumenanteil: Schmelze(schwarz), Wasser(schraffiert), Dampf(weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11
- Abb. 15: Volumenströme: Dampf(L = 1), Wasser(L = 2), Schmelze(L = 3) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11
- Abb. 16: Schmelzmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

- Abb. 17: Schmelzemasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)
- Abb. 18: Oberflächenvergrößerung der Schmelze
- Abb. 19: Enthalpieverlauf der Schmelze
- Abb. 20: Wassermenge in den verschiedenen Schichten
- Abb. 21: Wassermenge in Luft- und Schmelzeschicht
- Abb. 22: Druckverlauf in den verschiedenen Zellen
- Abb. 23: Temperaturverlauf der verschiedenen Phasen in den verschiedenen Zellen
- Abb. 24: Volumenanteil: Schmelze(schwarz), Wasser(schraffiert), Dampf(weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11
- Abb. 25: Volumenströme: Dampf(L = 1), Wasser(L = 2), Schmelze(L = 3) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11
- Abb. 26: Schmelzmassenverteilung in den verschiedenen Schichten
- Abb. 27: Schmelzemasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)
- Abb. 28: Oberflächenvergrößerung der Schmelze
- Abb. 29: Enthalpieverlauf der Schmelze
- Abb. 30: Wassermenge in den verschiedenen Schichten
- Abb. 31: Wassermenge in Luft- und Schmelzeschicht
- Abb. 32: Druckverlauf in den verschiedenen Zellen
- Abb. 33: Temperaturverlauf der verschiedenen Phasen in den verschiedenen Zellen

- Abb. 34: Volumenanteil: Schmelze(schwarz), Wasser(schraffiert), Dampf(weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 35: Volumenströme: Dampf(L = 1), Wasser(L = 2), Schmelze(L = 3) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 36: Schmelzmassenverteilung in den verschiedenen Schichten
- Abb. 37: Schmelzmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)
- Abb. 38: Oberflächenvergrößerung der Schmelze
- Abb. 39: Enthalpieverlauf der Schmelze
- Abb. 40: Wassermenge in den verschiedenen Schichten
- Abb. 41: Wassermenge in Luft- und Schmelzeschicht
- Abb. 42: Druckverlauf in den verschiedenen Zellen
- Abb. 43: Temperaturverlauf der verschiedenen Phasen in den verschiedenen Zellen
- Abb. 44: Volumenanteil: Schmelze(schwarz), Wasser(schraffiert), Dampf(weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 45: Volumenströme: Dampf(L = 1), Wasser(L = 2), Schmelze(L = 3) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 46: Schmelzmassenverteilung in den verschiedenen Schichten
- Abb. 47: Schmelzmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)
- Abb. 48: Oberflächenvergrößerung der Schmelze
- Abb. 49: Enthalpieverlauf der Schmelze
- Abb. 50: Wassermenge in den verschiedenen Schichten
- Abb. 51: Wassermenge in Luft- und Schmelzeschicht
- Abb. 52: Druckverlauf in den verschiedenen Zellen

- Abb. 53: Temperaturverlauf der verschiedenen Phasen in den verschiedenen Zellen
- Abb. 54: Volumenanteil: Schmelze(schwarz), Wasser(schraffiert), Dampf(weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 55: Volumenströme: Dampf( $L = 1$ ), Wasser( $L = 2$ ), Schmelze( $L = 3$ ) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13
- Abb. 56: Schmelzmassenverteilung in den verschiedenen Schichten
- Abb. 57: Schmelzmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)
- Abb. 58: Oberflächenvergrößerung der Schmelze
- Abb. 59: Enthalpieverlauf der Schmelze
- Abb. 60: Wassermenge in den verschiedenen Schichten
- Abb. 61: Wassermenge in Luft- und Schmelzeschicht
- Abb. 62: Druckverlauf in den verschiedenen Zellen
- Abb. 63: Temperaturverlauf der verschiedenen Phasen in den verschiedenen Zellen

## Abkürzungen

A:	Fläche
c:	spezifische Wärmekapazität
D:	Durchmesser
f:	Frequenz
m:	Masse
p:	Druck
R:	Radius
r:	Abstand
T:	Temperatur
t:	Zeit
u:	Geschwindigkeit
V:	Volumen (v: spezifisches Volumen)
v:	Geschwindigkeit
We:	Weberzahl

## *Griechische Abkürzungen*

$\alpha$ :	Volumenanteil
$\lambda$ :	Wärmeleitfähigkeit
$\mu$ :	dynamische Viskosität
$\rho$ :	Dichte
$\sigma$ :	Oberflächenspannung
$\tau$ :	Zeit

*Indizes*

- a:       äußeres Medium
- br:      'break' (Fragmentation)
- c:       kontinuierlich (continuous)
- d:       dispers (Partikel)
- dsp:     "
- dcoal:   Koaleszenz
- dcol:    Kollision
- k:       kaltes Medium
- p:       Wahrscheinlichkeit (probability)
- t:       Tropfen
- u:       Umgebung



## 1. Einleitung

### 1.1 Problemstellung

Im Rahmen der Entwicklung eines neuen Containment-Konzeptes für Leichtwasserreaktoren werden auch Überlegungen angestellt, wie man bei einem Kernschmelzunfall die den Reaktordruckbehälter verlassende Kernschmelze auffangen und in eine kühlbare Konfiguration überführen kann. Es wurde dazu eine Kernfängerkonstruktion konzipiert, die das bei einem Kernschmelzunfall vorhandene Sumpfwasser nutzt, um die Kernschmelze zu kühlen. Um trotz der schlechten Wärmeleitfähigkeit der überwiegend oxidischen Kernschmelze eine rasche Kühlung zu erreichen, soll die Kernschmelze zunächst schnell ausgebreitet werden, um später durch einsetzenden Wasserzutritt von unten und die damit verbundenen starken Verdampfungsprozesse fragmentiert und gekühlt zu werden.

Kann ein bestimmter Fragmentationsanteil nachgewiesen werden, könnte der Durchmesser der Konstruktion entsprechend kleiner ausfallen, da dann auch größere Schichthöhen trotz der geringen Wärmeleitfähigkeit kühlbar sind.

Um modellmäßig die Fragmentation einer Schmelze in der Kopplung von Wasserzutritt, Verdampfung, Fragmentierung und damit Schaffung von neuen Oberflächen, die Rückwirkung auf den Verdampfungsprozeß haben, studieren zu können, wurden bisher experimentelle Arbeiten von W. Tromm mit Thermitschmelze durchgeführt /19/, deren Fe- und  $\text{Al}_2\text{O}_3$  Anteile die metallischen und oxidischen Phasen repräsentieren. In weiteren Studienarbeiten /1,2/ wurden Laborexperimente mit Kunststoffschmelze sowie geschichteten Metall-Kunststoffschmelze durchgeführt. Die Kunststoffschmelze besitzt eine ähnliche Viskosität wie der oxidische Anteil der Kernschmelze und erlaubt auf Grund ihrer hohen Anfangstemperatur das Verdampfen des zutretenden Wassers.

Bei den Laborexperimenten wurden der Vordruck des zutretenden Wassers, die Temperatur und Viskosität der Schmelzen sowie deren Höhe variiert. Die Auswertung der Experimente ergab, daß ein Zusammenhang zwischen dem Wasservordruck und der Erstarrungsgeschwindigkeit sowie zwischen der Viskosität und der Erstarrungsgeometrie besteht. Als weitere Einflußgrößen wurden die Dichte und Wärmeleitfähigkeit der Schmelze und die Lochgeometrie der Wasseröffnung identifiziert.

Die Temperaturen der Schmelzen im Laborexperiment waren allerdings mit maximal 265°C deutlich geringer als die von Kernschmelze mit ca. 1500°C oder höher. Prinzipiell konnte bei diesen Experimenten gezeigt werden, daß eine Fragmentation der Schmelzen bei Wasserzutritt durch eine gelochte Bodenplatte von unten erreicht wird.

## 1.2 Ziel der Arbeit

Anknüpfend an die bisher durchgeführten experimentellen Arbeiten sollen in der hier vorliegenden theoretischen Arbeit erste rechnerische Untersuchungen zu den thermo- und fluiddynamischen Abläufen der Fragmentation heißer Schmelzen durch Wasserzutritt von unten mit dem Computer Code IVA3 durchgeführt werden, wobei eine einfache, zylindrische Einlochgeometrie zugrunde gelegt wird. Die entscheidenden Phänomene beim Verdampfen des von unten eintretenden Wassers und die dadurch hervorgerufene Fragmentierung sollen genauer untersucht werden. Dabei sind wichtige Parameter wie Wasservordruck, Lochgeometrie und Art der Schmelze zu variieren.

Nach der Erstellung des Eingabesatzes für das geometrische Modell sollen mit den in dem Code installierten Stoffdaten der Schmelzen (Fe,  $\text{UO}_2$ ) Rechnungen unter Variation der oben genannten Parameter durchgeführt und die Ergebnisse diskutiert werden.

Ferner soll die Arbeit einen Überblick über die verschiedenen Fragmentationsprozesse geben, die bei der thermischen Wechselwirkung zwischen heißer Schmelze und kaltem Wasser eine Rolle spielen. Da bei solchen Wechselwirkungen die Möglichkeit für die Entstehung einer Dampfexplosion besteht, soll in der hier vorliegenden Arbeit auch auf dieses Thema kurz eingegangen werden.

## 2. Fragmentierung von Schmelzen

### 2.1 Übersicht

In der Literatur existieren verschiedene Modellvorstellungen über die Fragmentierung von mehrkomponentigen Fluiden. Der schnellste und effektivste Prozeß läuft über eine Dampfexplosion, die auch im hier betrachteten System möglich ist. Im Zusammenhang mit der theoretischen Beschreibung solcher Dampfexplosionen werden unterschiedliche Modelle für schnelle Fragmentierungsprozesse diskutiert. Daher soll hier zunächst die Phänomenologie von Dampfexplosionen wiedergegeben und einige dabei für wichtig erachtete Fragmentierungsmechanismen beschrieben werden, wie sie auch im Rechenprogramm IVA3 eingesetzt werden.

Um das Verständnis dieser Modelle zu erleichtern und einen Einblick in die Fragmentationsmechanismen zu bekommen, ist es hilfreich, aus den in /3/ beschriebenen Kapiteln über Dampfexplosionen wichtige Informationen in Kürze wiederzugeben. Es soll damit versucht werden, die Zusammenhänge leicht verständlich darzustellen. Dabei wird weniger auf Vollständigkeit als vielmehr auf die Darstellung der physikalischen Grundlagen Wert gelegt. Für ausführliche Erklärungen sei auf /3/ verwiesen.

### 2.2 Dampfexplosion durch Kontakt zwischen Wasser und heißen Schmelzen

Wenn eine heiße Flüssigkeit (z.B. Metallschmelze) mit einer kälteren Flüssigkeit (z.B. Wasser), deren Siedepunkt niedrig im Vergleich zur Temperatur der heißen Flüssigkeit ist, in Kontakt kommt, dann kann es zu einer Dampfexplosion kommen. Der Grund für Dampfexplosionen ist ein spontaner Phasenwechsel der kälteren Flüssigkeit. Es handelt sich dabei nicht um eine chemische Reaktion, sondern um die physikalische Wechselwirkung zwischen beiden Komponenten.

Damit es überhaupt zu einer Explosion kommen kann, muß die Zeit, in der die Wärme übertragen wird, klein sein gegenüber der Expansionszeit des Gemisches, so daß ein wesentlicher Anteil der verfügbaren thermischen Energie in mechanische Arbeit umgesetzt werden kann.

Abb.1 zeigt den schematischen Ablauf einer Dampfexplosion im  $p$ - $v$ -Diagramm ( $p$  = Druck,  $v$  = spezifisches Volumen) für das kalte Teilsystem (z.B. Wasser). Ausgehend vom Ausgangszustand 0 wird durch rasche Wärmezufuhr aus der heißen Komponente bei nahezu konstantem Volumen  $v$  der Druck  $p$  bis auf einen Zwischenzustand 1 ansteigen. Sodann wird das kalte Material sich entspannen, z.B. entlang einer Isentropen, wenn keine Wärme bei der Entspannung zugeführt wird. Im Naßdampfgebiet des kalten Materials wird dabei das

Volumen stark zunehmen. Wenn bei einer Entspannung noch weitere Wärme aus dem heißen Material zugeführt wird, kommt man über die Taukurve hinaus in das Gebiet des reinen Dampfes. Bei der Entspannung muß das Umgebungsmedium gegen den Außendruck verdrängt werden. In einem geschlossenen Raum wird dieser Außendruck  $p_u$  ansteigen und somit liegt der Enddruck im Zustand 2 über dem Ausgangsdruck im Zustand 0. Die bei der Dampfexplosion abgegebene Arbeit  $W$  (je Masseneinheit) entspricht der Fläche zwischen der Druckkurve  $p_k$  und  $p_u$ .

Es ist keineswegs selbstverständlich, daß eine thermische Wechselwirkung zwischen heißen und kalten Komponenten explosionsartig abläuft. Eher das Gegenteil ist der Fall. Damit es zu einer explosionsartigen Verdampfung kommen kann, muß es zu einer sehr intensiven Vermischung der beteiligten Komponenten kommen. Nur dann lassen sich die extrem hohen Wärmeströme überhaupt realisieren. Dies soll durch die folgende Größenordnungsabschätzung deutlich gemacht werden.

Bei einem Gießerei-Unfall in Quebec (Kanada) Anfang der 60er Jahre gaben etwa 50 kg Stahl ihre Wärme an Wasser innerhalb von etwa 1 ms ab. Im folgenden soll der Größenordnung nach abgeschätzt werden, wie groß die dazu erforderliche effektive Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{eff}$  gewesen sein muß.

Es sei

$V = 4/3\pi R_o^3$ , das Stahl-Volumen

$A = 4\pi R_o^2$ , die Schmelzoberfläche

$\rho = 8000\text{kg/m}^3$ , Dichte von Stahl

$c = 750 \text{ J}/(\text{kg K})$ , die spez. Wärmekapazität

$\Delta t = 1 \text{ ms}$ , die Reaktionszeit

$T$  = Schmelztemperatur

$m = 50 \text{ kg}$ , Stahlmasse

Aus Masse und Dichte kann man einen äquivalenten Radius  $R_o$  abschätzen:

$$R_o = (3m/4\pi\rho)^{1/3} = 0,1\text{m}$$

Da die Änderung der Wärmeenergie gleich der abgeleiteten Wärmemenge ist, ändert sich die Temperatur aufgrund der Abkühlung etwa nach folgendem Gesetz:

$$V\rho c dT/dt = - A\lambda_{eff}T/R \approx V\rho c T/\Delta t$$

Hieraus folgt

$$\lambda_{eff} \approx (V \rho c R) / (A \Delta t) \approx (\rho c R^3) / (3 \Delta t) \approx 20 \cdot 10^6 \text{ W} / (\text{mK})$$

Nun hat Stahl eine Leitfähigkeit von  $\lambda \approx 37 \text{ W} / (\text{m K})$ . Damit bei dieser sehr viel kleineren Wärmeleitfähigkeit in der gleichen Zeit der gleiche Wärmebetrag übertragen werden kann, muß der wirksame Radius  $R$  sehr viel kleiner gewesen sein:

$$R/R_0 = (\lambda/\lambda_{eff})^{1/2} = 1,4 \cdot 10^{-3}, \text{ also}$$

$$R \approx 0,14 \text{ mm} = 140 \mu\text{m}$$

D.h. vor oder während der Dampfexplosion muß die Schmelze so fragmentiert worden sein, daß die effektive Oberfläche etwa um 6 bis 7 Größenordnungen angestiegen ist.

### 2.3 Bedingungen für eine Dampfexplosion

Von großer Bedeutung in der Praxis ist ein Verständnis für die notwendigen und hinreichenden Bedingungen, bei denen eine Wechselwirkung zwischen heißen Schmelzen und kalten Flüssigkeiten zu einer Dampfexplosion führt. Hierüber gibt es noch keinen abschließenden Konsens. Der Stand des Wissens wird etwa durch Abb. 2 charakterisiert /4/. Danach muß zunächst einmal eine thermische Energie vorhanden sein, wobei die Temperatur des heißen Mediums oberhalb der Siedetemperatur des Kalten liegen muß, damit überhaupt Verdampfung auftreten kann. Die meisten Konzepte gehen davon aus, daß eine grobe Verteilung (coarse mixture) entsteht, wobei die beiden Komponenten zunächst durch einen Dampffilm voneinander getrennt sind. Dies wird zumindest als Voraussetzung für das Entstehen einer großen (large-scale) Wechselwirkung angesehen. Wenn weiter dieser Dampffilm durch Druckstörungen oder thermische Effekte zum Zusammenbruch gebracht wird, dann kann es zum Flüssig-Flüssig-Kontakt kommen. Dies wiederum ist Voraussetzung für einen großen Wärmeübergang. Durch verschiedene Mechanismen (Spontane Keimbildung, ein Vorgang, bei dem beim Überschreiten einer kritischen Temperatur spontanes Verdampfen einsetzt, oder Feinfragmentation infolge anderer Ursachen) kommt es dann zu einer starken Dampfentwicklung. Es können besonders dann größere Drücke entstehen, wenn das Reaktionsgemisch in seiner Ausdehnung behindert ist (confinement). Dann kann es zu einer Rückwirkung und damit zu einer Eskalation der Dampfexplosion kommen. Die anschließende Expansion führt schließlich zu mechanischer Arbeit und eventuellen Schäden.

## 2.4 Dampfexplosions-Modellkonzepte

Um den in seiner Natur sehr komplexen physikalischen Sachverhalt der Dampfexplosion erklären zu können, wurden in den letzten dreißig Jahren mehrere Theorien vorgeschlagen. Es zeigt sich heute immer noch kein abschließender Konsens in diesen Erklärungen, weshalb auch in der Literatur mehrere dieser Theorien zum Vergleich einander gegenübergestellt werden. Im folgenden wird ein Modell kurz diskutiert, welches heftige kohärente Dampfexplosionen durch Analogie zu chemischen Detonationen erklärt.

### *Detonations-Konzept nach Board & Hall*

S.J. Board, R.W. Hall & R.S. Hall /5/ haben ein Modell für die Ausbreitung einer Dampfexplosion vorgeschlagen, das auf der Übertragung der Theorie chemischer Detonationswellen beruht. Dieses Modell ist in der Lage, einige experimentelle Befunde zu erklären und sagt große Wirkungsgrade voraus (Abb.3). An die Stelle der Energiefreisetzung durch Verbrennung bei einer chemischen Detonation wird die thermische Energieumsetzung in die flüchtige Phase bei gleichzeitiger Fragmentation gesetzt. Nach diesem Modell unterscheidet man vier Phasen (Abb.3):

Ungestörtes Gebiet:

Zunächst liegt ein zündfähiges Gemisch (hier Schmelze und Kühlmittel in grober Verteilung) vor. In der groben Verteilung (coarse mixture) sind am Anfang Schmelzetropfen durch einen Dampffilm vom Kühlmittel abgeschirmt, sowohl thermisch als auch in gewissem Umfang mechanisch. In diesem Zusammenhang sei die Bedeutung des Filmsiedens hervorgehoben, da dieses als eine der notwendigen Bedingungen für Dampfexplosionen allgemein anerkannt ist. Beim Filmsieden isoliert ein zusammenhängendes Dampfpolster die wärmeabgebende Oberfläche von der Flüssigkeit. Der Wärmeübergang ist daher kleiner als bei etwas niedrigeren Temperaturen im Bereich des Übergangssiedens oder Blasensiedens.

Filmsieden ist Voraussetzung für die Ausbildung einer groben Vermischung. Nur wenn ein isolierender Dampffilm vorhanden ist, ist genügend Zeit, die heißen und kalten Komponenten zu vermischen, ohne daß eine vorzeitige Entspeicherung der Wärme stattfindet.

Fragmentationszone:

Der Dampffilm wird durch eine kurze, heftige Störung (Stoßwelle) zum Kollabieren gebracht. Dadurch wird das Anfangsgemisch zur Reaktion gebracht. Durch einen direkten Kontakt der heißen Schmelze mit dem Kühlmittel erfolgt ein rascher Wärmeaustausch mit einer schnellen Entspeicherung der thermischen Energie. Es findet eine explosionsartige Verdampfung des Kühlmittels statt. Bedingt durch die unterschiedliche Beschleunigung von

Schmelze und Kühlmittel wirken Strömungs- und Oberflächenkräfte, die die Zerteilung der Schmelze einleiten. Befindet sich das heiße Material zum Zeitpunkt des Dampffilm-Zusammenbruchs im flüssigen Zustand, ist die Wahrscheinlichkeit eines Fragmentationsprozesses größer als in festem Zustand. Gründe dafür sind die kleinere benötigte Fragmentationsenergie und die schnellere Zerteilungsmöglichkeit.

Expansionszone:

Durch die Zerteilung der Schmelzetropfen in feine Fragmente wird die gemeinsame Oberfläche zwischen Schmelze und Kühlmittel stark vergrößert, so daß der Temperaturengleich zwischen den Fragmenten in extrem kurzen Zeiten ( $10^{-5}$ s) erfolgt. Die durch die schnelle Aufheizung des Kühlmittels bedingte Expansion bzw. Druckerhöhung speist ihrerseits wieder die Stoßwelle, so daß diese ohne abzuklingen durch das ganze Gemisch läuft. Es kommt zu vermehrter Verdampfung und Entspannung.

Stationäre Zone:

Der Fragmentationsprozeß ist hier soweit abgeschlossen, daß man von einer stationären Zone sprechen kann. Es liegt ein ruhendes Gemisch aus Fragmenten, Wasser und Dampf vor.

Wie bereits ausgeführt, ist eine sehr schnelle Bildung einer ausreichenden Menge Dampf für die Entstehung einer Dampfexplosion erforderlich. Der dazu benötigte große Wärmeübergang wird durch eine Kontaktflächen-Vergrößerung ermöglicht. Daher ist es naheliegend, anzunehmen, daß eine ausreichende Fragmentation des heißen Materials für das Zustandekommen einer Dampfexplosion notwendig ist. Eine ausreichende Fragmentation kann die Kontaktfläche zwischen heißer und kalter Flüssigkeit so weit erhöhen, daß eine größere Dampfmenge so schnell erzeugt wird, daß sie nicht abströmen kann. Dadurch baut sich ein hoher Druck auf, der zu einer explosionsartigen Entspannung führt. Entscheidend für das Verständnis von Dampfexplosionen ist deshalb die Frage, wie und unter welchen Bedingungen eine ausreichende Fragmentation zustandekommt.

## 2.5 Fragmentations-Mechanismen

### 2.5.1 Beschleunigungsbedingte Tropfenfragmentation

Bei beschleunigungsbedingter Tropfenfragmentation (acceleration induced fragmentation) handelt es sich um einen Fragmentationsmechanismus, der durch Strömungskräfte ohne

thermische Effekte hervorgerufen wird. Die Frage, unter welchen Bedingungen ein Tropfen zerteilt wird, wie lange dieser Vorgang dauert und wie groß die kleineren Tropfen sind, die bei der Fragmentation entstehen, hat Schriewer /6/ in einer ausführlichen Studie über hydrodynamische Fragmentation von Flüssigkeitstropfen behandelt. Die folgenden Erläuterungen sind weitgehend dieser Arbeit entnommen.

Bringt man einen Tropfen in eine stationäre Strömung ein, so erfährt er eine rasche Beschleunigung, bis seine Relativgeschwindigkeit praktisch null ist. Überschreitet die Strömungsgeschwindigkeit einen kritischen Wert, so wird der Tropfen aufgrund der auf ihn wirkenden hydrodynamischen Kräfte zerfallen. Die Gründe für diese hydrodynamische Tropfenfragmentation können folgende sein:

a) Der Druck des strömenden Mediums auf den Tropfen (proportional  $\rho_a u_a^2$ ) beschleunigt den Tropfen. Die resultierende Tropfengeschwindigkeit sei  $u_t$ . Für die Wirkung der Strömung auf die Tropfenform sind die Relativgeschwindigkeit  $\Delta u = u_a - u_t$  sowie die Tropfenbeschleunigung  $a_t = du_t/dt$  wesentlich.

b) Die Druckverteilung auf der Tropfenoberfläche verursacht dessen Verformung. Ihr entgegen wirkt die Oberflächenspannung  $\sigma$ . Überschreitet die Deformation des Tropfens ein bestimmtes Maß, so tritt Zerfall ein. Als Ursache kann man das Bestreben zur Minimalisierung der Oberflächenenergie ansehen. Die dynamische Zähigkeit  $\mu_t$  beeinflusst die Deformationsgeschwindigkeit.

c) Die Tangentialkomponente der Strömung an der Tropfenoberfläche übt infolge der Zähigkeiten ( $\mu_t, \mu_a$ ) eine Scherkraft aus, welche die randnahen Schichten des Tropfens (in der sogenannten Grenzschicht) in Bewegung setzt. Beim Überschreiten einer bestimmten Relativgeschwindigkeit tritt eine Ablösung der Grenzschicht auf, die sofort in feine Nebeltröpfchen zerfällt.

d) Die in dem Tropfen induzierten Wirbelbewegungen können infolge Zentrifugalkräften die Abspaltung des Tropfens verstärken.

e) Das Zusammenwirken verschiedener hydrodynamischer Kräfte kann an der Tropfenoberfläche Wellen auslösen, die möglicherweise instabil sind, schnell wachsen können und dadurch zum Tropfenzerfall führen:

*-Taylor-Instabilität durch starke Beschleunigung von der leichteren in Richtung schwerer Komponente (Luvseite des Tropfens in Gas).*

*-Helmholz-Instabilität infolge der Relativgeschwindigkeit an der Grenzfläche mit Dichteunterschieden (wie z.B. der Wind über einem See).*

*-Kapillarwellen. Oberflächenspannungen versuchen Wellen zu glätten, sie beeinflussen dadurch die Entstehung von Wellen.*



f) Die Wirbelablösungen an der Leeseite des Tropfens führen zu pulsierenden Druckfeldern an der Tropfenoberfläche. Dies kann die Fragmentation verursachen oder unterstützen.

g) Der Tropfen wird aufgrund der Zähigkeitskräfte in einer Scherströmung verzerrt und die Oberflächenkräfte sind nicht stark genug, sich dieser Verzerrung zu widersetzen. Dies kann zum Tropfenzerfall führen.

Welcher dieser Prozesse unter gegebenen Umständen eintritt, hängt vom Verhältnis der wirkenden Kräfte zueinander ab. Dieses läßt sich durch dimensionslose Kennzahlen ausdrücken. Die wichtigste Kennzahl, die auch bei der Modellierung in dem Computer Code IVA3 herangezogen wird, ist die Weberzahl. Die Weberzahl beschreibt das Verhältnis des Staudrucks (Trägheitskraft) zur Oberflächenspannung:

$$We = \rho_a u^2 R_i / \sigma$$

Abb. 4 enthält verschiedene Zerfallsformen bei zunehmender Weberzahl.

Wie im einzelnen anhand der Weberzahl die Modellierung in IVA3 durchgeführt wird, ist im Teil zwei der Code-Beschreibung /12/ ausführlich dokumentiert. Des weiteren läßt sich für alle bereits erwähnten Fragmentationsmechanismen sagen, daß die Tropfenbeschleunigung eine maßgebliche Rolle spielt.

## 2.5.2 Strahlfragmentation

Buchanan & Dullforce /7/ haben ein Detonationsmodell vorgeschlagen, bei dem die Fragmentation durch eine kollabierende Blase in der Nähe einer Grenzfläche zwischen heißem und kaltem Medium ausgelöst wird und das zu einer Art Kettenreaktion führen kann. Dieses Modell (jet disintegration), dessen Details in Buchanan /8,9,10/ ausgeführt sind, geht davon aus, daß die Wechselwirkung in fünf Stufen eingeteilt werden kann.

1) Durch einen Auslösemechanismus (z.B. Beginn des Übergangssiedens) kommen heißes Medium und Kühlmittel in Flüssig-Flüssig-Kontakt. Im Kühlmittel bildet sich eine Dampfblase.

2) Die Dampfblase wächst und kollabiert wieder. Der Zusammenbruch der Blase ist unsymmetrisch; es bildet sich ein Strahl der kalten Flüssigkeit, der sich mit hoher Geschwindigkeit auf die Grenzfläche zubewegt.

3) Der kalte Strahl dringt in die heiße Flüssigkeit ein und wird dort aufgebrochen. Dadurch steigt die Kontaktfläche zwischen den beiden Flüssigkeiten exponentiell an.

4) Entsprechend der vergrößerten Kontaktfläche nimmt auch der Wärmestrom von heißer Flüssigkeit nach kalter Flüssigkeit zu.

5) Ist der in die heiße Flüssigkeit eingedrungene Strahl genügend aufgeheizt, setzt Verdampfung ein; es bilden sich unter hohem Druck viele neue Dampfblasen kleineren Durchmessers, die sich ausdehnen und die heiße Komponente in Richtung der kalten Flüssigkeit beschleunigen. Von da an wiederholt sich der Vorgang bei Stufe 2.

Dies ist nur eine kurze Beschreibung der verschiedenen Stufen. Einige physikalische Details dieser Stufen werden in /8,9,10/ diskutiert. Abb. 5 u. 6 zeigen das Eindringen eines Strahls in eine ebene Flüssigkeit.

### 2.5.3 Überblick der Fragmentationsmodelle in IVA3

Die Modellierung der Fragmentierungsprozesse in IVA3 erfolgt u.a. durch die beiden unter 2.5.1 u. 2.5.2 beschriebenen Fragmentationsmodelle. Unter Einführung neuer Größen und Anwendung der bereits diskutierten Fragmentationsmodelle werden die Fragmentationsmechanismen beschrieben /12/.

Um die geometrischen Größen der Partikel, z.B. Blasen- oder Tropfendurchmesser usw., beschreiben zu können, wird in IVA3 der Begriff der *Partikeldichteverteilung*  $n_{d\infty}$  (*particle number density = Anzahl der Partikel im Kontrollvolumen*) für jedes Geschwindigkeitsfeld eingeführt.

Die Partikeldichteverteilung ist folgendermaßen definiert:

$$n_{d\infty} = \alpha_d / (\pi D_{d\infty}^3 / 6) ,$$

mit

$\alpha_d$  = Volumenanteil der Partikel im Kontrollvolumen

$D_{d\infty}$  = die stabile Partikelgröße nach der Fragmentation

Mechanische Quellen für Partikelzu- oder abnahme d.h. Fragmentation und Kollision, werden mittels der *Partikelproduktionsrate*  $\dot{n}_{dsp}$  (*production rates*) beschrieben. Sie überführt innerhalb der charakteristischen Zeit ( $\Delta \tau_{br}$ ) für den Fragmentationsvorgang die augenblickliche Partikeldichteverteilung ( $n_d$ ) in die stabile Partikeldichteverteilung ( $n_{d\infty}$ ).

$$\dot{n}_{dsp} = \frac{n_{d\infty} - n_d}{\Delta \tau_{br}} = n_d \left\{ \left( \frac{D_d}{D_{d\infty}} \right)^3 - 1 \right\} / \Delta \tau_{br}$$

Empirische Informationen in Form von Korrelationen, z.B. Ahmad (1970) /14/ für die Bestimmung des stabilen Partikeldurchmessers, werden benutzt, um

- (a) die stabile Partikeldichteverteilung ( $n_{d\infty}$ ) und
  - (b) die charakteristische Zeit des Fragmentationsvorgangs ( $\Delta \tau_{br}$ )
- zu ermitteln.

Die hauptsächlichen Charakteristika des Fragmentationsvorgangs sind

- (a) die stabile Partikelgröße nach der Fragmentation ( $D_{d\infty}$ ) und
- (b) die Dauer dieses Vorgangs ( $\Delta \tau_{br}$ ).

Durch Einführung der Weberzahl ( $We = \rho u^2 R / \sigma$ ) kann die Partikelproduktionsrate wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{D_d}{D_{d\infty}} = \frac{We_d}{We_{d\infty}} \left( \frac{V_c - V_{d\infty}}{V_c - V_d} \right)^2$$

$$\dot{n}_{dsp} = n_d \left\{ \left( \frac{We_d}{We_{d\infty}} \right)^3 \left( \frac{V_c - V_{d\infty}}{V_c - V_d} \right)^6 - 1 \right\} / \Delta \tau_{br},$$

wobei

$D_d$  = die anfängliche Partikelgröße

$D_{d\infty}$  = die stabile Partikelgröße nach der Fragmentation

$We_d$  = die anfängliche Weberzahl

$We_{d\infty}$  = die Weberzahl nach der Fragmentation

$V_c$  = die Geschwindigkeit des kontinuierlichen Feldes

$V_{d\infty}$  = die Geschwindigkeit der dispersen Partikel nach der Fragmentation

$V_d$  = die anfängliche Geschwindigkeit des Partikels

darstellen.

In IVA3 wird zwischen der Fragmentation von Blasen und Tropfen unterschieden. In beiden Fällen werden aber empirische Korrelationen z.B. zur Strahlfragmentation (Epstein u. Fauske (1985) /15/) und zur beschleunigungsbedingten Tropfenfragmentation (Pilch, Erdman u. Reynolds (1981) /16/) verwendet, um die stabilen Partikeldurchmesser ( $D_{d\infty}$ ), die Dauer des Fragmentationsvorgangs ( $\Delta \tau_{br}$ ) und gegebenenfalls auch die Weberzahl ( $We_{d\infty}$ )

zu bestimmen. Diese Werte werden anschließend für die Bestimmung von Partikeldichteverteilung und Partikelproduktionsrate benötigt.

In IVA3 wird nicht nur die Fragmentation von Blasen oder Tropfen modelliert, sondern auch deren mögliche Agglomeration und Koaleszenz. Die pro Zeiteinheit koaleszierenden Partikel werden durch folgende Differentialgleichung definiert:

$$\frac{dn_d}{d\tau} = -\dot{n}_{dcoal} = -f_{dcoal} \frac{n_d}{2},$$

wobei  $\dot{n}_{dcoal}$  die augenblickliche Koaleszenzrate und  $f_{dcoal}$  die Koaleszenzfrequenz darstellen, mit der jeweils 2 der  $n_d$  Partikel koaleszieren. Die nach einem Zeitintervall ( $\Delta\tau$ ) pro Volumeneinheit existierende Anzahl der Partikel kann durch Integration obiger Gleichung bestimmt werden:

$$n_{d,\tau+\Delta\tau} = n_d e^{-f_{dcoal}\Delta\tau/2}$$

Die zeitlich gemittelte Koaleszenzrate ergibt sich somit aus

$$\dot{n}_{dcoal} = \frac{n_d - n_{d,\tau+\Delta\tau}}{\Delta\tau} = n_d(1 - e^{-f_{dcoal}\Delta\tau/2})/\Delta\tau$$

Da nicht jeder Zusammenstoß tatsächlich zur Koaleszenz führt, wird die Koaleszenzfrequenz eines Partikels als Produkt aus Kollisionsfrequenz  $f_{dcol}$  und Koaleszenzwahrscheinlichkeit  $f_{dcoal}^*$  definiert.

$$f_{dcoal} = f_{dcol} f_{dcoal}^*$$

Auch hier werden Korrelationen aus verschiedenen Arbeiten, z.B. Howarth /18/ für die Bestimmung der Kollisionsfrequenz benutzt, um die entsprechenden Werte zu bestimmen.

Thermodynamische Quellen, d.h. die Entstehung von Partikeln durch Kondensation und Verdampfung aus Keimen in metastabilen Zuständen, werden durch Keimbildungstheorien modelliert. Für Felder mit mikroskopischen Partikeln und/oder gelösten Gasen werden heterogene Keimbildungstheorien und ein verzögertes Einsetzen der Keimbildung, hervorgerufen durch Druckgradienten, herangezogen. Für reine, metastabile Felder wird die homogene Keimbildungstheorie benutzt. Zusätzlich zur Konvektion wird die Entstehung bzw. das Verschwinden von Partikeln durch die lokalen mechanischen und thermodynamischen Bedingungen in einer Zelle bestimmt.

Nach der Bestimmung des Strömungsbildes (flow pattern) und der Partikeldichteverteilung errechnet IVA3 die makroskopischen Erhaltungsgleichungen für jedes Geschwindigkeitsfeld, die Massenproduktionsrate, die Energieübertragungsrate sowie die Kräfte zwischen den einzelnen Feldern und zwischen Wand und Feldern.

### 3. Beschreibung des IVA3-Codes

#### 3.1 Übersicht

Viele Prozesse in unserer Umwelt sowie in der Technik stellen transiente Mehrphasen-Mehrkomponenten-Strömungen dar. In den letzten 20 Jahren wurden Anstrengungen angestellt, transiente Mehrphasenströmungen mit dem Computer zu simulieren, nachdem sich die Computer-Simulation neben experimentellen und theoretisch analytischen Studien als ein leistungsfähiges Werkzeug erwiesen hat.

Das Computerprogramm IVA3 wurde für die numerische Simulation von Strömungen aus den 3 Komponenten Luft, Wasser und Schmelze entwickelt. Die Komponenten bilden die Fluide: Luft mit Wasserdampf, Wasser mit mikroskopischen festen Partikeln, die von Wasser getragen werden können, und Schmelzen mit einem eigenständigen Geschwindigkeitsfeld. Die Schmelzen liegen entweder flüssig, im fest-flüssigen Zweiphasengleichgewichtszustand oder fest, in der Form von makroskopischen Partikeln vor. Diese Mehrphasen-Dreikomponenten-Strömungen sind transient und dreidimensional.

#### 3.2 Strömungsmodell

Basierend auf diesem Drei-Fluid-Modell simuliert der IVA3-Code transiente Strömungsvorgänge. Die 3 eigenständigen Fluide können miteinander in Wechselwirkung treten. Die Fluide sind durch ihre Temperatur, Geschwindigkeit und Zusammensetzung charakterisiert. Jedes Fluid besteht aus zwei Komponenten, von denen die eine ihren Aggregatzustand ändern kann (z.B. Verdampfen und Kondensieren), die andere inerte Komponente im Verlauf des transienten Vorgangs keine Aggregatzustandsänderung durchläuft. Da jedes Fluid eine eigene Geschwindigkeit besitzt, hat man hier insgesamt drei Geschwindigkeitsfelder, die sich untereinander im mechanischen und thermodynamischen Nichtgleichgewicht befinden. Die Fluide können in kontinuierlicher oder disperser Form vorliegen, entsprechend wird zwischen kontinuierlichen und dispersen Feldern unterschieden.

Die Gasphase (1. Geschwindigkeitsfeld) besteht aus kondensierbaren und nicht kondensierbaren Komponenten. Das zweite und das dritte Geschwindigkeitsfeld bestehen aus Flüssigkeit und festen Partikeln, die innerhalb des jeweiligen Feldes im thermodynamischen und mechanischen Gleichgewicht sind. Das nicht kondensierbare Gas ist die erste Komponente, der Dampf und die Flüssigkeit (Wasser) sind die zweite Komponente, die festen Partikel und die flüssige Schmelze stellen die dritte Komponente dar.

Im IVA3-Code werden Zustandsgleichungen und Transporteigenschaften für

- (a) Luft
- (b) Wasser
- (c) Dampf
- (d) Schmelze
  - (i) Stahl
  - (ii) Uranoxid ( $\text{UO}_2$ )
  - (iii) Corium (60%  $\text{UO}_2$ , 16%  $\text{ZrO}_2$ , 24% Stahl (67% Fe, 27% Cr, 12% Ni))

verwendet, wobei die unter (d) genannten Stoffe sich im flüssigen oder flüssig-festen oder auch im fest-dispersen Zustand befinden können. Tab. 2 zeigt eine Gegenüberstellung der mathematischen Simulation und des physikalischen Zustandes. In IVA3 sind insgesamt 20 modellierte *flow regimes* gegeben. Abb. 7 zeigt diese Strömungsformen; entsprechende Erklärungen sind in Tab.1 bzw. Legende zu Abb. 7 zusammengefaßt. Die Bestimmung der Strömungsformen in jeder Strömungszelle erfolgt aufgrund der momentanen Fluidgeschwindigkeiten und der zugehörigen Volumenanteile. Die Zuordnung kann anhand der zu dem jeweiligen flow regime gehörenden Nummer (IREGIM) nachvollzogen werden.

### 3.3 Geometrie

Die Mehrphasen-Dreikomponenten-Strömung wird 3-dimensional in einem zylindrischen oder kartesischen Integrationsbereich mit beliebigen Einbauten, und, falls erwünscht, einschließlich der Spaltzone eines DWR's simuliert. Beliebige Hindernisse in der Strömung können anhand dynamischer Flächendurchlässigkeiten modelliert werden. Beliebige geometrische Strukturen können durch volumetrische Porositäten modelliert werden. Im letzteren Fall wird automatisch zwischen *Poolströmungen* (*keine Wand - Strömungs - Wechselwirkung*, d.h. die Volumina sind frei von technischen Strukturen) und *Kanalströmungen* (*starke Wand - Strömungs - Wechselwirkung*, d.h. teilweise sind die Volumina von technischen Strukturen besetzt) unterschieden. Demzufolge wird mit an das Strömungsbild angepaßten Modellen, basierend auf lokalen Strömungsbedingungen und lokalen geometrischen Längenmaßstäben, gerechnet.

### 3.4 Anfangs- und Randbedingungen

In IVA3 sind Anfangs- und Randbedingungen anzugeben. Dadurch können Anfangsparameter gesetzt werden, die sich im Verlauf der Rechnungen ändern können, oder Randbedingungen mit einer Vielfalt von Parametern für die Dauer der Rechnung konstant gehalten werden. Diese Parameter können als Funktion der Zeit definiert werden.

Eine ausführliche Dokumentation hierüber findet sich in /13/.

### 3.5 Eingabedaten für IVA3

Die für IVA3 zu erstellenden Eingabedaten sind folgendermaßen unterteilt:

- 1) Dimensionen und Parameter
- 2) Steuergrößen
- 3) Geometrie
- 4) Anfangsbedingungen
- 5) Randbedingungen

In IVA3 stehen drei Stoffdatensätze für die Zustandsgleichungen von (a) Uranoxid, (b) Coorium, und (c) Stahl zur Verfügung. Mindestens eine von ihnen muß verwendet werden. Im Anhang dieses Berichts sind alle für die hier durchgeführten Rechnungen benutzten Informationen angegeben.

Eine ausführliche Beschreibung der benötigten Eingabedaten ist in /13/ dargestellt. Ebenso werden in /13/ die Erstellung einer lauffähigen Prozedur und die ausgegebenen Daten während der Rechnung beschrieben, was für die Arbeit mit IVA3 unerlässlich ist.

### 3.6 Programmstruktur

Das Computerprogramm IVA3 besteht aus einem Hauptprogramm, 158 Unterprogrammen und einem ASSEMBLER-Unterprogramm. In diesen Programmen sind insgesamt ca. 8700 Programmschritte mit ca. 18.000 Programmzeilen enthalten. Die modulare Strukturierung in 158 Unterprogrammen vereinfacht eventuelle Verbesserungen und weitere Entwicklungen in einem Modul mit leicht lokalisierbarer Fehlerbearbeitung. Trotz des modularen Aufbaus ist

die Verfolgung des Rechenablaufs und des Einsatzes der verschiedenartigen Modelle für den Anwender sehr schwierig.



## 4. Geometrische Modelle zum Wasserzutritt in die Schmelze

### 4.1 Beschreibung der geometrischen Modelle

Für die rechnerische Untersuchung der Fragmentation heißer Schmelzen durch Wasserzutritt von unten werden geometrische Modelle gewählt, die in den Abbildungen 10 und 12 wiedergegeben sind. Im wesentlichen bestehen sie aus einem in zwei Kammern geteilten Behälter und einer Flutwasserzuführung. Zum Zeitpunkt null ist die obere Kammer mit Schmelze und die untere mit Wasser von einem bestimmten Vordruck gefüllt.

Das erste geometrische Modell (s. Abb. 10) besteht aus zwei zylindrischen Kammern, die konzentrisch übereinander angeordnet und durch eine Bodenplatte thermisch getrennt sind.

Die obere Kammer, der Schmelzebehälter, besitzt eine Höhe von 120 mm, einen Innendurchmesser von 100 mm und ist nach oben offen. Die Bodenplatte hat eine Stärke von 10 mm und besitzt in der Mitte eine Öffnung von 10 mm Durchmesser. Die untere Kammer, der Wasserbehälter, hat die gleiche Grundfläche wie der Schmelzebehälter und ist 100 mm hoch. Sie hat einen seitlich angeordneten Wassereinlaufstutzen von 20 mm Durchmesser, wodurch Nachströmen von Flutwasser simuliert werden kann.

Das zweite geometrische Modell (s. Abb. 12) ist in seinen äußeren und inneren Abmessungen nahezu identisch. Nur die Bodenplatte wird anders simuliert als in dem ersten geometrischen Modell. Zum einen hat die Bodenplatte in dem zweiten Modell nur noch die Funktion der Trennung von oberem und unterem Behälter, besitzt also keine Dicke mehr, zum anderen wird die Öffnung erweitert auf 40 mm Durchmesser, aber durch eine Siebplatte mit 25% Durchlässigkeit ersetzt und besitzt damit einen um den Faktor 4 größeren effektiven Strömungsquerschnitt. Diese Auswahl einer Siebkonfiguration für das Mittenloch erfolgte, weil während der Rechnungen mit dem IVA3-Code bei Zellen, die eine kleinere Maschenweite als 20 mm haben, Konvergenzschwierigkeiten auftraten; die Maschenweite der Zellen muß viel größer sein als die darin enthaltenen Partikelgrößen. Bei Wahl einer größeren Maschenweite und gleichzeitiger Begrenzung der Flächendurchlässigkeit konnten diese Konvergenzprobleme reduziert werden.

Die ausgewählten geometrischen Modelle ähneln in ihrer Konfiguration den in bisherigen experimentellen Studien eingesetzten Versuchsanordnungen.

## 4.2 Simulierte Form der geometrischen Modelle

Um die oben angeführten Modelle mit dem IVA3-Code darstellen zu können, wird ein Kreiszyylinder (s. Abb. 8) in Elementarvolumina (Zellen) aufgeteilt. Die Indizes der Raumkoordinaten werden wie folgt eingeführt:

$$r\text{-Richtung } i = 1, IM + 2$$

$$\theta\text{-Richtung } j = 1, JM + 2$$

$$z\text{-Richtung } k = 1, KM + 2$$

Dabei bezeichnen die Variablen IM, JM und KM die Anzahl der tatsächlichen Zellen in radialer, azimuthaler bzw. axialer Richtung.

In dem hier verwendeten ersten Modell (Abb. 11) sind 3 Radialzellen (IM = 3), 1 Azimutal-zelle (JM = 1) und 14 Axialzellen (KM = 14) enthalten. Im zweiten Modell (Abb. 13) wird die gleiche Anzahl von Radial- und Azimutalzellen und 20 Axialzellen (KM = 20) verwendet.

Der IVA3-Code führt rechnerische Randschichten ein (s. Abb. 8), die dazu dienen, ein abgeschlossenes Integrationsgebiet zu erzeugen und die dazugehörigen Randbedingungen zu definieren. Variablen zur Erzeugung der 6 begrenzenden Flächen werden wie folgt festgelegt:

$$i = 1 \text{ bzw. } IM + 2, \text{ für alle } j, k \text{ für inneren und äußeren Zylindermantel}$$

$$j = 1 \text{ bzw. } JM + 2, \text{ für alle } i, k \text{ für die azimuthalen Flächen}$$

$$k = 1 \text{ bzw. } KM + 2, \text{ für alle } i, j \text{ für die Deckflächen.}$$

Die Elementarvolumina haben die in Abb. 9 dargestellte Form. Die Volumengrenzen sind durch  $r_h, \theta_h, z_h$  definiert. Die Zonenmitten sind durch die Koordinaten  $r, \theta, z$  definiert. Die Abstände von den Zonenmitten sind  $\Delta r_h, \Delta \theta_h, \Delta z_h$ .

In den Randzellen werden Randbedingungen als Funktion der Zeit gesetzt. Nach der Festlegung der Randbedingungen lassen sich die Zellen des internen Bereiches innerhalb der Zeitschrittweite  $\Delta \tau$  einheitlich behandeln.

Die in den jeweiligen Rechnungen verwendeten Anfangs- bzw. Randbedingungen und andere notwendige Daten sind im Anhang dieses Berichtes als Eingabedaten für die entsprechenden Rechnungsläufe wiedergegeben.

## 5. Rechnungen mit IVA3 zur Fragmentierung der Schmelze

### 5.1 Vorgenommene Ergänzungen in IVA3

Nach anfänglichen Installierungsschwierigkeiten von IVA3 auf der IBM M3090 Rechenanlage des Kernforschungszentrums Karlsruhe sind bei den Rechnungen Schwierigkeiten aufgetaucht, die überwiegend auf Konvergenzprobleme zurückgeführt werden können, die einen starken Einfluß auf die Zeitschrittbestimmungen haben. Eine Simulation über längere Prozeßzeiten bei vertretbaren Kosten der Rechenzeit ist nur möglich, wenn die Rechenzeitschritte nicht allzu klein gesetzt werden. Mit den Ergänzungen, die im folgenden beschrieben werden, konnten diese Probleme größtenteils befriedigend gelöst werden.

#### *Reproduzierbarkeit der Ergebnisse:*

Bei Rechnungen mit mehreren Rechenläufen werden *Restartfiles* ausgeschrieben, die auch den zuletzt gesetzten Zeitschritt (DTAU) enthalten. In dem Eingabesatz (INPUT-DECK) für den Restart ist jedoch ein anderer Zeitschritt definiert, der das vorherige DTAU im Restartfile überschreibt. Dies hat zur Folge, daß z.B. bei verschiedenen Zeitlängen der Rechenläufe teilweise stark von einander abweichende Ergebnisse erzielt werden, d.h. bei sonst gleichen Bedingungen werden für dieselbe Simulationsaufgabe unterschiedliche Ergebnisse erzielt, weil die alten Zeitschritte nicht übernommen werden. Der Code wurde deshalb dahingehend geändert, daß der aus einem Restartfile gelesene Zeitschritt für die Rechnungen übernommen wird.

#### *Massenerhaltung:*

Bei der Festlegung von den Randbedingungen in den Randzellen an dem oben offenen Ende des Behälters wurde die Schwierigkeit beobachtet, daß für diese Randzellen die Massenerhaltung, die über eine Dichtebestimmung geprüft wird, nicht in ausreichender Genauigkeit erfüllt wird. Um die Genauigkeit zu erhöhen, wird der Zeitschritt so weit reduziert, daß man sehr lange Rechenzeiten in Kauf nehmen muß, um längere Prozeßzeiten zu simulieren. Da die diesbezügliche Ungenauigkeit aber gering ist, wurde die Überprüfung der Massenerhaltung in diesen Zellen ausgesetzt und damit größere Zeitschritte zugelassen.

## 5.2 Simulationsmodell M02: Wasserzutritt durch eine freie Öffnung

### 5.2.1 Formulierung der Simulationsaufgabe M02

Bei dieser Simulationsaufgabe handelt es sich um das in Abb. 10 dargestellte geometrische Modell. Die untere Kammer und das Mittenloch der Bodenplatte ist mit Wasser von 90°C aufgefüllt. Die Wasserhöhe beträgt 100 mm. Ein Flutwassereinlaufstutzen am unteren Rand des Wasserbehälters ermöglicht das Nachströmen von Wasser. Die obere Kammer enthält Stahlschmelze, deren Temperatur 1500°C beträgt. Die Schmelzeschicht hat ebenfalls eine Höhe von 100 mm, daran schließt sich eine Luftschicht von insgesamt 4090 mm an. Sie ist deshalb so hoch gewählt, um Konvergenzprobleme bei den Rechnungen zu unterbinden. Die Druckverteilung im Behälter wurde so festgelegt, daß an der Öffnung, also an der Reaktionsfront Wasser-Schmelze, in der ersten Rechnung (R01) ein Druck von 0 bar und in der zweiten Rechnung (R02) ein wasserseitiger Überdruck von 0,1 bar ansteht.

### 5.2.2 Geometrie

Der zylindrische Behälter wird in

- 3 radiale Ringspaltzonen
- 8 azimutale Segmente je  $\pi/4$
- 12 axiale Schichten

aufgeteilt (s. Abb. 11). Als Anfangsbedingung zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  gilt:

Das Wasser wird innerhalb des Gebietes

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$2 \leq K \leq 5$$

sowie in der Öffnung

$$2 \leq I \leq 2$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$6 \leq K \leq 6$$

definiert. Die Stahlschmelze wird innerhalb des Gebietes

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$7 \leq K \leq 10$$

definiert. Die Luftschicht oberhalb der Schmelze ist in dem Gebiet

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$11 \leq K \leq 13$$

definiert. Die Öffnung in der Bodenplatte sowie der Flutwassereinlaufstutzen werden mittels der Flächendurchlässigkeiten, die zur Simulation von beliebigen Hindernissen in einer Strömung verwendet werden, simuliert.

### 5.2.3 Randbedingungen

An 3 Stellen ( $I = 2, 3, 4$ ;  $J = 2$ ;  $K = 14$ ) am oberen Ende des Behälters sowie an 1 Stelle ( $I = 5$ ;  $J = 2$ ;  $K = 2$ ) am Wassereinlaufstutzen werden Druck, Temperaturen, Massenkonzentrationen, Anteil der inerten Komponenten sowie die Volumenanteile der einzelnen Felder als Konstante über der Zeit angegeben. Damit wird am oberen Rand des Behälters eine konstante Luftatmosphäre simuliert, am Wassereinlaufstutzen wird das Vorhandensein von Wasser vorgegeben.

### 5.2.4 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M02R01 ohne Überdruck

#### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

In Höhe der Kontaktfläche von Wasser und Schmelze existiert zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  definitionsgemäß Druckgleichheit. Zu Beginn des Prozesses kommt es zum Kontakt zwischen Wasser und heißer Stahlschmelze in der Wasseröffnung, wodurch ein schlagartiges Verdampfen eingeleitet wird. Wie der Rechnung zu entnehmen ist, bilden sich in unmittelbarer Umgebung der Reaktionsfront (Wasseröffnung) unterschiedliche Strömungsformen in der Schmelze und dem Wasser aus. In der Wasserschicht bildet sich nach unten vordringend

zunächst ein im Hinblick auf eine eventuell auftretende Dampfexplosion reaktionsfähiges Gemisch aus Schmelzetropfen, diskreten Dampfblasen und Wasser (flow regime 5). In dieser mehr oder weniger groben Vermischung (coarse mixture) verdampft immer mehr Wasser und erhöht so den Dampfanteil. Dies führt dann zu einer Strömungsform, in der die fragmentierten Schmelzetropfen und diskrete Wassertropfen von Luft-Dampf-Gemisch getragen werden (flow regime 21). Diese Strömungsform breitet sich mit fortlaufender Prozeßdauer nach unten und seitlich aus. In der Schmelzeschicht bilden sich immer mehr Kanäle, durch welche Dampf und diskrete Wassertropfen nach oben strömen (flow regime 23). Diese Entwicklung pflanzt sich weiter nach oben und seitlich fort. Während der gesamten Simulationszeit sickert die kaum abgekühlte flüssige Schmelze durch die Wasseröffnung nach unten in den Wasserbehälter und sorgt dort für weiteres Verdampfen des Flutwassers. Abb. 14.1 - 2 sowie Abb. 15.1 - 6 zeigen in der Geometrie von Abb. 11 die Volumenanteile bzw. die Stromfelder von Dampf, Wasser und Schmelze zu den entsprechenden Zeiten. Durch die immer stabiler werdenden Kanäle in der Schmelzeschicht (flow regime 23) entweicht der sich bildende Dampf, wobei es zu keinem weiteren nennenswerten Druckanstieg kommt.

In einer CPU-Zeit von 61 Minuten konnte bei dieser Rechnung eine Prozeßzeit von ca. 2,4 sec simuliert werden. Die Rechnung endete durch Erreichen der vorgegebenen CPU-Zeit (STOP 3).

### *Fragmentationsprozeß*

Das rasche Verdampfen des Wassers und der damit verbundene Druckanstieg reißt die Stahlschmelze in der Schmelzeschicht auseinander und führt zur Kanalbildung, wodurch eine sprungartige Oberflächenvergrößerung stattfindet (s. Abb. 18). Im weiteren Verlauf des Prozesses nimmt die Oberfläche geringfügig ab, bedingt durch ein Auslaufen der Schmelze aus dem Integrationsgebiet, s. Abb. 16. Die kleinen Schwankungen deuten darauf hin, daß möglicherweise Agglomerierungen der fragmentierten Teile stattgefunden haben.

### *Drücke*

Bei dieser Rechnung sind insgesamt Daten für 15 Druckverläufe in 10 verschiedenen Zellen während der Simulation ausgeschrieben worden und in Abb. 22.1 - 15 dargestellt. Die Druckkurven können grundsätzlich in zwei Gruppen aufgeteilt werden. Alle Druckverläufe in dem Schmelzebehälter weisen nur geringe Druckstöße (max. 2,8 bar in der Zelle (2,2,7) s. Abb. 22.4) auf. In den ersten 10 ms nach dem Beginn des Prozesses kommt es zu kleineren Druckspitzen aufgrund des schlagartigen Verdampfens des in die Schmelze eintretenden Wassers. Der nach oben offene Behälter führt jedoch zu einem raschen Druckausgleich mit der Umgebung, so daß es zu keinem starken Druckanstieg kommt. Nach diesen anfänglichen Druckspitzen ist ein flacher Verlauf der Druckkurven, abgesehen von den aufgrund der numerischen Instabilität hervorgerufenen Schwankungen, bis zum Ende der simulierten Pro-

zeit von 2,37 sec zu beobachten. Im Wasserbehälter dagegen kommt es teilweise zu sehr hohen Druckstößen. Der maximale Druckanstieg von ca. 48 bar findet ca. 8 ms nach dem Beginn in der Zelle (2,2,5) unmittelbar unterhalb der Wasseröffnung statt, s. Abb. 22.2. Wie aus den Abb. 14.1 - 2 zu entnehmen, fließt Schmelze schon zu Beginn des Prozesses in den Wasserbehälter. Es kommt zu einer heftigen Verdampfung des Wassers, was aufgrund der nahezu geschlossenen Konfiguration des Wasserbehälters (confinement) zu einem starken Druckanstieg führt, der in seiner Höhe typisch für Dampfexplosionen ist. Von kleinen Schwankungen abgesehen verlaufen anschließend die Druckkurven ähnlich konstant wie im Schmelzebehälter, obwohl zu späteren Zeiten der Wahrscheinlichkeit für Dampfexplosionen und ähnliche Ereignisse wegen der größeren Zahl metallischer Tropfen im Wasser eher höher ist.

### *Temperaturen*

In Abb. 23.2 - 6 sind insgesamt 6 Temperaturverläufe der verschiedenen Felder in 4 Zellen dargestellt. Die Temperaturverläufe der Gasphase korrelieren mit den Druckverläufen in den entsprechenden Zellen. Ein Temperaturanstieg der Gasphase von ca. 337 K, also eine Gas-temperatur von ca. 700 K wird in der Zelle mit maximalem Druckanstieg (2,2,5) beobachtet (s. Abb. 23.2). Die Temperatur des Wassers (Abb. 23.6) steigt bis zur Verdampfungstemperatur an. Interessant ist die Frage, ob sich die stetig in das Wasser hineinströmende Stahlschmelze deutlich abkühlt. Aus der Simulationsrechnung ergibt sich, daß die Temperatur der Schmelze teilweise bis auf 1740 K abgesunken ist. Im wesentlichen sinkt die Temperatur der Schmelze trotz heftiger Wechselwirkung nur geringfügig. Der monoton absteigende Verlauf der Enthalpiekurve (Abb. 19) resultiert nicht aus einer Energieentspeicherung, sondern aus dem Auslaufen der Stahlschmelze aus dem Einlaufstutzen, der die Integrationsgrenze darstellt, s. Abb. 16.

### *Flutwasserstrom*

Im Abb. 20 ist die Gesamtmasse des Wassers im Integrationsbereich abgebildet. Durch den Verdampfungsprozeß nimmt diese Wassermenge zunächst relativ stark ab. Zu dem wird aufgrund des Druckanstieges Wasser aus dem Behälter über den Wassereinlaufstutzen herausgedrückt. Je nach Druckverhältnis im Wasserbehälter strömt Wasser wieder nach, was an den kurzzeitigen Zunahmen der Wassermenge im Integrationsgebiet zu erkennen ist. Der Wasseranteil im oberen Behälter, also im Schmelzebehälter und in der darüberliegenden Luftschicht, ändert sich über der gesamten Simulationszeit praktisch nicht. Nur zu Beginn, während der heftigen Wechselwirkungsphase, wird Wasser in die Schmelzeschicht eingetragen, s. Abb. 21.

## *Schmelzemasse*

Im Abb. 16 sind die Verläufe der Schmelzemesse im gesamten Integrationsbereich sowie in den verschiedenen Schichten dargestellt. Die gesamte Schmelzemesse im Integrationsgebiet nimmt während des Prozesses stetig ab. Betrachtet man die Volumenanteile (Abb. 14.1 - 2) und den Verlauf der Schmelzemesse in der Luftschicht oberhalb der Schmelzeschicht, ist es offensichtlich, daß die fehlende Schmelzemesse durch den Wassereinlaufstutzen aus dem Behälter ausgelaufen sein muß.

### **5.2.5 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M02R02 mit Wasservordruck**

#### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

Die Simulationsaufgabe M02R02 mit einem wasserseitigen Überdruck von 0,1 bar unterscheidet sich lediglich durch den Überdruck von der Simulationsrechnung M02R01. Zu Beginn dringt das unter Druck stehende Wasser in die Schmelzeschicht ein und drückt somit die darüber liegende Schmelzemesse nach oben. Das Wasser verdampft schlagartig, wodurch bereits nach etwa 20 ms die erste Fragmentationserscheinung auftritt (s. Abb. 28). Es bilden sich hauptsächlich zwei Strömungsformen, die sich in zwei Richtungen ausbreiten. Nach oben bildet sich eine Strömungsform, in der Schmelze- und Wassertropfen von Gasströmung getragen werden (flow regime 21). Nach unten breitet sich eine andere Strömungsform aus, in der Dampfblasen und Schmelzetropfen vom Wasser getragen werden (flow regime 5). Somit gelangt auch ein wenig Schmelze in den Wasserbehälter, was zur Bildung der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5) führt; die Menge ist jedoch so klein, daß dies zu keinem großen Druckanstieg führt. Im Verlauf des Prozesses bildet sich ein stabiler Wasserstrahl in die Schmelze hinein. An der Oberfläche dieses Wasserstrahls verdampft Wasser auf dem Weg nach oben und der Strahl kollabiert wieder. Dieser Vorgang wiederholt sich fortlaufend und ist z.B. deutlich erkennbar aus Abb. 24 und Abb. 31. Ferner deuten die Stufen in der Abb. 28 auf einen solchen Ablauf. Es bilden sich Kanäle in die Schmelzeschicht (flow regime 23), durch die der gebildete Dampf und kleine Wassertropfen nach oben entweichen. Ein Teil des Wasser gelangt bis in die Luftschicht hinein, das Wasser in der Schmelzeschicht verdampft also nicht vollständig (s. Abb. 31).

Nach einer CPU-Zeit von 61 Minuten, in der eine Prozeßzeit von ca. 0,69 s simuliert werden konnte, brach die Rechnung wegen Konvergenzproblemen ab (STOP 4).

#### *Fragmentationsprozeß*

Im Gegensatz zu der Simulationsrechnung M02R01 erfolgte die Fragmentierung der Stahlschmelze in Stufen (s. Abb. 28). Herbeigeführt wird dies durch die kurzzeitigen, kleinen, aber



häufigen Druckstöße. Diese mäßigen Druckspitzen reichen aus, die Schmelze auseinanderzureißen. Die kleinen lokalen Absenkungen in der Kurve ergeben sich aus den möglichen Agglomerierungen der fragmentierten Schmelzemasse. Insgesamt liegt die Oberflächenvergrößerung der Schmelze bei dieser Modellierung höher, d.h durch den wasserseitigen Überdruck kann eine größere Fragmentation erreicht werden und gleichzeitig kann das Einströmen der Schmelze in den Wasserbehälter verhindert werden.

### *Drücke*

Die Druckverläufe in insgesamt 13 Zellen sind in Abb. 32.1 - 13 dargestellt. Im Vergleich zur Simulationsrechnung M02R01 haben diese Druckkurven einen anderen Verlauf. In den Zellen kommt es zu kleineren, aber häufigeren Druckspitzen. Da am Anfang das Wasser gegenüber der Schmelzeschicht unter Überdruck stand (0,1 bar), konnte nur sehr wenig Schmelze in den Wasserbehälter gelangen. Dies begrenzt die Intensität der Wechselwirkung zwischen Schmelze und Wasser, wodurch trotz des nahezu geschlossenen Wasserbehälters keine hohen Drücke auftreten. In der Schmelzeschicht, in der das meiste Wasser mit der Schmelze in Kontakt tritt, haben die Druckkurven, abgesehen von kleinen Schwankungen, einen nahezu konstanten Verlauf. Wie auch in der Simulationsrechnung M02R01 ist hierfür ein schneller Druckausgleich mit der Umgebung verantwortlich. Damit bleibt ein Druckaufbau im nach oben offenen Schmelzebehälter unterbunden.

### *Temperaturen*

Die Temperatur der Gasphase erreicht bis zu 580 K in der Schmelzeschicht (s. Abb.33.1). In der Wasseröffnung werden etwa 530 K erreicht (s. Abb. 33.6). Dies zeigt, daß das Wasser, das durch den Überdruck in die Schmelzeschicht gelangt, z.T. verdampft. Da der Druckanstieg in der Schmelze aus bereits erwähnten Gründen nicht allzu hoch ist, kann nicht mit höheren Temperaturen der Gasphase gerechnet werden. Die Schmelzetemperatur sinkt örtlich bis zu 1700 K ( z.B. in der Zelle (2,2,7) unmittelbar über der Wasseröffnung s. Abb. 33.6), also kühlt sich die Stahlschmelze dort um ca 73 K ab, erwärmt sich jedoch wieder durch Zufluß neuer Schmelze aus Nachbarzellen. Insgesamt aber kühlt sich die Stahlschmelze kaum ab, wie aus dem Enthalpieverlauf (Abb. 29) ersichtlich wird. Dies ist darauf zurückzuführen, daß sehr wenig Wasser mit der Schmelze direkt in Wechselwirkung getreten ist. Der Verlauf der Kurve in Abb. 27, in der die im reaktionsfähigsten Strömungsmodell (flow regime 5) enthaltene Schmelzemasse über der Zeit aufgetragen ist, untermauert zusätzlich diese Begründung.

### *Flutwasserstrom*

Wie in Abb. 30 zu sehen ist, nimmt die Wassermenge im Integrationsgebiet zu, was auf das Nachströmen von Wasser durch den Wassereinlaufstutzen zurückzuführen ist. Ein Teil des

Wassers verdampft in der Schmelzeschicht und gelangt bis in die Luftschicht oberhalb der Schmelzeschicht. Abb. 31 zeigt diese Entwicklung deutlich. Durch den wasserseitigen Überdruck von 0,1 bar dringt ein Wasserstrahl in die Schmelzeschicht. Die Volumenanteil-Diagramme (Abb. 24) und die Volumenstrombilder (Abb. 25.1 - 6) verdeutlichen diese Tendenz.

### *Schmelzemasse*

Die Schmelzemasse im Integrationsgebiet bleibt konstant; d.h während des Prozesses wird keine Schmelze aus dem Integrationsbereich ausgetragen. Aus der Kurve in Abb. 26 ist ersichtlich, daß aufgrund des in die Schmelzeschicht hineingedrückten Wassers ein Teil der Schmelzemasse in die Luftschicht hochgedrückt wird. Der Anteil der Schmelzemasse im reaktionsfähigsten Strömungsmodell (flow regime 5) ist zunächst gering. Erst nach ca. 0,6 sec kommt es zur vermehrten Wechselwirkung dieser Art (s. Abb. 27) in der Schmelzeschicht.

## **5.3 Simulationsmodell M03 : Wasserzutritt durch eine Siebplatte**

### **5.3.1 Formulierung der Simulationsaufgabe M03**

Bei dieser Simulationsaufgabe handelt es sich um das in Abb. 12 dargestellte geometrische Modell, das dem Modell der vorangegangenen Rechnungen ähnlich ist. Die untere Kammer wird mit Wasser von 90°C aufgefüllt. Die Wasserhöhe beträgt 100 mm. Ein Flutwassereinflaufstutzen am unteren Rand des Wasserbehälters ermöglicht das Nachströmen von Wasser. In den Rechnungen R01 und R02 enthält die obere Kammer Stahlschmelze, deren Temperatur 1500°C beträgt. Die Schmelzeschicht hat ebenfalls eine Höhe von 100 mm, daran schließt sich eine Luftschicht von insgesamt 5000 mm an. Sie ist deshalb so hoch gewählt, um Konvergenzprobleme bei den Rechnungen zu unterbinden. Die Druckverteilung im Behälter wurde so festgelegt, daß zu Beginn an der Siebplatte, also an der Reaktionsfront Wasser-Schmelze, in der ersten Rechnung (R01) ein Druck von 0 bar und in der zweiten Rechnung (R02) ein wasserseitiger Überdruck von 0,03 bar ansteht.

In der Rechnung R03 enthält die obere Kammer Uranoxidschmelze ( $UO_2$ ), deren Temperatur 3400 K beträgt. An der Reaktionsfront herrscht zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  Druckgleichheit.

Die Simulationsrechnung R04 mit Stahlschmelze soll schließlich dazu dienen, bei gleichen Anfangs- und Randbedingungen einen direkten Vergleich zwischen Rechnungen mit Uranoxidschmelze und Stahlschmelze durchführen zu können. Deshalb wurde die Anfangstemperatur der Stahlschmelze, wie bei der Rechnung R03 mit Uranoxidschmelze, auf 3400 K gesetzt. Diese Anfangstemperatur wird aber von IVA3 auf die Verdampfungstemperatur von Stahl (3086,75 K) gesetzt, da dies den maximalen Temperaturwert für Stahlschmelze in dem Stoffdatensatz von IVA3 darstellt. Trotz der dadurch entstehenden unterschiedlichen Anfangstemperatur, kann ein Vergleich zwischen den Rechnungen mit den beiden Schmelzen

gemacht werden. Wie in der Rechnung R03, herrscht auch hier Druckgleichheit an der Reaktionsfront zum Zeitpunkt  $\tau = 0$ .

### 5.3.2 Geometrie

Der zylindrische Behälter wird in

- 3 radiale Ringspaltzonen
- 8 azimutale Segmente je  $\pi/4$
- 20 axiale Schichten

aufgeteilt. Als Anfangsbedingung zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  gilt:

Das Wasser wird innerhalb des Gebietes

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$2 \leq K \leq 6$$

definiert. Die Stahlschmelze wird innerhalb des Gebietes

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$7 \leq K \leq 11$$

definiert. Die Luftschicht oberhalb der Schmelze ist in dem Gebiet

$$2 \leq I \leq 4$$

$$2 \leq J \leq 10$$

$$12 \leq K \leq 21$$

definiert. Die Siebplatte (25% Durchlässigkeit) sowie der Flutwassereinlaufstutzen (100% Durchlässigkeit) werden mittels der Flächendurchlässigkeiten simuliert, s. Abb. 13.

### 5.3.3 Randbedingungen

An 3 Stellen ( I = 2,3,4; J = 2; K = 22) am oberen Ende des Behälters sowie an 1 Stelle (I = 5; J = 2; K = 2) am Wassereinlaufstutzen werden Druck, Temperaturen, Massenkonzentrationen, Anteil der inerten Komponenten sowie die Volumenanteile der einzelnen Felder als Konstante über der Zeit angegeben. Damit wird am oberen Rand des Behälters eine konstante Luftatmosphäre simuliert, am Wassereinlaufstutzen wird das Vorhandensein von Wasser vorgegeben.

### 5.3.4 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R01 ohne Überdruck

#### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

Zu Beginn des Prozesses kommt es zu einer heftigen Wechselwirkung an der siebartig konfigurierten Grenze zwischen dem Kühlwasser und der heißen Schmelze. Dies führt zu einer spontanen Verdampfung des Kühlmittels und einem Druckanstieg bis zu 5 bar in unmittelbarer Umgebung unterhalb der Reaktionsfront (Zelle (2,2,6) s. Abb. 42.6), bzw. sogar knapp 6 bar im Bodenbereich des Wasserbehälters (Zelle (4,2,2) s. Abb. 42.9). Die heiße Stahlschmelze strömt durch die Siebplatte in den Wasserbehälter hinunter (Abb. 35.1 - 6) und sorgt somit für vermehrte Gemischbildung und intensive Verdampfung des Kühlwassers. Im Wasserbehälter kommt es zu starker Verwirbelung des Wassers im Bereich des Einlaufstutzens (Abb. 35.1 - 6), was die Vermischung der Komponenten weiter verstärkt. Wie aus Abb. 37 zu sehen, werden zeitweise über 350 g fragmentierte Schmelzetropfen völlig von Wasser umgeben (flow regime 5).

Aus den Volumenstrombildern (Abb. 35.1 - 6) ist u.a. eine deutlich nach oben gerichtete Dampfströmung erkennbar. Der gebildete Dampf strömt fast ungehindert durch die in der Schmelzeschicht entstehenden Kanäle (flow regime 23) in die Umgebung ab. Der fehlende Druckaufbau in der Schmelzeschicht z.B. in der Zelle (2,2,7) (Abb. 42.4) und die dort modellierten Strömungsformen (flow regime 23) weisen auf einen derartigen Ablauf hin. Mit dem Dampf werden auch kleine Wassertröpfchen mitgerissen und gelangen durch die Schmelze hindurch in die Luftschicht (Abb. 41); deren Masse ist jedoch verschwindend gering.

Nach einer CPU-Zeit von 61 Minuten, in der ca. 0.8 s Prozeßzeit simuliert werden konnten, brach die Rechnung wegen nicht behebbarer Konvergenzprobleme ab.

### *Fragmentationsprozeß*

Wie aus Abb. 38 ersichtlich, erfolgt die Fragmentation der Stahlschmelze hauptsächlich in zwei Stufen. Die erste Stufe findet in den ersten 40 ms nach dem Prozeßbeginn statt. Dabei wird die Schmelze durch die anfänglichen Druckstöße in der Nähe der Siebplatte fragmentiert. Die zweite und größere Stufe tritt ca 0,10 s später auf. Zurückzuführen ist dies zum einen auf Druckstöße, die zu dieser Zeit im Bereich des Wassereinlaufstutzens (Zelle (4,2,2) s. Abb. 42.7) stattfinden. Möglicherweise werden die Schmelzetropfen im Gemisch (flow regime 5) durch die Druckspitze und die daraus resultierende Beschleunigung weiter fragmentiert. Zum anderen trägt auch die in den Wasserbehälter abfließende Schmelze zu dieser Oberflächenvergrößerung bei.

### *Drücke*

Bei dieser Rechnung werden insgesamt an 12 Stellen des Integrationsbereichs die Druckverläufe aufgezeichnet (s. Abb. 42.1 - 12). Gleich zu Beginn des Prozesses kommt es zu einem relativ hohen Druckaufbau im Bereich der Siebplatte (s. Abb. 42.6). Dieser Druckaufbau pflanzt sich nach unten in den Wasserbehälter und nach oben in die Schmelzeschicht fort. Durch die Konfiguration des Wasserbehälters wird zunächst jegliche Entspannung unterdrückt. Folglich kommt es zu einem höheren Druckaufbau im Bereich des Behälterbodens. Der maximal beobachtete Druck beträgt ca. 7 bar und liegt in den Zellen (2,2,3) und (4,2,2) im Wasserbehälter (s. Abb. 42.2 bzw. Abb. 42.7). In der Schmelzeschicht wird kein Druckaufbau beobachtet, weil durch die freie Öffnung in die Umgebung ein rascher Druckausgleich stattfindet (s. Abb. 42.10). Abgesehen von kleinen Schwankungen, die ihre Gründe mehr in der numerischen Instabilität haben, verlaufen die Druckkurven mit fortlaufender Prozeßdauer nahezu konstant.

### *Temperaturen*

Die Temperatur der Gasphase steigt teilweise über 550 K (s. Abb. 43.3). Entsprechend der Druckentwicklung und dem Wärmeübergang aus der Schmelze erwärmt sich die Gasphase, die überwiegend aus Dampf besteht. Abb. 43.1 - 3 u. Abb. 43.6 zeigen die Temperaturverläufe der Gasphase in verschiedenen Zellen. In der Schmelzeschicht werden keine höheren Temperaturen erreicht. Wie z.B. aus Abb. 43.6 ersichtlich, erwärmt sich der Dampf in der Zelle (2,2,6) nach dem Phasenwechsel zunächst und strömt nach oben bevor durch Nachströmen neuer Dampfmenigen niedrigerer Temperatur die Temperatur der Gasphase wieder abfällt. In Abb. 43.5 ist der Verlauf der Wassertemperaturen in zwei Zellen des Wasserbehälters dargestellt. Trotz lokaler Verdampfung an den Schmelzetropfen und trotz des Druckanstiegs bleibt das Wasser im gesamten Zeitraum der Rechnung kalt. Die Temperatur der Stahlschmelze nimmt insgesamt nur geringfügig ab (s. Abb. 43.4). Im Wasserbehälter kühlt sich die Schmelze lokal um ca. 10 K ab. Aus Abb. 39 ist zwar eine deutliche Abnahme

der Enthalpie der Schmelze erkennbar, aber der überwiegende Teil dieser Abnahme fällt auf die durch den Wassereinlaufstutzen auslaufende Schmelzemasse (s. Abb. 36).

### *Flutwasserstrom*

Aus der Abb. 40 geht hervor, daß die Wassermenge im Integrationsgebiet im Laufe des Prozesses insgesamt abnimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß das Wasser größten Teils in die Gasphase übergeht. In der Abbildung sind auch kurzzeitige Zunahmen der Wassermenge zu sehen. Aus den Volumenstrombildern (Abb. 35.1 - 6) wird ersichtlich, daß Wasser durch den Wassereinlaufstutzen nachströmt. Überwiegt dieses Nachströmen das gleichzeitige Verdampfen des Wassers im Integrationsgebiet, kommt es zu diesen kurzzeitigen Zunahmen der Wassermenge.

### *Schmelzemasse*

Die Schmelzemasse im gesamten Integrationsbereich nimmt leicht ab (Abb. 36). Ein Teil dieser Schmelzemasse verläßt den Behälter durch den Einlaufstutzen nach außen. Die Schmelzmenge im reaktionsfähigsten Strömungsmodell (flow regime 5) ist verhältnismäßig hoch. Nach ca. 0,75s erreicht diese Menge knapp 0.4 kg (Abb. 37).

## **5.3.5 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R02 mit Wasservordruck**

### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

Zu Beginn des Prozesses dringt das gegenüber der Schmelzeschicht unter einem Überdruck von 30 mbar stehende Wasser in den Schmelzebehälter ein, wodurch heftiges Verdampfen an der siebartig konfigurierten Grenze einsetzt. Zunächst drückt der entstehende Dampf die darüber liegende Schmelzemasse nach oben, reißt kanalartige Öffnungen in die Schmelzeschicht und entweicht anschließend in die Umgebung (flow regime 23). Die Volumenzunahme, die aufgrund des bereits nach ca. 2 ms einsetzenden Verdampfungsprozesses erfolgt, führt zu Druckspitzen in der unmittelbaren Umgebung der Reaktionsfront sowie in den darunter liegenden Zellen (Abb. 46). Gleichzeitig fließt anfangs wenig und nach etwa 0,3 s verstärkt heiße Schmelze in den Wasserbehälter (Abb. 46). Aus den Volumenstrombildern (Abb. 45.1 - 6) ist diese Entwicklung deutlich zu erkennen. Bei dem hier gewählten geometrischen Modell der siebartigen Öffnung stellt sich eine Strömungsform ein, in der trotz des wasserseitigen Überdrucks die Schmelzemasse nach unten in die Wasserschicht strömt. Die in den Wasserbehälter fließende heiße Stahlschmelze sorgt dort für vermehrte reaktionsfähige Gemischbildung und somit intensive Verdampfung des Kühlwassers. Etwa 0,2 s nach Simulationsbeginn befindet sich in dem Wasserbehälter ein Gemisch, in dem Schmelzetropfen

und Dampfblasen in einer Wasserströmung getragen werden (flow regime 5). Dies führt zum verstärkten Verdampfen des Wassers, wodurch es zu einem Druckaufbau (ca. 12 bar) im Wasserbehälter kommt (Abb. 52.2). Auf Grund der heftigen Wechselwirkung zwischen Schmelze und Wasser stellt sich im Wasserbehälter zeitweise eine vollständige Verwirbelung ein (Abb. 45.1 - 6). Ferner wird aus diesen Volumenstrombildern deutlich, daß bis Ende der Rechnung stetig Schmelze in die Wasserschicht fließt. Das Wasser verdampft hauptsächlich im Wasserbehälter und entweicht als Dampf mit im Verdampfungsprozeß fragmentierten kleinen Wassertröpfchen durch die kanalartig gebildeten Öffnungen in der Schmelzeschicht an die Umgebung. Die Schmelzeschicht wird mit fortlaufender Simulationszeit immer poröser.

Nach einer CPU-Zeit von 61 Minuten, in der ca. 0,51 s Prozeßzeit simuliert werden konnten, brach die Rechnung wegen nicht behebbarer Konvergenzprobleme ab (STOP 4).

### *Fragmentationsprozeß*

Die Fragmentation der heißen Schmelzen erfolgt in mehreren kleinen Etappen (Abb. 48), wobei die anfänglichen Druckspitzen den überwiegenden Teil der Fragmentation verursachen. Aus der Zunahme der Partikeldichtevertelung vor allem im Wasserbehälter ist ersichtlich, daß die durch die heftige Wechselwirkung der Komponenten verursachten Beschleunigungen zur weiteren Fragmentation der Schmelzetropfen führen. Die Oberflächenvergrößerung der Schmelze, die ein Maß für die Fragmentation ist, liegt bei dieser Modellierung wesentlich höher als bei der Simulationsrechnung M03R01. Mit ansonsten gleichen Bedingungen kann allein durch einen mäßigen wasserseitigen Überdruck (hier 30 mbar) ein höherer Fragmentationsgrad erreicht werden. Die gegen Ende der Rechnung zu beobachtende leichte Abnahme der Schmelzeoberfläche liegt, neben möglichen Agglomerierungen, vor allem daran, daß zu dieser Zeit ein Teil der Schmelze den Integrationsbereich durch den Wassereinlaufstutzen verläßt (Abb. 46).

### *Drücke*

Die Druckverläufe in den verschiedenen Zellen des Wasserbehälters sowie der Schmelzeschicht sind in den Abb. 52.1 - 12 dargestellt. In den ersten 20 ms sind die Druckkurven in den Zellen des Wasserbehälters durch mehrere Druckspitzen gekennzeichnet. Dies ist auf den anfänglichen Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts zurückzuführen. Zu Beginn der Simulation, wenn das unter Druck stehende Kühlwasser mit der heißen Stahlschmelze in Kontakt kommt, führt die aus dem Verdampfungsprozeß resultierende Volumenzunahme zu einem Druckaufbau (ca. 2 bar) in unmittelbarer Umgebung der Reaktionsfront (Zelle (2,2,6), s. Abb. 52.6) und im Wasserbehälter (Zelle (2,2,2) ca. 4 bar, s. Abb. 52.6). Durch die verstärkte Gemischbildung infolge nach unten fließender Schmelzemasse kommt es zu vermehrtem Verdampfen und zu Druckspitzen. Nach etwa 20 ms kommt es zu dem bis dahin

größten Druckanstieg (ca. 15 bar) im Wasserbehälter (Abb. 52.7). Im Gegensatz zu den Druckkurven in dem Wasserbehälter verlaufen die Druckkurven in der Schmelzeschicht praktisch von Beginn an flach, s. Abb. 52.10. Da der Schmelzebehälter nach oben offen ist, erfolgt ein rascher Druckausgleich mit der Umgebung durch die porös gewordene Schmelzeschicht. Nach etwa 0,3 s stellt sich trotz weiterer Verdampfung des Kühlwassers, abgesehen von dem durch die numerischen Instabilitäten verursachten kleinen Schwankungen, ein konstanter Verlauf der Druckkurven ein. Dies deutet darauf hin, daß die kanalartigen Öffnungen in der Schmelzeschicht stabil bleiben. Das sich bis zum Ende der Rechnung einstellende flow regime 23 bestätigt diese Interpretation.

### *Temperaturen*

Im Wasserbehälter nimmt die Temperatur der Gasphase vergleichsweise niedrige Werte an. In den ersten 20 ms steigt sie entsprechend der Druckentwicklung lokal (Zelle (2,2,6) bis zu 500 K (Abb. 53.2). Gegen Ende der Rechnung werden im Bodenbereich Gastemperaturen bis zu ca. 1200 K erreicht (Zelle (2,2,3) s. Abb. 53.6). In den Abb. 53.1 - 6 sind Temperaturverläufe in 9 verschiedenen Zellen abgebildet. Während die Gastemperaturen im Wasserbehälter sowie die Drücke aufgrund der nahezu geschlossenen Geometrie deutlich höhere Werte annehmen, kommt es in der Schmelzeschicht zu keinen höheren Temperaturen. Wie auch in den vorangegangenen Rechnungen liegen die Wassertemperaturen unter der Verdampfungstemperatur (373,15 K) bei Umgebungsdruck (Abb. 53.5). Das Wasser bleibt also trotz des Druckanstiegs und trotz lokaler Verdampfung an den Schmelzetropfen weiterhin kalt. Die Temperatur der Stahlschmelze fällt, insgesamt betrachtet, geringfügig ab, dem entsprechend verläuft auch die Enthalpiekurve (Abb. 53.14). Gegen Ende der Rechnung tritt Schmelzemasse durch den Wassereinlaufstutzen aus dem Integrationsgebiet aus (Abb. 46), weshalb die Enthalpiekurve ab diesem Zeitpunkt deutlich abnimmt (Abb. 49).

### *Flutwasserstrom*

Die Wassermasse im Integrationsbereich nimmt insgesamt ab (Abb. 50). Zu Simulationsbeginn nimmt die Wassermenge aufgrund der anfänglichen Dampfentwicklung zunächst leicht ab, steigt aber durch anschließendes Nachströmen wieder an. Danach bleibt die Gesamtwassermenge trotz weiterer Verdampfung mehr oder weniger konstant, was ein etwaiges Gleichgewicht zwischen Verdampfen und gleichzeitigem Nachströmen des Flutwassers bedeutet. Nach etwa 0,2 s setzt verstärkte Verdampfung ein, vor allem auch in der Schmelzeschicht (Abb. 51), so daß die Wassermasse sowohl im Wasserbehälter als auch im Schmelzebehälter stärker abzunehmen beginnt (Abb. 50). Eine kurzzeitige Zunahme ca. 0,4 s nach dem Simulationsbeginn ändert diese Tendenz nicht. In den ersten 0,15 s gelangt ein geringer Teil des Flutwassers als Tropfen mit dem aufsteigenden Dampf in die Luftschicht (Abb. 51). Im weiteren Verlauf nimmt diese vom Dampf mitgerissene Wassermenge stetig ab, bis sie schließlich nach ca. 0,3 s praktisch verschwindet.



## *Schmelzmasse*

Die Schmelzmasse im Integrationsgebiet bleibt bis kurz vor Ende der Rechnung, als geringfügig Schmelze durch den Wassereinlaufstutzen den Wasserbehälter verläßt, konstant (Abb. 46). Trotz des wasserseitigen Überdrucks von 30 mbar fließt ein Teil der Stahlschmelze in den Wasserbehälter ab. Die hier gewählte geometrische Konfiguration, die die Strömungsform stark zu beeinflussen scheint, und der möglicherweise zu geringe Überdruck sind für diese Entwicklung verantwortlich. Im Vergleich zu der Simulationsaufgabe M03R01 ist trotz des Wasserüberdrucks insgesamt die gleiche Schmelzmasse in den Wasserbehälter eingelaufen; der Anteil der in der im Hinblick auf eventuell auftretende Dampfexplosionen reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5) vorliegenden Schmelzmasse ist jedoch deutlich niedriger (Abb. 47).

### 5.3.6 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R03 mit Uranoxidschmelze

#### **ohne Wasservordruck**

#### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

Zu Beginn des Prozesses tritt die heiße Uranoxidschmelze (3400 K) mit dem Kühlwasser (363,15 K) an der siebartigen Kontaktfläche in Wechselwirkung. Durch eine rasche Entsprechung der Wärmeenergie aus der Uranoxidschmelze setzt sofortiges Verdampfen des Kühlwassers ein, wodurch es in der unmittelbaren Umgebung der Reaktionsfront und im Wasserbehälter zu Druckspitzen kommt. Der Dampf drückt zunächst die über dieser Reaktionsfront liegende Schmelzmasse nach oben und entweicht anschließend unter Bildung kanalartiger Öffnungen in der Schmelzeschicht an die Umgebung. Ein ganz geringer Teil der Uranoxidschmelze fließt bereits zu Beginn in den Wasserbehälter (Abb. 56) und führt dort zur vermehrten Bildung der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5). Dadurch verdampft immer mehr Wasser und entweicht durch die poröser werdende Schmelzeschicht (flow regime 23) in die Umgebung. Mit fortlaufender Simulationszeit brechen die kanalartigen Öffnungen auf, ersichtlich aus dem Übergang dieses Strömungsbildes zu der durch flow regime 21 modellierten Strömungsform. Im flow regime 21 werden Wasser- und Schmelzetropfen von Gasströmung getragen. Auch im Wasserbehälter zeigt das modellierte flow regime 21, daß das intensive Verdampfen zur Zerteilung der Komponenten führt. Wie aus den Volumenstrombildern (Abb. 55.1 - 8) erkennbar, existiert im Wasserbehälter zeitweise eine stark turbulente Gasströmung. Das modellierte flow regime 21 bestätigt diese Aussage.

Nach einer CPU-Zeit von 41 Minuten konnten nur ca. 0,26 s Prozeßzeit simuliert werden, da zu diesem Zeitpunkt wegen nicht behebbarer Konvergenzprobleme die Rechnung abbrach (STOP 4).

### *Fragmentationsprozeß*

Bei dieser Simulationsaufgabe scheint die Fragmentation der Uranoxidschmelze hauptsächlich in drei Schritten abzulaufen (Abb. 58). Durch die anfangs auftretende Verdampfungsphase und die damit verbundenen Druckspitzen wird eine erste grobe Fragmentation der Schmelzeschicht eingeleitet. Aufgrund der in den Wasserbehälter fließenden Schmelze und dadurch verursachten Verdampfung wird die Fragmentation der Komponenten verstärkt. Nach etwa 0,2 s kommt es vor allem in der Schmelzeschicht vermehrt zu flow regime 21, was dem Aufbrechen einiger der ursprünglich gebildeten Kanalwände entspricht. Dies führt zu einer weiteren Oberflächenvergrößerung. Trotz des geringen Anteils der Schmelzemasse, die sich in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5) befindet (Abb. 57), ist die Oberflächenvergrößerung um ca. einen Faktor 3 größer als bei der vorhergehenden Rechnung mit Stahlschmelze (Rechnung M03R02 Abb. 38).

### *Drücke*

In den Abb. 62.1 - 6 sind die Druckverläufe in verschiedenen Zellen des Wasserbehälters und der Schmelzeschicht über der gesamten Simulationszeit (0,26 s) aufgetragen. Bereits zu Beginn kommt es zu Druckspitzen an der siebartig konfigurierten Kontaktfläche bei der Wechselwirkung zwischen Schmelze und Wasser. Die nahezu abgeschlossene Geometrie führt zu einem hohen Druck im Wasserbehälter. Bereits nach ca. 65 ms kommt es dort zum bis dahin größten Druck (12,5 bar in der Zelle (4,2,2) s. Abb. 62.5), der wesentlich höher liegt als bei der vorhergehenden Rechnung mit Stahlschmelze (max. 7 bar). Kurz darauf kommt es in der gleichen Zelle zu mehreren kleineren Druckspitzen (max. 7 bar). Der Grund für diese Druckentwicklung ist in der sehr reaktionsfähigen Strömungsform (flow regime 5) zu sehen, die sich zu diesem Zeitpunkt im Wasserbehälter ausgebildet hat und zu heftigen Wechselwirkungen führt. Etwa ab 0,1 s stellt sich in beiden Behältern, abgesehen von numerischen Schwankungen, ein konstanter Druckverlauf ein.

### *Temperaturen*

In den Abb. 63.1 - 3 sind insgesamt 5 Temperaturverläufe der drei Phasen in verschiedenen Zellen dargestellt. Die Gasphase erwärmt sich während des gesamten Zeitraumes und erreicht eine Höchsttemperatur von ca. 1100 K gegen Ende der Rechnung (Abb. 63.3). Die Temperatur des Wassers bleibt nahezu konstant (Abb. 63.2), trotz lokal auftretender Verdampfung. Interessant ist der Temperaturverlauf der Uranoxidschmelze (Abb. 63.1). Die Uranoxidschmelze kühlt sich, verglichen mit den bisher durchgeführten Rechnungen mit Stahlschmelze, stark ab. Temperaturabsenkungen um 150 K werden registriert (Abb. 63.1), örtlich wird sogar die Erstarrungstemperatur (3123 K) unterschritten. Der typische Wert der Temperaturabnahme bei Stahlschmelze in den vorhergehenden Rechnungen liegt hingegen

nur bei etwa 10 bis 20 K. Auf dieses Ergebnis wird im Abschnitt 5.3.7 (Temperaturen) näher eingegangen.

### *Flutwasser*

Die Wassermenge im Integrationsgebiet nimmt über die gesamte Simulationszeit ab (Abb. 60). Zeitweise ist eine leichte Zunahme der Wassermenge zu beobachten, falls mehr neues Wasser in den Wasserbehälter einströmt als verdampft. Ein kleiner Teil des Kühlwassers wird mit abströmendem Dampf mitgerissen und gelangt in die Schmelzeschicht (Abb. 61). Wegen der sehr hohen Temperatur reicht eine geringe Menge Uranoxidschmelze aus (Abb. 56), um den überwiegenden Teil des Flutwassers zu verdampfen.

### *Schmelzemasse*

Im gesamten Integrationsbereich bleibt die Schmelzemasse weitgehend konstant (Abb. 56), lediglich ein sehr kleiner Teil der in den Wasserbehälter eingelaufenen Schmelze verläßt diesen durch den Wassereinflaßstutzen und somit den Integrationsbereich (s. Volumenstrombilder Abb. 55.1 - 8). Aus Abb. 56 ist ersichtlich, daß Schmelze zunächst in die Luftschicht hochgedrückt und später zerteilt wird. Dieser Prozeß zeigt, daß die Wechselwirkung der Uranoxidschmelze von 3400 K mit Wasser heftiger abläuft als bei der Stahlschmelze mit 1773 K, in etwa aber gleich abläuft wie bei der Wechselwirkung der Stahlschmelze von 3086,75 K mit Wasser (s. Rechnung M03R04).

## **5.3.7 Ergebnisse der Simulationsaufgabe M03R04 mit Stahlschmelze bei**

### **3086,75 K und ohne Wasservodruck**

#### *Ablauf des Schmelze-Wasser-Kontakts*

Zu Beginn des Schmelze-Wasser-Kontakts tritt die heiße Stahlschmelze (3086,75 K) mit dem Flutwasser (363,15 K) an der siebartig konfigurierten Kontaktfläche in Wechselwirkung. Dies führt zu einer ersten spontanen Verdampfung des Flutwassers und einem kleinen Druckanstieg auf ca. 1,8 bar unmittelbar unterhalb der Reaktionsfront (Zelle (2,2,6) s. Abb. 71.4) und knapp 4 bar im Bodenbereich des Wasserbehälters (Zelle (4,2,2) s. Abb. 71.6). Der entstehende Dampf dringt zunächst oberhalb der Reaktionsfront in die Schmelzemasse ein, bildet kanalartige Öffnungen (flow regime 23) und entweicht anschließend nach oben. Aus dem Schmelzebehälter läuft stetig Schmelze in den darunter liegenden Wasserbehälter ab (max. 500 g, s. Abb. 65). Durch den daraus resultierenden Verdampfungsprozeß kommt

es zur vermehrten Bildung des reaktionsfähigsten Gemisches aus Schmelzetropfen und Gasblasen im Wasser des Wasserbehälters (flow regime 5, s. Abb. 7.1) und nachfolgend zu flow regime 21. In der Schmelzeschicht reißt der nach oben abströmende Dampf Wassertropfen und Schmelzetropfen mit sich, wodurch sich ein turbulenter Strömungszustand (flow regime 21) am oberen Rand der Schmelzeschicht sowie in der darüberliegenden Luftschicht einstellt; in flow regime 21 werden Wasser- und Schmelzetropfen von Gasströmung getragen, d.h. es brechen einige der kanalartigen Öffnungen in der Schmelze auf. Wie bei der Rechnung mit  $\text{UO}_2$ -Schmelze, geschieht dies vor allem in der oberen Hälfte der Schmelzeschicht. Die Ursache hierfür liegt u.a. in der Druckspitze, die sich in der Zelle (2,2,11) der Schmelzeschicht zum Zeitpunkt  $\tau = 0,12$  s entwickelt hat, s. Abb. 71.1. Wie auch anhand der Druckverläufe zu erkennen, ist der Prozeß der Wechselwirkung Stahl/Wasser wesentlich intensiver als bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze (Rechnung M03R03). Ein zeitweises völliges Aufbrechen der kanalartigen Öffnungen wie bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze (Rechnung M03R03) wird jedoch nicht berechnet.

In einer CPU-Zeit von 61 Minuten konnten ca. 0.4 sec Prozeßzeit auf der IBM-M3090 simuliert werden. Die Simulationsrechnung wurde durch die CPU-Zeit-Begrenzung abgebrochen (STOP 3).

### *Fragmentationsprozeß*

Die Oberflächenvergrößerungen der Stahlschmelze in den verschiedenen Schichten während der gesamten Simulationsdauer sind in Abb. 67 aufgetragen. Die Oberflächenzunahme erfolgt demzufolge überwiegend im Gasraum und zu einem anfangs geringeren Anteil in der Schmelzeschicht, wogegen der Beitrag in der Wasserschicht sehr klein ist. Die Fragmentation scheint hauptsächlich in zwei Stufen abzulaufen. Durch die einsetzende Verdampfung und die damit verbundenen anfänglichen Druckspitzen wird die erste grobe Fragmentation der Schmelze in der Schmelzeschicht eingeleitet. Nach etwa 0,1 sec wird die zu Beginn des Prozesses nach oben gedrückte Schmelzemasse auf Grund des in der Schmelzeschicht erfolgten Druckanstiegs von ca. 3 bar (Zelle (2,2,11) s. Abb. 71.1) weiter fragmentiert. Dies ist ersichtlich aus dem sprunghaften Anstieg der Oberflächenvergrößerung in Abb. 67 und dem Übergang der flow regimes 23 zu den flow regimes 21.

Die gesamte Oberflächenvergrößerung in den ersten 0,25 s beträgt ca.  $0,3 \text{ m}^2$  und nimmt danach durch Zurückfallen der Schmelzepartikel in die Schmelzeschicht wieder ab. Die Rechnung mit der  $\text{UO}_2$ -Schmelze zeigt bis etwa 0,25 s einen ähnlichen Verlauf mit der gleichen Oberflächenzunahme (Abb. 58), jedoch ergibt sich dort nach 0,25 s eine weitere sprunghafte Oberflächenvergrößerung auf ca.  $0,45 \text{ m}^2$ .

## *Drücke*

In den Abb. 71.1 bis 71.6 sind die Druckverläufe in verschiedenen Zellen der verschiedenen Schichten dargestellt. Bereits zu Beginn der Wechselwirkung zwischen Wasser und Stahlschmelze kommt es zu Druckspitzen an der siebartigen Kontaktfläche. Die nahezu geschlossene Geometrie des Wasserbehälters führt dort zu höheren Drücken als in der Schmelzeschicht, wo die nach oben offene Geometrie des Schmelzebehälters einen raschen Druckausgleich mit der Umgebung ermöglicht. Nach ca. 65 ms kommt es im Wasserbehälter zum bis dahin größten Druck (ca. 9,5 bar) im Bodenbereich in der Nähe des Wassereinlaufstutzens, s. Abb. 71.5. Im Vergleich mit der Rechnung der Uranoxidschmelze (12,5 bar) zu gleicher Prozeßzeit ist dieser Druckanstieg geringer, s. Abb. 62.5. Danach kommt es bis 0,25 sec Prozeßzeit zu häufigeren aber kleineren Druckspitzen im Wasserbehälter (max. 4 bar Zelle (4,2,2) s. Abb. 71.5). In der Schmelzeschicht bleibt bis auf die in der Zelle (2,2,11) auftretende Druckspitze (ca. 3 bar), s. Abb. 71.1, der Druckverlauf weitgehend konstant. Nach ca. 0,25 s stellt sich sowohl im Wasserbehälter als auch in der Schmelzeschicht, von kleinen Schwankungen abgesehen, ein konstanter Druckverlauf (1 bar) ein.

## *Temperaturen*

In den Abb. 72.1 bis 72.3 sind die Temperaturverläufe der drei Phasen in verschiedenen Zellen dargestellt. In dem Eingabesatz wurde als Anfangstemperatur der Stahlschmelze 3400 K gesetzt. Diese Anfangstemperatur wird aber in IVA3 programmintern (Unterprogramm I4EOSSS) auf den maximal in IVA3 zulässigen Wert der Verdampfungstemperatur der Stahlschmelze (3086,75 K) gesetzt. Dies ist somit der Anfangswert der Temperaturkurven in der Schmelzeschicht.

Die Temperatur der Stahlschmelze nimmt im Bereich der Durchlaßöffnung in der gesamten Simulationszeit (0,4 sec) maximal um ca. 20 K ab, s. Abb. 72.1. Diese Abnahme erfolgt im wesentlichen nach 0,2 s und scheint an einer bestimmten Strömungsform verbunden zu sein, da eine zeitliche Korrelation mit einem Druckergebnis oder eine Veränderung der Schmelze- oder Wassermenge nicht erkennbar ist. Verglichen mit der Rechnung mit Uranoxidschmelze, in der eine gleichmäßige Temperaturabsenkung von ca. 150 K registriert wird (Abb. 63.1, Simulationszeit = 0,25 sec), ist diese Abkühlung der Stahlschmelze sehr gering. Der Enthalpieverlauf der Stahlschmelze ist dem entsprechend weitgehend konstant, s. Abb. 68. Eine Abnahme gegen Ende der Simulation ist auf das Auslaufen eines geringen Teils der Stahlschmelze durch den Wassereinlaufstutze zurückzuführen. Der Vergleich mit dem Enthalpieverlauf der Oxidschmelze (Abb. 59), der eine gleichmäßige und deutliche Abnahme um etwa 2% bis 0,2 s aufweist, bestätigt die Unterschiede in der Temperaturabnahme der beiden Schmelzen. Die Oxidschmelze entspeichert mehr und schneller ihre Energie als die Stahlschmelze, und zwar beträgt der Unterschied in den Energien mehr als eine Größenordnung. Damit ergibt sich die Frage, welche Eigenschaften beider Schmelzen für dieses unterschiedliche Verhalten verantwortlich sind. Bis zum Zeitpunkt 0,2 s ist die Oberflächenvergrößerung

beider Schmelzen nahezu gleich, so daß die Größe der wärmeübertragenden Oberfläche als Ursache ausscheidet. Eine zweite Möglichkeit besteht in der unterschiedlichen Wärmeleitung beider Stoffe: Für den vereinfachten Fall der instationären eindimensionalen Wärmeleitung für einen halbbunendlichen Körper einheitlicher Temperatur gilt /17/:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Führt man eine Abschätzung des Temperatur/Zeit-Verhaltens durch und betrachtet man hierzu das Verhältnis der Temperaturleitfähigkeiten ( $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$ ) und der Wärmeeindringkoeffizienten ( $b = \sqrt{\lambda \rho c_p}$ ) von Oxid-(3400 K) zu Metallschmelze(3086,75 K), ergeben sich Werte von 0,57 bzw. 0,66. Also können auch die instationäre Wärmeleitprozesse in der Schmelze die unterschiedlichen Energieübertragungen nicht erklären. Damit ist vermutlich die Modellierung unterschiedlicher Wärmeübergänge zwischen Wasser-Dampf-Strömung und der Oberfläche der Schmelze bzw. Schmelzepartikel für die unterschiedlichen Abkühlraten verantwortlich. Die Programmbeschreibung wie auch der Rechenausdruck lassen jedoch keine detailliertere Schlußfolgerung zu, so daß eine genauere Begründung z. Z. nicht angegeben werden kann.

Nach Aussage des Autors liegt der Grund für die schnellere Abkühlung der Uranoxidschmelze in der Wärmeübergangsmodellierung im Unterprogramm '13HEATTR'. Hierin ist die Dampffilmdicke, die den Wärmeübergang stark beeinflusst, abhängig von der Reynoldszahl und damit von der Geschwindigkeit. Diese wiederum ist bei vertikalen Strömungen abhängig von der Dichte. Eine höhere Geschwindigkeit führt somit zu höheren Wärmeübergangszahlen, d.h. die höhere Dichte der Uranoxidschmelze ( $\rho_{\text{UO}_2}(3400\text{K})/\rho_{\text{Stahl}}(3086,75\text{K}) = 1,46$ ) führt zu einem verbesserten Wärmeübergang in der Modellierung. Der Wärmeübergang wird aber durch sehr viele Parameter beeinflusst, weshalb eine Beurteilung i.a. schwer ist.

Wie aus der Abb. 72.3 ersichtlich, schwankt die Temperatur der Gasphase in einem großen Temperaturbereich (330 K bis 580 K), wobei die Gastemperatur zu Anfang 363,15 K beträgt. Im Vergleich zu den Gastemperaturen in der Rechnung mit Uranoxidschmelze, in der eine Höchsttemperatur von ca. 1100 K erreicht wird (s. Abb. 63.3), ist dieser Temperaturverlauf ein weiterer Hinweis für die geringere Entspeicherung der Energie der Stahlschmelze.

Abb. 72.2 zeigt den Temperaturverlauf des Wassers in der Zelle (2,2,6) des Wasserbehälters. Die horizontalen Kurvenstücke deuten auf das Nichtvorhandensein von Wasser zu den entsprechenden Zeiten hin, da dann die zuletzt gerechneten Temperaturwerte gespeichert bleiben. Die absteigenden Äste entsprechen einem Nachströmen von frischem Wasser niedriger Temperatur in die Zelle.

### *Flutwasser*

Die Wassermenge im Integrationsgebiet nimmt über die gesamte Simulationsdauer ab (s. Abb. 69). Die zeitweise leichte Zunahme ergibt sich, weil mehr neues Wasser in den Wasserbehälter einströmt als verdampft. Wie Abb. 70 zeigt, wird ein kleiner Teil des Flutwassers mit dem abströmenden Dampf mitgerissen und gelangt somit in die Schmelzeschicht (flow regime 21), in der weitere Verdampfung stattfindet.

### *Schmelzemasse*

Im gesamten Integrationsbereich bleibt die Schmelzemasse weitgehend erhalten, s. Abb. 65. Lediglich ein sehr kleiner Teil der in den Wasserbehälter eingelaufenen Schmelze verläßt diesen und somit den Integrationsbereich durch den Wassereinlaufstutzen gegen Ende der Simulationsrechnung. Die Schmelzevolumenanteile in den verschiedenen Schichten sind in den Abb. 64.1 u. 64.2 dargestellt. Wie daraus anhand der fehlenden Schmelzevolumen ersichtlich, wird die Stahlschmelze zunächst in die Luftschicht nach oben gedrückt und später zerteilt, s. dazu auch Abb. 67. Die in dem reaktionsfähigsten Gemisch (flow regime 5) enthaltene Schmelzemenge über der Zeit ist in Abb. 66 dargestellt. Diese Schmelzemenge (ca. 90 g) kurz vor dem Zeitpunkt 0,25 s entspricht etwa der Menge bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze zum gleichen Zeitpunkt. Dies bedeutet, daß die Verteilung der Schmelzmassen beider Schmelzen in flow regime 5 ähnlich ist.

## 6. Diskussion der Ergebnisse

### *Anwendung des Rechenprogramms*

In den Rechnungen mit dem IVA3-Code treten Konvergenzschwierigkeiten bei kleinen Maschenweiten der Strömungszellen auf (z.B. Rechnung M02R02), die zu erheblichen Rechenkosten oder sogar zum Abbrechen der Rechnungen führen. Das Verhältnis der Maschenweite zu den darin enthaltenen Partikelgrößen sollte ausreichend groß sein, um solche Konvergenzprobleme zu reduzieren. Aus Sicht des Autors des IVA3-Codes sollte dies jedoch nicht erforderlich sein.

### *Übersicht der durchgeführten Rechnungen*

In der nachfolgenden Tabelle sind die wesentlichen Anfangsbedingungen für die verschiedenen durchgeführten Rechnungen zusammengestellt. Variiert wurde die Einlauföffnung, Art und Temperatur der Schmelze und Vordruck des Flutwassers. Die letzte Spalte zeigt die Zeitdauer, für die die Wechselwirkung von Schmelze und Wasser berechnet wurde. Die Rechnungen wurden entweder durch Zeitbegrenzung der Rechnung oder bei Auftreten von Konvergenzproblemen beendet.

Bezeichnung der Rechnung	Einlauföffnung, Ø in mm	Art der Schmelze	Anfangstemperatur in K	Wasservordruck in bar	berechnete Zeit der WW in s
M02R01	10	Stahl	1773,15	0,0	2,37 <sup>2)</sup>
M02R02	10	Stahl	1773,15	0,1	0,69 <sup>1)</sup>
M03R01	40, porös	Stahl	1773,15	0,0	0,80 <sup>1)</sup>
M03R02	40, porös	Stahl	1773,15	0,03	0,51 <sup>1)</sup>
M03R03	40, porös	UO <sub>2</sub>	3400	0,0	0,26 <sup>1)</sup>
M03R04	40, porös	Stahl	3086,75	0,0	0,40 <sup>2)</sup>

Tab. 3: Tabellarische Übersicht der durchgeführten Rechnungen

- 1) begrenzt durch Konvergenzprobleme
- 2) begrenzt durch Vorgabe der Rechenzeit



Die Abläufe beim Kontakt von Wasser und Schmelze sind durch die parallel ablaufenden hoch instationären Vorgänge außerordentlich kompliziert. Dabei laufen die folgenden Prozesse ab:

- Mit dem Kontakt von Wasser und Schmelze setzt eine schnelle Verdampfung ein. Der schnell expandierende Dampf führt zu Druckanstiegen, die Wasser und Schmelze aufbrechen und fragmentieren können.
- Durch den Fragmentationsprozess entstehen neue Oberflächen, die den Vorgang der Dampfbildung und des Druckaufbaus weiter verstärken können.
- Der Druckaufbau wirkt auf die Eintritts- bzw. Übertrittsrate des Flutwassers zurück. Vor allem bei der großen Einlaufsöffnung kann auch Schmelze in den unteren Wasserbehälter übertreten, so daß in beiden Behältern Mehrphasenströmungen auftreten. Druckspitzen im unteren Behälter sind stärker ausgeprägt, da er weitgehend geschlossen ist, im oberen Behälter sind sie wegen der freien Oberfläche gering.
- Mit der Verdampfung des Wassers ist die Temperaturabnahme der Schmelze gekoppelt. Für die hier berechneten sehr kurzen Zeiten der Wechselwirkung tritt noch keine oder nur unwesentliche Erstarrung der Schmelze ein.

Im Folgenden werden die verschiedenen Prozesse ausführlich diskutiert.

### *Druckverläufe*

Zu Beginn des Kontakts von Schmelze und Wasser kommt es durch die heftige Wechselwirkung zwischen Wasser und heißer Schmelze bei allen durchgeführten Simulationsrechnungen zu Druckstößen. Beim Einlaufen der Schmelze in den unten liegenden Wasserbehälter finden dort kurzzeitig hohe Druckstöße im Bereich von 10 bar statt. Dennoch treten in den IVA3-Rechnungen keine größeren Massen der Schmelze in eine dampfexplosionsähnliche Wechselwirkung. Im oben liegenden Schmelzebehälter liegen die Druckstöße, unabhängig von der Art der Schmelze und des Wasserzutritts, bei wenigen zehntel bar und sind damit niedriger als im Wasserbehälter. Im weiteren Verlauf stellt sich über die gesamte Simulationszeit, abgesehen von Schwankungen aufgrund der numerischen Instabilitäten, ein nahezu konstanter Druck in beiden Behältern ein.

Vergleicht man die Druckverläufe der einzelnen Rechnungen miteinander (s. Tab. 3), so stellt man fest, daß Intensität und Dauer der Druckstöße von dem Flutwasservordruck, der Temperatur, der verwendeten Schmelze und der Öffnungsgeometrie abhängen.

Bei Rechnungen mit Stahlschmelze und einem Flutwasservordruck von 0 bar läuft Schmelzemasse in den Wasserbehälter und führt dort zu intensiver Wechselwirkung zwischen den Komponenten. Daraus ergeben sich hohe Drücke, wobei bei der Siebplattengeometrie unter

sonst gleichen Bedingungen aufgrund des vergrößerten Strömungsquerschnittes die Drücke wesentlich kleiner sind als bei der Einlochgeometrie.

Bei Rechnungen mit Stahlschmelze und einem Flutwasservordruck  $> 0$  bar (s. Tab. 3) kommt es zu kleinen, aber häufigen Druckspitzen. Bei der Einlochgeometrie mit einem Durchmesser von 10 mm und einem Flutwasservordruck von 100 mbar fließt fast keine Schmelze in den Wasserbehälter, wodurch eine intensive Wechselwirkung verhindert wird. Bei der Rechnung mit Siebplatte von 40 mm Durchmesser gelangt hingegen bei einem Flutwasservordruck von 0 und 30 mbar heiße Schmelze in den Wasserbehälter, und zwar einige 100 g. Die Ursache dafür ist hauptsächlich die vergrößerte Öffnungsgeometrie. Das Durchtreten der Schmelze durch die recht große Siebplatte wird somit bei allen hier durchgeführten Rechnungen vorhergesagt, es ist aber bei oxidischer Schmelze geringer als bei Stahlschmelze.

In der Rechnung mit Uranoxidschmelze, die ohne Flutwasservordruck und mit der Siebplattengeometrie durchgeführt wird, kommt es aufgrund der in den Wasserbehälter einlaufenden Schmelzemasse ebenfalls zu häufigeren Druckspitzen (s. Abb. 62.5).

Die Höhe der erzielten Druckstöße ist von der in mechanische Arbeit umgewandelten Wärmemenge abhängig. Kommt zu Simulationsbeginn in den Wasserbehälter einlaufende Schmelze mit Wasser in Kontakt, verdampft das Wasser und baut durch die plötzliche Volumenzunahme Druck auf. Aufgrund der nahezu abgeschlossenen Geometrie des Wasserbehälters liegen die Druckstöße dort wesentlich höher als in dem nach oben offenen Schmelzebehälter, wo es zu einem raschen Druckausgleich mit der Umgebung kommt, so daß in allen Fällen die Druckerhöhungen in der oben befindlichen Schmelze gering sind.

### *Fragmentationsprozeß*

Die Zerteilung der Schmelze beruht auf der Kopplung von Wasser-Schmelze-Kontakt, nachfolgender Verdampfung des Wassers und den sich dadurch bildenden Abströmkanälen in der Schmelze, die bei allen durchgeführten Simulationsrechnungen beobachtet werden. Bei der Stahlschmelze tritt vermehrt die Bildung stabiler Kanäle auf, die bei der Durchströmung mit Dampf einen geringen Strömungswiderstand aufweisen. Bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze sehr hoher Temperatur sind die Kanäle nicht so stabil, so daß sie aufbrechen und in Tropfen zerteilt werden. Die Zunahme neuer Oberfläche ist zunächst in Stahl- und  $UO_2$ -Schmelzen hoher Temperatur ähnlich. Aufgrund weiterer Fragmentation und der höheren Dampfbildungsrate ist die Oberflächenvergrößerung bei der Uranoxidschmelze aber nach 0,25 s um ca. 50% größer als bei der vergleichbaren Rechnung mit Stahlschmelze.

Bei den Rechnungen mit Metallschmelze hängt der Fragmentationsgrad von der Temperatur, dem Flutwasservordruck und der Öffnungsgeometrie ab. So ist z.B. bei den Rechnungen mit Einlochgeometrie und Flutwasservordruck die Oberflächenvergrößerung um ca. 20% höher als ohne Flutwasservordruck.

Ähnliches ergibt sich auch bei den Rechnungen mit Stahlschmelze in der Siebplattengeometrie. In der Rechnung mit Flutwasservordruck wird eine um ca. 13% höhere Oberflächenvergrößerung als ohne Flutwasservordruck erreicht. Verglichen mit der Einlochgeometrie ist die Oberflächenvergrößerung hier höher. Grund ist u.a. die durch die turbulente Strömung bedingte Fragmentation der in den Wasserbehälter einlaufenden Schmelzemasse und die geänderte Abströmmöglichkeit durch die Siebplattenanordnung. Bei Siebplattengeometrie und ohne Flutwasservordruck nimmt der Fragmentationsgrad mit höherer Temperatur zu.

Alle Prozesse im oberen Behälter verlaufen so langsam und mit so geringer Dampfentwicklung, daß keine Ansätze für eine Dampfexplosion zu erkennen sind. Auch im Wasserbehälter werden trotz Einlaufen von Schmelze in das Wasser und trotz damit verbundener Druckspitzen keine dampfexplosionsähnlichen Fragmentierungsprozesse berechnet.

### *Flutwasserstrom*

Bei allen durchgeführten Rechnungen ist die Wassermenge im Integrationsgebiet vom Flutwasservordruck und von der in den Wasserbehälter einlaufenden Schmelzemasse abhängig. In den Rechnungen ohne Flutwasservordruck dringt Schmelze in den Wasserbehälter ein und führt dort zum schnellen Verdampfen des Wassers. Dementsprechend ergibt sich eine stärkere Abnahme der Wassermenge im Integrationsbereich von Beginn an. Wasser strömt zwar durch den Einlaufstutzen nach, die Dampfbildungsrate liegt aber so hoch, daß insgesamt die Wassermenge im Integrationsbereich abnimmt. Bei der Rechnung mit Flutwasservordruck und Einlochgeometrie nimmt die Wassermenge im Integrationsbereich zu, weil nur eine sehr kleine Menge Schmelze aufgrund des Überdrucks in den Wasserbehälter eindringt und dort dem entsprechend auch nur eine geringe Menge Wasser verdampft. Im Gegensatz dazu verursacht die in den Wasserbehälter einlaufende Schmelze bei der Rechnung mit Siebplattengeometrie trotz Flutwasservordruck eine rasche Dampfentwicklung, so daß eine Abnahme der Wassermenge im Integrationsbereich zu beobachten ist; gegenüber den Rechnungen ohne Flutwasservordruck ist sie jedoch geringer.

Bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze verdampft Wasser am schnellsten. Die Folge ist eine schnellere Abnahme der Wassermenge im Integrationsgebiet als bei den Rechnungen mit Metallschmelzen, über den gleichen Zeitraum betrachtet. Generell gilt, daß die nachfließende Flutwassermenge bei Rechnungen mit wasserseitigem Überdruck größer ist als bei den Rechnungen ohne Überdruck.

### *Schmelztemperatur*

Bei den Rechnungen mit Stahlschmelzen (s. Tab. 3) sind die Temperaturabnahmen sehr gering, abgesehen von örtlichen Abkühlungen. Bei der Uranoxidschmelze wird ein schnellerer Abkühlvorgang beobachtet, wodurch örtlich die Erstarrungstemperatur (3123 K) unterschritten wird.

Bei allen Rechnungen wurde keine wesentliche Erstarrung beobachtet. Die Ursache dafür liegt vor allem in der nur kurzen Zeitspanne von i.a. weniger als 2,5 s, für die die Wechselwirkung berechnet wird, so daß nur wenig Wasser mit der heißen Schmelze in dem Schmelzebehälter in Kontakt tritt.

Bei der  $\text{UO}_2$ -Schmelze wird eine schnelle Temperaturabnahme um ca. 150 K berechnet, während bei allen Rechnungen mit Stahlschmelze die Temperatur nur geringfügig abnimmt (10 bis 20 K). Der Grund dafür liegt vermutlich in dem modellierten Wärmeübergang Schmelze, Wasser und Dampf und nicht in der Oberflächenvergrößerung oder der Wärmeleitung in der Schmelze (s. hierzu Kap. 5.3.7, Temperaturen). Ob dieses an einer Rechnung mit Uranoxidschmelze vorhergesagte Verhalten verallgemeinert werden kann, ist nach bisheriger Kenntnis schwer vorauszusagen, zumal der domierende physikalische Mechanismus kaum identifiziert werden kann.

Bei den Rechnungen, in denen Schmelze in den Wasserbehälter dringt, wird zu einem späteren Zeitpunkt eine Abnahme der Enthalpie beobachtet. Dies beruht im wesentlichen nicht auf einer Temperaturabnahme, sondern darauf, daß ein Teil der Schmelze durch den Wassereinflaßstutzen den Integrationsbereich verläßt.

## 7. Zusammenfassung und Schlußfolgerung

In dieser theoretischen Arbeit werden die Phänomene der Fragmentation von Schmelzen bei Wasserzutritt von unten mit Hilfe des Rechenprogrammes IVA3 /11,12,13/ untersucht. Mit IVA3 können 3-Komponenten-Mehrphasen-Strömungen simuliert werden. Ziel dieser Arbeit ist es, Aussagen zu den thermo- und fluiddynamischen Abläufen der Fragmentation heißer Schmelzen zu gewinnen.

Hierzu wurden zwei geometrische Modelle verwendet. In beiden Modellen wird ein zylindrischer Schmelzebehälter simuliert, der mit einem darunterliegenden, ebenfalls zylindrischen, Wasserbehälter durch eine Öffnung verbunden ist. Im ersten geometrischen Modell wird die Öffnung als ein freier Querschnitt von 10 mm Durchmesser dargestellt. Im zweiten geometrischen Modell wird eine Platte mit siebartiger Öffnung von 40 mm Durchmesser, aber mit einem um den Faktor 4 größeren effektiven Querschnitt verwendet. Als Schmelzen werden Stahl- und Uranoxidschmelzen untersucht.

Bei der Durchführung der Rechnungen (s. Tab. 3, Seite 50) werden folgende Parameter variiert: die Art der Schmelze (Stahl, Uranoxid), der Flutwasservordruck und die Öffnungsgeometrie in der Bodenplatte.

Als Ergebnisse werden über der Zeit die Temperatur- und Druckverläufe, sowie die Wasser- und Schmelzemasse im Integrationsgebiet aufgezeichnet. Des weiteren werden die Volumenanteile und die Volumenströme der verschiedenen Komponenten in den Behältern sowie die Oberflächenvergrößerung und Enthalpie über der Zeit dargestellt.

Die Ergebnisse der Rechnungen lassen sich zu folgenden Beobachtungen zusammenfassen:

- Bei dem Modell mit der freien Öffnung in der Bodenplatte und einem Flutwasservordruck von 0,1 bar tritt kontinuierlich Wasser von unten in die Schmelze ein und es erfolgt eine Fragmentation der Schmelze. Bei fehlendem Flutwasservordruck läuft gleichzeitig ein Teil der Schmelzemasse durch die Öffnung in den unten liegenden Wasserbehälter und verursacht dort durch intensive Wechselwirkung mit dem Wasser eine höhere Fragmentation; der Druckanstieg im Wasserbehälter ist wegen der Verdämmung viel stärker als in der Schmelzeschicht mit freier Oberfläche.
- Bei der siebartig angenommenen Öffnung im zweiten geometrischen Modell wird bei niedrigerem Druckaufbau eine höhere Fragmentation erreicht als im ersten Modell. Bei siebartiger Öffnung wird wegen des großen Strömungsquerschnitts ein stetes Abfließen eines Teils der Schmelze in den Wasserbehälter beobachtet. Es wird aber kein andauerndes Eintreten von Wasser in die Schmelze beobachtet, auch nicht bei einem Wasservordruck von 0,3 bar. Das Durchregnen von Schmelze in den Wasserbehälter ist bei Oxid kleiner als bei Stahl.

- Bei allen Rechnungen mit Stahlschmelze steigt der Fragmentationsgrad mit dem Flutwasservordruck und der Temperatur, wobei sich in der Schmelzeschicht Kanäle ausbilden, die stabil sind und einen geringen Strömungswiderstand bei der Durchströmung mit Dampf aufweisen. Bei der Rechnung mit Uranoxidschmelze bilden sich ebenfalls Kanäle in der Schmelzeschicht, die aufbrechen und zur Zerteilung der Schmelze in Tropfen führen. Die Fragmentierung der Schmelze im unteren Behälter ist bei Stahl geringer (Strahlbildung) als bei Uranoxid.
- Bei allen Rechnungen konnte in der jeweiligen Simulationszeit ( $< 2,5$  s) keine wesentliche Erstarrung, wohl aber eine geringe Abkühlung der Schmelze beobachtet werden. Dabei kühlt die Uranoxidschmelze schneller ab als die Stahlschmelze, was vermutlich auf dem modellierten Wärmeübergang Schmelze, Wasser, Dampf und nicht auf der Oberflächenvergrößerung oder der Wärmeleitung in der Schmelze beruht. Der Wärmeausstrag aus der Schmelze über den berechneten kurzen Zeitraum ist bei Stahl (10 bis 20 K) geringer als bei Uranoxid (ca. 150 K). Ferner wird bei allen Rechnungen mit mäßigem oder keinem Flutwasservordruck ein Auslaufen der Schmelze durch den Wassereinlaufstutzen aus dem Behälter beobachtet.
- Alle Prozesse im oberen Behälter verlaufen so langsam und mit so geringer Dampfwicklung, daß keine Ansätze für eine Dampfexplosion zu erkennen sind. Auch im unten liegenden Wasserbehälter werden trotz des Einlaufens von Schmelze in das Wasser und der damit verbundenen Druckspitzen keine dampfexplosionsähnlichen Fragmentierungsprozesse berechnet.

Für weiterführende Simulationsrechnungen sind folgende Punkte zu berücksichtigen:

- Die Rechnungen mit Uranoxidschmelze konnten nur für sehr kurze Rechenzeiten ( $< 0,3$  s) simuliert werden, da aus Konvergenzgründen die Rechnungen abbrachen. In dem vorgegebenen Zeitraum für diese Arbeit war es nicht möglich, die Ursachen genauer zu identifizieren und weitere Rechnungen durchzuführen.
- Um den Einfluß der Stoffgrößen der verschiedenen Schmelzen besser identifizieren zu können, sollten weitere Rechnungen unter ausreichender systematischer Variation von Schmelzezusammensetzung, Anordnung der Öffnungsgeometrie, Flutwasservordruck sowie Schmelzetemperatur durchgeführt werden, um deren Einfluß auf die Fragmentation besser beurteilen zu können.

## 8. Literaturverzeichnis

- /1/ S.Schmidt, W.Tromm:  
unveröffentlichter Bericht  
Kernforschungszentrum Karlsruhe 1992
  
- /2/ M.Kerber, W.Tromm:  
unveröffentlichter Bericht  
Kernforschungszentrum Karlsruhe 1992
  
- /3/ U.Schumann:  
Dampfexplosion - physikalische Grundlagen  
und Bezug zur Reaktorsicherheit;  
Bericht KfK 3388 (1982)
  
- /4/ A.W.Cronenberg (1980):  
Recent Developments in the Understanding of  
Energetic Molten Fuel-Coolant Interactions;  
Nuclear Safety 21, 319-337
  
- /5/ S.J.Board, R.W.Hall & R.S.Hall (1975):  
Detonation of Fuel Coolant Explosions;  
Nature 254, 319-321
  
- /6/ J.Schriewer(1980):  
Zur Theorie der hydrodynamischen Fragmentation  
von Flüssigkeitstropfen in flüssigen Medien  
durch Stoßwellen mit Anwendung auf die Systeme  
Hg/H<sub>2</sub>O, Fe/H<sub>2</sub>O, Stahl/Na, UO<sub>2</sub>/Na;  
Dissertation, Institut für Kernenergetik und  
Energiesysteme, Universität Stuttgart
  
- /7/ D.J.Buchanan & T.A.Dullforce (1973):  
Mechanism for Vapour Explosions;  
Nature 245, 32-34

- /8/ D.J.Buchanan (1973):  
Penetration of a Solid Layer by a Liquid Jet;  
J.Phys.D: Appl. Phys. 6, 1762-1771
- /9/ D.J.Buchanan (1974a):  
A Model for Fuel-Coolant Interactions;  
J.Phys.D: Appl. Phys. 7, 1441-1457
- /10/ D.J.Buchanan (1974b):  
Fuel-Coolant Interaction Theory;  
In: J.R.Ockendon & W.R.Hodgkind (eds.),  
Moving Boundary Problems in Heat Flow and  
Diffusion, 270-285
- /11/ N.I.Kolev:  
A Three-Field Model of Transient 3D Multiphase,  
Three-Component Flow for the Computer Code IV A3,  
Part 1: Theoretical Basis: Conservation and  
State Equations, Numerics;  
Bericht KfK 4948 (1991)
- /12/ N.I.Kolev:  
A Three-Field Model of Transient 3D Multiphase,  
Three-Component Flow for the Computer Code IV A3,  
Part 2: Models for the Interfacial Transport Phenomena,  
Code Validation;  
Bericht KfK 4949 (1991)
- /13/ N.I.Kolev:  
IVA3: Computer Code for Modelling of Transient Three  
Dimensional Three Phase Flow in Complicated Geometry,  
Program Documentation: Input Discription;  
Bericht KfK 4950 (1991)
- /14/ Y.Ahmad:  
Axial Distribution of Bulk Temperature and Void  
Fraktion in a Heated Channel with Inlet Subcooling;  
J. Heat Transfer, 92 (1970) 595



- /15/ M.Epstein and K.Fauske:  
Steam Film Instability and the Mixing of Core-Melt  
Jets and Water;  
ANS Proceedings, 1985 National Heat Transfer Conference,  
August 4-7, 1985, Denver, Colorado, pp. 277-284
- /16/ M.Pilch, C.A.Erdman and A.B.Reynolds:  
Acceleration Induced Fragmentation of Liquid Drops;  
NUREG/CR-2247/ Charlottesville, VA:  
Department of Nucl. Eng., University of Virginia,  
August 1981 /17/ U.Grigull, H.Sandner:  
Wärmeleitung  
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York  
1979 /18/ W.I.Howarth, A.I.Ch.E.J. Vol.13, 5 (1967) 1007-1013
- /19/ W.Tromm:  
Langfristige Kühlbarkeit einer Kernschmelze;  
Sicherheitsorientierte LWR-Forschung  
Jahresbericht 1991,  
Bericht KfK 5050 (1991), pp. 218-227
- /20/ G.Arnecke:  
unveröffentlichter Bericht  
Kernforschungszentrum Karlsruhe 1991

## IREGIM

### One velocity field only:

- 17 Velocity field 1 (gas) only.
- 1 Velocity field 2 (water) only.
- 22 Velocity field 3 (liquid metal) only.

### Two velocity fields only:

- 4 Two phase bubble flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 6 Two phase slug flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 7 Two phase churn turbulent flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 9 Two phase dispersed flow — continuous velocity field 1 (gas), discrete velocity field 2 (droplets) for pool flow.
- 8 Annular flow — continuous velocity field 1 (gas) and continuous velocity field 2 (water film), identified only for flow in a confined geometry.
- 3 Dispersed velocity field 3 (liquid metal droplets or solid particles) in continuous velocity field (2) (water).
- 2 Dispersed water droplets (2) in continuous liquid metal (3).
- 13 Continuous velocity field 1 (gas) and dispersed velocity field 3 (water droplets).
- 14 Continuous velocity field (1) (gas) and dispersed velocity field (3) (solid particles).
- 15 Dispersed velocity field 1 (gas bubbles) 1 in continuous velocity field 3 (liquid metal).
- 16 Continuous velocity field 1 (gas) and dispersed velocity field 3 (solid particles or liquid metal droplets).

### Three velocity fields:

- 5 Three phase bubble flow — dispersed velocity field 1 (gas bubbles), continuous velocity field 2 (water) and dispersed velocity field 3 (liquid metal or solid particles).
- 21 Continuous velocity field 1 (gas), dispersed velocity field 2 (water droplets) and dispersed velocity field 3 (solid particles or liquid metal droplets or porous velocity field 3) — for pool flow only.
- 23 Continuous velocity field 1 (gas), disperse velocity field 2 (water droplets) surrounded by continuous velocity field 3 (porous liquid metal with large particle diameters).
- 11 Disperse velocity field 1 (gas bubbles), continuous velocity field 2 (water) and continuous velocity field 3.
- 10 Continuous velocity field 1 (gas), continuous velocity field 2 (water) and discrete velocity field (3) (water droplets) — only for flow in confined geometry.
- 12 Continuous velocity field 1 (gas), continuous velocity field 2 (water) and discrete velocity field (3) (microscopic solid particles) — only for flow in confined geometry.

Abstract mathematics	Real world
Velocity field Nr.1	Disperse or continuous homogeneous equilibrium mixture of two gases
Inert component	Air
Non inert component	Steam
Velocity field Nr.2	Disperse or continuous homogeneous equilibrium solution of chemical constituents in liquid water (liquid – solid mixture)
Disperse inert component	Microscopic solid particles
Non inert component	Continuous or disperse water
Velocity field Nr.3	For channel flow : disperse homogeneous equilibrium solution of chemical constituents in liquid water (liquid – solid mixture)  For pool flow: "liquid metal"
Disperse or continuous inert component	
– single phase	Micro- or macroscopic liquid metal or solid particles
– two phases	Macroscopic freezing metal
Non inert component	Water droplets

The abstract mathematical formalism used in IVA3 is universal for all flows consisting of three fields where each of the fields consists of two components.

Tab. 2      Gegenüberstellung der mathematischen Simulation und des physikalischen Zustandes in IVA3 /13/.

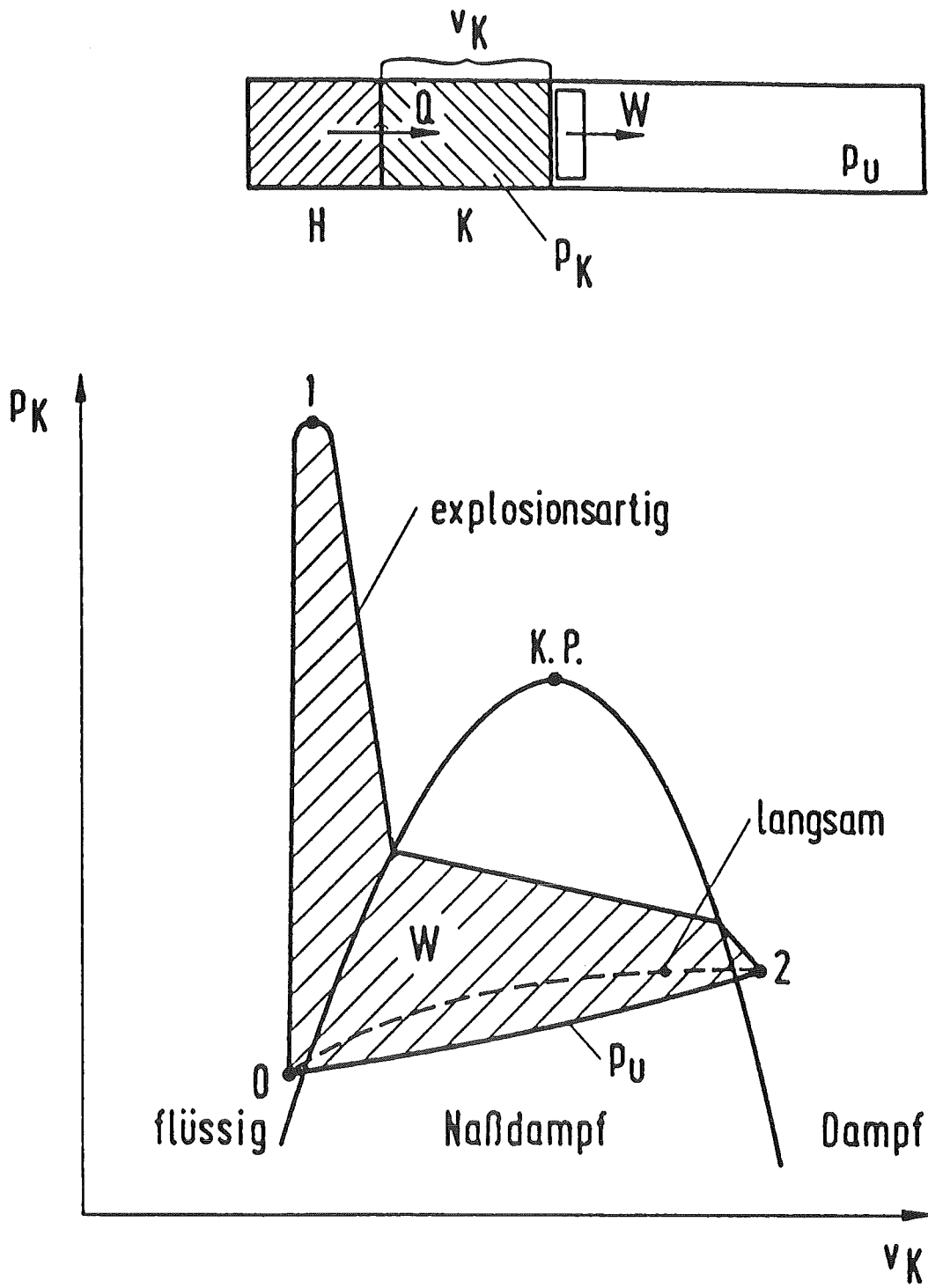


Abb. 1 Ablauf einer Dampfexplosion im Druck (p)-Volumen (v)-Diagramm /3/.

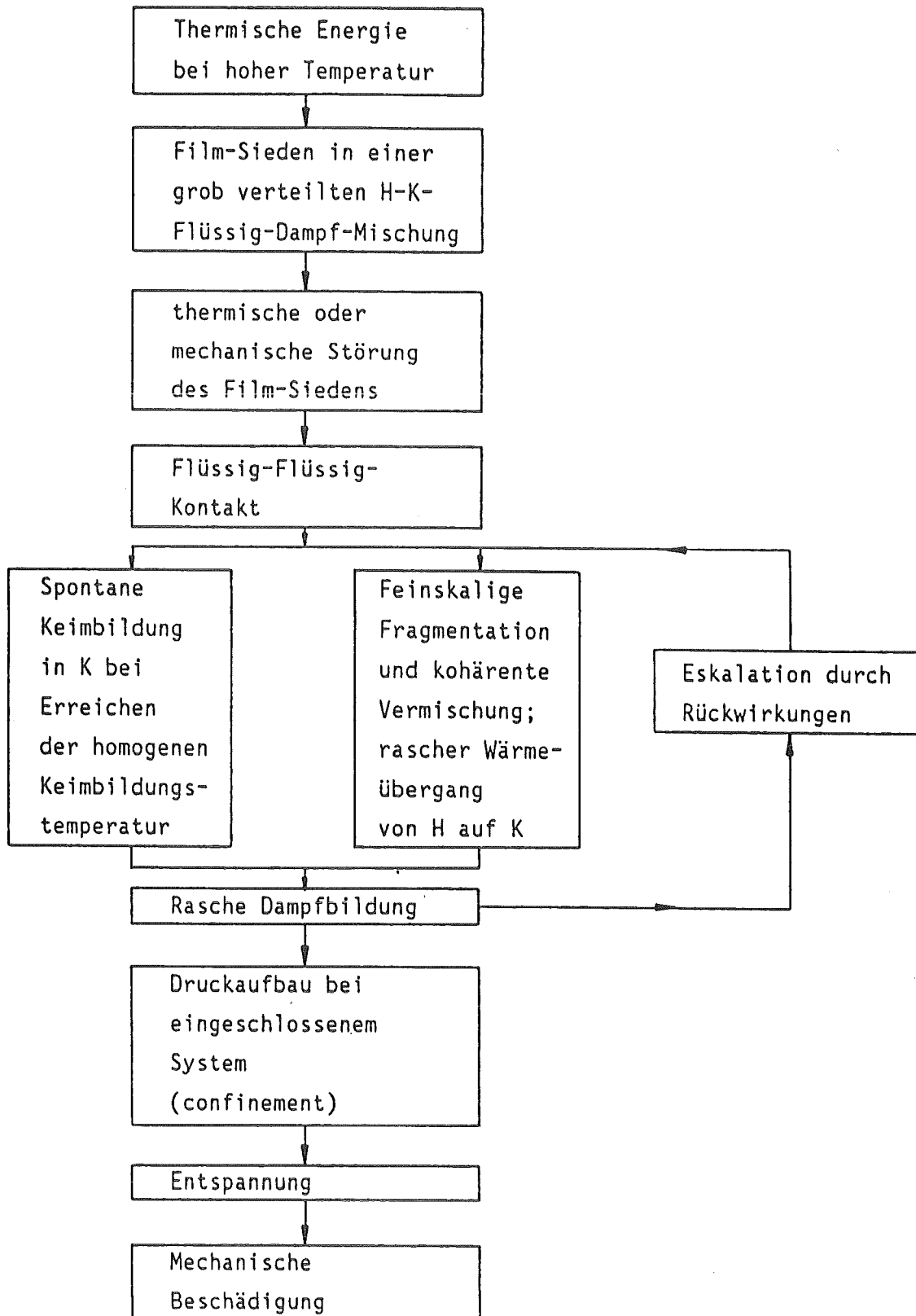


Abb. 2 Ereignisfolgen, die zu einer großen Dampfexplosion mit großem Schadenspotential führen, nach Cronenberg (1980).

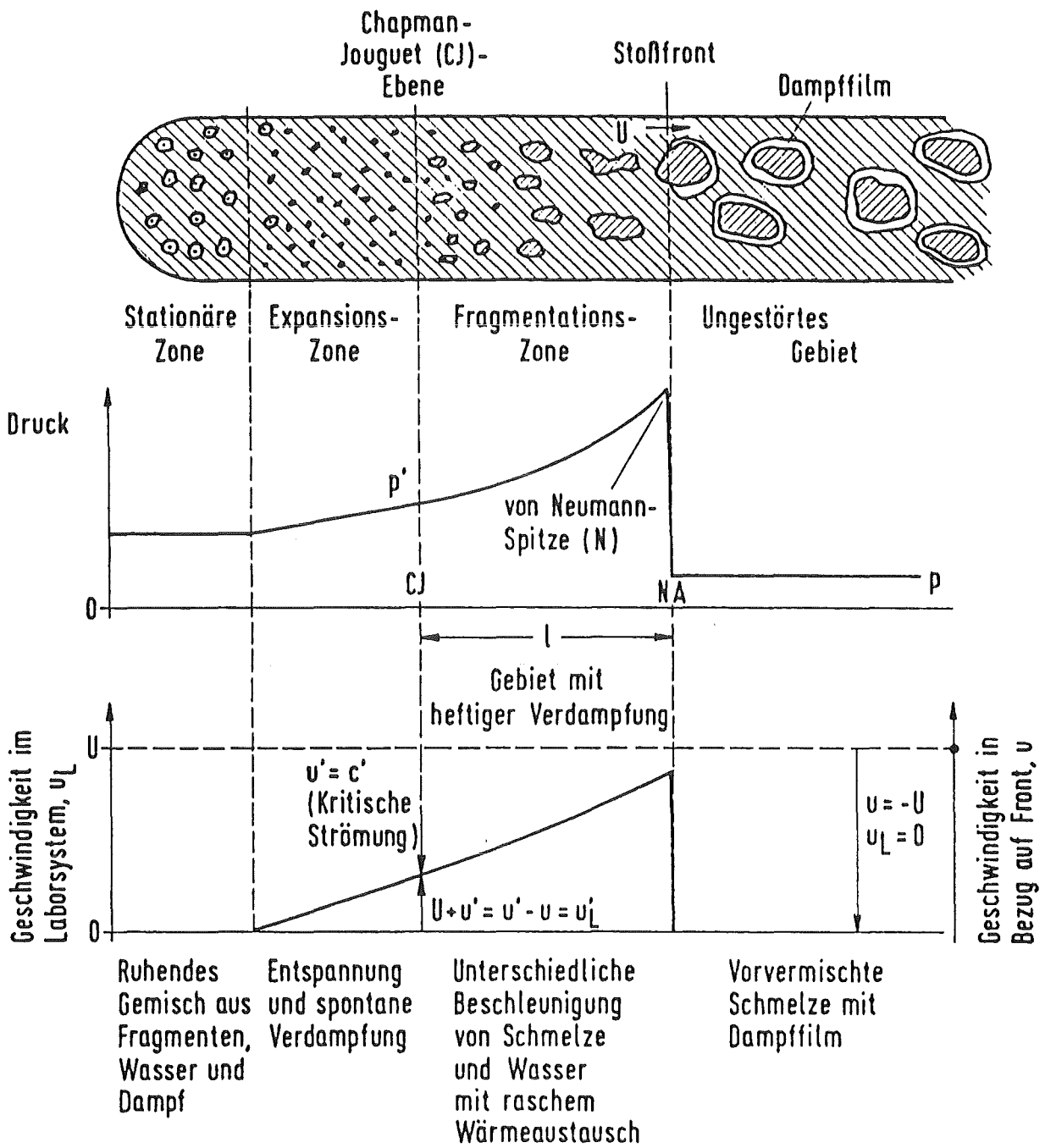
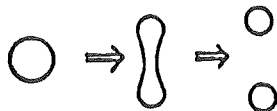


Abb. 3 Schema einer thermischen Detonation nach Board, Hall & Hall (1975).

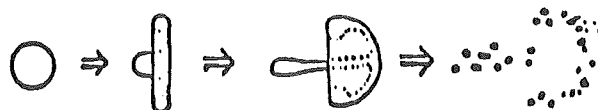
- 1) **VIBRATIONAL MODE (WEBER NUMBER ABOUT 10) - DROP OSCILLATES, THEN BREAKS UP INTO TWO SMALLER DROPS**



- 2) **BAG BREAKUP MODE (WEBER NUMBER ABOUT 20) - HOLLOW BAG IS FORMED SPANNING A RING OF FLUID: BAG BURSTS AND RING BREAKS UP INTO MANY DROPLETS**



- 3) **CLAVIFORM BREAKUP MODE (WEBER NUMBER ABOUT 70) - SIMILAR TO BAG BREAKUP, BUT WITH FORMATION OF CENTRAL CLUB PRIOR TO DISINTEGRATION**



- 4) **STRIPPING MODE (WEBER NUMBER ABOUT 1000) - DROP FLATTENS, AND MIST OF DROPLETS IS STRIPPED AWAY FROM CIRCUMFERENCE INTO WAKE**

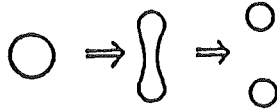


- 5) **CATASTROPHIC MODE (WEBER NUMBER ABOUT 50,000) - DROP IS SUDDENLY TORN APART**



Abb. 4 Zerfallsformen bei hydrodynamischer Fragmentation nach Reinecke & Waldman (1970) (Abb. aus Benz & Schriewer 1978).

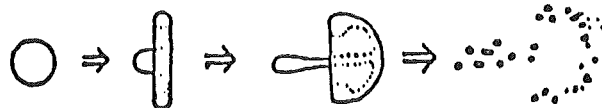
- 1) **VIBRATIONAL MODE (WEBER NUMBER ABOUT 10) – DROP OSCILLATES, THEN BREAKS UP INTO TWO SMALLER DROPS**



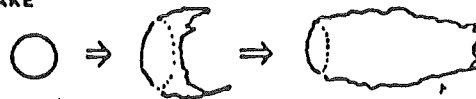
- 2) **BAG BREAKUP MODE (WEBER NUMBER ABOUT 20) – HOLLOW BAG IS FORMED SPANNING A RING OF FLUID: BAG BURSTS AND RING BREAKS UP INTO MANY DROPLETS**



- 3) **CLAVIFORM BREAKUP MODE (WEBER NUMBER ABOUT 70) – SIMILAR TO BAG BREAKUP, BUT WITH FORMATION OF CENTRAL CLUB PRIOR TO DISINTEGRATION**



- 4) **STRIPPING MODE (WEBER NUMBER ABOUT 1000) – DROP FLATTENS, AND MIST OF DROPLETS IS STRIPPED AWAY FROM CIRCUMFERENCE INTO WAKE**



- 5) **CATASTROPHIC MODE (WEBER NUMBER ABOUT 60,000) – DROP IS SUDDENLY TORN APART**



Abb. 4 Zerfallsformen bei hydrodynamischer Fragmentation nach Reinecke & Waldman (1970) (Abb. aus Benz & Schriewer 1978).



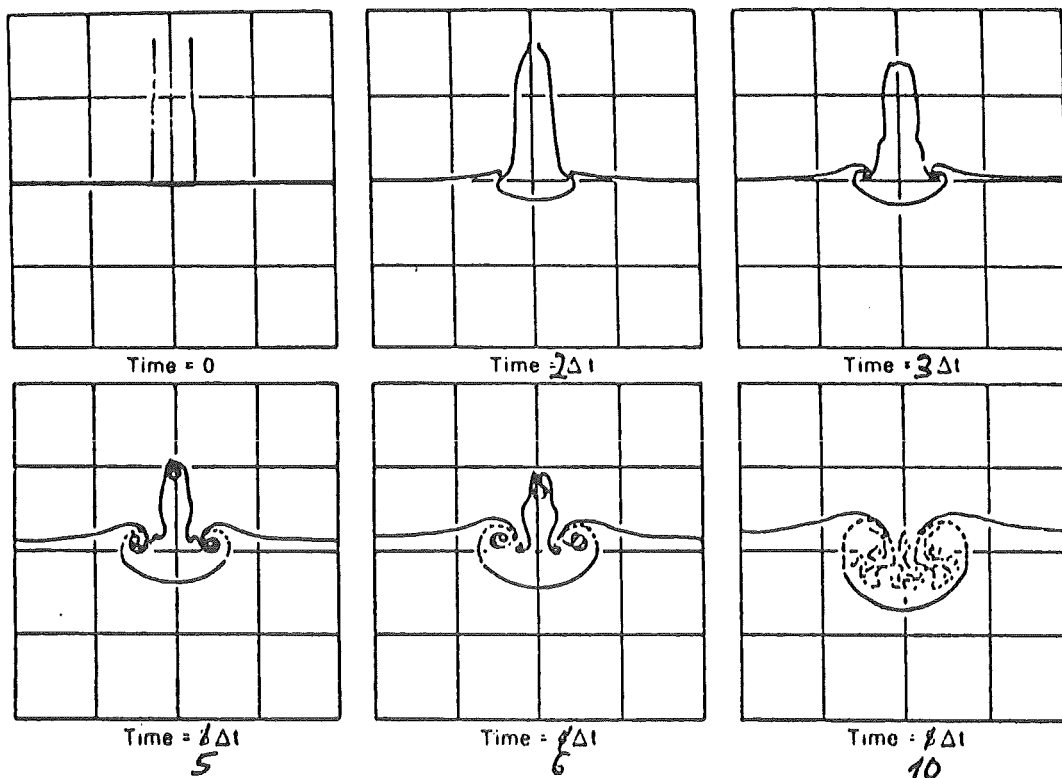


Figure 10. Computer Simulation of Liquid Jet Penetration into Another Fluid(75,86)

Abb. 5 Aufbrechen eines Strahls durch Bildung eines Wirbelpaares beim Eindringen in eine Flüssigkeit. Rechenergebnis von Christiansen (1973), entnommen aus Cronenberg & Benz (1980). ( $\Delta t$  = dimensionsloses Zeitinkrement von 0.25)

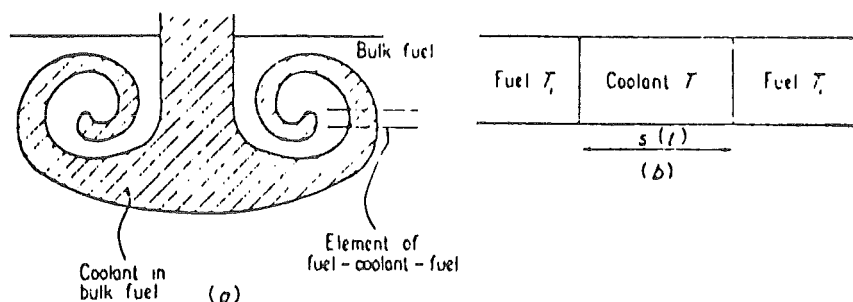


Figure 4. (a) Schematic cross section of a jet of coolant sometime after penetration. (b) Element of fuel-coolant-fuel in which heat transfer occurs one-dimensionally.

Abb. 6 Schematischer Querschnitt durch einen fragmentierenden Strahl mit charakteristischer Dicke  $s(t)$  nach Buchanan (1974a).

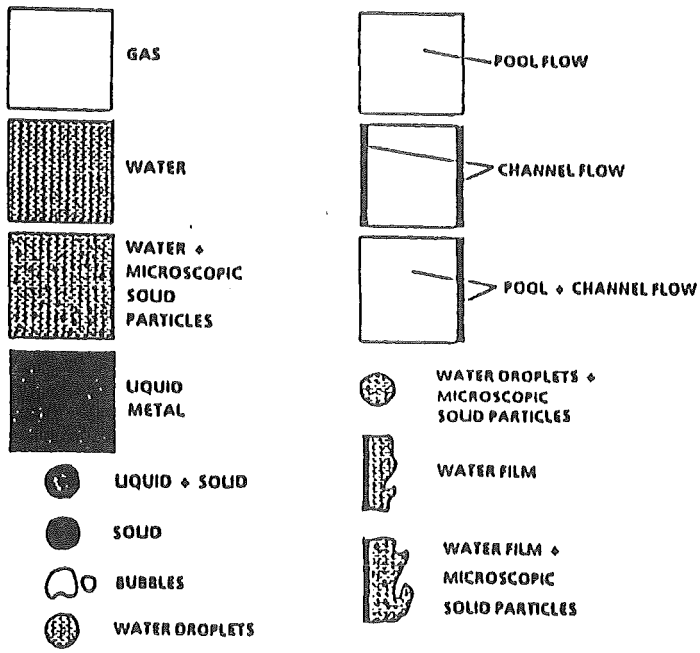
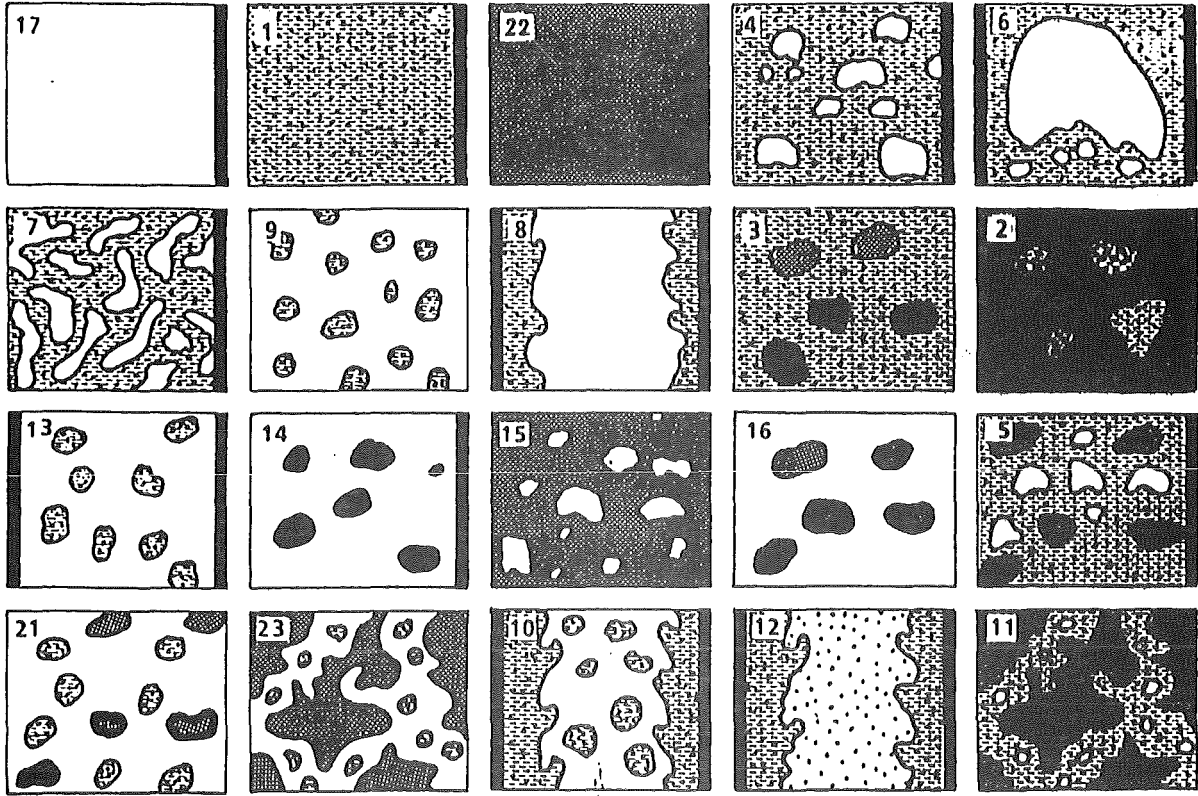


Abb. 7.1 Modellierete Strömungsformen in IVA3 /12/.

IREGIM

One velocity field only:

- 17 Velocity field 1 (gas) only.
- 1 Velocity field 2 (water) only.
- 22 Velocity field 3 (liquid metal) only.

Two velocity fields only:

- 4 Two phase bubble flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 6 Two phase slug flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 7 Two phase churn turbulent flow — continuous velocity field 2 and discrete velocity field 1 (gas).
- 9 Two phase dispersed flow — continuous velocity field 1 (gas), discrete velocity field 2 (droplets) for pool flow.
- 8 Annular flow — continuous velocity field 1 (gas) and continuous velocity field 2 (water film), identified only for flow in a confined geometry.
- 3 Dispersed velocity field 3 (liquid metal droplets or solid particles) in continuous velocity field (2) (water).
- 2 Dispersed water droplets (2) in continuous liquid metal (3).
- 13 Continuous velocity field 1 (gas) and dispersed velocity field 3 (water droplets).
- 14 Continuous velocity field (1) (gas) and dispersed velocity field (3) (solid particles).
- 15 Dispersed velocity field 1 (gas bubbles) 1 in continuous velocity field 3 (liquid metal).
- 16 Continuous velocity field 1 (gas) and dispersed velocity field 3 (solid particles or liquid metal droplets).

Three velocity fields:

- 5 Three phase bubble flow — dispersed velocity field 1 (gas bubbles), continuous velocity field 2 (water) and dispersed velocity field 3 (liquid metal or solid particles).
- 21 Continuous velocity field 1 (gas), dispersed velocity field 2 (water droplets) and dispersed velocity field 3 (solid particles or liquid metal droplets or porous velocity field 3) — for pool flow only.
- 23 Continuous velocity field 1 (gas), disperse velocity field 2 (water droplets) surrounded by continuous velocity field 3 (porous liquid metal with large particle diameters).
- 11 Disperse velocity field 1 (gas bubbles), continuous velocity field 2 (water) and continuous velocity field 3.
- 10 Continuous velocity field 1 (gas), continuous velocity field 2 (water) and discrete velocity field (3) (water droplets) — only for flow in confined geometry.
- 12 Continuous velocity field 1 (gas), continuous velocity field 2 (water) and discrete velocity field (3) (microscopic solid particles) — only for flow in confined geometry.

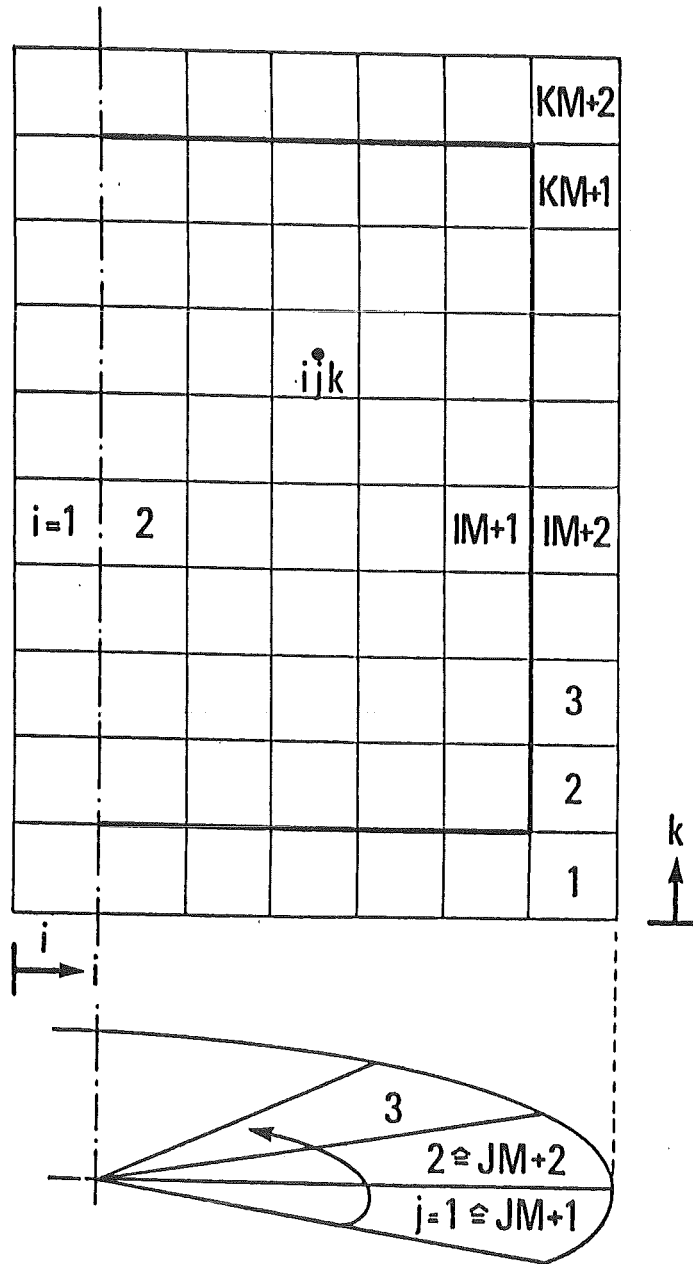


Abb. 8 Zuordnung der Indizes der Elementarzellen in der diskretisierten Zylindergeometrie /11/.

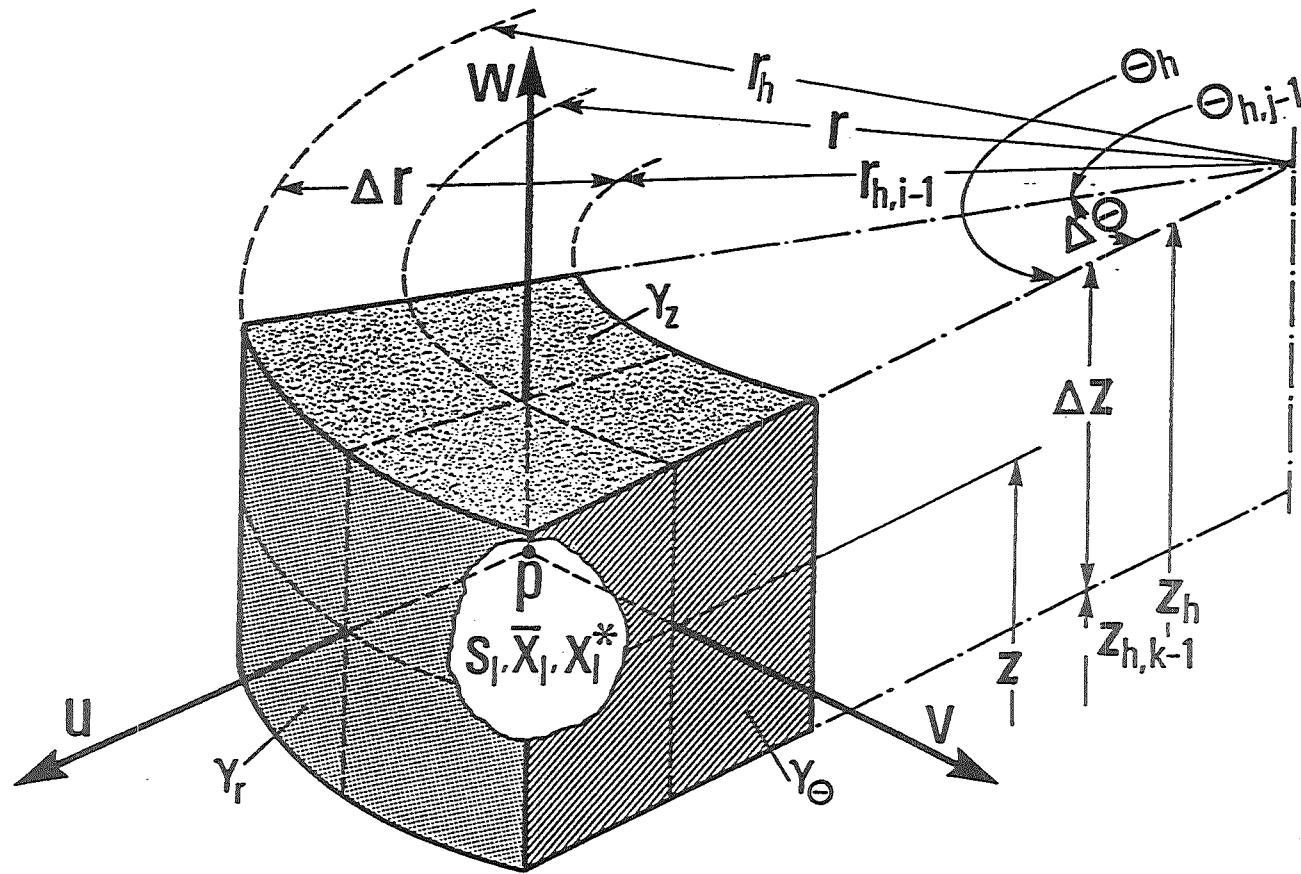


Abb. 9 Definition der geometrischen Größen und der Position der abhängigen Variablen /11/.

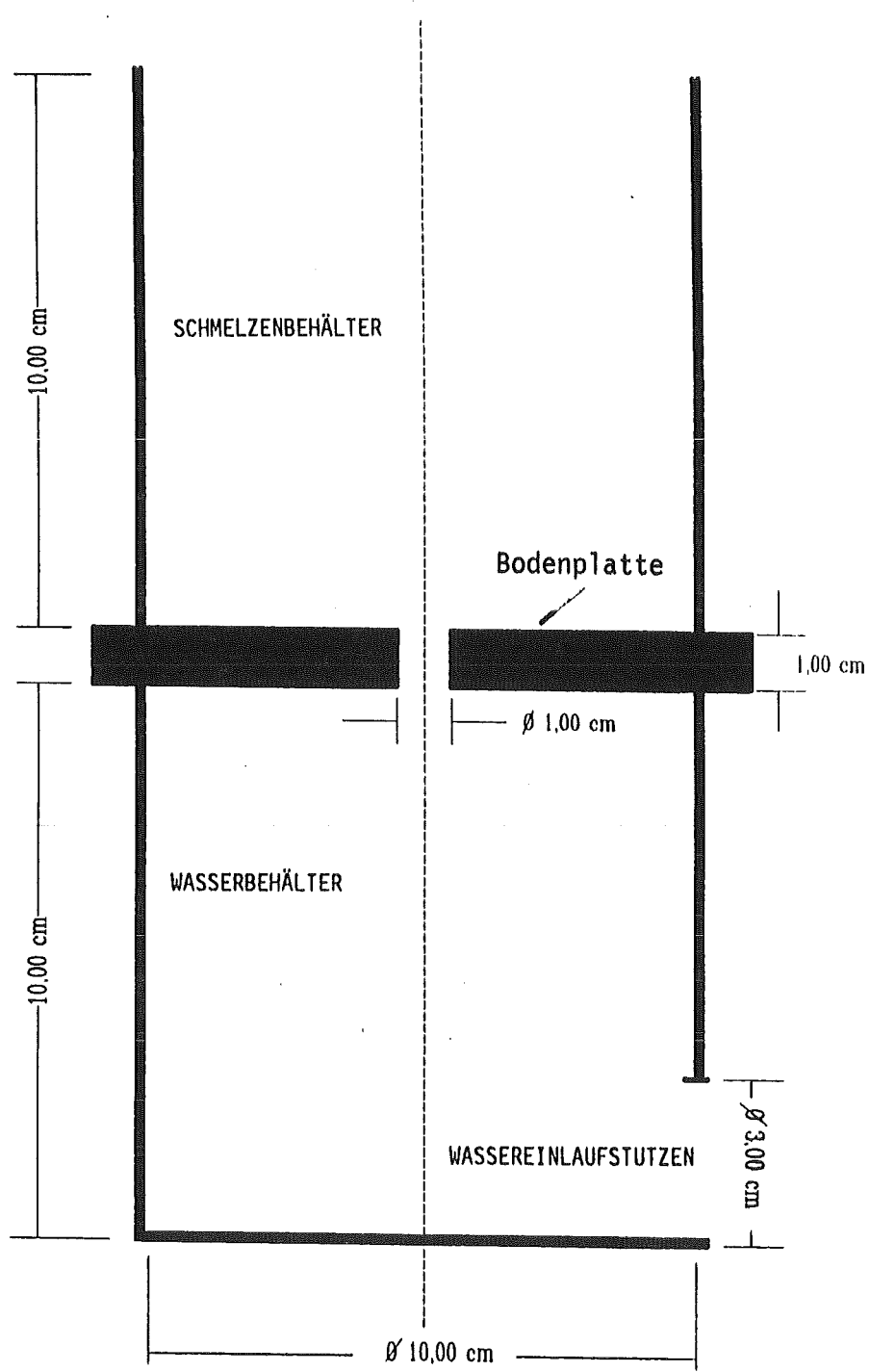


Abb. 10 Das geometrische Modell M02.

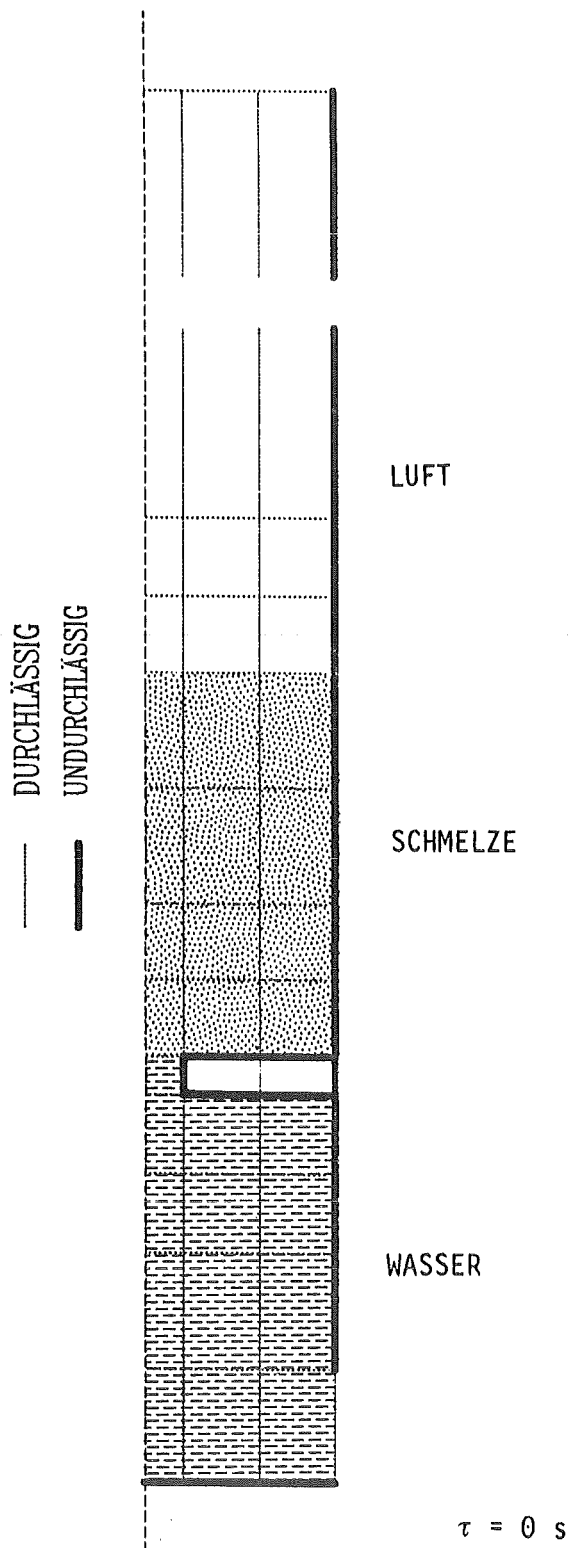


Abb. 11 Simulation des geometrischen Modells M02.

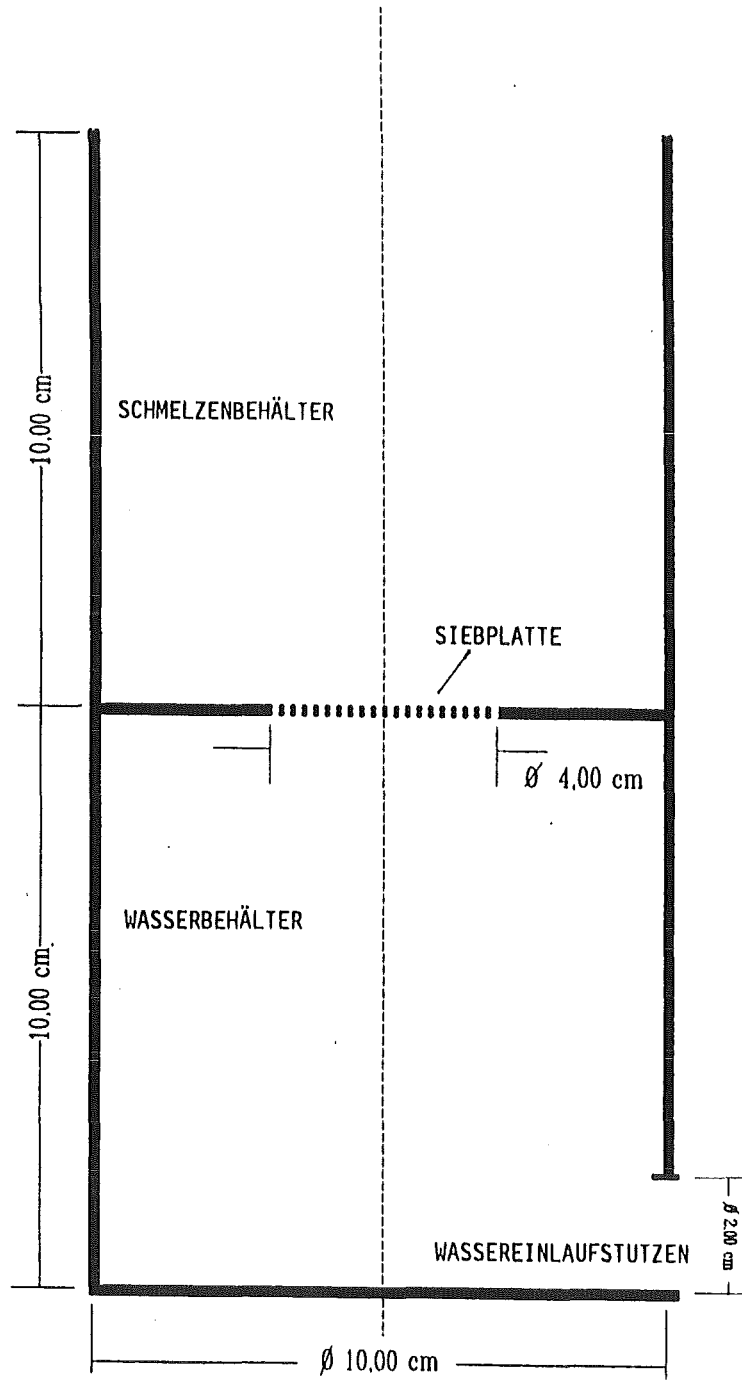


Abb. 12 Das geometrische Modell M03.



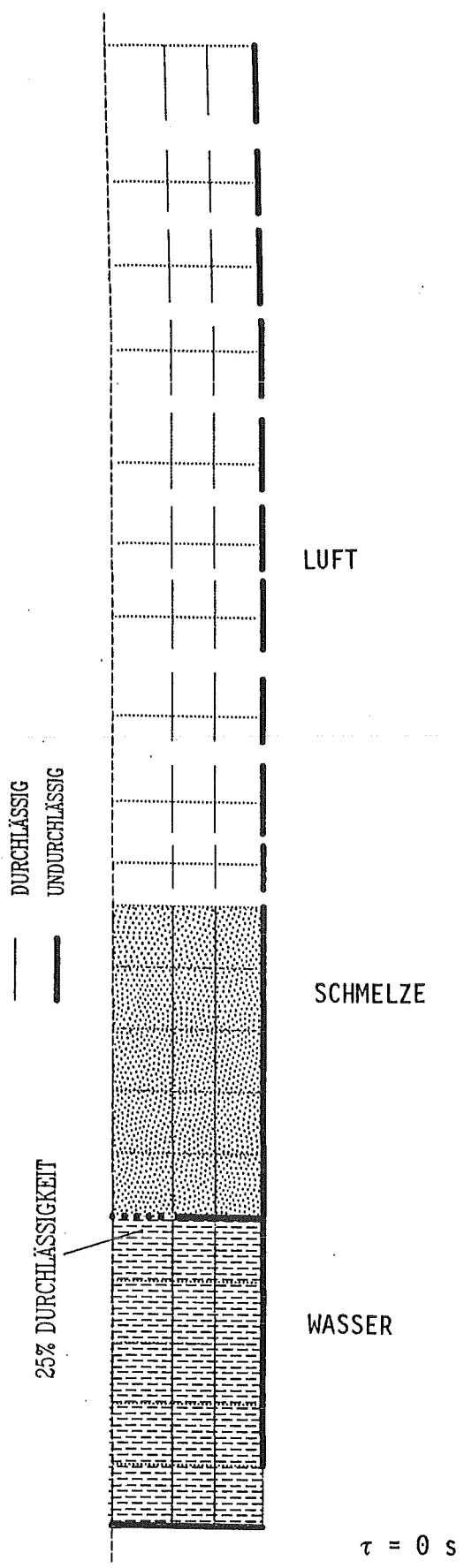
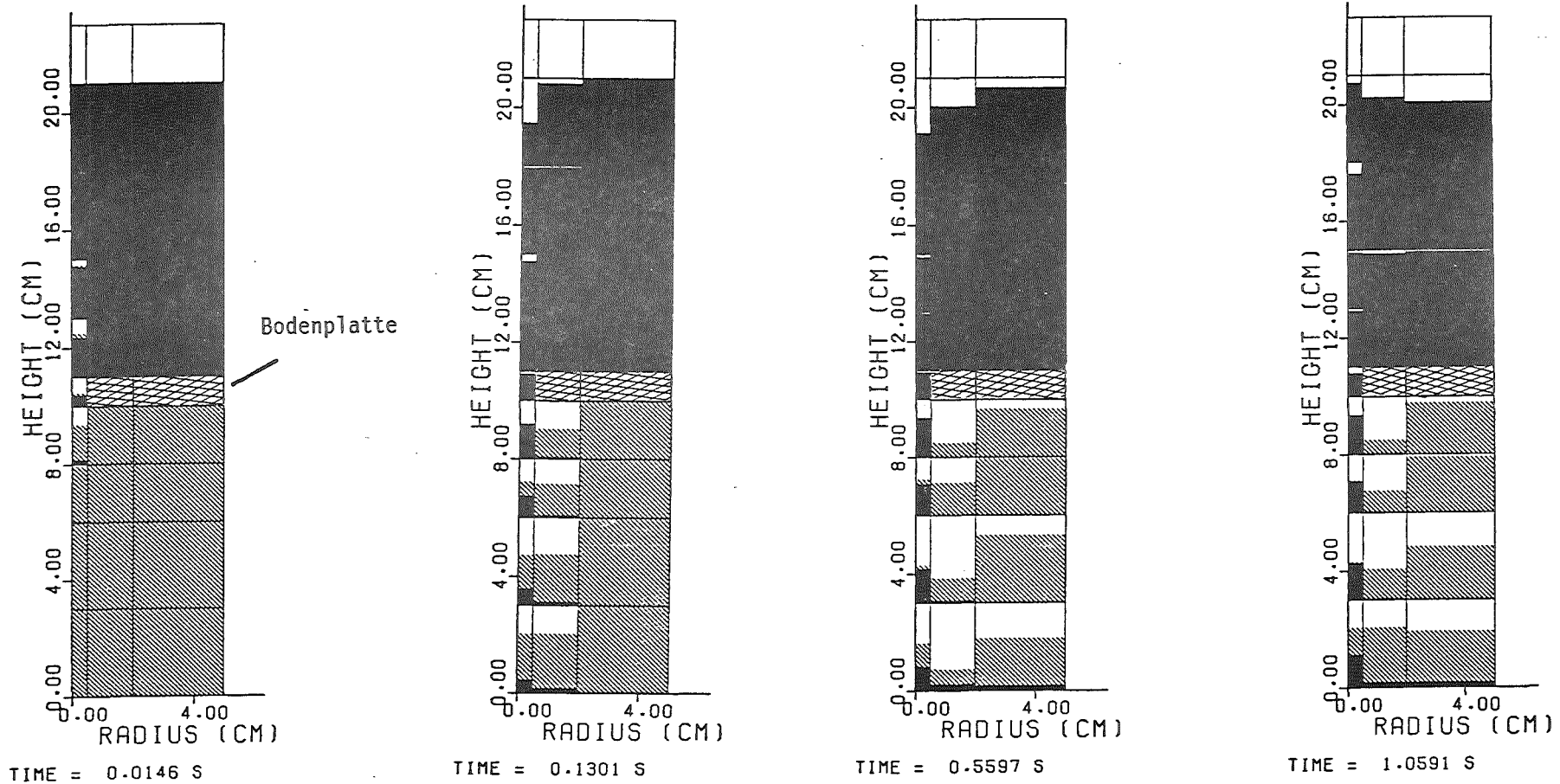
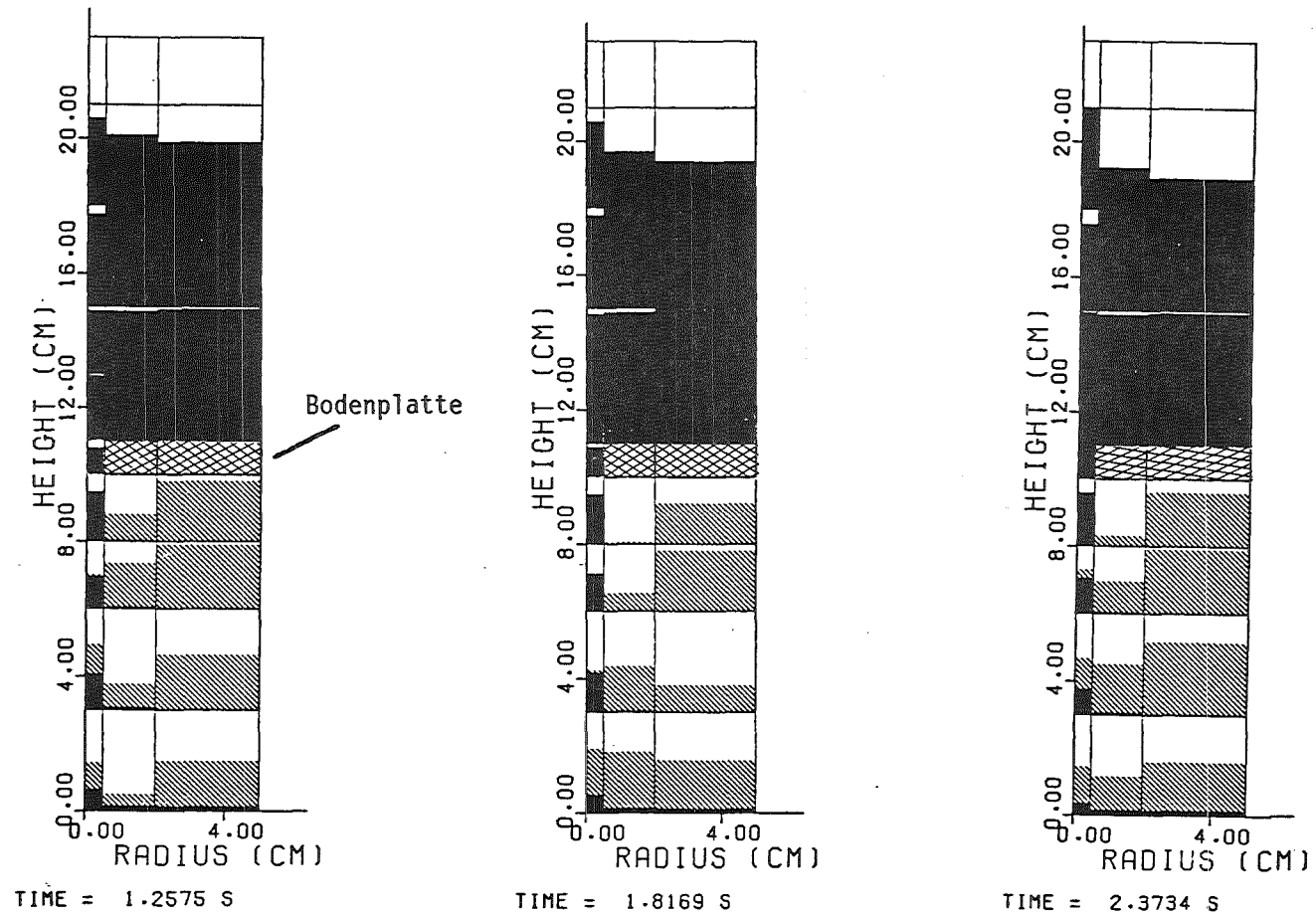


Abb. 13 Simulation des geometrischen Modells M03.



Rechnung M02R01

Abb. 14.1 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11



Rechnung M02R01

Abb. 14.2 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11

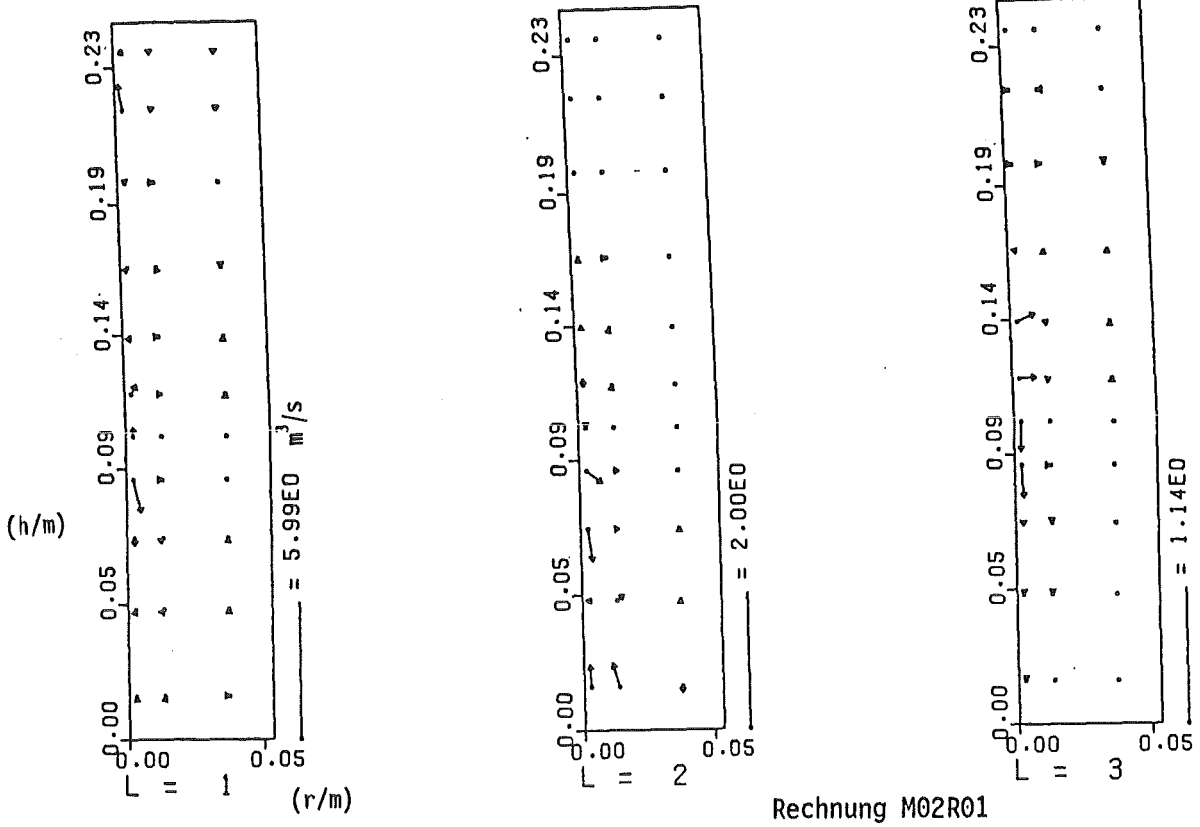


Abb. 15.1 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,015$  s in der Geometrie der Abb. 11

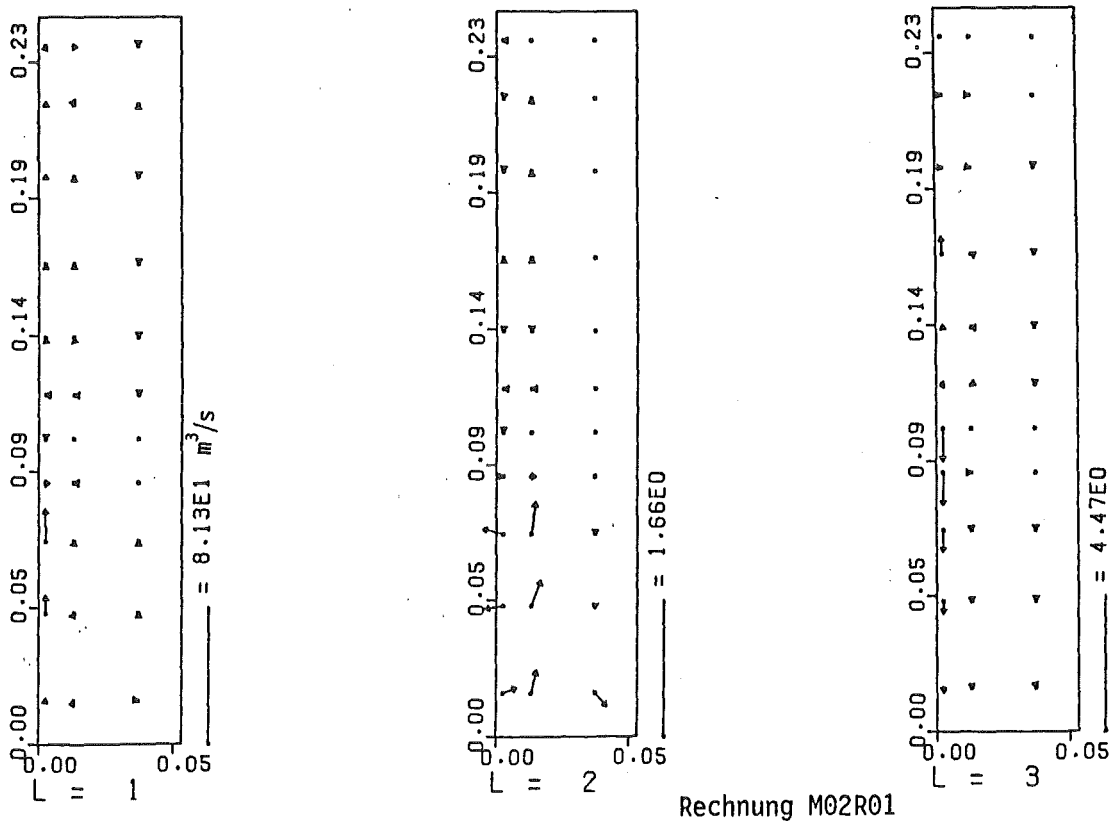


Abb. 15.2 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,130$  s in der Geometrie der Abb. 11

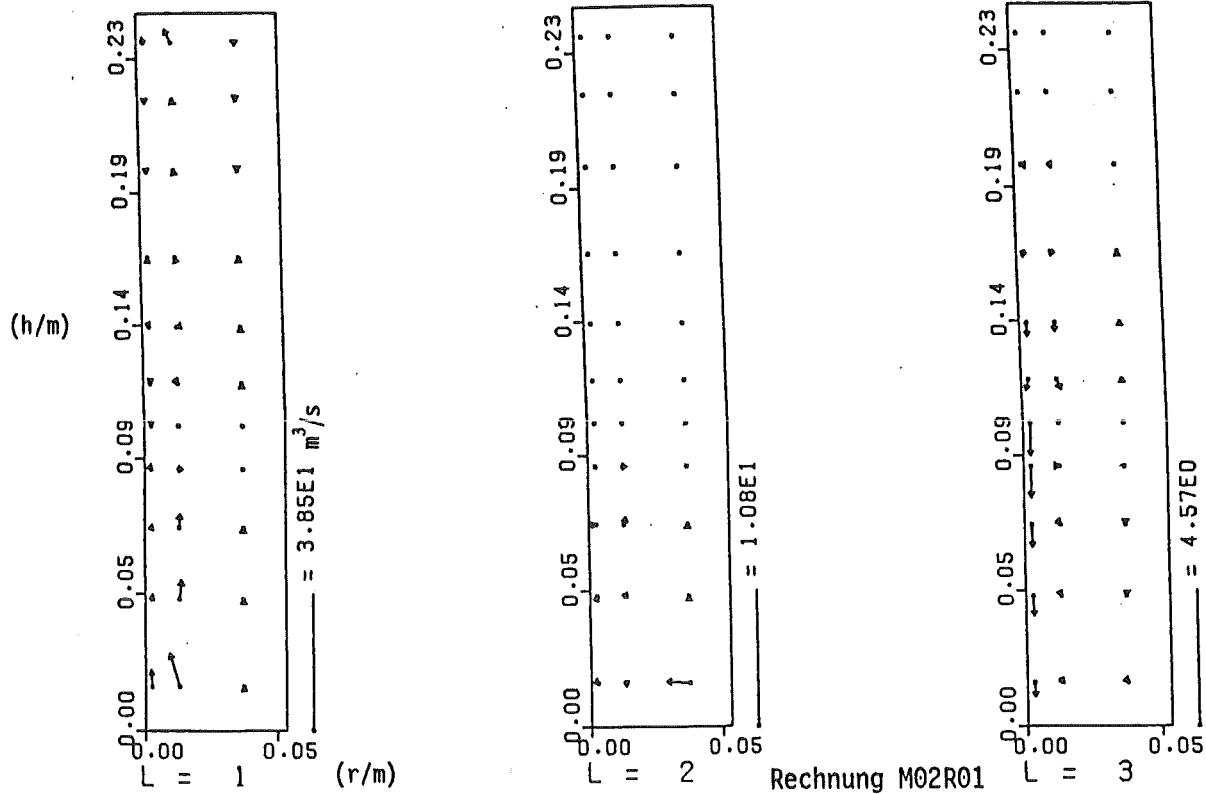


Abb. 15.3 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,560$  s in der Geometrie der Abb. 11

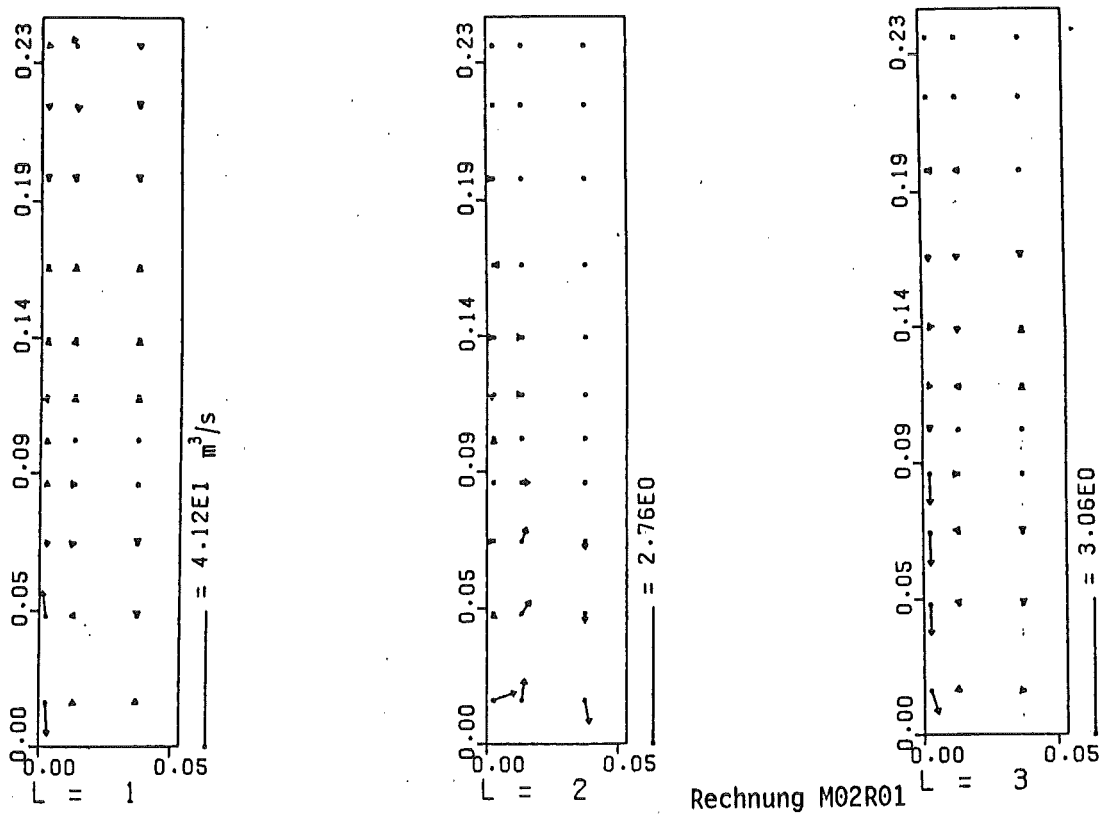


Abb. 15.4 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 1,059$  s in der Geometrie der Abb. 11

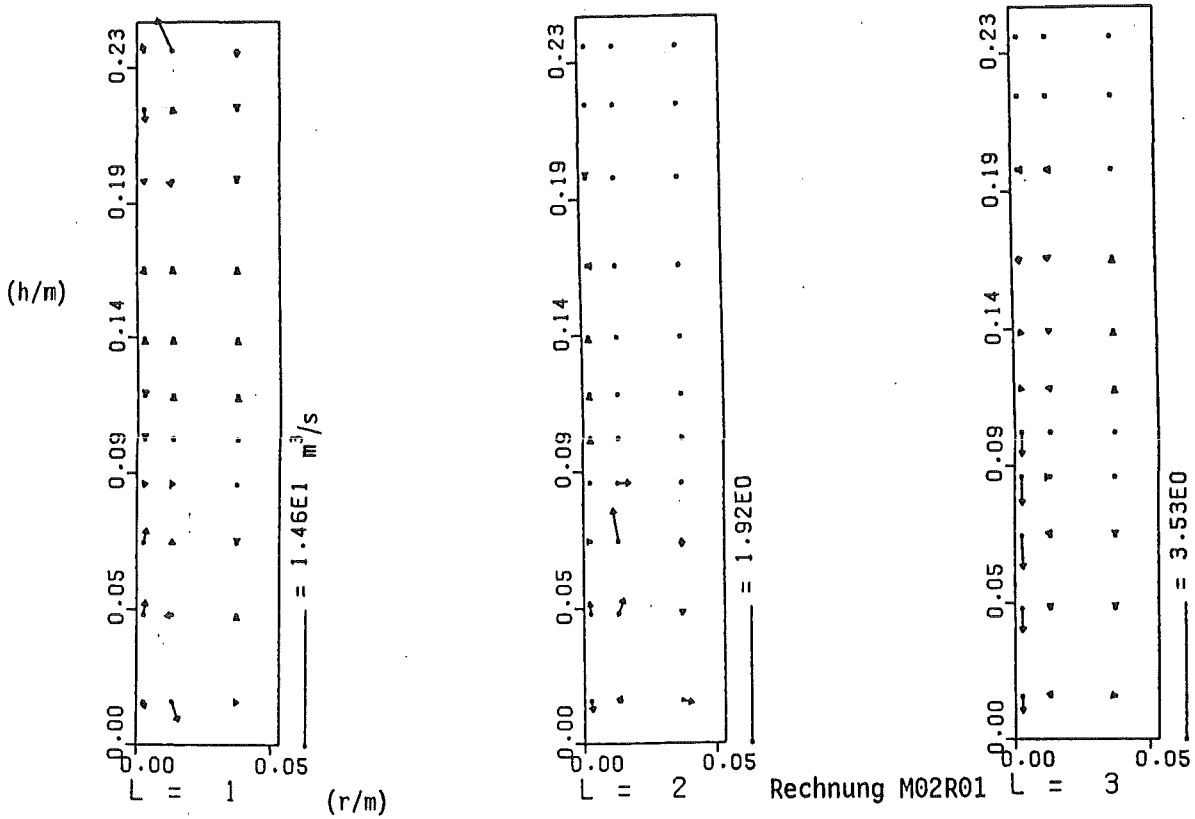


Abb. 15.5 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 1,256$  : in der Geometrie der Abb. 11

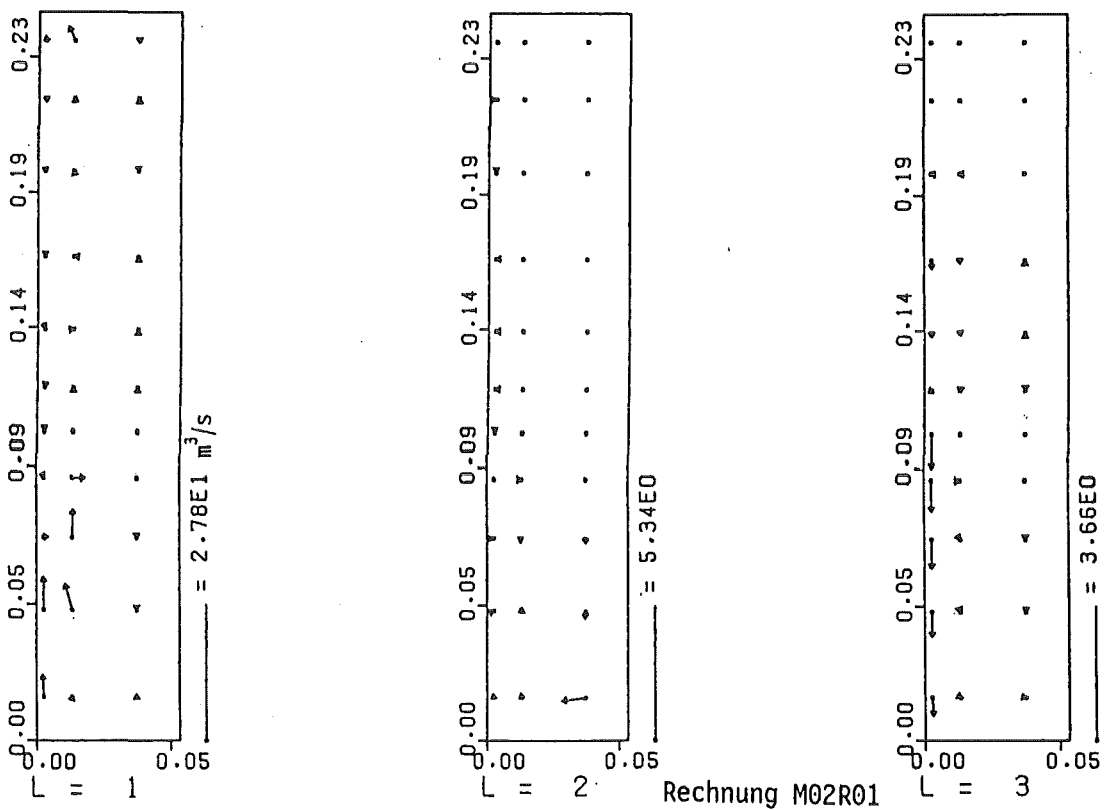


Abb. 15.6 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 1,817$  in der Geometrie der Abb. 11

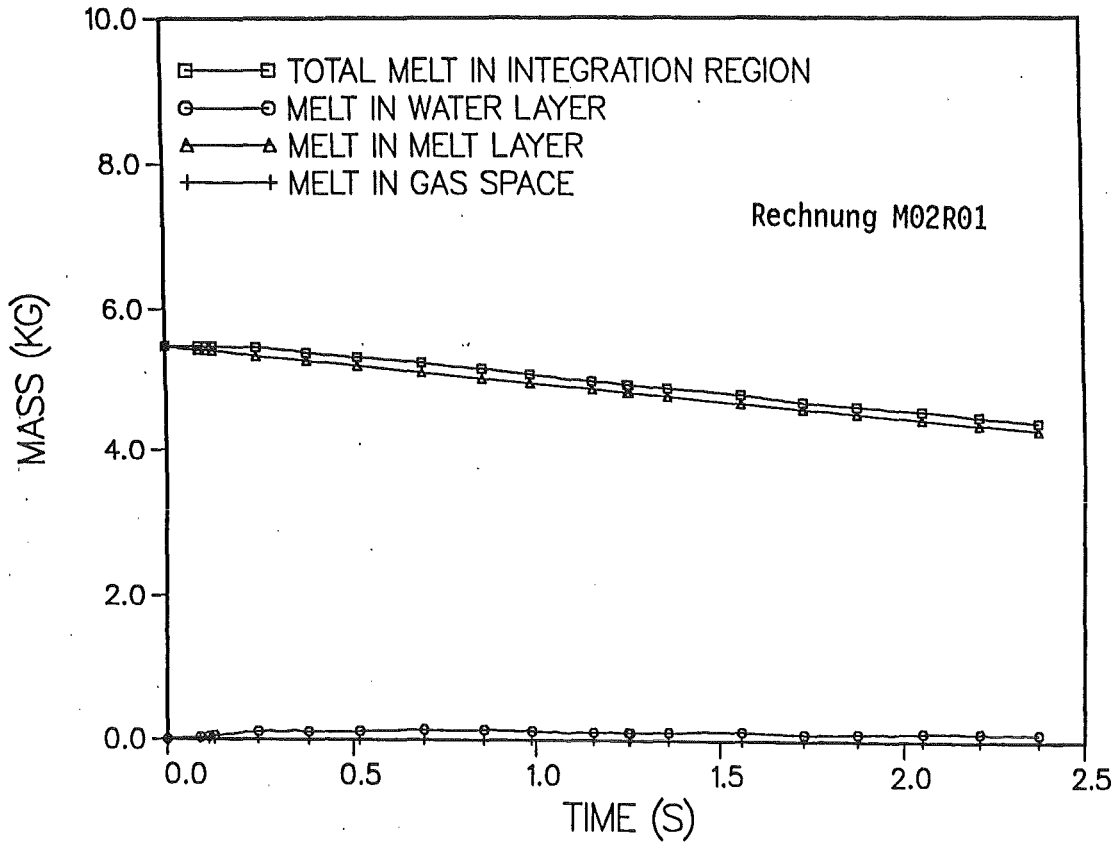


Abb. 16 Schmelzenmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

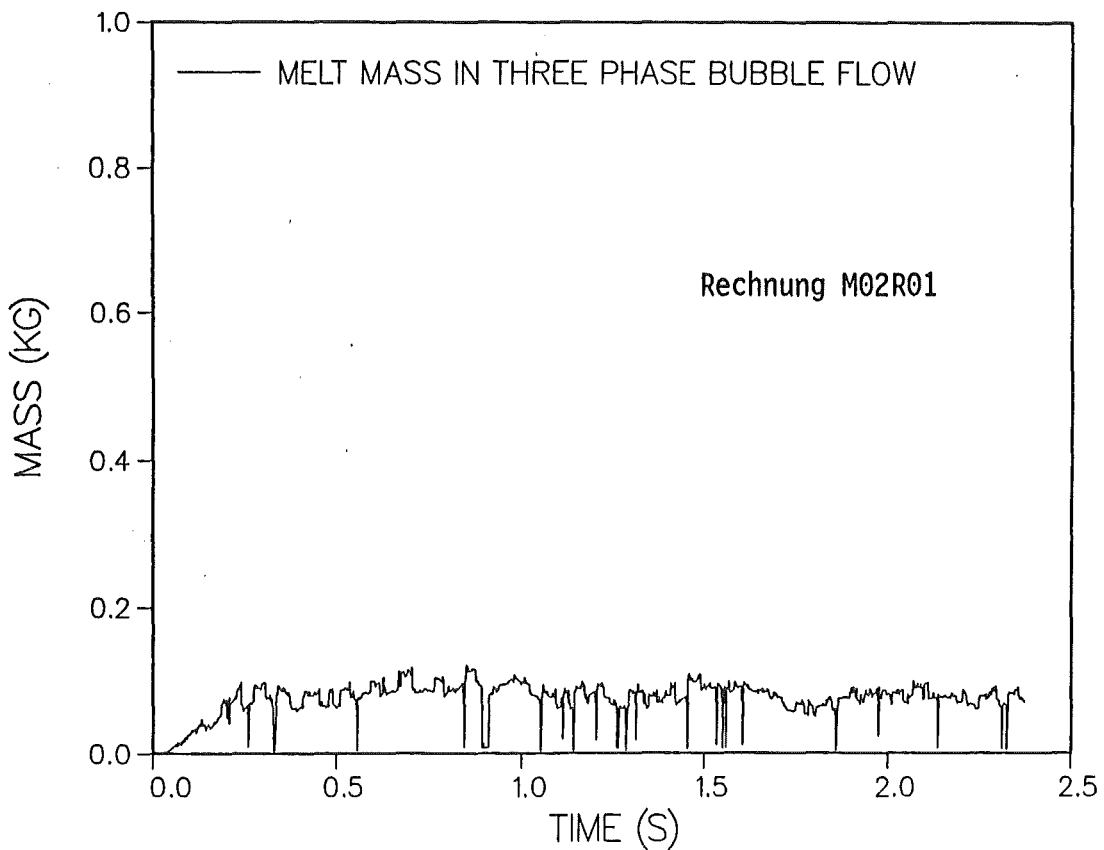


Abb. 17 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

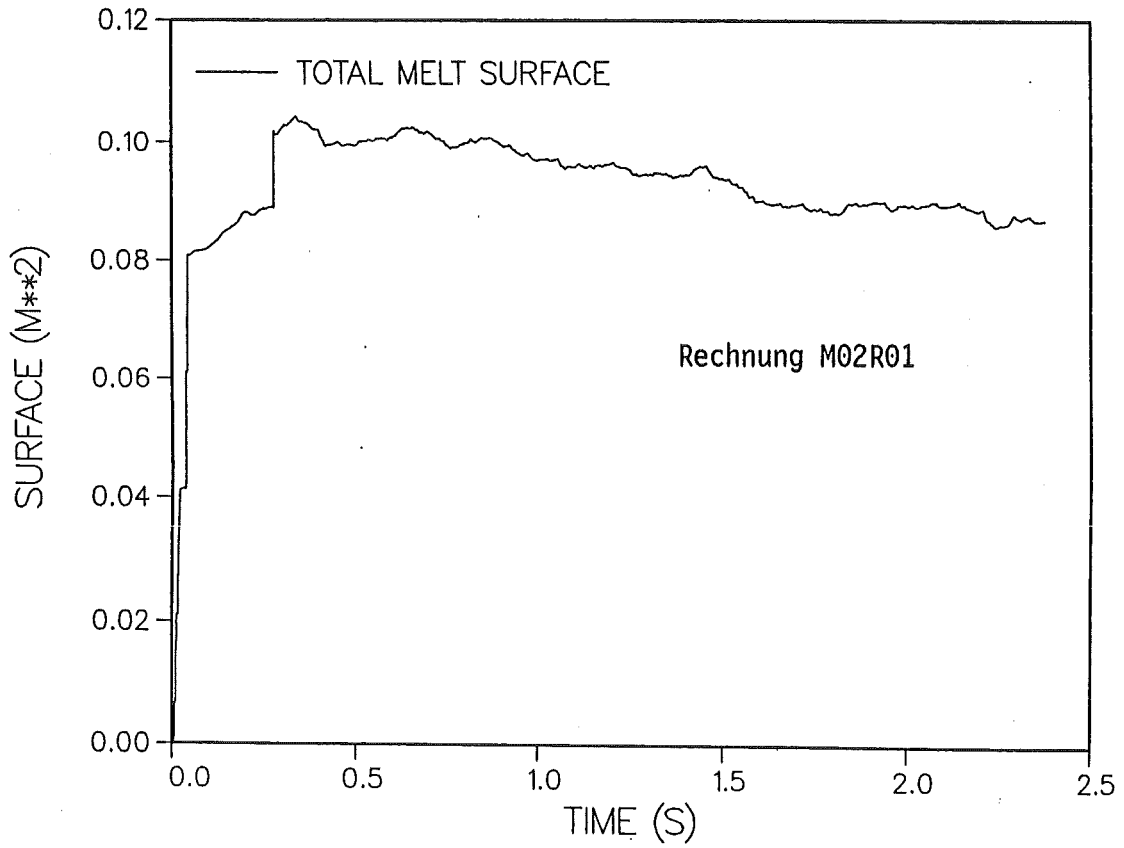


Abb. 18 Oberflächenvergrößerung der Schmelze

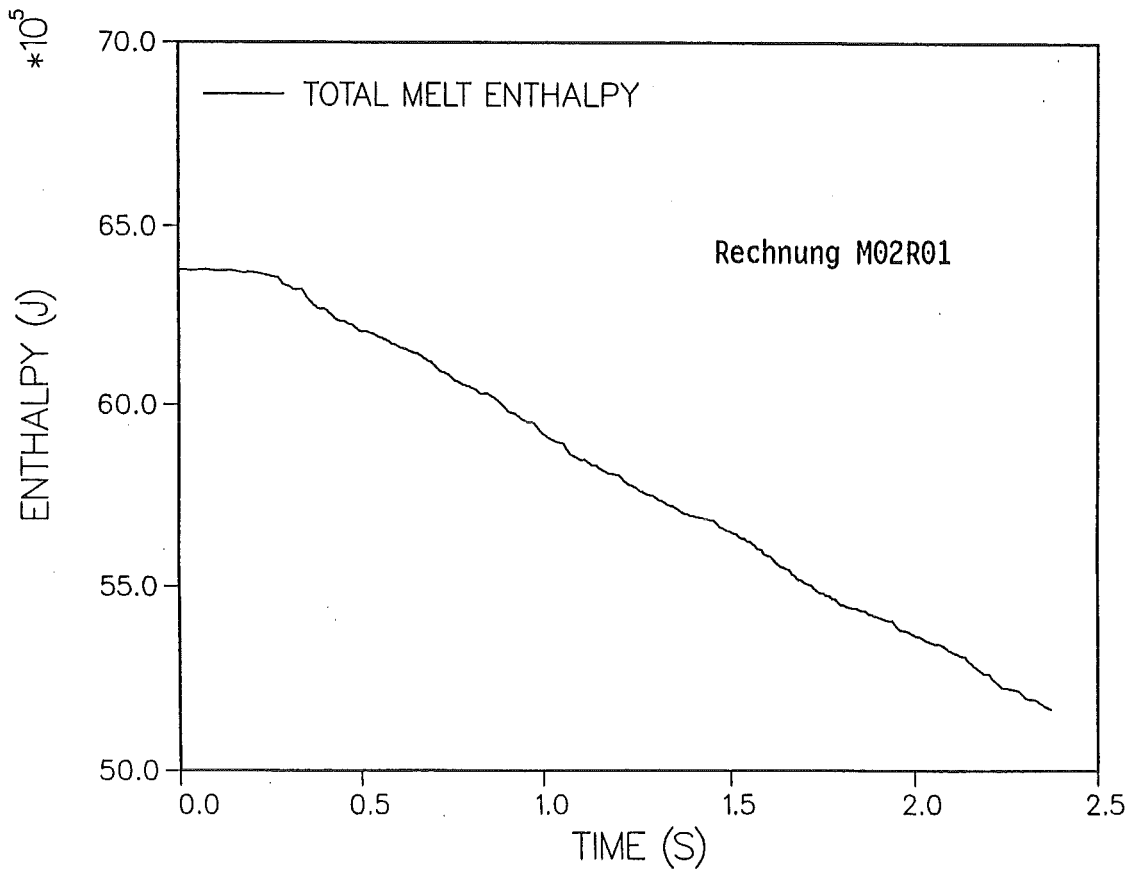


Abb. 19 Enthalpieverlauf der Schmelze



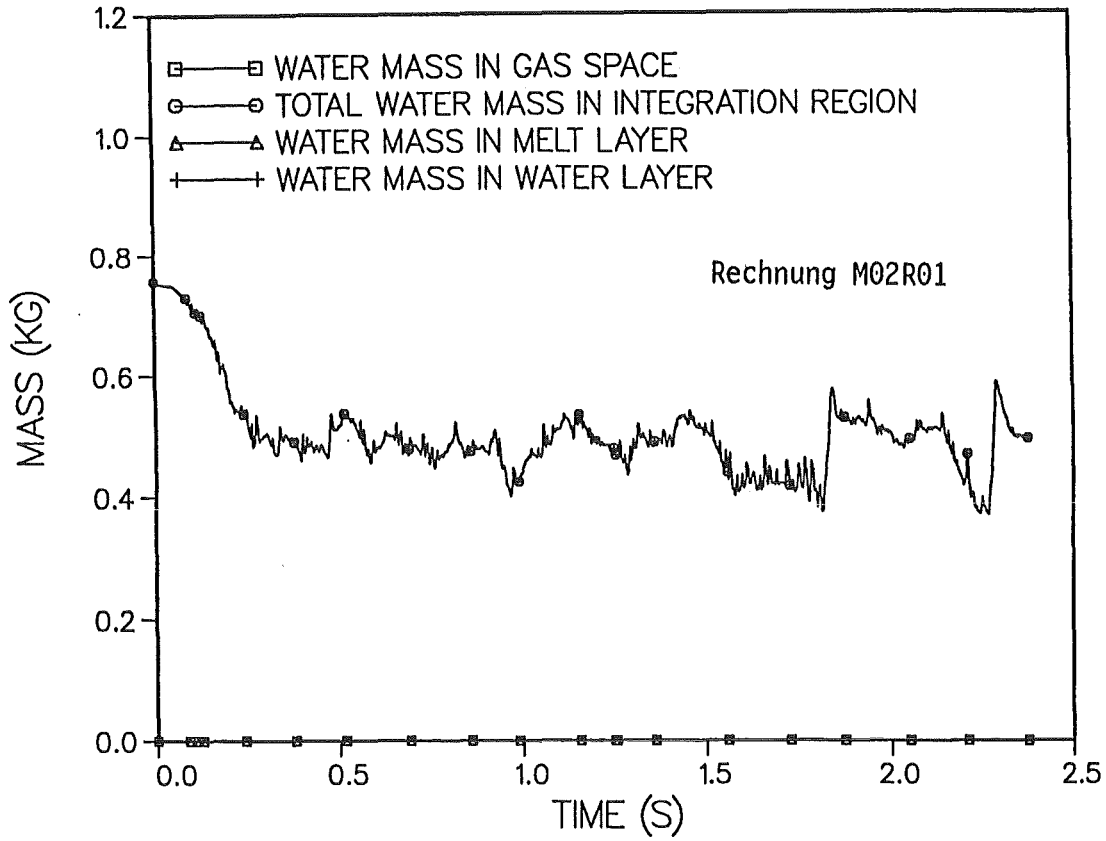


Abb. 20 Wassermenge in den verschiedenen Schichten

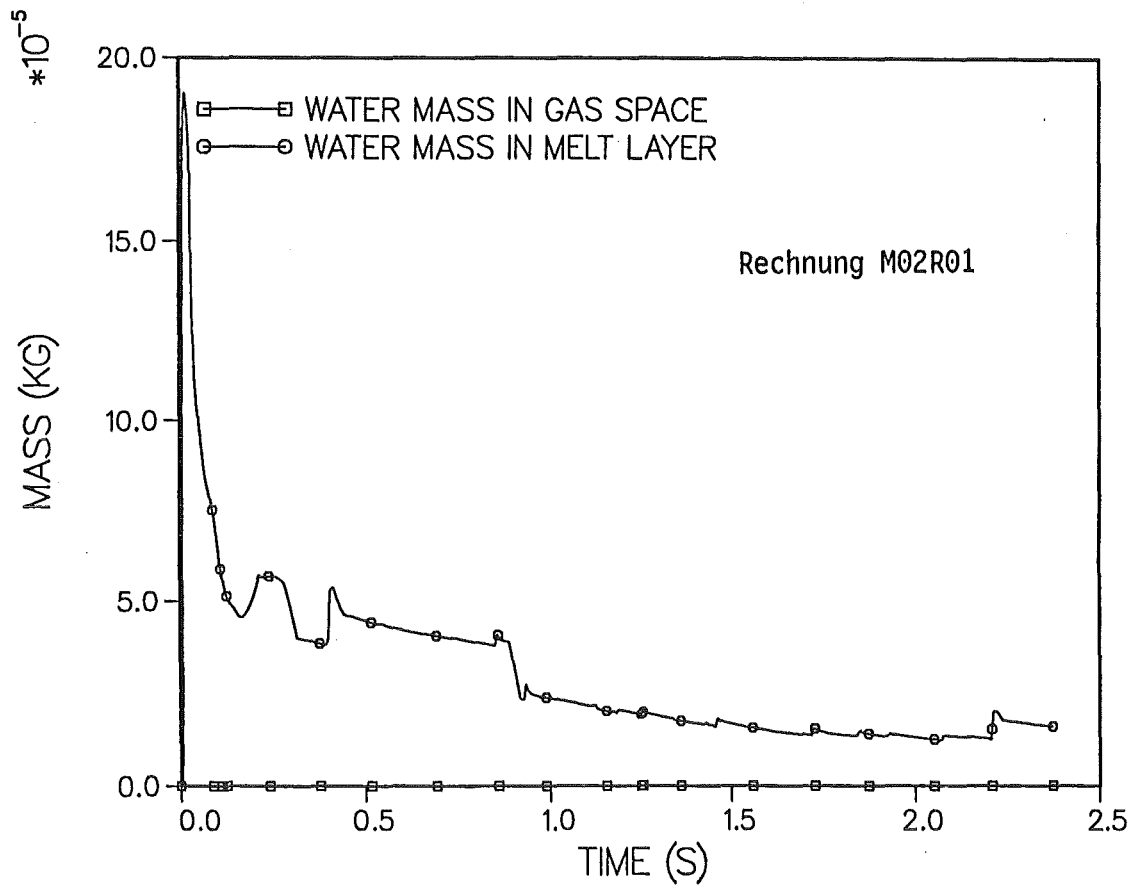


Abb. 21 Wassermenge in Luft- und Schmelzschicht

Rechnung M02R01

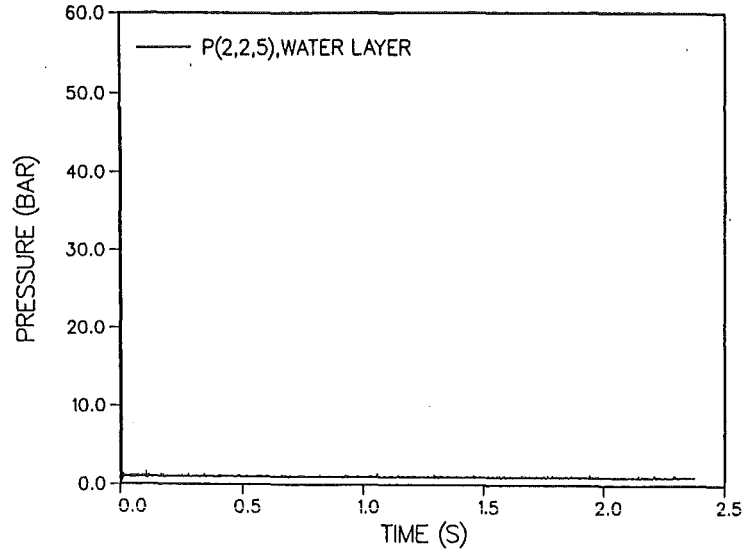
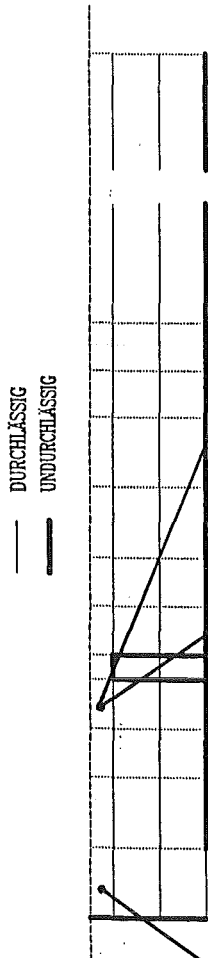


Abb. 22.1 Druckverlauf in der Zelle (2,2,5) im Wasserbehälter

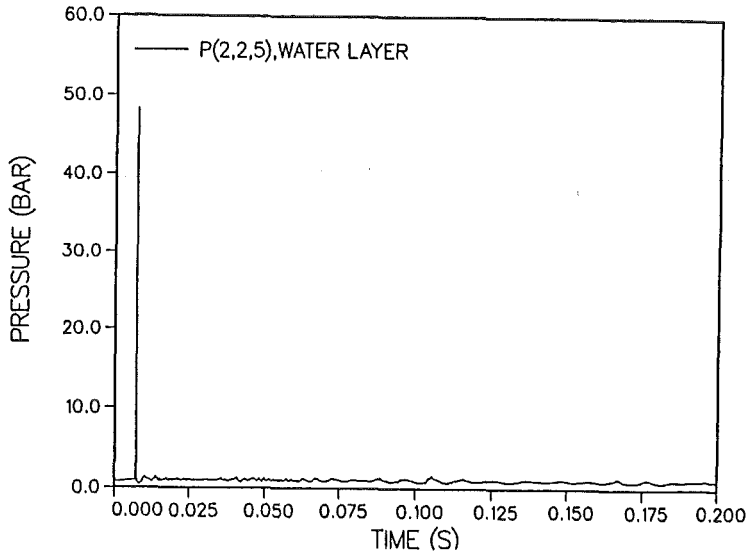


Abb. 22.2 Druckverlauf in der Zelle (2,2,5) im Wasserbehälter

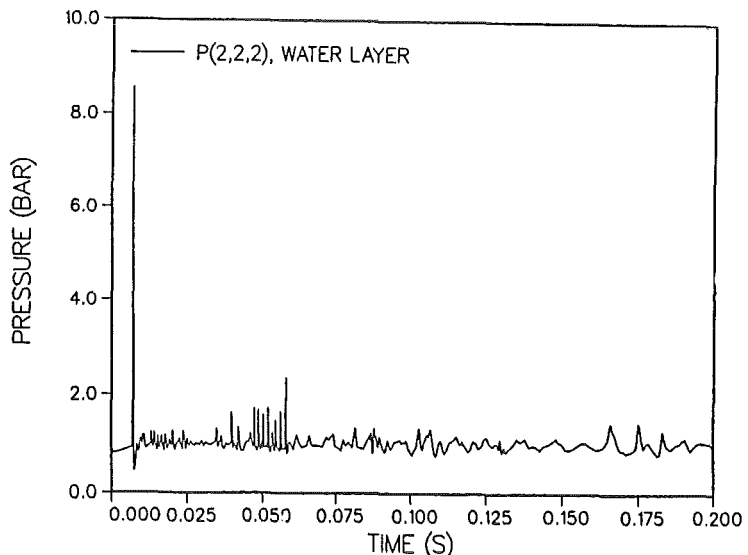


Abb. 22.3 Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M02R01

DURCHLÄSSIG  
UNDURCHLÄSSIG

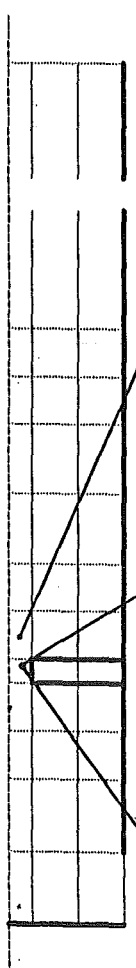
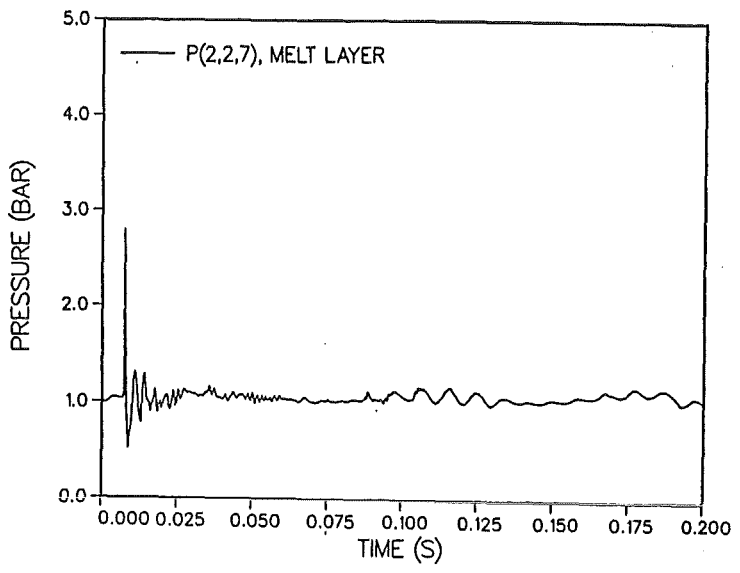
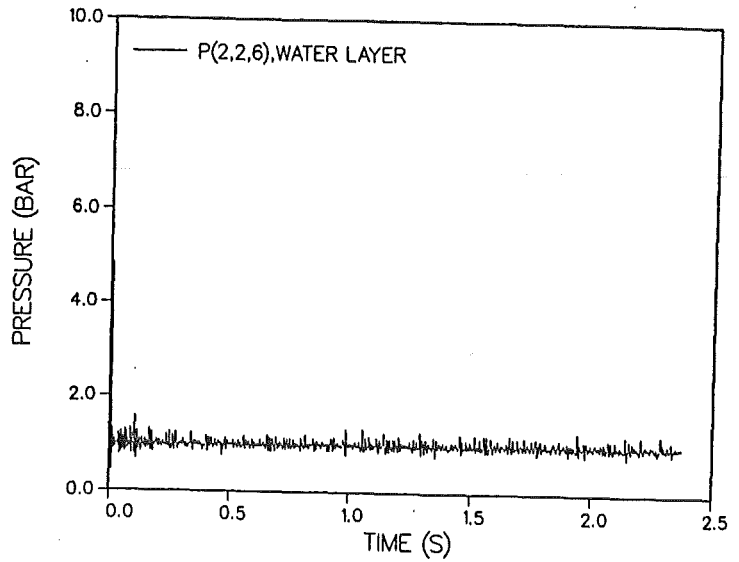


Abb. 22.4



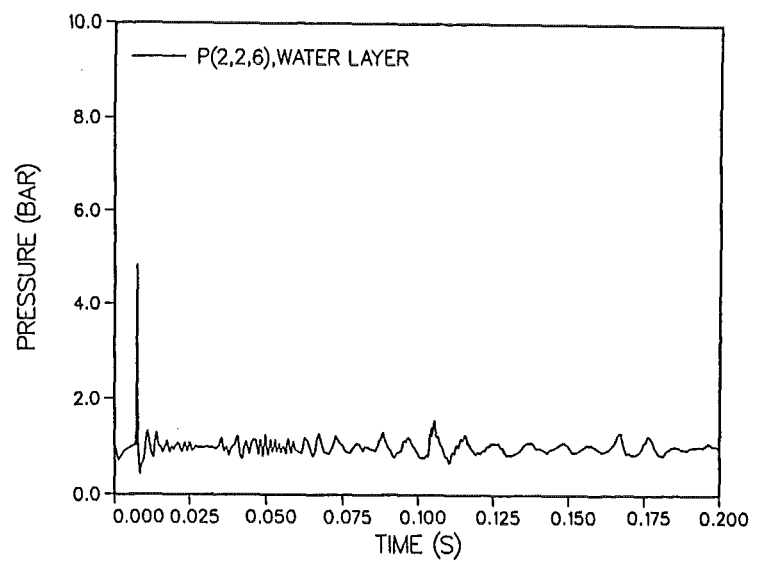
Druckverlauf in der Zelle (2,2,7) im Schmelzenbehälter

Abb. 22.5



Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

Abb. 22.6



Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

Rechnung M02R01

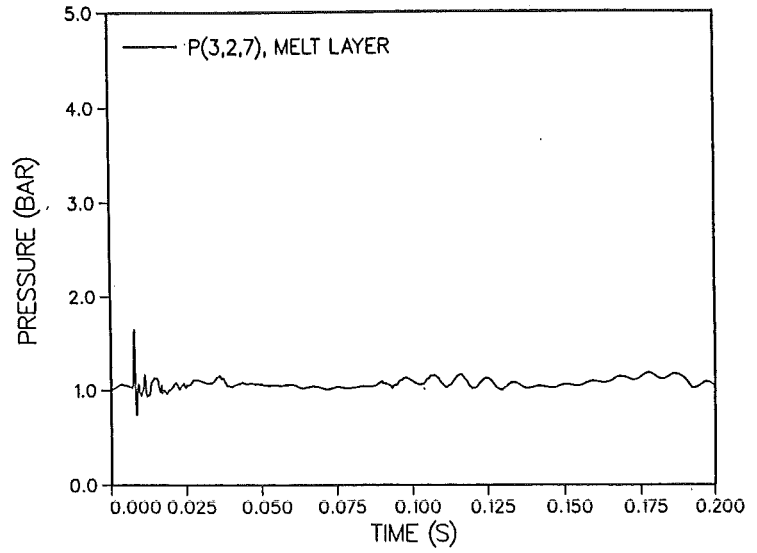
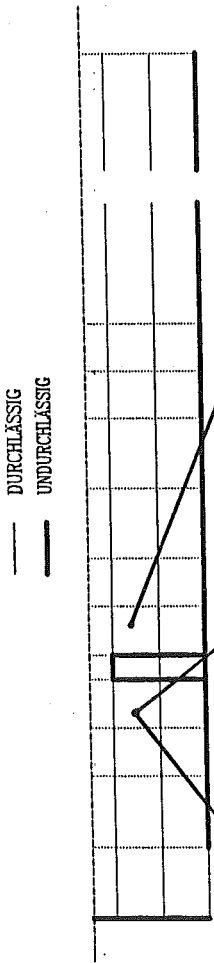


Abb. 22.7 Druckverlauf in der Zelle (3,2,7) im Schmelzenbehälter

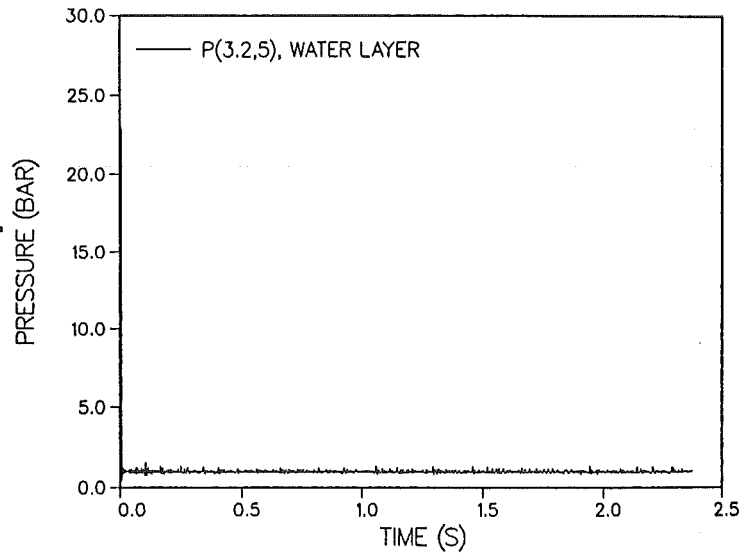


Abb. 22.8 Druckverlauf in der Zelle (3,2,5) im Wasserbehälter

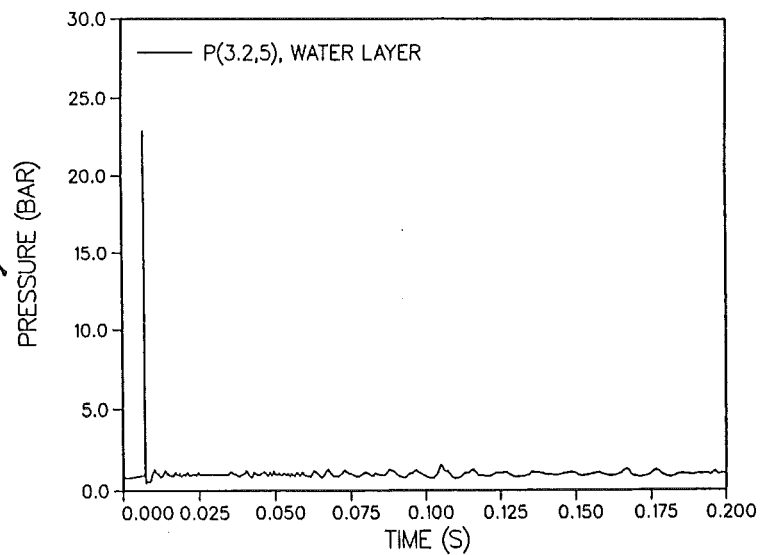


Abb. 22.9 Druckverlauf in der Zelle (3,2,5) im Wasserbehälter

Rechnung M02R01

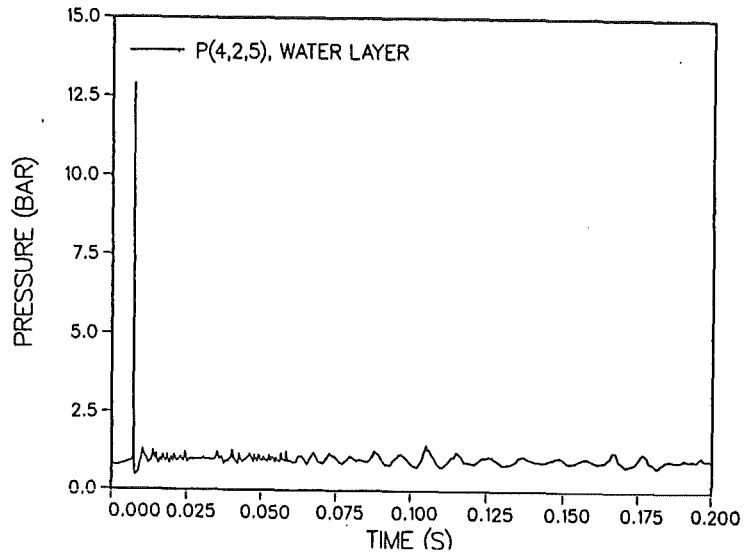
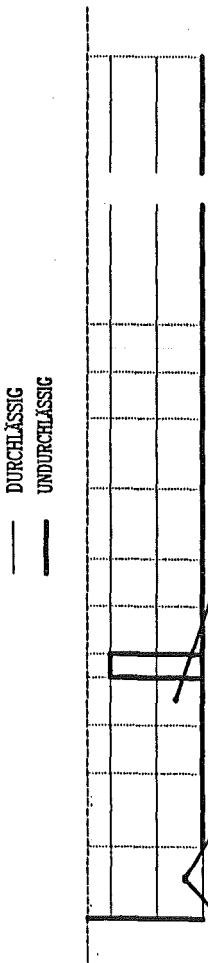


Abb. 22.10 Druckverlauf in der Zelle (4,2,5) im Wasserbehälter

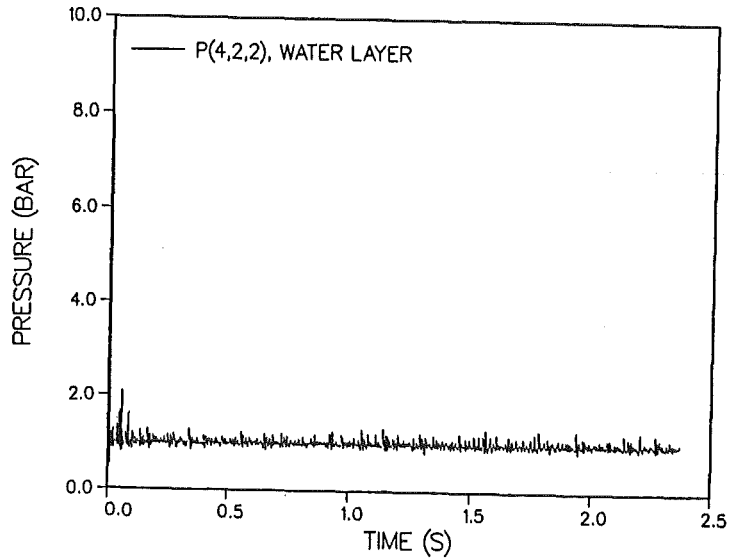


Abb. 22.11 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

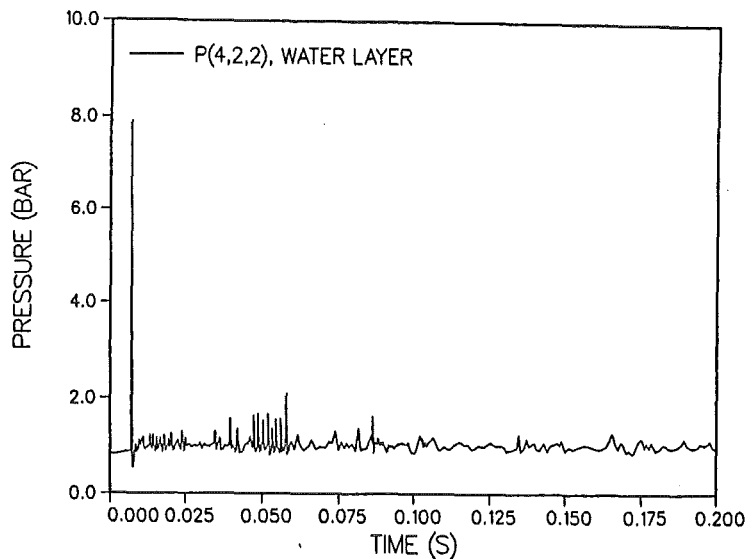


Abb. 22.12 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M02R01

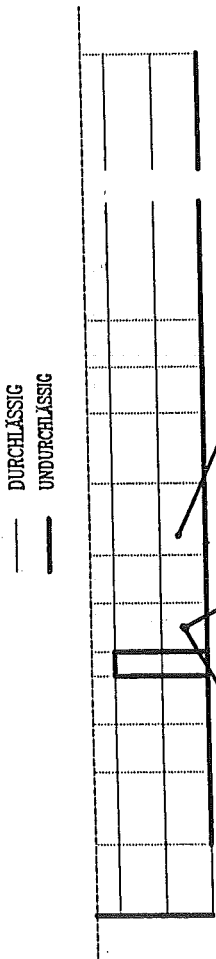


Abb. 22.13 Druckverlauf in der Zelle (4,2,9) im Schmelzenbehälter

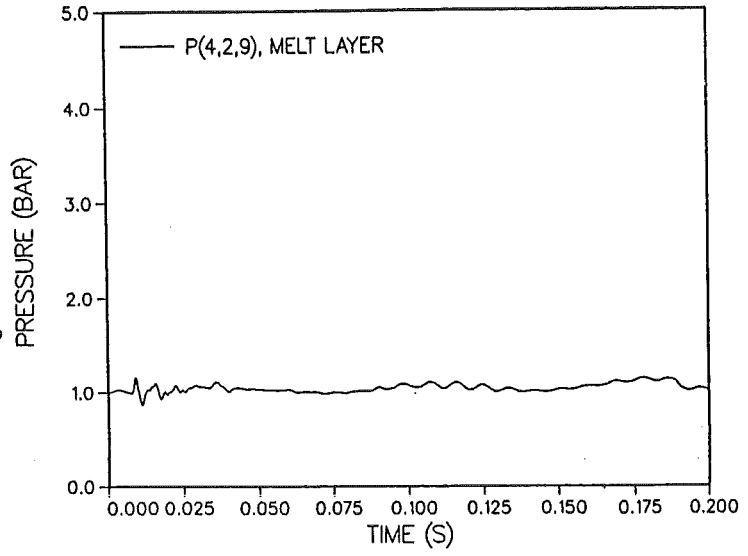


Abb. 22.14 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter

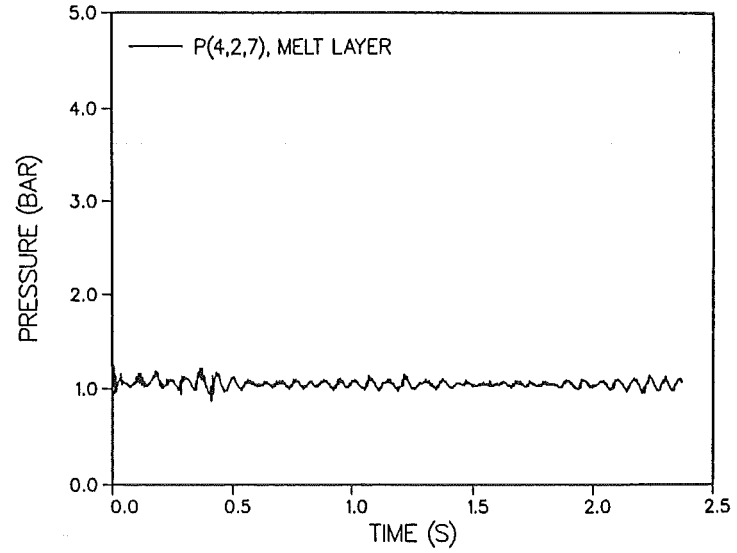
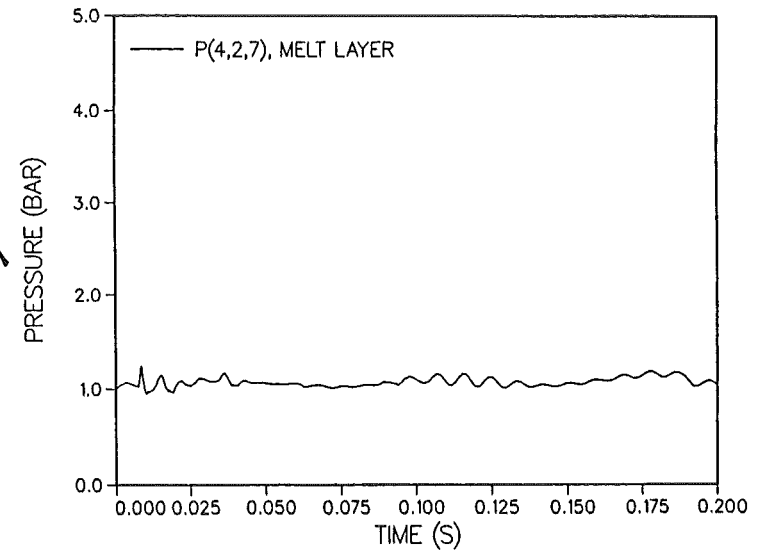


Abb. 22.15 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter



Rechnung M02R01

DURCHLÄSSIG  
—  
UNDURCHLÄSSIG  
—

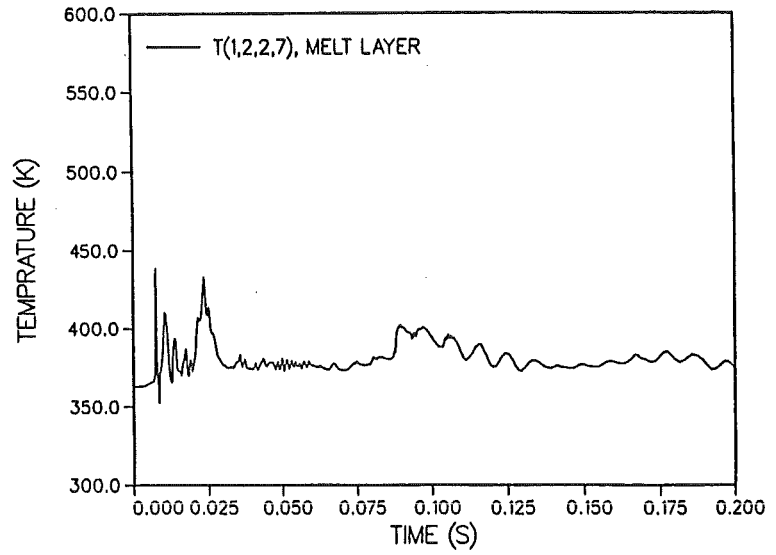
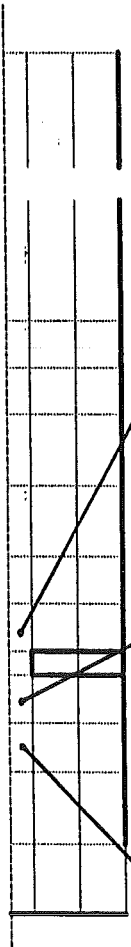


Abb. 23.1 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,7)

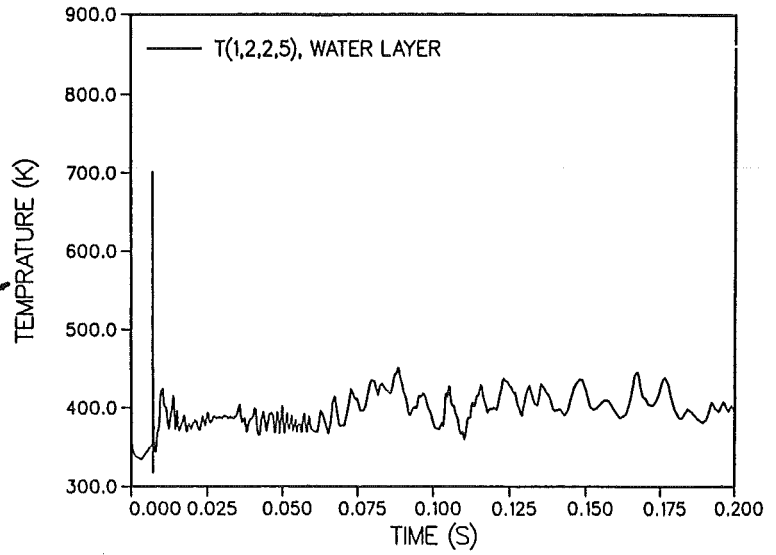


Abb. 23.2 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,5)

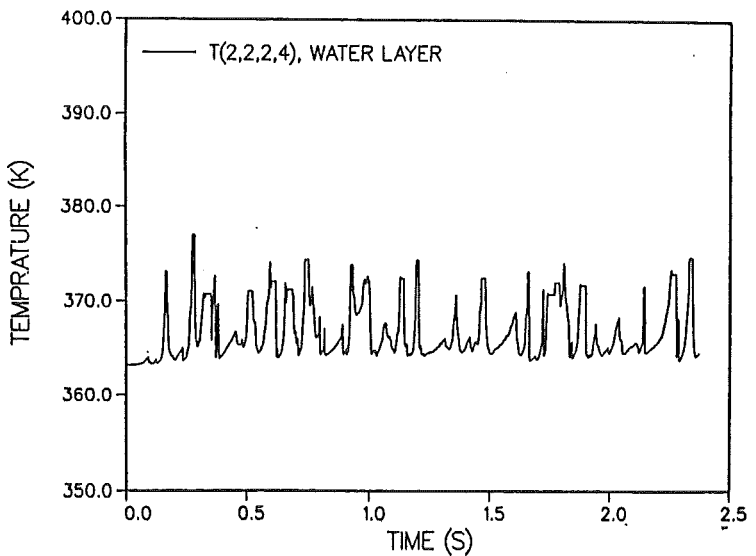


Abb. 23.3 Temperaturverlauf des Wassersin der Zelle (2,2,4)

Rechnung M02R01

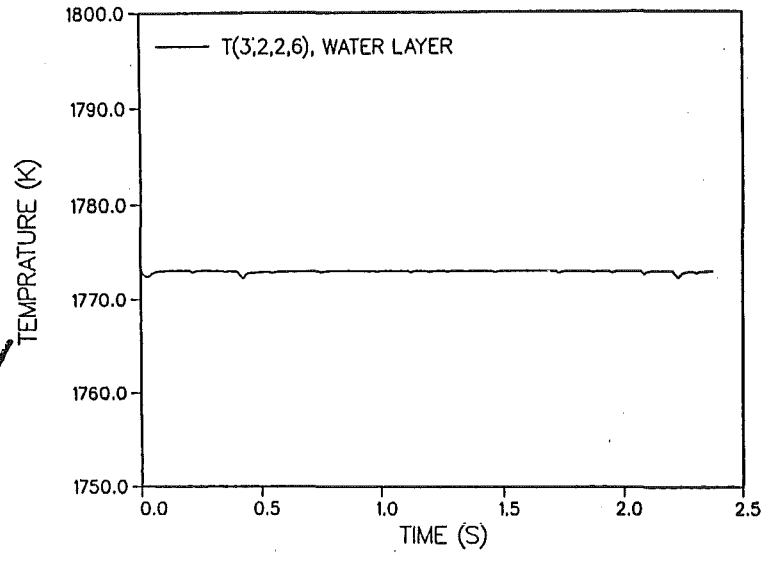
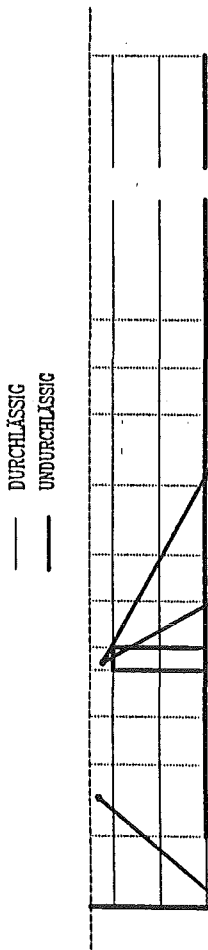


Abb. 23.4 Temperaturverlauf der Schmelze in der Zelle (2,2,6)

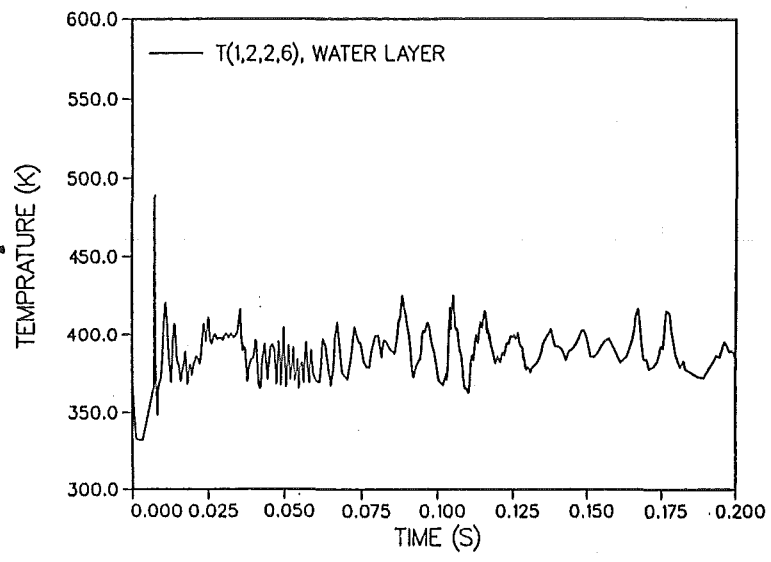


Abb. 23.5 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)

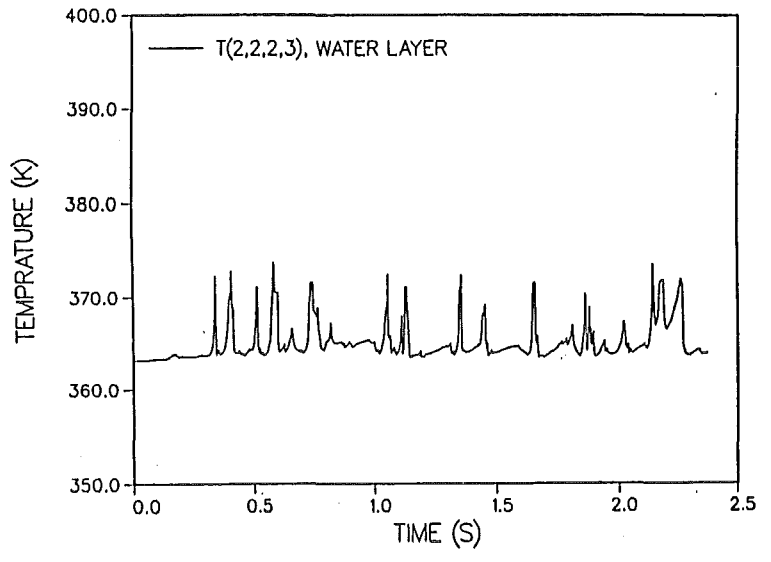
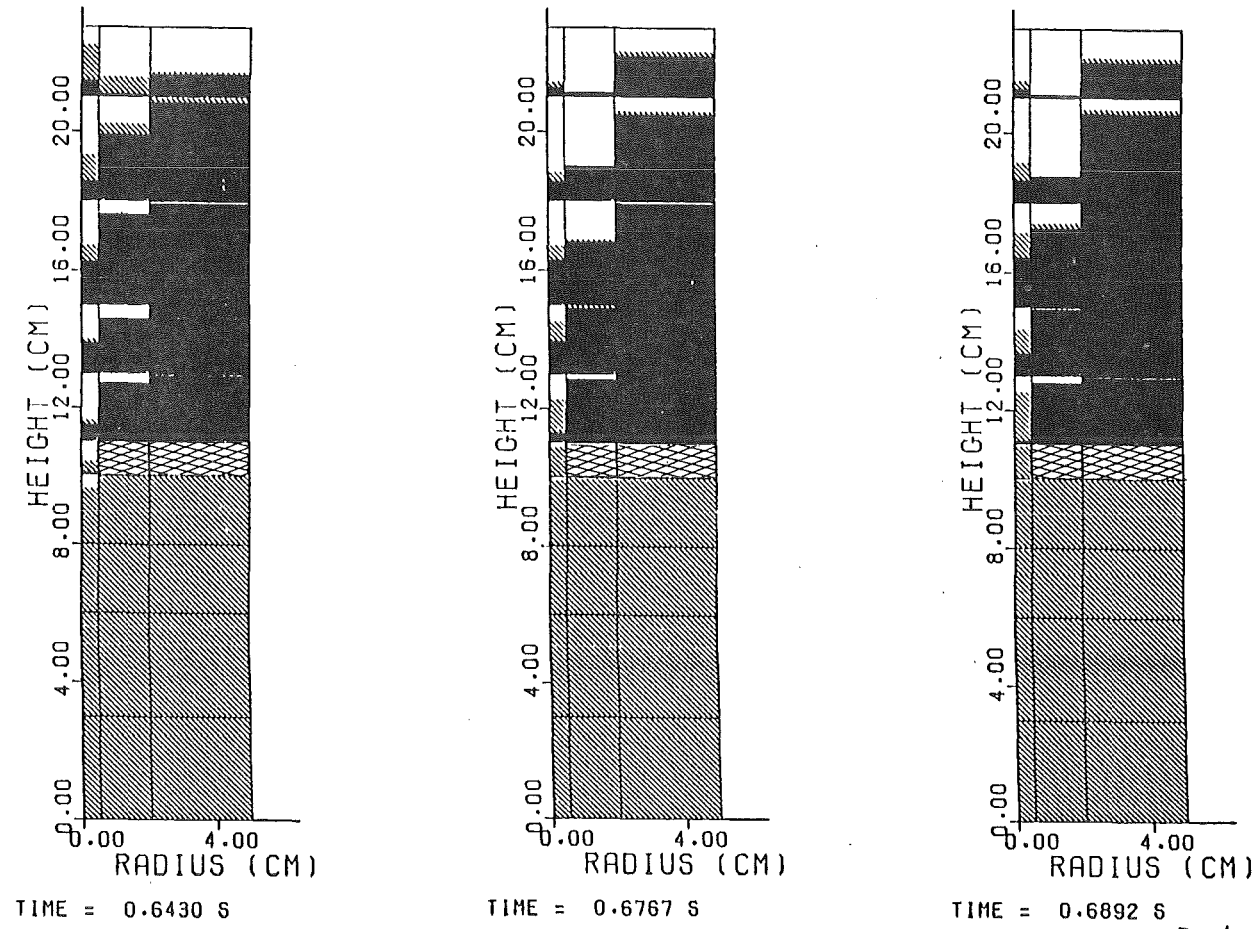
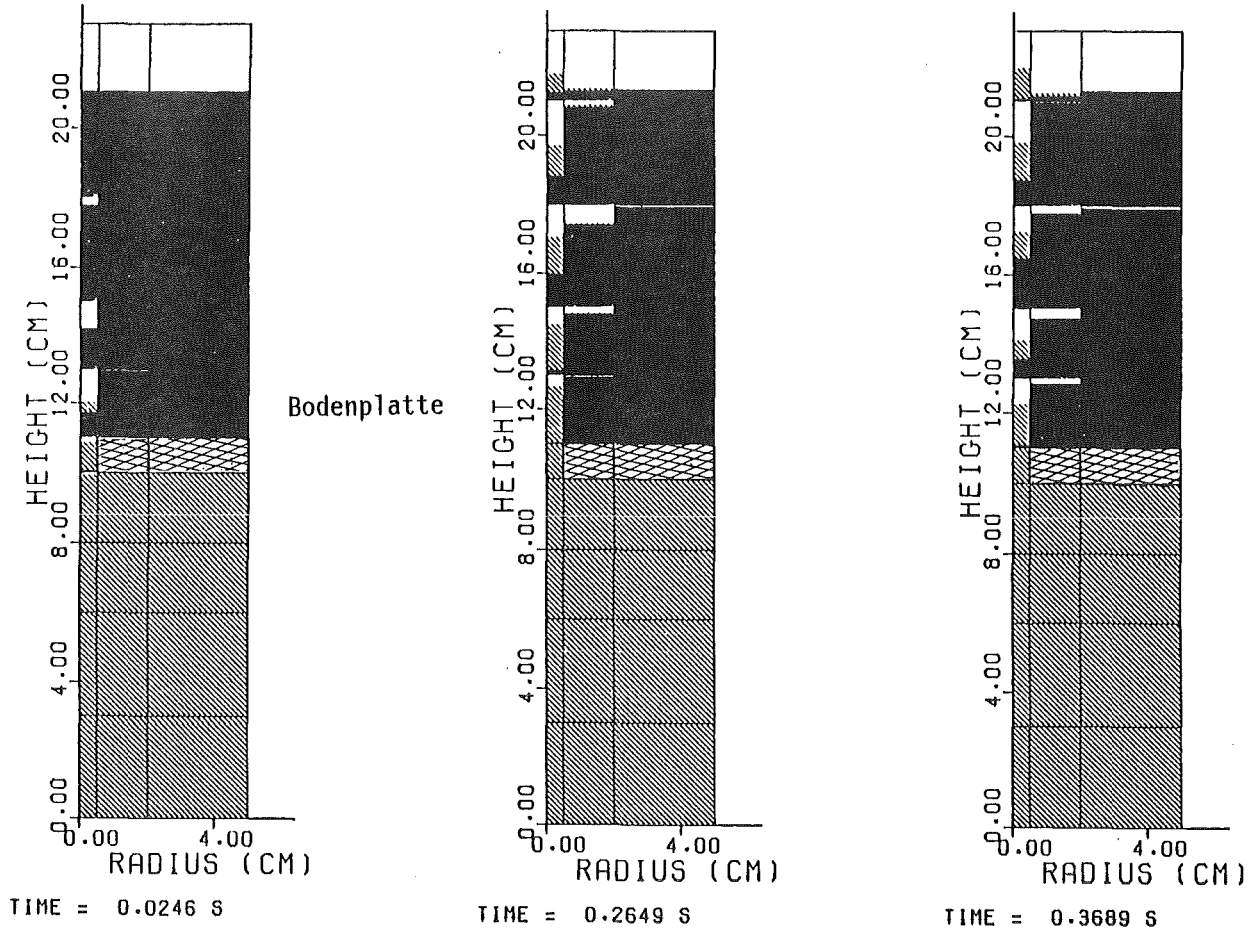


Abb. 23.6 Temperaturverlauf des Wassers in der Zelle (2,2,3)





Rechnung M02R02

Abb. 24 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 11

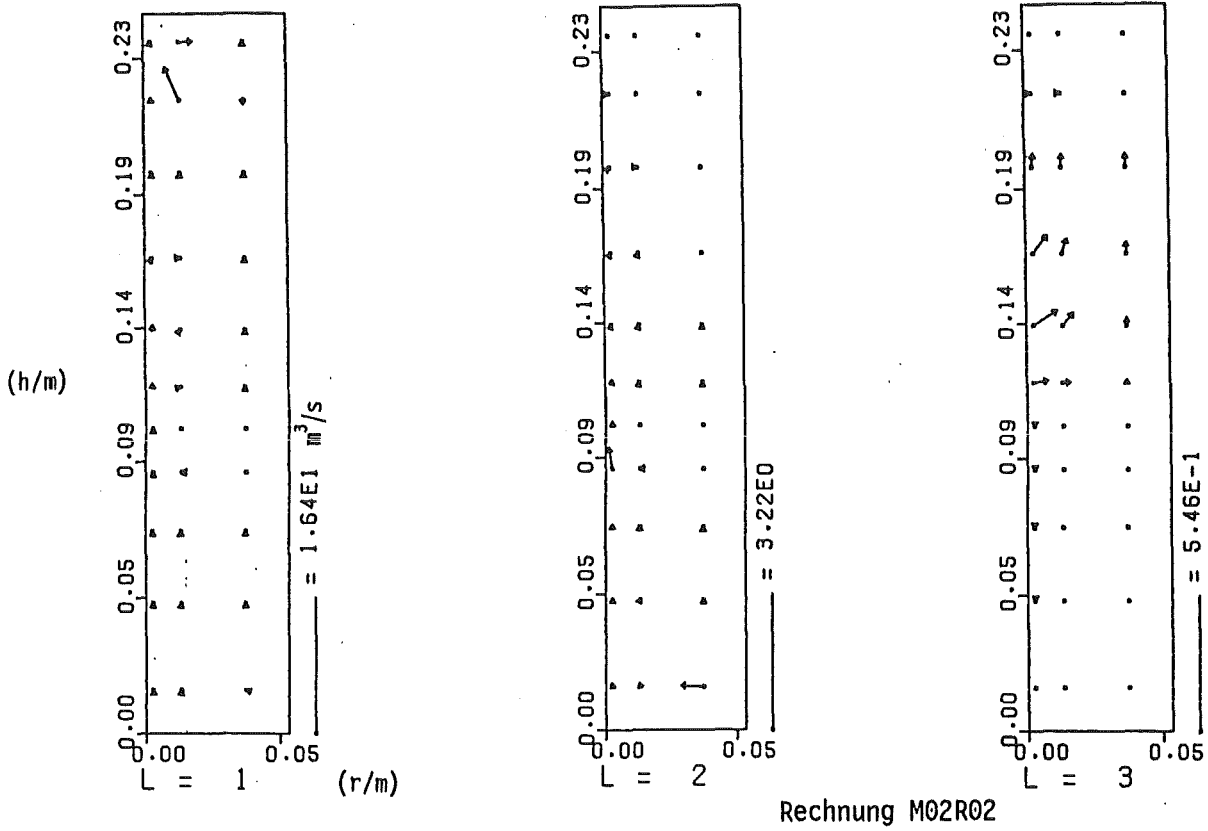


Abb. 25.1 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,025$  s in der Geometrie der Abb. 11

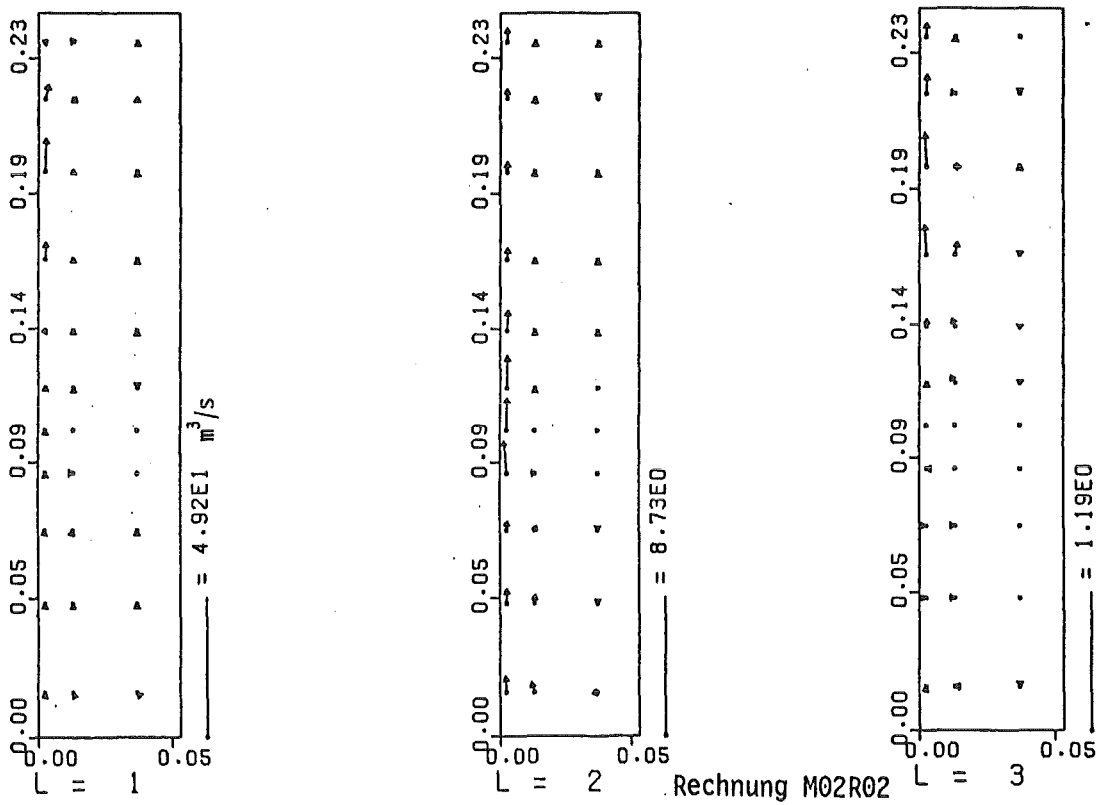


Abb. 25.2 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,265$  s in der Geometrie der Abb. 11

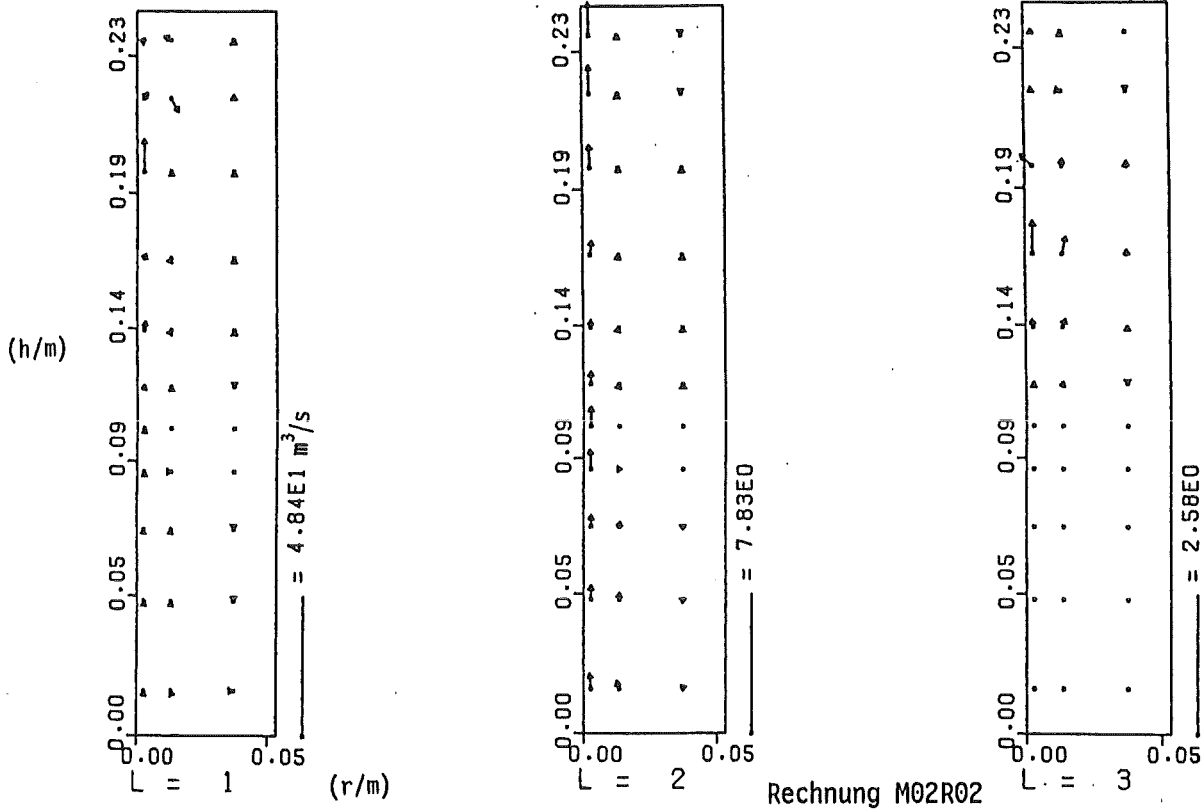


Abb. 25.3 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,369$  s in der Geometrie der Abb. 11

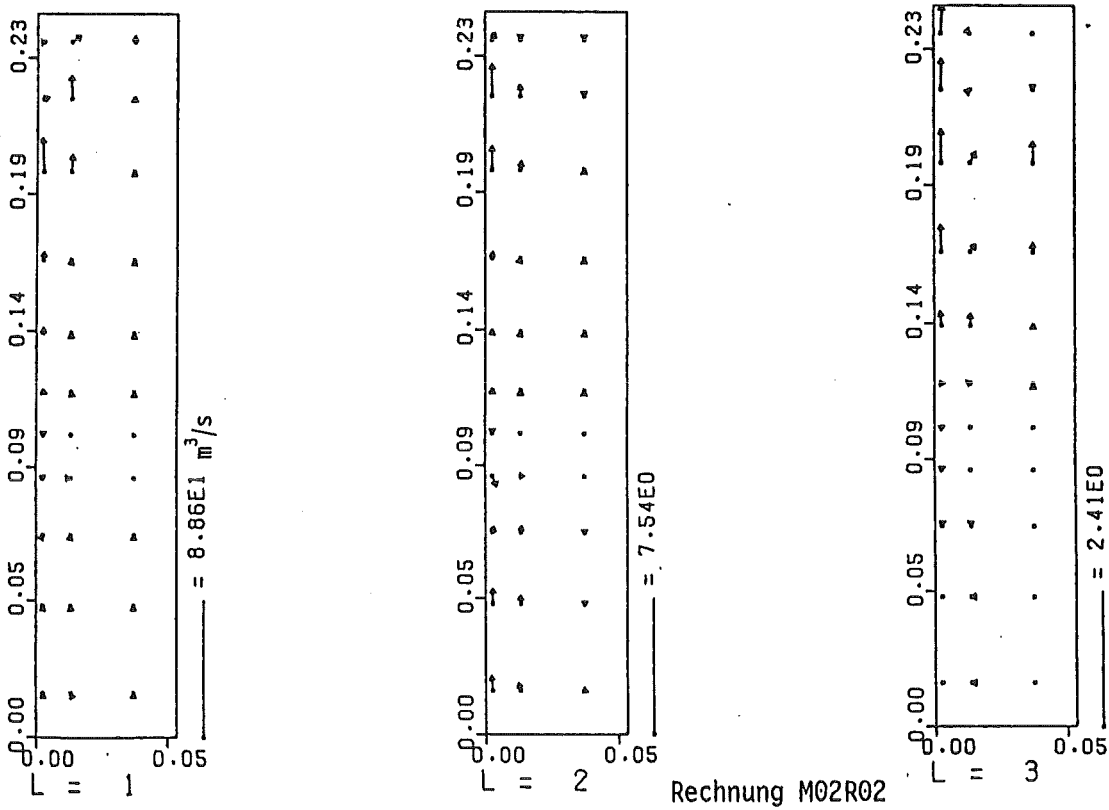


Abb. 25.4 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,643$  s in der Geometrie der Abb. 11

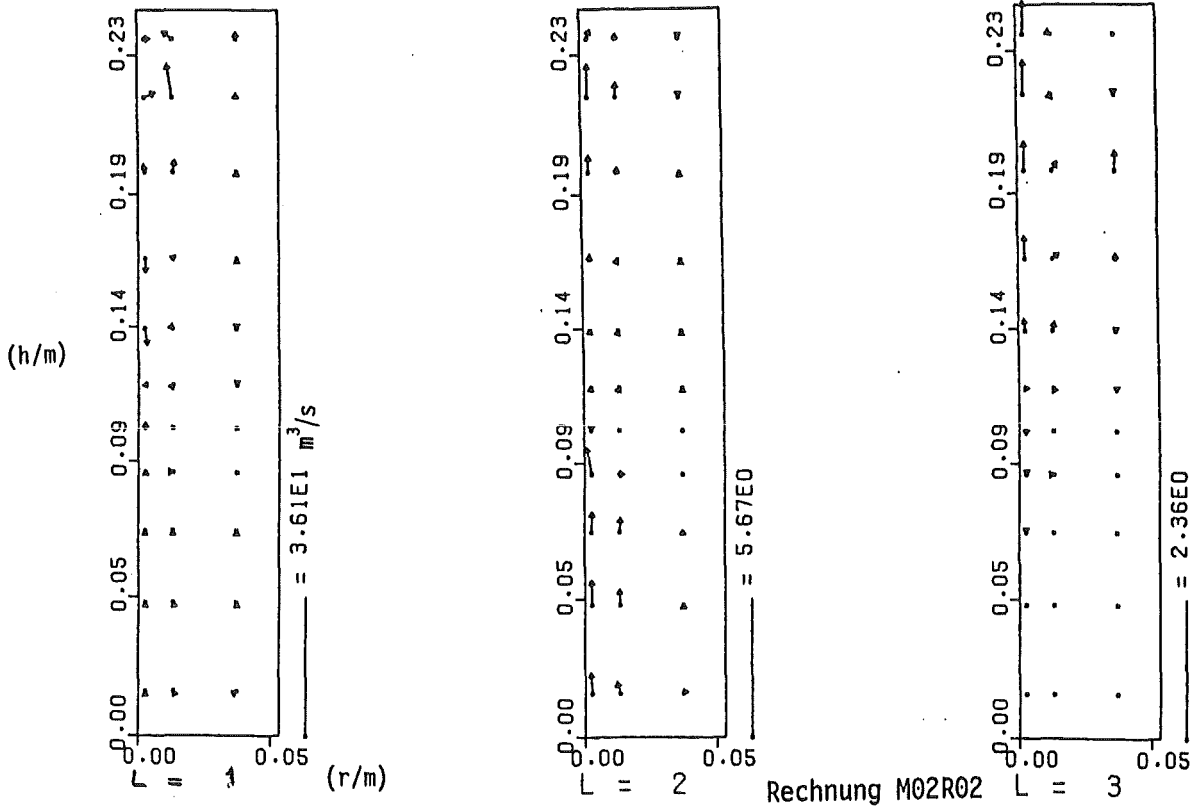


Abb. 25.5 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 10,647$  s in der Geometrie der Abb. 11

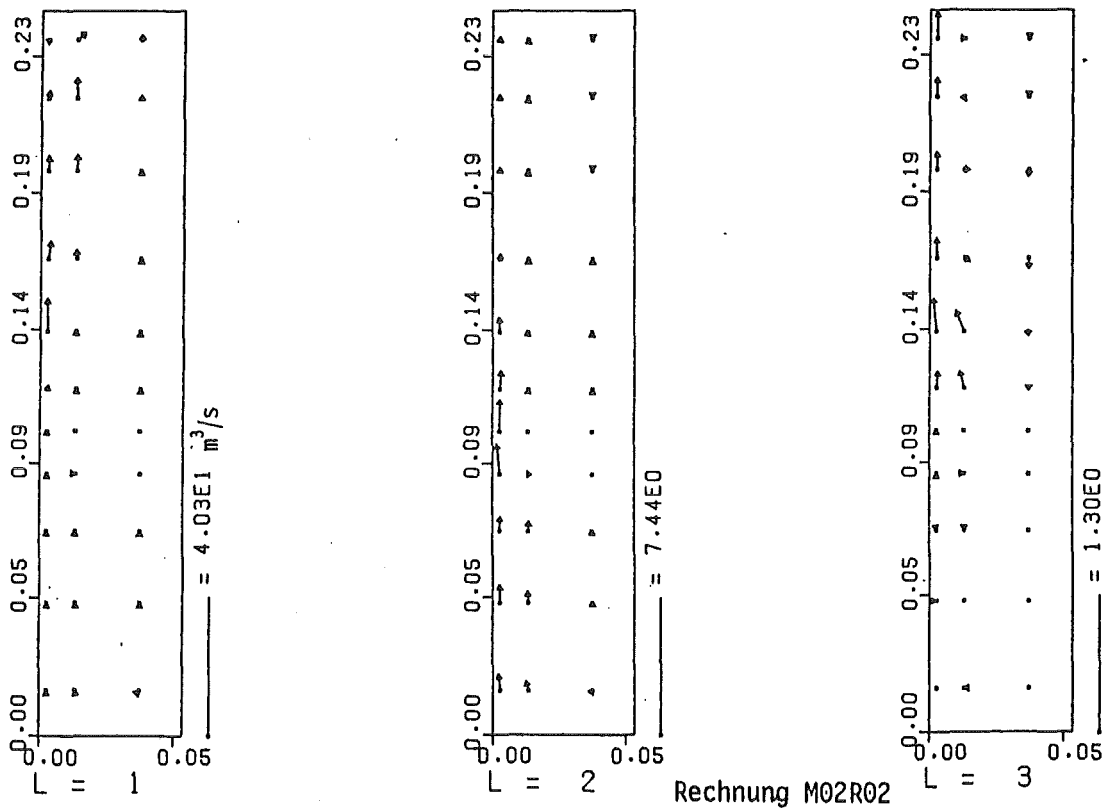


Abb. 25.6 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,677$  s in der Geometrie der Abb. 11

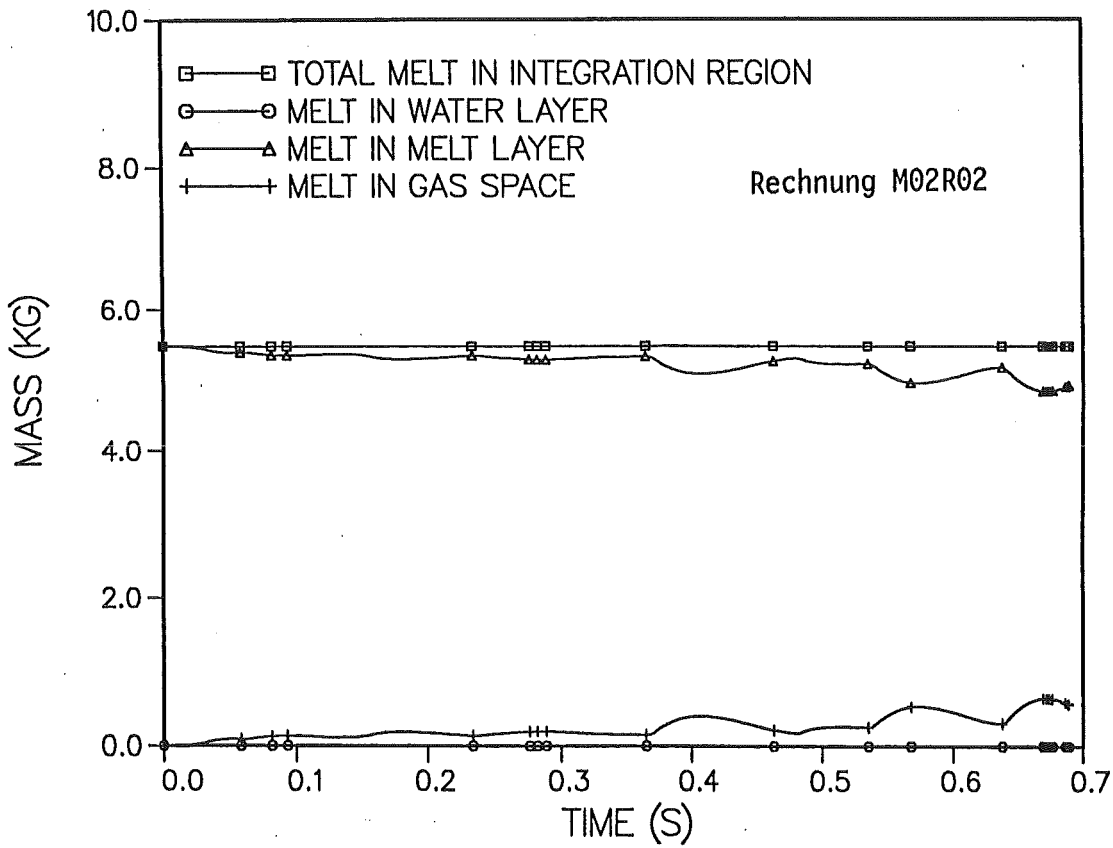


Abb. 26 Wassermenge in den verschiedenen Schichten

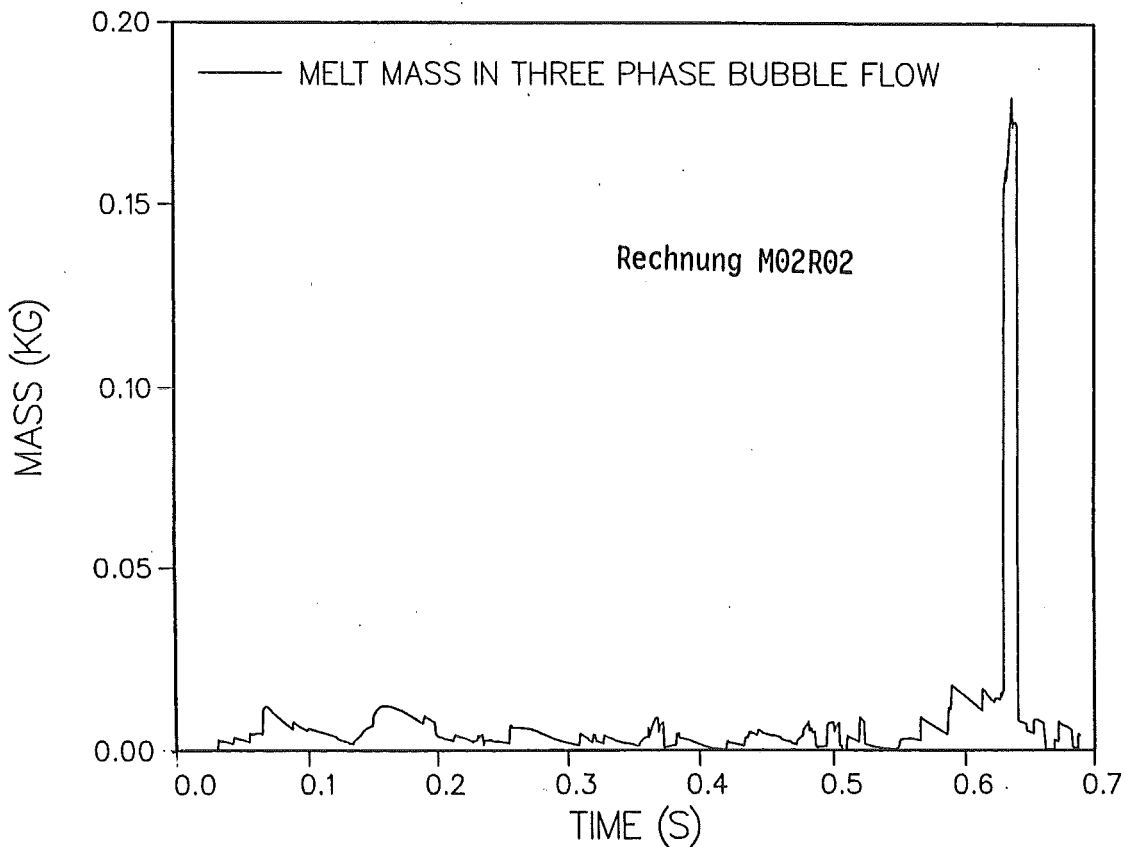


Abb. 27 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

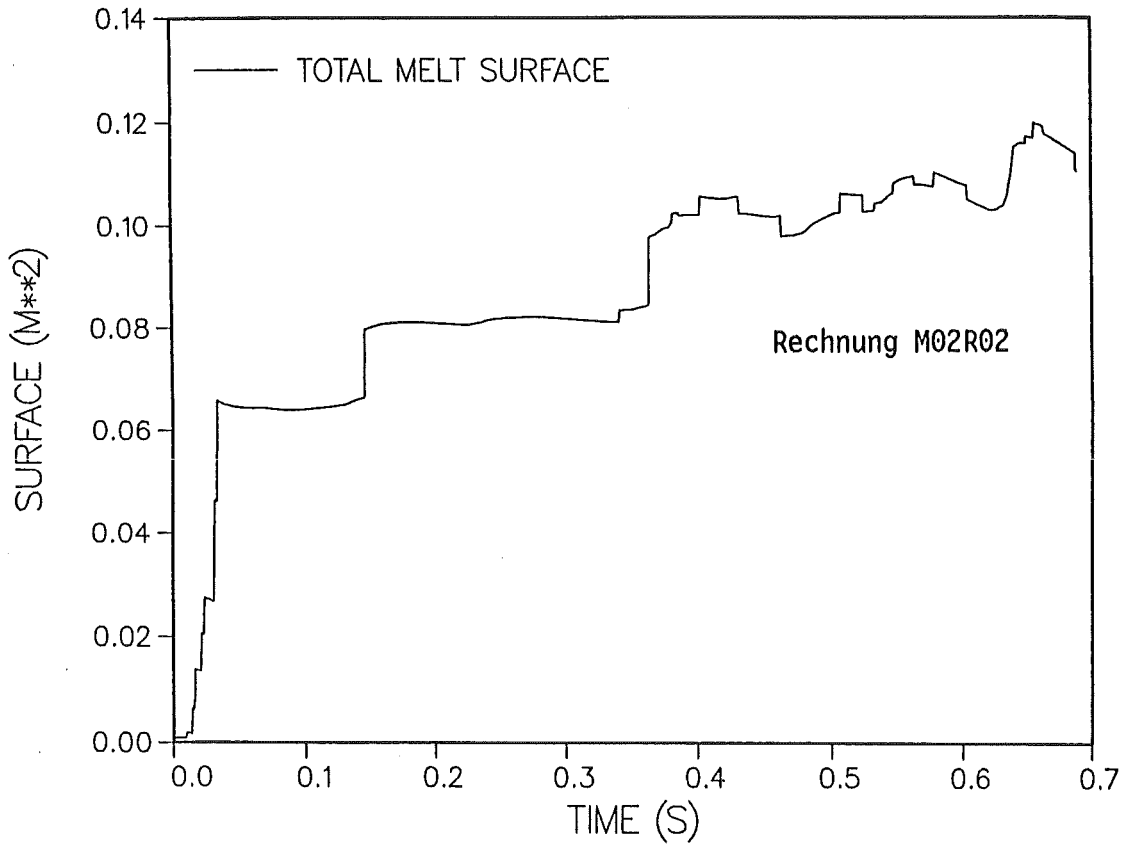


Abb. 28 Oberflächenvergrößerung der Schmelze

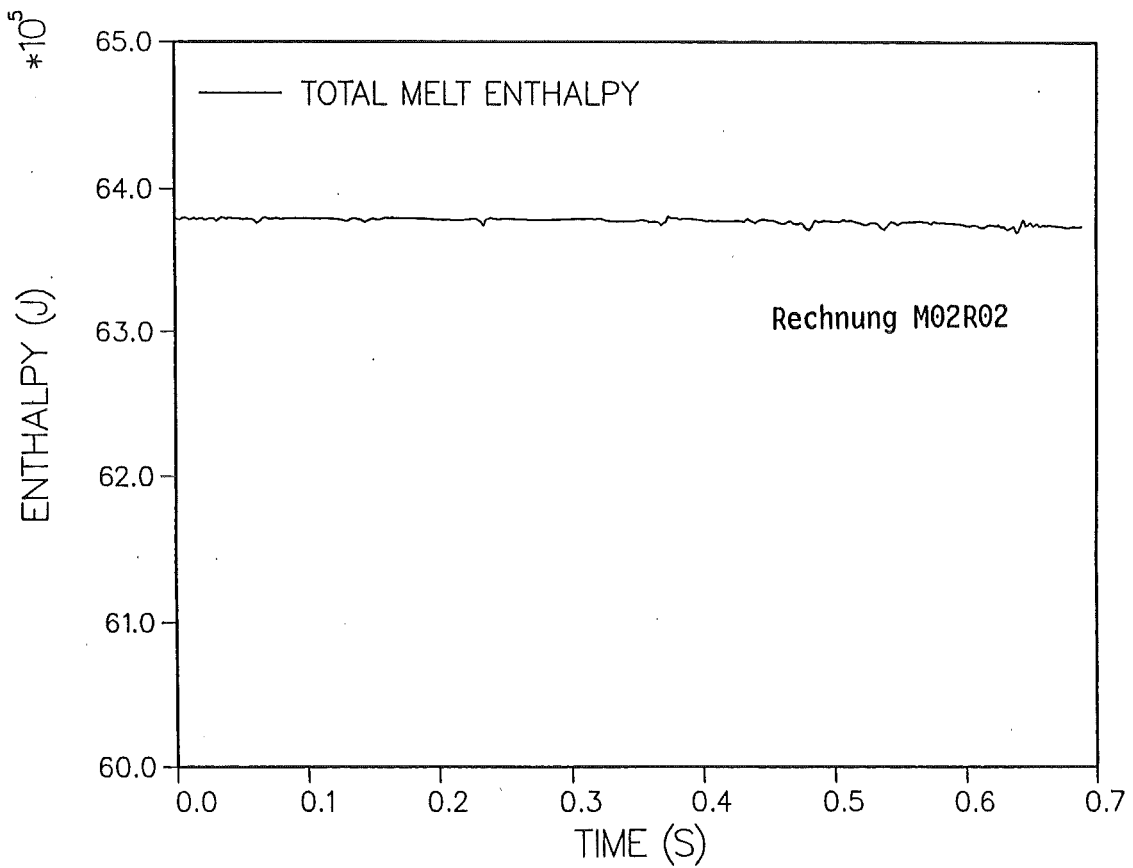


Abb. 29 Enthalpieverlauf der Schmelze

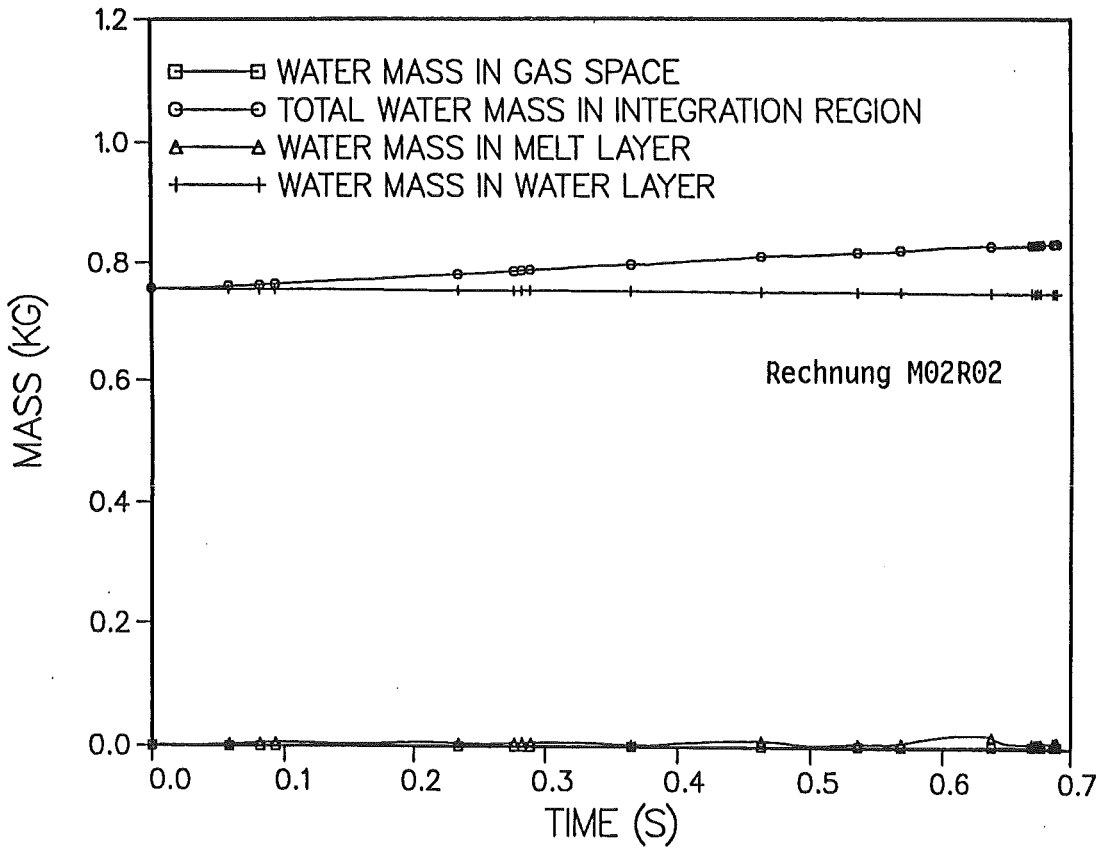


Abb. 30 Wassermenge in den verschiedenen Schichten

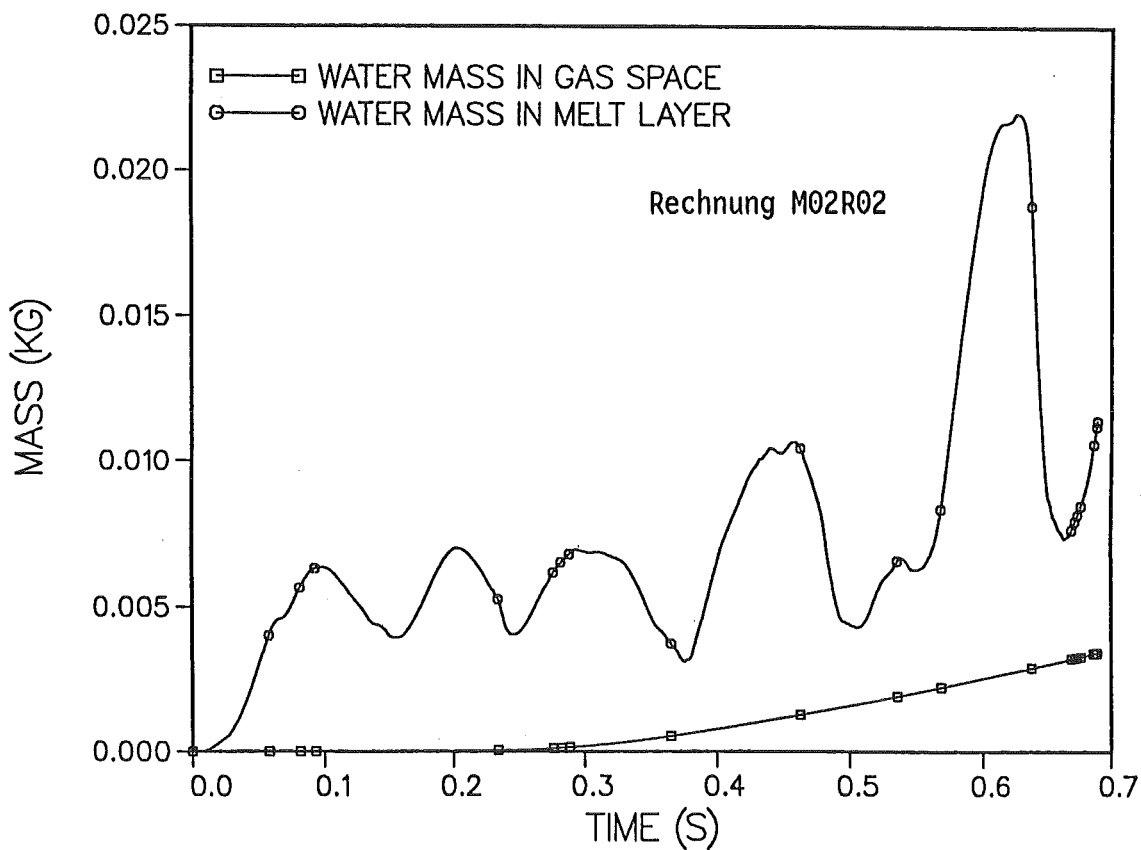


Abb. 31 Wassermenge in Luft- und Schmelzschicht

Rechnung M02R02

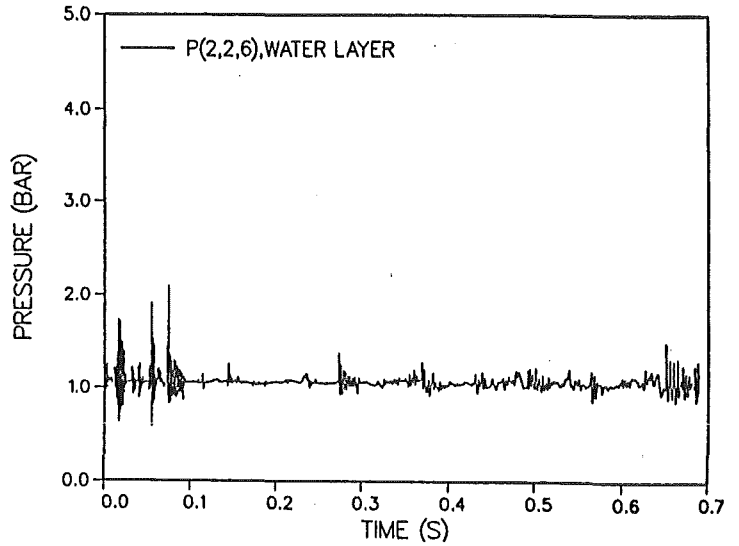
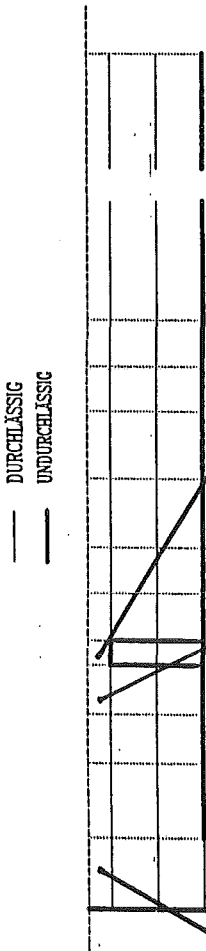


Abb. 32.1

Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

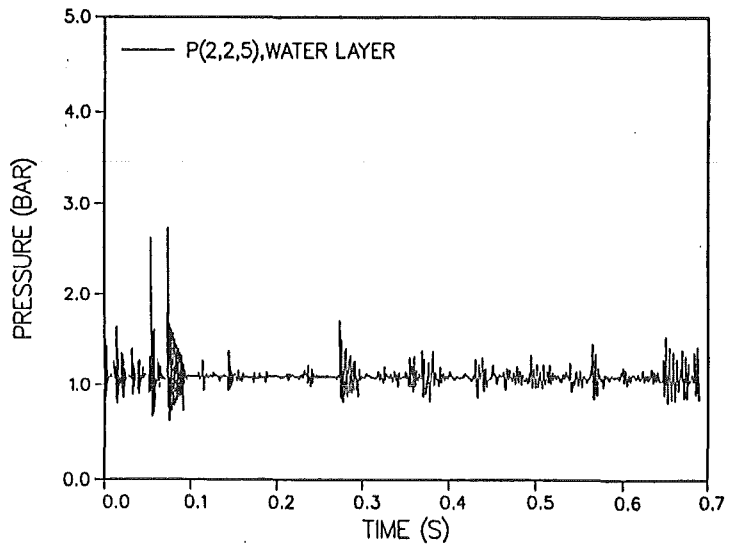


Abb. 32.2

Druckverlauf in der Zelle (2,2,5) im Wasserbehälter

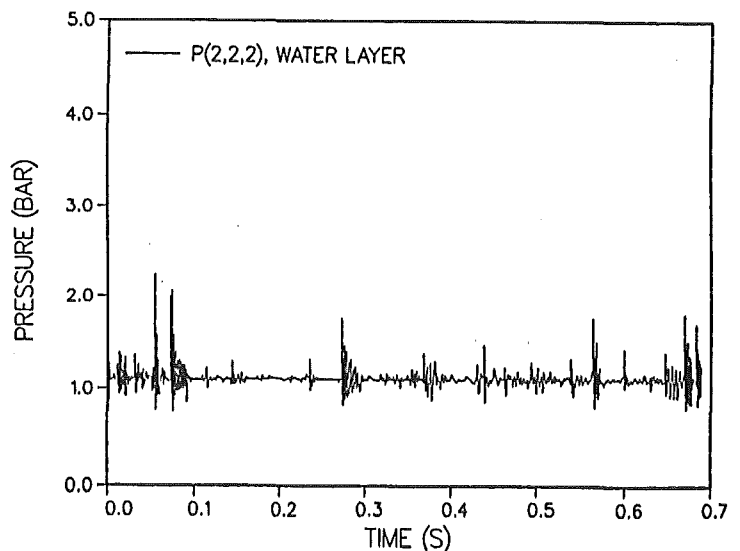


Abb. 32.3

Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter



Rechnung M02R02

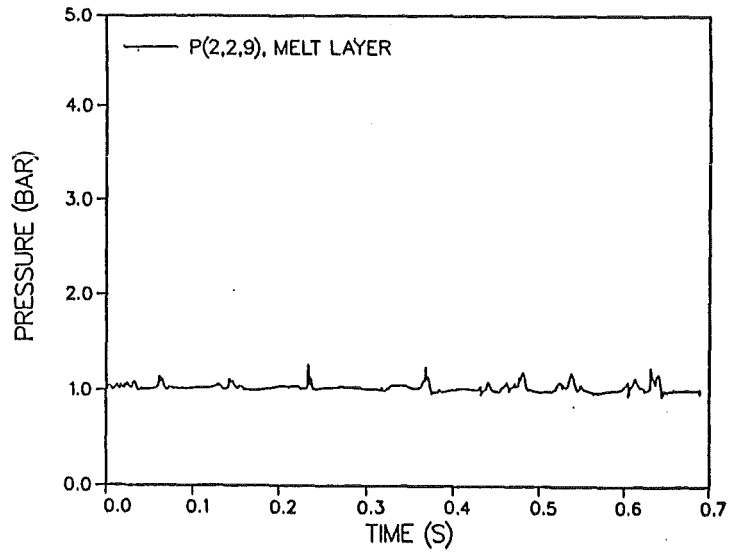
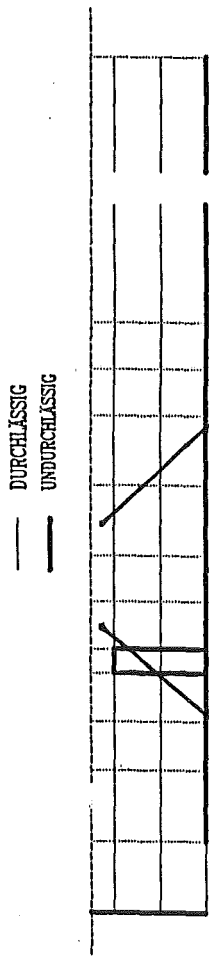


Abb. 32.4 Druckverlauf in der Zelle (2,2,9) im Schmelzenbehälter

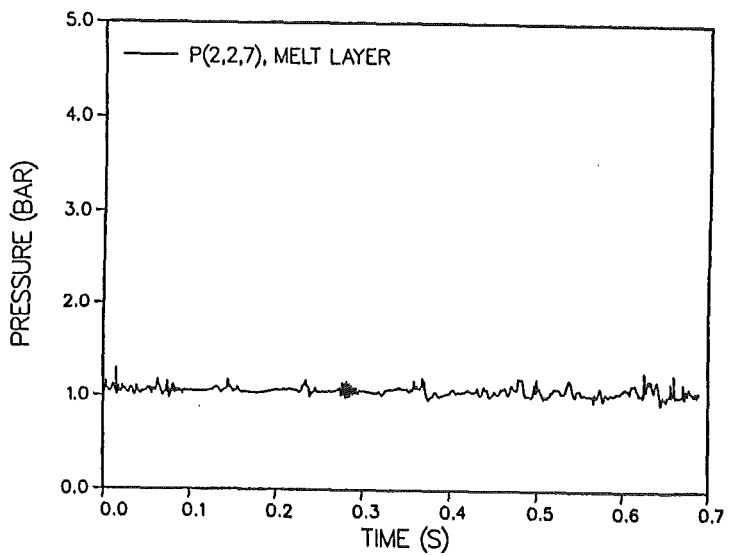


Abb. 32.5 Druckverlauf in der Zelle (2,2,7) im Schmelzenbehälter

Rechnung M02R02

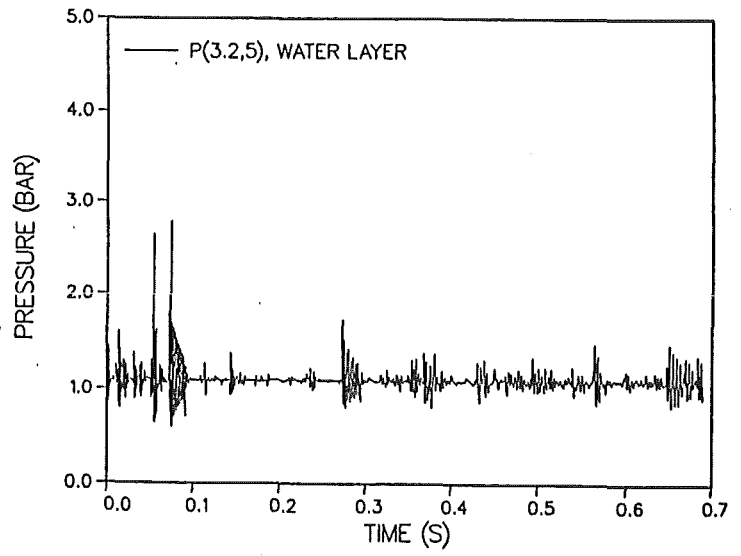
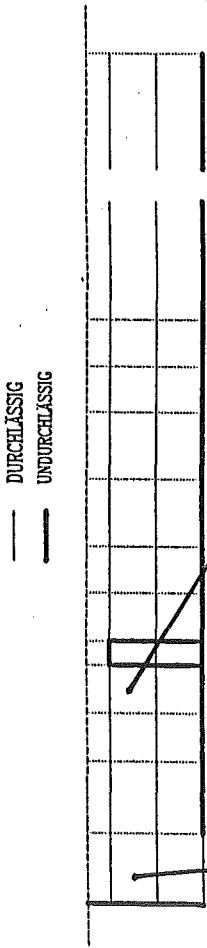


Abb. 32.6 Druckverlauf in der Zelle (3,2,5) im Wasserbehälter

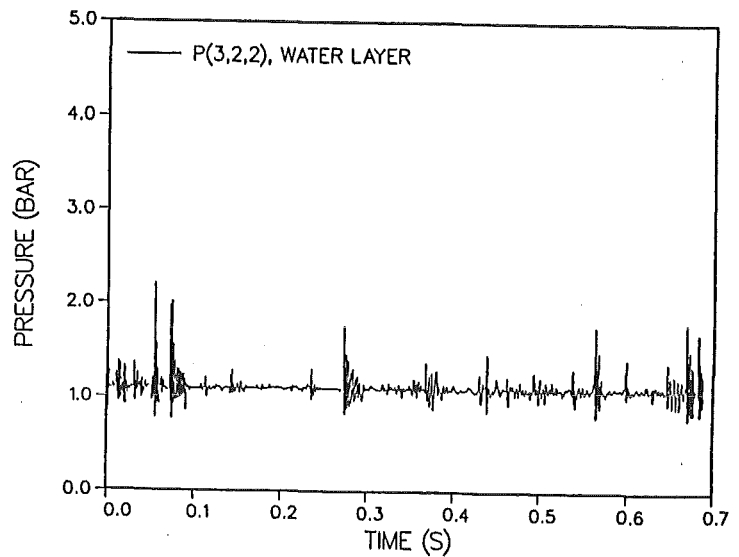


Abb. 32.7 Druckverlauf in der Zelle (3,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M02R02

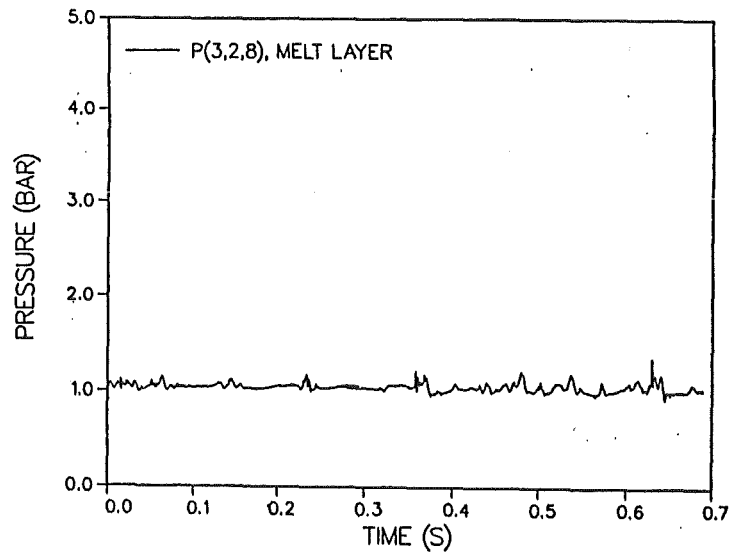
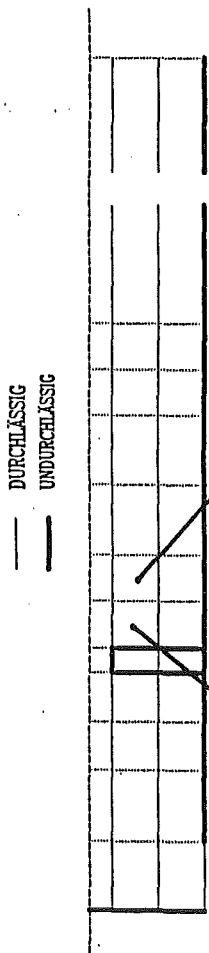


Abb. 32.8 Druckverlauf in der Zelle (3,2,8) im Schmelzenbehälter

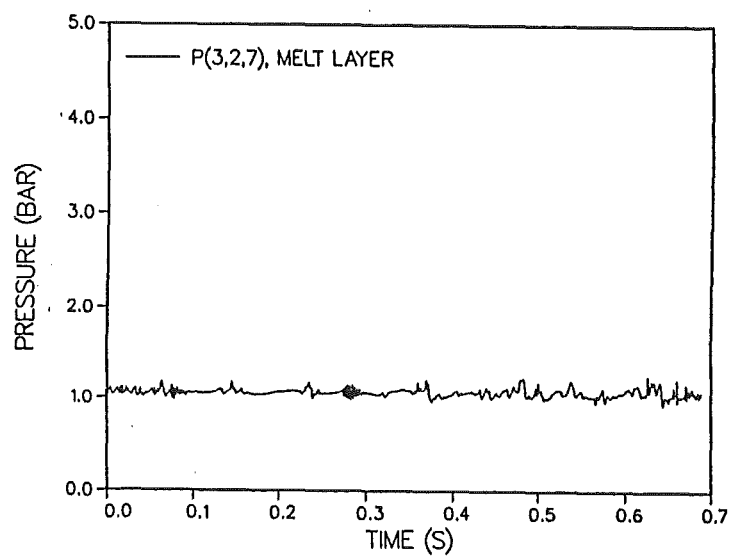


Abb. 32.9 Druckverlauf in der Zelle (3,2,7) im Schmelzenbehälter

Rechnung M02R02

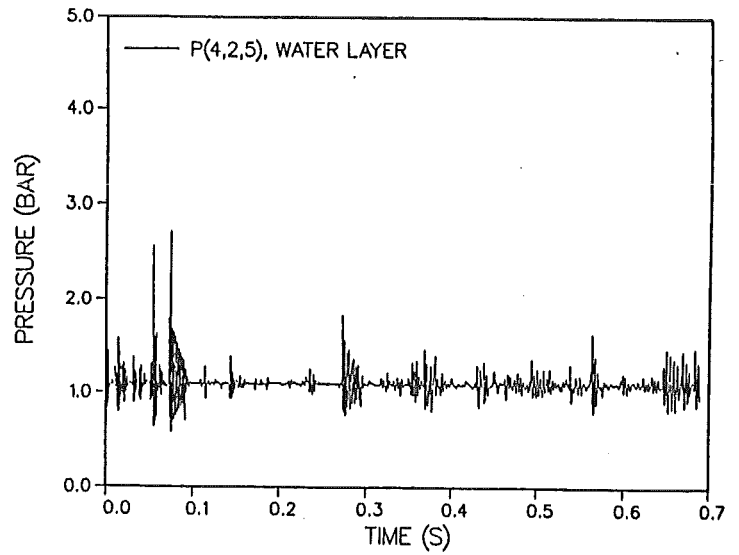
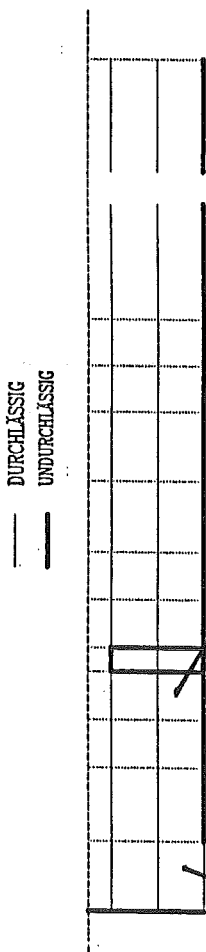


Abb. 32.10 Druckverlauf in der Zelle (4,2,5) im Wasserbehälter

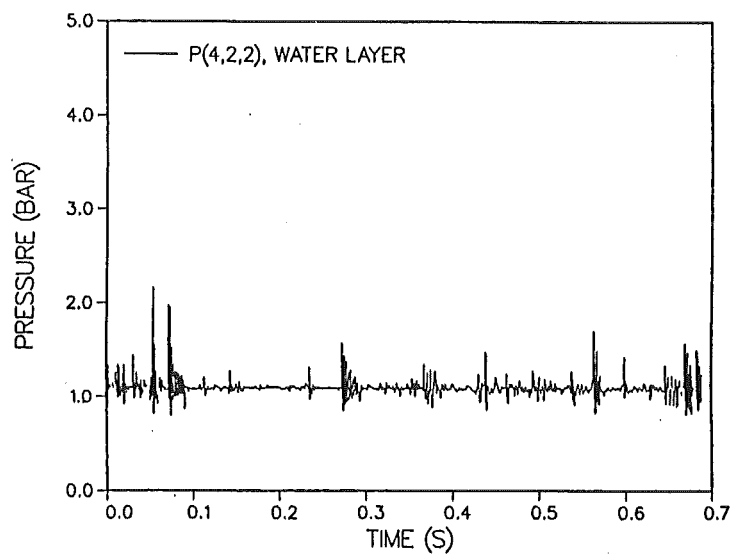


Abb. 32.11 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M02R02

— DURCHLÄSSIG  
— UN DURCHLÄSSIG

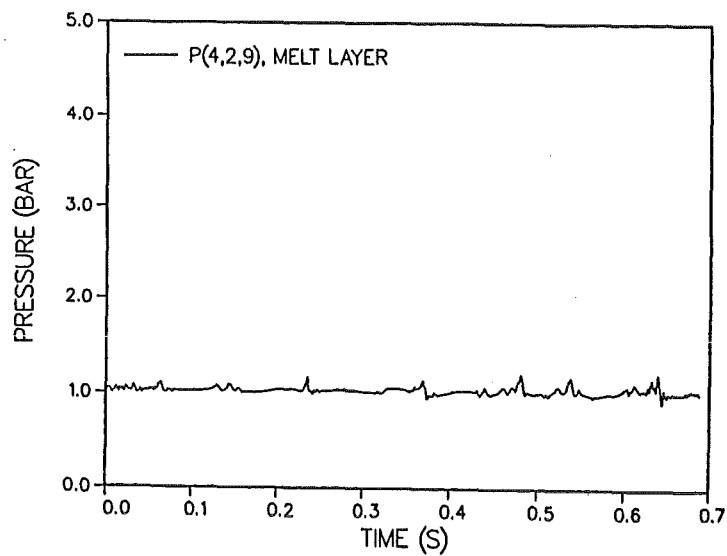


Abb. 32.12 Druckverlauf in der Zelle (4,2,9) im Schmelzenbehälter

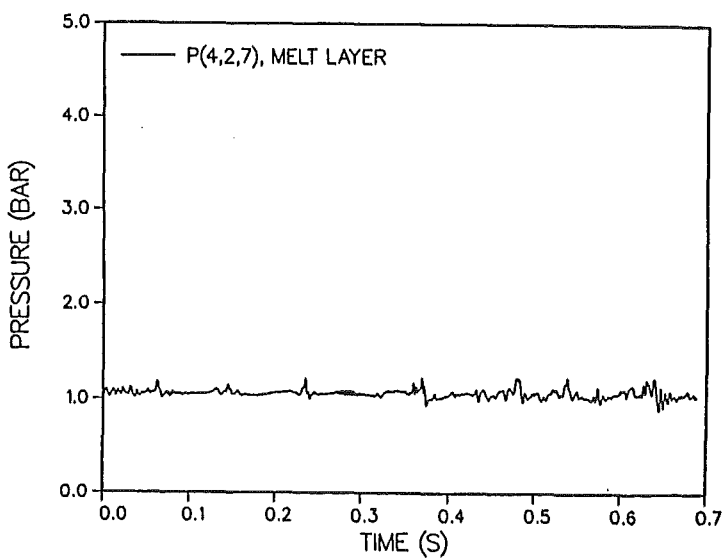


Abb. 32.13 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter

Rechnung M02R02

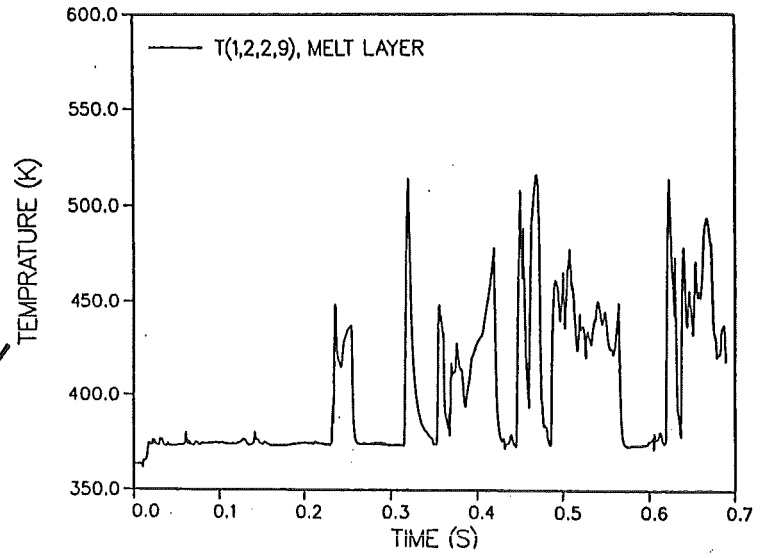
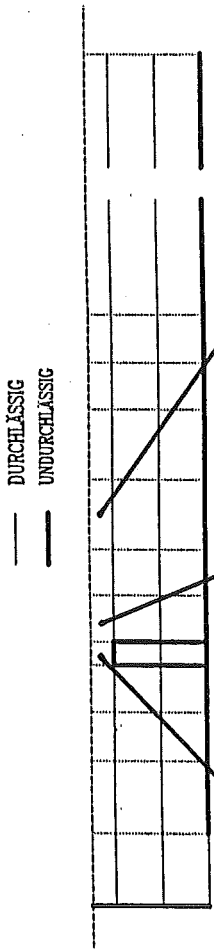


Abb. 33.1 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,9)

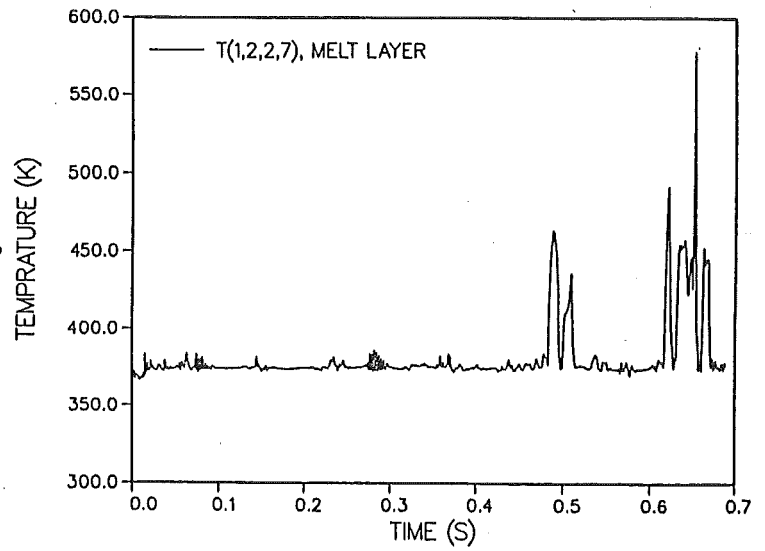


Abb. 33.2 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,7)

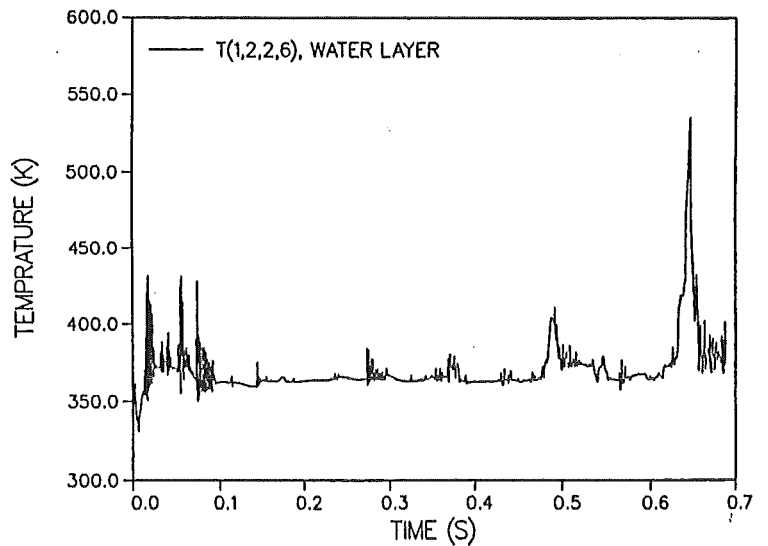


Abb. 33.3 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)

Rechnung M02R02

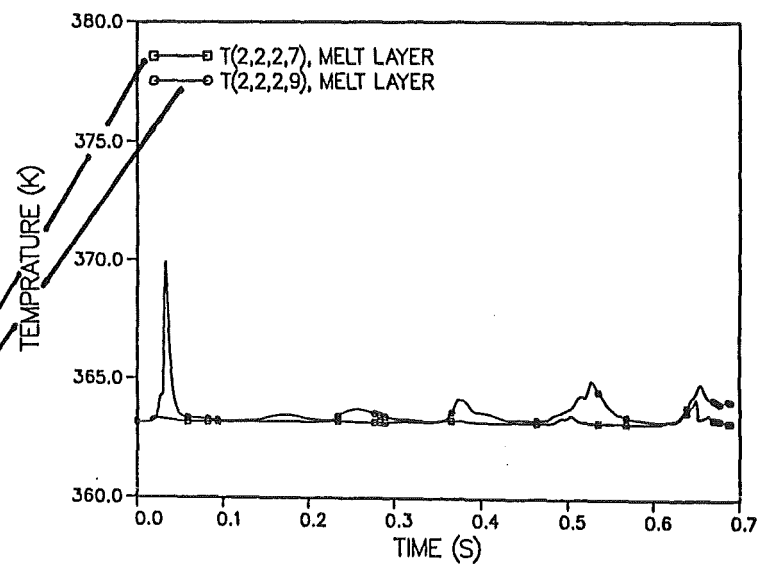
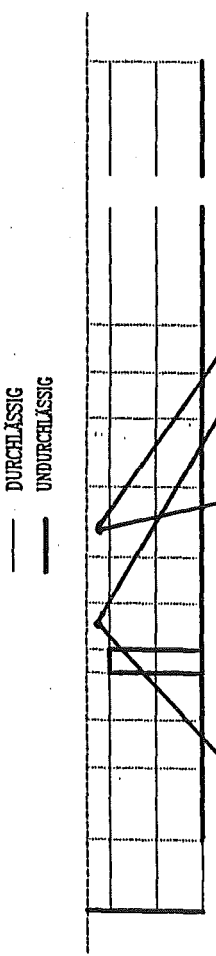


Abb. 33.4 Temp. des Wassers in den Zellen (2,2,7) u. (2,2,9)

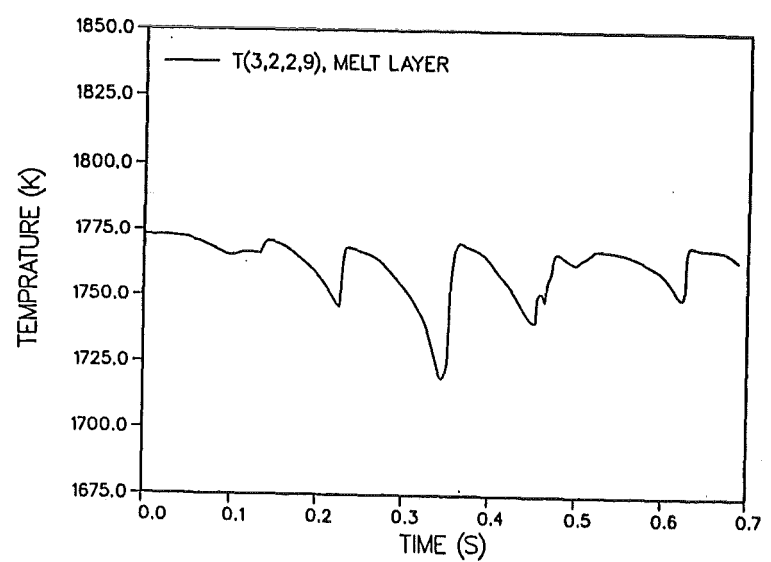


Abb. 33.5 Temperaturverlauf der Schmelze in der Zelle (2,2,9)

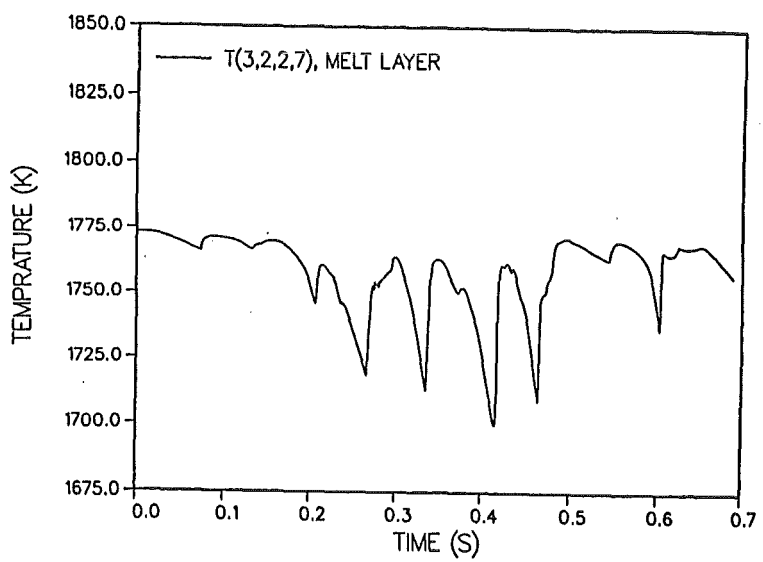
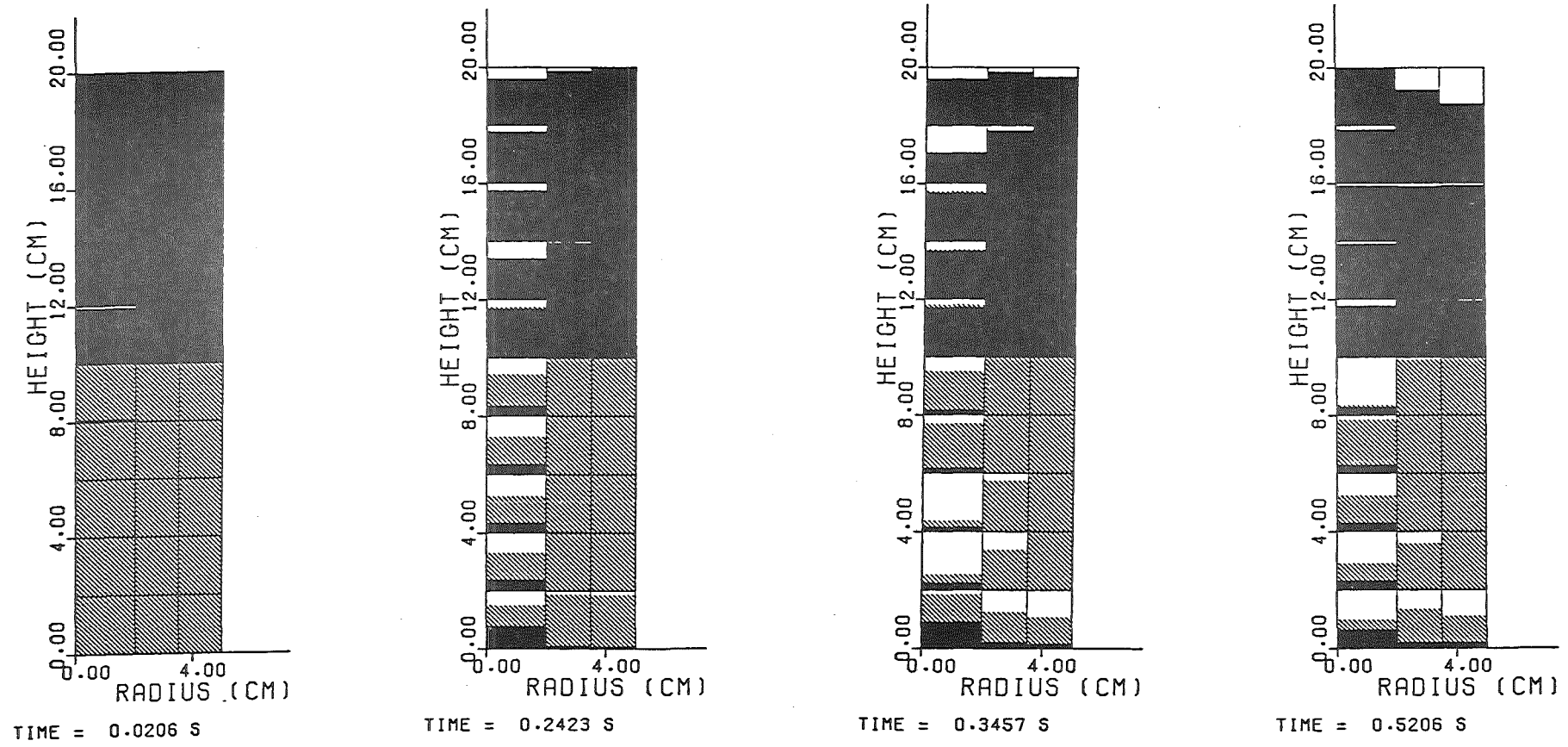


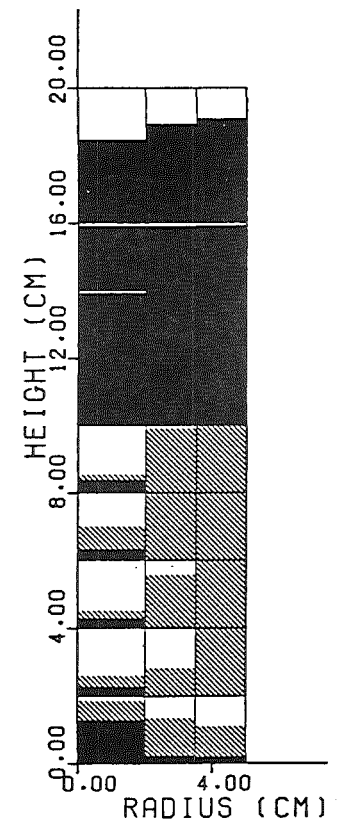
Abb. 33.6 Temperaturverlauf der Schmelze in der Zelle (2,2,7)



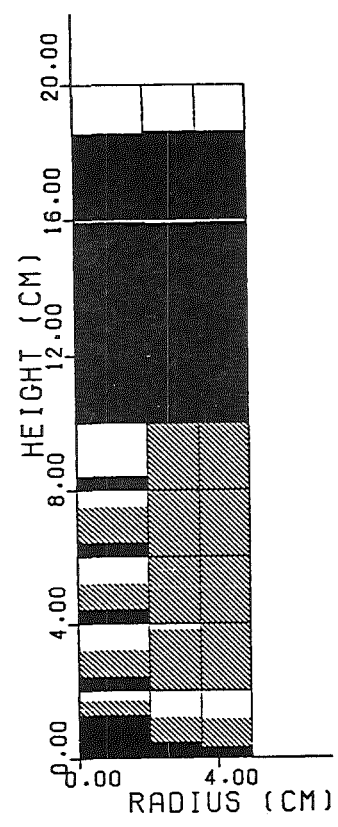
Rechnung M03R01

Abb. 34.1 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

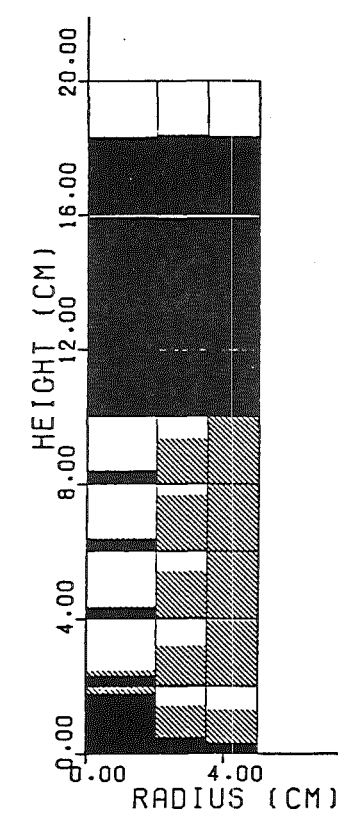




TIME = 0.6494 S



TIME = 0.7485 S



TIME = 0.8121 S

Rechnung M03R01

Abb. 34.2 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

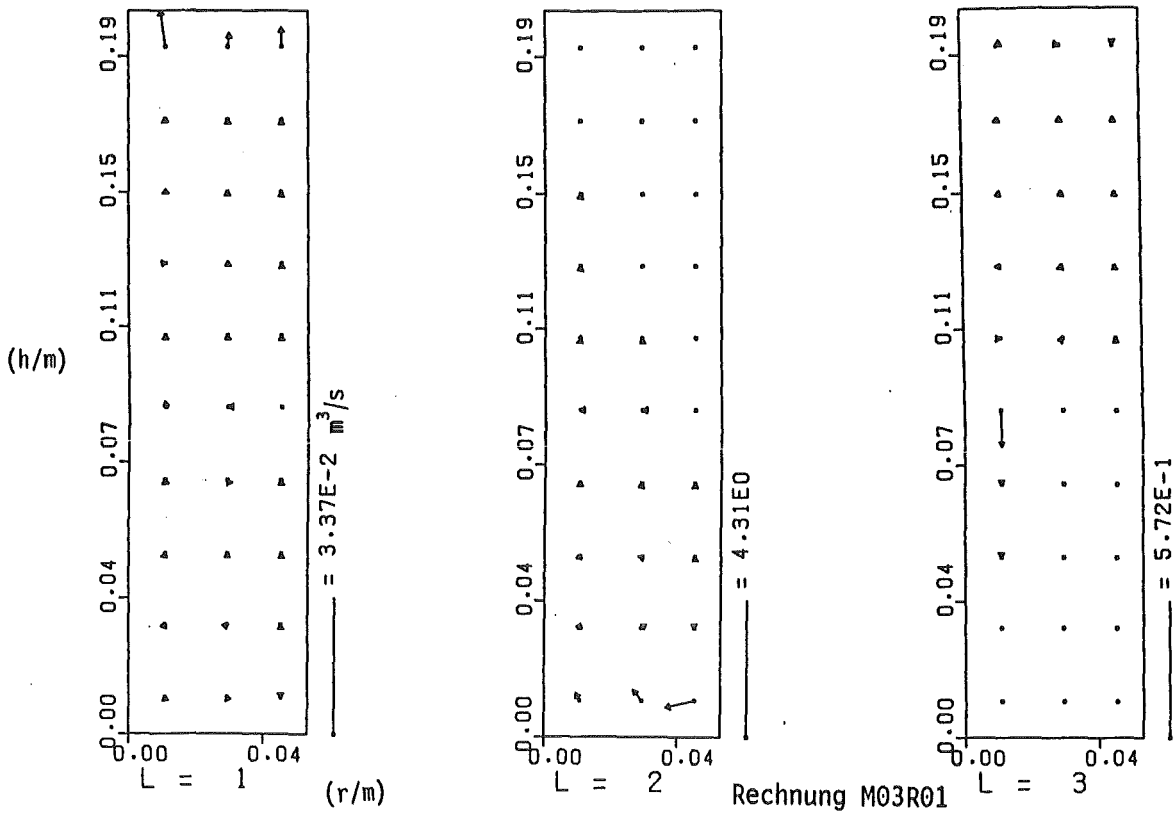


Abb. 35.1 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,021$  s in der Geometrie der Abb. 13

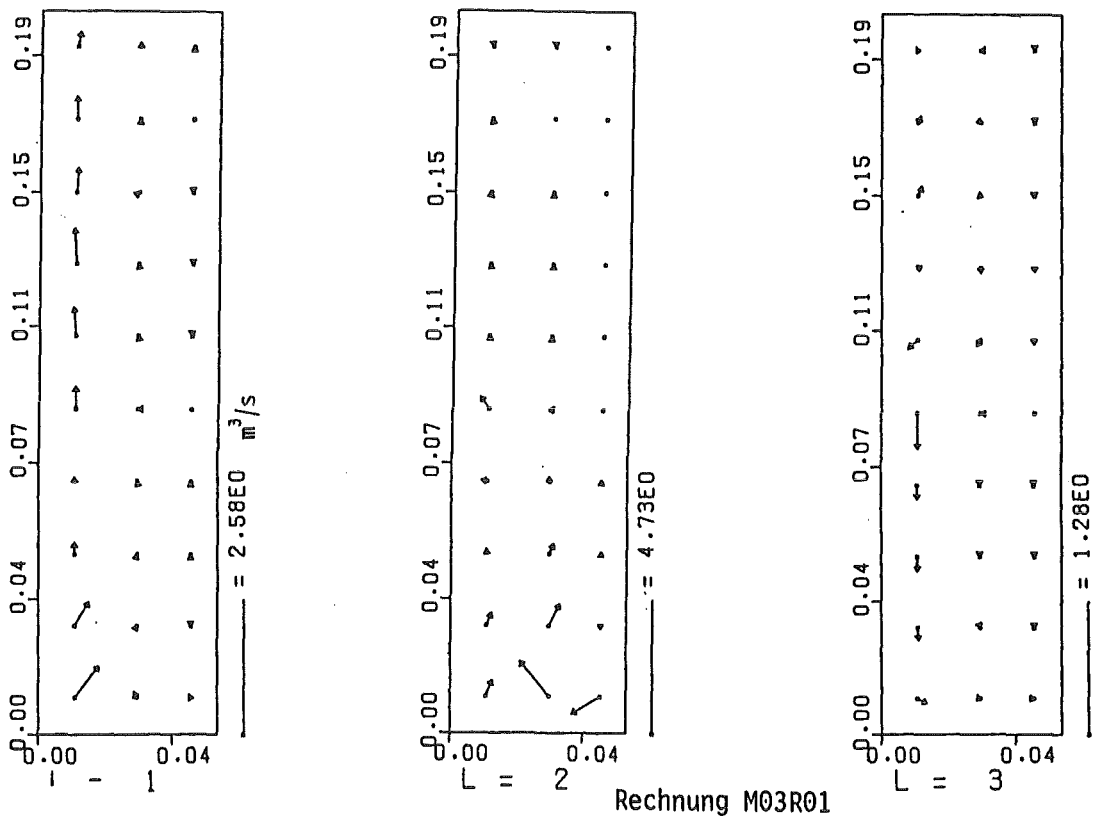


Abb. 35.2 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,242$  s in der Geometrie der Abb. 13

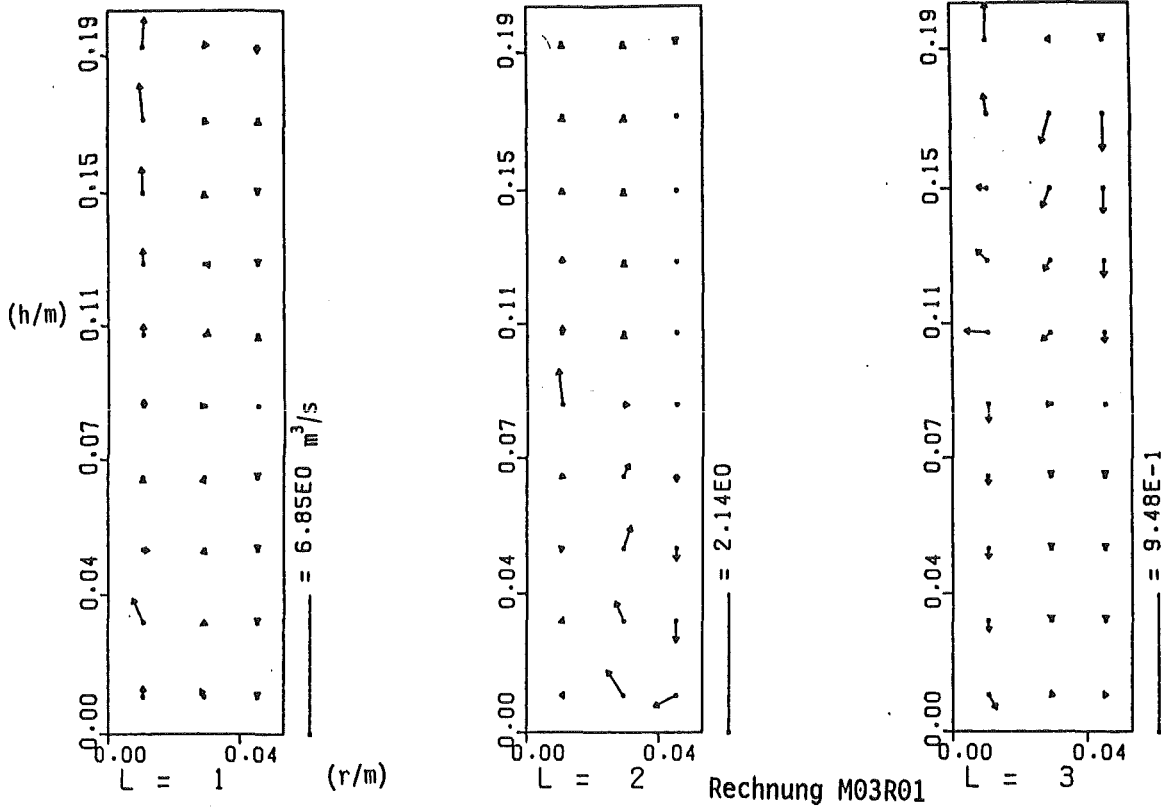


Abb. 35.3 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,346$  s in der Geometrie der Abb. 13

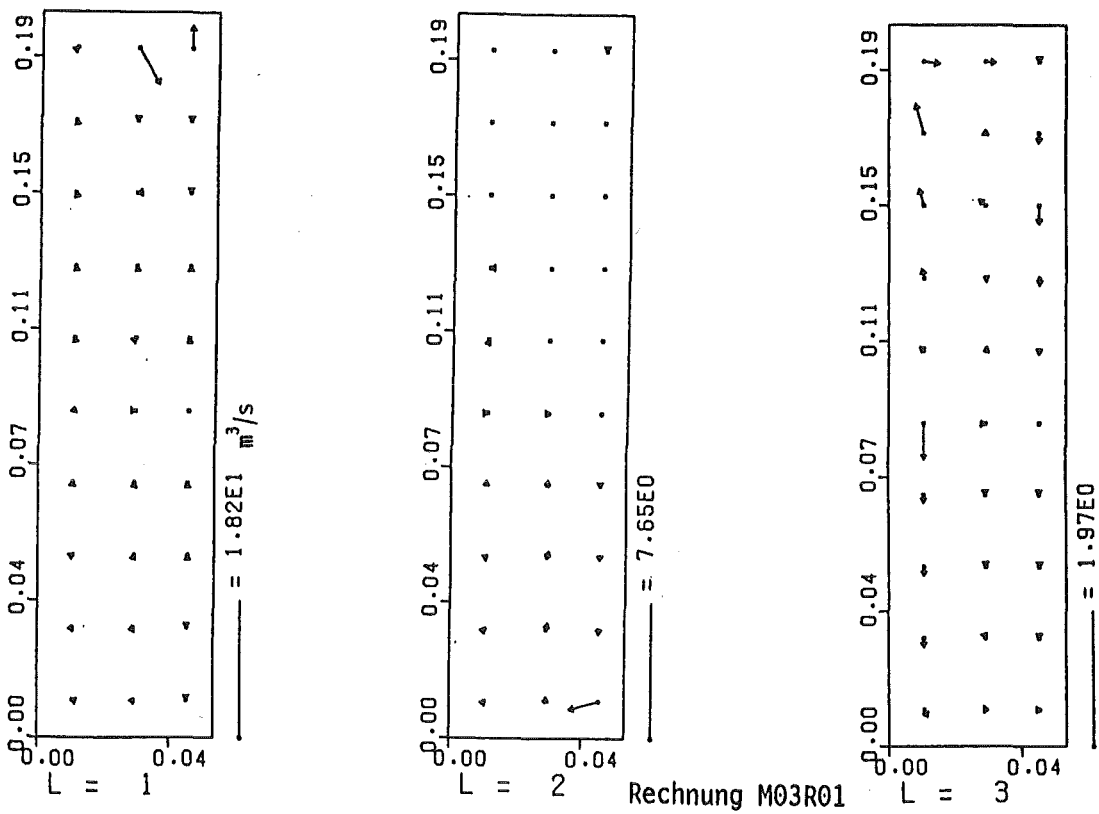


Abb. 35.4 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,521$  s in der Geometrie der Abb. 13

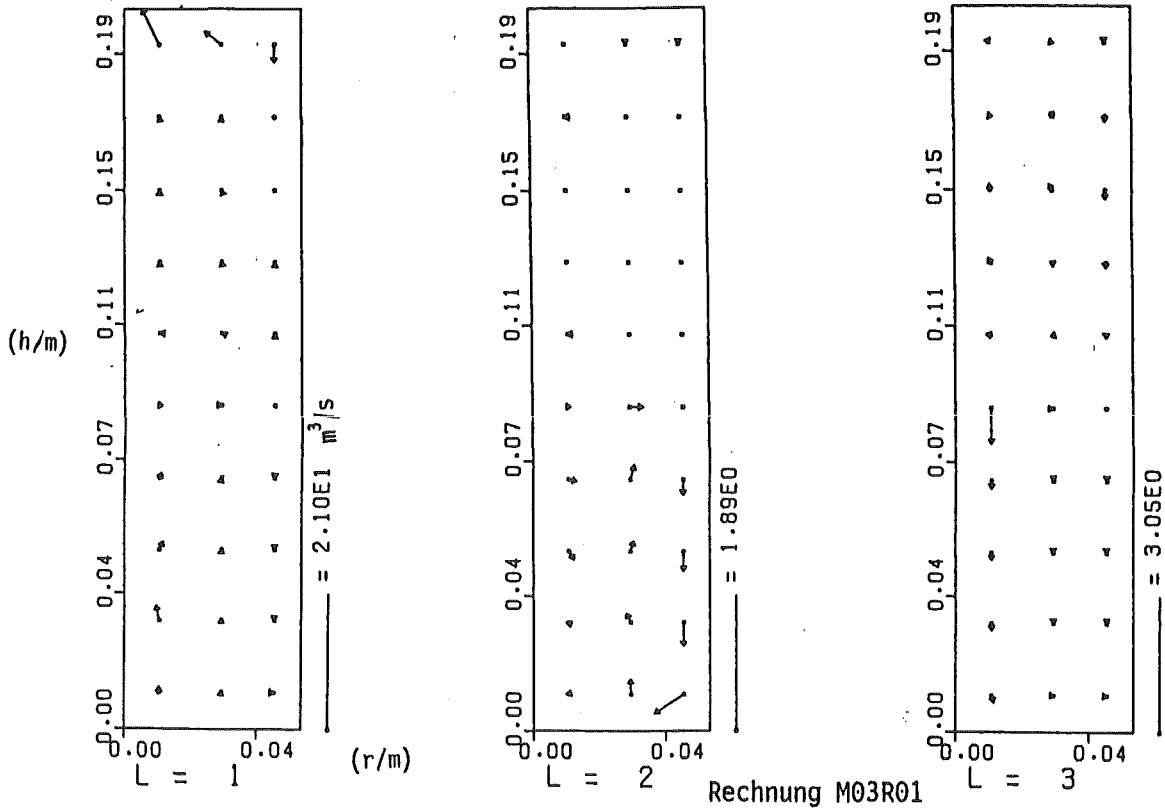


Abb. 35.5 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,649$  s in der Geometrie der Abb. 13

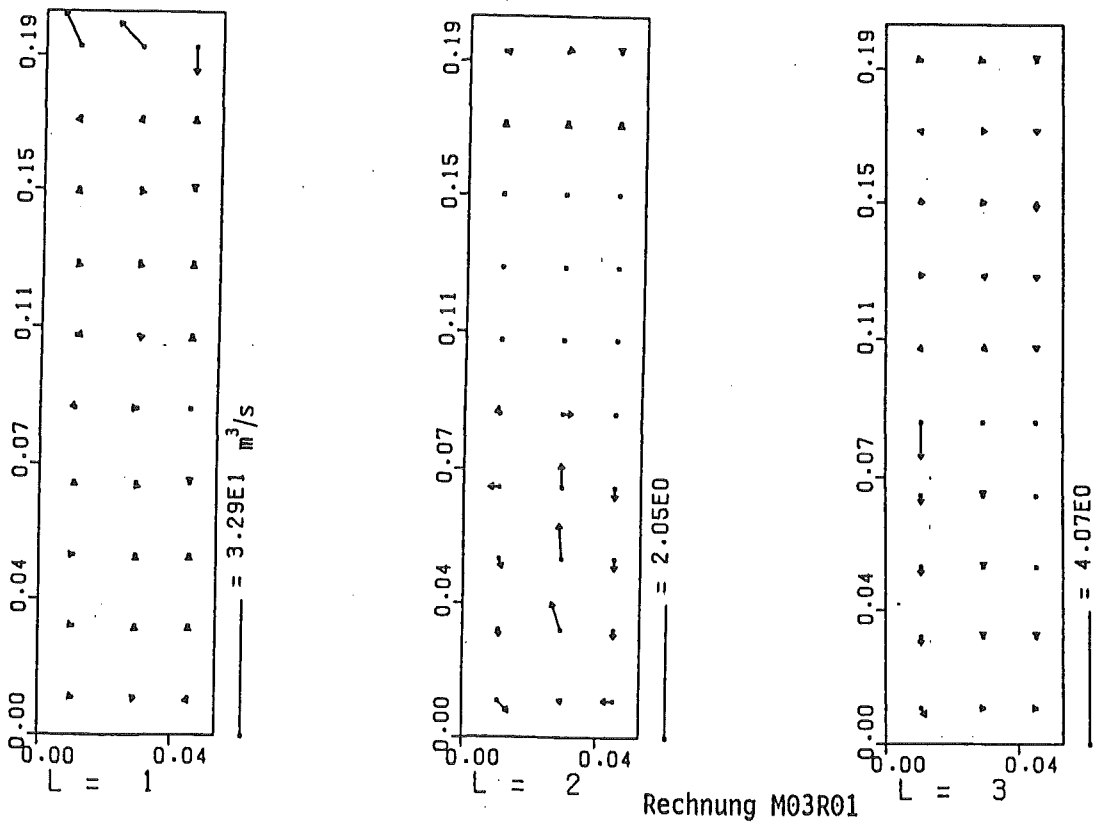


Abb. 35.6 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,749$  s in der Geometrie der Abb. 13

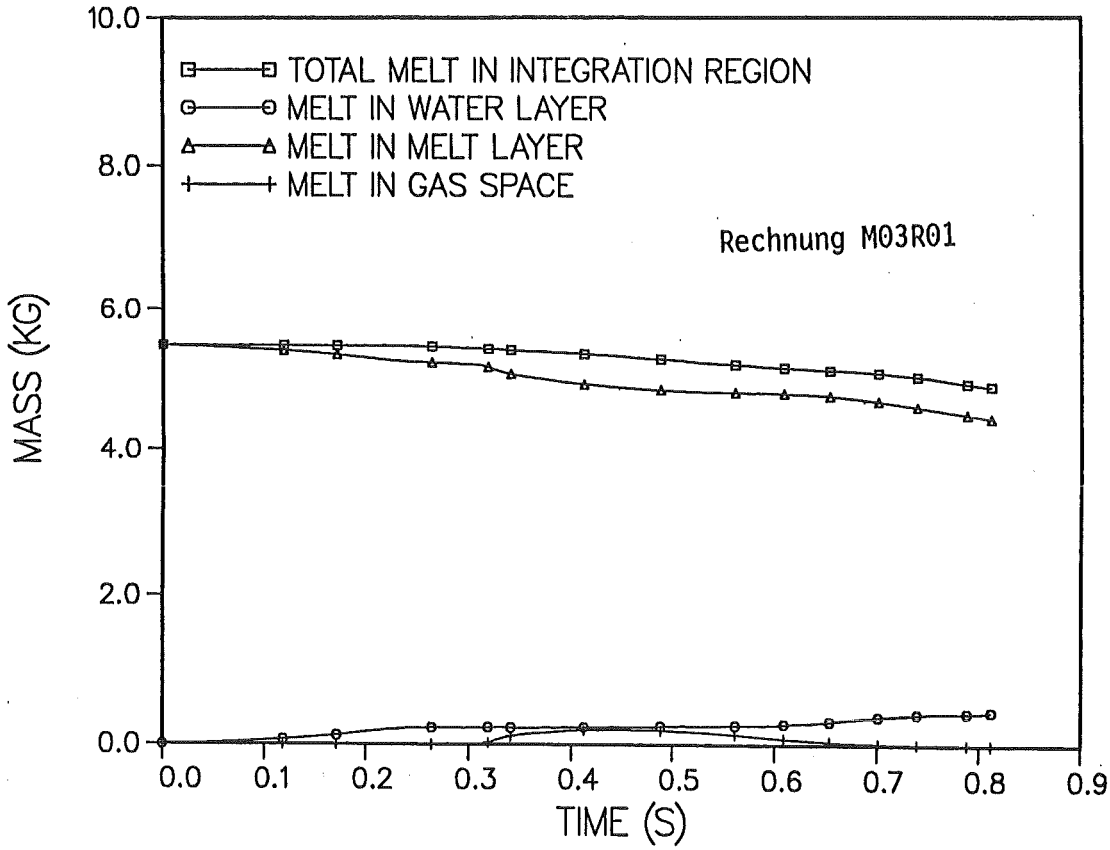


Abb. 36 Schmelzenmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

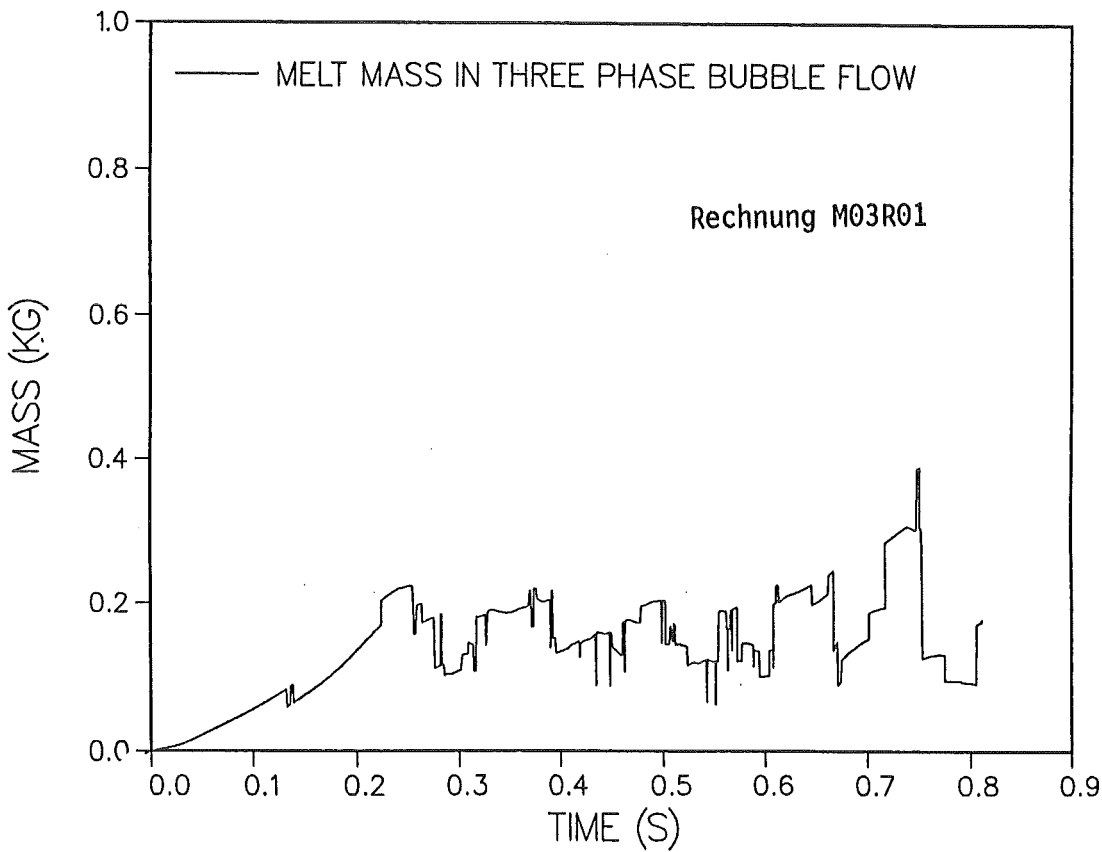


Abb. 37 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

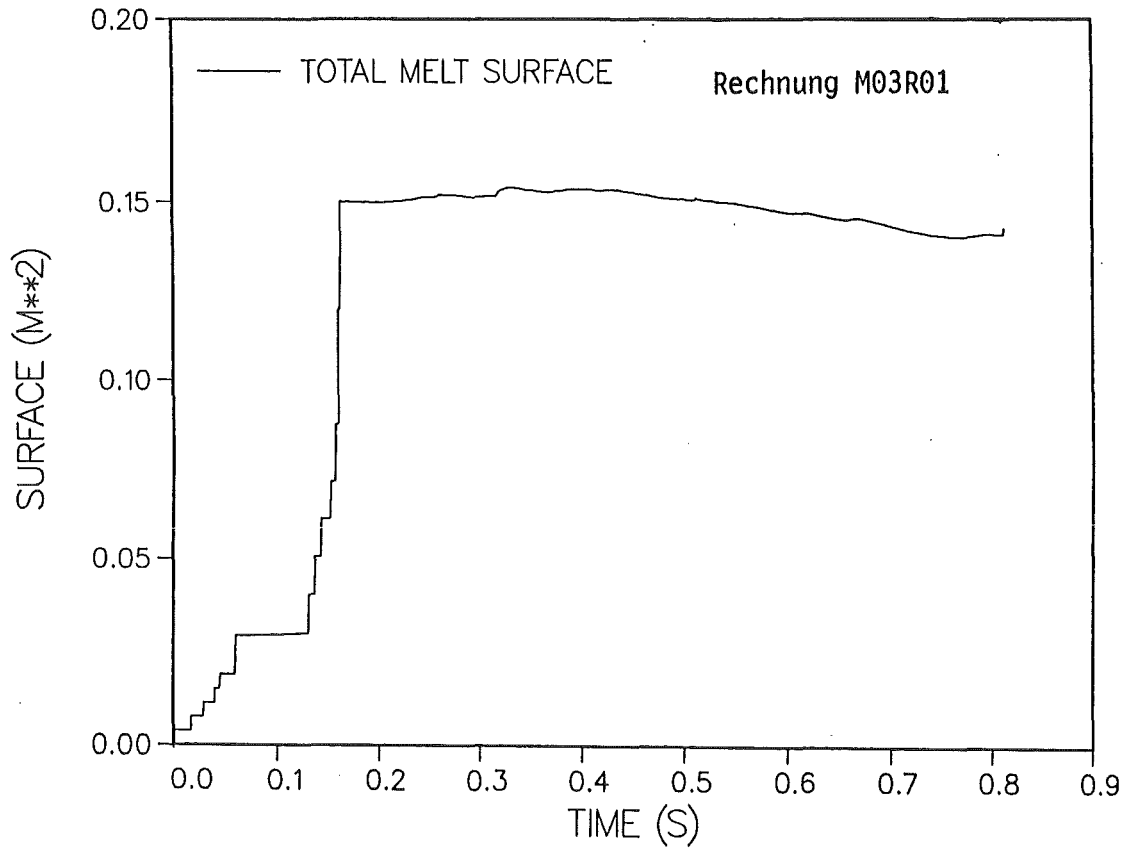


Abb. 38 Oberflächenvergrößerung der Schmelze

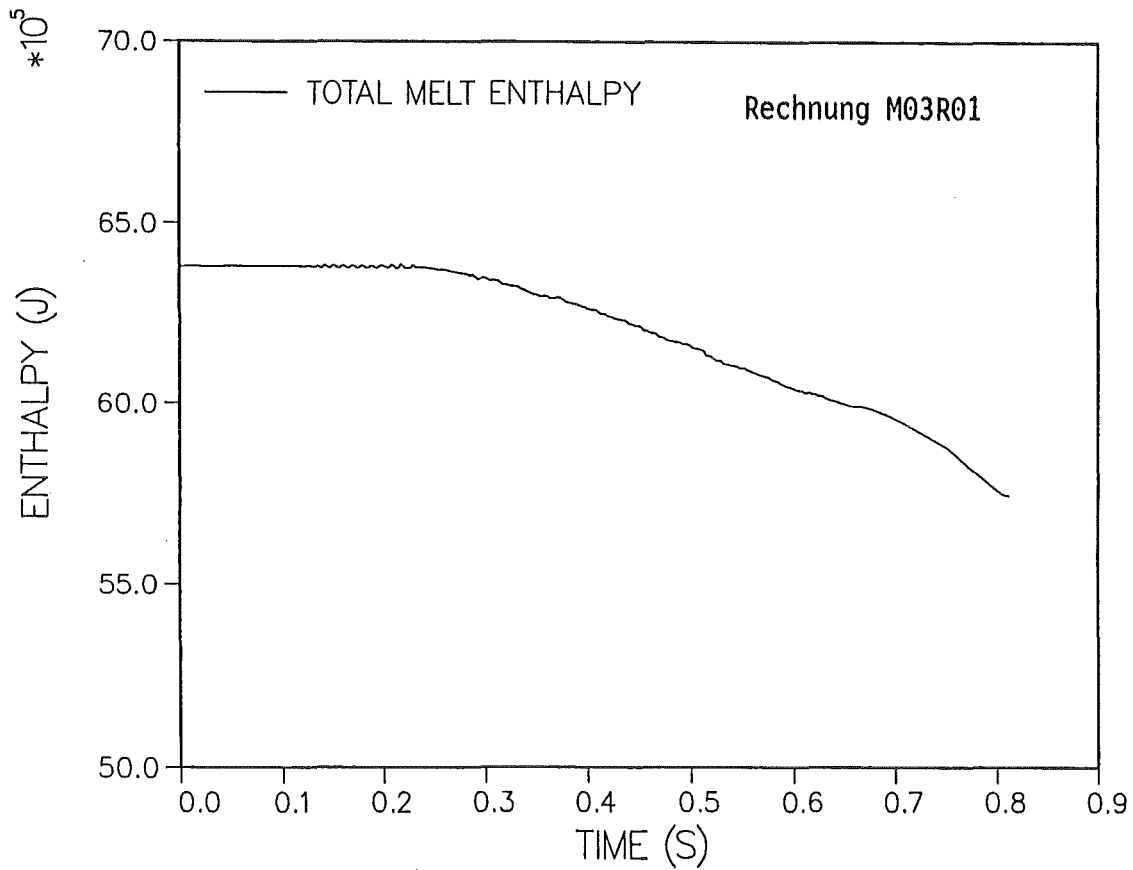


Abb. 39 Enthalpieverlauf der Schmelze

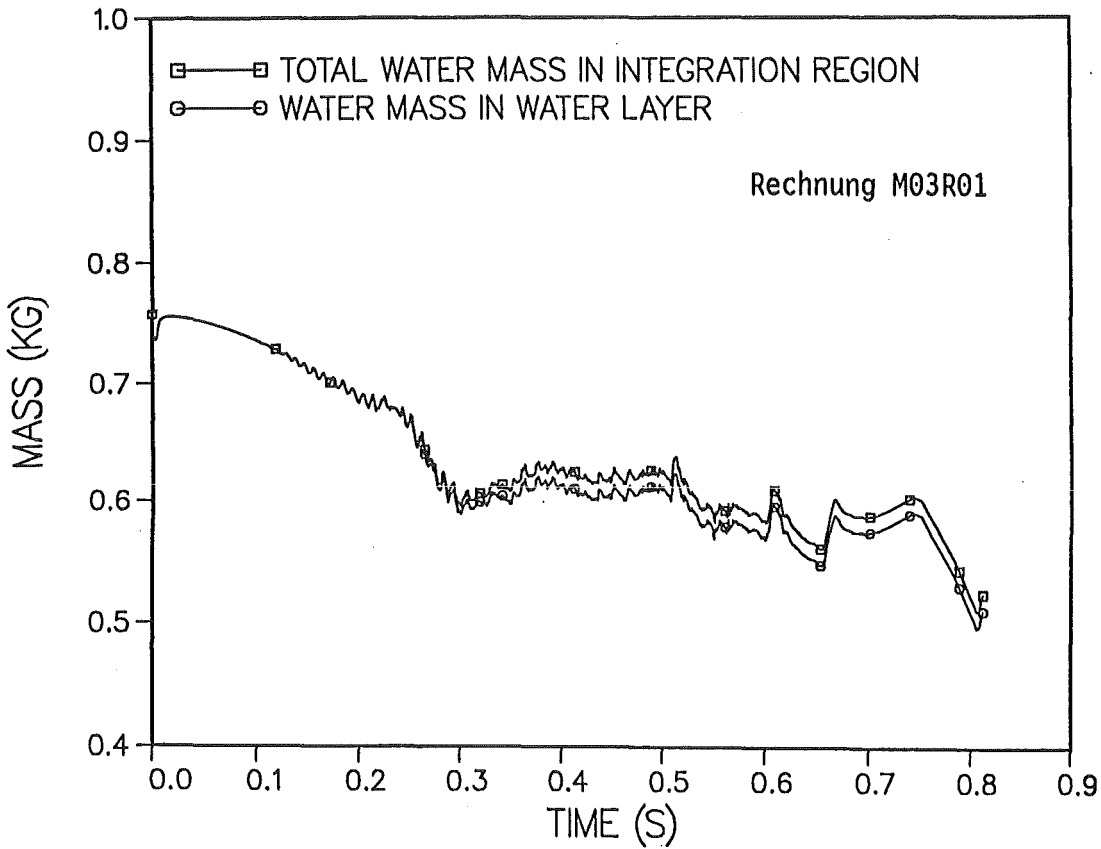


Abb. 40 Wassermengen in den verschiedenen Schichten

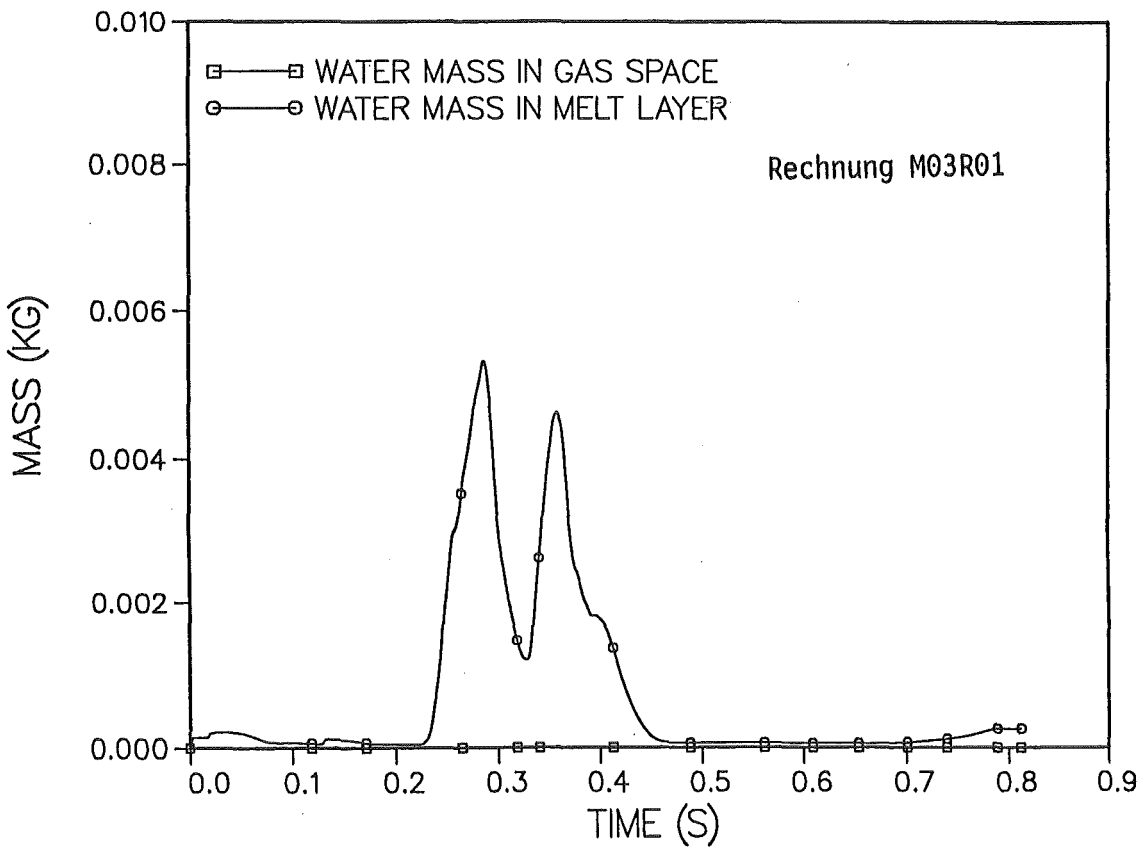


Abb. 41 Wassermenge in Luft- und Schmelzschicht

# Rechnung M03R01

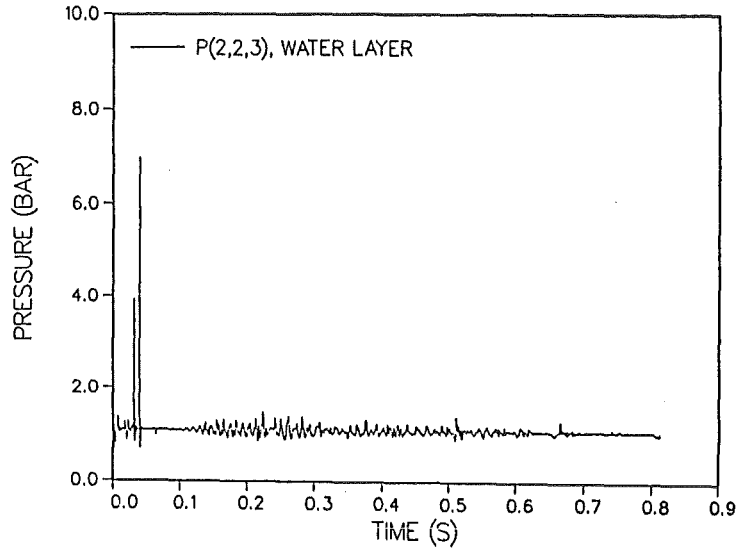
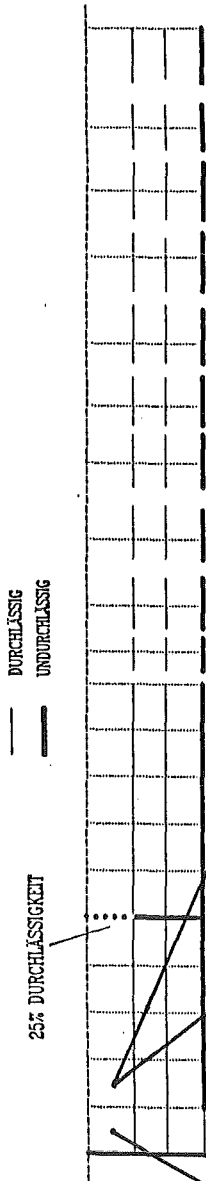


Abb. 42.1 Druckverlauf in der Zelle (2,2,3) im Wasserbehälter

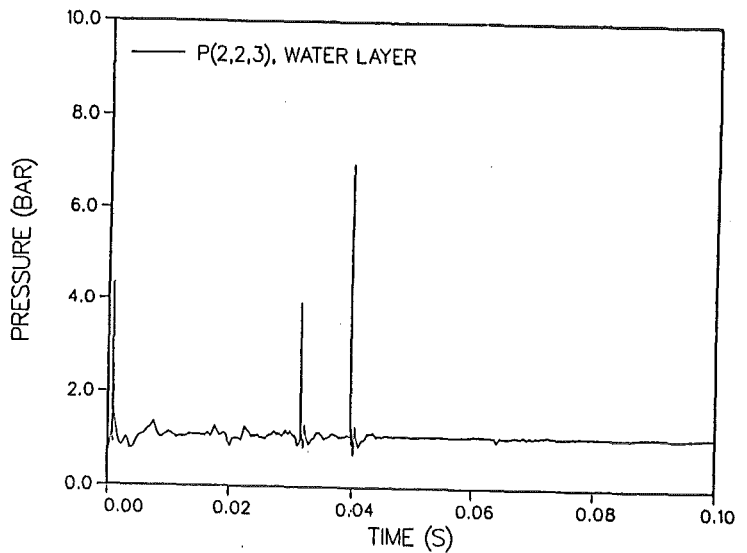


Abb. 42.2 Druckverlauf in der Zelle (2,2,3) im Wasserbehälter

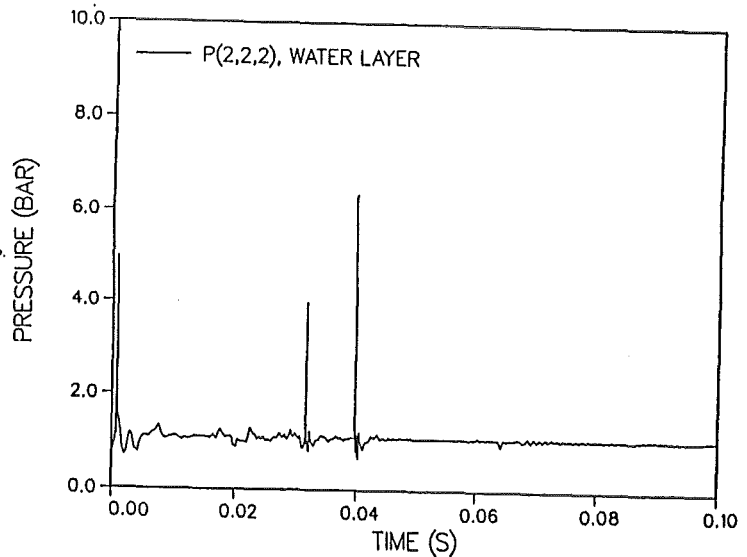


Abb. 42.3 Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter



Rechnung M03R01

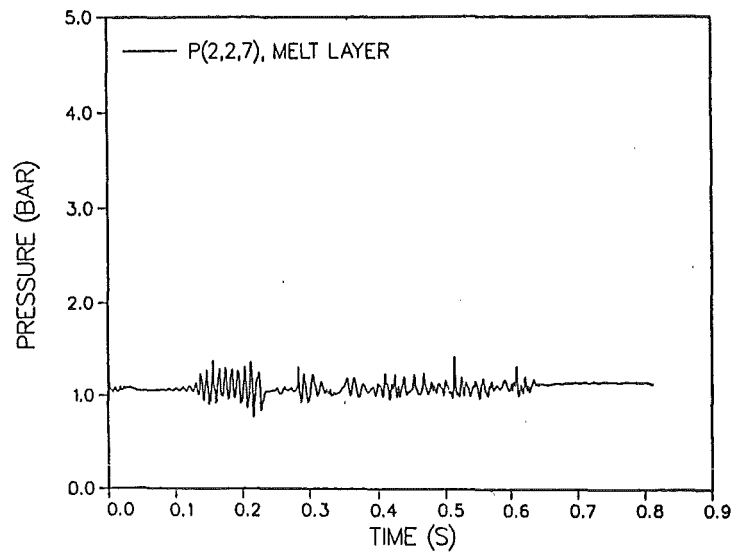
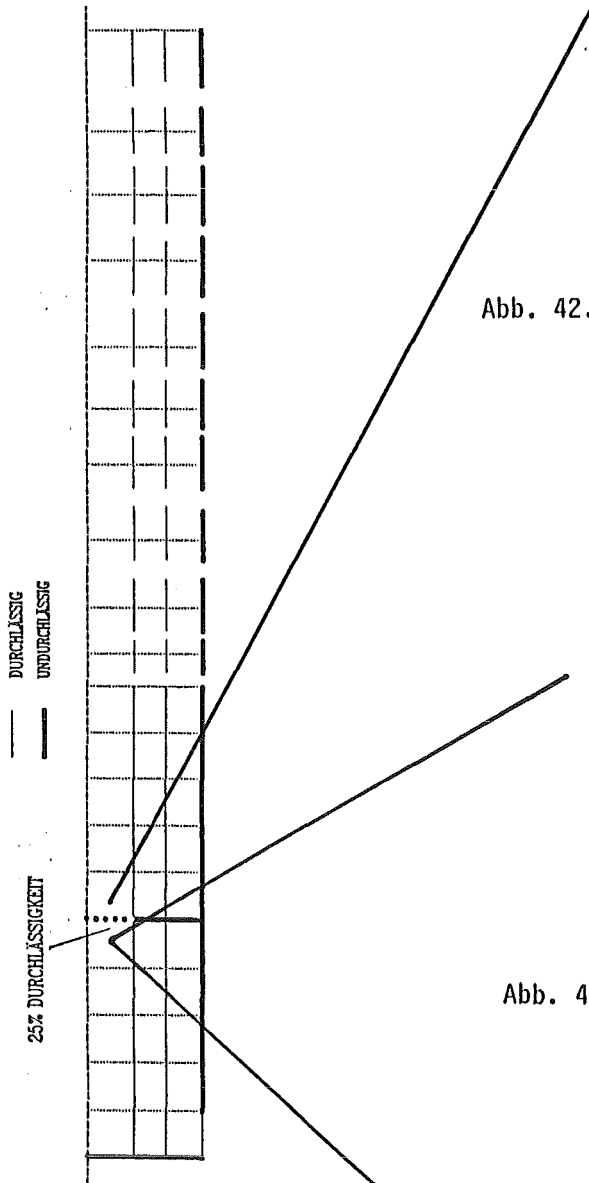


Abb. 42.4 Druckverlauf in der Zelle (2,2,7) im Schmelzenbehälter

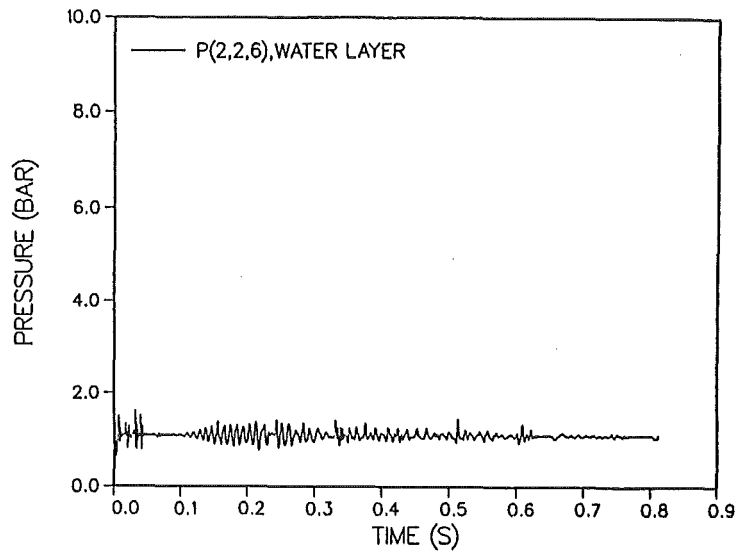


Abb. 42.5 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

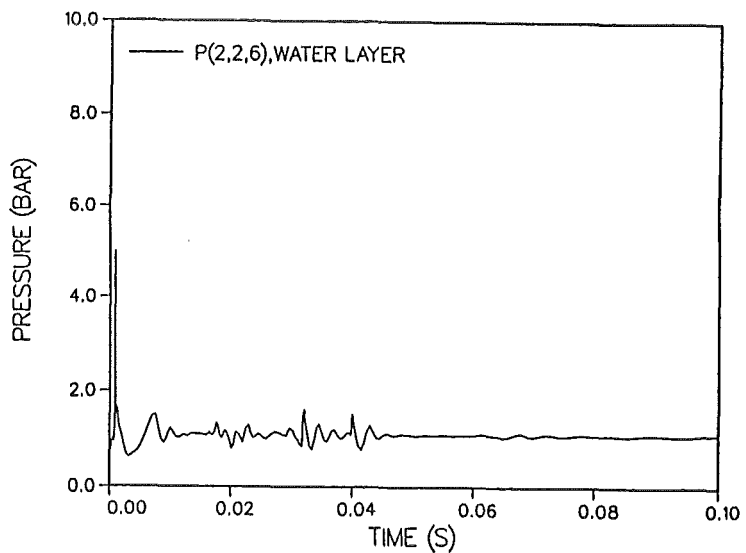


Abb. 42.6 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

Rechnung M03R01

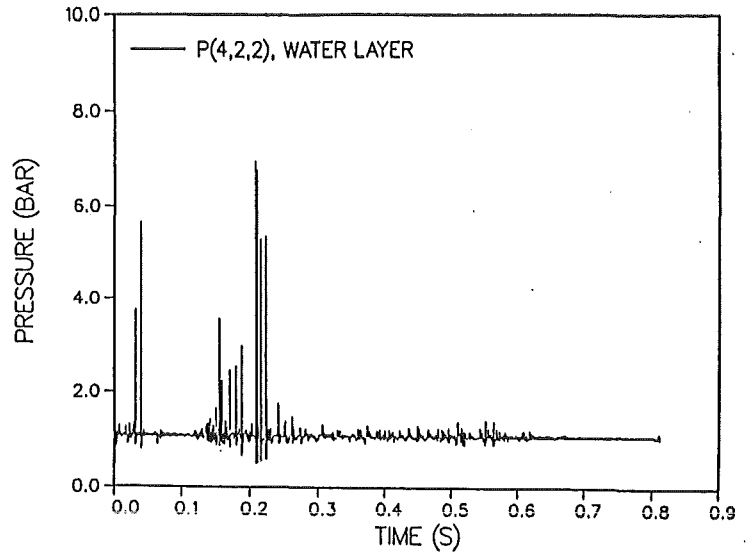
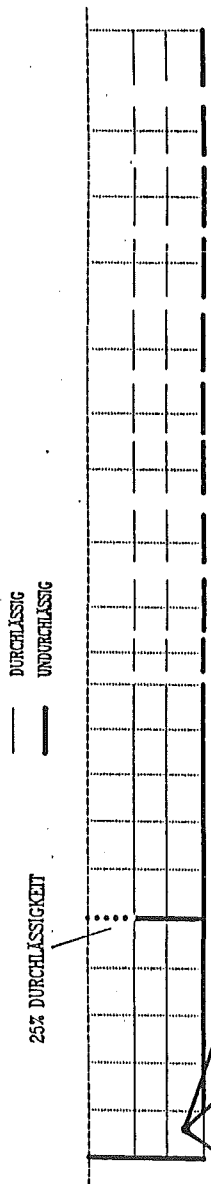


Abb. 42.7 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

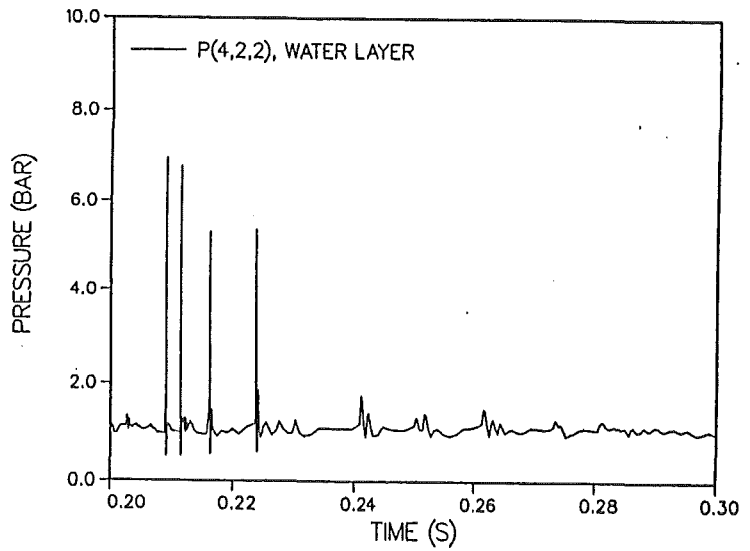


Abb. 42.8 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

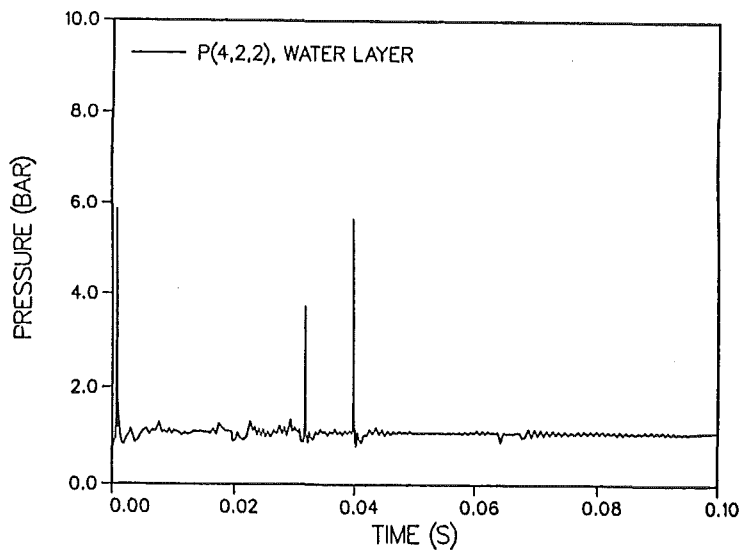


Abb. 42.9 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M03R01

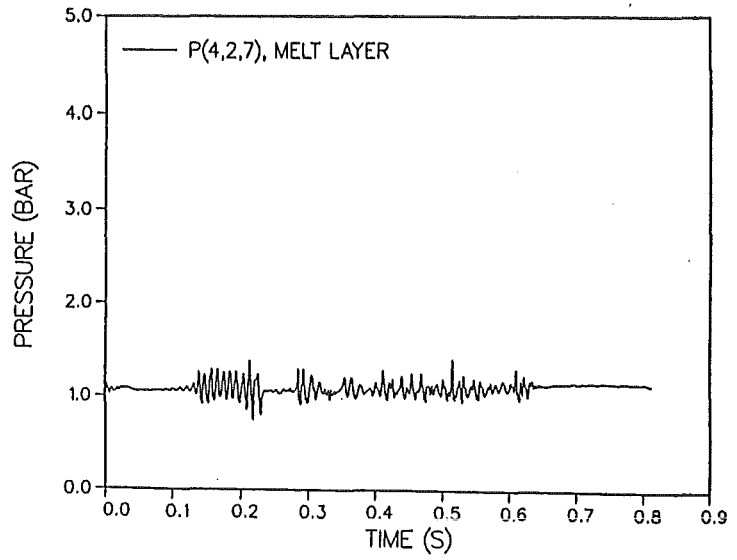
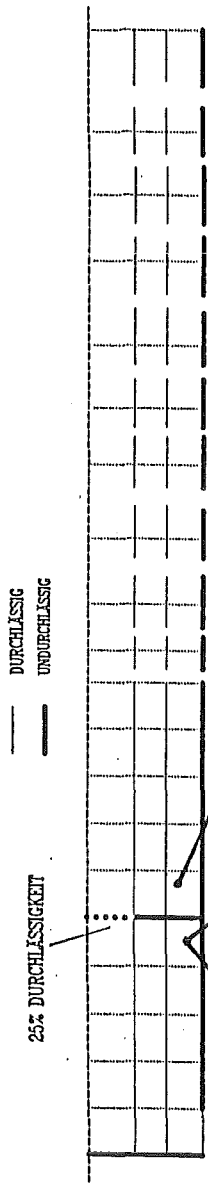


Abb. 42.10 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter

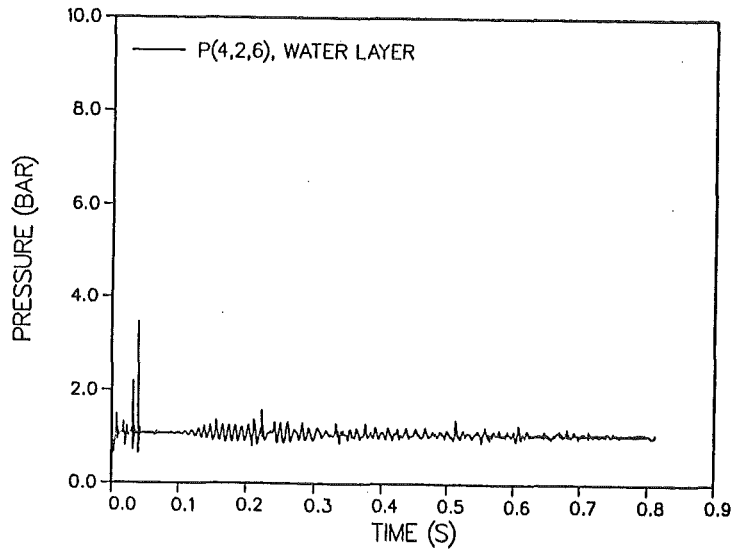


Abb. 42.11 Druckverlauf in der Zelle (4,2,6) im Wasserbehälter

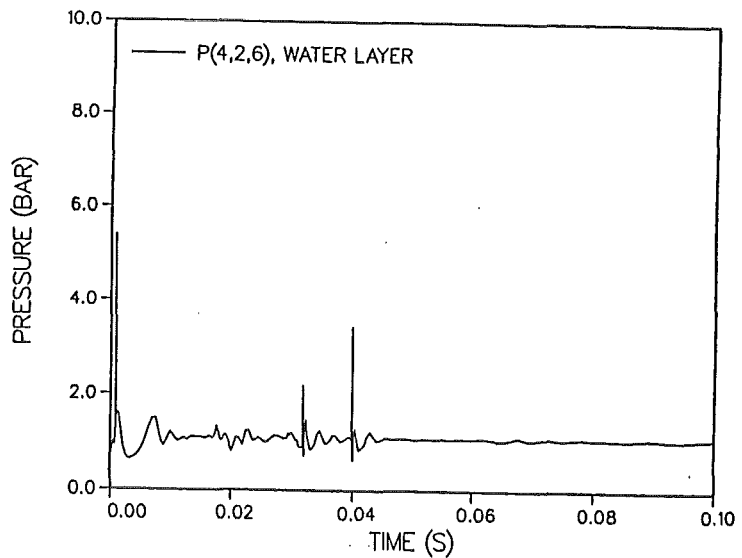


Abb. 42.12 Druckverlauf in der Zelle (4,2,6) im Wasserbehälter

Rechnung M03R01

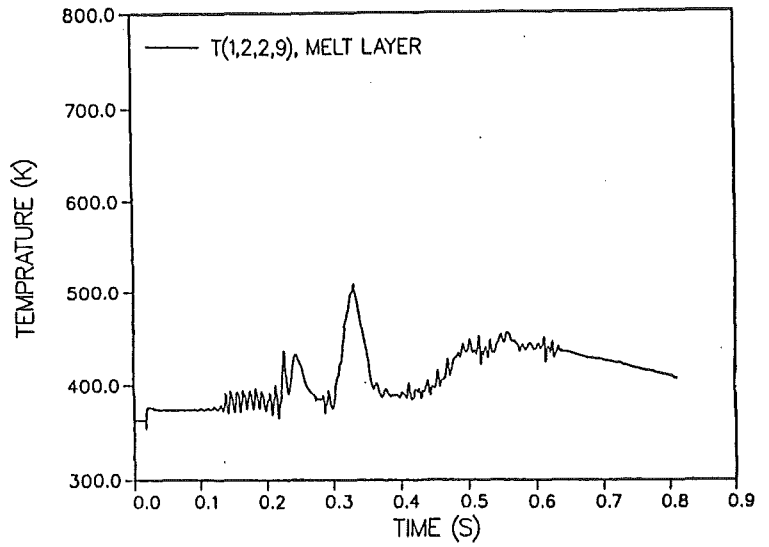
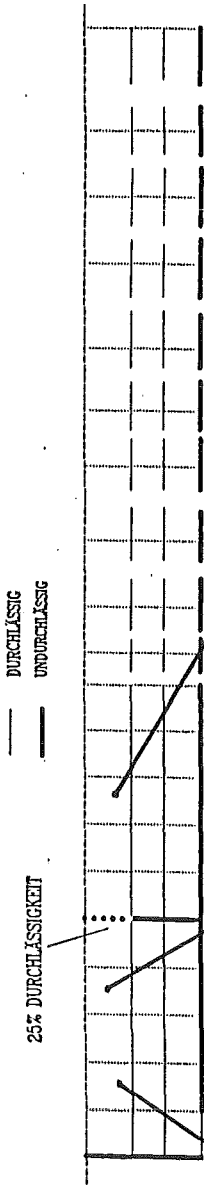


Abb. 43.1 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,

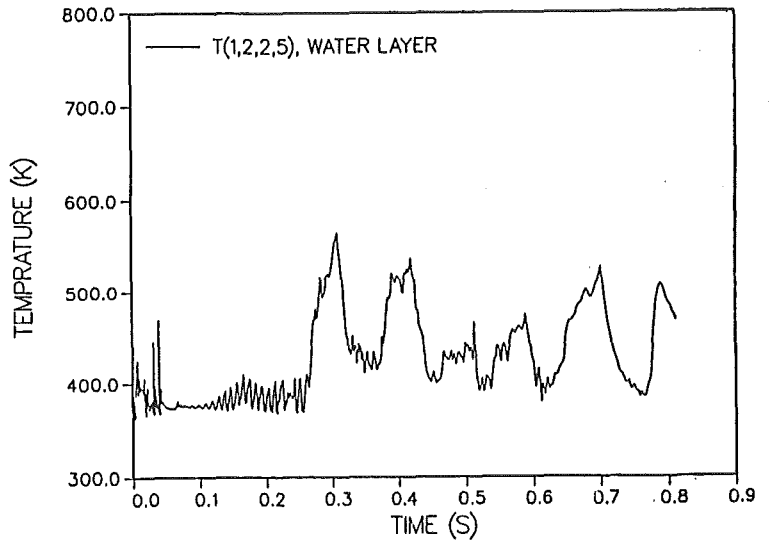


Abb. 43.2 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,

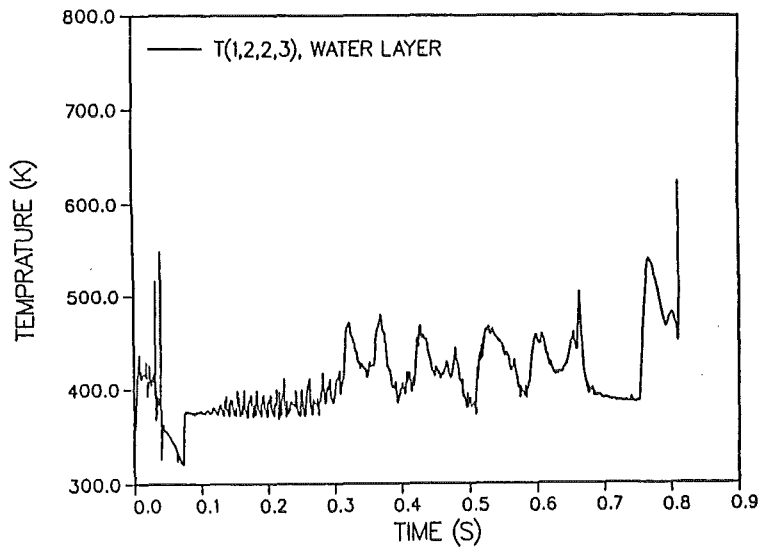


Abb. 43.3 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,

Rechnung M03R01

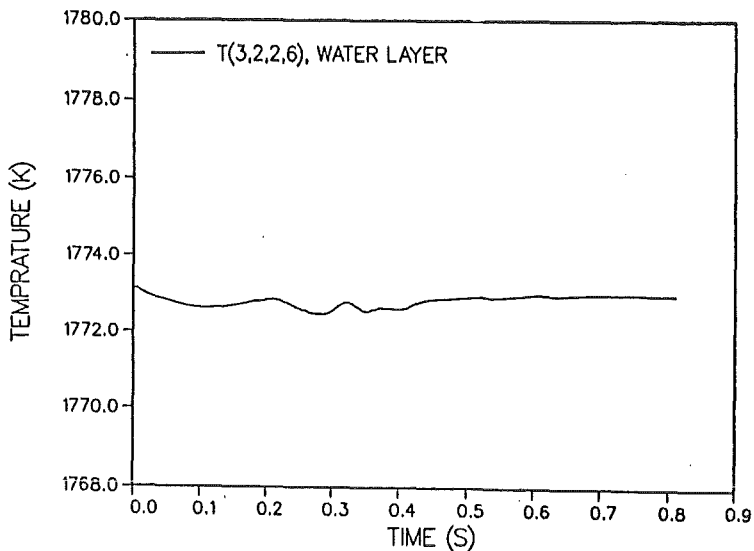
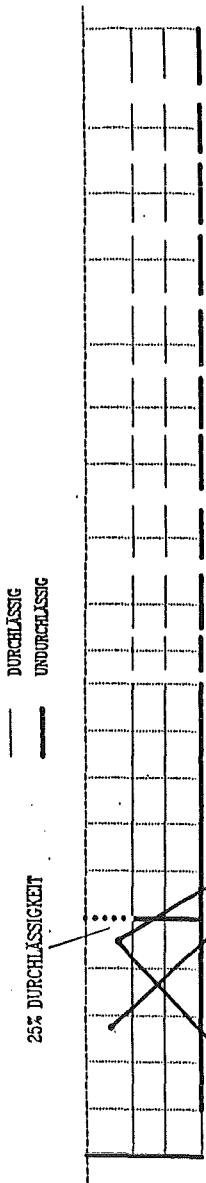


Abb. 43.4 Temperaturverlauf der Schmelze in der Zelle (2,2,6)

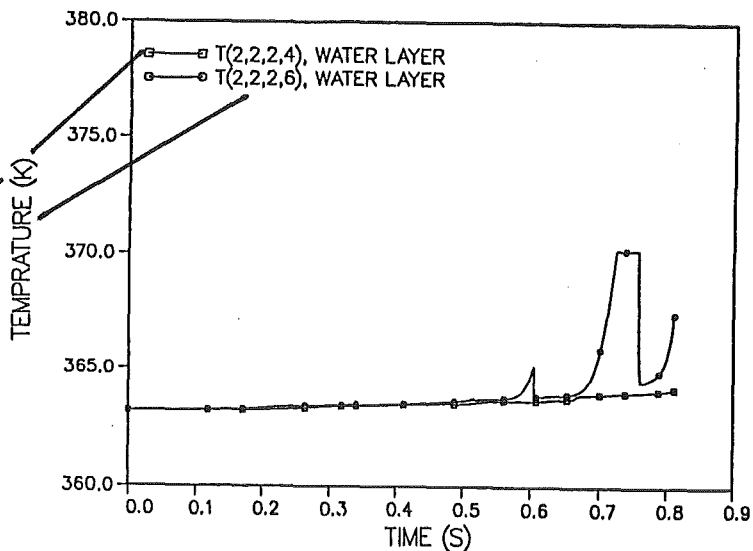


Abb. 43.5 Temp. des Wassers in den Zellen (2,2,4) u. (2,2,6)

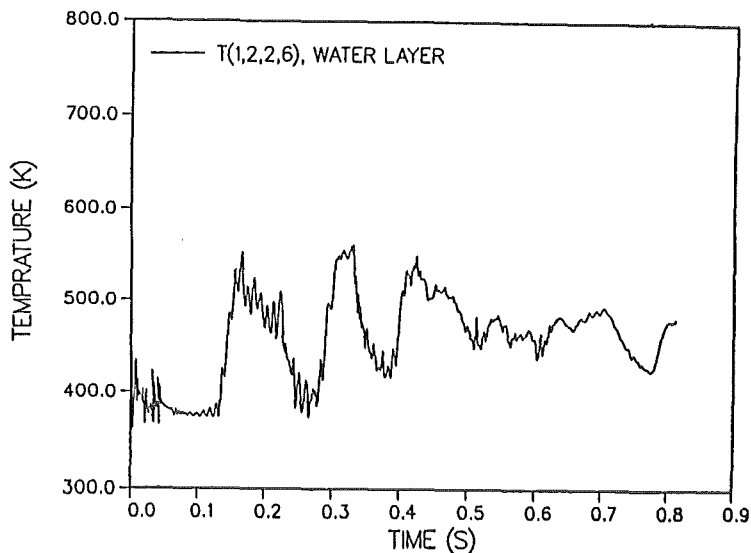
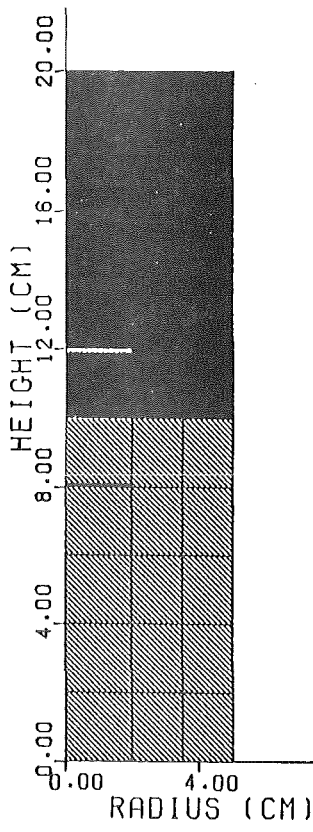
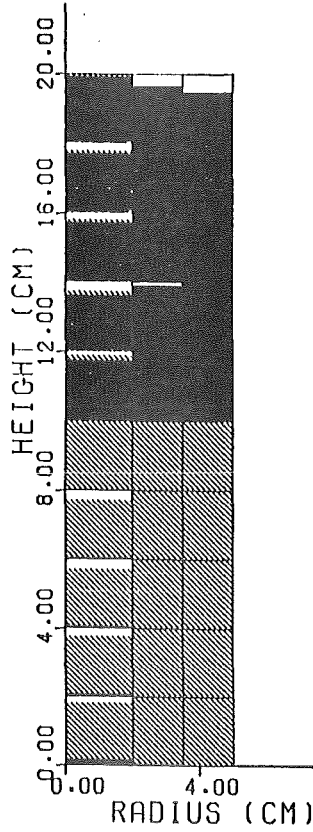


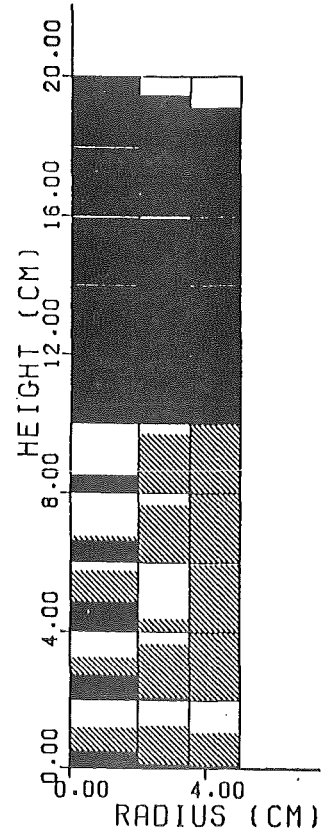
Abb. 43.6 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)



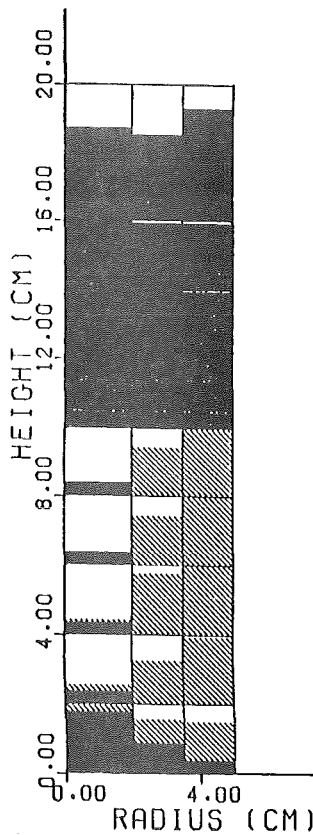
TIME = 0.0222 S



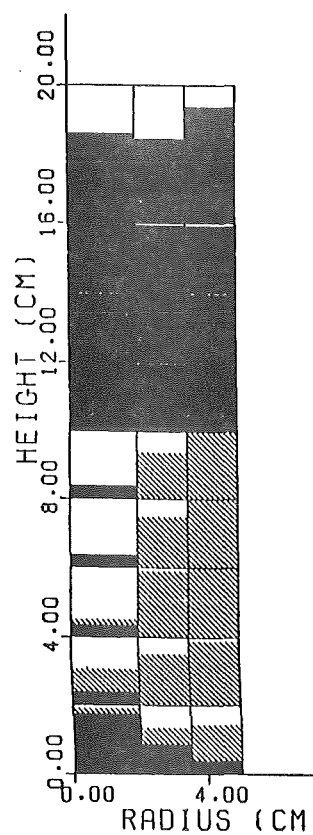
TIME = 0.1762 S



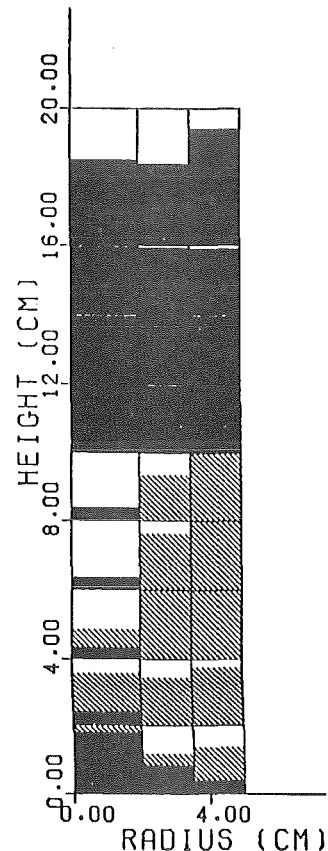
TIME = 0.4017 S



TIME = 0.5073 S



TIME = 0.5107 S



TIME = 0.5128 S

Rechnung M03R02

Abb. 44 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

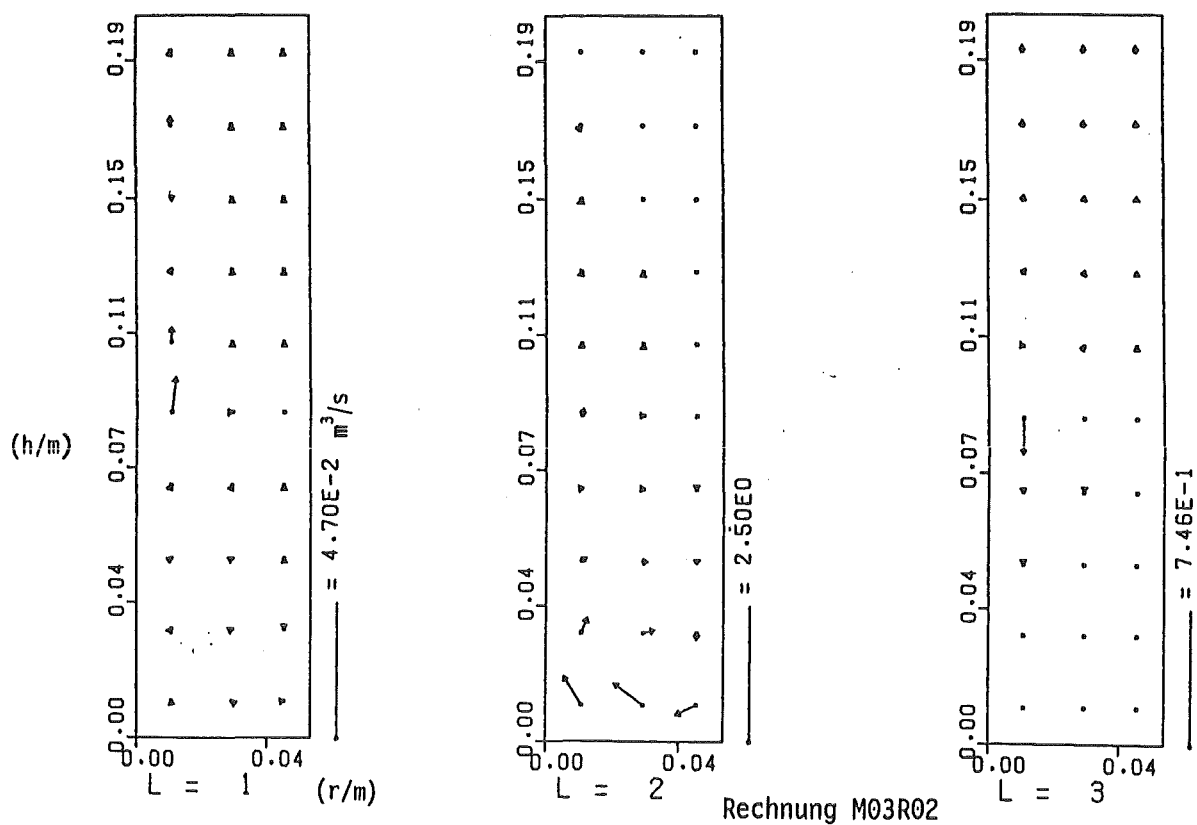


Abb. 45.1 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,022$  s in der Geometrie der Abb. 13

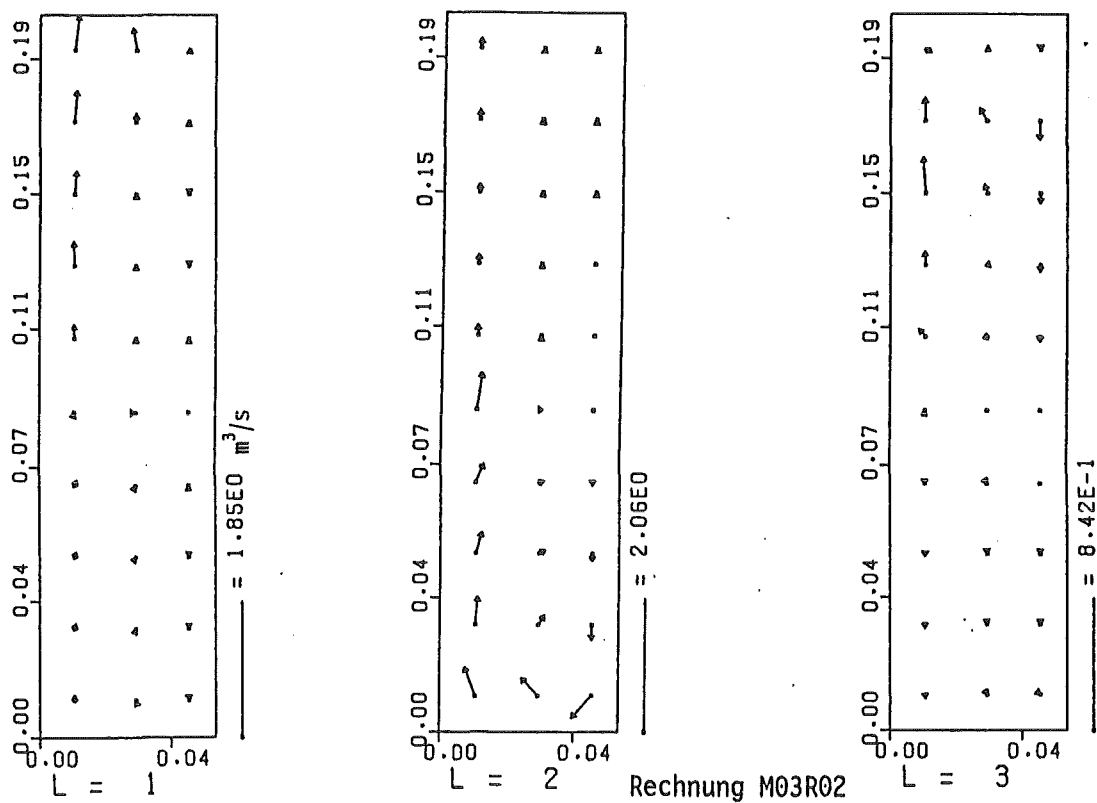


Abb. 45.2 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,175$  s in der Geometrie der Abb. 13

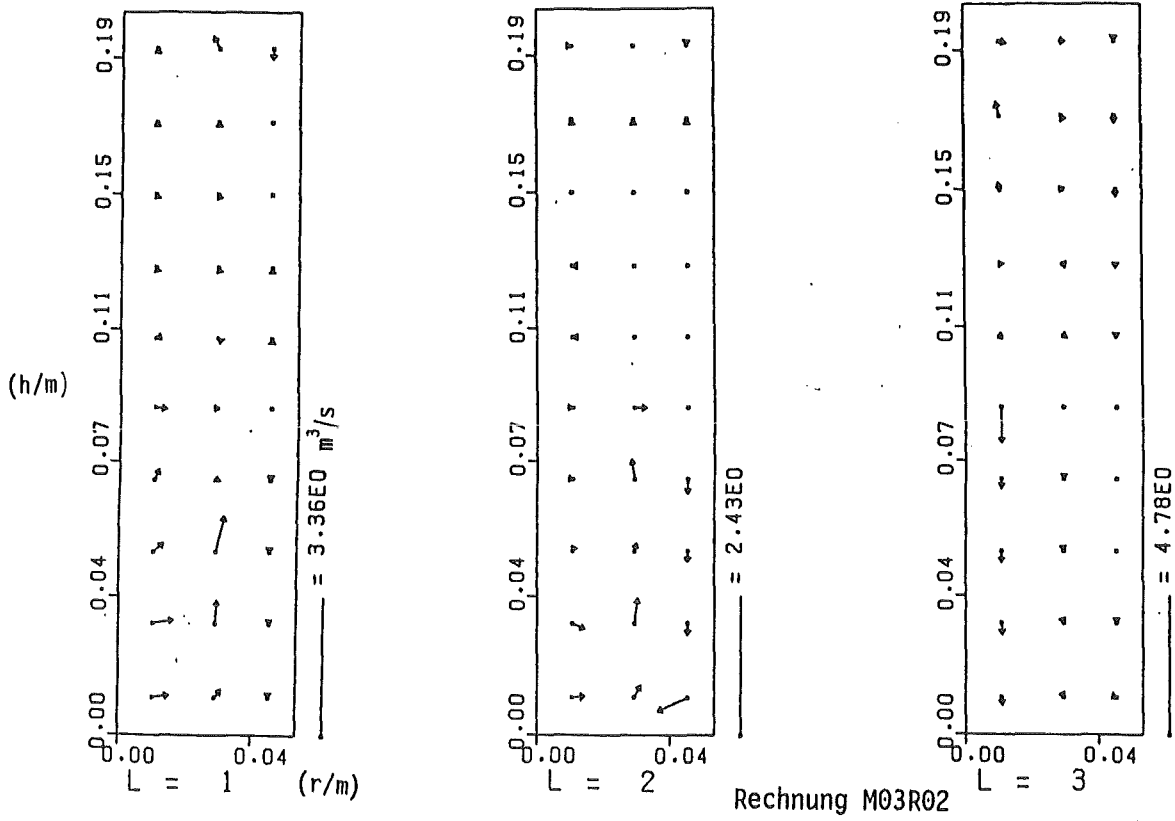


Abb. 45.3 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,401$  s in der Geometrie der Abb. 13

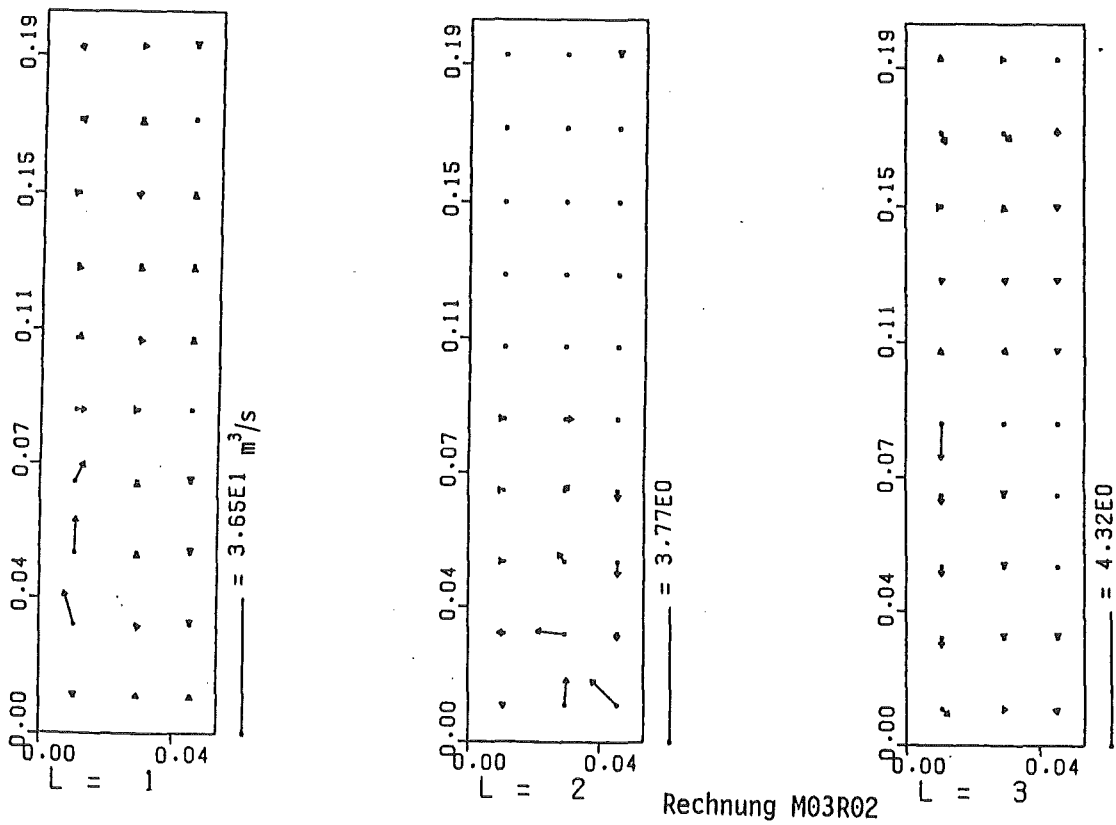


Abb. 45.4 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,507$  s in der Geometrie der Abb. 13



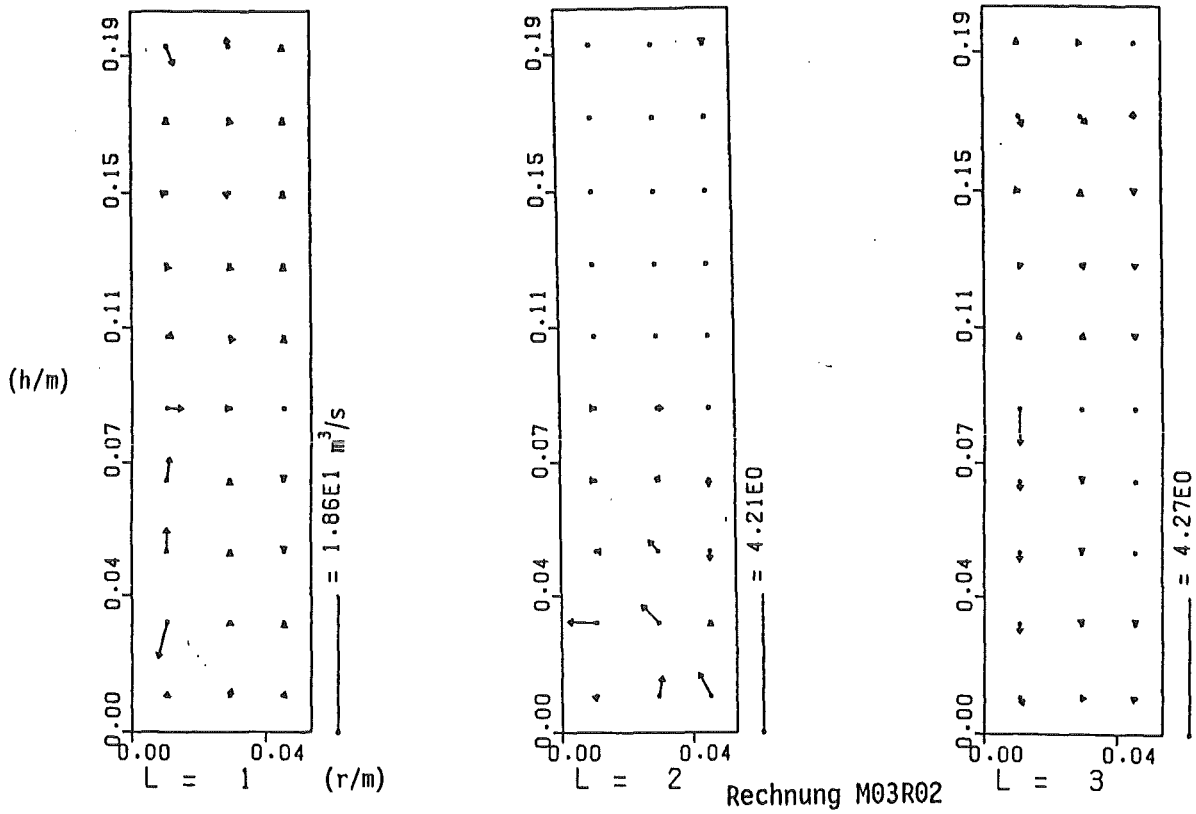


Abb. 45.5 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,509 \text{ s}$  in der Geometrie der Abb. 13

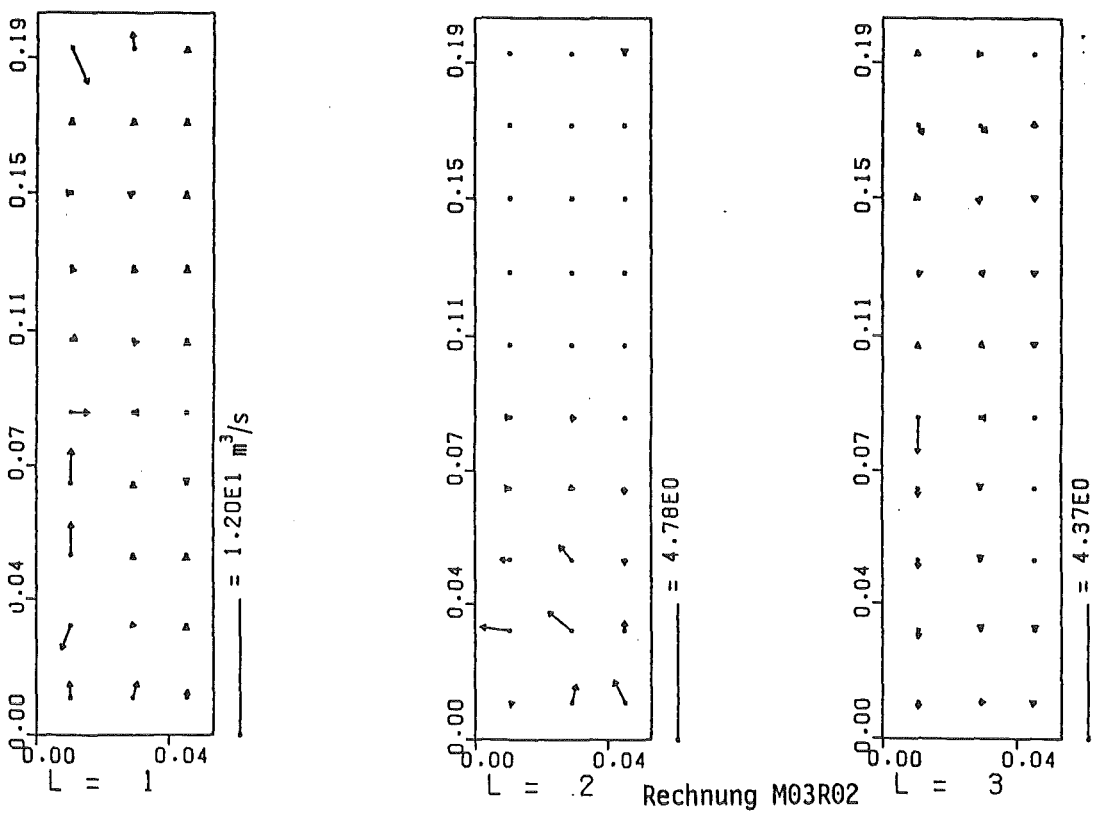


Abb. 45.6 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,511 \text{ s}$  in der Geometrie der Abb. 13

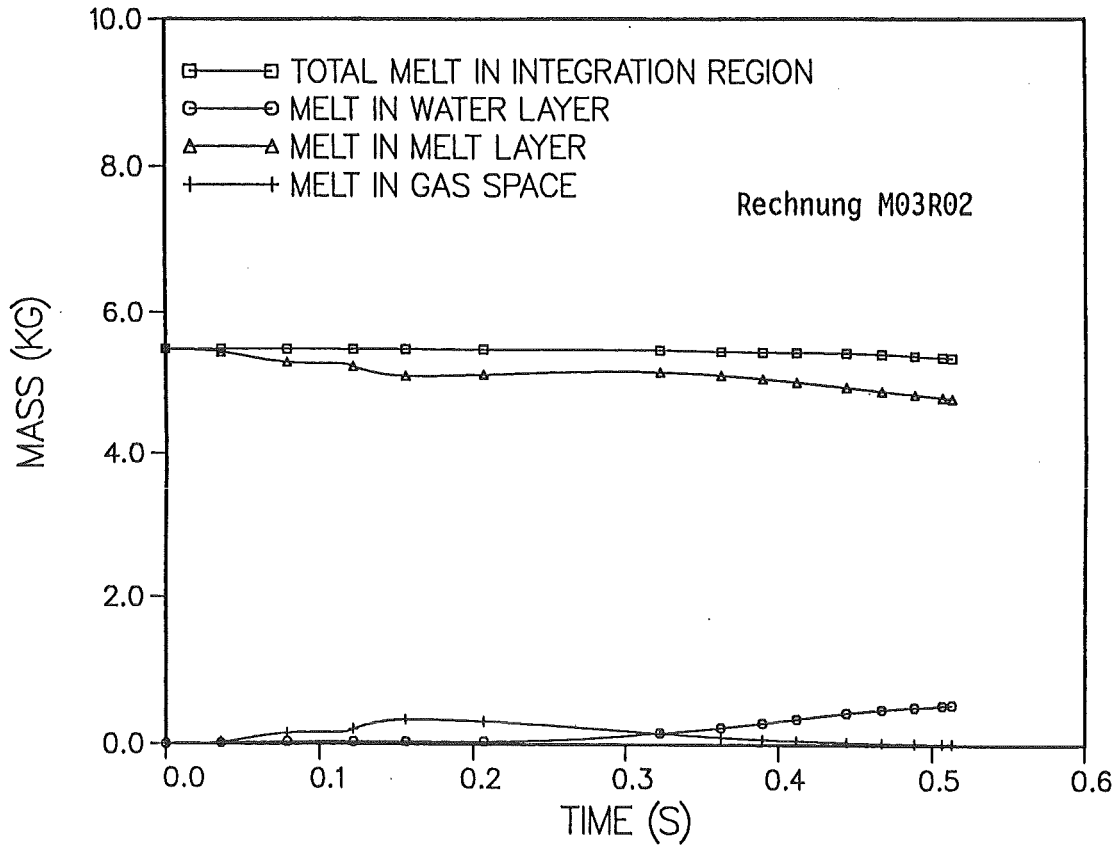


Abb. 46 Schmelzenmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

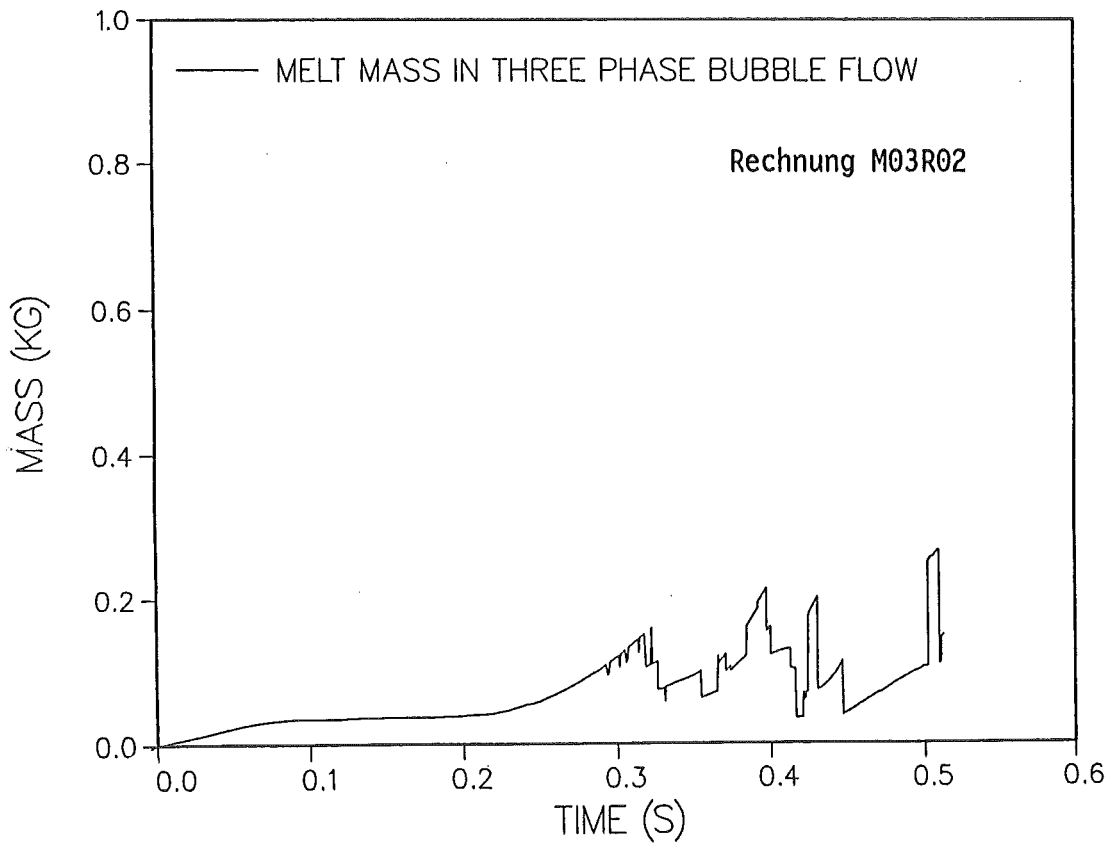


Abb. 47 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

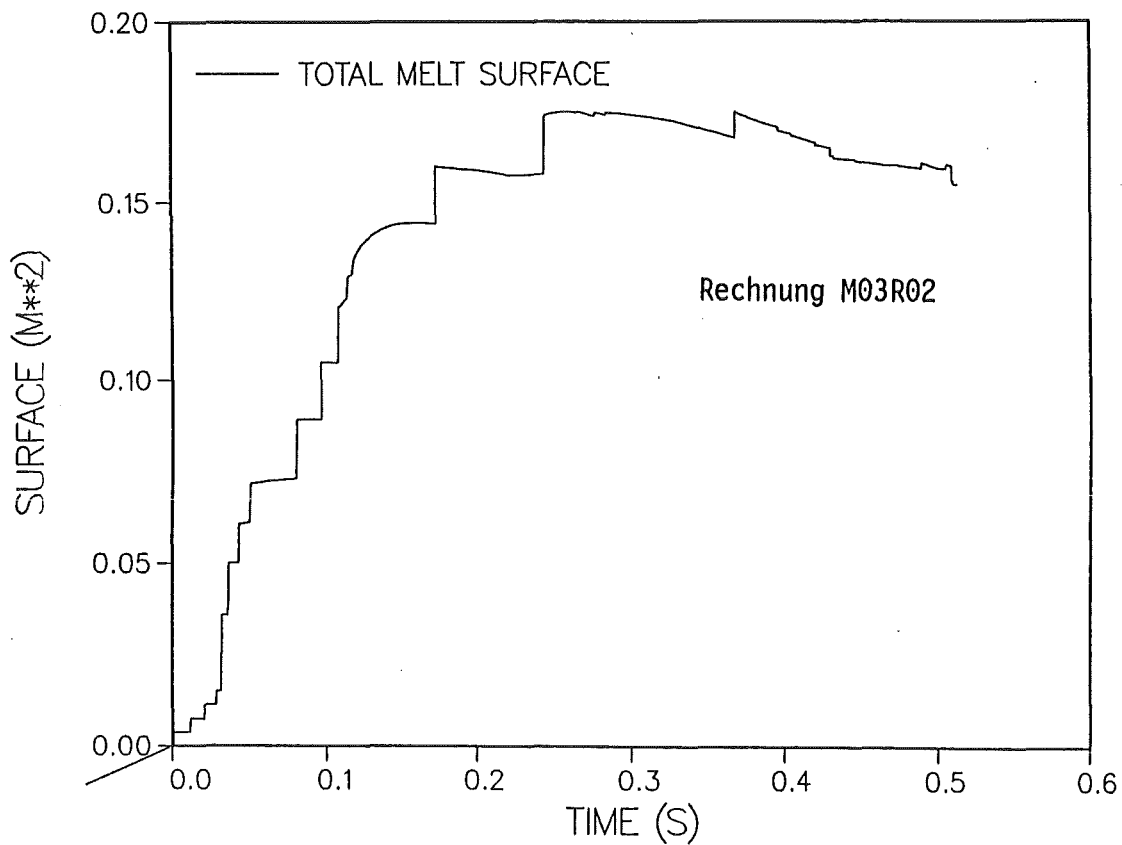


Abb. 48 Oberflächenvergrößerung der Schmelze

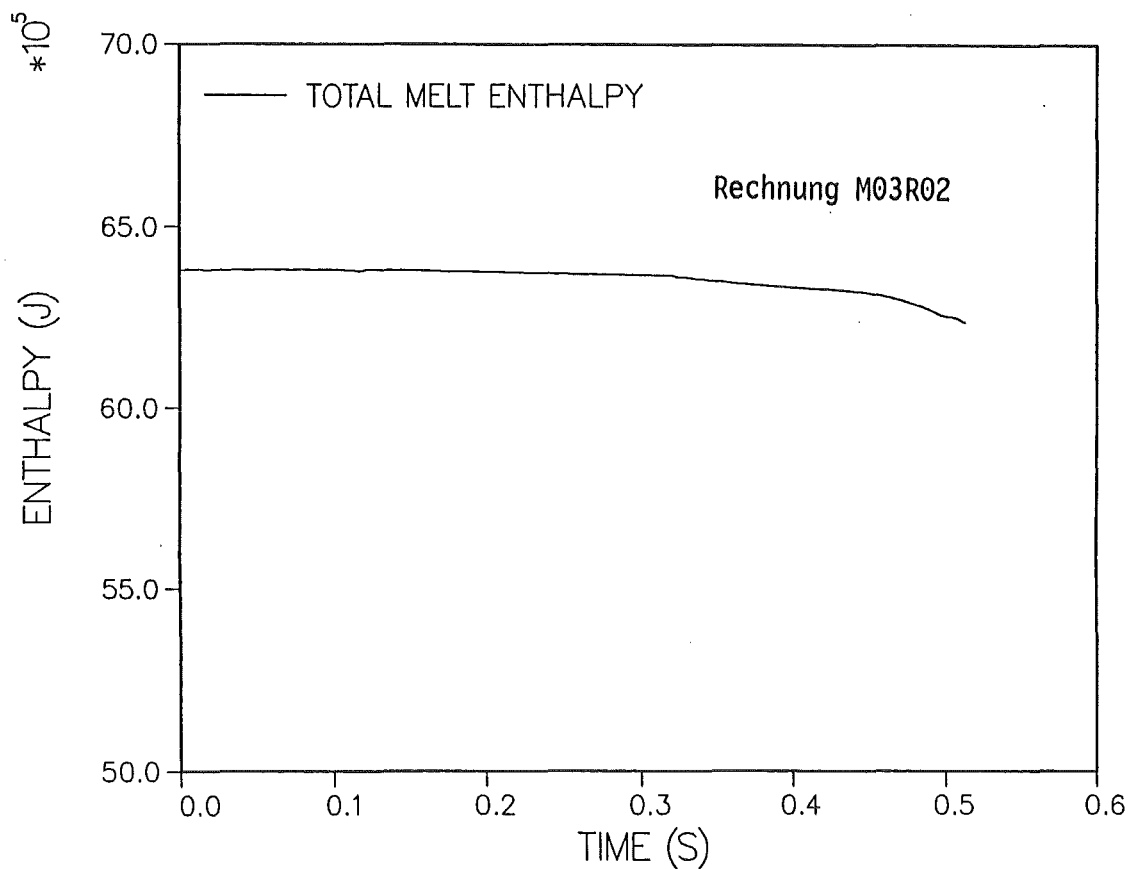


Abb. 49 Enthalpieverlauf der Schmelze

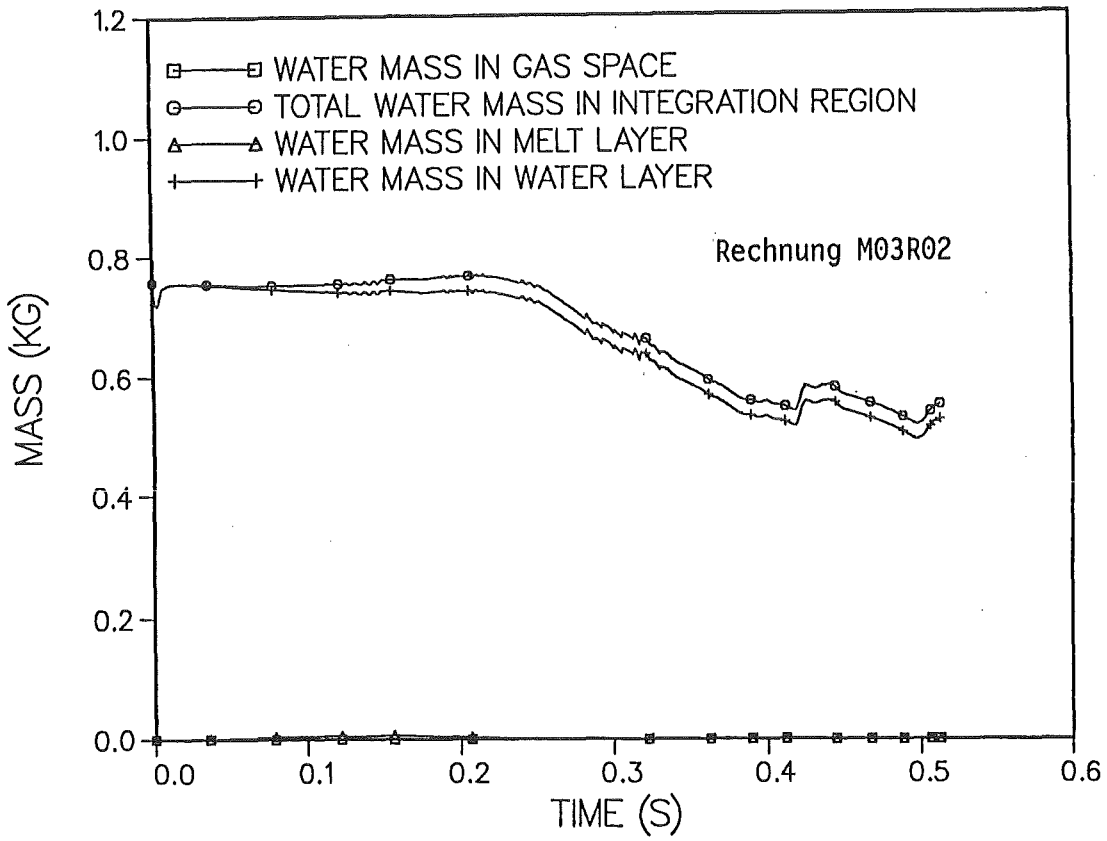


Abb. 50 Wassermenge in den verschiedenen Schichten

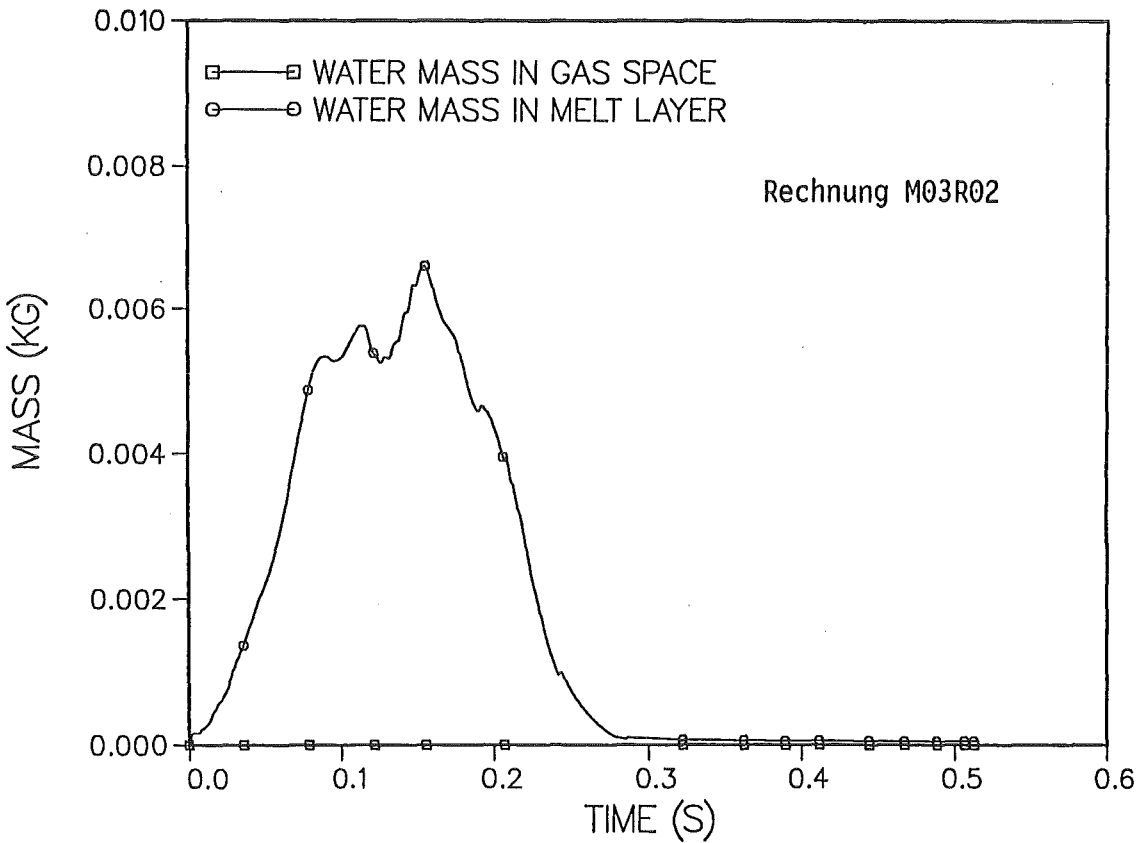


Abb. 51 Wassermenge in Luft- und Schmelzschicht

Rechnung M03R02

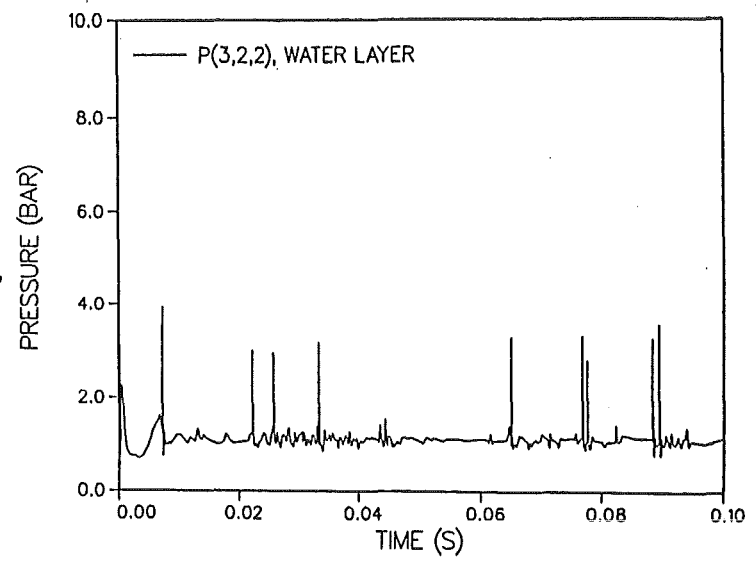
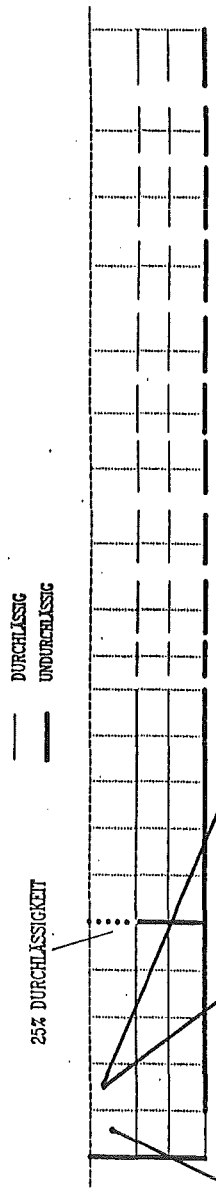


Abb. 52.1 Druckverlauf in der Zelle (3,2,2) im Wasserbehälter

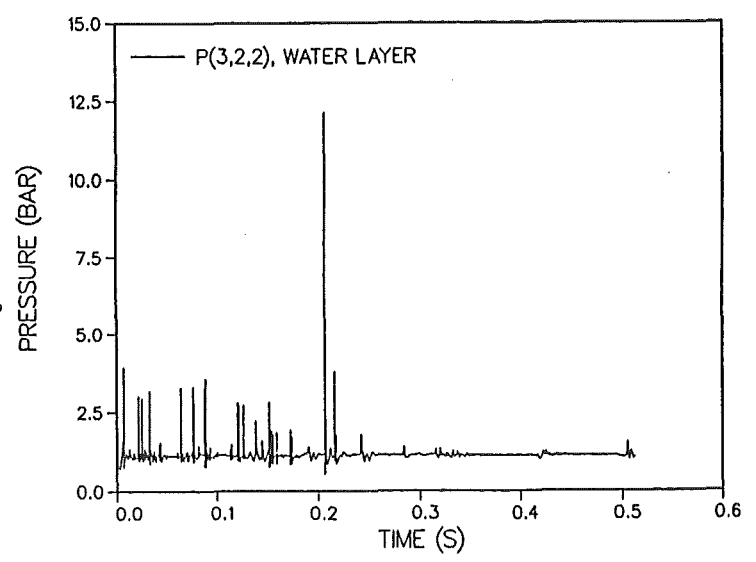


Abb. 52.2 Druckverlauf in der Zelle (3,2,2) im Wasserbehälter

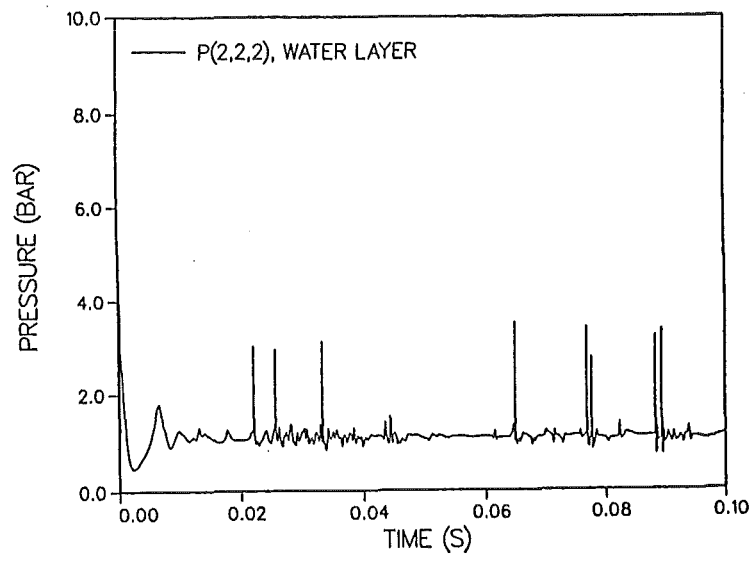


Abb. 52.3 Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M03R02

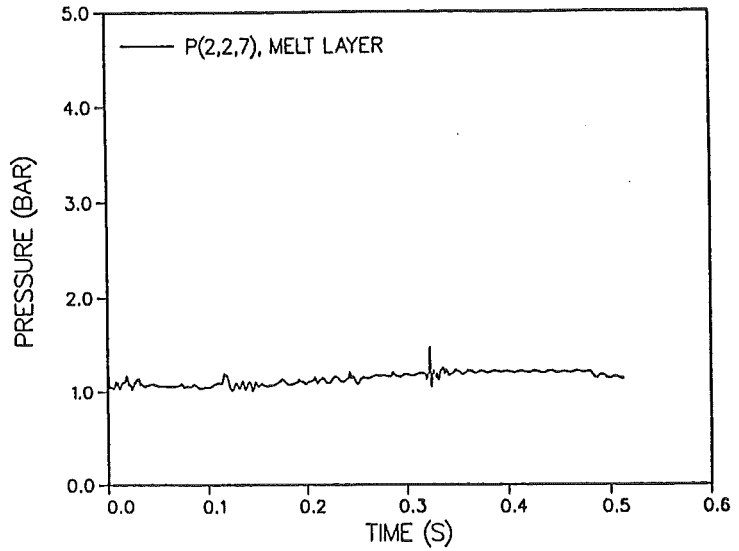
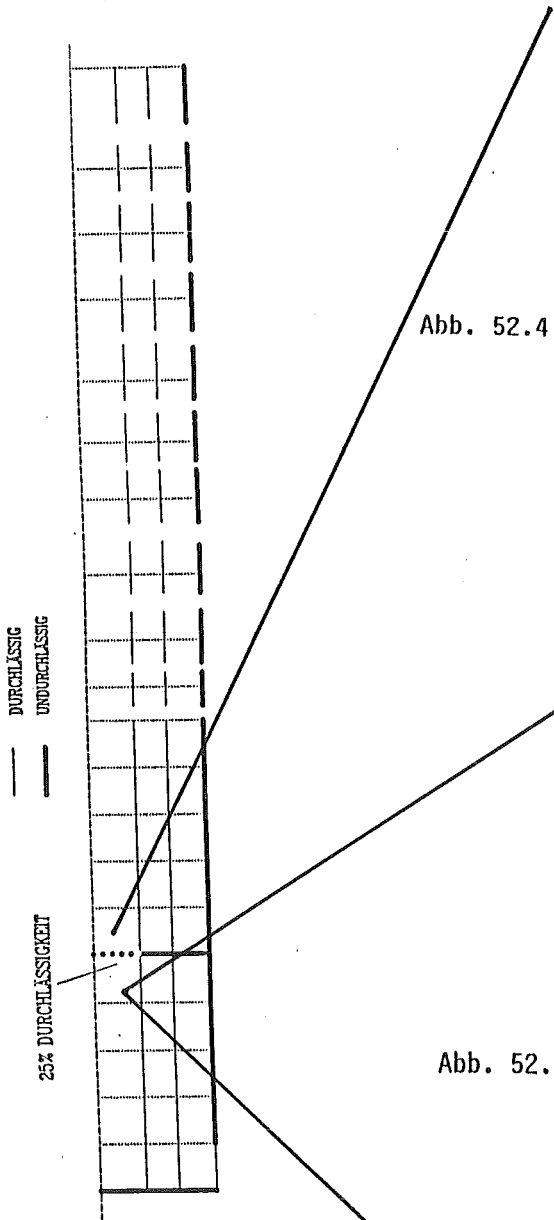


Abb. 52.4 Druckverlauf in der Zelle (2,2,7) im Schmelzenbehälter

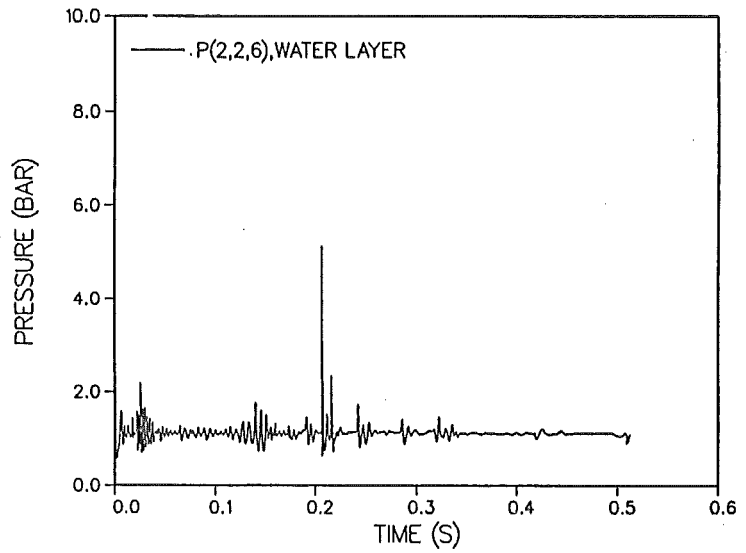


Abb. 52.5 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

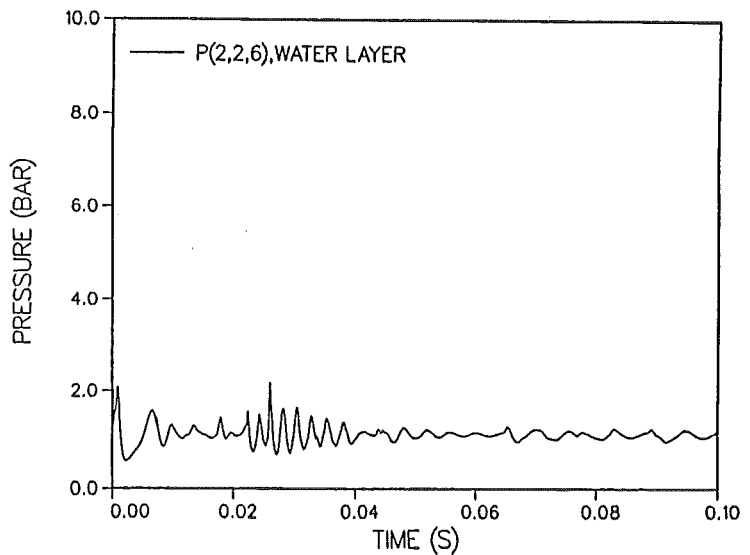


Abb. 52.6 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

Rechnung M03R02

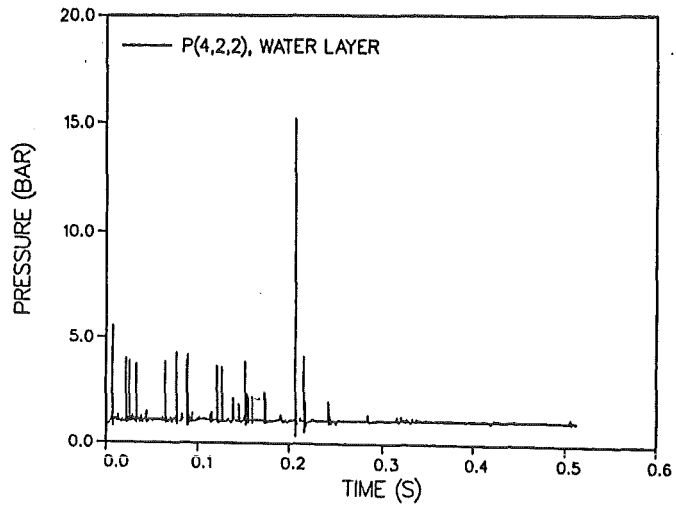
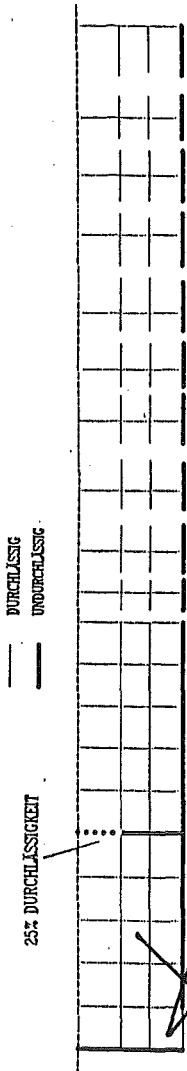


Abb. 52.7 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

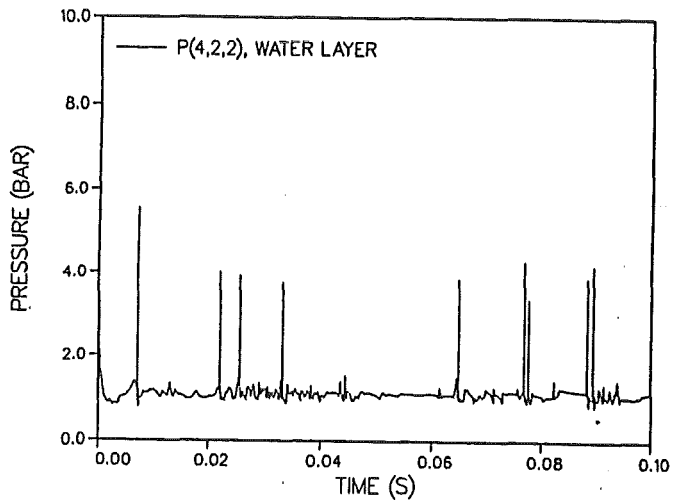


Abb. 52.8 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

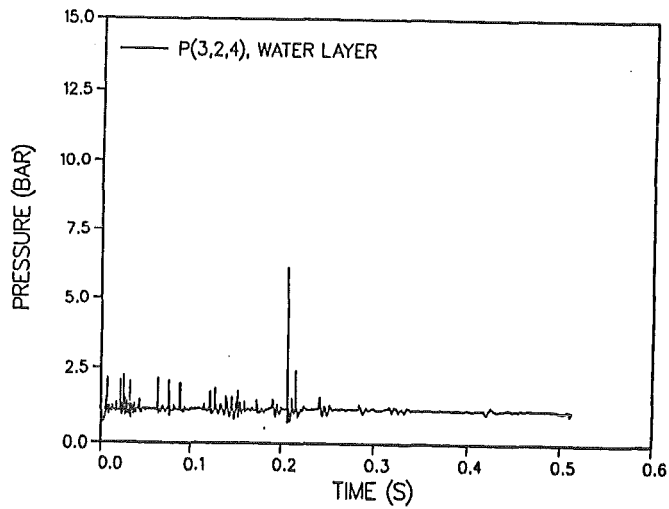


Abb. 52.9 Druckverlauf in der Zelle (3,2,4) im Wasserbehälter

Rechnung M03R02

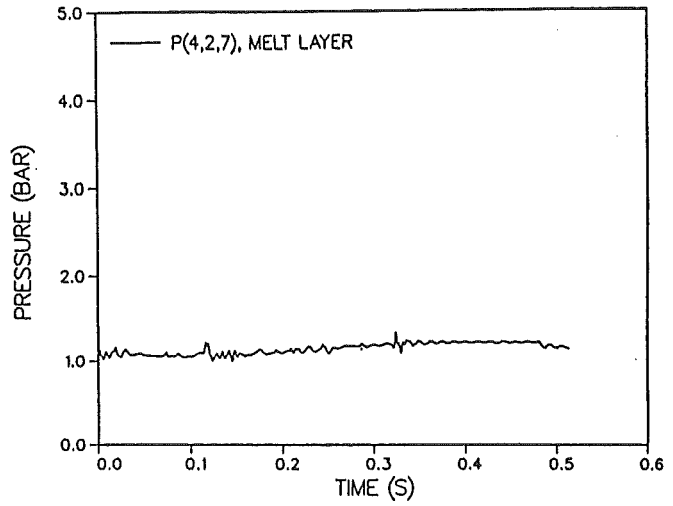
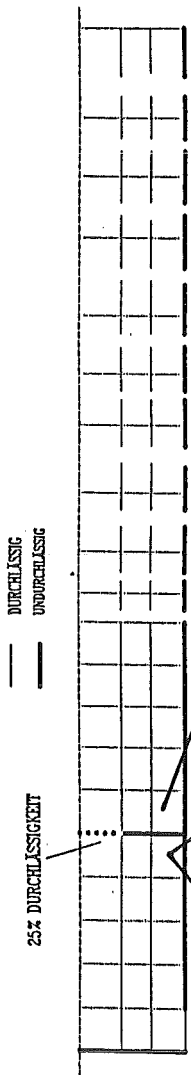


Abb. 52.10 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter

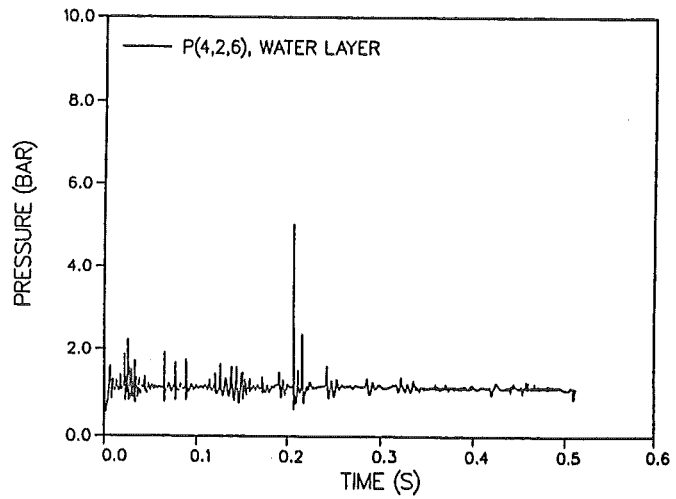


Abb. 52.11 Druckverlauf in der Zelle (4,2,6) im Wasserbehälter

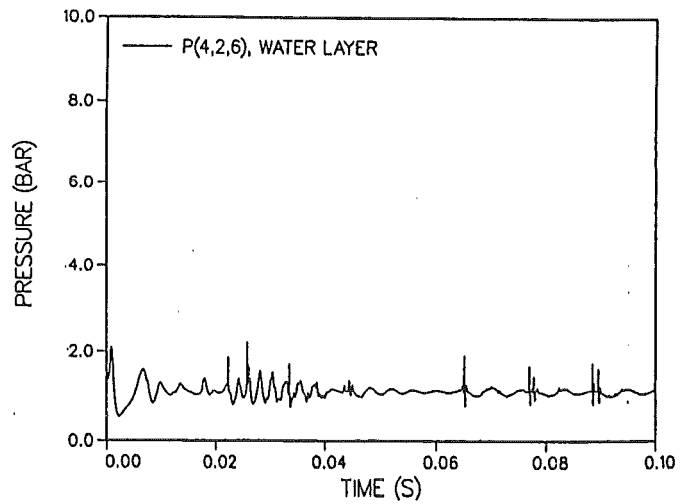


Abb. 52.12 Druckverlauf in der Zelle (4,2,6) im Wasserbehälter



Rechnung M03R02

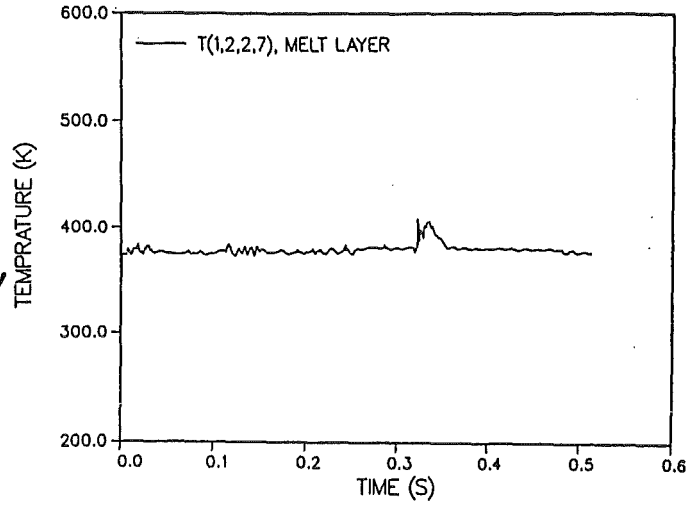
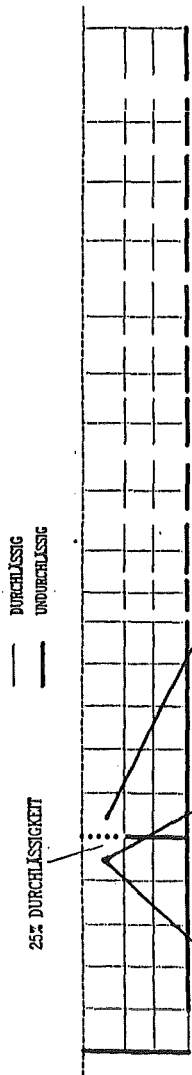


Abb. 53.1 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,7)

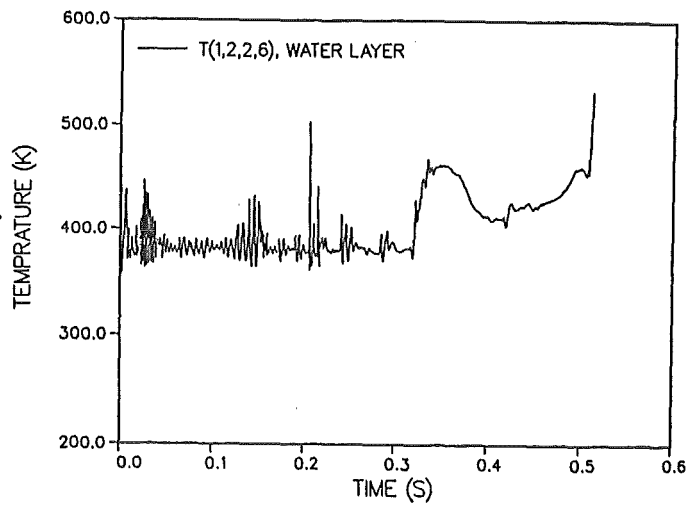


Abb. 53.2 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)

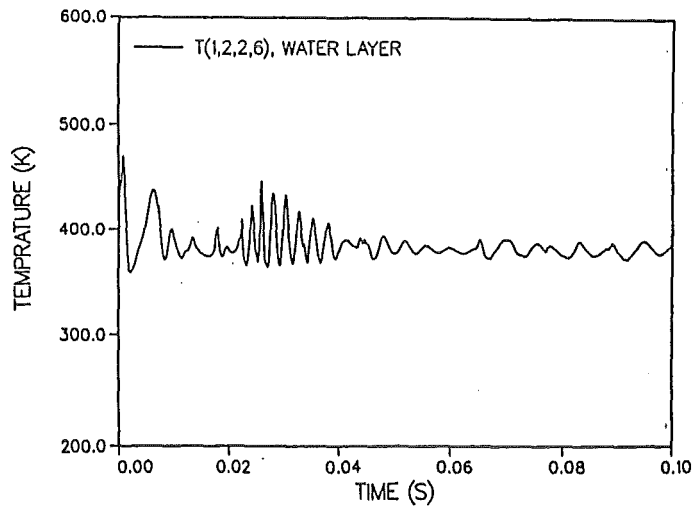


Abb. 53.3 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)

Rechnung M03R02

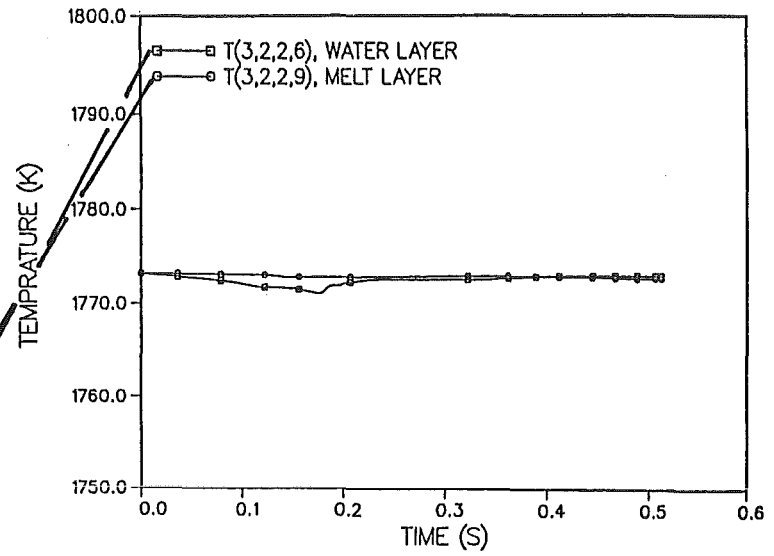
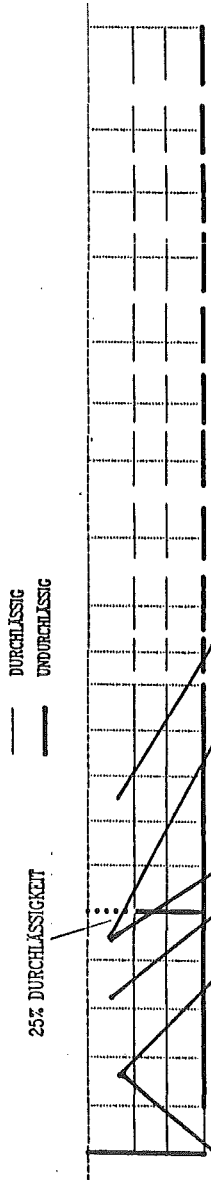


Abb. 53.4 Temp. der Schmelze in den Zellen (2,2,6) u. (2,2,9)

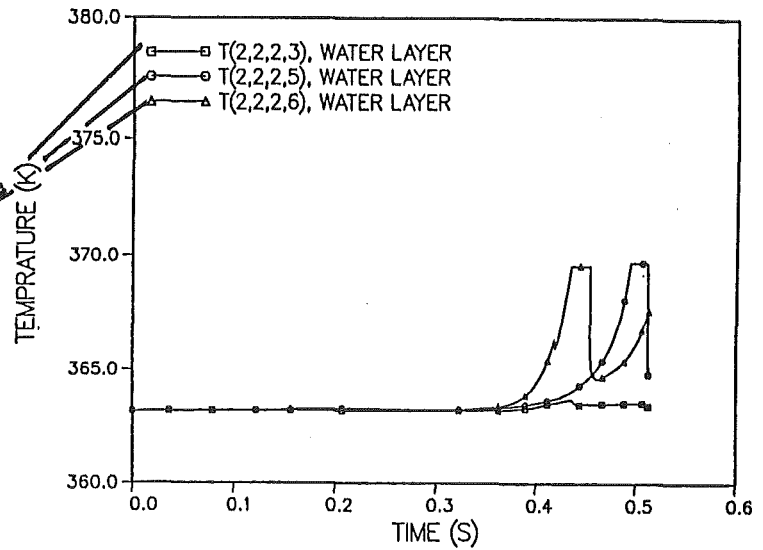


Abb. 53.5 Temp. des Wassers in den Zellen (2,2,3), (2,2,5) u. (2,2,6)

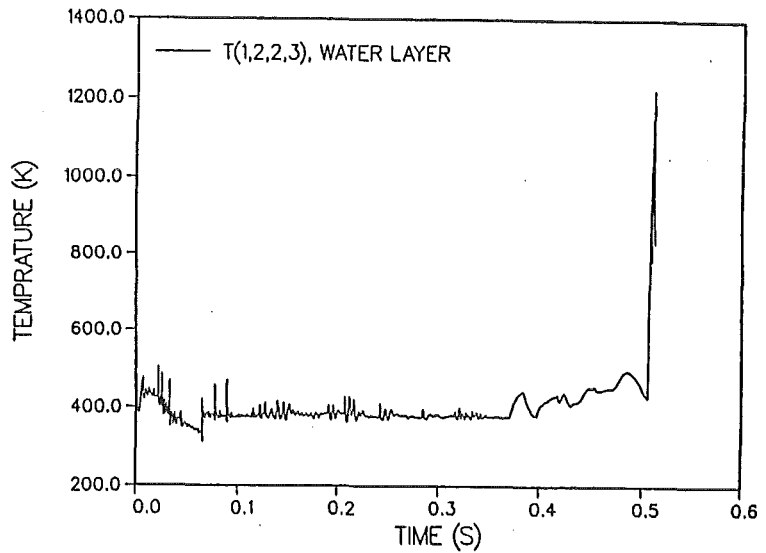
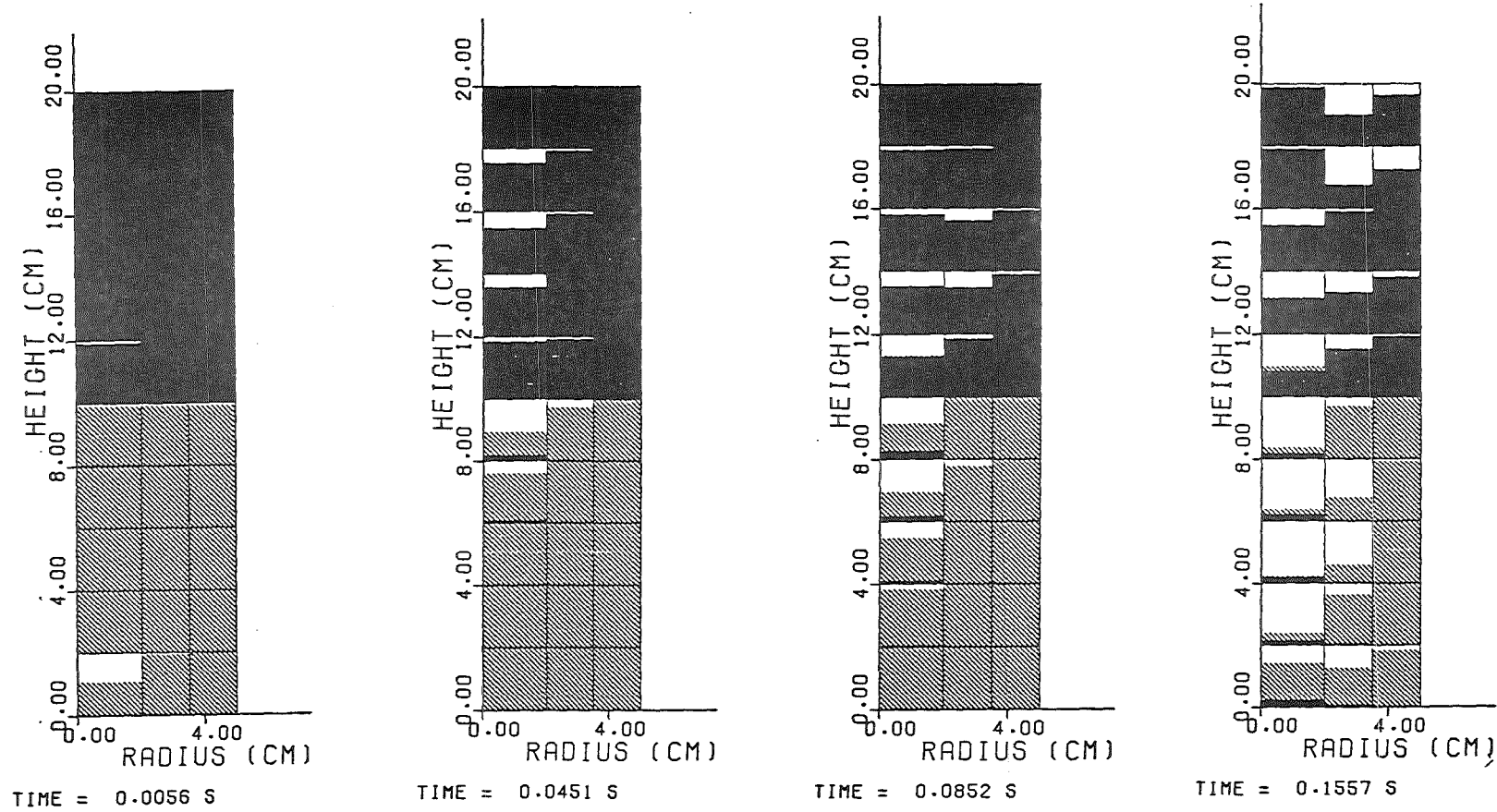
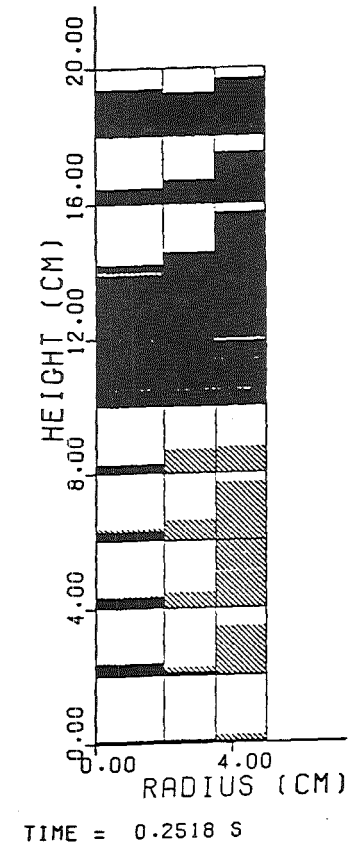
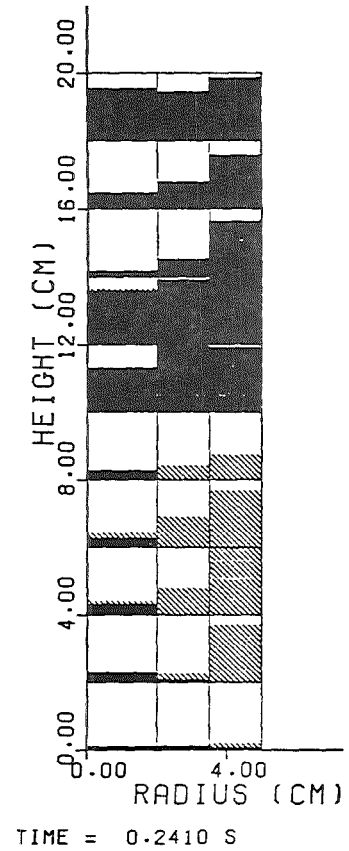
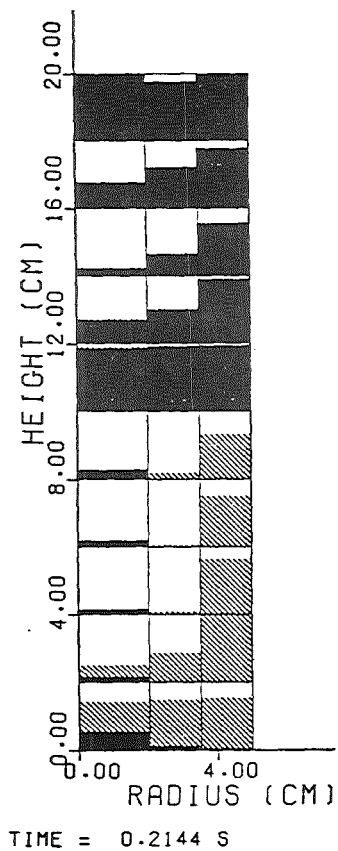


Abb. 53.6 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,3)



Rechnung M03R03

Abb. 54.1 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13



Rechnung M03R03

Abb. 54.2 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

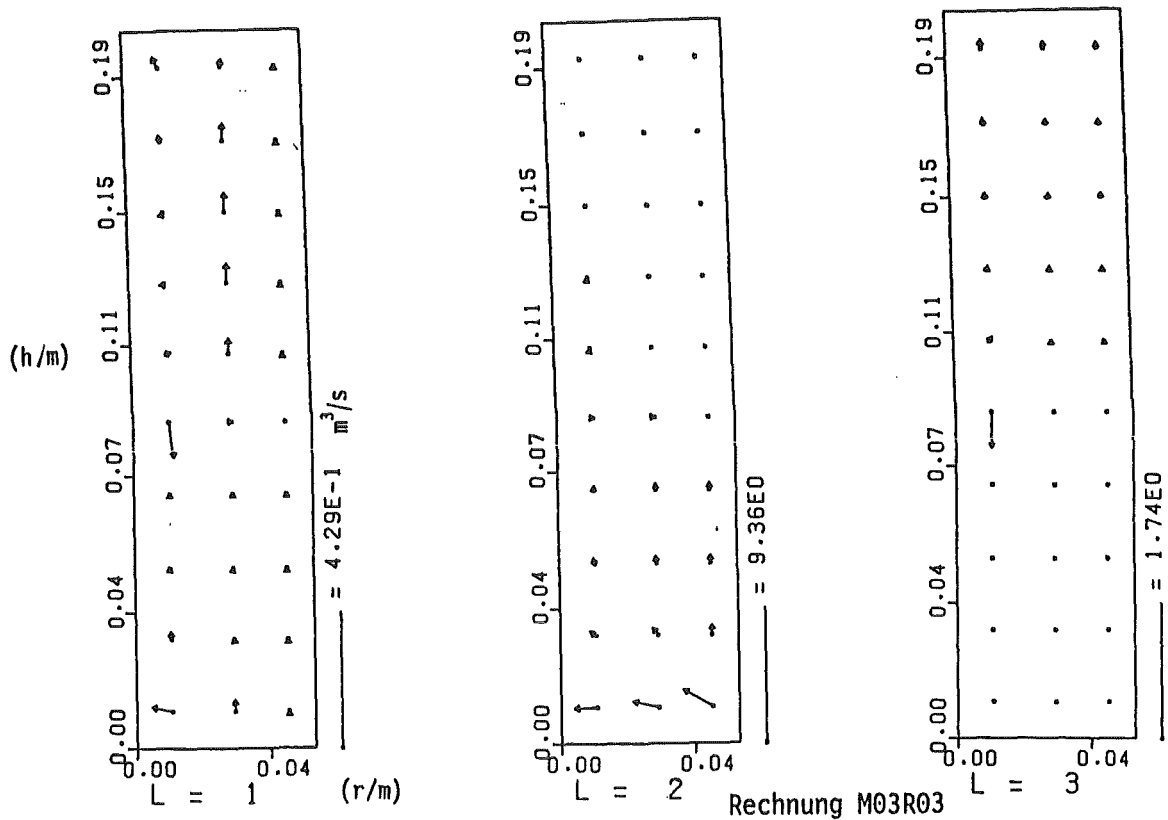


Abb. 55.1 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,006$  s in der Geometrie der Abb. 13

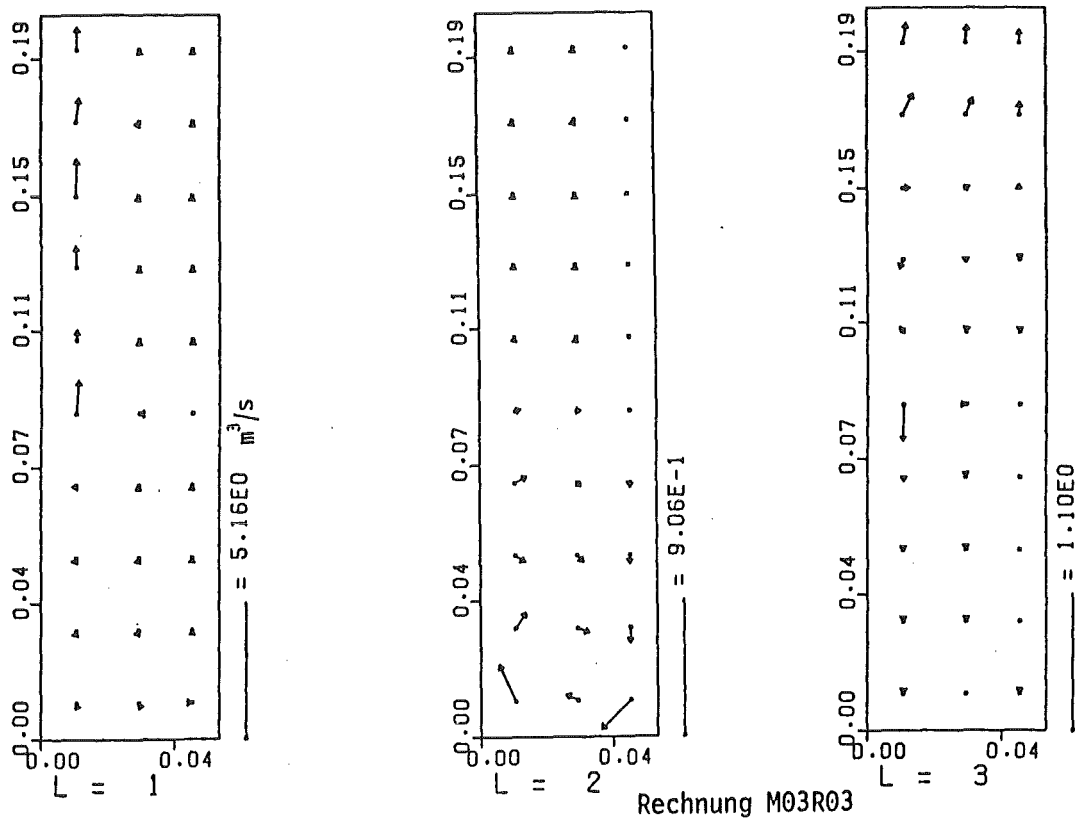


Abb. 55.2 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,045$  s in der Geometrie der Abb. 13

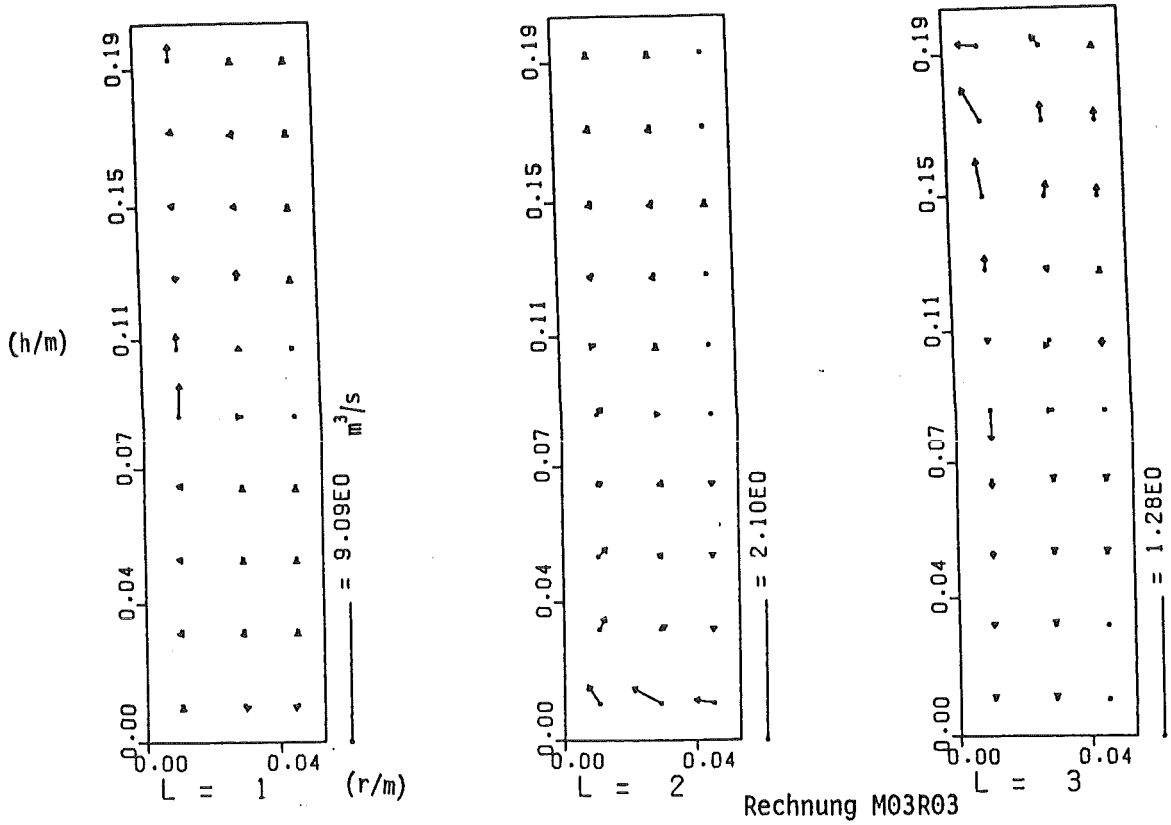


Abb. 55.3 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,085$  s in der Geometrie der Abb. 13

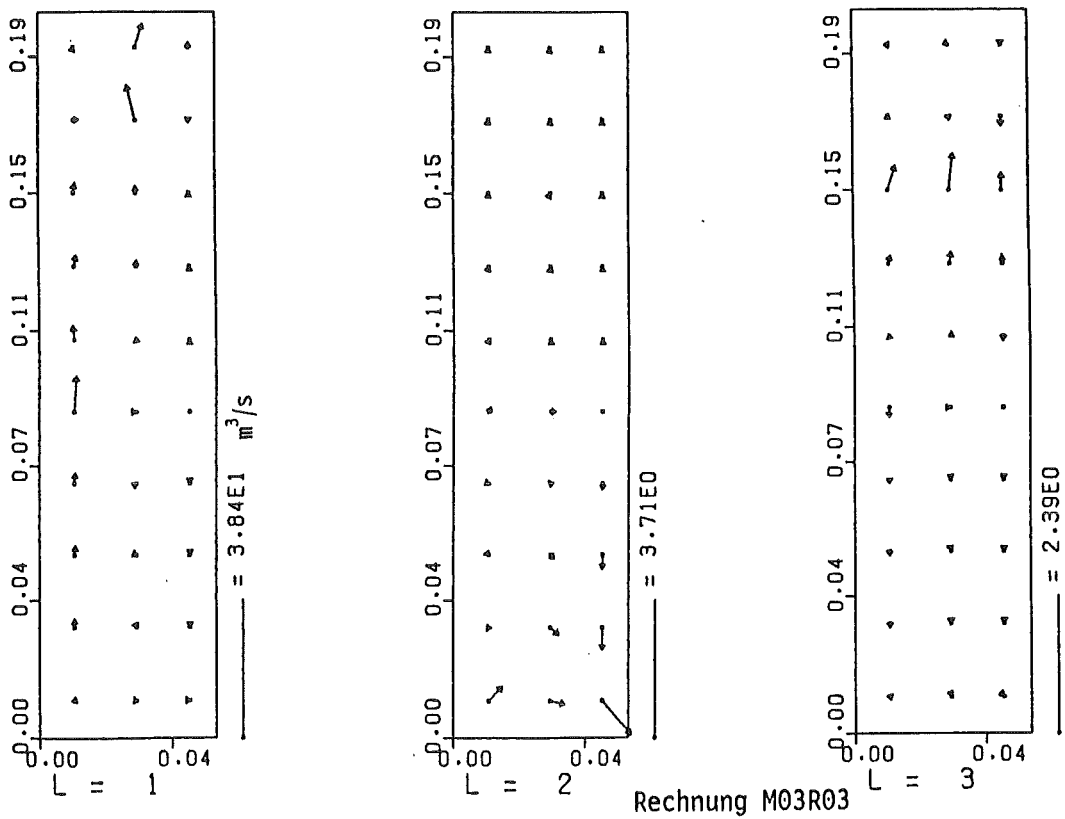


Abb. 55.4 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,156$  s in der Geometrie der Abb. 13

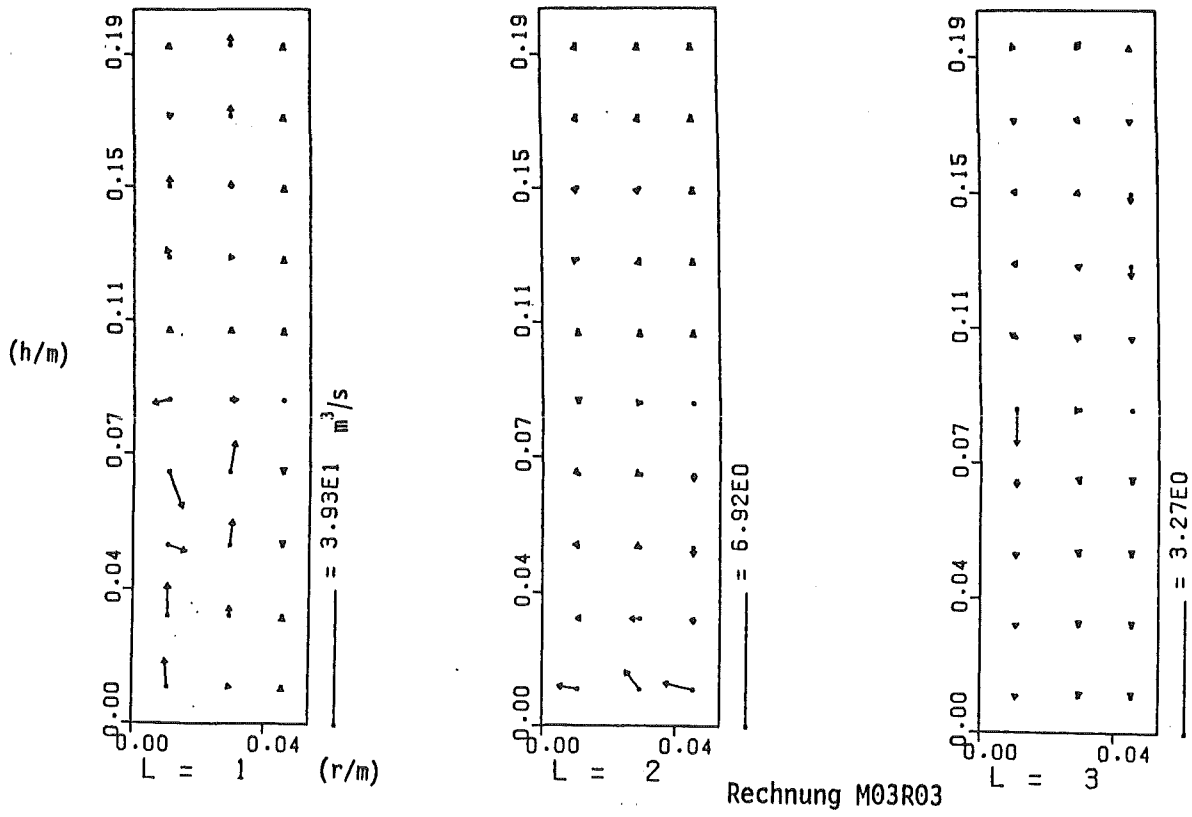


Abb. 55.5 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,214$  s in der Geometrie der Abb. 13

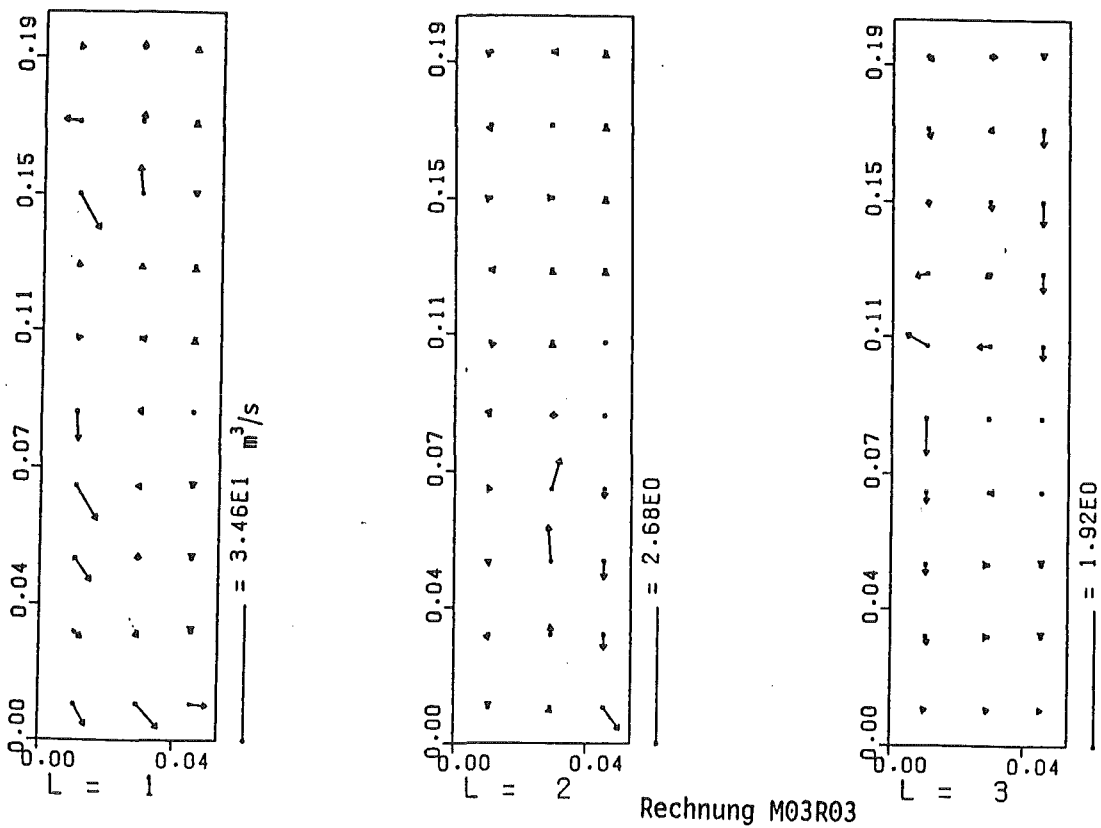


Abb. 55.6 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,241$  s in der Geometrie der Abb. 13

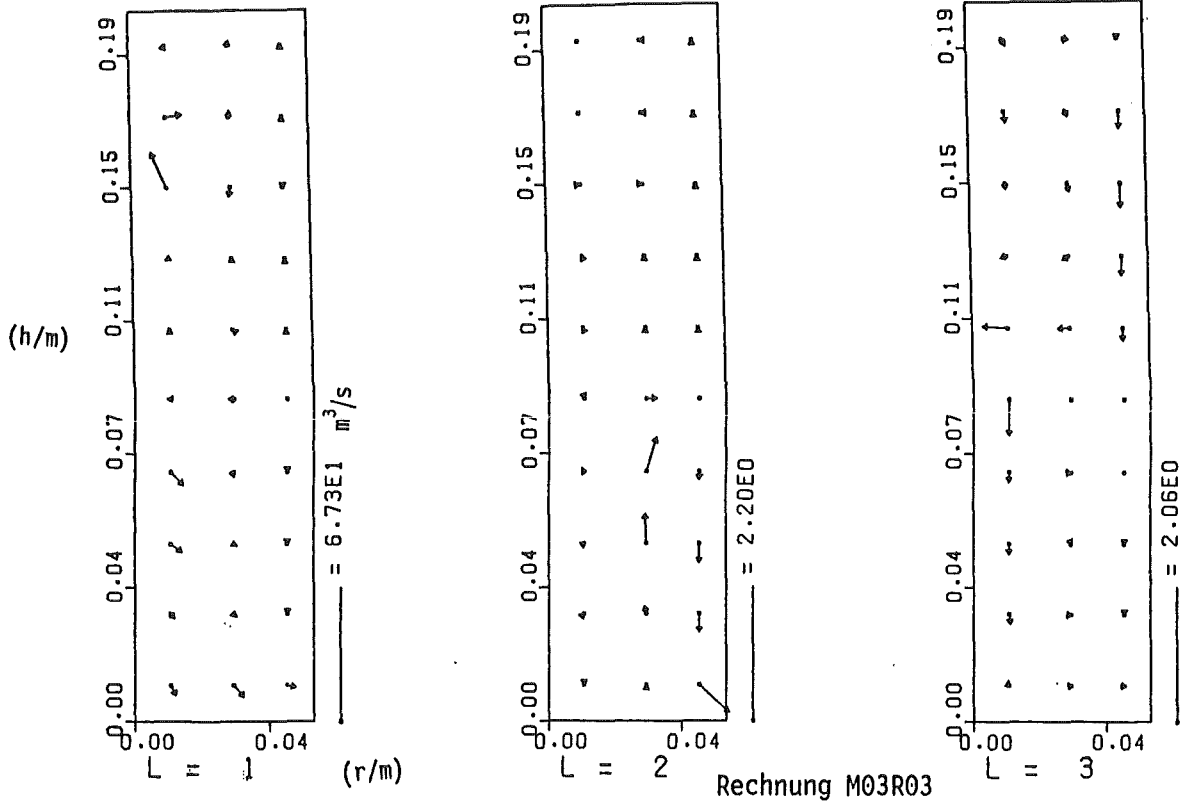


Abb. 55.7 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,247$  s in der Geometrie der Abb. 13

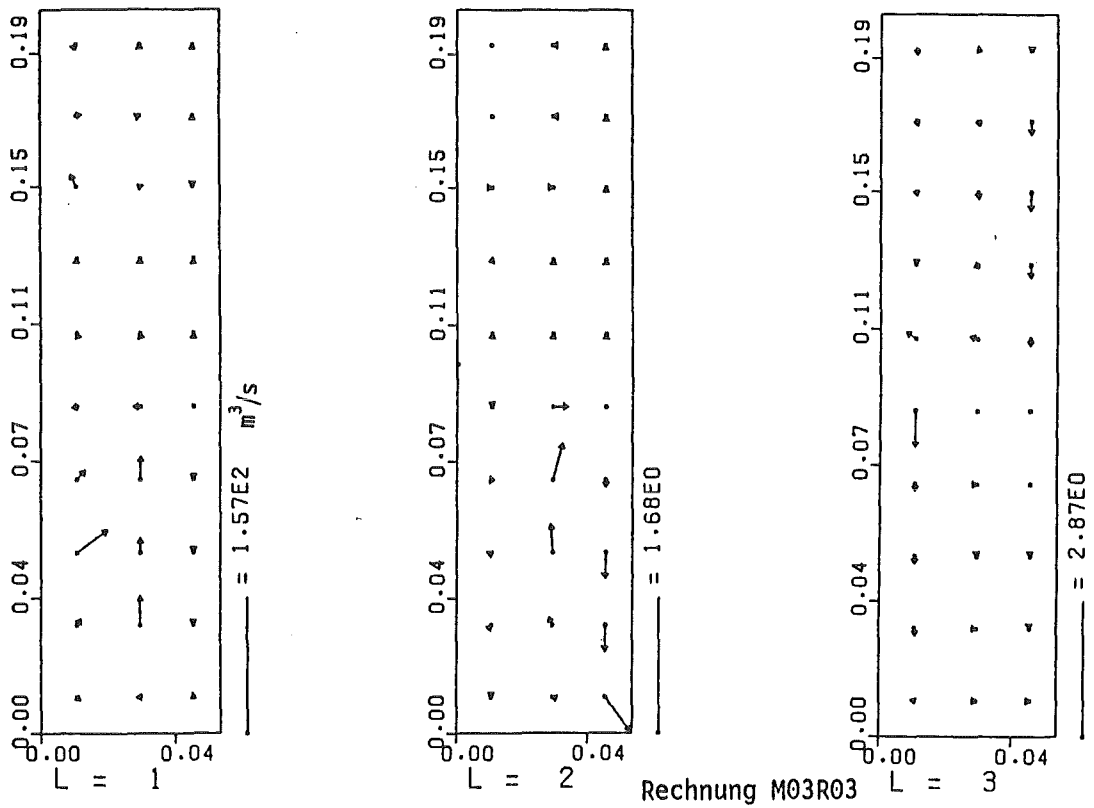


Abb. 55.8 Volumenströme: Dampf(L=1), Wasser(L=2), Schmelze (L=3)  $\tau = 0,251$  s in der Geometrie der Abb. 13



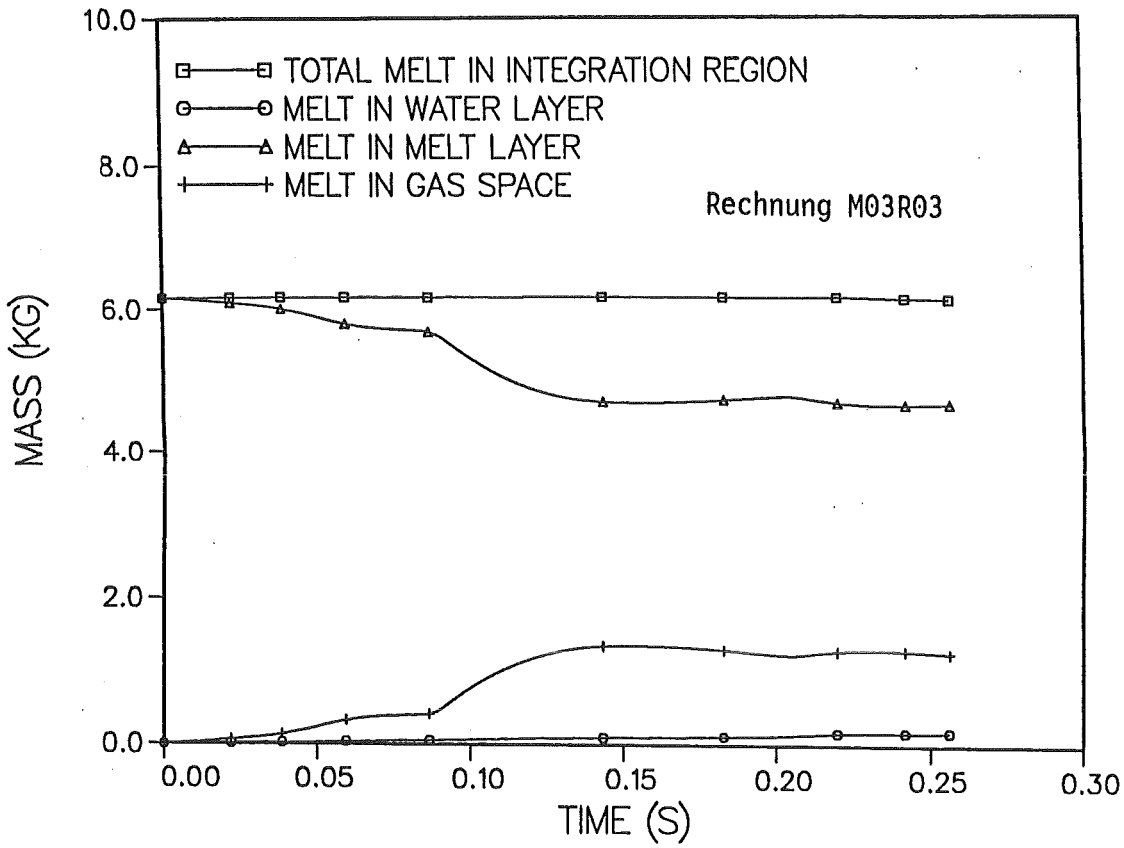


Abb. 56 Schmelzenmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

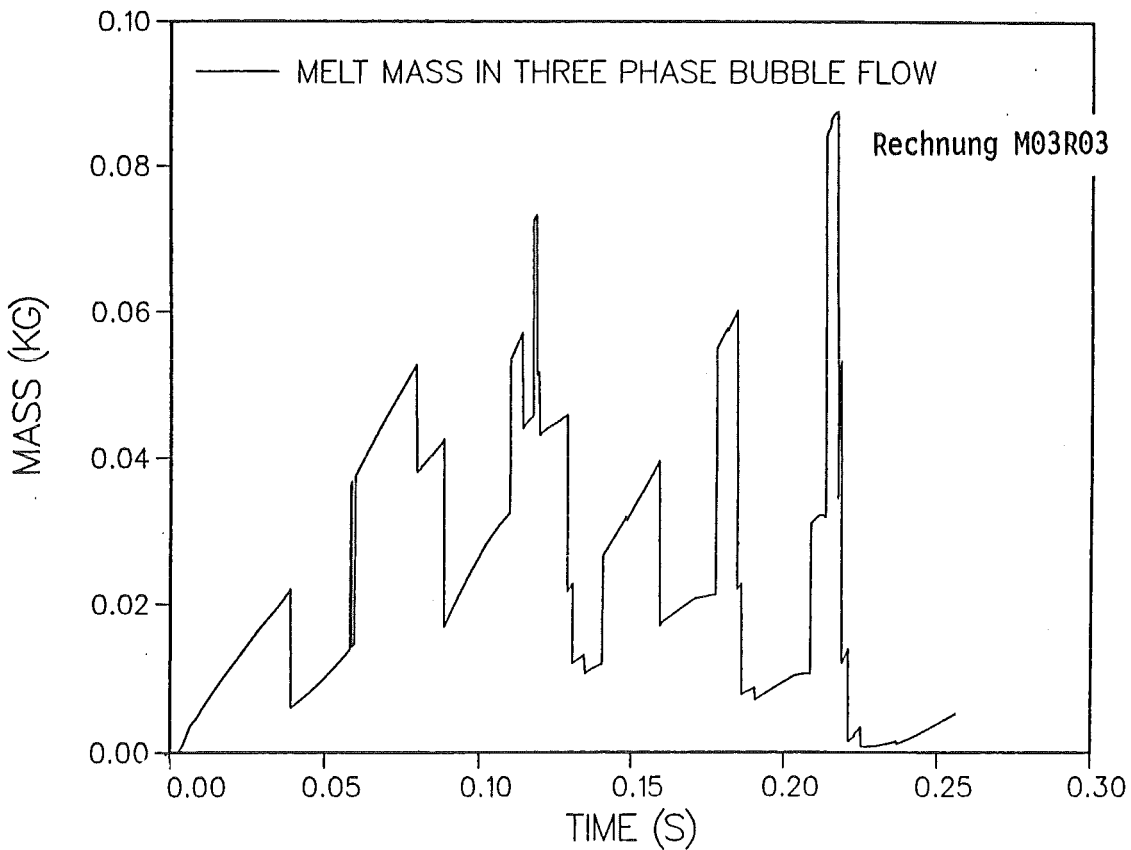


Abb. 57 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

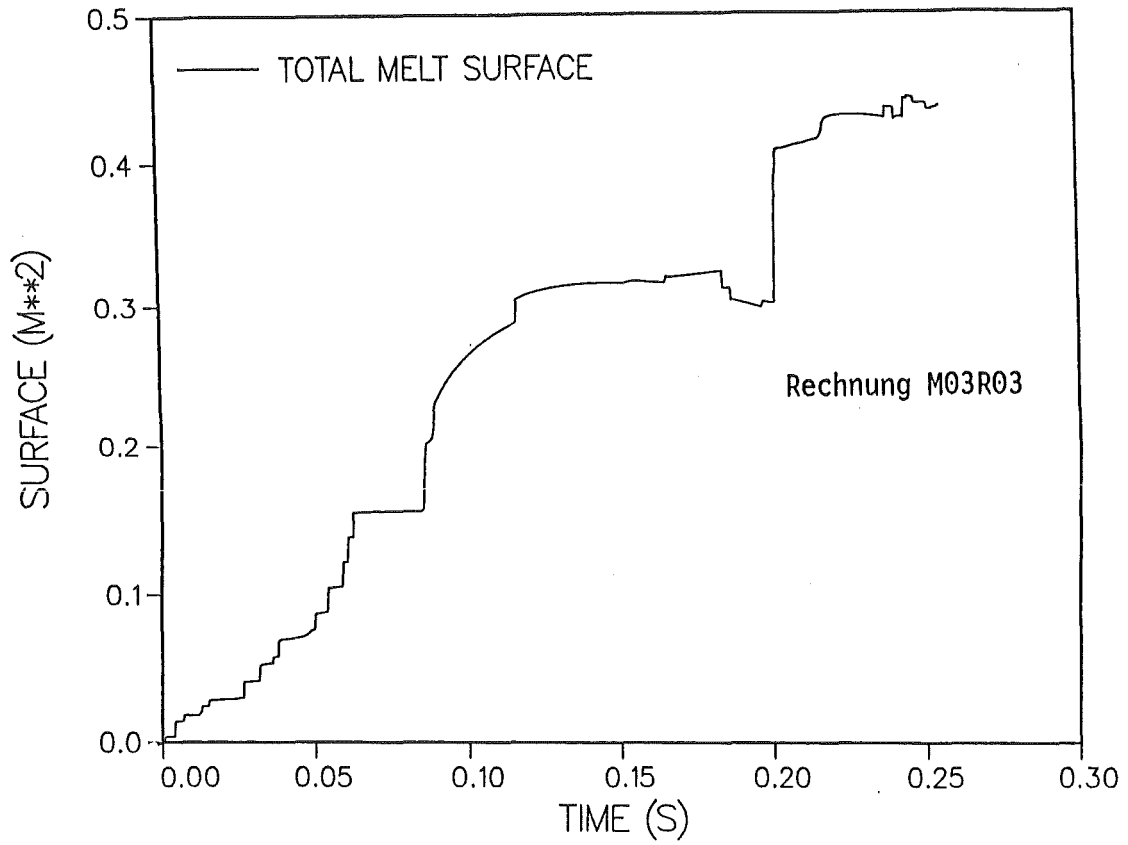


Abb. 58 Oberflächenvergrößerung der Schmelze

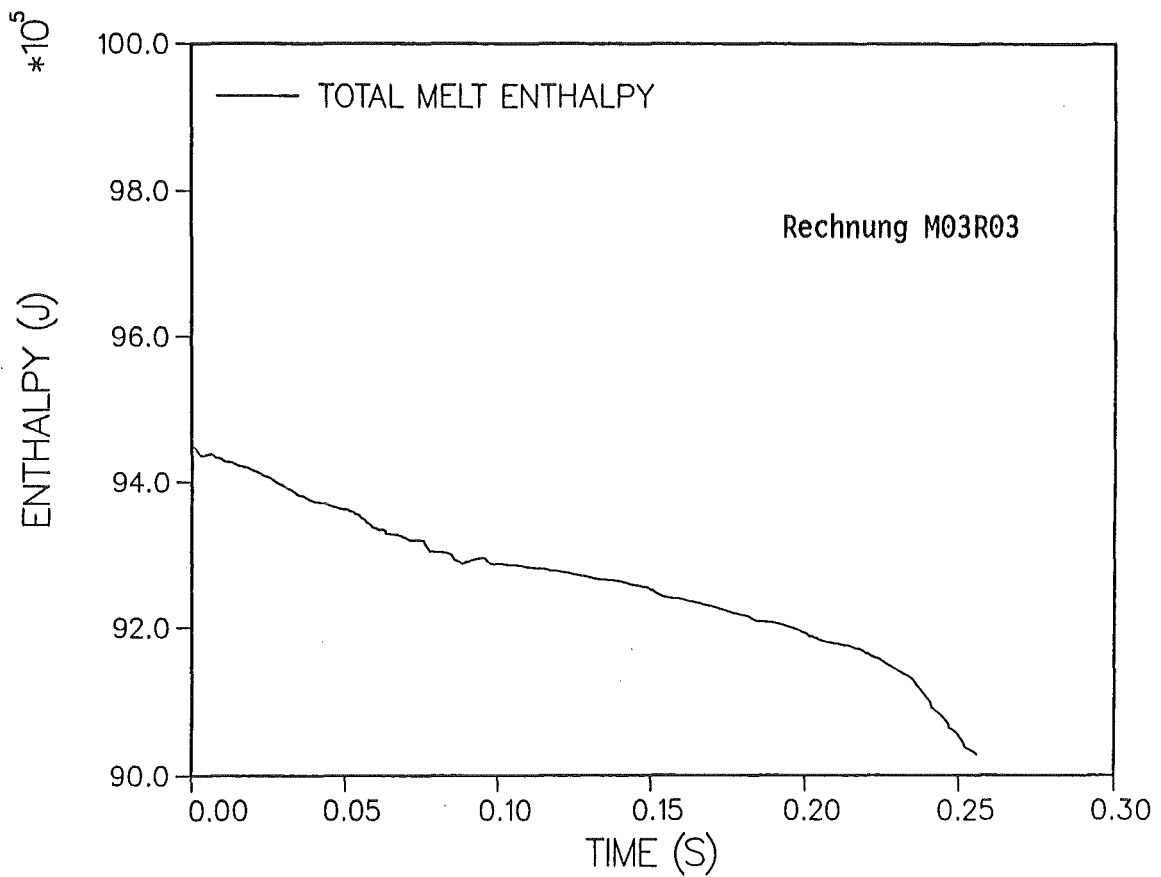


Abb. 59 Enthalpieverlauf der Schmelze

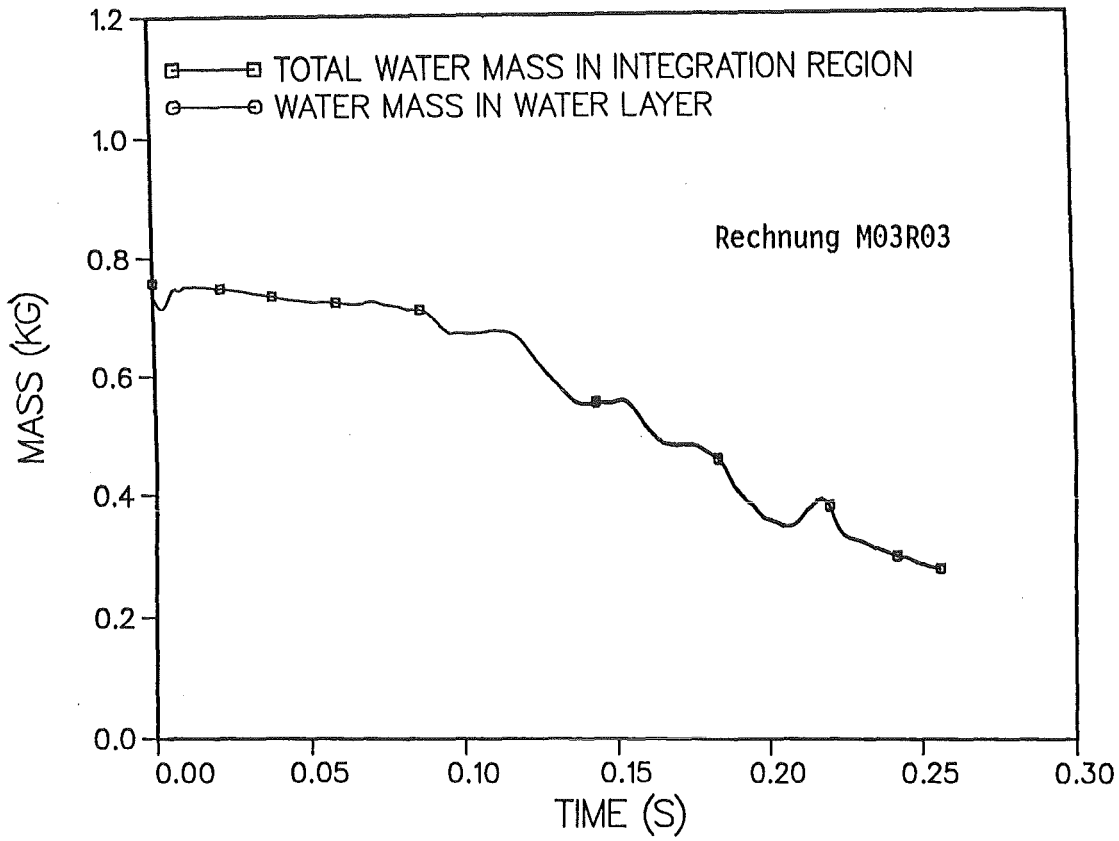


Abb. 60 Wassermengen in den verschiedenen Schichten

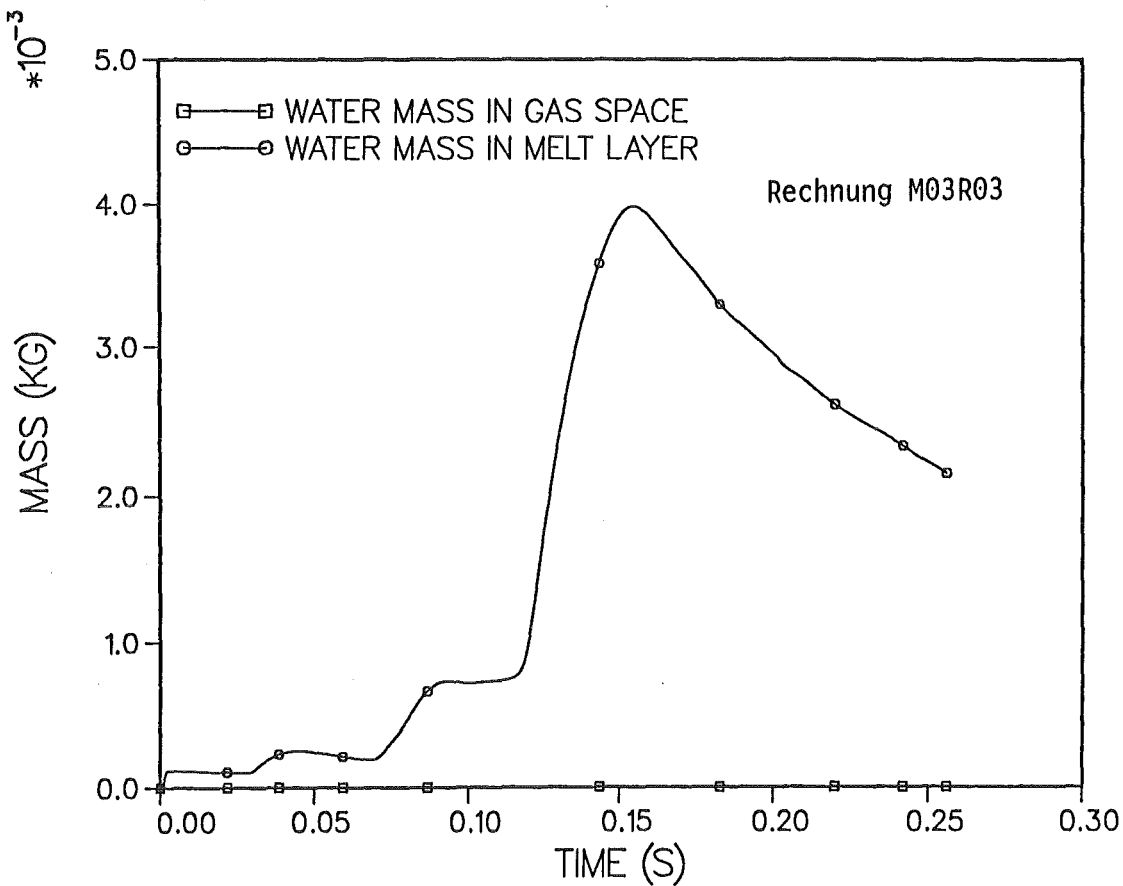


Abb. 61 Wassermenge in Luft- und Schmelzenschicht

### Rechnung M03R03

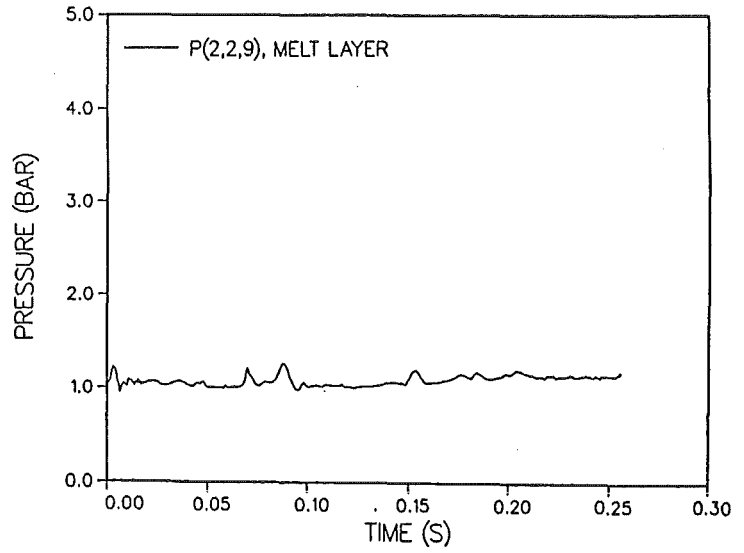
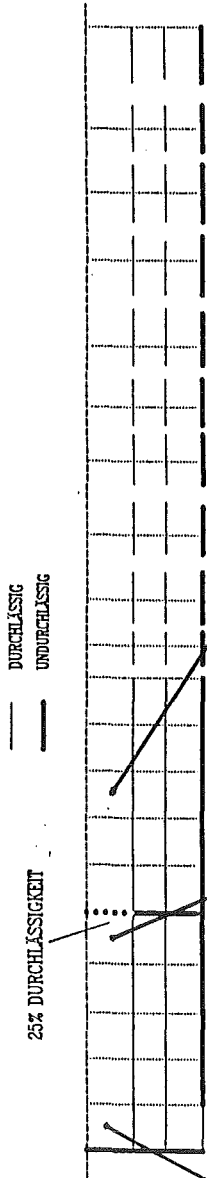


Abb. 62.1 Druckverlauf in der Zelle (2,2,9) im Schmelzenbehälter

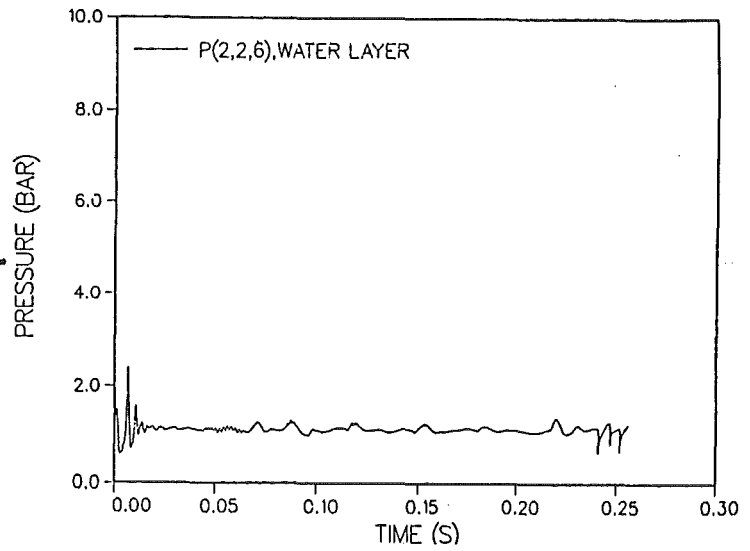


Abb. 62.2 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

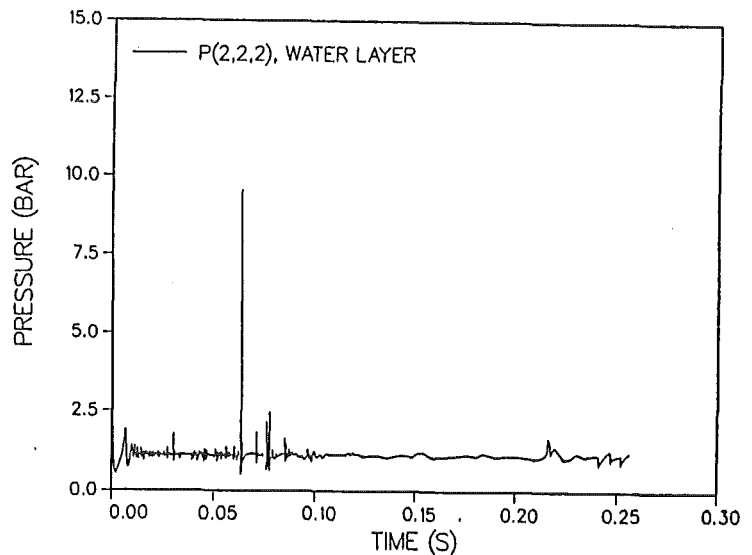


Abb. 62.3 Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M03R03

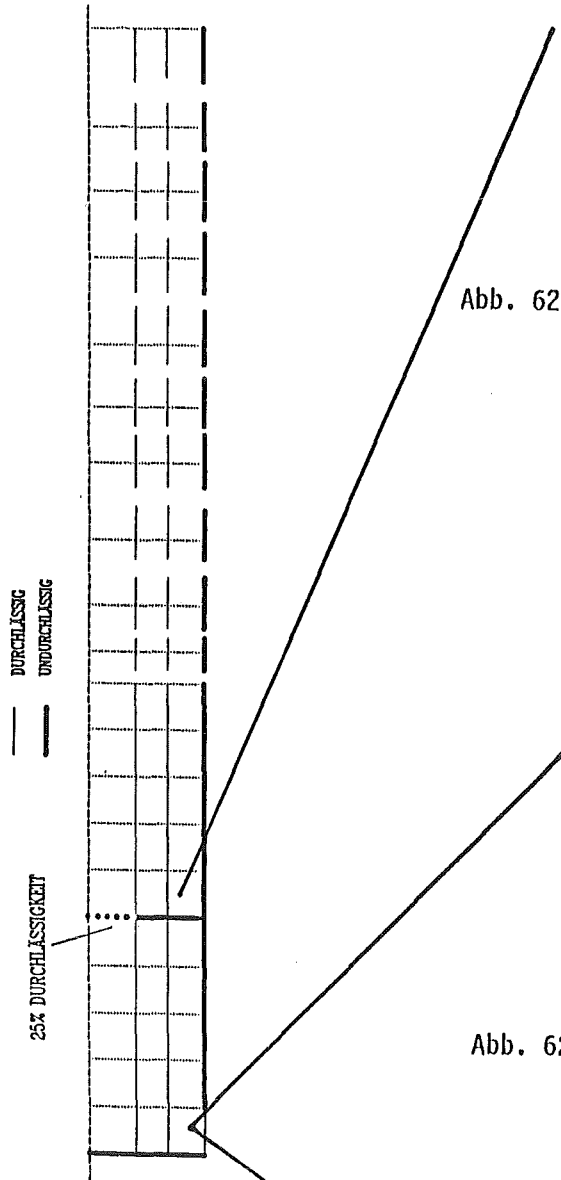


Abb. 62.4 Druckverlauf in der Zelle (4,2,7) im Schmelzenbehälter

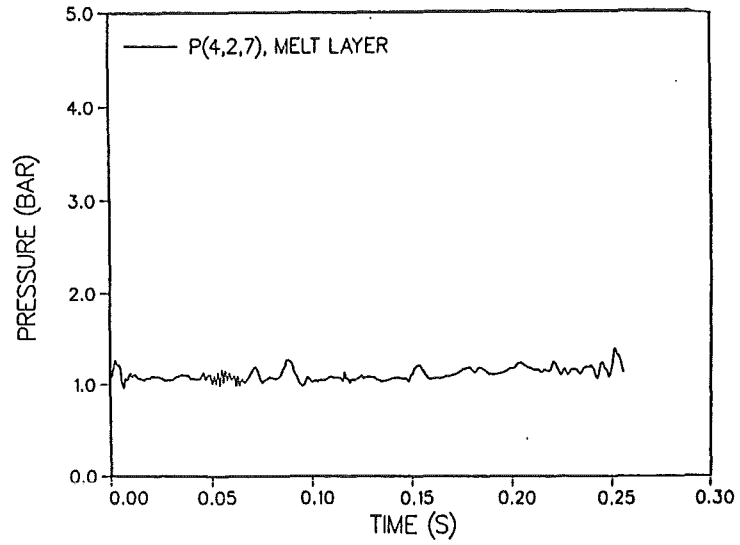


Abb. 62.5 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

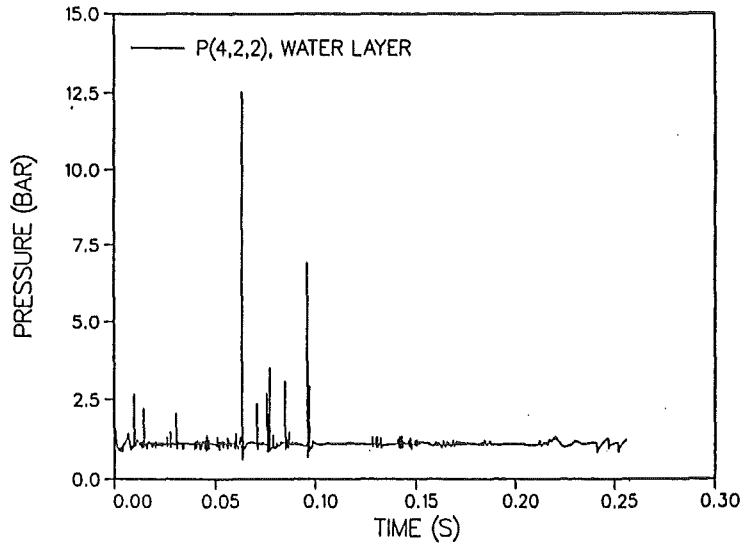
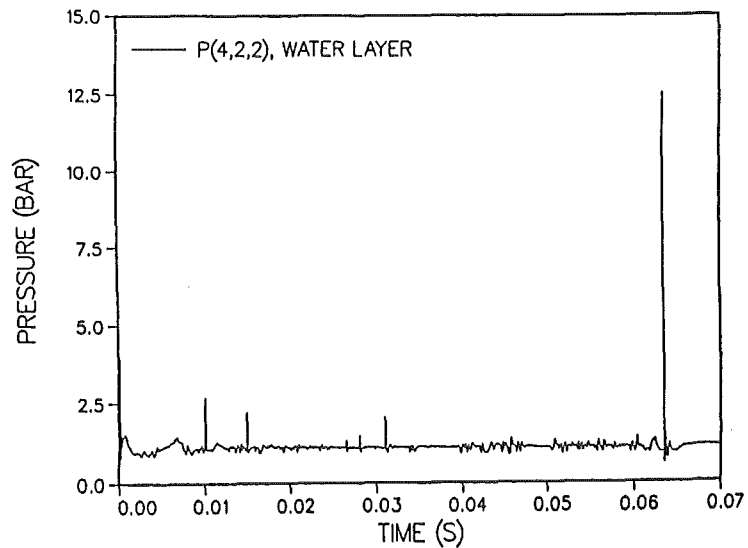


Abb. 62.6 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter



Rechnung M03R03

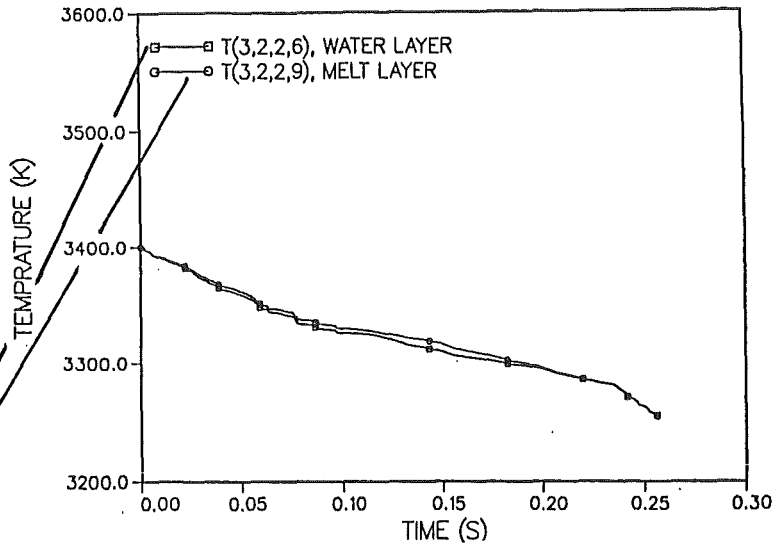
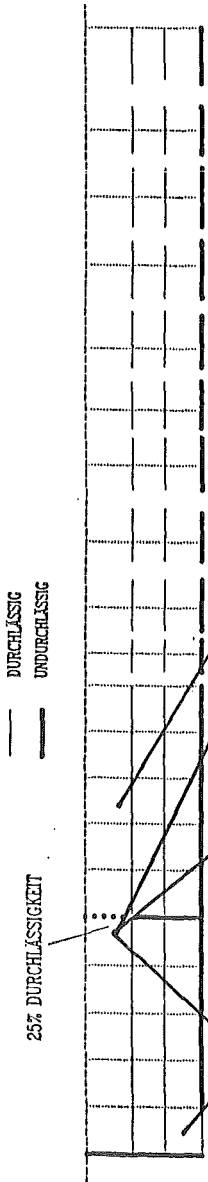


Abb. 63.1 Temperaturverlauf der Schmelze in den Zellen (2,2,6) u. (2,2,9)

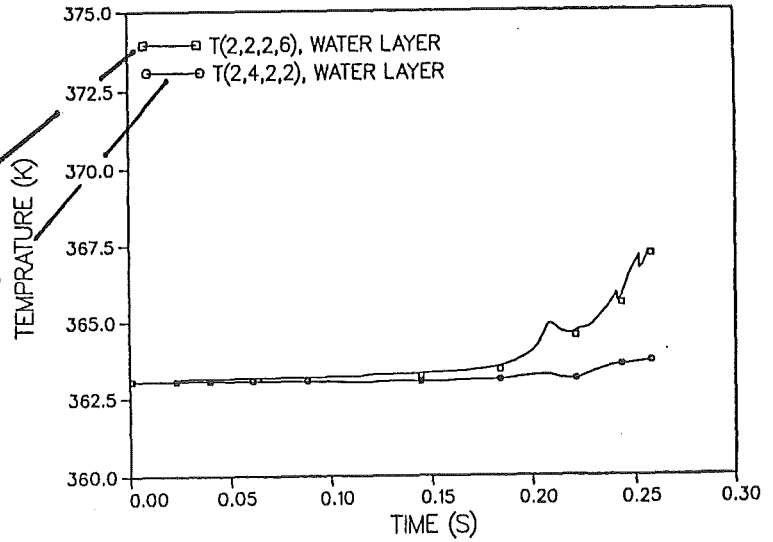


Abb. 63.2 Temp. des Wassers in den Zellen (2,2,6) u. (4,2,2)

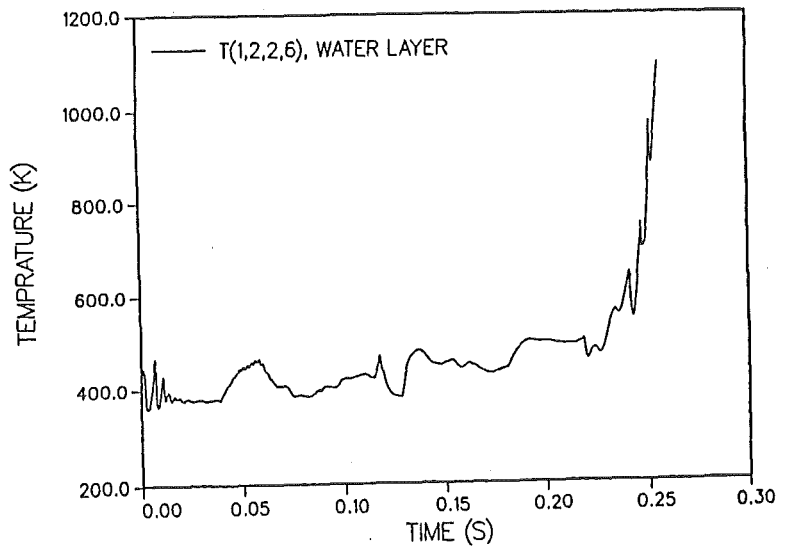


Abb. 63.3 Temperaturverlauf der Gasphase in der Zelle (2,2,6)

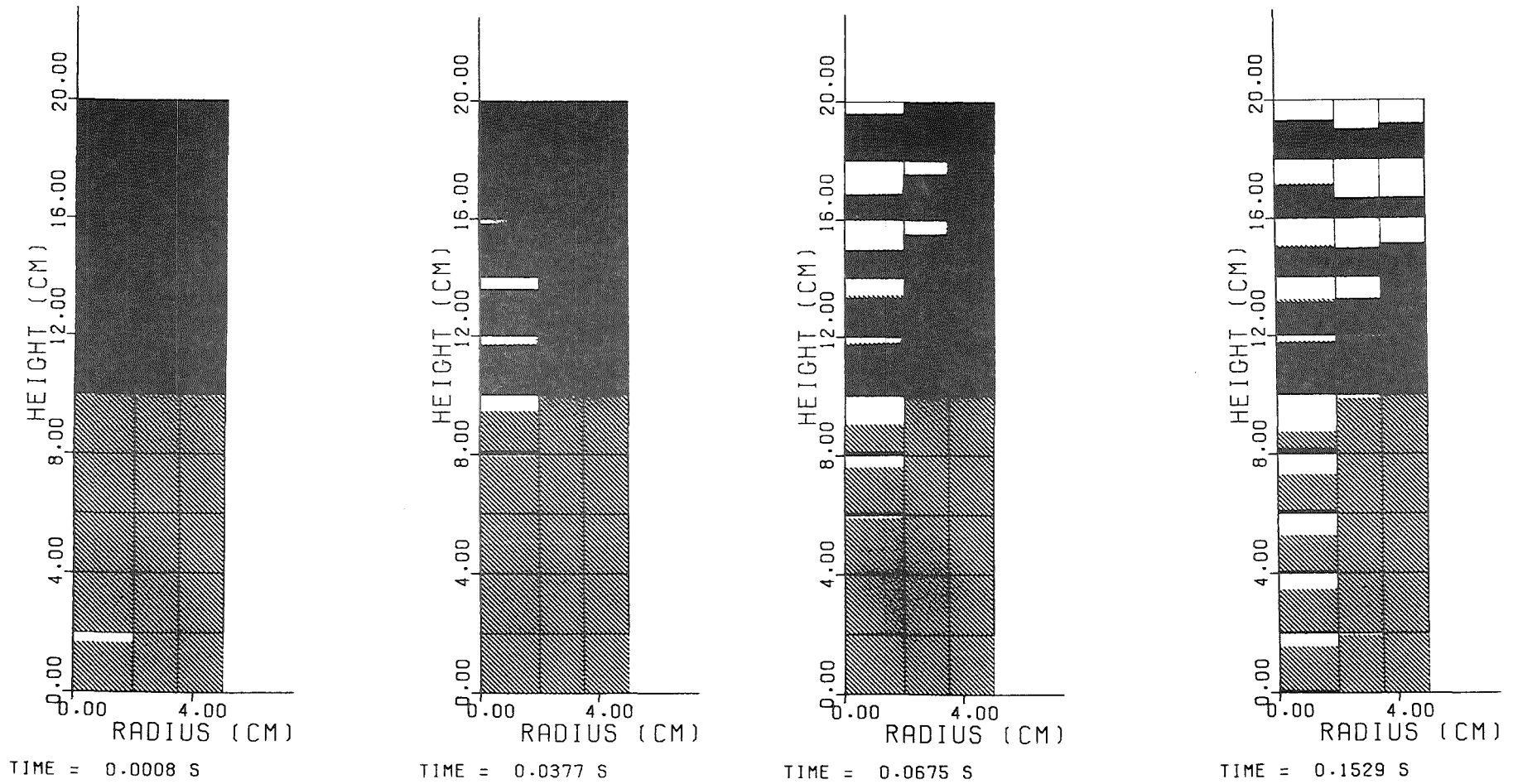
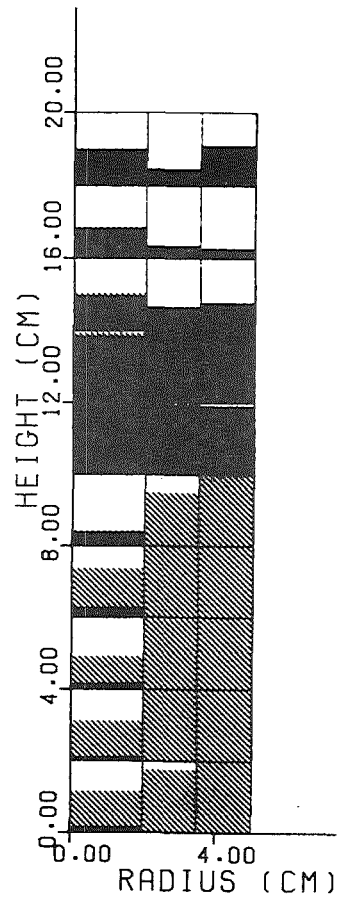
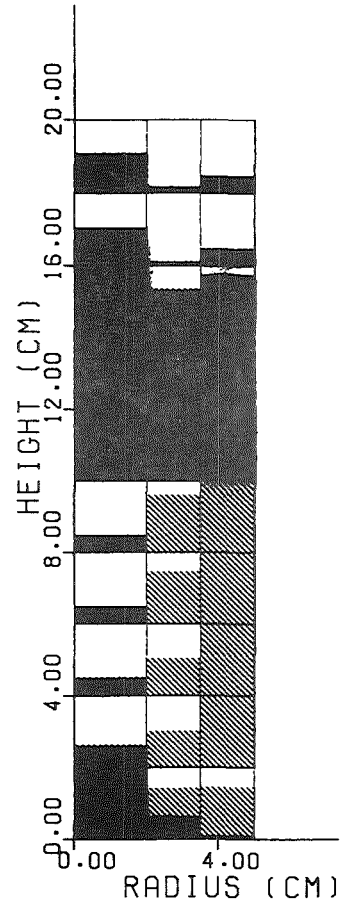


Abb. 64.1 Volumenanteil: Schmelze (schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

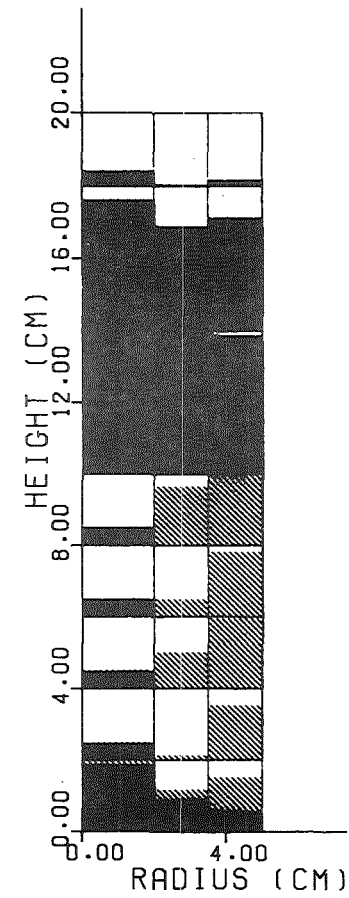
Rechnung M03R04



TIME = 0.1870 S



TIME = 0.3016 S



TIME = 0.3965 S

Abb. 64.2 Volumenanteil: Schmelze ( schwarz), Wasser (schraffiert), Dampf (weiß) zu verschiedenen Zeiten in der Geometrie der Abb. 13

Rechnung M03R04



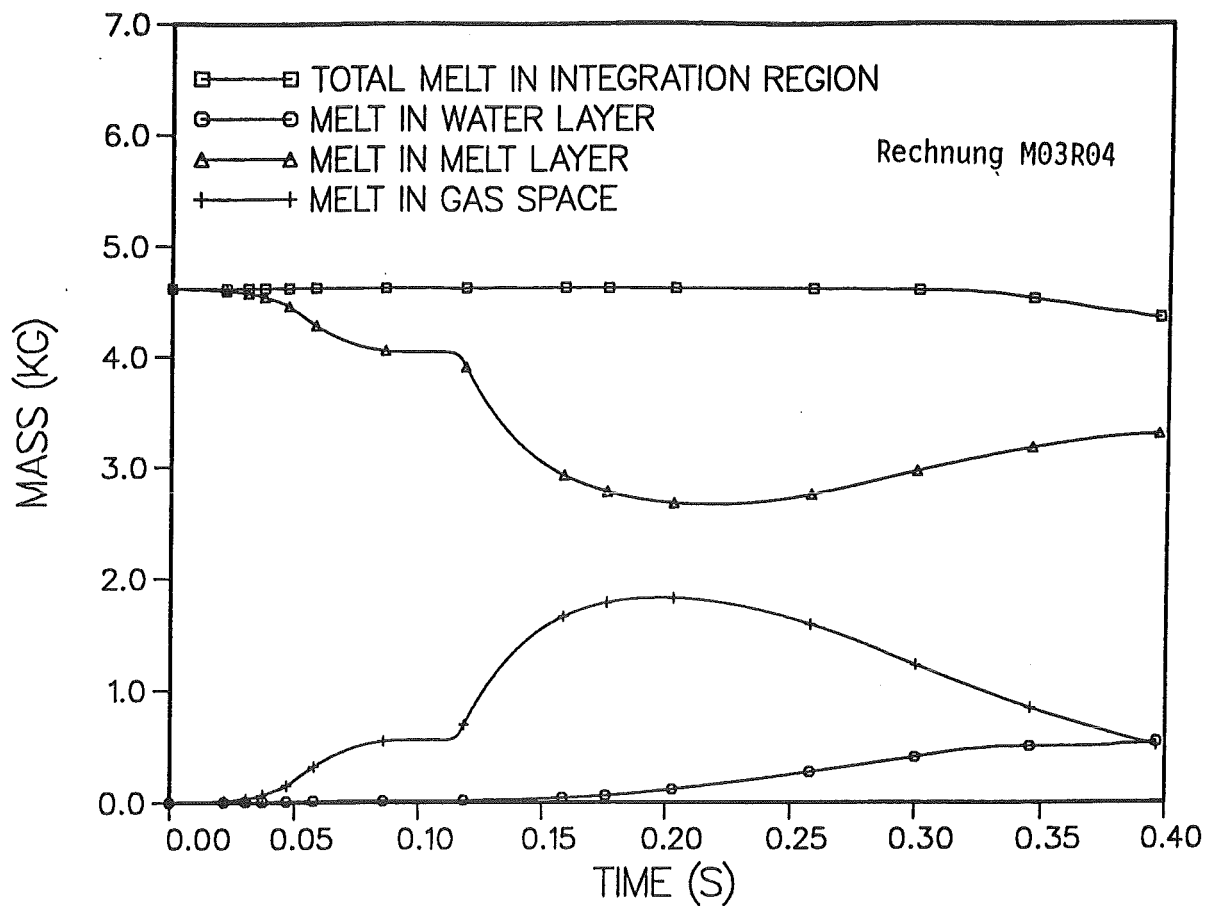


Abb. 65 Schmelzenmassenverteilung in den verschiedenen Schichten

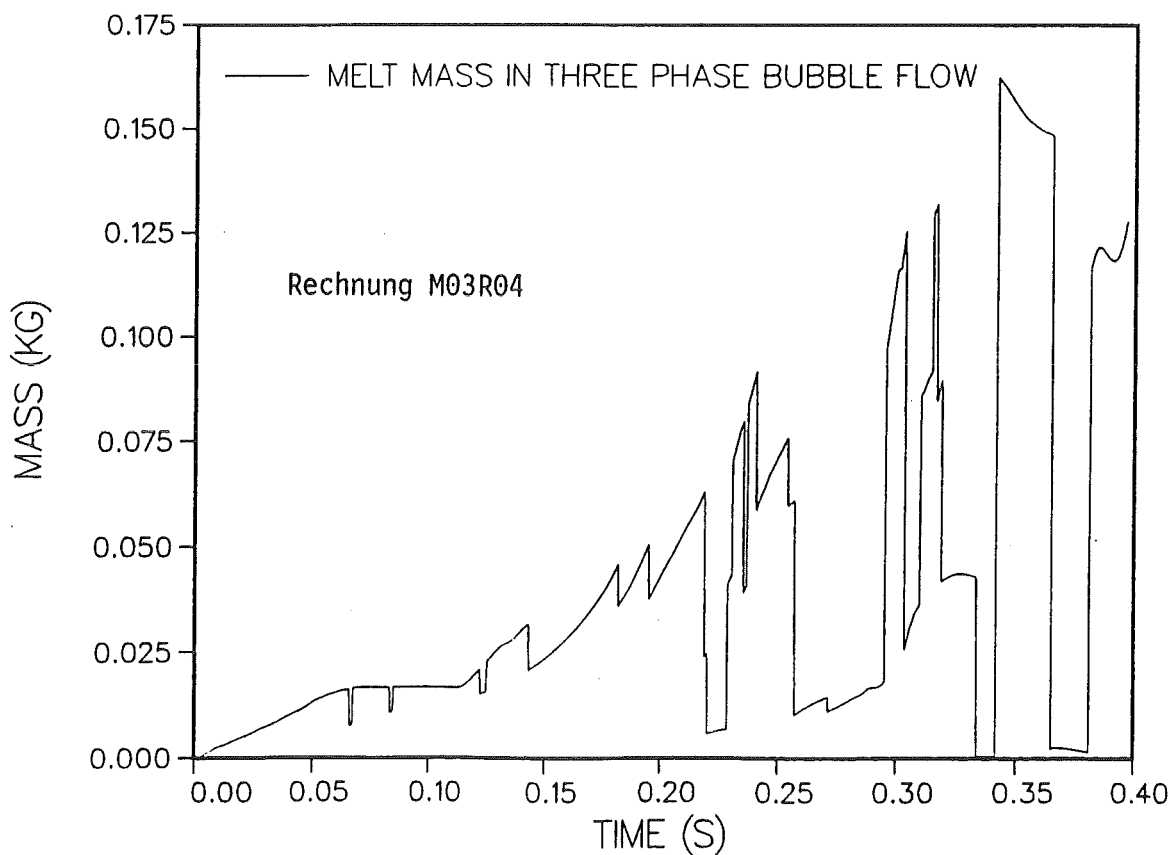


Abb. 66 Schmelzenmasse in der reaktionsfähigsten Strömungsform (flow regime 5)

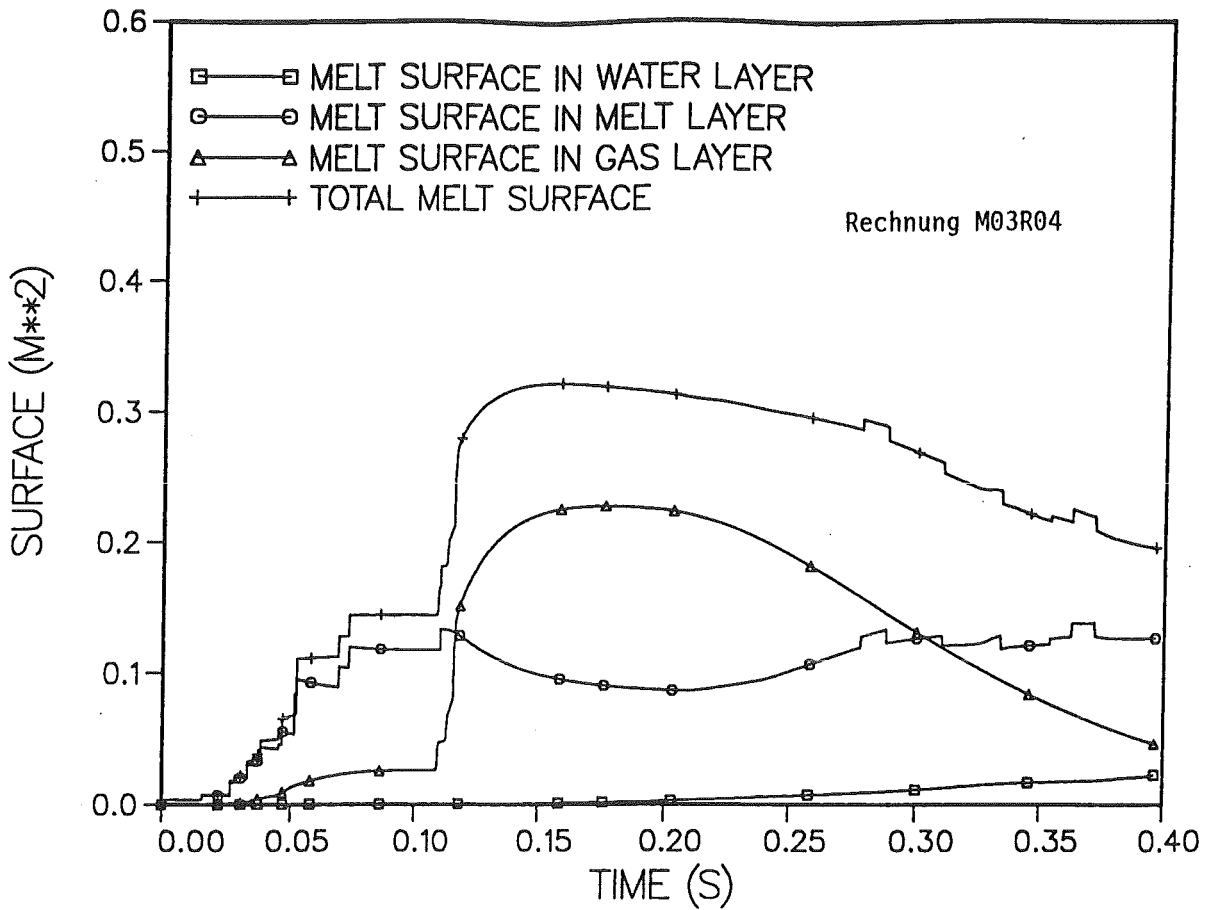


Abb. 67 Oberflächenvergrößerung der Schmelze in den verschiedenen Schichten

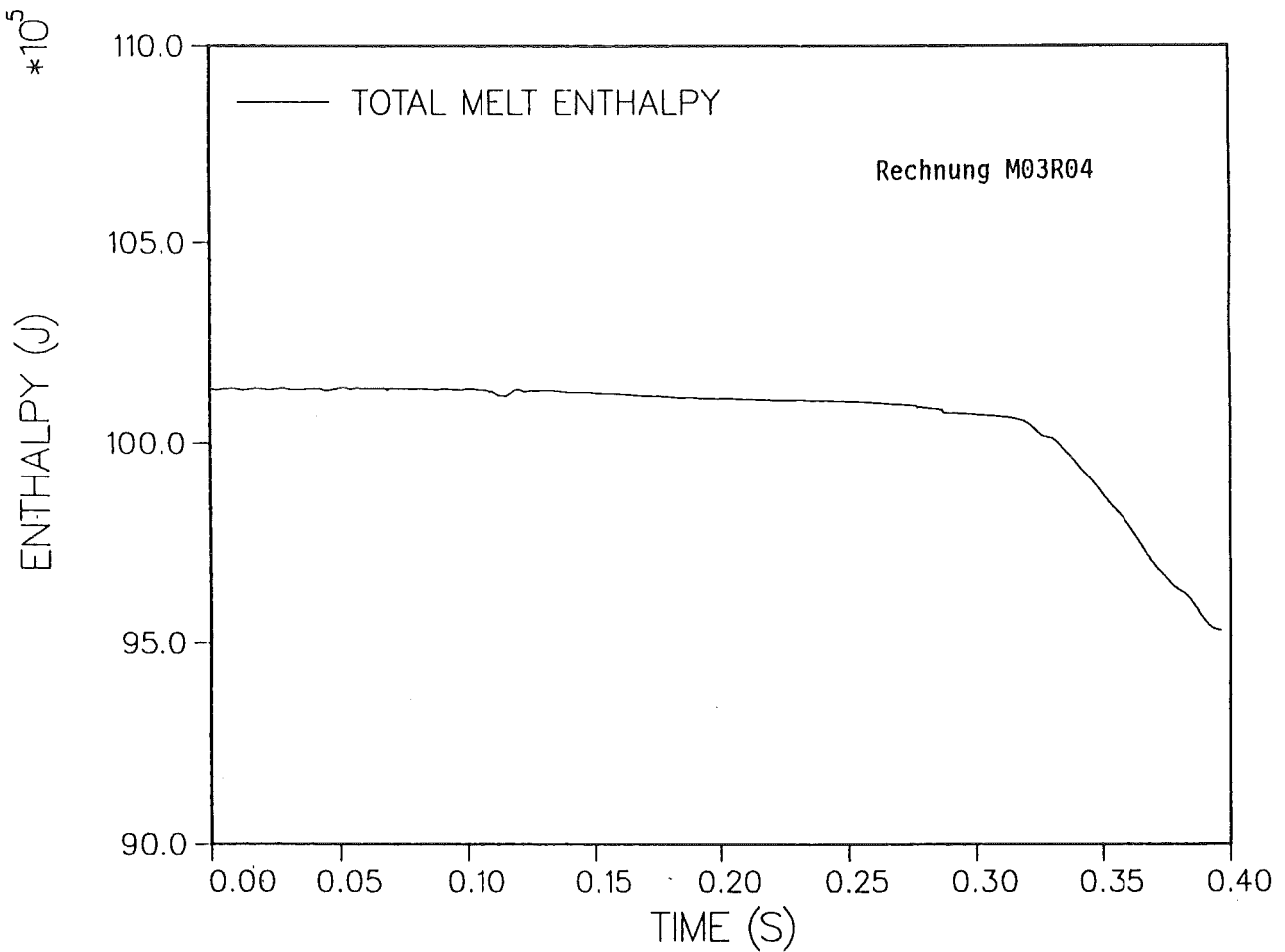


Abb. 68 Enthalpieverlauf der Schmelze in den verschiedenen Schichten

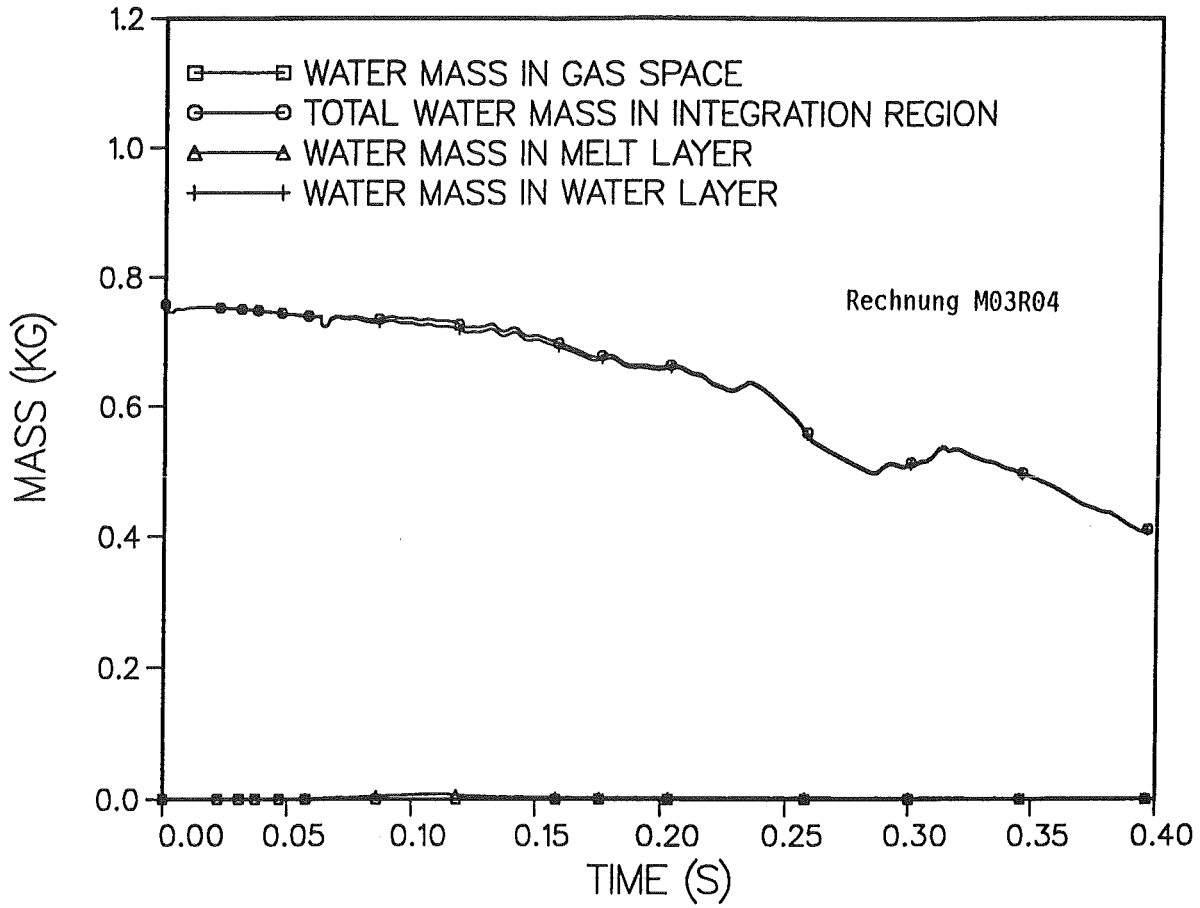


Abb. 69 Wassermengen in den verschiedenen Schichten

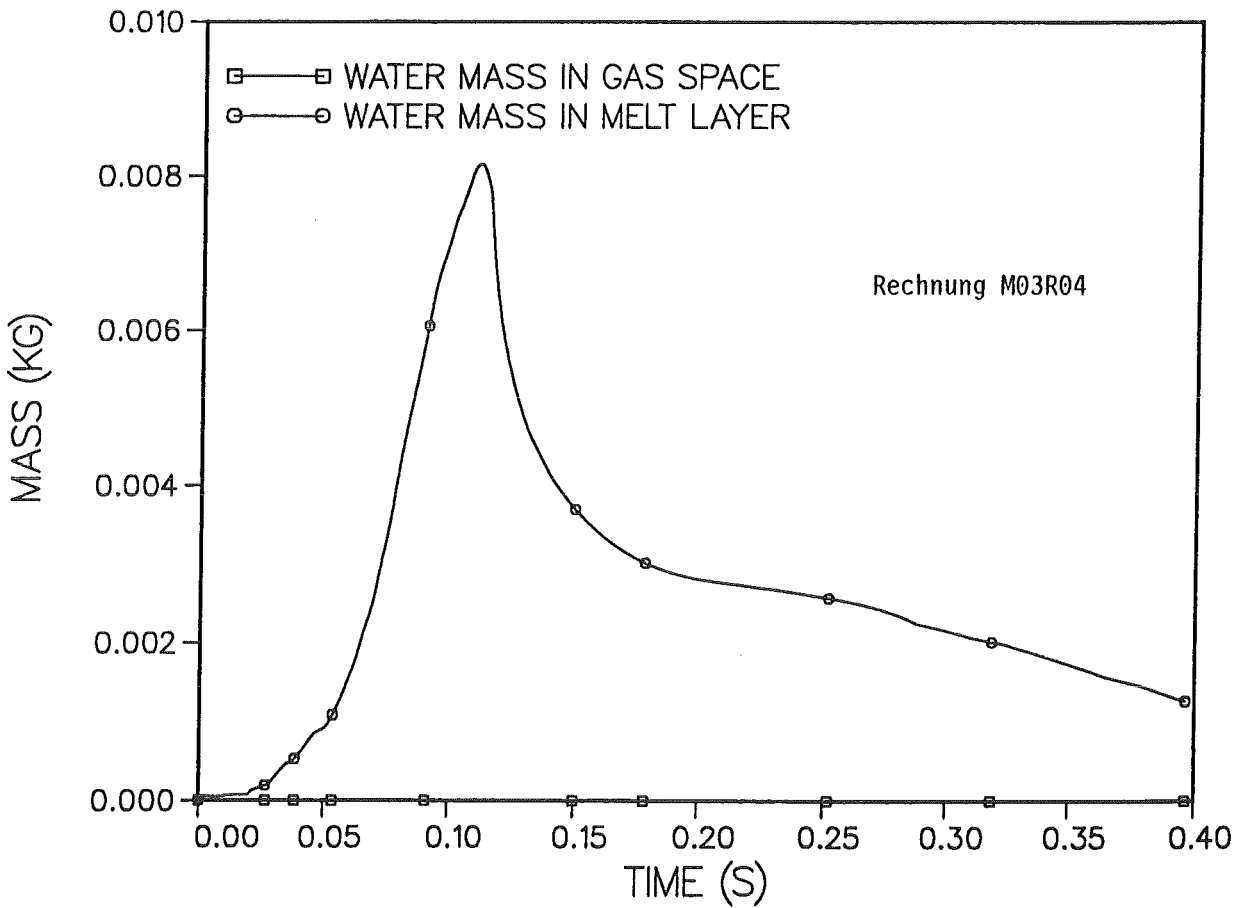


Abb. 70 Wassermenge in Luft- und Schmelzschicht

Rechnung M03R04

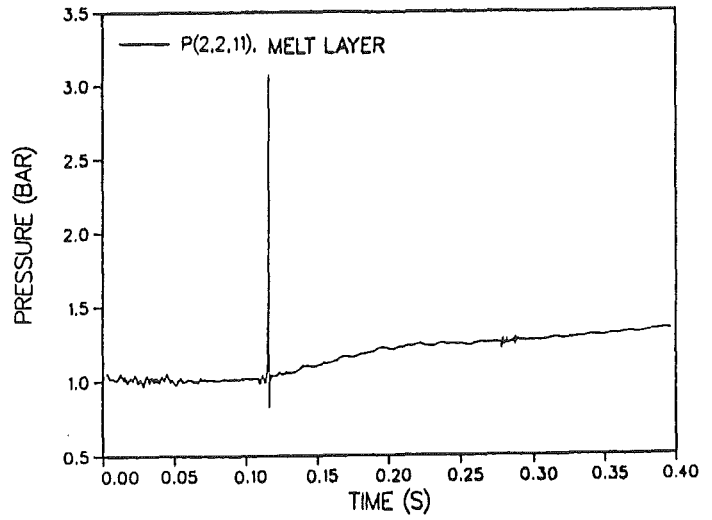
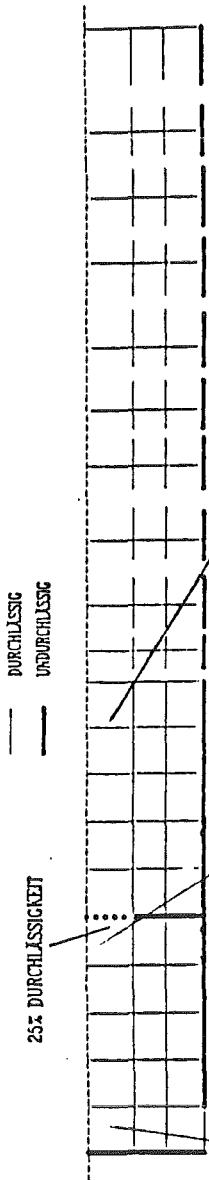


Abb. 71.1 Druckverlauf in der Zelle (2,2,11) in der Schmelzschicht

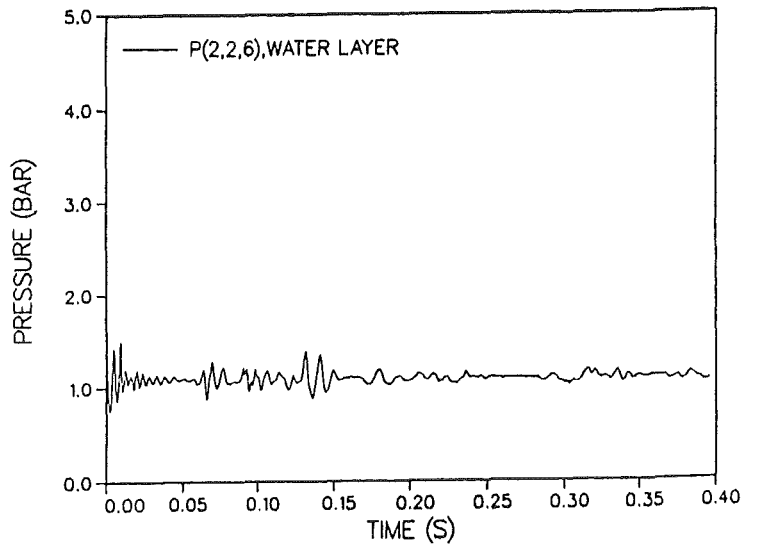


Abb. 71.2 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

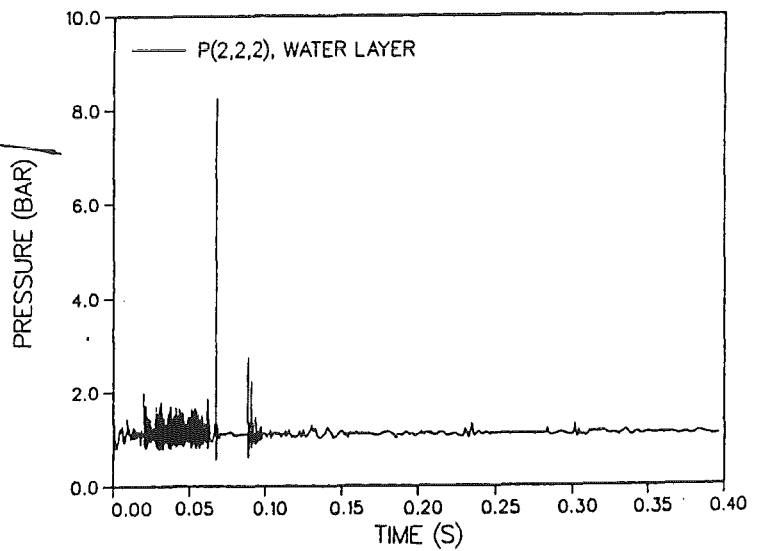


Abb. 71.3 Druckverlauf in der Zelle (2,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M03R04

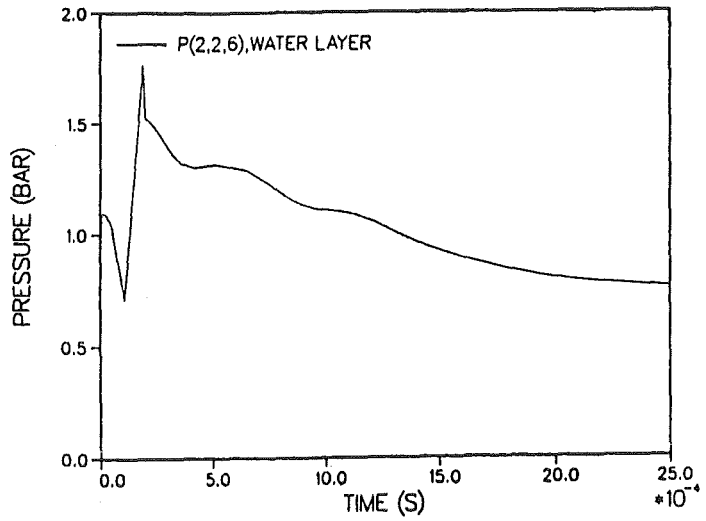
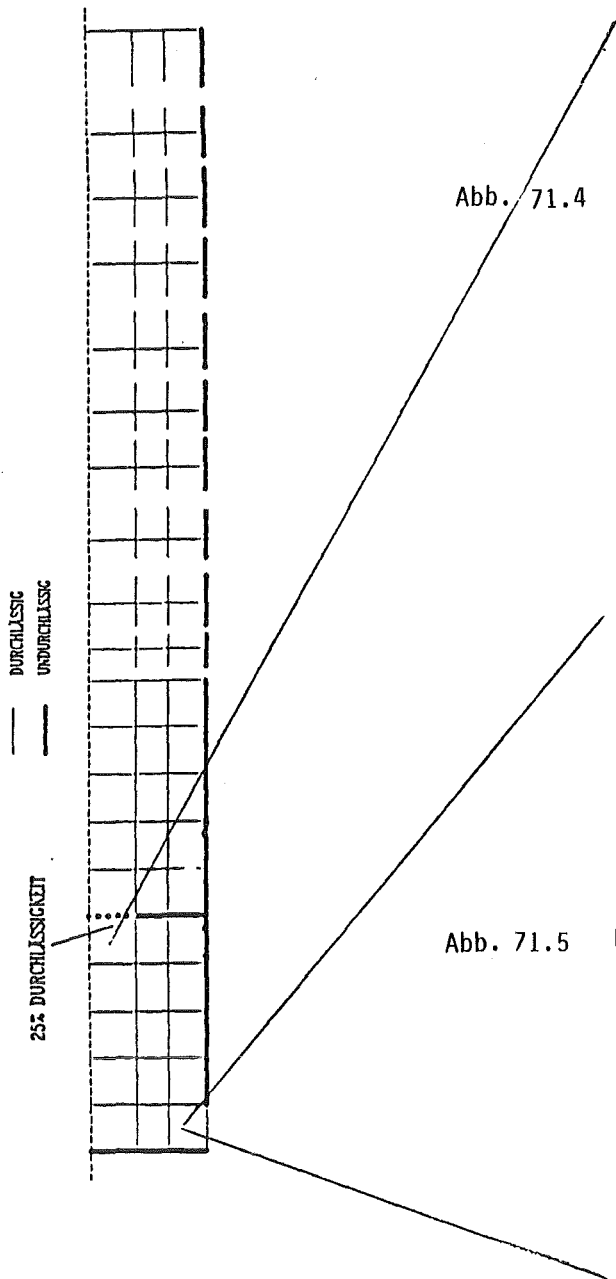


Abb. 71.4 Druckverlauf in der Zelle (2,2,6) im Wasserbehälter

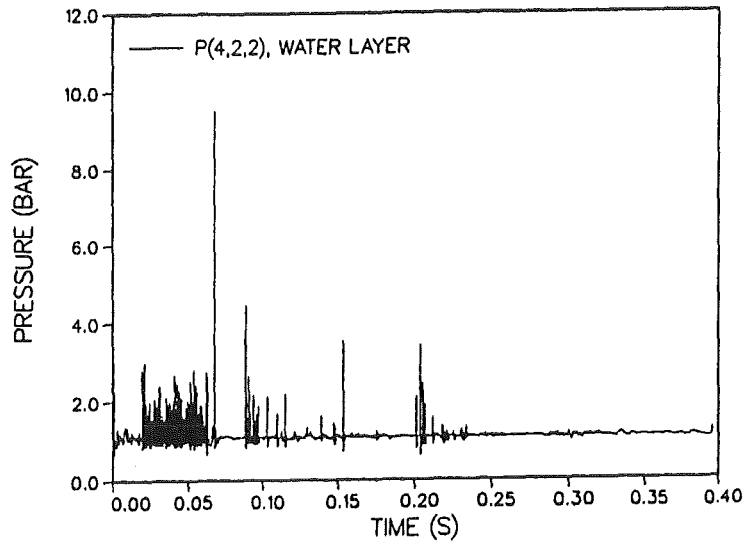


Abb. 71.5 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

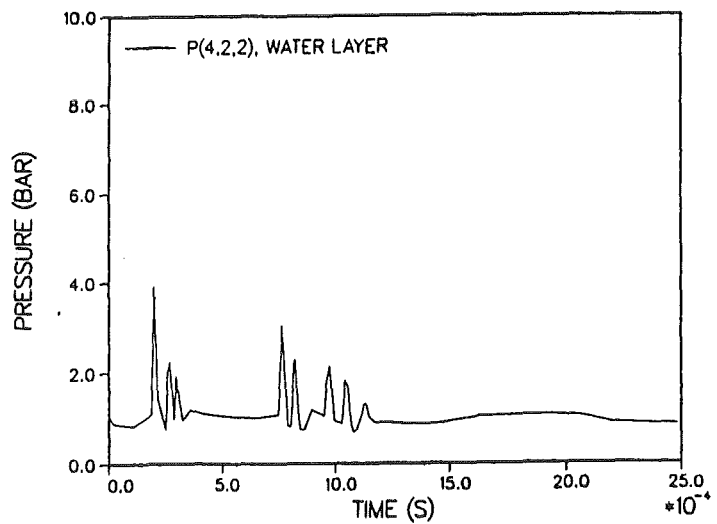


Abb. 71.6 Druckverlauf in der Zelle (4,2,2) im Wasserbehälter

Rechnung M03R04

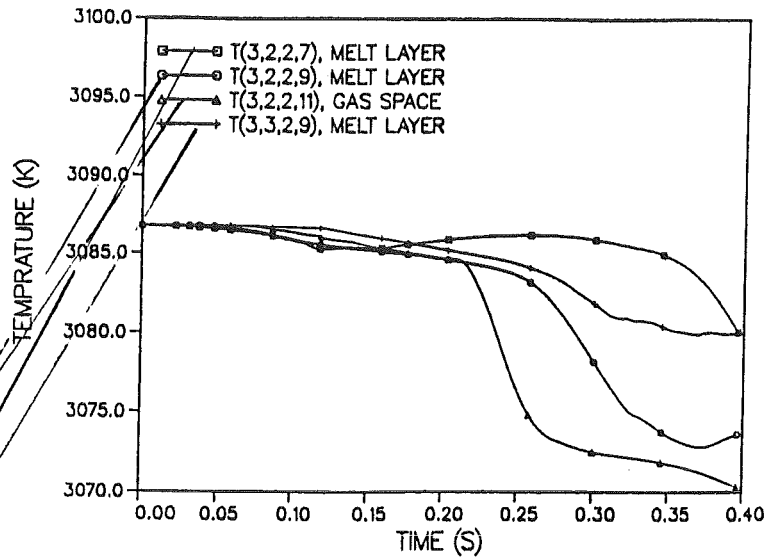


Abb. 72.1 Temperaturverlauf der Schmelze in den Zellen (2,2,7), (2,2,9) (2,2,11) u. (3,2,9)

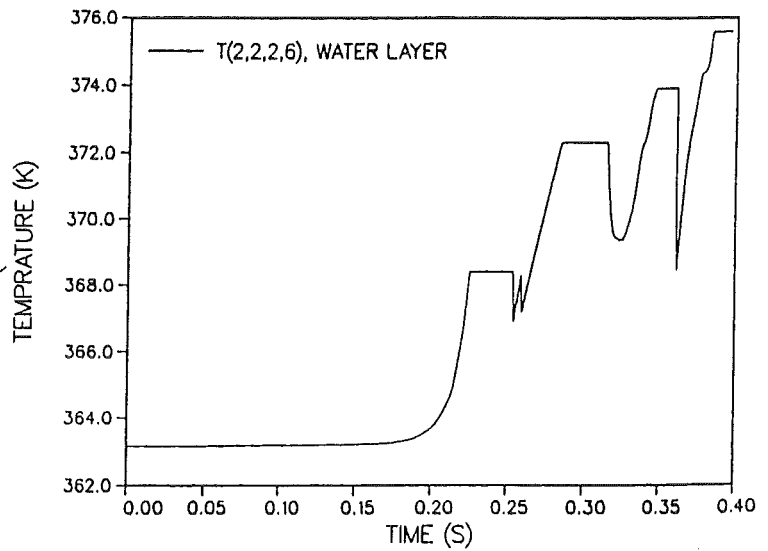


Abb. 72.2 Temperaturverlauf des Wassers in der Zelle (2,2,6)

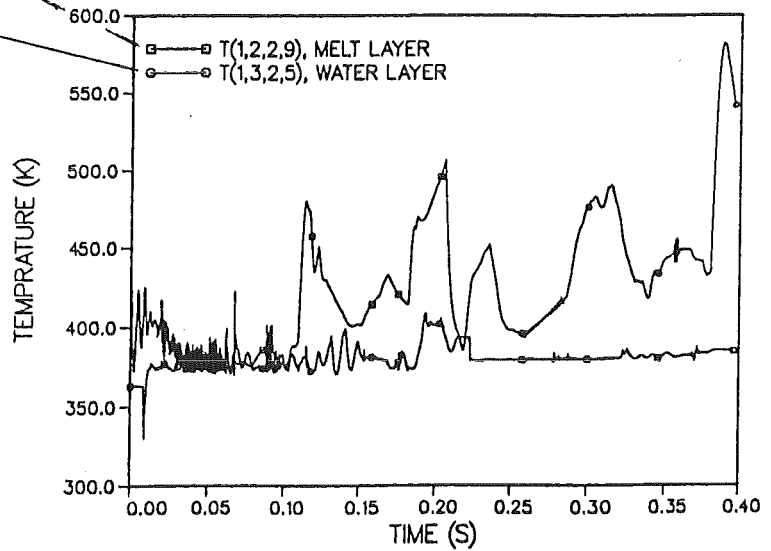
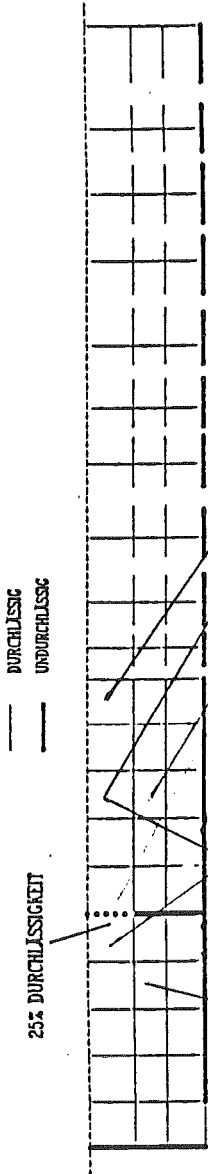


Abb. 72.3 Temperaturverlauf der Gasphase in den Zellen (3,2,5) u. (2,2,9)



## Anhang A Probleme mit dem IVA3 Code

### A.1 Reproduzierbarkeit der Ergebnisse

Wie im Abschnitt 5.1 bereits erwähnt, wurde bei Rechnungen mit dem IVA3 Code festgestellt, daß die Ergebnisse einer Simulationsaufgabe voneinander abweichen, wenn die Zeiträume der Rechenläufe variiert werden.

Um die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse gewährleisten zu können, wurde in dem Hauptprogramm IVA3 und in der SUBROUTINE RRESTAR eine neue Variable DTAURE eingeführt. Nach dem Einlesen von Daten mit Hilfe der SUBROUTINE RRESTAR (Unterprogramm: I3RESTAR) aus einem Restartfile wird DTAURE der Wert des eingelesenen DTAU zugeordnet. Im Hauptprogramm wird dann dieser Wert beibehalten und somit die Kontinuität der Zeitschritte gewährleistet. Diese Änderungen befinden sich in dem modifizierten Haupt- und Unterprogramm MUIVA3D bzw. MUI3RES.

### A.2 Massenerhaltung

Die in Abschnitt 5.1 angesprochene Ungenauigkeit bezüglich der Massenerhaltung in den Randzellen, in denen die Randbedingungen definiert werden, führt zu einer starken Reduzierung der Iterationszeitschritte. Dadurch werden sehr lange CPU-Zeiten für eine zu simulierende Prozeßzeit benötigt. Da lange CPU-Zeiten aus Kostengründen nicht erstrebenswert sind, muß versucht werden, bei geringem Verlust an Genauigkeit der Simulationsergebnisse, die Rechenkosten in akzeptablem Rahmen zu halten. Deshalb wurde eine Änderung in der SUBROUTINE DICHTe, welche für die Überprüfung der Massenerhaltung zuständig ist, vorgenommen, wobei die Randzellen bei der Überprüfung der Massenerhaltung ausgelassen werden. In den Rechnungen wurde beobachtet, daß die diesbezügliche Änderung auf die Simulationsergebnisse wenig bis gar keinen Einfluß hat. Diese Änderung befindet sich in der SUBROUTINE DICHTe im modifizierten Unterprogramm MUMASCON.

### A.3 Parameter

In IVA3 gibt es 2 sehr wichtige Parameter, die je nach Simulationsaufgabe geändert werden können. Diese Parameter DPMAXI (maximal zulässige Druckänderung während eines Iterationszeitschrittes) und DTMAXI (maximal zulässige Temperaturänderung pro Zeitschritt) befinden sich im Hauptprogramm IVA3D und spielen eine große Rolle bei der Bestimmung der Iterationszeitschritte. Werden die vom Benutzer festgelegten Werte dieser Parameter

während eines Iterationsschrittes überschritten, so wird der Iterationszeitschritt reduziert und die Iteration nochmals durchgeführt. Da aber der Iterationszeitschritt nicht beliebig klein werden kann, bricht der Code nach Erreichen eines minimalen Iterationszeitschrittes ( $\Delta\tau_{\min} = 10^{-12}$ ) ab. Man muß also größere Werte für diese beiden Parameter zulassen, um weiterrechnen zu können.

Es gibt leider kein allgemein gültiges Rezept, wie diese Parameter festzulegen sind. Man kann sich jedoch nach dem Analysieren der Proberechnungen (JOB OUTPUT) und Erfahrungen mit dem Code einen Überblick verschaffen und für diese Parameter geeignete Werte einsetzen. Diese Änderungen werden jeweils in dem modifizierten Hauptprogramm MUIVA3D vorgenommen.



## Anhang B Neue Unterprogramme zur Darstellung der Ergebnisse

### B.1 SUBROUTINE DYNPRI

Die Subroutine dient zum Ausschreiben von PLOT-Daten für die spätere Diagrammerstellung. Sie muß an die verschiedenen Simulationsaufgaben angepaßt werden (s. Anhang E.11).

Die SUBROUTINE DYNPRI wird im Hauptprogramm (MUIVA3D) aufgerufen und ist in dem Unterprogramm COMPR30 enthalten. Dieses Unterprogramm muß bei der Erstellung eines Load-Moduls in die entsprechende JCL eingefügt werden.

### B.2 SUBROUTINE MUIPRIN

Um wichtige Daten wie *flow regimes*, *Volumenanteile der Felder* usw. auszudrucken und später den erstellten Plots beizulegen wird diese Subroutine (s. Anhang E.12) jeweils vor Abbrechen (STOP 4) bzw. einer normalen Beendigung (STOP 3) im Hauptprogramm MUIVA3D aufgerufen. Die Daten werden in ein editierbares File (Block format = FB, Record length = 80) geschrieben, das mit Hilfe von GML ausgedruckt werden kann. Die Subroutine steht im Unterprogramm MUIPRIN und muß ebenfalls in die JCL für die Erstellung eines Load-Moduls eingefügt werden.

### B.3 SUBROUTINE MUPRINTV

Diese Subroutine wird benötigt, um die Geschwindigkeitskomponenten der Massenschwerpunkte der Felder auszuschreiben und in das gleiche File wie die Daten aus der SUBROUTINE MUIPRIN abzulegen (s. Anhang E.13). Die Daten dienen der zahlenmäßigen Darstellung der Geschwindigkeitskomponenten. Die Subroutine wird ebenfalls jeweils vor Abbrechen (STOP 4) bzw. einer normalen Beendigung (STOP 3) im Hauptprogramm MUIVA3D aufgerufen und steht im Unterprogramm MUI3PRIN .

### B.4 Erstellung von Diagrammen

In dieser Arbeit werden Diagramme unter Zuhilfenahme des Anwenderprogramms PLOTEASY erstellt. Da dieses Plotprogramm nur Plotdaten mit einfacher Genauigkeit verarbeiten kann, müssen die bei Simulationsrechnungen in doppelter Genauigkeit ausgeschrie-

benen Plotdaten in einfache Genauigkeit umgewandelt werden. Dafür wurden folgende zwei Fortranprogramme geschrieben:

Das Programm COMETUM (s. Anhang E.14) wird zur Umwandlung der Plotdaten von doppelter Genauigkeit in einfache Genauigkeit verwendet. Die Plotdaten, die von der SUBROUTINE DYNPRI ausgeschrieben werden, enthalten u.a. Druck- bzw. Temperaturverläufe über der Zeit. Je nach Umfang bzw. Anzahl der ausgeschrieben und somit umzuwandelnden Daten werden in diesem Programm entsprechende Änderungen vorgenommen und die Plotdaten für eine weitere Verarbeitung in ein File geschrieben.

Das Programm IVA3VIS (s. Anhang E.15) wird ebenfalls zur Umwandlung der Plotdaten benutzt, die für die Erstellung der Volumenstrombilder der einzelnen Felder benötigt werden.

## Anhang C Input-Deck

Der Programminput besteht aus zwei Sätzen:

Der erste Satz enthält die Daten für eine Rechnung, die zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  (Start) anfängt und während bzw. am Ende der Rechnung Daten für Vektor- und Skalarplots bzw. für einen späteren Restart schreibt. Hier werden u.a. Anfangs- und Randbedingungen definiert und die geometrischen Daten der zu simulierenden Modelle angegeben.

Der zweite Satz enthält die Eingabedaten für einen Restart, wobei die Daten für einen weiteren Restart herausgeschrieben werden können. Dieser Satz ist wesentlich kürzer, da alle Geometriedaten sowie eine neue Festlegung von Anfangsbedingungen entfallen. Die Randbedingungen werden wiederum als Funktionen der Zeit angegeben. Dadurch können z.B. verschiedene Prozesse, ausgehend von dem gleichen Restartzustand, simuliert werden.

Die Eingabesätze der hier durchgeführten Rechnungen sind in den Anhängen E.1 bis E.10 angegeben.

## **Anhang D JCL (JOB CONTROL LANGUAGE)**

### **D.1 Erzeugen eines Load-Moduls**

Ein Beispiel einer JCL für das Compilieren und Linken von Haupt- und Unterprogrammen von IVA3, die die verschiedenen Subroutinen enthalten, ist in Anhang E.16 angegeben. Diese JCL erzeugt einen lauffähigen Load-Modul auf

L.SYSLMOD...

### **D.2 Ausführung beginnend mit $\tau = 0$**

Eine JCL, die der Ausführung des Codes mit dem ersten Datensatz dient, ist in Anhang E.17 dargestellt. Sie entnimmt den Eingabesatz aus

G.FT01F001...

Während der Ausführung wird der Ausdruck der Ergebnisse auf

G.FT06F001...

geschrieben. Die Daten zum Plotten der Massenschwerpunktgeschwindigkeiten in den Ebenen  $J=2$  und  $J=3$  werden auf

G.FT11F001...

geschrieben. Die Daten für den nachfolgenden Restart werden auf

G.FT13F001...

geschrieben.

### **D.3 Restart**

Ein Beispiel einer JCL für den Restart ist in Anhang E.18 dargestellt. Diese JCL benutzt den Datensatz aus

G.FT01F001...

und verwendet das entsprechende Restartfile aus

G.FT12F001...

Die Daten für den Plot und den Restart werden auf die gleiche Art wie bei D.2 geschrieben.

#### D.4 Skalarplots

Eine JCL für das Umkopieren von Plotdaten, die während einer Simulationsrechnung ausgeschrieben wurden, ist in Anhang E.19 angegeben. Wie bereits in Anhang B.4 erwähnt, werden hier Plotdaten für das Plotprogramm PLOATEASY umgeschrieben und in ein File abgelegt. Dazu wird das entsprechende Fortranprogramm aus

C.SYSIN...

benutzt. Die umzuwandelnden Daten werden aus

G.FT21F001...

geholt und die umgewandelten Plotdaten auf

G.FT22F001...

geschrieben.

#### D.5 Vektorplot

Eine JCL für die Erstellung der Volumenstrombilder der einzelnen Felder in der vertikalen Ebene  $J=2$  steht im Anhang E.21. Die dazu notwendigen Daten werden anhand des Fortranprogrammes IVA3VIS aufbereitet und in ein File geschrieben. Eine JCL dafür befindet sich im Anhang E.20.

#### D.6 Kopplung IVA3 - PLIVA/B-Graphik

Die Kopplung IVA3 - PLIVA/B-Graphik /19/ wird mittels der im Anhang E.22 aufgeführten JCL durchgeführt. Dabei werden Daten aus den Restartfiles

FT03F001.....

gelesen, um die 2D-Plots für die Volumenanteile der Felder in den einzelnen Zellen zu bestimmten Zeiten zu erzeugen.

## Anhang E Eingabesätze, neue Unterprogramme und JCL

### E.1 Eingabesatz für die Rechnung M02R01 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INPDATA(COMET20)
F  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.      0.1E-06  3      *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  T  F  F  F
COMET SMALL SCALE M02R01 (STAHL)
  1.      1.00      1.      1.      1.      1.
3  1  12  F      * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 12 AXIAL NODES
  0.0    0.005    0.020    0.050
  0.0    0.785398  *AZIMUTHAL SECTION PI/4
  0.0    0.03     0.06     0.08     0.10     0.11     0.13
  0.18   0.21    0.23    0.25     4.30
0.00001  0.0001  0.0100  *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4      *RADIAL PERMEABILITIES
1  1  3  1  14  0.  *CENTER LINE
2  2  2  6  6  0.  *HOLE IN PLATE
4  1  3  3  13  0.  *VESSEL WALL(EXCEPT FOR WATER INLET)
4  1  3  2  2  1.  *VESSEL WALL(WATER INLET)
3      *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  14  0.
2  1  5  1  14  0.
3  1  5  1  14  0.
4      *AXIAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  3  0.  *VESSEL BOTTOM
5  3  5  1  3  0.  *BOTTOM OF PLATE
6  3  5  1  3  0.  *TOP OF PLATE
13 2  4  1  3  1.  *TOP OF VESSEL
0      *VOLUMETRIC POROSITIES
21     *HYDRAULIC DIAMETERS
2  2  1  3  2  3 .006 .009 .003 *
2  2  1  3  9  10 .006 .009 .003 *
2  2  1  3  4  5 .007 .008 .003 *
2  2  1  3  7  8 .007 .008 .003 *
2  2  1  3  11 12 .007 .008 .003 *
2  2  1  3  6  6 .006 .007 .003 *
2  2  1  3  13 14 .008 .010 .003 *
3  3  1  3  2  3 .024 .024 .015 *
3  3  1  3  9  10 .024 .024 .015 *
3  3  1  3  4  5 .020 .020 .015 *
3  3  1  3  7  8 .020 .020 .015 *
3  3  1  3  11 12 .020 .020 .015 *
3  3  1  3  6  6 .013 .013 .015 *
3  3  1  3  13 14 .030 .031 .015 *
4  4  1  3  2  3 .034 .027 .027 *
4  4  1  3  9  10 .034 .027 .027 *
4  4  1  3  4  5 .026 .022 .027 *
4  4  1  3  7  8 .026 .022 .027 *
4  4  1  3  11 12 .026 .027 .027 *
4  4  1  3  6  6 .016 .014 .027 *
4  4  1  3  13 14 .045 .034 .027 *
0      *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F  F      *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0      *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F  1      *DUMMY PARAMETERS
5      *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1  5  1  3  1  14  1.0E+05  1.0E+05  *P IN GAS LAYER+D
2  4  2  2  2  5  1.0E+05  1.0E+05  *P IN WATER
2  2  2  2  6  6  1.0E+05  1.0E+05  *P IN WATER

```

```

5 5 2 2 2 2 1.0E+05 1.0E+05 *P AT WATER INLET
1 5 2 2 7 10 1.0E+05 1.0E+05 *P IN MELT
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4 *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1 5 1 3 1 14 363.15 363.15 0.99 0.99 1. 1.
2 2 2 2 6 6 363.15 363.15 0.99 0.99 0.20 0.20
2 4 2 2 2 5 363.15 363.15 0.99 0.99 0.002 0.002
2 4 2 2 7 10 363.15 363.15 0.99 0.99 0.000 0.000
3 *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.
1 5 1 3 1 14 363.15 363.15 0. 0. 0. 0.
2 4 2 2 2 5 363.15 363.15 0. 0. 0.998 0.998
2 2 2 2 6 6 363.15 363.15 0. 0. 0.800 0.800
2 *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1 5 1 3 1 14 1773.15 1773.15 1. 1. 0. 0.
2 4 2 2 7 10 1773.15 1773.15 1. 1. 1.000 1.000
0 *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0 *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0 *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1 *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1 5 1 3 1 14 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0 *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2 * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2 2 14 1 3 *3 CELLS WITH BC # 1
3 2 14
4 2 14
2 2 2 2 *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0 1.E5 *PRESSURE
10.0 1.E5 *PRESSURE
0.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
10.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5 2 2 1 1 *1 CELL WITH BC # 1
2 2 2 2 2
0.0 1.01E5
10.0 1.01E5
0.0 0.99 0.0 1.0
10.0 0.99 0.0 1.0
0.0 0.002 0.998 0.0
10.0 0.002 0.998 0.0
0.0 363.15 363.15 363.15
10.0 363.15 363.15 363.15
0.0 0.0 0.0 0.0
10.0 0.0 0.0 0.0
F *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0 *SOURCES (NONE)

```



E.2 Eingabesatz für die Rechnung M02R01 (RESTART)

```

T          *** INPUT DATA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET20R)
T  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.1E-6  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M02R01 (STAHL)
  1. 1.00 1. 1. 1. 1.
2          *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  14  1  3  *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  14
4  2  14
2  2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
  0.0 1.E5 *PRESSURE
 10.0 1.E5 *PRESSURE
  0.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
 10.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
  0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
 10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
  0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
 10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
  0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
 10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
  0.0 1.01E5
 10.0 1.01E5
  0.0 0.99 0.0 1.0
 10.0 0.99 0.0 1.0
  0.0 0.002 0.998 0.0
 10.0 0.002 0.998 0.0
  0.0 363.15 363.15 363.15
 10.0 363.15 363.15 363.15
  0.0 0.0 0.0 0.0
 10.0 0.0 0.0 0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

### E.3 Eingabesatz für die Rechnung M02R02 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INPDATA(COMET21)
F  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.    0.1E-06  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  T  F  F  F
COMET SMALL SCALE M02R02 (STAHL)
  1.    1.00    1.    1.    1.    1.
3  1  12  F          * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 12 AXIAL NODES
  0.0  0.005  0.020  0.050
  0.0  0.785398 *AZIMUTHAL SECTION PI/4
  0.0  0.03  0.06  0.08  0.10  0.11  0.13
  0.18  0.21  0.23  0.25  4.30
0.00001  0.0001  0.0100 *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4          *RADIAL PERMEABILITIES
1  1  3  1  14  0.  *CENTER LINE
2  2  2  6  6  0.  *HOLE IN PLATE
4  1  3  3  13  0.  *VESSEL WALL(EXEPT FOR WATER INLET)
4  1  3  2  2  1.  *VESSEL WALL(WATER INLET)
3          *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  14  0.
2  1  5  1  14  0.
3  1  5  1  14  0.
4          *AXIAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  3  0.  *VESSEL BOTTOM
5  3  5  1  3  0.  *BOTTOM OF PLATE
6  3  5  1  3  0.  *TOP OF PLATE
13 2  4  1  3  1.  *TOP OF VESSEL
0          *VOLUMETRIC POROSITIES
21         *HYDRAULIC DIAMETERS
2  2  1  3  2  3 .006 .009 .003  *
2  2  1  3  9  10 .006 .009 .003  *
2  2  1  3  4  5 .007 .008 .003  *
2  2  1  3  7  8 .007 .008 .003  *
2  2  1  3  11 12 .007 .008 .003  *
2  2  1  3  6  6 .006 .007 .003  *
2  2  1  3  13 14 .008 .010 .003  *
3  3  1  3  2  3 .024 .024 .015  *
3  3  1  3  9  10 .024 .024 .015  *
3  3  1  3  4  5 .020 .020 .015  *
3  3  1  3  7  8 .020 .020 .015  *
3  3  1  3  11 12 .020 .020 .015  *
3  3  1  3  6  6 .013 .013 .015  *
3  3  1  3  13 14 .030 .031 .015  *
4  4  1  3  2  3 .034 .027 .027  *
4  4  1  3  9  10 .034 .027 .027  *
4  4  1  3  4  5 .026 .022 .027  *
4  4  1  3  7  8 .026 .022 .027  *
4  4  1  3  11 12 .026 .027 .027  *
4  4  1  3  6  6 .016 .014 .027  *
4  4  1  3  13 14 .045 .034 .027  *
0          *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F  F          *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0          *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F  1          *DUMMY PARAMETERS
5          *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1  5  1  3  1  14  1.0E+05  1.0E+05  *P IN GAS LAYER+D
2  4  2  2  2  5  1.1E+05  1.1E+05  *P IN WATER
2  2  2  2  6  6  1.1E+05  1.1E+05  *P IN WATER
5  5  2  2  2  2  1.1E+05  1.1E+05  *P AT WATER INLET
1  5  2  2  7  10  1.0E+05  1.0E+05  *P IN MELT
0          *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)

```

```

0      *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4      *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1 5 1 3 1 14 363.15 363.15 0.99 0.99 1. 1.
2 2 2 2 6 6 363.15 363.15 0.99 0.99 0.20 0.20
2 4 2 2 2 5 363.15 363.15 0.99 0.99 0.002 0.002
2 4 2 2 7 10 363.15 363.15 0.99 0.99 0.000 0.000
3      *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.
1 5 1 3 1 14 363.15 363.15 0. 0. 0. 0.
2 4 2 2 2 5 363.15 363.15 0. 0. 0.998 0.998
2 2 2 2 6 6 363.15 363.15 0. 0. 0.800 0.800
2      *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1 5 1 3 1 14 1773.15 1773.15 1. 1. 0. 0.
2 4 2 2 7 10 1773.15 1773.15 1. 1. 1.000 1.000
0      *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0      *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0      *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1      *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1 5 1 3 1 14 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0      *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2      * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2 2 14 1 3 *3 CELLS WITH BC # 1
3 2 14
4 2 14
2 2 2 2 2 *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0 1.E5 *PRESSURE
10.0 1.E5 *PRESSURE
0.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
10.0 0.99 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5 2 2 1 1 *1 CELL WITH BC # 1
2 2 2 2 2
0.0 1.1E5
10.0 1.1E5
0.0 0.99 0.0 1.0
10.0 0.99 0.0 1.0
0.0 0.002 0.998 0.0
10.0 0.002 0.998 0.0
0.0 363.15 363.15 363.15
10.0 363.15 363.15 363.15
0.0 0.0 0.0 0.0
10.0 0.0 0.0 0.0
F      *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0      *SOURCES (NONE)

```

### E.4 Eingabesatz für die Rechnung M02R02 (RESTART)

```

T          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INPDATA(COMET21R)
T  T  T  T 100 5000 *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.1E-6  3 *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M02R02 (SS)
  1.  1.00  1.  1.  1.  1.
2
2  2  14  1  3  *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
3  2  14  *3 CELLS WITH BC # 1
4  2  14
2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
  0.0  1.E5  *PRESSURE
 10.0  1.E5  *PRESSURE
  0.0  0.99  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
 10.0  0.99  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
  0.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
 10.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
  0.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
 10.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
  0.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
 10.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
  0.0  1.1E5
 10.0  1.1E5
  0.0  0.99  0.0  1.0
 10.0  0.99  0.0  1.0
  0.0  0.002  0.998  0.0
 10.0  0.002  0.998  0.0
  0.0  363.15  363.15  363.15
 10.0  363.15  363.15  363.15
  0.0  0.0  0.0  0.0
 10.0  0.0  0.0  0.0
F  *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0  *SOURCES (NONE)

```

E.5 Eingabesatz für die Rechnung M03R01 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET30)
F T T T 100 5000 *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
1.E-05 1.0E+01 1.E-05 1.E-05 1.E-05 1.E-05
10.0 1000. 0. 0.1E-06 3 *TIMES
F 1.00E+03 1.00E+03 3 4 14 T F F F
COMET SMALL SCALE M03R01 (STAHL)
1. 1.00 1. 1. 1.
3 1 20 F * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 20 AXIAL NODES
0.0 0.020 0.035 0.050
0.0 0.785398 *AZIMUTHAL SECTION PI/4
0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 0.12
0.16 0.18 0.20 0.325 0.45 0.7 0.95
1.70 2.20 3.20 4.200 5.20
0.00001 0.0001 0.0100 *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4 *RADIAL PERMEABILITIES
1 1 3 1 22 0. *CENTER LINE
4 2 2 3 22 0. *VESSEL WALL(EXCEPT FOR WATER INLET)
4 2 2 2 2 1. *VESSEL WALL(WATER INLET)
4 2 2 1 1 0. *VESSEL WALL
3 *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1 1 5 1 22 0.
2 1 5 1 22 0.
3 1 5 1 22 0.
4 *AXIAL PERMEABILITIES
1 1 5 1 3 0. *VESSEL BOTTOM
6 3 5 1 3 0. *PLATE
6 2 2 2 2 0.25 *HOLE
22 2 4 1 3 1. *TOP OF VESSEL
0 *VOLUMETRIC POROSITIES
15 *HYDRAULIC DIAMETERS
2 2 1 3 1 11 .018 .020 .011 *
2 2 1 3 12 13 .028 .034 .011 *
2 2 1 3 14 16 .030 .037 .011 *
2 2 1 3 17 18 .030 .039 .011 *
2 2 1 3 19 22 .018 .039 .011 *
3 3 1 3 1 11 .023 .017 .018 *
3 3 1 3 12 13 .045 .027 .018 *
3 3 1 3 14 16 .050 .028 .018 *
3 3 1 3 17 18 .052 .029 .018 *
3 3 1 3 19 22 .031 .030 .018 *
4 4 1 3 1 11 .027 .017 .021 *
4 4 1 3 12 13 .060 .027 .021 *
4 4 1 3 14 16 .068 .028 .021 *
4 4 1 3 17 18 .073 .029 .021 *
4 4 1 3 19 22 .044 .030 .021 *
0 *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F F *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0 *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F 1 *DUMMY PARAMETERS
4 *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1 5 1 3 1 22 1.0E+05 1.0E+05 *P IN GAS LAYER+D
2 4 2 2 2 6 1.085E+05 1.075E+05 *P IN WATER
5 5 2 2 2 2 1.085E+05 1.085E+05 *P AT WATER INLET
1 5 2 2 7 11 1.075E+05 1.0E+05 *P IN MELT
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4 *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1 5 1 3 1 22 363.15 363.15 1.00 1.00 1. 1.
2 4 2 2 2 6 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000
5 5 2 2 2 2 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000
2 4 2 2 7 11 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000

```

```

3          *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.
1  5  1  3  1  22  363.15  363.15  0.  0.  0.  0.
2  4  2  2  2  6  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
5  5  2  2  2  2  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
2          *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1  5  1  3  1  22  1773.15  1773.15  1.  1.  0.  0.
2  4  2  2  7  11  1773.15  1773.15  1.  1.  1.000  1.000
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1          *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1  5  1  3  1  22  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0
0          *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2          * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  22  1  3          *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  22
4  2  22
2  2  2  2  2          *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0  1.E5          *PRESSURE
10.0  1.E5          *PRESSURE
0.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
10.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
0.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
10.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
0.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
10.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
0.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1          *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
0.0  108500.0
10.0  108500.0
0.0  1.00  0.0  1.0
10.0  1.00  0.0  1.0
0.0  0.000  1.000  0.0
10.0  0.000  1.000  0.0
0.0  363.15  363.15  363.15
10.0  363.15  363.15  363.15
0.0  0.0  0.0  0.0
10.0  0.0  0.0  0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

E.6 Eingabesatz für die Rechnung M03R01 (RESTART)

```

T          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET30R)
T  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.1E-6  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R01 (STAHL)
  1.  1.00  1.  1.  1.  1.
2
2  2  22  1  3  *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
3  2  22  *3 CELLS WITH BC # 1
4  2  22
2  2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
  0.0  1.E5  *PRESSURE
 10.0  1.E5  *PRESSURE
  0.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
 10.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
  0.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
 10.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
  0.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
 10.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
  0.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
 10.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
  0.0 108500.0
 10.0 108500.0
  0.0  1.00  0.0  1.0
 10.0  1.00  0.0  1.0
  0.0  0.000  1.000  0.0
 10.0  0.000  1.000  0.0
  0.0  363.15  363.15  363.15
 10.0  363.15  363.15  363.15
  0.0  0.0  0.0  0.0
 10.0  0.0  0.0  0.0
F  *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0  *SOURCES (NONE)

```

### E.7 Eingabesatz für die Rechnung M03R02 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET31)
F  T  T  T  100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.    0.1E-06  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  T  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R02 (STAHL)
  1.    1.00    1.    1.    1.
3  1  20  F  * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 20 AXIAL NODES
  0.0  0.020  0.035  0.050
  0.0  0.785398  *AZIMUTHAL SECTION PI/4
  0.0  0.02  0.04  0.06  0.08  0.10  0.12
  0.16  0.18  0.20  0.325  0.45  0.7  0.95
  1.70  2.20  3.20  4.200  5.20
0.00001  0.0001  0.0100  *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4  *RADIAL PERMEABILITIES
1  1  3  1  22  0.  *CENTER LINE
4  2  2  3  22  0.  *VESSEL WALL(EXCEPT FOR WATER INLET)
4  2  2  2  2  1.  *VESSEL WALL(WATER INLET)
4  2  2  1  1  0.  *VESSEL WALL
3  *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  22  0.
2  1  5  1  22  0.
3  1  5  1  22  0.
4  *AXIAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  3  0.  *VESSEL BOTTOM
6  3  5  1  3  0.  *PLATE
6  2  2  2  2  0.25  *HOLE
22  2  4  1  3  1.  *TOP OF VESSEL
0  *VOLUMETRIC POROSITIES
15  *HYDRAULIC DIAMETERS
2  2  1  3  1  11  .018  .020  .011  *
2  2  1  3  12  13  .028  .034  .011  *
2  2  1  3  14  16  .030  .037  .011  *
2  2  1  3  17  18  .030  .039  .011  *
2  2  1  3  19  22  .018  .039  .011  *
3  3  1  3  1  11  .023  .017  .018  *
3  3  1  3  12  13  .045  .027  .018  *
3  3  1  3  14  16  .050  .028  .018  *
3  3  1  3  17  18  .052  .029  .018  *
3  3  1  3  19  22  .031  .030  .018  *
4  4  1  3  1  11  .027  .017  .021  *
4  4  1  3  12  13  .060  .027  .021  *
4  4  1  3  14  16  .068  .028  .021  *
4  4  1  3  17  18  .073  .029  .021  *
4  4  1  3  19  22  .044  .030  .021  *
0  *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F  F  *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0  *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F  1  *DUMMY PARAMETERS
4  *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1  5  1  3  1  22  1.0E+05  1.0E+05  *P IN GAS LAYER+D
2  4  2  2  2  6  1.115E+05  1.105E+05  *P IN WATER
5  5  2  2  2  2  1.115E+05  1.115E+05  *P AT WATER INLET
2  4  2  2  7  11  1.075E+05  1.0E+05  *P IN MELT
0  *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)
0  *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4  *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1  5  1  3  1  22  363.15  363.15  1.00  1.00  1.  1.
2  4  2  2  2  6  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000
5  5  2  2  2  2  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000
2  4  2  2  7  11  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000

```



```

3          *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.
1  5  1  3  1  22  363.15  363.15  0.  0.  0.  0.
2  4  2  2  2  6  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
5  5  2  2  2  2  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
2          *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1  5  1  3  1  22  1773.15  1773.15  1.  1.  0.  0.
2  4  2  2  7  11  1773.15  1773.15  1.  1.  1.000  1.000
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1          *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1  5  1  3  1  22  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0
0          *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2          * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  22  1  3          *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  22
4  2  22
2  2  2  2  2          *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0  1.E5          *PRESSURE
10.0  1.E5          *PRESSURE
0.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
10.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
0.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
10.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
0.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
10.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
0.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1          *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
0.0  111500.0
10.0  111500.0
0.0  1.00  0.0  1.0
10.0  1.00  0.0  1.0
0.0  0.000  1.000  0.0
10.0  0.000  1.000  0.0
0.0  363.15  363.15  363.15
10.0  363.15  363.15  363.15
0.0  0.0  0.0  0.0
10.0  0.0  0.0  0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

**E.8 Eingabesatz für die Rechnung M03R02 (RESTART)**

```

T          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET31R)
T  T  T  T  100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.1E-6  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R02 (STAHL)
  1. 1.00 1. 1. 1. 1.
2          *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  22  1  3  *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  22
4  2  22
2  2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
  0.0 1.E5 *PRESSURE
 10.0 1.E5 *PRESSURE
  0.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
 10.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
  0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
 10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
  0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
 10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
  0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
 10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
  0.0 111500.0
 10.0 111500.0
  0.0 1.00 0.0 1.0
 10.0 1.00 0.0 1.0
  0.0 0.000 1.000 0.0
 10.0 0.000 1.000 0.0
  0.0 363.15 363.15 363.15
 10.0 363.15 363.15 363.15
  0.0 0.0 0.0 0.0
 10.0 0.0 0.0 0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

### E.9 Eingabesatz für die Rechnung M03R03 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET32)
F  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.    0.      0.1E-06  3      *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  T  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R03 (U02)
  1.      1.00      1.      1.      1.      1.
3  1  20  F          * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 20 AXIAL NODES
  0.0    0.020    0.035    0.050
  0.0    0.785398 *AZIMUTHAL SECTION PI/4
  0.0    0.02    0.04    0.06    0.08    0.10    0.12
  0.16   0.18   0.20   0.325   0.45   0.7    0.95
  1.70   2.20   3.20   4.200   5.20
0.00001  0.0001  0.0100  *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4          *RADIAL PERMEABILITIES
1  1  3  1  22  0.  *CENTER LINE
4  2  2  3  22  0.  *VESSEL WALL(EXCEPT FOR WATER INLET)
4  2  2  2  2  1.  *VESSEL WALL(WATER INLET)
4  2  2  1  1  0.  *VESSEL WALL
3          *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  22  0.
2  1  5  1  22  0.
3  1  5  1  22  0.
4          *AXIAL PERMEABILITIES
1  1  5  1  3  0.  *VESSEL BOTTOM
6  3  5  1  3  0.  *PLATE
6  2  2  2  2  0.25 *HOLE
22 2  4  1  3  1.  *TOP OF VESSEL
0          *VOLUMETRIC POROSITIES
15         *HYDRAULIC DIAMETERS
2  2  1  3  1  11 .018 .020 .011  *
2  2  1  3  12 13 .028 .034 .011  *
2  2  1  3  14 16 .030 .037 .011  *
2  2  1  3  17 18 .030 .039 .011  *
2  2  1  3  19 22 .018 .039 .011  *
3  3  1  3  1  11 .023 .017 .018  *
3  3  1  3  12 13 .045 .027 .018  *
3  3  1  3  14 16 .050 .028 .018  *
3  3  1  3  17 18 .052 .029 .018  *
3  3  1  3  19 22 .031 .030 .018  *
4  4  1  3  1  11 .027 .017 .021  *
4  4  1  3  12 13 .060 .027 .021  *
4  4  1  3  14 16 .068 .028 .021  *
4  4  1  3  17 18 .073 .029 .021  *
4  4  1  3  19 22 .044 .030 .021  *
0          *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F  F          *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0          *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F  1          *DUMMY PARAMETERS
4          *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1  5  1  3  1  22  1.0E+05  1.0E+05  *P IN GAS LAYER+D
2  4  2  2  2  6  1.097E+05  1.087E+05  *P IN WATER
5  5  2  2  2  2  1.097E+05  1.097E+05  *P AT WATER INLET
1  5  2  2  7  11  1.087E+05  1.0E+05  *P IN MELT
0          *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)
0          *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4          *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1  5  1  3  1  22  363.15  363.15  1.00  1.00  1.  1.
2  4  2  2  2  6  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000
5  5  2  2  2  2  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000
2  4  2  2  7  11  363.15  363.15  1.00  1.00  0.000  0.000

```

```

3          *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.
1  5  1  3  1  22  363.15  363.15  0.  0.  0.  0.
2  4  2  2  2  6  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
5  5  2  2  2  2  363.15  363.15  0.  0.  1.000  1.000
2          *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC.,
1  5  1  3  1  22  3400.00  3400.00  1.  1.  0.  0.
2  4  2  2  7  11  3400.00  3400.00  1.  1.  1.000  1.000
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1          *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1  5  1  3  1  22  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0
0          *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2          * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  22  1  3          *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  22
4  2  22
2  2  2  2  2          *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0  1.E5          *PRESSURE
10.0  1.E5          *PRESSURE
0.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
10.0  1.00  0.0  1.0  *INERT CONCENTRATIONS
0.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
10.0  1.0  0.0  0.0  *VOLUME FRACTIONS
0.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
10.0  363.15  363.15  363.15  *TEMPERATURES
0.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0  0.0  0.0  0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1          *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
0.0  109700.0
10.0  109700.0
0.0  1.00  0.0  1.0
10.0  1.00  0.0  1.0
0.0  0.000  1.000  0.0
10.0  0.000  1.000  0.0
0.0  363.15  363.15  363.15
10.0  363.15  363.15  363.15
0.0  0.0  0.0  0.0
10.0  0.0  0.0  0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

E.10 Eingabesatz für die Rechnung M03R03 (RESTART)

```

T          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET32R)
T  T  T  T  T 100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
10.0    1000.    0.1E-6  3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R03 (U02)
1. 1.00 1. 1. 1. 1.
2          *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2  2  22  1  3  *3 CELLS WITH BC # 1
3  2  22
4  2  22
2  2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0 1.E5 *PRESSURE
10.0 1.E5 *PRESSURE
0.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
10.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
0.0 109700.0
10.0 109700.0
0.0 1.00 0.0 1.0
10.0 1.00 0.0 1.0
0.0 0.000 1.000 0.0
10.0 0.000 1.000 0.0
0.0 363.15 363.15 363.15
10.0 363.15 363.15 363.15
0.0 0.0 0.0 0.0
10.0 0.0 0.0 0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

E.11 Eingabesatz für die Rechnung M03R04 (START)

```

F          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET33)
F T T T 100 5000 *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
1.E-05 1.0E+01 1.E-05 1.E-05 1.E-05 1.E-05
10.0 1000. 0. 0.1E-06 3 *TIMES
F 1.00E+03 1.00E+03 3 4 14 T F F F
COMET SMALL SCALE M03R04 (SS)
1. 1.00 1. 1. 1. 1. 1
3 1 20 F * 3 RADIAL, 1 AZIMUTHAL, 20 AXIAL NODES
0.0 0.020 0.035 0.050
0.0 0.785398 *AZIMUTHAL SECTION PI/4
0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 0.12 0.14
0.16 0.18 0.20 0.325 0.45 0.7 0.95 1.20
1.70 2.20 3.20 4.200 5.20
0.00001 0.0001 0.0100 *LAST NUMBER: PARTICLE DIAMETER
4 *RADIAL PERMEABILITIES
1 1 3 1 22 0. *CENTER LINE
4 2 2 3 22 0. *VESSEL WALL(EXEPT FOR WATER INLET)
4 2 2 2 2 1. *VESSEL WALL(WATER INLET)
4 2 2 1 1 0. *VESSEL WALL
3 *AZIMUTHAL PERMEABILITIES
1 1 5 1 22 0.
2 1 5 1 22 0.
3 1 5 1 22 0.
4 *AXIAL PERMEABILITIES
1 1 5 1 3 0. *VESSEL BOTTOM
6 3 5 1 3 0. *PLATE
6 2 2 2 2 0.25 *HOLE
22 2 4 1 3 1. *TOP OF VESSEL
0 *VOLUMETRIC POROSITIES
15 *HYDRAULIC DIAMETERS
2 2 1 3 1 11 .018 .020 .011 *
2 2 1 3 12 13 .028 .034 .011 *
2 2 1 3 14 16 .030 .037 .011 *
2 2 1 3 17 18 .030 .039 .011 *
2 2 1 3 19 22 .018 .039 .011 *
3 3 1 3 1 11 .023 .017 .018 *
3 3 1 3 12 13 .045 .027 .018 *
3 3 1 3 14 16 .050 .028 .018 *
3 3 1 3 17 18 .052 .029 .018 *
3 3 1 3 19 22 .031 .030 .018 *
4 4 1 3 1 11 .027 .017 .021 *
4 4 1 3 12 13 .060 .027 .021 *
4 4 1 3 14 16 .068 .028 .021 *
4 4 1 3 17 18 .073 .029 .021 *
4 4 1 3 19 22 .044 .030 .021 *
0 *ADDITIONAL HYDRAULIC DIAMETERS (NONE)
F F *NUCLEAR REACTOR? (NONE)
0 *FINAL CORRECTION OF SOME SURFACE PERM. AND V.POROSITIES
F 1 *DUMMY PARAMETERS
4 *INITIAL PRESSURE DISTRIBUTION BY VOLUME
1 5 1 3 1 22 1.0E+05 1.0E+05 *P IN GAS LAYER+DUMMY
2 4 2 2 2 6 1.097E+05 1.087E+05 *P IN WATER
5 5 2 2 2 2 1.097E+05 1.097E+05 *P AT WATER INLET
1 5 2 2 7 11 1.087E+05 1.0E+05 *P IN MELT
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY PLANE (NONE)
0 *ADDITIONAL PRESSURE INITIALIZATION BY NODE (NONE)
4 *FIELD 1 (GAS) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC., VOL. FRA
1 5 1 3 1 22 363.15 363.15 1.00 1.00 1. *GAS SP
2 4 2 2 2 6 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000 *WATER
5 5 2 2 2 2 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000 *WATER
2 4 2 2 7 11 363.15 363.15 1.00 1.00 0.000 0.000 *MELT

```

```

3          *FIELD 2 (WATER) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC., VOL. F
1 5 1 3 1 22 363.15 363.15 0. 0. 0. 0. *WATER
2 4 2 2 2 6 363.15 363.15 0. 0. 1.000 1.000 *WATER
5 5 2 2 2 2 363.15 363.15 0. 0. 1.000 1.000 *WATER
2          *FIELD 3 (MELT) INITIALIZATION: TEMP., INERT MASS CONC., VOL. FR
1 5 1 3 1 22 3400.00 3400.00 1. 1. 0. 0. *MELT L
2 4 2 2 7 11 3400.00 3400.00 1. 1. 1.000 1.000 *MELT L
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 1 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 2 (NONE)
0          *ADDITIONAL INITIALIZATIONS FOR FIELD 3 (NONE)
1          *INITIAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS (HOM. ASSUMPTION)
1 5 1 3 1 22 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0          *ADDITIONAL VELOCITIES FOR ALL 3 FIELDS 1 (NONE)
2          * NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
2 2 22 1 3 *3 CELLS WITH BC # 1
3 2 22
4 2 22
2 2 2 2 2 *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
0.0 1.E5 *PRESSURE
10.0 1.E5 *PRESSURE
0.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
10.0 1.00 0.0 1.0 *INERT CONCENTRATIONS
0.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
10.0 1.0 0.0 0.0 *VOLUME FRACTIONS
0.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
10.0 363.15 363.15 363.15 *TEMPERATURES
0.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
10.0 0.0 0.0 0.0 *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5 2 2 1 1 *1 CELL WITH BC # 1
2 2 2 2 2
0.0 109700.0
10.0 109700.0
0.0 1.00 0.0 1.0
10.0 1.00 0.0 1.0
0.0 0.000 1.000 0.0
10.0 0.000 1.000 0.0
0.0 363.15 363.15 363.15
10.0 363.15 363.15 363.15
0.0 0.0 0.0 0.0
10.0 0.0 0.0 0.0
F          *VARIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```

E.12 Eingabesatz für die Rechnung M03R04 (RESTART)

```

T          *** INPUT DADA SET: IRB905.IVA3D.INDATA(COMET33R)
T  T  T  T  100 5000  *ZULETZT: PRINT- UND PLOTFREQUENZEN
  1.E-05  1.0E+01  1.E-05  1.E-05  1.E-05  1.E-05
  10.0    1000.   0.1E-6   3  *TIMES
F  1.00E+03  1.00E+03  3  4  14  F  F  F  F
COMET SMALL SCALE M03R04 (SS)
  1.      1.00      1.      1.      1.      1.  1  1
2
2  2  22  1  3  *NUMBER OF BOUNDARY CONDITIONS
3  2  22  *3 CELLS WITH BC # 1
4  2  22
2  2  2  2  2  *2 POINTS FOR ALL VARIABLES
  0.0      1.E5      *PRESSURE
 10.0      1.E5      *PRESSURE
  0.0      1.00      0.0      1.0  *INERT CONCENTRATIONS
 10.0      1.00      0.0      1.0  *INERT CONCENTRATIONS
  0.0      1.0      0.0      0.0  *VOLUME FRACTIONS
 10.0      1.0      0.0      0.0  *VOLUME FRACTIONS
  0.0      363.15    363.15    363.15  *TEMPERATURES
 10.0      363.15    363.15    363.15  *TEMPERATURES
  0.0      0.0      0.0      0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
 10.0      0.0      0.0      0.0  *PARTICLE NUMBER DENSITIES
5  2  2  1  1  *1 CELL WITH BC # 1
2  2  2  2  2
  0.0 109700.0
 10.0 109700.0
  0.0      1.00      0.0      1.0
 10.0      1.00      0.0      1.0
  0.0      0.000    1.000    0.0
 10.0      0.000    1.000    0.0
  0.0      363.15    363.15    363.15
 10.0      363.15    363.15    363.15
  0.0      0.0      0.0      0.0
 10.0      0.0      0.0      0.0
F          *VERIABLE GEOMETRY (NO)
0          *SOURCES (NONE)

```



## E.13 Programm zum Ausschreiben von benutzerdefinierten Daten

```

C   DECK COMPR30
C
C   DATA SET IRB905.IVA3D.FORT(COMPR30)
C
C   SUBROUTINE DYNPRI (LM,IMP2,JMP2,KMP2,IREGIM,
*                   R,DR,DTH,DZ,GAV,AL,RHOI,P,TAU,
*                   T,S,DIAMP,UU,WW)
C
C   WRITE PLOT DATA
C   (THIS SUBROUTINE IS CALLED EVERY IPRI14 TIME STEPS)
C
C
C   COMMON /SAET3/ T3S,R3S,R3L,R3TS,R3TL,H3S,H3L,H3LS,S3S,S3L,S3LS,
*               CP3S,CP3L,E3S,E3L,L3S,L3L,SIGMA3
C   REAL*4 L3S,L3L
C
C
C   DIMENSION AL (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             RHOI (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             R (IMP2),DR (IMP2),DTH (JMP2),DZ (KMP2),
*             GAV (IMP2,JMP2,KMP2),
*             P (IMP2,JMP2,KMP2),
*             T (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             S (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             DIAMP (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             IREGIM (IMP2,JMP2,KMP2),
*             UU (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             WW (LM,IMP2,JMP2,KMP2)
C
C   MELT MASS IN BUBBLY FLOW (IREGIM=5)
C   MELT MASS PARTICIPATING IN THE BUBBLE THREE PHASE FLOW
C   (THE MOST EXPLOSIVE MIXTURE)
C
C   SUMME0=0.
C   J=2
C   DO 111 I=2,IMP2-1
C   DO 111 K=2,KMP2-1
C   IF (IREGIM(I,J,K).NE.5) GO TO 111
C   ALT =AL(3,I,J,K)
C   SUMME0=SUMME0
*       +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
111 CONTINUE
C   SUMME0=8.*SUMME0
C
C   TOTAL MELT MASS IN INTEGRATION REGION
C   SUMME1=0.
C   J=2
C   DO 121 I=2,IMP2-1
C   DO 121 K=2,KMP2-1
C   ALT = AL(3,I,J,K)
C   IF (ALT.LT.0.0000001) GO TO 121
C   SUMME1=SUMME1
*       +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
121 CONTINUE
C   SUMME1=8.*SUMME1
C
C   MELT MASS IN WATER LAYER
C   SUMME2=0.
C   J=2
C   DO 122 I=2,IMP2-1
C   DO 122 K=2,6

```

```
      ALT = AL(3,I,J,K)
      IF(ALT.LT.0.0000001) GO TO 122
      SUMME2=SUMME2
      *      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
122 CONTINUE
      SUMME2=8.*SUMME2
C
C      MELT MASS IN MELT LAYER
      SUMME3=0.
      J=2
      DO 123 I=2,IMP2-1
      DO 123 K=7,11
      ALT = AL(3,I,J,K)
      IF(ALT.LT.0.0000001) GO TO 123
      SUMME3=SUMME3
      *      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
123 CONTINUE
      SUMME3=8*SUMME3
C
C      MELT MASS IN HOLE
      SUMME4=0
      J=2
      I=2
      K=6
      ALT = AL(3,I,J,K)
      IF(ALT.LT.0.0000001) GO TO 12
      SUMME4=SUMME4
      *      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
12 CONTINUE
      SUMME4=8.*SUMME4
C
C      MELT MASS IN GAS SPACE
      SUMME5=0.
      J=2
      DO 124 I=2,IMP2-1
      DO 124 K=12,KMP2-1
      ALT = AL(3,I,J,K)
      IF(ALT.LT.0.0000001) GO TO 124
      SUMME5=SUMME5
      *      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(3,I,J,K)
124 CONTINUE
      SUMME5=8.*SUMME5
C
C      CHECK ON TOTAL MELT MASS
      SUMME6=SUMME2+SUMME3+SUMME4+SUMME5
C
C      WATER MASS IN GAS SPACE
      SUMME7=0.
      J=2
      DO 125 I=2,IMP2-1
      DO 125 K=12,KMP2-1
C      IF(AL(2,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 125
      SUMME7=SUMME7
      *      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(2,I,J,K)
125 CONTINUE
      SUMME7=8.*SUMME7
C
C      WATER MASS IN HOLE
      SUMME8=0.
      J=2
      I=2
      K=6
      IF(AL(2,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 126
      SUMME8=SUMME8
```

```

*      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*ALT*RHOI(2,I,J,K)
126 CONTINUE
SUMME8=8.*SUMME8
C
C   TOTAL GAS MASS
SUMME9=0.
J=2
DO 1 I=2,IMP2-1
DO 1 K=2,KMP2-1
IF(AL(1,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 1
SUMME9=SUMME9
*      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(1,I,J,K)*RHOI(1,I,J,K)
1 CONTINUE
C
SUMME9=8.*SUMME9
C
C   TOTAL WATER MASS
SUMME10=0.
J=2
DO 2 I=2,IMP2-1
DO 2 K=2,KMP2-1
IF(AL(2,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 2
SUMME10=SUMME10
*      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(2,I,J,K)*RHOI(2,I,J,K)
2 CONTINUE
SUMME10=8.*SUMME10
C
C   WATER MASS IN MELT LAYER
SUMME11=0.
J=2
DO 3 I=2,IMP2-1
DO 3 K=7,11
IF(AL(2,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 3
SUMME11=SUMME11
*      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(2,I,J,K)*RHOI(2,I,J,K)
3 CONTINUE
SUMME11=8.*SUMME11
C
C   WATER MASS IN WATER LAYER
SUMME12=0.
J=2
DO 4 I=2,IMP2-1
DO 4 K=2,6
IF(AL(2,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 4
SUMME12=SUMME12
*      +R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(2,I,J,K)*RHOI(2,I,J,K)
4 CONTINUE
SUMME12=8.*SUMME12
C
C CHECK ON TOTAL WATER MASS
SUMME13=SUMME7+SUMME8+SUMME11+SUMME12
C
C   TOTAL CORIUM ENTHALPY
SUMME14=0.
J=2
DO 7 I=2,IMP2-1
DO 7 K=2,KMP2-1
IF(AL(3,I,J,K).LT.0.000000001) GO TO 7
IF(T(3,I,J,K).GT.T3S) THEN
SUMME14=SUMME14+(CP3L*(T(3,I,J,K)-T3S)+H3L)

```

```

*      *R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(3,I,J,K)*RHOI(3,I,J,K)
ELSE
IF(T(3,I,J,K).EQ.T3S) THEN
SUMME14=SUMME14+(H3LS*(S(3,I,J,K)-S3S)/S3LS+H3S)
*      *R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(3,I,J,K)*RHOI(3,I,J,K)
ELSE
SUMME14=SUMME14+HUO2(T(3,I,J,K))
*      *R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(3,I,J,K)*RHOI(3,I,J,K)
END IF
END IF
7 CONTINUE
8 CONTINUE
SUMME14=8.*SUMME14
C
C TOTAL FUEL SURFACE
SUMME15=0.
J=2
DO 10 I=2,IMP2-1
DO 10 K=2,KMP2-1
IF(AL(3,I,J,K).LT.0.0000001) GO TO 10
IF(DIAMP(3,I,J,K).LE.0.0) GO TO 10
IF(DIAMP(3,I,J,K).LE.0.0000010) WRITE (6,222) I,J,K,DIAMP(3,I,J,K)
222 FORMAT('0MINUTE PARTICLE DIAMETER:',3I5,G13.6)
SUMME15=SUMME15+
*      R(I)*DR(I)*DTH(J)*DZ(K)*GAV(I,J,K)*
*      AL(3,I,J,K)/DIAMP(3,I,J,K)
10 CONTINUE
C 11 CONTINUE
SUMME15=48.*SUMME15
C FACTOR 48. BECAUSE SURFACE = 6.*VOLUME/DIAMETER
C
C
C KMP1=KM+1
C
WRITE(14) TAU,SUMME0,SUMME1,SUMME2,SUMME3,SUMME4,SUMME5,SUMME6,
*      SUMME7,SUMME8,SUMME9,SUMME10,SUMME11,SUMME12,SUMME13,
*      SUMME14,SUMME15,
*      P(2,2,2),P(2,2,3),P(2,2,4),P(2,2,5),P(2,2,6),
*      P(2,2,7),P(2,2,8),P(2,2,9),P(2,2,10),P(2,2,11),
*      P(3,2,2),P(3,2,3),P(3,2,4),P(3,2,5),P(3,2,6),
*      P(3,2,7),P(3,2,8),P(3,2,9),P(3,2,10),P(3,2,11),
*      P(4,2,2),P(4,2,3),P(4,2,4),P(4,2,5),P(4,2,6),
*      P(4,2,7),P(4,2,8),P(4,2,9),P(4,2,10),P(4,2,11),
*      P(2,2,12),P(3,2,13),P(4,2,15),P(2,2,20),P(4,2,18),
*      T(2,2,2,3),T(2,2,2,4),T(2,2,2,5),T(2,2,2,6),
*      T(2,3,2,3),T(2,4,2,2),T(2,3,2,5),T(2,4,2,6),
*      T(2,2,2,7),T(2,2,2,8),T(2,2,2,9),T(2,2,2,10),
*      T(2,2,2,11),T(2,2,2,12),T(2,3,2,14),T(2,4,2,10),
*      T(3,2,2,6),T(3,2,2,7),T(3,2,2,8),T(3,2,2,9),
*      T(3,2,2,10),T(3,2,2,11),T(3,2,2,12),T(3,2,2,14),
*      T(1,2,2,3),T(1,2,2,5),T(1,2,2,6),T(1,2,2,7),
*      T(1,2,2,9),T(1,3,2,11),T(1,3,2,5),T(1,2,2,17),
*      UU(2,4,2,2),WW(2,4,2,2)
RETURN
END

```

## E.14 Programm zum Ausschreiben von Ausgabedaten auf ein File

```

C   DECK MUI3PRIN
C   DATA SET IRB905.IVA3D.FORT(MUI3PRIN)
C
C   SUBROUTINE MUIPRIN(LM,IMP2,JMP2,KMP2,
*                   XN,S,T,AL,DIAMP,PART,
*                   IREGIM,TAU)
C
C   DIMENSION XN (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             S  (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             T  (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             AL (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             IREGIM(IMP2,JMP2,KMP2),
*             DIAMP(LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*             PART(LM,IMP2,JMP2,KMP2)
C
C
C   COMMON /I2TITL/ TITLE(20)
C
C   1 FORMAT (20A4,//
*           AKTUELLE ZEIT  TAU  =',F15.6//)
C
C   WRITE(15,1) (TITLE(I),I=1,20),TAU
C
C
C   42 FORMAT(//' FLOW REGIM IN DER TH-EBENE J=',I2,//
*           ' IREGIM(I,',I2,',K) I=1,2,3.....'//
*           ' K'//)
C
C   41 FORMAT(I4,20I3,
*           /,' ',20I3,
*           /,' ',20I3,
*           /,' ',20I3)
C
C   FORMAT 41 IST DIMENSIONSABHAENGIG
C
C   DO 40 J=2,2
C   WRITE(15,42) J,J
C   DO 40 K=2,KMP2-1
C   K1=KMP2-K+1
C   K2=K1-1
C   WRITE(15,41) K2,(IREGIM(I,J,K1),I=2,IMP2-1)
C   40 CONTINUE
C
C
C   7 FORMAT(//' TEMPERATUR DES ',I2,
*           '-TEN FELDES IN DER TH-EBENE J=',I2,//
*           ' T(',I1,',I,',I2,',K)      I=1      I=2      I=3      ..... '//
*           ' K'//)
C
C   8 FORMAT(I4,11F8.2,
*           /,' ',11F8.2,
*           /,' ',11F8.2,
*           /,' ',11F8.2)
C
C   FORMAT 8 IST DIMENSIONSABHAENGIG
C
C   DO 9 L=1,LM
C   DO 9 J=2,2
C   WRITE(15,7) L,J,L,J
C   DO 9 K=2,KMP2-1
C   K1=KMP2-K+1

```

```

      K2=K1-1
      9 WRITE(15,8) K2,(T(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
C
C
C
      11 FORMAT(//' KONZENTRATION DER INNERTE KOMPONENTE DES ',I2,' FELDES'
      *' IN DER TH-EBENE J=',I2,//
      *'   XN(',I2,',I,',I2,',K)  I=1   I=2   I=3.....'//
      *'   K'//)
C
      12 FORMAT(I4,11F8.5,
      * /,'   ',11F8.5,
      * /,'   ',11F8.5,
      * /,'   ',11F8.5)
C
C
      FORMAT 12 IST DIMENSIONSABHAENGIG
C
      DO 13 L=1,LM
C
      DO 13 J=2,2
      WRITE(15,11) L,J,L,J
      DO 13 K=2,KMP2-1
      K1=KMP2-K+1
      K2=K1-1
      13 WRITE(15,12) K2,(XN(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
C
C
      37 FORMAT(//,' VOLUMENANTEILE DER ',I2,'-TEN GESCHWINDIGKEITSFELDES',
      *' IN DER TH-EBENE J=',I2,//,
      *'   AL(',I2,',I,',I2,',K)  I=1   I=2   I=3.....',//,
      *'   K',//)
C
      DO 38 J=2,2
      DO 38 L=1,LM
      WRITE(15,37) L,J,L,J
      DO 38 K=2,KMP2-1
      K1=KMP2-K+1
      K2=K1-1
      38 WRITE(15,12) K2,(AL(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
C
C
      20 FORMAT(//,' ENTROPIE DES ',I2,'-TEN GESCHWINDIGKEITSFELDES',
      *' IN DER TH-EBENE J=',I2,//,
      *'   S(',I2,',I,',I2,',K)  I=1   I=2   I=3.....',/,
      *'   K',//)
C
      DO 19 L=1,LM
C
      DO 19 J=2,2
      WRITE(15,20) L,J,L,J
      DO 19 K=2,KMP2-1
      K1=KMP2-K+1
      K2=K1-1
      19 WRITE(15,21) K2,(S(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
      21 FORMAT(I4,11F8.0,
      * /,'   ',11F8.0,
      * /,'   ',11F8.0,
      * /,'   ',11F8.0)
C
C
      34 FORMAT(//,' PARTICLES PER UNIT MIXTURE VOLUME DES ',I2,'-TEN',/,
      *' GESCHWINDIGKEITSFELDES IN DER TH-EBENE J=',I2,//,
      *' PART(',I2,',I,',I2,',K)  I=1   I=2   I=3.....',/,

```

```

* ' K',//)
C
DO 35 L=1,LM
C
DO 35 J=2,2
WRITE(15,34) L,J,L,J
DO 35 K=2,KMP2-1
K1=KMP2-K+1
K2=K1-1
35 WRITE(15,36) K2,(PART(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
36 FORMAT(I4,10E12.5,
* /,' ',10E12.5,
* /,' ',10E12.5,
* /,' ',10E12.5)
C
C
C
44 FORMAT(//,' PARTICLE DIAMETERS DES ',I2,'-TEN',
* ' GESCHWINDIGKEITSFELDES IN DER TH-EBENE J=',I2,//,
* ' DIAMP(',I2,',',I,',',I2,',',K) I=1 I=2 I=3.....',/,
* ' K',//)
C
DO 43 L=1,LM
C
DO 43 J=2,2
WRITE(15,44) L,J,L,J
DO 43 K=2,KMP2-1
K1=KMP2-K+1
K2=K1-1
43 WRITE(15,39) K2,(DIAMP(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
39 FORMAT(I4,10F10.7,
* /,' ',10F10.7,
* /,' ',10F10.7,
* /,' ',10F10.7)
C
RETURN
END

```

### E.15 Programm zum Ausschreiben von Geschwindigkeitskomponenten

```

C   DECK MUI3PRIN
C   DATA SET IRB905.IVA3D.FORT(MUI3PRIN)
C
C   SUBROUTINE MUPRINTV(LM,IMP2,JMP2,KMP2,UU,VV,WW)
C
C   DIMENSION UU (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*       VV (LM,IMP2,JMP2,KMP2),
*       WW (LM,IMP2,JMP2,KMP2)
C
17  FORMAT(//,' GESCHWINDIGKEIT ',I2,'-TEN FELDES',
* ' IN DER TH-EBENE J=',I2,/,
* '   UU(',I2,',I,',I2,',K)   I=1   I=2   I=3.....',/,
* '   K',/)
C
DO 18 L=1,LM
C
DO 18 J=2,2
WRITE(15,17) L,J,L,J
DO 18 K=2,KMP2-1
K1=KMP2-K+1
K2=K1-1
18  WRITE(15,19) K2,(UU(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
19  FORMAT(I4,11F8.3,
* /,' ',11F8.3,
* /,' ',11F8.3,
* /,' ',11F8.3)
C
C
23  FORMAT(//,' GESCHWINDIGKEIT ',I2,'-TEN FELDES',
* ' IN DER TH-EBENE J=',I2,/,
* '   WW(',I2,',I,',I2,',K)   I=1   I=2   I=3.....',/,
* '   K',/)
C
DO 24 L=1,3
C
DO 24 J=2,2
WRITE(15,23) L,J,L,J
DO 24 K=2,KMP2-1
K1=KMP2-K+1
K2=K1-1
24  WRITE(15,19) K2,(WW(L,I,J,K1),I=2,IMP2-1)
C
RETURN
END

```



## E.16 Programm zum Umspeichern von Plotdaten

```

C   DECK COMETUM
C   DATA SET IRB905.IVAPLOT.FORT(COMUM30)
C
C   GESCHRIEBEN AM 01.10.92 ZUM UMSPEICHERN DER DATEN VON COMET30
C
CHARACTER NAME*8,XAXET*28,YAXET*28,TEXT*60
PARAMETER (MXY=5500,IYPE=1,LXAXET=28,LYAXET=28,LTEXT=60)
REAL*8 T,S0,S1,S2,S3,S4,S5,S6,S7,S8,S9,S10,S11,S12,S13,S14,S15,
*      P1,P2,P3,P4,P5,P6,P7,P8,P9,P10,P11,P12,P13,P14,P15,
*      P16,P17,P18,P19,P20,P21,P22,P23,P24,P25,P26,P27,P28,
*      P29,P30,P31,P32,P33,P34,P35,
*      T1,T2,T3,T4,T5,T6,T7,T8,T9,T10,T11,T12,T13,T14,T15,
*      T16,T17,T18,T19,T20,T21,T22,T23,T24,T25,T26,T27,T28,T29,
*      T30,T31,T32,UU,WW
DIMENSION T(MXY),S1(MXY),S2(MXY),S3(MXY),S4(MXY),S5(MXY),S6(MXY),
*          S7(MXY),S8(MXY),S9(MXY),S10(MXY),
*          S11(MXY),S12(MXY),S13(MXY),S14(MXY),S15(MXY),
*          P1(MXY),P2(MXY),P3(MXY),P4(MXY),P5(MXY),
*          P6(MXY),P7(MXY),P8(MXY),P9(MXY),P10(MXY),
*          P11(MXY),P12(MXY),P13(MXY),P14(MXY),P15(MXY),
*          P16(MXY),P17(MXY),P18(MXY),P19(MXY),P20(MXY),
*          P21(MXY),P22(MXY),P23(MXY),P24(MXY),P25(MXY),
*          P26(MXY),P27(MXY),P28(MXY),P29(MXY),P30(MXY),
*          P31(MXY),P32(MXY),P33(MXY),P34(MXY),P35(MXY),
*          T1(MXY),T2(MXY),T3(MXY),T4(MXY),T5(MXY),
*          T6(MXY),T7(MXY),T8(MXY),T9(MXY),T10(MXY),
*          T11(MXY),T12(MXY),T13(MXY),T14(MXY),T15(MXY),
*          T16(MXY),T17(MXY),T18(MXY),T19(MXY),T20(MXY),
*          T21(MXY),T22(MXY),T23(MXY),T24(MXY),T25(MXY),
*          T26(MXY),T27(MXY),T28(MXY),T29(MXY),T30(MXY),
*          T31(MXY),T32(MXY),UU(MXY),WW(MXY),
*          S0(MXY)
C
DIMENSION TS(MXY),SS1(MXY),SS2(MXY),SS3(MXY),SS4(MXY),
*          SS5(MXY),SS6(MXY),
*          SS7(MXY),SS8(MXY),SS9(MXY),SS10(MXY),
*          SS11(MXY),SS12(MXY),SS13(MXY),SS14(MXY),SS15(MXY),
*          PS1(MXY),PS2(MXY),PS3(MXY),PS4(MXY),PS5(MXY),
*          PS6(MXY),PS7(MXY),PS8(MXY),PS9(MXY),PS10(MXY),
*          PS11(MXY),PS12(MXY),PS13(MXY),PS14(MXY),PS15(MXY),
*          PS16(MXY),PS17(MXY),PS18(MXY),PS19(MXY),PS20(MXY),
*          PS21(MXY),PS22(MXY),PS23(MXY),PS24(MXY),PS25(MXY),
*          PS26(MXY),PS27(MXY),PS28(MXY),PS29(MXY),PS30(MXY),
*          PS31(MXY),PS32(MXY),PS33(MXY),PS34(MXY),PS35(MXY),
*          TS1(MXY),TS2(MXY),TS3(MXY),TS4(MXY),TS5(MXY),
*          TS6(MXY),TS7(MXY),TS8(MXY),TS9(MXY),TS10(MXY),
*          TS11(MXY),TS12(MXY),TS13(MXY),TS14(MXY),TS15(MXY),
*          TS16(MXY),TS17(MXY),TS18(MXY),TS19(MXY),TS20(MXY),
*          TS21(MXY),TS22(MXY),TS23(MXY),TS24(MXY),TS25(MXY),
*          TS26(MXY),TS27(MXY),TS28(MXY),TS29(MXY),TS30(MXY),
*          TS31(MXY),TS32(MXY),UUS(MXY),WWS(MXY),
*          SS0(MXY)
C
C   XAXET='TIME (S)'
C
C   DO 4 M=1,9000
C 4 READ (21,END=250)
C
C   MMAX=MXY
C   NXY=0

```

```

K=0
10 DO 20 M=1,MMAX
  NXY=NXY+1
  K=K+1
  READ (21,END=250)
  READ (21,END=250)
  READ (21,END=250)
  READ (21,END=250) T(K),S0(K),S1(K),S2(K),S3(K),S4(K),S5(K),S6(K),
* S7(K),S8(K),S9(K),S10(K),S11(K),S12(K),S13(K),
* S14(K),S15(K),
* P1(K),P2(K),P3(K),P4(K),P5(K),
* P6(K),P7(K),P8(K),P9(K),P10(K),
* P11(K),P12(K),P13(K),P14(K),P15(K),
* P16(K),P17(K),P18(K),P19(K),P20(K),
* P21(K),P22(K),P23(K),P24(K),P25(K),
* P26(K),P27(K),P28(K),P29(K),P30(K),
* P31(K),P32(K),P33(K),P34(K),P35(K),
* T1(K),T2(K),T3(K),T4(K),T5(K),
* T6(K),T7(K),T8(K),T9(K),T10(K),
* T11(K),T12(K),T13(K),T14(K),T15(K),
* T16(K),T17(K),T18(K),T19(K),T20(K),
* T21(K),T22(K),T23(K),T24(K),T25(K),
* T26(K),T27(K),T28(K),T29(K),T30(K),
* T31(K),T32(K),UU(K),WW(K)
  READ (21,END=250)
  READ (21,END=250)

```

C

```

P1(K)=P1(K)*1.E-5
P2(K)=P2(K)*1.E-5
P3(K)=P3(K)*1.E-5
P4(K)=P4(K)*1.E-5
P5(K)=P5(K)*1.E-5
P6(K)=P6(K)*1.E-5
P7(K)=P7(K)*1.E-5
P8(K)=P8(K)*1.E-5
P9(K)=P9(K)*1.E-5
P10(K)=P10(K)*1.E-5
P11(K)=P11(K)*1.E-5
P12(K)=P12(K)*1.E-5
P13(K)=P13(K)*1.E-5
P14(K)=P14(K)*1.E-5
P15(K)=P15(K)*1.E-5
P16(K)=P16(K)*1.E-5
P17(K)=P17(K)*1.E-5
P18(K)=P18(K)*1.E-5
P19(K)=P19(K)*1.E-5
P20(K)=P20(K)*1.E-5
P21(K)=P21(K)*1.E-5
P22(K)=P22(K)*1.E-5
P23(K)=P23(K)*1.E-5
P24(K)=P24(K)*1.E-5
P25(K)=P25(K)*1.E-5
P26(K)=P26(K)*1.E-5
P27(K)=P27(K)*1.E-5
P28(K)=P28(K)*1.E-5
P29(K)=P29(K)*1.E-5
P30(K)=P30(K)*1.E-5
P31(K)=P31(K)*1.E-5
P32(K)=P32(K)*1.E-5
P33(K)=P33(K)*1.E-5
P34(K)=P34(K)*1.E-5
P35(K)=P35(K)*1.E-5

```

C

```

WRITE(6,111) K,T(K),S1(K),S2(K),S3(K),S4(K),S5(K),S6(K),

```

```

*          S7(K),S8(K),S9(K),S10(K),S11(K),S12(K),S13(K),
*          S14(K),S15(K),
*          P1(K),P2(K),P3(K),P4(K),P5(K),
*          P6(K),P7(K),P8(K),P9(K),P10(K),
*          P11(K),P12(K),P13(K),P14(K),P15(K),
*          P16(K),P17(K),P18(K),P19(K),P20(K),
*          P21(K),P22(K),P23(K),P24(K),P25(K),
*          P26(K),P27(K),P28(K),P29(K),P30(K),
*          P31(K),P32(K),P33(K),P34(K),P35(K),
*          T1(K),T2(K),T3(K),T4(K),T5(K),
*          T6(K),T7(K),T8(K),T9(K),T10(K),
*          T11(K),T12(K),T13(K),T14(K),T15(K),
*          T16(K),T17(K),T18(K),T19(K),T20(K),
*          T21(K),T22(K),T23(K),T24(K),T25(K),
*          T26(K),T27(K),T28(K),T29(K),T30(K),
*          T31(K),T32(K),UU(K),WW(K),S0(K)

```

20 CONTINUE

C 111 FORMAT (I6,7G14.7/7G14.7/14X,5F10.4)

C 111 FORMAT (I6,F8.6,6F8.2,F11.1,6F8.3/14X,5F10.4)

111 FORMAT (I6,F12.9,8F8.3/14X,5F8.3/14X,2G12.5/14X,10F10.4/14X,

\* 10F10.4/14X,10F10.4/14X,5F10.4/14X,

\* 10F10.4/14X,10F10.4/14X,10F10.4/14X,2F10.4/14X,

\* 2F8.5/14X,G20.4)

NXY=NXY+1

250 CONTINUE

KENN2=1

NXY=NXY-1

C

DO 300 IK=1,NXY

TS(IK)=REAL(T(IK))

SS0(IK)=REAL(S0(IK))

SS1(IK)=REAL(S1(IK))

SS2(IK)=REAL(S2(IK))

SS3(IK)=REAL(S3(IK))

SS4(IK)=REAL(S4(IK))

SS5(IK)=REAL(S5(IK))

SS6(IK)=REAL(S6(IK))

SS7(IK)=REAL(S7(IK))

SS8(IK)=REAL(S8(IK))

SS9(IK)=REAL(S9(IK))

SS10(IK)=REAL(S10(IK))

SS11(IK)=REAL(S11(IK))

SS12(IK)=REAL(S12(IK))

SS13(IK)=REAL(S13(IK))

SS14(IK)=REAL(S14(IK))

SS15(IK)=REAL(S15(IK))

PS1(IK)=REAL(P1(IK))

PS2(IK)=REAL(P2(IK))

PS3(IK)=REAL(P3(IK))

PS4(IK)=REAL(P4(IK))

PS5(IK)=REAL(P5(IK))

PS6(IK)=REAL(P6(IK))

PS7(IK)=REAL(P7(IK))

PS8(IK)=REAL(P8(IK))

PS9(IK)=REAL(P9(IK))

PS10(IK)=REAL(P10(IK))

PS11(IK)=REAL(P11(IK))

PS12(IK)=REAL(P12(IK))

PS13(IK)=REAL(P13(IK))

PS14(IK)=REAL(P14(IK))

PS15(IK)=REAL(P15(IK))

PS16(IK)=REAL(P16(IK))

PS17(IK)=REAL(P17(IK))

PS18(IK)=REAL(P18(IK))

```
PS19(IK)=REAL(P19(IK))
PS20(IK)=REAL(P20(IK))
PS21(IK)=REAL(P21(IK))
PS22(IK)=REAL(P22(IK))
PS23(IK)=REAL(P23(IK))
PS24(IK)=REAL(P24(IK))
PS25(IK)=REAL(P25(IK))
PS26(IK)=REAL(P26(IK))
PS27(IK)=REAL(P27(IK))
PS28(IK)=REAL(P28(IK))
PS29(IK)=REAL(P29(IK))
PS30(IK)=REAL(P30(IK))
PS31(IK)=REAL(P31(IK))
PS32(IK)=REAL(P32(IK))
PS33(IK)=REAL(P33(IK))
PS34(IK)=REAL(P34(IK))
PS35(IK)=REAL(P35(IK))
TS1(IK)=REAL(T1(IK))
TS2(IK)=REAL(T2(IK))
TS3(IK)=REAL(T3(IK))
TS4(IK)=REAL(T4(IK))
TS5(IK)=REAL(T5(IK))
TS6(IK)=REAL(T6(IK))
TS7(IK)=REAL(T7(IK))
TS8(IK)=REAL(T8(IK))
TS9(IK)=REAL(T9(IK))
TS10(IK)=REAL(T10(IK))
TS11(IK)=REAL(T11(IK))
TS12(IK)=REAL(T12(IK))
TS13(IK)=REAL(T13(IK))
TS14(IK)=REAL(T14(IK))
TS15(IK)=REAL(T15(IK))
TS16(IK)=REAL(T16(IK))
TS17(IK)=REAL(T17(IK))
TS18(IK)=REAL(T18(IK))
TS19(IK)=REAL(T19(IK))
TS20(IK)=REAL(T20(IK))
TS21(IK)=REAL(T21(IK))
TS22(IK)=REAL(T22(IK))
TS23(IK)=REAL(T23(IK))
TS24(IK)=REAL(T24(IK))
TS25(IK)=REAL(T25(IK))
TS26(IK)=REAL(T26(IK))
TS27(IK)=REAL(T27(IK))
TS28(IK)=REAL(T28(IK))
TS29(IK)=REAL(T29(IK))
TS30(IK)=REAL(T30(IK))
TS31(IK)=REAL(T31(IK))
TS32(IK)=REAL(T32(IK))
UUS(IK)=REAL(UU(IK))
WWS(IK)=REAL(WW(IK))
```

300 CONTINUE

C

```
KENN1=0
NAME='MIXBUBBL '
TEXT='MELT MASS IN THREE PHASE BUBBLE FLOW '
YAXET='MASS (KG) '
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS0(K),K=1,NXY)
NO=0
WRITE (6,222) NO
```

C

```

C   FIGURE 1
C
KENN1=1
NAME='MASSTOT '
TEXT='TOTAL MELT IN INTEGRATION REGION'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS1(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 2
C
KENN1=2
NAME='MELINWAT'
TEXT='MELT IN WATER LAYER'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS2(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 3
C
KENN1=3
NAME='MELINMEL'
TEXT='MELT IN MELT LAYER'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS3(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 4
C
KENN1=4
NAME='MELINHOL'
TEXT='MELT IN HOLE'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS4(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 5
C
KENN1=5
NAME='MELINGAS'
TEXT='MELT IN GAS SPACE'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS5(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 6
C
KENN1=6
NAME='CKTOTMEL'

```

```
TEXT='CHEK ON TOTAL MELT MASS'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (SS6(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 7

```
KENN1=7  
NAME='WATINGAS'  
TEXT='WATER MASS IN GAS SPACE'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (SS7(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN2
```

C  
C  
C

FIGURE 8

```
KENN1=8  
NAME='WATINHOL'  
TEXT='WATER MASS IN HOLE'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (SS8(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 9

```
KENN1=9  
NAME='TOTALGAS'  
TEXT='TOTAL GAS IN INTEGRATION REGION'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (SS9(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 10

```
KENN1=10  
NAME='TOTWATER'  
TEXT='TOTAL WATER MASS IN INTEGRATION REGION'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (SS10(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 11

```
KENN1=11  
NAME='WATINMEL'  
TEXT='WATER MASS IN MELT LAYER'  
YAXET='MASS (KG)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
```

```

WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS11(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 12

```

KENN1=12
NAME='WATINWAT'
TEXT='WATER MASS IN WATER LAYER'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS12(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 13

```

KENN1=13
NAME='CKTOTWAT'
TEXT='CHECK ON TOTAL WATER MASS'
YAXET='MASS (KG)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS13(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 14

```

KENN1=14
NAME='ENTHALPY'
TEXT='TOTAL MELT ENTHALPY'
YAXET='ENTHALPY (J) '
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS14(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 15

```

KENN1=15
NAME='SURFACE'
TEXT='TOTAL MELT SURFACE'
YAXET='SURFACE (M**2)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (SS15(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C  
C

FIGURE 16

```

KENN1=16
NAME='P(2,2,2)'
TEXT='P(2,2,2), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS1(K),K=1,NXY)

```

```
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 17
C
KENN1=17
NAME='P(2,2,3)'
TEXT='P(2,2,3), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS2(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 18
C
KENN1=18
NAME='P(2,2,4)'
TEXT='P(2,2,4), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS3(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 19
C
KENN1=19
NAME='P(2,2,5)'
TEXT='P(2,2,5), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS4(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 20
C
KENN1=20
NAME='P(2,2,6)'
TEXT='P(2,2,6), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS5(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 21
C
KENN1=21
NAME='P(2,2,7)'
TEXT='P(2,2,7), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS6(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

C
C   FIGURE 22
C
```



```

KENN1=22
NAME='P(2,2,8)'
TEXT='P(2,2,8), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS7(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

```

C
C  FIGURE 23
C

```

```

KENN1=23
NAME='P(2,2,9)'
TEXT='P(2,2,9), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS8(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

```

C
C  FIGURE 24
C

```

```

KENN1=24
NAME='P(2,2,10)'
TEXT='P(2,2,10), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS9(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

```

C
C  FIGURE 25
C

```

```

KENN1=25
NAME='P(2,2,11)'
TEXT='P(2,2,11), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS10(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

```

C
C  FIGURE 26
C

```

```

KENN1=26
NAME='P(3,2,2)'
TEXT='P(3,2,2), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS11(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

```

C
C  FIGURE 27
C

```

```

KENN1=27
NAME='P(3,2,3)'
TEXT='P(3,2,3), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'

```

```
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS12(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 28

```
KENN1=28  
NAME='P(3,2,4)'  
TEXT='P(3,2,4), WATER LAYER'  
YAXET='PRESSURE (BAR)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS13(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 29

```
KENN1=29  
NAME='P(3,2,5)'  
TEXT='P(3,2,5), WATER LAYER'  
YAXET='PRESSURE (BAR)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS14(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 30

```
KENN1=30  
NAME='P(3,2,6)'  
TEXT='P(3,2,6), WATER LAYER'  
YAXET='PRESSURE (BAR)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS15(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 31

```
KENN1=31  
NAME='P(3,2,7)'  
TEXT='P(3,2,7), MELT LAYER'  
YAXET='PRESSURE (BAR)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS16(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 32

```
KENN1=32  
NAME='P(3,2,8)'  
TEXT='P(3,2,8), MELT LAYER'  
YAXET='PRESSURE (BAR)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (PS17(K),K=1,NXY)
```

```

WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 33
C
KENN1=33
NAME='P(3,2,9)'
TEXT='P(3,2,9), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS18(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 34
C
KENN1=34
NAME='P(3,2,10)'
TEXT='P(3,2,10),MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS19(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 35
C
KENN1=35
NAME='P(3,2,11)'
TEXT='P(3,2,11),GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS20(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 36
C
KENN1=36
NAME='P(4,2,2)'
TEXT='P(4,2,2), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS21(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 37
C
KENN1=37
NAME='P(4,2,3)'
TEXT='P(4,2,3), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS22(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 38
C

```

```
KENN1=38
NAME='P(4,2,4)'
TEXT='P(4,2,4), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS23(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 39

```
KENN1=39
NAME='P(4,2,5)'
TEXT='P(4,2,5), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS24(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 40

```
KENN1=40
NAME='P(4,2,6)'
TEXT='P(4,2,6), WATER LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS25(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 41

```
KENN1=41
NAME='P(4,2,7)'
TEXT='P(4,2,7), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS26(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 42

```
KENN1=42
NAME='P(4,2,8)'
TEXT='P(4,2,8), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS27(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 43

```
KENN1=43
NAME='P(4,2,9)'
TEXT='P(4,2,9), MELT LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
```

```

WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS28(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 44

```

KENN1=44
NAME='P(4,2,10)'
TEXT='P(4,2,10), MELTR LAYER'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS29(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 45

```

KENN1=45
NAME='P(4,2,11)'
TEXT='P(4,2,11), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS30(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 46

```

KENN1=46
NAME='P(2,2,12)'
TEXT='P(2,2,12), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS31(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 47

```

KENN1=47
NAME='P(3,2,13)'
TEXT='P(3,2,13), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS32(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 48

```

KENN1=48
NAME='P(4,2,15)'
TEXT='P(4,2,15), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS33(K),K=1,NXY)

```

```
WRITE (6,222) KENN1
C
C FIGURE 49
C
KENN1=49
NAME='P(2,2,20)'
TEXT='P(2,2,20), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS34(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C FIGURE 50
C
KENN1=50
NAME='P(4,2,18)'
TEXT='P(4,2,18), GAS SPACE'
YAXET='PRESSURE (BAR)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (PS35(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C FIGURE 51
C
KENN1=51
NAME='T(2,223)'
TEXT='T(2,2,2,3), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS1(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C FIGURE 52
C
KENN1=52
NAME='T(2,224)'
TEXT='T(2,2,2,4), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS2(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C FIGURE 53
C
KENN1=53
NAME='T(2,225)'
TEXT='T(2,2,2,5), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
* ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS3(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C FIGURE 54
C
```

```

KENN1=54
NAME='T(2,226)'
TEXT='T(2,2,2,6), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS4(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 55

```

KENN1=55
NAME='T(2,323)'
TEXT='T(2,3,2,3), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS5(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 56

```

KENN1=56
NAME='T(2,422)'
TEXT='T(2,4,2,2), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS6(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 57

```

KENN1=57
NAME='T(2,325)'
TEXT='T(2,3,2,5), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS7(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 58

```

KENN1=58
NAME='T(2,426)'
TEXT='T(2,4,2,6), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS8(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 59

```

KENN1=59
NAME='T(2,227)'
TEXT='T(2,2,2,7), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'

```

```
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS9(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 60

```
KENN1=60  
NAME='T(2,228)'  
TEXT='T(2,2,2,8), MELT LAYER'  
YAXET='TEMPRATURE (K)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS10(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 61

```
KENN1=61  
NAME='T(2,229)'  
TEXT='T(2,2,2,9), MELT LAYER'  
YAXET='TEMPRATURE (K)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS11(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 62

```
KENN1=62  
NAME='T(2,2210)'  
TEXT='T(2,2,2,10), MELT LAYER'  
YAXET='TEMPRATURE (K)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS12(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 63

```
KENN1=63  
NAME='T(2,2211)'  
TEXT='T(2,2,2,11), GAS SPACE'  
YAXET='TEMPRATURE (K)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS13(K),K=1,NXY)  
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 64

```
KENN1=64  
NAME='T(2,2212)'  
TEXT='T(2,2,2,12), GAS SPACE'  
YAXET='TEMPRATURE (K)'  
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,  
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT  
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)  
WRITE (22) (TS14(K),K=1,NXY)
```



```
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
KENN1=65
NAME='T(2,3214)'
TEXT='T(2,3,2,14), GAS SPACE'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS15(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
FIGURE 66

KENN1=66
NAME='T(2,4210)'
TEXT='T(2,4,2,10), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS16(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
FIGURE 67

KENN1=67
NAME='T(3,226)'
TEXT='T(3,2,2,6), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS17(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
FIGURE 68

KENN1=68
NAME='T(3,227)'
TEXT='T(3,2,2,7), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS18(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
FIGURE 69

KENN1=69
NAME='T(3,228)'
TEXT='T(3,2,2,8), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS19(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

```
C
C
C
```

```
FIGURE 70
```

```
KENN1=70
NAME='T(3,229)'
TEXT='T(3,2,2,9), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS20(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 71

```
KENN1=71
NAME='T(3,2210)'
TEXT='T(3,2,2,10), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS21(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 72

```
KENN1=72
NAME='T(3,2211)'
TEXT='T(3,2,2,11), GAS SPACE'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS22(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 73

```
KENN1=73
NAME='T(3,2212)'
TEXT='T(3,2,2,12), GAS SPACE'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS23(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 74

```
KENN1=74
NAME='T(3,2214)'
TEXT='T(3,2,2,14), GAS SPACE'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS24(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1
```

C  
C  
C

FIGURE 75

```
KENN1=75
NAME='T(1,223)'
TEXT='T(1,2,2,3), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
```

```

WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS25(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 76

```

KENN1=76
NAME='T(1,225)'
TEXT='T(1,2,2,5), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS26(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 77

```

KENN1=77
NAME='T(1,226)'
TEXT='T(1,2,2,6), WATER LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS27(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 78

```

KENN1=78
NAME='T(1,227)'
TEXT='T(1,2,2,7), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS28(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 79

```

KENN1=79
NAME='T(1,229)'
TEXT='T(1,2,2,9), MELT LAYER'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS29(K),K=1,NXY)
WRITE (6,222) KENN1

```

C  
C  
C

FIGURE 80

```

KENN1=80
NAME='T(1,3211)'
TEXT='T(1,3,2,11), GAS SPACE'
YAXET='TEMPRATURE (K)'
WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*      ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
WRITE (22) (TS30(K),K=1,NXY)

```

```
WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 81
C
   KENN1=81
   NAME='T(1,325)'
   TEXT='T(1,3,2,5), WATER LAYER'
   YAXET='TEMPRATURE (K)'
   WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*       ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
   WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
   WRITE (22) (TS31(K),K=1,NXY)
   WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 82
C
   KENN1=82
   NAME='T(1,2217)'
   TEXT='T(1,2,2,17), GAS SPACE'
   YAXET='TEMPRATURE (K)'
   WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*       ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
   WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
   WRITE (22) (TS32(K),K=1,NXY)
   WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 83
C
   KENN1=83
   NAME='U(2,422)'
   TEXT='U(2,4,2,2), WATER LAYER'
   YAXET='RADIAL VELOCITY (M/S)'
   WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*       ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
   WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
   WRITE (22) (UUS(K),K=1,NXY)
   WRITE (6,222) KENN1
C
C   FIGURE 84
C
   KENN1=84
   NAME='U(2,422)'
   TEXT='T(2,4,2,2), MELT LAYER'
   YAXET='AXIAL VELOCITY (M/S)'
   WRITE (22) NXY,NAME,KENN1,KENN2,
*       ITYPE,LXAXET,LYAXET,LTEXT,XAXET,YAXET,TEXT
   WRITE (22) (TS(K),K=1,NXY)
   WRITE (22) (WWS(K),K=1,NXY)
   WRITE (6,222) KENN1
C
C
222 FORMAT ('0FIGURE',I3,' WRITTEN')
STOP
END
```

### E.17 Programm zur Umwandlung von Geschwindigkeitsdaten

```

C   DECK IVA3VIS
C
C   DATA SET IRB905.IVA3D.CNTL(IVA3VIS)
C
C   PROGRAM IVAVIS
C
C   PARAMETER (IMAX=3,KMAX=12)
C   PARAMETER (IMP1=IMAX+1,IMP2=IMAX+2,KMP1=KMAX+1,KMP2=KMAX+2)
C
C   DIMENSION R(IMP2),Z(KMP2),
C   *          RR(IMP2),ZZ(KMP2),
C   *          U(IMP1,KMP1),
C   *          W(IMP1,KMP1)
C   REAL*8 RR,ZZ,UU,WW
C   CHARACTER*8 CCNAME,CCNUMB,CCAUTH,CCDATE,CCTIME
C   CHARACTER*8 CSNAME/' '/
C
C   NF=20
C   NULL=0
C   ISDIM=2
C   ISNO=IMAX*KMAX
C   NONE=1
C   ISORD=12
C   ZERO=0.
C
C   IDDBL=1
C   CCNAME='1.01'
C   WRITE(NF) NULL,IDDBL,CCNAME
C   KZ=1
C   CCNAME='IVA3'
C   CCNUMB=' '
C   CCAUTH=' '
C   CCDATA=' '
C   CCTIME=' '
C   WRITE(NF) KZ,NULL,CCNAME,CCNUMB,CCAUTH,CCDATE,CCTIME
C   KZ=2
C   CCNAME=' '
C   CCNUMB=' '
C   CCAUTH='MUSSA'
C   CCDATA=' '
C   CCTIME=' '
C   WRITE(NF) KZ,NULL,CCNAME,CCNUMB,CCAUTH,CCDATE,CCTIME
C   KZ=3
C   CCNAME=' '
C   CCNUMB=' '
C   CCAUTH=' '
C   CCDATA=' '
C   CCTIME=' '
C   WRITE(NF) KZ,ISDIM,CCNAME,CCNUMB,CCAUTH,CCDATE,CCTIME
C   WRITE(NF) CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME
C   *          ,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME
C   WRITE(NF) CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME
C   *          ,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME,CSNAME
C   M=0
C
C   8 N=0
C   1 READ(11,END=4) IM,KM,(RR(I),I=1,IMP2),(ZZ(K),K=1,KMP2)
C   IF (IM.NE.IMAX.OR.KM.NE.KMAX) THEN
C   WRITE(6,101) IM,KM
C   101 FORMAT('0FEHLER: IM =',I3,', KM =',I3)
C   STOP

```

```
ENDIF
READ(11) J,TAU
IF (N.EQ.0.AND.M.EQ.0) THEN
C-  GEOMETRIE
    KZ=4
    MM=3
    CCNAME='GEOMETRY'
    IZSYS=220
    IZLOC=11
    WRITE(NF) KZ,MM,CCNAME,ISDIM,NONE,IZSYS
    WRITE(NF) IMP1,KMP1,NULL,IZLOC,ZERO,ZERO,ZERO
    R(1)=0.
    DO 5 I=2,IMP1
5  R(I)=2.*RR(I)-R(I-1)
    Z(1)=0.
    DO 6 K=2,KMP1
6  Z(K)=2.*ZZ(K)-Z(K-1)
    WRITE(NF) (R(I),I=1,IMP1)
    WRITE(NF) (Z(K),K=1,KMP1)
ENDIF
IF (N.EQ.0) THEN
C-  ZEIT
    KZ=10
    CCNAME='CYCL'
    WRITE(NF) KZ,NULL,CCNAME,M,TAU,NULL
ENDIF
N=N+1
KZ=15
MM=3
CSNAME(1:4)='L ='
WRITE(CSNAME(5:6),'(I2)') N
WRITE(NF) KZ,MM,CSNAME,ISNO,ISDIM,NONE
WRITE(NF) ISDIM,NULL,NULL,NULL,ISORD,NULL
C
DO 2 K=1,KMP1
DO 2 I=1,IMP1
C
C-  VOLFLU=UU(L,I,J,K)
C-  VOLFLW=WW(L,I,J,K)
C
READ(11) UU,WW
IF (I.GT.1.AND.K.GT.1) THEN
U(I-1,K-1)=UU
W(I-1,K-1)=WW
ENDIF
2 CONTINUE
C
WRITE(NF) ((U(I,K),I=1,IM),K=1,KM)
WRITE(NF) ((W(I,K),I=1,IM),K=1,KM)
C
GO TO 1
4 CONTINUE
M=M+1
IF (M.LT.7) GO TO 8
WRITE(6,102) N
102 FORMAT('0DATEI-ENDE',I5)
C
STOP
END
```

## E.18 JCL für die Erstellung eines Loadmoduls

```

//IRB905A1 JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,REGION=3999K,
// NOTIFY=IRB905,MSGCLASS=H,TIME=(1,59)
// EXEC PGM=IEFBR14
/**D1 DD DISP=(OLD,DELETE),DSN=IRB905.IVA3D.LOAD
/**MAIN LINES=999
// EXEC ASC
//A.SYSIN DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(TLEFT),DISP=SHR
// EXEC FVCL,PARM.C='NOMAP,AUTODBL(DBLPAD),FLAG(W),SDUMP',
// PARM.L='LIST,MAP',LIB=DUMMY
//C.SYSIN DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(MUIVA3D),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4RES),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4RES),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4ALENT),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(MUI3RES),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3PLOTI),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3PRINT),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(MUI3PRIN),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(COMPR30),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3VELO),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3COEF3),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3ENTROP),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3PART),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3ALPHA),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(MUMASCON),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3POIS1),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3POIS2),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3POIS3),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3POIS4),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3MATRI),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3RAND),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4CONSTI),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3SOURCE),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3MOMENT),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3DPDZ),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3LINKHM),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3FRAG),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3REGIM),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3FUEL),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(MUI3MAST),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3HEATTR),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3EOS),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4EOSSS),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3READ),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I3TURBO),DISP=SHR
// DD DSN=IRB905.IVA3D.FORT(I4CRITI),DISP=SHR
//L.SYSLMOD DD DISP=SHR,UNIT=IRB,
/**L.SYSLMOD DD DISP=(NEW,CATLG),
/** SPACE=(TRK,(300,150,20)),UNIT=IRB,
/** DCB=(RECFM=U,BLKSIZE=24300),
// DSN=IRB905.IVA3D.LOAD(SCOMET31)
//L.SYSIN DD *
NAME SCOMET31(R)
/*
/**L.SYSLMOD DD DISP=SHR,DSN=IRB905.IVA3D.LOAD(IVA3D)

```

**E.19 JCL für den START einer IVA3-Rechnung**

```

//IRB905AA JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,REGION=3999K,
// NOTIFY=IRB905,MSGCLASS=H,TIME=(1,0)
// EXEC PGM=IEFBRI4
//***** STARTING WITH COMET31 *****
//**D1 DD DISP=(OLD,DELETE),DSN=IRB905.SC31VP1
//**D2 DD DISP=(OLD,DELETE),DSN=IRB905.SC31PLT
//**D3 DD DISP=(OLD,DELETE),DSN=IRB905.SC31RE.DATA
//**D4 DD DISP=(OLD,DELETE),DSN=IRB905.SC31DAT1
//*MAIN LINES=999
// EXEC FVG,LIBG='IRB905.IVA3D.LOAD(SCOMET31)',NAME=SCOMET31
//G.FT11F001 DD DISP=(NEW,CATLG),UNIT=IRB,
// SPACE=(TRK,(300,150),RLSE),DSN=IRB905.SC31VP1,
// DCB=(RECFM=VBS,BLKSIZE=23476)
//G.FT12F001 DD DUMMY
//G.FT13F001 DD UNIT=IRB,DISP=(NEW,CATLG),
// SPACE=(TRK,(300,150,15)),
// DCB=(BLKSIZE=23476,RECFM=VBS),
// DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE1)
//G.FT14F001 DD UNIT=IRB,
// SPACE=(TRK,(300,150)),DISP=(NEW,CATLG),
// DSN=IRB905.SC31PLT,
// DCB=(BLKSIZE=23476,RECFM=VBS)
//G.FT15F001 DD UNIT=IRB,
// SPACE=(TRK,(300,150),RLSE),DISP=(NEW,CATLG),
// DSN=IRB905.SC31DAT1,
// DCB=(BLKSIZE=23476,RECFM=FB,LRECL=80)
//G.FT01F001 DD DSN=IRB905.IVA3D.INDATA(COMET31),DISP=SHR

```

**E.20 JCL für den RESTART einer IVA3-Rechnung**

```

//IRB905AB JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,REGION=3999K,
// NOTIFY=IRB905,MSGCLASS=H,TIME=(10,0)
//*NET ID=IRB905X,RL=IRB905AC
//*****NET ID=IRB905X,HC=1
//*****NET ID=IRB905X,HC=1,RL=IRB905AD
//***** RESTARTING WITH COMET31R *****
//*MAIN LINES=999
// EXEC FVG,LIBG='IRB905.IVA3D.LOAD(SCOMET31)',NAME=SCOMET31
//G.FT11F001 DD DISP=(NEW,CATLG),UNIT=IRB,
// SPACE=(TRK,(300,150),RLSE),
// DSN=IRB905.SC31VP2,
// DCB=(RECFM=VBS,BLKSIZE=23476)
//G.FT12F001 DD UNIT=IRB,DISP=SHR,
// DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE1)
//G.FT13F001 DD UNIT=IRB,DISP=SHR,
// DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE2)
//G.FT14F001 DD UNIT=IRB,DISP=MOD,
// DSN=IRB905.SC31PLT
//G.FT15F001 DD UNIT=IRB,DISP=(NEW,CATLG),
// SPACE=(TRK,(300,150),RLSE),
// DCB=(RECFM=FB,BLKSIZE=23476,LRECL=80),
// DSN=IRB905.SC31DAT2
//G.FT01F001 DD DSN=IRB905.IVA3D.INDATA(COMET31R),DISP=SHR

```



## E.21 JCL für die Umwandlung von Plotdaten (PLOTEASY)

```
//IRB905UM JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,NOTIFY=IRB905,MSGCLASS=H,
// REGION=4000K
// *MAIN LINES=999
// ** IRB905.IVA3D.CNTL(UMKOP)
// **MAIN ORG=RM003
// EXEC F7CG,PARM.G='SIZE=9000K'
//C.SYSIN DD DSN=IRB905.IVAPLOT.FORT(COMUM30),DISP=SHR
//G.FT21F001 DD DSN=IRB905.SC30PLT,DISP=SHR
// **G.FT22F001 DD UNIT=IRB,DISP=(NEW,CATLG),
//G.FT22F001 DD UNIT=IRB,DISP=SHR,
// DCB=DCB.VBS,SPACE=(TRK,(900,500),RLSE),
// DSN=IRB905.C20UM
```

## E.22 JCL für die Umwandlung der Geschwindigkeitsdaten

```
//IRB905A5 JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,MSGCLASS=H
// ** IVA3-DATEI IN VISART-FORMAT UMSETZEN.
// *MAIN LINES=50
// **
// EXEC F7CG
//C.SYSIN DD DSN=IRB905.VISART1.CNTL(IVA3VIS),DISP=SHR
//G.FT11F001 DD DSN=IRB905.SC30VP1,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP2,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP3,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP4,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP5,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP6,DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.SC30VP7,DISP=SHR
// ** ** ** DD DSN=IRB905.SC30VP7,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//G.FT20F001 DD DSN=IRB905.IVA3DAT,DISP=SHR
// **G.FT20F001 DD DSN=IRB905.IVA3DAT,UNIT=IRB,DISP=(,CATLG),
// ** DCB=(RECFM=VBS,LRECL=23476,BLKSIZE=23476),SPACE=(CYL,(1,1))
```

## E.23 JCL für das Plotten von Volumenstrombildern

```
//IRB905A5 JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,REGION=4096K,MSGCLASS=H,
// TIME=3
// ** VERSATEC-HYD PLOT8 - LINK AND GO. ACHTUNG: UNNUM GEBEN.
// ** ***** MUSTER-JCL; STEHT IN 'INR308.VISART.CNTL(GHPLT8VS)' *****
// *MAIN LINES=10
// **
// EXEC F7LG,PLOT=VERMON7,PLOU=V,PARM.L='MAP,LIST',SPACE=20
//L.SYSLIN DD DSN=INR308.SIMMOBJ(HYD PLOT8),DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//L.SYSIN DD *
// ENTRY MAIN
//G.PLOTPARM DD *
// &PLOT PXMAX=300. &END
//G.FT10F001 DD DSN=IRB905.IVA3DAT,DISP=SHR
//G.SYSIN DD DSN=IRB905.VISART1.CNTL(SPLV3),DISP=SHR
//
```

## E.24 JCL für das Plotten von Volumenanteilen

```

//IRB905A4 JOB (0905,321,P0N1M),STIEFEL,NOTIFY=IRB905,MSGCLASS=H,
// REGION=6000K
// EXEC F7CLG,LIB=NUSYS,PARM.C='ALIGNC',PARM.L='MAP,LIST',PLOU=V,
// SPACE=20,RLSL='L89121.F7LINK',RLSF='L89121.F7FORT',PLOT='VERMON7'
//C.SYSIN DD DSN=IRB905.PLIVA.FORT(PL01),DISP=SHR
//          DD DSN=IRB905.PLIVA.FORT(INDAT3),DISP=SHR
//L.SYSLIB DD DSN=SYS7.L89121.F7FORT,DCB=BUFL=32760,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS7.HARWELL,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS2.GS7,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS2.VERMON7,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS7.FORT2LIB,DISP=SHR
//          DD DSN=LOAD.DUMMY,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS7.IMSL.DP,DISP=SHR
//          DD DSN=SYS7.FTNFORT,DISP=SHR
//L.SYSIN DD *
  ENTRY MAIN
  INCLUDE LOAD(PLIVA)
//G.FT03F001 DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE1),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE2),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE3),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE4),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE5),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE6),DISP=SHR
//            DD DSN=IRB905.SC31RE.DATA(SC31RE7),DISP=SHR
//G.PLOTPARM DD *
  &PLOT
    PXMAX=50.
  &END
/*
//G.FT01F001 DD *
  &INPUT
  IR=3,IANF=0,IEND=0,JANF=1,JEND=10,RMAS=1.0,ITES=0,PLOTER='VERS',
  TFIRS=0.0,TLAS=9.,MOPLO=1,OUTPT=' PLOT',
  IM=3,JM=1,KM=20,LM=3,JS=2,
  NCX=20,NCY=20,IHEATE=1,
  RTEXT='      RADIUS (CM)',ZTEXT='HEIGHT (CM)',
  TEXT1='COMET SMALL SCALE M03R02 (SS)',
  TEXT2='
  &END
  TEXT2='COMET SMALL SCALE M02 (U02)'

```