Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte FZKA 5963

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1996

B. Mühl (Hrsg.)

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

September 1997

FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Technik und Umwelt Wissenschaftliche Berichte FZKA 5963

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Jahresbericht 1996

Herausgegeben von B. Mühl Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe 1997

٩

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

Summary

The reactor safety R&D work of the Karlsruhe Research Centre (FZK) has been part of the Nuclear Safety Research Project (PSF) since 1990. The present annual report 1996 summarizes the R&D results. The research tasks are coordinated in agreement with internal and external working groups.

The contributions to this report correspond to the status of early/mid 1997. A short abstract in English precedes each of them, whenever the respective article is written in German.

Zusammenfassung

Seit Beginn des Jahres 1990 sind die F+E-Arbeiten des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) zur Reaktorsicherheit im Projekt Nukleare Sicherheitsforschung (PSF) zusammengefaßt. Der vorliegende Jahresbericht 1996 enthält Beiträge zu aktuellen Fragen der Sicherheit von Leichtwasserreaktoren und innovativen Systemen sowie der Umwandlung von minoren Aktiniden. Die konkreten Forschungsthemen und -vorhaben werden laufend mit internen und externen Fachgremien abgestimmt.

An den beschriebenen Arbeiten sind die folgenden Institute und Abteilungen des FZK beteiligt:

Institut für Materialforschung	IMF I, II, III
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik	INR
Institut für Angewandte Thermo- und Fluiddynamik	IATF
Institut für Reaktorsicherheit	IRS
Hauptabteilung Informations- und Kommunikationstechnik	НІК
Hauptabteilung Ingenieurtechnik	HIT
Institut für Nukleare Entsorgungstechnik	INE
Hauptabteilung Versuchstechnik	HVT
Institut für Technische Chemie	ITC
sowie vom FZK beauftragte externe Institutionen.	

Die einzelnen Beiträge stellen den Stand der Arbeiten im Frühjahr/Sommer 1997 dar und sind entsprechend dem F+E-Programm 1996 numeriert. Den in deutscher Sprache verfaßten Beiträgen sind Kurzfassungen in englischer Sprache vorangestellt.

<u>Inhalt</u>

<u>Contents</u>

32.21	LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT		
32.21.01	Wasserstoffverbrennungsvorgänge		
I.	Theoretische Untersuchungen mit GASFLOW (E.A. Haytcher, G. Necker, P. Royl, J. Spore, J.R. Travis, IRS; H. Wilkening, INR)	1	
11.	Untersuchungen zum Wasserstoffverhalten und zu Gegen- maßnahmen bei schweren Störfällen (W. Breitung, A. Veser, INR)	28	
32.21.02	Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel	125	
I.	Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS) (R. Huber, M. Kirstahler, D. Kuhn, L. Meyer, A. Roth, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, INR)	125	
II.	Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX) (H. Will, F. Huber, A. Kaiser, W. Schütz, IRS)	139	
III.	Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung – Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Wasser (G. Arnecke, H. Jacobs, B. Stehle, K. Thurnay, L. Väth, INR; U. Imke, M. Lummer, IRS)	147	
32.21.03	Versagen des Reaktordruckbehälters bei Hochdruck	161	
I.	Thermodynamisch konsistente, finite Thermoviskoplastizität mit Schädigung (H. Lämmer, B. Ritter, Ch. Tsakmakis, IMF II)	161	
11.	Druckaufbau bei spätem Fluten in einem 'Station Blackout' (W. Baumann, G. Jacobs, M. Lau, L. Meyer, INR)	182	

32.21.04	Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung	
Ι.	COMET-Konzept (H. Alsmeyer, T. Cron, J.J. Foit, S. Schmidt-Stiefel, H. Schneider, W. Tromm, T. Wenz, IATF; S. Mussa, F. Ferderer, KIKI; C. Adelhelm, IMF I; HG. Dillmann, H. Pasler, ITC-TAB; W. Schöck, IMK; G. Schumacher, INR; H. Benz, C. Grehl, G. Merkel, W. Ratajczak, HVT)	202
II. A.	Untersuchungen zum EPR- Konzept – KATS- und KAPOOL- Experimente (G. Engel, F. Fellmoser, G. Fieg, H. Massier, H. Werle, INR; F. Huber, N. Prothmann, D. Raupp. U. Ziegler, IRS)	239
B.	Untersuchungen zur Validierung des Codes SIMMER-III mit den KATS-Experimenten (W. Maschek, G. Fieg, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)	256
111.	Untersuchungen zum EPR- Konzept – KAJET-Experimente (G. Albrecht, H. Brüggemann, F. Huber, D. Raupp, IRS)	260
IV.	Modellversuche und Simulationen mit CORFLOW zur Ausbreitung erstarrender Schmelze (Legierung MCP 58) (P. Ehrhard, IATF; U. Siegel, St. Krauth, FH Karlsruhe)	264
V.	Ausbreitung mit variabler Viskosität (J.J. Foit, IATF)	274
VI.	Thermophysikalische Eigenschaften von Kernschmelzen (B. Schulz, IMF I)	279
32.21.05	Langfristige Containment-Kühlung	282
I.	SUCO-Programm (J.U. Knebel, G. Janssens-Maenhout, M. Daubner, IATF)	282

II.	Thermohydraulische Untersuchungen zur passiven Containment- Kühlung – PASCO-Programm (E. Arbogast, X. Cheng, F.J. Erbacher, U. Harten, H.J. Neitzel, H. Schmidt, IATF)	296
32.21.06	Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen unter hochtransienten Belastungen	299
	Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter – BERDA-Versuche und Ähnlichkeitsexperimente FLIPPER (B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, A. Hirt, G. Hoffmann, O. Jonatzke, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, T. Stach, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)	299
32.21.07	Analysen zum Containmentverhalten	314
I.	Aerosol-Rechnung mit CONTAIN als Beitrag zum Vergleich von Containment-Codes (W. Baumann, G. Henneges, INR; H. Stein, Siemens/KWU)	314
II.	Bewertung des COMET-Corecatcher-Konzepts mit Hilfe des Codes CONTAIN (W. Baumann, INR; W. Scholtyssek, PSF)	328
111.	Analysen von Kernschmelzunfällen im EPR mit MELCOR (M. Deisinger, R. Frutos, P. Schmuck, G. Willerding, INR)	338
32.21.08	Untersuchungen zur Kernzerstörung	343
I.	In-Vessel Unfallabläufe (W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, V.H. Sanchez-Espinoza, S. Smit, D. Struwe, IRS; Ch. Messainguiral, CEA; E. Elias, Technion Haifa)	343
II.	Abschreckexperimente mit Brennelementsimulatoren, QUENCH-Anlage (D. Piel, L. Schmidt, IMF III)	369

,

III

111.	Experimente zum Wasserstoff-Quellterm und zur UO ₂ und ZrO ₂ - Auflösung durch geschmolzenes Zircaloy (P. Hofmann, V. Noack, M. Steinbrück, L. Steinbock, J. Stuckert, J. Burbach, H. Metzger, IMF I)	
IV.	Interpretation der mechanischen Auswirkungen bei Einzelstab- Abschreckversuchen (H. Steiner, IMF III)	400
32.21.09	Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktor- unfällen	404
	Probalistische Abschätzungen von Unfallfolgen und rechnergestützte Entscheidungshilfeinstrumentarien für für den Katastrophenschutz (J. Ehrhardt, D. Faude, F. Fischer, I. Hasemann, A. Lorenz, J. Päsler-Sauer, T. Schichtel, O. Schüle, C. Steinhauer, INR; G. Benz, Ch. Haller, M. Rafat, T. Sauder, D.T.I. GmbH)	404
32.21.10	Beteiligung am PHEBUS-Projekt	410
	Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse (W. Hering, W. Sengpiel, S.O. Smith, IRS)	410
32.22	INNOVATIVE SYSTEME	411
32.22.02	Passive Nachwärmeabfuhr	411
1.	Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen (G. Grötzbach, M. Wörner, T. Ammann, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr, Y. Kimhi, W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye, IRS; M. Alef,	411
	St. Genz, A. Hennemuth, G. Janßen, M. Linder, D. Seldner, HIK)	

II.	Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen (W. Cherdron, J. Aberle, G. Grötzbach, P. Philipp, H. Sauter,			
	K. Selber, W. Sengpiel, IRS; A. Hennemuth, HIK)			
32.22.04	Strukturelle Integrität	435		
I.	Untersuchungen an austenitischen und martensitischen Stählen (A. Falkenstein, S. Heger, R. Hübner, E. Materna-Morris, M. Schirra, W. Schneider, T. Stober, IMF !)			
II.	Charakterisierende Werkstoffuntersuchungen von Struktur- materialien (R. Schmitt, M. Pfeifenroth, IMF II)	446		
32.22.06	Untersuchungen zu Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme	448		
I.	Bestrahlungsnachuntersuchungen und modelltheoretische Analyse (D. Freund, W. Ernst, IMF III)	448		
II.	Verbesserung und Qualifizierung des DEFORM-4C Programm- pakets (D. Struwe, B. Porscha, M. Eigemann, W. Pfrang, IRS)	453		
32.22.07	Containmentuntersuchungen für innovative Systeme	456		
	KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Reentrainment (J. Minges, W. Schütz, IRS; M.K. Koch, RUB-NES)	456		
32.23	STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG	459		
32.23.01	Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Trans- mutation von Aktiniden und Spaltprodukten	459		

I.	Untersuchungen und Vorschläge für ein geeignetes neutronisches Berechnungsschema zur Auslegung und Optimierung von CAPRA-Reaktoren (S. Jaag, E. Kiefhaber, INR)	
11.	IAEA-koordinierte Neutronik-Benchmark-Rechnungen für Beschleuniger-getriebene Systeme (C. Broeders, I. Broeders, INR)	464
32.23.02	Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen (Z. Kolarik, INE)	473
32.23.03	Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil	476
I.	Passive Maßnahmen zur Reduzierung des Rekritikalitäts- risikos in CAPRA-Kernen (W. Maschek, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)	476
11.	SAS 4A-Programmentwicklung (D. Struwe, B. Porscha, M. Eigemann, W. Pfrang, IRS)	482
111.	Reaktorstudien (D. Struwe, B. Porscha, M. Eigemann, W. Pfrang, IRS)	484
32.23.04	Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR (D. Freund, W. Ernst, O. Jacobi, IMF III)	487

VERÖFFENTLICHTE BERICHTE

491

32.21 LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT

32.21.01 Wasserstoffverbrennungsvorgänge

I. Theoretische Untersuchungen mit GASFLOW

(E.A. Haytcher, G. Necker, P. Royl, J.R. Travis, IRS; H. Wilkening, INR)

The GASFLOW code is developed as an integral tool for the simulation of hydrogen distribution and combustion from steam/hydrogen releases during hypothetical core melt accidents. We report here on the progress we have made in the simulation of steam/hydrogen distributions in reactor containments with inclusion of mitigating effects from catalytic recombiners and igniters. The report covers the new modeling the application and validation analyses with GASFLOW in 1996.

1. GASFLOW Model developments and code maintenance

A model for sump vaporization and condensation has been added to the code. Vaporization from a sump surface is simulated when the steam density in the adjacent fluid node is below the saturation steam density on the sump surface. The vaporization rate is proportional to the density difference and is calculated from the Reynolds analogy in the same way as the film vaporization and condensation.

A new model was implemented into GASFLOW for the Siemens plate recombiner. It determines a volume flow rate through the recombiner in dependence of the hydrogen concentration at the recombiner inlet and applies this as a velocity boundary condition like an active ventilator. The model uses measured performance data for the recombiner efficiency and the recombination rate from the Battelle GX tests as function of the hydrogen concentration (see fig. 1). Least square fits were made to the experimentally derived correlations for the recombination rate in dependence of the hydrogen concentration and for the recombiner efficiency in dependence of the recombination rate. The model reflects the reduction of the recombiner efficiency for hydrogen concentrations above 7%. It covers a range of hydrogen concentrations up to 10 Vol%. An asymptotic velocity vo through the recombiner is determined so that the amount of hydrogen for the measured recombination rate actually gets to the recombiner plates. Close to the steam inertization we plausibly limit the flow and recombination rate by the oxygen concentration. Like in the model for the NIS granulate recombiner we approach the asymptotic velocity with a time constant. For the Siemens plate recombiner this constant is selected two orders of magnitude smaller (10s) than for the NIS granulate recombiner. The model calculates the hydrogen recombination and its effect on the convection processes in all analyzed GX tests quite well.

The diffusion terms in the transport equations of GASFLOW were corrected to remove non physical pressure changes from numerical errors during the diffusion of two different gases from adjacent meshes. The molar diffusion fluxes are now exactly balanced to zero. The correction particularly improves the simulation of diffusion flames.

The variable area option that allows to simulate fractional areas on the mesh boundaries instead of the full geometrical size was extended to allow for the simulation of leakage pathes with small hydraulic diameters. The higher velocities at strongly reduced flow areas can significantly reduce the time step due to Courant conditions, however.

All code extensions were consolidated into a new GASFLOW version 1.4.3. We are now documenting the new models and code additions relative to the released base version GASFLOW 1.0 from 1994. Since September we are combining the consolidated GASFLOW version 1.4.3 with the multiblock version 2.0 of GASFLOW developed at Los Alamos National Laboratory (LANL) to a new code version GASFLOW 2.1. We rewrote the code from FORTRAN 77 to FORTRAN 90 during this merging process and we switched our update method from Historian (CMP) to a new update procedure RCS (Revision Control System), which allows the automatic generation of code versions from different development stages of the code. This major revision of GASFLOW is done as a joint activity between FZK and LANL and also supported by US-NRC. The new GASFLOW version 2.1 will allow to change meshes between different rooms that are connected through 1 dimensional ducts. Besides it includes an aerosol model which allows simulation of aerosol transport in the gas field which can also be coupled to volumetric decay heat sources.

The switching to FORTRAN 90 makes the code more platform independent. The new GASFLOW code runs on the Cray J90, on the new Siemens Fujitsu machine VPP and on Risc and Solaris workstations without major changes. But the use of FORTRAN 90 lead to some difficulties with the vectorization of GASFLOW on the VPP and Cray J90, that are related to the use of pointers. We attribute this to compiler errors and hope that the coming up improved FORTRAN 90 compilers for these machines will vectorize better.

2. Overview over new GASFLOW simulations

Our important new GASFLOW simulations have been included in the updated overview of the GASFLOW simulations for steam/hydrogen transport without

and with inclusion of mitigation effects (fig.2). New transport simulations without mitigation effects were performed for the Biblis A reactor containment. We developed a complex 3D geometry model for this containment and analysed stratification and mixing of the steam-hydrogen release from a loss of coolant accident under simplified design basis accident conditions. Steam vaporization from a heated sump provides an important mechanism for mixing the initially stratified steam/hydrogen mixture. GASFLOW calculated the initial stratification phase and the transition to homogeneous conditions from the sump vaporization. The applied sump model was succesfully validated with the specific sump tests RX4 and RX5 that were performed in the Battelle model containment. This work was done outside the Siemens/EVU contract with direct support from RWE and is published in [1]. We have started to study the hydrogen distribution during the dynamic injection tests in the Russian RUT facility using GASFLOW, this work is still in progress. GASFLOW could succesfully predict Helium stratification in a recent blind posttest analysis of the Battelle Hyjet test JX7. This progress report will summarize these results.

Steam/hydrogen transport simulations with mitigation measures include the effects of inertization for instance by CO2 release, the catalytic hydrogen combustion in recombiner modules and the local hydrogen deflagration at igniters. We will report here about our analysis of the Battelle GX tests which simulated steam hydrogen distribution together with a plate recombiner of the Siemens type. Test GX7 also simulated mitigation by the so-called "dual concept" with a plate recombiner and a series of spark igniters that were positionned in different rooms of the Battelle Model Containment. The GASFLOW combustion model was further tested in the analysis hydrogen combustion in some FZK tube tests. Besides we analyzed hydrogen combustion in the test RUT 23. We will briefly report about these new combustion calculations also.

2.1. Hyjet test JX7

Recently we participated with GASFLOW in a blind benchmark set up by Battelle for the test JX7. The blind benchmark was also analyzed with the field code FLOW3D and with the lumped parameter codes RALOC, WAVCO, and Gothic.

Test JX7 involved the full Battelle containment with a total gas volume of 600 m**3. Helium with a total mass of 10 kg was injected in 200 s near the bottom of the banana room R6 (fig. 3). The injection velocity was 42 m/s. The nozzle was positionned underneath vertically aligned overflow openings

in the ceilings of the banana rooms. A jet formed that extended all the way from the source location into the dome region. The jet is displayed in fig. 3 into the actual containment model at 50 s after the start of Helium injection as the isosurface for 10 Vol% Helium. The Helium stratifies in a cloud in the containment dome. The geometrical model for GASFLOW applies 50000 computational cells. It models the jet well but requires quite long running times (10 d for 800s) mainly due to the Courant limitation for the time step. A preceding analysis with a coarser mesh of only 5000 cells did not resolve the jet with the same detail, but it could capture the plume behavior in the dome quite well also. The analysis of the 800s problem time took only 80 min with this coarser model.

The plots in fig. 4 compare the results from the GASFLOW simulation with the fine mesh to the test data and to the other code predictions at four sensor locations in the dome, near the bottom of the central room, and in the upper and lower part of the ring room. Compared to the test data the GASFLOW concentrations are 18% instead of measured 16% at the top of the dome and 9% instead of measured 11% in the upper region of the ring room. Good agreement is obtained at the bottom of the central room and in the lower ring room where the lumped parameter codes significantly overestimated the helium concentration. GASFLOW simulates turbulent diffusion based on the algebraic turbulence model with a prespecified turbulent length scale. The overprediction of the Helium concentration in the dome region can be attributed to insufficient air entrainment along the jet surface. The Helium concentration profile across the jet shows good agreement with the test data near the source location.

FLOW3D results are in better agreement with the test data in the dome but not as good as GASFLOW in the lower containment regions. Overall the blind benchmark demonstrated that field code predictions are in better agreement with the test data than the results from lumped parameter codes. The predictions of the two field codes GASFLOW and FLOW3D for this Hyjet test are of a comparable quality when one includes all sensor locations in the comparison.

2.2. Validation of mitigating measures with Battelle GX experiments

The EPR calculations reported about last year [2] and the analysis of steam/hydrogen distribution in the Biblis A containment under LOCA conditions documented well the ability of GASFLOW to simulate such transport phenomena in quite complex geometries. We continue to include the

major mitigation effects into such analyses based on validated models. We developed and validated a model for the NIS granulate recombiner already last year [2]. This year we extended our mitigation modeling to also include the Siemens plate recombiner and validated it succesfully with the analysis of the Battelle GX tests. We consider this is a further important strengthening of our basis for integral containment analysis of severe accident sequences. Test GX7 with a Siemens plate recombiner and with spark igniters in the various rooms was the first integral performance test for the "dual concept" which is currently in discussion for hydrogen mitigation both in the EPR and in the operating PWR plants. So far the GASFLOW analysis of test GX7 is the only available 3D field code analysis of this complex performance test.

The GX tests were done in the inner containment region of the Battelle model containment with the banana rooms R5, R6, R7, and R8 that are arranged in two axial planes and with the central rooms R1 and R3. A large plug above room R1 and closed openings in the ceilings of R5 and R7 separate these rooms from the remainder of the containment with the dome and ring rooms. The total gas volume of the test rooms was 209 m**3. We simulated the inner containment region with GASFLOW in a 3D cylindrical model with 5800 computational cells.

The scheme in figure 5 shows a radial cut through the central room with the concrete plug on the top and and through the banana rooms outside. The right hand side gives an unwrapped scheme of the four banana rooms. The recombiner box is a scaled Siemens plate recombiner module with a cross section of 11.6 by 16 cm**2 and a prototypical height of 1.6 m. It is positionned at the inside wall of room R5 not far from the overflow opening to room R6 underneath. The recombiner box has a vertical inlet at the bottom and a horizontal outlet at the top. With the small recombiner box the wall effects became quite important in this test which was different from our earlier analysis of test MC3 with the full size NIS granulate recombiner [2].

Test GX4 had 2 periods of hydrogen injection, first from a line source in room R5 and then from a line source at the bottom of R8. Steam was injected into R5, R6, and R8 prior to the hydrogen release and in between the two release periods. Test GX6 had only one hydrogen injection period into the lower room R8. Test GX7 was run with a higher steam concentration and stronger hydrogen sources. Hydrogen was injected into R5 and R8 again in two periods. Spark igniters were positionned in each room. They were all activated during the first period of hydrogen injection. In the second injection period only the igniters in R6 and R7 away from the source room were active. The igniters operated with a frequency of 7s during the activation periods.

The boundary conditions for all these tests were quite complex. Sump valves and blowers that are open and active during the pre-conditionning phase and in between the hydrogen injection periods control the composition of the atmosphere and relieve the pressure during the steam injection. The containment was also not leak tight after valve closure. Leakage effects were found in the analysis of tests GX4 and GX6. In tests GX7 these had so much impact on the concentration that we included in our model 14 known leakage pathes with 1mm hydraulic diameter and 3.1 cm**2 surface at the locations where the instrument guide tubes penetrated the outer walls of the banana rooms. Although they were quite small these leaks relieved the pressure on a fast enough time scale. The steam and hydrogen injection rates and their interplay with the valve opening and the fan operation, also the activation times of the igniters in test GX7 are shown in figure 6. The figures only plot the integral steam release from all three injection points as it was recorded in the test. The actual distribution of the steam source over the three rooms R5, R6, and R8 was estimated on basis of the relative valve openings. We applied the original estimates from Kanzleiter for this distribution. However, significant overpredictions of the gas temperature resulted in room R5 during the preconditionning of test GX7 with Kanzleiter's specified original steam distribution which lead to a too high steam content and nearly steam inerted conditions at the recombiner box. This was independently found also in a RALOC simulation of this phase for test GX7. We then used an adjusted steam distribution GRS had estimated from their analysis of the preconditionning phase and like GRS got a much better agreement with the measured gas temperatures and steam concentrations prior to the hydrogen injection. Because the high steam volume fraction in room R5 makes the recombiner operate near the limit of steam inertization this adjustment of the steam distribution in test GX7 was quite important. The collection of all details from these tests was not easy and only possible with the help of Dr. Kanzleiter from Battelle and Mr. Klein-Heßling from GRS.

2.2.1. Results for tests GX4 and GX6

The measured and calculated hydrogen volume fractions for tests GX4 and GX6 are compared in figure 7. The upper two plots are for the high banana rooms R5 and R7, below are the data for the two low banana rooms R6 and R8 and at the bottom a characteristic hydrogen concentration is displayed for

the central room R3. We have analyzed a problem time of 20h for test GX4 and 10h for test GX6. The two hydrogen peaks for test GX4 reflect the two periods of hydrogen injection. Hydrogen concentration never exceeds 4% in both tests and the hydrogen distributes fairly homogeneous over the different containment rooms. Agreement with the test data is quite good for both tests.

There is a slight overprediction of hydrogen concentration in the upper rooms during the second injection period in test GX4. Responsible for this is an increase of the steam concentration in the upper rooms after a strong reduction of the steam source which increases the hydrogen volume fraction while reducing the pressure. The local underpressure due to the condensation sucks additional gas from the lower source room R8 which in turn reduces the calculated hydrogen concentrations in the source room R8 relative to the test data. We attribute the fact that this behavior is not seen in the test data to the containment leakage which doesn't allow such an evacuation after loss of the steam source and which replaces the condensed steam by the air sucked in through the leaks instead of increasing the hydrogen volume fraction.

Condensation is also overpredicted after shutting off the steam source in test GX6. In this case the resulting underpressure increases the hydrogen volume fraction only for a short time, an effect which shows up to a certain degree also in the test data (GX6 results around 6h). Then the sump valves open in R6 and bring in air which causes a local temporary hydrogen dilution in R6. The nearly 0.1 bar underpressure that develops in the leak tight GASFLOW model after stopping the steam injection makes this dilution stronger than in reality, but it is a local effect only and mixing brings the hydrogen concentrations back to the experimental data quite fast.

2.2.2. Results for test GX7

The calculated and measured hydrogen concentrations for test GX7 in figure 8 also show quite good agreement with the test data. Steam and hydrogen injection are significantly stronger in GX7 than in the previous tests GX4 and GX6.

2.2.2.1. First injection period of hydrogen

The upper banana rooms R5 and R7 have steam volume fractions above 65% at onset of hydrogen injection. The hydrogen release in room R5 causes a rather strong stratification with peak hydrogen volume fractions of 8% in the upper rooms and values below 3% in the lower rooms. GASFLOW captures

this stratification quite well. Catalytic combustion in the recombiner box gradually removes the released hydrogen from the first injection period. The solid bars in each graph indicate the activation times of the igniters in each room. Igniters were sparking in each containment room during the first hydrogen injection period with a frequency of 7s. But the hydrogen concentrations never exceeded the flammability limit at any location during the first activation period of the igniters. This flammability limit for the burnable hydrogen concentration in a steam/hydrogen mixture was determined from the lean combustion limit in the Shapiro diagram and is evaluated in dependence of the steam volume fraction at the igniter position in each room from the correlation

$$H_{Burn} = 0.04 + min (0, \frac{(v_{f_{H20}} - 0.3)}{(v_{flam} - 0.3)} * 0.08)$$

which has also been implemented into GASFLOW. In this correlation

vfh2o = steam volume fractionvflam = 0.65 = steam volume fraction threshold for inertization

To trigger a combustion in a lean hydrogen/steam/air mixture the hydrogen concentration must exceed 4% for steam volume fractions below 30%. This threshold increases to 12% with increasing steam content. No combustions are triggered above steam volume fractions of 65%.

In test GX7 the regions with high hydrogen volume fractions initially are fully steam inerted. The recombiner continues to operate above the limit of steam inertization but with a reduced efficiency and a reduced flow rate during the lack of oxygen. Steam concentrations in the lower rooms are much smaller. The flammability limit never exceeds 4% there, but not enough hydrogen gets there for an ignition during the first injection period. As the steam release goes down the flammability drops nearly to the hydrogen concentration in particular in room R7. But when the mixture becomes burnable for a short time in R7 the igniters have already been deactivated. The recombination rate increases during the reduction of the steam injection. Most hydrogen is gone in the upper rooms after 8 hours. The hydrogen concentrations in the lower rooms even exceed the values in the upper rooms then.

2.2.2.2. Second injection period of hydrogen

In the second phase, that starts at 8.5 h, hydrogen gets injected into the lower room R8. Hydrogen concentration there rapidly exceeds the flammability limit, but the igniters are only activated in the adjacent rooms R6 and R7 then. The relative increase of the hydrogen concentration and the changes of the flammability limit in these two rooms controls the progression of the experiment in this second phase. The hydrogen distribution becomes quite sensitive to the distribution of the steam release.

With the estimated distribution of the steam injection into the three rooms R6, R8 and R5 from Kanzleiter the hydrogen concentration in R7 increased faster than in R6. Combustion in the second period of hydrogen release was triggered in R7 then. It brought about a change in the circulation that kept the concentration in R6 from exceeding the flammability limit. The hydrogen concentration in R7 remained too low for a backflash into the source room R8 and cyclic combustions in R7 with continued hydrogen supply from the room R8 below gradually removed the hydrogen in the second period. The experiment did not show such behavior.

Without changing the measured overall steam source we reduced the steam release in the lower rooms R6 and R8 by 5% each and enhanced it correspondingly in the upper room R5. This slight redistribution of the steam injection caused the initiation of hydrogen combustion in R6 when the hydrogen concentration there exceeded the flammability limit (fig. 8). After some time for enthalpy accumulation the flame propagated horizontally into the source room R8 which is in good agreement with the test data. GASFLOW calculates a nearly complete combustion then.

The test data indicate a complete combustion only in the source room R8 and leave behind a residual hydrogen concentration in the other rooms. The GASFLOW mesh size was primarily set to simulate hydrogen transport with recombination. To maintain the combustion process in the coarse mesh we had to increase the sparking duration (it was increased from the specified value of 1 ms to 0.5 s) in order to get enough enthalpy into the coarse mesh for a flame propagation. We also reduced the temperature threshold for the use of the Arrhenius law from the recommended value of 800K to 500K to be able to propagate the combustion into the adjacent nodes and prevent it from extinguishing when the convected enthalpy is not sufficient to raise the temperature to a high enough value in the coarse mesh of the adjacent nodes. Running the whole transport sequence with a rather fine mesh for the combustion would be rather time consuming and not be feasible for large containment systems. A local mesh refinement at the onset of the combustion would certainly be more appropriate. The IKA code that is currently under development at FZK is designed for such dynamic mesh refinements during the hydrogen transport phase. It will also apply a more detailed turbulence model for the combustion simulation than the simple algebraic model that was applied in this analysis. When we analyze steam hydrogen distribution in GASFLOW with the dual mitigation concept of recombiners and igniters we must be aware that the combustion results currently cannot have the same accuracy as the results from the transport analysis. We do conserve the enthalpy, however, which should be sufficient to account for the effect of local combustions on the overall convection behavior.

As seen in figure 8, the ongoing hydrogen injection after the first burnout again builds up combustible mixtures, that are ignited in room R6. The residual hydrogen inventory after the first burnout in GASFLOW is rather low compared to the test data. The development of a new flammable mixture takes longer and the second hydrogen ignition in room R6 starts more delayed relative to the test data. GASFLOW again calculates a complete burnout in all rooms while in the test complete burnout is seen only in the source room.

The first full burnout leads to a narrow pressure peak of 1.9 b in GASFLOW which is above the recorded peak of 1.2 b from the pressure sensor. In the second combustion a wider pressure pulse with a peak value of 1.2 b results which is nearly at the same level as the sensor reading. Not only the earlier flame extinction in the test but also differences in the kinectis of the flame propagation contribute to the value of the pressure peak. For instance in another analysis with an even stronger shift of the steam release from the lower rooms into the upper room R5 (20% instead of 5%) the combustion with a similar hydrogen inventory only caused a pressure peak of 1.25 b. In this case only one flame controls the combustion in the source room while in the before discussed case two flame fronts meet in the source room coherently, one coming from R6 by an azimuthal flame propagation, the other from a propagation through a central shortcut in R3.

The GASFLOW simulation does include convective and condensation heat transfer with cut off of wall condensation at structure surface temperatures above the critical point of steam. It does not account for radiative cooling. The calculated gas temperatures peak at nearly 1000K in room R8 during the first and 600K during the second combustion. Steam condensation brings these temperatures back to saturation values for the steam vapor pressure quite fast. The recorded temperature readings never exceed 500K but they stay at an elevated level for a longer time.

2.2.2.3. **Representative configurations for recombination and combustion**

The Kismet plots in figure 9 show two snap shots from the GASFLOW simulations during the first hydrogen release phase and at the onset of the ignition in R6 in the second hydrogen release phase. To allow a better view we removed the ceiling and the outer walls of the banana rooms in these snap shots.

The left configuration shows the two banana rooms R5 and R6 with the Siemens recombiner box at 5.26 h when the hydrogen concentration peaks in R5 (see fig. 8). Hydrogen is released from a line source on the floor of R5. A cloud which contains more than 9 Vol% hydrogen has been determined from the calculated hydrogen concentrations (the surface is marked by the superimposed wire frame). It builds up above the line source. It doesn't extend high into R5 and is consumed near the recombiner from the ongoing catalytic hydrogen combustion. The 400K isosurface of the gas temperature has also been entered and documents the hot plume above the recombiner box that spreads under the ceiling of R5 and reflects the released recombination energy. The downward extension of this isosurface along the recombiner box documents hot temperatures within this box. Its appearance on the outside of the box reflects the limitation of the interpolation procedure for the isosurfaces from the concentration field which doesn't account for walls and obstacles. A transparent cloud in moiree extends from the roof of R5 to near the upper surface of the hydrogen cloud. It marks the region where the steam volume fraction is above 72%. Only recombination but no hydrogen combustion is possible inside this cloud, it fully inertizes the igniter in room R5. Similar steam only somewhat smaller hydrogen concentrations are found in R7 which is also fully inertized at this time (see fig. 8). Burnable conditions may exist closed to the floor in room R5, provided that the vaporization of the collected sump with hot condensate there doesn't inertize this region also. The picture documents the importance of igniter positionning. Had the igniter been placed away from the recombiner near the bottom of R5 it would have triggered a combustion also during the first hydrogen injection phase.

The right configuration in figure 9 shows the conditions at the point of hydrogen ignition in room R6 during the second phase of hydrogen release. The hydrogen comes from a line source near the bottom of room R8 (inside wall of the canyon). A burnable hydrogen cloud (>5Vol%) fills the whole source room (surface marked by superimposed wire frame). It spreads circumferentially and extends partially also into the adjacent banana room R6. It also makes a shortcut radially inward through overflow openings into the central room R3 where the hydrogen concentration grows faster than in R6 (fig. 8). Some hydrogen then enters room R6 through openings from the central room R3 via the shortcut through the center. It forms the secondary hydrogen cloud around the lower overflow opening above the canyon at the far end of room R6. The location of the igniter in R6 is near the floor and next to the outside wall. It falls in between the clouds from the two transport pathes. The picture also includes the 400K isosurface of the gas temperature. The early combustion builds up a hot plume locally above the igniter, the plume around the recombiner box is small at this time because the hydrogen concentration there is low. Some hydrogen also enters the room R7 through the overflow opening in the ceiling of R8. A finger of the 5% hydrogen cloud is visible in room R7 that spreads mostly upward, it cannot reach the other igniter. With less shifting of the steam release into room R5 when using Kanzleiter's estimate for the distribution of the steam release this cloud would have spread circumferentially. The flammability limit would have first been reached in R7 thus completely changing the combustion sequence. The finger from the hydrogen cloud in room R7 pushes away some steam which can be seen from the shadows in the transparent cloud that bounds the region with a steam volume fraction above 40%. The atmosphere is no longer steam inerted during this second phase of hydrogen injection. We have visualized the flame propagation in a sequence of 100 snap shots after the ignition in R6. Combustion starts with a flickering period of nearly 40 s. Only then the flame accelerates. It spreads out circumferentially and enters room R8 from the side. In parallel a propagation occurs through overflow openings to the central room R3. It triggers a second flame front in the source room R8 which superimposes with the azimuthally propagated flame. This strongly amplifies the pressure and is the principal reason for the much higher than measured pressure peak in the first combustion.

2.2.2.4. Conclusions from analysis of test GX7

The GASFLOW analysis of test GX7 shows that in principle it is possible to describe the steam/hydrogen transport with the combined mitigation from recombiners and igniters. The GASFLOW results allow the precise control of

when and where the hydrogen/steam/air mixture becomes burnable. We found out that the transport phase with the recombination superimposed is described quite accurately. The combustion simulation in the coarse transport mesh requires to use longer than the physical sparking durations and to reduce the temperature threshold for simulating the combustion rate with the Arrhenius correlation. GASFLOW then propagates the flame well from the barely combustible ignition point into the highly combustible region. But compared with the test more hydrogen burns out in the regions with low hydrogen concentrations. In the test flame extinctions occur in the rooms adjacent to the source rooms and leave behind higher unburnt hydrogen inventories. Local mesh refinements and improved turbulence modeling may eventually give better interpretations also for such combustion/extinction processes. There are also considerable sensitivities in the interpretation of this test that come from uncertainties in the distribution of the steam injection over the three banana rooms. The code does of course conserve the combustion enthalpy. In a large containment geometry this should be sufficient to account for the effect of local combustions on the overall convection process as long as local ignitions don't progress into a global combustion process.

2.3. Combustion calculations for some FZK-tube tests and for the Rut 23 test

In support of the premixed H2-air turbulent deflagration experiments in the FZK-tube for the EG project FI4S-CT95-0001, we have performed three calculations. The geometry and conditions for these tests are described in reference 3.

The FZK-tube geometry was modeled two-dimensionally in cyclindrical geometry with 360 and 10 computational cells in z and r coordinate directions, respectively, or 3,600 total computationa control volumes. The cell size in the z-direction was uniform with a size of 3.3333 cm., while in the r-direction, the first 8 cells were 1.83 cm and the last two cells were 1.68 cm. This allowed us to exactly model the array of blockages with walls every 50 cm in the axial direction. The global one-step chemical kinetics model coupled with the k-e turbulence model was used in these calculations. The turbulence model was applied in its standard form without any adjustment of parameters. Calculations were performed for blockage ratios of 30, 60, and 90% for hydrogen volume fractions of 10, 12 and 15%. The following table puts the calculated turbulent flame velocities into the evaluated test matrix of these combustion tests

H2 Vol%	Test/Calc	Blockage Percentage		
		30	60	90
10	FZK-Tube	-	-	1 22
	GASFLOW	45 m/s	-	-
12	FZK-Tube	-	524 m/s	361 m/s
	GASFLOW	300 m/s	500 m/s	200 m/s
15	FZK-Tube	1141 m/s	611 m/s	428 m/s
	GASFLOW	1000 to 1300 m/s	625 m/s	370 m/s

Turbulent Flame velocity results from GASFLOW simulation of different tests in the FZK combustion tube

The GASFLOW results give a good picture of the dependence of hydrogen volume fraction and blockage fraction with respect to the flame velocities. In the very fine mesh that was applied the global one-step chemical kinetics model coupled with the k-e turbulence model in GASFLOW does indeed predict the results quite well. An example of the calculated flame propagation for the 60% blockage test with 15Vol% hydrogen is given in figure 10.

We then used the same one-step chemical kinetics model to calculate the turbulent combustion in the premixed H2-air deflagration experiment RUT-23 with 11.25 Vol% hydrogen in dry air. The Russian RUT facility is a large concrete building having a length of 70 m and total volume of 480 m**3 [4].

We have modeled the RUT facility in cartesian geometry with 429 computational cells in the length direction, 40 cells in the height direction and 16 cells in the depth direction giving a total of 274,560 fluid volumes. More than half of these cells are blocked out by obstacles or regions to represent the actual geometry. These cells lead to an average control volume size around 4 liters. We have performed two calculations using (1) the one-step chemical kinetics coupled with the algebraic turbulence model and (2) the one-step chemical kinetics with the k-e model.

The simulation with the k-e model produces max flame speeds before the

flame expands into the canyon of 80 m/s. This is significantly below the measured peak value of 320 m/s. With the algebraic turbulence model the flame speed increases by roughly 50% to 120 m/s but is still too low compared to the measured data. The accuracy of this prediction which was made without any adjustment of the turbulence parameters is not acceptable. It is necessary to examine the spatial resolution issues and probable also necessary to develop better chemical kinetics models with more coupling to the turbulence modeling.

3. Conclusions

Theoretical investigations with GASFLOW in the frame of the Siemens/EVU contract focussed on code development in general and on further strenghtening the modeling and validation basis to simulate mitigation by recombiners and igniters together with the steam hydrogen transport.

The general model development included the rewriting of GASFLOW into FORTAN 90, the consolidation of the FZK version of GASFLOW 1.4.3 and the merging with the LANL version 2.0 of GASFLOW to a unified new version GASFLOW 2.1. This work is still in progress.

A model for the Siemens recombiner was added to the code and validated with the analysis of experiments from the Battelle GX series. Together with the model for the NIS granulate recombiner we have now validated mitigation models for all type of recombiners that are currently considered for use under severe accident conditions in the containments of the EPR and of the other already operating German pressurized water reactors. Good results for the hydrogen distribution during recombination processes were obtained both for the nearly homogeneous conditions of tests GX4 and GX6 but also for the strongly stratified conditions of test GX7.

The 3D field simulation of the Battelle model containment with GASFLOW had a fine enough resolution to reliably control the spark ignition process which strongly relies on local data. One cannot expect to capture the absolutes of the complex combustion process with the simplified combustion model and without a mesh refinement. But the model conserves the combustion energy and includes enough details to simulate the impact of the combustion process on the convection behavior during local combustions at igniters in large containment geometries. GASFLOW can now be applied under severe accident situations to analyze steam/hydrogen distributions in reactor containments with the so-called "dual concept" of mitigation that involves recombiners and igniters.

4. References

- P. Royl, W. Breitung, L. Seyffarth, J. R. Travis, H. Wilkening Simulation of Hydrogen Transport with Mitigation Using the 3D Field Code GASFLOW To be published at Second International Conference on Advanced Reactor safety, June 1-4, 1997, Orlando, Florida
- E. A. Haytcher, P. Royl, J. R. Travis, H. Wilkening Theoretical Investigations with GASFLOW
 Fortschrittsbericht FZK/EVU/Siemens Zusammenarbeit, Seite 95, März 1996
- 3. A. Veser

Numerische Simulation von H2-Luft-Verbrennungsexperimenten" Diplomarbeit chem. ing., Forschungszentrum Karlsruhe and Universität Karlsruhe, 1996

4. Specifications for Premixed H2-air turbulent deflagration experiment RUT-23, Benchmark tests for EG project FI4S-CT05-0001, 1996

5. List of Pictures

- 1. GASFLOW model for the Siemens recombiner
- 2. FZK activities on hydrogen transport and mitigation
- 3. Helium jet in Battele Model Containment during Hyjet test JX7 at 100s (GASFLOW-Kismet)
- 4. Calculated and measured Helium concentrations in Battelle test JX7
- 5. Scheme of the Battelle Model Containment for the Battelle GX tests (radial cut and unwrapped geometry of the banana rooms)
- 6. GASFLOW conditions for the Battelle GX tests with a Siemens recombiner and spark igniters
- 7. Hydrogen volume fractions in Battelle tests GX4 and GX6 with a Siemens recombiner box
- 8. Calculated H2 concentrations in BMC test GX7 with Siemens recombiner and igniters
- 9. GASFLOW results for the BMC "Dual Concept" test GX7 (Kismet Plots)
- 10. GASFLOW simulation of the FZK combustion tube test R0601 with 60% blockage and 15 Vol% hydogen



GASFLOW Model for the Siemens Recombiner

Figure 1





- 19 -



Helium Jet in Battelle Model Containment during Hyjet Test Jx7 at 50s (GASFLOW–Kismet)

Room R9

He-Source









···⊠···GS:··GS:RALOC -∇···GRS:RLADC -Δ··· -Δ··· -Φ··· -Φ···

8

400. Zeit [s]

20

9PK270R36

Ř

N h

Ż

Ż

Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt



Scheme of the Battelle Model Containment for the Battelle GX Tests (Radial Cut and Unwrapped Geometry of Banana Rooms)

Figure 5

1000





GASFLOW Conditions for Battelle GX Tests with a Siemens Recombiner and Spark Igniters

Figure 6



Hydrogen Volume Fractions in Battelle Tests GX4 and GX6 with Siemens Recombiners GASFLOW Results vs. Test Data for all Containment Rooms


Siemens recombiner and igniters $(H_{burn} \text{ is flammability limit for calculated steam concentration})$

Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt



Recombination in R5 (5.26h)

Ignition in R6 (8.99h)

GASFLOW results for BMC "Dual Concept" test GX7 (Kismet Plots)

Figure 9

Hydrogen Concentration Contour Field



- 27 -

GASFLOW Simulation of the FZK Combustion Tube: 60% Blockage with 15 Volume Percent Hydrogen

Figure 10

 II. <u>Untersuchungen zum Wasserstoffverhalten und zu Gegenmaßnahmen</u> bei schweren Störfällen (W. Breitung, A. Veser, INR)

Scientific Contributions:

- <u>FZK:</u>
 W. Breitung, G. Engel, A. Kotchourko, H. Massier, G. Necker, A. Miassoedov,
 R. Redlinger, H. Rochholz, P. Royl, P. Schmuck, J. Spore, J.R. Travis,
 H. Wilkening, J. Wolff, A. Veser
- Kurchatov Institute Moscow:
 S.B. Dorofeev, V.P. Sidorov, A. Efimenko, A. Dvoinishnikov, A. Lelyakin,
 A. Denkevits, I.D. Matsukov, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, A.V. Bezmelnitsin and RUT operational crew
- <u>Russian Academy of Sciences, Moscow:</u>
 B.E. Gelfand, S.P. Medvedev, O.V. Popov, A.M. Bartenev, S.V. Khomik,
 G.L. Agafonov, A.Y. Kusharin, A.N. Polenov
- <u>University of Aachen</u>, ITM (Inst. für Techn. Mechanik): V. Moser, R. Klein

<u>CONTENTS</u> (zum Beitrag von W. Breitung und A. Veser)

- 0. ZUSAMMENFASSUNG
- 1. INTRODUCTION
- 2. HYDROGEN PRODUCTION
 - 2.1 MELCOR calculations for EPR
 - 2.1.1 SB-LOCA sequence
 - 2.1.2 SBO sequence
 - 2.2. REFLOX code development
- 3. HYDROGEN DISTRIBUTION
 - 3.1 Simulation of RUT injection test
- 4. HYDROGEN COMBUSTION
 - 4.1 Code development for turbulent deflagration
 - 4.1.1 COM3D-Code
 - 4.1.2 ERCO-Code
 - 4.2 Experiments
 - 4.2.1 FZK "3 m-tube"
 - 4.2.2 FZK "12 m-tube"
 - 4.2.2.1 He-air turbulence tests
 - 4.2.2.2 H₂-air combustion tests
 - 4.2.3 RUT tests with H₂-air-steam mixtures
 - 4.2.4 Quenching in non-uniform H₂-air mixtures
 - 4.2.5 Flame-vortex interaction
 - 4.2.6 Turbulent deflagation in H₂-air-fog-systems
 - 4.3 COM-code validation
 - 4.3.1 The forward facing step
 - 4.3.2 He-air turbulence tests
 - 4.3.3 Flame-vortex interaction
 - 4.3.4 RUT combustion experiments
 - 4.4 ERCO-code validation

5. DETONATION CRITERIA

- 5.1 DDT in room geometry
- 5.2 DDT in channel geometry
- 5.3 Detonation cell size data
 - 5.3.1 Fits of experimental data
 - 5.3.2 Theoretical predictions
- 6. DETONATION
 - 6.1 Heat release in DET3D
 - 6.2 Missile generation by local detonations
 - 6.2.1 Drag coefficient calculations
 - 6.2.2 Wall missiles

7. MITIGATION WITH CO₂

- 7.1 Flammability limits
- 7.2 Laminar premixed burning velocity
- 7.3 Turbulent premixed burning velocity
- 7.4 Self-ignition delay times
- 7.5 Detonability limits
- 7.6 Conclusions on CO₂ effects

8. EPR APPLICATIONS

- 8.1 The GASFLOW model
- 8.2 Analysis without mitigation
- 8.3 Analysis with spark igniters

9. INCA PROGRAM DEVELOPMENT

0. ZUSAMMENFASSUNG

Im Berichtszeitraum wurde die <u>Wasserstoffproduktion</u> während der in-vessel-Phase für zwei EPR-Szenarien mit MELCOR modelliert:

- 50 cm² Leck im kalten Strang (SB-LOCA), und
- Ausfall aller netzabhängigen Stromversorgung (Station black-out).

Der MELCOR-Eingeabedatensatz für diese Rechnungen wurde mit neuen Daten von Siemens/KWU überarbeitet. Der Vergleich mit entsprechenden MAAP-Rechnungen zeigte, daß die Beschreibung des Akkumulatorverhaltens einen empfindlichen Einfluß auf den Ablauf der H₂-Erzeugung hat.

Die Entwicklung eines theoretischen Modells zur Beschreibung der H₂-Erzeugung beim Fluten eines überhitzten Stabbündels wurde abgeschlossen (REFLOX-Code). Das Modell wurde an CORA-Flutversuchen verifiziert. Zur Anwendung auf den EPR müssen noch weitere Modelle eingefügt werden, insbesondere für den konvektiven Wärmetransport. Die Anwendung der vereinfachten REFLOX-Version auf den EPR ergab vorläufige Zr-Oxidationsgrade zwischen 30 und 60 %, was durchaus realistisch erscheint. Zur Weiterentwicklung von REFLOX wurde eine Zusammenarbeit mit Siemens/KWU vereinbart. Im Bereich der <u>Wasserstoffverteilung</u> wurde neben den unter 2.1. geschilderten Arbeiten mit GASFLOW ein Versuch in der russischen RUT-Anlage simuliert. In diesem Versuch wurden 0,6 kg H₂ pro Sekunde in ein Testvolumen von etwa 300 m³ injiziert. Die 3-D GASFLOW-Simulation mit etwa 150.000 Rechenzellen zeigte eine befriedigende globale Übereinstimmung mit dem Experiment. Abweichungen im Detail sind vermutlich auf unbekannte Rand- und Anfangsbedingungen des Versuchs (z.B. Temperatur) zurückzuführen. GASFLOW ist prinzipiell in der Lage, die hochdynamischen Strahlströmungen nahe der Bruchstelle zu simulieren.

Im Bereich der <u>Wasserstoffverbrennung</u> wurden folgende Ergebnisse für Programmentwicklung, Experimente, Programmverifikation und Reaktoranwendungen erzielt:

Zur Programmentwicklung:

Der COM3D-Code zur Simulation von schnellen turbulenten Deflagrationen wurde für die 1995 beschaffte Cray-J916 Multiprozessormaschine vektorisiert und parallelisiert. Die Turbulenzmodellierung wurde von Standard k- ϵ auf ein verbessertes RNG k- ϵ -Modell erweitert. Die bisherige 2-Komponentenbehandlung (verbranntes/ unverbranntes Gas) wurde auf eine flexiblere Multikomponentenbeschreibung (z.B. H₂, O₂, N₂, H₂O) umgestellt.

Die ERCO-Code-Entwicklung zur Beschreibung des Flamelet-Regimes in turbulenter Verbrennung wurde mit einer erprobten 2-D Version vorläufig abgeschlossen. Das Programm beschreibt die Flamme als eine Diskontinuität, die verbranntes und unverbranntes Gas trennt. Der ERCO-Code enthält keine freien Anpassungsparameter und besitzt dadurch wichtige Voraussagefähigkeiten.

Zur Validierung der theoretischen Modelle wurden folgende <u>Experimente</u> zu verschiedenen Verbrennungsphänomenen auf unterschiedlichen Skalen durchgeführt:

- Turbulente Verbrennung von mageren H₂-Luftgemischen im 12 m-Rohr des FZK-INR.
- Inerte Versuche mit He-Luft-Stoßwellen in komplexer Geometrie zum isolierten Test von Turbulenzmodellen (FZK 12 m-Rohr).
- Versuche zur turbulenten Verbrennung und DDT-Vorgängen in H₂-Luft-Dampfgemischen bei erhöhter Temperatur (70 m-RUT-Anlage, 100°C).

- Versuche zum Löschverhalten turbulenter Flammen in H₂-Luft-Gemischen mit reaktorrelevanten Wasserstoffgradienten.
- Wechselwirkung zwischen einer turbulenten H₂-Luft-Flamme und einem Wirbel (Labormaßstab mit Schlierenoptik).
- Einfluß von während der Dampfkondensation entstehenden Nebeltröpfchen (Durchmesser im µm-Bereich) auf die turbulente Verbrennung von H₂-Luft-Dampfgemischen bei erhöhten Temperaturen und Drücken (120°C, 2-10 bar).
- Laminare und turbulente Verbrennung in H₂-Luft-CO₂-Gemischen bei unfallrelevanten Druck- und Temperaturbedingungen.

Alle Experimente haben neue und am Reaktorfall orientierte Daten für die Überprüfung von theoretischen Modellen geliefert. Die wichtigsten Resultate sind im Bericht zusammengefaßt.

Hauptziel der <u>Programmverifikation</u> im Jahr 1996 war es, theoretische Teilmodelle des COM3D-Programms möglichst isoliert und mit schrittweise zunehmender Komplexität zu überprüfen. Die folgenden Testrechnungen wurden durchgeführt:

- Überschallströmung gegen eine Stufe im Strömungskanal (Testfall f
 ür Hydrodynamik).
- Berechnung von He-Luft-Turbulenzen im FZK-Rohr (Test für Turbulenzmodell).
- Simulation der Wechselwirkung zwischen einer turbulenten Flamme und einem Strömungswirbel (Test für Turbulenz und Chemiemodell in einfacher Geometrie und kleiner Skala).
- Nachrechnung von sieben turbulenten Verbrennungsversuchen in der RUT-Anlage mit homogenen H₂-Luft- und H₂-Luft-Dampfgemischen (Test für Turbulenz und Chemie in komplexer 3-D Geometrie und auf großer Skala).

Der zweidimensionale ERCO-Code wurde ebenfalls an mehreren turbulenten RUT-Versuchen überprüft und mit den COM3D-Ergebnissen verglichen. Generell ergab sich gute Übereinstimmung.

Zur Beurteilung des DDT-Potentials während schwerer Störfälle wurde ein 1995 vorgeschlagenes Kriterium an weiteren Daten überprüft und auf verschiedene Raumtypen erweitert. Für die im Kriterium enthaltene Detonationszellgröße λ wurden analytische Fitfunktionen aus den bekannten λ -Daten erzeugt. Die Funktionen λ (% H, % H₂O, T) gestatten eine genaue Auswertung des Detonationskriteriums während einer Containmentsimulation. Mit einem theoretischen Modell wurden Detonationszellgrößen für heiße, N₂- und dampfinertisierte Mischungen berechnet.

Im Programm zur Berechnung von Detonationslasten in komplexer 3-D Geometrie (DET3D) wurde das Chemiemodell auf H₂-Luft-*Dampf*-Gemische erweitert.

Bei schnellen Verbrennungsformen besteht die Gefahr der Trümmer- und Geschoßbildung im Containment. Um das Gefahrenpotential abzuschätzen, wurden Impulse und Geschwindigkeiten bei lokalen H₂-Luft-Detonationen mit einem neuen numerischen Programm berechnet (BO2). Trümmer von Wänden mit mehreren 100 kg Masse können 300 m/s erreichen. Schnelle Verbrennungen müssen deshalb bei schweren Unfällen sicher vermieden werden.

Bei den <u>Reaktoranwendungen</u> (EPR) wurde eine trockene Freisetzung von Wasserstoff über den IRWST mit GASFLOW untersucht. Mit der bewußt konservativ gewählten H₂-Quelle (2 Phasen mit je 600 kg H₂-Freisetzung) ergab sich ohne Gegenmaßnahmen ein hohes Detonationspotential im gesamten Containment. Rechnungen mit Zündern an verschiedenen Positionen zeigten, daß es möglich ist, den Wasserstoff nahe an der Quelle so früh zu zünden, daß er ohne nennenswerte Druckentwicklung direkt nach der Freisetzung abbrennt. Demnach scheint die Beherrschung von trockenen Freisetzungsszenarien mit Funkenzündern möglich zu sein. Derzeit wird zusammen mit Siemens/KWU ein neues detaillierteres EPR-Geometriemodell für weitere Analysen erstellt.

1. INTRODUCTION

The FZK research program on hydrogen behaviour in severe PWR accidents addresses the three main phases of severe accident sequences in pressurized water reactors

- hydrogen production,
- hydrogen distribution, and
- hydrogen combustion (Fig. 1.1).

These phases are investigated on three levels

- module development and verification by experiments,
- current reactor applications, and



Fig. 1.1: Structure of FZK research program on hydrogen behaviour and control in severe accidents.

- development of a next generation program.

This report describes the main results obtained in these R+D areas during 1996.

2. HYDROGEN PRODUCTION

The hydrogen production in the EPR was investigated with the MELCOR code for two scenarios without reflood. The REFLOX code was developed to describe the rapid H₂-generation in CORA-experiments with reflood.

2.1 MELCOR calculations for EPR

The MELCOR input deck for description of the EPR primary and secondary system was up-dated using new EPR design data. Details are given in the section by P. Schmuck et al. This section summarizes the results for hydrogen and steam sources which provide the initial conditions for distribution calculations.

2.1.1 SB-LOCA sequence

A 50 cm² leak in the cold leg was analyzed with MELCOR 1.8.3. The schematic EPR representation is shown in **Fig. 2.1**. Three of the four EPR loops are lumped together into one combined loop. The core is subdivided into three radial rings and eleven axial segments. The sequence was modeled up to failure of the reactor pressure vessel. The results are presented in **Fig. 2.2**.

The first hydrogen is generated about 1200 seconds after accident initiation. The accumulator injections produce small individual H₂-peaks. The last two peaks in the H₂ production are related to the failure of the core support plate (\approx 14000 s) and the reactor pressure vessel (\approx 17000 s). The total in-vessel H₂-production in this base case calculation amounts to about 420 kg. Sensitivity calculations are underway to investigate the influence of model parameters (e.g. debris characteristics) on the resulting hydrogen and steam production.



- 36 --



Fig. 2.2: MELCOR results for hydrogen and steam production during a small - break LOCA sequence in the EPR (50 cm² leak)

2.1.2 Station-black-out sequence

Due to the small steam leak rate in this scenario core dry-out occurs much later than in the previous case (**Fig. 2.3**). The first significant H_2 production period between 10.000 and 15.000 s results from accumulator injections. The core is refilled with water to about 70 %. Shortly after 20.000 s the core dries out finally and large scale oxidation takes place with about 0.4 kg H_2 /s maximum rate. The vessel is predicted to fail after 32.000 seconds. The total hydrogen generation is about 450 kg.

Additional sensitivity studies are currently performed for this accident scenario. The described base case included opening of all pressurizer values (200 cm²) and shut down of the secondary side.

2.2 REFLOX code development

In all severe accident sequences the primary goal of the operators will be to cover the overheated core with water as soon as possible. This measure is prescribed in most accident hand books. The core flooding can also occur automatically; e.g. from the accumulators during pressure decrease, of from re-activated emergency pumps at the end of a station-black-out sequence.

Since very high hydrogen generation rates were observed in a number of severe core damage tests, a model was developed at FZK to predict hydrogen production during reflood events. The model currently describes the CORA experiments. In a second step additional models will be added for full-size reactor predictions.

The program simulates the following set of coupled physical phenomena for a representative fuel pin [1]:

- Oxygen diffusion in the Zircalloy cladding and growth of the various O-Zr-reaction layers,
- heat conduction and heat generation in the fuel pin (nuclear decay heat, heat of reaction from Zr-oxidation at the metal/oxide interface),
- radiation transport through the steam containing atmosphere around the bundle.

The model is based on intact fuel rod geometry, melt relocation is neglected. Convective heat transfer is only implicitely modeled in the energy balance, no mass



Fig. 2.3: MELCOR results for hydrogen and steam production during a station - black - out sequence in the EPR.

convection is included. The main new hypothesis for explanation of the observed high H_2 -production rates during reflood (e.g. CORA and LOFT tests) is that flooding suddenly increases the steam partial pressure in the test bundle, which reduces the radiation heat losses to the cold environment and results in a sudden temperature excursion. The temperature increase triggers elevated oxygen-diffusion rates and H_2 -production. The model was validated on the large CORA-data basis existing at FZK.

A major result from the CORA-simulations was, that the sudden high hydrogen release rates from a reflood event do not create immediately dangerous gas compositions because they are mitigated by an even stronger steam production. E.g. in CORA-13 the H₂: steam ratio dropped from about 1:3 before the reflood, to less than 1:10 during the reflood. When air is added to such mixtures inert or weakly flammable gases are generated. Sensitive H₂-air-steam mixtures can only develop later in time if significant steam condensation should occur. The hydrogen risk from flooding an overheated core is more related to the integral H₂-mass than to the high H₂ release rate.

3. HYDROGEN DISTRIBUTION

Experiment RUT-29 was selected for a simulation of the hydrogen distribution during a dynamic injection because this test provided more extended data than other dynamic RUT injection tests. In the dynamic injection tests only the canyon (16.6x3x2.5m) and the second part of the channel (13.4x2.3x2.5m) have been used. The injection was performed under an angle of 45° downwards with a flow rate of 0.59kg/s. After 7.98s injection time there was a time delay of 26.3s until ignition occurred. During this time delay hydrogen concentrations had been monitored at 8 positions (5 in upper part of the test facility and 3 in the lower part of the canyon).

For the simulation GASFLOW was used. The RUT-geometry was modeled in a 3-D mesh with 155x50x21 grid points. An inflow velocity of 700 m/s was assumed, because the thermodynamic state was not measured. The calculation time was 29 days on one CPU of a CRAY-J90 computer.

Fig. 3.1 shows a comparison of measured and calculated hydrogen concentrations. The experiment as well as the calculation shows a hydrogen wave transported by



Fig. 3.1: GASFLOW simulation of a dynamic H₂ - injection test in the RUT facility (experiment hyd 29, injection rate 0.59 kg H₂ / s)

convection from the source (S1) to the igniter (I2). The maximum concentration of about 40 % hydrogen is predicted well by the simulation. In the simulation the hydrogen wave travels faster towards the igniter than in the experiment. In the lower part of the canyon the calculated hydrogen concentrations are slightly higher, they are too low nearby the igniter.

Differences between simulation and experiment are due to several effects: Only the experimental mass flow rate has been defined, but not the inflow conditions (temperature and velocity, no adiabatic flow from the hydrogen storage tank to the injection nozzle). To test the experimental reproducibility test RUT-27 was performed. The measured hydrogen distribution time history of RUT-27 showed significant differences compared to RUT-29. This indicates a strong sensitivity to boundary conditions such as e.g. initial temperature distribution in the test facility and weather conditions.

This simulation has shown the principle capability of GASFLOW to calculate hydrogen distributions even under situations where hydrogen distribution processes are difficult to predict e.g. high velocity jets against gravity, but further investigation is needed. This will be possible with new improved experimental data performed in the next RUT test series.

4. HYDROGEN COMBUSTION

The combustion related work addresses code development, experiments and code validation based on the test results.

4.1 Code development for turbulent deflagration

The development of numerical models for description of premixed turbulent H_2 -airsteam deflagration was continued. According to the different regimes of turbulent combustion two different modelling approaches are pursued:

- ERCO-code for the flamelet regime (Ka=reaction time scale/Kolmogorov eddy timescale < 1), and
- COM3D-Code for distributed reaction zones (Da=turbulent time scale/reaction time scale >1) and well stirred reactor (Da <1).

4.1.1 COM3D-code

The <u>turbulence modelling</u> in the COM3D code was extended. The code now offers the choice between two different turbulence models:

- a standard κ - ϵ , and
- a RNG κ - ϵ (Renormalization Group Theory).

The RNG model is a modern development of the traditional κ - ε model. An additional term has been added in the ε -equation, which changes dynamically with the rate of strain of the turbulent flow, providing more accurate predictions for flows with rapid distortions and large eddies (**Fig. 4.1**). The RNG model appears attractive for a number of reasons:

- it is applicable to compressible flow,
- the model constants result from a closed theory, not from empirical experiment data,
- it covers low Reynolds numbers, and
- the additional computational costs compared to κ - ϵ are low (+3%).

Test calculations with the new RNG model are presented in Section 4.3 of this report.

In the field of <u>turbulent combustion modelling</u> the COM3D code now offers an Eddy Dissipation Model for Da>1 and an Arrhenius formulation for the well-stirred reactor (Da<1). This model approach corresponds to a jumping between two states, the actual evolution of the mixing from unburned to burned gas is not treated.

The next logical extension of the combustion modelling is to treat the intermediate mixing states for each component with a presumed β -PDF model. If the joint probability density function (PDF) F is known as function of temperature T and mass fractions f_i , the mean reaction rate ϖ can be calculated from

$$\varpi = \iint \dots \int \omega(\mathbf{T}, f_i) \cdot \mathbf{F}(f_i) d\mathbf{T} df_i$$
(4.1)

where ω is the real reaction rate of the mixture for given mass distribution f_i and temperature T.

$$\begin{split} (\rho k)_t + (\rho u_j k)_{x_j} &= S - \rho \epsilon + (\frac{\mu_{tur}}{C_k} k_{x_j})_{x_j}, \\ (\rho \epsilon)_t + (\rho u_j \epsilon)_{x_j} &= \frac{\epsilon}{k} [(C_1 - C_\eta) S - C_2 \rho \epsilon] + (\frac{\mu_{tur}}{C_\epsilon} \epsilon_{x_j})_{x_j} + \\ &+ [C_3 - \frac{2}{3} C_\eta (C_\mu \frac{k}{\epsilon} u_{j,x_j} + 1)] \rho u_{j,x_j} \epsilon. \end{split}$$
Here C_η is defined by
$$C_\eta &= \frac{\eta (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3}, \qquad \eta_0 = 4.38$$

$$\eta &= \frac{k}{\epsilon} \left(\frac{1}{2} (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}) (u_{i,x_j} + u_{j,x_i}) \right)^{1/2}, \end{aligned}$$
and
$$C_3 &= \frac{-1 + 2C_1 - 3m(\gamma - 1) + (-1)^{\delta} \sqrt{6} C_\mu C_\eta \eta}{3}. \end{cases}$$

$$\frac{\text{Turbulence model constants}}{\frac{1}{3} C_1 C_2 C_k C_k \beta} \frac{1}{2} C_1 C_2 C_k C_k \beta}{\frac{1}{2} C_1 C_2 C_k C_k \beta} C_1 C_2 C_k \beta}$$

Fig. 4.1: Equations and model constants of the RNG k - ϵ model as implemented in the COM3D code.

The implementation of such an PDF model into COM3D was started. Compared to the Eddy Dissipation Model only one more transport equation needs to be solved, e.g. for a 4-component system 11 instead of 10 equations. The main difficulty in evaluating Eq. 4.1 at each time step and in each computational node is to develop a fast and still precise numerical scheme for solving the multidimensional integral, which contains singularities at the end points ($f_i = 0$ or 1).

A major advantage of the presumed β -PDF approach is that it allows also to treat <u>non</u>-premixed combustion, e.g. a hydrogen diffusion flame in a steam-air environment. This is the desired combustion mode which is obtained in a successfull (non-energetic) hydrogen control with spark igniters. A β -PDF model would also allow a more mechanistic description of the quench and extinction phenomena in turbulent flames, which are important for flame acceleration predictions.

4.1.2 ERCO-Code

A two-dimensional version of the ERCO-code was completed and tested against RUT-experiments [2]. The numerical scheme models the turbulent flame zone as a reactive discontinuity (no reaction before, complete reaction behind the interface). The laminar burning velocity is calculated from detailed chemistry models and used as input data to ERCO. The effect of turbulence on the burning velocity is modeled with single relations using the local velocity fluctuation. Turbulence is calculated with a standard κ – ϵ model. Ignition of unburned gas is described with a two-step induction model, fitted to detailed chemistry calculations. Details of the numerical scheme can be found in [2].

The verification calculations performed with ERCO are described in Section 4.4. Since the code contains no free input parameters the comparison to experimental data provides a thorough test of its predictive capabilities.

4.2 Experiments

A large variety of experiments was performed in 1996 to provide test data for different models developed in the combustion codes COM3D and ERCO.

4.2.1 FZK "3 m-tube"

A rectangular test tube (10 cm x 10 cm) was designed and constructed for the visual observation of turbulent H_2 -air combustion around flow obstacles. The tube is a scaled-down model of the existing FZK 12m-tube.

The tube was instrumented and tested with a 15% H₂-air mixture and rectangular obstacles blocking 30% of the flow cross section. The tube was damaged at the end from high reflected pressures of the fast turbulent flame. Additional tube extensions without optical access were fabricated and installed, thus avoiding high reflected pressure loads on windows.

The tube was now modified and prepared for testing of Laser Doppler Anemometers (LDA) to measure flow velocities and turbulence generation ahead of a fast turbulent flame.

4.2.2 FZK "12 m-tube"

In 1996 two different types of experiments have been performed in the FZK 12 mtube:

- experiments on turbulence generation and dissipation in obstructed geometry (inert He/air).
- experiments on turbulent combustion in lean H₂-air mixtures.

The intention of the two test series is to decouple the turbulence and the combustion model development into two sequential steps:

- 1) verification of turbulence models alone for the relevant flow conditions under inert conditions (He+air), and
- 2) investigation of turbulence with chemical reaction (H_2 +air).

4.2.2.1 He-air turbulence tests

The 12 m-tube was modified to allow inert tests in a shock tube mode, where a 3m long section can be pressurized **(Fig. 4.2)**. After bursting of the membrane a shock wave travels into the remaining section which is initially at low pressure (e.g. 1 bar) and contains circular orifices as obstacles.

The shock wave looses velocity and pressure amplitude by partial reflection and turbulence generation. The measured pressure signals at different locations can then be compared to numerical simulations using different turbulence models. These data allow to verity the turbulence modelling under inert conditions, without interference from a combustion process.

Four experiments were performed in the inert shock-tube mode. **Fig. 4.2** shows one example for the measured pressure decay as the wave proceeds into the obstacle region. These results are compared to COM3D calculations in section 4.3.

4.2.2.2 H₂-air combustion tests

New germanium photodiodes with higher infrared sensitivity were tested and installed. They allow to register flame fronts in lean H_2 -air mixtures with high resolution.

A new sampling unit for analysis of the hydrogen concentration in test gases was constructed, tested and applied to the experiments. The principle is to measure the mole change in the test gas due to H_2 -air mixtures with high resolution. The results agree well with the H_2 concentration values devived from the mass flow meter readings during the filling.

15 experiments have been performed in the 12 m-tube with different obstacle configurations (blockage ratio 30 to 90 %), initial pressures (1-2 bars) and with lean hydrogen concentrations (8-11% H_2). The test parameters are summarized in **Fig. 4.3.**

Fig. 4.4 shows the data from experiment R0796-02 as an example. In this test the flame accelerated to a terminal velocity of about 170 m/s. COM3D calculations are



Fig. 4.2: Inert shock tube experiments in FZK " 12 m tube ". The measured pressure data contain information about turbulence generation and dissipation without combustion.

Experiment	BR (%)	p₀ (bar)	H ₂ (%)
R0696_00	60	1	10
R0696 01	60	2	10
R0696_02	60	1	8
R0696_02a	60	2	8
R0696_03	60	1	11
R0696_04	60	1,4	11
R0796_01	90	1	10
R0796_02	90	1	10
R0796_03	90	2	10
R0796_04	90	1	9
R0796_05	30	1	11
R0796_06	30	1	10
R0796_07	30	1	9
R0796_08	30	1	8,5
R0796_09	30	1	8,5

Fig. 4.3: Combustion experiments performed in 1996 in the FZK " 12 m tube " with lean H₂ - air mixtures, different obstacles and pressure.



Fig. 4.4: Turbulent combustion experiment in the FZK 12 m - tube with a lean H₂ - air mixture, flow blockage 90 %, photodiode signals in upper figure, pressure signals in lower picture.

currently underway to determine the performance of the eddy-break-up model for lean mixtures and different flow restrictions.

4.2.3 RUT tests with H₂-air-steam mixtures

In 1996 eight large scale tests were performed in the Russian RUT facility to study the critical conditions in hydrogen-air-steam mixtures at elevated temperatures for a deflagration-to-detonation-transition (DDT).

The experimental parameters were

- temperature 80 100°C, pressure 1 bar,
- total test volume 480 m³,
- steam concentration 6.6, 15, and 34-45%,
- hydrogen concentration (dry) 10.5, 18.5, and 29-32%,
- ignition by a weak electric spark.

The test serie was jointly sponsored by FZK, IPSN and NRC, and performed by Kurchatov Institute Moscow in the RUT facility.

Fig. 4.5 summaries the test parameters and the observed combustion regime. Fig. 4.6 shows the dependence of the combustion mode from the gas composition (hydrogen and steam concentration). The figure includes the results of the first test series in 1995 (denoted 1 to 7). The experiments have shown a clear limit between deflagration and detonation modes. This experimental limit is close to the theoretical prediction using cell size scaling (critical size \approx 7 x detonation cell width), which results in λ about 1 m.

Four types of combustion process were registered in the tests:

- slow deflagration (tests sth4, sth9)
- fast turbulent deflagration (sth6, sth7)
- DDT in the large cavity (sth1, sth2, sth3)
- DDT in the channel (sth8).

An example for a slow deflagration case is shown in **Fig. 4.7**. The flame reached a maximum speed of 200 m/s at the entrance to the large cavity. The evolution of the flame front within the cavity was computed from measured photodiode signals.

File name	Average hydrogen concentration (dry)	Average steam concentration	Minimum steam concentration	Comments
sth1	32.7	34.6	33.4	DDT
Juin				
sth2	29.0	36-38 ?	30,5-37.5 ?	DDT
				Uncertain steam concentration
sth3	29.2	39.5	37.7	DDT
sth4	30 ± 1	44	41.2	Deflagration
				ignition from operating fan
sth6	29.6	45	43.3	Deflagration
sth7	28.8	40.6	38.1	Deflagration
sth8	18.5	15.5	14.0	DDT in 1 st channel
sth9	10.1	6.6	4.2	deflagration

Fig. 4.5: RUT combustion experiments with H₂ - air - steam at elevated temperatures



Fig. 4.6: Observed combustion regimes in large scale RUT experiments as function of mixture composition (temperature ≈ 100°C). Experiments 1 to 7 refer to the test series in 1995.



Fig. 4.7: Example for a slow deflagration test in RUT facility, 10.1 % H₂ dry, 6.6 % steam. The maximum flame speed was about 200 m/s after a travel of about 40 m.

The opposite extreme in combustion speed is represented by test sth8, in which a DDT occurred already in the first channel after about 25 m flame path (**Fig. 4.8**). The detonation propagated in a stable manner throughout the remainder of the system with the theoretically predicted CJ-detonation velocity (1550m/s).

The RUT tests with steam have confirmed the 7 λ -DDT criterion on large scale for steam containing mixtures at elevated temperatures. They have also provided large scale test data on different combustion modes in H₂-air-steam mixtures which will be used for the verification of numerical models and programs (COM3D, GASFLOW, ERCO).

4.2.4 Quenching in non-uniform H₂-air mixtures

For a realistic simulation of hydrogen combustion in severe accidents the phenomenon of flame quenching must be modeled. Flame quenching can occur e.g. if the flame burns into regions rich in steam or lean in hydrogen. Also the development of high turbulence levels can extinguish the combustion process locally or even globally. Experiments were performed at the Russian Research Center "Kurchatov Institute" which investigated both of these quenching mechanisms. The data will be used for verification of quenching models in numerical codes (COM3D, GASFLOW).

The experimental set-up is shown in **Fig. 4.9**. It consist of a 11.5 m long shock tube equipped with annular orifice obstacles to generate turbulence during the flow. The blockage ratios of the obstacles were BR = 0.3, 0.6, 0.75 and 0.9, where BR = $1-(d/D)^2$, with tube diameter D = 174 mm.

A hydrogen gradient in the tube was generated by inserting a certain amount of pure H_2 into the air filled tube at one end of the tube and by diffusional transport towards the opposite tube end. In a pre-test serie the hydrogen concentration profile along the tube was measured as function of injected H_2 -mass and diffusion time. **Fig. 4.10** shows an example. In this case a nearly linear concentration gradient had developed after 16 minutes, ranging from 30 % down to 4 % H_2 in air. By varying the amount of H_2 injected and the diffusion time different gradients could be generated in the tube.



Fig. 4.8: Example for a DDT in a large scale H₂ - air - steam mixture at about 100°C, RUT test sth 8, 18.5 % H₂ dry, 15.5 % steam. After DDT a stable detonation propagates throughout the remainder of the facility.



Fig. 4.9: Experiment tube for investigation of quench mechanisms in non - uniform H_2 - air mixtures [3].



Fig. 4.10: Evolution of the axial H₂ - concentration in the test tube as function of diffusion time [3].

Test variables in the main experiment serie were blockage ratio and average hydrogen concentration. The minimum hydrogen concentration at the end of the tube, opposite to the rich ignition location, was kept constant at about 5 % H₂. The steepness of the H₂-gradient was determined by the amount of H₂ injected. Tests with homogeneous H₂-distribution were also performed for comparison. Photodiodes and pressure transducers were used to resolve the flame and pressure wave propagation. After each test the total mass fraction of H₂ burned was determined from the measured final pressure in the tube at ambient temperature. A total of 30 experiments were performed.

Fig. 4.11 shows as example a test with a hydrogen concentration gradient from 19 to 4.5 % H_2 in air (test GRD54). The combustion was ignited at the rich end (R=0). The flame accelerated to about 500 m/s maximum speed and quenched completely near the 8 m position. These and other test results will be used for the verification of quench models.

In summary the experiments have shown that global quenching can easily occur when a turbulent flame propagates through obstructed channels. Quenching is more distinct in case of a concentration gradient from rich to lean when compared to the homogeneous condition. In the gradient case the flame accerelates very fast at the beginning of the tube, generating high turbulence levels ahead of the flame and resulting in faster quenching. Quenching is increased by the blockage ratio and by a decrease in H_2 -concentration.

4.2.5 Flame-vortex interaction

The interaction of an isolated vortex with a flame is a fundamental phenomena of reactive flow which involves all important effects like strain, curvature and quenching. It provides a serious test case for all numerical combustion models. Experiments were therefore performed which investigate the interaction between a single laminar vortex and an initially laminar premixed flame. The experimental data will be simulated with the COM3D code.

The experimental apparatus consists basically of a quasi two-dimensional test chamber, equipped with a fast Schlieren system and an array of photodiodes (Fig.





a) hydrogen concentration gradient (19 - 4.5 % H₂),

b) photodiode signals and

c) resulting flame speed in test GRD 54 [3]. Quenching occurred near the 8 m position. The data will be used for validation of quench models.

4.12). The vortex ring was formed by transmitting a shock wave through a circular orifice. The vortex velocity was in the range of 80 \pm 10 m/s. The experiments were conducted in lean H₂-air mixtures (8-15% H₂) in which quenching effects can be expected.

Three different arrangements of flame and vortex were investigated:

- vortex of unburned mixture moves towards the flame (Fig. 4.12a),
- the vortex of unburned mixture moves through flame kernel (Fig. 4.12b),
- a burning vortex moves through unburned mixture (Fig. 4.12c).

The experiments require carefull synchronization of all events: mixture ignition, electromagnetic release of the membrane piercer, light flash time marker, high speed camera starting, recorder triggering and illuminating laser flash. **Fig. 4.13** shows an example from the first test series. The vortex of unburned gas compresses the flame front in the first frame, then enters the flame and burns out rapidly in the last two frames. The signals of the installed photodiodes show distinct transient reductions in light during this interaction, which is due to quench effects.

The experiments can be summarized as follows:

- For a vortex moving towards a flame front, the character of the interaction depends mainly on the hydrogen concentration. With concentrations of about 15% H₂ the flame easily penetrates into the vortex and very fast combustion is observed. With lower H₂ concentrations the flame is delayed and often quenched by the vortex flow.
- When a vortex moves through a flame kernel, the outcome depends on the size of the kernel. Small kernels (≤ 6 cm in these tests) are partially or completely quenched, large kernels can penetrate into the vortex and cause complete burnout.
- When a burning vortex enters unburned mixture the result depends strongly on the H₂-concentration. Varying the H₂-content from 10 to 12.5% changed the interaction from complete quench of the vortex, over partial quench, to intensive ignition of the mixture.





- a.) unburned vortex moves towards flame,
- b.) unburned vortex moves through flame kernel,
- c.) burning vortex moves through unburned mixture [3].



Fig. 4.13: Schlieren pictures of a vortex interacting with a turbulent flame front. The vortex approaches from the right, experiment st142, 15 % H₂ in air. Photodiode signals showed transient quenching of the flame [3].
The experiments will be modeled with turbulent combustion codes. An example is given in Section 4.3.

4.2.6 Turbulent deflagration in H₂-air-steam-fog systems

All severe accident sequences involve partial or complete discharge of hot primary coolant water/steam into the initially cold containment. Steam condensation will create air-steam-fog mixtures, where fog can be considered as nearly monodispersed microdroplets in a carrier gas (initially air and steam). Fog from condensation processes must be distinguished from spray, typical droplet diameters being 1-10 μ m and > 100 μ m, respectively. Fog droplets suspended in a H₂-air-steam mixture can act as a heat sink that absorbs a large amount of the combustion heat by vaporization and heating of the additionally created steam. The flame may be inhibited or quenched, pressure and temperature development from H₂- combustion will be reduced. For a flame speed of 2-3 m/s the drop residence time inside the combustion zone is about 0.5 ms. Such times are sufficient to entirely vaporize fog of less than about 8 μ m diameter.

The presence of fog may therefore be an inherent mechanism to mitigate hydrogen combustion effects in serve accidents.

Since up to now no systematic data on combustion in H₂-air-steam-fog systems were available, experiments were performed at the Russian Academy of Sciences in Moscow which use fog particle sizes, adequate to typical accident situations. A shock-tube method and bomb-type experiments with new types of nozzles were developed.

Fig. 4.14 gives a schematic view of the heated shock tube for studying flames in H_{2} -air-steam-fog systems. The high pressure section (HPS) was heated to 410-420 K. First a controlled mass of water was inserted into the HPS and vaporized. Then a hydrogen-air mixture was added through a preheated inlet until the membrane failed (4.2 and 11 bar with two different membranes). The adiabatic expansion cooled the gaseous H_{2} .air-steam mixture and fog formation occurred. After a preset delay time an exploding wire ignited the mixture, which contained 16 and 20 % H_{2} , respectively. Two different outflow cross sections were used to vary the flow velocity in the tests.



Fig. 4.14: Scheme of heated expansion / shock tube for studying H₂ - air - steam - fog systems. PG = pressure gauges, PD = photodiodes, PDA = extinction meter, A, B = membrane sections with different blockage ratios for fast and slow expansions.

The main results for the fast and slow expansion tests are summarized in **Fig. 4.15** and **4.16**, respectively. The data show that the presence of fog can have a strong mitigation effect on the combustion dynamics in lean H_2 -air-steam mixtures (16-20 % H_2). The flame velocities, the peak pressures and the rate of pressure rise decrease all significantly with increasing fog concentration.

A second test series on the combustion in foggy H_2 -air-steam mixtures was performed in a spherical explosion bomb (**Fig. 4.17**). The vessel is heated to 373-393 K. Fog was created in two ways:

- a) by cooling and condensation of superheated water vapor,
- b) by mechanical dispersal of a water jet passing through a specially designed nozzle.

The main results are presented in **Fig. 4.18**. The solid line is a thermodynamic calculation for a stoichiometric saturated H_2 -air-steam mixture without fog. The dashed lines are calculations for mixtures containing fog. The given percentage refers to the fraction of fog, e.g. 20 % of the total water is present in so small droplets that they vaporize completely in the flame, 80 % of the water is present in the gaseous state.

The solid and open points are experimental data in mixtures containing 20-30 % of the total water in liquid form, produced in the two different ways described above.

The effect of liquid water increases rapidly with decreasing H_2 -concentration because of the decreasing flame temperature in leaner mixtures. A very significant observation is that quenching occurred consistently below 14% H_2 . According to the present experiments fog has a strong effect on the flammability limit, which has so far not be considered in severe accident analysis.

4.3 COM3D-code validation

A substantial effort was devoted in 1996 to verifity the different models of the COM3D-code in a step-by-step procedure. **Fig. 4.19** summarizes the main components of the code. Different sub-sets of these models were tested on increasingly complex problems.



Fig. 4.15: Measured turbulent flame velocities in fast expansion tests as function of steam concentration and fog mass fraction [4]. The presence of fog can significantly mitigate H₂ combustion dynamics.



Fig. 4.16: Measured flame velocities in slow expansion experiments. The presence of fog reduces flame speeds significantly [4].



Fig. 4.17: Bomb experiments on combustion in foggy H₂ - air - mixtures [4].



Fig. 4.18: Measured peak pressures in heterogeneous H₂ - air - steam -fog mixtures at elevated temperatures and pressures.



Fig. 4.19: Models of the COM3D code.

4.3.1 The forward facing step

The supersonic flow through a 2-d duct containing a forward facing step was analyzed. This numerical test problem has been investigated by many authors using various codes and numerical methods. The correct solution is well known. The problem is a test for the numerical solution of the Euler equations and the thermodynamic data in the COM3D-code for a high velocity case.

The results obtained with three different grids are shown in **Fig. 4.20**. The calculated stagnation pressure, angle of the low shock, shear layer, and downstream shock pattern agree well with the known numerical solutions. The TVD scheme used in the COM3D code preserves shock fronts very well. Even in the coarse grid only about three meshes are needed to resolve a discontinuity.

4.3.2 He-air turbulence tests

The experiment on turbulence generation and dissipation in inert He-air (Section 4.2.2.1, **Fig. 4.2**) was simulated with COM3D using three different turbulence models:

- COM3D without turbulence model
- with κ-ε,
- with RNG κ-ε.

The calculation was performed with a 3-d cartesian grid using a space resolution of 1 cm in each direction. A total of 390000 cells were modeled. **Fig. 4.21** compares the measured pressure signals to the three COM3D calculations.

The calculation without turbulence model shows large deviations from the measured pressure data. These results are clearly inadequate.

Including a κ - ϵ model improves the agreement with the experiment significantly. The calculation matches the measured pressures associated with the incoming wave very well. The deviation in the 6.25 m-signal is due to the membrane rupture. In the calculation an ideal plane surface is assumed, whereas in the experiment the membrane was deformed to an almost hemispherical shape before rupture occured. This results in a slightly curved shock wave.



Fig. 4.20: COM3D verification on a hydrodynamic test problem. Supersonic flow through a duct containing a forward facing step: N₂, M =3, p₀=1 bar, T₀ = 298 K. Three grids are shown: 20 x 60, 40 x 120, 100 x 300 cells. The COM3D results agree well with the known solutions.



Fig. 4.21: Verification of turbulence models against shock tube experiments in obstructed geometry. Both the k - ϵ and the RNG k - ϵ model result in good agreement with the measured pressure data.

The calculation with an RNG κ - ϵ turbulence model resulted in pressures practically identical to the standard κ - ϵ model. Very good agreement is obtained for the incoming wave, and slightly too high dissipation is observed for the reflected wave. The last two calculations are indistinguishable on the plot.

The measured and calculated shock trajectories for this experiment are compared in **Fig. 4.22**. This plot allows to investigate velocity results. Shock tube theory for free flow results in 565 m/s velocity for the incoming wave. This agrees very well with the experimental and numerical data in the obstacles free tube section (6-9 m). The annular obstacles (0-6 m) generate turbulence and slow down the wave velocity.

The velocity of the leading shock in this very complex flow field is described well by the COM3D calculations. The simulations of the inert experiment on turbulence generation in an abstracted geometry have shown that the standard κ - ϵ and the RNG κ - ϵ turbulence models are both fully satisfactory for describing the turbulence effects on the macroscopic properties (pressures and wave velocities) of the flow.

4.3.3 Flame-vortex interaction

The third step in code verification is inclusion of chemistry into a turbulent flow problem. The flame-vortex experiments were selected as a test problem ([3], Section 4.2.5).

Figure 4.23 shows the interaction of a flame moving from left to right, with a vortex approaching from the opposite direction. The density gradient of the flow field is depicted, simulating in a Schlieren picture. The flame appears as dark curve moving into the unburned gas. The vortex of unburned gas emergs from the narrow channel in the third frame (left column, top to bottom). Pressure waves are visible as grey zones. The vortex and its associated turbulence penetrates into the flame zone and enhances the burning rate.

Fig. 4.23 was obtained with a standard κ - ϵ model. The calculation with a RNG κ - ϵ model showed no significant differences in flame propagation and vortex-flame interaction. A noticeable difference was more corrugation of the flame surface with



Fig. 4.22: Measured and calculated shock wave trajectories for tube experiment R1096_03.

- 72 --



Fig. 4.23: Numerical simulation of a turbulent vortex - flame interaction in a H₂ - air mixture. Shown is the density gradient (Schlieren picture). The flame front moves from left to right (dark line), the vortex from right to left (gray).
 COM3D calculation with standard k - ε turbulence model.

RNG. The flame front velocity and consequently pressure wave amplitudes and positions were close in both calculations.

It is possible that significant differences could be observed in simulations of fast accelerating flames, producing strong pressure waves and shock waves. A possible conclusion from these investigations is that the turbulence model itself is less important than the chemistry model for predicting turbulent premixed flames.

4.3.4 RUT combustion experiments

The eddy-break up combustion model in the COM3D code contains a reaction rate constant c_f which must be determined empirically from experimental results. A previous series of calculations for turbulent combustion experiments in the 12 m-tube had shown that for quite different experiments a c_r -value of 7±1 gave good agreement with the test data, provided the mixture burned completely in the test.

A second series of calculations was performed in 1996 simulating large scale RUT experiments (**Fig. 4.24**) in order to determine the optimum c_{r} -values for larger, more reactor typical geometrical scales. **Table 4.1** summarizes the turbulent combustion tests for which COM3D calculations were performed, together with the optimum c_{r} value, necessary to produce good agreement with the test results (flame speed, overpressures). These tests were selected because they resulted in turbulent flame propagation (no DDT) and because they provided the detailed measured data. The experimental parameters cover a wide range of initial conditions (p_o , T_o , % H_2 , % steam), geometrical configurations (S_1 =opening from first channel to canyon, S_2 =vent opening of second channel, BR=blockage ratio of installed obstacles, and maximum flame speeds in the first channel (v_{max}).

Fig. 4.25 compares measured and calculated positions of the flame front as it accelerates along the obstructed first channel. Ignition was near the 1.4 m position by a weak spark. It is remarkable that despite of the quite different initial conditions (%H₂) and geometries (S₁, S₂, BR), the flame path can be modeled well with a nearly constant c_{Γ} value (6 or 7). The maximum flame speeds varied significantly (factor 3). The calculations were done with a numerical grid size of 12.5 cm (44x50x 50 \approx 1.100.000 grid cells).



Fig. 4.24: Schematic view of RUT facility, consisting of first channel (equipped with obstacles), large cavity, and second channel leading to exit. All dimensions are shown on same scale (Autocad plot).



Fig. 4.25: Comparison of measured and calculated flame front trajectories in the first channel of the RUT facility (0 - 34 m).

	Experimental parameters								
Test	p _o	Τo	H ₂	H_2O	S ₁	S ₂	BR	V _{max}	Optimum
	(bar)	(K)	(%)	(%)	(m ²)	(m ²)		(m/s)	c _f value
13	1	280	11.0	-	2.0	0	30	210	7
17	1	280	11.0	-	5.6	2.5	30	440	6
19	1	280	12.5	-	5.6	2.5	0	35	9
21	1	280	12.5	-	5.6	2.5	60	650	7
23	1	28	11.2	-	5.6	2.5	60	340	6
stm2	1	370	14.7(dry)	14.7	5.6	2.5	30	680	10
stm7	1	370	17.5(dry)	25.7	5.6	2.5	30	680	10

Table 4.1	Experimental conditions of simulated RUT-tests and resulting Eddy-
	break-up coefficient c _f giving the best agreement with measured data.

In test 19 without obstacles the optimum c_r-value differed noticeably from tests 13, 17, 21 and 23. The most likely reason is that the calculated turbulence level is too low for two reasons:

- the κ - ϵ model does not include turbulence generation at the walls
- small obstacles in the channel (crane, instrumentation and cable piping) are not included in the geometrical COM3D model.

Then the turbulent time scale κ/ϵ in the eddy-break-up reaction rate $\overline{\omega}$:

$$\overline{\omega} = -c_{f} \frac{\varepsilon}{k} \min(y, 1 - y)$$
(4.1)

becomes too small and must be compensated by an increased c_f value (y = fuel mass fraction). In experiments with large obstacles (BR= 30 and 60 %) the turbulence generation from walls and secondary small flow resistances is negligeable compared to that from the large obstacles.

A comparison of the measured and calculated pressure histories in the RUT facility (Fig. 4.26) shows good agreement for the integral combustion development and local pressure loads. All major peaks in the experiments can be identified in the calculation, showing that the simulation captures, the essential wave propagation phenomena in the complex 3-d enclosure. At later times the calculated pressures exceed the test data because the late venting of the facility was not simulated.



Fig. 4.26: Numerical simulation of large scale RUT - experiments with hydrogen - air and hydrogen - air - steam mixtures.

For simulation of the H₂-air-steam test a relatively high c_{f} -value (=10) was needed to obtain acceptable agreement. This is very likely due to the fact that the heating tubes and other additional equipment, which was installed for heating the RUT facility to about 100°C, were neglected in the COM3D geometry model. This results in too low calculated turbulence generation and requires an artificially high c_{f} -value for compensation, similar to test 19.

In summary the observed c_r -variation can be interpreted in terms of model approximations. It appears important that the dominant turbulence generation processes are captured in order to obtain reliable results from an eddy-break-up combustion model. For instance in large empty rooms it may be necessary to include wall functions in the turbulence model.

The described work allows now to calculate premixed turbulent combustion in severe accidents with a semi-empirical approach. Complex 3-d geometries with up to about 1 million mesh points can be handled on a dedicated Cray-J916 multiprocessor machine.

4.4 ERCO-code validation

Seven RUT experiments on turbulent H_2 -air deflagration were simulated in 2-d geometry using the ERCO-code [2]. The hydrogen concentration ranged from 11.0 to 14.0 % H_2 in air. Different blockage ratios (30 and 60%) and flow geometries were investigated.

A set of standard computational parameters were defined and the effect of parameter variations on the important results, like e.g. terminal flame speed in the first channel were investigated (**Table 4.2**).

The calculations were performed on a Cray J904, the same machine type as used for the COM3D simulations.

Parameter/Model	Standard value	Variations	
- wall turbulence model	none	none	
- space resolution ($\Delta X, \Delta Y$)	10 cm	5 cm	
- initial flame shape	circular	plane over	
	(25 cm radius)	RUT cross section	
 initial velocities 	zero	-	
 initial turbulence (u') 	0.02 m/s	0.5 m/s	
- turbulent burning law	s _t =s _l +u'	s _t =s _l +2u'	
- flame buoyancy	modelled	not modelled	
- geometry model	only first	first channel plus	
	channel	cavity	

Table 4.2 ERCO parameters used for 2-d RUT simulations

The parameter variations showed a number of important effects on the computational results:

- Finer space resolution (5 cm compared to 10 cm) leads to larger turbulence generation (u'_{max} = 28 m/s vs. 19 m/s), faster burning rates and higher flame speeds (900 m/s vs. 680 m/s) at the end of the first channel. Convergence could not be reached with the feasible grid resolution.
- The spherical initial flame shape produces higher flame speeds than the planar configuration (800 m/s vs. 550 m/s). The spherical case is more relevant to the experiment.
- The faster turbulent burning law leads to faster flame acceleration, but the effect is not very pronounced (970 m/s vs. 800 m/s). Nevertheless the burning law must be evaluated and chosen carefully.
- Neglection of the (actually existing) flame buoyancy can strongly influence the initial slow combustion phase. The final flame velocities in the RUT tests were nearly equal (both about 800 m/s).

Fig. 4.27 compares measured and calculated flame trajectories for different RUT experiments. Some three-dimensional results from COM3D are included. The best predictions with the ERCO code are observed for the experiments with 12,5% H_2 , possibly because the burning law was adjusted to this mixture and not varied with the H_2 concentration.



Fig. 4.27: Comparison of measured flame trajectories in large scale RUT - experiments with ERCO and COM3D predictions.

Fig. 4.28 shows the corresponding flame velocities. The flame velocities at the end of the first channel (34 m) tend to be above the experimental values. ERCO predicts generally a continuing flame acceleration up to the channel end, whereas most of the experiments showed a choked-flame regime. The ERCO flame velocities correspond closely to the sound velocity in the burned gas. The flame propagates in the ERCO calculation as a CJ-deflagration.

Despite of these differences the general agreement in the flame behaviour is good, considering that the computational parameters were fixed for all simulations. No DDT was observed in the computations, probably due to insufficient grid resolution which smears out local hot spots in compressed gas regions. The current H_2 -air chemical kinetics can be extended to H_2 -air-steam systems.

5. DETONATION CRITERIA

For the implementation of igniter systems as a hydrogen mitigation measure it is necessary to determine if an ignition event can lead to a deflagration-to-detonation-transition (DDT) or not. The direct numerical simulation on containment scale is currently not possible because very small time and space scales have to be resolved. The alternative is to derive DDT-criteria which allow a decision on the basis of the calculated gas distribution during the accident progression. The idea of a minimum scale requirement for DDT was developed at Kurchatov Institute and investigated during the last years in joint FZK-KI test-series on different scales, mixtures and geometries. The following criterium was proposed

$$D \ge 7\lambda$$
 for DDT (5.1)

where D is the characteristic "size" of the mixture and λ the average detonation cell width in the reacting cloud. A minimum scale is required for a successfull DDT, which depends on the chemical sensitivity of the mixture, characterized by λ .

Because a variety of geometrical configurations can be found in containment buildings, work in 1996 investigated how the characteristic size D depends on the shape of the confining geometry. The available literature data on DDT experiments were sorted into few different geometry classes and analyzed systematically [5]. The



Fig. 4.28: Comparison of measured flame velocities in large scale RUT - experiments with ERCO and COM3D predictions. The black triangles show uncertainties in the measured flame speeds (<u>+</u> 100 m/s)

following results were obtained, assuming that a certain mixture fills the room completely.

5.1 DDT in room geometry

A typical room geometry with the linear dimensions is shown in **Fig. 5.1**. The width of the room width perpendicular to the page plane is denoted W. The room length is L and the room height is H.

<u>**Case I:**</u> Regular compartment geometry with $L \approx H \approx W$, (BR < 0.5, d < 0.5H). The arithmetical average of the room dimensions results in good representation of the experimental data

$$D = (L+H+W)/3$$
 (5.2)

A very similar and equally suitable value is obtained from the geometrical average $D = (L \bullet H \bullet W)^{1/3}$.

Case 2: Flat compartment geometry, L≈H>> W (BR < 0.5, d < 0.5 H)

In a flat room the smallest dimension W has no noticeable influence on the maximum possible size of the mixture and the average of the other two dimensions is an appropriate measure for the characteristic size

$$D = (L+H)/2$$
 (5.3)

5.2 DDT in channel geometry

The geometrical designations for a typical channel geometry is given in Fig. 5.2. W is again the dimension in vertical direction, S is the obstacle spacing.

Case 1: S≈H (BR<0.5, d >0.5H)

The following rules are proposed for estimating the maximum macroscopic size D of sensitized mixture if the obstacle spacing is similar to the channel diameter

$$D = 2.5 S$$
 (5.4)



Fig.5.1: Typical room geometry with height H, length L, opening d and blockage ratio BR [5].





<u>Case 2:</u> S << H or S >> H (BR < 0.5, d > 0.5 H)

If the obstacle spacing is either much smaller of much larger than the channel (or tube) diameter a good measure is

$$D = 2.5 H$$
 (5.5)

Figure 5.3 summarizes all investigated experiments, when D is determined according to the above relations.

The mixture properties (λ) and the geometrical size (D) of each experiment is plotted in the form D/ λ vs. D. The theoretical line very well separates the region in which DDT was observed (D/ λ > 7) from the deflagration regime (D/ λ < 7).

This criterion is valid for DDT in confined geometry, where the initial explosion wave develops from an approximately planar wave. The minimum scale requirement in this case seems to be $D \ge 7\lambda$.

In unconfined geometries only a spherical initiation wave can develop. It was shown that in this case the scale requirement is more severe: $D \ge 3 \cdot 7\lambda$ [5]. Turbulent jet initiation experiments without reflections in the flow path could be correlated well with this relation. For containment analysis the relation $D \ge 7\lambda$ is more relevant and more demanding.

5.3 Detonation cell size data.

The above DDT criteria require knowledge of λ -values as function of mixture composition, pressure and temperature. Cell size data for containment analysis were generated by fitting available measurements and by performing new theoretical calculations.

5.3.1 Fitting of experimental data

Measured cell size data were collected from the original literature sources and compared [5]. The data generally agree within a factor of two. A special fit program was developed and used to describe the experimental data basis with the least square deviation. Different statistical weights were given to the data according to the respective accuracy limits. Different analytical fit functions were applied to the data



Fig.5.3: Summary of data analysis for DDT criterion. The theoretical line separates very well the region in which DDT was observed $(D/\lambda > 7)$ from the deflagration regime $(D/\lambda < 7)$. The data cover 2 orders of magnitude in the geometrical size of the reacting gas. The criterion may be used in severe accident containment analysis to predict the possibility of a deflagration - detonation transition.

and compared. The best functions gave mean deviations of a factor 1.5 which is within the experimental uncertainties.

A special approximation was made for 375 K, which is needed for analysis of the RUT tests with steam. **Figure 5.4** shows as an example predicted detonation cell sizes from this fit function for 1 bar. The effect of pressure is currently under investigation.

5.3.2 Theoretical predictions

The computer code DILIM was used to calculate detonation cell sizes for hydrogenair mixtures at elevated temperatures with nitrogen or steam dilution [6]. The code solves the one-dimensional Euler equations together with detailed chemistry (42 elementary reactions). Wall losses of momentum and energy are also included. The theoretical model was evaluated against high temperature measurements in the range of 0.5-3 bar, 370-650 K, 0-50% H₂, and 0-30% steam. Predicted and measured cell sizes agree within a factor of about two, which is equal to the experimental uncertainties.

Detonation cell size calculations with nitrogen dilution were performed for the following conditions:

 $p_0 = 1-2 \text{ bar}, T_0 = 300-600 \text{ K}, H_2 = 10-30 \%, O_2 = 9.5-17 \%, N_2 = 60-78 \%.$

The results are supplied in the form of a small computer program which allows fast retrieval of the λ -data for specified conditions. Hot and nitrogen enriched mixtures were observed in GASFLOW simulations for the EPR, when hydrogen burned out only partially due to oxygen limitations. As an example **Fig. 5.5** shows calculated results at 600 K and 1 bar pressure. The hot mixtures are quite reactive, λ varies from 0.6 to 2.7 cm for the shown parameter range. N₂ dilution does not decrease the chemical sensitivity significantly.

Calculation were also performed for H_2 -air-steam mixtures in the range from 300 to 600 K and 1-2 bar. It was found that the dilution of H_2 -air with steam is more effective than N_2 with respect to suppressing detonation. **Fig. 5.5** shows results for the same conditions (600 K, 1 bar). With steam much larger detonation cell sizes are predicted



Fig.5.4: Predicted detonation cell width (cm) of hydrogen - air - steam mixtures at 375 K and 1 bar, based on a systematic fit of the available experimental data [5].



Fig.5.5: Calculated detonation cell sizes for 600 K and 1 bar

a) H_2 - air with additional N_2

b) H₂ - air with steam.

Plotparameter is ln (λ /cm). Steam is more effective in suppressing detonations than nitrogen.

<u>- 89 -</u>

٠.

than with N_2 . An important difference is the higher heat capacity of steam (tri-atomic molecule) which acts as an inert heat sink.

The effect of the initial pressure on the calculated cell size was found to be negligeable.

6.1 DETONATION

6.1 Heat release in DET3D

In the 3-d detonation code DET3D the chemical reaction is modeled by one single global reaction

$$2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2 O + Q \tag{6.1}$$

where the heat release Q is taken from detailed chemistry models. The Q value is an input parameter for the code which contains all chemistry information. This simplified treatment is valid as long as the induction length of the mixture is small compared to the grid size. The chemical reaction is then a subgrid phenomenon.

The existing function $Q(x_{H2})$ was extended to include the effect of steam in the following way:

1. Lean H₂-air-steam mixtures ($x_{H2, dry} < 0.3$):

 x_{H2} = hydrogen mol fraction

$$Q(x_{H2}) = \left[220 + 36 \frac{(0.3 - xH2)}{0.2}\right] \text{ kJ/mol}$$
(6.2)

With 10 water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.272 \,\mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.043 \tag{6.3}$$

With 20 water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.272 \, \mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.068 \tag{6.4}$$

With 30 % water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.272 \, \mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.069 \tag{6.5}$$

2. Rich H₂-air-steam mixtures ($x_{H2, dry} > 0.3$):

$$Q(x_{H2}) = \left[220 + 23 \frac{(x_{H2} - 0.3)}{0.4}\right] \text{ kJ/mol}$$
(6.6)

With 10 water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.02 \, \mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.058 \tag{6.7}$$

With 20 water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.154 \, \mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.147 \tag{6.8}$$

With 30 % water vapor concentration:

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.172 \, \mathrm{x}_{\mathrm{H2}} - 0.169 \tag{6.9}$$

Fig. 6.1 compares calculated detonation velocities from the DET3D code with "exact" STANJAN results which are based on detailed chemistry. The agreement is better than 2 %. The improved fit for Q (x_{H2} , x_{H2O}) allows now detonation calculations for all relevant H₂-air-steam mixtures.

6.2 Missile generation by local detonations

Fast combustion processes during severe accidents can threaten the containment or safety related systems by generation of fast missiles. No quantitative results on obtainable missile velocities are available. The investigation of the missile problem started in 1995 with small-scale experiments and model development [7]. The work was completed in 1996 with necessary drag coefficient calculations and several 2-d containment simulations for local detonations to derive upper limits for missile velocities.



Fig.6.1: Comparison of calculated detonation velocities from DET3D with simplified chemistry model to STANJAN results with detailed chemistry. The deviations are less than 2 %. DET3D can be used for H₂-air-steam mixtures.

- 92 -

6.2.1 Drag coefficient calculations

A computer code was written in 1995 to describe the motion of a missile in a 3-d containment geometry when subjected to a gas flow [8]. The analysis is restricted to the case that the missile is much smaller than characteristic size of the gas flow, so that the flow pattern is not significantly influenced by the missile. The code requires drag coefficients as input, however most of the published data concern completely different conditions and cannot be used for the current applications in severe accidents. Drag coefficients were therefore calculated for different missile shapes, missile orientations, flow Mach numbers M, and specific heat ratios γ .

The drag coefficients are derived from direct numerical simulation of the stationary flow around the missile by integrating the pressure over the missile surface. Inviscid gas and ideal equation of state were used. The grid resolution necessary to exclude numerical effects was found to be about 16 nodes across the flow exposed missile surface. Additional validation of the method was obtained by comparing calculated stagnation point pressures with known analytical solutions. Deviations existed only in the third digit. The flow properties were chosen to be characteristic for fast Deflagration or detonation waves in H₂-air mixtures. 2-d simulations were performed for (infinitely) long missiles, and full 3-d calculations for finite bodies like cube and sphere.

Fig. 6.2 shows an example for the calculated pressure distribution around an infinite missile. The drag coefficient c_d is found by integrating the calculated stationary pressure distribution p(A) over the missile surface A:

drag force =
$$c_d S \frac{1}{2} \rho (v - u)^2 = \iint_A p (A) d (A)$$
 (6.10)

with

S = flow cross section of missile (m^2)

 $\rho =$ flow density (kg/m³)

u = flow velocity (m/s)

v = missile velocity(m/s).



Fig.6.2: Calculated pressure distribution around infinite square bar missile, 2-d calculation. Mach number of incident flow M = 1.2, ratio of heat capacities γ = 1.4, pressure of incident flow 1.0 MPa. Pressure range is from 0.36 MPa (black) to 2.41 MPa (white). The drag coefficient can be evaluated from the missile surface pressures. The drag coefficients were determined via Eq. 6.10 as function of missile shape, orientation, Mach number and specific heat ratio γ . **Fig 6.3** summarizes the results for $\gamma = 1.4$. The value of γ had only a weak influence on the calculated drag coefficients, its effect may be omitted in hydrogen-air combustion situations.

Results from **Fig. 6.3** may be used in a detailed or averaged form. The drag coefficients for cube and sphere bracket the values for elongated missile shapes.

6.2.2 Wall missiles

The first missile calculations indicated that free missiles dragged by gas flow require a relatively large scale combustion before containment threatening velocities are obtained [7]. Another mechanism for generating missiles consists of breaking a wall by a high dynamic combustion load and by accelerating the fragments with the outflowing gas. In this case the missile motion has a large effect on the gasflow and the drag coefficient model is not applicable.

The code BO2 was modified to treat simplified 2-d cases in which a missile of rectangular shape can move along one axis without rotation. The analysis is valid only for cases in which the velocity of the missile is much smaller than the sound speed of the ambient gas. In this case the interaction of the gas flow with the missile surface represents a quasi-stationary boundary condition for the missile motion. The missile acceleration a (t) results from integration of the actual pressure over the missile surface:

Force on missile = F (t) =
$$\iint_{A} p(t) dA \approx \Delta p(t) wh$$
 (6.11)

with

w = missile width (m) h = missile height (m)

d = missile thickness (m)

$$a(t) = \frac{F(t)}{m} = \frac{\Delta p(t)wh}{\rho whd} = \frac{\Delta p(t)}{\rho d}$$
(6.12)



Fig.6.3: Summary of calculated drag coefficients for different missile shapes, missile orientations, and flow Mach numbers ($\gamma = 1.4$).
Note that only the thickness of the missile in flow direction (d) enters into the missile acceleration, the other missile dimensions cancel. A 2-d treatment is therefore sufficient.

The described model was applied to the case of a local detonation in a closed compartment. It is assumed that the initial reflection of the detonation wave fractures a wall and that part of this wall moves under the influence of the existing pressure differences according to Eq. 6.12. The rest of the wall is treated as immobile. The fracture process itself is not modeled, the missile can move freely from the beginning.

A two-compartment situation was analyzed, one being filled with a detonable mixture, the other with air (**Fig. 6.4**). The central part of the wall separating the two compartments was regarded as missile. The mixture was ignited opposite to the center of the missile. The missile mass, initial position, thickness and the thickness of the inner wall were varied in five calculations. The values of these parameters and the main results are given in **Fig. 6.5**. A mesh size of 1 cm was used in the calculations. Only half of the volume was modeled because of the symmetry of the problem, resulting in a total of about 340.000 nodes.

Calculated flow field parameters for missile case no 1 are summarized in **Fig. 6.6**. The detonation wave reaches the wall 5.05 ms after ignition (first frame). The other frames show flow field properties shortly before the missile collides with the right hand wall of the second compartment. The characteristics of the missile motion are shown in **Fig. 6.7**. Most of the acceleration occurs within the first meter of the missile's flight path because thereafter large lateral cross sections exist for the venting flow and because back pressure on the back side of the missile increases rapidly.

The described scoping calculations have clearly shown that confined rapid combustions can in principle accelerate missiles to significant velocities and impulses. Because the terminal velocity is independent of the missile area the damage potential (impulse) of a missile increases with its area. Scaling relationships were derived to scale the cases of **Fig. 6.5** to other geometries and mixtures.



Fig.6.4: Investigated two - compartment geometry with missile in the separating wall. Dark squares mark locations of pressure transducers. Properties of reactive mixture: p₀ = 1 bar, T₀ = 275 K, 30 % H₂ in air. Geometry of calculation no.1.

Test	№ 1	№ 2	Nº 3	<u>№</u> 4	№ 5	
Missile mass, kg	80	200	200	200	500	
Wall thickness, mm	300	600	600	600	600	
Missile thickness, mm	300	600	100	100	600	
Distance, mm	3000	2700	3200	2700	2700	
Drift time, ms	11.19	18.70	21.30	19.51	32.40	
Average speed, m/s	268.09	144.36	150.21	138.38	83.33	
Final speed, m/s	313.14	204.95	194.86	171.94	111.87	
Maximal speed, m/s	313.14	205.50	203.25	179.94	115.61	

Fig.6.5: Calculational parameters and main results of five missile simulations for the two - compartment geometry shown above.



Fig.6.6: Calculated flow field parameters for missile case 1. Black = lowest value, white = highest value of given property [8].



Fig.6.7: Calculated missile acceleration, velocity and drift for case 1. Most of the acceleration occurs within the first meter of the missile's flight path [8].

The calculated velocities from this simplified model are not upper limits. They may be exceeded by additional effects, like e.g. 3-d wave focusing, or complete collapse of a wall, in which case a less effective vent flow would occur and a longer driving pressure would exist. The main conclusion from the described simulations is that local explosions must be avoided in severe accidents at any case. The missile investigations were completed in 1996, no further work is planed. The developed two codes, one for the free flying missile and one for the wall missile, will be implemented at FZK in 1997.

7. MITIGATION WITH CO₂

Dilution of the accident atmosphere with CO_2 is one possible mitigation measure against energetic hydrogen combustion in core-melt accidents. It is well known that CO_2 -additions generally inhibit H₂-air combustion processes. However, before implementation of such a measure can be considered, a complete understanding of the important combustion related consequences should be reached. Since only a limited and incoherent data base exists on the effects of CO_2 addition, a detailed and consistent research program was performed at the Russian Academy of Sciences investigating the fundamental reaction phenomena in CO_2 containing H₂-air mixtures [9].

The following sections present the main results of this program. The combustion phenomena are discussed in the order of increasing reactiveness.

7.1 Flammability limits

Most of the experimental work has been carried out at an initial pressure of 1 bar. To obtain data for severe accident conditions the pressure influence on the flammability limit of H_2 -air-CO₂ mixtures was measured in constant-volume bomb experiments. The ignition was considered unsuccessfull when a spark energy of 2 Joules did not cause a noticeable pressure increase in the bomb.

The results are compared in **Fig. 7.1** to earlier experiments at 1 bar. The data agree well on the lean side, for the rich side a small 2 % difference in the $CO_{2^{-}}$ concentration was obtained. It is apparent that the pressure rise from 1 to 5 bar



Fig.7.1: New measured data for the influence of initial pressure on the flammability limit of H_2 - air - CO_2 mixtures [9]. CO_2 quenches more effectively at higher pressures which could be beneficial in reactor applications

diminishes the limiting CO_2 -concentration by about 6 % (from 57.6 % to 51.2 % CO_2 at about 8 % H₂). CO_2 quenches more effectively at higher pressures. This could be a beneficial effect for reactor applications.

7.2 Laminar premixed burning velocity

After a successfull ignition the flame kernel will initially grow as a laminar flame. The fundamental property of interest for this phase is the burning velocity S_u of the mixture, which is connected to the flame velocity S_b through the expansion ratio $E = \rho_{unburned}/\rho_{burned}$.

$$S_u = S_b / E \tag{7.1}$$

The flame velocity S_b was calculated from measured flame kernel radii r(t):

$$S_{b} = dr/dt \tag{7.2}$$

An explosion bomb of 20 cm diameter, equipped with a high-speed Schlieren system was used in the experiments to measure r(t).

This method is suitable for lean and slowly burning mixtures. The burning velocities of more reactive H_2 -air-CO₂ mixtures were obtained from a mathematical processing of measured pressure-time records. This method was also preferred for tests at higher initial temperatures and pressures (T_o and p_o up to 200 °C and 5 bar).

Fig. 7.2 shows Schlieren records from a smooth, rapidly burning flame and from a lean, slowly burning flame kernel with a district cellular surface. A mass/thermal diffusion instability causing locally different gas compositions and burning velocities is the reason for the cellular structure.

The second mixture in Fig. 7.2 is very close to the flammability limit, + 1 % CO_2 or - 0.5% H₂ will lead to quenching. These are the first pictures from H₂-air-CO₂ flames in the literature.

A one-dimensional computational model was developed for the prediction of laminar, freely propagating spherical flames in H_2 -air-CO₂ mixtures. The model takes into account a detailed reaction scheme with 72 elementary reactions. In specific cases a reduced scheme with 26 reactions was used. In this approximation CO₂ is treated as





$p_o = 1 \text{ bar}, \Delta t = 1 \text{ ms};$

b) lean, slowly burning mixture with cellular flame surface, 11.2 % H₂, 20 % CO₂, p_0 = 3 bar, Δt = 10 ms.

an inert component. The time-dependent conservation equations for total mass, species fractions and energy are numerically integrated to calculate the steady-state flame speed. The mixture is ignited with 10 mJ energy, corresponding to the experimental spark energy. The flame zone is resolved with \geq 40 nodes.

Fig. 7.3 shows the measured and calculated effect of the CO_2 addition on the laminar burning velocities. The experimental data derived from the pressure record p(t) and those derived from the visual flame radius r(t) agree well with the model calculations. Three different equivalence ratios ($\Phi = 0.21, 0.26, 0.39$) are diluted with CO_2 up to the quenching limit. The relative influence of the CO_2 dilution is expressed in the lower part of the figure as the ratio S_u/S_{uo} , where S_{uo} is the burning velocity of the undiluted mixture (% $CO_2 = 0$). The used S_{uo} values for normalization are also given. In a relative sense, CO_2 additions are more effective in lean H₂-air mixtures, than in near stoichiometric mixtures. To reduce e.g. the burning velocity by a factor of two, 5 % CO_2 are needed for $\Phi = 0.21$, but 20 % for $\Phi = 1$.

The effect of the initial pressure was also investigated. The dependence is only weak, generally reducing S_u by a factor of 2 in going from 1 to 5 bar initial pressure. Detailed calculations are presented in [9].

The burning velocity increases strongly with increasing initial temperature. The numerical calculations gave the following temperature dependence

 $S_u(T)=S_{uo}(T/T_o)^{\alpha}$ (7.3) where $\alpha \approx 3$ S_{uo} = burning velocity at 298 K.

In the region of 300-500 K Eq. 7.3 results in about a factor of 2 increase in S_u for 100 K temperature increase. The temperature effect is important for the ex-vessel hydrogen generation when hot CO_2 is generated by core-concrete interaction.

The newly generated data base and the theoretical model now allow to determine the laminar burning velocity of H_2 -air-CO₂ mixtures for practically all accident relevant



Fig.7.3: Measured and calculated influence of CO_2 dilution on the laminar burning velocity S_u in H_2 - air - CO_2 mixtures ($p_0 = 1$ bar, $T_0=298$ K, $S_{u_0} =$ burning velocity without CO_2 , $\Phi =$ fuel equivalence ratio). CO_2 dilution is more effective in lean mixtures than in near - stoichiometric mixtures.

temperatures and pressures. S_u is a fundamental mixture property which is also needed for turbulent burning models.

7.3 Turbulent premixed burning velocity

Turbulence in the flow field can increase the combustion rate on the molecular level by turbulent diffusion and on the macroscopic level by flame folding. Turbulent deflagration is the most important combustion regime because fast turbulent flames can develop spontaneously if the gas composition and geometrical configuration are appropriate. The main goal of CO_2 -mitigation is to suppress high flame speeds in this regime.

Experiments were carried out on the turbulent combustion of H₂-air-CO₂ mixtures in a spherical explosion bomb, which was equipped with fans to produce known levels of isotropic turbulence. The turbulence intensity u' ranged up to 8 m/s. The inhomogenity of the turbulence intensity was less than 20 %. Experiments were performed for 3 equivalence ratios (0.21, 0.26, 0.39), CO₂ concentrations up to 36 %, and pressures up to 5 bar. The results for Φ = 0.39 are summarized in **Fig. 7.4**. The data were measured at room temperature.

The turbulent burning velocity of a given mixture is significantly larger than the laminar velocity due to the increased mass transport rate and flame surface (e.g. a factor of 6 in pure H₂-air for u'=8m/s). After reaching a maximum value the turbulent burning velocity S_T decreases in CO₂-containing mixtures with further increasing turbulence.

The extinction limits (%CO₂) were close to those observed in the laminar burning tests. Variation of the initial pressure from 1 to 5 bar did not affect S_T within the measurement scatter. The Schlieren photographs show a very fuzzy, irregular flame shape. The surface is no longer closed and smooth, but rather consists of many apparently individual flamelets.

7.4 Self-ignition delay times

Fast turbulent flames produce precursor shocks which can cause the formation of hot spots in confined geometries. Self-ignition can then occur in these hot spots and



Fig.7.4: Measured turbulent burning velocities in H_2 - air - CO_2 mixtures at 298 K [9]. Open points $p_0 = 1$ bar, solid points $p_0 = 5$ bar. Pressure has a negligeable effect on the turbulent burning velocity. Extinction was observed at nearly the same CO_2 - concentrations as in the laminar tests. lead to deflagration or even detonation, if certain conditions are met. The self-ignition delay time τ_i (or induction time) is therefore the most useful quantity of a mixture to judge its potential for transition into detonation. The influence of CO₂ on this property was therefore investigated experimentally and theoretically.

A computer code IDD was written to calculate the self-ignition delay times for H₂-air-CO₂ mixtures in a wide range of parameters ($p_o = 1-15$ bar, $T_o = 800-1200$ K, 10-20 % H₂, 5-20 % CO₂). The code integrates the rate equations of a detailed chemical reaction model (72 elementary reactions). τ_i is defined as the time after which the maximum heat release is reached:

$$\tau_{i} = t \left(\frac{\delta T}{\delta t} \right)_{max}$$
(7.4)

Fig. 7.5 shows calculated induction times for a 15% H_2 -mixture with 5 and 20 % CO_2 , respectively. The inhibiting effect of CO_2 becomes noteworthy above 900 K in the shown Ω -zone. Compared to pure H_2 -air mixtures, the addition of 20% CO_2 increases τ by roughly a factor of 2, which is not very significant.

Two modes of self-ignition can be distinguished in H₂-air mixtures

- mild or spotty self-ignition, characterized by a slow pressure rise and formation of numerous, distributed ignition centers, and
- strong ignition with a sharp, detonation-like pressure rise.

The ignition process depends on the pressure and temperature. The first ignition mode is connected to the slow thermal explosion mode of radical production, and the second one to the fast chain branching regime in the detailed kinetics of the H_2 - O_2 -reaction.

Experiments were made in a shock tube to investigate the influence of CO_2 on the mild and strong ignition regimes. The pressure and temperature development behind a reflected shock wave was measured with pressure transducers and photodiodes. The initial pressure and temperature in the reflected shock was evaluated from shock tube theory (700-1350 K, 8-44 bar).

The results of the experiments with 15% H₂-mixtures are summarized in Fig. 7.6.



Fig.7.5: Calculated induction times τ_i for 15 % H₂ - air - CO₂ mixtures using a detailed chemistry model. The addition of 20 % CO₂ increases τ_i by roughly a factor of 2 compared to a pure 15 % H₂ - air mixture.



Fig.7.6: Influence of CO_2 on the self - ignition in H_2 - air - CO_2 mixtures. Points = experiments, line = theory, 20 % CO_2 are needed for a significant delay in self - ignition.

The solid curve is the calculated boundary between the mild and the strong regime of self-ignition without CO₂. It agrees well with the measurements for 15% H₂-air (squares) which gave a transition temperature of 1100 \pm 50 K for p_o> 10 bar.

The transition boundary is not influenced by 5 % or 10 % CO_2 , only 20 % CO_2 produce a significant shift to higher temperatures.

7.5 Detonability limits

In case of a strong ignition, which can e.g. result from focusing of a pressure wave in a confing structure, a detonation may proceed into the unburned gas away from the ignition location. The stable propagation of such detonation wave requires certain geometrical sizes. In a tube geometry e.g., the wave will fail if the tube diameter is below a certain limiting value (d_{lim}), because the losses are too high and no stable transverse shock wave system can be established. The limiting tube diameter d_{lim} can therefore be used to quantify the detonability of gas mixtures. The value of d_{lim} represents roughly the minimum characteristic size necessary for detonation propagation in an extended channel or tube like geometry.

The numerical model described in [6] was used to calculate limiting tube diameters for H_2 -air- CO_2 systems. The predictions of this model agree very well with earlier detonation experiments in H_2 -air and with the limited data in H_2 -air- CO_2 mixtures [9]. Pressures of 1, 3, and 5 bar, initial temperatures of 298, 400 and 500 k, different equivalence ratios and CO_2 concentrations were investigated in a large member of calculations.

Fig. 7.7 presents the results for moderately elevated temperatures and pressures, which are representative for global containment conditions in a severe accident, far away e.g. from H_2 or CO_2 sources (core-concrete interaction). For the interpretation of these results it is helpful to use the relation

$$d_{\lim} = \lambda / \pi \tag{7.5}$$

which is based on the fact that the detonation cell size of the limiting single head spin detonation in a tube is equal to the tube circumference. Fig.7.7 shows that the CO_2 concentration necessary to suppress a stable detonation propagation, increases with



Fig.7.7: Calculated detonability diagram for H_2 - air - CO_2 mixtures at 400 K initial temperature and 3 bar initial pressure, representing global containment conditions in severe accidents. Significant CO_2 concentrations are needed on large scale to suppress detonations (> 30 %).

the tube diameter (17 % CO₂ in a 2 cm tube, 38 % CO₂ in a 1 m tube). The shown range in d_{lim} covers the situations of interest for more accidents because d_{lim}=1m corresponds to a detonation cell size of about 3.1 m. According to the DDT criterion described in Section 5, a volume of $V\approx(7\lambda)^3\approx(7\bullet3,1 \text{ m})^3\approx10.000 \text{ m}^3$ would be necessary for starting a detonation in such an insensitive mixture.

The calculations showed that rising temperature widens the detonability range for a given d_{lim} significantly.

7.6 Conclusions on CO₂ effects

The effects of CO_2 on the suppression of deflagration and detonation in H₂-air- CO_2 mixtures can be summarized with the help of **Fig. 7.8**. The value of d_{lim}=1 m is a realistic limit for containment situations.

The lower flammability limit with CO_2 is the same as with steam. This is due to the preferential hydrogen distribution in the lean regime which drives the flame propagation alive. The H-diffusion is very similar in a steam or CO_2 containing atmosphere.

To suppress detonations and fast deflagrations between 30 and 50 % CO_2 are necessary ($\emptyset = 1$). Smaller amounts of CO_2 dampen all explosion phenomena because the high heat capacity of CO_2 lowers the final combustion temperature. The induction times with CO_2 become longer. CO_2 certainly helps, but as long as burning is possible the same governing phenomena exist as without CO_2 .

The CO_2 -concentrations necessary to quench laminar and turbulent flames are close to the required steam concentrations. CO_2 is not more effective than steam, both being triatomic molecules.

A significant disadvantage of introducing CO_2 into an accident atmosphere is the pressure increase in the containment. In case of a combustion a higher pressure will exist in the containment than without CO_2 addition.

The main conclusion from the view point of combustion processes is that CO_2 only brings a significant mitigation effect if flames can be safely quenched. If one takes advantage of the presence of steam this will require more than 50% in steam + CO_2



Fig.7.8: Effect of CO_2 on the suppression of detonation and deflagration in H₂ - air mixtures. Between 30 and 50 % CO_2 are needed.

concentration, which is not trivial to reach in a multicompartment containment in the available relatively short time span (\approx 30 min). The effectiveness of a CO₂-injection system to reach inertization in a nuclear containment can only be reliably demonstrated with a careful 3-d analysis.

8. EPR APPLICATIONS

The described models and criteria were applied to the EPR to investigate the effectiveness of spark igniters in "dry scenarios", where the in-vessel produced gases (H₂, steam) are released to the containment via the IRWST [10].

8.1 The GASFLOW model

The EPR geometry was modeled with a 3-d cylindrical mesh consisting of about 12000 computational cells. 180 degree symmetry was assumed. **Fig. 8.1** shows one horizontal and six vertical cuts through the geometry model. All major components of the primary system are included.

The containment was subdivided into six control volumina (rooms 1-6 in Fig. 8.1). In each volume the characteristic size of the H₂-air-steam cloud and its average composition was evaluated during the H₂-release (**Fig. 8.2**). At any given time the characteristic size D, the average H₂, and steam concentrations \bar{x}_{H2} and \bar{x}_{H20} are calculated to

$$\mathsf{D} = (\Sigma \Delta \mathsf{V}_{i})^{1/3} \tag{8.1}$$

where ΔV_i = GASFLOW cell with burnable mixture, e.g. 4-75 % H₂ in dry mixture.

$$x_{H2} = \sum x_{H2,i} \cdot \Delta V_i / \sum \Delta V_i$$
(8.2)

$$x_{H2O} = \sum x_{H2O,i} \bullet \Delta V_i / \sum \Delta V_i$$
(8.3)

where $x_{H2, i}$ = local H₂-concentration in cell i, which is part of the reactive cloud volume

 $x_{H2O,i}$ = corresponding steam concentration in cell i.



Fig. 8.1: 3 - d GASFLOW geometry model for the EPR with about 12000 computational cells.



Hydrogen Injection

Fig. 8.2: Evaluation of characteristic properties of H_2 - air - steam cloud during the H_2 - release process. Computed cloud size and average composition are used to evaluate the DDT potential according to the 7λ - criterion. The detonation cell size of the average cloud mixture is then evaluated from the known relation

$$\lambda = f(x_{H2}, x_{H2O}, p, T)$$
(8.4)

The DDT potential is calculated according to the 7λ criterion described in section 5:

$$\mathsf{R} = \frac{D}{7\lambda} \begin{cases} > 1 & DDT \ possible \\ < 1 & DDT \ not \ possible \end{cases}$$
(8.5)

The DDT index R is evaluated in each room n of the containment (n=1...6) as function of time.

8.2 Analysis without mitigation

A quite conservative dry release scenario was investigated to fully explore the limits of the deliberate ignition concept for dry hydrogen sources. Release rates of up to 2 kg H_2 /s were used (**Fig. 8.3**). The first release phase up to 2000 s is the result of a MAAP calculation for the EPR in-vessel H_2 -production. The same release history was added between 2000 and 4000 s to roughly represent an ex-vessel phase. The total released H_2 -mass is about 1200 kg.

First a transport analysis without deliberate ignition was performed to understand the time and space dependent evolution of burnable H_2 -mixtures. Fig. 8.4 shows the computed DDT index R as defined in Equ. 8.5.

During the first release phase up to 2000 s, detonable mixtures only develop in the compartments close to the H_2 -source location, namely in the IRWST and pump room 1. The second release of 600 kg H_2 drives all compartments into the detonable regime. A global detonation could not be excluded after 3000 seconds.

It is important to note that the time needed to change from the deflagration regime (R < 1) to the potential detonation regime (R > 1) can be relatively short. The large dome volume makes the transition in about 100 s in this test calculation. This demonstrates the need for a fast reacting H₂-control system, recombines alone may not be sufficient for high dry release rates.



Fig. 8.3 : Assumed conservative H_2 - release rate into EPR during dry release scenario (in - vessel and ex - vessel phase about 600 kg H_2 each)



Fig. 8.4 : Computed detonation potential for six rooms of the EPR containment, according to the 7λ - criterion (detonation possible for R > 1).

The described GASFLOW models allowed for the first time a mechanistic 3d prediction and a quantitative measure for the possibility of local detonations in a H_2 release scenario.

8.3 Analysis with spark igniters

The described release sequence was analyzed with spark igniters at different positions in the IRWST and with different spark frequencies (1 and 10 Hz). The computations showed that it is possible to control severe dry release scenarios with appropriately positioned spark igniters (**Fig. 8.5**). The first large scale burn-out of the release compartment (the IRWST) could be triggered early enough before DDT possibilities had developed. Very effective H₂-removal was predicted for the whole release duration without damaging pressure loads.

Fig. 8.5 shows the lower EPR geometry with two spark igniters located about 3 m above the two hydrogen sources. The dark surface below the two igniters represents the calculated 200 K isosurface of the burning H_2 -flame at 922 s. During high hydrogen release rates the flame in the IRWST becomes oxygen limited. Unburned H_2 leaves the IRWST and ignites above the left hand opening to the containment.

The current model verification in GASFLOW covers the sequence of events up to the first burn-out where either the detonation regime (R > 1) or the deflagration regime (R < 1) is entered. For slow deflagrations (R <<1) the current global reaction model of GASFLOW appears adequate. For the intermediate regime of fast deflagrations it is intended to derive a flame acceleration criterion which will allow to introduce a branching point in the GASFLOW analysis concerning the transition from slow to fast turbulent deflagration.

9. INCA PROGRAM DEVELOPMENT

The development of a next generation program for <u>IN</u>tegral <u>C</u>ontainment <u>A</u>nalysis was started at FZK (INCA code).

The main objective of the work is development, testing and application of 3-d adaptive grid techniques to full scale containment analysis. Such a method would



Fig. 8.5: Lower EPR 3 - d containment geometry with spark igniter positions leading to early H₂ - ignition without pressure development (case 3 - C2 at 922s)

allow much improved space and time resolution in local areas of the computational domain, automatically adjusted to the evolution of the flow field or the flame motion.

The INCA-code structure is depicted in **Fig. 9.1**. The important characteristics of the new program are

- adaptive grid for local resolution of the computational domain (equidistant cartesian, 3-d),
- modular structure with clearly defined interfaces between the main modules for distribution, deflagration, and detonation,
- graphical user interface for input of geometry and initial conditions,
- vectorization and parallelization capabilities,
- automatic switching between distribution and different combustion regimes, reversible scheme.

Currently COM3D and DET3D exist as stand-alone codes. The program V3D is under development. The hydrodynamics and turbulence part has been completed and will be validated against theoretical and experimental results (Riemann problem, FZK turbulence tests).

For the generation of a 3-d adaptive Eulerian grid a C++ library of Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) is used. The library together with a LLNL test problem was successfully implemented at FZK. The next step will be replacement of the LLNL-problem with the DET3D code.



Fig. 9.1 : Structure of FZK next generation program for integral containment analysis (INCA - Code)

REFERENCES

[1] A. Miassoedov,

"Ein Modell zur Beschreibung der Wasserstofferzeugung durch Kernflutung bei Kernschmelzunfällen",

Dissertation, Universität Karlsruhe (1996)

[2] V. Moser;

"Simulation der Explosion magerer Wasserstoff-Luft-Gemische in großskaligen Geometrien", Dissertation RWTH Aachen, Institut für Techn. Mechanik (1996)

- [3] I.D. Matsukov, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, S.B. Dorofeev; "Experimental study of turbulent flame propagation and flame-vortex interaction for turbulent combustion modeling", Internal report to FZK from Russian Research Center "Kurchatov Institute" (November 1996)
- [4] B.E. Gelfand, S. P. Medveder, O.V. Popov; ", Turbulent deflagration phenomena in hydrogen - fog - air mixtures", Internal report to FZK from Russian Academy of Sciences, Moscow (November 1996)
- [5] S.B. Dorofeev, A.A. Efimenko, A.V. Bezmelnitsyn "Analysis and evaluation of DDT criteria for severe accident conditions", Internal report to FZK from Russian Research Center" Kurchatov Institute", Moscow (Nov. 1996)
- [6] A.M. Bartenev, B.E. Gelfand, O.E. Popov, "Evaluation of hydrogen containing mixture detonability for accident relevant conditions", Report to FZK from Russian Academy of Sciences, Moscow (Nov. 1996)
- [7] W. Breitung, G. Engel, E. Hesselschwerdt, A. Kotchourko, H. Massier, R. Redlinger, H. Wilkening, J. Wolff, A. Veser, "Untersuchungen zu H₂-Verbrennungsvorgängen" PSF Jahresbericht 1995 (R. Hüper Ed.), Report FZKA 5780 (1996) p.73
- [8] A.A. Efimenko, A.V. Denkevits, S.B. Dorofeev "Computer code for missile problem evaluation", Report to FZK from Russian Research Center "Kurchatov Institute", Moscow (Nov. 1995)
- [9] B.E. Gelfand, O.E. Popov, S.V. Khomik "Laminar and turbulent flame propagation in hydrogen-air-CO₂ mixtures at accident relevant pressure-temperature conditions", Report to FZK from Russian Academy of Sciences, Moscow (Nov. 1996)
- [10] W. Breitung, S.B. Dorofeev, J.R. Travis "A mechanistic approach to safe igniter implementation for hydrogen mitigation", OECD Workshop "On the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques", Winnipeg, Manitoba, Candda, May 13-15, 1996

32.21.02 Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel

Ι.

Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS) (R. Huber, M. Kirstahler, D. Kuhn, L. Meyer, A. Roth, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, INR)

ABSTRACT

A second series of experiments with hot spheres to investigate the premixing phase of a steam explosion has been performed in the QUEOS facility at FZK. The diameter of the sphere jet plunging into the water has been reduced from 180 mm to 100 mm and larger masses have been employed. Both changes led to longer pours, compared to the short pours in the first series. The data of seven experiments are presented using three types of spheres at 1800 K and total volumes of approximately two and four liters, respectively. High speed films were taken, pressures, water temperatures and the steaming rate were measured.

ZUSAMMENFASSUNG

Zur Untersuchung der Vorvermischungsphase einer Dampfexplosion wurde in der QUEOS-Anlage eine zweite Serie von Experimenten mit heißen Kugeln durchgeführt. Der Durchmesser des Kugelstrahles wurde von 180 mm auf 100 mm verringert und größere Massen wurden verwendet. Beide Änderungen führten zu längeren Schüttungen im Vergleich zu den kurzen Schüttungen in der ersten Serie. Hier werden die Daten von sieben Experimenten vorgestellt, bei denen drei Arten von Kugeln bei 1800 K mit einem Volumen von ca. zwei und vier Litern verwendet wurden. Es wurden Hochgeschwindigkeitsfilme aufgenommen, Drücke, Wassertemperaturen und Verdampfungsraten wurden gemessen.

1. INTRODUCTION

A steam explosion might occur when large amounts of molten corium fall into water. For the quantification of the maximum energy conversion multifield codes are being developed and experiments are performed to get a better understanding of the phenomena involved and to obtain relevant and reliable data for code validation. A premixing phase precedes any large-scale steam explosion. It is expected that violent but non-explosive evaporation during this premixing limits inherently the amounts of core melt and water that can interact. In premixing experiments the interaction of simulated corium jets with saturated water is studied. In the QUEOS^{1,2} experiments the melt is simulated by large numbers of small solid spheres in order to obtain data for code validation under well defined conditions, especially the particle diameters and surface areas for heat transfer. Three types of spheres with two different densities and three different diameters are used, relating to sphere numbers between 2300 and 49000, or to masses between 7 and 20 kg. In order to simulate melt jets as closely as possible, the spheres are released as a cylindrical jet into a three-dimensional test vessel.

There are two other facilities in which heated solid spheres are being dropped into water. The MAGICO-2000³ experiment involved the pouring of up to 8.6 kilograms of 2.4 to 3.4 mm sized zirconia (ZrO₂) spheres at temperatures between 1300 and 1450 °C into an open water-pool at various subcoolings. In the BILLEAU-2200⁴ experiment up to 500 10 mm-sized zirconia spheres at approximately 2000°C were poured into an open water-pool. The BILLEAU-2200 geometry is two-dimensional, i.e. the spheres fall in a plane into a water pool which is only slightly wider than the diameter of the spheres, which is useful for measuring the steam fraction. The main parameters of the most recent experiments performed in the three facilities are listed in Table 1. The main difference between the two 3-D experiments is the particle volume fraction. It is much higher in QUEOS than in MAGICO. Another important difference is the fact that the MAGICO water vessel is completely open, while in QUEOS the vessel is closed and connected to the atmosphere through a venting pipe. Thereby a slight pressure increase occurs, depending on the steaming rate. The pressures in the vessel and the volume flow rate through the venting pipe are valuable data for code validation.

FACILITY	QUEOS	MAGICO-2000	BILLEAU-2200
geometry	3-D	3-D	2-D
water depth [cm]	100	60 / 80	87
vessel cross section [cm]	70 x 70	60 x 60	1.2 x 140
sphere material	zirconia / Mo	zirconia	zirconia
total mass [kg]	7 / 10 / 14 / 20	6.2 - 8.6	0.6 - 1.5
sphere diameter [mm]	4.3 / 5 / 10	2.4 - 3.4	10
jet diameter [mm]	100	225	10 x 121
impact velocity [m/s]	5.0	4.8 / 5.0	1.8 / 2.6 / 3.5
pour duration [s]	0.12/0.25	0.33	0.3 - 0.57
volume fraction at impact [%]	25	1.7 - 2.4	< 10 , varies
sphere temperature [°C]	1540 ± 30	1300 - 1450	2000 ±100
water subcooling [°C]	1-3 ±0.5 / 20	0/3/18	80

Table 1. Main parameter of recent experiments with hot spheres

2. SYSTEM DESCRIPTION

2.1 The Experimental Apparatus.

The QUEOS facility consists of the test vessel, the furnace and the valve system separating the two. The spheres are heated in an electric radiation furnace in an argon atmosphere. The spheres are discharged into the water with a drop height of 130 cm. The diameter of the sphere stream is 100 mm after the discharge from the middle valve and the spheres fall freely without touching any walls.

The water vessel is made of stainless steel frames and glass and has a square cross section of 0.7 m side length and is 1.38 m high. Three walls have glass windows, with a field of view of 50 by 113.5 cm. A reference grid of 10x10 cm is mounted close to the inside of each of the windows, consisting of steel wire with 2 mm diameter. The fourth wall is the instrumentation wall made of steel. At its upper end there is an opening of 100 mm diameter, connected to the steam venting pipe. This pipe is guard-heated and insulated to prevent condensation. The test vessel is filled with water $(0.5m^3)$ to a level of 1 m. The facility is described in more detail in refs. 1 and 2.

2.2 Instrumentation

The release temperature of the spheres is monitored by high temperature thermocouples and pyrometers. The temperature just before the entry into the water is measured by a pyrometer with a response time of 1 ms. The temperatures of the water and steam are measured by Ni-CrNi-thermocouples. Six piezoresistive pressure transducers measure the vessel pressure. The steaming rate is measured by a vortex flowmeter which works on the principle of vortex shedding. The range for saturated steam at 1 bar is 80-700 dm³/s. The water level is measured by two impedance level meters positioned in opposite corners of the test vessel. In a two phase mixture they measure the collapsed height of the water.

Pictures from the experiment are taken from two sides (90°) by two high speed film cameras (500 f/s) and two video cameras (50 f/s). The main direction with a lighted background has a long focal distance to reduce the perspective distortion. The second position of picture taking is directed against the black background of the instrumentation panel. Because the windows are only 50 cm wide there is a 10 cm wide space on both sides which cannot fully be seen, depending on the camera position. Also the bottom cannot be seen, it is 12 cm below the lower edge of the windows.

2.3 Initial Conditions

The data of the initial conditions for the seven experiments described here are shown in table 2. The water was uniformly heated except for a cool layer at the bottom of ap-

proximately 10 cm height, this temperature is given in brackets. The temperature of the spheres in the furnace was measured by a thermocouple near the center of the cylindrical container, and the temperature of this container was measured by a pyrometer at its outside. The difference of approximately 100°C between these two temperatures in runs 31 through 34 is due to a too short balancing time before the start of the experiment. The temperature of the outermost spheres was probably higher than that of the center spheres. The pyrometer positioned 24 cm above the water level measured too high temperatures because of an untrue emissivity factor. A check with a second two-color-pyrometer showed approximately 50 degrees difference. The value corrected by 50°C is given in the table. The duration of the pour was read from the pyrometer signal taking into account the time constant of the pyrometer and the fact that there are always some spheres ahead of the bulk and some behind. In one direction the cylindrical sphere jet has a pointed front, because of the finite opening time of the sliding door valve. This pointed tip can be seen in the pictures taken against the dark background; it is approximately 15 to 20 cm long with hot spheres and is only partly counted for determining the total length of the pour. Since there is very little radial spreading of the spheres above the water, the volume was calculated with a diameter of 100 mm. The total solid volume related to this volume is the average volume fraction at water impact. With approximately 25% it is relatively high compared to the other experiments. It is 40% of the possible maximum for spheres. Of course the volume fraction is not constant, especially at the front end it is lower.

A similar series of experiments was performed with cold spheres and cold water and in one case with hot water also (Q20-Q26). The masses used were the same as in the hot series (Q30-Q36) but the length of the pour was shorter and thereby the volume fraction higher, due to different frictional behavior of cold and hot spheres. Only the

No.	mate - rial	Ø	mass	volume	number of spheres	water temp.	sphere temp. in fur- nace	furnace temp.	sphere temp. above water	duration of pour	length of pour	average volume fraction
		[mm]	[kg]	[cm³]	-	[°C]	±5 [°C]	±20 [°C]	±40 [°C]	±5 [ms]	±3[cm]	±0.01
30	ZrO₂	4.95	7	1830	18140	80.4	1535	1561	1550	125	62	0.24
31	ZrO ₂	4.95	7	1830	18140	99.0 (96)	1558	1683	1570	115	57	0.26
32	ZrO_2	4.95	14	3660	36280	98.5 (94)	1545	1665	1620	220	110	0.27
33	ZrO ₂	9.80	7	1900	2340	98.7 (95)	1572	1664	1600	115	57	0.26
34B [•]	ZrO ₂	9.80	14	3800	4680	99.0 (95)	1542	1642	1600	250	125	0.24
35	Мо	4.32	10	1800	24580	98.4 (94)	1517	1586	1540	125	62	0.22
36	Мо	4.32	20	3600	49160	98.3 (94)	1539	1563	1550	220	110	0.24

Table 2. Initial conditions

Q34 was repeated as Q38, here called Q34B, because 6 kg of the spheres were broken into fragments.

first 10 - 15 cm of the sphere jet is pointed and has a low density. The main part of the jet, which has a length of 27 cm or 54 cm, respectively, is close to its possible maximum density (85%) and has an average volume fraction of 53% ±3. The density of the sintered molybdenum was $\rho_{Mo} = 9.67$ g/cm³, and of the zirconia $\rho_{ZrO2} = 6.06$ g/cm³.

3. EXPERIMENTAL RESULTS

3.1 Cold spheres

To better understand the experiments with hot spheres some results from those with cold spheres are presented first. Figure 1 shows the typical behavior of a sphere jet falling through water. The first picture in its lower part shows the view from a 90 degree angle. The effect of the sliding doors, moving sideways relative to the lower view, is obvious. The first spheres touch the water surface with a velocity of 5 m/s and are decelerated to approximately 3 m/s. The succeeding spheres push the spheres which are already in the water sideways and downward, thereby opening a gas channel twice as wide as the original diameter of the sphere jet. Since those spheres fall within the gas channel they still accelerate and meet the sphere front at a higher velocity and the front velocity increases again. Subsequently the diameter of the gas channel is pinched at a depth one diameter below the water level. Some of the gas flows upward through the channel which is narrowing down until it collapses (700 ms) and traps a large bubble within the sphere cloud, which rises to the surface at a later time. This phenomenon can be observed in all cases with the exception of the case where small amounts (7 kg) of 10 mm sized zirconia spheres fall with a large jet diameter of 180 mm into the water. Here almost all gas escapes before the gas channel collapses.²



Figure 1. High speed photographs of Q-20, 7 kg cold zirconia spheres in cold water, time relative to release of spheres. Note, that the vessel is 10 cm wider than the windows at both sides and at the bottom.

Figure 2 shows the absolute pressures measured at four different levels in the water and in the gas space above the water. The pressure above the water surface does not change when the spheres enter the water at t=0.5 s, but the pressure in the water increases, more in lower positions than near the surface. At the time of the collapse of the gas channel (0.7 s) it reaches a minimum below the static head and than increases sharply. The high pressure peak reverberates several times with a frequency of 18 Hz and a decreasing amplitude, which probably reflects the oscillation of the gas bubble. If the same experiment is performed in hot water the damping of these spikes is larger (Q21). Lower pressure peaks are registered when the mass and the pour duration is doubled (Q22). The first peak occurs at the same time in all three cases. For a different density of the spheres or a different diameter of the sphere jet the timing of the peak changes analogous to the sink velocity of the sphere front, which is obvious from figure 3 and 4.



Figure 2. Pressures in the water vessel in runs with cold zirconia spheres, diameter 5 mm; Q-20 (7 kg) and Q-22 (14 kg) in cold water, Q-21 (7 kg) in water at 99°C. Positions in cm relative to water level: P1: +24; P2, P3: -16; P4, P5: -55; P6: -75



Figure 3. Pressures in water (P6) with cold spheres of different densities and jet diameters.



Figure 4. Front velocity with cold spheres



Figure 5. High speed photographs of 7 kg zirconia spheres (5 mm), Q-31. (t = 500-900 ms, 100 ms interval)



Figure 6. High speed photographs of 7 kg zirconia spheres (10 mm), Q-33. (t = 500-900 ms, 100 ms interval)



Figure 7. High speed photographs of 10 kg Mo-spheres (4.3 mm), Q-35. (t = 500-900 ms, 100 ms interval)



Figure 8. Video frames of 14 kg zirconia spheres (5 mm), Q-32. (t = 500-900 ms, 100 ms interval)



Figure 9. High speed photographs of 14 kg zirconia spheres (10 mm), Q-34B (t=500-900 ms, 100 ms interval)



Figure 10. High speed photographs of 20 kg Mo-spheres (4.3 mm), Q-36 (t = 500-900 ms, 100 ms interval)


Figure 11. Pressures in the water vessel in runs with 7 kg hot spheres; Q-31, 5 mm zirconia; Q-33, 10 mm zirconia; Q-35, 4.3 mm Mo (note the different pressure scales).



Figure 12. Pressures in the water vessel in runs with 14 kg hot spheres; Q-32, 5 mm zirconia; Q-34, 10 mm zirconia; Q-36, 4.3 mm Mo (note the different pressure scales).

3.2 Hot spheres

The behavior of hot spheres is essentially similar if the total volume or length of pour is short. The small molybdenum spheres (Fig.5 and 7) generate more steam than the 10 mm-zirconia spheres (Fig.6) and consequently are driven apart more. But in all cases (also Q31) with two liters of spheres the gas funnel collapses as with cold spheres. If the duration of the pour is longer (Q32, Q34, Q36) spheres are still entering the water at the time when the funnel would collapse ($t \approx 0.7$ s), and the generated steam inhibits the collapse (Fig. 8, 9 and 10). The water closes behind the sphere cloud ($t \approx 0.9$ s) only after the steam bubble, which has been trapped within the sphere cloud and which was enlarged by vaporization, has escaped to the surface.

The pressures presented in figures 11 and 12 reflect this behavior. The first pressure rise and plateau is due to the steam generated during the time of an open steam funnel. It is higher for smaller spheres. When this channel closes a pressure peak on top

of the plateau followed by a sharp decrease is registered in the lower parts of the water vessel. The escaping steam bubble generates no overpressure in the vessel (Fig.11). In the cases with the large total sphere volumes (Fig.12) the pressures are generally higher and a second pressure peak occurs in the water at the time of the release of the steam bubble from the sphere cloud. This pressure increase is not registered above the water, except in Q36, where it was extremely high in the water. If the water is subcooled by 20 K, as in Q30 (Fig.13), the pressure traces look like those measured in experiments with cold spheres (Fig.14). There was no net steam production. However, the first peak due to the collapse of the funnel is only small, while the second one is as high as the first one in the cold case.



Figure 13. Q30, water subcooled by 20 K



The different behavior of the spheres during their fall through the water is also reflected in their distribution on the vessel floor. From the two-dimensional distribution on the vessel floor, the curves shown in Fig.15 were determined. Shown is the ratio of the content of the boxes related to the total mass. At the radius r = 0 the content of the center box (10x10 cm) is plotted. The average of the four boxes next to the center is shown at r = 10 cm; at r = 14 cm the average of the corner boxes is shown, and so on. In the corner of the vessel (r = 42 cm) only very few spheres were found. For large total masses (Q34B, Q36) one third of all spheres was found in the center box (in Q32 the center box was not high enough to take up all spheres). With small total masses the heavy Mo-spheres spread less than the lighter zirconia spheres. The large zirconia spheres spread most. The results from the cold runs were similar in their relation, but the absolute concentration of the spheres in the center was less by approximately a factor of two. This is probably due to the shorter pouring length associated with a higher volume fraction, as described in section 2.3. An even more uniform distribution was found in our first test series. Here the jet diameter was larger with 180 mm, and the pouring length even shorter (app. 30 cm). The pouring length and the volume fraction are important parameters for the mixing process. Tests with higher sphere temperatures (2500 K), done in the first test series and lately also in the present one, have shown that radial spreading increases dramatically at these high temperatures.



Figure 15. Radial distribution of spheres on the vessel floor

The figures 16 through 18 show four different data for each experiment. The pyrometer signal, measured 23 cm above the water level, gives the information on the duration of the pour. The measured temperature is probably 50 K too high. The water level rise sets in at t=0.5 s, which agrees with the first spheres entering the water. The level meters positioned in opposite corners of the vessel delivered almost identical data. The steam flow rates through the venting pipe correspond to the pressure measured in the gas space above the water. Note that the scales are the same for two plots side by side, but are different in the three figures. The total net volume of the generated steam up to four different times (t = 0.6s, 0.7s, 0.8s and 1.0s) is given in table 3. For the long pours it is not possible to determine a meaningful heat flux from the steam rate, since a correlation between the number of spheres just falling through the water and the measured steam rate does not exist. Nevertheless, it is interesting to compare the steam rate for different sizes and numbers of spheres by relating it to the total surface of the spheres. The data in the last line in table 3 show that the large spheres generate more steam per surface area than the small spheres, at least up to t=0.7s. Of course dou-

bling the number of spheres does not double the amount of steam generated. Transforming these numbers into a heat flux we get a range between 215 and 500 kW/m², which is similar to the values we found in the first experimental series with a jet diameter of 180 mm.²



Figure 16. The steam volume flow rate through the vent pipe, the pyrometer signal, the pressure in the gas space and the water level rise for 5 mm zirconia spheres, Q-31 (7kg) and Q-32 (14 kg); the scales are the same for both plots.



Figure 17. The steam volume flow rate through the vent pipe, the pyrometer signal, the pressure in the gas space and the water level rise for 10 mm zirconia spheres, Q-33 (7kg) and Q-34 (14 kg); the scales are the same for both plots.



Figure 18. The steam volume flow rate through the vent pipe, the pyrometer signal, the pressure in the gas space and the water level rise for 4.3 mm Mo-spheres, Q-35 (7kg) and Q-36 (14 kg); the scales are the same for both plots.

Experiment		31	32	33	34B	35	36
volume (t=0.6	6s) [dm ³]	33	44	22	33	28	40
volume (t=0.7	7s) [dm ³]	80	95	52	70	71	92
volume (t=0.8	3s) [dm ³]	112	140	70	101	103	142
volume (t=1.0)s) [dm ³]	140	204	72	150	117	210
surface	[m²]	1.40	2.80	0.71	1.41	1.44	2.88
V _{0.7} /S	[dm³/m²]	57	33	73	50	49	32

 Table 3. Accumulated net steam volume at different times

4. CONCLUSION

A second series of experiments with a smaller jet diameter and larger masses of spheres has been performed in the QUEOS facility. Both changes led to longer pours, which better simulate the pouring of melt in experiments such as PREMIX and FARO. The volume fraction of the sphere jet was relatively high with approximately 25%, or 40% of the maximum packing density of spheres. Entirely different results in respect of the mixing process were observed compared to the MAGICO-2000 experiments where the volume fraction was less than 2.4% or only 1/10 of the QUEOS experiments. In QUEOS a gas channel in the water is formed by the first spheres entering the water and the rest of the spheres basically fall through this gas space until they hit the sphere front and accelerate it. The generated steam flows countercurrent to the sphere stream and leaves the water as a large bubble. The spreading of the spheres is caused by several processes, most important by the velocity differences at the sphere front which push spheres laterally. Those spheres are more decelerated by the upward directed water flow around the mixing zone. Another effect is the generation of steam which spreads the spheres apart. Of course, the behavior of spheres is not the same as that of a continuous melt jet. Also there is an effect of the proximity of the vessel walls, but it is estimated to be small. The purpose of these experiments is to provide reliable data at well defined initial and boundary conditions for model development and code verification and this goal is achieved in spite of these restrictions.

REFERENCES

- 1. L. Meyer and G. Schumacher, "QUEOS, a Simulation-Experiment of the Premixing Phase of a Steam Explosion with Hot Spheres in Water," *FZKA Report 5612*, Forschungszentrum Karlsruhe, April 1996.
- 2. L. Meyer, "The Interaction of a Falling Mass of Hot Spheres with Water", ASME/ AICHE/ANS National Heat Transfer Conf., Houston, Tx., Aug. 3-6, 1996

- 3. S. Angelini, T.G. Theofanous and W.W. Yuen, "The mixing of particle clouds plunging into water," *Proc.* 7th *Int. Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, NURETH-7,* Saratoga Springs, NY, Sept. 10-15, 1995, Vol.3, 1754-1778, (1995).
- 4. G. Berthoud, T. Oulmann, M. Valette, "Corium-water interaction studies in France," *Int. Seminar on Heat and Mass Transfer in Severe Accidents*, Cesme, Turkey, May 21-26, 1995.

II. Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX)¹

(H. Will, F. Huber, A. Kaiser, W. Schütz, IRS)

PREMIX is the name of an experimental programme performed at FZK in which the mixing behaviour is investigated of a hot alumina melt discharged into water. The main goals of the tests are to describe the phenomena of premixing, to supply data for code development, and to find out whether an inherent limit exists for the masses involved in premixing and, consequently, for the thermal energy which can be transformed into mechanical work. The tests are part of an experimental and theoretical programme designed to contribute to the above goals.

The main reason why we use a simulating material instead of corium are strong safety directions. Tests with a simulating material performed in a proper range of parameters (e.g. the temperature) are deemed to be suited for the investigation of the fuel coolant interaction problem. Computer codes that have to be verified by those experiments must afterwards take over the task of providing the information for the reactor case.

EXPERIMENTAL SET-UP AND TEST PROCEDURE

The test set-up (Fig. 1) mainly consists of a container (also called vessel) filled with water to a specified level. Note that the origin of the axial coordinate is located two meters above the floor. The melt generator is part of the container. The so-called gas space comprises the volume between the water, the melt generator and the vessel wall. Four steam venting pipes are mounted slantwise to the top of the vessel. Rows of glass windows enable high-speed cinematography. A fragment catcher mounted inside the vessel with the height as a parameter allows, besides the collection of particles, to investigate the spreading of a liquid melt arriving on a flat bottom.

The melt is generated by a thermite reaction. The reaction products, alumina and iron, separate during the reaction due to their different densities. Using this effect, the melt generator is constructed to release only the oxidic part of the melt into the water pool. The melt release through the nozzle is supported by a small overpressure (0.08 MPa).

The instrumentation comprises various types of measuring devices. Pressure transducers are mounted in the water, the gas space, and the venting tubes. The steam outflow is recorded by vortex flow meters. The rise of the water level is measured at four positions. Several lances positioned at various axial levels in the water pool as well as in the gas space are equipped with rows of void sensors. The void sensors indicate whether or not there is water at their tips. The data are used to evaluate the develop-

¹ This work is performed under the sponsorship of and partly funded by the European Community, SIEMENS, and a consortium of German electricity utilities.

ment of the interaction zone and to determine time-dependent local volume fractions of water and steam. High-speed cameras taking 2000 frames/s and video cameras are used to record the phenomena of the experiment. The actual melt mass flow rate cannot be measured. Characteristic features, like the average exit velocity, are known from pre-tests, however.

TEST PARAMETERS

Eleven tests have been performed up to now (four experiments since our last annual report) by varying the following parameters:

- mass of alumina melt: 10 and 20 kg
- number of melt release nozzles: one and three
- type of melt release: compact stream, spray type release
- height of fall in steam atmosphere: 200 and 0 mm.
- temperature of the water: saturated or slightly subcooled (max. 5 K)
- depth of the water from surface to fragment catcher: 1500, 920 and 500 mm

The melt temperature is about 2600 K. This value is obtained from pyrometer measurements as well as from calculations in which both, heat losses and the reaction kinetics were taken into account.

		PM02	PM04	PM06	PM08	PM09	PM10	PM11
Melt								
Mass	kg	9.4	9.2	20.2	9.3	20	20	20
Temperature	К	2600	2600	2500	2600	2600	2600	2600
Height of fall	mm	168	185	195	0	0	0	0
Type of release	-	compact	spray	compact	spray	compact	spray	3 jets
Duration of release	S	0.45	1.0	0.57	0.43	0.9	0.81	1.0
Water								
Temperature	K	372	368	371	373	373	373	373
Depth	mm	1500	1500	1500	500	920	500	500

Table: Test conditions of selected tests extended by a few results

RESULTS

General course of the thermal interaction

The very first material release occurs as single droplets which are followed by a shower of droplets. In five tests, the stream of melt became more or less compact soon after that. In the other tests, the spray-type discharge of melt continued. The melt release generally lasts about 0.5 to one second. The average outlet velocity of the compact stream is calculated to be about 6 m/s. The speed of the leading drops is much larger.

A definition is required for a better understanding of the results which are presented below. The interaction region (sometimes short: I/R) is defined as the region outside which, laterally and downwards, only liquid water is present. Its upper (plain) boundary is given by the actual water level. The interaction region is regarded to be composed of the three partial volumes of steam, water, and melt.

When hitting the water surface, the melt particles are strongly decelerated. Initially, a shallow I/R is formed. The succeeding mass of melt penetrates into the water at an axial rate of up to 4 m/s. The film pictures show that the leading edge of the melt stream is being more or less fragmented; the fragments are decelerated by counter-current vapour flow. The steam production supports fragmentation, and vice versa. A funnel-shaped I/R is generated which is relatively slim in the case of a compact stream of melt. In the tests in which the spray-type discharge continues, the steam production is more rapid in the very beginning. The melt fragments cool down, partly solidify and eventually settle on the fragment catcher.

The displaced water causes the water level to rise. The rise occurs rather evenly. The water finally reaches the upper cover of the test vessel. It also penetrates into the steam venting pipes.

Discussion of the single-jet experiments

Typical results, i.e. pressures, the steam volume flow rate and level change, of a test characterised by 20 kg of melt and a water depth of 1500 mm are shown in Fig. 2. The leading increase in the gas/steam flow rate is obviously due to an early expansion of the gas/steam contained in the gas space. The expansion was probably caused by heat-up by the melt and/or due to the entry of gas released with the melt. The steam production rate was typically 4 m³/s at normal conditions; it was higher by about 25% in the tests with 20 kg.

Reaction pressures never exceeded 0.1 MPa. They were highest in the tests with a larger melt mass (20 kg). The pressures above the water surface generally exceed those measured below. The difference is small, however. Different dynamic processes occurring at the various axial heights are considered to be responsible for this result. No steam explosion occurred in the single-jet experiments.

The small number of tests, which have been performed until now, together with the difficulty to reproduce those parameters which should remain unchanged, makes a comparison of the results difficult. Nevertheless, the effect of one important test parameter, namely the melt mass flow rate, on the test results can be recognised. Moreover, the effects of other parameters, like the mode of melt release, can be observed.

1. Effect of the melt mass flow rate. Two tests, PM02 and PM06, performed with melt masses of about 10 and 20 kg, respectively, and a large water depth are compared in

this sub-section. Note that the nozzle cross section in PM06 was increased by a factor of two in order to get the same melt release times. In fact, the average melt flow rate (kg/s) is higher in PM06 by a factor of only 1.7. Another parameter, the major melt discharge mode, is the same (compact stream, cf. the table). The progression of the interaction region into the water is shown in Fig. 3 with the time as a parameter. The boundary lines have been constructed by means of an algorithm (third order polynomial expression of two variables, the radius and axial coordinate) applied to the void signal data. By that, the information is used of the first signal changes from water to gas. As a first approximation, axial symmetry is assumed in the evaluation.

As reflected in the r-z profiles shown, the speed of axial penetration is not affected by the larger melt flow rate (PM06) up to about 250 ms. After that time, the axial penetration rate even increases in PM06 whereas it remains approximately constant in PM02. On the other hand, different growth rates of the I/R can be stated in the radial direction from the beginning. The boundary comes close to the vessel wall much earlier in the case of the larger melt mass.

At about 300 ms, the rising water starts to penetrate into the gap between the melt generator and the vessel wall. From that time on, this part of the water contains a small but increasing portion of steam bubbles.

Another important information can be obtained from the time histories of the average volume fractions of the three components steam, water, and melt inside the interaction region (Fig. 4). The volume fractions are calculated using the following data as an input: the total volume of the I/R (calculated from the lines drawn in Fig. 3), water level rise, steam exit flow rate, and an approximated function of the melt flow rate. As an example, the results of PM06 are shown in Fig. 4. Initially, the first droplets contacting the water surface produce only a small fraction of steam. Note that in the very first period of time, the absolute quantities are very small; tis leads to a relatively large error. After about 100 ms, the steam fraction increases due to both the increasing rate of melt entering the interaction region and the advancing fragmentation process. After 200 ms, the volume fractions of the steam and liquid take on values of approximately $50 \pm 10 \%$. A comparatively large steam volume fraction, about 80%, is calculated for test PM02 for the same time (not shown).

2. Effect of the type of melt discharge. Comparison is made here between tests PM02 and PM04 (Fig. 3). The spray-type discharge of the melt in PM04 results in a larger growth rate of the I/R in radial direction from the beginning. On the other hand, the axial penetration velocities in both tests are comparable.

In search for the reason for the spray-type melt discharge observed in test PM04, the pressure in the gas space was found to take on relatively large values, probably due to a small portion of unreacted thermite that had been released at 0.06 s. Nevertheless,

the results of this test are suited for code development regarding a spray-type material release.

3. Effect of a smaller water depth combined with zero falling height. In these tests (PM08 - PM10), the lower edge of the melt generator was put down to level -700 mm which is also the coordinate of the initial water surface. The melt masses were 10 and 20 kg. The water displaced by thermal interaction was forced to move like it is expected in the reactor case where an axial displacement of the water is obstructed due to the presence of the grid plate.

The progression of the I/R into the water measured in test PM08 is shown in Fig. 5. In this case, the lines of constant time have been obtained by a different algorithm (interpolation) applied to the void signal data. As a result of the smaller water depth a portion of the melt reached the bottom still in a liquid state. There are indications that this portion only weakly interacted with water. A cake of melt was formed on the bottom and smaller fragments settled on its top. Of course, the period of heat transfer was much longer in these cases because the cake cools down and solidifies at a smaller rate than in the case of complete fragmentation.

4. Effect of subcooling. Subcooling of the water seems to delay the onset of a substantial pressure build-up due to steam generation.

Triple-jet experiment (with steam explosion)

The release of a triple jet, which is thought to better simulate accident conditions, was performed in PM11. The water depth was 500 mm. This kind of melt release obviously led to more violent interaction and boiling processes above and in the vicinity of the fragment catcher. Probably, a more intense coarse mixing occurred. The processes are reflected in the pressure time history. In Fig. 6, the pressure recorded in the gas space is compared with that obtained in the corresponding single-jet experiment (PM10). As one can easily see, the pressure starts to rise much earlier in the case of the triple jet.

A steam explosion occurred about one second after the first melt/water contact. A substantial portion of the melt had settled on the bottom and quasi-steady boiling had been established. The high-speed films show, besides the more violent boiling mentioned, no deviating behaviour, compared to PM10, during the premixing phase. The explosion itself took place within a very short period of time (less than one millisecond). The film pictures show that the steam explosion was triggered when water contacted the melt settled on the bottom. Before this event, the void measurements indicate that there was a gathering of water between the three melt jets below the melt nozzles for a while; they also show traces of water moving downward a little later. The resulting shock wave severely damaged the test facility. Rough estimations of the released energy based on the deformations of facility components led to very low values; these are in the order of magnitude of 100 kJ. The rate of conversion of thermal to mechanical energy were estimated to be less than one percent.







Fig. 2: Representative data obtained in test PM06. Note that the early steam flow rise is due to a premature gas volume expansion.



PM06, compact jet, 20 kg

PM04, spray type, 10 kg



Fig. 3: Progression of the interaction region into the water: Effects of the mass flow rate and the melt release mode



Fig. 4: Average volume fractions inside the interaction region



Fig. 5: Effect of a smaller water depth on the development of the thermal interaction: Test PM08,10 kg of melt, 500 mm water depth



Fig. 6: Pressure time histories of two tests with equal melt mass and water pool parameters but different numbers of melt release orifices. PM10: one jet; FM11: triple jet

— 146 —

 III. <u>Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung – Thermische</u> <u>Wechselwirkung von Kernschmelze und Wasser</u> (G. Arnecke, H. Jacobs, B. Stehle, K. Thurnay, L. Väth, INR; U. Imke, M. Lummer, IRS)

Abstract

The code MC3D, which has been developed by CEA-Grenoble, has been transfered to FZK in 1996. Thus, there is now a second code available in addition to IVA-KA for analyzing the premixing phase preceding vapour explosions. The following studies were performed:

- 1. Analyses of PREMIX experiments with both codes.
- 2. Analyses of QUEOS experiments with IVA-KA.
- 3. Calculation of an International Standard Problem with IVA-KA.
- 4. Model and code improvements on IVA-KA.

Einleitung

Im vergangenen Jahr wurde das Rechenprogramm MC3D /1/ von CEA-Grenoble übernommen. Damit steht zusätzlich zu IVA-KA ein zweiter Code zur Verfügung, um Analysen der Vorvermischung bei Dampfexplosionen durchzuführen. Die folgenden Arbeiten wurden durchgeführt:

- 1. Analyse von PREMIX-Experimenten mit beiden Codes.
- 2. Analyse von QUEOS-Experimenten mit IVA-KA.
- 3. Berechnung eines Benchmark-Problems mit IVA-KA.
- 4. Modell- und Codeverbesserungen an IVA-KA.

Theoretische Interpretation der PREMIX-Experimente mit MC3D

Zur Ergänzung der Nachrechnung von PREMIX-Experimenten mit IVA-KA wurde das Programmsystem MC3D von CEA-Grenoble übernommen. MC3D enthält zwei Anwendungsmöglichkeiten zur Simulation der Vorvermischungsphase. Eine einfache Modellierung wird durch die thermohydraulische und thermodynamische Beschreibung von flüssigem Wasser, Wasserdampf und Schmelze realisiert. Die zweite Anwendung beschreibt als zusätzliche Komponente einen Schmelzestrahl, dessen Oberfläche während der Simulation in seiner räumlichen Ausbreitung verfolgt wird. An dieser Oberfläche fragmentiert die Schmelze und wird dann in ein Tröpfchenfeld überführt.

Beide Anwendungen befinden sich noch in der Entwicklung, wobei die vereinfachte Modellierung die größere numerische Stabilität aufweist. Der verwendete Lösungsalgorithmus besitzt im Vergleich mit IVA-KA eine erheblich höhere Effizienz. Bei der Nachrechnung von PREMIX Experimenten zeigte sich, daß es Schwierigkeiten bei der Simulation von sehr kleinen Gasanteilen in der Schmelze gibt. In enger Zusammenarbeit mit CEA wurde an der Behebung dieses Problems gearbeitet.

Die Anwendung von MC3D auf das Experiment PM06 (20 kg Schmelze) erfolgte in zwei Varianten. Der Schmelzeeintrag kann über eine Quelle mit Geschwindigkeitsrandbedingungen oder als Ausfluß aus einem Vorratsbehälter simuliert werden. Für beide Fälle ergaben sich ähnliche Resultate, die stark von der vorgegebenen Fragmentierung an der Schmelzestrahloberfläche und dem minimalen Teilchendurchmesser abhängen. Dieses Ergebnis ist vergleichbar mit Resultaten von IVA-KA Nachrechnungen. Eine Fragmentierung der Schmelze zu Tropfengrößen vergleichbar mit den Durchmessern der Partikel, die am Ende des Experimentes durch Siebanalysen festgestellt wurden, führt zu einer zu geringen Verdampfung und zu einem zu schwachen Druckaufbau. Erst eine viel stärkere Fragmentierung ergibt Verdampfungsraten die näher an den experimentellen Ergebnissen liegen. Ähnliche Ergebnisse erhält man durch künstlich erhöhte Wärmeübertragung von der Schmelze direkt ins Wasser und direkt in den Dampf. Die Variation von Dragkoeffizienten, Maschengröße und Divergenz des Schmelzestrahles haben im Vergleich dazu einen nicht so großen Einfluß. Die Wärmeübertragung bei Kondensation des Dampfes und die Abströmbedingungen sind weitere wichtige Parameter bei der Simulation der PREMIX Experimente. Sie sind zur Zeit nicht genau bekannt und beeinflussen das Ergebnis wesentlich.

Abbildung 1 zeigt den Druckverlauf im Versuchsbehälter mit zwei verschiedenen Randbedingungen für die Fragmentierung. Für diese Simulation wurde die Version MC3D 3.0 mit Updates von Anfang Dezember 96 benutzt (3 Felder). Die Rechnung wurde mit einem Maschennetz von 11 radialen Zellen und 46 axialen Zellen durchgeführt. Die Abströmrohre wurden durch eine Druckrandbedingung (1 bar) und eine der Rohrquerschnittsfläche entsprechenden Porosität auf dem Rand simuliert. Es wurden keine Druckverlustbeiwerte für das ausströmende Gemisch verwendet. Damit ist durch die Abströmbedingungen die Möglichkeit einer maximalen Verdampfungsrate gegeben. Die Schmelze wurde mit einem Treibdruck von anfänglich 2 bar aus dem Schmelzebehälter ausgeblasen. Kurz vor der Entleerung betrug der Druck noch 1.8 bar.



Abb. 1 Druck in Versuchsbehälter

In Abbildung 1 sind die Druckverläufe für die Fragmentierung an der Strahloberfläche auf 0.7 mm und 5 mm im Vergleich zu den Druckmessungen im Gasraum dargestellt. Eine weitere Fragmentierung der Tropfen wurde unterbunden. Sie würde im 5 mm Fall auf einen Enddurchmesser von etwa 2 mm führen. Der mittlere Durchmesser der nach dem Experiment gefundenen Teilchen betrug etwa 5 mm. In diesem Fall waren nach einer Sekunde in der Rechnung ungefähr 300 g Wasserdampf ausgeströmt. Entstehen gleich anfangs Teilchen von 0.7 mm Durchmesser steigt der Druck stärker an und es verlassen 600 g Dampf das Rechengebiet. Im Experiment entweichen etwa 1.7 kg Dampf während der ersten Sekunde. Für die Simulation wurde eine CPU-Zeit von 45 min auf einer IBM RISC6000 benötigt.

Die zusätzliche Anwendung von MC3D auf PREMIX Experimente hat die Ergebnisse, die mit IVA-KA berechnet wurden, bestätigt. Unter der Annahme, daß die am Ende des Experimentes gefundene Partikelgröße der Fragmentierung in der ersten Sekunde entspricht, ist es mit den vorhandenen Modellen nicht möglich, die im Experiment gefundene Dampfproduktion zu berechnen. Als Schwerpunkt der nicht ausreichenden Modellierung haben sich die Fragmentierung, die Dampfkondensation und die direkte Wärmeübertragung herausgestellt.

Zur Analyse der PREMIX Experimente mit IVA-KA

Im Rahmen der PREMIX-Experimente zur Schmelze/Kühlmittelwechselwirkung werden mit dem Programm IVA-KA begleitende Rechnungen durchgeführt. Ziel dieser Rechnungen ist zum einen die Unterstützung der Interpretation der Experimente und zum anderen die Weiterentwicklung und Validierung des Codes für eine spätere Anwendung auf schwere Reaktorstörfälle.

Bei der Anwendung von IVA-KA auf eine Reihe von Strömungsproblemen zeigte sich, daß die PREMIX Experimente die bei weitem höchsten Anforderungen an die Stabilität des Lösungsalgorithmus stellen. Obwohl eine Reihe von Fortschritten hinsichtlich der numerischen Qualität der Lösung gemacht wurden, ist noch keine befriedigende Simulation von PREMIX mit IVA-KA möglich.

Insbesondere das Problem der zu geringen Verdampfung und des damit einhergehenden zu geringen Druckaufbaus während der Rechnungen konnte noch nicht zufriedenstellend geklärt werden. Allerdings zeigte der CEA-Code MC3D bei Anwendungen auf PREMIX ein ähnliches Verhalten. Dies deutet eher auf Unvollkommenheit in den, in beiden Codes ähnlichen, Wärme- und Massenaustauschmodellen hin, als auf Fehler im Lösungsalgorithmus von IVA-KA, der sich von dem des MC3D Codes erheblich unterscheidet.

Zu Beginn der Revision der Materialmodelle wurde zunächst untersucht, ob möglicherweise durch zu grobe Gitter und die damit einhergehende numerische Diffusion eine die Verdampfung verstärkende konvektive Mischung der Phasen unterdrückt wird.

Dies ist dadurch motiviert, daß zum einen aus der Stabilitätstheorie der Strömungen bekannt ist, daß starke Gradienten zu Instabilitäten führen können, die eine intensive Mischung der Strömung bewirken und zum anderen die in IVA-KA implementierten Differenzenformeln erster Ordnung eine der Maschengröße proportionale numerische Diffusion besitzen, die auf groben Gittern eine starke Glättung der Gradienten bewirkt.

Um den Einfluß des Rechengitters auf die PREMIX Simulationen zu überprüfen, wurde der Versuch PM06 (20 kg Al₂O₃ Schmelze) mit zwei verschiedenen Auflösungen des Versuchsbehälters (11*44 und 16*60 Maschen) gerechnet. Dies entspricht im wesentlichen einer Halbierung der Maschenweite im Bereich der Mischungszone der Phasen.

Der deutlichste Unterschied der Rechnung auf dem feinen Gitter gegenüber der auf dem groben ist die stärkere radiale Ausbreitung der Mischungszone. Die Abbildungen 2 und 3 zeigen die Volumenfraktionen im Wasser und Schmelze zum Zeitpunkt T = 1 sek.



Abbildung 2: Volumenfraktion (Gitter 11*44) T=1 sek.



Abbildung 3: Volumenfraktion (Gitter 16*60) T=1 sek.

Obwohl an der Verschmierung der Phasengrenze zwischen Wasser und Gas die auf dem groben Gitter größere numerische Diffusion zu erkennen ist, führt das feinere Gitter nicht zu einer stärkeren Verdampfung mit entsprechendem Druckaufbau.

Dies kann man der Abbildung 4 entnehmen, die einen repräsentativen Druck auf dem groben und feinen Gitter im Vergleich mit drei experimentell gewonnen Kurven zeigt. Lediglich ab etwa T = 0.7 sek. ist der Druck auf dem feinen Gitter etwas höher als auf dem groben.



Abbildung 4: Druck im Behälter

Es soll an dieser Stelle noch darauf hingewiesen werden, daß im Bereich der untersuchten Gitter noch nicht von einer Konvergenz der Lösung, d.h. einem vernachlässigbaren Einfluß der Maschenweite, gesprochen werden kann. Ob dies im Einzelfall tolerierbar ist, muß vorläufig offen gelassen werden. Eine weitere Verringerung der Maschenweite ist jedoch mit der gegenwärtigen Version von IVA-KA nicht praktikabel.

Eine Analyse der Verdampfungs- und Kondensationsraten zeigte dann, daß die Dampfproduktion im wesentlichen von der Verdampfung von Wassertropfen bestimmt wird, während die Kondensation in Gasblasen im Wasser geschieht.

Eine Verringerung der Kondensationsrate der Dampfblasen hatte dann einen sehr starken Einfluß auf die Rechenergebnisse in Richtung auf eine Zunahme der Nettoverdampfung und einen erheblich steigenden Druck im Strömungsfeld. Infolgedessen wurde mit einer Überarbeitung des im Programm implementierten, sehr rudimentären Modelles für die Blasenkondensation begonnen.

Ein weiteres Problem, dessen Klärung in Angriff genommen wurde, ist die starke Zunahme des Fehlers der Gesamtenergie im Strömungsfeld. Dieser beträgt etwa 1 % am Ende einer PREMIX Simulation und entspricht so einer Energiezunahme in der Größenordnung der für die Verdampfung notwendigen Wärmemenge.

Die Überprüfung der Energieerhaltung ist dadurch schwierig, daß die in IVA-KA anstelle der Energiebilanz implementierte Entropiegleichung deutlich kompliziertere Grenzflächenterme enthält, für die in der Literatur kaum Modellansätze zu finden sind. Bisherige Untersuchungen deuten daraufhin, daß in IVAK-KA zugelassene Nichtgleichgewichtsphasenübergänge (d.h. unterschiedliche Temperaturen von Gas bzw. Dampf und Wasser während der Verdampfung bzw. Kondensation) Ursache des Energiefehlers sind.

Analyse von QUEOS mit IVA-KA

Bei den QUEOS Experimenten /2/ sind die Anfangs- und Randbedingungen mit einer für solche Experimente ungewöhnlichen Genauigkeit bekannt. Die präzisen Messungen und die fotografischen Daten bieten zahlreiche Möglichkeiten, Nachrechnungen mit den Experimenten zu vergleichen. Daher sind diese Experimente hervorragend geeignet, Mehrphasen-Rechenprogramme zu testen. Allerdings hat sich bei den Nachrechnungen mit IVA-KA herausgestellt, daß es zumindest bei der ersten Serie von QUEOS Experimenten mit breiten Kugelwolken, die entsprechend kurz sind, nicht sinnvoll ist, auch den Fall der Kugeln von dem mittleren Schieber bis zur Wasseroberfläche zu simulieren. Auf Grund numerischer Diffusion wird das anfänglich nur etwa 10 cm hohe Partikelbett während des Falls weit stärker als im Experiment axial aufgefächert, so daß der Eintauchvorgang von vornherein ganz anders abläuft als im Experiment. Aus diesem Grund wird hier nur über Rechnungen berichtet, bei denen die Verteilung der Partikel und ihre Geschwindigkeit beim Erreichen der Wasseroberfläche entsprechend den Informationen aus den Experimenten vorgegeben wurden. Bei dem Experiment Q-08, das mit 10 kg kalten Molybdänkugeln mit 4.3 mm Durchmesser durchgeführt wurde, ergab sich auf Grund des hohen Impulsaustausches beim Eintauchen der Partikelwolke ein typischer Druck-Zeit-Verlauf im Wasser, der von IVA-KA auch reproduziert wird, siehe Abbildung 5. Allerdings sind die Amplituden und Zeiten bei der Nachrechnung kleiner. Es ist zu vermuten, daß hier transiente Vorgänge beim Eintauchen eine besondere Rolle spielen, die von den in IVA-KA verwendeten Dragkorrelationen für stationäre Strömungen nicht erfaßt werden. Weitere Untersuchungen sind erforderlich.



Abbildung 5: QUEOS-08: Druck-Zeit-Verlauf im Experiment (links) und in der Nachrechnung mit IVA-KA (rechts). Man beachte die unterschiedlichen Skalen.

Als Beispiel für die Nachrechnung eines Experiments mit heissen Kugeln zeigen wir in Abb. 6 gemessene und berechnete Druck-Zeit-Verläufe von QUEOS-12, das mit 6.9 kg Mo-Kugeln (wie Q-08) mit einer Temperatur von etwa 2300 K durchgeführt wurde. Die Abströmgeschwindigkeit des Dampfes wird ähnlich gut wiedergegeben. Man beachte den besonderen Druckpeak, der nur im Wasser auftritt und von dem Zusammenschlagen des Wassers über der Partikelwolke verursacht wird. Derartige hydrodynamische Vorgänge werden von IVA-KA recht genau berechnet. Der nachfolgende Einbruch des Gasdruckes ist vermutlich auf eine Überschätzung von Kondensation zurückzuführen. Auch hier sind noch weitere Untersuchungen erforderlich.



Abbildung 6: QUEOS-12: Gemessene und mit IVA-KA berechnete Drücke

Berechnung des Internationalen Standard-Problems ISP-39 zu FARO Test L-14 mit IVA-KA

Das Internationale Standard Problem ISP-39 /3/, das im wesentlichen dem FARO Experiment L-14 entspricht, wurde 1996 von dem Institute for Systems, Informatics and Safety im JRC-Ispra erstellt. Sein Ziel ist eine Bewertung der Leistungsfähigkeit von Codes bei der Modellierung der Vorvermischungsphase, die einer möglichen Dampfexplosion beim Niederschmelzen eines Kernreaktors vorausgeht. Es handelt sich um ein Quenching Experiment mit 125 kg UO₂-ZrO₂-Schmelze, die durch ca. 1 m Dampf-Luft-Gemisch in ein ca. 2 m tiefes Wasserbecken fällt. Der Gasdruck liegt bei 5.1 MPa, und das Wasser hat Sättigungstemperatur. Die Schmelzetemperatur beträgt 2800 °C. Um den Vergleich der verschiedenen Rechenergebnisse zu vereinfachen, wurden zwei Einschränkungen gegenüber einer völlig freien Modellie-

rung durch die Codes getroffen: Die Ausströmrate der Schmelze in das Experimentiergefäß wurde vorgeschrieben, und die Materialdaten der Schmelze wurden ebenfalls festgelegt.

Mit IVA-KA wurden die Spezifikationen des Benchmarks weitgehend realisiert. Eine wichtige Abänderung wird durch die vorgegebene Ausströmrate der Schmelze bedingt, die in IVA-KA nur an einer Außengrenze der Rechengeometrie definiert werden kann. Daher mussten alle Gasvolumina oberhalb des Auslasses des Schmelzefängers in radiale Ringe transformiert werden, die das Experimentiergefäß außen umschließen. Außerdem musste das im Experiment benutzte Argon durch die gleiche Molmenge Luft ersetzt werden, da IVA-KA kein Argon modelliert.

Ein Netz mit 8 radialen Maschen im Experimentiergefäß und 3 weiteren für die umschließenden Gasvolumina sowie 45 axialen Maschen wurde für die Rechnungen verwendet. Die axiale Maschenweite beträgt nirgends mehr als 7 cm, um die Effekte der numerischen Diffusion in IVA-KA klein zu halten. Die radiale Maschenweite ist höchstens 5.5 cm.

Die Rechnung wurde Ende 1996 mit der damals neuesten Version von IVA-KA bis zu einer Problemzeit von 7 s durchgeführt. Zu diesem Zeitpunkt hat sich die Schmelze bereits längere Zeit auf dem Boden des Experimentiergefäßes abgesetzt.

Die wichtigsten Ergebnisse werden in Tabelle 1 mit den experimentellen Befunden von L-14 verglichen. Den Druck im Gasvolumen des Experimentiergefäßes zeigt Abb. 7. Der qualitative Verlauf wird befriedigend wiedergegeben, jedoch steigt der Druck zunächst etwas zu stark und verbleibt später auf einem zu niedrigen Niveau.

Die Zeit, zu der der Schmelzestrahl auf die Wasseroberfläche trifft (Tab. 1), wird etwas zu kurz berechnet, was auf die numerische Diffusion zurückzuführen ist. Dagegen kommt er deutlich zu spät am Gefäßboden an (Tab. 1). Dies liegt wahrscheinlich an der vollständigen Auflösung des Strahls in Tropfen, die in der Rechnung in einer Höhe von ca. 1 m über dem Gefäßboden eintritt, während das Experiment auf die Ankunft eines kompakten Strahls am Gefäßboden hinweist. Diese zu frühe Auflösung des Strahls dürfte auch den etwas zu hohen Druck im Zeitintervall zwischen

	L-14	IVA-KA
Strahlankunft an der Wasseroberfläche (s)	0.36	0.33
Strahlankunft am Gefäßboden (s)	0.79	0.91
Schmelzeoberfläche bei t=7 s (m ²)	33.2	12.2
Fragmentierte Schmelzemasse (kg)	105	125
Fragmentgröße D-50 % (mm)	4.8	6.5
An Wasser und Dampf übertragene Energie bei	125	86
t=7 s (MJ)		

0.5 und 1.0 s bedingen. Das Modell sollte also so modifiziert werden, dass der Schmelzestrahl teilweise den Gefäßboden erreicht.

Tab. I	Veraleich von	IVA-KA Resul	taten für ISP-39) mit Experiment L-14
--------	---------------	---------------------	------------------	-----------------------



Abbildung 7: Vergleich des Drucks im Gasraum laut Messung in FARO Test L-14 und wie von IVA-KA für ISP-39 berechnet.

Vergleicht man die Schmelzeoberfläche, die fragmentierte Schmelzemasse und die Fragmentgröße in Tab. 1 mit den experimentellen Werten, so fällt zunächst auf, dass IVA-KA die Entstehung eines Schmelzekonglomerats nicht modelliert. Daher berechnet es eine größere fragmentierte Masse. Allerdings modelliert es auch sehr viel größere Teilchen und deshalb eine zu kleine Schmelzeoberfläche. Durch sie

kann der zu niedrige Druck bei größeren Zeiten mitverursacht werden. Dies würde auf eine etwas zu schwache Fragmentation hinweisen. Allerdings ist die Partikelgröße Funktion vieler Modellteile, für die z.T. schon Änderungen geplant sind, deren Effekt abzuwarten bleibt.

Wie aus Tab. 1 ersichtlich ist die an Wasser und Dampf übertragene Energie zu klein, was auf Grund des zu niedrigen Drucks zu erwarten ist. Der wesentliche Grund dafür dürfte ein Modellfehler sein, der nach Abschluß der Rechnungen entdeckt wurde, und der zu einem Energieverlust führt. Die Beseitigung dieses Fehlers hat höchste Priorität.

Die Rechnung benötigte einen großen Rechenaufwand (35 Std. CPU auf der IBM-3090), lief aber ohne numerische Probleme. Die einzelnen Phasen werden gründlich analysiert werden, um Probleme zu identifizieren und die Leistungsfähigkeit des Programms zu steigern.

Modellverbesserungen und Programmkorrekturen an IVA-KA

Die folgenden Änderungen wurden 1996 vorgenommen:

- 1. Überarbeitung von Verdampfung/Rekondensation und Wärmeübertragung bei Wassertröpfchen und Dampfblasen in Wasser.
- 2. Verbesserung eines Fehlers bei der Berechnung der Drag-Terme.
- 3. Benutzung eines realistischen Wertes für die Schallgeschwindigkeit in der Schmelze.
- 4. Verbesserte Berechnung der Entropie im Luft-Dampf-Gemisch.

Literatur

- /1/ G. Berthoud, M. Valette: Development of a multidimensional model for the premixing phase of a fuel-coolant interaction. Nucl. Engng. and Design 149 (1994), 409.
- /2/ L. Meyer, G. Schumacher: QUEOS, a Simulation Experiment of the Premixing Phase of a Steam Explosion with Hot spheres in Water - Base Case Experiments, Forschungszentrum Karlsruhe Report FZKA 5612 (1996).
- /3/ A. Annunziato, C. Addabbo, G. Leva: OECD/CSNI International Standard Problem No. 39 on FARO Test L-20. Reference Specification. JRC, Institute for Safety Technology, Technical Note No. I.96.64 (1996).

32.21.03 Versagen des Reaktordruckbehälters bei Hochdruck

I. <u>Thermodynamisch konsistente, finite Thermoviskoplastizität mit Schädigung</u> (H. Lämmer, B. Ritter, Ch. Tsakmakis, IMF II)

Abstract

In 1996, the finite deformation viscoplasticity model developed in '95 was extended to thermoviscoplasticity, static recovery of the isotropic and kinematic hardening, and to thermomechanical coupling. Furthermore, the constitutive equation for the damage variable was generalized. The thermodynamical consistency of the model was proofed for every admissible process. In order to reduce the CPU time required by the ABAQUS finite element code, an effective integration algorithm was developed. It is based on the operator split methodology (triple operator split). By using this methodology, the number of equations to be solved by means of Newton's method were reduced from 15 to 2 in operator 2 (inelastic part) and from 7 to 2 in operator 3 (recovery part). For these reductions, some simplifications in the constitutive theory were necessary. Both, the simplifications and the triple operator split were validated. To speed up the convergence of the global equilibrium solved by ABAQUS, the contributions to the consistent tangent modulus provided by the material subroutine were calculated analytically.

Kurzfassung

Im Berichtsjahr wurde das in '95 entwickelte, für große Deformationen formulierte Viskoplastizitätsmodell auf Thermoviskoplastizität, einschließlich thermomechanischer Kopplung, erweitert. Zusätzlich wurden statische Erholungsterme (recovery) in die Evolutionsgleichungen der isotropen und kinematischen Verfestigung eingeführt und die Evolutionsgleichung der Schädigung verallgemeinert. Das Materialmodell wurde so formuliert, daß für jeden zulässigen Prozeß dessen thermodynamische Konsistenz nachgewiesen werden konnte. Zur Erlangung möglichst kurzer Rechenzeiten im Finite-Elemente-Programm wurde ein effektiver Spannungsalgorithmus entwickelt und in den FE-Code ABAQUS implementiert. Die Integration der Materialgleichungen erfolgt mit Hilfe eines Operator-Split-Verfahrens (dreifacher Operator-Split). Die Anzahl der mit dem Newton-Verfahren zu lösenden Gleichungen konnte im Operator 2 (inelastischer Anteil) von 15 auf 2 und im Operator 3 (recovery Anteil) von 7 auf 2 reduziert werden. Um diese Reduktion durchführen zu können waren gewisse Vereinfachungen im Modell notwendig. Diese Vereinfachungen sowie das Operator-Split-Verfahren konnten validiert werden. Zur Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit wurden die von der Materialroutine zu liefernden Beiträge zum konsistenten Tangentenoperator analytisch berechnet.

1 Einleitung

Um mit einem Finite-Elemente-Programm kritische Zustände, die nach einen schweren Störfall zum Versagen des Reaktordruckbehälters (RDB) führen, berechnen zu können, wird ein für große Deformationen formuliertes Materialmodell benötigt. Da das Materialverhalten bei den zu erwartenden Temperaturen, neben der Temperatur selbst, stark von der Belastungsgeschwindigkeit abhängt, wird ein sogenanntes Thermoviskoplastizitätsmodell benötigt. Weiterhin wird durch Schädigungseffekte die Tragfähigkeit des Materials herabgesetzt und führt somit letztendlich zum Aufreißen des Behälters. Es ist zu beachten, daß eine Bauteilinstabilität (kraftkontrollierter Prozeß) nicht notwendigerweise an eine Schädigung im Material gebunden ist. Wenn jedoch, wie in unserem Fall, das nachkritische Verformungsverhalten des RDBs von Interesse ist, kann mit Hilfe der Schädigung ein Kriterium für den Tragfähigkeitsverlust des Materials (nicht gleichbedeutend mit dem Tragfähigkeitsverlust des Behälters) formuliert werden. Ein weiterer entfestigend wirkender Mechanismus ist die sogenannte statische Erholung des Materials. Bei diesem Langzeiteffekt werden nach und nach Versetzungen im polykristallinen Gefüge abgebaut bzw. Spannungen im Innern des Gefüges abgebaut oder umgelagert (s. z.B. [10][S. 332]). Dieser Effekt ist ebenfalls stark temperaturabhängig.

Im Berichtsjahr wurde das in '95 entwickelte Viskoplastizitätsmodell [8] auf Thermoviskoplastizität erweitert. In die Evolutionsgleichungen der isotropen und kinematischen Verfestigung wurden statische Erholungsterme eingearbeitet. Weiterhin wurde das Schädigungsmodell verallgemeinert und die thermomechanische Kopplung berücksichtigt.

Im vorliegenden Bericht werden zunächst anhand thermodynamischer Betrachtungen die konstitutiven Gleichungen aus hinreichenden Bedingungen zur Erfüllung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik hergeleitet. Die zur Erlangung eines effektiven Spannungsalgorithmus notwendigen Vereinfachungen werden aufgezeigt und validiert. Im darauffolgenden Kapitel wird die numerische Umsetzung kurz erläutert, validiert und es werden zwei FE-Simulationen zur Problematik der Verformungslokalisierung aufgezeigt.

2 Thermodynamische Betrachtungen bei großen Deformationen

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung lautet, relativ zur Momentankonfiguration R_t

$$-\dot{\Psi} - \dot{\theta} \eta_* + \frac{1}{\rho_R} \mathbf{S} \cdot \mathbf{D} - \underbrace{\frac{\mathbf{q}}{\rho \theta} \cdot \mathbf{g}}_{C_{\theta}} \ge 0 \quad .$$

$$(1)$$

Hierbei sind Ψ die freie spezifische Energie, θ die absolute Temperatur, η_* die spezifische Entropie, ρ_R und ρ die Massendichten in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration, S der gewichtete Cauchy'sche Spannungstensor, D der symmetrische Anteil des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten, q der Wärmeflußvektor und g der Temperaturgradient.

Die Annahme einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten \mathbf{F} in einen elastischen, einen thermischen und einen inelastischen Anteil gemäß

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_t \mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{et} \mathbf{F}_p \tag{2}$$

impliziert eine sog. plastische Zwischenkonfiguration \hat{R}_t . Die übliche Vorgehensweise im Rahmen der Theorie großer Deformationen legt nahe, die konstitutiven Gleichungen bezüglich dieser Konfiguration zu formulieren. Transformation der Clausis-Duhem-Ungleichung in \hat{R}_t mittels dem Konzept der dualen Variablen [3, 4] liefert

$$-\dot{\Psi} - \dot{\theta} \eta_* + \frac{1}{\rho_R} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}} - C_\theta \ge 0 \quad , \tag{3}$$

wobei $\hat{\mathbf{T}}$ einen zweiten Piola-Kirchhoff-Tensor und $\hat{\Gamma}$ einem Green'scher Verzerrungstensor bzgl. der plastischen Zwischenkonfiguration entspricht. $\hat{\hat{\Gamma}}$ ist die untere Oldroyd-Ableitung von $\hat{\Gamma}$, wie folgt definiert:

$$\overset{\scriptscriptstyle \Delta}{\hat{\Gamma}} = \dot{\hat{\Gamma}} + \hat{L}_p^T \hat{\Gamma} + \hat{\Gamma} \hat{L}_p \quad .$$

$$\tag{4}$$

Der plastische Anteil des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten relativ zur plastischen Zwischenkonfiguration $\hat{\mathbf{L}}_p$ ist durch $\hat{\mathbf{L}}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1}$ gegeben. Die Oldroyd-Ableitung besitzt die wichtige Eigenschaft der Objektivität; eine Invarianzforderung gegenüber der Wahl des Bezugssystems. Ausgehend von einer additiven Zerlegung der Deformation und deren objektiver Ableitung

$$\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}_e + \hat{\Gamma}_t + \hat{\Gamma}_p = \hat{\Gamma}_{et} + \hat{\Gamma}_p \tag{5}$$

$$\hat{\hat{\Gamma}} = \hat{\hat{\Gamma}}_{et} + \hat{\hat{\Gamma}}_{p} = \hat{\hat{\Gamma}}_{et} + \hat{D}_{p}$$
(6)

wird zunächst eine spezifische freie Energiefunktion der Form

$$\Psi(t) = \bar{\Psi}\left(\hat{\Gamma}_{et}, \hat{\mathbf{Y}}, r, \mathsf{d}, \theta\right) = \Psi_{et}(t) + \Psi_{p}(t) \tag{7}$$

eingeführt. Es wird angenommen, daß sie additiv in einen thermoelastischen und einen plastischen Anteil zerlegt werden kann. Die tensorielle Größe $\hat{\mathbf{Y}}$ und die skalarwertigen Größen r und d sind innere Variablen vom Dehnungstyp, wobei $\hat{\mathbf{Y}}$ die Struktur eines Green'schen Verzerrungstensors aufweist und d die Schädigungsvariable darstellt. Sie sind die thermodynamisch konjugierten Größen der inneren Variablen vom Spannungstyp $\hat{\mathbf{Z}}$, k und Ω . Mit Hilfe der Beziehungen (4 - 7) sowie der Annahme elastischer Isotropie kann die Clausius-Duhem-Ungleichung in

$$\left(\hat{\mathbf{T}} - \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_{et}} \right) \cdot \hat{\hat{\Gamma}}_{et} - \rho_R \left(\eta_* + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} + \left(\hat{\mathbf{T}} + 2 \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_{et}} \hat{\Gamma}_{et} \right) \cdot \hat{\mathbf{D}}_p - - \rho_R \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} \cdot \dot{\hat{\mathbf{Y}}} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial r} \dot{r} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \mathsf{d}} \dot{\mathsf{d}} \right) - C_\theta \ge 0$$

$$(8)$$

überführt werden (s. hierzu [7]). Standardargumentation, die auf Coleman/Gurtin zurückgeführt werden kann (s. hierzu z.B. [1]), führt zu den Potentialbeziehungen

$$\hat{\mathbf{T}} = \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_{et}} \quad , \quad \eta_* = -\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta} \quad , \tag{9}$$

die im Falle der Viskoplastizität notwendige und hinreichende Bedingungen zur Erfüllung der Clausius-Duhem-Ungleichung darstellen.

Mit Hilfe der folgenden Annahme für den plastischen Anteil der freien Energie

$$\Psi_p(t) = \bar{\Psi}_p(\hat{\mathbf{Y}}, r, \mathsf{d}, \theta) = \frac{(1-\mathsf{d})}{2\rho_R} \left\{ \gamma r^2 + 2hr + c\,\hat{\mathbf{Y}}\cdot\hat{\mathbf{Y}} \right\}$$
(10)

und den Definitionen für die inneren Variablen vom Spannungstyp

$$\hat{\mathbf{Z}} := \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} = (1 - \mathsf{d}) c \, \hat{\mathbf{Y}}$$
(11)

$$\mathsf{k} := \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial r} = (1 - \mathsf{d}) (\gamma r + h)$$
(12)

$$\Omega = \Omega_{et} + \Omega_p := \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \mathsf{d}} = \Omega_{et} - \frac{1}{2} \left\{ \gamma \, r^2 + 2h \, r + c \, \hat{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{Y}} \right\}$$
(13)

lautet die Clausius-Duhem-Ungleichung

$$\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{D}}_p - \hat{\mathbf{Z}} \cdot \hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{k} \dot{r} - \Omega \dot{\mathbf{d}} - C_\theta \ge 0 \quad . \tag{14}$$

Es sind c, β, γ und h nichtnegative Materialfunktionen der Temperatur, mit der Eigenschaft $h \leq k(\theta)|_{s=0}$ und $\hat{\mathbf{P}}$ der sogenannte Mandel'sche Spannungstensor, der wie folgt definiert ist:

$$\hat{\mathbf{P}} := \left(\mathbf{1} + 2\,\hat{\Gamma}_{et}\right)\,\hat{\mathbf{T}} \quad . \tag{15}$$

In Anlehnung an Tsakmakis [12] wird eine Fließfunktion $F = \bar{F}(\hat{P}, \hat{\xi}, k, d)$ mit kinematischer und isotroper Verfestigung im Raum der Mandel'schen Spannungstensoren verlangt, die zusätzlich noch Schädigungseffekte berücksichtigt, wobei $\hat{\xi}$ der Translationstensor der kinematischen Verfestigung ist, der die Struktur eines Mandel'schen Spannungstensors aufweist. Der Translationstensor wird somit mittels eines zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensors, in diesem Falle mit \hat{Z} , und dem dazu thermodynamisch konjugierten (Green'schen) Verzerrungstensor \hat{Y} definiert:

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} := \left(\mathbf{1} + 2\,\hat{\mathbf{Y}} \right)\,\hat{\mathbf{Z}} = \hat{\mathbf{Z}} + \frac{2}{c(1-\mathsf{d})}\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{Z}} \quad . \tag{16}$$

Für Plastizität ohne Schädigung (bei isothermen Prozessen) führt das Postulat von l'Ilushin auf die Eigenschaften der Konvexität der Fließfläche und der assoziierten Normalenregel. Diese Eigenschaften werden auch für den Fall der Viskoplastizität mit Schädigung angenommen. Als Fließfunktion wurde eine von Mises Fließfunktion

$$\mathsf{F} = \bar{\mathsf{F}}\left(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\boldsymbol{\xi}}, \mathsf{k}, \mathsf{d}\right) = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\xi}}}{1 - \mathsf{d}}\right)^{D} \cdot \left(\frac{\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\xi}}}{1 - \mathsf{d}}\right)^{D} - \frac{\mathsf{k}}{1 - \mathsf{d}}}$$
(17)

gewählt, die Fließregel ist dann durch

$$\hat{\mathbf{D}}_{p} = (1-\mathsf{d}) \dot{s} \frac{\partial \bar{\mathsf{F}}}{\partial \hat{\mathbf{P}}} = \dot{s} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\left(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\xi}}\right)^{D}}{\sqrt{\left(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\xi}}\right)^{D} \cdot \left(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\xi}}\right)^{D}}} \quad (18)$$

gegeben. Die Rate der plastischen Bogenlänge $\dot{s} = \sqrt{\frac{2}{3}\hat{\mathbf{D}}_{p}\cdot\hat{\mathbf{D}}_{p}}$ wird im Falle der Viskoplastizität mit Hilfe einer Überspannung gemäß

$$\dot{s} = \frac{\langle \mathsf{F} \rangle^m}{\eta} \tag{19}$$

bestimmt, wobei $\langle \rangle$ die McAuley Klammern mit der Eigenschaft $\langle x \rangle = x$ für $x \ge 0$ und $\langle x \rangle = 0$ für x < 0 und m, η positive, temperaturabhängige Materialfunktionen sind. Somit ist \dot{s} stets nichtnegativ.

Nach einigen Umrechnungen (s. [7]) kann die Clausius-Duhem-Ungleichung in

$$\underbrace{\left(\frac{\hat{\mathbf{P}}-\hat{\boldsymbol{\xi}}}{1-\mathsf{d}}\right)\cdot\hat{\mathbf{D}}_{p}-\frac{\mathsf{k}\,\dot{r}}{1-\mathsf{d}}}_{(A)}+\underbrace{\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\cdot\left\{\hat{\mathbf{D}}_{p}-\frac{1}{c}\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)^{\vee}+\frac{c'}{c^{2}}\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)\dot{\theta}\right\}}_{(B)}\underbrace{-\frac{\Omega\,\dot{\mathbf{d}}}{1-\mathsf{d}}}_{(C)}\underbrace{-\frac{C_{\theta}}{1-\mathsf{d}}}_{(D)}\geq0\qquad(20)$$

überführt werden, wobei c' die Temperaturableitung $\partial c/\partial \theta$ darstellt. Das Symbol " \forall " repräsentiert eine obere Oldroyd-Ableitung, sie ist relativ zur plastischen Zwischenkonfiguration wie folgt definiert:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)^{\nabla} = \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) - \hat{\mathbf{L}}_{p}\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) - \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)\hat{\mathbf{L}}_{p}^{T} \quad .$$

$$(21)$$

Es ist sofort ersichtlich, daß eine hinreichende Bedingung zur Erfüllung von (20) ist, daß jeder der vier Terme (A) - (D) nichtnegativ ist. Daraus lassen sich nun die Evolutionsgleichungen für die isotrope Verfestigung k, für die gemäß (16)mit der kinematischen Verfestigung $\hat{\xi}$ verknüpften inneren Variable \hat{Z} und für die Schädigungsvariable d herleiten.

2.1 Isotrope Verfestigung (A)

Mit Hilfe von (17) und (18) kann gezeigt werden (s. [7]), daß (A) stets nichtnegativ ist, wenn $\dot{s} \ge \dot{r}$ gilt. Durch geeignete Wahl von \dot{r} (s. [7]) folgt als Evolutionsgleichung

$$\left(\frac{\mathbf{k}}{1-\mathbf{d}}\right)^{\prime} = \phi \left\{\gamma - \beta \left(\frac{\mathbf{k}}{1-\mathbf{d}} - h\right)\right\} \dot{s} - \pi \left(\frac{\mathbf{k}}{1-\mathbf{d}} - h\right)^{\omega} + \left\{\frac{\gamma'}{\gamma} \left(\frac{\mathbf{k}}{1-\mathbf{d}} - h\right) + h'\right\} \dot{\theta} , \qquad (22)$$

wobei ϕ, π, ω nichtnegative, temperaturabhängige Materialfunktionen mit den Eigenschaften $0 \leq \phi \leq 1$ sind. Der erste Term der rechten Seite beschreibt die nichtlineare Verfestigung (strain hardening), der zweite die statische Erholung (recovery) und der dritte Term die Abhängigkeit von der Temperaturänderung.

2.2 Kinematische Verfestigung (B)

Es ist offensichtlich, daß (B) stets nichtnegativ ist, wenn der Term zwischen den geschweiften Klammern positiv proportional zu $\hat{\mathbf{Z}}/(1-d)$ ist. Durch die Wahl eines Proportionalitätsfaktors

$$\frac{b}{c}\dot{s} + \frac{p}{c} \left\| \frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}} \right\|^{\mathsf{w}-1} ,$$

mit $b = b(\theta), \ p = p(\theta), \ w = w(\theta) \ge 0$ folgt sofort

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)^{\nabla} = c\,\hat{\mathbf{D}}_p - b\,\dot{s}\,\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) - p\,\left\|\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right\|^{\mathsf{w}-1}\,\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) + \frac{c'}{c}\,\dot{\theta}\,\left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right)\,,\tag{23}$$

wobei $||\mathbf{A}|| = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ die euklidische Norm eines Tensors zweiter Stufe A darstellt. Die ersten beiden Terme der rechten Seite beschreiben ein Verfestigungsverhalten vom Armstrong-Frederick-Typ, der dritte Term die statische Erholung und der letzte Term die Abhängigkeit von der Temperaturänderung.

2.3 Schädigung (C)

Es wird unterstellt, daß sich der thermoelastische Anteil der spezifischen freien Energiefunktion in zwei Anteile

$$\Psi_{et}(t) = \bar{\Psi}_{et}\left(\hat{\Gamma}_{et}, \mathsf{d}, \theta\right) = \frac{(1-\mathsf{d})}{\rho_R} \bar{\mathrm{H}}\left(\hat{\Gamma}_{et}, \theta\right) + \frac{1}{\rho_R} \bar{\mathrm{K}}\left(\theta\right)$$
(24)

aufspalten läßt. Der erste Summand wird linear in (1–d) vorgegeben, wobei H eine isotrope Funktion von $\hat{\Gamma}_{et}$ und θ ist. $\hat{\mathbf{T}}$ und Ω_{et} ergeben sich aufgrund der Beziehungen (7, 9₁, 10) und (13) zu

$$\hat{\mathbf{T}} = \rho_R \frac{\partial \bar{\Psi}_{et}}{\partial \hat{\Gamma}_{et}} = (1 - \mathsf{d}) \frac{\partial \bar{\mathbf{H}}}{\partial \hat{\Gamma}_{et}} , \qquad (25)$$

$$\Omega_{et} = \rho_R \frac{\partial \Psi_{et}}{\partial \mathsf{d}} = -\bar{\mathrm{H}} \left(\hat{\Gamma}_{et}, \theta \right) .$$
(26)

Als Evolutionsgleichung für d wird nun

$$\dot{\mathsf{d}} = \left\{ a_0 + (a_1 + a_2 \, \mathsf{d}) \, \frac{(-\Omega_{et})^n}{(1-\mathsf{d})^q} \right\} \dot{s} , \qquad (27)$$

vorgeschlagen, wobei a_0, a_1, a_2, n, q nichtnegative temperaturabhängige Materialfunktionen sind. Es wird deutlich, daß unter der Voraussetzung $\overline{\mathrm{H}}(\hat{\Gamma}_{et}, \theta) \ge 0$ die Forderung $(C) \ge 0$ stets befriedigt ist. Beziehung (27) stellt eine Verallgemeinerung einer von Dhar et al. [2] vorgeschlagenen Evolutionsgleichung dar (n = 1, q = 0). Der Sonderfall $a_0 = a_2 = 0$ liefert eine von Lemaitre [9] formulierte Evolutionsgleichung.

Es kann gezeigt werden, daß für das Fourier'sche Wärmeleitungsgesetz $(D) \ge 0$ stets erfüllt wird.

2.4 Wärmeleitungsgleichung

Die noch fehlende Evolutionsgleichung für die Temperatur liefert der erste Hauptsatz der Thermodynamik, der relativ zur plastischen Zwischenkonfiguration die Form

$$\dot{\mathbf{e}} = \frac{1}{\rho_R} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}} - \frac{1}{\rho} (\hat{\operatorname{div}} \mathbf{q}) + \mathbf{r}_{w}$$
(28)

annimmt. Hierin sind e die spezifische inneren Energie und r_w die Wärmezufuhr pro Zeit- und Masseneinheit der Referenzkonfiguration. Mit Hilfe der Definition der spezifischen freien Energie

$$\Psi = e - \theta \eta_* \tag{29}$$

kann (28) in die Wärmeleitungsgleichung

$$c_{\varepsilon}\dot{\theta} - w_{et} = \mathbf{r}_{w} - \frac{1}{\rho}\operatorname{div}\mathbf{q} + w_{p} - \dot{\mathbf{e}}_{s} \quad , \tag{30}$$

überführt werden, wobei

$$c_{\varepsilon} := -\theta \,\frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \theta^2} = \theta \,\frac{\partial \eta_*}{\partial \theta} \tag{31}$$

der spezifischen Wärmekapazität bei konstanter Verzerrung entspricht. Der Term

$$w_{et} = \theta \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \theta \,\partial \hat{\Gamma}_{et}} \cdot \dot{\hat{\Gamma}}_{et} = \frac{\theta}{\rho_R} \frac{\partial \hat{\mathbf{T}}}{\partial \theta} \cdot \dot{\hat{\Gamma}}_{et}$$
(32)

beschreibt die thermoelastische Kopplung und

$$w_p = \frac{1}{\rho_R} \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}}_p \tag{33}$$

die spezifische plastische Spannungsleistung. Die Größe \dot{e}_s entspricht der in Form von innerer Energie im Material gespeicherten Leistung, die sich aus Beiträgen der inneren Variablen $\hat{\mathbf{Y}}, r$ und d gemäß

$$\dot{\mathbf{e}}_s = \dot{\mathbf{e}}_{sY} + \dot{\mathbf{e}}_{sr} + \dot{\mathbf{e}}_{sd} \tag{34}$$

zusammensetzt.

3 Vereinfachte konstitutive Beziehungen

Zur Erlangung eines effektiven Spannungsalgorithmus (s. Abschnitt 4) sind gewisse Vereinfachungen im Modell notwendig. Als erste Annahme wird unterstellt, daß in $(16)_2$ der zu $\hat{\mathbf{Z}}^2$ proportionale Term vernachlässigt werden kann, d.h.

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} \equiv \hat{\mathbf{Z}}$$
 (35)

Es kann gezeigt werden, daß diese Vereinfachung immer noch eine thermodynamisch konsistente kinematische Verfestigungsregel darstellt, vorausgesetzt der Materialparameter b erfüllt stets die Bedingung

$$b = b(\theta) \ge \sqrt{6} . \tag{36}$$

Dieselbe einschränkende Bedingung an die Materialkonstante b zeigte Kamlah [6] für ein Modell ohne Schädigung.

Als zweite Annahme werden kleine thermoelastische Verzerrungen

$$\left\|\hat{\Gamma}_{et}\right\| \ll 1 \tag{37}$$

unterstellt, wodurch mittels der polaren Zerlegung $\mathbf{F}_{et} = \mathbf{R}_{et}\mathbf{U}_{et}$, der thermoelastische Anteil von \mathbf{F} durch den thermoelastischen Anteil des eigentlich orthogonalen Rotationstensors \mathbf{R}

$$\mathbf{F}_{et} \approx \mathbf{R}_{et}$$
 (38)

angenähert werden kann. Aus (15) folgt weiterhin

$$\hat{\mathbf{P}} \approx \hat{\mathbf{T}}$$
 (39)

Ausgehend von einem Hyperelastizitätsgesetz der Form

$$\hat{\mathbf{T}} = (1-\mathsf{d}) \, \mathcal{C}[\hat{\Gamma}_e] \, \Leftrightarrow \, \frac{\hat{\mathbf{T}}}{1-\mathsf{d}} = \mathcal{C}[\hat{\Gamma}_e] = \mathcal{C}[\hat{\Gamma}_{et} - \alpha \, \Delta \theta_R \, \mathbf{1}] \quad , \tag{40}$$
kann durch Bildung der materiellen Zeitableitung und unter Berücksichtigung der Definitionen der unteren und oberen Oldroyd-Ableitungen (4,21) das Hyperelastizitätsgesetz in ein Hypoelastizitätsgesetz

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{T}}}{1-\mathsf{d}}\right)^{\nabla} = \mathcal{C}\left[\hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}}_{e}\right] + \dot{\theta}\frac{\partial\mathcal{C}}{\partial\theta}\left[\hat{\mathbf{\Gamma}}_{e}\right] - \mathcal{C}\left[\hat{\mathbf{L}}_{p}^{T}\hat{\mathbf{\Gamma}}_{e} + \hat{\mathbf{\Gamma}}_{e}\hat{\mathbf{L}}_{p}\right] - \hat{\mathbf{L}}_{p}\mathcal{C}\left[\hat{\mathbf{\Gamma}}_{e}\right] - \mathcal{C}\left[\hat{\mathbf{\Gamma}}_{e}\right]\hat{\mathbf{L}}_{p}^{T} , \qquad (41)$$

überführt werden. In (40) sind C ein Elastizitätstensor vierter Stufe, α der Wärmeausdehnungskoeffizient und $\Delta \theta_R$ die Differenz zwischen absoluter Temperatur θ und einer Bezugstemperatur θ_R . Werden im Rahmen der Annahme (37) zusätzlich in (41) die letzten vier Terme der rechten Seite vernachlässigt, resultiert

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{T}}}{1-\mathsf{d}}\right)^{\nabla} = \mathcal{C}\left[\hat{\hat{\Gamma}}_{e}\right] = \mathcal{C}\left[\hat{\hat{\Gamma}} - \hat{\hat{\Gamma}}_{p} - \hat{\hat{\Gamma}}_{t}\right].$$

$$(42)$$

Für den thermischen Anteil der Verzerrungsrate ergibt sich

$$\stackrel{\scriptscriptstyle \Delta}{\hat{\Gamma}}_t = (\alpha' \,\Delta \theta_R + \alpha) \,\dot{\theta} \,\mathbf{1} + \hat{\mathbf{L}}_p^T \,\hat{\Gamma}_t + \hat{\Gamma}_t \,\hat{\mathbf{L}}_p \quad, \tag{43}$$

wobei hierin die beiden letzten Terme der rechten Seite auch vernachlässigt werden können, d.h.

$$\stackrel{\scriptscriptstyle \Delta}{\hat{\Gamma}}_t = \left(\alpha' \,\Delta \theta_R \,+\, \alpha\right) \dot{\theta} \,\mathbf{1} \,\,. \tag{44}$$

Eine analoge Vorgehensweise führt auf folgende vereinfachte Beziehungen für die in die Wärmeleitungsgleichung (30) eingehenden Größen $c_{\varepsilon}, w_{et}, w_p$ und \dot{e}_s (s. hierzu [7]):

$$c_{\varepsilon} = \text{konst.}$$
 (45)

$$w_{et} = -\frac{\theta}{\rho_R} \, 3 \, \kappa \, (1 - \mathsf{d}) \, (\alpha' \, \Delta \theta_R + \alpha) \, \mathsf{Sp} \, \hat{\hat{\Gamma}}$$

$$\tag{46}$$

$$w_p = \frac{1}{\rho_R} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}}_p = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\dot{s}}{\rho_R} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{N}}$$
(47)

$$\dot{\mathbf{e}}_{sr} = \frac{(1-\mathsf{d})}{\rho_R} \left\{ \frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}} - \frac{\gamma'}{\gamma} \theta \left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}} - h \right) - h' \theta \right\} \dot{r}$$
(48)

$$\dot{\mathbf{e}}_{sY} = \frac{(1-\mathsf{d})}{\rho_R} C_Y \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{Y}}}$$
(49)

$$\dot{\mathbf{e}}_{sd} = -\frac{1}{\rho_R} \left\{ -\Omega_{et} + (\alpha' \Delta \theta_R + \alpha) \operatorname{Sp}\left(\frac{\hat{\mathbf{T}}}{1-\mathsf{d}}\right) \theta + \frac{C_r}{2\gamma} \left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}} - h\right)^2 + \frac{h-h'\theta}{\gamma} \left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}} - h\right) + \frac{C_Y}{2c} \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) \cdot \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1-\mathsf{d}}\right) \right\} \dot{\mathsf{d}} , \qquad (50)$$

mit

$$\hat{\mathbf{N}} = \frac{\left(\hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{Z}}\right)^{D}}{\sqrt{\left(\hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{Z}}\right)^{D} \cdot \left(\hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{Z}}\right)^{D}}}$$

$$C_{r} = 1 - \frac{\gamma'}{\gamma} \theta$$

$$C_{Y} = 1 - \frac{c'}{c} \theta$$

$$\dot{r} = \phi \left\{ 1 - \frac{\beta}{\gamma} \left(\frac{\mathsf{k}}{1 - \mathsf{d}} - h \right) \right\} \dot{s} - \frac{\pi}{\gamma} \left(\frac{\mathsf{k}}{1 - \mathsf{d}} - h \right)^{\omega}$$

$$\dot{\mathbf{Y}} = \frac{1}{c} \left\{ \sqrt{\frac{3}{2}} c \,\hat{\mathbf{N}} - b \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1 - \mathsf{d}} \right) + \sqrt{6} \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1 - \mathsf{d}} \right) \hat{\mathbf{N}} \right\} \dot{s} - \frac{p}{c} \left\| \frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1 - \mathsf{d}} \right\|^{w-1} \left(\frac{\hat{\mathbf{Z}}}{1 - \mathsf{d}} \right)$$

Es sind κ der Kompressionsmodul und SpA die Spur eines Tensors zweiter Stufe A. Es kann gezeigt werden, daß mit Hilfe von (38) bei der Transformation der konstitutiven Gleichungen (17, 18, 23, 42, 44, 46-50) in die Momentankonfiguration (mittels der Methode der dualen Variablen) die Größen $\hat{\mathbf{P}}$ bzw. $\hat{\mathbf{T}}$ durch S, $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ bzw. $\hat{\mathbf{Z}}$ durch Z, $\hat{\hat{\mathbf{\Gamma}}}$ durch D und $\hat{\mathbf{N}}$ durch N ersetzt werden.

4 Numerische Umsetzung

Die Integration des Systems der konstitutiven Gleichungen basiert auf einem Operator-Split-Verfahren mit 3 Operatoren, die nacheinander integriert werden (s. auch [5]). Dabei bilden die Lösungen aus Operator 1 (thermoelastischer Anteil) die Anfangswerte für den zweiten Operator (inelastischer Anteil), dessen Lösungen wiederum die Anfangswerte des dritten Operators darstellen. Die Lösungen des dritten Operators sind die gesuchten Lösungen des Differentialgleichungssystem zum Zeitpunkt $t+\Delta t$.

Zur Integration des Systems der konstitutiven Gleichungen bzgl. der letzten Gleichgewichtskonfiguration R_t (Update Lagrange) werden zunächst die bzgl. der gesuchten Momentankonfiguration $R_{t+\Delta t}$ formulierten objektiven Ableitungen nach ihren materiellen Zeitableitungen aufgelöst, wobei die untere und obere Oldroyd-Ableitung eines Tensors zweiter Stufe A relativ zur Momentankonfiguration durch

 $\stackrel{\Delta}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L}$ $\stackrel{\nabla}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} - \mathbf{L} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{L}^T$

gegeben sind (vgl. (4, 21)). Dies führt auf das auf der nächsten Seite in Tabelle 1 angegebene Differentialgleichungssystem.

	Operator 1: Thermoelastische Anteile	Operator 2: Inelastische Anteile	Operator 3: Erholungsterme
$\dot{s} =$		$\frac{\langleF\rangle^m}{\eta}$	
$\left(\frac{\mathbf{S}}{1-d}\right)$ =	$\mathbf{L}\left(\frac{\mathbf{S}}{1-d}\right) + \left(\frac{\mathbf{S}}{1-d}\right)\mathbf{L}^{T} + \mathcal{C}\left[\mathbf{D} - (\alpha + \alpha'\Delta\theta_{R})\dot{\theta}1\right]$	$-2\mu\sqrt{2\over 3}\dot{s}{f N}$	
$\left(\frac{k}{1-d}\right)$ =	$\left\{ \frac{\gamma'}{\gamma} \left(\frac{k}{1 - d} \! - \! h \right) + h' \right\} \dot{\theta}$	$+\phi \left\{ \gamma - \beta \left(\frac{k}{1-d} \!-\! h ight) ight\} \!\dot{s}$	$-\pi \left(\frac{k}{1-d} - h \right)^{\omega}$
$\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right)^{\cdot} =$	$\mathbf{L}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right) + \left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right)\mathbf{L}^{T} + \frac{c'}{c}\dot{\theta}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right)$	$+\left\{\sqrt{\frac{2}{3}}c\mathbf{N}-b\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d} ight) ight\}\dot{s}$	$-p \left\ \frac{\mathbf{Z}}{1-d} \right\ ^{w-1} \left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d} \right)$
d =		$\left\{a_0 + (a_1 + a_2 d) \frac{(-\Omega_{et})^n}{(1-d)^q}\right\} \dot{s}$	
mit			
$\mathbf{N} =$	$\frac{\left(\mathbf{S}\!-\!\mathbf{Z}\right)^{D}}{\sqrt{\left(\mathbf{S}\!-\!\mathbf{Z}\right)^{D}\!\cdot\left(\mathbf{S}\!-\!\mathbf{Z}\right)^{D}}}$		
$\Omega_{et} =$	$-\frac{1}{(1-d)^2} \left\{ \frac{1}{4\mu} \mathbf{S}^D \cdot \mathbf{S}^D + \frac{1}{6(2\mu+3\lambda)} \left(Sp\mathbf{S} \right)^2 \right\} \; ,$	μ,λ : Lamésche Konstanten	

Tab. 1: Das zulösende Gleichungssytem (vereinfachtes Materialmodell):

Ausgehend von einem gegebenen Zustand zum Zeitpunkt t wird nun die Lösung zum Zeitpunkt $t+\Delta t$ gesucht. Mit den Werten $\mathbf{S}(t)$, $\mathbf{k}(t)$, $\mathbf{Z}(t)$ und $\mathbf{d}(t)$ am Inkrementanfang und dem vom FE-Code vorgegebenen Zeitinkrement Δt , dem Verschiebungsinkrement $\Delta \mathbf{u}$ sowie dem Temperaturinkrement $\Delta \theta$ wird das in der Materialroutine zu lösende Anfangswertproblem gelöst.

4.1 Operator 1 (thermoelastischer Anteil)

Die Gleichungen in der ersten Spalte von Tabelle 1 werden mit Hilfe des Hughes-Winget-Algorithmus integriert. Dazu werden die Gleichungen mit Hilfe der Bar-Transformation (s. Weber [13]) gemäß

$$\overline{\mathbf{X}} = \mathbf{Q}^T \, \mathbf{X} \, \mathbf{Q} \tag{51}$$

in die letzte Gleichgewichtskonfiguration (Referenzkonfiguration) R_t zurückrotiert. Der eigentlich orthogonale Rotationstensor Q sei durch die Lösung des Anfangswertproblems

$$\mathbf{Q} = \mathbf{W} \mathbf{Q} \ , \ \mathbf{Q}(t) = \mathbf{1} \tag{52}$$

gegeben. Es kann nun gezeigt werden, daß die Bar-Transformation die Jauman-Ableitung $\overset{\circ}{\mathbf{X}} = \dot{\mathbf{X}} - \mathbf{W}\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{W}^T$ in die materielle Zeitableitung $\dot{\overline{\mathbf{X}}}$ überführt, d.h.

$$\dot{\overline{\mathbf{X}}} = \mathbf{Q}^T \stackrel{\circ}{\mathbf{X}} \mathbf{Q} \ . \tag{53}$$

Da
$$\mathbf{\tilde{X}} = \mathbf{\tilde{X}} - \mathbf{D}\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{D}$$
 gilt, folgt mit (51)
 $\mathbf{\overline{X}} = \mathbf{Q}^T \mathbf{\tilde{X}} \mathbf{Q} + \mathbf{\overline{D}}\mathbf{\overline{X}} - \mathbf{\overline{X}}\mathbf{\overline{D}}$. (54)

Mit anderen Worten, ein Anfangswertproblem

$$\overset{\vee}{\mathbf{X}} = \mathcal{M}[\mathbf{D}, \Delta\theta],\tag{55}$$

mit $\mathbf{X}_0 =: \mathbf{X}(t)$, wird mit Hilfe der Bar-Transformation in

$$\overline{\mathbf{X}} = \overline{\mathbf{X}} \overline{\mathbf{D}} + \overline{\mathbf{D}} \overline{\mathbf{X}} + \mathcal{M}[\overline{\mathbf{D}}, \Delta\theta], \ \overline{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_0$$
(56)

überführt. Die Integration erfolgt nun (analytisch) mit Hilfe der Mittelpunktsregel

$${}^{I}\overline{\mathbf{X}}_{1} = \mathbf{X}_{0} + \Delta t \,{}^{I} \frac{\dot{\mathbf{X}}_{1}}{\mathbf{X}_{\frac{1}{2}}} \tag{57}$$

und eine anschließende Transformation in $R_{t+\Delta t}$ liefert

 ${}^{I}s_{1} = s_{0} \qquad {}^{I}\mathbf{S}_{1} = {}^{I}\tilde{\mathbf{S}}_{1}(\Delta\boldsymbol{\epsilon},\Delta\boldsymbol{\theta},\mathbf{Q}_{1})$ ${}^{I}\mathbf{k}_{1} = {}^{I}\tilde{\mathbf{k}}_{1}(\Delta\boldsymbol{\epsilon},\Delta\boldsymbol{\theta},\mathbf{Q}_{1}) \qquad {}^{I}\mathbf{Z}_{1} = {}^{I}\tilde{\mathbf{Z}}_{1}(\Delta\boldsymbol{\epsilon},\Delta\boldsymbol{\theta},\mathbf{Q}_{1})$ ${}^{I}\mathbf{d}_{1} = \mathbf{d}_{0}$

Unter der Annahme, daß sich der Geschwindigkeitsgradient $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}$ innerhalb des Zeitinkrements nicht ändert, folgt sofort, daß dessen symmetrischer Anteil \mathbf{D} und dessen antisymmetrischer Anteil \mathbf{W} konstant sind. Daraus folgt wiederum

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon} := \Delta t \mathbf{D} = \text{konst.}$$
(58)

Es kann gezeigt werden, daß für $\mathbf{L}=$ konst. \mathbf{Q}_1 durch

$$\mathbf{Q}_{1} = \left(\mathbf{1} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{W}\right)^{-1} \left(\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{W}\right)$$
(59)

gegeben ist.

4.2 Operator 2 (inelastischer Anteil)

Die Anfangswerte der im Operator 2 zu integrierenden Größen sind durch

$${}^{II}s_0 = s_0, \; {}^{II}\mathbf{S}_0 = {}^{I}\mathbf{S}_1, \; {}^{II}\mathbf{k}_0 = {}^{I}\mathbf{k}_1, \; {}^{II}\mathbf{Z}_0 = {}^{I}\mathbf{Z}_1, \; {}^{II}d_0 = d_0, \tag{60}$$

gegebenen. Die Fließfunktion am Ende des ersten Schritts lautet somit

$${}^{I}\mathsf{F}_{1} = \bar{\mathsf{F}}({}^{I}\mathsf{S}_{1}, {}^{I}\mathsf{Z}_{1}, {}^{I}\mathsf{k}_{1}, {}^{I}\mathsf{d}_{1}) = \sqrt{\frac{3}{2}}{}^{I}\left(\frac{\mathsf{S}-\mathsf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1}^{D} \cdot {}^{I}\left(\frac{\mathsf{S}-\mathsf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1}^{D} - {}^{I}\left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1}^{D} .$$
(61)

Im Falle inelastischer Belastung, F > 0, werden die Gleichungen implizit gemäß der Vorschrift

$$^{II}\mathbf{X}_{1} = {}^{I}\mathbf{X}_{1} + \Delta t {}^{II}\dot{\mathbf{X}}_{1}$$
(62)

integriert. Dazu wird zunächst ein plastischer Multiplikator

$$\Lambda_1 := \Delta t \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{s} \bigg|_{t+\Delta t} = \Delta t \sqrt{\frac{3}{2}} \left. \frac{\langle \mathsf{F} \rangle^m}{\eta} \right|_{t+\Delta t}$$
(63)

eingeführt. Damit läßt sich das Gleichungssystem wie folgt darstellen:

$${}^{II}s_1 = s_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\Lambda_1 \tag{64}$$

$${}^{II}\left(\frac{\mathbf{S}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} = {}^{I}\left(\frac{\mathbf{S}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} - 2\,\mu_{1}\,\Lambda_{1}{}^{II}\mathbf{N}_{1}$$

$$(65)$$

$$\binom{II}{1-d}_{1} = \frac{1}{1+\sqrt{\frac{2}{3}}\beta_{1}\phi_{1}\Lambda_{1}} \left\{ \binom{I}{1-d}_{1} + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{1}\Lambda_{1}(\gamma_{1}+\beta_{1}h_{1}) \right\}$$
(66)

$$\binom{II}{1-\mathsf{d}}_{1} = \frac{1}{1+\sqrt{\frac{2}{3}}b_{1}\Lambda_{1}} \left\{ I\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} + c_{1}\Lambda_{1}^{II}\mathbf{N}_{1} \right\}$$

$$(67)$$

$${}^{II}\mathsf{d}_{1} = \mathsf{d}_{0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ a_{0_{1}} + (a_{1_{1}} + a_{2_{1}} \mathsf{d}) \frac{(-{}^{II}\Omega_{et_{1}})^{n_{1}}}{(1 - {}^{II}\mathsf{d})^{q_{1}}_{1}} \right\} \Lambda_{1} , \qquad (68)$$

mit

$${}^{II}\mathbf{N}_{1} = {}^{II} \left(\frac{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^{D}}{\sqrt{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^{D} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{Z})^{D}}} \right)_{1}$$

$${}^{II}\Omega_{et_{1}} = -\frac{1}{4\mu_{1}} {}^{II} \left(\frac{\mathbf{S}}{1 - \mathsf{d}} \right)_{1}^{D} \cdot {}^{II} \left(\frac{\mathbf{S}}{1 - \mathsf{d}} \right)_{1}^{D} - \frac{1}{6(2\mu_{1} + 3\lambda_{1})} \left\{ \mathsf{Sp}^{II} \left(\frac{\mathbf{S}}{1 - \mathsf{d}} \right)_{1} \right\}^{2}$$

Es handelt sich somit um ein System aus 15 Gleichungen, jeweils 6 für den gewichteten Cauchy'schen Spannungstensor und die kinematische Verfestigung sowie jeweils eine Gleichung für s, k und d. Unter Einbeziehung der Fließfunktion (61) gelingt es nun die 15 Gleichungen auf 2 skalarwertige Tensorfunktionen

$${}^{II}\Phi = {}^{II}\tilde{\Phi} (\Delta \boldsymbol{\varepsilon}, \Delta \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Q}_{1}, \Lambda_{1}) = 0$$
$${}^{II}\Gamma = {}^{II}\tilde{\Gamma} (\Delta \boldsymbol{\varepsilon}, \Delta \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Q}_{1}, \Lambda_{1}, {}^{II}\mathsf{d}_{1}) = 0$$

zu reduzieren. Die beiden unbekannten Größen Λ_1 und ${}^{II}d_1$ werden mit Hilfe des Newton-Verfahrens numerisch ermittelt, wobei zuerst aus ${}^{II}\Phi$ die Unbekannte Λ_1 und damit anschließend ${}^{II}d_1$ bestimmt wird. Einsetzen von Λ_1 und ${}^{II}d_1$ in (64 – 67) liefert schließlich die gesuchten Lösungen für s = ${}^{II}s_1$, $\mathbf{S} = {}^{II}\mathbf{S}_1$, ${}^{II}\mathbf{k}_1$ und ${}^{II}\mathbf{Z}_1$.

4.3 Operator 3 (recovery Anteil)

Die noch verbleibenden Gleichungen für die Erholungsterme der isotropen und kinematischen Verfestigung werden ebenfalls implizit integriert. Es folgt

$${}^{III}\left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} = {}^{II}\left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} - \Delta t \,\pi_{1} \left({}^{III}\left(\frac{\mathsf{k}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} - h_{1}\right)^{\omega_{1}} \tag{69}$$

$${}^{II}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} = {}^{II}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} - \Delta t \, p_{1} \left\| {}^{III}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} \right\| {}^{\mathsf{w}_{1}-1} {}^{III}\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathsf{d}}\right)_{1} \,.$$

$$(70)$$

Es gelingt auch hier, das Gleichungssystem, in diesem Falle 7 Gleichungen, auf zwei skalarwertige Tensorfunktionen

$${}^{III} \Phi = {}^{III} \tilde{\Phi} (\Delta \varepsilon, \Delta \theta, \mathbf{Q}_1, {}^{II} \mathsf{d}_1, {}^{III} \mathsf{k}_1) = 0$$
$${}^{III} \Gamma = {}^{III} \tilde{\Gamma} (\Delta \varepsilon, \Delta \theta, \mathbf{Q}_1, \Lambda_1, {}^{II} \mathsf{d}_1, \| {}^{III} \mathbf{Z}_1 \|) = 0$$

mit den Unbekannten ^{III} k₁ und $\|^{III} \mathbf{Z}_1\|$ zu reduzieren. Die mit dem Newton-Verfahren ermittelten Größen liefern die gesuchten Lösungen k = III k₁ und $\mathbf{Z} = {}^{III} \mathbf{Z}_1$.

4.4 Wärmeleitungsgleichung

In ABAQUS müssen bei thermomechanisch gekoppelten Problemen die in die Wärmeleitungsgleichung (30) eingehenden Größen w_{et} , w_p und \dot{e}_s von der Materialroutine bereitgestellt werden. Diese berechnen sich aus den in die Momentankonfiguration transformierten Beziehungen (46-50) (s. hierzu die Bemerkungen am Ende von Kapitel 3), unter Beachtung von (58), für die am Inkrementende ermittelten Spannungen.

4.5 Beiträge zur konsistenten Tangente

Weiterhin erwartet ABAQUS zur Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix die Beiträge

 $\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \;, \;\; \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \Delta \boldsymbol{\theta}} \;, \;\; \frac{\partial w}{\partial \Delta \boldsymbol{\epsilon}} \;, \;\; \frac{\partial w}{\partial \Delta \boldsymbol{\theta}}$

aus der Materialroutine. Diese Beiträge werden analytisch berechnet. Auf eine Darstellung der Ergebnisse wird im Rahmen dieses Berichts verzichtet und auf die Arbeit von Lämmer [7] verwiesen.

5 Validierung und Beispiele

5.1 Validierung der vereinfachten konstitutiven Gleichungen

Im folgenden wird der Einfluß der Vereinfachungen auf die Materialantworten des Stoffgesetzes am Beispiel des einachsigen, homogenen Zugs aufgezeigt. Dazu wurde das vereinfachte Materialmodell einachsig formuliert und mit Hilfe eines Runge-Kutta-Verfahrens 4. Ordnung numerisch integriert. Zum Vergleich wurden die Materialantworten für ein weiteres Modell berechnet, das auf einem von Simo [11] vorgeschlagenen Hyperelastizitätsgesetz und der mit der exakten Definition von $\boldsymbol{\xi}$ (16) formulierten Fließfunktion basiert. Beide Modelle wurden jedoch für kleine thermoelastische Verzerrungen formuliert. Die technische Dehnrate $\dot{\varepsilon}_t(t)$ wurde so vorgegeben, daß die in Abb. 1 dargestellte zyklische Belastung mit Haltezeiten entstand.

Die Materialparameter wurden in diesem Beispiel in temperaturunabhängiger Form vorgegeben. Es wurde folgender Parametersatz angenommen:

$\rho_0 =$	$7.85\cdot10^3~\mathrm{kg/m}^3$	$\phi =$	1.0	p =	10^{-4} MPa ^{1-W} /s
$c_{\epsilon} =$	$540.0 \ \mathrm{J/(kgK)}$	$\beta =$	10.0	w =	1.5
E =	200.0 GPa	$\gamma =$	1500.0 MPa	$a_0 =$	0.1
$\nu =$	0.3	$h = k_0 =$	100.0 MPa	$a_1 =$	0.2
$\alpha =$	0.0 1/K	$\pi =$	$10^{-4}~{ m MPa}^{1-\omega}/{ m s}$	$a_2 =$	0.8
$\theta_R =$	293.0 K	$\omega =$	1.5	n =	0.01
m =	7.0	b =	10.0	q =	5.0
$\eta =$	$10^{16} \mathrm{MPa}^m \mathrm{s}$	<i>c</i> =	2500.0 MPa		

Tab 2: Die verwendeten Materialparameter (temperaturunabhängig)

In Abbildung 1 sind minimale Unterschiede bei der 11-Komponente des gewichteten Cauchy'schen Spannungstensors, S₁₁, erkennbar, die anderen Kurvenverläufe sind nahezu deckungsgleich. Der Unterschied zwischen ξ_{11} und Z₁₁ liegt in derselben Größenordnung wie zwischen S₁₁ aus den beiden Ansätzen des Translationstensors der kinematischen Verfestigung $\hat{\xi}$. Für hinreichend große Werte von *c* ist somit die Vereinfachung zulässig, selbst wenn die Schädigung gegen 1 strebt, da die Evolutionsgleichung von Z so formuliert wurde, daß Z für voll geschädigtes Material (d=1) verschwindet (s. hierzu [8]).



Abb. 1: Vergleich der mit Runge-Kutta aus den beiden Modellen berechneten Materialantworten (kleine thermoelastische Verzerrungen). Vorgegeben wurden die Dehnrate $\dot{\varepsilon}_t(t)$ und die Materialparameter aus Tabelle 2.

5.2 Validierung des Operator-Split-Verfahrens

Für dieselbe Lastgeschichte und dieselben Materialparameter wie im vorherigen Abschnitt wurde mit ABAQUS die Materialantwort berechnet. Hierzu wurde ein einziges axialsymmetrisches, 8-knotiges Element verwendet. Die maximale Schrittweite wurde im FE-Lauf auf eine Sekunde beschränkt. Wie Abbildung 2 verdeutlicht, zeigen sich nahezu deckungsgleiche Verläufe der mit dem Runge-Kutta-Verfahren für das vereinfachte Materialmodell und den mit ABAQUS ermittelten Materialantworten. Weitere Rechnungen (s. z.B. [5]) ergaben auch bei größeren maximalen Schrittweiten eine sehr gute Übereinstimmung mit den Runge-Kutta Lösungen, vorausgesetzt es findet innerhalb des Zeitinkrements kein Wechsel von elastischer Belastung auf inelastische Belastung statt (erstmalige inelastische Belastung oder inelastische Wiederbelastung).

5.3 Simulation eines Zugversuchs

Abbildung 3 zeigt die Verformungslokalisierung eines axialsymmetrischen Stabes sowie einer dünnen Platte (ebener Dehnungszustand). Es wurden dasselbe FE-Netz, jedoch unterschiedliche Elementtypen verwendet. Die Knoten am oberen Ende wurden in axialer Richtung verschoben, am unteren Ende und an der linken Seite der Geometrie wurde eine Symmetriebedingung unterstellt. An der rechten Seite der Geometrie und am oberen Ende des Netzes wurde zusätzlich noch ein Wärmeübergangskoeffizient vorgegeben, wodurch sich bei zunehmender Verformung ein inhomogenes Temperaturfeld einstellt. Dieses Temperaturfeld führte durch Vorgabe zweier temperaturabhängiger Materialparametersätze zu der aus Experimenten hinreichend bekannten Einschnürung des Zugstabs bzw. zur Ausbildung eines Scherbandes.



Abb. 2: Vergleich der mit Runge-Kutta (vereinfachtes Modell) und den mit ABAQUS berechneten Materialantworten. Vorgegeben wurden die Dehnrate $\dot{\varepsilon}_t(t)$ und die Materialparameter aus Tabelle 2.



- 180 --

Literatur

- COLEMAN, B.D. and M.E. GURTIN: Thermodynamics with internal state variables. J.Chem.Phys., 47(2), 597-613, (1967).
- [2] DHAR, S., R. SETHURAMAN, and P.M. DIXIT: A continuum damage mechanics model for void growth and micro crack initiation. Eng.Fract.Mech., 53(6), 917–928, (1996).
- [3] HAUPT, P. and CH. TSAKMAKIS: On the application of dual variables in continuum mechanics. Continuum Mech.Thermodyn., 1, 165–196, (1989).
- [4] HAUPT, P. and CH. TSAKMAKIS: Stress tensors associated with deformation tensors via duality. Arch.Mech., (1996).
- [5] JANSOHN, W.: Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität und -viskoplastizität. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), (1996).
- [6] KAMLAH, M.: Zur Modellierung des Verfestigungsverhaltens von Materialien mit statischer Hysterese im Rahmen der phänomenologischen Thermodynamik. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, (1994).
- [7] LÄMMER, H. Dissertation in Vorbereitung, (1997).
- [8] LÄMMER, H., B. RITTER und CH. TSAKMAKIS: Untersuchungen zum Versagen des Reaktordruckbehälters unter hohem Innendruck. In HÜPER, R. (Herausgeber): Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1995, Seiten 129–141, (1996).
- [9] LEMAITRE, J.: Formulation unifiée des lois d'évolution d'endommagement.
 C.R.Acad.Sci.Paris, Série II, pages 1125–1130, (1987).
- [10] LEMAITRE, J. and J.L. CHABOCHE: Mechanics of Solid Materials. Cambridge University Press, (1990).
- [11] SIMO, J.C: On the computational significance of the intermediate configuration and hyperelastic stress relations in finite deformation elastoplasticity. Mechanics of Materials, 4, 439–451, (1985).
- [12] TSAKMAKIS, CH.: Kinematic hardening rules in finite plasticity part I: A constitutive approach. Continuum Mech.Thermodyn., 8(4), 213–231, (1996).
- [13] WEBER, G.G.A.: Computational Procedures for a New Class of Finite Deformation Elastic-Plastic Constitutive Equations. Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology, (1988).

II. <u>Druckaufbau bei spätem Fluten in einem 'Station Blackout'</u>(W. Baumann, G. Jacobs, M. Lau, L. Meyer, INR)

Abstract

This topic deals with the pressure build-up during a station blackout. The question whether a pressure increase in the order of 2 MPa could occur after depressurization measures following a core melt-down, was investigated in different approaches. From the results it can be concluded that such a pressure increase cannot be excluded when the water injection is re-established.

Zusammenfassung

Die Frage, ob in einem 'station blackout' nach Niederschmelzen des Kerns und einer gezielten Druckentlastung eine Druckerhöhung in der Größenordnung von 2 MPa durch Wiedereinspeisung von Wasser in das Primärsystem möglich ist, wurde mit verschiedenen Mitteln bearbeitet. Zunächst wurden die wichtigsten Einflußgrößen identifiziert und eine globale Größenabschätzung der möglichen Verdampfungs- und Abströmraten und damit der Druckerhöhung vorgenommen. Als nächstes wurde mit dem 'lumped parameter' Code CONTAIN eine Parameterstudie durchgeführt, mit dem Ziel, den Einfluß der Anfangsbedingungen auf den Druckaufbau zu untersuchen. Als wichtigste Parameter wurden die Größe und die Temperatur der Oberfläche der Reststrukturen identifiziert. Mit realistischen Annahmen für diese Größen ist eine Druckerhöhung im RDB auf 2 MPa möglich. Schließlich wurde eine detaillierte Analyse mit SCDAP/relap5 durchgeführt. Das Rechenergebnis zeigt, daß der Druck innerhalb von 300 s nach Beginn der Einspeisung auf über 2 MPa ansteigt, und zwar bei maximaler Pumpenförderung und offenen Entlastungsventilen. Die massive Nettodampfproduktion ist hauptsächlich auf Wärmeentspeicherung der hocherhitzten Strukturen zurückzuführen. Die die SCDAP/relap5-Ergebnisse sind als vorläufig zu betrachten, weil ein Teil des Programms (COUPLE) nicht funktionsfähig war. Dennoch kann aus dem SCDAP/relap5-Ergebnis der Schluß gezogen werden, daß im Falle eines späten Wiederfluten ein Druckaufbau im Bereich von 2 MPa nicht ausgeschlossen werden kann.

1. EINLEITUNG

Eine frühe, primärseitige Druckentlastung soll beim EPR Hochdruckszenarien ausschließen und dafür sorgen, daß der Versagensdruck, d. h. der Primärsystemdruck zum Zeitpunkt des RDB-Versagens, unter 2 MPa bleibt. Daß aber auch bei einem relativ niedrigen Versagensdruck (1 - 2 MPa) Kernschmelze in der Reaktorgrube dispergieren kann, lehren die Ergebnisse der amerikanischen 'Direct Containment'-Forschung [1]. Die langfristige Kühlung der Kernschmelze nach einem Versagen des RDB setzt beim gegenwärtigen Konzept des EPR voraus, daß die Kernschmelze zunächst in der Reaktorgrube gehalten werden kann, um dann in einen Ausbreitungsraum geleitet zu werden. Eine Coriumschmelze-Dispersion könnte jedoch den Austrag einer größeren Menge Coriumdebris in die angrenzenden Räume des Containments zur Folge haben. Damit würde die Wirksamkeit der Schmelze-Kühleinrichtung im Ausbreitungsraum beeinträchtigt.

Die Problematik der Schmelzedispersion bei (relativ) niedrigem Versagensdruck wird in diesem Vorhaben sowohl analytisch als auch experimentell untersucht. Auf experimenteller Seite befindet sich eine Versuchsanlage (DISCO = Dispersal of Simulated Corium melt) für Dispersionsexperimente mit Wasser und Woodsmetall in der Entwurfsphase. Ferner sind integrale Simulationsexperimente mit Thermit-Schmelze in der Planung. Die Möglichkeit des Druckaufbaus bei spätem Wiederfluten wurde mit einfachen Abschätzungen und Rechnungen mit dem Containmentcode CONTAIN als auch mit detaillierteren SCDAP/relap5-Rechnungen untersucht.

Betrachtet wurde der sog. 'Station Blackout', ein Szenario, das ausgelöst wird durch den Ausfall der Fremdstromversorgung (LOOP, Loss of Offsite Power), weil es im Falle einer späten Wiederkehr der Stromversorgung trotz früher Druckentlastung zu einem unerwünschten Druckaufbau kommen kann, wenn nämlich mit der Stromversorgung automatisch die Förderung der Noteinspeisepumpen beginnt. In diesem Fall kann es unter Umständen durch Verdampfung des eingespeisten Wassers zu einem höheren Versagensdruck kommen.

Nach dem gegenwärtigen Stand wird das Druckentlastungssystem durch die drei Sicherheitsventile am Druckhalter dargestellt. Die Entlastungsventile werden geöffnet, wenn eines der beiden folgenden Kriterien erfüllt ist: (a) der Wasserstand im RDB sinkt unter 1 m über Kernoberkante (b) die Kühlmitteltemperatur am Kernaustritt übersteigt 923 K. Der nominale Ventildurchsatz beträgt 250 kg/s Sattdampf bei 17.6 MPa, was einer Wärmeabfuhr von ca. 600 MW entspricht. Nach dem Öffnen der Entlastungsventile sinkt der Druck schnell unter den Ansprechdruck der Akkumulatoren, aus denen dann Wasser eingespeist wird, wodurch der Beginn des Kernschmelzens um etwa 100 min hinausgeschoben wird. Einschlägige Rechnungen zeigen [2], daß etwa 6 h nach dem auslösenden Ereignis die Kernschmelze sich ins untere Plenum verlagert hat. Etwa 30 min später, wenn die Wand der unteren Kalotte soweit geschädigt ist, daß ein thermisches Kriechversagen droht, beginnt ein kritisches Zeitintervall für die Stromwiederkehr, kritisch in Hinsicht auf einen höheren Versagensdruck. Der Versagensdruck ist neben der Art und Größe des Versagensloches im Reaktordruckbehälter die einflußreichste Anfangsbedingung für die Coriumschmelzedispersion. Deshalb ist es wichtig, in diesem Punkte größere Klarheit zu bekommen.

Solange noch Restwasser im RDB verdampft und der Druck nicht unter 0.8 MPa sinkt, kann die Nachwärme, die zu diesem Zeitpunkt etwa 0.8 % oder 34 MW beträgt, über die Entlastungsventile sicher abgeführt werden. Sobald alles Restwasser verdampft oder der Druck unter 0.8 MPa gefallen ist, kann die erzeugte Nachwärme nicht mehr vollständig abgeführt werden; denn bei 0.8 MPa ist die Ventilkapazität ca. 10 kg/s, was einer Wärmeabfuhr von nur 30 MW entspricht. Als Folge davon heizt das Corium die Strukturen durch Strahlung und Konvektion weiter auf. Mit der späten Wasserinjektion setzt eine intensive Verdampfung des eingepumpten Wassers ein.

Diese Verdampfungsrate hängt von vielen Parametern ab. Die Bedingungen, die den Druckaufbau bestimmen, sind zum einen relativ genau definierbare Größen, wie Querschnittsfläche der Entlastungsventile, Volumina der beteiligten Räume und Massenstrom des Kühlwassers und zum anderen weniger genau bestimmbare Größen, wie die Oberflächen der Wärmequellen und deren Temperaturen, also des Schmelzepools, der Kernstrukturen und der Wände des RDB und des Kühlsystems. Da der Druckaufbau innerhalb weniger Minuten erfolgen wird, ist die Größe der beteiligten Massen ein Effekt zweiter Ordnung. Die Höhe der Nachwärmeleistung ist von noch untergeordneterer Bedeutung, sie bestimmt allerdings den Zustand des Schmelzepools zum Zeitpunkt der Einspeisung und die Art eines möglichen Versagens der RDB-Kalotte. Die Eingrenzung des möglichen Bereichs, in dem sich die zweite Gruppe der Parameter bewegen kann, erfolgt z. Zt. mit Rechnungen mit SCDAP/RELAP5 für verschiedene Unfallszenarien [3]. Aussagen über den Zustand des Schmelzepools können erst in Zukunft erwartet werden, durch Experimente und Rechnungen mit Codes, wie z. Bsp. TOLBIAC.

2. ANALYSE DER EINFLUSSPARAMETER AUF DEN DRUCKAUFBAU

2.1 Anfangs-und Randbedingungen

Druckentlastung. Die Entlastungsventile sollen einen Durchfluß von m=250 kg/s bei einem Druck von 17.6 MPa haben, das entspricht einem Volumenstrom von v = 2 m³/s. Aus diesen Größen ergibt sich eine Querschnittsfläche von ca. 90 cm². Über die Ausflußcharakteristik und die Länge und den Durchmesser der Zuleitungen zu den Ventilen liegen keine Daten vor.

Volumen. Das Volumen setzt sich zusammen aus dem des RDB und dem des RCS (Reactor Cooling System), mit $V_{RDB} = 150 \text{ m}^3$, $V_{RCS} = 290 \text{ m}^3$, was ein Gesamtvolumen von $V_{total} = 440 \text{ m}^3$ ergibt. Der RDB hat einen Innenradius von ca. 2.50 m und eine Höhe von ca. 12 m. Das RCS-Volumen besteht aus jeweils vier kalten Strängen und vier heißen Strängen, den Pumpen, den Wärmetauschern und dem Druckhalter. Die Stellung von Schiebern und Ventilen ist nicht bekannt. Da zudem der Druckaufbau ein dynamischer Vorgang von kurzer Zeitdauer (60 - 600 s) sein wird, kann u.U. nur ein Teil dieses Volumens als Speicher teilnehmen.

Anfangsdruck. Es wird vollständige Entlastung mit einem Anfangsdruck von $p_0 = 0.1$ MPa angenommen.

Schmelzemenge. Die gesamte Masse des Brennstoffinventars beträgt $m_{UO2} = 138$ Mg, die des Zircalloys $m_{Zr} = 41$ Mg. Die Gesamtmasse des geschmolzenen Coriums ist ca. $m_{Cor} = 180$ Mg. Das minimale Schmelzevolumen, das sich im 'lower head' befinden muß, damit der maximale Radius von ca. 2.5 m erreicht wird, beträgt ca. 16.5 m³ (bei einer Höhe in der Mitte von 1.50 m). Die entsprechende Masse beträgt $m_{pool} = 120$ Mg, mit einer Brennstoffmasse von $m_{UO2} = 92$ Mg.

Nachzerfallswärme. Die Nachwärmeleistung bei 4250 MW_{th} nach 876 Vollasttagen und 5 Stunden nach Abschalten beträgt Q = 35 MW, entsprechend q = 0.25 MW/Mg UO_2 und q''' = 2.0 MW/m³ UO_2 . Die Wärmeleistung des Schmelzepools von 92 Mg UO_2 ist Q = 23 MW.

Wärmeaustauschfläche des Schmelzepools. Die maximale Wärmeaustauschfläche des Schmelzepools bei glatter Oberfläche beträgt bei einem Radius von 2.5 m $A_m = 20$ m². Allerdings kann sie auch größer sein bei teilgeschmolzenen Massen oder Krustenformationen.

Temperatur des Schmelzepools. Die Temperatur des Schmelzepools zum Zeitpunkt der Einspeisung von Wasser in den RDB muß parametrisch behandelt werden, da dies abhängig vom Szenario ist. Die Temperatur wird nicht uniform sein, sondern zumindest an der RDB-Wand wird sich eine Kruste gebildet haben (auch ohne Außenkühlung des RDB). Die Oberfächentemperatur hängt einerseits von der Ausbildung einer Konvektion im Pool und andererseits von der Bildung einer (Stahl-) Metallschicht an der Oberfläche ab. Auch ohne Metallschicht wird die Bildung einer Kruste vorausgesagt, obwohl es dafür keine gesicherten Daten gibt. Werden Krusteninseln gebildet, so können diese aufgrund ihrer höheren Dichte absinken und die Konvektion anfachen. Gasanteile in der Schmelze könnten die Dichte der Kruste verringern aber auch die Konvektion verstärken. Die Kruste kann auch zerstört werden durch sequentielles Herabfließen von Schmelze in den unteren Pool. Durch eine Kruste wird der Wärmetransport durch Wärmeleitung begrenzt. Die Anfangstemperatur der Schmelzepooloberfläche liegt zwischen T_{m0} = 2000 K mit Kruste und T_{m0} = 3500 K ohne Kruste.

Kernstrukturen und Wände. Es können noch ungeschmolzene Kernstrukturen am Kernrand stehen, oder an Strukturen oder Wänden können sich noch feste bzw. teilgeschmolzene Massen aus Stahl und Brennstoff befinden. Die Oberfläche dieser Strukturen ist unbestimmt und muß parametrisch behandelt werden. Die Fläche des intakten Kerns beträgt ca. 2000 m². Für die Berechnung des Druckaufbaus können die Parameter in den folgenden Bereichen variiert werden: die Fläche A_{Str} = 50 - 600 m² mit der Oberflächentemperatur T_{Str} = 1500 - 2000 K; die Wände des RDB, der Gitterplatte und des Reflektors A_{RDB} = 200 - 400 m², mit der Oberflächentemperatur T_{RDB} = 700 - 1200 K; die Oberfläche der Kühlkreisläufe hängt von der Größe des einbezogenen Volumens ab; die Wände des RCS A_{RCS} = 200 - 1000 m² mit der Oberflächentemperatur der Innenseite T_{RCS} = 500 - 1000 K.

Eingespeiste Wassermenge. Die Einspeisung des Wassers erfolgt über 4 Niederdruck- und 4 Mitteldruckpumpen in die 'cold legs'. Die Förderkapazität der Niederdruckpumpen ohne Gegendruck liegt bei ca. 600 kg/s und sinkt auf 200 kg/s bei einem Druck von 2.6 MPa. Bei diesem Druck fördern die Mitteldruckpumpen ebenfalls 200 kg/s. Deren Förderkapazität fällt nur langsam ab und beträgt noch 100 kg/s bei 11.5 MPa. Da es möglich ist, daß nur ein Teil der Pumpen funktioniert, muß mit einer minimalen Einspeisemenge von ¼ von 200 kg/s gerechnet werden also, m_w = 50 - 600 kg/s. Die Temperatur des Wassers wird angenommen zu T_w = 300 K. Die Art der Einspeisung bestimmt entscheidend die Verdampfungs- und Rekondensationsrate und damit den Druckaufbau im RDB. Im einfachsten Fall läuft das Wasser in einem kompakten Strom in das untere Plenum und bildet über der Schmelze einen Wasserpool. Der Wärmetransport vom Schmelzepool an das Wasser ist relativ genau bestimmbar. Wird das Wasser in einem Strahl oder Spray in den RDB eingebracht, so hängt die Verdampfungsrate von der Tröpfchengröße ab, und davon, ob das Wasser die Strukturen und Wände trifft.

2.2 Globale Größenabschätzung

Mit der Druckentlastung von v = 2 m³/s ergeben sich die folgenden Dampfmassenströme:

р	m
[MPa]	[kg/s]
17,6	250
2,0	20
1,0	10
0,5	5.3
0,3	3.3

Die Verdampfungsrate m_v bei einem Wärmetransport allein durch Strahlung von einer Fläche mit A = 20 m² ergibt sich mit

	α = ε	σT^4 mit	σ=5 ε=	5.67 10 ⁻¹¹ kW K ⁻⁴ m ⁻² , 0.8
zu:		und	∆h _v ≈	2000 kJ/kg
	T	Q A=20 m ²	m _v	-
	[K]	[MW]	[kg/s]	
	2000	9	4.5	-
	2500	22	11	
	3000	46	23	_

Mit einer Oberfläche von 20 m² und einer Oberflächentemperatur von 2000 K ist demnach keine Drucksteigerung über 0.3 MPa zu erwarten, während bei Oberflächentemperaturen von 2500 K schon Drücke von 1 MPa erreicht werden können, allein durch den Wärmeeintrag von der Pooloberfläche. Allerdings müsste fast die gesamte Wärmeleistung von 23 MW an die Oberfläche fließen, soll die Temperatur nicht zu stark absinken. Ein hoher Wärmetransport ist nur durch Konvektion im Schmelzepool möglich, d.h. ohne Konvektion im Schmelzepool und mit Kruste an der Oberfläche wird die Verdampfungsrate am Pool nicht ausreichen, eine wesentliche Druckerhöhung im RDB (> 0.3 MPa) zu erreichen.

Ist der Pool flüssig, so tritt Naturkonvektion auf. Bei einer Pooltiefe von 0.6 m, einer kinematischen Viskosität der Schmelze von $v = 0.74 \ 10^{-6} \ m^2/s$ und einer Temperaturdif-

ferenz zwischen der Poolunterseite und -oberfläche von ca. 150 K ergibt sich eine Ra-Zahl (=Gr Pr) von Ra = $1.5 \ 10^{11}$. Dies bedeutet turbulente Strömung mit Nu=0.092 Ra^{0.33}. Mit der sich ergebenden Nusseltzahl von Nu = 450, kann der Wärmestrom schon bei einer Temperaturdifferenz von weniger als 150 K erreicht werden. Tatsächlich wird die Konvektion durch andere Nu-Beziehungen beschrieben, da die Wärmequellen im Pool sind und die Form der Berandung und die Wärmeabgabe an die Wände eine Rolle spielen, aber grundsätzlich wird sich eine turbulente Konvektion einstellen mit ähnlich hohen Wärmeströmen [**4**].

3. PARAMETERSTUDIE MIT DEM CONTAIN CODE

Es wurden Rechnungen mit dem CONTAIN-Code (Version 1.2.1) durchgeführt, bei denen der Wärmetransport im Schmelzepool, die Nachzerfallswärme und der Wärmeeintrag der Strukturen und Wände im RDB modelliert wurden. Ausgehend von einem einfachen Modell, das analytisch berechnet wurde und zu gleichen Ergebnissen führte wie die Code-Rechnungen, wurden schrittweise weitere Modelle zugefügt. Hier werden nur die Endergebnisse vorgestellt.

3.1 Schmelzepool als einzige Wärmequelle

Zunächst sollen Ergebnisse gezeigt werden, die ohne den Einfluss der in den Strukturen und Wänden gespeicherten Energien berechnet wurden. Im Fall des flüssigen Schmelzepools reduziert sich das Problem auf die Frage: wann bildet sich eine Kruste ? Bei geringer Konvektion wird die Oberflächentemperatur unter die Liquidustemperatur sinken und Krustenbildung (wahrscheinlich vom Rand zur Mitte oder als Inseln) wird einsetzen. Mit Hilfe von Codes und Simulationsexperimenten wurden Schmelzepools untersucht [5], ohne daß die Frage der Krustenbildung an der freien Oberfläche



Abb.1. Druckaufbau und Temperaturen des Schmelzepools (mit Kruste) ohne Einfluss der Strukturen.

befriedigend beantwortet wurde. **Abbildung 1** zeigt Ergebnisse, die mit einer 7.3 mm dicken Kruste über einem 0.58 m tiefen flüssigen UO₂-Pool erzielt wurden. Die Anfangstemperatur des Pools war 3500 K, während die mittlere Krustentemperatur 3300 K betrug. Innerhalb von 60 Sekunden sinkt die Krustentemperatur um 500 K auf 2800 K und die Oberflächentemperatur liegt bei 1900 K und bleibt praktisch konstant. Ein wesentlicher Druckaufbau findet nicht statt. Würde sich keine Kruste bilden, so würde nach 6 Minuten die Oberflächentemperatur nur auf 2700 K sinken und der Druck auf 2.0 MPa steigen. Selbst ohne Einfluss der oberen Strukturen, könnte bei einer flüssigen Pooloberfläche ein Druck von 2 MPa im RDB entstehen, vorausgesetzt die Wassereinspeisung ist gering.

3.2 Berücksichtigung der Strukturen und Wände im RDB

Um den Wärmeeintrag von den Wänden und Reststrukturen zu berücksichtigen, wurden aus dem weiten möglichen Parameterfeld folgende Werte gewählt:

	Restkern-	Wand und	RCS
	strukturen	Gitterplatte	
Material	UO ₂	Stahl	Stahl
Oberfläche	200 m ²	300 m²	500 m²
Dicke	0.1 m	0.25 m	0.03 m
Temperatur	1600 K	1200 K	800 K



Abb. 2. Druckaufbau und Temperaturen des Schmelzepools (mit Kruste) mit Einfluss der Strukturen und Wände. Wassereinspeisung 30 kg/s; nach 400 s wird ein 1 m² großes Leck g e-öffnet.

Der Wärmeübergang findet (in CONTAIN) von den Strukturen an das Gas statt, und zwar durch Konvektion und Strahlung. Um den Wärmeübergang auch an Wasser zu berücksichtigen, wurde die SPRAY-Option benutzt. Hier wird das Wasser als Spray in den RDB eingebracht, und es findet ein Wärmeübergang vom Gas an die Tröpfchen statt. Die Anfangströpfchengröße wurde zu 1 mm gewählt. Tatsächlich kann der Wärmetransport von den Strukturen direkt an die Tröpfchen effektiver sein; das wird in CONTAIN allerdings nicht modelliert. Die Tröpfchengröße wird sich aufgrund der Relativgeschwindigkeiten einstellen und kann je nach Art des Wassereintrags sowohl größer als auch kleiner sein. Die Pool-Temperaturen zeigen kaum Unterschiede zum vorigen Fall ohne Kernstrukturen, jedoch ist der Druckanstieg stark von den oberen Strukturen beeinflußt (**Abb.2**). Mit dem Wärmeeintrag von heißen Wänden und Strukturen kann auch bei einem Pool mit Kruste ein Druckaufbau stattfinden, wenn die Rate der Wassereinspeisung niedrig ist.

Die Rechnungen haben gezeigt, daß ein wichtiger Parameter, neben dem Zustand des Schmelzepools, die eingespeiste Wassermenge ist, wobei natürlich auch die Art und der Ort der Einspeisung eine Rolle spielen. Der günstigste Fall für einen niedrigen Druckaufbau ist der gleichzeitige Einsatz aller Pumpen mit maximaler Förderleistung, dann wird der entstehende Dampf zum größten Teil rekondensiert (in dem vereinfachten Modell von CONTAIN). Wenn die Zeit bis zur vollen Förderleistung kleiner 10 Sekunden ist, so wird auch dann der Druck niedrig bleiben. Nur im Fall eines langsamen Ansteigens der Wassereinspeisung oder des Ausfalls mehrerer Pumpen, also bei Teileinspeisung, ist mit Druckerhöhung auf über 2 MPa zu rechnen. Ergebnisse von Rechnungen mit dem mechanistischen AFDM-Code [6] haben allerdings gezeigt, daß selbst bei hoher Wassereinspeisung aufgrund hoher Gasgeschwindigkeiten in der RDB-Atmosphäre und damit sehr kleiner Tröpfchengröße und großer Wärmeübertragung Drücke größer 4 MPa erreicht werden können.

3.3 Schlußfolgerungen aus der Parameterstudie

Die Abschätzungen mit analytischen Methoden und dem CONTAIN-Code haben die Haupteinflußgrößen identifiziert, die für den Druckaufbau im RDB nach Druckentlastung, Coreschmelzen und Wiedereinspeisung von Wasser maßgebend sind. Die wichtigsten Parameter sind die Größe und Temperatur der heißen Oberflächen der Struktur, die Krustenbildung auf dem Schmelzepool und die eingespeiste Wassermenge. Bei kleinem Massenstrom kann auch mit einer festen Pooloberfläche ein Druckaufbau grö-Ber 2.0 MPa stattfinden. Nach diesen Abschätzungen baut sich kein Druck größer 0.5 MPa auf, wenn die maximale Wassermenge eingespeist wird. Allerdings werden dabei nicht alle Wärmeübertragungsmechanismen und Ungleichgewichtszustände berücksichtigt. Diese Fragen müssen durch Rechnungen mit mechanistischen Codes, wie z. Bsp. AFDM und SCDAP/RELAP5 (siehe folgenden Abschnitt), untersucht werden.

Diese Untersuchungen haben gezeigt, daß bei den derzeitig vorgesehenen Entlastungsventilen mit nicht geringer Wahrscheinlichkeit ein Druckanstieg im RDB auf 2 MPa möglich ist. Weitere Rechnungen werden an dieser Aussage nichts Grundlegendes ändern. Die offene Frage des Verhaltens des Schmelzepools bei Wasserkühlung von oben kann durch existierende Codes nicht beantwortet werden, da entsprechende Modelle fehlen [7]. Diese Codes können den Zeitpunkt und die Größe des Zeitfensters abschätzen, für die die hier getroffenen Voraussetzungen zutreffen. Die Frage der Krustenbildung und der Stratifikation von Stahl-und Brennstoffschmelze kann nur experimentell beantwortet werden.

Rechnungen mit dem MAAP-Code, die bei FRAMATOM durchgeführt wurden, haben zu ähnlichen Ergebnissen geführt, d.h. auch hier wurden Drücke von ca. 2.0 MPa erreicht [**12**].

4. SCDAP/RELAP5 ANALYSE

Das verwendete SCDAP/relap5-Programm [8] ist speziell dafür geeignet, das Verhalten des Reaktorkühlsystems während eines Kernschmelzunfalles zu simulieren. In das Programm wurden im Laufe der Zeit vier selbständige Programme, nämlich SCDAP, TRAP/MELT, COUPLE und RELAP5, integriert. SCDAP simuliert die Kernzerstörung, TRAP/MELT den Spaltprodukt-Transport, COUPLE geschmolzene Zonen im Kern und im unteren Plenum, und schließlich RELAP5 das thermische Verhalten der Strukturen und die umfassende Hydrodynamik, die auf einer eindimensionalen, Zwei-Fluid-, Nicht-gleichgewicht-, Sechs-Gleichung-Darstellung basiert.

Für die Rechnungen wurde Release E der Version MOD3.1 verwendet. Anzumerken ist, daß das Programm im COUPLE-Teil ganz unbefriedigend lief. So gab es zunächst Probleme mit der Eingabe, weil die Eingabebeschreibung eine Reihe von folgenreichen Fehlern enthielt, der Code selbst fehlerhaft war und die neue, formatfreie Eingabe überhaupt nicht funktionierte. Um einen Rechenfall bis zum Ende durchrechnen zu können, mußten einige Korrekturen am Code selbst vorgenommen werden. Die Suche nach weiteren Code-Fehlern, die offensichtlich noch vorhanden sind, wurde jedoch aufgegeben, weil die angekündigte, neue Code-Version, MOD3.2, Mitte 1997 von der NRC freigegeben werden und die neue Fassung ein überarbeitetes COUPLE-Paket enthalten soll [9]. Für das Verständnis der COUPLE-Eingabe erwies es sich als sehr hilfreich, den COUPLE-Originalbericht [10] zu Rate ziehen zu können.

Es wurde im übrigen ein notwendiges Schnittstellen-Programm zur Auswertung des Ausgabefiles von COUPLE geschrieben, das es erlaubt, die Temperaturverteilung des Finite-Elemente-Gitters mithilfe des kommerziellen TECPLOT-Programms [11] am Bild-schirm darzustellen und zu plotten.

4.1 SCDAP/relap5 Eingabemodell

Das aufgestellte SCDAP/relap5-Eingabemodell basiert auf einer relap5-Eingabe von Siemens. Die Erstellung der Eingabe profitierte von einer 'Station Blackout'-Analyse für den amerikanischen SURRY Druckwasserreaktor [**2**]. Das Eingabemodell simuliert das Wiederfluten im kritischen Zeitfenster, d. h. ca. 6 1/2 h nach Beginn des auslösenden Ereignisses. Der Zustand des Primärsystems zu diesem Zeitpunkt wird wie folgt angenommen. 80 % des Kerns bildet einen Schmelze-Debris-Pool in der unteren Kalotte. Die Wandtemperatur des Bodens liegt mit 1250 K an der Versagensgrenze. Der äußere Ring der Brennelemente steht noch im Kern. Die Temperaturen der Strukturen variieren zwischen 800 und 1000 K. Die Nachzerfallsleistung ist 0,8 %. Die Entlastungsventile sind offen. Alle acht Sicherheitspumpen speisen ein. Der Druck im Containment und im Primärsystem beträgt 0.18 MPa.

relap5-Ident.	Funktion	Oberfläche, m ²	Eff. Dicke, m	Anf.Temp., K
201	RDB Wand	159	0.25	1000
202	Kernfass	106	0.06	1000
203	Reflektor	122	0.22	1000
204	Gitterplatte	39	0.09	1200
207	Einbauten	139	0.11	1200
2301	RDB Deckel	27	0.25	1000
3000	Rohre heiß Str.	313	0.07	1000
3101	DE Rohrplatte	1424	0.01	800
3220	DE Rohre 3L	19405	0.001	800
3300	Rohre kalt Str.	404	0.07	1000
4220	DE Rohre 1L	6468	0.001	800
8010	Ausgleichsltg.	21	0.05	1000
8120	Druckhalter	120	0.14	800

Tabelle I: Wärmeleitende Strukturen (Stahl)



Abbildung 3. Nodalisierung des EPR-Reaktordruckbehälters



Die relap5-Eingabe beschreibt den Reaktordruckbehälter und das Primärsystem durch 155 Wärmestrukturen mit 1036 Knoten und 165 Kontrollvolumen. Die Masse und die benetzte Oberfläche der Wärmestrukturen ergibt sich zu 1979 Mg bzw. 28747 m² (vergleiche **Tabelle I)**. Das freie Strömungsvolumen ist 440 m³. **Abbildung 3** zeigt die Nodalisierung des Reaktordruckbehälters. Die nichtgezeigten Kreisläufe einschließlich der U-Rohre der Dampferzeuger werden durch einen Einfachkreis mit Druckhalter und einen Dreifachkreis dargestellt. Die Einspeisung erfolgt jeweils im kalten Strang. Die Ventilquerschnittsfläche, 82,12 cm², wurde mit einer relap5-Nebenrechnung entsprechend der Leistung von 250 kg/s 17,6 MPa Sattdampf bestimmt. Die Einspeiseraten der Pumpen wurden druckabhängig eingegeben.

Die SCDAP/COUPLE-Eingabe besteht aus einer Brennstab-Komponente, die die äußeren 56 Brennelemente in noch intaktem Zustand repräsentieren soll. Dadurch ist die Möglichkeit des Niederschmelzens der Brennstäbe und der Verlagerung der Coriumschmelze ins untere Plenum gegeben. Die Nachzerfallsleistung wurde mit 34 MW, d. h. 0,8 % der Nominalleistung angenommen. Der Debris/Schmelze-Pool in der unteren Kalotte mit 140 Mg Corium wird, wie **Abbildung 4** zeigt, durch ein axensymmetrisches Finite-Elemente-Gitter, das aus 285 Elementen besteht, dargestellt. Die anfängliche Pool-Temperatur ist 3000 K, die der oberen Kruste 2000 K und die der Wand 1250 K.

4.2 SCDAP/relap5 Ergebnisse

Wegen der angedeuteten Schwierigkeiten mit COUPLE müssen wir uns auf die relap5-Ergebnisse beschränken, die aber fürs erste genügend Aussagekraft besitzen. Abbildung 5 zeigt im Vergleich die druckabhängigen Einspeisemassenströme der beiden unterschiedlichen Sicherheitspumpensätze und die Abströmung durch das Entlastungsventil. Der ab 300 s stärker ansteigende Ventilmassenstrom hängt damit zusammen, daß ab diesem Zeitpunkt die zweiphasige Ausströmung einsetzt, wie die Entwicklung der Voidfraktion in Abbildung 6 belegt. Der Abstrom durch das Ventil ist noch einmal in Abbildung 7 zusammen mit der gesamten Nettodampfproduktion gezeigt. Nettodampfproduktion meint, daß bei der Summierung über alle Kontrollvolumen die Rekondensation des produzierten Dampfes berücksichtigt wird. Wie aus Abbildung 7 ersichtlich, ist die Nettodampfproduktion schwallartig, und es baut sich innerhalb der ersten 300 s nach Einspeisebeginn ein leichter Überschuß an produziertem Dampf auf. Das führt zu einem Druckaufbau, der in Abbildung 8 dargestellt ist. Der Druck steigt innerhalb 300 s steil an auf ca. 2.5 MPa. Das Maximum wird bei schwächer ansteigender Verlauf mit 5 MPa bei 700 s erreicht. Da in den Rechnungen wegen des Ausfalls von COUPLE der Wärmeübergang von der Schmelze an das Kühlmittel unberücksichtigt blieb, dürfte der Druckaufbau in Wirklichkeit noch stärker sein als der in Abbildung 8 gezeigte. Fazit: Die Kondensation des Dampfes ist offenbar nicht groß genug, um das Nettodampfaufkommen kleiner zu halten als die über das Entlastungsventil abführbare Menge. **Abbildung 9** zeigt zum Beispiel die auf Rekondensation zurückzuführende, stark fluktuierende Dampfproduktion am relativ kalten (383 K) Einspeisewasser in den kalten Strängen. Ab 150 s wird der RDB bereits massiv wieder geflutet, wie in **Abbildung 10** zu sehen ist. Ähnlich wie bei den obigen Abschätzungen mit dem CONTAIN-Code gefunden, ist die intensive Verdampfung auf die Entspeicherung der heißen Strukturen zurückzufüren. Dies veranschaulicht beispielsweise **Abbildung 11**, wo Wandtemperaturen im kalten Strang des Einfachkreises an der Einspeisestelle gezeigt werden. Die durchgezogene Kurve zeigt die Temperatur an der Innenseite der Wand. Man sieht, daß an dieser Stelle die Wand nach ca. 200 s abgeschreckt wird. Die Außenwandtemperatur folgt langsam nach.

Wegen des vorläufigen Charakters der SCDAP/relap5-Rechnungen ist es zu früh, die Unsicherheiten im Detail zu erörtern. Auf der Hand liegen die Unsicherheiten der Startbedingungen für die Rechnung. Hier sind es vor allem die Temperaturen der Strukturen und die Konfiguation der Corium-Schmelze, die mit Ergebnissen aus Analysen, die das Szenario von Anfang an verfolgen, noch zu verbessern sind. Abgesehen von den Modellierungsmängeln, die, soweit COUPLE betroffen ist, sicher behoben werden können, besteht die größte Unsicherheit für die Vorhersage des Versagensdruckes zweifellos im Szenario, nämlich in der Angabe des Zeitpunktes der Stromwiederkehr und damit des Einsetzens der Pumpenförderung.

Trifft die Wiederkehr zusammen mit einer weit fortgeschrittenen Vorschädigung der RDB Wand im Kalottenbereich, genügt schon ein geringer Druckanstieg, um den RDB-Boden zum Versagen zu bringen. In diesem Fall ist der Versagensdruck niedrig. Hält der Boden dem Druckaufbau etwas länger stand, ist mit einem höheren Versagensdruck zu rechnen, der nach unseren Rechnungen sogar über der angestrebten Schranke von 2 MPa liegen kann.

4.3 Schlussfolgerungen aus der SCDAP/RELAP5 Analyse

Eine SCDAP/relap5 Analyse des kritischen Zeitfensters während eines 'Station Blackouts' mit aktiver Druckentlastung und automatisch einsetzender Noteinspeisung nach Wiederkehr der Stromversorgung wurde durchgeführt. Die Rechnungen haben allerdings noch vorläufigen Charakter, weil das integrierte COUPLE-Paket nicht richtig funktionierte.











Abbildung 7. Nettodampfproduktion und Abströmung



Abbildung 8. Druckaufbau im RDB durch Wiederfluten



Abbildung 9. Verdampfung und Rekondensation an den Einspeiseste llen



Abbildung 10. Wiederfluten des RDBs



Abbildung 11. Wandtemperaturen an der Einspeisestelle des Einfachkreises

Die relap5-Ergebnisse zeigen für dieses Szenario, daß es innerhalb der ersten 300 s nach Einspeisebeginn der augenblicklich gültige und deswegen in den Rechnungen angenommene Ventilquerschnitt von ca. 80 cm² nicht ausreicht, um das Dampfaufkommen abzuführen. Daher kommt es laut Rechnung zu einem Druckaufbau von etwa 2,5 MPa innerhalb 300 s und einem Maximum von 5 MPa bei 700 s nach Wiedereinspeisungsbeginn.

Der Versagensdruck hängt entscheidend vom Zeitpunkt der Stromwiederkehr und dem Zustand der unteren RDB-Wand ab. Trifft die Rückkehr zeitlich zusammen mit dem thermischen Versagen, genügt schon ein geringer Druckanstieg, um den RDB-Boden zum Versagen zu bringen. In diesem Fall ist der Versagensdruck niedrig. Hält der Boden dem Druckaufbau etwas länger stand, ist mit einem höheren Versagensdruck zu rechnen, der laut Rechnung sogar über der angestrebten Grenze von 2 MPa liegen kann. Im übrigen liegen die von uns mit SCDAP/relap5 ermittelten Werte für den Druckaufbau deutlich höher als die mit dem MAAP4-Code berechneten Werte [**12**].

5. SCHLUSSFOLGERUNGEN

Sowohl die Analyse mit einfachen Codes als auch die detaillierten Rechnungen mit SCDAP/relap5 haben ergeben, daß in einem 'station blackout' nach Niederschmelzen des Kerns und einer gezielten Druckentlastung eine Druckerhöhung in der Größenordnung von 2 MPa durch Wiedereinspeisung von Wasser in das Primärsystem möglich ist. Die wesentlichen Wärmequellen für die Verdampfung sind die aufgeheizten Strukturen.

Ausgegangen wurde dabei von einem Szenario des 'station blackout' mit aktiver Druckentlastung und automatisch einsetzender Noteinspeisung nach Wiederkehr der Stromversorgung. Es gibt dabei eine kritisches Zeitfenster, ca 6 ½ Stunden nach Beginn des auslösenden Ereignisses, bei dem sich ein Schmelze/Debris Pool in der RDB-Kalotte befindet und die Temperatur der Wand nahe der Versagensgrenze liegt. Der tatsächliche Versagensdruck hängt entscheidend vom Zeitpunkt der Stromwiederkehr ab.

Referenzen

- 1. Jacobs, G., 'Dispersion der Kernschmelze bei begrenztem Druck,' Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995, FZKA-5780, Aug. 1996.
- 2. Knudson, D.L. and C.A. Dobbe, 'Assessment of the Potential for High Pressure Melt Ejection Resulting for a Surry Station Blackout Transient', NUREG/CR-5949, INEL, 1993.
- Hering, W., Ch. Homann, W. Sengpiel, D. Struwe, 'Severe Core Degration Analyses for an Advanced Reactor Concept using SCDAP/RELAP5', ARS'97, Orlando, USA, June 1-4, 1997.
- 4. Kymäläinen, O. Hongistro, T.G. Theofanous, 'Heat flux distribution from a volumetrically heated pool with high Rayleigh number', OECD/NEA/CSNI Workshop on Large Molten Pool Heat Transfer, Grenoble 9-11.3. 1994.
- Einen Überblick gibt: J.Artnik, C.Caroli, G.Cenerino et al., 'Molten Pool Behaviour Calculations for Reactor Cases', FISA 95 - EU research on severe accidents, Ed. G.Van Goethem, W.Balz, E. Della Loggia, EUR 16896EN, p. 214, 1996. s.a. OECD/NEA/CSNI Workshop on Large Molten Pool Heat Transfer, Grenoble, 1994.
- 6. Wilhelm, D., AFDM-Rechungen, pers. Mitteilung
- 7. OECD/NEA/CSNI Workshop on Large Molten Pool Heat Transfer, Grenoble, 1994.
- Allison, C.M. et al, SCDAP/relap5/MOD3.1 Code Manual (5 Volumes), INEL, NUREG/CR-6150, Oct. 1993.
- 9. Corryell, E. W., INEEL, Persönliche Mitteilung, 1997.
- 10. Lemmon, E.C., 'COUPLE/FLUID: A Two-Dimensional Finite Element Thermal Conduction and Advection Code', EGG-ISD-SCD-80-1, INEL, 1980.
- 11. Lau, M., G. Jacobs,' Visualisierung von COUPLE-Daten mit Tecplot,' Interner Bericht, FZK, (in Vorbereitung).
- 12. Azarian, G., P.Gandrille, 'EPR Severe Accidents Relevant Scenarios', CEA/FZK Seminar on EPR related severe accident research, Karlsruhe, November 7-8, 1996.

32.21.04 Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung

I. <u>COMET-Konzept</u>

(H. Alsmeyer, T. Cron, J.J. Foit, S. Schmidt-Stiefel, H. Schneider, W. Tromm,
T. Wenz, IATF; S. Mussa, F. Ferderer, KIKI; C. Adelhelm, IMF I;
H.-G. Dillmann, H. Pasler, ITC-TAB; W. Schöck, IMK; G. Schumacher, INR;
H. Benz, C. Grehl, G. Merkel, W. Ratajczak, HVT)

Abstract

The COMET core catcher concept for a future PWR is based on the spreading of a core melt on a sacrificial layer and its erosion, until a subsequent addition of water from below causes a fragmentation of the melt. A porous solidification of the melt then admits a complete flooding within a short period. Studies on this concept have been continued with several experiments. The COMET-T experiments have demonstrated that pure oxidic melts can also be cooled very well from below and that they do not show any important differences compared with the metallic/oxidic melts investigated before. The large-scale COMET-H experiments with thermite melts up to 800 kg have also shown very satisfying results. Further experiments with real UO₂-containing melts are planned.

1 Einführung

Das COMET-Konzept zur Kernschmelzenkühlung außerhalb des Reaktordruckbehälters sieht die Ausbreitung der Kernschmelze auf einer betonartigen Opferschicht vor. Nach Erosion dieser Opferschicht soll die Schmelze durch Wasserzutritt von unten fragmentiert werden und porös erstarren, um damit eine schnelle Kühlung durch intensiven Wasserkontakt zu erreichen und aufrecht zu halten. Abb. 1 zeigt, wie das COMET-Konzept in den derzeitigen EPR-Entwurf unter Verwendung des Ausbreitungsraums integriert werden kann. Die Detailzeichnung zeigt dabei die Betonopferschicht mit den integrierten Kühlkanälen und der darunterliegenden Flutwasserschicht.



Abb. 1: Mögliche Anordnung des COMET-Kühlkonzepts im EPR

Die wesentlichen Vorgänge zur Erreichung und Sicherstellung der Kurz- und Langzeitkühlung der Kernschmelze bei diesem Konzept sind:

- Mit Ausbreitung der Schmelze auf der ebenen Betonfläche beginnt die Erosion der Opferschicht. Diese besteht aus Beton, der unter Verwendung von gebrochenem Borosilikatglas gefertigt ist. Durch die Erosion des Betons kühlt die Schmelze wesentlich ab. Der oxidische Teil der Schmelze vermischt sich mit dem erschmolzenen Glas aus dem Beton. Das Borosilikatglas wirkt sich günstig auf die Fließfähigkeit der Schmelze und die Rückhaltung wichtiger Spaltprodukte in der Schmelze aus.
- Nach Aufschmelzen der 10 bis 20 cm dicken Beton-Opferschicht öffnen sich passiv die Kühlkanäle (Schmelzstopfen) in der Betonschicht. Kühlwasser, z. B. aus dem IRWST, das unter dem hydrostatischen Druck des Flutbehälters steht, dringt von unten in die Schmelze ein. Die einsetzende schnelle Verdampfung des Wassers bricht die Schmelze in Fragmente auf, in die entstehenden Hohlräume können verstärkt Wasser und Dampf eindringen und die Schmelze vollständig erstarren lassen. Dabei wird die in der Schmelze gespeicherte und als Nachwärme auch noch langzeitig freigesetzte Energie in Dampf umgesetzt.
- Der langzeitig stabile Zustand ist die porös erstarrte Schmelze, die von Wasser vollständig geflutet und überdeckt ist. Da die erstarrte Schmelze allseitig von Wasser umgeben ist, werden die angrenzenden Strukturen thermisch nicht belastet. Durch Wärmeabfuhr aus dem Sicherheitsbehälter muß dafür gesorgt werden, daß der Kühlwasserstand in der gefluteten Schmelze erhalten bleibt.

Das Prinzip dieser Kühlung wurde bereits, wie in den vorigen Fortschrittsberichten dargestellt, in verschiedenen Experimenten bestätigt. Die im Berichtszeitraum durchgeführten Experimente sollen die folgenden weitergehenden Fragen im Sinne einer Prüfung und Optimierung des Konzepts behandeln:

- Verhalten rein oxidischer Schmelzen im Unterschied zu 2-phasigen Schmelzen
- Dauer bis zur vollen Erstarrung der Schmelze und Charakterisierung der erstarrten Schmelze
- Möglichkeit heftiger Reaktionen zwischen Schmelze und eindringendem Wasser
- Verhalten des Kühlkonzepts bei lokal schnellerer Erosion der Opferschicht und Einsetzen lokalen Wasserzutritts
- Übertragbarkeit der Ergebnisse auf volle Geometrie und auf Schmelzen realer Zusammensetzung

Zur Beantwortung dieser Fragen werden transiente Experimente (COMET-T) oder Experimente mit Nachbeheizung (COMET-H) durchgeführt. Zunächst aber soll noch der Einfluß des Opferbetons diskutiert werden.

2 Opferschicht und Materialverhalten

Aufgabe der Opferschicht ist einerseits, die Kühleinrichtung vor extremen Anfangsbelastungen durch die Kernschmelze zu schützen, die eventuell mit hohem Druck und sehr hoher Temperatur aus dem RDB austritt. Gleichzeitig sollen bestimmte Eigenschaften der Schmelze günstig beeinflußt werden, bevor der Wasserzutritt einsetzt. Dazu gehört die Absenkung der Temperatur der Schmelze bei gleichzeitig günstiger Beeinflussung ihrer Fließfähigkeit. Dies geschieht durch das Aufschmelzen des speziellen Opferbetons und durch die Einmischung vor allem des Borosilikat-Glases, aus dem der Beton gefertigt ist. Die Gasfreisetzung während der Betonzerstörung, die im wesentlichen durch die thermische Zersetzung des Zementsteines im Beton erfolgt und die vorwiegend Wasserdampf in die Schmelze freisetzt, sorgt dabei für eine gute Einmischung der Glasschmelze in die oxidische UO₂-ZrO₂-Schmelze, wie die im Rahmen unserer Untersuchungen durchgeführten Experimente bestätigen. Wie bereits erwähnt, wird weiterhin durch den Glasanteil die Stabilisierung von Spaltprodukten im Oxid verbessert.

Mit der Änderung der Zusammensetzung der Oxidschmelze ändern sich vor allem ihr Erstarrungsbereich und ihre Zähigkeit. Beide sind für die Ausbreitung der Schmelze, für eine eventuelle heftige Schmelze-Wasser-Reaktion und für die Fragmentierung und damit Kühlbarkeit der Schmelze bei Wasserzutritt von wesentlicher Bedeutung. Es erscheint günstig, wenn (a) die Zähigkeit der Oxidschmelze bei Beginn des Kühlwasserzutritts um 1 Pa · s ist, das heißt, einem zähen Öl entspricht, wenn (b) die Temperatur der Schmelze sich in die Nähe des Erstarrungsbeginns abgesenkt hat, und wenn (c) sich die Erstarrung über einen relativ großen Temperaturbereich von einigen hundert Grad erstreckt. Dadurch kann sich eine hohe Porosität in der erstarrenden Schmelze aufbauen. Zu niedrige Zähigkeiten scheinen nach den Ergebnissen der COMET-T Experimente mögliche thermische Reaktionen von Schmelze und Wasser zu begünstigen.

Das zunächst für den Einsatz in der Opferschicht vorgesehene Glas war in Untersuchungen des INE entwickelt worden, um Anforderungen an endlagerfähige Verglasungsprodukte für nukleare Abfälle zu erfüllen. Im Hinblick auf den hier vorliegenden Anwendungsfall können aber durchaus kostengünstigere Gläser verwendet werden, wie das kommerziell erhältliche Borosilikat-Glas der folgenden Zusammensetzung (Tabelle 1):

Komponente	SiO ₂	B ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	Na ₂ O	CaO	MgO	TiO ₂	Fe ₂ O ₃	K ₂ O
Gew.%	62.5	≥6	≥ 5	14.5	6	3.5	≤ 1	≤ 1	≥ 1

Tabelle 1: Zusammensetzung des kommerziell erhältlichen Borosilaktglases zur Fertigung der Betonopferschicht

Für dieses Glas, das als gebrochene Fritte der Körnung 0 - 10 mm lieferbar ist, wurde eine entsprechend der Körnung optimierte Rezeptur für einen gut fließfähigen und verarbeitbaren Beton erstellt, der leicht als Deckschicht auf der Kühleinrichtung aufgebracht werden kann. Die Zähigkeit des erschmolzenen Glases wird zur Zeit noch in getrennten Messungen bestimmt. Es wird ein ähnlicher Verlauf erwartet wie in Abb. 2 für das Glas GG WAK 1 dargestellt [1]. Zusätzlich wird auch die Zähigkeit interessierender keramischer Schmelzen mit charakteristischen Zusätzen dieses Glases bestimmt, um den Einfluß der Glaszugabe auf die Fließfähigkeit der Schmelzen in den COMET-Experimenten und unter realitätsnahen Zusammensetzungen vergleichen und vorhersagen zu können.

Nach den derzeitigen Kenntnissen erfolgt die Erstarrung der hier vorliegenden Oxidschmelzen, deren Erstarrungstemperaturen durch die Zumischung des Glases stark abgesenkt ist, bei Unterschreiten der Liquiduskurve durch Auskristallisieren der hochschmelzenden Komponenten aus der Schmelze. Dadurch entsteht eine Suspension von Kristallen in der "Mutterschmelze", deren Zähigkeit immer stärker durch den wachsenden Kri-



Abb. 2: Zähigkeitsverlauf eines typischen Borosilikatglases als Opfermaterial

stallanteil bestimmt wird (englisch: mushy region). Solche Schmelzen sind schließlich bei einem Volumenanteil der Kristalle von etwa 50 % nahezu fest, da die Kristalle sich dann praktisch berühren und einen festen Verband bilden, weil der geringe Flüssigkeitsanteil eine Verschiebung der Partikel gegeneinander nicht mehr zuläßt. Zur Bestimmung des Zähigkeitsverlaufes der erstarrenden Schmelzen ist also die Kenntnis des Kristallanteils aus den Phasengleichgewichten sehr nützlich. Aus der Rheologie sind verschiedene Modellansätze bekannt, die den Zähigkeitsanstieg auch mit der Form der Kristalle korrelieren (Grenzfälle: kugelige oder nadelförmige Kristalle). Im allgemeinen zeigen solche Schmelzen ein nicht-Newtonisches Zähigkeitsverhalten. Eine Erweiterung der experimentellen Aussagen zum Zähigkeitsverhalten der hier interessierenden Schmelzen ist daher notwendig.

3 COMET-T Experimente

Durchführung von Oxidexperimenten mit dem Versuchsaufbau COMET-T:

Zielsetzung

In dieser Versuchsserie wurde im Berichtszeitraum die Kühlbarkeit von reinen Oxidschmelzen bei Wasserzutritt von unten ohne Nachbeheizung der Schmelzen untersucht. Dieses wird bezüglich der Zusammensetzung der Schmelze als Grenzfall betrachtet, wenn der Metallanteil in der Kernschmelze gering ist oder der Metallanteil der Schmelze während der andauernden Betonerosion in Form kleiner Tropfen in die Oxidschmelze eingemischt wird. Das Verhalten einer auf diese Weise dispergierten zwei-komponentigen Schmelze entspricht eher einer reinen Oxidschmelze als einer Metallschmelze [2].

Versuchsaufbau

Das Prinzip des Versuchsaufbaus wurde von der Versuchsserie II übernommen [3]. Die Thermitschmelze mit dem CaO-Zusatz wird aber nicht mehr direkt im Versuchsbehälter erzeugt, sondern in einem separaten Thermitreaktionstiegel gezündet. Nach ca. 1 min wird zunächst die nicht benötigte Metallschmelze in einen Behälter abgelassen und anschließend der oxidische Anteil der Schmelze über eine Gießrinne in den Versuchsbehälter eingegossen. Nach Erosion einer nur dünnen Beton-Opferschicht erfolgt passiv der Wasserzutritt mit Aufschmelzen der Stopfen, und die einsetzende Kühlung wird beobachtet.

Versuchsparameter

Da diese Experimente die Vergleichbarkeit mit den 2-Komponenten-Thermitschmelzen untersuchen sollen, wurden die Versuchsparameter wie in den Referenzversuchen der Versuchserie COMET-T I und II eingestellt: Die Opferschichthöhe des Beton oberhalb der Stopfen beträgt 10 mm, die Schmelzenmasse ca. 60 kg und die Wasserzutrittsbedingungen entsprechen bei 5 Stopfen mit einem Durchmesser von 10 mm und einer Drossel in der Zuführungsleitung von 5 mm \emptyset den Bedingungen aus der Versuchsserie II. In den

Experimenten wurden der wirksame Druck des Flutwassers von 0.0 - 0.4 bar und die Schmelzenzusammensetzung (Zr-Zugabe) varijert. Einen Überblick über die durchgeführten Oxidexperimente gibt Tab. 2. Das erste durchgeführte Experiment COMET-T 8.1 wurde in dem letztjährigen Zusammenarbeitsbericht [4] schon dargestellt, so daß hier nur auf die neueren Ergebnisse eingegangen werden soll.

Experiment COMET-T	8.1	8.2	8.3	8.4	8.5
Schmelzenmasse/kg	80	66	76	83	56
Fe/kg (+ Zr)	15 (+5 kg ZrO ₂)	0	6	11	0
Oxid/kg	60	66	70	72	56
Einguß-Temperatur/K	> 1700	>1820	> 2055	> 2000	> 1800
Wasservordruck	0.2 bar	0.2 bar	0.4 bar	0.4 bar	0.0 bar
Erosionszeit bis Wasser- kontakt	1:30 min	4:50 min	-	1:30 min	1:25 min
Oberfläche erstarrt	2:00 min	5:50 min	8:00 min	2:00 min	2:00 min
bedeckt mit Wasser	2:30 min	6:10 min	-	2:30 min	≥ 2:30 min
gesamte Wasserzutritts- rate	255 ml/s	100 ml/s	-	425 ml/s	180 ml/s
mittl. Verdampfungsrate (0 bis 5:00 min nach Wasserkontakt)	100 ml/s	50 ml/s	-	150 ml/s	70 ml/s
Porosität	60 %	28 %	-	51 %	30 %

Tabelle 2:	Überblick	über die	COMET-T	Oxid Ex	xperimente
------------	-----------	----------	---------	---------	------------

- 209 -

COMET-T 8.2 / 8.3

In dem Experiment 8.2 wurden die Wasserzutrittsbedingungen gegenüber Experiment 8.1 nicht verändert, aber es wurde in diesem Experiment vollständig auf einen Metallanteil in der Schmelze verzichtet.

66 kg Oxid, bestehend aus 56 % Al₂O₃ und 44 % CaO, wurden in den Versuchsbehälter abgegossen. Die Eingußtemperatur beträgt 1820 K und liegt damit ca. 50 K über der Erstarrrungstemperatur. Erst ca. 5 min nach Einguß ist die Opferschicht soweit erodiert, daß der Wasserzutritt einsetzt. Die Wasserzutrittsrate beträgt ungefähr 100 ml/s. Bereits 1:15 min nach Wasserzutritt ist die Schmelze vollständig erstarrt und weitere 20 s später auch geflutet.

Während des Wasserzutritts werden keine heftigeren Schmelze-Wasser-Wechselwirkungen beobachtet und es wird auch praktisch keine Schmelze aus dem Versuchsbehälter ausgeworfen, so daß das Gewicht des erstarrten Regulus noch 66 kg beträgt. Die Porosität beträgt ca. 28 %. Verglichen mit dem 1. Experiment ist dieser Wert niedriger, weil aufgrund der langen Erosionsdauer und des Fehlens von inneren Wärmequellen die Temperatur der Schmelze beim ersten Wasserkontakt bereits sehr niedrig war, so daß die geringere Verdampfungsrate auch zu kleineren sich ausbildenden Kanälen führt. Dies zeigt auch die geringere Wasserzutrittsrate von ca. 100 ml/s.

In dem nachfolgend durchgeführten Experiment COMET-T 8.3 trat kein Öffnen der Stopfen auf, obwohl ca. 76 kg Schmelze in den Versuchsbehälter mit einer Anfangstemperatur von ca. 2000 K abgegossen wurden. Die Nachuntersuchungen zeigten, daß die Höhe der Restbetonschicht über den Stopfen nach dem Experiment noch ca. 20 mm betrug, so daß davon ausgegangen werden muß, daß die Betonschicht zu hoch gefertigt wurde. Dies ist der Hauptgrund für das Nichtöffnen der Stopfen in diesem Experiment und ist auch als Ursache für das späte Öffnen der Stopfen im Experiment COMET-T 8.2 anzusehen. Zusätzlich sind auch bei den hier vorliegenden Oxidexperimenten - wegen der eventuell langsameren Erosion des Opferschicht und des späteren Zutritts des Kühlwassers - die radialen Wärmeverluste in die MgO-Auskleidung von Bedeutung. Es wurden deshalb Rechnungen zur Ermittlung der Verlust-Wärmeströme in die Seite durchgeführt, mit dem Ziel, das Auskleidungsmaterial für das Experiment zu optimieren. Für die Abschätzungen der Wärmeverluste wurde eine ebene, halb-unendliche Wand angenommen, deren Anfangstemperatur $T_0=20^{\circ}$ C beträgt. Zum Zeitpunkt t=0 kommt ihre Oberfläche in Kontakt mit der turbulent durchmischten Schmelze. Damit erhöht sich ihre Oberflächentemperatur auf die Temperatur der Schmelze: $T_{Oberfläche}=T_{Schmelze}$

Der Wärmestrom in die Oberfläche berechnet sich aus der instationären Wärmeleitung zu:

$$\dot{q} = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{bT_0}{\sqrt{\rho t}}$$

mit dem Wärmeeindringkoeffizienten $b = \sqrt{\lambda \rho c_p}$, gebildet mit den Stoffwerten der Wand.

Die Stoffwerte für die Schmelze und das Auskleidungsmaterial MgO sind Tab. 3 zu entnehmen. Zusätzlich sind in der Tabelle die physikalischen Daten für ein Auskleidungsmaterial aus Al₂O₃ - Hohlkugeln angegeben, dessen Wärmeeindringkoeffizient wesentlich geringer ist.

Stoffwerte	Schmelze	Auskleidung	Auskleidung	
	Oxid	MgO	Al ₂ O ₃ - Basis	
λ/ W/mK	4	5	0.8	
ρ/ Mg/m ³	3.6	3.0	1.53	
c _p / kJ/kgK	1.0	1.1	1.2	
b/J/m ² Ks ^{1/2}	3795	4062	1212	
T₀/ °C	1780	20	20	

Tab. 3: Physikalische Daten der Oxidschmelze und der Auskleidungsmaterialien

Die Ergebnisse der Rechnungen zeigen, daß der Wärmestrom in das Auskleidungsmaterial auf Al₂O₃ - Basis deutlich kleiner ist als in die Auskleidungsschicht aus MgO. Der Verlust-Wärmestrom verringert sich auf ca. 57% des ursprünglichen Wertes. Aufgrund dieser günstigen Eigenschaften wird in den nachfolgenden Versuchen dieses neue Auskleidungsmaterial eingesetzt. Gleichzeitig wird mit Hilfe einer speziellen Vorrichtung die Höhe der Betonopferschicht sehr exakt gefertigt. Dadurch verbessert sich die Genauigkeit der experimentellen Ergebnisse wesentlich.

COMET-T 8.4 / 8.5

Mit diesen Verbesserungen des experimentellen Aufbaus wurden 2 weitere Experimente mit geändertem Wasservordruck durchgeführt, d.h. mit 0.0 und 0.4 bar. Bei einem Wasservordruck von 0 bar ist der Gegendruck durch die Schmelze an der Stopfenoberkante gerade ausgeglichen.

Die Experimente zeigen eine übereinstimmende Erosion der Opferschicht, auch mit dem Experiment COMET-T 8.1. Nach Einguß der Schmelze wird die Betonopferschicht von 10 mm innerhalb von ca. 90 s erodiert, entsprechend einer Erosionsrate von ca. 0.1 mm/s. Beide Experimente zeigen die Abhängigkeit des Erstarrungsverhaltens vom Wasserdruck. Bei einem hohen Wasservordruck von 0.4 bar in Experiment COMET-T 8.4 wird die Schmelze durch den ersten Wasserkontakt stark aufgewirbelt und erstarrt sehr schnell mit einer hohen Porosität von 60 %. Aus diesem Grunde ist auch die Wasserzutrittsrate mit 425 ml/s sehr hoch, siehe Abbildung 3. Der Versuchsbehälter ist bereits nach 250 s geflutet, weshalb der Wasserzulauf abgeschaltet wurde.



Abb. 3: COMET-T 8.4. Wasserzutrittsrate

Abb. 4: COMET-T 8.5 Wasserzutrittsrate

Bei einem Wasservordruck von 0 bar in Experiment COMET-T 8.5 ist die Wechselwirkung der Schmelze mit dem zutretenden Wasser schwächer, aus dem Versuchsbehälter wird keine Schmelze ausgeworfen und die Porosität der erstarrten Schmelze ist mit ca. 30 % geringer. Aus Abbildung 4 ist zu ersehen, daß die Volumenstromrate maximal 180 ml/s beträgt und damit zwar niedriger ist als in Experiment COMET-T 8.4, aber groß genug, um die Schmelze schnell zu kühlen.

Die Tiegelschnitte beider Experimente zeigen große Hohlräume in der erstarrten Oxidschmelze, die durch kleinere Kanäle verbunden sind. Zu Beginn wird das zutretende Kühlwasser vollständig verdampft. Durch die Abkühlung der Schmelze werden etwa 30 s nach Wasserzutritt nur noch 2/3 des Wasserstromes verdampft, und die Schmelze wird somit langsam von unten geflutet. Ca. 1 min nach Wasserzutritt ist die Schmelze bereits vollständig geflutet und nur noch ca. 1/3 des zutretenden Wassers verdampfen. In beiden Experimenten wurden alle 5 Stopfen geöffnet, was zusammen mit den sehr gut übereinstimmenden Erosionszeiten bestätigt, daß es gelungen ist, durch die genau gefertigte Opferschichthöhe und das neue Auskleidungsmaterial die Probleme des verzögerten Öffnens bzw. Nichtöffnens der Stopfen zu beheben.

Allgemeine Schlußfolgerungen und Ausblick zu COMET-T

Die durchgeführten Experimente zeigen, daß auch Oxidschmelzen durch Wasserzutritt von unten sehr effektiv gekühlt werden können. Die durchschnittliche Wasserzutrittsrate von mehr als 100 ml/s ist um eine Größenordung höher als zur Kühlung der Kernschmelze notwendig, bezogen auf die Ausbreitungsfläche der Kühleinrichtung. Auch Oxidschmelzen von ca. 40 cm Höhe können aufgrund des sehr wirksamen Fragmentierungsprozesses durch Wasserzutritt von unten schnell und sicher gekühlt werden. Das Verhalten der Oxidschmelzen unterscheidet sich nicht wesentlich vom Verhalten der 2-Komponenten-Schmelzen.

Die durchgeführten Experimente zeigen auch den Einfluß der Überhitzung der Schmelze auf den Fragmentierungs- und Kühlprozeß. Niedrige Überhitzung der Schmelze und beginnende Erstarrung zum Zeitpunkt des Wasserzutritts führt zu geringerer Porosität und niedrigerem Wasserzustrom in die Schmelze. Demgegenüber führt ein hoher Flutwasservordruck zu einer stark porös erstarrenden Schmelze und einer sehr hohen Wasserzutrittsrate, während ein niedrigerer Flutwasservordruck zu einer geringeren Porosität und demzufolge geringeren Wasserzutrittsrate führt.

Die Experimente werden fortgesetzt unter weiterer Variation der Wasserzutrittsbedingungen und der Schmelzenzusammensetzung, speziell unter Zugabe von metallischem Zirkalloy. In weiteren Versuchen kann die Versuchsanlage genutzt werden, um spezielle Fragestellungen dieses Kernfängerkonzepts zu beantworten.

4 COMET-H Experimente

Die COMET-H Experimente sind großskalige Experimente, die mit Thermitschmelzen von bis zu 800 kg durchgeführt werden. Mit der induktiven Beheizung der Schmelze mit Mittelfrequenzen von ca. 1000 Hz ist es möglich, die Nachwärmeleistung in der Schmelze mit der für die Kernschmelze charakteristischen Leistungsdichte zu simulieren, und zwar von Beginn des Auftreffens der Schmelze bis zum Erreichen der vollen Erstarrung und darüber hinaus.

Die Experimente stellen einen 1-dimensionalen kreisförmigen Ausschnitt von 92 cm Durchmesser der großen Kühleinrichtung dar. Die geometrischen Höhen, einschließlich der Höhen der Schmelzen entsprechen den Verhältnissen der realen Anordnung. Da auch die Temperaturen der Schmelze und ihre Stoffeigenschaften weitgehend einer realen Kernschmelze nach teilweiser Erosion der Opferschicht entsprechen, werden auch die charakteristischen Wärmeströme und Kühlprozesse praktisch 1:1 repräsentiert. Eventuell verbleibende Unterschiede der COMET-H Experimente, die durch die Verwendung der thermitisch erzeugten Oxidschmelze aus Aluminium- und Kalziumoxid, anstelle von Uranund Zirkonoxid in der Realität, werden durch zusätzliche Experimente mit Uran-reichen Schmelzen abgedeckt (s. 6.1.5). Es wird allerdings kaum mit wesentlichen Abweichungen bezüglich der Kühlbarkeit gerechnet.

Die Kühlfläche, die für die Kernschmelze bei dem COMET-Konzept zur Verfügung gestellt wird, liegt bei 100-150 m². Bei der anfänglichen Nachwärmeleistung in der Kernschmelze von etwa 30 MW folgt damit eine flächenbezogene Leistungsdichte von 200-300 kW/m². Die COMET-H-Experimente sind so ausgelegt, daß bei der vorgegebenen Kühlfläche von

zur Zeit 92 cm \emptyset eine Leistung von bis zu 300 kW kontinuierlich in der Schmelze erzeugt werden kann. Das entspricht einer Flächenleistungsdichte von 450 kW/m², liegt also auf der sicheren Seite der geforderten Leistungsdaten.

Im Jahr 1995 waren die ersten beiden Experimente (COMET- H 1.1 und H 1.2) durchgeführt und berichtet worden [2]. Bei diesen Experimenten waren noch Probleme mit der induktiven Beheizung der Schmelze aufgetreten, die zu Unterbrechungen der Heizung führten. Ursache hierfür waren die Schwankungen der Leistungsaufnahme der Schmelze durch die Eigenbewegung der Schmelze während der Phase des Wasserzutritts. Diese Laständerungen konnten von den Leistungsreglern zunächst nicht beherrscht werden.

So wurde vor dem anschließenden COMET-H-Experiment ein umfangreiches Programm zur Stabilisierung der Induktionsheizung zusammen mit dem Hersteller der Induktionsanlage durchgeführt, bei dem verschiedene Schwachstellen identifiziert und beseitigt wurden [3]. Dabei wurden verschiedene statische und dynamische Lastfälle für den Induktor realisiert und für die optimale Abstimmung der Regelkreise verwendet. Bei den inzwischen durchgeführten, weiteren zwei COMET-H-Experimenten haben sich diese Verbesserungen bewährt, und der stabile Induktorbetrieb konnte wie geplant über die vorgesehene Versuchsdauer aufrechterhalten werden. Damit hat sich die COMET-H-Anlage als einzigartige Versuchsanlage bezüglich stabiler, homogener Beheizung von Schmelzen unter den schwierigen Bedingungen der gleichzeitigen Kühlung bewährt. Der sichere Umgang mit heißen Schmelzen und die Verfolgung des Abkühlprozesses durch umfangreiche Instrumentierung konnte somit in weiteren Experimenten fortgesetzt werden.

COMET-H 1.3 Experiment

Dieses dritte Experiment zur Kühlung von Schmelzen in ebener Geometrie wurde im April 96 durchgeführt. Es stellt eine Erweiterung der bisher durchgeführten Experimente dar, da die maximal mögliche Schmelzenmasse von 800 kg bei kontinuierlicher Beheizung mit 300 kW bis nach Abschluß der vollständigen Erstarrung der Schmelze verwendet wurde. Die Höhe der Schmelze, ohne Gasblasenanteil und ohne Opferbeton, beträgt 32 cm. Davon entfallen 9,4 cm auf die unten liegende Stahlschmelze (340 kg Fe + 60 kg Ni) und 22,5 cm auf die oben liegende Oxidschmelze (224 kg Al_2O_3 + 176 kg CaO). Metall- und Oxidmasse betragen je 400 kg.

Die Kühleinrichtung nach dem COMET-Konzept ist aufgebaut wie in den Vorläuferexperimenten. Wegen der induktiven Beheizung der Schmelze im Experiment sind als Konstruktionsmaterialien nur Nicht-Metalle, d. h. überwiegend Kunststoffe einsetzbar. Diese Beschränkung entfällt natürlich für eine reale Anwendung. Abb. 5 zeigt die Kühleinrichtung vor Aufbringen der Deckschicht aus Opferbeton.



Abb. 5 COMET-Kühleinrichtung mit Schmelzstopfen/Kühlkanälen vor Aufbringen der Deckschicht aus Opferbeton

Die obere Kunststoffplatte trägt in einem Rastermaß von 8 cm 112 Stopfen aus Kunststoff, die bei Kontakt mit der Schmelze aufschmelzen und als Kühlkanäle den Wasserzutritt erlauben. Sie haben eine Höhe von 5 cm und werden in eine 10 cm hohe Schicht aus Opferbeton eingebettet, von der die oberen 5 cm zur Erosion durch die Schmelze bis zum Öffnen der Stopfen zur Verfügung stehen. Diese Schicht wurde hier noch aus dem Original HAW-Glas gefertigt, und zwar im wesentlichen aus kleinen Glaskügelchen von 1,5 bis 2 mm Durchmesser. Wie sich beim Experiment zeigte, erhöht die Verwendung solcher Kügelchen allerdings die Erosionsrate des Beton wegen geringerer Festigkeit bei Temperaturbelastung. Dies ist einer der Gründe, warum, wie oben erwähnt, nunmehr gebrochenes Borosilikatglas eingesetzt wird.

Unter der Tragplatte mit den Stopfen befindet sich die ebene Wasserschicht zur Versor-

gung der Stopfen, bespeist von einem höher liegenden Wasserbehälter. Der Differenzdruck des Wassers gegenüber dem statischen Druck der Schmelze auf der Betonschicht beträgt 0,2 bar und ist für das Eindringen des Wassers in die Schmelze nach Öffnen der Kanäle wichtig. In Abb. 5 sind Thermoelemente in verschiedenen Höhen in der Nähe der Stopfen erkennbar. Sie detektieren die Position der Schmelze während der Erosion des Betons und den Kühlungszustand der Schmelze. Weitere Thermoelemente befinden sich in der unteren Wasserschicht und auf wichtigen Strukturen der Kühleinrichtung. Wichtig ist auch die Messung der Zutrittsrate des Flutwassers, die in den Zulaufleitungen vorgenommen wird. Dort wird auch gleichzeitig der Wasserdruck gemessen. Diese Druckmeßstellen, wie auch entsprechende Druckmeßstellen im Gasraum oberhalb der Schmelze, registrieren auch eventuelle schnelle Druckspitzen, sollte es zu heftigen Reaktionen zwischen Kühlwasser und Schmelze kommen.

Abbildung 6 zeigt schematisch die Verwendung der Kühleinrichtung im Versuch.





Die Schmelze wird in einem separaten Behälter durch eine Thermitreaktion erzeugt und von oben auf die Kühleinrichtung aufgegossen. Bemerkenswert ist dabei, daß der aus einer Höhe von etwa 2,5 m frei fallende Schmelzestrahl keine wesentliche lokale Erosion der Opferschicht erzeugt. Dieses günstige Verhalten des Beton ist aus den früheren BETA - Experimenten bekannt und beruht wesentlich auf der sofort einsetzenden Gasfreisetzung aus dem Beton.

Die Zeitzählung im Experiment startet mit der Zeit 0 bei Beginn des Eingusses der Schmelze. Die gemessene Anfangstemperatur der Schmelze ist 1880 °C, der Einguß der Metallschmelze ist nach 13 s, der Oxidschmelze nach 39 s beendet. Abbildung 7 zeigt die in der Schmelze induktiv erzeugte Nettoleistung bis zum Zeitpunkt 2100 s, dem geplanten Abschalten der Heizung. Der zeitliche Mittelwert der Leistung beträgt 326 kW in sehr guter Übereinstimmung mit der Planung. Leistungsänderungen ergeben sich aus Änderungen der Ankopplungsverhältnisse als Folge von Geometrieänderung der Schmelze sowie Änderung ihrer elektrischen Eigenschaften. Durch Nachregeln der Induktorspannung konnte die Leistung ausreichend konstant gehalten werden.



Abb. 7 Simulierte Nachwärmeleistung in der Schmelze

Mit Einguß der Schmelze beginnt zunächst die Erosion der Betonopferschicht, bei der die aus dem Beton entweichenden Gase die Schmelze heftig durchströmen, stark verwirbeln und zum Teil hochschleudern. Beim vorliegenden Experiment erfolgt die Erosion der oberen 5 cm Opferschicht wesentlich schneller als in den früheren Experimenten, begründet in der hohen Schmelzenmasse, der hohen Eingußtemperatur, aber auch in der geringeren Temperaturfestigkeit des Betons, wie oben dargelegt. Daher beginnt der Zutritt des Kühlwassers bereits nach 112 s, also nach kaum 2 Minuten. Dieses zeigt die gemessene Einströmrate des Flutwassers in Abb. 8. Bis 3 Minuten steigt die Einströmrate auf 2 l/s und verteilt sich gleichmäßig auf die 4 Quadranten der Kühleinrichtung. Wie die Nachuntersuchungen zeigen, haben 75 Schmelzstopfen, das sind 67 % der verfügbaren Stopfen, gleichmäßig über die Fläche verteilt geöffnet. Die an Einzelstopfen gemessene Einströmrate liegt zwischen 30 und 70 ml/s pro Einzelstopfen. Das bedeutet allerdings, daß ein Teil der geöffneten Stopfen wenig zur Wassereinspeisung beiträgt. Die gemessene Einströmrate ist die höchste, die bisher in COMET-H-Experimenten beobachtet wurde.

Der gemessene Verlauf der Einströmraten an den Einzelstopfen zeigt auch, daß in der Anfangsphase des Wasserkontakts die Einströmraten stark schwanken. Erst ab etwa 180 s stabilisiert sich die Einstömung, was in der höheren Zähigkeit bzw. der beginnenden Erstarrung wesentlicher Bereiche der Schmelzen begründet ist, so daß sich die Strömungskanäle für das kühlende Wasser-Dampf-Gemisch stabilisieren. Ab 320 s sinkt die Einströmrate leicht. In Übereinstimmung mit der Höhenstandsmessung des Wassers in der Schmelze in Abb. 9 ist dies verursacht durch die beginnende Flutung der porösen Schmelze und den Anstieg des Flutwassers, wodurch sich der treibende Druck für das Flutwasser vermindert. Das heißt, daß bis zu diesem Zeitpunkt das Wasser vollständig verdampft; danach übersteigt die Einströmrate die Verdampfungsrate, und das Wasser flutet die erstarrende Schmelze von unten.

Die in Abb. 8 sichtbaren Unterbrechungen der Wassereinströmung wurden während des Experiments von der Schaltwarte vorgenommen, um ein Überspeisen des Versuchsbehälters zu verhindern. Abb. 9 zeigt, wie durch diese Maßnahme der Wasserstand über der vollständig gefluteten Schmelze begrenzt wird.

Bei dem in Abb. 9 dargestellten Höhenstand des Kühlwassers ist zu berücksichtigen, daß



Abb. 8: Volumenstrom des eintretenden Kühlwassers in der Schmelze



Abb. 9: Höhenstand des Kühlwassers (ohne Dampfblasen) in und über der Schmelze

dieser über eine Druckmessung bestimmt wurde. Der Höhenstand repräsentiert daher die Höhe der Wasserschicht ohne Dampfblasenanteil, der während der starken anfänglichen Verdampfung zu einer Verdopplung der Höhe des Wasser-Dampf-Gemisches führen kann.

Aus der Videobeobachtung der Schmelzenoberfläche erkennt man, daß die Erstarrung der Schmelze zum Zeitpunkt 200 s erfolgt. Die Oberfläche der Schmelze ist dann aber noch hellglühend. Bei 265 s ist die Schmelze so weit abgekühlt, daß sie wegen fehlenden Eigenleuchtens nicht mehr im Video erkennbar ist. Nach 480 s ist die Schmelze vollständig geflutet und mit Wasser überdeckt. Aus der Abgasstrecke entweicht ein kontinuierlicher, langsam schwächer werdender Dampfstrom, der die entspeicherte Energie und die simulierte Nachwärme aus der Schmelze abführt. Die Beheizung der Schmelze wird über weitere 27 Minuten fortgesetzt, um die Langzeitkühlbarkeit der porös erstarrten Schmelze zu prüfen. Dabei treten keinerlei Probleme auf: Die Nachwärme wird kontinuierlich abgeführt. Die Temperaturen in der erstarrten Schmelze und in den angrenzenden Strukturen liegen bei 100 °C oder nur wenig darüber, und die hohe Porosität der Schmelze läßt das Kühlwasser in ausreichendem Maße zutreten und den Dampf abströmen.

Tabelle 4 stellt die wichtigen Beobachtungen zusammen. Die darin angegebenen Kühlraten der Schmelze beruhen auf der Auswertung der Verdampfung des Kühlwassers, basierend auf Messungen des Einstromes bzw. des Höhenstandes in Abb. 8 und 9. Dabei wurde die Überhitzung des Dampfes berücksichtigt, dessen Temperatur im kurzen Zeitraum bis 130 s maximal 800 °C beträgt und ab 200 s unter 250 °C fällt. Leider wurde die in der Abgasstrecke der Versuchsanlage installierte Meßtechnik zur direkten Messung der Dampfabströmung durch die unerwartet hohe Temperatur zerstört und lieferte keine Meßwerte. Im Nachfolgeversuch sind aber entsprechende Meßdaten vorhanden (s. COMET-H 2.1). Die aus der Verdampfungsrate ermittelten Werte sind jedoch sehr zuverlässig, da die Messung der einströmenden Wassermenge einen Fehler <5 % aufweist.

Die zum Zeitpunkt 1850 s angegebene Kühlrate von 390 kW übersteigt die Heizleistung um 18 %. Dies ist vor allem die Folge eines geringen Leckageverlustes des eingeströmten Kühlwassers aus dem Versuchsbehälter zum späten Zeitpunkt (60 kW entsprechen 25 ml Wasser je Sekunde), so daß die im stationären Zustand erreichte Gleichheit von erzeugter und abgeführter Heizleistung vor Abschaltung der Heizung in guter Weise gegeben ist.

Zeit/s	Vorgang	Bemerkung
110	Beginn Wasserzutritt bei vollständiger	Eruptionen durch verdampfendes
	Verdampfung des Kühlwassers	Wasser
200	Schmelze erstarrt, aber noch hellglü-	Wassereintritt ist gleichmäßig auf
	hend	1,6 l/s angestiegen, wegen vollständi-
		ger Verdampfung Kühlrate 4,5 MW
265	Oberfläche der erstarrten Schmelze	Kühlrate 5,4 MW
	dunkel	
300	maximale Einströmrate bei noch voll-	max. Wassereintritt 2 l/s,
	ständiger Verdampfung	max. Kühlrate 5,7 MW
320	Flutung der porösen Schmelze von	Anstieg des Flutwasserstandes beob-
	unten beginnt	achtbar
480	Schmelze vollständig geflutet und	Wassereintrittsrate geringfügig gefal-
	wasserüberdeckt	len durch Anstieg des Wasserstands
		im Tiegel (1,7 l/s)
ca. 800	Wasserzutritt abgesperrt zur Begren-	Kühlrate 1,35 MW,
	zung des Wasserstands	Heizleistung 350 kW
1850	stationäre Kühlung bei konstanter	Kühlrate 390 ± 20 kW (aus Abnahme
	Nachwärmeerzeugung in erstarrter	Wasserstand), Heizleistung 330 kW
	Schmelze	
2100	Abschaltung der Nachwärmesimula-	Dampfentwicklung fällt nachfolgend
	tion	auf 0

 Tabelle 4:
 Vorgänge bei Kühlung der Schmelze in COMET-H 1.3

Bemerkenswert ist, wie auch schon bei den ersten Experimenten beobachtet, der hohe Energieaustrag aus der Schmelze und damit einhergehend die schnelle Erstarrung. Dadurch endet auch die Erosion sowohl des Opferbetons wie auch eventuell seitlicher Begrenzungen. Auch im vorliegenden Experiment wurde der Opferbeton praktisch nur bis zur Oberkante der Schmelzstopfen erodiert, und die verbleibende Dicke des Restbetons von 5 cm war ausreichend, um die Temperatur der Tragplatte aus Kunststoff auf unter 100°C zu halten. Entsprechend niedrige Temperaturen wurden auch hinter dem keramischen Schutzrohr gemessen, das nicht erodiert wird.

Abb. 10 zeigt in Aufsicht die verbliebene Schicht des Opferbetons, in der auch die geöffneten Kühlkanäle im quadratischen Raster erkennbar sind. Die Erosion ist nahezu gleichmäßig erfolgt, auch wenn zwischen dem Öffnen der verschiedenen Kühlkanäle zum



Abb. 10: Aufsicht auf verbliebene Schicht des Opferbetons mit geöffneten Kanälen für Wasserzutritt

Teil Zeitunterschiede von bis zu 80 s liegen. Das heißt, daß das Ende der Erosion unmittelbar durch das lokal eindringende Kühlwasser vorgegeben wird. Auch die Thermoelemente an der Schmelzfront reagieren sehr schnell auf das Eindringen von Wasser und messen dann Temperaturen nahe 100 °C.

Abbildungen 11 und 12 zeigen die porös erstarrte Schmelze, und zwar in Aufsicht bzw. im vertikalen Schnitt entlang der Mittelachse. Der Schnitt ist so ausgeführt, daß ein kleines Segment der Grundfläche, das nicht mit Metall, sondern nur mit Oxid bedeckt ist, im rechten Teil der Schnittebene liegt. Die helle, etwa 14 cm hohe Schicht am Boden der linken Hälfte ist die erstarrte Metallschmelze, die darüberliegende grob poröse Schicht die erstarrte Oxidschmelze. Der hohe Anteil an Porosität verbunden mit der großen inneren Oberfläche ist für die gute Kühlbarkeit und die hohe Durchlässigkeit für die Wasser-Dampf-Strömung verantwortlich. Diese Porosität entsteht im wesentlichen während der



Abb. 11: Oberfläche der porös erstarrten Schmelze in COMET-H 1.3



Abb. 12: Querschnitt der porös erstarrten Schmelze in COMET-H 1.3

Phase der Erstarrung. Erfolgt diese über einen größeren Temperaturbereich mit einem erheblichen Anstieg der Zähigkeit wie bei dem mit Glas vermischten Oxid, so kann sich, verglichen mit dem Metall, eine höhere Porosität aufbauen.

Wichtig für die Einsetzbarkeit des COMET-Konzepts sind die Möglichkeit und eventuelle Auswirkungen von energetischen Wechselwirkungen bei direktem Kontakt des Kühlwassers mit der heißen Schmelze. Wichtig hierfür sind Temperatur und Stoffeigenschaften der Schmelze, insbesondere ihre Zähigkeit, und die Menge des verfügbaren Wassers. In letzterem Punkt wurde bereits gezeigt, daß wegen der kontrollierten Wasserzufuhr durch die Einzelstopfen die reaktionsfähigen Wassermengen so klein sind (wenige Kubikzentimeter), daß Dampfexplosionen, selbst wenn sie auftreten, sehr lokale Ereignisse mit geringer Energiefreisetzung sind. Im hier vorliegenden Experiment war die Schmelze wegen der früh einsetzenden Kühlung heißer und dünnflüssiger als bei den Vorläufer-Experimenten. So kam es zwar zu Beginn der Kühlung zu heftigeren Reaktionen mit Erup-



Abb. 13: Druckverlauf in Wasserzuführung (WP3) und im Gasraum über der Schmelze (HP1)

tionen von Schmelze; Dampfexplosionen wurden aber wiederum nicht registriert. Dies zeigen die in Abb. 13 dargestellten Drücke in der Wasserzuführung und im Gasraum über der Schmelze, die nur kleine Druckschwankungen bei Beginn der Flutung als Folge schneller Verdampfung zeigen. Dampfexplosionen würden Druckspitzen von mehreren 10 bar oder höher verursachen.



Abb. 14: Freisetzung der Gase (ohne Wasserdampf) während der Schmelzekühlung

Die in der Abgasstrecke gemessene Konzentration freigesetzter Gase, mit Ausnahme von Wasserdampf, zeigt Abb. 14. Die Verzögerung zwischen Freisetzung der Gase und ihrer Registrierung am Meßgerät liegt bei etwa 1 Minute. Versuchsbedingt kann die Registrierung der Gase erst ab etwa 2 Minuten nach Start des Eingußes erfolgen. In dieser Phase entstehen - hier praktisch nicht registrierte - Gase allein aus der Betonerosion. Mit Zutritt des Kühlwassers nimmt wegen der Metalloxidation zunächst die Wasserstoffentwicklung zu. Sie fällt aber mit Abkühlung und Erstarrung der Metallschmelze sehr schnell ab und ist bereits nach 7 Minuten im Rahmen der Meßgenauigkeit auf Null abgesunken. Die integrierte Wasserstoffmenge ergibt sich zu etwa 6000 I, entsprechend 540 g. Im Experiment

wird dieser Wasserstoff bei Austritt aus dem Abgasrohr abgebrannt. Ab 2:25 min dominiert der Dampfgehalt im Abgas, so daß der geringer werdende Wasserstoff nicht mehr gezündet werden kann. Die übrigen Gase sind ohne Bedeutung.



Abb. 15: Extinktionsmessung als Maß für die Aerosolkonzentration im Abgas

Gemessen wurde auch die Freisetzung von Aerosolen mit der Gasströmung. Abb. 15 zeigt als Maß für die Aerosoldichte im Abgas die Extinktion eines Laserstrahls. Die in der Anfangsphase während der Betonerosion entstehenden Aerosole führen zunächst zum Vollausschlag des Meßgerätes. Bereits 20 s (Time = 130 s) nach Beginn des Wasserzutritts nimmt die Aerosoldichte drastisch ab und erreicht dann einen sehr niedrigen Wert, der langzeitig bestimmt ist durch Mitriß von Partikeln, die im Wasser der gefluteten Schmelze suspendiert sind. Dies bestätigen auch die elektronenmikroskopischen Aufnahmen von Filterproben in Abb. 16 in der Vergrößerung 1:2000. Bild (a) zeigt die frühen Aerosole mit nadel- und kugelförmigen Partikeln von 0,1 bis 5 µm, teilweise in Agglomeraten. Bild (b) zeigt trotz 3-fach längerer Beladezeit nur ganz vereinzelte kugelförmige Partikel kleiner 0,5 µm. Dies dokumentiert den drastischen Rückgang der Aerosolerzeugung.



Abb. 16: Vergrößerung von Aerosol-Filterproben:

- (a) Filterbeladung von 120 180 s
- (b) Filterbedladung von 750 930 s

(a)

(b)

Zum Nachweis der stabilen Langzeitkühlung der Einrichtung gibt Abb. 17 den Temperaturverlauf in wichtigen Bereichen wieder. BT 25 ist die Temperatur in 40 mm Höhe der Beton-Opferschicht, also 10 mm unter der Oberkante der Stopfen. Sie steigt zunächst mit Annäherung der heißen Schmelze an, fällt aber dann sehr schnell mit Einsetzen des Wasserzutritts auf 100 °C. Die Oberflächentemperatur CT 8 der Kunststoffdeckfläche, die die Stopfen trägt, erreicht maximal 100 °C, und die Temperatur CT 3 hinter dem Keramikrohr verbleibt dauernd unter der Siedetemperatur. Die Kühlung durch das stagnierende, siedende Kühlwasser ist so wirkungsvoll, daß vor Abschalten der Beheizung der Schmelze zum Zeitpunkt 2100 °C eine Überhitzung nicht zuerkennen ist.



Abb. 17: Temperaturverlauf bis nach Ende der Beheizung nahe der Oberfläche der erodierten Beton-Opferschicht (BT 25), auf der Oberfläche der Kunststoff-Tragplatte (CT 3) und hinter dem Keramikrohr (CT 8).

Dieses Experiment hat also die kurz- und langzeitige sichere Kühlung der Schmelze bestätigt, wobei die Nachbeheizung der Schmelze einem hohen Nachwärmeniveau entsprach. Trotz der großen Schmelzenhöhe von 32 cm (ohne Gasblasenanteil) erwiesen sich die Kühlungs- und Fragmentierungsvorgänge durch den Wasserzutritt als so wirkungsvoll, daß eine Begrenzung der Kühlbarkeit durch die Höhe der Schmelze noch nicht zu erkennen war. Bezüglich der Höhe der Opferschicht oberhalb der Stopfen zeigt sich für reale Anwendungen, daß im Hinblick auf hohe Schmelzenmassen Opferschichthöhen von 15 bis 20 cm sinnvoll sind, um die Temperatur der Schmelze vor Wasserzutritt ausreichend zu erniedrigen und ihre Zusammensetzung günstig zu beeinflussen.

COMET-H 2.1 Experiment

Die weiterführenden COMET-H-Experimente untersuchen nun, nach Bestätigung der Kühlbarkeit in Standardsituationen, die Kühlbarkeit von Schmelzen unter extremen Bedingungen. Hierzu gehört der Einfluß ungleichmäßiger Erosion der Opferschicht und das lokale Einsetzen der Wasserzufuhr, während wesentliche Bereiche der ausgedehnten Schicht noch nicht geflutet werden. Abb. 18 zeigt, wie diese Situationen im Experiment COMET-H 2.1 im Herbst 1996 simuliert wurde. Die im Norden der Kühlfläche angebrachten, um 30 mm längeren Stopfen werden als erste von der vordringenden Schmelze getroffen, so daß hier lokal das Eindringen des Wassers von unten beginnt. Es ist zu erwar-



Abb. 18: Prinzipaufbau von COMET-H 2.1 zur Simulation des Einflusses ungleichmäßiger Erosion (nicht maßstäblich) ten, daß diese Kühlung nur begrenzt wirkt, so daß die Schmelze in anderen Bereichen weiter vordringt, bis auch dort der Zutritt von Wasser mit Öffnen weiterer Stopfen erfolgt, so daß im günstigen Fall die vollständige Kühlung erreicht wird.

Der im Experiment eingesetzte Kühleinsatz verwendet 11 Stopfen der Länge 80 mm, angeordnet im nördlichen Bereich der kreisförmigen Kühlfläche, und 46 kürzere Stopfen von 50 mm Länge auf dem größeren Teil der Fläche. Die Zahl der Stopfen ist gegenüber früheren Experimenten um fast die Hälfte auf 57 reduziert, wodurch sich ein auf 113 mm vergrößertes quadratisches Raster ergibt. Zur Fertigung der Betonopferschicht wurde ausschließlich das kommerzielle, oben beschriebene Borosilikatglas verwendet. Die Masse der Thermitschmelze beträgt 650 kg (50 % Metall, 50 % Oxid), und die Heizleistung wird bei 300 kW gehalten. Der Versuchsaufbau entspricht ansonsten Abb. 6.

Der Versuch verlief zunächst wie erwartet. Die Schmelze war allerdings mit einer unerwartet niedrigen Temperatur von 1690 °C eingegossen worden. Sie kühlt sich infolge der Betonerosion weiter ab, stabilisiert sich aber durch die Nachbeheizung mit etwa 300 kW (Abb. 19) auf einem Niveau, bei dem, wie im Video sichtbar, die obenliegende Oxidschmelze dünnflüssig bleibt. Die Erosionsrate der Opferschicht liegt zunächst bei



Abb. 19: Leistungseinspeisung in die Schmelze in COMET-H 2.1

0,07 mm/s, das heißt, daß zunächst durch Betonerosion 2/3 der Heizleistung nach unten abgeführt werden. Nach Erosion der oberen 80 mm Opferschicht setzt bei 755 s der Wasserzutritt ein, weil lange Stopfen im Norden durch die Schmelze geöffnet werden. Bis 1222 s sind insgesamt 4 hohe Schmelzstopfen geöffnet, die Flutrate ist auf etwa 200 ml/s angestiegen (Abb. 20). Dadurch stoppt die Erosion im Bereich der langen Stopfen, und die Kühlung führt zu fortschreitender Erstarrung in der nördlichen Tiegelhälfte. Der Kontakt von Wasser und Schmelze führt dabei zu keinerlei heftigen Reaktionen. Zum Teil bricht die Oberflächenkruste wieder auf und es wird darunterliegende Schmelze hochgetrieben.

Erwartungsgemäß geht zunächst die Erosion im Bereich niedriger Stopfen weiter. Ab 1400 s beginnen dort, Stopfen zu öffnen, und der Wasserzutritt steigt auf bis 800 ml/s. Damit erhöht sich auch die Verdampfungsrate des Kühlwassers, und der mit der Dampfströmung abgeführte Wärmestrom steigt kurzzeitig auf nahe 2 MW (Messung der Abgasströmung in Abb. 21). Nach 1415 s ist die Schmelze vollständig von Wasser überdeckt, teilweise wird durch die aufbrechende Kruste Schmelze in das Kühlwasser ausgetragen (Unterwasservulkan), wo sie porös erstarrt, ohne daß es zu heftigen Reaktionen mit dem Wasser kommt. Trotz der in dieser Phase guten Kühlwasserversorgung werden jedoch geringe Bereiche der Metallschmelze im Zentralbereich unzureichend gekühlt, während die Oxidschmelze porös erstarrt. In einigen Fällen verschließt erschmolzener Opferbeton bereits geöffnete Stopfen. Durch kurzzeitige Unterbrechung der Wasserversorgung, die von der Schaltwarte vorgenommen wurde, um den Wasserstand über der Schmelze zu begrenzen, wird dieser negative Effekt verstärkt, und ein schlecht gekühlter Metallbereich durchdringt schließlich die obere Kunststoffplatte noch lokaler Erosion der Betonopferschicht. Dadurch wird zum Zeitpunkt 1983 s durch das Sicherheitssystem eine Abschaltung der Schmelzenbeheizung vorgenommen, und die Schmelze erstarrt dann vollständig. Die durchgetretene Schmelzenmasse war kleiner als 100 g, und sie wurde natürlich durch die untere wasserführende Schicht sofort gekühlt.







Abb. 21: Abgeführter Wärmestrom durch gemessene Dampfströmung in COMET-H 2.1

Die erstarrte und geschnittene Schmelze zeigt Abb. 22. Der Schnitt wurde so gelegt, daß der Bereich der Schmelze, der zum Durchschmelzen der Kunststoffplatte geführt hat, gut sichtbar wird (rechter Teil in Abb. 22). Man erkennt rechts die schlecht gekühlten Bereiche der Metallschmelze, die langsam den schon bei Temperaturen um 1000 °C flüssig werdenden Opferbeton (Glasverflüssigung) durchdringen konnte, auch wenn das Metall selbst erstarrt oder teilerstarrt, aber noch auf höheren Temperaturen ist. Demgegenüber weist der Oxidanteil die gewohnte Porosität und Kühlbarkeit auf.



Abb. 22: Schnitt durch die erstarrte Schmelze von COMET-H 2.1

Das im Hinblick auf vollständige Kühlbarkeit der Schmelze nicht ganz befriedigende experimentelle Ergebnis kann verschiedene Ursachen haben. Einerseits hat sicherlich die Halbierung der Anzahl der Schmelzstopfen die Kühlungsbedingungen in diesem kritischen Fall verschlechtert. Hinzu kommt, daß sich - wegen der hier verwendeteten induktiven Beheizung - die Leistungsdichte in tieferliegenden Metallbereichen wesentlich verstärkt, so daß durch eine positive Rückkopplung die lokale Erosion begünstigt wird. Als vermutlich wichtigste Ursache wird aber die, verglichen mit der Erstarrungstemperatur der Schmelze, niedrige Schmelztemperatur der Glasbeton-Opferschicht angesehen. So ergeben Rechnungen mit dem WECHSL-Programm, daß für die hier vorliegende Situation unter stationären Bedingungen, aber ohne Kühlung durch Flutwasser, die Metallschicht in ihrem unteren Teil eine dünne, erstarrte Kruste gebildet hat, die noch so heiß ist, daß sie den Glasbeton aufschmilzt. Da die Kruste durch das eintretende Wasser nicht aufgebrochen werden kann, kann die Kühlung des Metalls problematisch sein. Natürlich würden bei Verwendung einer Stahl- statt einer Kunststoffplatte, wie in der Reaktoranwendung vorgesehen, die Folgen wesentlich abgemildert sein.

Zur grundsätzlichen Lösung dieses speziellen Problems ist eine geringfügige Veränderung des Aufbaus der Betonschicht vorgesehen. Die untere Schicht bis zur Oberkante der Stopfen bei 50 mm wird aus hochtemperaturbeständigem Beton hergestellt. Dadurch stoppt in jedem Fall die Erosion, bei unzureichender Kühlung auch mit einem begrenzten Temperaturanstieg in Teilen der Schmelze, und es steht ausreichend Zeit für eine hinreichende Fragmentierung und damit verbesserte Kühlung zur Verfügung. Ein so modifiziertes Experiment ist für Frühjahr 1997 vorgesehen.

5 Experimente mit prototypischen Schmelzen

Zur Simulation der Kernschmelze werden in den Experimente COMET-T und COMET-H Thermitschmelzen verwendet. Diese können bezüglich ihrer Metallschmelzen wie Kernschmelzen eingestellt werden. Die Oxidschmelzen sind, unter Berücksichtigung des eingemischten Glasbetons, weitgehend ähnlich, jedoch erscheinen im Hinblick auf eine klare Nachweisführung ergänzende Experimente mit oxidischen UO₂-haltigen Schmelzen wünschenswert.

Daher wurde in Zusammenarbeit mit dem Argonne National Laboratory (ANL) in USA ein Versuchskonzept erarbeitet, das die im ANL im Rahmen der MACE Experimente entwikkelten experimentellen Möglichkeiten nutzt. Es sind nunmehr zwei Experimente nach Abb. 23 vorgesehen. Dabei wird die UO₂-haltige Schmelze in einem zylindrischen Versuchsbehälter (Innendurchmesser 30 cm) erzeugt und wird dann, nach Erosion einer dünnen Opferschicht, von unten geflutet. Die Schmelzenmasse soll 110 kg betragen, die aus einem speziellen Uranthermit erzeugt werden. Das Experiment ist also analog zu den transienten



Abb. 23: Geplante COMET-Experimente unter Einsatz UO₂-haltiger Schmelzen

COMET-T-Experimenten, so daß im direkten Vergleich Aussagen über die Übertragbarkeit zu erwarten sind.

6 Kenntnisbewertung und Ausblick

Die berichteten COMET-Experimente haben wichtige Aussagen zur Anwendbarkeit des COMET-Kühlungskonzepts erbracht. Die sichere Kühlbarkeit durch die hohe Porosität der erstarrenden Schmelze wurde auch für Oxidschmelzen bestätigt. Das inzwischen dritte Experiment mit nachbeheizten Schmelzen in regulärer Geometrie hat auch bei Schmelzen von 32 cm Höhe eine sehr gute Kühlbarkeit erbracht. Ein Problem durch Dampfexplosionen bei Kühlwasserzutritt von unten wurde nicht beobachtet. Ein weiterer Vorteil des Konzepts ist die Aufrechterhaltung niedriger Temperaturen in der Umgebung der Kühleinrichtung.

Bei Untersuchung lokal einsetzender Kühlung auf einer großen Kühlfläche konnten allerdings Teilbereiche der metallischen Schmelze nicht vollständig gekühlt werden. Durch eine geringfügige Änderung im Aufbau der Opferschicht im folgenden geplanten Experiment wird erwartet, daß dieses Problem beseitigt werden kann.

Zwei vorgesehene Experimente mit realen UO₂-haltigen Schmelzen sollen die Übertragbarkeit der bisherigen Aussagen auf Corium-Schmelzen absichern. Hierzu dienen auch separate Zähigkeitsmessungen von Schmelzen. Vorgesehen sind weitere Experimente unter Verwendung des chemisch sehr aggressiven, metallischen Zirkoniums. Falls notwendig, können auch weitere Versuchsparameter variiert werden. Damit wird in naher Zukunft eine gut fundierte Bewertung des COMET-Konzepts möglich sein.

Wegen der sehr effektiven Kühlung der Schmelze, die im Reaktorfall in einem Zeitraum von vermutlich 30 bis 60 Minuten zur vollständigen Erstarrung der Schmelze führt, wird eine bedeutende Menge Wasserdampf in den Sicherheitsbehälter freigesetzt. Unter Verwendung des CONTAIN-Rechenprogramms wurde für das EPR-Containment der dadurch entstehende Druckanstieg berechnet [6], und zwar unter der Vorgabe, daß in einem Zeitraum von 5, 15 bzw. 30 Minuten die gesamte thermische Energie aus der Schmelze in Dampf umgesetzt wird. Abb. 24 zeigt den berechneten Containmentdruck, der ermittelt wurde unter der Annahme, daß der Containmentdruck bereits vor Beginn des Wasserzutritts 2 bar beträgt. Die ausgezogene Linie gibt den kurzzeitig auftretenden Maximaldruck als Funktion des Zeitraums für die Entspeicherung der Energie. Die gestrichelten Kurven geben den Druck-Zeitverlauf bei verschiedenen Entspeicherungszeiten. Man erkennt, daß die Maximaldrücke nur kurzzeitig auftreten, da die Energie durch Wärmeleitung in die Betonstrukturen eingespeichert werden. Zudem liegen sie unter dem Auslegungsdruck des Containments. Bei diesen Rechnungen ist unterstellt, daß der Wasserinhalt des IRWST, dessen Speichervermögen etwa der Energie der Schmelze entspricht, nicht zur Einspeicherung von Energie genutzt werden kann. Die schnelle Kühlung beim COMET-Konzept führt also nicht zu problematischen Belastungen des Sicherheitsbehälters.



Abb. 24: Druck im Sicherheitsbehälter durch Entspeicherung der thermischen Energie der Kernschmelze in Dampf über einen Zeitraum von 5, 15 oder 30 Minuten

Literatur

- [1] S. Weisenburger, FZK, persönliche Mitteilung
- [2] J.J. Foit , FZK, persönliche Mitteilung,
- [3] H. Alsmeyer, W. Tromm: COMET Konzept, in "Untersuchungen zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen (Unfällen) in Leichtwasserreaktoren", Zusammenarbeit KfK/EVU/Siemens, 1. Fortschrittsbericht, März 1994
- [4] H. Alsmeyer, et al.: COMET Konzept, in "Untersuchungen zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen (Unfällen) in Leichtwasserreaktoren", Zusammenarbeit FZK/EVU/Siemens, 3. Fortschrittsbericht, März 1996
- [5] Mussa, S., Tromm, W., Cron, T., Benz, H.; Funktionstest und Einsatz der Induktionsspule zur Beheizung der Schmelze in den COMET-Experimenten, FZKA-5844, Dez. 1996
- [6] W. Baumann, W. Scholtyssek, FZK, persönliche Mitteilung

 II. A. <u>Untersuchungen zum EPR-Konzept – KATS und KAPOOL-Experimente</u> (G. Engel, F. Fellmoser, G. Fieg, H. Massier, H. Werle, INR; F. Huber, N. Prothmann, D. Raupp, U. Ziegler, IRS)

1. Introduction

Special devices (core catchers) might be required in future Pressurized Water Reactors to prevent containment failure by basement erosion after pressure vessel meltthrough during a core meltdown accident. For the planned European Pressurized Water Reactor (EPR) the core catcher concept is based on spreading the core melt on a horizontal surface and cooling it by water from top [1]. The core melt is temporarily (~ 1 h) stored in the reactor pit to allow for gathering and heatup of a large fraction of the core melt and to ensure sufficient fluidity for homogeneous spreading. After meltthrough of a "gate", the core melt shall be released quickly (within a few ten seconds) from the reactor pit and shall spread homogeneously on a large (170 m²) horizontal spreading area. After spreading the core melt is flooded with water from top (by passive devices).

Two slightly different designs of the EPR concept have been proposed: in the initial "EPR Reference Concept" [1], both, the walls of the reactor pit and the spreading area are protected by high-melting ZrO₂ ceramic. The gate consists of a thick vertical plate and there is no cooling device in the bottom below the spreading surface. In the "Improved Reference Concept" [2], the walls of the reactor pit, including the horizontal gate (steel plate), and the spreading surface are protected by sacrificial concrete. Below the sacrificial concrete, the spreading surface consists of layers of iron, ZrO₂ and concrete and the bottom is actively cooled. The eroded sacrificial concrete will be admixed to the oxidic corium melt causing a decrease of the liquidus and solidus points, a reduction of the uncertainties in the material properties and finally (either already in the reactor pit or at least in the spreading compartment), density inversion (oxidic melt becomes less dense than metalic melt). This will improve spreading behaviour and its

prediction and shall avoid contact and chemical interaction of the oxidic melt and the ZrO₂ of the spreading area (this is also the purpose of the steel layer in the spreading surface).

The goal of the test series KAPOOL and KATS is to study some fundamental phenomena related to the EPR concept, especially the melting behaviour of the gate (KAPOOL) and melt spreading (on dry and wet horizontal surfaces), flooding initiation devices and finally the phenomena during flooding of spread melts (KATS). In the experiments the two components of the core melt (UO_2/ZrO_2 and Zr/Fe) are simulated by Al_2O_3 and Fe melts (temperature ~ 2300 °C) produced by a thermite reaction. The results of most tests cannot be applied directly to the reactor case but are used to verify theoretical models which describe the behaviour of core melts.

The test series KAPOOL has been started mid 1996. The goal is to study the erosion behaviour of a horizontal gate consisting of a layer of sacrificial concrete above a steel plate (as proposed for the "Improved Reference Concept [2]) by an overlying melt. Five tests (each with 100 to 150 kg thermite) have been performed (table 1).

The test series KATS has been started 1993. The main goals are:

1) Spreading

- Generation of dry, 1- and 2-dimensional spreading data for inert (ceramic) surfaces and relevant spreading regimes (inertial, viscous and finally crust formation dominated) to check existing codes, especially CORFLOW,
- Study the influence of moisture or shallow water layers (from condensed vapor) on the spreading surface and of gas production (from painting and/or erosion of concrete) on the spreading,
- 2) Test of flooding initiation devices, which are passively actuated by melt arrival
- 3) Study the phenomena during flooding of spread core melts with water from top (parameters flooding mode and rate).
Results of previous tests have been discussed elsewhere [3]. In 1996 three tests (each with 300 kg thermite) have been performed (KATS-7 to KATS-9, table 2).

2. KAPOOL test series

The main goal of this test series (table 1) is to study the erosion behaviour of a horizontal gate consisting (similar as in the "Improved Reference Concept" [2]) of a steel plate protected by a sacrificial concrete layer. In the later tests (starting with KAPOOL-3), in addition, melt spreading on concrete surfaces, flooding initiation devices and the phenomena during flooding of the spread melts were studied.

Masses of 100 to 150 kg of thermite type (R70SSH and 10AlSSH, respectively, see table 1) are ignited in a steel vessel. In KAPOOL-2 fifteen times 2 kg and in KAPOOL-3 three times 3 kg of thermite were added later to reduce melt cooling down. The inner walls of the steel vessel, except the gate at the bottom are protected by 40 mm of Cordierite (in KAPOOL-5 by an Al_2O_3 -based material). After erosion of the gate, in the later tests, the released melt spread on a concrete surface (width ~ 40 cm, length 150 - 225 cm) to a height of about 8 cm and the spread melt was finally flooded by a water film (with a flow rate of 100 and 250 g/s, respectively) (fig. 1). The concrete layer of the gate and of the spreading surface consists of "glass" concrete (~ 82 wt% glass, ~ 16 wt% cement, ~ 2 wt% water; after drying). The concrete layer and the steel plate of the gate are instrumented with type K thermocouples to detect the erosion front. The melt temperature is measured with W-Re thermocouples. All tests are documented with several video cameras. Details and results of the various tests are summarized in table 1.

In <u>KAPOOL-1</u> melt release from the gate started 52 s after ignition and the total melt was released within about 6 s (table 1). Examination of the gate after the test showed that 84 cm² of the gate (37 % of the total gate area) were eroded and that the concrete layer was essentially completely eroded (fig. 2).

In <u>KAPOOL-2</u>, both the thickness and the area of the gate were increased as compared to KAPOOL-1 and fifteen times packages of 2 kg thermite were added to

the initial 100 kg of thermite at later times. In this test the steel plate becomes very hot (~ 1200 °C, bright glowing), but did not melt and the melt stayed in the vessel. The initial 50 mm thick concrete layer was found to be completely eroded.

In <u>KAPOOL-3</u> the gate thickness and area were in between those of KAPOOL-1 and -2. Three times packages of 3 kg thermite were added to the initial 100 kg of thermite. Melt release started 72 s after ignition and lasted for about 23 s, much longer than in KAPOOL-1 (~ 6 s). In agreement with this long release time it was found that only about 10 cm² (2.5 % of the total gate area) of the gate were eroded and that in the residual gate area the steel layer was still covered with a thin (2-5 mm) concrete layer (fig. 2). In the tests KAPOOL-3 to -5 the experimental program was extended to study in addition (fig. 1).

- 1. melt spreading on a concrete surface (same composition as that of the gate)
- 2. flooding initiation devices (horizontal and vertical steel cables, only in KAPOOL-3) and
- phenomena during flooding of the spread melt (height ~ 8 cm) by a water film from the channel end.

No remarkable difference in spreading behaviour on concrete compared to that on ceramic (KATS tests) was observed. The steel cables melted, as required, immediately after contact with the melt (KAPOOL-3). Vigorous movements of the melt surface (oxide above metal melt) and a regular pattern of hydrogen flames (from concrete erosion and water vapor reduction to hydrogen by the metalic melt) were observed. Flooding with a water film from the channel end was initiated by hand about 5 s after end of melt release. The flooding front moved steadily forward into the channel. In agreement with the KATS tests, no energetic melt/water interaction was observed during flooding. About 3 - 4 cm of the concrete spreading surface have been eroded by the overlying melt.

In <u>KAPOOL-4</u> the 40 mm thick Cordierite plates protecting the steel vessel were at several places heavily eroded. At one place (sidewards near the bottom), the plates

were penetrated and the melt was released through this hole before the gate was eroded.

The unusual strong erosion of the Cordierite plates in KAPOOL-4 gave rise to choose in <u>KAPOOL-5</u> a Al_2O_3 -based protecting layer (stamping mass type SITAL-CAST-042, 40 mm thick, dried at 1200 °C). Melt release through the gate started 75 s after ignition and lasted for about 8 s. In contrast to KAPOOL-3, in this test, the gate was penetrated at several places. About 82 cm of the gate (21 % of the total area) were eroded and the concrete layer was completely eroded (fig. 2). The same phenomena as in KAPOOL-3 were observed after spreading and during flooding: melt surface movement, hydrogen flames, no energetic melt/water interaction. About 3 - 4 cm of the concrete spreading surface have been eroded by the overlying melt.

The most important results of the hitherto performed KAPOOL tests are considered to be:

- 1) probably due to stochastic processes involved in concrete erosion, the erosion behaviour and correspondingly the melt release time of a gate consisting of a steel plate protected by a concrete layer was observed to be very different in similar tests. In one test (KAPOOL-3) only a small part of the gate was eroded and correspondingly the melt release time was very long. This is undesirable in the reactor case, because it makes homogeneous spreading more difficult. More work is necessary to design a gate which ensures fast melt release under all circumstances.
- in KAPOOL-3, vertical and horizontal steel cables were, as required for a passive flooding initiation device, destroyed immediately after melt arrival (similar as observed in KATS-9)
- in the two KAPOOL tests with flooding no energetic melt (oxide)/water interaction was observed (again in agreement with KATS-9)

3. KATS test series

Three tests (KATS-7 to -9) have been performed in the reporting period (table 2).In each test 300 kg thermite were used and the two melt components were separated.

KATS-7 and -8 refer to the initial "EPR Reference Concept" [1] with a dry ZrO₂ spreading area and correspondingly the spreading surface was made of dry Cordierite plates. KATS-7 is one of a parametric series of 1-dimensional dry spreading tests of separated melts until freezing on ceramic and differs from the previous tests (KATS-5 and -6) by the low pouring rate. This causes the spreading to be dominated by viscous forces and crust formation, a domain, which is of special interest for testing spreading codes. KATS-8 was the first 2-dimensional dry spreading test until freezing on ceramic and was intended to check the 2-dimensional capabilities of the spreading codes.

KATS-9 was the first test which refers to the new "Improved Reference Concept" [2]. Correspondingly the surface of the (short) channels were made of silica concrete and SiO_2 was added to oxidic melt to simulate the effect of concrete erosion in the reactor cavity. After spreading to a final height of ~ 8 cm the spread melts were flooded with a water film. In addition, flooding initiation devices (steel cables) were tested.

All tests are instrumented rountineously with video cameras for documentation, with W-Re thermocouples to determine the melt temperature and with type K thermocouples to detect melt front arrival.

<u>KATS-7</u>

300 kg of thermite type R70SSH (12 % iron surplus over stochiometric composition) were used in this test. The melt was released from the reaction crucible through a 40 mm \emptyset nozzle into two (open) storage containers (one for iron, one for oxide) and from here directly over shallow walls into long spreading channels (bottom Cordierite, width: iron 20 cm, oxide 40 cm). The melts were separated as in the

previous KATS tests by moving a chute into the melt jet released from the reaction crucible when the iron melt was exhausted.

The melt flow into the spreading channels is determined by the nozzle diameter and melt height in the reaction crucible and was estimated iteratively by a modified Torricelli law to be about 2.5 ℓ /s for iron and 3.5 ℓ /s for the oxide melt (estimation is based on the known release times of the two melts and the increase of the nozzle diameter during melt release). The temperature of the melts at the entrance of the spreading channels, as determined by W-Re thermocouples, were ~ 2300 °C for the iron and ~ 2200 °C for the oxide melt.

Compared to previous spreading tests in similar channels but with higher flow rates (iron ~ 20 ℓ /s, oxide ~ 40 ℓ /s) [3], the spreading velocity is, as expected, much smaller (~ 0.5 m/s) than in the previous tests (~ 2 m/s), but the spreading lengths (iron 7.8 m, oxide 5.9 m) are comparable with those of the previous tests (iron 8.6 m, oxide 7.5 m).

The good spreadibility of superheated melts even at small flow rates is encouraging with respect to the feasibility of the EPR spreading concept. The main goal of the dry tests is to check spreading codes. In fig. 3 the measured time-dependent spreading for the oxide melt is compared with CORFLOW calculations [4]. In the calculations the viscosity values proposed in [5] have been used. The agreement is very satisfactory, indicating that CORFLOW is applicable also in the viscous forces dominated spreading regime.

<u>KATS-8</u>

KATS-8 was the first 2-dimensional dry spreading test on a ceramic surface (Cordierite). 300 kg of thermite type 10 AISSH (4 % AI_2O_3 surplus over stochiometric composition) were used. In this test a new method to separate the two melt components was used: the melt released from the reaction crucible is collected in one storage container, which is equipped with initially closed (by plugs) windows in different heights. First the (less dense) oxide melt is released through the upper window (windows size: height 5 cm, width 8 cm) on the spreading area, then a small amount of a (possibly) mixed melt is released unused through an intermediate

window and finally the iron melt is released through the lower window (height 5 cm, width 8 cm) on a second spreading area. The volumetric flow rate on the spreading areas decreases linearly with time to zero for oxide from 7.6 ℓ /s within 17 s and for iron from 6.7 ℓ /s within 7 s. The windows are at the corners of the spreading area (each 1.8 m x 2.8 m). The melt temperatures on the spreading area near the windows were measured to be ~ 2150 °C for oxide and ~ 2100 °C for iron. The oxide spread within about 20 s over 78 % of the available area with a crust thickness of 10 to 44 mm, the iron within about 10 s over about 69 % of the available area with a pretty uniform crust thickness of about 9 mm in the average.

In this test, additionally the time-dependent surface temperature of the oxide melt during spreading was measured with a infrared video camera (fig. 4). These data together with the routineously measured bulk melt temperature and melt front propagation are a valuable basis to test the 2-dimensional capabilities of the CORFLOW code.

<u>KATS-9</u>

KATS-9 was the first test which refers to the new "Improved Reference Concept" [2]. Correspondingly the surface of the spreading channels were made of silicate concrete and 16 kg of SiO_2 were added to the 300 kg of thermite type 10 AISSH (4 % Al_2O_3 surplus) to simulate concrete erosion in the reactor cavity. The main goals were

- 1) to study 1-dimensional spreading on dry concrete surfaces
- 2) to study phenomena during and crust structure after flooding of the spread melts (final height ~ 8 cm) and finally

3) to test flooding initiation devices (horizontal and vertical steel cables).

Melt separation was achieved, as in KATS-8, by using one common storage container with windows at different heights. The size (height 5 cm, width 8 cm) of both windows (for the oxide and the iron melt) and therefore also the flow rates were the same as in KATS-8. The dimensions of the spreading channels (oxide: width 0.3 m, length 2.5 m; iron: width 0.3 m, length 1.0 m) were chosen such that after

spreading a reactor-relevant height (~ 8 cm) was achieved. The melts were flooded a few seconds after spreading, similar as in KATS-5 [3], with a water film (100 g/s) extending over the channel widths and entering the end of the channels over plane inclined 10° against vertical. To quantify any energetic melt/water interactions during flooding the test was instrumented additionally with pressure transducers. Due to a failure in the data acquisition system, the melt temperatures (on the spreading surfaces near the windows) had to be estimated based on KATS-8 data and taking into account the SiO₂ addition and amounted to 2050 \pm 50 °C for both melts.

Important results from this test are:

- 1) no remarkable difference in the spreading behaviour on concrete or ceramic,
- as observed in the KAPOOL tests, vigorous movement of melt surfaces caused by gas production from concrete erosion (~ 20 mm in the oxide and 30 - 50 mm in the iron channel),
- 3) no energetic melt/water interaction for both melts in agreement with KATS-5 and the KAPOOL tests,
- 4) structure of the oxidic crust different in flooded and not-flooded areas (consequences concerning coolability have to be studied),
- 5) as in KAPOOL-3, the vertical and horizontal steel cables were destroyed within a few s after arrival of both melts, indicating that this might be a suitable passive device to initiate flooding.

Conclusions

The following conclusions can be drawn from the KAPOOL and KATS tests performed in the reporting period:

1) the erosion behaviour of a gate consisting of a steel plate protected by an overlying concrete layer was found to be quite different in three similar KAPOOL

tests. Other gate designs with the goal to improve the prediction of the erosion behaviour should be studied

- 2) spreading behaviour on concrete and on ceramic is not remarkably different
- 3) spreading length depends only weakly on the flow rate
- 4) in two KAPOOL tests (oxide above iron) and in KATS-9 with separated oxide and iron melts, no energetic melt/water interaction during flooding (with a water film) of the spreaded melts on eroding (gas producing) concrete was observed. This is a very encouraging result for the "Improved Reference Concept"
- 5) the structure of the oxidic crust in flooded and not-flooded areas is different and requires further studies concerning the coolability of oxidic melts
- 6) in two KAPOOL tests with not-separated melts and in KATS-9 with separated oxide and iron melts horizontal and vertical steel cables have been successfully tested as flooding initiation devices.

References

- [1] H. Weisshäupl, "Prevention and Mitigation of Severe Accidents", Proc. SFEN /KTG Conference on the EPR Project, Strasbourg, 1995, p. 80.
- [2] Dr. Lohnert, EPR Technical Report TR 96/31, unpublished.
- [3] a) Zusammenarbeit FZK/EVU/Siemens: Fortschrittsberichte 1994, 1995, 1996
 - b) H. Alsmeyer et al., "Studies on Core Melt Retention Concepts for the EPR", Proc. SFEN/KTG Conference on the EPR Concept, Strasbourg, 1995, p. 204.
 - c) W. Scholtyssek, H. Alsmeyer, H. Werle, "Recent Results of Melt Spreading and Cooling Experiments at Forschungszentrum Karlsruhe - the KATS and COMET Projects", CSARP Meeting, Bethesda, MD, May 1996

- d) G. Fieg, F. Huber, H. Werle, R. Wittmaack, "Simulation Experiments on the Spreading Behaviour of Molten Core Melts", Proc. 1996 National Heat Transfer Conference, Houston, Aug. 3-6, 1996, p. 121-129.
- e) G. Fieg, F. Huber and H. Werle, "KATS Thermite Experiments", CEA/FZK-Seminar on EPR related Severe Accident Research, FZK, November 1996
- [4] R. Wittmaack, Siemens/KWU, private communication, January 1997.
- [5] G. Fieg, Internal FZK note, January 1997, unpublished.

KAPOOL, performed tests and results

Test	Goals	Vessel	Gate		Thermite type Melt temp.		Gate erosion						
(date)		bottom	area	thickness	(mm)	mas	s (kg)	(°C)		Erosion	Melt rel	ease (s)*	Eroded
		area	(cm)	concrete	steel	initial	added	max	min	rate (mm/s)	start	end	area
		(cm)											
KAPOOL-1	Gate erosion	36x36	15x15	20	10	Type R	70SSH	2100	1970	~0.5	52	58	84
(26.6.96)						100							
KAPOOL-2	Gate erosion	40x40	40x40	50	20	Type F	70SSH	2070	1640	0.4-0.2	00		
(10.7.96)						100	15x2			Melt not rele	ased		
KAPOOL-3	Gate erosion	40x40	20x20	40	15	Type 1	0AISSH	~2450	2070	0.5-0.4	72	95	10
(8.10.96)	Spreading					100	3x3						
	Flooding												
	initiation												
	Flooding (100												
	g/s)												
KAPOOL-4	Gate erosion	40x40	20x20	40	15	Type 1	0AISSh	~2450			11		
(14.11.96)	Spreading					150				Melt release	d through	n side wall	
	Flooding												
KAPOOL-5	Gate erosion	41 Ø	22.5 Ø	40	15	Type 1	0AISSH	~2550	2060	0.8-0.6	75	83	82
(16.1.97)	Spreading					150							
	Flooding (250												
	g/s)												

* Time after ignition of thermite

Table 2KATS, performed tests and results

Test	Phenomena	Parameters	Results/comments		
KATS-7	Dry, 1-dim spreading	Melt: 300 kg, separated iron, oxide	 Spreading velocity ~ 0.5 m/s (high 		
Feb. 6, 96	(Reference concept)	 small pouring rate (~ 3 l/s) 	pouring rate ~ 2 m/s)		
		Spreading surface: ceramic	• Spreading length 6 - 8 m (high		
			pouring rate 7 - 9 m)		
			Comparison with CORFLOW in		
			work		
KATS-8	Dry, 2-dim spreading	Melt: 300 kg, separated iron, oxide	Comparison with CORFLOW in work		
April 24, 96	(Reference concept)	 Pouring rate ~ 10 l/s 			
		Spreading surface: ceramic			
KATS-9	Test flooding initiation	• Melt: 300 kg, separated iron, oxide (+SiO ₂)	Flooding initiation devices worked		
Sept. 24, 96	devices	Flooding initiation devices: horizontal and	No energetic melt/water		
	Flooding of spreaded	vertical steel cables	interactions (in agreement with		
	melts (Improved	Spreading surface: concrete	previous tests)		
	concept)	Melt height after spreading ~ 8 cm			
		Flooding mode: water film (100 g/s)			



Fig. 1 KAPOOL experimental setup

KAPOOL-1



KAPOOL-3

KAPOOL-5



Fig. 2 KAPOOL ; gate setup, melt temperatures and gate erosion

steel plate



Fig.3 Comparison of measured (KATS-7) and calculated (CORFLOW) 1-dimensional spreading of oxide melt on a ceramic surface.

--- 254 --



Fig. 4 Two-dimensional spreading of oxide melt (KATS-8)

Top: surface temperature after spreading (melt entered at the top of left side)

Bottom: time-dependant maximum and minimum surface temperatures in the region AR01 during spreading

B. <u>Untersuchungen zur Validierung des Codes SIMMER-III mit den KATS-</u> <u>Experimenten</u>

(W. Maschek, G. Fieg, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)

I. INTRODUCTION

SIMMER-III /1/ is a two-dimensional, three-velocity-field, multiphase, multi-component, Eulerian, finite difference fluid-dynamics code coupled with a space-, time- and energy-dependent neutron dynamics model. The main field of application at FZK is the analysis of core disruptive accidents in CAPRA burner reactors /2/ but the code can also be used to investigate safety related problems in other types of advanced reactors. The code development and verification is performed by PNC (Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation) in cooperation with the European partners FZK and CEA (Commissariat à l'Energie Atomique).

Within the verification effort, SIMMER-III has been applied to various test examples ranging from multiphase benchmark problems to elaborate experiments. Examples of a first phase of code verification are given in /3/. In the second step of the verification effort both the range of applications have been widened and also more complex experiments will be treated.

As a representative example for the verification efforts the simulation of the FZK-KATS experiments is given here. The KATS experiments /4/ simulate the spreading of a melt in an ex-vessel core retention device under dry and wet conditions. In the dry tests the main point of interest is the extent of spreading and in the wet tests possible reactions with cooling water. In the following, three experiments covering dry and wet conditions are described and results of SIMMER-III simulations are presented.

II. VERIFICATION OF SIMMER-III WITH THE KATS EXPERIMENTS

Three KATS experiments (KATS-3b, KATS-5 and KATS-4) have been selected for this investigation. In the experiments both alumina and steel melts have been used. Our calculations only deal with alumina melts.

II.a Experimental Setup and Results

The KATS series of experiments /4/ have been performed with alumina-iron thermite melts up to 300 kg. The test rig consisted of a large reaction crucible for thermite to generate molten alumina and iron. Below this crucible the surfaces were located on which the spreading of oxidic and metallic melts occurs. The initial liquid oxide melt level is about 0.40 m in the container and the initial temperature is 2433 K. The oxidic melt drains into a channel of 40 cm width. The spreading channel is made of concrete covered with cordierite plates and ceramic tiles to prevent contact between the melt and the

concrete. During the spreading process, Ni-Cr- and W-Re-type thermocouples at different axial positions in the channel indicate the arrival time of the melt. In addition several video cameras record the spreading process.

In the KATS-3b experiment the spreading velocity of an oxidic melt is investigated. This dry surface test served as a reference for the wet surface experiment KATS-4. The objective of the KATS-5

test was the determination of the maximum spreading length for an oxidic melt in a long channel. In the **KATS-4** experiment the alumina melt spreads into a channel of 2.5 m length, which is covered by a 1 cm water layer of 323 K. The interpretation of results of the experiments in Tab. 1 is taken from /4/.

Test	Results	Comments
KATS-3b	Spreading velocities 1.8 - 2.0 m/s	Dry reference test for KATS-4
KATS-4	Spreading velocities 1.4 - 1.6 m/s	Energetic melt- water interaction (vapor explosion)
KATS-5	Oxide: 7.5 m spreading length	Viscosity and crust formation define final spreading

Table 1: Summary of KATS experiments

II.b Modeling of KATS Experiments with SIMMER-III

The experiments analyzed could be treated as a 2d-system because of the experimental setup. The container releasing the oxidic melt and the spreading channel were modeled in a cartesian grid system using 7 x 35 cells for KATS-4 and 6 x 35 resp. 6 x 85 cells for KATS-3b and KATS-5. In SIMMER-III the heat transfer from fluid to solid structure is only modeled in radial direction or for surfaces with vertical orientation. This limitation is related to the ordinary applications in reactor analysis

where structure elements like pins and hexcans are predominant. After introducing code modifications to SIMMER-III to allow the rotation of the gravitational vector, the code was capable of dealing with the flowing and freezing problems of the KATS tests (Fig. 1). The Al_2O_3 reservoir was formed by a rigid boundary wall that did not interact with adjacent cells. At the bottom an orifice of 6 cm



height permitted the reservoir to run dry. The structure with thermophysical properties of cordierite material held room temperature and occupied 25 % of the bottom cell row. The superheated Al_2O_3 melt (233 K above liquidus) was described as a 2-phase flow. In the case of a water layer on the cold substrate the additional lower mesh row was filled with water. For the calculations the general default values were applied. The wall friction factor was set according to the Colebrook formula /5/. A high order differencing scheme was used to reduce the impact of numerical diffusion.

The calculated velocity decrease in the orifice was found to be in accordance with the Torricelli law. In the KATS-3b experiment the crust build-up played only a minor role because of the superheated melt, the short channel length and the small contact time between fluid and structure. Compared to the experiment the flow velocity calculated with SIMMER-III is underestimated by about 20 % (Fig.2).

According to the KATS-5 experiment the container run dry at about 2 s and the melt moved down the channel with no further driving force. The wall friction and the increased viscosity of the mushy alumina flow (in the solidus-liquidus temperature range) led to the halt of the fluid at a spreading length of approximately 7.5 m after 10 ... 11 s /4/. In the SIMMER-III simulation the spreading length was overestimated by 10 % (Fig.3). At the leading edge Al_2O_3 particles were precipitated and carried along with the fluid leading to an increased mixture viscosity /5/. The final spreading length was approached asymtotically in the SIMMER-III simulation.



Fig.3: Comparison between simulation and experiment (KATS-5)

Originally, SIMMER-III lacks a radiation model for intercell heat transfer between the melt and the environment. Therefore the heat flux to the structure is the only path to lead off thermal energy. With the inclusion of an ad hoc radiation model the temperature of the melt drops below the liquidus temperature leading to a significant increase of the fluid viscosity. For long term heat removal both radiation and heat conduction to the foundation will cause complete freezing.

II.d Results of the KATS-4 Simulation with SIMMER-III

In the KATS-4 experiment a water layer of 1 cm height was present in the channel. During the spreading of the oxidic melt two energetic reactions have been recorded in the experiment. The first one occurs 10 - 20 cm from the gate opening, the second one in 1 m distance in the channel. The pressure transducers recorded short pressure peaks (1 - 2 ms) between 0.2 and 0.3 MPa. The average spreading velocity was reduced to 1.6 m/s compared to 2.5 m/s in the dry case. Some parts

of the oxidic melt have been ejected out of the channel /4/. The preliminary conclusion drawn from this test was that the presence of water delays the spreading of the melt compared to dry conditions.

With SIMMER-III the phenomenological course of the KATS-4 experiment has been simulated. The code is able to describe rapid evaporation processes of heated coolant, but has no specific model to

describe the triggering of a vapor explosion (no key issue for CAPRA reactors). In the SIMMER-III simulation the leading edge of the hot liquid melt mixes with water and reacts near the exit of the melt reservoir. The pressurization pushes some material back into the reservoir and propels other parts of the melt into the free space. Further reactions during the spreading process lead to intermediate flow reversals. The velocity of the bulk melt is in the range of 1.2 -1.5 m/s (Fig.4), while some parts of the ejected melt reach velocities up to 10 m/s.



III. SUMMARY OF KATS SIMULATIONS WITH SIMMER-III

Two selected KATS experiments have been simulated within the verification efforts for SIMMER-III.

• Spreading velocities and spreading lengths are in good agreement with the KATS-3b and KATS-5 experiments. In the SIMMER-III calculation the final spreading length of KATS-5 is determined by inertia effects, friction forces and the increase of mixture viscosity.

• The phenomena of the KATS-4 test with a hot melt spreading over a surface covered with a water layer have been simulated. It could be shown that the interaction of the melt with water leads to a delay in the spreading process and an ejection of parts of the melt out of the channel.

REFERENCES

- /1/ S. Kondo et al.: SIMMER-III, An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis, ANP '92, Tokyo (1992)
- /2/ W. Maschek et al.: Mitigation of Core Disruptive Accident Energetics in Burner Cores, GENES-II, Tsuruga, Japan (1996)
- /3/ W. Maschek et al.: SIMMER-III Code Verification Phase I FZK 5690 (1996)
- /4/ G. Fieg et al.: Simulation Experiments on the Spreading Behaviour of Molten Core Melts. ASME/AIChE/ANS National Heat Transfer Conference, Houston, Texas, USA (1996)
- /5/ W. Beitz (Editor): Dubbel Taschenbuch für den Maschinenbau, Springer Verlag, Berlin (1981)
- /6/ M. Ishii et al.: Drag Coefficients and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows. AIChE Journal, Vol. 25, No. 5 (1979)

III. <u>Untersuchungen zum EPR-Konzept – KAJET-Experimente</u>

(G. Albrecht, H. Brüggemann, F. Huber, D. Raupp, IRS)

Abstract

In the sequence of a core melt accident it is assumed that, after melt through of the reactor pressure vessel, the molten corium will be released as a high- pressure melt jet which interacts with the protective liner of the reactor pit. This interaction will be investigated in the KAJET experiments in which thermite melts are used to simulate the molten corium.

In the period reported, pretests with small amounts of thermite melt were performed to investigate nozzle designs which have been selected on the basis of a series of experiments carried out with water. The purposes of the pretests are to achieve a compact melt jet and to test the working life of the nozzle.

1. Einleitung

Ausgangsbasis für das KAJET- Vorhaben ist die Annahme, daß bei einem schweren Störfall, bei dem der Core niederschmilzt, die Schmelze als Hochdruckstrahl (ca. 2 MPa) aus dem Reaktortank austreten kann. Unterstellt wird weiter, daß es hierbei zu einer starken thermischen und chemischen Wechselwirkung zwischen der strahlförmig austretenden Schmelze und der umgebenden Wand kommt.

In den KAJET-Versuchen wird mit Thermitschmelzen als Simulationsmaterial der Einfluß eines Schmelzestrahls auf die in der Diskussion befindlichen Auskleidematerialien untersucht. Eine wichtige Vorraussetzung dieser Untersuchungen ist die Herstellung eines möglichst kompakten Schmelzestrahls, der mit einer Geschwindigkeit von bis zu 25 m/s auf das zu untersuchende Material auftrifft.

In Vorversuchen mit Wasser wurden zunächst verschiedene Düsengeometrien untersucht. Parameter waren hierbei der Düsenwinkel, die Länge der Auslaufstrecke und der treibende Gasdruck. Die Ergebnisse dieser Versuche zeigen, daß bei optimaler Geometrie mit Wasser ein ausreichend kompakter Strahl erzeugt werden kann.

Um festzustellen, ob die mit Wasser erzielten Ergebnisse auch auf Thermitschmelzen übertragbar sind, werden ausgewählte Düsengeometrien zunächst in Vorversuchen mit Thermitschmelzen getestet.

Die KAJET-Versuchsanlage (Bild 1) besteht aus einem Schmelzegenerator, der für ca. 10 kg Schmelze ausgelegt ist und der daran angeflanschten Düse mit Auslaufstrecke. Zur Beschleunigung der Schmelze wird der Schmelzegenerator unmittelbar vor dem Beginn des Schmelzenaustritts durch Einspeisung von Argon auf den erforderlichen Gasdruck aufgeladen. Die austretende Schmelze trifft nach etwa 1,70 auf ein Sandbett. Der Schmelzegenerator und das Sandbett sind von einem Spritzschutzwall aus Betonschachtringen umgeben, die mit einer schmalen Öffnung zur Beobachtung und zur Videoaufzeichnung des Schmelzestrahls versehen sind. Der bei der Reaktion des Thermits und beim Strahlaustritt entstehende Rauch, wird mit einem Abluftsystem abgesaugt. Von den In Tab.1 aufgeführten Versuchen, wurden bisher die Versuche VJ01 - VJ04 durchgeführt. Die Randbedingungen sind bei allen Versuchen nahezu identisch. Die Parameter sind auf die physikalischen Eigenschaften der oxidischen Schmelze abgestimmt. Der Düsenwinkel beträgt 30°, die Länge der Auslaufstrecke 110 mm und der Düsendurchmesser 12 mm. Dieser Düsendurchmesser wurde gewählt, um bei den eigentlichen Versuchen mit ca. 300 kg Thermit ausreichend lange Austrittszeiten zu bekommen. Zur Beschleunigung der oxidischen Schmelze auf die vorgesehene Auftreffgeschwindigkeit von 25 m/s, ist ein Gasdruck von 16 bar notwendig. Bei einem Austrittsdurchmesser von 12 mm, beträgt die Austrittsdauer beim Eisen ca. 0,4 s und beim Oxid ca. 0,6 s. Die Temperatur der austretenden Schmelze liegt bei ca. 2300 °C.

Versuch	Gasdruck	Auftreffgeschw.	Länge der Auslauf-	Austrittsdurchmesser	
Nr.	(bar)	(m/s)	strecke (mm)	(mm)	
VJ01	16	25	110	12	
VJ02	16	25	110	12	
VJ03 E	Eisen: unter Schwerkraft Oxid: 11 bar	22	110	12	
TIDA	A sectorittelle geine senten		110	10	
V J 04	Austrittsbeginn unter	25	110	12	
	Schwerkraft, dann				
	Druckanstieg bis 16 bar				
VJ05 I	Druckanstieg bis 12 bar	23	110	12	
i	innerhalb ca. 1,2 s,				
d	doppelte Schmelzen-				
l	menge				

Tab. 1 Vorversuche mit Thermit, Randbedingungen für oxidische Schmelzen

Um auch unter schlechten Sichtbedingungen eine Information über das Strahlverhalten zu bekommen, wurden ab VJ02 je eine Drahtgitterfläche in Abständen von 300 und 600 mm unter dem Schmelzenaustritt montiert. Anhand der durchschmolzenen Flächen lassen sich die maximalen Strahldurchmesser in den vorgegebenen Abständen rekonstruieren. Ab VJ03 sind die Gitterflächen zusätzlich mit Schmelzdetektoren versehen, um die Strahlaufweitung auch zeitlich zuordnen zu können.

3. Ergebnisse

Bei VJ01 war keine Auswertung möglich, da durch starke Rauchentwicklung beim Schmelzenaustritt die Sicht auf den Strahl stark beeinträchtigt wurde. Außerdem wurde bei der Nachuntersuchung festgestellt, daß während des Schmelzenaustritts die Auslaufstrecke zerbrochen ist.

Der Versuch VJ02 mit verbesserter Absaugung und etwas reduzierter Schmelztemperatur (ca. 2260 °C) zeigt, daß der Strahl sofort nach dem Austrittsbeginn stark expandierte. Nach den durchschmolzenen Gittern hatte der Strahl im Abstand von 600 mm eine maximale Aufweitung auf 360 mm. Auch bei diesem Versuch sind Probleme mit der Standzeit der Auslaufstrecke aufgetreten.

Beim Versuch VJ03 wurde wegen Lieferverzug des Düsenherstellers statt der Düse aus Zirkonoxid eine solche aus Stahl eingesetzt. Außerdem wurde der Gasdruck so gesteuert, daß das zuerst austretende Eisen unter Schwerkraft austrat. Unter dieser Bedingung bildete sich ein kompakter Strahl aus. Mit der Druckerhöhung weitete sich der Strahl jedoch sofort auf. Die Nachuntersuchungen zeigten, das der Düsenaustritt und die nachfolgende Auslaufstrecke von ursprünglich 12 auf 25 mm Durchmesser aufgeschmolzen waren. Hierdurch war der Massenstrom der Eisenschmelze größer als vorgesehen, weshalb zum Zeitpunkt der Druckbeaufschlagung schon ungefähr 30 - 50 % der oxidischen Schmelze ausgetreten waren. Die Austrittsdauer des Oxides war damit geringer als die erforderliche Zeit für die Druckerhöhung. Dadurch wurde nur ein Druck von 11 bar erreicht. Die maximale Strahlaufweitung nach einer Austrittsstrecke von 600 mm betrug etwa 190 mm.

Um eine bessere Zuordnung der Strahlverhaltens zum Druck über der Zeit zu ermöglichen, wurde bei VJ04 zum einen die Druckbeaufschlagung erst nach dem

Austrittsbeginn der Eisenschmelze ausgelöst und zum anderen die Zeit für den Druckaufbau auf ca. 1 s ausgedehnt. Somit erfolgte der Schmelzenaustritt unter einem sich stetig aufbauendem Druck. Die Auswertung der Meßergebnisse zeigte ein überproportionales Anwachsen des Strahldurchmessers mit steigendem Druck. Einen wesentlichen Einfluß hatte hierbei der Gasdurchbruch am Ende des Schmelzenaustritts.

4. Weiteres Vorgehen

In weiteren geplanten Versuchen wird ein Schmelzengenerator eingesetzt, der für ca. 18 kg Thermit ausgelegt ist und bei dem die Eisenschmelze abgetrennt wird, d. h. es tritt nur die oxidische Schmelze aus. Durch die größere Schmelzenmenge wird die Austrittsdauer nahezu verdoppelt. Die Zeit für die Druckerhöhung kann somit verlängert werden. Um eine Aufweitung des Strahls durch einen Gasdurchbruch zu vermeiden, wird der treibende Druck gegen Ende des Schmelzenaustritts wieder abgebaut. Durch die längere Austrittsdauer liefert dieser Versuch auch bessere Ergebnisse zur Standzeit der Zirkonoxid-Düse.



Bild 1. Skizze des KAJET-Versuchsaufbaus

 IV. <u>Modellversuche und Simulationen mit CORFLOW zur Ausbreitung</u> erstarrender Schmelze (Legierung MCP 58) (P. Ehrhard, IATF; U. Siegel, St. Krauth, FH Karlsruhe)

Abstract

A corresponding set of both experimental results and numerical simulations with CORFLOW are presented for the plane (two-dimensional) spreading of a metallic model melt, namely MCP 58. The effect of solidification due to a cooled spreading area is the focus. The Prandtl number of the melt is Pr = 0.74, the realized range of Reynolds numbers is $3.7 \le Re \le 40$, thus, both the mixed viscous/inertial regime and the pure inertial regime of spreading are covered. The spreading takes place on an isothermal plate, kept at temperatures in the range 40 degC $\le T_w \le 75$ degC, heat losses into the ambient air are negligible. Solidification effects are treated within the numerical simulations using a strongly temperature dependent viscosity.

The influence of the solidified crust, attached to the spreading area is discussed in detail. It is found that for low Prandtl number melts (metallic melts), solidification has a strong influence onto the progress of the spreading front. The concept of treating solidified regions via a modified viscosity, hereby occurs promising. For the present set of parameters, reasonably-good agreement has been found between experimental findings and numerical simulations.

1. Introduction

Future generations of pressurized water reactors (e.g. the European Pressurized Water Reactor EPR) will have to meet safety criteria, which go far beyond the present standard. With respect to a severe core melt down accident, precautions need to be taken to ensure permanent coolability of the corium melt in an intact containment. In detail the concept relies on (i) collecting the melt below the pressure vessel, (ii) erosion of the sacrificial concrete and melt-through of the gate, (iii) dry spreading of the melt on a horizontal spreading area of sufficient extent, (iv) passively-intitiated flooding of the melt by water from above, (v) removing the decay heat by circulating the pool water through external heat exchangers. Additionally,

water is circulated through channels in the basemat, obtaining two-sided cooling of the spreaded melt.

The spreading of the corium melt on the spreading area, therefore, represents a very crucial question as it determines the outcome of the scenario: If the melt spreads far enough, the thickness of the melt layer will be sufficiently small to ensure its coolability. On the other hand, if the spreading is strongly inhibited by viscous or even solidification effects, we are left with a large thickness of the melt layer. Due to the internal heat source distribution, the removal of the decay heat is more critical for such a situation. The design of the reactor cavity, the sacrificial concrete and the gate, clearly, has to ensure the initial conditions for of melt such that a complete spreading is guaranteed.

From the above concept, the spreading of the melt in presence of heat losses both into the basemat by stationary or non-stationary heat conduction and at the melt/gas interface by radiation appears to be an important question with respect to reliability of the safety concept. In particular the question of appropriate initial temperature, viscosity and composition of the melt for complete spreading needs to be answered. This problem is the focus of a variety of investigations at the Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) in collaboration with industrial partners. The goal is to develop and verify a computer code (CORFLOW) such that the computation of the spreading flow under quite general geometric and thermal conditions is possible in an accurate manner.

The program includes, firstly, small-scale experiments using low-melting model melts such as waxes and alloys. Spreading these model melts on cooled plates or in presence of interfacial cooling allows to identify the basic physical phenomena occuring as consequence of the heat losses, namely increase of viscosity, crust formation, crustal mechanics and bulk solidification. Secondly, the development of theoretical models for the thermal field in the spreading flow, for the crust formation and for the kinematic influence of the crust onto the spreading flow is persued. Thirdly, within the large-scale KATS experiments the spreading of both metallic and oxidic components of a Thermite melt on ceramics or concrete surfaces is investigated. The geometry is either plane (long channels) or three-dimensional (square areas) and both melt properties and temperature range are fairly close to the situation expected in a severe accident scenario. Thus, heat losses into the spreading area and into the ambient are present simultaneously and are comparable to the heat losses experienced by a realistic corium melt. These experiments are conducted such that the inertia-dominated regime, the viscosity-dominated regime and the crust formation and solidification can all be observed as time progresses. All the above experimental data and models are, finally, used to verify and improve the CORFLOW code. This code has been initially developed by the Siemens company to compute the spreading of liquid melts in general technical geometries. In collaboration with Siemens it is presently extended towards a regime, where non-isothermal conditions lead to strong variations of viscosity and even to solidification.

The present paper on the one hand presents results from small-scale experiments using a low-melting alloy, spreading on a cooled plate. This problem relates closely to the spreading of metallic melts on the basemat if radiative heat losses are not important. On the other hand, computations with CORFLOW are conducted for the identical problem, employing the measured viscosity $\mu(T)$ of the alloy to capture the melt behaviour in the pure liquid regime as it develops towards the solid regime. Computations and experimental findings are compared and discussed. It is found that, given a reliable knowledge of the temperature dependent viscosity, for metallic melts a reasonably good agreement between computations and experiments is obtained. Thus, for metallic melts the concept of treating solidification by an adequat increase of viscosity occurs promising. This method, however, should not apply to oxidic melts, as in that case a sufficiently-precise temperature field is hardly to obtain from the computations.

2. Experiment



Within the experiment the plane spreading of a low-melting alloy (MCP 58) is investigated, occuring on a temperature-controlled copper plate of 650 mm length and 200 mm width. For that purpose the melt is initially stored temperature-controlled in a cylinder at $T_0 = 75$ degC. The spreading area is kept at the desired constant temperature in the range 20 degC $\leq T_w \leq 75$ degC. Through a displacement piston, moved at a well-controlled, constant speed, a constant volumetric flux \dot{V} of the melt is poured into a ceramics-coated reservoir at the left side of the spreading area. This reservoir achieves both a good thermal insulation of the melt through ceramics layers and a damping of the melt velocities resulting from the pouring. After the reservoir is filled, a homogeneous, almost undisturbed spreading of the melt occurs across the smooth, chromium-coated copper plate. Given a plate temperature well above the solidification temperature, i.e. $T_w > 58$ degC, a pure liquid spreading is observed. If, in contrast, the plate is cooled below solidification temperature, i.e. $T_w < 58$ degC, the melt develops a solidified crust attached to the plate and the spreading is slowed down or even stopped, depending on the actual parameters.

The measuring technique involves temperature measurements (and control) of all relevant temperatures by means of thermocouples. Thus, the melt temperatures in the storage cylinder, in the reservoir and at the entrance of the spreading area is precisely known. Moreover, the temperature of the spreading area is monitored at three different locations and controlled at an accuracy of \pm 0.1 degC by means of circulating coolant. The progress of the front is recorded in a twofold manner. Firstly, a standard 35 mm camera captures an image of both the side and the top view of the spreading melt via a mirror. These pictures are taken at arbitrary times by the experimentalist, they additionally contain the image of a reference length scale and a clock, resolving 1 mm and 0.01 sec, respectively. Secondly, a CCD camera automatically records pictures of the spreading area from above, in time steps of typically 1 sec. The resolution of 512 x 512 pixels allows afterwards an automated evaluation of the pictures by means of an image processing system to determine the wetted portion of the spreading area even for cases where the front cannot be approximated by a straight line. Moreover, occasionally we capture highly-precise measurements of the height profile around the front (resolution $\pm 2 \,\mu$ m) by means of a triangulation sensor, mounted at the desired position above the spreading area.

The experiments with the low-melting alloy feature a Prandtl number of Pr = 0.74. Another series of experiments, using wax as model melt, features a Prandtl number of Pr = 560 and has been reported previously (cf. Weick (1995), Töppel-Wolf (1996)). Through the adjustable volumetric flux \dot{V} of the melt, a range of Reynolds numbers, namely $3.7 \le Re \le 40$, is covered. The Reynolds number here is defined using the average inflow velocity u_0 and the inflow height h_0 , both taken at the entrance of the spreading area. Thus, we have $Re = u_0h_0/v$. The Reynolds number in this definition reflects directly the ratio of inertial forces and viscous forces within the spreading melt.

3. Numerical simulations

We use the CORFLOW code to simulate the spreading flow, precisely for the set of parameters present in the experiments. CORFLOW employs a fixed grid finite volume formulation of the conservation equations in conjunction with a volume of fluid method for the representation of the free interface. A detailed description of the code and its models can be found in Wittmaack (1996). We use for our plane simulations 52 x 27 elements to grid the complete reservoir, the spreading area, theinsulating ceramics layers and the well-conducting copper layer. A sketch of the modelled geometry is given in figure 2.



Figure 2: CORFLOW 2D model for simulation of the spreading flow of MCP58

Instead of assuming the melt flux entering the reservoir from above, we model a horizontal inflow through the gap at the left side of the reservoir (cf. figure 2). Here an integral flux of melt, identical to that poured in the experiment, enters the computational domain. This simplification was tested carefully in order to ensure that no disturbances of the outflow velocity profiles are present. In fact, the upward step at the right end of the reservoir causes a stagnant portion of melt in the lower corner, leading to a fairly-smooth flow from the reservoir onto the spreading area.

CORFLOW employs a dimensional formulation of the conservation equations and boundary conditions, such that all material properties have to be entered separately in SI units. These data are listed in table 1 for all the different materials. As mentioned earlier, the data on viscosity are used such that solidification effects are modelled through a strongly temperature dependent viscosity. Therefore, a reliable knowledge of viscosity is important. The measured data for the viscosity of the alloy MCP 58 are plotted in figure 3. As obvious from the data, a dramatic rise of viscosity occurs as soon as temperature approaches the solidification temperature $T_{sol} = 58$ degC. The data of figure 3 are entered via a 10 point approximation into the code. The liberation of the latent heat of solidification is treated within CORFLOW by entering a step function for the specific heat c_p as function of temperature. In several runs we have checked the influence of latent heat onto the results, and we find that solidification at a fixed point in space is just slightly postponed. Thus, liberation of latent heat can be neglected for not too extreme parameter combinations. The heat losses of the melt into the (copper) spreading area due to non-stationary and stationary heat conduction are, of course, considered. They represent the most important heat sink in the problem. The heat losses of the melt into the ambient air proves to be of minor importance and is consequently neglected.

	density [kg/m ³]	specific heat [J/kgK]	heat conductivity [W/mK]	surface tension [N/m]
copper	8900	390	393	-
ceramics	3375	800	30	-
MCP 58	9230	201	10	0.4446
plexiglass	1180	1300	0,19	-

Table 1: Employed material properties

The simulations took a considerable amount of CPU time. On an IBM RISC/6000-580 workstation the simulation of 15 sec real time, required typically more than 10000 minutes of CPU time. This is due to the rquired fine mesh resolution in the vertical direction, which in turn demands very small time steps. As CORFLOW is not designed for parallel processing, the huge number of time steps remains responsible for this huge amount of CPU time.



Figure 3: Viscosity of the melt (MCP58) in both the liquid and the solid regime

4. Results and discussion



Figure 4: Development of the front in time from both experiments and CORFLOW simulations (Re = 40, Pr = 0.74).

In figure 4 we conduct a typical result, obtained in the inertia-dominated regime with Re = 40. Three different temperatures of the spreading area have been realized, namely $T_w = 75$, 50, 40 degC, within both the experiments and the numerical simulations. For each plate temperature T_w a number of identical experiments has been performed, given in figure 4 as open symbols. It should be noted that we have artificially introduced an offset on the time axis for the different curves to separate the curves in the plot. For each plate temperature, likewise a numerical simulation is given by solid symbols.

We, firstly, concentrate onto the case with $T_w = 75$ degC. We recognize that both experimental curves (open circles) nicely resemble, proving a reproducable spreading process and an accurate measurement of the average front position \overline{a} (t). The results from the corresponding numerical simulation (solid circles) show a front behaviour which slightly departs from the experimental findings. Here, a slight adjustment of viscosity would produce exactly identical slopes in both the experimental and the numerical curves. To remain honest, we have renounced to introduce this adjustment. For $T_w = 75$ degC the melt remains always liquid and spreads in all experiments to the end of the spreading area. The first data points from the numerical simulation are taken just at the outlet of the reservoir, while the spreading can be followed numerically beyond the end of the spreading area.

The second set of curves corresponds to a plate temperature of $T_w = 50 \text{ degC}$. Here, the temperature of the spreading area is such, that the melt transfers a considerable amount of heat into the copper plate and, thus, solidification of the melt occurs in the vincinity of the plate as soon as the melt temperature falls below $T_{sol} = 58$ degC. Again, both experimental curves (open squares) behave almost identical, showing a fast initial spreading followed by a first slow-down of the front. After this gradual stagnation, a reacceleration of the front and a second slow-down is observed, leading finally to a stop of the front progression. The numerical simulation (closed squares) resembles perfectly the initial phase of the process, namely the fast spreading followed by a first slow-down at a position $x \cong 18$ cm. Likewise the reacceleration and the final stop of the front are obtained from the simulation. However, a discrepancy remains with respect to the final position of the front. The numerical simulation predicts $x \equiv 33$ cm, while the experiments give $x \equiv 41$, 43 cm. In these experiments with $T_w = 50 \text{ degC}$ the initial speed of the front is almost identical with the speed observed for pure liquid spreading ($T_w = 75 \text{ degC}$). Thus, in the initial phase heat losses and solidification do not have any influence onto the spreading process.

The third set of curves, finally, is obtained for an even lower plate temperature of $T_w = 40 \text{ degC}$ to enforce the influence of cooling and solidification. The behaviour of the three experimental curves (open triangles) is somewhat scattered, while the general features are identical to the observations for $T_w = 50 \text{ degC}$. A fast initial spreading, a first slow-down, a reacceleration, a second slow-down and the final stop of the front are all obvious. The final front position in the experiments is already reached at $x \equiv 35$, 35.5, 36 cm. The numerical simulation again resembles the early phase with reasonable accuracy, but fails to predict the late phase and the final front position correctly. Numerically, we find the final front position at $x \equiv 25$ cm.

The repeated occurance of a slow-down of the front, followed by an reacceleration can physically be understood as follows. As a crust of increasing thickness develops on the spreading area, the height difference in the melt - and therefore the driving hydrostatic pressure head - are reduced. This leads to the slow-down of the front. Due to the constant feeding of melt into the spreading area, the melt height increases. This increased height allows for a flow of hot melt across the solidified and thermally-insulating dam onto the spreading area. This hot melt is not yet influenced by any heat losses or by solidification. Thus, a fast spreading is possible until heat losses sum up and a second build-up of solidified melt develops. In figure 5 a typical velocity profile from the simulations is given. We recognize clearly the flow of the melt across the solidified portion, attached to the spreading area.



Figure 5: Velocity field from simulation

5. References

R. Wittmaack (1996): CORFLOW, a computer program for the numerical simulation of free surface flow, Siemens work report KWU NA-M/96/E041;

G. Weick (1995): *Experimentelle Untersuchung zur Ausbreitung von Schmelzen bei gleichzeitiger Erstarrung*, Diplomarbeit Nr. 95/43, FH-Karlsruhe;

J. Töppel-Wolf (1996): *Experimentelle Untersuchung zur Ausbreitung von Schmelzen bei gleichzeitiger Erstarrung*, Diplomarbeit, FH-Offenburg;

IV. <u>Ausbreitung mit variabler Viskosität</u> J. J. Foit, IATF

Abstract

The isothermal spreading of a volume of liquid which increases with times as q t^{α}, $\alpha \ge 0$ was described in terms of similarity solutions (Huppert). Sakimoto and Zuber derived a similarity solution for the axisymmetric release of a fixed volume of fluid ($\alpha = 0$) with time dependent viscosity of the form $\nu = \kappa t^{\beta}$, $0 \le \beta < 1$. This result is extended to all $\alpha > 0$ and $0 \le \beta < 3 \alpha + 1$. These solutions which describe a kind of non-isothermal spreading can be used to validate the CORFLOW code.

Zusammenfassung

Die isotherme Ausbreitung eines Volumenstromes, qt^{α}, $\alpha \ge 0$, in Form von dünnen Schichten kann mit Hilfe selbstähnlicher Lösungen beschrieben werden (Huppert). Für die axialsymmetrische Ausbreitung eines konstanten Volumens ($\alpha = 0$) mit einer variablen Viskosität von der Form $\nu = \kappa t^{\beta}$, $0 \le \beta < 1$ existieren ebenfalls selbstähnliche Lösungen (Sakimoto, Zuber). Dieses Ergebnis läßt sich auf den Fall einer Ausbreitung für alle $\alpha > 0$ und $0 \le \beta < 3\alpha + 1$ erweitern. Die hergeleiteten Lösungen, die eine gewisse Form von nicht isothermer Ausbreitung beschreiben, können zur Validierung des CORFLOW-Rechenprogramms verwendet werden.

Selbstähnliche Lösungen für die eindimensionale Ausbreitung

Die Ausbreitung einer dünnen Schicht viskoser Flüssigkeit, die die kinematische Viskosität v besitzt, im Gravitationsfeld g wird durch folgende Gleichungen beschrieben [1]:

$$h_{t}' - \frac{1}{3} \frac{g}{v} \left(h^{3} h_{x}' \right)_{x} = 0, \qquad (1)$$

$$\int_{0}^{x_{front}^{(t)}} h(x,t) \, dx = q t^{\alpha}, \, \alpha \ge 0,$$
(2)

wobei h (x, t) die freie Oberfläche beschreibt und q t^{α} den Volumenstrom angibt, mit dem der Strom gespeist wird.

Für die axialsymmetrische Ausbreitung wurde für α = 0 eine selbstähnliche Lösung hergeleitet [2], die für variable Viskosität von der Form

$$\nu = \kappa t^{\beta}, \ \kappa = \frac{\nu_{O}}{t_{O}^{\beta}}$$
(3)

gilt.

Für die lineare Ausbreitung lassen sich ebenfalls selbstähnliche Lösungen für alle $\alpha \ge 0$ finden:

$$h(x,t) = \eta \frac{2}{N} \left(\frac{3q^{2}\kappa}{g} \right)^{\frac{1}{5}} t^{\frac{(2\alpha+\beta-1)}{5}} \psi(\eta/\eta_{N}),$$
(4)

$$\eta = \left(\frac{3\kappa}{gq^3}\right)^{\frac{1}{5}} xt^{-(3\alpha-\beta+1)/5}, \qquad (5)$$

$$\eta_N = \left(\int_0^1 \psi \, dy\right)^{-3/5}.$$
 (6)

Die Ausbreitung eines konstanten Volumens (α =0) wird für 0 $\leq \beta < 1$ beschrieben durch:

$$\psi(y) = \left(\frac{3}{10}\right)^{\frac{1}{3}} (1-\beta)^{\frac{1}{3}} (1-y^2)^{\frac{1}{3}}, \tag{7}$$

$$\eta_N = \left\{ \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{5} \left[\frac{3}{10} (1 - \beta) \right]^{\frac{1}{3}} \frac{\Gamma \left(\frac{1}{3} \right)}{\Gamma \left(\frac{5}{6} \right)} \right\}^{-\frac{3}{5}},$$
(8)

wobei Γ die Gammafunktion ist.

Für alle $\alpha > 0$ und $0 \le \beta < 3\alpha + 1$ gilt

$$\psi(y) = \left[\frac{3}{5}(3\alpha - \beta + 1)\right]^{\frac{1}{3}} (1 - y)^{\frac{1}{3}} \left[1 + \frac{3\alpha + 4\beta - 4}{24(3\alpha - \beta + 1)}(1 - y) + O((1 - y)^2)\right]$$
(9)

und

$$\eta_{N} = \left\{ \frac{3}{4} \left[\frac{3}{5} (3\alpha - \beta + 1) \right]^{\frac{1}{3}} \left[1 + \frac{4}{7} \frac{3\alpha + 4\beta - 4}{24(3\alpha - \beta + 1)} + \dots \right] \right\}^{-\frac{3}{5}}.$$
 (10)

• /

Die Position der Ausbreitungsfront kann aus GI. (5) bestimmt werden.

$$x_{front}(t) = \eta_N \left(\frac{3\kappa}{gq^3}\right)^{-\frac{1}{5}} t^{(3\alpha-\beta-1)/5}.$$
 (11)

Die Ableitung von $x_{front}(t)$ nach t liefert die Ausbreitungsgeschwindigkeit:

$$u_{front}(t) = \frac{3\alpha - \beta + 1}{5} \eta_N \left(\frac{3\kappa}{gq^3}\right)^{-\frac{1}{5}} t^{(3\alpha - \beta - 4)/5}.$$
 (12)

Die folgenden Abbildungen Abb. 1, Abb. 2 und Abb. 3 zeigen die freie Oberfläche bei der Ausbreitung eines konstanten Volumenstromes ($\alpha = 1$) mit

$$q = 4.5 \cdot 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$
, $v_0 = 3.6 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s}$ und $t_0 = 1 s$

für verschiedene Werte von β nach 10 s, 50 s und 100 s Ausbreitung, wobei $h(x, t + t_0)_{t=0}$ der Anfangszustand ist. Der Übergang zu einer Ausbreitung, die durch viskose Kräfte bestimmt wird, erfolgt in diesem Fall nach

$$t_{tr} = \left(\frac{q^4}{g^2 v_0^3}\right)^{\frac{1}{7-4\alpha}} = 1 \text{ s.}$$

Mit Hilfe von β kann der Anstieg der Viskosität, der durch Kühlung der Schmelze hervorgerufen wird, angepaßt werden. Die isotherme Lösung [1] erhält man für β =0. Mit wachsendem β wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit kleiner und die Schichthöhe der Schmelze nimmt zu.




Abb. 2: Freie Oberfläche nach 50 s Ausbreitung



Abb. 3: Freie Oberfläche nach 100 s Ausbreitung

<u>Literatur</u>

- Herbert E. Huppert, The propagation of two-dimensional and axisymmetric viscous gravity currents over a rigid horizontal surface, J. Fluid Mech. (1982), vol. 121, pp.42-58
- [2] S. E. H. Sakimoto and M. T. Zuber, The spreading of variable-viscosity axisymmetric radial gravity currents: appliations to the emplacement of Venusian "pancake" domes, J. Fluid Mech. (1995), vol. 301, pp.65-77

VI. <u>Thermophysikalische Eigenschaften von Kernschmelzen</u> (B. Schulz, IMF I)

Abstract

It will be demonstrated how it is possible to determine the thermophysical properties of core melts even when these properties cannot be measured directly.

Zusammenfassung

Es werden für die Bestimmung der thermophysikalischen Eigenschaften an Kernschmelzen Wege aufgezeigt, die eine Ermittlung dieser Eigenschaften selbst dann gestatten, wenn eine direkte Messung nicht möglich ist.

Es wurden für die Bestimmung der Eigenschaften folgende Genauigkeiten zugrunde gelegt:

Oberflächenspannung 50 % spez. Wärmekapazität 30 % Wärmeleitfähigkeit 30 % Viskosität 50 %

Auf diesem Hintergrund wurde die Abschätzbarkeit der genannten Eigenschaften für Schmelzen mit ionischem Bindungscharakter untersucht [1]. Es wird davon ausgegangen, daß in der Schmelze eine quasikristalline Struktur erhalten bleibt und die unstetige Veränderung der Eigenschaften am Schmelzpunkt hervorgerufen wird durch die unstetige Erhöhung der Leerstellen am Schmelzpunkt, bei ionischen Schmelzen ~ 10 -15 %.

Am Beispiel der höchstschmelzenden Komponente in Kernschmelzen kann gezeigt werden, daß diese Theorie für Schmelzen mit ionischem Bindungscharakter brauchbar ist (Tab. 1) und damit eine Abschätzbarkeit vom festen in den flüssigen Zustand erlaubt.

property of molten UO_2 at melting point	calculated	measured
density (g/cm³)	8.76	8.63
viscosity (mPas)	5.7	4.4
thermal expansion coefficient (K ⁻¹)	10 x 10⁵	10.5×10^{-5}
		3.2 × 10
isothermal compressibility (m² /N)	3.5 x 10''	3.54 x 10''
thermal conductivity (W/cmK)	0.018	0.022

Diese Theorie soll erweitert werden für die Schmelzen mit nicht ionischem Bindungscharakter und ist experimentell zu bestätigen an Schmelzen von ausgewählten Materialien.

Wesentlich schwieriger stellt sich die Ermittlung von thermophysikalischen Eigenschaften im Solidus-Liquidusbereich von Systemen mit Mischkristallbildung dar.

Im Solidus-Liquidusbereich existieren Fest- und Flüssigphasen nebeneinander. Es handelt sich also um einen Zweiphasenwerkstoff, dessen thermophysikalische Eigenschaften für den Gleichgewichtszustand leicht ermittelt werden können. Das Zustandsdiagramm liefert die chemische Zusammensetzung und Konzentration der beteiligten Phasen. Form und Orientierung der festen Phasenteilchen sind durch metallografische Präparation am erstarrten Regulus zu bestimmen.

Die experimentelle Bestätigung liegt für die richtungsabhängigen Eigenschaften Viskosität η und Wärmeleitfähigkeit λ vor [2,3].

Für die Viskosität z. B. ist der Zusammenhang:

$$\eta_r = \frac{\eta \ fest - flüssig}{\eta \ flüssig} = (1 - c)^{-m}$$
$$m = \frac{1 - \cos^2 \alpha}{2F} + \frac{\cos^2 \alpha}{1 - 2F}$$

 η_r = Viskosität des fest-flüssig-Gemisches bezogen auf die der reinen Flüssigkeit. $\cos^2 \alpha$ = Orientierung der festen Teilchen mit Bezug auf den Geschwindigkeitsgradienten F = Formfaktor der festen Teilchen.

c = Volumenkonzentration der festen Teilchen.

Für den realen Fall der Ausbreitung und Kühlung einer Kernschmelze können jedoch zwei unter Umständen gravierende Schwierigkeiten entstehen. Der Dichteunterschied der beteiligten Phasen fest-flüssig kann zur räumlichen Phasentrennung führen und durch zu hohe Abkühlungsgeschwindigkeiten der Schmelzen kann es zu starken Abweichungen in der Gleichgewichtskonzentration, wie sie das Zustandsdiagramm liefert, kommen. Auch diese Einflüsse müssen experimentell untersucht werden.

- [1] B. Schulz; The estimation of thermophysical properties of ionic melts (in Vorbereitung)
- [2] B. Schulz; Thermal conductivity of composites; Proc. Of the 1975 Intern. Conf. On Composite Materials Geneva, 1975 Vol 2 578 - 602
- [3] W. D. Sältzer, B. Schulz, Viscosity of Suspensions Proc. 4th Ris International Symposium on Deformation of Multiphase and Particle Containing Materials, 1983 Roskilde 511 - 516

32.21.05 Langfristige Containmentkühlung

I. <u>SUCO-Programm</u>

(J.U. Knebel, G. Janssens-Maenhout, M. Daubner, IATF)

Abstract

One possible concept for the decay heat removal from the containment of a future PWR after a core melt accident is based on passive sump cooling. The core melt would spread as a dry melt and stabilize in the reactor sump, as in the reference concept for the European Pressurized Water Reactor. After a number of plugs melt by passive means, water from the IRWST would flood the core melt with a low flow rate. The sump cooling is achieved by a stable natural circulation which transports the heat from the core melt to heat exchangers and condensers. The main objective of the SUCO programme is to attain results on the feasibility of the sump cooling concept. The work on this programme has progressed very well.

1. EINLEITUNG UND ZIELSETZUNG

Eine Möglichkeit der Nachwärmeabfuhr aus dem Containment eines zukünftigen Leichtwasserreaktors nach einem Kernschmelzunfall ist das Sumpfkühlkonzept. Wie bei dem Referenzkonzept für den Europäischen Druckwasserreaktor EPR breitet sich die Kernschmelze trocken im Reaktorsumpf aus und wird dort stabilisiert. Nach einem passiven Aufschmelzen von Stopfen wird die Schmelze von Wasser aus dem IRWST unter geringem Volumenstrom von oben geflutet. Die Sumpfkühlung erfolgt durch eine stabile <u>Naturkonvektionsströmung</u>, die die Wärme von der Schmelze an Wärmetauscher und Kondensatoren transportiert. Die <u>passiven Mechanismen</u> der Wärmeübertragung innerhalb des Containments sind Verdampfung/Kondensation, Konvektion und Konduktion. Das <u>Kurzzeitverhalten</u> ist durch eine zweiphasige Naturkonvektionsströmung, das <u>Langzeitverhalten</u> durch eine einphasige Naturkonvektionsströmung charakterisiert. Auf der sekundären Seite, das heißt von den Wärmetauschern und Kondensatoren, wird die Wärme über Pumpen an die Umgebung (Fluß, Kühlturm) abgegeben.

Das <u>Ziel</u> der im Rahmen des SUCO-Programms durchzuführenden <u>numerischen und</u> <u>experimentellen Untersuchungen</u> ist es,

- die im Prototyp auftretende Naturkonvektionsströmung mit Hilfe von ähnlich skalierten Modellexperimenten zu simulieren,
- die Modellexperimente durch Simulationsrechnungen nachzuvollziehen,
- die Ergebnisse mit Gesetzen der Ähnlichkeitsdynamik auf den Prototyp zu übertragen,
- Aussagen über die Machbarkeit des Sumpfkühlkonzepts zu treffen.

2. SUCO-PROGRAMM

Das SUCO-Programm besteht aus drei aufeinander aufbauenden Modellexperimenten, die durch Simulationsrechnungen begleitet werden. Das SUCO-Programm ist in Tab. 1 dargestellt. Die Modellexperimente und Simulationsrechnungen unterteilen sich in zwei Gruppen.

- Testanlage SUCOT und Rechenprogramm CFX-F3D zur Untersuchung des zweiphasigen Kurzzeitverhaltens.
- Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D und Rechenprogramme CFX-F3D und FLUENT zur Untersuchung des einphasigen Langzeitverhaltens.

Parameter	Zukünftige	SUCOT	SUCOS-3	SUCOS-2
	1500 MW D	Volumen 1:3	Längen 1:2	Längen 1:2
	Maßstab 1:	Leistung 1:3	Leistung 1:2	Leistung 1:2
		Höhe 1:1	Höhe 1:20	Höhe 1:20
Fluid	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser
Ausbreitungsfläche, m ²	160	0.45	0.4	0.4/4
Wasserhöhe, m	5.5	5.5	0.275	0.275
Nachzerfallswärme, M	25	0.07	0.00313	0.00313/4
Wärmestromdichte, W/c	15.6	15.6	0.783	0.783
untersuchtes Strömungsver		zweiphasig	einphasige	einphasige
		Langzeitverha	Kurzzeitverha	Kurzzeitverha
Rechenprogramm		CFX-F3D	CFX-F3D,	CFX-F3D,
		_	FLUENT	FLUENT

Tab 1:SUCO-Programm am Forschungszentrum Karlsruhe.

2.1 TESTANLAGEN

In Abb. 1 ist eine Zusammenstellung der drei Testanlagen als Fotografie und Skizze gegeben.

Die aus einer <u>Ähnlichkeitsanalyse</u> für eine zweiphasige und einphasige Naturkonvektionsströmung hergeleiteten dimensionslosen Kennzahlen sind im Detail in Knebel (1995) dargestellt und diskutiert.

Die <u>Untersuchungsschwerpunkte der Testanlage SUCOT</u> sind:

- Phänomenologie einer zweiphasigen Naturkonvektionsströmung,
- Unterkühltes und gesättigtes Behältersieden mit überlagerter Konvektion,
- Bildung, Aufstieg und Rekondensation von Dampfblasen,
- Strömungsmuster,
- Oberflächenstruktur der Heizplatte.

Die <u>Untersuchungsschwerpunkte der Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D</u> sind:

- Phänomenologische Untersuchungen zum einphasigen Langzeitverhalten,
- Integrale Thermo- und Fluiddynamik,
- Untersuchung des einphasigen Wärmeübergangs,
- Einfluß dreidimensionaler Effekte,
- Parametervariationen.











Abb. 1b: Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D am Forschungszentrum Karlsruhe (FZK).

— 285 —

2.2 RECHENPROGRAMME

Das <u>Rechenprogramm CFX-F3D</u> hat folgende Eigenschaften:

- Allgemeines thermo-hydraulisches Rechenprogramm zur numerischen Simulation einer mehrphasigen Strömung mit Wärme- und Phasenübergang,
- Lösung der Kontinuitätsgleichung, Impulserhaltungsgleichung, Energieerhaltungsgleichung für alle Phasen und Druckkorrekturgleichung (IPSA) nach der Methode der finiten Volumen,
- Berechnung von laminaren und turbulenten Strömungen (k-ε-Turbulenzmodell),
- Berechnung von stationären oder instationären Strömungen,
- Berechnung für beliebige zwei- und dreidimensionale Geometrien.

Das <u>Rechenprogramm FLUENT</u> hat folgende Eigenschaften:

- Allgemeines thermo-hydraulisches Rechenprogramm zur numerischen Simulation einer einphasigen Strömung mit Wärmeübergang,
- Lösung der Kontinuitätsgleichung, Impulserhaltungsgleichung und Energieerhaltungsgleichung nach der Methode der finiten Differenzen,
- Berechnung von laminaren und turbulenten Strömungen (k-ε-Turbulenzmodell),
- Berechnung von stationären oder instationären Strömungen,
- Berechnung für beliebige zwei- und dreidimensionale Geometrien.

3. ERGEBNISSE

Im folgenden werden die im Berichtszeitraum neuen Ergebnisse diskutiert:

- Stationäre Messungen in der verbesserten Testanlage SUCOS-2D.
- Transiente Messungen in der verbesserten Testanlage SUCOS-2D.
- Vergleich der Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D.
- Skalierung der Ergebnisse auf den Prototyp.
 Aussage über die Machbarkeit des Sumpfkühlkonzepts.
- Erste Validierungsrechnungen mit dem Rechenprogramm CFX-F3D für eine isotherme Blasenströmung.

3.1 Stationäre Messungen in der Testanlage SUCOS-2D

In der Testanlage SUCOS-2D wurden die in Tab. 2 aufgeführten Parametervariationen durchgeführt. Insgesamt wurden Versuche mit 99 unterschiedlichen Kombinationen abgearbeitet. Eine <u>ausführliche Dokumentation</u> ist in HosseinTari (1996), Kuhn (1996) und Schober (1997) gegeben.

Parameter	Variationen			
Heizleistung	783 W 313 W		313 W	
Versuchsführung	transient stationär		stationär	
Beheizung	gesamte Grundfläche ein Drittel der beheizt Grundfläche behe		n Drittel der Ifläche beheizt	
Anordnung der Wärmetauscher	VR, VL, H+VR, VR+VL, H+VR+VL, 2A, H+2A, VR+VL+2A, H+VR+2A, H+VR+VL+2A, H+VR+VR+4A			
Eintrittstemperatur in die Wärmetauscher	20°C	25°C		30°C
Höhe des Sumpfwassers	200 mm 275 mm (kein Naturumlauf) (Naturumlauf)		275 mm aturumlauf)	
Versperrung im Kamin	0 %	67 % 89		89 %

Tab 2: Parametervariationen.

Als wichtigstes Ergebnis ist festzuhalten, daß die integrale Wärmeübergangscharakteristik der Testanlage SUCOS-2D für sämtliche untersuchten Anordnungen der Wärmetauscher durch eine laminare <u>Wärmeübergangsbeziehung</u> der Form $Nu \propto Gr^{1/4}$ beschrieben wird, Knebel und Müller (1997). Die Meßwerte für den Betrieb nur des horizontalen Wärmetauschers (Konfiguration H) weichen deutlich von der Trendlinie ab, da die gewählte Wärmeübergangsbeziehung nicht für horizontale Flächen gültig ist. Dieser Zusammenhang ist für 10 unterschiedliche Anordnungen der Wärmetauscher und zwei Versperrungen im Kamin in Abb. 2 dargestellt.



Abb. 2: Beschreibung des integralen Wärmeübergangs der Testanlage SUCOS-2D. Heizleistung 313 W, stationär, gesamte Grundfläche beheizt, Eintrittstemperatur in die Wärmetauscher 20°C, 275 mm Wasserhöhe, 0% und 67% Versperrung.

Die entsprechenden mittleren Sumpftemperaturen sind in Tab. 3 angegeben. Sämtliche Temperaturen sind auf den <u>Referenzfall</u> der Anordnung der Wärmetauscher H+VR+VL+2A bezogen, das heißt die verbesserte Konfiguration nach Knebel (1996). Es zeigt sich, daß der Zubau der Array-Wärmetauscher die erreichbare Sumpftemperatur deutlich erniedrigt hat. Der Wert für die Anordnung der Wärmetauscher H+VR (ursprüngliche Konfiguration nach Weisshäupl und Bittermann (1993) liegt bei 1.79. Die Anordnung der Wärmetauscher H+VR+VL+4A sieht eine Verdopplung der Anzahl der Array-Wärmetauscher vor und führt mit einem Wert von 0.88 zu einer weiteren Absenkung der Sumpftemperatur.

Anordnung	Versperrung	T _{Pool,M} / T _{Ref}	Anordnung	Versperrung	T _{Pool,M} / T _{Ref}
Н	0%	2.87	VR+VL	67%	1.79
VR	0%	2.34	H+VR+VL	67%	1.42
H+VR	0%	1.44	2A	67%	1.84
VR+VL	0%	1.71	H+2A	67%	1.45
H+VR+VL	0%	1.32	VR+VL+2A	67%	1.10
H+VR+VL+4A	0%	0.85	H+VR+2A	67%	1.12
Н	67%	3.13	H+VR+VL+2A	67%	1.00
VR	67%	2.37	H+VR+VL+4A	67%	0.88
H+VR	67%	1.70	VR+VL	200 mm	2.18

Tab 3: Sumpftemperaturen der Testanlage SUCOS-2D aus Abb. 2 bezogen auf die Sumpftemperatur der Referenzanordnung H+VR+VL+2A.

Generell kann festgehalten werden, daß die mittlere Sumpftemperatur linear mit der Eintrittstemperatur in die Wärmetauscher ansteigt. Der Anstieg ist für alle Anordnungen der Wärmetauscher identisch, der Ordinatenabschnitt hängt von der Anordnung ab. Die unterschiedliche Beheizung und die Versperrung im Kamin sind von untergeordneter Bedeutung. Für eine Sumpfwasserhöhe von nur 200 mm, das heißt, es ist kein Naturumlauf möglich und nur die beiden vertikalen Wärmetauscher sind in Betrieb, stellt sich eine deutlich höhere Sumpftemperatur ein.

3.2 Transiente Messungen in der Testanlage SUCOS-2D

Insgesamt wurden drei transiente Messungen für die Anordnungen der Wärmetauscher H+VR, H+VR+VL+2A und H+VR+VL+4A (verbesserte Konfiguration mit doppelter Anzahl an Array-Wärmetauschern) durchgeführt.

In Abb. 3 sind die Sumpftemperatur und die Heizleistung über der skalierten Zeit aufgetragen. Die Sumpftemperatur ist auf die Eintrittstemperatur der Wärmetauscher bezogen und mit dem Wert für t = 0 min normiert. Die Heizleistung wird von 100 % der Nachzerfallswärme für t = 0 min bis 40 % Nachzerfallswärme für t = 11050 min exponentiell vorgegeben. Das entspricht einem Abklingen von 25 MW auf 10 MW innerhalb von 30000 min im Prototyp. Die Leistung ist mit dem Wert für t = 0 min normiert.

Aus Abb. 3 wird deutlich, daß die Sumpftemperatur für alle drei Anordnungen der Wärmetauscher ein <u>thermisch ähnliches Verhalten</u> zeigt. Sie nimmt für alle drei Anordnungen entsprechend der stationären Lösung der Impulsbilanzgleichung (Knebel (1995)) wie $T_{Pool} \propto \dot{Q}^{2/3}$ ab. Das Abklingen der mittleren Sumpftemperatur folgt verzögerungsfrei der über der Zeit vorgegebenen Heizleistung, $\dot{Q} \propto t^{-0.26}$, entsprechend $T_{Pool} \propto t^{(-0.26 \cdot 2/3)} = t^{-0.173}$.



Abb. 3: Sumpftemperatur und Heizleistung über skalierter Zeit im Modell.
 Heizleistung transient von 783 W auf 313 W abklingend, gesamte
 Grundfläche beheizt, Eintrittstemperatur in die Wärmetauscher 20°C,
 275 mm Wasserhöhe, 67% Versperrung.

3.3 Vergleich der Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D

Ein Vergleich der Messungen in den Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D ist bisher nur über die Temperaturmessungen möglich. Grundsätzlich kann festgehalten werden, daß die wesentlichen Phänomene wie die deutlich abgegrenzte Mischungsschicht oberhalb der Heizplatte, der isotherme Sumpfbereich und der kalte Strahl aus den Seitenbereichen in beiden Testanlagen identisch wiedergegeben werden. In Abb. 4 sind für beide Testanlagen zwei charakteristische Temperaturverläufe der Profile 1 und 6 gegenübergestellt. Profil 1 sowie sämtliche Profile im Bereich des Sumpfs zeigen für beide Testanlagen einen identischen Verlauf. Lediglich im Bereich des vertikalen Seitenbereichs ist für die Testanlage SUCOS-3D der kalte Strahl aus dem horizontalen Seitenbereich nicht so deutlich ausgebildet, da die Array-Wärmetauscher einen größeren Abstand haben.



Abb. 4: Charakteristische Temperaturverläufe der Profile 1 und 6 der Testanlagen SUCOS-2D und SUCOS-3D. Anordnung der Wärmetauscher H+VR+VL+2A.

3.4 MACHBARKEIT DES SUMPFKÜHLKONZEPTS

Die Schlüsselfrage bei einem skalierten Modellexperiment ist die Übertragung der experimentellen Ergebnisse auf den Zustand im Prototyp. Dazu sind Wärmeübegangsbeziehungen in Form einer <u>Nusselt-Grashof-Zahl Beziehung</u> notwendig, die den integralen Wärmeübergang in der Modellgeometrie und im Prototyp beschreiben. Die mit der treibenden Temperaturdifferenz und der für den Auftrieb relevanten Länge gebildete Rayleigh-Zahl liegt für die untersuchte Modellgeometrie in der Größenordnung $Ra = 5 \cdot 10^9$. Für den Prototyp liegt die Rayleigh-Zahl in der Größenordnung $Ra = 2 \cdot 10^{14}$. Der Übergang von einer laminaren zu einer turbulenten freien Naturkonvektionsströmung liegt im Bereich $10^9 < Ra_{krit} < 10^{10}$. Das bedeutet, daß der Wärmeübergang im Modell laminar und im Prototyp turbulent ist.

Für das Modell wird somit eine laminare Wärmeübergangsbeziehung der Form

$$Nu_{lam} = \frac{\alpha \ l}{\lambda} = \frac{0.72 \ Pr^{1/2}}{(0.95 + Pr)^{1/4}} \left(\frac{Gr}{4}\right)^{1/4}$$
(1)

angesetzt. <u>Abweichend</u> von der konservativen Annahme von Knebel (1996) wird jetzt für den Prototyp entsprechend der Abschätzung für die Rayleigh-Zahl eine turbulente Wärmeübergangsbeziehung der Form

$$Nu_{tur} = \frac{\alpha l}{\lambda} = 0.13 \left(Gr \ Pr \right)^{1/3}$$
⁽²⁾

verwendet.

In analoger Weise zu Knebel (1996) kann jetzt eine Bestimmungsgleichung für die Sumpftemperatur im Prototyp hergeleitet werden der Form

$$T_{Pool,P} = T_{HX,P} + 2.7 \left(T_{Pool} - T_{HX} \right)_{M} + \left(c_{T} - 2.7 \right) \left(a \ T_{HX} + b \right)_{M} \quad .$$
(3)

Darin sind c_T , *a* und *b* Koeffizienten, die von der für den Auftrieb relevanten Länge, von Vorfaktoren aus den Gln. (1) und (2) und von der Anordnung der Wärmetauscher abhängen. Sie sind in Kuhn (1996) gegeben.

Für die Referenzkonfiguration ergibt sich im Prototyp der in Abb. 5 dargestellte Temperaturverlauf über der Zeit. Die <u>mittlere Sumpftemperatur im Prototyp</u> bleibt aufgrund der vergrößerten Fläche der Wärmetauscher selbst für eine Nachzerfallswärme von *25 MW* knapp unterhalb der Siedetemperatur, eine deutliche Verbesserung gebenüber der Konfiguration H+VR.



Abb. 5: Sumpftemperatur und Heizleistung über Zeit im Prototyp.

- 291 -

Die Übertragung der <u>Geschwindigkeit</u> im Modell auf den Zustand im Prototyp erfolgt unter der Voraussetzung, daß die integrale Reibungs-Zahl des Naturkonvektionssystems im Modell und im Prototyp identisch ist (siehe Abendschön (1995)), nach

$$u_P = 7.37 u_M$$
 (4)

Für die Referenzkonfiguration ergeben sich im Prototyp maximale Geschwindigkeiten im Bereich von 0.2 m/s.

3.5 ERSTE RECHNUNGEN MIT CFX-F3D

Die numerische Simulation einer Zweiphasenströmung mit Massen-, Impulsund Energieaustausch zwischen den Phasen erfordert die Entwicklung physikalischer Modell zur Beschreibung lokaler Strömungseigenschaften. In einem ersten Schritt wurden in das Rechenprogramm CFX-F3D die Zwischenphasenkräfte in den Impulsbilanzgleichungen implementiert. Dies sind die Drag-Kraft, die sich aus der Zwischenphasenreibungskraft und der virtuellen Massenkraft zusammensetzt, und die Lift-Kraft, die sich aus der turbulenten Diffusionskraft und der Kutta-Joukowski-Kraft zusammensetzt. Die implementierten Modelle wurden an einer isothermen, vertikalen und turbulenten Blasenströmung des Systems Wasser-Luft im Vergleich mit Meßergebnissen von Samstag (1996) ausgetestet. Die Parameter entsprechen in etwa den in der Testanlage SUCOT zu erwartenden Werten.

In Abb. 6 ist aus Janssens-Maenhout et al. (1996) exemplarisch ein berechnetes und gemessenes radiales Profil des Flächenanteils dargestellt. Es wird <u>eine sehr</u> <u>gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung</u> erreicht.

In einem zweiten Schritt werden physikalische Modelle zur Beschreibung der Blasenbildung und des Siedens implementiert und verifiziert. Dafür sind Ausdrücke für die Dampfbildungsrate, den Blasendurchmesser, die Blasenablösefrequenz und die Blasendichte notwendig. Weiter sind Aussagen über den Massenübergang zwischen den Phasen und die Zwischenphasenterme in den Energiebilanzgleichungen notwendig.



Abb. 6: Radiale Verteilung des Flächenanteils. Vergleich Messung / Rechnung.

4. WESENTLICHER FORTSCHRITT DER ARBEITEN

- Das Sumpfkühlkonzept realisiert eine <u>stabile Naturkonvektionsströmung</u> zwischen Wärmequelle und Wärmesenke.
- Die experimentellen und numerischen Untersuchungen an der Testanlage SUCOS-2D sind abgeschlossen. Es wurden stationäre und transiente Versuche mit insgesamt 99 unterschiedlichen Parameterkombinationen durchgeführt. Eine Ähnlichkeitsskalierung zeigt, daß durch den Zubau von Array-Wärmetauschern die Sumpfgeometrie so optimiert werden konnte, daß <u>der Sumpf im Prototyp deutlich unterkühlt gehalten werden kann</u>. Die Ähnlichkeitsskalierung beruht auf einer laminaren Wärmeübertragung im Modell und einer turbulenten Wärmeübertragung im Prototyp.
- Erste Rechnungen mit dem Rechenprogramm CFX-F3D f
 ür eine zweiphasige Strömung zeigen eine <u>sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und</u> <u>Numerik</u>.
- Die Testanlage SUCOT ist aufgebaut, instrumentiert und in Betrieb.
- Die thermo- und fluiddynamischen Eigenschaften des Sumpfkühlkonzepts zeichnen dieses als <u>erfolgversprechendes passives System</u> zur Nachwärmeabfuhr aus dem Containment aus.

5. AUSBLICK

Testanlage SUCOT:

An der Testanlage SUCOT ist die Durchführung von Messungen unter Variation der folgenden Parameter vorgesehen:

- Phasenübergangs-Zahl,
- Unterkühlungs-Zahl,
- Heizleistung als Funktion des Ortes und der Zeit,
- Oberflächenstruktur der Heizplatten.

Rechenprogramm CFX-F3D:

- Implementierung und Verifizierung physikalischer Modelle zur Beschreibung der Blasenbildung und des Siedens,
- Berechnung der Zweiphasenströmung in SUCOT.

Prototyp:

• Numerische Simulation der realen Sumpfgeometrie.

6. LITERATUR

Abendschön, P., Experimentelle Untersuchungen zum möglichen optionalen Sumpfkühlkonzept des Europäischen Druckwasserreaktors EPR, Studienarbeit, Institut für Angewandte Thermo- und Fluiddynamik am Forschungszentrums Karlsruhe, (1995)

Hossein-Tari, K., Untersuchung der Naturkonvektion in einem Behälter mit verteilten Wärmequellen und Wärmesenken, Diplomarbeit, Institut für Angewandte Thermo- und Fluiddynamik am Forschungszentrums Karlsruhe, (1996)

Janssens-Maenhout, G., Transport Phenomena in Bubbly Flows, 3. CFDS-Usermeeting, Stuttgart, 10.11. September, (1996)

Knebel, J.U., Langfristige Containment-Kühlung, in: Hüper, R., Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1994, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5600, pp. 159-170, (1995)

Knebel, J.U., Langfristige Containment-Kühlung, in: Hüper, R., Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5780, pp. 224-239, (1996)

Knebel, J.U., Müller, U., Experimental and Numerical Simulation of Passive Decay Heat Removal After Core Melt Down, Proc. 8th Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics NURETH-8, Kyoto, Japan, September 30 - October 4, (1997)

Kuhn, D., Numerische und experimentelle Untersuchungen zum Sumpfkühlkonzept, Diplomarbeit, Institut für Angewandte Thermo- und Fluiddynamik am Forschungszentrums Karlsruhe, (1996) Samstag, M., Experimentelle Untersuchungen von Transportphänomenen in vertikalen turbulenten Luft-Wasser-Blasenströmungen, Dissertation Universität Karlsruhe (TH) und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5662, (1996)

Schober, P., Untersuchung der Naturkonvektion in einem Behälter mit verteilten Wärmequellen und Wärmesenken, Studienarbeit, Institut für Angewandte Thermound Fluiddynamik am Forschungszentrums Karlsruhe, (1997)

Weisshäupl, H.A., Bittermann, D., Large Spreading of Core Melt for Melt Retention/Stabilization, Proc. 5th Int. Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Karlsruhe, August 23-24, pp. 347-355, (1993) II. <u>Thermohydraulische Untersuchungen zur passiven Containment-Kühlung –</u> <u>PASCO-Programm</u> (E. Arbogast, X. Cheng, F.J. Erbacher, U. Harten, H.J. Neitzel, H. Schmidt, IATF)

Abstract

In addition to the sump cooling concept, the PASCO programme deals with the potential to remove the decay heat in a passive way. Experimental and theoretical work has been carried out to investigate the limits of cooling the containment shell by natural air convection.

Einleitung und Zielsetzung

Neben der Möglichkeit der Sumpfkühlung wurden im PASCO-Programm im Rahmen der Untersuchungen der passiven Nachwärmeabfuhr experimentelle und theoretische Arbeiten zur Ermittlung der Kühlbarkeitsgrenzen der Containmentschale durch Luft-Naturkonvektion auf der Außenseite durchgeführt. Im einzelnen umfaßt dies Untersuchungen von Maßnahmen zur Erhöhung des Wärmeübergangs durch Konvektion und Strahlung sowie Arbeiten zur Erfassung von physikalischen Modellen und Wärmeübergangsbeziehungen. Die Versuchsdaten dienen als Datenbasis für die Weiterentwicklung mehrdimensionaler Rechencodes (z.B. FLUTAN).

Durchgeführte Arbeiten

Im Berichtszeitraum wurden am PASCO-Prüfstand die Einflüsse der Kanalhöhe und eines Filters am Kanalaustritt untersucht, wobei die Kanalhöhe von 8 m auf 4 m reduziert wurde. Verglichen mit der vollen Kanalhöhe von 8 m wird die abgeführte Wärme bei 4 m Höhe auf 55 % reduziert.

Die Versuchsparameter bei den Versuchen ohne Filter waren:

Kanalhöhe: 4 m; Emissionskoeffizient aller Wände: 0,4; Tiefe des Kanals: 0,25; 0,50; 0,75; 1,0 m; Temperatur der beheizten Wand: 100, 125, 150, 175 °C.

Der zur Verfügung stehende Filter brachte, verglichen mit den entsprechenden Versuchen ohne Filter, eine Reduzierung der abgeführten Wärme um ca. 30 %. Da

die Druckabfall-Charakterisitik des Filters unbekannt ist, wurde sie mit dem PASCO-Rechenprogramm in der Weise ermittelt, daß Messung und Rechnung bezüglich des Massenstromes der Luft gut übereinstimmen. Es ergab sich dann auch eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung bezüglich der übertragenen Wärme und der Temperaturen von Rückwand und Seitenwänden des Kanals.

Die Versuchsparameter bei den Versuchen mit Filter waren:

Kanalhöhe: 4 m; Emissionskoeffizient aller Wände: 0,4; Tiefe des Kanals: 0,25 m; Temperatur der beheizten Wand: 100, 125, 150, 175 °C.

Versuchsbegleitende Rechnungen wurden durchgeführt mit dem 3-D-Code FLUTAN. Eine gute Übereinstimmung zwischen dem Experiment und der numerischen Rechnung wurde festgestellt. Die Abbildung vergleicht die abgeführte Wärmeleistung aus dem Experiment mit der aus der Rechnung. Für alle Meßpunkte ist die Abweichung zwischen den Meßdaten und den Rechenergebnissen kleiner als 10%. Daraus ist zu schließen, daß der FLUTAN-Code für das betrachtete passive Kühlsystem erfolgreich validiert ist.



Abb. 1: Vergleich der gemessenen Wärmeleistung mit den Rechenergebnissen

Für das vorschlagene Verbundcontainment eines zukünftigen Reaktors wurde sodann mit dem FLUTAN-Code berechnet, wieviel Wärmeleistung in einem der etwa 300 Kühlkanäle abgeführt werden kann. Der betrachtete Kühlkanal hat eine Höhe von 50 m und eine Breite von 0.5 m. Die Temperatur des Stahlcontainments beträgt 150°C. Der Wandemissionskoeffizient ist 0.9. Am Austritt des Kühlkanals befindet sich ein Luftfilter. Der Druckverlustbeiwert des Luftfilters wurde von 0 bis 1500 variiert. Wie die Abbildung zeigt, können für den Fall ohne Luftfilter insgesamt 50 kW Wärmeleistung abgeführt werden, jeweils 50% durch Wärmestrahlung und Konvektion. Mit steigendem Druckverlustbeiwert des Luftfilters nimmt die abgeführte Wärme ab. Bei einem Druckverlustbeiwert von 1000 wird etwa 15 kW Wärmeleistung durch Wärmestrahlung und etwa 10 kW direkt durch Konvektion abtransportiert. Die gesamte abführbare Nachwärme aus dem Reaktorcontainment liegt somit bei einem Filterdruckverlustbeiwert von 1000 bei etwa 8 MW.



Abb. 2: Abgeführte Wärmeleistung in einem Kühlkanal des Verbundcontainments

32.21.06 Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen unter hochtransienten Belastungen

<u>Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter –</u> <u>BERDA-Versuche und Ähnlichkeitsexperimente Flipper</u> (B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, A. Hirt, G. Hoffmann, O. Janatzke, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, T. Stach, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)

1 Model experiments BERDA simulating the liquid slug impact against the upper vessel head. Tests 04 to 07 with liquid metal but without upper internal structures.

Test 04 to 06 were analyzed in detail. In Table 1 the results for these tests are collected.

Tost	liquid metal			
Test	04	05	06	
Mass [kg]	80+5.0	80+2.4	80+2.5	
Measured velocity Pos. A [m/s]	78.4	104.6	102.6	
Measured velocity Pos. B [m/s]	≈97 (?)	≈104.6	≈104.8	
Extrapolated impact velocity [m/s]	82	110	107	
Maximum impact force for 52 bolts [MN]	4.6	10.6	11.0	
Circumferential force variation [%]	- 14/+22	- 10/ + 15	- 5/+11	
Maximum strain of the bolts [%]	0.16	0.38	0.45	
Impact duration [ms]	8.5	2.4	2.4	
Initial momentum [Ns]	8245	9064	8873	
Rebound factor [-]	1.38	1.12	1.18	
Meridional strain [%]	≈2	≈12	≈40	
Circumferential strain [%] at $R = 25 \text{ mm}$	≈3	≈25	≈50	
Measured wall thickness reduction [%]	-	≈14	≈35	
Vertical displacement [mm]	3.3	22.0	30.8	
Accumulated vertical displacement [mm]	3.3	25.3	30.8	

Table 1: Results for the test 04 - 06

In test 04 the crucible failed at the bottom during the impact at the crash tube. Therefore, it is supposed that the slug was dispersed intensively by the escaping gas thus reducing the impact forces considerably. In addition the slug was accelerated to a higher velocity by the gas and a fragment of the crucible increased the impact mass by about 2.5 kg. Therefore, the measured velocities at position A and B, see Fig. 1, and the extrapolated impact velocity at the crash tube vary considerably. It is believed that the velocity at point B is the most realistic one. Hence, this velocity is taken as reference value here.

For the tests 05 and 06 where the crucible remained intact the extrapolated impact velocity is taken as the reference velocity.

The resulting impact force is calculated from the measured strains at the bolts (see Figs. 2, 7, 13). The variation of the force along the circumference, given in Table 1, is the maximum deviation from the mean value. The impact duration is estimated from the force time-history. The product of slug mass and reference velocity is given as initial momentum of the slug. The rebound factor is defined as the ratio of the time integral of the impact force - the transferred momentum - and the initial momentum (see Figs. 3, 8, 14).

The permanent meridional and circumferential strains and the permanent displacement of the pole of the RPV-head are determined from position measurements of marked points (see Figs. 5, 10, 16). The thickness reduction in test 05 is determined by ultrasonic measurement; in test 06 coordinate measurements of marked points on the inner and outer surface are used.

In all tests a vessel head with holes for the control rods was used. However, comparing the strains of the different tests, it is important to note that in test 06 an additional hole was close to the central hole at the pole. Due to this hole the head was weakened what increased the strains such that finally a crack developed from the central hole to this additional one in test 06.

A comparison of the measured impact forces is given in Fig. 19. Herein all masses are converted to a reference mass of 80 kg, assuming that the impact force is proportional to the impacting mass.

The high strains obtained for test 05 and 06, especially the crack for test 06, indicate that the maximum impact force which the head can carry is about 11 MN. The maximum force which the bolts could carry is about 14 MN. Thus it is questionable whether an overloading would cause the head to become one single

missile. Now, the tolerable kinetic slug energy which the head is able to withstand can be determined. It is $\frac{1}{2} \cdot 82.5 \text{ kg} \cdot (110 \text{ m/s})^2 \approx 0.5 \text{ MJ}$. (For real scale this value is 0.5 GJ.) For the next experimental series including models of the upper internal structures a higher tolerable slug energy is expected.

Meanwhile, test 07 was performed which, however, is not yet analyzed in detail. The impact mass was 82.5 kg, the impact velocity was 61 m/s. The maximum impact force was 7.4 MN, what is considerably larger than expected: From test 01 and 02 using lead spheres and test 05 and 06 using liquid metal it might be concluded that the relation between the maximum impact force and the impact velocity can be described approximately by a parabola. (Test 04 is an exception, since failure of the crucible caused enhanced slug dispersion.) This parabola is shown by the dashed line in Fig. 20 together with the measured peak force of test 07.

Our computational model SimSIC recently developed suggests different and more complex relations for the impact of the lead spheres and the liquid metal. According to SimSIC the large plastic head deformations seem to be of considerable influence. The maximal impact forces, determined by first calculations with SimSIC for different impact velocities are shown by the solid line in Fig. 20. It has a quite different trend than the parabola, and thus can better explain the tendency of the results from tests 05 to 07.



Figure 1: Test facility BERDA









— 304 —



-40%

BERDA Test06

Figure 15: Shape of the RPV-head

Radius [mm]

Figure 18: Thickness reduction from measured coordinates

Radius [mm]

A main question of the model experiments BERDA is the similarity to the reactor scale. Is the strain distribution due to liquid slug impact in the BERDA head really the same as in the reactor head? Therefore, the similarity for liquid slug impact against deformable structures has been investigated by the similarity experiments FLIPPER, where a liquid (water) is hurled against a simple deformable plate as shown in Fig. 21. The tests were carried out in three different scales, $\lambda = 10$ (small scale), $\lambda = 2.5$ (medium scale), $\lambda = 1$ (large scale). In case of similarity the relative deformations should be scale independent.

Fig. 22 shows the results for solid plates and bending joints of structural steel. Specimens manufactured from different charges are indicated by different symbols. The figure reveals considerable scatter. However, the mean values (indicated together with the confidence intervals) show only a moderate scale influence which can be explained by the strain rate sensitivity of the material.

Fig. 23 shows results for a perforated plate. From these experiments it can be concluded that the influence of the fluid viscosity is negligible.

Further results for other test conditions show the same tendency.

For tests with bending joints from austenitic steel, however, a strong scale effect was found, Fig. 24. It was caused by the stiffness of the joints, which was obviously not governed by the classical stress-strain relations for plastic flow.

It can be concluded that for pure liquid structure impact problems the transfer to other scales follows the known similarity rules approximately. However, for certain materials the size effect on deformation and the size effect on fracture, which was not addressed by FLIPPER, needs additional research.



¹see Krieg et.al., Nucl. Tech., **111**, 369ff.

Figure 19: Results of BERDA Tests 01 to 06, converted to a reference mass of 80 kg



Figure 20: Results of BERDA Tests 01 to 07, converted to a reference mass of 80 kg

The solid line gives a new relation between impact force and impact velocity calculated with SimSIC.



Fig. 21: FLIPPER - Test principle



Fig. 22: FLIPPER - Test results for solid target plates, bending joints from St37, drop height h = 2 m



Fig. 23: FLIPPER - Test results for perforated target plates, bending joints from ST37, drop height h = 3.8 m



Fig. 24: FLIPPER - Test results for solid target plates, bending joints from X5 Cr Ni 189

3 Theoretical investigations on liquid slug impact

Discussion of simplified liquid slug impact models

In order to interprete the experimental results of the BERDA tests, simplified models were developed for the description of liquid slug impact. Formerly, liquid slug impacts were discussed where very idealized conditions yielded the most unfavorable results [1, chapter III B]. It was assumed that the surface of the slug and the inner surface of the head fitted exactly. Thus, the impact occured instantaneously on a large area. Two phases had to be distinguished:

- The first phase is governed by acoustic waves travelling in the slug. Pressures are rather high with peak values of about $p_{ac} = \rho c v$, the duration is rather short with times of about $\tau_{ac} = h_{slug}/c$ ($\rho = density$, c = velocity of sound, v = impact velocity, $h_{slug} = initial$ height of slug). During this phase the uniform velocity distribution in the liquid slug is changed into a flow pattern according to the obstacle. This consumes a certain fraction of the initial slug momentum. Assuming that the duration of this phase approaches zero, the pressure peak is of Dirac-type, and the changed flow can be determined from the equations for incompressible fluids. It turned out that - depending on the height of the slug - about 30-60 % of the initial momentum is transferred during this first phase.
- The second phase is governed by simple transient fluid flow with rather low pressures in the order of $p_{flow} = \rho v^2$ and a long duration of about $\tau_{flow} = h_{slug}/v$. During this phase the remainder of the momentum is transferred.

However, in reality highly idealized conditions as just considered will hardly occur. The experimental findings in BERDA indicate, that the impact should mainly be governed by fluid flow phenomena. Thus, the first accoustic phase of the impact would not be significant here. The impact can be described by fluid flow phenomena as follows: The liquid metal slug is contained in a second thin walled crucible, which moves along with the slug. Thus, significant slug distortion and dispersion will not occur, and the impact conditions can be idealized as indicated in Fig. 25a.

The impact area increases gradually during the time span $\tau_{dome} = h_{dome}/v$ until the center of the slug has reached the head. Then the impact force has reached its maximum $F = \rho \cdot v^2 \cdot A_{slug}$. Using the parameters from the BERDA test 05 with

 $\rho=9200~kg/m^3,\,v=109~m/s,\,h_{dome}=66~mm$ and the slug area $A_{slug}=0.1~m^2$ one obtains $\tau_{dome}=0.6~ms$ and F=11~MN.

Thereafter, the force is assumed to decrease linearly due to the decreasing vertical slug velocity and the decreasing involved fluid mass. The duration of the second phase can be determined by requiring that the initial slug momentum should be balanced by the total force time-history. Taking into account that in the experiment 1.13 times the initial momentum was transferred, a total impact duration of $\tau_{total} = 1.8$ ms is obtained. In Fig. 25b the resulting force time-history modeled in this way is compared with the measured time-history [2]. The agreement is very good. For BERDA test 06, which had similar parameters, the corresponding results agree also very good.

This gave motivation to assess a pressure distribution acting at the head, using similar assumptions. A triangular pressure-time-history was chosen with a duration of $\tau = 2h_{slug}/v = 1.6$ ms. The height of the pressure peaks is $p = \rho \cdot v^2 \cdot f = 1235$ bar, where the factor f = 1.13 considers that more than the initial slug momentum was transferred in the experiment. The pressure peaks act at the different regions of the head with a time dealy $\Delta \tau$ depending from the free height left above the slug, according to $\Delta \tau = h$ (r)/v. This pressure loading is shown in Fig. 26a. The resulting force acting at the head is compared with the measured and idealized time-histories in Fig. 26b. The agreement is good, the same is also true for BERDA test 06.

However, meanwhile BERDA test 07 was performed using a lower impact velocity of 61 m/s. The measured impact force was considerably larger than that calculated with the above formula. Up to now findings indicate (see next section) that differences in the yielding of the head have a considerable influence on the height of the impact forces: in this test the largest permanent head deformation was 10 mm, while it was 22 mm for BERDA test 05. Additional investigations are necessary for clarification.

Development of the computational model SimSIC

The basic features of the code SimSIC were presented in some detail in the last report. Its main features are briefly repeated. SimSIC is a rather coarse model with respect to geometric resolution, but it allows to model the different physical phenomena important for slug-structure interactions. Only one axial coordinate is considered. The different components are represented by point masses, but the size of these may change with time. For instance, the internal structures which are still intact are represented by one mass; those which have already failed are described by another mass. Both masses change with time according to the progression of failure. The masses are coupled by forces which depend on deformation, velocity difference or other parameters. Thus the model SimSIC allows one to study in a more general sense the influence of failure loads, flow resistance, inertia, and further parameters.

Most parts of the model are developed and tested successfully. First calculations for slug impact against the head with different velocities indicate that the yield-ing of the head has a significant influence on the impact forces (see section 3.4.1).

Literature

- [1] R. Krieg, T. Malmberg, G. Messemer, T. Stach, E. Stratmanns, "Slug Impact Loading on the Vessel Head During a Postulated In-Vessel Steam Explosion in Pressurized Water Reactors", *Nuclear Technology*, 111, 369 (1995).
- [2] R. Krieg, T. Malmberg, G. Messemer, G. Hoffmann, T. Stach, E. Stratmanns, "Model Experiments BERDA Describing the Impact of Molten Core Material Against a PWR Vessel Head", International Conference on Advanced Reactor Safety ARS'97, Orlando, Florida, June 1997.



- Fig. 25: Idealized liquid slug impact against the vessel head a) geometric conditions
 - b) comparison of the idealized impact force time-history with a corresponding measurement


- Fig. 26: Determination of liquid slug impact forces from an assumed idealized pressure distribution
 - a) pressure distribution

 b) resulting force time-history compared with a corresponding measurement and the idealization from Fig. 25

32.21.07 Analysen zum Containmentverhalten

<u>Aerosol-Rechnung mit CONTAIN als Beitrag zum Vergleich von Containment-</u> Codes

(W. Baumann, G. Henneges, INR; H. Stein, Siemens/KWU)

Abstract

I.

The integral accident analysis code CONTAIN was employed to benchmark the aerosol behavior using the example of a hypothetical EPR accident scenario initiated by a midsized leak in the cold leg. The basic data for the code input together with the proposal to carry out a benchmark with the containment codes WAVCO/NAUA, FIPLOC and MELCOR originate from Siemens/KWU. As can be seen from the calculated aerosol distributions, the results of WAVCO/NAUA and CONTAIN agree well with each other whereas FIPLOC and MELCOR partially deviate.

Zusammenfassung

Der integrale Störfall-Code CONTAIN wurde im Rahmen eines Benchmarks zum Aerosolverhalten am Beispiel einer hypothetischen EPR-Störfallsequenz eingesetzt, wobei ein mittleres Leck im kalten Strang angenommen wurde. Die Basisdaten für die Code-Eingabe stammen von Siemens/KWU, ebenso die Anregung zum Vergleich der Ergebnisse mit den Containment-Codes WAVCO/NAUA, FIPLOC und MELCOR. Wie die berechneten Aerosolverteilungen zeigen, stimmen WAVCO/NAUA und CONTAIN recht gut überein, während FIPLOC und MELCOR teilweise abweichen.

1. Einleitung

Containment-Codes zur Betrachtung und Analyse von Reaktorunfällen werden im Rahmen der Entwicklung des European Pressurized Water Reactor (EPR) eingesetzt, um den Ablauf schwerer hypothetischer Störfälle vorherzusagen. Die für die Störfall-Atmosphäre berechneten thermodynamischen und aerosolphysikalischen Verhältnisse im Containment (Abb.1) bilden dabei die Grundlage zur Bewertung entsprechender Schutzmaßnahmen sowie zur Bestimmung des Quellterms. Um einen Überblick über die Leistungsfähigkeit verfügbarer Rechenprogramme zu erhalten, hatte Siemens/KWU vor einiger Zeit ein Benchmark mit Containment-Codes angeregt. Als zu betrachtender Referenzfall wurde eine Störfallsequenz für den EPR vorgeschlagen, die durch ein mittleres Leck im kalten Strang (200 cm²) in die Anlagenräume initiiert wird. An dem Codevergleich beteiligte sich Siemens/KWU mit den Containment-Codes WAVCO/NAUAmod5-M¹, FIPLOC 2.0 und MELCOR 1.8.3; das Forschungszentrum Karlsruhe lieferte einen Beitrag mit CONTAIN 1.12 /1/.

Während die erste Stufe des Codevergleichs die thermohydraulischen Aspekte des Containmentverhaltens betraf /2/, befaßt sich die zweite Stufe, die Gegenstand des vorliegenden Berichtes ist, mit der Untersuchung zum Aerosolverhalten /3/.

2. Containment- und Störfall-Beschreibung

Für die Benchmark-Rechnung zum Aerosolverhalten wurden die Eingabedaten des thermohydraulischen Benchmarks /2/ übernommen, überarbeitet und anhand der von Siemens/KWU gelieferten Basisdaten erweitert. Bezüglich der Nodalisierung hatte Siemens/KWU bei der mit NAUA /4/ durchgeführten Referenzrechnung die Teilräume 1 bis 3 zu einer Einheit zusammengefaßt, so daß die Rechnung - anders als im Falle der Thermohydraulik - nicht für 7, sondern nur für 4 Teilräume zuzüglich der Umgebung erfolgte. Diese Zusammenfassung wurde in der Eingabe für die CONTAIN-Rechnung nicht verifiziert. Lediglich die für die Räume 1 bis 3 berechneten Ergebnisse wurden bei der Auswertung zusammengefaßt, so daß sie mit den NAUA-Referenzwerten vergleichbar sind.

Während die Raumdaten somit unverändert blieben, mußte jedoch ein Teil der Wand- und Bodenflächen, die früheren Vorgaben gemäß fast durchweg vertikal angeordnet waren, aus Gründen der Aerosol-Deposition umorientiert werden. Entsprechend den von Siemens/KWU gelieferten Basisdaten wurden daher 2 vertikale Strukturflächen in Raum 5 nunmehr horizontal ausgerichtet.

¹ WAVCO berechnet den thermohydraulischen, NAUA den aerosolphysikalischen Anteil.

Die Aerosol-Freisetzung erfolgt ab dem Zeitpunkt 17 000 s nach Beginn des Störfalls. Die Werte basieren auf dem Ergebnis einer von Siemens/KWU durchgeführten Konvoi-Analyse. Es handelt sich um eine Folge von 27 Einzelvorgängen, die aus Rechenzeitgründen für die NAUA-Eingabe nachträglich diskretisiert wurden und sich auf 3 Quellen mit je 2 Aerosolgruppen verteilen. Die jeweils erste Gruppe bezeichnet dabei die Gesamtmasse, die zweite den entsprechenden radioaktiven Anteil.

Die erste Aerosolquelle beschreibt die instantanen Ereignisse beim Abschmelzen des Kerns und beim RDB-Versagen, wobei zunächst 638 kg, später weitere 10 kg Aerosolmasse mit einer Dichte von je 4 000 kg m⁻³ kurzfristig freigesetzt werden. Ein Anteil von 27% dieser Massen gilt als radioaktive Komponente. Bei der zweiten und dritten Quelle handelt es sich um intermittierende Resuspensionsvorgänge aus Primärkreis und Sumpf, wobei jedes einzelne Ereignis im Falle der zweiten Quelle 67.5 kg, im Falle der dritten Quelle 0.0033 kg involviert. Der radioaktive Anteil erreicht bei der zweiten Quelle 27%, bei der dritten 12%. Die Aerosoldichte beträgt bei beiden Quellen 2 200 kg m⁻³.

3. Benutzte CONTAIN-Optionen

Die Benchmark-Rechnung wurde mit der CONTAIN-Version 1.12 inklusive Update C110W und der in /2/ beschriebenen Änderung durchgeführt. Der Quellcode für diese Version war dem Forschungszentrum Karlsruhe im September 1993 zur Verfügung gestellt worden. Die im Code enthaltenen Modelle und Optionen sind im Benutzerhandbuch /1/ und im Referenzhandbuch /5/ detailliert beschrieben. In den folgenden Abschnitten werden die neu verwendeten Optionen kurz erläutert.

3.1 Aufgeprägte Volumenströmung

Beim früheren thermohydraulischen Benchmark waren die Gasströmungen zwischen den Zellen über die Option "flows" mit Hilfe einer Druckverlustgleichung berechnet worden, welche die Trägheit der Gasmasse, den Strömungswiderstand sowie den geodätischen Höhenunterschied entlang des Strömungsweges berücksichtigte /2/. Auswirkungen dieser Effekte auf das Ergebnis des Aersolverhaltens bei der vorliegenden Benchmarkrechnung sind jedoch unerwünscht, damit Abweichungen beim Codevergleich ausschließlich dem implementierten Aerosolmodell zugeordnet werden können. Um daher thermohydrauli-

sche Einflüsse auf die zu berechnende Aerosolverteilung auszuschließen, wurden die von Siemens/KWU in der Referenzrechnung mit WAVCO ermittelten und in NAUA verwendeten zeitabhängigen Volumenströme übernommen und als Randbedingungen eingesetzt. Diese Vorgehensweise hatte Siemens/KWU empfohlen und auch selbst bei den eigenen Rechnungen mit den Codes FIPLOC und MELCOR angewandt /6/.

Der CONTAIN-Code erlaubt es, konstante oder zeitlich variable Volumenströme mithilfe der "engineered vents"-Option als Randbedingung aufzuprägen. Hierzu wird das Modell mit "engvent" aktiviert. Bei der NAUA-Referenzrechnung hatte Siemens/KWU die Teilräume 1 bis 3 zu einer Rechenzelle zusammengefaßt und nur die Volumenströme zwischen den Teilräumen 3 bis 8 explizit berechnet. Die Option "engineered vents" zur Vorgabe der Volumenströme wurde deshalb auf diese Teilräume beschränkt.

3.2 Aerosolmodell

Das Aerosolverhalten spielt bei Containment-Analysen eine wichtige Rolle, weil bei schweren Störfällen freigesetzte radioaktive Spaltprodukte als Gase und luftgetragene Aerosole in die Umgebung gelangen können. Dabei muß angenommen werden, daß bei einem derartigen Unfall ohnehin ein großer Teil der freigesetzten Aktivität in Form von Aerosolen vorliegt.

CONTAIN berechnet die Ausbreitung dieser Spaltprodukte nach dem gleichen mechanistischen Modell, wie es für den MAEROS-Code /7/ entwickelt wurde. Diesem Modell liegt eine Multigruppen-Multikomponenten-Betrachtung zugrunde. "Multigruppen-Betrachtung" bedeutet, daß die Partikelverteilung diskret behandelt wird und deshalb eine beliebige Form annehmen kann. "Multikomponenten-Betrachtung" besagt, daß jede Aerosolgruppe, also jede einzelne Partikel-Größenklasse, sich aus unterschiedlichen Materialkomponenten zusammensetzen kann. Im Einklang mit thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten berechnet das Modell die Wechselwirkung zwischen Aerosolen und atmosphärischer Luftfeuchte, sowohl Kondensations- als auch Verdampfungsvorgänge. Aerosolwachstum, also die Agglomeration oder auch Koagulation von Partikeln, wird auf drei verschiedene Arten berücksichtigt: durch Brownsche Molekularbewegung, Gravitation und Turbulenz. Darüberhinaus sind im Modell insgesamt vier Möglichkeiten der Aerosol-Ablagerung enthalten: Sedimentation, Diffusion, Diffusiophorese und Thermophorese. Entsprechend den vorliegenden Basisdaten von Siemens/KWU werden für die Modellierung des EPR-Störfalls sechs Aerosolquellen im Anlagenraum vereinbart. Da für alle Aerosole zusammen nur ein einheitlicher Dichtewert angegeben werden kann, wird dieser mit 3 000 kg m⁻³ festgelegt. Die Eingabe der Freisetzungswerte erfolgt über Zeit- und Massentabellen in Form von Stufenfunktionen.

4. Ergebnisse

4.1 Allgemeines

Die Benchmark-Rechnung wurde bis zur Problemzeit von 188 000 s (etwas über 52 Stunden) durchgeführt, wobei als CPU-Zeit eine knappe Stunde benötigt wurde. Die berechneten Aerosol-Verteilungen wurden tabellarisch an Siemens/KWU übermittelt und dort zum Vergleich zusammen mit den Ergebnissen der anderen Codes geplottet. Die erzeugten Bilder /8/ stellte Siemens/KWU freundlicherweise für die Dokumentation /3/ zur Verfügung. Eine Auswahl davon enthält dieser Bericht (Abbn.2-5). Der in den Diagrammen benutzte Begriff "mass fraction" ist dabei definiert als das Verhältnis der im betrachteten Raum befindlichen zu den bis zum jeweiligen Zeitpunkt insgesamt freigesetzten Aerosolmassen.

4.2 Aerosol-Verteilungen

Wie die dargestellten Kurven zeigen, beginnt die Freisetzung der Aerosole instantan zum Zeitpunkt 17 000 s in den Anlagenräumen, ersichtlich aus der vertikalen Geraden, die sich vom Massenanteil 10⁻⁸ bis 1.0 erstreckt (Abb.2a). Im Anschluß daran ergibt sich ein steiler Abfall auf Werte im Bereich zwischen 10⁻¹ und 5·10⁻³, d. h. ein großer Teil der freigesetzten Aerosole wird sofort abgelagert (Abb.2b) oder durch atmosphärische Konvektion in die Nachbarräume befördert. Im weiteren Verlauf zeigen die Kurven 12 Spitzen im Zeitraum bis etwa 92 000 s. Sie entsprechen der durch die Eingabe aufgeprägten Folge kurzzeitiger Aerosol-Freisetzungen mit sofort daran anschließendem Abbau durch Deposition und Transport. Die im Zeitraum nach 92 000 s auftretenden Freisetzungen liegen um mehrere Größenordnungen niedriger, was zu einer stetigen Abnahme der luftgetragenen Aerosole zunächst in den inneren Räumen, später auch in den äußeren Räumen führt.

Während die zeitlichen Verteilungskurven in Anlagenräumen, Ringraum und Kuppel sich der Form nach einander weitgehend ähneln, zeigt sich vom Ringspalt an (Abb.3) ein neues Verlaufsmuster, das die von den instantanen Freisetzungen herrührende große anfängliche Spitze gänzlich vermissen läßt und die anschließenden kleineren Rampen nur als schwache Oszillationen darstellt. Der Grund hierfür ist in der geringen Leckage des Containments zu suchen, die sich um 5 Größenordnungen von der Konvektion in den inneren Teilräumen unterscheidet. Die Folge sind relativ niedrige Volumenströme in die äußeren Teilräume und in die Umgebung, wodurch die dortigen Aerosol-Verteilungen gegenüber den inneren eine starke Dämpfung erfahren.

In der Umgebung treten freigesetzte Aerosole erst ab etwa 50 000 s auf, d. h. gegenüber den inneren Teilräumen um etwa 9 Stunden verzögert (Abbn.4,5). Dies hängt zusammen mit dem im Ringspalt anfangs herrschenden Unterdruck von 15 mbar, der bewirkt, daß bis zu besagtem Zeitpunkt die Volumenströme aus den Nachbarräumen in den Ringspalt hinein gerichtet sind. Auf diese Weise wird die Ausbreitung von Aerosolen in die Umgebung für die Zeitdauer von etwa 9 Stunden blockiert.

5. Vergleich und Diskussion

Wie die berechneten Kurvenverläufe zeigen, sind bereits in den Anlagenräumen, also dort, wo die Freisetzungen erfolgen, - und sogar schon kurz nach der ersten Freisetzung - deutliche Unterschiede zwischen den Ergebnissen der einzelnen Codes zu erkennen (Abb.2a). Diese Unterschiede treten auf, obwohl von der Thermohydraulik her durch Aufprägung der atmosphärischen Konvektion feste Randbedingungen für die Rechnungen vorgegeben wurden. FIPLOC liefert hier durchweg die niedrigsten luftgetragenen Aerosolmassen, die jedoch im Bereich zwischen 35 000 und 40 000 s auch von MELCOR erreicht werden. Die im Bereich der Kurvenspitzen bei NAUA bestehenden flacheren Rampen (bei etwa 62 000 s, 74 000 s und 86 000 s) sind auf eine zu klein gewählte Plotfrequenz zurückzuführen /6/. Abgesehen von diesen Abweichungen zeigt sich zwischen NAUA- und CONTAIN-Resultaten eine weitgehende Übereinstimmung, die insbesondere im oberen Zeitbereich deutlich hervortritt. Hier fallen die mit NAUA und CONTAIN ermittelten Kurven praktisch zusammen, während MELCOR allgemein höhere, FIPLOC niedrigere Werte liefert. Die von MELCOR berechnete Verteilung der luftgetragenen Aerosole zeigt im Containment-Inneren das gleiche Verlaufsmuster. Sie tendiert zunächst nach unten, deckt sich sogar kurzzeitig mit den minimalen FIPLOC-Werten, übersteigt aber bei etwa 60 000 s die anderen Kurven und erzielt so im daran anschließenden Zeitbereich den höchsten Massenanteil (Abb.2a). Im Ringspalt verläuft die Verteilung nach MELCOR anfangs etwas unterhalb, dann oberhalb der zusammenfallenden NAUA- und CONTAIN-Ergebnisse, liegt im ganzen Zeitbereich aber deutlich über der FIPLOC-Kurve (Abb.3). Die vergleichsweise hohe Konzentration luftgetragener Aerosole bewirkt natürlich eine entsprechende Austragungsrate in die Umgebung und damit zugleich eine höhere Einschätzung des radioaktiven Quellterms nach MELCOR (Abb.4).

Nach FIPLOC ergeben sich im Anlagenraum die niedrigsten luftgetragenen Aerosolmassen (Abb.2a). Dies ist möglicherweise im Zusammenhang zu sehen mit aufallend überhöhten Ablagerungen gleich zum Freisetzungsbeginn (Abb.2b). Die FIPLOC-Kurven für die weiter außen liegenden Räume liegen teilweise bis zu einer Größenordnung unterhalb der anderen Ergebnisse (Abb.3). Ähnlich verhält es sich mit den in die Umgebung ausgetragenen Aerosolmassen, wo FIPLOC mit Abstand die niedrigsten Werte erzielt (Abb.4).

Zwischenzeitlich wurde die FIPLOC-Eingabe von Siemens/KWU revidiert. Dabei wurde COLEFF, eine die Kollisionseffizienz für gravitationsbedingte und turbulente Koagulation betreffende Steuergröße auf den von GRS empfohlenen Wert COLEFF = -1 (Modell nach Pruppacher und Klett) abgeändert /6/. Die damit wiederholte FIPLOC-Rechnung liefert nun Werte, die wesentlich besser mit den anderen Ergebnissen übereinstimmen (Abb.5).

Die bemerkenswert gute Übereinstimmung zwischen NAUA und CONTAIN ist nicht nur bei den luftgetragenen, sondern auch bei den abgelagerten Aerosolen - und zwar für alle Räume des Containments sowie für die Umgebung zu beobachten. Dies ist um so überraschender, als die implementierten Aerosol-Algorithmen von verschiedenen Verfassern stammen und sich in einigen als wesentlich anzusehenden Punkten unterscheiden. Beispielsweise kann die Aerosol-Dichte bei NAUA /4/ für jede einzelne Freisetzung spezifiziert werden, während CONTAIN /1/ für alle auftretenden Aerosole nur einen gemeinsamen Wert zuläßt. So wurde die NAUA-Referenz-Rechnung mit schweren (4000 kgm⁻³) und leichten (2200 kgm⁻³) Aerosolen, die CONTAIN-Benchmark-Rechnung dagegen mit einem angenommenen mittleren Wert (3000 kgm⁻³) durchgeführt. Aus der Tatsache, daß beide Ergebnisse gut übereinstimmen, ist zu schließen, daß die Aerosol-Dichte zumindest beim vorliegenden Problem lediglich eine vernachlässigbare Rolle spielt. Diese Aussage wird von Siemens/KWU bestätigt, wo die MELCOR-Rechnung mit variierter Aerosol-Dichte wiederholt wurde, ohne daß ein signifikanter Einfluß auf die Ergebnisse festzustellen war /6/.

Die Benchmark-Rechnung wurde mit dem inzwischen freigegebenen, mit anspruchsvolleren physikalischen Modellen und genaueren Stoffwerten ausgestatteten und daher nicht voll kompatiblen CONTAIN 2.0 /9/ wiederholt. Obwohl eine Reihe von Anpassungen in der Code-Eingabe erforderlich war, wurden praktisch identische Ergebnisse erzielt.

6. Zusammenfassung

Um einen Überblick über die Leistungsfähigkeit verfügbarer Rechenprogramme zu erhalten, hatte Siemens/KWU einen Vergleich von Containment-Codes angeregt. Zu untersuchen war das Aerosolverhalten am Beispiel einer EPR-Störfallsequenz, die durch ein mittleres Leck im kalten Strang in die Anlagenräume eingeleitet wird. An dem Codevergleich beteiligte sich Siemens/KWU mit den Containment-Codes WAVCO/NAUA, FIPLOC und MELCOR, das Forschungszentrum Karlsruhe lieferte einen Beitrag mit CONTAIN.

Für die CONTAIN-Rechnung wurden die Eingabedaten des vorangehenden thermohydraulischen Benchmarks übernommen, überarbeitet und anhand der von Siemens/KWU bereitgestellten Basisdaten erweitert. Um thermohydraulische Einflüsse auf die zu ermittelnde Aerosolverteilung auszuschließen, wurden einer Empfehlung von Siemens/KWU entsprechend die zeitabhängigen atmosphärischen Volumenströme der Referenzrechnung als Randbedingung verwendet. Durchgeführt wurde die Rechnung mit der CONTAIN-Version 1.12 einschließlich Update C110W und einer FZK-internen Erweiterung auf einer Workstation IBM RISC 6000/370. Die benötigte CPU-Zeit für rund 52 Stunden Problemzeit betrug eine knappe Stunde. Wie sich als Ergebnis zeigte, stimmen die von NAUA und CONTAIN berechneten Aerosolverteilungen in allen Räumen des Containments überraschend gut überein, obwohl die zugrundeliegenden Modelle von verschiedenen Autoren stammen. Auch hat offenbar die bei CONTAIN eingesetzte mittlere Aerosoldichte keinen merklichen Einfluß auf das Resultat. Obwohl CONTAIN und MELCOR das gleiche Aerosolmodell benutzen, weichen ihre Ergebnisse teilweise deutlich voneinander ab. Verglichen mit den gut übereinstimmenden Werten von NAUA und CONTAIN liefert MELCOR eine höhere, FIPLOC eine niedrigere Austragung von Aerosolen in die Umgebung. Die Ergebnisse aller beteiligten Codes liegen jedoch fast durchweg innerhalb einer Größenordnung.

Die vergleichenden Untersuchungen werden mit den Programmen CONTAIN 2.0, MELCOR 1.8.3 und FIPLOC 3.0 für eine aktualisierte EPR-Störfallsequenz fortgesetzt.

Referenzen

- K. K. Murata, D. E. Carroll, K. E. Washington, F. Gelbard, G. D. Valdez, D. C. Williams, and K. D. Bergeron, User's Manual for CONTAIN 1.1, a Computer Code for Severe Nuclear Reactor Accident Containment Analysis, Revised for Revision 1.11, NUREG/CR-5026, SAND87-2309, R4, Sandia National Laboratories, Albuquergue, NM, Nov. 1989 (Revised July 1990).
- W. Scholtyssek, CONTAIN Analyse zum thermohydraulischen Verhalten im EPR Containment nach einem Kühlmittelverluststörfall, Int. Bericht (Juli 1995)
- W. Baumann, H. Hein, G. Henneges, H.-J. Peter, CONTAIN-Analyse zum Aerosolverhalten des EPR im Vergleich zu anderen Containment-Codes, Int. Bericht (Nov. 1996)
- H. Bunz, M. Koyro, W. Schöck, NAUA Mod 5 und NAUA Mod 5-M, Zwei Computerprogramme zur Berechnung des Aerosolverhaltens im Containmentsystem eines LWR nach einem Kernschmelzunfall, KfK-4278 (Sept. 1987), Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- K. E. Washington, K. K. Murata, R. G. Gido, F. Gelbard, N. A. Russell, S. C. Billups, D. E. Carroll, R. O. Griffith, D. L. Y. Louie, Reference Manual for the CONTAIN 1.1 Code for Containment Severe Accident Analysis, NUREG/CR-5715, SAND91-0835, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, July 1991.
- 6. H. Hein, Siemens Erlangen (KWU), pers. Mitteilung
- 7. F. Gelbard,

MAEROS Users Manual, NUREG/CR-1391, SAND80-0822, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1982.

8. H. Hein,

Benchmarking von Containment-Codes, Teil 2: Aerosolverhalten im Containment, KWU/NA-M/96/027, (in Vorber.)

 K. K. Murata, D. C. Williams, J. L. Tills, R. O. Griffith, R. G. Gido, E. L. Tadios, F. J. Davis, G. M. Martinez, and K. E. Washington, Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Analysis, Draft Report (January 1997), Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM.

1 : Ausbreitraum für Schmelze	Spreading Compartment
2: IRWST	IRWST
3 : Anlageräume	Equipment Rooms
4 : Ringraum	Annular Compartment
5 : Kuppel	Dome
6 : Ringspalt	Annulus
7 : Ringraumgebäude	Annular Building

Für die Referenzrechnung mit NAUA wurden die Räume 1 - 3 zusammengefaßt.



Bild 1: EPR- Reaktorgebäude mit den Rechenmodell-Nummern



Abb. 2a): Massenanteil der luftgetragenen Aerosole in den Anlagenräumen



Abb. 2b): Massenanteil der insgesamt abgelagerten Aerosole in den Anlagenräumen



Abb. 3: Massenanteil der luftgetragenen Aerosole im Ringspalt



Abb. 4: Massenanteil der in die Umgebung insgesamt freigesetzten Aerosole



Abb. 5: Massenanteil der in die Umgebung insgesamt freigesetzten Aerosole: FIPLOC-Nachrechnung mit modifiz. Eingabe

II. Assessment of the COMET corecatcher concept using the CONTAIN code (W. Baumann, INR; W. Scholtyssek, PSF)

The discussion of the COMET concept, in the wake of H. Alsmeyer's presentation given on January 18, 1996, is focusing on the question how much pressure would build up in the containment during the debris quenching process after a core melt-down accident /1/. In order to assess the severeness of the pressure increase, a series of analyses using the CONTAIN code /2/ have been performed.

The computational model employed to describe the geometry and the structures of the EPR containment (Fig.1) is based on the input data of a previous analytical activity conducted by W. Scholtyssek /3/, however with some adjustments made to the new problem. The principal modifications are:

- 1. The flow connection between the containment and the environmental cell was closed.
- 2. The volume of the crane hall was increased from 45800 to 65800 cbm in order to approach the free containment volume of the new EPR design which is 90000 cbm.
- 3. The decay heating power of the debris layer was eliminated from the spreading room. Instead, the evaporation process associated with the core-catcher quenching process was directly modeled by introducing an adequate steam source term.
- 4. The heat sink designed to cover excess heat, numerically emerging in the equipment room after the melt had already moved into the spreading compartment, was commented out. Accordingly, heat transfer in the spreading compartment between the debris and the pool layer was changed to zero.
- 5. The CONTAIN code accepts only one (averaged) density value, even for a possibly broad variety of aerosols. As in the present study water was considered to be the only aerosol existing in the containment, the density value was reduced from 3000 to 1000.

The total thermal energy to be quenched and converted into steam was assessed to an amount of $E_{total} = 5.9 \cdot 10^{11}$ Joule /4/, which seems to be a first and rough estimate. From another side this value was seen to represent an upper limit, and a more realistic value derived from MELCOR calculations was given as $E_{total} = 4.2 \cdot 10^{11}$ Joule /5/.

In order to stay on the safe side, the upper limit being $5.9 \cdot 10^{11}$ Joule was accepted for this CONTAIN calculation. Considering the steam temperature not to fall below 150° C, and the heat of evaporation to be $\Delta h = 2.65 \cdot 10^{6}$ J kg⁻¹, the water mass required to absorb the total thermal energy would turn out as $m_{Water} = 2.23 \cdot 10^{5}$ kg.

A realistic period of time to quench the melt was given as 1000 s or 16.7 min /4/. Because this estimated time of evaporation defines the steam flow-rate and hence the value of the source term, it may have an enormous impact on the occurring pressure peak during CONTAIN analyses. Therefore, a parameter study was performed using three values of evaporation times which are 5 min, 15 min, and 30 min. In order to examine the impact of the source term itself, an additional calculation was done at a reduced level of 80% of the initial amount of thermal energy.

As shown by the CONTAIN results, the expected peak pressure attains a maximum value of about 6.3 bar when a high thermal energy of 5.9 10¹¹ Joule and a short quenching time of 5 min. are assumed. The peak temperature which is located in the spreading room attains roughly 160°C (Fig.2). Increasing the quenching time to 15 or 30 min. diminishes the peak pressures to values between 6 and 5 bar, with the peak temperatures slightly reduced, however staying above 150°C (Figs. 3, 4).

Based on the more moderate - and more likely - thermal energy of 4.72·10¹¹ Joule and an assumed quenching time of 15 min., the peak pressure falls below 4.9 bar, whereas the peak temperature remains almost unaffected (Fig.5).

In order to assess the influence of hydrogen burning, the inherent hydrogen source term was increased by 50% to a total of 570 kg. At the same time, the default values governing the combustion process were changed to the conservative side: the mole fraction of com-

bustible for ignition reduced close to zero, and the mole fraction of steam plus carbon dioxide for inerting enlarged to 1.0. Assuming a thermal energy of 5.9·10¹¹ Joule and a quenching time of 15 min., the peak pressure turned out to reach 5.86 bar, meaning that hydrogen burning accounts for a pressure increase of less than 0.25 bar. Regarding the temperatures only a very slight increase is found (Fig.6).

To provide an overall view of the situation, the results obtained with the CONTAIN code have been summarized in Fig.7, depicting the calculated peak pressure as a function of the quenching time for the two assumed values of thermal energy of the melt, including the effect of hydrogen burning.

References:

- 1. M. Coudray, FRAMATOME, letter to G. Heusener, Febr. 21, 1996
- K. K. Murata et al., User's manual for CONTAIN 1.1, a computer code for severe nuclear reactor accident containment analysis (rev. 1.11), NUREG/CR-5026, SAND87-2309 (July 1990)
- W. Scholtyssek, CONTAIN Analyse zum thermohydraulischen Verhalten im EPR Containment nach einem Kühlmittelverluststörfall, Int. Bericht (Juli 1995)
- 4. H. Alsmeyer, note of March 05, 1996
- 5. Ph. Schmuck, Notiz v. 26. März 1996



- 1: Spreading room
- 2: IRWST
- 3: Equipment rooms
- 4: Annular room
- 5: Crane hall
- 6: Gap
- 7: Annular building

Fig.1: EPR Containment building, the computational model with numbered cells



Fig.2: Calculated pressure and atmospheric temperatures based on 5.9E11 Joule thermal energy and 5 min. quenching time.



Fig.3: Calculated pressure and atmospheric temperatures based on 5.9E11 Joule thermal energy and 15 min. quenching time.



Fig.4: Calculated pressure and atmospheric temperatures based on 5.9E11 Joule thermal energy and 30 min. quenching time.



based on 4.72E11 Joule thermal energy and 15 min. quenching time.



Fig.6: Burning of 570 kg hydrogen taken into account: Calculated pressure and atmospheric temperatures based on 5.9E11 Joule thermal energy and 15 min. quenching time.



Fig.7: Peak pressure during the quenching process as a function of the quenching time, with and without burning of hydrogen.

III. <u>Analysen von Kernschmelzunfällen im EPR mit MELCOR</u>(M. Deisinger, R. Frutos, P. Schmuck, G. Willerding, INR)

Abstract

EPR data received from Siemens were used to refine the input models for MELCOR accident calculations in order to describe more accurately the components of the primary and secondary circuit of the reactor system and the containment. Version 1.8.3 of MELCOR was applied for these accident simulations which concentrated on LOCA and Station Blackout (SBO) simulations. Some results are presented.

Im Jahr 1996 wurden weitere Unfallanalysen mit dem Rechenprogramm MEL-COR für den EPR durchgeführt. Es handelt sich um die folgenden Arbeitsschwerpunkte:

- Weiterentwicklung der Modellierung der Systemkomponenten für den EPR Primär/Sekundärkreis und für das Containment;
- Durchrechnung von wichtigen auslegungsüberschreitenden Störfällen mit vorläufigen Daten;
- Validierungsarbeiten fuer die durchgeführten Entwicklungen.

Im folgenden werden die durchgeführten Arbeiten detaillierter dargestellt:

Für das Primärsystem wurden die Darstellung des Druckhalters, der Dampferzeuger, der Pumpen und der Sicherheitseinspeisesysteme verbessert; in der Kerndarstellung wurden der korrekte Strahlungsaustausch, wichtige Candling Parameter, das Spaltproduktinventar und die Nachzerfallsleistung in verbesserter Form berücksichtigt; im Sekundärsystem wurden die Speisewasserversorgung, die Dampferzeuger und die Frischdampfleitungen samt Ventilen genauer modelliert; die Darstellung der Freisetzung und des Transports von Spaltprodukten wurde verbessert; und schließlich wurden die wichtigsten Containment-Komponenten in einer vorerst separatem Darstellung modelliert.

Mit vorläufigen EPR Daten wurden die folgenden Unfälle durchgerechnet:

- Kühlmittelverlustszenarien (LOCAs fuer kleine und mittlere Lecks);
- Ausfall von Netz, Notspeisung und Notstrom (SBO = Station Blackout).

Die Unfallverläufe wurden über längere Zeit verfolgt, im wesentlichen bis zum Versagen des RDB und kurz danach (beim EPR etwa 15000 -35000 Sekunden). Das thermohydraulische MELCOR Modell des EPR stellt einen Kompromiß zwischen Genauigkeit und akzeptabler Rechenzeit dar. Der EPR wird durch zwei Loops dargestellt, wobei drei Original-Loops zu einem lumped Loop zusammengefaßt werden. Das Core wird in drei Ringe aufgeteilt, wobei jeder Ring 11 axiale Zonen enthält ist. Das Containment wurde durch 6 Kontrollvolumina repräsentiert.

Im folgenden werden zunächst einige Ergebnisse für den SBO vorgestellt. Abbildung 1 zeigt den Druckverauf im Kern während eines SBO. Dieser beginnt mit dem totalen Stromausfall zum Zeitpunkt null. Der Druck fällt nach dem Reaktorscram stark ab. Selbst nach dem Auslaufen der Hauptkühlmittelpumpen verbleibt die Möglichkeit die erzeugte Nachwärme über die Dampferzeuger abzuführen, daher stabilisiert sich der Druck bei etwa 125 bar. Nach dem Ausdampfen der Dampferzeuger steigt der Druck stark an, und es kommt vorübergehend immer wieder zur Öffnung eines Druckhalterventils, sodaß der Druck etwa um den Wert 170 bar herum oszilliert. Erst nach Erreichen eines Temperaturkriteriums (923 K im Kern) werden alle Ventile am Druckhalter dauerhaft geöffnet und es kommt zur raschen und langfristigen Druckentlastung. Während dieses Druckabfalls kommt es zum Ansprechen der Akkumulatoren, wodurch kaltes Wasser über die kalten Stränge in den Kern transportiert wird, welches den Kern noch mehr als zwei Stunden kühlen kann.

In Abbildung 2 sind die Höhenstände des Wassers im RDB während der Unfallzeit dargestellt. Man kann in diesem Bild sehr gut das Ausdampfen des Wassers aus dem Kern verfolgen. Sobald sich kein Wasser mehr im Kernbereich befindet kommt es rasch zum Kernschmelzen. Die exotherme Reaktion Wasserdamf/Zirkaloy hat an dem letztendlichen Zusammenschmelzen des Kerns einen großen Anteil, da sie beträchtliche Wärme an das Kernmaterial abgibt. Das herabfallende heiße Material heizt zunächst die Kerntrageplatte auf, die bei etwa 32000 Sekunden versagt. Etwa 700 Sekunden später kommt es dann zum Versagen des RDB, die Druckdifferenz zwischen RDB und Containment beträgt zu diesem Zeitpunkt etwa 4 bar.

Mit dem zunächst separat erstellten EPR Containment-Modell wurde ein LOCA Benchmark-Problem gerechnet [1]. Es handelt sich hier um ein Leck im kalten Strang, bei einer Leckgröße von 200 cm². Der langfristige Druckaufbau und andere wichtige physikalische Variable im Containment stimmen recht gut mit den von CONTAIN berechneten Werten überein [1].

Im folgenden sei anhand von Beispielen erwähnt, wie Teilaspekte von MELCOR Rechnungen verifiziert wurden:

- Wasserstoffproduktion: Vergleich von MELCOR und REFLOX Rechnungen;
- Wirkungsweise der Druckentlastungsventile: Vergleich mit SCDAP/RELAP Rechnungen.

Interne Quellterme (an der Systemgrenze Primärsystem/Containment) für Dampf, Wasserstoff und Spaltprodukte wurden für die verschiedene Unfalltypen bestimmt. Folgende wichtige Parameter des Kernschmelzens wurden erprobt und der Einfluß auf die Quellterme studiert:

- Wärmeübergänge beim Kernschmelzen (Candling);
- Eutektische Gemischbildung;
- Größe und Eigenschaften der Debris von Kernmaterial.

Sehr wichtig ist eine stichhaltige Bewertung der berechneten Ergebnisse. Dieses Ziel ist zur Zeit schwierig zu erreichen, da andere Codes auch keine verifizierten Modelle haben (z.B. für die H₂ Produktion bei Oxidation von Debris oder für die Spaltproduktfreisetzung aus der Debris). Um dieses Defizit zu beheben sind Nachrechnungen von Experimenten (z.B. QUENCH und PHEBUS) geplant. die das Erarbeiten eines guten Verständnisses von einzelnen Phänomene ermöglichen.

Uber den Stand der Arbeiten wurde verschiedentlich auf projektinternen, externen und auch internationalen Tagungen berichtet [2]. Ein repräsentativer MELCOR Eingabe-Datensatz für den EPR (Umfang: etwa 4500 Eingabezeilen) wurde im Oktober 1996 an die Firma Siemens übergeben.

Ab Herbst 1996 wurden von Siemens eine große Menge neuer EPR Daten zur Verwendung in der Basic Design Phase verteilt. Mit diesen Daten wird ein neuer MELCOR Eingabedatensatz erarbeitet, der auch den Kern genauer modelliert. Mit diesem Satz sollen alle Fälle des Basic Design konsistent durchgerechnet werden.

Geplant ist zum einen die integrierte Behandlung des EPR Primär/Sekundärsystems und des Sicherheitsbehälters in guter Auflösung mit MELCOR. Die Bestimmung der Freisetzungsraten von Radionukliden in die Umgebung (externe Quellterme) soll damit durchgeführt werden.

Zum anderen sollen die internen Quellterme direkt an das Programm CON-TAIN übergeben werden, um damit ebenfalls die externen Quellterme zu bestimmen. Ein Vergleich der Ergebnisse von MELCOR und CONTAIN soll die Stärken und Schwächen der einzelnen Codes deutlicher machen.

Zur weiteren Qualifizierung der MELCOR Ergebnisse sind systematische Vergleiche mit SCDAP/RELAP Rechnungen geplant und ebenso die schon erwähnten Nachrechnungen von relevanten Experimenten.

Berichte:

- 1. W. Scholtyssek: CONTAIN Analyse zum thermohydraulischen Verhalten im EPR Containment nach einem Kühlmittelverluststörfall, Interner Bericht 1995
- 2. P. Schmuck: MELCOR Severe Accident Simulations for a Large, Innovative PWR (MCAP Annual Meeting, May 1-3, 1996)





Druckverlauf im Kern und im Containment während des Ablaufs eines Station Blackout im EPR



Abbildung 2 :

Höhenstände des Wassers im RDB während des Ablaufs eines Station Blackout im EPR

32.21.08 Untersuchungen zur Kernzerstörung

١.

In-Vessel Unfallabläufe

(W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, V.H. Sanchez-Espinoza, S. Smit,D. Struwe, IRS; Ch. Messainguiral, CEA; E. Elias, Technion Haifa)

Abstract

For in-vessel core meltdown analyses carried out by the SCDAP/RELAP5 code, a new detailed input deck was developed. Calculations were carried out for the "surge line rupture" scenario in order to compare the new and the old input deck. First test calculations for a small leak (50 cm²) have started. The relevant code versions SCDAP/ RELAP5 mod3.1 Rel. D and Rel. E were validated from CORA and Phebus tests and improved. A new reactor input deck was developed for ICARE2, and first calculations to compare it with SCDAP/RELAP5 were carried out. Furthermore, design calculations for the planned FZK quench test facility were done.

Zusammenfassung

Für die in-vessel Kernschmelzanalysen zum EPR mit SCDAP/RELAP5 wurden ein detaillierteres Inputdeck entwickelt und Rechnungen zum Vergleich mit dem alten Inputdeck für das "surge line rupture"- Szenario (Abriß der Druckhalterleitung) durchgeführt. Erste Testrechnungen zum kleinen Leck (50 cm²) wurden begonnen. Als Codeversionen wurden SCDAP/RELAP5 mod3.1 Rel. D und Rel. E verwendet. Beide Codeversionen wurden anhand von CORA- und Phebus-Tests validiert, die gefundenen Fehler wurden korrigiert. Code-Modellschwächen speziell in der späten In-vessel-Phase werden umgangen, indem Stand-alone Modelle zur Untersuchung der Pool-Struktur-Wechselwirkungen entwickelt werden. Für ICARE2 wurde ein Reaktor-Inputdeck erstellt, erste Vergleichsrechnungen zu SCDAP/RELAP5 wurden zur Optimierung durchgeführt. Daneben wurden für die projektierten QUENCH-Versuche Auslegungsrechnungen durchgeführt. Die Flut- bzw. Quenchmodelle in RELAP5 wurden anhand von Experimenten in der NEPTUN-Anlage (PSI) und der Einzelstab-Quenchanlage (FZK/IMF) getestet, verbessert und in SCDAP/RELAP5 eingebaut.

A. Unfallanalysen mit Codesystemen

(W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, S. Smit, D. Struwe, Ch. Messainguiral ^(CEA))

Zielsetzung:

Die Aktivitäten im IRS untergliedern sich im wesentlichen in 3 Teilgebiete:

- 1. Störfallanalysen mit SCDAP/RELAP5 und ICARE für den EPR
- 2. Modellierung der späten in-vessel Phase im EPR
- 3. Validierung der Codesysteme

A. 1 Störfallanalysen

Im IRS werden für Störfallanalysen das mechanistische Programm SCDAP/RELAP5 (S/R5) sowie - auf den Reaktorkern beschränkt - das französische Programm ICARE2 verwendet. Zu Beginn des Berichtszeitraumes wurde die Version S/R5 mod 3.1 Rel D verwendet. Ab Mitte des Jahres wurde auch die neue Version S/R5 Rel. E eingesetzt (s. Kap. I.3).

Ausgehend von dem früher entwickelten Input-Deck (epr594) für den "European Pressurized Water Reactor" EPR wurde unter Berücksichtigung der laufenden Entwicklungen im Basic-Design in Zusammenarbeit mit Siemens-KWU ein detaillierteres EPR-Modell (epr5A2) entwickelt, welches speziell in der späten Phase genauere Ergebnisse erwarten läßt. Zudem ist zur Berechnung der Temperaturentwicklung der Kerneinbauten eine realitätsnahe Modellierung dieser Komponenten notwendig.

Das EPR Modell beschreibt den Reaktorkern mittels fünf konzentrischen Ringen, die in radialer Richtung von drei konzentrischen Shrouds umgeben sind. Der innerste Shroud beschreibt den Heavy Reflektor bis zu dessen Mitte, der mittlere Shroud den Rest des Reflektors sowie den Kernbehälter. Beide sind durch den Bypass voneinander getrennt. Auf der Außenseite des Downcomers wird die RDB-Wand als dritter Shroud modelliert. Die Brennstäbe und die Shrouds sind durch Strahlungsaustausch miteinander gekoppelt. Das obere Plenum sowie der obere Deckelraum sind durch drei Ringe dargestellt (s. Abb. 1), die durch drei repräsentative Steuerstabführungsrohre miteinander verbunden sind. Die Kern- und Plenumseinbauten wurden durch RELAP heat structures modelliert. Der Primärkreis wurde von vier symmetrischen Loops auf 2 reduziert, einem repräsentativen Loop (3xx) und einem Loop (4xx), der die restlichen drei Kreise simuliert.

In Abstimmung mit Siemens wurden folgende drei Szenarien definiert: großes Leck (Abriß der Druckhalterleitung, 962 cm²), kleines Leck 50 cm² und der Ausfall der Eigenbedarfsversorgung ("station black out"). Die bisher untersuchten Fälle, das 5 cm² Leck sowie das 180 cm²-Leck wurden dokumentiert /1/, /2/.

Mit dem EPR Modell epr5A2 wurden Rechnungen zu dem vorgegebenen Fall: "Abriß der Druckhalterleitung" (surge line rupture) durchgeführt, die im folgenden kurz beschrieben werden. Zum Vergleich werden auch die Ergebnisse aus Rechnungen mit

dem alten Modell (epr594) hinzugezogen. Die Rechnungen wurden unter DCE auf jeweils einem Knoten der IBM-SP2 an der Universität Karlsruhe durchgeführt.

A.1.1 "Surge line rupture"

Das Inputdeck für das "surge line rupture" Szenario ersetzt die bisher zu Validierung eingesetzten Modellierungen für das 10%-Leck und das 180cm²-Leck. Aufgrund des großen Leckquerschnittes im heißen Strang wird ein Großteil des Primärkreisinventars ausgetragen, Blowdown und Wiederauffüllphase werden rasch durchlaufen.

Nach ca. 50 s ist der Druck auf 4.5 MPa abgefallen (s. Abb. 2b), der Kern zur Hälfte entleert (s. Abb. 2c). Jetzt speisen die Akkumulatoren wie in Abb. 2d ersichtlich ein. Im Zuge der Designoptimierung wurden die Reibbeiwerte ζ entsprechend der Siemens-KWU-Vorgaben reduziert, wodurch die Einspeiserate (s. Abb. 2d gestrichelt) gegenüber dem Inputdeck epr594 (s. Abb. 2d gepunktet) ansteigt und die Einspeisedauer abnimmt. Nach ca. 120 s ist der Primärkreisdruck (s. Abb. 2b) auf 1 MPa gefallen und der wiedergeflutete Kern dampft bei Sättigungstemperatur aus. Nach ca. 300 s wird keine Wärme mehr an die Sekundärseite abgegeben (s. Abb. 2a)

Nach 800 s beginnen die Brennstäbe sich aufzuheizen (s. Abb. 3a, -T-). Die Ausdampfrate ist bei der epr5A2-Version deutlich größer als beim alten Modell (epr594), was auf die Speicherwärme des heavy reflectors und der massiven Kerntragestruktur zurückzuführen ist (s. Abb 3c). Daher beginnt bei der epr5A2 Version der Temperaturanstieg ca. 200 s und der Beginn der Oxidation ca. 250 s früher. Zu Beginn der Oxidation ist der Wasserstand im Kern bei beiden Modellierungen auf ca. 0.5m abgesunken. Bis ca. 1400 s ist der Temperaturanstieg weitgehend durch die Nachzerfallsleistung bestimmt, danach durch die Zirkonium-Wasser-Reaktion. Die maximale Wasserstoffproduktionsrate ist mit ca. 0,9 kg/s (epr5A2: 1550s, epr594: 1800s) in etwa gleich, da das gleiche Oxidations- bzw. Limitierungsmodell verwendet wurde (s. Abb. 3d). Bis 2000 s werden ca. 170 kg Wasserstoff erzeugt.

Die Temperaturentwicklung im Kern (s. Abb. 4 a-f) zeigt in radialer Richtung aufgrund des gewählten radialen Leitungsprofils ("begin of cycle", BOC) keine ausgeprägte radiale Abhängigkeit, lediglich der äußerste Ring (s. Abb. 4e) zeigt aufgrund des relativ kalten heavy reflectors (s. Abb. 4g) eine verzögerte Aufheizung, die in der Rechnung epr594 nicht beobachtet wird. Der Kernbehälter bleibt deutlich unter 1000 K, nach 2000 s nimmt jedoch die Aufheizrate zu (s. Abb. 4i). In dieser Phase der Kernschmelz-ausbreitung sind die Hüllrohre in 6 der 14 axialen Zonen stärker oxidiert (s. Abb. 4h und Abb. 4k).

Nach ca. 1550 s versagen die Absorberstäbe in den inneren drei Ringen, 50 s später der Absorberstab im 4. Ring in der oberen Hälfte des aktiven Kerns. Nach 2000s hat die Versagenshöhe ca. 1.8 m erreicht.

Die Poolbildung setzt beim Modellierung ohne heavy reflector nach ca. 2700 s in ca. 3.2 m Höhe ein. Hierbei bildet sich in allen fünf Ringen etwa gleichzeitig ein Pool mit einer Pooltemperatur von 2879 K und einer Liquidustemperatur von 2873 K.

Bei Berücksichtigung des heavy reflectors wird schon nach ca. 2070 s in 3.2 m Höhe in den beiden inneren Ringen eine Poolbildung berechnet, wobei hier bei gleicher Liquidustemperatur die Pooltemperatur 2863 K beträgt. Das Poolmodell wird noch weiterentwickelt, wobei die Beschreibung des Übergang von einem Debris-Bett zu einem Schmelzepool noch zu verbessern ist.

Verbesserungen:

Aufgrund der Erfahrungen mit dem o. g. Szenario wird das Inputdeck geringfügig modifiziert: Da bis auf die stationäre Rechnung für den steady-state keine Zwangskonvektion im Primärkreis vorliegt, kann der Bypass entfallen, da hier keine Naturkonvektion auftritt. Das vereinfacht die Modellierung des Reflektors, der jetzt durch einen einzigen Shroud beschrieben werden kann. Durch diese wegfallende SCDAP-Komponente sowie die damit verbundene Strahlungsberechnung kann nun ohne Zunahme der Rechenzeit ein Absorberstab im äußersten Ring modelliert werden. Testrechnungen sind für Februar 1997 vorgesehen, sobald die Korrektur des Absorberstabmodells durchgeführt ist.

Dieses Inputdeck wird auch zu Vergleichsrechnungen mit ICARE2 /3/ herangezogen. Ein ICARE-EPR-Inputdecks ist in Arbeit.

A.1.2 50 cm² Leck

Hierzu wurden erste Rechnungen durchgeführt. Die ersten Ergebnisse zeigen, daß durch die aktivierte sekundärseitige Notbespeisung der Dampferzeuger für lange Zeit eine ausreichende Nachwärmeabfuhr gewährleistet ist und die Kernfreilegung erst stattfindet, nachdem die Naturkonvektion aufgrund des Druckabfalles nicht mehr genügend Wärme an die Sekundärseite abgeben kann. Daher sind lange Rechenzeiten zu erwarten, so daß erst die Prüfung des Inputdecks anhand des "surge line rupture" Szenarios abgewartet wird.

Verbesserung:

Nach Input- und Codeüberprüfung werden die Rechnungen im Januar 97 fortgesetzt. Da die Nachzerfallsleistung nach ca. 2 h sehr langsam abfällt, wird untersucht, ob das 50 cm² Leck auch ohne die Dampferzeuger-Notbespeisung (EFWS) gerechnet werden kann, wodurch sich die Rechenzeiten verkürzen würden.

A.1.3 "Station black-out"

Das Inputdeck wurde erstellt, Rechnungen werden begonnen, wenn sichergestellt ist, daß das Inputdeck weitgehend fehlerfrei ist (voraussichtlich im 2. Quartal 1997). Die primärseitige Druckentlastung wurde von einem Temperaturkriterium auf ein Wasserstandskriterium umgestellt. Die Druckentlastungsventile bleiben offen.

Weitere Aktivitäten:

Eine zusammenfassende Dokumentation der Rechnungen mit dem epr594 Inputdeck zu den untersuchten Störfallszenarien ist in Arbeit /1/.

A. 2 Modellierung der späten in-vessel Phase im EPR

Die Modelltiefe des mechanistischen Codesystems S/R5 nimmt mit zunehmender Komplexität des Unfallablaufes in der späten Phase ab. S/R5 berechnet die Entstehung, Massenzusammensetzung, räumliche Ausdehnung und Enthalpie des Schmelzepools, nicht jedoch die thermische und mechanische Wechselwirkung des Pools vor Krustenversagen oder der Schmelze nach Krustenversagen mit den radialen und axialen kernbegrenzenden Strukturen (Heavy Reflector,Kernmantel s. Abb5 oben, bzw. untere Kerntrageplatte, s. Abb. 5 unten). Diese Wechselwirkung ist aber von großer Bedeutung, da sie den Zeitpunkt und den Verlagerungsmodus der Kernschmelze in das untere Reaktorplenum und damit Ausmaß und Auswirkungen einer möglichen In-Vessel-Dampfexplosion beeinflussen.

Um diese Lücke zu schliessen, wurde die Entwicklung von "stand-alone"- Rechenmodellen begonnen: Modelle zur Berechnung der transienten Temperaturverteilungen im Heavy Reflector (+Kernmantel) und in der unteren Kerntrageplatte unter Berücksichtigung des Aufschmelzens dieser Strukturen bei thermischer Wechselwirkung mit dem Schmelzepool (Wärmestrahlung, Kontaktwärmeübertragung). Dabei wird zunächst unterschieden zwischen:

- 1. LOWCOR1: Modellierung der thermo-mechanischen Wechselwirkung des Pools und seiner Kruste mit den angrenzenden Strukturen (ohne Schmelze-Struktur-Wechselwirkung bei Krustenversagen) und
- 2. LOWCOR2: Modellierung der zusätzlichen Wechselwirkung der Schmelze mit den radialen / axialen Strukturen nach Krustenversagen.

Am Beispiel eines weit nach unten verlagerten Schmelzepools, der über poröse Reststrukturen der Brennelemente mit der unteren Kerntrageplatte sowie seitlich u.U. mit dem Heavy Reflector in thermischem Kontakt ist, wird in Abb. 5 (unten) die Ausgangssituation für die Modellierung mit LOWCOR1/2 dargestellt.

S/R5-Rechnungen für den EPR zeigen darüber hinaus, daß die radiale Poolausbreitung schneller voranschreiten kann als die axiale, so daß der Schmelzepool bereits in einer frühen Phase der Poolausbreitung den Heavy Reflektor / Kernmantel erreicht. Die thermische Wechselwirkung kann in diesem Fall zu einem radialen Poolversagen mit seitlicher Schmelzeverlagerung ins untere Plenum führen; die dafür zu betrachtenden geometrischen Verhältnisse sind in Abb. 5 (oben) dargestellt. Aufgabe ist es, diese Szenarien mit geeigneten Modellen zu untersuchen.

Schwerpunkt der bisherigen Arbeiten ist die Untersuchung der Temperaturentwicklung der unteren Kerntrageplatte des EPR bei Wämeaustausch über Strahlung bzw. Kontaktwärmeübergang mit der Schmelzepoolkruste und Wärmestrahlung an das Restwasser in das untere Plenum. Detailfragen dabei sind:

 Wie erfolgt die Temperaturentwicklung in der Kerntrageplatte (a) wenn die dabei aufgeschmolzene Stahlmasse nicht ablaufen kann, und (b) wenn die Stahlschmelze instantan verlagert wird;

- 2. Wie ist die lokale Temperaturentwicklung der Kruste am oberen Rand einer Plattenbohrung (Krustenstabilität);
- 3. Wie verhalten sich metallische Ablagerungen in den Bohrungen (Verstopfungen durch frühe Verlagerungen) infolge der Wärmestrahlung von oben.

Als erstes Ergebnis dieser Rechnungen mit einem eindimensionalen Aufheizmodell für die Trageplatte wird die zeitliche Entwicklung der Liquidustemperatur von oben nach unten in Abb. 6 dargestellt: Bei unterstelltem Nichtabfliessen der Stahlschmelze, wird nach Aufschmelzen von 25 % der Trageplatte (Reststärke ca. 0.3 m) ein quasistationärer Zustand erreicht (untere Kurve: Temperatur am oberen Plattenrand 2000 K, Wassertemperatur im unteren Plenum 400 K). Hierbei wurde jedoch ein möglicher konvektiver Wärmetransport in der Stahlschmelze nicht berücksichtigt. Bei der oberen Kurve wurde eine instantane Schmelzeverlagerung bei gleichbleibender thermischer Belastung von oben angenommen. Die Kerntrageplatte wird jetzt in weniger als 1000 s durchgeschmolzen.

Diese ersten Ergebnisse zeigen, daß eine genaue Modellierung notwendig ist, um belastbare Angaben für den Schmelzequellterm in das untere Plenum treffen zu können. Die Arbeiten werden fortgesetzt, ein zweidimensionales Modell für die Untersuchung der thermischen Belastungen der Core-Randstrukturen befindet sich in der Entwicklung.

A.3 Verbesserung von SCDAP/RELAP5

Mitte des Berichtszeitraumes wurde uns von INEL eine neue Version S/R5 Rel. E zur Verfügung gestellt, die neben dem angekündigten DEBRIS-Oxidationsmodell auch ein detaillierteres Absorberstabmodell enthält. In diese Version wurden die IRS-Erweiterungen für die CORA und die QUENCH Anlage und Fehlerkorrekturen implementiert und INEL zwecks Integration in die nächste Version (Rel. F) zur Verfügung gestellt.

A.3.1 Restartfähigkeit

Im Rahmen der Verbesserung der Anwendungsmöglichkeiten von S/R5 wurde die Restartfähigkeit des Codesystems verbessert. Nach einer Code-Erweiterung können nun Parameterstudien auch in den späten Phasen eines in-vessel Kernschmelzunfalles durchgefürt werden, ohne daß die gesamte Rechnung wiederholt werden muß. Die Erweiterung gibt den Restart jedoch erst dann frei, wenn die betroffenen Modelle noch nicht aktiviert wurden. In der derzeitigen Version können die Versagenskriterien und die Oxidationsparameter verändert werden.

A.3.2 Absorberstab

Fehler im Versagensmodell des Absorberstabes machten eine Rechnung mit S/R5 Rel.E über den Versagenszeitpunkt hinaus zunächst unmöglich, da die Temperaturen einer falsche Brennstabkomponente verwendet wurden. Nach Korrektur dieses Zuordnungsfehlers im Bündelkonfigurationsteil von S/R5 und Einführung einer verallgemei-
nerten Zuordnungslogik, die sich nun an den Fluidkanälen von Absorber- und Brennstab orientiert, wurde auch eine größere Freiheit in der Inputgestaltung möglich.

A.3.3 Oxidation

Das Oxidationsmodell erlaubt auch die Oxidation von verlagerter Schmelze und von erstarrter Schmelze (Cohesive Debris). Hüllrohrteile, die nur zum Teil durch erstarrte Schmelze bedeckt sind, können nun weiter oxidieren. Korrigiert wurde auch die Limitierung der Sauerstoffaufnahme durch Diffusion durch eine Inertgasschicht. Die Werte im Code waren um einen Faktor 18 zu klein.

Vorgesehen ist auch die Berücksichtigung neuerer Diffusionsdaten. Die dem Programm zugrunde liegenden Korrelationen werden an die neu vorgeschlagenen Werten angepaßt (1. Quartal 97).

A.3.4 Materialverlagerung

Wichtigste Verbesserung des Verlagerungsmodells ist die Verlagerung in Strähnen, d.h. die Hüllrohroberfläche wird nicht komplett benetzt - es bleiben, wie in den Experimenten beobachtet, Hüllrohroberflächen frei, die weiter oxidiert werden können. Damit ändert sich auch das Verlagerungsverhalten der Schmelze und die Debrisbettbildung. Die Auswirkungen auf den Ablauf der Kernzerstörungen wurden in den Validierungsrechnungen untersucht /4/.

A.4 Validierungsrechnungen

Die aktuelle, korrigierte Code Version (Rel. E) wurde anhand von Rechnungen zu CORA-7 und CORA-13 getestet. Die entsprechenden Rechnungen zu Phebus FPT0 und FPT1 sind noch nicht abgeschlossen. Mit den Verbesserungen des Oxidationsmodells wurden Rechnungen zu CORA-7 und CORA-13 durchgeführt.

A.4.1 CORA-13

Die Auswirkungen des neuen Oxidationsmodells sind sehr gut anhand von Wasserstoffproduktion und Hüllrohrtemperaturen zu erkennen (s. Abb. 7). Während in der alten Version (Rel.D) ca. 50 g Wasserstoff produziert wurde (Kurve 5 und 6), erreicht man mit der neuen Code Version (Rel.E) ca. 140 g., ohne Limitierung der Hüllrohroxidation (limit-off, Kurve 3). Damit wurde der im Experiment gemessenen Wert von 145 g unter Berücksichtigung der experimentellen Genauigkeit erreicht. Wird hingegen angenommen, daß die Oxydation durch Diffusion von Sauerstoff limitiert wird, so werden nur ca. 120 g vor Beginn der Quenchphase produziert (limit-on, Kurve 1), dieser Wert liegt jedoch auch noch knapp im Bereich der experimentelle Unsicherheiten. Die Kurven 2 und 4 zeigen die Ergebnisse der unkorrigierten Version von Rel.E.

Beide Ergebnisse deuten darauf hin, daß, wie im stationären Fall bekannt und gemessen, auch bei transienten Oxidationsprozessen der Sauerstoffdiffusionsprozess nicht limitierend wirkt. Daher werden die Reaktorrechnungen in 1997 ohne Limitierung durchgeführt werden. Die Validierung der Modelle für die Quenchphase wird in Kapitel B.2 behandelt.

A.4.2 CORA-7

Mit der Version Et. konnten die Elektrodenzone des CORA Heizstabes in voller Länge modelliert werden. Die ersten Temperaturergebnisse aus S/R5 zeigen keine ausgeprägten Unterschiede zwischen den beiden Optionen für die Limitierung der Oxidationsrate wie in CORA-13 (s. Abb. 8). Die Abweichungen in 0.15m Höhe sind durch die turbulente Queranströmung des Stabbündels erklärbar, die in 0.55m sind derzeit nicht verstanden. In der oberen Elektrodenzone sind die radialen Wärmeverluste durch Strahlung und Konvektion etwas überschätzt worden. Eine Bewertung der Codeversion Rel.E anhand der beiden out-of-pile Experiment wird zur Zeit durchgeführt.

A.4.3 Phebus FPT0

Die Nachrechnungen des Experiments Phebus FPT0 mit SCDAP/RELAP5 /5/ sind im Rahmen einer umfangreichen Parameterstudie fortgesetzt worden, ein FZK-Bericht darüber wird im Februar 1997 erscheinen /4/. Seitdem die neue korrigierte Version S/R5 mod3.1 Rel.E zur Verfügung steht, sind damit erste Rechnungen für FPT0 durchgeführt worden. Vorläufige Ergebnisse zeigen insbesondere eine Verbesserung der Genauigkeit in der Berechnung der erzeugten Wasserstoffmasse, die auf das neue Debris-Oxidationsmodell zurückzuführen ist (s. Abb. 9).

Abb. 9 a-d zeigt einen Vergleich gemessener und mit S/R5 Rel.E berechneter Temperaturverläufe in verscheidenen Bündelhöhen, Abb. 9 e die zeitlichen Verläufe der berechneten nuklearen Leistung und der Oxidationswärme im Bündel und Abb. 9 f die kumulative Wasserstoffmassen. Eine detaillierte Diskussion der neuen Rechenergebnisse im Vergleich mit denen der Version S/R5 Rel.D wird in /4/ vorgenommen.

A.4.4 Phebus FPT1

Entsprechende Rechnungen für FPT1 nach Durchführung des Experiments im Juli 1996 sind ebenfalls weitergeführt worden, ein Vergleich mit den experimentellen Daten war noch nicht möglich. Neben S/R5 wird hier auch ICARE2 mod 2 eingesetzt werden

B. Quenchversuche

(Prof. Elias¹, V.H. Sanchez-Espinoza, Ch. Homann, W. Hering, D. Struwe)

Zielsetzung

Die Vorbereitung der Quenchversuche wird unterteilt in Auslegungsrechnungen und Validierung der verfügbaren Reflood- und Quenchmodelle in RELAP5 und S/R5.

B.1 Auslegungsrechnungen

In der geplanten QUENCH-Anlage im FZK/IMF sollen die physikalischen und chemischen Vorgänge bei einer Abschreckung des überhitzten Bündels mit Wasser oder der schnellen Abkühlung durch Dampf untersucht werden.

Im IRS werden diese Versuche durch Rechnungen, vor allem mit S/R5, analytisch begleitet. In einer ersten Phase ("pre-design") waren Fragen zur Auslegung und Optimierung der Teststrecke einschliesslich der radialen Wärmeabfuhr zu klären. Einerseits sollen vorgegebene Temperaturgrenzwerte vor dem Quenchen nicht überschritten werden, um ein vorzeitiges Versagen von Komponenten zu vermeiden. Andererseits soll eine Kondensation des Dampfes vermieden werden, um eine Verfälschung der Versuchsabläufe durch Kondensat in der Teststrecke auszuschließen. Als Obergrenzen sind 2000 K für die Brennstäbe, 900 K für den Kühlmantel und 320 K für das Containment festgelegt.

Die geplante QUENCH-Anlage wird in axialer Richtung mit den beheizten und unbeheizten Teilen der Teststrecke betrachtet. In radialer Richtung wird die gesamte Anlage einschliesslich des Containments modelliert, da die einzige verlässliche Randbedingung für die radiale Wärmeabfuhr die Umgebungstemperatur im Labor ist. Aus den ersten Erfahrungen wird das Bündel jetzt nur mit einem Kühlkanal dargestellt. Einzelheiten der Modellierung wurden dem jeweiligen Stand der Planung der Anlage angepaßt (s. Abb. 10) /6/.

Nach den ersten Rechnungen kann der Grenzwert für die Stabtemperaturen nicht eingehalten werden, wenn die Teststrecke nicht aussen durch einen Kühlkreislauf mit Zwangskonvektion gekühlt wird. Als Kühlmittel ist Argon vorgesehen, die Kühlung ist in Gegenstromrichtung, um das axiale Temperaturprofil im Bündel möglichst flach zu halten. Die Rechnungen zeigen weiter, daßdie Isolation des Bündels zwischen der Teststrecke und der Argonkühlung im oberen unbeheizten Teil des Bündels zu Stabtemperaturen oberhalb des Schmelzpunktes des Elektrodenmaterials führen kann, so daß in diesem Teil des Bündels keine Isolation des Bündels in Betracht gezogen werden sollte.

Für eine solche Konfiguration sind die berechneten Oxidschichtdicken für eine Voroxidationszeit von 30 Minuten deutlich geringer als die angestrebten 0,3 mm. Eine Verlängerung der Voroxidationszeit führt zu Temperaturen oberhalb der genannten Sicher-

¹ Gastwissenschaftler Technion HAIFA, Israel

heitsgrenzen. Eine deutliche Reduktion der Massendurchsätze, vor allem des Dampfdurchsatzes, kann zu Dampfmangel ("steam starvation") im oberen Bereich des Bündels führen.

Der Shroud muß im Bereich der oberen unbeheizten Zone des Bündels mit Wasser statt, wie bisher vorgesehen, mit Argon gekühlt werden, damit die Shroudtemperatur unterhalb von zulässigen Grenzwerten bleiben. Abbildung 10 zeigt die Modellierung der geplanten Anlage für eine solche Konfiguration. Abbildung 11 zeigt die axialen Profile von Kühlmittel- und Strukturtemperaturen (Abb 11 a) und die erreichten Oxidschichtdikken vor Beginn des Quenchens (s. Abb. 11 b). Alle Grenzwerte für Strukturtemperaturen werden nach der Rechnung eingehalten. Bei einem angenommenen Durchfluss von 100 g/s im Wasserkreislauf ist die Aufheizung des Wassers vernachlässigbar. Als Folge dieses Wasserkreislaufs bleibt das Argon deutlich kälter als bei den früheren Rechnungen. Die Kühlung im Bündel wird dadurch verbessert, und es können höhere Temperaturen im Bündel erreicht werden, ohne daß es zu einer Temperatureskalation durch heftige Oxidation der Hüllrohre kommt.

Die gewünschte maximale Dicke der Oxidschicht auf den Stäben von 0,3 mm wird nach etwa einer Stunde Voroxidation erreicht. Die axialen Profile der Oxidationschichtdicken sind als Folge des flachen radialen Temperaturprofils im Bündel bei allen Komponenten ähnlich. Rechnungen zum Quenchen des heißen Bündels mit Wasser waren wegen des erforderlichen kleinen Zeitschrittes sehr aufwendig. Erste Ergebnisse zum schnellen Abkühlen mit Wasserdampf liegen vor. Eine Temperaturerhöhung am oberen Ende des Bündels durch die zusätzliche Wasserstoffproduktion bei der schnellen Abkühlung wurde jedoch bisher nicht berechnet.

Bei der Durchführung der Experimente wird es erforderlich sein, die elektrische Leistung für das Bündel während der Versuche kontrolliert zu variieren, um eine Temperatureskalation zu vermeiden. Wie bei den CORA-Experimenten ist das ein kritischer Punkt, da die lokale Einkopplung der elektrischen Leistung mit der Temperatur steigt und die Reaktionsrate mit zunehmender Temperatur ebenfalls steigt.

Die Rechnungen werden mit Untersuchungen zur Optimierung der Versuchsdurchführung fortgesetzt.

B.2 Validierung der Reflood- und Quenchmodelle

Das Wärmeübertragungsmodell des Programms RELAP5/MOD3.1 (R5M3) wurde ausführlich überprüft und bewertet. Dabei hat sich herausgestellt, daß die bisherige Modellierung des Übergangssiedens einen wesentlichen Mangel dieser Programm-Version ist. Das bisherige Modell des Übergangssiedens unterschätzt die Wärmeübertragungsrate in die Flüssigkeit. Da der Beitrag der Flussigkeitsverdampfung den grössten Anteil des gesamten Wärmeübergangskoeffizients im Übergangssieden unter Bedingungen geringen Dampfgehalts darstellt, wird die Quenchtemperatur und -rate in den meisten Fällen unterschätzt, was für LOCA- und Kernschmelzunfallbedingungen relevant ist.

Es wurde daher ein neues Modell für das Übergangssieden entwickelt, getestet und in der Programmversion R5M3 implementiert. Das Modell erweitert, analog zu der ur-

sprünglich von Chen vorgeschlagenen Formulierung /7/, die phänomenologische Beschreibung, so daß nur von R5M3 berechnete, lokale Zustandsparameter (Wand- und Fluidtemperatur, Druck, Void, Massenstrom und statischer Dampfgehalt) benutzt werden. Die bisher benutzten Parameter wie Quenchfrontposition, kritischer Wärmestrom, minimale Filmsiedetemperatur, welche in Experimenten nur schwer zu ermitteln sind, werden nicht mehr benötigt.

Eine Vielzahl von Einzelstab- und Bündelversuchen wurden mit der modifizierten Programmversion R5M3 untersucht. Die dabei erzielten Ergebnisse wurden mit denen der Originalversion und mit den experimentell ermittelten Daten verglichen. Zahlreiche Variable wie Wandtemperatur, Flüssigkeits- und Dampfgeschwindigkeit und Dampfgehalt wurden analysiert zur Bewertung des Rechenprogramms bei der Simulation von transienten Verdampfungs- und Flutsituationen. In "stand-alone"-Versionen wurde das ursprüngliche und das modifizierte Übergangssieden-Modell an einer breiten experimentellen Daten-Basis für die stationäre Post-Dryout Wärmeübertragung getestet. In allen untersuchten Fällen hat sich gezeigt, daß die Einführung des neuen Modells die Übereinstimmung der berechneten mit den gemessenen Daten erheblich verbessert. Darüber hinaus sind die berechneten Temperaturverläufe realisticher und sie geben den physikalische Sachverhalt besser wieder als die der ursprünglichen Code-Version.

Einige typische Ergebnisse der "stand-alone" - Rechnungen mit dem bisherigen und modifizierten Modell sind in Abb. 12 gegen die gemessenen, stationären Daten des gesamten Wärmestromflusses aufgetragen. Die Daten umfassen mehr als 360 Meßpunkte in einem großen Parameterbereich (Druck bis 7 MPa und Massenstrom bis 5000 kg/m²s). Abbildung 12 oben, zeigt, daß das ursprüngliche Modell vom R5M3 die meisten experimentellen Daten unterschätzt, in einigen Fällen um mehr als eine Größenordnung. Lediglich die Daten nach dem kritischen Wärmestrom und mit hohem Dampfgehalt, wo der Wärmestrom vorwiegend durch die Konvektion zur Dampfphase bestimmt wird, werden relativ gut vom bisherigen Modell ermittelt. Eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Daten zeigen die mit dem neuen Modell berechneten Wärmeströme, Abb.12 unten. Mehr als 90 Prozent der ermittelten Werte liegen innerhalb von ca. 40 % der Meßwerte. Ein detaillierter Bericht wird zur Zeit für das CAMP-Programm vorbereitet.

Als Beispiel für die Leistungsfähigkeit werden die Ergebnisse der berechneten und gemessenen Temperaturen sowohl des FZK Einzelstab-Quenchtests T16106 (s. Abb. 13 oben) und des PSI Flut-Bündeltests NEPTUN-5036 (s. Abb 13 unten) mit niedriger Einspeiserate dargestellt. Im Einzelstabversuch wird ein kurzer, mit ZrO₂ Pellets gefüllter Zirkaloy-Hüllrohrabschnitt mit Dampf oder Wasser gequencht.

Die experimentell gemessenen Temperaturen sind als Kreise dargestellt, die der bisherigen R5M3-Version als gestrichelte Linien und die Ergebnisse der modifizierten Version als durchgehende Linien dargestellt. In Abbildung 13 oben ist die Temperatur im Spalt zwischen Hüllrohr und Pellet in der Höhe von 0.075 m dargestellt. Für die modifizierte Version zeigt sich während der ganzen Transiente eine sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Temperaturen. R5M3 berechnet hingegen eine zu niedrige Quench-Temperatur, wodurch auch die Temperatur im Spalt während des Übergangssiedens überschätzt wird. Die Ergebnisse des Fluttests NEPTUN des PSI sind in der Abb. 13 unten dargestellt. Bei diesem Versuch wurde eine elektrische Heizleistung, die der Nachzerfallsleistung entspricht, während der ganzen Flutphase aufgeprägt. Daher steigt die Temperatur anfänglich bis ein Wendepunkt erreicht wird, wenn der konvektive Wärmeverlust die Heizleistung übersteigt. Die Temperaturen sinken allmählich, bis das Hüllrohr gequenched wird. Die Ergebnisse der modifizierten Version zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem Meßdaten, der Quenchzeitpunkt wird gut vorhergesagt. Dem gegenüber zeigt die bisherige Code-Version ein frühzeitiges Abfallen der Temperatur und keine erkennbare Wiederbenetzung /8/.

Eine ausführliche Validierung des neuen Modells unter Einbeziehung einer größeren Anzahl verschiedener Transienten ist notwendig, um das neue Modell im ganzen Bereich der erwarteten Betriebs- und Störfallsituationen zu qualifizieren. Arbeiten laufen zur Zeit, um die Vorhersagbarkeit des Modells unter Bedingungen hohen Dampfgehaltes zu verbessern. Es wird empfohlen, dieses neue Modell in die neuste Version R5M3.2 zu implementieren, um die Leistungsfähigkeit und Vorhersagbarkeit des Modells bezüglich Flutprozesse und allgemeiner Wärmeübergangsprobleme weiter zu bewerten. Das neue Modell wird auch in S/R5 Version Rel.E eingebaut.

Literatur

- /1/ W. Hering, Status of Accident sequence analyses using SCDAP/RELAP5, W.Hering, PSF report, 1997.
- /2/ W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, Severe core damage analyses for an advanced reactor concept using SCDAP/RELAP5, 2nd International Conference on Advanced Reactor Safety (ARS'97), June 1-4, 1997, Orlando, Fl, USA.
- /3/ R. Gonzales, D. Chatelard, F. Jacq, ICARE2 Version 2 Mod 1, Description of physical models, Note Technique DRS/SEMAR 92/43, 1996
- /4/ S. Smit, W. Hering, W. Sengpiel: Analysis of Fuel Bundle Behaviour in Phebus FPT0 with SCDAP/RELAP5, FZKA 5882, 1997 (in Vorbereitung).
- /5/ W. Hering, W. Sengpiel, D. Struwe: Calculation of Bundle Degradation in the Phebus FPT0 In-pile Experiment with SCDAP/RELAP5, Proc. Jahrestagung Kerntechnik 1996, Mannheim, 21.-23. Mai 1996, S.226-229.
- /6/ Ch. Homann, W. Hering, V.H. Sanchez: State of FZK/IRS calculations for the projected QUENCH facility, 2nd International QUENCH workshop, Karlsruhe, September 16-19 1996.
- 17/ J.C. Chen, R.K. Sundaram, T.F. Ozkaynak, A phenomenolagical correlation for post-CHF heat transfer, Lehigh University, NUREG-0237, Juni 1977.
- /8/ V.H. Sanchez-Espinoza, E. Elias, W. Hering, D. Struwe, Development and Validation of a Reflood Model for the RELAP5/MOD3 Code, FZKA, 1997 (in Vorbereitung).

Liste der Abbildungen

- Abbildung 1: Axiale Diskretisierung des verfeinerten EPR Inputdecks für Rechnungen mit S/R5 mod 3.1 Rel.D und Rel. E.
- Abbildung 2: Ergebnisse der S/R5 Rechnungen zum "surge line rupture" Szenario", (a)
 Wärmeübertragung vom Primär- auf den Sekundärkreis, (b) Primär- und
 Sekundärkreisdruck, (c) Wasserstände im Kern, unterem und oberen Plenum, und (d) Einspeiseraten und Wasserinhalt der Druckspeicher.
- Abbildung 3: Ergebnisse der S/R5 Rechnungen zum "surge line rupture" Szenario",
 (a) Leistungsbilanz im Kern und maximale Kerntemperatur, (b) Gastemperaturen im Kern, (c) Wasserstand im Kern und im unteren Plenum für epr594 und epr5A2, sowie (d) Wasserstoffproduktionsrate und H₂-Gesamtmasse für epr594 und epr5A2.
- Abbildung 4: Ergebnisse der S/R5 Rechnungen zum "surge line rupture" Szenario",
 (a), (c), (e) Hüllrohrtemperaturen der Brennstäbe im 1., 3., und 5. Ring,
 (b), (d), (f) Hüllrohrtemperaturen der Absorberstäbe im 1., 3., und 4. Ring,
 (g), (i) Temperaturen des "heavy reflectors" (h), (k) Oxydschichtdicken für die Brennstäbe im 1. und 5. Ring.
- Abbildung 5: Mögliche In-Core-Poolzustände und Wechselwirkungen zwischen Pool, Kruste und Kerneinbauten: (a) in radialer Richtung und (b) in axialer Richtung.
- Abbildung 6: Erste Ergebnisse der Untersuchung des Verhaltens der Kerntragestruktur unter Annahme vereinfachter Randbedingungen: (a) ohne Verlagerung der aufgeschmolzenen Stahlmassen und (b) bei instantaner Verlagerung in das untere Plenum.
- Abbildung 7: Ergebnisse der CORA-13 Validierungsrechnungen mit S/R5 Rel. E (IRS): Vergleich der gemessenen und berechneten Temperaturen in: (a) 0-0.1 m und 0.1-0.2 m Bündelhöhe, (b) 0.9-1.0 m und 1.0.1.2 m Bündelhöhe, (c) 0.3-0.4 m und 0.6 - 0.7m Bündelhöhe, und (d) gemessenen und berechnete Wasserstoffmassen für Rel.D und Rel.E.
- Abbildung 8: Ergebnisse der CORA-7 Validierungsrechnungen mit S/R5 Rel. E (IRS) in verschiedenen Bündelhöhen: (a) 0.15m, (b) 0.35m, (c) 0.55m, (d) 0.75m, (e) 0.95m und in der oberen Elektrodenzone (f) 1.050m.
- Abbildung 9: Vorläufige Ergebnisse der Phebus FPT0 Rechnungen mit Rel. E (IRS) (a) -(d) Vergleich der gemessenen (Symbole) und berechneten Temperaturen, (e) Leistungsbilanz und (f) integrale Wasserstoffproduktion.
- Abbildung 10: Axiale und radiale Diskretisierung der geplanten QUENCH-Anlage für die Auslegungsrechnung mit S/R5.
- Abbildung 11: Stand der QUENCH-Auslegungsrechnungen für die Voroxidationsphase: (a) axiales Temperaturprofil zum Ende der Voroxidationsphase, (b) axiales Oxidationsprofil, und (c) axiale Verteilung der Wasserstoffproduktionsrate
- Abbildung 12: Validierung des thermohydraulischen Quenchmodelle in R5M3 bzw. S/R5 für den Bereich des "Übergangssiedens" (transition boiling): (a) Original R5M3 Ergebnisse und (b) Verbesserung des Modells durch Modifikation der zugrundeliegende CHEN-Korrelation.
- Abbildung 13: Ergebnisse der Validierungsrechnungen für das verbesserte R5M3-Modell: (a) Versuch T-16106 in der Einzelstab-Quenchanlage (FZK/IMF) und (b) Bündel-Flutexperiment NEPTUN-5036 (PSI).

12.02.1997



Abbildung 1: Axiale Diskretisierung des verfeinerten EPR - Inputdecks für Rechnungen mit S/R5 mod 3.1 Rel.D und Rel. E.



Abbildung 2: Ergebnisse der S/R5 Rechnungen zum "surge line rupture" Szenario",

- (a) Wärmeübertragung vom Primär- auf den Sekundärkreis,
- (b) Primär- und Sekundärkreisdruck,
- (c) Wasserstände im Kern, unterem und oberen Plenum, und
- (d) Einspeiseraten und Wasserinhalt der Druckspeicher.





- (a) Leistungsbilanz im Kern und maximale Kerntemperatur,
- (b) Gastemperaturen im Kern,
- (c) Wasserstand im Kern und im unteren Plenum für epr594 und epr5A2, sowie
- (d) Wasserstoffproduktionsrate und H_2 -Gesamtmasse für epr594 und epr5A2.



Abbildung 4: Ergebnisse der S/R5 Rechnungen zum "surge line rupture" Szenario",

- (a), (c), (e) Hüllrohrtemperaturen der Brennstäbe im 1., 3., und 5. Ring,
- (b), (d), (f) Hüllrohrtemperaturen der Absorberstäbe im 1., 3., und 4. Ring,
- (g), (i) Temperaturen des "heavy reflectors"
- (h), (k) Oxydschichtdicken für die Brennstäbe im 1. und 5. Ring.



Axiales / radiales Krustenversagen

Abbildung 5: Mögliche In-Core-Poolzustände und Wechselwirkungen zwischen Pool, Kruste und Kerneinbauten: (a) in radialer Richtung und (b) in axialer Richtung.



Abbildung 6: Erste Ergebnisse der Untersuchung des Verhaltens der Kerntragestruktur unter Annahme vereinfachter Randbedingungen: (a) ohne Verlagerung der aufgeschmolzenen Stahlmassen und (b) bei instantaner Verlagerung in das untere Plenum.



Abbildung 7: Ergebnisse der CORA-13 Validierungsrechnungen mit S/R5 Rel. E (IRS): Vergleich der gemessenen und berechneten Temperaturen in:
(a) 0-0.1 m und 0.1-0.2 m Bündelhöhe, (b) 0.9-1.0 m und 1.0.1.2 m Bündelhöhe, (c) 0.3-0.4 m und 0.6 - 0.7m Bündelhöhe, und (d) gemessenen und berechnete Wasserstoffmassen für Rel.D und Rel.E.

— 362 —



Abbildung 8: Ergebnisse der CORA-7 Validierungsrechnungen mit S/R5 Rel. E (IRS) in verschiedenen Bündelhöhen: (a) 0.15m, (b) 0.35m, (c) 0.55m, (d) 0.75m, (e) 0.95m und in der oberen Elektrodenzone (f) 1.050m.



Abbildung 9: Vorläufige Ergebnisse der Phebus FPT0 Rechnungen mit Rel. E (IRS)
 (a) - (d) Vergleich der gemessenen (Symbole) und berechneten Temperaturen,
 (e) Leistungsbilanz und (f) integrale Wasserstoffproduktion.



-- 365 --



Abbildung 11: Stand der QUENCH-Auslegungsrechnungen für die Voroxidationsphase: (a) axiales Temperaturprofil zum Ende der Voroxidationsphase,

(b) axiales Oxidationsprofil, und

(c) axiale Verteilung der Wasserstoffproduktionsrate



Abbildung 12: Validierung des thermohydraulischen Quenchmodelle in R5M3 bzw. S/R5 für den Bereich des "Übergangssiedens" (transition boiling):
(a) Original R5M3 Ergebnisse und (b) Verbesserung des Modells durch Modifikation der zugrundeliegende CHEN-Korrelation.



Abbildung 13: Ergebnisse der Validierungsrechnungen für das verbesserte R5M3-Modell: (a) Versuch T-16106 in der Einzelstab-Quenchanlage (FZK/IMF) und (b) Bündel-Flutexperiment NEPTUN-5036 (PSI). II. <u>Abschreckexperimente mit Brennelementsimulatoren, QUENCH-Anlage</u> (D. Piel, L. Schmidt, IMF III)

Abstract

At the end of March 1996, the Siemens company was awarded the contract to manufacture and supply the complete QUENCH facility. Prior to this, a concept had been developed by FZK for QUENCH experiments with a 21-rod fuel element . simulator.

Design of the entire system was largely completed at the end of 1996 in close cooperation between Siemens and FZK using design calculations by IRS, AEA Technology and the Ruhr University, Bochum.

The instrumented fuel element simulator is provided by FZK for each experiment. Design work including various preliminary experiments, e.g. with high-temperature thermocouples, and procurement of the partly exotic semifinished products were accomplished in 1996.

1 Einleitung

Am 27.03.96 wurde der Firma Siemens der Auftrag erteilt über die Konstruktion, Planung, Herstellung, Lieferung, Montage und Inbetriebnahme einer QUENCH-Versuchsanlage zur Durchführung von Abschreckexperimenten an Brennelementsimulatoren. Zuvor war im IMF eine Konzeptstudie erarbeitet worden, die als Grundlage für die Ausschreibung der Anlage diente.

Ziel der QUENCH-Experimente ist die quantiative Bestimmung des Wasserstoffquelltherms (Erzeugungsrate, Gesamtmenge) beim Fluten eines teilzerstörten, stark überhitzten LWR-Kerns. Die Ergebnisse werden für weiterführende Untersuchungen zum Verhalten des Wasserstoffs im Reaktor-Containment benötigt. Die Auslegung des Gesamtsystems konnte in enger Abstimmung zwischen Siemens und FZK mit begleitenden Auslegungsrechnungen von IRS, AEA Technologie und Ruhr Universität Bochum Ende 1996 weitgehend abgeschlossen werden.

Der instrumentierte Brennelementsimulator wird für jedes Experiment vom FZK neu beigestellt. Die Designarbeiten einschließlich diverser Vorversuche, z.B. mit speziellen Hochtemperatur-Thermoelementen wurden in 1996 durchgeführt und die Beschaffung der zum Teil exotischen Halbzeuge getätigt.

Als Aufstellungsort für die QUENCH-Anlage wurde das Technikum im IMF III-Gebäude 618 gewählt. Umfangreiche, kostenintensive Baumaßnahmen mußten in die Wege geleitet werden, um die anlagenspezifische Infrastruktur (Wasserkühlkreislauf, Elektroversorgung, Gasversorgung, usw.) bereitzustellen. Daneben wird für Nachuntersuchungen ein Metallographie-Labor und eine Mikroskopie (Lichtmikroskop und REM) eingerichtet.

2 Testbündel

Die QUENCH-Anlage besteht im wesentlichen aus der Teststrecke, dem Wasser-, Dampf- und Gassystem, dem Wasserstoffmeßsystem, der Hochstromanlage für die Bündelheizung, dem Prozeßleitsystem und der Meßdatenerfassungsanlage.

Herzstück der Anlage ist die Teststrecke mit dem instrumentierten Testbündel, dem Brennelementsimulator. Das Testbündel, Abbildung 1, ist mit 21 Brennstabsimulatoren beladen. 20 Brennstabsimulatoren sind elektrisch beheizt, der Zentralstab ist unbeheizt. Die Stäbe sind auf einem quadratischen Gitter mit 14,3 mm Mittenabstand in Original-LWR-Abstandshaltern angeordnet. Die vier Eckpositionen im Bündel sind mit sogenannten Instrumentierungsstäben von 6 mm Durchmesser beladen. Ein Stab wird nach der Voroxidationsphase aus dem heißen Bündel gezogen, um die Oxidschichtdicken vor dem Quenchen zu ermitteln. Der gegenüberliegende Stab dient zur Oxidschichtdickenermittelung nach dem Experiment.

Das Testbündel ist umgeben vom Dampfführungsrohr, dem sogenannten Shroud, aus Zircaloy mit einem Innendurchmesser von 80 mm und einer Wandstärke von 2,38 mm. Abbildung 2 zeigt einen vertikalen Schnitt durch das Testbündel. Bis zur Oberkante der beheizten Zone ist der Shroud nach außen zum Kühlmantel hin mit Zr0₂-Fasermaterial isoliert (ca. 40 mm Dicke). In diesem Bereich wird der Kühlmantel mit Argongas gekühlt (ca. 6 g/s). Im oberen nicht isolierten Bereich des Bündels wird der Kühlmantel mit Wasser gekühlt, da bei einer Gaskühlung am Kühlmantelinnenrohr die maximal zulässige Temperatur von 600 °C überschritten würde. Durch Weglassen der Isolierung konnte das Temperaturmaximum im Bündel vom Ende der beheizten Zone nach unten hin verschoben werden.

3 Brennstabsimulator

Der beheizte Brennstabsimulator, Abbildung 3, ist ca. 2,5 m lang und hat ein Hüllrohr aus Zircaloy-4 mit den typischen Abmessungen, Durchmesser 10,75 mm, 0,725 mm Wand, wie sie auch für Reaktor-Brennstäbe verwendet werden. Die beheizte Länge beträgt ca. 1 m. Der Wolframheizer (ϕ 6 mm) ist oben und unten über Molybdän- und Kupferelektroden an die Stromversorgung angeschlossen. Die Materialkombination Molybdän an den Heizerenden und Kupfer an den äußeren Enden wurde wegen der hohen Temperaturen an den Heizerenden gewählt. Kühlkammern am Bündelkopf und -fuß sorgen dafür, daß die Kupferelektroden nicht überhitzt werden. Die Elektroden sind mit einer 0,2 mm dicken Isolierschicht aus Zr0₂ überzogen. Im Bereich des Heizers ist der Stab mit Zr0₂-Ringpellets gefüllt.

Der Festpunkt zwischen Hülle und innerer Stabbeladung (obere Elektrode, Heizer mit Ringpellets, untere Elektrode) befindet sich am oberen Ende des Hüllrohres. Die Kupferelektrode ist hier auf einen kleineren Durchmesser verjüngt, auf diesen wird eine Bornitridhülse aufgeschoben und das Hüllrohr dann aufgehämmert. Am unteren Ende ist der Stab offen, so daß sich bei unterschiedlichen thermischen Dehnungen Hülle und innere Stabbeladung frei bewegen können. In der Isolierplatte am Bündelfuß wird das Stabinnere durch eine O-Ring-Kombination nach außen hin abgedichtet. Durch ein Kanalsystem in der Isolierplatte ist es möglich, die Stäbe während des Experimentes mit Helium zu befüllen. Am oberen Stabende ist ebenfalls eine Isolierplatte mit O-Ringen zum Abdichten des Stabes angeordnet. Der unbeheizte Zentralstab, Abbildung 4, ist ca. 2,6 m lang und hat die gleiche Hülle wie der beheizte Brennstabsimulator. Im Zentralstab sind zwei Zentraltemperaturmeßstellen angeordnet. Die Hochtemperatur-Thermoelemente werden über Dichtverschraubungen in den Stab geführt. Korrespondierend zu den Zentraltemperaturmeßstellen werden außen auf der Hülle während der Bündelmontage Hochtemperatur-Thermoelemente angebracht.

4 Thermoelementinstrumentierung

Testbündel, Shroud und Kühlmantel sind mit insgesamt 90 Temperaturmeßstellen ausgerüstet:

- 37 Thermoelemente im Testbündel
 (26 W/Re-Thermoelemente, 11 NiCr/Ni-Thermoelemente)
- 26 Thermoelemente am Shroud
 (18 W/Re-Thermoelemente, 8 NiCr/Ni-Thermoelemente)
- 22 Thermoelemente in der Innenwand des K
 ühlmantels (NiCr/Ni-Thermoelemente)
- 5 Thermoelemente auf der Außenwand des Kühlmantels (NiCr/Ni-Thermoelemente)

Die Thermoelemente sind auf 17 Meßebenen von Teststreckenniveau -250 bis +1350 angeordnet (siehe Abbildung 2). Der Beginn der beheizten Zone ist Niveau 0. Der Abstand der Meßebenen beträgt 100 mm.

Die Positionen der Thermoelemente auf den 17 Meßebenen sind in Abbildung 5 dargestellt. Die Meßstellen auf der Kühlmantelaußenwand sind in dieser Darstellung nicht berücksichtigt. Bis Ebene 7 (+350 mm) sind Bündel und Shroud mit NiCr/Ni-Thermoelementen instrumentiert, weil hier die Temperaturen auch während der Quench-Phase unterhalb 1.000 °C liegen. Ab Ebene 8 (+450 mm) werden für Bündel und Shroud Hochtemperatur-Thermoelemente verwendet. In die Kühlmantel-Innenwand sind NiCr/Ni-Thermoelemente, Durchmesser 0,5 mm, eingelötet (T600 °C). Bis Ebene 10 (+650 mm) werden die Thermoelemente (7 Hochtemperatur-Thermoelemente und 11 NiCr/Ni-Thermoelemente) nach unten durch den Bündelfuß nach außen geführt und ab Ebene 11 (+750 mm) nach oben durch den Bündelkopf (19 Hochtemperatur-Thermoelemente).

Die radiale Anordnung der Meßstellen im Bündel und am Shroud projeziert auf eine Ebene ist in Abbildung 6 dargestellt. Die Darstellung ist maßstäblich. Man sieht, daß die Hochtemperatur-Thermoelemente mit 2,1 mm Durchmesser kaum eine Versperrung der Kühlkanäle bewirken.

5 Hochtemperatur-Thermoelemente

Die Hochtemperatur-Thermoelemente, sogenannte Duplex-Thermoelemente, Abbildung 7, wurden seinerzeit für die CORA-Experimente entwickelt, anfangs in der Hauptwerkstatt des FZK und später dann bis zur Einsatzreife von einem kleinen Unternehmen eines ehemaligen FZK-Mitarbeiters. Nur diese Firma ist derzeit in der Lage, die Hochtemperatur-Thermoelemente für die QUENCH-Testbündel zu fertigen. Die Thermoelemente haben einen Außendurchmesser von 2,1 mm und einen Doppelmantel innen aus Tantal und außen aus Zircaloy. Das Adernmaterial ist aus W5%Re und W26%Re. Als Isolation wird Hf0₂ verwendet. Die aufwendige Fertigungsprozedur ist in Tabelle 1 aufgelistet. Die Länge der Hochtemperatur-Thermoelemente ist von der jeweiligen Position im Bündel bzw. am Shroud abhängig und liegt zwischen 500 mm und 1800 mm. Über eine spezielle Kupplung wird das Hochtemperatur-Thermoelement mit der edelstahlummantelten Ausgleichsleitung verbunden. Die Kosten für die Hochtemperatur-Thermoelemente sind relativ hoch, z.B. bei 1m Länge 2.000 DM, wovon 1200 DM auf die Halbzeuge entfallen und 800 DM auf die Fertigungskosten.

Vor der Fertigung der Thermoelemente für die ersten beiden Testbündel wurde eine Pilotserie von fünf Thermoelementen gefertigt und bei Temperaturen bis 1.700 °C und 2.000 °C getestet. Die Thermoelemente funktionierten auch bei den hohen Temperaturen einwandfrei. Anschließend wurden Schliffe angefertigt. Das Thermoelement bis 1.700 °C zeigte keine Veränderungen nach dem Test, Abbildung 8. Ein vorangegangener Lecktest ergab, daß die Hülle noch völlig intakt war. Das Thermoelement bis 2.000 °C zeigte Veränderungen an der äußeren Zircaloy-Hülle, Abbildung 9. Die Thermoelemente waren jeweils senkrecht hängend, mit der Meß-

Table 1 High-temperature thermocouples main fabrication steps

- 1 Cleaning of Zircaloy and tantalum tubes inside
 - rinsing with a mixture of Al₂0₃ powder and water
 - · rinsing with pure water
 - drying with Ar
- 2 Cleaning of W/Re wires with acetone
- 3 Lead-in W/Re wires into Hf0₂ insulators (double hole insulator)
- 4 Reduce Ta tube from 2.15 mm ø to 1.8 mm ø by drawing process
- 5 Slide Hf0₂ insulators with W/Re wires into Ta tube
- 6 Swage Ta tube to 1.4 mm ø
- 7 Cleaning of surface of Ta tube with acetone
- 8 Slide Ta tube into Zircaloy tube
- 9 Swage Zircaloy tube on Ta tube
- 10 Remove Zircaloy tube from Ta tube about 1 mm at one end
- 11 Remove Hf0₂ insulation from cable tip to depth of 2 to 3 mm
- 12 Weld W/Re wire tips together by laser to form the hot junction
- 13 Fill Hf0₂ powder into Ta tube around hot junction tip
- 14 Close Ta tube with disc by laser welding
- 15 Slide Zircaloy end cap over Ta tube tip and seal-weld by laser
- 16 Store in oven at 150 °C also between different fabrication steps
- 17 Connect thermocouple with compensating cable by special transition piece (developed by manufacturer)
- 18 Mount connector to compensating cable end
- 19 Electrical tests: wire resistance, loop resistance, insulation resistance after every fabrication step
- 20 Leak test with complete thermocouple including transition piece in demineralized water at 100 °C for about 24 hours, check insulation resistance (2000 M Ω)
- **Remark:** This described fabrication procedure was initially developed for CORA experiments.



Fig. 1: 21 Fuel Rod Simulator Bundle



temperature measurement elevations

-150

-250

(2)

1

Fig. 2 : QUENCH Test Rig

-200 Inconel spacer grid

Ar



Fig. 3: Heated Fuel Rod Simulator



Fig. 4: Unheated Fuel Rod Simulator



Fig. 5 : TC Instrumentation of the Test Bundle



Fig. 6 : QUENCH Facility TC Instrumentation of the Test Bundle



Fig. 7: QUENCH Facility High-temperature thermocouple

- 381 —



Fig. 8 : High-temperature thermocouple heat-up test 1700°C



Fig. 9: High-temperature thermocouple heat-up test 2000°C

III. Experimente zum Wasserstoff-Quellterm und zur UO₂ und ZrO₂Auflösung durch geschmolzenes Zircolay

(P. Hofmann, V. Noack, M. Steinbrück, L. Steinbock, J. Stuckert, J. Burbach, H. Metzger, IMF I)

Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Vorhabens werden Experimente zum Wasserstoff-Quellterm sowie zur UO₂- und ZrO₂-Auflösung durch geschmolzenes Zircaloy durchgeführt. Die Fragestellung beim Wasserstoff-Quellterm ist, wieviel Wasserstoff beim Fluten (Abschrecken) eines teilweise ausgedampften Reaktorkerns mit Wasser entsteht. Zur quantitativen Abschätzung reichen die herkömmlichen Zircaloy/Wasserdampf-Oxidationskorrelationen nicht aus. Es werden deshalb Abschreckexperimente mit kurzen Brennstababschnitten durchgeführt. Von Interesse ist dabei u. a. die Bildung neuer Oberflächen infolge Rißbildung im Hüllrohr während des Abschreckens. Parallel dazu erfolgen Grundlagenuntersuchungen zur Wasserstoffaufnahme und -abgabe im Zircaloy. Die Quantifizierung der UO₂- und ZrO₂-Auflösung durch geschmolzenes Zircaloy ist im Hinblick auf die modellmäßige Beschreibung der physikalischchemischen Vorgänge von Bedeutung. Infolge der chemischen Auflösung kommt es zur Verflüssigung von UO₂ und ZrO₂ etwa 1000°C unterhalb ihrer Schmelzpunkte, zu Materialverlagerungen und zur Bildung von Kühlkanalblockaden.

Single rod quench tests

The separate effects tests with short fuel rod segments to study the formation of new metallic surfaces by cracking and fragmentation of the oxygen embrittled cladding during fast cooldown and the corresponding hydrogen generation have been continued. The new tests were subjected on the investigation of the impact of preoxidation in steam on crack formation in the cladding and the hydrogen storage in the metal. In former tests an argon-oxygen mixture was used for preoxidation. The new test series was performed with similar boundary conditions as in the tests conducted before. Specimens were preoxidized to 100 or 300 μ m thickness of the oxide layer, the cladding temperature before cooldown amounted to 1200, 1400 or 1600 °C, respectively. The steam flow rate was kept constant at 0.08 g/s during preoxidation and subsequent steam cooling. The cooldown of the specimens was mainly determined by the radiative heat losses to the environment.

The mechanical behavior of the cladding tube segments corresponds to that in the former experiments. Large cracks, penetrating the oxide and the metal substrate, can be found in specimens with an initially 300 µm thick oxide layer. Surfaces of the cracks are partially oxidized, indicating thus their contribution to oxidation and hydrogen generation. The cracks are more pronounced if the cooldown starts from lower temperatures. A new method was applied to determine the amount of hydrogen stored in the specimens. It was proved that the error of this method is smaller than 10 % of the measured value. Results of the hydrogen storage in specimens of the new tests series are depicted in the diagram below (Fig. 1).


Temperature at onset of cooldown, °C

Fig. 1: Hydrogen stored in Zircaloy tube specimens after preoxidation and cooldown in steam (flow rate: 0.08 g/s)

The generation of cracks in the specimens with 300 μ m thick oxide layers is accompanied by an increased storage of hydrogen. However, the absolute values of stored hydrogen are lower than in the previously performed experiments with preoxidation in an argon-oxygen mixture. This can possibly be attributed to the in comparison to the former experiments reduced steam flow rate (0.08 g/s compared to 2 g/s).

A second test series has been performed to determine the extend of crack formation in dependence on the initial thickness of the oxide layer. The crack formation in different specimens with oxide layers between 100 and 300 μ m has been investigated. The specimens were preoxidized and subsequently cooled down by a steam flow rate of 0.08 g/s. The specimen temperature at onset of cooldown amounted to 1200 °C. It exist clear boundaries for the formation of through-wall cracks. Axial through-wall cracks form if the oxide layer thickness exceeds 150 μ m. Either axial or a combination of axial and circumferential cracks were observed in the intermediate zone of 200 to 230 μ m thickness of the oxide scales. A combination of axial and circumferential cracks was generated during cooldown of specimens with oxide scales thicker than 230 μ m. The crack density remains more or less constant if the oxide scale thickness exceeds 230 μ m. In further experiments the cooldown will be initiated at 1400 °C and 1600 °C, the

steam flow rate will amount to 1.5 g/s. Additionally, the influence of the cooldown rate on crack formation will be investigated.

The QUENCH-rig was also used for sensitivity studies of the mass spectrometer system, which is foreseen for the hydrogen measurement in the large bundle quench facility. After the optimization of the calibration procedure of the mass spectrometer, known mixtures of argon and hydrogen were diluted in steam and measured. The error of the hydrogen measurement of concentrations of 5 to 0.05 Vol% hydrogen in steam was smaller than 2 % of the measured value.

Determination of the crack patterns of quenched Zircaloy tubes

When partially oxidized Zircaloy fuel rod cladding tubes are quenched from high temperatures by water or steam, cracks develop in the oxide layer and the brittle α -Zr(O) substrate. With respect to the enhanced oxidation of the cladding during quenching and the generated hydrogen it is important to determine the crack density in the specimen. Cracks reduce the length of the diffusion paths for oxidation in the ZrO₂ layer or form surfaces in the α -Zr(O) which may be quickly oxidized. Therefore the cracks were visualized with a stereo microscope and a digitizing video camera and methods were developed in order to analyze the crack pattern and crack density analytically.

The cracked Zircaloy tubes, after cooldown by steam in the quench rig, are scanned in axial and azimuthal directions and a series of contiguous images are generated which cover the whole circumference. The injection of a solvent darkened the surface of the tubes in the vicinity of through-wall cracks. The crack length per unit area is a measure for the stresses in the tube wall during quenching. The crack patterns may be extracted from these surface images either by hand tracing or by automatic tracing with programmed algorithms and an image processing system. Fig. 2 shows a circumference image of a cracked Zircaloy tube, the patterns generated with the "aceton.mac" macro written for the OPTIMAS image system and a crack pattern generated by hand tracing. In both cases the crack density was determined with a macro calculating the total crack length.

The crack densities of several pins from a series of recent quench experiments are listed in table 1. The oxide layer thickness was measured optically on polished cross sections of the tube. The crack densities were calculated from hand tracing, because

the algorithms for crack determination can not yet distinguish between thin and thick crack patterns and dark stains not associated to cracks.

It seems that the dependence of the crack density from the initial oxide layer thickness (fig. 3) resembles a step-like function with a critical oxide layer thickness of about 200 mm for tubes with dimension 10.75x0.75 mm. Since the oxide layer thickness until now is measured at some isolated axial points only, this is a rather preliminary result and may be changed in the future when oxide layer thickness maps may be generated with the new eddy current device.

Tab. 1:Axial distribution of crack density in pre-oxidized Zircaloy cladding
during rapid cool-down by steam

	Preoxid.	Quench	Condition	Digital Image Analysis			
Probe	ZrO ₂	V _{steam}	by Temp	Coord.,mm	Crack density, mm ⁻¹		
	μm	g/s	°C	(from bottom)	Distribution	Mean	
200272a	230-260	0.08	1400	70-112	0.85;0.99;0.67;0.48;0.57;0.31	0.65	
090472a	225-240	0.08	1200	20-118	0.52;0.66;0.42;0.42;0.42;0.42;0.30	0.46	
100471a	220	1.5	1200	27-101	0.77;0.57;0.45;0.40;0.33	0.50	



Fig. 2: Pin 303 (cool-down by steam at 1200°C, 200 µm oxide thickness) left: circumference scan, center: automatic tracing, right: hand tracing.



Fig. 3: Crack formation in preoxidized Zircaloy cladding during rapid cooldown from 1200°C by steam

Hydrogen absorption of Zircaloy at high temperatures

Besides the oxidation of Zircaloy by steam the interaction of hydrogen produced during this reaction with the remaining Zircaloy metal is of interest.

It is well known that zirconium and Zircaloy, respectively, can dissolve large amounts of hydrogen. This reaction may have important consequences on the course of events during and after quenching of an overheated core. So, Zircaloy may act as a sink or source of hydrogen, depending on the prevailing conditions. In this way, the hydrogen solubility of the cladding material can alter the hydrogen source term.

A literature study was performed at FZK to define the state of the art concerning the hydrogen solubility at high temperatures. The main statements found in literature are:

- Zircaloy has a high capacity for the absorption of hydrogen, even at the high temperatures considered for the quench process. The solubility of hydrogen in Zircaloy is well described by Sievert's law up to high hydrogen concentrations.
- The diffusivity of hydrogen in Zircaloy is very high at the high temperatures considered. Thus, large amounts of hydrogen can be taken up or released, respectively, within short times.
- The hydrogen uptake of Zircaloy is an exothermic reaction. Therefore, the chemical heating due to the steam oxidation can be significantly increased by the absorption of the produced hydrogen.
- The diffusivity as well as the solubility of hydrogen in ZrO₂ is by some orders of magnitude lower compared to the metal. Therefore, the hydrogen uptake or release, respectively, can significantly impeded by the existence of an intact oxide scale.

• Alloying element influence the hydrogen solubility of zirconium only slightly. For that reason, the behavior of Zircaloy is comparable to that of pure zirconium.

Additionally, it was shown that there is a lack of data for temperatures above 1000 °C. Therefore, measurements of the uptake and release of hydrogen by Zircaloy have been performed at high temperatures. A first test series concerning the hydrogen solubility of pure Zircaloy-4 at temperatures between 950 °C and 1450 °C has been completed.

The tests are performed in a thermobalance (NETZSCH STA-409) coupled with a mass spectrometer (Balzers Prisma). This arrangement (Fig. 4) permits the continuous and simultaneous recording of mass changes, energetic effects (by using a DTA measuring head), and the composition of the off-gas. The furnace of the thermobalance is designed for maximum temperatures of 1600 °C, the accuracy of the micro-balance is better than 0.2 mg, and the mass spectrometer used measures hydrogen concentrations down to about 100 ppm. A sophisticated gas supply system reproducibly provides any needed argon/hydrogen mixture between 0(5) % and 100 % H₂. Two types of measuring heads for the thermobalance are available: One with type-S thermocouples (Pt10%Rh-Pt) for tests under inert or oxidising atmosphere and one with type-D thermocouples (W3%Re-W25%Re) used in tests under hydrogen containing atmosphere. Specimens investigated in the most tests are customary Zircaloy-4 cladding tube segments, for some tests specimens are fabricated from Zry-4 rods as disks or cylinders.

In a first test series the hydrogen solubility of Zircaloy-4 in dependence on temperature (950-1450 °C) and hydrogen partial pressure (0-1 bar) is investigated (Fig. 5). The specimens are heated up to about 1450 °C under argon, then the gas composition is switched to 0.1, 0.5, and 1.0 bar hydrogen pressure, respectively.

Due to the hydrogen absorption of the specimens their mass increases up to the equilibrium hydrogen concentration given by SIEVERT's law is achieved. After that, the temperature is decreased up to 950 °C in 100 K steps, during each step the specimen was equilibrated. Finally, the specimens are cooled down under argon gas. As it is expected from SIEVERT's law the hydrogen solubility of the Zircaloy-4 specimen increases with increasing hydrogen pressure and decreasing temperature.



Fig. 4: Test set-up for the investigation of the hydrogen solubility of Zircaloy-4 at high temperatures (STA = Simultaneous Thermal Analysis)

Figure 5 shows also that the hydrogen uptake proceeds very fast, the mass increase follows the changes in temperature almost instantaneously.



Fig. 5: Hydrogen uptake of Zircaloy-4 vs. temperature and H₂ partial pressure

The agreement between our data for the SIEVERT constant and literature values is very good (Fig. 6).

Further tests demonstrated that the uptake and release of hydrogen by Zircaloy is a fully reversible process and that the hydrogen absorption is connected with a considerable heat release.

- 390 ----



Fig. 6: Sievert's law constant for hydrogen in zirconium alloys (β -phase) Comparison of recent FZK tests with literature data

An intact oxide scale significantly impedes the hydrogen uptake of the metal phase, as can be seen in Fig. 7. Two tests are performed in the QUENCH rig under comparable conditions ($P_{H2} = 0.5$ bar, T = 1000-1400 °C). Whereas the specimen without an oxide scale takes up and releases hydrogen during changes in temperature as expected, the pre-oxidised specimen shows almost no reaction on the changes in temperature. However, after dissolution of the oxide layer the hydrogen solubility of the formed α -phase is in the same order as of pure Zry-4.



Fig. 7: Hydrogen uptake/release of Zircaloy-4 specimens during temperature changes (1000-1400 °C) left: no pre-oxidation, right: pre-oxidation 100µm

The dependence of the hydrogen solubility on the oxygen content in the β - as well as in the α -phase will be the subject of the next tests planned to be performed in the thermobalance.

<u>UO₂ and ZrO₂ dissolution by molten Zircaloy</u>

Dissolution of UO₂ and ZrO₂ by molten Zircaloy is an important chemical process influencing core degradation and melt progression as well as the fission product source term. Since the available experimental data base, obtained by different investigations, results in controversial conclusions concerning the modeling of the phenomena a series of new dissolution experiments is being performed. First experimental results are available which have to be evaluated.

With respect to UO_2 dissolution there exist no principal disagreements on the basic reaction mechanism. During the first stage of UO_2 dissolution, the so-called saturation stage, the molten Zircaloy dissolves the crucible wall and reaches quickly saturation composition (liquidus line of the two-phase field (Zr, U, O) melt and (U, Zr)O₂ precipitates). During the second stage, the precipitation period, the oxygen diffusion from the UO_2 crucible to the Zircaloy melt is the rate determining diffusion process which governs the kinetics of (U, Zr)O₂ ceramic phase precipitation in the oxygen-containing metallic (Zr,U,O) melt and possible crucible wall dissolution. The main disagreement concerns the continuation of the UO_2 crucible wall dissolution during the precipitation period. Therefore, experimental clarification is needed.

The ZrO_2 dissolution kinetics is important with respect to the definition of a ZrO_2 oxide layer failure criteria. During a high-temperature transient in a severe reactor accident the outer surfaces of Zircaloy cladding will be oxidized, forming a layer of ZrO_2 . After reaching the melting points of the underlying cladding and the oxygen-stabilized α -Zr(O) the molten alloy, held in contact with the fuel by the outer layer of ZrO_2 , will begin to dissolve both UO₂ fuel and ZrO_2 simultaneously until failure of the oxide layer occurs. At this time, the molten (U, Zr, O) material will relocate by "candling" down the fuel rods or by slumping. These relocation events, which produce pools of molten material around undissolved fuel in the lower cooler reactor regions, has been observed in both inreactor and out-reactor integrated experiments with LWR fuel elements. Thus, the dissolution rate of the outer ZrO_2 layer on oxidized Zircaloy cladding is an important factor in determining:

- the residence time for fuel/molten cladding contact,
- the amount of molten α -Zr(O) available for fuel dissolution, and
- the molten α-Zr(O) oxygen content, which will determine the extend of fuel dissolution.

For this reason, values for the dissolution rate and solubility of ZrO₂ in molten Zircaloy as functions of temperature are required important input parameters for SFD code systems, such as ICARE2 and SCDAP/RELAP5.

The available experimental results on ZrO_2 dissolution show a rapid dissolution of solid ZrO_2 by molten Zircaloy similar to the UO_2 dissolution. After a temperature dependent short time the oxygen diffusion from the ZrO_2 crucible to the molten Zircaloy a solid ZrO_{2-x} layer forms at the crucible/melt interface which had a strong impact on the subsequent reactions.

Solubility limits for UO₂ dissolution by molten Zircaloy

To determine the solubility limits new UO₂ dissolution experiments are being performed at the Whiteshell Laboratories of AECL (Canada), with AECL acting as a subcontractor to FZK⁻ The results will subsequently be interpreted by P. Hofmann (FZK), P.J. Hayward (AECL), M.S. Veshchunov (NSI-RAS-Moscow) and D.R. Olander (UCB).

The objective is to repeat the original UO_2 dissolution tests performed by P. Hofmann and co-workers [1] but with use of alternative chemical analysis methods to remove any uncertainty in the earlier data and to allow the different interpretations of UO_2 dissolution to be reconciled. Isothermal heating tests at 2000, 2100 and 2200°C are being used to study the dissolution of UO_2 crucibles in molten Zircaloy-4. The crucibles have been supplied by FZK and are from the original batch [1], while the test and analysis methods are broadly similar to those used in previous Canadian dissolution tests.

Nine isothermal heating experiments at 2100°C have been performed up to now with nominal times at temperature of 2, 5, 10, 15, 20 and 30 min. The 10, 20 and 30 min tests were repeated to check for reproducibility of the results.

After cooling and sectioning the test specimens, representative melt specimens were analyzed for U, Zr, Sn, Fe and Cr by ICP spectrometry, with results for oxygen being obtained by difference. The other half of each sectioned specimen was polished and used for SEM examination. The individual melt phases at numerous locations within each specimen were analyzed by EDX for U, Zr and Sn, with oxygen values being obtained by difference. Phase-area analyses were also performed on SEM micrographs from different regions within each specimen. Finally, the dissolvedcrucible fractions were estimated from optical micrographs of the sectioned specimens by AECL and FZK (see below).

The detailed results have been documented in an interim report [2]. No interpretation of the 2100°C data has been attempted, apart from noting the obvious trends, which are as follows:

- The ICP melt analyses (U/(U + Zr) wt. % ratio) appear to reach a fairly constant value of 55.8 ± 3.8 after reaction times of ≥ 383 s.
- The features observed by SEM were very similar to those reported from earlier tests.
 Formation of a significant transition zone occurred after ~15 min reaction time. The major melt phases were a (U,Zr)O_{2-x} ceramic phase and a α-Zr(O) alloy phase containing traces of U and Sn. However, the shortest-duration (223 s) test specimen also contained significant quantities of U-rich alloy inclusions in both major phases. At longer times, these inclusions were confined to the α-Zr(O) phase and diminished in volume.
- The EDX analyses indicate that the mean y value in the $(U_y, Zr_{1-y})O_{2-x}$ ceramic phase of the cooled specimens decreased progressively from ~ 0.94 ± 0.02 after 223 s reaction time to ~0.77 ± 0.12 after ~ 1816 s reaction time.
- The EDX and phase-area analysis results showed no statistically-significant variation in the phase compositions or distributions at different locations within each cooled melt, although the microstructures became progressively coarser in moving from top to bottom. The area fraction of the (U,Zr)O_{2-x} phase appeared to increase with

increasing reaction time up to \sim 50% after \sim 20 min at 2100°C, and remained approximately constant thereafter.

• The measurements for the dissolved-crucible fraction as a function of reaction time showed no clear trend. However, the lowest values occurred with the two shortest-duration test specimens.

Image processing method to determine the extend of UO₂ crucible dissolution by molten Zircaloy

Photographs, showing the molten Zircaloy attack of UO₂ crucibles at 2100°C after various reaction times (fig. 8), were digitized and then analyzed with the program Photoshop. The whole image was classified into 6 different areas (fig. 9): initial melt volumes in the crucible bore (1), solidified melt in the attacked bottom of the crucible (2), solidified melt in the dissolved interior wall of the crucible (3), a second phase between the solidified melt and the crucible at the base and interior wall (4), the voided zone of the interior wall above the melt (5) and the macroscopic unchanged material of the crucible (6). The border of these areas were hand traced and the image coordinates were calibrated with the known vertical dimensions of the crucible. Fig. 10 shows classified areas for specimens with typical time duration of interaction. For all specimens the relative area fractions were determined by means of image analysis methods and compared with the initial cross-section area. The relative area fractions as a function of melt attack are shown in table 2. These melt areas are not melt volumes since the volume element increases with radius r from center to outside. Furthermore the U/Zr melt has a different specific volume than UO₂ and pure Zircaloy. Therefore any physical-chemical modeling of the melt attack needs further analytical work for determining the volumetric constitution of the crucible.





Fig. 8: Cross section of UO₂ crucible, as-polished

Fig. 9: Typical interaction zones in UO₂ crucible



Fig. 10: Image analysis of interactions between liquid Zry and solid UO₂ at 2100°C after different reaction times

	Time	Melt. Area	Diss. Area	Bottom	Trans. Zone	B.+T.Z.	Walls
Test		1+2+3	2+3+5	2	4	2+4	3+5
	S	%	%	%	%	%	%
HF-6	223	32,9	8,02	4,11		4,11	3,92
HF-7	383	35,7	11,74	4,38		4,38	7,36
HF-8	623	38,2	10,36	4,02		4,02	6,40
HF-9	634	38,8	10,83	4,72		4,72	6,13
HF-1	916	40,1	12,27	5,17		5,17	7,46
HF-4	1217	39,4	10,84	4,69	0,35	5,04	6,16
HF-10	1236	40,5	12,44	4,81	0,57	5,38	7,90
HF-3	1801	41,2	10,72	4,20	1,78	5,98	6,64

Table 2: Dissolved "areas" of crucible cross-sections

ZrO₂ dissolution by molten Zircaloy

In the past two sets of ZrO_2 crucible experiments were performed to determine the dissolution rate for ZrO_2 in molten Zircaloy by P. Hofmann et al. in 1987 [3] and P. Hayward et al. in 1997 [4]. The results of these experiments show a rapid dissolution of solid ZrO_2 by molten Zircaloy similar to the UO_2 dissolution. After a temperature dependent short time the oxygen diffusion from the ZrO_2 crucible to the molten Zircaloy a solid ZrO_{2-x} layer forms at the crucible/melt interface which had a strong impact on the subsequent reactions. Since the interpretation of the results is still controversial a new set of selected experiments is being performed in the temperature range of 2100 through 2400°C. As crucible materials MgO-stabilized ZrO_2 has been used. The results of the chemical analysis of the first crucible experiments are not yet available.

Analytical work on the modeling of the UO₂ and ZrO₂ dissolution by molten zircaloy

Dissolution of UO₂ by molten Zircaloy (Zry) at high temperatures \geq 1760°C (melting point of Zry) is an important chemical process influencing core melt progression in nuclear reactor severe accidents. Owing to this process, liquefaction and relocation of UO₂ take place about 1000 degrees below the melting point of the fuel (~2850°C). Dissolution of ZrO₂ by molten Zry is another important process which takes place competitively with the UO₂ dissolution in the same temperature interval. Owing to this process, thickness of the oxide scale which keeps the fuel rod cladding intact after metal Zry melting can be significantly reduced. This leads to the cladding failure and downward relocation of the melt and, therefore, determines the commence of core melt progression.

The UO₂ dissolution process has been intensively studied during the last few years by different experimental groups. In order to describe theoretically the experimental results, several models have been proposed. Despite the joint efforts of experimentalists and theoreticians, no common point of view on the physics of this complicated phenomenon could be developed. New investigations of the dissolution process are therefore necessary to resolve this extremely important problem.

In the presented interim report [5] a detailed overview of the current status of the problem, including laboratory tests and current models has been performed. The model which was elaborated earlier by the present authors [6,7] for the description of laboratory test results on UO_2 dissolution by molten Zircaloy, was further developed. On this basis, recommendations to the future tests boundary conditions were proposed and necessary additional measurements were specified.

The present model was also extended for the description of ZrO₂ dissolution by molten Zircaloy. On this basis available experimental data of earlier FZK tests [8] were analyzed and reinterpreted. As a result, some discrepancies between optical observations (revealing the oxide layer growth at a late stage of the process) and melt chemical composition measurements (revealing continuous dissolution of the oxide layer in this stage) were resolved. Recommendations for future test conduction in order to extract form the obtained data important model parameters (such as solid state diffusion and liquid phase mass transfer coefficients) were elaborated.

References

- P. Hofmann et al., Dissolution of solid UO₂ by molten Zircaloy and its modeling", Proc. IAEA/NEA Symp. on "Severe Accidents in Nuclear Power Plants", Sorrento, 1988, IAEA-SM-296/1 (1988)
- 2. P. J. Hayward et al., Solubility limit for UO₂ dissolution by molten Zircaloy; Experiments at 2100°C, Interim Report (1997)
- 3. P. Hofmann et al., Dissolution of solid ZrO₂ by molten Zircaloy, KfK-4200 (1987) p. 9
- 4. P. J. Hayward, I. M. George, Dissolution of ZrO₂ in molten Zircaloy-4, to be published (1997)
- 5. A.V.Berdyshev, M.S.Veshchunov, Analytical Work on the Modeling of the UO₂ and ZrO₂ Dissolution by Molten Zircaloy, Interim Report, 1997, NSI-SARR-51-97.
- 6. M.S.Veshchunov and P.Hofmann, J. Nucl. Mater. 209(1994)27.
- 7. M.S.Veshchunov, P. Hofmann and A.V. Berdyshev, J. Nucl. Mater. 231(1996)1.
- P. Hofmann, Ch. Adelhelm, H. Uetsuka, H. Zimmermann, J. Burbach, G. Gausmann, D. Kempf, K. Kurz, H. Metzger, G. Streib, Jahresbericht 1985, KfK 4000(1986)4200-56.

(H. Steiner, IMF III)

The most important mechanical effect in the single rod quench tests is the occurrence of through-wall cracks observed mainly for thick oxide scales in water quenched and steam cooled tests. A few examples of through-wall cracks were also detected with 100 µm oxide scales. The calculations with WSPAN suggest that the stress pulse occuring during the phase change in the oxide is the cause for the through-wall cracks. There is also direct experimental evidence which is supporting this interpretation (some oxidation of the Zry, disturbance of inductive heating of the clad by the cracks).

But the precise mechanism by which the through-wall cracks form is still a question of research. One feasible mechanism is the propagation of surface flaws or cracks in the oxide scale which reach into the tensile stress region. In this way one should obtain also normal cracks in the oxide going only to the interface if the energy release rate is sufficiently high for cracking in the oxide scale but not high enough to lead to substrate damage. In steam cooled tests only through-wall cracks are observed and no other mechanical effects. This is a strong indication to discard this mechanism. Also, for such a mechanism to work, cracks or flaws of sufficient depth in the oxide scale must exist. It is evident from metallographic examinations of test samples that the oxide scales were in a very good mechanical condition, with flaw sizes much lower than 10 μ m. This is due to the high oxidation temperature of 1400 °C. At such a temperature creep rates in the oxide are presumably sufficient for effective relaxation of oxidation stresses.

Under the high strain rates during phase change in the oxide, α -Zr(O) behaves in a brittle elastic manner. This would lead to high tensile stresses in the α -Zry and the through-wall cracks could then initiate from flaws pre-existing in the α -phase. Indeed, the metallographic examinations revealed that the occurrence of through-wall cracks is linked to cracking in the α -Zry, also the through-wall cracks observed in PTE are all opening towards the inside of the cladding. ZrO₂ and α -Zr(O) are known to be rather brittle at low temperatures. At higher temperatures and under low strain rates both phases are expected to have some ductility. But the regime of high strain rates which should be relevant at the phase transition has never been investigated.

Calculations with WSPAN under the assumption of a purely elastic α -Zr(O) yielded the stress values given in Table II. Normally, the flaw size should scale with the grain size.

oxide scale	σ _θ [MPa]	σ _θ [MPa]	σ _θ [mPa]
thickness [µm]	β-Zry	α-Zry	ZrO ₂
300	-	1600	- 2150
200	2*	(1850)*	(- 1950)*
150 200	400 300 (2)*	1200 900 (1400)*	- 2500 -2850 (- 2400)*

Table II:	Stresses in the cladding for purely elastic behaviour of α -Zr(O),
	T ≈ 1150 °C

*plastic flow in β-Zry

But for the basaltic grains in the α -phase grain size is very large and cannot give us a clue on the flaw size. Also, it is difficult to obtain values from the metallographic examinations, as the α -phase has suffered severe degradation from the quench tests. If 10 µm is a realistic value for the flaw size, then critical stresses are at about 1400 MPa. The stresses in the α -phase calculated with WSPAN under the premises of a purely elastic behaviour are above this value. Thus, cracking in the α -phase is to be expected.

The cracks, which have been initiated in the α -Zry, could propagate right through the oxide scale, if part of the oxide is still above phase change and therefore in a tensile stress state. Otherwise, the cracks stop in the oxide scale or even at the interface. The cracking of the oxide scale could then be completed at lower temperatures when high tensile stresses arise in the scale by the radial temperature gradient. These different mechanisms might explain the different oxidation state of the through-wall crack faces. Many examples for crack arrest in the oxide phase and even in the β -phase have been found in PTE.

With thick oxide scales, the inner part of the cladding consists only of α -Zry and then there is a high probability for the formation of through-wall cracks. With oxide scales of 100 µm there is still a layer of β -Zry in the cladding. The ductile nature of this layer should then prevent the formation of through-wall cracks. But with a high oxygen content the β -phase is also rather brittle. This would explain why also some through-wall cracks have been observed in test samples with 100 µm oxide scale thickness. Furthermore, some examples for cracks initiated in the α -phase propagated into the β -phase and arrested there, have been found in PTE.

According to the findings of PTE, cracks appear in the α -phase at layer thickness values of about 20 - 25 μ m. Under the assumption of elastic behaviour of the oxygen-stabilized α -Zry at phase change the code WSPAN calculates tensile stresses of about 2000 MPa in this phase, rather independent of the layer thickness. For a layer thickness of about 20 μ m the critical stress for tunneling cracks is at about 2100 MPa, a value compa-

rable with the calculated elastic stress level. For layers of about 10 μ m the critical stress (\approx 3000 MPa) is far above the elastic stresses. Thus, no cracking is to be expected in this case. This interpretation is in accord with the findings of PTE.

The number of cracks increases with decreasing T_0 temperature. With very low T_0 temperature ($T_0 \leq 1000$ °C) the fuel rods are severely damaged and they could not be withdrawn from the test section in an intact form. Well, the stress pulse in the oxide scale occuring upon phase change should be rather independent of the T_0 temperature. But the amount of subcooling could depend on this parameter. This would then change the propagation velocity of the phase change and consequently the strain rates in the α -Zry. Thus, with higher T_0 temperature the α -Zry could still have some ductility.

There was no spalling observed in steam cooled tests and only a rather small amount in water quenched tests with oxide scales of 100 μ m. For thick oxide scales of 300 μ m the radial stress profile in the oxide is unfavourable for spalling in water quenched tests. In order to have spalling, first normal cracks going to the interface must be formed. With a highly compressive stress state in the inner part of the oxide scale, the normal cracks cannot reach the interface.

In thin oxide scales, at temperatures below about 1000 °C the stress level increases with ~1/h, whereas the critical stress should increase with ~1/ \sqrt{h} . Thus, there could be a critical scale thickness below which we would obtain extensive cracking and eventually spalling of the oxide scale. With the high oxidation temperature, the flaw size in the oxide seems to be very low. This means high critical stress values. This could explain why even in very thin oxide scales no cracking originating from surface flaws has been observed.

The spalling observed in water quenched tests with 100 μ m oxide scales is most probably due to local effects, like cold spots on the cladding. In steam cooled tests local effects should be unimportant. That spalling was so unimportant in the single rod quench tests might be due to the high oxidation temperature. It would be very interesting to study the effect of lower oxidation temperatures on the mechanical behaviour of the oxide scale.

In this work interest focused on cracking mechanisms under tensile stresses. But at phase change the outer part of the oxide scale is in a high compressive stress state. Thus, azimuthal crack propagation is in principle possible via a buckling mechanism. The critical buckling stress for a clamped flat circular plate is given by :

$$\sigma^{c} = 14,68 \cdot \frac{E}{12 (1-v^{2})} \cdot \left(\frac{t}{a}\right)^{2}$$

t = thickness of the buckling layer

a = crack radius

With stress levels of about 2000 MPa in the outer oxide scale, the thickness of the buckling layer is bounded by:

t < 0,15 • a

There are some indications from PTE that buckling of thin surface layers of the oxide scale has indeed occured.

32.21.09 Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen

<u>Probabilistische Abschätzung von Unfallfolgen und rechnergestützte</u>
<u>Entscheidungshilfeinstrumentarien für den Katastrophenschutz</u>
(J. Ehrhardt, D. Faude, F. Fischer, I. Hasemann, A. Lorenz, J. Päsler-Sauer,
T. Schichtel, O. Schüle, C. Steinhauer, INR; G. Benz, Ch. Haller, M. Rafat,
T. Sauder, D.T.I. GmbH)

Abstract

Probabilistic Accident Consequence Assessments

After the release of the mainframe version 95/1 and the PC-Version 2.0 of the program package COSYMA, both software products were distributed to 20 and 100 users, respectively, together with the updated documentation. Work has been started to implement the mainframe COSYMA on UNIX workstations as a consequence of the shutdown of the FZK mainframe computer IBM 3090. The conditions, time schedules and responsibilities for performing sensitively and uncertainty analyses with COSYMA have been negotiated and fixed with the partner institutes University of Delft, NL and NRPB, UK.

Decision Support Systems for Off-Site Emergency Management

With support of the BMU and the European Commission, RODOS, the real-time on-line decision support system for nuclear emergency management, has been further developed with the improved pre-operational version PV 3.0 being ready by mid 1997. With the start of the 4th Framework Programme of the European Commission at the beginning of 1996, some 20 institutes on the EU and about the same number of institutes in Central and Eastern Europe including the former Soviet Union cooperate in the RODOS project until mid 1999. Two training courses with the contract partners were organised at FZK in February and November 1996 to familiarise the future users with system functions, models and data processing, aiming at enhancing and customising the RODOS system in the partner countries for operational use.

1. Probabilistische Abschätzungen von Unfallfolgen

Nach Fertigstellung der Großrechnerversion 95/1 und der PC-Version 2.0 des in Zusammenarbeit mit dem National Radiological Protection Board (NRPB), UK, entwikkelten Programmsystems COSYMA wurden beide Softwarepakete zusammen mit der aktualisierten Dokumentation an 20 bzw. 100 Benutzer innerhalb und außerhalb der EU verteilt.

Wegen der Abschaltung des FZK-Großrechners IBM 3090 (Betriebssystem MVS) Mitte 1997 muß das Programmsystem COSYMA einschließlich seiner Auswerteprogramme und Graphiksoftware zum Betrieb auf UNIX Workstations angepaßt werden. Die Arbeiten hierzu wurden bereits begonnen.

Im Rahmen des Vertrags FI4P-CT95-0006 mit der Europäischen Kommission (EK) werden in Abstimmung mit der Universität Delft, NL, und dem NRPB in den Jahren 1997 und 1998 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Programmsystem COSYMA durchgeführt. Die Randbedingungen, die Zeitlaufpläne und die Verantwortlichkeiten für die Rechenläufe mit COSYMA und deren Auswertungen wurden festgelegt und dokumentiert.

2. Rechnergestützte Entscheidungshilfeinstrumentarien für den Katastrophenschutz

2.1 Durchgeführte Arbeiten

Mit Unterstützung des BMU (Vorhaben St. Sch. 1054/1) und der EK (Verträge FI4P-CT95-0007 und FI4C-CT96-0006) wird das Entscheidungshilfesystem RODOS für den anlagenexternen Notfallschutz nach kerntechnischen Unfällen bis zur Einsatzreife entwickelt. Im RODOS Projekt sind im 4. Rahmenprogramm der EK seit Anfang 1996 etwa 40 Vertragspartner in der EU, den mittel- und osteuropäischen Staaten und den GUS Republiken mit FZK/INR als Koordinator involviert. Die Vertragsverhandlungen über einen weiteren INCO-COPERNICUS Vertrag mit der Zielsetzung der Implementierung des RODOS Systems in das nationale Katastrophenschutzmanagement osteuropäischer Länder beginnend Anfang 1997 wurden erfolgreich abgeschlossen. In diesem Zusammenhang müssen auch zwei weitere Projekte der EK im Rahmen von TACIS/PHARE/ECHO Programmen gesehen werden, die die beschleunigte Implementierung von RODOS in Notfallschutzzentren der Ukraine und Ungarn, sowie die Errichtung eines Informationsnetzes zwischen ost- und westeuropäischen Staaten für den schnellen Austausch von radiologischen Informationen zur Zielsetzung haben. Die finanzielle Förderung aus allen Verträgen erstreckt sich bis Mitte 1999.

Die technischen, administrativen und finanziellen Aspekte der zukünftigen Nutzung von RODOS in Katastrophenschutzzentralen wurden in verschiedenen Gremien des Bundes und der Länder diskutiert. Insbesondere wurde von Fachausschüssen des Länderausschusses für Atomkernenergie der Beschluß gefaßt, den BMU aufzufordern, ein Gesamtkonzept für die Errichtung und den dauerhaften Betrieb des RODOS Systems an zentraler Stelle einschließlich der Kostenfrage zu erarbeiten und mit den zuständigen Landesbehörden abzustimmen.

Mit Ende des Jahres 1996 sind die Arbeiten zur Fertigstellung der ersten operationellen RODOS Version PV3.0 weitgehend abgeschlossen. Zu den wesentlichen Arbeiten am Betriebsabwicklungssystem gehörten Entwurf, Implementierung und Test der Real-time Datenbank und Bereitstellung der zugehörigen Softwarewerkzeuge zur beidseitigen Adaptierung von SQL-C Programmen in ALLBASE-SQL Syntax an die INGRES-SQL Syntax. Die Anzeige und graphische Darstellung von Real-time Daten wurde entwickelt. Weiterhin wurde eine anpassungsfähige Benutzerschnittstelle zur Eingabe und Modifizierung der Initialisierungsdaten der externen Programme bereitgestellt. Die Client- und Server-Software zum Transfer von on-line Daten auf verteilte Rechner wurde entwickelt und mit den FZK-Meßmast-Daten getestet. Darüber hinaus wurde die Funktionalitäten des Betriebsabwicklungssystems im Hinblick auf neu hinzukommende Anforderungen modifiziert und verbessert. Eine erste Version des Systemhandbuchs liegt vor.

Als Erweiterung der in RODOS integrierten Graphiksoftware wurde in 1996 das "Desktop-GIS" ArcView beschafft. Die in ArcView integrierte Scriptsprache Avenue erlaubt seine Anpassung an RODOS. Gleichzeitig wurden die Schnittstellen von RoGIS, dem internen geographischen Informationssystem von RODOS, derart erweitert, daß ein Datenaustausch zwischen RoGIS und ArcView möglich ist. Flächendeckende geographische Daten von Deutschland im Maßstab 1:25000 wurden in ArcInfo- (und damit ArcView-) kompatiblen Formaten beschafft. Sie umfassen u.a. das Straßennetz, Flächennutzungsdaten, administrativ-politische Grenzen und Punktinformationen zu Sondereinrichtungen. Sie werden ergänzt durch digitale Höhendaten mit 1km Gitterauflösung.

Inhaltlich wurde eine neue Version des atmosphärischen Ausbreitungsmodells ATSTEP erstellt und in RODOS integriert; mit dieser Version kann der Transport in räumlich und zeitlich variablen Windfeldern berechnet werden. Weiterhin wurde die Modellierung der trockenen Ablagerung auf verschiedene Bodennutzungs- und Bewuchsarten erweitert, um eine bessere Ankopplung an das Nahrungskettenmodell in ECOAMOR, dem radioökologischen Programmodul, zu erzielen. Mit den Arbeiten zur Implementierung des dosisratenabhängigen Modells zur Berechnung deterministischer Gesundheitsschäden wurde begonnen. Test- und Vergleichsrechnungen mit dem in der Phase der Integration befindlichen deutsch-französischen Ausbreitungsmodells (RIMPUFF) wurden durchgeführt. Das deutsche und das englischsprachige Benutzerhandbuch wurden angepaßt und die Modell-, Funktions- und Schnittstellenbeschreibungen der Module ATSTEP und EMERSIM weitgehend fertiggestellt.

Das Evakuierungssimulationsmodell EVSIM wurde bezüglich seiner Benutzeroberfläche verbessert. Insbesondere wurde die Steuerung des Simulationsablaufs für den Benutzer transparenter gestaltet. Das gesamte Programm wurde weiter modularisiert und mit Standardprüfsoftware getestet. Es wurde mit der Entwicklung von Programmen begonnen, die es ermöglichen, Verkehrsnetzdaten nicht wie bisher aus einer von Hand editierten Datei, sondern aus geographischen Datenbanken einzulesen. Die Dokumentation wurde durch ein Modellbeschreibung in deutscher Sprache ergänzt.

Die Modellkette, die den Run-off von Radionukliden im Einzugsgebiet großer Flüsse, den Transport in den Flußsystemen und das Verhalten in Seen beschreibt, ist in einer ersten Version fertiggestellt, an RODOS angekoppelt aber noch nicht vollständig integriert. Zusammen mit den Vertragspartnern KEMA(NL), SPA TYPHOON (Rußland) und IMMS CC (Ukraine) wurden Einzelmodelle der Modellkette am Rheinhochwasser 1993, am Fluß Ilja und auch im Rahmen von BIOMOVS II getestet.

Im Februar und November 1996 wurden zwei RODOS Benutzertreffen mit den Vertragspartnern aus Ost- und Westeuropa organisiert. Zielsetzung war die Schulung in der Benutzung des RODOS Systems und seiner Software-Werkzeuge zur Integration externer Programme. Die jeweils aktuelle RODOS Version (derzeit PRTY 2.1) wurde an die Vertragspartner weitergegeben. Im April 1996 fand in der FTU der erste "Computer-Based Training Course on Off-Site Emergency Response to Nuclear Accidents" statt, bei dem das RODOS System als Trainingsinstrument eingesetzt wurde. Weitere Kurse befinden sich in Vorbereitung. Zwei weitere der in 1994 begonnenen Expertenbefragungen unter Benutzung von RODOS fanden mit englischen und französischen Katastrophenschutzbehörden statt und wurden vom FZK RODOS Team unterstützt.

2.2 Geplante Weiterarbeit

Für 1997 ist vorgesehen, die Pilotversion RODOS-PV3.0 bis zum operationellen Einsatz fertigzustellen. Die Diskussion mit zukünftigen Benutzern sowohl während der geplanten Trainingskurse als auch im direkten Dialog bei Einzelzugriff auf das RODOS-System wird wesentlich zur Verbesserung der Benutzeroberfläche beitragen. Nachdem auch in 1996 die On-Line Ankopplung der Prototypversion an meteorologische und radiologische Datennetze aufgrund von datentechnischen Schwierigkeiten auf seiten der KFÜs nicht erfolgte, wird dies ein Schwergewicht der Arbeiten in 1997 bilden.

Veröffentlichungen

Ehrhardt, J.; Shershakov, V.M. Real-time on-line decision support system (RODOS) for off-site emergency management following a nuclear accident Joint study project No. 1 - Final Report - EUR 16533 EN

Kelly, G.N.; Ehrhardt, J.; Shershakov, V.M. Decision support for off-site emergency preparedness in Europe Radiation Prot. Dosim., Vol. 64, No 1/2,pp 129 - 141 (1996)

Ehrhardt, J.; Shershakov, V.M.; Zheleznyak, M.; Mikhalevich, A. RODOS: Decision support system for off-site emergency management in Europe Proceedings of the "1st Int. Conference of the EC, Belarus, Russian Federation and Ukraine on the Radiological Consequences of the Chernobyl Accident", Minsk, 18 -22 March 1996, EUR-Bericht 16544, pp. 1087 - 1096

Ehrhardt, J.; Shershakov, V.M.; Zheleznyak, M.; Mikhalevich, A.

The implementation of RODOS in Belarus, Russia and Ukraine and future perspectives

Proceedings of the "1st Int. Conference of the EC, Belarus, Russian Federation and Ukraine on the Radiological Consequences of the Chernobyl Accident", Minsk, 18 - 22 March 1996, EUR-Bericht 16544, pp. 1097 - 1108

Ehrhardt, J.; Weis, A.

Development of RODOS, a comprehensive real-time on-line decision support system for nuclear emergency management in Europe - Final Report for Contract FI3P-CT92-0036 FZK-Bericht 5772

Ehrhardt, J.

The RODOS System: Decision support for off-site emergency management in Europe

4th Int. Workshop on Real-time Computing of the Environmental Consequences of an Accidental Release from a Nuclear Installation, Aronsborg, Schweden, 6.-11.10.1996

Schüle, O.; Rafat, M.; Kossykh, V. The software environment of RODOS Proceedings of the "1st Int. Conference of the EC, Belarus, Russian Federation and Ukraine on the Radiological Consequences of the Chernobyl Accident", Minsk, 18 -22 March 1996, EUR-Bericht 16544, pp. 1109 - 1118

Schüle, O., Rafat, M. The software framework of RODOS 4th Int. Workshop on Real-time Computing of the Environmental Consequences of an Accidental Release from a Nuclear Installation, Aronsborg, Schweden, 6.-11.10.1996

32.21.10 Beteiligung am PHEBUS-Projekt

Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse

(W. Hering, W. Sengpiel, S.O. Smith, IRS)

Abstract:

The participation of IRS in the PHEBUS project covers

- supporting pre-calculations for the preparation of the experiments in order to define the experimental boundary conditions,
- analyses of the experiments and interpretation of the experimental results.

The analyses of the mechanical and physico-chemical processes of the damage propagation in the fuel rod bundle under the conditions of a severe core malt accident are of special interest. Up to now, a number of post-test analyses have been done for the experiments FPT0 and FPT1, and the development of models has been initiated which are important to take into account special features of the PHEBUS test facility, e.g. the heat transport through the shroud of the PHEBUS test bundle. Furthermore, the investigation of the influence of the burnupdependent physico-chemical processes onto the bundle degradation has been initiated. The code systems SCDAP/RELAP5 and ICARE2 are the basic tools for the analyses.

Because of the proximity in substance to the PSF project 32.01.08 (Untersuchung der Kernzerstörung/contribution of IRS) the PHEBUS activities are reported there in the context of code validation effort.

Kurzfassung:

Die Beteiligung des IRS am PHEBUS-Projekt erstreckt sich auf

- unterstützende Vorausrechnungen im Zuge der Vorbereitungen der Experimente zur Festlegung der Versuchsbedingungen,
- Analysen der Versuche und die damit einhergehende Ergebnisinterpretation.

Von Interesse ist insbesondere die Analyse der mechanischen und physico-chemischen Prozesse bei der Schadenspropagation im Brennstabbündel unter den Bedingungen eines Kernschmelzunfalles. Der Schwerpunkt der Arbeiten lag bisher auf Nachrechnungen der Versuche FPT0 und FPT1 und auf der Verbesserung von Rechenmodellen zur Berücksichtigung PHEBUS-spezifischer Anlageneigenschaften. Das betrifft die Modellierung des Wärmetransports durch den das PHEBUS-Bündel einhüllenden Shroud. Ein weiteres wichtiges Gebiet betrifft die Untersuchung der Einflüsse des Brennstoffabbrandes auf das Brennstabverhalten und auf die Prozesse der Materialverlagerungen. Zum Einsatz kommen die Rechenprogramme SCDAP/RELAP5 und ICARE2.

Da eine sehr enge thematische Anbindung an das Vorhaben 32.21.08 (Untersuchung der Kernzerstörung/IRS-Arbeiten) besteht, wird dort über die Arbeiten zu PHEBUS unter dem Aspekt der Codevalidierung berichtet.

32.22 INNOVATIVE SYSTEME

32.22.02 Passive Nachwärmeabfuhr

I. Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen

(G. Grötzbach, M. Wörner, T. Ammann, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr,Y. Kimhi, W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye, IRS; M. Alef, St. Genz, A. Hennemuth,G. Janßen, M. Linder, D. Seldner, HIK)

Abstract

The turbulence model developed for the analysis of heat transport processes by means of natural convection was integrated into the FLUTAN code. The results of first applications of the programme on the model experiment SUCO-2D were in good agreement with the experiment, but only in those cases where the thermal conductivity of the surrounding structures was considered.

Zusammenfassung

Das für die Analyse von Wärmetransportvorgängen durch Naturkonvektion entwickelte Turbulenzmodell wurde in der Arbeitsversion des Thermofluiddynamikrogrammes FLUTAN verfügbar gemacht. Es beschreibt den Impulsaustausch mit geeigneten Varianten des k-ε-Modells und den Wärmeaustausch durch ein Modell zweiter Ordnung und wurde für Zwangs- und Mischkonvektion verifiziert. Zur Vorbereitung effizienter numerischer Analysen von Varianten eines Sumpfkühlkonzeptes wurde eine Methode zur lokalen Verfeinerung von strukturierten Gittern entwickelt und ihre Einsatzfähigkeit nachgewiesen. Erste Anwendungen des Programms auf das zweidimensionale Modellexperiment SUCO-2D zur Analyse der Sumpfkühlung erbrachten mit dem Experiment vergleichbare Ergebnisse nur, wenn die Wärmeleitung in den umgebenden Strukturen mitberücksichtigt wurde. Damit sind einige der wesentlichen Vorarbeiten für die anstehende Analyse des dreidimensionalen Experimentes und der Strömung im Sumpf des Reaktorgebäudes abgeschlossen.

Die begleitenden Arbeiten zur Verbesserung der Turbulenzmodelle für stabil und instabil geschichtete Naturkonvektion wurden weitergeführt. Insbesondere wurden Modellansätze aus dem neuen Turbulenzmodell von FLUTAN durch Vergleich mit Simulationsergebnissen des Rechenprogramms TURBIT genauer untersucht. Für Rayleigh-Bénard-Konvektion konnten die Ansätze in der Dissipationsgleichung von Temperaturschwankungen bestätigt werden. Neue direkte numerische Simulationen von Turbulenz in Kernschmelze bei relativ hohen Rayleigh-Zahlen bestätigen die schon früher bei kleinen Rayleigh-Zahlen gezogene Schlußfolgerung, daß diese Konvektionsart nicht mit ausreichender Genauigkeit mit gängigen Turbulenzmodellen beschrieben werden kann, sondern nur mit Modellen zweiter Ordnung. Die Simulationen stellen die einzigen zuverlässigen Daten bereit, mit denen Turbulenzmodelle für diesen Strömungstyp entwickelt und kalibriert werden können.

Aufbauend auf den in TURBIT verwendeten Methoden und den Kenntnissen aus dem Experiment TWOFLEX wurde ein Konzept für eine detaillierte, lokale und zeitabhängige Modellierung turbulenter Zweiphasenströmung erarbeitet. Es ist geplant, unter Verwendung von einer weiterentwickelten Version von TURBIT die Turbulenz um wenige Blasen genauer zu studieren und aus diesen Simulationen, wie auch aus den im TWOFLEX-Umfeld bereitzustellenden Erkenntnissen zur Blasenströmung Feinstrukturmodelle zu entwickeln. Diese sollen schließlich in einem gerade ausgewählten Code zur Beschreibung der Konvektion in komplexen Geometrien für Grobstruktursimualtionen von Zweiphasenströmungen zur Anwendung kommen.

Rechenprogramm FLUTAN für thermo- und fluiddynamische Anwendungen

Das Rechenprogramm FLUTAN wird bei FZK für die Analyse der Nachwärmeabfuhr in neu konzipierten Reaktorsystemen weiterentwickelt [1] und eingesetzt. Entsprechend beziehen sich die Arbeiten zu diesem Arbeitsschwerpunkt hauptsächlich auf die Entwicklung von physikalischen Modellen, die für Anwendungen auf Naturkonvektion geeignet sind, wie z. B. auf das Turbulenzmodell für Auftriebsströmungen TMBF [2,3], auf die Verbesserung der Effizienz der verwendeten numerischen Methoden und auf die Bereitstellung von Die in den Vorjahren begonnenen Weiterentwicklungen von FLUTAN haben folgenden Stand erreicht: Die zwei neu implementierten k- ε - σ_t Turbulenzmodelle für kleine Reynolds-Zahlen wurden unter Verwendung von Ergebnissen aus direkten numerischen Simulationen überprüft [4]. Das k- ε - σ_t Modell nach Nagano ist besonders für Wandströmungen geeignet, weil es die vom Wandabstand abhängigen Korrekturfunktionen enthält. Das zweite implementierte k- ε - σ_t Modell nach Launder sollte eine größere Allgemeingültigkeit besitzen, da auch eine Relaminarisierung in der wandfernen Kernströmung berücksichtigt werden kann. Als Testbeispiel diente die turbulente Zwangskonvektion zwischen parallelen Platten mit und ohne Wärmeübergang an den Wänden. Die Nachrechnung der Simulationsdaten zeigt, die Modelle sind richtig implementiert und liefern zufriedenstellende Ergebnisse. Abweichungen zwischen den Ergebnissen der Modelle ergeben sich beim berechneten turbulenten Wärmetransport. Diese Abweichungen sind mit den unterschiedlichen Modellierungsansätzen erklärbar.

Das im Vorjahr theoretisch entwickelte und analysierte Verfahren zur lokalen Verfeinerung eines strukturierten Gitters wurde in FLUTAN in den Impuls-, der Druck-, der Enthalpieund den Transportgleichungen des k-ε Turbulenzmodells implementiert [5]. Es wurde an verschiedenen zweidimensionalen Experimenten erfolgreich verifiziert. An der Anbindung und Optimierung der im HIK und an der University of Virginia entwickelten iterativen Poisson-Gleichungslöser wird noch gearbeitet. Mit diesen Lösern werden später die Verifikation des Verfahrens an dreidimensionalen Strömungsaufgaben und Untersuchungen zur Effizienz des Verfahrens ebenso möglich sein wie technische Anwendungen. Eine Effizienzsteigerung für die teilweise sehr rechenintensiven Simulationen wird zudem über eine Entkopplung der Zeitintegration der verschiedenen Transportgleichungen angestrebt. Die theoretischen Untersuchungen hierzu wurden abgeschlossen [6] und die Umsetzung der Entkopplung der Zeitintegration in den Transportgleichungen von Impuls und Enthalpie realisiert. Das Potential einer weiteren Beschleunigung des Rechenprogramms wurde durch Entwicklung und Tests von verschiedenen Konzepten zur Parallelisierung des Rechenprogramms im Zusammenarbeit mit dem HIK untersucht. Bisheriger Schwerpunkt der Tätigkeiten des FLUTAN-Entwicklungsteams im IRS war die Weiterentwicklung und Verwaltung des Rechenprogramms [7] und die Hilfestellung für die Anwender im IATF, die unter 32.21.05 Untersuchungen für das PASCO-Experiment mit FLUTAN durchführen [8], und für die externen Anwender. Nachdem die Weiterentwicklungen von FLUTAN weit fortgeschritten sind, ist es im IRS jetzt möglich, Anwendungsrechnungen zur Untersuchung der Sicherheitseigenschaften von neuen Reaktorkonzepten durchzuführen. In einem ersten Schritt konzentrieren sich die Arbeiten zur Zeit auf die Nachrechnung und Interpretation der zweidimensionalen Modellversuche SUCOS-2D aus dem IATF zum einphasigen Langzeitverhalten eines optionalen Sumpfkühlkonzepts für den Europäischen Druckwasserreaktor EPR. Anschließend soll das dreidimensionale Experiment mit Hilfe des neu implementierten Verfahrens zur lokalen Verfeinerung untersucht und die Interpretation der Bedingungen im Reaktor vorgenommen werden.



Abb. 1: Mit FLUTAN berechnetes momentanes Isothermenfeld und Strömungswege in SUCOS-2D. Die Rechnung berücksichtigt den gesamten Wärmetransport im Fluid und die Wärmeleitung in den schraffierten Strukturen.



Abb. 2: Wärmestromverteilung am Fluidrand der Heizplatte zu verschiedenen Zeiten.

Im Experiment SUCO-2D wird Wasser über einer unten positionierten Heizplatte aus Kupfer, die die Kernschmelze simuliert, mit dem Wärmestrom Q beheizt und durch drei horizontale bzw. vertikale Wärmetauscher mit -Q₁, -Q₂ und -Q₃ gekühlt, Abb. 1. Hier wurde der spezielle Fall mit zwei Kühlern (-Q1 und -Q3) nachgerechnet. Die Kupferplatte wird an der Unterseite mit einem konstanten Wärmestrom von Q₀ = 3091 W/m² beheizt. Erste phänomenologische numerische Untersuchungen haben gezeigt, daß erhebliche Ansprüche an die Modellierung des Wärmetransports in den Strukturen und an die räumliche Diskretisierung des Fluidraumes zu stellen sind. Als Folge dessen müssen die Kühler durch ein Wärmetauschermodell repräsentiert werden. Für den Wärmetransport in den Strukturen ist ein dreidimensionales Wärmeleitungs-Strukturmodell für FLUTAN entwickelt worden. Der damit berechnete Wärmefluß Q/Q₀ am Fluidrand der Kupferplatte zeigt über seine stark ortsabhängige Verteilung die Notwendigkeit des Einsatzes eines solchen Strukturmodells, Abb. 2. Der Wärmeübergang in das Fluid ist rechts im Bereich des Rezirkulationsgebietes groß, und links ebenso, wo von Zeit zu Zeit vom horizontal liegenden Kühler kalte Fluidballen herunterfallen und zu starken Schwankungen im Wandwärmestrom führen, Abb. 1 und 2. Um die Grenzschichten der wandnahen Strömung optimal auflösen zu können, ist eine feine räumliche Diskretisierung notwendig. Die Maschenweite der Zellen variiert von 0,5 mm in Wandnähe bis 5 mm im Innern. Die Rechnungen wurden ohne Turbulenzmodell durchgeführt, da die Strömung laminar ist. Als Differenzenverfahren für die konvektiven Terme wurde sowohl das Upwind-Verfahren erster Ordnung als auch das LECUSSO Verfahren, für das inzwischen eine überarbeitete Wandformulierung zur Verfügung steht, benutzt.

In der Rechnung stellt sich durch Naturkonvektion eine Zirkulation ein, wie sie auch im Experiment beobachtet wird. Durch die asymmetrisch angeordneten Wärmetauscher wird eine Grundströmung im Uhrzeigersinn induziert, Abb. 1. Die berechnete vertikale Verteilung der horizontalen Geschwindigkeit U nahe der Stufe bei x=47,6 cm zeigt, daß das abgekühlte Fluid vom vertikalen Schacht strahlförmig zur Kupferplatte strömt, Abb. 3. Außerhalb dieses Strahles strömt das Fluid zurück, d.h. es bildet sich links der Stufe eine Rezirkulation aus. Die vertikale Verteilung von U zwischen Heizplatte und Kamin bei x=10 cm läßt ein Grenzschichtprofil erkennen. Für y>12 cm nimmt U positive Werte an, weil das Fluid im oberen Kaminteil zum horizontalen Wärmetauscher strömt. Beide berechneten Geschwindigkeitsverteilungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Meßwerten von [9].

Die angekündigte Reduktion der von HIK unter dem MVS-Betriebssystem angebotenen Rechenleistung erfordert es, ein neues grafisches Analysesystem für FLUTAN unter UNIX



Abb. 3: Vertikale Verteilungen der horizontalen Geschwindigkeit. Vergleich zwischen Meßwerten [9] und FLUTAN-Rechnungen.

verfügbar zu machen. Als Schnittstelle zu neuen Grafikprogrammen wurde das im INR entwickelte VISART-Fileformat ausgewählt. Die früher bereits vorgenommene einfache Implementierung dieser Schnittstelle in FLUTAN wurde um alle wichtigen thermofluiddynamischen Ergebnisse, besonders der neuen Turbulenzmodelle, ergänzt. Das VISART-Format wird sowohl für die Visualisierung mittels AVS als auch für den Datentransfer zu anderen Grafikprogrammen verwendet, die über die übliche Rechteck- bzw. Quadergeometrie die in FLUTAN typische komplexe Geometriestruktur darstellen können.

Numerische Simulation turbulenter Naturkonvektion

Die Arbeiten am Rechenprogramm TURBIT zur numerischen Simulation von Turbulenz in Kanalströmungen [10] dienen dazu, die im Rechenprogramm FLUTAN verwendeten Turbulenzmodelle auf eine breitere Basis zu stellen. Insbesondere soll mit Hilfe der Ergebnisse aus numerischen Simulationen der Anwendungsbereich von Turbulenzmodellen auf Naturkonvektion in verschiedenen Fluiden überprüft und methodisch erweitert werden [11]. Schließlich soll eine Detailabstimmung der Koeffizienten der Turbulenzmodelle vorgenommen werden.

Die von TURBIT mit der direkten Simulationsmethode, bei der alle Skalen von Geschwindigkeits- und Temperaturfeld durch das Maschennetz aufgelöst werden, zuvor bereitgestellte Datenbasis für Rayleigh-Bénard-Konvektion wurde weiter analysiert. Insbesondere wurde die Transportgleichung für die Dissipation der Varianz der Temperaturschwankungen, die z.B. auch in FLUTAN im Rahmen des erweiterten Wärmestromturbulenzmodells zweiter Ordnung gelöst wird, detailliert untersucht. Die Analyse der TURBIT-Ergebnisse hat gezeigt, daß Modelle für diese Gleichung aus der Literatur für Naturkonvektion zufriedenstellende Ergebnisse liefern [12]. Für Fluide mit kleinen Prandtl-Zahlen sind in dieser Transportgleichung also keine besonderen Anpassungen der Modellkoeffizienten notwendig.

Eine aktuelle technologische Fragestellung zur Reaktorsicherheit ist, ob nach einem schweren hypothetischen Störfall die Kernschmelze im unteren Teil des Reaktordruck-

behälters durch Naturkonvektion gekühlt werden kann. In diesem Zusammenhang sind grundlegende Untersuchungen der Konvektion in Fluidschichten mit interner Wärmequelle von Interesse, um z.B. die physikalischen Modelle für überwiegend stabil geschichtete Konvektion zu ertüchtigen. Mit TURBIT wurden frühere Arbeiten zu dieser Konvektionsart wieder aufgegriffen und neue direkte numerische Simulationen der Konvektion in einer horizontalen Fluidschicht mit volumetrischer Wärmeguelle bei isothermer oberer und unterer Wand durchgeführt [13]. Die relevante dimensionslose Kennzahl des physikalischen Problems ist die interne Rayleigh-Zahl Ra, Gegenüber den früheren Simulationen konnte Ra, um einen Faktor 250 gesteigert werden. Mit der höchsten bisher jemals direkt simulierten Rayleigh-Zahl von Ra_l =10⁹ wurde damit ein deutlicher Schritt hin zu reaktortypischen Bedingungen von Ra_L >=10¹² getan. Die Abbildung 4 zeigt einen Vergleich der mit TURBIT für verschiedene Werte der internen Rayleigh-Zahl berechneten Nußelt-Zahlen an der unteren und oberen Wand mit experimentellen Ergebnissen. Die Wärmeübergangszahlen dieser neuen Simulationen belegen, daß bei diesen Konvektionsbedingungen der turbulente Beitrag zum Wärmetransport um mehr als eine Größenordnung den molekularen Beitrag übersteigt. Damit ist der simulierte Turbulenzzustand von einer Größe, die bei der Auswertung von Termen aus Turbulenzmodellen für die Praxis relevante Schlußfolgerungen ermöglicht.



Abb. 4: Aus numerischen Simulationen ausgewertete Nußelt-Zahlen Nu für die untere und obere Wand einer intern beheizten horizontalen Fluidschicht im Vergleich zu Korrelationen aus Experimenten, aufgetragen über der Rayleigh-Zahl Ra_I.

Zur Untersuchung der Strukturen und dynamischen Vorgänge der Konvektion wurden die zeitabhängigen Ergebnisse dieser Simulationen verfilmt. Für Rayleigh-Zahlen größer-Ra_I=10⁷ findet man Konvektion in Form von irregulären Zellen an deren Rändern kaltes Fluid schnell nach unten fällt und in deren Zentrum warmes Fluid großflächig mit kleiner Geschwindigkeit aufsteigt. Die Größe der irregulären Zellen wird mit steigender Rayleigh-Zahl kleiner.

Mit Hinblick auf die Anwendung von Turbulenzmodellen auf die Konvektion mit interner Wärmequelle wurde mit der numerischen Datenbasis die Gültigkeit üblicher empirischer Schließungsansätze überprüft. Dabei ist das Verhalten von Modellen für den vertikalen turbulenten Wärmestrom $\langle u_3 T \rangle$ von besonderem Interesse. Ein in einfachen Turbulenzmodellen häufig verwendeter Schließungsansatz, der auf dem Gradienten der mittleren Temperatur $\langle T \rangle$ und der Wirbelviskosität v, basiert, ist:

$$\langle u'_{3}T' \rangle = -\frac{v_{t}}{Pr_{t}} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x_{3}}.$$
 (1)

Hier ist x_3 die dimensionslose vertikale Koordinate (0<= x_3 <=1). Für die turbulente Prandlt Zahl Prt wird häufig der empirische Wert 0,9 verwendet. Um das Verhalten des Modells (1) zu überprüfen, ist in Abbildung 5 die separat aus den numerischen Ergebnissen für Ra₁=10⁸ ausgewertete linke und rechte Seite der Modellgleichung gegenübergestellt. Es wird deutlich, daß das Modell für die Konvektion in einer intern beheizten Fluidschicht völlig unzureichend ist. Zum einen ist der Betrag des turbulenten Wärmestroms in weiten Bereichen des Kanals viel zu klein. Zum anderen liefert das Modell im Bereich 0,2<x3<0,85 negative Werte, während der ausgewertete turbulente Wärmestrom dort positiv ist. Diese Unzulänglichkeiten des Modellansatzes sind darauf zurückzuführen, daß im nahezu isothermen Kernbereich des Kanals der vertikale Gradient von <T> sehr klein ist, und der turbulente Wärmetransport entgegen diesem Gradienten erfolgt. Es bleibt festzuhalten, daß in Übereinstimmung mit früheren Untersuchungen für wesentlich kleinere Rayleigh-Zahlen auch bei der hier erstmals untersuchten hohen Turbulenzintensität einfache Gradientenmodelle für den turbulenten Wärmetransport nicht sinnvoll anwendbar sind. Eine detaillierte Beschreibung der Wärmeübertragungsvorgänge bei der Konvektion mit interner Wärmequelle erfordert also Turbulenzmodelle, die auf den vollen differentiellen Transportgleichungen für die turbulenten Wärmeflüsse basieren, wie sie beispielsweise jetzt in FLUTAN angewandt werden können.

Die in TURBIT verfügbaren Analysemöglichkeiten wurden weiter ergänzt. Ein neues Analysepaket ermöglicht es, Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen von Geschwindigkeits-, Temperatur- und Druckfluktuationen in den numerischen Simulationen turbulenter Strömungen auszuwerten [14]. Darüber hinaus können alle Verbundwahrscheinlichkeitsdichten dieser Schwankungsgrößen analysiert werden. Diese neue Auswerteoption ist für die Untersuchung der statistischen Eigenschaften der Turbulenz und deren Modellierung mit Turbulenzmodellen von besonderer methodischer Bedeutung, da alle interessierenden Turbulenzgrößen als Momente von Wahrscheinlichkeitsdichten definiert sind.




Andere Weiterentwicklungen von TURBIT betrafen die Möglichkeit der automatischen Generierung von unsymmetrischen nicht-äquidistanten Maschennetzen [13], wie sie bei Simulationen physikalischer Anwendungsfälle mit an beiden Wänden unterschiedlich dicken Grenzschichten benötigt werden. Desweiteren wurde die Umstellung des Rechenprogramms auf Anforderungen von UNIX-Betriebssystemen weitgehend abgeschlossen [15]; auch grafische Ausgaben von TURBIT sind jetzt in beschränktem Umfang unter UNIX möglich.

Im World Wide Web wurde eine Seite eingerichtet, über die Analysedaten aus Simulationen mit TURBIT in Form von Tabellen heruntergeladen werden können [16]. Die Datenbank umfaßt umfangreiche statistische Auswertungen zur Rayleigh-Bénard Konvektion in Natrium, Quecksilber und Luft sowie zur Konvektion in Fluidschichten mit interner Wärmequelle. Die Ergebnisse dieser früher durchgeführten direkten numerischen Simulationen stehen damit der Fachwelt über das Internet zur Verfügung und können als Vergleichsund Verifikationsdaten für Rechnungen mit statistischen Turbulenzmodellen verwendet werden.

TURBIT wurde erneut an eine externe Forschungsgruppe vergeben. Am "Royal Institute of Technology" in Stockholm wird es für Grobstruktursimulationen der Konvektion in Fluidschichten mit volumetrischer Wärmequelle weiterentwickelt und eingesetzt werden.

Theoretische Untersuchungen für turbulente Zweiphasenströmungen

Ziel dieses Vorhabens ist die Bereitstellung von numerischen Methoden und physikalischen Modellen, mit denen auch lokale Vorgänge in turbulenten Zweiphasenströmungen simuliert werden können. Grundlegende numerische Untersuchungen sollen den aus laufenden Experimenten [17] ableitbaren Kenntnisstand zu den Eigenschaften der Turbulenz in Blasenströmung erweitern und ergänzen. Daraus werden dann physikalische Modelle abgeleitet, wie sie in Rechenprogrammen für Zweiphasenströmung benötigt werden.

Für die numerische Berechnung von Zweiphasenströmungen wurde ein neues Modellierungskonzept erarbeitet, das sich aus der von einphasigen Strömungen her bekannten Methode der Grobstruktursimulation ableitet. Die Grundidee ist, für großräumige Wirbel und Blasen und für separierte Strömungen sowohl die Turbulenz als auch die Phasengrenzen direkt zu beschreiben. Effekte von Wirbeln und Blasen, deren Durchmesser in der Größenordnung der Maschenweite und kleiner sind, sollen mit ähnlichen Modellen, wie sie in dem gängigen Zwei-Fluid-Modell zur Berechnung von Zweiphasenströmungen verwendet werden, berücksichtigt werden. Das erarbeitete Konzept zur Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen sieht vor, neben den über das Maschenvolumen gemittelten physikalischen Erhaltungsgleichungen von Masse und Impuls zusätzlich je eine Transportgleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase und für die Konzentration der Phasengrenzflächen zu lösen. Mit den beiden letztgenannten Größen liefert die Simulation Informationen über die lokale Struktur der Zweiphasenströmung. Dies bietet den Ansatzpunkt für eine detaillierte physikalische Modellierung der Austauschvorgänge über die nicht durch das Maschennetz aufgelösten Phasengrenzen. Realisiert werden soll dieses Konzept in einem existierenden Rechenprogramm. Im Rahmen der Auswahl eines geeigneten Mehrfeldrechenprogrammes, mit dem sofort Zweiphasenströmungen mit herkömmlichen Modellen berechnet werden können und welches als Basis für die eigenen Entwicklung dienen kann, wurde ein Katalog notwendiger und wünschenswerter Anforderungen entwickelt. Anhand von wissenschaftlichen Veröffentlichungen, persönlichen Kontakten und Angaben aus dem Internet wurde die Liste möglicher Anbieter zusammengestellt. Programme, die die notwendigen Kriterien erfüllen, wurden einer detaillierten Analyse unterzogen. Die Bewertung umfaßte die implementierten Zweifluidmodelle, die Möglichkeiten der Diskretisierung durch hochauflösende numerische Verfahren, die verfügbaren Turbulenzmodelle, die Möglichkeiten der Geometrieabbildung und Kriterien wie Effizienz und Erfahrungen anderer Benutzer. Ergebnis der umfangreichen Recherchen war die Auswahl des für die gestellten Anforderungen geeignetsten Kandidaten und die Beschaffung und Installation einer Testversion.

Zur Erweiterung des grundlegenden Verständnisses der Vorgänge in schwach turbulenter Blasenströmung und zur Unterstützung der Interpretation von zugehörigen Experimenten ist geplant, numerische Simulationen einfacher Blasenströmungen durchzuführen. Hierzu soll das bisher auf einphasige Strömungen beschränkte Rechenprogramm TURBIT um die "Volume-of-Fluid" Methode erweitert werden, um damit einige wenige Blasen beschreiben und das turbulente Umfeld analysieren zu können. Die Arbeiten zur Vorbereitung der Programmentwicklung wurden aufgenommen. Parallel dazu wurden neue Mittelungskonzepte für die Herleitung geeigneter Grundgleichungen untersucht [18].

Veröffentlichungen

G. Grötzbach, T. Ammann, C. Bratianu, B. Dorr, S. Hofmann, M. Kampczyk,
 Y. Kimhi, W. Olbrich, M. Wörner, M. Alef, A. Hennemuth, G. Janßen, D. Seldner,
 Turbulenzmodellentwicklung und ingenieurtechnische Anwendung, (FLUTAN+
 TURBIT).
 Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1995,

Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5780, August 1996, pp. 342 - 351

2 L.N. Carteciano,

Entwicklung eines Turbulenzmodells für Auftriebsströmungen. Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5775, Dezember 1996

3 L.N. Carteciano,

Analysis of a turbulent model for buoyant flows implemented in the 3D thermalhydraulic computer code FLUTAN and comparison with the standard k-eps model. International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, August 9-12, 1994, Lisbon, Portugal, Publ. Proc. Turbulence, Heat and Mass Transfer 1, Ed. K. Hanjalic, J.C.F. Pereira, Begell House Inc., N.Y. 1995, pp. 222 - 227

4 C. Philippe,

Untersuchung von k-eps-Sigma-t Turbulenzmodellen für kleine Reynolds-Zahlen. Ecole Nationale Supérieure d'Art et Métiers Paris, Diplomarbeit, Juni 1996

5 T. Ammann,

Entwicklung eines impliziten Verfahrens zur lokalen Verfeinerung eines strukturierten Gitters.

Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5864, Januar 1997

6 B. Moser

Entkopplung der Zeitintegration bei der Lösung der verschiedenen Erhaltungsgleichungen des Thermo-Fluiddynamikrechenprogramms FLUTAN. Fachhochschule Stuttgart, Fachbereich Mathematik, Diplomarbeit, Mai 1996

- G. Willerding, W. Baumann,
 FLUTAN 2.0 Input Specifications
 Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5712, Mai 1996
- G. Grötzbach, X. Cheng,
 Stand der Entwicklung von FLUTAN für die Modellierung der Wärmeübertragung in LWR-Systemen.
 Jahrestagung Kerntechnik 1996, Mannheim 21. - 23.5.1996,
 Kerntechnische Gesellschaft e.V., INFORUM Bonn 1996, S. 168 - 171
- 9 J.U. Knebel,

SUCO-Programm Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995 Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5780, August 1996

10 G. Grötzbach,

Direct numerical and large eddy simulation of turbulent heat transfer. International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, August 9-12, 1994, Lisbon, Portugal, Publ. Proc. Turbulence, Heat and Mass Transfer 1, Ed. K. Hanjalic, J.C.F. Pereira, Begell House Inc., N.Y. 1995, pp. 25 - 39

11 M. Wörner, G. Grötzbach,

Analysis of thermal variance equation for natural convection of air and sodium. International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, August 9-12, 1994, Lisbon, Portugal, Publ. Proc. Turbulence, Heat and Mass Transfer 1, Ed. K. Hanjalic, J.C.F. Pereira, Begell House Inc., N.Y. 1995, pp. 332 - 337 12 M. Wörner, G. Grötzbach,

Analysis of the transport equation of temperature variance dissipation rate by direct numerical simulation data of natural convection. in: "Engineering Turbulence Modelling and Experiments 3",

Eds.: W. Rodi, G. Bergeles, Elsevier Science B.V., 1996, pp. 229-238

13 M. Schmidt, M. Wörner, G. Grötzbach,

Direkte numerische Simulation der Konvektion in einer Fluidschicht mit interner Wärmequelle.

Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5916, 1997

14 J.-H. Park

Analyse der Wahrscheinlichkeitsdichten turbulenter Schwankungsgrößen in numerischen Simulationen von Rayleigh-Bénard-Konvektion.

Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit, Universität Karlsruhe, Studienarbeit, Mai 1996

- 15 G. Janßen, unveröffentlicht
- 16 M. Wörner, G. Grötzbach,

DNS database of turbulent natural convection in horizontal fluid layers. http://hbksun17.fzk.de:8080/IRS/eng/IRS3/TURBIT_DNS_database.html

W. Cherdron, J. Aberle, G. Grötzbach, D. Klein, R. Meyder, P. Philipp, M. Samstag, H. Sauter, K. Selber, W. Sengpiel,
Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1995,
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5780, August 1996, pp. 352 - 355 18 E. G. Schlechtendahl,

First moment fields for turbulent multi-phase flow analysis. Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5849, Dezember 1996 II. <u>Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen</u>
 (W. Cherdron, J. Aberle, G. Grötzbach, P. Philipp, H. Sauter, K. Selber, W. Sengpiel, IRS; A. Hennemuth, HIK)

Abstract

In order to examine turbulent two-phase flows, measurements on the upward and downward flows were performed at the TWOFLEX facility. This facility was also improved.

Zusammenfassung

Zur Untersuchung turbulenter Zweiphasenströmungen wurden an der Twoflex I-Anlage Messungen zur Aufwärts- und Abwärtsströmung durchgeführt. Die Anlage selbst wurde weiter verbessert. Desweiteren wurden die Laboruntersuchungen zum Verhalten von invasiven Sonden aufgenommen, ebenso wurde mit den Arbeiten an optischen Sonden begonnen. Der Twoflex II-Versuchsstand konnte, bis auf die Schaltwarte, fertiggestellt werden.

Experimentelle Untersuchungen in turbulenter Zweiphasenströmung

In der TWOFLEX I-Anlage [1] wurden 1996 die Messungen zum Blasenverhalten in adiabaten Aufwärts- und Abwärtsströmungen fortgesetzt. Für die Messungen der Blasenverteilung im Strömungsrohr kam wieder die Röntgen-Tomographie zum Einsatz. Es zeigte sich im Fall der Aufwärtsströmung, daß bei symmetrischer Gaszufuhr und hoher Strömungsgeschwindigkeit ein radialer Blasentransport zur Kanalwand hin stattfindet, Abb. 1. Da ein Transport in umgekehrter Richtung nicht stattfindet, tritt am Ende der Meßstrecke der höchste Gasgehalt an der Wand und der niedrigste im Zentrum der Strömung auf. Bei unsymmetrischer Gaszufuhr strebt die Strömung einem symmetrischen Gasprofilverlauf zu, Abb. 2. Mit den in [2] dokumentierten Meßreihen konnte nicht eindeutig geklärt werden, ob diese Wanderung der Blasen zur Wand lediglich ein Effekt ist, der bei hohen Geschwindigkeiten auftritt, oder ob bei kleinen Geschwindigkeiten zur Umverteilung größere Kanallängen notwendig sind. Dies wurde mittels einer neuen Meßreihe für eine mittlere Geschwindigkeit von 0,72 m/sec geklärt und in [3] dokumentiert.

Eine Gegenüberstellung der Meßergebnisse für alle untersuchten Geschwindigkeiten in der Aufwärtsstrecke ist in Abb. 3 gegeben.



Abb. 1: Symmetrische Gaszufuhr: Blasentransport von der Kanalmitte (unten: Messung bei 3D, ca. 21 cm) zur Kanalwand (oben: Messung bei 63D), bei 1,44 m/s Grundströmung und 10% Gasgehalt.



Abb. 2: Unsymmetrische Gaszufuhr: Blasentransport (unten: Messung bei 3D, ca. 21 cm) zu einer homogenen Verteilung in Wandnähe (oben: Messung bei 53D), bei 1,08 m/s Grundströmung und 10% Gasgehalt.



Abb. 3: Vergleich der α -Profile am Rohrende (H = 65 D) bei verschiedenen Strömungsgeschwindigkeiten (β = 5 %, nur Zentraldüse und alle Düsen, außer v = 0,72 m/s alle von [2])



Abb. 4: Axialer Verlauf der radialen Gasverteilung in der Abwärtsstrecke (β =5%, v = 0,72 m/s und v = 1,44 m/s)

Die relative Gasverteilung am Rohrende zeigt sowohl bei Gaszufuhr alleine über das zentrale Düsensystem, als auch bei Zufuhr über alle sieben Düsensysteme, daß die Blasenwanderung zur Wand mit zunehmender Geschwindigkeit stärker ausgeprägt ist. Damit gibt es also keinen Schwellwert der Geschwindigkeit, ab dem die Gasumverteilung einsetzt, vielmehr deutet sich an, daß, wie auch theoretisch zu erwarten, die Umverteilungskräfte mit zunehmender Geschwindigkeit wachsen und auf kürzeren axialen Transportlängen schon eine deutlichere Verlagerung der Blasen zur Wand hin bewirken.

Messungen dieser Art wurden ebenfalls in der Abwärtsströmung durchgeführt [3]. Dabei mußte zunächst der Blasengenerator für die Abwärtsströmung modifiziert und der Arbeitsbereich der Anlage für stabile Blasenströmung ermittelt werden. Bei geringen Geschwindigkeiten kann wegen des Auftriebes der Gasblasen keine stabile Blasenströmung erzeugt werden, da die entgegen der Abwärtsströmung aufsteigenden Gasblasen sich im Blasengenerator ansammeln und von dort von Zeit zu Zeit in Form von großen Pfropfen mit dem Wasser mitgerissen werden. Auch haben die Sondenhalter einen wesentlich störenden Einfluß auf die Strömung in deren Umfeld. Teilweise konnten ausgeprägte, zusammenhängende Luftschleier hinter den Haltern beobachtet werden. Diese Störungen schränken wesentlich den Bereich ein, für den zuverlässige Ergebnisse für die relative Gasverteilung bereitgestellt werden können.

Wie sich die radiale Gasverteilung in der Abwärtsteststrecke auf dem Weg von oben nach unten für zwei verschiedene Geschwindigkeiten entwickelt, ist in Abb. 4 dargestellt. Da das Gas über sieben Düsensysteme zugeführt wurde, findet man oben eine weitgehend homogene radiale Gasverteilung. Mit zunehmender Laufstrecke abwärts verschwindet das Gas jedoch aus dem wandnahen Bereich; es konzentriert sich alles zur Rohrmitte. Dieser Wanderungseffekt zur Rohrmitte ist als "Core Peaking" bekannt. Auch bei diesem Effekt zeigt sich eine deutlich schärfere Umverteilung mit zunehmender Geschwindigkeit. Erste Turbulenzmessungen wurden inzwischen auch für die Abwärtsströmung durchgeführt. Sie werden zur Zeit ausgewertet.

Der Einfluß von invasiven Sonden auf die Blasenströmung wurde in separaten Laborexperimenten untersucht. Dabei wurden "Chip"-Kameras eingesetzt, um optisch das Verhalten einer Blase bei Sensorberührung mit dem zugehörigen elektrischen Signal vergleichen zu können. Selbst im adiabaten Fall zeigten sich Probleme, die mit Hilfe geänderter Sonden und Signalinterpretation gelöst werden sollen. Ähnliche Probleme wurden auch bei den nicht-invasiven (optischen) Meßverfahren aufgegriffen und untersucht. Hier ist es der Blasendurchgang durch das Meßvolumen, der besonders bei nicht-kugelförmigen Blasen eine besondere Signalanalyse erfordert. Abb. 5 zeigt die Annäherung einer Blase an eine Doppelsonde und gibt einen Eindruck von der Wechselwirkung der Sonde auf die zu untersuchende Blase. Die Untersuchungen zeigen, daß eine Blase vom ersten Sensor sowohl deformiert als auch zu Schwingungen angeregt werden kann. Damit wird das Signal am zweiten Sensor deutlich schwieriger auswertbar. Die weiteren Arbeiten sollen zeigen, wie weit dieses Blasenverhalten die Genauigkeit der Messungen beeinflußt.



Abb.5: Annäherung einer Blase an einen Doppelsensor

Ein besonderer Schwerpunkt war die Planung und der Bau der Anlage TWOFLEX II. Diese Anlage zur Untersuchung nicht-adiabater Zweiphasenströmungen wird eine Meßstrecke von 100 mm Innendurchmesser bei einer Höhe von 10 m (Gesamthöhe der Anlage: 14 m) erhalten. In Ergänzung zu TWOFLEX I werden in dieser neuen Anlage damit vor allem Untersuchungen an Dampfblasen in turbulenter Rohrströmung möglich, bei denen sowohl Stoff- als auch Energietransport eine Rolle spielen.

Veröffentlichungen

- W. Cherdron, J. Aberle, G. Grötzbach, D. Klein, R. Meyder, P. Philipp, M. Samstag, H. Sauter, K. Selber, W. Sengpiel, Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1995, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5780, August 1996, pp. 352 - 355
- 2 M. Samstag,

Experimentelle Untersuchungen von Transportphänomenen in vertikalen Luft-Wasser-Blasenströmungen. Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5662, Februar 1996

3 J. Becker

Experimentelle Untersuchung von Transportphänomenen und Blasenverteilungen in vertikalen turbulenten zweiphasigen Rohrströmungen.

Institut für technische Thermodynamik und Kältetechnik, Universität Karlsruhe, Studienarbeit, Oktober 1996

32.22.04 Strukturelle Integrität

<u>Untersuchungen an austenitischen und martensitischen Stählen</u> (A. Falkenstein, S. Heger, R. Hübner, E. Materna-Morris,. M.Schirra, W. Schneider, T. Stober, IMF I)

Abstract

١.

The research area "Structural integrity" comprises different activities. The examinations on structural materials concentrate on the creep behaviour of the austenitic steel 316L(N) - DIN 1.4909. The irradiation project PFR M2 is aimed to determine the influence of minor alloying elements on volume swelling and in-pile creep for different steels as well as the influence of mechanic tension on volume swelling. The influence of the irradiation exposure and time on a martensitic wrapper tube was examined in the irradiation experiment SAMARCANDE.

Zusammenfassung

In diesem Vorhaben sind verschiedene Aktivitäten des IMF I zusammengefaßt. Die Untersuchungen an Strukturmaterialien konzentrieren sich auf das Kriechverhalten des Stahls 316L(N) - DIN 1.4909 bei 550 und 600°C bei niedrigen, konstanten Spannungen bzw. bei ansteigender Spannung im Vergleich zu konstanter Spannung. Das Bestrahlungsprojekt PFR-M2 dient der Bestimmung des Einflusses minorer Legierungselemente auf Volumenschwellen und In-pile Kriechen verschiedenster Stähle, sowie der Bestimmung des Einflusses mechanischer Spannung auf das Volumenschwellen. Der Einfluß von Bestrahlung und Standzeit auf einen Brennelementekasten aus einem martensitischen 10% Chromstahl wurde im Bestrahlungsprojekt SAMARCANDE untersucht.

1. Untersuchungen an Strukturmaterialien

1.1 Einleitung

Für das im europäischen Rahmen geplante Brüterprojekt wurde als Anlagenstrukturwerkstoff der 17/12/2 CrNiMo-Stahl 316L(N) - DIN 1.4909 gewählt. Das Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten dieses Stahltyps ist im üblichen Spannungs- und Temperaturbereich experimentell hinreichend untersucht, u.a. durch eigene Arbeiten an 3 Chargen im Temperaturbereich 500 - 700°C und bis zu Zeiten von 70 000 Stunden. Im auslegungsrelevanten niedrigen Spannungsbereich bei 550 und 600°C ist ein völliger Mangel an Daten festzustellen, die z.B. eine Aussage zur Spannungsabhängigkeit der minimalen Kriechgeschwindigkeit oder zu den technisch wichtigen Zeit-Dehngrenzen erlauben würden.

Innerhalb der AGT9A/SG1 wurde die Bestimmung von Kriechdaten für die Aufstellung zuverlässiger konstitutiver Auslegungsformeln zum Werkstoffverhalten für unbedingt notwendig erachtet, und das Forschungszentrum / IMF I erklärte sich bereit, spezielle Langzeitversuche im Rahmen des meßtechnisch Möglichen durchzuführen

1.2 Stand der Untersuchungen

Die Versuche mit konstanter Spannung bei 550 und 600°C (250-60 MPa) werden mit überlangen Proben ($L_0 = 200$ mm) durchgeführt, um die zu erwartenden extrem niedrigen Kriechraten (<10⁻⁷ / h) meßtechnisch zu erfassen. Z. Zt. sind rund 40 000 Stunden Versuchszeit erreicht. Aus dem kontinuierlich registrierten Kriechverlauf wird in 1000 bzw. 5000 h Intervallen die jeweilige Kriechrate bestimmt, wie es beispielhaft in der Abb. 1.1 für die 600°C-Versuche dargestellt ist. Es ist verständlich, daß bei Kriechraten $\dot{\epsilon} \le 10^{-7}$ / h (abs), dies entspricht einem Dehnbetrag von $\le 0,1$ mm / 5000 h für $L_0 = 200$ mm, gewisse Streuungen auftreten, sei es meßtechnisch oder werkstoffbedingt, aber für die Spannungen bis 80 MPa dürfte die minimale Kriechgeschwindigkeit erreicht sein. Dagegen läßt sich für 60 und 70 MPa der Wert in etwa abschätzen. Für die 550°C Versuche gilt sinngemäß eine ähnliche, vorläufige Aussage. Überträgt man die sicher bestimmten bzw. abgeschätzten Werte für die minimale Kriechgeschwindigkeit in das Diagramm $\dot{\epsilon}_{pmin} \rightarrow \sigma$ (Abb. 1.2), so erkennt man, daß jeweils im unteren Spannungsbereich der beiden Prüftemperaturen eine deutlich geänderte Spannungsabhängigkeit von $\dot{\epsilon}_{pmin}$ vorliegt im Vergleich

zu den oberen Spannungsbereichen (schraffiert), d.h. es treten deutlich höhere Kriechraten auf, als man aus dem bisher experimentell abgedeckten Spannungsbereich extrapoliert hätte. Auffallend und eine plausible Erklärung liefernd ist die Tatsache, daß alle bisher realisierten Versuche bei 550 und 600°C in einem Spannungsbereich liegen, bei denen bei Versuchsbeginn auf Grund der niedrigen Warmstreckgrenze plastische Anfangsdehnungen \geq 5% auftreten, was schematisch links als sich öffnende Schere dargestellt ist. Das bedeutet, das Kriechverhalten bei Spannungen < 150 MPa bezieht sich tatsächlich auf den spezifizierten lösungsgeglühten Zustand, wohingegen bei Spannungen > 150 MPa das Material im Zustand lsg + verformt (bis 30% bei 400 MPa) vorliegt. Aus dieser geänderten Spannungsabhängigkeit von $\dot{\varepsilon}_{pmin}$ resultiert dann auch ein deutlich kleinerer Spannungsexponent n (nach Norton).

Auch die technologisch wichtigen Zeit-Dehngrenzwerte (t_{ef}) zeigen jeweils im oberen und unteren Spannungsbereich deutlich veränderte Abhängigkeiten. Für eine belastbare Aussage sind allerdings noch wesentlich längere Versuchszeiten erforderlich, weil bei den jeweils niedrigsten Spannungen erst $t_{ef 0,1\%}$ erreicht ist [1].

Versuche mit ansteigender Last, als Simulation eines stetigen Spannungsanstieges, wurden bei 600°C und Lastrampen von 2,5 MPa / Woche bis 20 MPa / Woche ($\cong 0,015$ MPa / h bis 0,12 MPa / h) durchgeführt und der Kriechverlauf als Folge dieser Lastrampen mit den Kriechkurven der Versuche mit konstanter Last, wie im Abschnitt zuvor beschrieben, verglichen (Abb. 1.3). Der Vergleich der vier Rampenversuche mit den Versuchen mit konstanter Spannung (A - E) ergibt, daß, unabhängig von der Höhe der Lastrampe, der absolute Dehnbetrag bei Erreichen eines bestimmten Spannungsniveaus (a - e) immer deutlich niedriger ist, wie im Detail am Rampenversuch mit 10 MPa / Woche gezeigt ist [2]. Für die beiden Rampenversuche mit 0,015 MPa / h (2,5 MPa / Woche und 10 MPa / Monat) ergeben sich bei gleichem Dehnbetrag folgende äquivalente Endspannungen im Vergleich zum Iso-Spannungsversuch:

Iso-Spannung			stufenweise Belastung		
60 MPa	~ 7000 h =	0,037 %	äquiv.	107 MPa	
80 MPa	~ 7700 h =	0,078 %	äquiv.	118 MPa	
100 MPa	~ 8500 h =	0,2 %	äquiv.	131 MPa	
120 MPa	~ 9600 h =	0,6 %	äquiv.	151 MPa	

[1] Jahrestagung Kerntechnik '97 (Aachen)

Tagungsband Beitrag 506, S. 656-659

[2] Jahrestagung Kerntechnik '95 (Nürnberg)Tagungsband Beitrag 507, S. 325-328

2. Einflüße minorer Legierungselemente auf das Schwellen und das In-pile Kriechen, Bestrahlungsprojekt PFR-M2

2.1. Einleitung

Zu den wichtigsten Eigenschaften von Struktur- und Hüllmaterialien gehören das Schwell- und In-pile Kriechverhalten. Im Bestrahlungsexperiment PFR-M2 sollen diese Eigenschaften für verschiedene Gruppen von Stählen systematisch untersucht werden. Zu diesem Zwecke wurden Druckröhrchen mit 6 mm Durchmesser und 28 mm Länge hergestellt und im Prototype Fast Reactor (PFR) in Dounreay, Schottland bei nominell 420, 500 und 600°C bestrahlt. Die Proben wurden mehrfach dem Reaktor entnommen um die Durchmesser- und Längenänderungen zu bestimmen. Aus den Durchmesseränderungen wurden die Schwell- und Kriechdehnungen bestimmt, während aus den Längenänderungen Aussagen über das spannungsinduzierte Schwellen nach dem sog. Soderberg-Theorem gewonnen werden. Die bei Beendigung der Bestrahlung akkumulierten maximalen Dosen betragen 106 dpa_{NRT} bei 420°C, 81 dpa_{NRT} bei 500°C und 61 dpa_{NRT} bei 600°C. Nach Beendigung der Bestrahlung wurden die Proben nach Karlsruhe transportiert, wo in den HZ die nichtzerstörenden Untersuchungen abgeschlossen wurden und mit den zerstörenden Untersuchungen begonnen wurde.

2.1 Stand der Untersuchungen

Die Dimensionsvermessungen der 420°C-Proben konnten nach der letzten Bestrahlung nicht mehr in Dounreay durchgeführt werden. Um die Daten dieser Proben mit der höchsten Dosis nicht zu verlieren, wurde in den Heißen Zellen ein Lasermikrometer zur Bestimmung des Durchmessers installiert. Zur Absicherung der gewonnenen Daten wurden Proben, die bereits in Dounreay vermessen wurden mit dem neuen Lasermikrometer erneut vermessen, was eine gute Übereinstimmung zwischen den Messungen ergab. Nach dem Abschluß der Dimensionsvermessungen können die Proben zerlegt werden um die Dichte zu bestimmen und um Proben für das Transmissionselektronenmikroskop (TEM) zu fertigen.

Als erste Materialien wurden verschiedene Chargen des Werkstoff-Nr. 1.4970 für die Nachuntersuchungen ausgewählt. Bei diesem Stahl zeigt sich ein sehr deutlicher Einfluß der minoren Legierungselemente auf das Schwell- und Kriechverhalten (Abb. 2.1). Die B-Charge mit niedrigem Si-Gehalt (0,4%) und Ti-Überstabilisierung (0,47% Ti bei 0,08% C) zeigt das stärkste Schwellen. Die Neigung zum Schwellen verringert sich bei der K- und der L-Charge durch Erhöhung des Si-Gehaltes (1% Si). Die etwas unterschiedliche Lösungsglühtemperatur zwischen K- und L-Charge (1100°C \leftrightarrow 1120°C) zeigt keinen Einfluß auf das Schwellen. Die I-Charge mit der niedrigsten Schwellneigung ist gegenüber der K- und L-Charge noch unterstabilisiert (0,3% Ti) Für alle vier Charge nimmt das Schwellen mit steigender Temperatur ab. Bei 600°C konnte für keine Charge ein Schwellen bis zur Enddosis von 61 dpa_{NRT} nachgewiesen werden. Der Einfluß der Temperatur auf die Porenstruktur wurde für die B-Charge untersucht. Das Ergebnis der TEM-Analyse zeigt Abb. 2.2. Der mittlere Porendurchmesser der 500°C-Probe ist doppelt so groß wie der der 420°C-Probe, allerdings ist die Porenkonzentration um nahezu den Faktor 20 kleiner.

Der Effekt des spannungsinduzierten Schwellens konnte durch die Ergebnisse der Dichtemessungen bestätigt werden. In Abb. 2.3 sind die Ergebnisse für die I- und die K-Charge zusammengestellt. Das spannungsinduzierte lineare Schwellen wurde als Differenz der Längenänderung bzw. als Differenz eines Drittels des Volumenschwellens von druckbeaufschlagter und druckloser Probe bestimmt. Das Volumenschwellen wurde aus der Dichteänderung berechnet. Als Ursache des spannungsinduzierten Schwellens sind sowohl eine beschleunigte Keimbildung als auch eine erhöhte Porenwachstumsgeschwindigkeit denkbar. Der erste Effekt würde zu einer erhöhten Porenzahl in einer druckbeaufschlagten Probe führen, während der zweite Effekt zu größeren Poren führt. Erste Ergebnisse der TEM-Analyse an Proben der I-Charge zeigen einen komplizierten Einfluß der Spannung auf die Porenkonzentration und den Porendurchmesser. Jedoch kann eine beschleunigte Keimbildung ausgeschlossen werden.

3. Die mechanischen Eigenschaften und die Mikrostruktur eines hochdosis bestrahlten martensitischen 10% Chromstahls; Bestrahlungsprojekt SAMARCANDE.

Die Nachuntersuchungen an dem martensitischen Kasten aus dem Werkstoff X18CrMoVNb 12 1 konnten als eines der letzten Materialuntersuchungsprojekte zum EFR abgeschlossen werden. Die Untersuchungen hatten das Ziel einen Brennelementekasten aus deutscher Frabrikation im französischen Schnellen Brutreaktor PHENIX einzusetzen, um ihn dann anschließend auf die Einflüsse durch die Bestrahlung oder Standzeit zu überprüfen. Hierzu wurden umfangreiche mechanische Prüfungen und Strukturuntersuchungen durchgeführt um die Materialeigenschaften nach zwei Jahren Reaktoreinsatz zu bestimmen. Über eine Zeit von 719 Vollasttage wurde in der Mitte des Kastens eine Dosis von 105 dpa_{NRT} akkumuliert. Die Bestrahlungstemperatur variierte von 380°C Natriumeinflußtemperatur, am Fuß des Kastens bis zum obersten Bereich mit einer Natriumaustrittstemperatur von ungefähr 630°C. Besonderes Interesse galt den Schweißverbindungen, die den eigentlichen Brennelementekasten mit den austenitischen Manschetten am oberen und unteren Ende verbinden. Aber mindestens ebenso wichtig für die Charakterisierung der Materialeigenschaft war der Bereich der höchsten Dosis in Kastenmitte.

Durch die Untersuchungen, zunächst mit nichtzerstörenden Materialprüfungen und später mit Zug-, Kriech- und Kerbschlagbiegeversuche, konnten wesentliche Daten ermittelt werden. Alle diese Prüfverfahren wurden am Grundmaterial, wie an geschweißten Proben, bei Raumtemperatur und bei verschiedenen Reaktortemperaturren durchgeführt.

Die ersten Vermessungen des Kastens in Frankreich zeigten stets Werte, die innerhalb der Toleranzen des unbestrahlten Materials lagen. Weitere Vermessungen der Wanddicke an Einzelsegmenten konnten dies bestätigen. Ebenso war keine Deformation feststellbar.

Mit der Transmissionselektrönenmikroskopie konnten die Einflüsse durch die Neutronenstrahlung auf das Material sichtbar gemacht werden. Im Temperaturbereich von 380°C bis ca. 410°C (10 bis 50 dpa_{NRT}) konnten bestrahlungsinduzierte kohärente α '-Ausscheidungen in den Martensitlatten festgestellt werden. Im Temperaturbereich von 400°C bis 480°C (bis 105 dpa_{NRT}) wurden Poren vorgefunden, aber die quantitative Auswertung des Porenvolumens zeigte einen max. Schwellwert von 0,05%. Somit konnte das gute Schwellverhalten des Materials bestätigt werden. Bei höheren Temperaturen, ab ca. 430°C wurden He-Blasen an Versetzungen und Subkörnern beobachtet. Die Dichte der He-Blasen nahm mit höherer Bestrahlungstemperatur weiter zu und es wurde bis zur Wärmeeinflußzone der oberen Schweißnaht eine homogen Verteilung von 3,5 x 10^{17} cm⁻³ He-Blasen im Material beobachtet.

Die Materialeigenschaften wurden durch die bestrahlungsinduzierten Mikrostrukturänderungen kaum beeinflußt. Im Bereich der α `-Ausscheidungen (380°C bis 430°C) wurde eine leichte bestrahlungsinduzierte Härtung beobachtet. Im Bereich der höchsten Dosis, in Kastenmitte, konnte kein Unterschied zum unbestrahlten Material in der Festigkeit gefunden werden (480°C). Dagegen zeigte das geschweißte Material unterschiedliche Daten, welches aber im Wesentlichen darauf zurückzuführen ist, daß die Materialtrennung in der unteren Schweißnaht in der Schmelzzone erfolgte und in der oberen Schweißnaht in der Wärmeeinflußzone des Martensits. In beiden Schweißverbindungen wurde eine Reduktion der Duktilität im bestrahlten Material festgestellt.

Kriechversuche wurden bei 550°C und 600°C durchgeführt und die Ergebnisse, ob Grundmaterial, bestrahlter Kastenwerkstoff oder Schweißverbindung liegen im gleichen Streuband.

Bei den Kerbschlagbiegeversuchen wurde ein leichter Abfall in der Hochlage beim bestrahlten Material beobachtet. Die Übergangstemperaturen zwischen den einzelnen Materialzuständen wurden ebenfalls kaum beeinflußt.

Zusammenfassend zeigte der martensitische 10% Chromstahl gute mechanische Eigenschaften als Brennelementekasten nach einem Reaktoreinsatz von zwei Jahren und dies besonders im Bereich der höchsten Dosis. Damit kann gewährleistet werden, daß bei der eigentlichen Handhabungstemperatur, ausreichende Materialfestigkeiten und immer ein duktiles Werkstoffverhalten vorliegen [3].

[3] MATERNA-MORRIS E, et. al.: demnächst im FZKA 5660, Forschungszentrum Karlsruhe.

Veröffentlichungen

M. Schirra, K. Ehrlich, "OPTIMAR, ein hochfester martensitischer CrNiMoVNb-Stahl mit 10,5% Cr und 0,11% C mit guten Zähigkeitseigenschaften", VDI-Bericht 1151 (1995) S. 367-375

M. Schirra, W. Schneider, "Kriechversuche am Strukturwerkstoff 316L(N) mit konstanter und ansteigender Last bei niedrigen Spannungen", Jahrestagung Kerntechnik Nürnberg 1995, Beitrag 507, S. 325-328

M. Schirra, H. Finkler, "Das Umwandlungsverhalten der hochwarmfesten martensitischen Stähle mit 8-14% Cr", FZKA 5607, September 1995

M.Schirra, K. Ehrlich, "Die Entwicklungslinie von martensitischen CrNiMoVNb-Legierungen für unterschiedliche Anwendungen in der Energietechnik", Werkstoffwoche 1996, Stuttgart, Tagungsband 3, S. 89-96

E. Materna-Morris, C. Petersen, M. Rieth, O. Romer, M. Schirra, K. Ehrlich, "Mechanical Properties of a High Dose Irradiated Martensitic 10% Cr-Steel", EUROMAT 96, 21.-23. Oktober 1996, Bournemouth, UK

H. Finkler, M.Schirra, "Transformation behaviour of high temperature martensitic steels with 8-14% chromium", Steel Research 67 (1996) Nr. 8, S. 328-342

K. Herschbach, W. Schneider, T. Stober, "Increase of volume swelling by a temperature gradient", FZKA 5841, November 1996



Abb. 1.1: Lineare Kriechgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Versuchszeit.



Abb. 1.2: Minimale Kriechgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Versuchsspannung



Abb. 1.3: Kriechverlauf von Versuchen mit konstanter Last (A - E) und stufenweiser Belastung (a - e)



Abb. 2.1: Dosisabhängigkeit der Durchmesseränderung für vier Chargen des DIN 1.4970 (a) 420°C (b) 500°C



Abb. 2.2: Temperaturabhängigkeit der Porenstruktur für DIN 1.4970, B-Charge c: Porenkonzentration



Abb. 2.3: Dosisabhängigkeit des spannungsinduzierten linearen Schwellens bei 420°C (a) K-Charge (b) I-Charge

II. <u>Charakterisierende Werkstoffuntersuchungen von Strukturmaterialien</u> (R. Schmitt, M. Pfeifenroth, IMF II)

The austenitic stainless steel AISI 316 L(N), X2 CrNiMoN 17-12-2, will be used as structural material for the EFR (European Fast Reactor). The austenitic Type 316L(N)-IG stainless steel is also reference steel for a future NET / ITER fusion reactor.

The operational conditions of EFR cause creep as well as fatigue damage in the structural material. To simulate these conditions, hold-time tests have found extensive application. The introduction of hold-times, which corresponds to the stationary phase of the operational cycle, causes mostly a reduction of the number of cycles to fracture N_f due to creep damage.

Within an joint-programme with the "Materials Department" of ECN-Petten (M. de Vries and M. G. Horsten), The Netherlands, the creep-fatigue behaviour has been studied for AISI 316 L(N) in the temperature range of 450°C to 700°C performing axial strain controlled test with hourglass-shaped specimens. From tests without hold-time, the number of cycles to fracture N_f was determined as function of temperature, strain amplitude and strain rate. In tests with hold-time, the reduction of Nf depends strongly on whether the hold-time is introduced in the tension phase, the compression phase, or in the tension and compression phase (symmetrical hold-time) of the cycle. In addition, the creepfatigue behaviour of austenitic stainless steel material was found to be prone to neutronirradiation exposure. Such pertinent data, which are also required by safety authorities on unirradiated and irradiated 1.4909-specimens, were only available in very limited numbers up to now.

The influence of neutron-irradiation upon cyclic fatigue behaviour has been investigated at a temperature of 550°C. The irradiations were carried out in the High Flux Reactor (HFR) of Petten in The Netherlands. The test specimens were irradiated in a sodium filled capsule for one cycle (about 1 month) in an in-core position of the HFR. A fast fluence of about $7x10^{23}$ n/m² corresponding to about 0.1 dpa was reached within 600 hours. The accumulated amount of helium in the material during irradiation was between 1 and 5 appm, depending on the initial B contents of the material. These conditions are representative for the above-core structures (ABS) of the EFR.

Examinations of failed specimens, deformed at 550° C, revealed for continuous cycling tests fatigue striations indicating a transgranular fracture mode. For tensile hold-time tests a corresponding change in failure mode from transgranular to intergranular was observed. The absence of fatigue striations for tensile dwell-tests is a hint, that for this loading condition creep damage is the dominating damage mode.

A newly developed damage model for time dependent damage was applied to describe the failure behaviour of AISI 316 L(N) in the cyclic tests performed. The ability of the damage model to consider the creep-fatigue interaction and the effects of irradiation is discussed. The results obtained with the new damage model are presented in comparison to those of the often used linear summation rule and of the damage envelope according to the French RCC-MR Design Code and the ASME Code N47 in the United States.

32.22.06 Untersuchungen zum Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme

I. <u>Bestrahlungsnachuntersuchungen und modelltheoretische Analyse</u> (D. Freund, W. Ernst, IMF III)

Kurzfassung

Die in-pile-Versuchsreihe POTOM des PSF zur Untersuchung von Brennstoffschmelzen wurde mit dem Experiment POTOM-4 im HFR Petten beendet. Drei Prüflinge mit (U,Pu)O_{1.96} Brennstoff mit Pu-Gehalten von 15, 20 bzw. 30 % wurden nach einer Vorbestrahlung mit einem Abbrand von 3 at % einer Leistungstransiente auf 800 W/cm unterworfen. Wie die zerstörungsfreie Nachuntersuchung zeigt, trat in allen drei Stäben massives Brennstoffschmelzen auf. Alle Stäbe blieben intakt. Rechnungen mit dem Programm SATURN-S ergeben Schmelzleistungen im Bereich von 674 - 749 W/cm in Abhängigkeit von Pu-Gehalt. Im Falle eines Schnellen Neutronenflusses sinken diese Leistungen um etwa 100 W/cm.

Abstract

The in-pile irradiation series POTOM (<u>POwer TO Melt</u>) of the Project Nuclear Safety has been terminated with the experiment POTOM-4 in the HFR Petten. Three fuel pins with $(U,Pu)O_{1.96}$ fuel with Pu contents of 15, 20 and 30 % have been subjected after a burnup of 3 at % to a power-to-melt ramp up to 800 W/cm. As shown by non destructive examination fuel melting was reached in all of the pins, which remained intact. Calculations with the computer code SATURN-S resulted in power-to-melt values of 674 - 749 W/cm, depending on the Pu content. In the case fast neutron flux these values decrease by about 100 W/cm.

Analyse des Bestrahlungsexperimentes POTOM-4

In dem letzten Experiment POTOM-4 der Brennstoffschmelzversuchsreihe POTOM des Projekts Nukleare Sicherheitsforschung im HFR Petten wurden drei Prüflinge mit (U,Pu)O_{1.96}-Brennstoff hoher Dichte (> 95 % th.D.) bis zu einem Abbrand von ca. 3 at % bei Leistungen zwischen 400 und 500 W/cm bestrahlt und im Anschluß einer Leistungstransiente mit Leistungen über 800 W/cm unterworfen. Aufgabe des Experiments war die Bestimmung der Leistung, bei der gerade Schmelzen (<u>PO</u>wer-<u>TO-M</u>elt) eintritt sowie des Schmelzausmaßes. In dem Bestrahlungsexperiment kam ein (U, Pu)O_{2-x}-Brennstoff des OKOM-Typs der Firma ALKEM mit Pu-Gehalten von 15, 20 und 30 % zum Einsatz. In Tabelle II sind die Herstellungsdaten dieses Brennstoffs, die in den Rechnungen verwendet werden, zusammengestellt

Stab Nr.	P 158	P 212	P 304	
Brennstoffdichte	[g/cm³]	10,575	10,575	10,450
Porosität	[%]	2,562	2,564	4,311
Stoichiometrie	[-]	1,960	1,949	1,952
Pu/(U+Pu)	[%]	15,57	20,10	30,00
U 235/U	[%]	83,01	83,12	83,05
Tablettendurchmesser	[<i>mm</i>]	6,350	6,350	6,338
Hüllmaterial		1.4970		
Hüllaußendurchmesser [mm]		7,594		
Hüllinnendurchmesser [mm]		6,595		

Tabelle I: Herstellungsdaten der Brennstäbe POTOM-4

Die heterogenen Brennstoffsäulen bestehen aus sechs (U,Pu)O₂-Tablettenteilsäulen von 40 mm und einer oberen Teilsäule von 64 mm, die jeweils durch zwei UO₂-Tabletten mit insgesamt 16 mm Länge voneinander getrennt sind. Diese heterogene Anordnung ist gewählt worden, um die lokalen Schmelzvorgänge ohne axiale Brennstoffbewegungen untersuchen zu können. Die Gesamtlänge der Tablettensäule beträgt 376 mm.

Vor und nach der Transiente wurden die Prüflinge neutrografiert. Anhand dieser Aufnahmen konnte in allen Fällen Schmelzen nachgewiesen werden. Weitere qualitative Nachweise von Brennstoffschmelzen ergaben die eingehenden γ -spektrometrischen Untersuchungen. Wie die Dimensionskontrollen (Abb. 1) zeigen, ist es in allen Stäben zu mechanischen Wechselwirkungen zwischen Brennstoff und Hülle mit bleibenden, wenn auch schwachen Hüllverformungen (< 0,15 %) gekommen. Alle Stäbe blieben intakt.

Die modelltheoretische Analyse wurde mit dem Rechenprogramm SATURN-S durchgeführt. Wie die Rechnungen zeigen, tritt Schmelzen im Leistungsmaximum bei Leistungen von 749 W/cm, 702 W/cm bzw. 674 W/cm für die Brennstäbe mit 15, 20 resp. 30 % Pu-Gehalt auf. In Abb. 2 ist der Verlauf der Brennstoffzentraltemperatur der drei Prüflinge als Funktion ihrer spezifischen Leistungen während der Bestrahlung dargestellt. Hierbei entspricht der erste Teil der Kurven dem ersten Anfahren, der anschließende Temperaturrückgang der stationären Langzeitbestrahlung und der letzte Teil dem zweiten Bestrahlungsab-



Abb. 1: POTOM-4-Wendelschriebe

schnitt mit der abschließenden Leistungstransiente. Der Schnittpunkt mit der Schmelztemperatur ergibt die Anschmelzleistung (<u>POwer-TO-Melt</u>).

Von Bedeutung ist weiterhin die Abhängigkeit des Schmelzausmaßes von der Stableistung zu dem jeweiligen Betriebszeitpunkt. Dieses ist für POTOM-4 in Abb. 3 dargestellt. Überwiegend aufgrund der radialen Temperaturverteilung verringert sich das radiale Schmelzinkrement mit zunehmender Leistung, die Auswirkungen der radialen Verteilungen von O/Me, Pu-Gehalt und Abbrand, die sich in diesem speziellen Fall z.T. gegenläufig überlagern, spielen nur eine untergeordnete Rolle.

Die Brennstoffschmelzleistungen sind axialabhängig aufgrund der axialen Leistungs- und Temperaturgradienten. Wie die Rechnungen ergeben, tritt in allen drei Prüflingen in der vierten Teilsäule Brennstoffschmelzen auf. Infolge der in diesem Bereich geringeren Umstrukturierung sinken die Anschmelzleistungen, durch die niedrigeren Hülltemperaturen werden sie angehoben. Für die Stäbe P 158, P 212 und P 304 betragen sie 765 W/cm, 714 W/cm bzw. 692 W/cm. Für die Stäbe P 212 und P 304 wird auch in der fünften Teilsäule noch Schmelzen berechnet. Aufgrund der die Säulen separierenden UO₂-(U,Pu)O₂-Isoliertabletten wird jedoch die Brennstofftemperatur in den angrenzenden UO₂-(U,Pu)O₂-



Abb. 2: SATURN-S Zentraltemperatur als Funktion der Stableistung



Abb. 3: Schmelzradius als Funktion derStableistung

Tabletten so stark abgesenkt, daß Schmelzen unterdrückt wird. In Abb. 4 sind die axialen Leistungsprofile mit den axialen Schmelzgrenzen dargestellt.



Abb. 4: POTOM 4 Axiale Leistungsverteilung und Schmelzgrenzen

Da die POTOM-Experimente in einem Mischfluß mit einem hohen Anteil thermischer Neutronen und der daher resultierenden Flußabsenkung ($\oslash_i / \oslash_a = 0,5$) durchgeführt wurden, erhebt sich die Frage nach den Anschmelzleistungen im Schnellen Fluß, d.h. ohne Flußabsenkung.

Zur Beantwortung dieser Frage wurden Rechnungen mit den Brennstoff- und -stabdaten von POTOM-4 durchgeführt. Bei einer Bestrahlungsdauer von 4900 h wurden stationäre Leistungen im schnellen Fluß von 450 W/cm gewählt, die dann in etwa zu den gleichen Umstrukturierungen und Abbränden im Brennstoff führen wie bei POTOM-4

Die maximale Leistung der Transiente betrug 750 W/cm. Im Leistungsmaximum ergeben sich die in Tabelle II aufgeführten Ergebnisse.

Stab Nr.	P 158 S	P 212 S	P 304 S	
Stationäre Leistung	[W/cm]	450	450	450
Maximale Leistung	[W/cm]	750	750	750
Anschmelzleistung	[W/cm]	632	583	558
Schmelzradius bei 750 W/cm	[mm]	1.45	1.65	1.79

Tabelle II: Brennstoffschmelzen im Schnellen Fluß (nach t = 4900 h)

Gegenüber den Anschmelzleistungen im Mischfluß gehen die entsprechenden Werte im Schnellen Fluß um ca. 100 w/cm zurück.

Evaluation of safety aspects of innovative core designs for actinide burning and transmutation as the CAPRA 4/94 core design with mixed oxide fuel concentrated on the behaviour of the hollow pellet fuel pin design during power operation up to high burn-up values and the determination of the power to melt value in case of slow power transients ($\leq 1\% P_N$ /s). Analyses have been performed with the SAS4A.Ref.96 code which is developed in close cooperation by the French IPSN, the Japanese PNC and the German FZK.

In a first step the reliability of code calculations for the behaviour of a hollow pellet fuel pin design during power operation has been evaluated. For this purpose preirradiation campaigns were recalculated which were performed in the framework of the CABRI-2 and CABRI-FAST projects. In these projects three hollow pellet fuel pin designs were preirradiated in the PHENIX reactor, i.e. the OPHELIE-6 pins up to a peak burn-up of 5.8 at%, the SCARABIX pins up to a peak burn-up of 6.4 at% and the QUASAR pins up to a peak burn-up of 12 at%. Comparison of experimental results with calculations performed with the Rel. 0.1 code version of SAS4A.Ref.96 revealed reasonable agreement when integral characteristics as fission gas release were considered. However, extending the comparison to more detailed data as fuel pellet stack dimensions and axial distributions of fission gas retention, non-negligible differences between experimental data and calculations were identified. As a consequence of these findings several modelling aspects of the SAS4A fuel pin mechanics model DEFORM-4C were revised. These were the radial distribution of the solid fission product swelling, the temperature dependence of the fission gas induced fuel swelling, the burn-up dependent axial fuel pellet stack expansion, the calculational route to determine the behaviour of a fully cracked fuel pellet, the thermal expansion of solid fission products, JOG material behaviour and the consideration of contact pressure effects on the fuel to clad heat transfer in case of gap closure. When comparing results of calculations with the revised DEFORM-4C model with the experimental observation, better agreement was obtained, especially with regard to the burn-up dependent axial fuel pellet stack expansion and the axial distribution of retained fission gases for the three irradiation campaigns considered.

The revised code version was used to investigate the fuel pin behaviour of the CAPRA 4/94 core design with mixed oxide fuel during power operation. For this purpose fissile subassemblies located at about the same radial position in the core cross-section and having a similar power output at EOEC conditions, the same residence time and the same coolant flow have been combined to one representative subassembly group. With the foreseen three batch loading scheme this procedure led to a core representation with 21 subassembly groups. Seven subassembly groups have the same residence time, but a different power production.

The power variation of individual subassemblies during the equilibrium cycle operation with the simulation of the subcycling of heavy and light diluents was newly calculated. The burn-up behaviour of the subassemblies was determined dependent on the actually established power distribution. As a result of these calculations a fully consistent power distribution along the core cross section was provided for EOEC conditions.

For the evaluation of the fuel pin behaviour during power operation simplified power histories during residence times were used. Results have shown no peculiarities, though rather high fuel to clad contact pressures were calculated to occur for burn-up values around 10 at%. At EOEC conditions the average fuel temperatures amount to about 1700 K to 1800 K for more than 80% of the fuel pins. Clad swelling becomes considerable especially for the high burn-up pins. Integral fission gas release values of fuel pins with 12 at% peak burn-up amount to 72% which is just the value observed in the QUASAR pin preirradiation which reached a peak burn-up of 12 at% as well. The as fabricated central hole becomes slightly smaller with higher burn-up which is consistent with the experimental observation. On basis of the calculations no anomalies were identified which might indicate difficulties arising from the fuel pin behaviour during power operation. As a next step a more realistic power variation with the residence time is to be simulated and the results are to be analysed in detail.

One important result of transient tests performed in the CABRI-2 and CABRI-FAST programmes was that hollow pellet fuel pin designs seem to result in rather low power to melt values if power transients with a power increase rate of about 1% P_N/s are imposed. These experimental results make it necessary to evaluate whether this might pose a more serious problem in case of the specific CAPRA fuel pin design. However, it seemed firstly necessary to identify the reason of this unexpected behaviour of the hollow fuel pellet design in the CABRI-tests. Extensive investigations were therefore performed to evaluate whether the experimental observations are specific for the CABRI test conditions only or whether they represent a generic feature of the hollow fuel pellet pin design. As one important result of this investigation it was demonstrated that the results of the CABRI tests are partly influenced by the fact that the fuel pins remain only for a short time on nominal power levels prior to the performance of the transient tests. This implies that the fuel pellets remain in a fully cracked configuration up to the start of the transient, because there is not sufficient time for a complete preconditioning of the fuel pellet, i.e. crack healing is not complete at the time of the transient testing onset. However, the power to melt values for a fully cracked fuel pellet and for a preconditioned fuel pellet are different from each other. As consequence of these findings one has to differentiate between power to melt values applicable to start-up transients and power to melt values applicable to transients starting from long-term power operation. The later values are higher than the former ones. On this background transient analyses of the CAPRA core behaviour will be performed for the two conditions separately as a next step.

32.22.07 Containmentuntersuchungen für innovative Systeme

KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Reentrainment (J.Minges, W. Schütz, IRS; M.K. Koch, RUB-NES)

Abstract

This topic deals with experimental and theoretical work on resuspension of low-volatile material from liquids. In the reporting period, the KAREX experiments were continued and the code RESUS was further developed and improved in cooperation with the university of Bochum (RUB).

Im Rahmen dieses Vorhabens werden experimentelle und theoretische Arbeiten zur Resuspension schwerflüchtiger Substanzen aus Flüssigkeiten durchgeführt. Zunächst werden mechanische Prozesse betrachtet. Die Resultate sollen benutzt werden zur Abschätzung des Quellterms infolge Reentrainment (RESUSPENSION) aus dem Sumpfwasser. Beim EPR interessiert insbesondere die Freisetzung aus dem siedenden Pool im Core-Catcher zur Schmelzekühlung nach der Schmelzeausbreitung.

Fortgesetzt wurden die KAREX-Experimente zur Untersuchung der Jettröpfchen, die beim Zerplatzen von aufsteigenden Gasblasen entstehen, sowie der damit einhergehenden Freisetzung von Feststoffpartikeln aus Oberflächenschichten der Flüssigkeitsvorlage. Zu diesem Zweck wurde eine Apparatur im Labormaßstab errichtet, die eine guantitative, zeitabhängige Bestimmung der Partikelmengen in den Oberflächenschichten sowie in den Schichten am Gefäßboden ermöglicht und außerdem die Erzeugung von Luftblasen im Größenbereich von 1 - 5 mm Durchmesser mit definierter Größe und definiertem zeitlichen Ablauf gestattet. Es wurden orientierte Versuche mit Pulver von Ag, Cr, Cu, Fe und Zn mit Partikelgrößen 5 µm bis 50 µm durchgeführt. Die freigesetzten Mengen sowie die Mengen in der Oberflächenschicht und am Gefäßboden wurden mit optischen und chemischen Nachweismethoden guantifiziert. Die verschiedenen Materialien zeigen trotz ähnlicher Partikelgrößen ein sehr unterschiedliches Freisetzungsverhalten. Im Hinblick auf die chemische Analytik (Nachweisgrenze) und das Freisetzungsverhalten sind insbesondere Ag- und Cu-Pulver für weitere Versuche gut geeignet.
Der ehemalige Natrium-Versuchsstand FAUST wurde demontiert. Der Versuchsbehälter (0,6 m Durchmesser; 1,1 m Höhe; Maximaldruck 2,2 MPa) wird weiterverwendet für Resuspensionsversuche in größerem Maßstab. Der Aufbau des Versuchsstandes soll 1997 beginnen. Hierbei werden Heizleistungen, Siedebedingungen und Druckwerte eingestellt, die dem EPR-Szenario entsprechen.

Begleitende theoretische Arbeiten zur Resuspension aus Flüssigkeiten wurden als Auftrag an die Ruhr-Universität Bochum (RUB) vergeben. Im Rahmen dieser Arbeiten wird der Code RESUS weiterentwickelt. Im Berichtszeitraum wurde hauptsächlich die Anlagerung partikelförmigen, schwerflüchtigen Materials in Oberflächenschichten betrachtet.

Um die maximale Größe einer an einer Flüssigkeitsoberfläche haftenden Partikel zu bestimmen, wurden die an einer Partikel angreifenden Kräfte im stationären Fall bilanziert. Beispielrechnungen für verschiedene Stoffpaarungen zeigten, daß die maximalen Radien schwimmfähiger Partikeln im Bereich von 0,06 mm (Nickel) bis 2,6 mm (PTFE) an einer Flüssigkeitsoberfläche (Wasser-Luft bei 20 °C; Umgebungsdruck) liegen. Stahlpartikeln sind unterhalb von 0,7 mm schwimmfähig. Steigende Temperaturen und kurze Kontaktzeiten mindern den maximalen Radius schwimmfähiger Partikeln, die Zugabe von Salz (Meerwasser) erhöht ihn. Oxidation und glatte Oberflächen senken den Randwinkel und damit auch den maximalen Radius.



32.23 STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG

- 32.23.01 Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Transmutation von Aktiniden und Spaltprodukten
- I. <u>Untersuchungen und Vorschläge für ein geeignetes neutronisches</u>
 <u>Berechnungsschema zur Auslegung und Optimierung von CAPRA-Reaktoren</u> (S. Jaag, E. Kiefhaber, INR)

The established project route was well justified for conventional core designs of Liquid Metal Cooled Fast Reactors (LMFRs) of the type of the SUPERPHENIX (SPX 1) plant. This calculational route was verified and validated by comparing its results with those obtained by using more refined methods. An equivalent validation was up to now missing for more advanced core designs like those of the CAPRA reactors intended for burning plutonium and Minor Actinides (MAs).

A unique feature of the CAPRA core is its large number of diluents. Due to their large empty volume fractions, these diluents are rather transparent for neutrons, especially for those traveling in axial directions; additionally, their considerable amount of moderating material causes a remarkable variation of the neutron spectrum between the fuel region and the positions of the diluents subassemblies (S/As). Moreover, due to the in creased transparency, the core zones of different fuel enrichment are radially not coupled as closely as conventional LMFR cores. Therefore, the flux and power tilting induced e.g. by insertion of control rods in the inner or outer core region could be considerably more pronounced than predicted for standard LMFRs. Altogether the combination of these specific features gave rise to doubts whether the established route and the inherent approximation might still be suitable for the CAPRA cores or it there may be a need for a "New Fast Reactor Neutronic Formulaire" for these nonstandard LMFR designs. Furthermore, modern computers are much faster and cheaper than those available in the past so that now advance calculational tools can be sued on a routine basis, e.g. 3-dimensional transport codes, which would have been prohibitive one decade ago, even if the algorithms would have existed.

The following problems were addressed, at least in a preliminary manner, in the study of which the main results will be described below:

- Is the synthesis approximation still reliable?
- Is the mesh 1 approximation still acceptable?
- Is the diffusion approximation still sufficient?
- Is the group collapsing to 6 coarse energy groups still suitable?

By comparing the results of the Kaplan single channel synthesis method with the fully 3-dimensional finite difference discretization method (both for diffusion theory), our investigations revealed at a fairly early stage that although the synthesis approach is applicable for conventional LMFR core designs such as SPX1, but that it can no longer be relied upon for the more advanced burner designs such as the CAPRA core having a much more complicated geometrical arrangement and material configuration.

Our studies for a configuration with all control rods withdrawn showed that for the power densities in the fuel at reactor midplane, the relative differences exhibit their largest discrepancies, of about - 10 %, close to the core center, and of about + 11% at the border between outer core and reflector. For a configuration where the rods are only withdrawn just up to the core midplane, the deviations exceed considerably the \pm 10 % range reaching about \pm 20 % at maximum. In the so-called singularities, i.e. S/As filled with diluent or absorber material, the observed discrepancies were even larger.

For the above reasons, the KAPLAN single channel synthesis method cannot be considered as a suitable tool for design and optimization studies of CAPRA-type cores.

Our detailed investigations showed a remarkable influence of the mesh refinement on the criticality eigenvalue, k_{eff} , which is more pronounced for the *rods in* configuration than for the *rods out* configuration. The largest mesh size effect was found for the absorber worth and for the Na-void reactivity associated to the *rods in* configuration. Discrepancies roughly of the order of ± 5 % were also observed for the power distribution upon mesh refinement. Here the situation is even worse than for eigenvalues or reactivity worths because contrary to a possibility for these integral parameters, for the power distribution there does not exist an easy way of extrapolating the results for decreasing mesh sized to the proper distribution representative for mesh size zero.

Our investigations showed the following:

- The *mesh 1* fin.diff. diffusion method must be considered as **not** being sufficient when applied to CAPRA-type cores.
- The mesh size effect is dominated by its radial dependence.
- The largest discrepancies are found for *rods in* configurations, including a significant power tilting effect between inner and outer core regions.

Having in mind (a) the shortcomings of the established project route mentioned above and (b) the specific features of the CAPRA cores, we decided to have a closer look to the Variational Nodal Method (VNM) which has become available fairly recently as an attractive option, namely the VARIANT code as a new code package within the ERANOS system. It was particularly useful that a transport option could be applied in addition to the diffusion option, both for 3-dimensional Hex-Z-geometry.

The main findings of our investigations were:

- The VARIANT transport method must be considered as the first choice when studying Na-void effects.
- The discrepancies in power distribution are on an acceptable level of roughly ± 3 % so that the diffusion option of VARIANT might be suitable for burn-up calculations and for optimization of the core layout.
- The mesh size zero extrapolations of the fin.diff. diffusion calculations are in almost perfect agreement with the VARIANT diffusion calculation.
- The computing costs and achieved accuracy clearly favors VARIANT diffusion calculations for condensed group schemes, sing suitable chosen medium-wise weighting functions obtained by crude fin.diff. diffusion calculations.

The established "Neutronic Formulaire" makes use of collapsing scheme with 6 coarse groups. Due to the large amount of moderating material in CAPRA-type cores, there is a justified suspicion that there might be more favorable group schemes - e.g. schemes emphasizing the low-energy part of the neutron spectrum and, particularly, the pronounced resonance of Na, leading eventually to more than 6 coarse groups for a better accommodation to the variation in the energy dependence of the neutron spectrum between the fuel region and the enclosed diluent and absorber positions.

We have studied in a fairly comprehensive manner various coarse group schemes with respect to their properties of achieving reasonably good approximations for eigenvalues as well as for power distributions for different configurations. Moreover, we also tried to find out in which way one can easily obtain fairly suitable weighting functions to be used in group collapsing.

The most important results of our efforts related to energy group condensation for a typical CAPRA core are as follows:

- The group scheme with 6 groups of the established "Formulaire" no longer seems to be the best choice for the CAPRA-type cores. Various group schemes having 7, 8, and 9 groups should be preferred instead.
- For group collapsing, the concept of using HETAIRE cell fluxes is not recommended, as it causes large discrepancies in reactivity eigenvalues and power distributions.
- The quality of the power distribution is excellent for all group schemes when condensing with medium-wise averaged fluxes.
- For determining the medium-wise averaged fluxes as weighting functions for group collapsing a very low convergence accuracy of the 25 groups fin.diff. diffusion calculation is sufficient (e.g. local/integral convergence 10⁻²/10⁻¹) leading to short extra CPU times.

As a general suggestion we would recommend for an "Advanced Neutronic Formulaire" adapted to CAPRA-type core designs to sue slightly more than 6 groups where the preparation of weighting functions should rely on medium-wise spectra obtained on the basis of fairly simple and cheap 25 groups, mesh 1/finite difference diffusion calculations with rather crude convergence criteria or iteration accuracies. As a standard route the VARIANT diffusion option will usually be sufficient for most design and optimization studies. For more accurate results, especially regarding the Na-void reactivity effect, the VARIANT transport option is more adequate.

As a precautious remark it should be mentioned that some of our numerical results and the deduced conclusions have still to be considered as to be of a somewhat preliminary nature and not yet the final answer to some of the questions posed at the beginning. This restriction holds e.g. for the influences of the mesh size in fin.diff. diffusion calculations and for the comparison between diffusion and transport results. In the established "Formulaire" it was standard practice to apply an appropriate modification e.g. of the ¹⁰B

concentration to take into account mesh size and transport effects. No such "recipe" for an equivalent modification has up to now been established and validated for CAPRA cores.

Obviously the derivations and verification of suitable and sufficiently reliable procedures for adjustments or modifications of material compositions or macroscopic cross sections on the basis of preserving diluent and absorber reactivities (and - hopefully - power distributions, too) will only be needed for those calculational routes using the diffusion approximation. However, even when using the VARIANT transport method, proper procedures of dealing with the heterogeneous structure of the singularities (absorber and diluent S/As) are needed. I.e. the application of a homogenized absorber composition and the appropriate (maybe direction-dependent) transport cross section for these singularities are still issues to be dealt with in future studies.

Calculations for the IAEA coordinated ADS NEUTRONIC BENCHMARK

Abstract:

Since several years the transmutation of nuclear waste (actinides and fission products) in accelerator driven subcritical systems (ADS) is investigated in many countries. In a recent publication, C. Rubbia and coworkers at CERN proposed a so-called Energy Amplifier (EA) which may be used as power generator and for the transmutation of actinides and fission products. This Energy Amplifier has been chosen as the base for the IAEA-coordinated ADS-neutronic benchmark. The aim of the benchmark is to obtain a better understanding of the neutron physics of accelerator driven subcritical reactors, and international comparison of the codes and data used for the calculation of these systems. Some of the results obtained from the benchmark calculations at FZK will be presented.

Introduction:

The ADS - Neutronic Benchmark coordinated by the IAEA is based on the Energy Amplifier (EA) proposed by C. Rubbia and coworkers [1],[2]. This energy amplifier uses thorium as basic fuel and liquid lead coolant. A proton beam of 1 GeV hits a liquid lead target and produces spallation neutrons. The constant power of $1500MW_{th}$ is controlled by the proton current of the accelerator. The necessary proton current depends on the reactivity eigenvalue of the system and is about 11 mA for the fresh reactor with $k_{eff} = 0.98$. A larger proton current is needed for lower values of k_{eff} .

Specification of the ADS-Neutronic Benchmark

Figure 1 shows the longitudinal cut through the cylindrical reactor. The reactor is symmetric around core midplane, only the upper half of the reactor is shown in the figure. The fuel of the reactor is Th^{232}/U^{233} , coolant and moderator is liquid lead. The neutron source is produced by a 1 GeV proton beam of 20 cm diameter and parabolic profile. The particle beam hits the liquid lead target 25 cm above the axial symmetry line. The target is positioned within a liquid lead zone the radius of which is 32.5 cm.

The total radius of the reactor is 320 cm, its height is 640 cm. The Th^{232}/U^{233} fuelled annular core is 150 cm high and consists of two zones both having the same U^{233} enrichment, but different volume fractions. In the inner core region the volume fractions of fuel/coolant(moderator)/structural material are about 0.31/0.58/0.11, in the outer core region about 0.37/0.51/0.12, which means a relatively low volume fraction of structural material when comparing with conventional LMFR designs. The radial extent of the inner core region is from 32.5 cm to 82.5 cm, the outer radius of core region 2 is 147.5cm, the outer boundary of the radial blanket is 162.5 cm. An axial reflector (90 cm high) composed mainly of lead and iron is positioned above and below the core and blanket zones

The weight of heavy metal (HM) in the inner core region at begin of life is 6.63 t, in the outer core region it is 20.23 t, the weight of Th^{232} in the radial blanket is 6.29 t.

In the present stage 1 of the benchmark the neutron source has been provided in the benchmark specification. The energy dependent neutron source is given in a 25 energy group structure. The neutron source is assumed to be spatially homogeneous in the cylindrical region of 10 cm radius and 25 cm height above and below the axial symmetry line. For our calculations we have converted the neutron source from the 25 energy group structure into the 69 group structure that is used in the KARBUS system [6]. The calculation of the source using codes like HETC [3] or LAHET [4] will be part of a further stage of the benchmark.

Calculations for the reactor at begin of life

The calculations for the reactor at begin of life have been carried out with the S_N code TWODANT [5] in S_4/P_1 approximation with multigroup cross sections of our 69 energy group constant library. The group constants for the isotopes in the fresh reactor are based on JEF-2.2 except U^{233} which is calculated from ENDF/B-VI. In our calculations the temperature of the fuel was 1200K and the temperature of structural materials and coolant was 900K. The 25 energy group neutron source provided with the benchmark has been transformed to the 69 group structure of our group constant set in such a way that for each of the original 25 energy groups the average number of source neutrons per eV was conserved. For the power normalization the energy release per fission has been set equal to 210 MeV (default value used in TWODANT), which might a bit too large for a realistic design. The U^{233} enrichment (same enrichment in the two core zones) had to be adjusted to three different values of k_{eff} at begin of life, namely $k_{eff} = 0.98$, 0.96 and 0.94.

In order to avoid complications from the definition of k_{eff} for external source driven subcritical systems, the benchmark specification required the k_{eff} determination from the well defined eigenvalue calculation of the system.

The following U^{233} enrichments have been calculated:

10.0 at% U^{233} for $k_{eff} = 0.98$

9.68 at% U^{233} for $k_{eff} = 0.96$

9.36 at% U^{233} for $k_{eff} = 0.94$

The radial power density distribution at core midplane at begin of life is shown in Figure 2. The power is zero in the inner lead region (power production due to (n, γ) - and (n,n')reactions has been neglected here) and jumps to its maximum value at the inner core
boundary. From there it decreases rapidly in radial direction. The power jumps to another
peak value at the boundary between core region 1 and core region 2 corresponding to the
higher fuel volume fraction in core region 2, in the radial blanket the power is close to
zero (in the graph the jumps are simulated by steep slopes).

Figure 3 presents the radial distribution of the neutron flux density at core midplane at begin of life for the three values of k_{eff} investigated in the benchmark.

Finally Figure 4 shows the radial dependence of the spectral indices: $\sigma_{fiss}(Th^{232})/\sigma_{fiss}(U^{233})$. The ratio of the two fission cross sections is large in the target region because of the high energy of the spallation neutrons. The neutrons are slowed down in the buffer lead region between 10cm and the inner core boundary at 32.5cm and the spectral indices are decreasing correspondingly. The slight increase of $\sigma_{fiss}(Th^{232})/\sigma_{fiss}(U^{233})$ at the inner edge of core region 2 is due to a noticeable spectrum hardening effect resulting from the lower coolant volume fraction in the outer zone. The spectral indices are rapidly decreasing in the radial blanket caused by the strong attenuation of high energy neutrons and the piling up of low energy neutrons (see Figures 4a and 4b showing the group fluxes fo four coarse energy groups). For two of the cores ($k_{eff} = 0.98$ and $k_{eff} = 0.94$) the void reactivity effect has been determined for begin of life (BOL) from eigenvalue calculations with TWODANT. In both cases k_{eff} increases if only core region 1 is voided. If both core regions are voided, k_{eff} decreases. The results are shown in more detail in Table 1.

If we make the conservative assumption that on the average 25 spallation neutrons are produced per source proton, the proton current required to obtain the power of $1500MW_{th}$ at begin of life is 11.1 mA for $k_{eff} = 0.98$. For the fresh reactor with $k_{eff} = 0.96$ a proton current of 22.8 mA is needed to obtain $1500MW_{th}$. For the case $k_{eff} = 0.94$ the proton current necessary for $1500MW_{th}$ is 35.7 mA.

According to the change of k_{eff} during burnup a variation of the proton current is required to obtain constant power. For constant power, the correlation between proton current and k_{eff} is approximately proportional to $(1 - k_{eff})$ [8]

Behaviour of k_{eff} as a function of burnup

The main goal of the benchmark was to study the behaviour of the eigenvalue k_{eff} during burnup. Our burnup calculations have been carried out with the program chain TWODANT/KARBUS [6] [7]. Neutron flux densities for the burnup calculations have been obtained from **source** calculations with TWODANT, the k_{eff} values at begin of life and after each burnup step are obtained from **eigenvalue** calculations with TWODANT. KARBUS has been applied for the burnup calculations.

Figure 5 shows our results for k_{eff} as a function of burnup from 0 days to 2250 full power days in time steps of 150 days. After 2250 days a burnup of about 115 $GW_{th}d/t(HM)$ is reached. The main reasons for the strong decrease of k_{eff} during the first 150 days is the buildup of Pa^{233} , which has a large capture cross section (about 1 barn in the core regions, about 4 barn in the radial blanket at begin of life). Pa^{233} is built up by $Th^{232}(n, \gamma)Th^{233}$ and subsequent β^- - decay of Th^{233} into Pa^{233} . The half life of Th^{232} is 22.3 m and that of Pa^{233} (β^- -decay) is 27 d.

During the first burnup step of 150 d the U^{233} enrichment decreases in both core regions. After 150 d the U^{233} enrichment increases steadily as a consequence of the U^{233} buildup. This leads to the increase of k_{eff} between 150 d and about 900 d which is shown in Figure 5.

The decrease of k_{eff} after about 900 days is due to the increase of fission product concentration in the core regions. The change of fuel isotope concentrations and the buildup of some actinides and of Tc^{99} during burnup are shown in Table 2 for the inner core region of the reactor with $k_{eff} = 0.96$. After 2250 days of burnup 72.5kg of Tc-99 are produced in the reactor: 28.7 kg in the inner core region, 42.1 kg in the outer core region and 1.7 kg in the radial blanket.

Table 1: Void reactivity effect at begin of life (BOL)					
		core region 1	core regions $1 + 2$		
	no void	voided	voided		
k_{eff}	0.97969325	0.98971642	0.97843171		
$(\frac{\Delta k}{k})_{void}(BOL)$.01023	00129		
k _{eff}	0.93996718	0.95017181	0.93966408		
$(\frac{\Delta k}{k})_{void}(BOL)$.01086	000322		
$(\frac{\Delta k}{k})_{void}(BOL) = [k_{eff}(voided) - k_{eff}(BOL)]/k_{eff}(BOL)$					

Table 2 : weight of isotopes [kg] as a function of time							
core region 1 $(k_{eff} = 0.96)$							
Time	Th^{232}	U^{233}	U^{235}	Pa^{233}	Pu^{238}	Pu^{239}	Tc^{99}
[days]							
0	5.986E + 03	6.443E + 02	0.00E + 00	0.00E + 00	0.0E + 00	0.0E+00	0.00E+00
150	5.876E + 03	6.247E + 02	2.21E-01	2.69E+01	2.4E-07	1.5E-09	2.25E+00
300	5.761E + 03	6.233E + 02	8.90E-01	2.88E+01	8.8E-06	1.1E-07	4.59E+00
450	5.650E + 03	6.324E + 02	1.90E+00	2.78E+01	$6.5 \text{E}{-}05$	1.2E-06	6.84E + 00
600	5.543E+03	6.339E + 02	3.16E + 00	2.68E+01	2.5E-04	5.9E-06	9.00E+00
750	5.439E+03	6.332E + 02	4.60E + 00	2.60E + 01	7.0E-04	2.0E-05	1.11E+01
900	5.338E+03	6.310E + 02	6.17E + 00	2.53E+01	1.6E-03	$5.4\mathrm{E}$ - 05	1.31E+01
1050	5.239E+03	6.275E + 02	7.84E+00	2.47E + 01	3.2E-03	1.2E-04	1.51E+01
1200	5.142E+03	6.229E + 02	9.58E + 00	2.42E + 01	5.6E-03	2.5E-04	1.70E+01
1350	5.047E+03	6.174E + 02	1.13E+01	2.38E+01	9.4E-03	4.5E-04	1.88E+01
1500	4.953E+03	6.112E + 02	1.31E+01	2.34E + 01	1.5E-02	7.8E-04	2.06E + 01
1650	4.861E+03	6.044E + 02	1.49E+01	2.31E+01	2.2E-02	1.3E-03	2.23E+01
1800	4.769E+03	5.970E+02	1.67E+01	2.29E+01	3.2E-02	2.0E-03	2.40E+01
1950	4.679E+03	5.893E + 02	1.84E+01	2.27E+01	4.4E-02	3.0E-03	2.56E + 01
2100	4.589E+03	5.812E+02	2.02E+01	2.25E+01	6.0E-02	4.3E-03	2.71E + 01
2250	4.500E+03	5.728E + 02	2.18E+01	2.23E+01	8.0E-02	6.1E-03	2.87E+01



References

- [1] C. Rubbia, J.A. Rubio et. al., and Ch. Roche, CERN/AT/95-44(ET)
- [2] C. Rubbia, S. Buono et. al., CERN/AT/95-53(ET)
- [3] P. Cloth, D. Filges et. al., Jül-2203, (May 1988)
- [4] R.E. Prael and H. Lichtenstein LA-UR-89-3014 Los Alamos National Laboratory (September 1989)
- [5] R.E. Alcouffe, R.S. Baker et. al. LA-12969-M, (June 1995)
- [6] C.H.M. Broeders KfK 5072 (August 1992)
- [7] C. Broeders, I. Broeders, in R. Hüper (Hrsg), FZKA 5780 (August 1996)
- [8] M. Segev "Personal communication" Sommer 1995









Figure 4a: radial dependence of neutron flux density in coarse groups at core midplane (begin of life) k-eff=0.96







Figure 5: k-eff as function of burnup



32.23.02 Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen

(Z. Kolarik, INE)

Abstract

The work on the separation of actinides from high active waste concentrated mainly on examinations on the separation of transplutonides from lanthanides. These examinations are to increase the knowledge on extractants for the selective extraction of transplutonides (III) from lanthanides (III). Extraction tests were carried out with Am(III) and Eu(III) representing the element groups to be separated. Some of the tested extractants showed promising results.

Das Vorhaben wird im Rahmen des EU-Programms "Safety of Nuclear Reactors. A.2. Fuel Cycle Concepts (Partitioning and Transmutation)" unter der Vertrags-Nr. FI4I-CT96-0010 bearbeitet (Projekt "New Partitioning Techniques", Vertrag in Kraft seit 01.05.96, finanzielle Unterstützung 100.000 ECU für 3 Jahre). Das gesamte Projekt befaßt sich mit Arbeiten zu einem schon festgelegten Fließschema für die Abtrennung von Uran, Neptunium, Plutonium, Americium und Curium aus dem hochradioaktiven Abfall, der in der Wiederaufarbeitung des abgebrannten Kernbrennstoffs anfällt. Gemäß der Arbeitsverteilung innerhalb des EU-Programms liegt der Schwerpunkt unserer Arbeit an diesem Vorhaben in der Untersuchung der Abtrennung von Transplutoniden von Spaltlanthaniden.

Das Ziel unserer Arbeiten ist Gewinnung von Kenntnissen über Extraktionsmittel für selektive Extraktion von Transplutoniden(III) im Bezug auf Spaltlanthaniden(III). Solche Selektivität kann mit sogenannten "Soft-donors" erreicht werden, d. h. solchen Extrahenten, die extrahierte Metallionen durch Schwefel- oder Stickstoffatome binden. Unsere Aufmerksamkeit wurde den letzteren Extraktionsmitteln gewidmet, weil von ihnen eine höhere chemische Stabilität erwartet werden kann als von Schwefelverbindungen. Dabei wurden neutrale, solvatisierende Verbindungen untersucht, die Transplutoniden(III)- und Lanthaniden(III)-lonen (M³⁺) als Komplexe des Typs MA₃·nB extrahieren. Die zu gewinnenden Kenntnisse betrafen den Einfluß der molekularen Konfiguration des

Extrahenten, des Charakters des Anions A⁻ und des Charakters des benutzten Verdünnungsmittels aud die Extraktions- und Trenneffektivität.

Unsere Arbeit umfasste Synthesen der Extrahenten und Untersuchungen ihrer Eigenschaften in Extraktionsversuchen. Die Extraktionsversuche wurden mit Am(III) und Eu(III) als Repräsentanten der Transplutoniden(III)- bzw. Lanthaniden(III)gruppe durchgeführt.

Im Jahre 1996 wurde die Untersuchung von 2-substituierten Benzimidazolen, die als bidentate Komplexbildner wirken, abgeschlossen. Die Grundsubstanz, 2-(2-Pyridyl)benzimidazol, ist hier abgebildet:



Folgende Schlußfolgerungen können über den Einfluß der Struktur gemacht werden: Die Extraktions- und Trenneffektivität (und auch die Löslichkeit in organischen Lösungsmitteln) wird duch Einführung einer Methylgruppe in die 6-Position des Benzolrings verbessert. So wurden z. B. in der Extraktion von Am(III)- und Eu(III)-Thiocyanaten mit 6-Methyl-2-(2-pyridyl)benzimidazol Am(III)/Eu(III)-Trennfaktoren von 20 - 50 erreicht. Einführung einer weiteren Methylgruppe, nämlich in die 5-Position, verbessert die Extraktions- und Trenneffektivität nicht weiter und verschlechtert die Löslichkeitseigenschaften. Die Extraktions- und Trenneffektivität wird durch die Einführung von Chlor- und Nitrosubstituenten in die 5(6)-Position und von einer Methylgruppe in die 6'-Position (d. h. an das Pyridylring) verschlechtert.

Am(III) und Eu(III) werden als Mono- bis Trisolvate, MA₃·B bis MA₃·3B, extrahiert. Es kann allgemein gesagt werden, daß die Trenneffektivität mit der durchschnittlichen Solvatationszahl des extrahierten Am(III)-Komplexes stark ansteigt. Aus dieser Tatsache kann eine allgemeine Regel über den Einfluß des Anions A⁻ und des Verdünnungsmittels auf die Trenneffektivität abgeleitet werden, daß sie nämlich durch solche Faktoren unterdrückt wird, die die Solvatationszahl herabsetzen. So wird die beste Trenneffektivität in der Extraktion von Am(III) und Eu(III)-Thiocyanaten (A = SCN) erreicht, weil die monodentaten Thiocyanationen wenig Raum in der Koordinationssphäre der M³⁺-Ionen beanspruchen und die Koordinierung von Extrahentenmolekülen (B) nicht verhindern. Weniger effektiv ist die Am(III)/Eu(III)-Trennung in der Extraktion von Salzen von bidentaten Anionen wie Nitraten, Perchloraten und Thenoaten. Um den Einfluß von Verdünnungsmitteln zu charakterisieren, es kann gesagt werden, daß solche von ihnen die Trenneffektivität unterdrücken, die mit den Extrahenten molekulare Komplexe bilden.

Im Unterschied zu Benzimidazolderivaten weisen analoge und ähnliche Heterocyklen, nämlich 2-(2-Pyridyl)benzoxazole, 2-(2-Pyridyl)benzthiazol, 2-(2-Pyridyl)chinolin und 2-(2-Pyridyl)chinoxaline, eine äußerst niedrige Extraktions- und Trenneffektivität für das Americium(III)/Europium(III)-Paar.

Im weiteren Verlauf wurde die Arbeit auf tridentate Komplexbildner konzentriert. Leider zeigten sich manche, im Bezug auf die Struktur versprechende Extrahenten in organischen Lösungsmitteln ungenügend löslich. Dies betrifft z. B. 2,6-Di(2-benzimidazolyl)-, 2,6-Di(6-methyl-2-benzimidazolyl)-, 2,6-Di(5,6-dimethyl-2-benzimidazolyl)- und 2,6-Di(2benzoxazolyl)pyridin. 2,3,5,6-Tetra(2-pyridyl)pyrazin is besser löslich, aber auch bei der höchsten erreichbaren Konzentrationen konnten die Messergebnisse seine Trenneffektivität nur andeuten. 2,3,5,6-Tetra(6-methyl-2-pyridyl)pyrazin ist noch besser löslich, aber zeigt eine äußerst schwache Fähigkeit, Am(III)- und Eu(III)-Verbindungen zu solvatisieren (eine Methylgruppe in der 6-Position eines 2-Pyridylsubstituenten scheint ganz allgemein eine stark untrdrücxkende Wirkung auf die Extraktionseffektivität von heterocyklischen Extrahenten zu haben). 2,6-Bis[4,5-dihydro-4(S)-isopropyloxazol-2-yl]pyridin (im Handel erthältlich) ist gut löslich in organischen Lösungsmitteln, aber nicht sehr effektiv. In der Extraktion von Am(III)- und Eu(III)-Thiocyanaten ist die Trenneffektivität befriedigend, aber die Extraktionseffektivität ist niedrig, und es ist umgekehrt in der Extraktion von Am(III)- und Eu(III)-Thenoaten.

Versprechende Ergebnisse wurde mit potentiel tridentaten 3,5-Pyridinderivaten von 1,2,4-Triazol gewonnen, die Am(III)/Eu(III)-Trennfaktoren von bis zu 60 ermöglichen. Untersuchungen dieser Verbindungen wurden erst Ende 1996 angefangen und wurden in diesem Jahr fortgesetzt.

32.23.03 Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil

I.Passive Maßnahmen zur Reduzierung des Rekritikalitätsrisikos in CAPRA-
KernenKernen

(W. Maschek, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)

I. INTRODUCTION

Within the CAPRA program the feasibility of fast reactors has been investigated to burn plutonium and also to destruct minor actinides (Mas) /1/. The main research effort focuses on a reference core option based on oxide fuel, but also advanced core concepts of fuel without uranium are investigated. The design of CAPRA cores shows significant differences compared to conventional cores. This refers e.g. to the high Pu-enrichment, the MAs in the fuel, the absence of axial blankets, the new pin design and the introduction of diluent material into the core. These differences are reflected in altered safety parameters and accident scenarios during core melt-down /2/.

The general safety strategy for CAPRA cores goes along the lines for risk minimization developed for the EFR /3/.Additionally to the two ordinary shutdown systems a so-called third shutdown level is introduced which should exclude a core-melt at all. For CAPRA cores, in the beyond design basis area, additional mitigative measures (besides containment measures) might be foreseen and an additional line of defense might be introduced against recriticalities.

Analyses have been performed to assess the recriticality and core-melt energetics potentials for the CAPRA reference oxide core and for an advanced uranium-free core with PuN fuel /2/. Compared to a conventional core the risk of a recriticality is increased under core-melt conditions because of the much higher Pu-enrichment. However, the special design of burner cores can be utilized to reduce the recriticality risk by both exploiting inherent features and optimizing the available diluent system on the core level for enhancing the fuel discharge from the core. By an early fuel relocation from the core the escalation into a neutronically active whole-core-melt with its associated energetics might thus be prevented.

II. STRATEGIES AND MEASURES FOR REDUCING THE RECRITICALITY RISK

In spite of the available safety systems, the occurrence of a core disruptive accident is postulated in our investigations. In a reactor core with high enrichment the prime measure to prevent/mitigate recriticalities is the dilution of the fuel. The dilution is achieved via a discharge of fuel from the core reducing the criticality of the system (critical configurations outside the core, e.g. in a core catcher must also be prevented). The dilution principle can be extended by introducing absorbing material. The 'dilution principle' is already applied under normal operating conditions in the highly enriched CAPRA cores. The CAPRA cores contain significant "empty" space to increase the neutron leakage and to cope with the high

Pu-enrichment of 40 - 45 %. This "dilution" manifests on the core level by the introduction of numerous diluent- subassemblies (52 S/As), on the subassembly level by dummy pins (133 per S/As) and on the pin level by a large central hole of more than 2 mm.

The strategy for the increased fuel discharge relies on three levels (Fig. 1) which come into action sequentially with the extending core destruction:

A. Pin level:

With the large central hole in CAPRA pins the 'fuel squirting' effect observed in CABRI experiments might be enhanced.

B. Subassembly level:

The diluent pin positions within the subassembly could be 'bundled and connected' to provide a separate channel for fuel relocation in the case of pin disruption and melting.

C. Core level:

In the case of local pool formation the molten inventory could access the subassembly diluents. The large hydraulic diameter of the diluents could provide sufficient relocation space.

Additionally to these 'dedicated' fuel removal paths, the subchannel system, the hexcan gaps of the axial and radial reflector and also the control rod guide tubes could further contribute to the fuel discharge. The important difference of the 'dedicated' fuel release paths is that they are specifically designed and should reliably allow for a controlled material relocation (CMR).

Analyses performed so far/5/ did not give convincing results that fuel relocation on the pin level (A) and on the subassembly level (B) are sufficient to control the recriticality problem. Therefore the major thrust of work has been devoted to mitigation measures on the core level (C).

Transient analyses of core melt accidents show that for conventional cores with e.g. 20 % Pu-enrichment, a loss of 20 % of fuel already strongly mitigates the energetics potentials and a loss of 40 % makes a power burst very unlikely /4/. In the CAPRA core, more fuel must be discharged with the above percentages increasing to 40 % and 70 % respectively. These numbers reflect conditions of neutronically active whole core pools where extensive compactive motions could take place /2/. In a more realistic assessment, taking into account the heterogeneous structure of the CAPRA core, the diluent system has an important double function. As long as it is largely intact it reduces the mobility of the molten inventory and prevents any significant compacting motions /6/. After failure it can serve as an efficient fuel removal path.

The final goal of utilizing these CMR measures /devices might be the prevention of recriticalities. The present status of results however indicates that this might be too ambitious. A more moderate goal is to prevent the occurrence of prompt critical core states and the melt-escalation and formation of a large connected molten fuel pool with its energetics potential. This more cautious position takes into account that the effectiveness of these measures must be proven for a large number of accident conditions and that experimental testing of these devices has not yet been started /5/.

III. CONTROLLED MATERIAL REMOVAL ON THE CORE LEVEL

A significant potential for fuel discharge under accident conditions offers the diluent subassembly system of the core. The CAPRA core contains 52 diluent subassemblies where 22 of them are partly filled with B_4C as moderator to improve void and Doppler values. Usually, six fuel subassemblies are grouped around one diluent. The 'light' diluents contain 37 empty pins, in the 'heavy' diluents 15 % of the pins are filled with B_4C . In the diluent the sodium volume fraction directly available as fuel streaming path is low with 27 %, the flat to flat distance is 0.15 m. The diluents can become activated for fuel removal after local fuel pool formation and melt-through of the subassembly walls in the early transition phase. The empty steel pins can be eroded after fuel enters the bundle and the large hydraulic diameter of the bundle becomes available for the fuel flow. These diluents might be optimized for a maximum potential of fuel release.

For assessing the potential for fuel removal through the diluent system the SIMMER-III code /7/ has been applied as the prime calculational tool. This code is developed by PNC under cooperation with FZK and CEA. In the geometric core model, the central diluent subassembly has been used as possible fuel release path for the fuel pool. Axial and radial blockages around the pool suppress intra-subassembly or gap-system fuel removal.

Different types of diluents have been investigated starting with the ordinary diluent assembly and gradually changing the steel and sodium fractions within the hexcans. In addition, the option has been investigated to place boron balls above the core which could drop into the diluent assembly. In the calculations the surrounding local pool which should be discharged consists of 18 subassemblies - the directly adjacent 6 plus 12 additional fuel subassemblies. This larger pool was chosen to identify any fuel sloshing and compaction tendencies. The pool conditions vary in fuel/steel temperature, pressure and power. The investigated fuel-temperature parameter-range covers 3000-3600 K, pressure levels range between $1.0 - 20.0 \cdot 10^5$ Pa and power levels between 0.5 - 10.0 times steady state. The time scale for the pool to access the diluent bundle depends on the power conditions in the pool and if protecting fuel crusts on the hexcan walls are stable. The evidence from SCARABEE-N experiments /8/ proposes that a very rapid access on a less than ~ 2 sec timescale would take place for reactor conditions with heat fluxes above 1000 W/cm².

The necessary time frame on which the fuel removal must take place can be deduced from accident calculations on whole core pool formation /4/ and from the propagation velocities found in the SCARABEE-N tests /8/. Accident calculations show that the melt-down phase after a primary excursion until formation of a whole core pool lasts between 5 - 20 s (if conditions allow to achieve this state and the pool confinement is stable). The SCARABEE-N experimental information and extrapolation to reactor conditions /8/ give time scales in the same range. Thus a necessary condition for the effectiveness of the dedicated devices is to become rapidly accessible and that a significant fuel mass must be released on time scales of less than 5 seconds.

In Fig. 2 a typical fuel removal scenario is presented. After the triggering of hexcan failure the pool expands into the diluent. A fuel coolant interaction (FCI) ejects the sodium from the bundle and fuel starts to move into the voided space.

The calculational results provide the following information:

1) Efficient fuel removal on the right time scale can only be expected with sufficient temperature/pressure levels in the pools (e.g. after a mild recriticality). A massive removal of a fuel particle melt with high viscosity cannot be expected. Removal rates in this case are in the range of 10 kg/sec or below.

2) The discharge rates in a diluent subassembly could be as high as $dM/dt \sim 100-200 \text{ kg/s}$ for temperature/pressure levels typical for a mild nuclear excursion ($T_f \sim 3600 \text{ K}$, $P \sim 5 \cdot 10^5$ Pa). This would guarantee a sufficient fuel removal in a time-frame of 2 - 3 sec when 50% of the available diluent bundles would be activated. These are typical numbers for conditions of a neutronically active core which would finally lead to the formation of a whole core pool if only insufficient fuel release would take place.

3) The diluent bundle should contain a maximum of empty space. Empty steel pins with large diameters which can be eroded by the melt could open large escape paths while also controlling the amount of initial sodium and a possible FCI risk.

4) The reactivity reducing effects of absorber balls dropping into the diluent could not be fully confirmed. An extensive mixing of fuel and absorber balls did not take place. Absorber material should however be positioned at the upper and especially at the lower ends of the diluents to keep the **discharged fuel** in neutronically subcritical conditions. The impact of the relocated fuel heat load on the below core structures must be assessed.

5) The fuel release devices should work safety directed which can be described by the condition $dk_{eff}/dt < 0$. In the analyses simulating ULOF conditions this condition was fulfilled. No fuel flow reversal towards core midplane and compaction could be detected in the diluent.

6) Pressure pulses resulting from FCI's with the sodium of the diluent may accelerate the fuel in the surrounding pool. However, the still available diluent structures could diminish any sloshing potential /5/. Transient axial compaction of the local pool was observed.

IV. CONCLUSIONS

The influence of inherent design features and specific measures on the recriticality potential of CAPRA burner cores has been investigated. These design features/measures should provide well defined and reliable fuel removal paths out of the core in the case of a core-melt accident. The fuel removal path through the diluent system was investigated for various boundary conditions of the surrounding fuel/steel pools. The results show that under accident conditions with molten, mobile fuel, enough inventory could be discharged from the core within the proper timescale to prevent the formation of a neutronically active whole core pool with a high energetics potential. Results of the exploratory investigations are promising in that an additional medium line of defense might be introduced into CAPRA cores to cope with the recriticality risk. According to the present status of analyses prompt critical conditions cannot be completely excluded, but scenarios with high reactivity ramp rates and energetics are very unlikely.

REFERENCES

- 1. A. Languille, et al.: "CAPRA Core Studies the Oxide Reference Option," GLOBAL '95, Paris, France (1995).
- 2. W. Maschek et al.: "Core Disruptive Accident Analyses for Advanced CAPRA Cores," ICONE-4, New Orleans, USA (1996).
- 3. G. Heusener et al.: "EFR Safety Concept," ARS '94, Pittsburgh, USA (1994).
- 4. W. Maschek et al.: "Energetics Potentials of CDAs in Fast Reactors with Transmutation/ Burning Capabilities," ARS'94, Pittsburgh, USA (1994).
- 5. W. Maschek et al.: "Risk Reduction of Core-Melt Accidents in Advanced CAPRA Burner Cores", ARS '97, Orlando, USA (1997).
- 6. W. Maschek et al.: "Mitigation of Core Disruptive Accident Energetics in Burner Cores," GENES-2, Tsuruga, Japan (1996).
- 7.S. Kondo et al.: "SIMMER-III: An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis," ANP '92, Tokyo, Japan (1992).
- 8. G. Kayser et al.: "Potential Lessons from SCARABEE for the Transition Phase," IWGRF / 89 IAEA Mtg., Oarai, Japan (1994).



Fig. 1 Possible release paths for controlled material removal



Fig.2 Fuel/steel pool discharge into a central diluent subassembly simulated with SIMMER-III code

II. SAS4A-Programme development

(B. Struwe, B. Porscha, M. Eigemann, W. Pfrang, IRS)

In spring 1996 a new version, namely REF96.Rel.0.1, of the SAS4A code was released by the partners IPSN, PNC and FZK. Qualification of this code version revealed weaknesses of the fuel pin mechanic models and of the two-phase flow models. Therefore, further development of models concentrated on improvements of these two aspects. The improvements with regard to the fuel pin mechanic models are shortly described under item 32.22.06.

The evaluation of the two-phase flow model has shown, that the original version of the code predicts a too rapid coolant channel boil-up and a clad melting onset which is calculated considerably too early when compared to experimental observations. In addition coolant mass flow oscillations after clad dry-out are considerably overestimated (see Fig. 1). Therefore, modelling assumptions were basically revised concentrating

- on an improved formulation of the heat transfer between clad and coolant prior to and especially after clad dry-out including radiative heat transfer from the dried-out clad surfaces to the structure material,
- on the criteria of clad dry-out prediction based now on a flooding criteria and
- on a refinement of the two-phase pressure drop calculation on basis of the Walliscorrelation for rough annular flow.

In addition it was found necessary to reformulate the time step control and partially the numerical solution algorithm. As shown in the figure the new model calculates the transient coolant mass flow behaviour at the test section inlet with better accuracy. Coolant mass flow reversal is calculated in good agreement with the experimental observation and clad relocation onset is calculated 4.15 s into the transient boiling time which is close to the 4.5 to 5 s deduced from the experimental observations. Coolant mass flow oscillations after clad dry-out are still larger than experimentally observed but by far less pronounced than with the original model.



Fig. 1 Coolant mass flow oscillations at the test section inlet in case of the BI3-Experiment (Comparison of calculations and experimental measurement prior and after model refinement)

III. Reactor Case Studies

(D. Struwe, B. Porscha, W. Pfrang, M. Eigemann, IRS)

Model refinements of the SAS4A-code resulted in the release of a code version REF96.Rel.1 which was used for reactor case studies. This code version does not yet include all model refinements related to the fuel pin mechanic models. Therefore, a version REF96.Rel. 1-mod FZK was established which formed the basis for the most recent reactor case studies. These concentrated an ULOF-analyses for the CAPRA 4/94 core design with mixed oxide fuel and on an innovative BN-800 core design with a nearly zero void coefficient.

For the consequence evaluation of unprotected loss-of-flow accidents in the CAPRA 4/94 core design new reactivity worth distributions for sodium, steel and fuel were provided for the EOEC conditions. These calculations were based on the fully consistent evaluation of the equilibrium cycle power operation of the CAPRA 4/94 core design. The calculated maximum sodium void worth amounted to 6 \$ and the reactivity feedback related to a total clad material removal would result in a positive reactivity feedback of 7.6 \$. These newly calculated values are considerably higher than the ones provided earlier. For the performance of the transient calculations the EFR plant simulation of the primary and secondary circuit was selected. To force the transient calculations into sodium boiling onset as a consequence of the negative control rod drive line expansion feedback considerably when compared to the project reference data.

With the artificially introduced conservatism sodium boiling starts at 45 s into the transient at a normalized power level of 53%. The net reactivity amounts to -20 c. The boiling transient alone does not drive the net reactivity to prompt critical. 14 s after boiling onset and 4 s after clad relocation onset in the first boiling subassembly group fuel pin break-up is calculated to occur at a power level of 4.3 times nominal. The net reactivity amounts to 76 c only. Fuel slumping reduced the net reactivity just after fuel pin failure, but fuel accumulation at the lower clad material blockage stops

this negative reactivity feedback and reverses its contribution to an incremental increase of the fuel reactivity feedback. This kind of fuel pin break-up followed by fuel slumping and fuel accumulation takes place sequentially in nearly all simulated subassembly groups. It drives the power transient at about 750 ms after the first fuel pin break-up into a superpromptcritical power burst which subsequently leads to a permanent reactor shut-down several milliseconds later. The power excursion results in an isentropically calculated mechanical energy release of several hundred MJ where fuel vapour expansion and iron vapour expansion contribute nearly equally strong. The calculated power excursion is dominantly driven by sequentially occurring fuel slumping processes in different subassembly groups after a rather benign sodium voiding induced power excursion. In a next step this result has to be analyzed in more depth and the sensitivity of the result to post-failure modelling assumptions has to be evaluated.

Consequences of core disruptive accident initiators in an innovative reactor core design of a Russian BN-800 like plant have been analyzed as well. These analyses have been performed within the framework of a comparative exercise sponsored and organized by the IAEA and EU. The core state at the end of a three batch equilibrium cycle operation has been determined. The integral sodium void reactivity worth as consequence of sodium boiling amounts to -0.5 \$ though the maximum sodium void reactivity worth value is 4.5 \$. If the subassembly load pad level is heated-up radial core expansion introduces a negative reactivity feedback which amounts to about -0.5 \$ up to boiling onset during ULOF-transients.

Consequences of several initiators for core destruction have been analyzed i.e. ULOFs, UTOPs and UTOP/LOFs. All accident sequences lead to core destruction via sodium boiling, clad melting and an incoherent structural collapse of individual subassemblies. A quite complicated transition phase will follow where core material relocation phenomena will deviate considerably from the quasi-one-dimensional behaviour in the initiation phase of the accident because hexcan melting is calculated early within the transient.

It is hardly possible to predict the behaviour of the core design during the transition phase. It is most probably characterized by a slowly progressing core melt-down interrupted by multiple recriticality events. Whether these might lead to a mechanical loading of the heated-up structures of the primary system cannot be predicted, because termination of the ULOF-transient is only possible if fissile core material is efficiently removed from the original core region. Relocation paths are difficult to become accessible and material relocation is rather limited as long as the fuel stays practically solid. Therefore results of the comparative exercise does not allow yet to conclude that ULOF-transients in a BN-800 like reactor core design leads only to benign consequences in terms of the thermal and mechanical loading of structures of the primary system.

32.23.04 Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR

(D. Freund, W.Ernst, O. Jacobi, IMF III)

Abstract

In the first experiment of the TRABANT series in the HFR Petten three fuel pins with $(U,Pu)O_2$, $(U,Pu,Np)O_2$, and $(Pu,Ce)O_2$ fuels are irradiated in a TRIOX carrier. Design and precalculations have been carried out basing on the specifications. In the meantime, due to manufactoring problems and special requirements on the irradiation conditions, fuel and fuel pin design had to be changed. Furthermore, as intermediate neutronographs reveal, apparently fuel melting occurred in some of the fuel specimen, especially in the hypostoichiometric (Pu,Ce)O₂ fuel.

The actual state of fuel and fuel pin of Pin No. 3 with two different (Pu,Ce)O₂ fuel batches is described. Calculations with the computer code SATURN-S concerning the start-up phase point out the thermal load of the fuel at this critical irradiation phase.

Comparative SATURN-S Calculations for TRABANT-1, Pin No. 3

Fuel and fuel pin have been fabricated by the Institute of Transuranium Elements, Nuclear Technology Unit. Table I summarizes the specification and as-fabricated values, which are necessary for the calculations.

Fuel Pin No.	Specification	Lower Part	Upper Part
Fuel	(Pu,Ce)O ₂	(Pu,Ce)O ₂	(Pu,Ce)O _{2-x}
Pu/(Pu+Ce) [%] O/Me [-] Theor. Density [g/cm ³] Pellet Density [%] Outer Diameter [mm]	41 2.0 95 5.42 ± 0.05	44.98 2.008 8.51 91.03 5.438 ± 0.005	44.04 1.931 8.32 87.00 5.449 ± 0.006

 Table I:
 Fuel Characteristics TRABANT 1 / Pin No.

The fuel cladding consists of SS 15/15 Ti with an outer diameter of 6.55 mm and an inner diameter of 5.65 mm. The lower column is insulated on both sides by CeO_2 pellets, the upper column by two pellets on the lower end.

The fuel pin consists of two separate sections. The lower part is separated from the upper part by an intermediate welded plug (piece No. 7 in Fig. 1). Fig. 1 schematically shows the design of the fuel pin. The intermediate plenum (No. 8) with a support tube locates the upper fuel column in a core region with lower linear rod power as shown in Fig. 1.



Fig. 1: Pin Design and Axial Power Profile

Calculations with SATURN-S have been carried out for both fuel pin sections for the first start-up phase. The main assumptions are the applicability of the thermal properties of

conventional (U,Pu)O₂ fuel, as no properties of (Pu,Ce)O₂ are available. Thus, Ce is replaced by U. The fuel characteristics of the fuel as given in Table I are applied. The calculations are carried out at the hot ends of each column with 463 W/cm (lower column) and 441 W/cm (upper column), with coolant temperatures of 630 °C and 550 °C, resp. The flux depression in the fuel due to the thermal neutron flux is 0.45. The γ heating is about 2.5 % of the fissile power.

With these assumptions and the preliminary irradiation conditions, the following results have been achieved. In Fig. 2 the development of the fuel centerline temperatures (Tc) with the rod power (Chi) together with the melt temperatures (Tm) for the lower (Pin 3L) and the upper section Pin 3U) are plotted.



Fig. 2: Power, Fuel Centerline, and Melt Temperatures

Whereas the centerline temperature stays about 320 °C below the melting point (2624 °C) in the lower section, melting occurs in the upper column.

n the upper column a melt radius of 0.68 mm (\approx 0,24 r/r_a) has been calculated. Due to the low stoichiometry and the additional O/Me redistribution the melting point for (U,Pu)O_{1.931} decreases to 2573 °C.

In Table II a comparison of some typical values of the state of fuel at the power maximum is given.

Table II:	State	of the	Fuel at	Power	Maximum

Fuel Pin No. 3		Lower Part	Upper Part
Fissile Power	[W/cm]	463	441
Coolant Temp.	[°C]	630	550
Fuel Centerline Temp.	[°C]	2307	2636
Fuel Surface Temp.	[°C]	956	780
Solidus Temp.	[°C]	2624	2573
Fuel/Clad Gap	[µm]	27	10
Heat Transfer Coeff.	[W/cm]	0.948	1.382
Radius Central Void	[mm]	0.154	0.342
Melt Radius	[mm]	0	0.676

Due to low initial density and stoichiometry a $(U,Pu)O_{2-x}$ like fuel will melt at a relative low power of 441 W/cm.

ABERLE, J.; SCHLEISIEK, K.; SCHMUCK, I.; SCHMIDT, L. Abschließende Bewertung der Mol 7C-Experimente. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.359-63 (39887)AKTAA, J.; SCHINKE, B. The influence of the hardening state on time dependent damage and its consideration in a unified damage model. Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures, 19(1996) S.1143-51 (40405) ALEKSEEV, V.I.; DOROFEEV, S.B.; EFIMENKO, A.A.; KUZNETSOV, M.S.; BREITUNG, W. Experimental study on the transmission of gaseous detonation to less sensitive mixture. 15th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Boulder, Colo., July 31 - August 4, 1995 Conf.Proc. S.13-16 Boulder : Univ.of Colorado, 1995 (40092) ALSMEYER, H.; CRON, T.; FOIT, J.J.; SCHMIDT-STIEFEL, S.; SCHNEIDER, H.; TROMM, W.; WENZ, T.; MUSSA, S.; ADELHELM, C.; DILLMANN, H.G.; PASLER, H.; SCHÖCK, W.; SCHUMACHER, G.; BENZ, H.; GREHL, C.; MERKEL, G.; RATAJCZAK, W. COMET-Konzept. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.161-77 (39868)ALSMEYER, H.; KUCZERA, B.; WERLE, H.; BÜRGER, M.; COGNET, G.; CORDFUNKE, E.H.P.; FISCHER, M.; PAROZZI, F.; TURLAND, B.D.; VETEAU, J.M. Overview on the results of the RCA project on molten core concrete interaction. Van Goethem, G. [Hrsg.] FISA-95 Symp. EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 20-22, 1995 EUR-16896 EN (1996) S.231-55 (38516) ARNECKE, G.; JACOBS, H.; STEHLE, B.; THURNAY, K.; VÄTH, L.; IMKE, U.; LUMMER, Μ. Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Wasser. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.107-22 (39864) BENZ, G.; EHRHARDT, J.; FAUDE, D.; FISCHER, F.; HASEMANN, I.; LORENZ, A.; MEYER, D.; PÄSLER-SAUER, J.; RAFAT, M.; SCHICHTEL, T.; SCHÜLE, O.; STEINHAUER, C. Modellierung und Abschätzung von Unfallfolgen: Entwicklung des rechnergest%tzten Entscheidungshilfesystems RODOS/RESY für kerntechnische Notfälle. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.

Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.331-41 (39883)

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.B.; EFIMENKO, A.A.; KOCHURKO, A.S.; REDLINGER, R.; SIDOROV, V.P. Large-scale confined hydrogen-air detonation experiments and their numerical simulation. Sturtevant, B. [Hrsg.] Shock Waves : Proc.of the 20th Internat.Symp., Pasadena, Calif., July 23-28, 1995 Singapore [u.a.] : World Scientific Publ.Co., 1996 S.1101-06 (37595)

BREITUNG, W.; KESSLER, G. Calculation of hydrogen detonation loads for future reactor containment design. Aus dem Massivbau und seinem Umfeld : Festschrift, Prof.Dr.Ing. Josef Eibl zu seinem 60.Geburtstag 1996 S.331-50 (Schriftenreihe des Instituts für Massivbau und Baustofftechnologie) (39293)

BREITUNG, W.; KOTCHOURKO, A. Numerische Simulation von turbulenten Wasserstoff-Verbrennungen bei schweren Kernreaktorunfällen. Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 28(1996) S.175-91 (40023)

BREITUNG, W.; MASSIER, H.; MÖSCHKE, M.; REDLINGER, R.; VESER, A.; GALON, P.; LEPAREUX, M. Hydrogen-air detonation experiments in complex geometry and their analysis with different codes. Van Goethem, G. [Hrsg.] FISA-95 Symp. EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 20-22, 1995 EUR-16896 EN (1996) S.498-520 (38143) BREITUNG, W.; ROYL, P.; TRAVIS, J.R.; WILKENING, H. Analysen zur Wasserstoff-Verteilung. Atomwirtschaft-Atomtechnik, 41(1996) S.411 (40034)

BROEDERS, C.H.M. Investigations related to the buildup of transurania in pressurized water reactors. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5784 (Dezember 96) (40318)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I. Verknüpfung von HETC-TWODANT mit Abbrandoptionen und erste Anwendungen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.375-80 (39893)

BUCKEL, G.; KIEFHABER, E. Three dimensional transport calculations in cartesian geometry. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.381-83 (39894)

CACUCI, D.G.

Multigroup neutron diffusion in multi-region domains with interior corners. Internat.Conf.on the Physics of Reactors : PHYSOR 96 ; Breakthrough of Nuclear Energy by Reactor Physics, Mito, J, September 16-20,

1996 Proc. Vol. 1 S.A1-A10 Tokai-Mura : JAERI, 1996 (40384)

CACUCI, D.G.

Safety research for evolutionary light water reactors. 19th Conf.of the Israel Nuclear Societies, Herzliya, IL, December 9-10, 1996 Proc. S.PS2/1-PS2/6 (40670)

CARTECIANO, L.N.

Analysis of a turbulence model for buoyant flows implemented in the 3D thermal-hydraulic computer code FLUTAN and comparison with the standard k-e-sigmat model. Hanjalic, K. [Hrsg.] Turbulence, Heat and Mass Transfer : 1 ; Proc.of the Internat.Symp., Lisboa, P, August 9-12, 1994 New York, N.Y. [u.a.] : Begell House Inc., 1995 S.222-27 (35709) CARTECIANO, L.N. Entwicklung eines Turbulenzmodells für Auftriebsströmungen. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5775 (November 96) Dissertation, Universität Karlsruhe 1996 (40310)

CHERDRON, W.; ABERLE, J.; GRÖTZBACH, G.;

KLEIN, D.; MEYDER, R.; PHILIPP, P.; SAMSTAG, M.; SAUTER, H.; SELBER, K.; SENGPIEL, W. Experimentelle Untersuchungen von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.352-55 (39885)

CHERDRON, W.; MINGES, J.; SCHÜTZ, W. FAUST/KAREX/RESUS/CONTAIN. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.371-74 (39892)

CRON, T.; SCHNEIDER, H.; TROMM, W.; WENZ, T. Schmelzstopfen zum Aufschmelzen unter Wärmeeinwirkung. DE-PS 19 508 160 (26.2.1996) (40181)

DAUM, E.; BERTSCH, J. Investigation of the long-term activation of austenitic PWR steels. EUROMAT '96 : Conf.on Materials and Nuclear Power, Bournemouth, GB, October 21-23, 1996 London : The Institute of Materials, 1996 S.499-506 (40353)

DOROFEEV, S.B.; KOCHURKO, A.S.; SIDOROV, V.P.; BEZMELNITSIN, A.V.; BREITUNG, W. Experimental and numerical studies of the pressure field generated by DDT events. Shock Waves, 5(1996) S.375-79 (40035)

DOROFEEV, S.B.; SIDOROV, V.P.; DVOINISHNIKOV, A.E.; BREITUNG, W. Deflagration to detonation transition in large confined volume of lean hydrogen-air mixtures. Combustion and Flame, 104(1996) S.95-110 (40033)
DOROFEEV, S.B.; SIDOROV, V.P.; DVOINISHNIKOV, A.E.; BEZMELNITSIN, A.V.; BREITUNG, W. Transition to detonation in large confined and unconfined fuel-air clouds. 15th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Boulder, Colo., July 31 - August 4, 1995 Conf.Proc. S.421-24 Boulder : Univ.of Colorado, 1995 (40093)

EHRHARD, P.

Dimensional analysis and scenario discussion for the spreading of a corium melt (EPR). Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5713 (Mai 96) Vortr.: Universität Karlsruhe, 20.Mai 1996

(39264)

EHRHARD, P. Ausbreitung erstarrender Schmelze. Szenario-Diskussion und Dimensionsanalyse. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.206-23 (39871)

EHRHARD, P. Spreading of melts in presence of solidification. Rao, A.S. [Hrsg.] Proc.of the ASME/JSME 4th Internat.Conf.on Nuclear Engineering (ICONE-4), New Orleans, La., March 10-14, 1996 Vol. 1, Part B. Basic Technological Advances

New York, N.Y. : ASME, 1996 S.935-41(38929)

EHRHARDT, J.; BENZ, G.; FAUDE, D.; FISCHER, F.; LORENZ, A.; PÄSLER-SAUER, J.;

RAFAT, M.; SCHICHTEL, T.; SCHÜLE, O.; STEINHAUER, C.

Das Entscheidungshilfesystem RODOS/RESY für

den Katastrophenschutz nach kerntechnischen Unfällen. Inhalt, Entwicklungsstand und Planungen.

9.Fachgespräch Überwachung der Umweltradioaktivität - Neue Regelungen auf dem Gebiet der Radioaktivitätsüberwachung, Probeentnahme-, Meß- und Analyseverfahren für die Emissions- und

Immissionsüberwachung kerntechnischer Anlagen sowie Überwachung der allgemeinen Umweltradioaktivität, Oberschleißheim, 25.-27.April 1995

Bonn : Bundesministerium f.Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, 1996 S.513-18 (37280) EHRHARDT, J.; SHERSHAKOV, V.; [HRSG.] Real-time on-line decision support systems (RODOS) for off-site emergency management following a nuclear accident. EUR-16533-EN (1996) (39029)

EHRHARDT, J.; SHERSHAKOV, V.; ZHELEZNYAK, M.; MIKHALEVICH, A. RODOS: Decision support system for off-site emergency management in Europe. Karaoglou, A. [Hrsg.] The Radiological Consequences of the Chernobyl Accident : Proc.of the 1st Internat.Conf., Minsk, Belarus, March 18-22, 1996 S.1087-96 EUR-16544-EN (39953)

ERBACHER, F.J.; HARTEN, U.; JUST, W.; NEITZEL, H.J.; SCHMIDT, H. PASCO-Programm. Thermal-hydraulic investigations on passive containment cooling. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.240-45 (39873)

ERBACHER, F.J.; NEITZEL, H.J. Passive containment cooling by natural air convection. Nuclear Technology, 111(1995) S.386-94 (39333)

ERLENMAIER, S.; TSAKMAKIS, CH. Experimentelle Ermittlung der Gleichgewichtsspannung bei viskoplastischen Materialien. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5676 (Oktober 96) (39998)

FIEG, G.; HUBER, F.; WERLE, H.; WITTMAACK, R. Simulation experiments on the spreading behaviour of molten core melts. Proc.of the 1996 National Heat Transfer Conf., Houston, Tex., August 3-6, 1996 Vol. 9 S.121-30 La Grange Park, III. : American Nuclear Society, 1996 (39916)

FIEG, G.; WERLE, H.; HUBER, F. Untersuchungen zum EPR-Referenz-Konzept (KATS-Experimente). Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.178-91 (39869) FOIT, J.J. Modellierung der Wechselwirkung Kernschmelze/Beton in WECHSL. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.192-205 (39870)

FREUND, D.; HECK, M.; STEINER, H. Bestrahlungsnachuntersuchungen und modelltheoretische Analysen zum Brennstoffund Brennstabverhalten. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.368-70 (39891)

FREUND, D.; HECK, M.; STEINER, H. Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.395-401 (39899)

GÖTZMANN, O. Fission product speciation in phebus tests FPT0 and FPT1 and the possible influence of boron. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5682 (Januar 96) (38917)

GELFAND, B.; POPOV, O.; KUSHARIN, A.; AGAFONOV, G.; BREITUNG, W. High-temperature self-ignition and detonation of H2-air mixtures with NOx additives. 15th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Boulder, Colo., July 31 - August 4, 1995 Conf.Proc. S.473-75 Boulder : Univ.of Colorado, 1995 (40094)

GLUSHKOVA, V.; SCHICHTEL, T.; PÄSLER-SAUER, J. Modelling of early countermeasures in RODOS. Karaoglou, A. [Hrsg.] The Radiological Consequences of the Chernobyl Accident : Proc.of the 1st Internat.Conf., Minsk, Belarus, March 18-22, 1996 S.1119-28 EUR-16544-EN (39939)

GRÖTZBACH, G. Direct numerical and large Eddy simulation of turbulent heat transfer. Hanjalic, K. [Hrsg.] Turbulence, Heat and Mass Transfer : 1 ; Proc.of the Internat.Symp., Lisboa, P, August 9-12, 1994 New York, N.Y. [u.a.] : Begell House Inc., 1995 S.25-39 (36027) GRÖTZBACH, G.; AMMANN, T.; BRATIANU, C.;

DORR, B.; HOFMANN, S.; KAMPCZYK, M.; KIMHI, Y.; OLBRICH, W.; WÖRNER, M.; ALEF, M.;

HENNEMUTH, A.; JANSSEN, G.; SELDNER, D.

Turbulenzmodellentwicklung und ingenieurtechnische Anwendung. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.342-51 (39884)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.; SEPOLD, L.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G. Impact of absorber rod material on bundle degradation seen in CORA experiments. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5680 (Dezember 96) (40319)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.; SEPOLD, L. Lessons learned from CORA program. PSA 96 : Internat.Topical Meeting on Probabilistic Safety Assessment ; Moving Toward Risk-Based Regulation, Park City, Utah, September 29 - October 3, 1996 Vol.1 S.1185-92

LaGrange Park, III. : ANS, 1996 (40292)

HAUPT, A.; SCHINKE, B. Experiments on the ratchetting behavior of AISI 316L(N) austenitic steel at room temperature. Transactions of the ASME - Journal of Engineering Materials and Technology, 118(1996) S.281-84 (40442)

HELM, F. Einfluß chemischer Reaktionen auf die Leckage radioaktiver Isotope.

Projekť Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.281 (39877)

HENNEGES, G. CONTAIN-Untersuchungen über ein verbessertes LWR-Containment-Konzept. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.266-75 (39875)

HERING, W.; HOMANN, CH.; SENGPIEL, W.; STRUWE, D.; MESSAINGUIRAL, CH. Ereignisablaufanalyse kernzerstörender Unfälle. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.282-304 (39878) HERSCHBACH, K .; SCHNEIDER, W .; STOBER, T. Increase of volume swelling by a temperature gradient.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5841 (November 96) (40284)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; BURBACH, J.; METZGER, H.

Experiments on the quench behavior of fuel rods.

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.316-25 (39880)

HUBER, F.; KAISER, A.; STEINBRÜCK, M.; WILL, H. PREMIX, documentation of the results of experiments PM01 to PM06. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5756 (März

(39084)96)

JACKSON, C.J.; CACUCI, D.G.; FINNEMANN, H.B.

Efficiency enhancement of RELAP/PANBOX using

adaptive spatial kinetics.

Internat.Conf.of the American Nuclear Society and the European Nuclear Society on the Global Benefits of Nuclear Technology, Washington, D.C., November 10-14, 1996 Transactions of the American Nuclear Society, 75(1996) S.323-25 (40350)

JACOBS, G.

Dispersion der Kernschmelze bei begrenztem Druck (IPCD). Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.142-60 (39867)

JACOBS, H.; LUMMER, M.; MEYER, L.; STEHLE, B.; THURNAY, K.; VÄTH, L. Multifield simulations of premixing experiments. Proc.of a Multidisciplinary Internat.Seminar on Intense Multiphase Interactions, Santa Barbara, Calif., June 9-13, 1995 Santa Barbara, 1996 S.56-69 (37442)

JACOBS, H.; MEYER, L.; VÄTH, L.; BERTHOUD, G.; MEIGNEN, R.; OULMANN, T.; BUCK, M.; BERG, E.VON; BÜRGER, M.; CHEN, S. KENNING, D.B.R.; MANTLIK, F. Studies of principal processes during melt-water premixing. Van Goethem, G. [Hrsg.] FISA-95 Symp. EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 20-22, 1995 EUR-16896 EN (1996) S.165-86 (38144)

JONES, J.A.; MANSFIELD, P.A.; HAYWOOD, S.M.; HASEMANN, I.; STEINHAUER, C.: EHRHARDT, J.; FAUDE, D. PC Cosyma (version 2): an accident consequence assessment package for use on a PC. (39296)

EUR-16239-EN (1996)

KELLY, G.N.; EHRHARDT, J.; SHERSHAKOV, Decision support for off-site emergency

preparedness in Europe. Radiation Protection Dosimetry, 64(1996) S.129-41 (39297)

KLEYKAMP, H.; GOTTSCHALG, H.D. Nachuntersuchungen an den Blockadeexperimenten Mol 7C/5 und Mol 7C/6. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.364 (39888)

KLEYKAMP, H.; GOTTSCHALG, H.D. Nachuntersuchungen am Betriebstransientenexperiment POTOM 3. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.365 (39889)

KLEYKAMP, H.; KANG, S.G. The constitution of the uranium-tin-palladium-system. Journal of Nuclear Materials, 230(1996) S.280-86 (39909)

KNEBEL, J.U. SUCO-Programm. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.224-39 (39872)

KNEBEL, J.U.; KREBS, L. Calibration of a miniature permanent magnet flowmeter probe and its application to velocity measurements in liquid sodium. Experimental Thermal and Fluid Science, 8(1994) S.135-48 (38870)

KNEBEL, J.U.; KREBS, L.; MÜLLER, U. Turbulent convection in buoyant sodium jets. Experimental Thermal and Fluid Science, 8(1994) S.149-57 (38871)

KOLARIK, Z.; MÜLLICH, U. Abtrennverfahren für Actiniden aus hochradioaktiven Abfällen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.384-87 (39895)

KOLARIK, Z.; SCHULER, R.; MÜLLICH, U. Partition of high-level radioactive wastes. EUR-16958 EN (1996) (40289)

KRIEG, R.; DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.; HIRT, A.; MESSEMER, G.; VORBERG, G. Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containment-Strukturen unter hochtransienten Belastungen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.246-65 (39874)

KUCZERA, B. CO2-Reduktion bei der Elektrizitätserzeugung. Atomwirtschaft-Atomtechnik, 41(1996) S.110-13 (39153)

KUCZERA, B. Leichtwasserreaktor-Sicherheitsforschung. 25 Jahre ein Forschungsschwerpunkt in Karlsruhe. Atomwirtschaft-Atomtechnik, 41(1996) S.783-88 (40647)

LÄMMER, H.; RITTER, B.; TSAKMAKIS, CH. Untersuchungen zum Versagen des Reaktordruckbehälters unter hohem Innendruck. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.129-41 (39866)

MAGALLON, D.; ANNUNZIATO, A.; WILL, H.; LUMMER, M.; VÄTH, L.; TURLAND, B.D.; DOBSON, G.P.; HORVATH, G.L.; VALETTE, M.; VALISI, M. High temperature melt/water mixing: results and calculations of FARO.PREMIX and MIXA experiments. Van Goethem, G. [Hrsg.] FISA-95 Symp. EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 20-22, 1995 EUR-16896 EN (1996) S.140-64 (38493)MASCHEK, W.; [HRSG.] SIMMER-III code-verification. Phase I. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5690 (Mai

(39330)

96)

MASCHEK, W.; THIEM, D.; LO PINTO, P. Safety investigations for uranium-free burner cores. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.388-91 (39896)

MEYER, L.

The interaction of a falling mass of hot spheres with water. Proc.of the 1996 National Heat Transfer Conf., Houston, Tex., August 3-6, 1996 Vol. 9 S.105-14 La Grange Park, Ill. : American Nuclear Society, 1996 (39915)

MEYER, L.; REHME, K.; SCHUMACHER, G.; ROTH, A.; SCHWALL, M.; WACHTER, E.; WÖRNER, G. Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS). Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.86-100 (39341)

MEYER, L.; SCHUMACHER, G. QUEOS, a simulation-experiment of the premixing phase of a steam explosion with hot spheres in water base case experiments. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5612 (April 96) (39201)

MUSSA, S.; TROMM, W.; CRON, T.; BENZ, H. Funktionstest und Einsatz der Induktionsspule zur Beheizung der Schmelze in den COMET-H Experimenten. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5844

(Dezember 96) (40348)

PFRANG, W.; PORSCHA, B.; STRUWE, D. Qualifizierung des transienten Brennstabverhaltens bei Reaktortransienten. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.366-67 (39890)

PIEL, D.; RUPRECHT, R.; SCHMIDT, L.; HOFMANN, P.; NOACK, V. Untersuchungen zu schweren Kernschäden. Abschreckexperimente mit Brennstabsimulatorbündeln, QUENCH-Anlage. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.305-15 (39879)

POPP, M.

Kernkompetenzen weiter nutzen. 40 Jahre Forschungszentrum Karlsruhe. Atomwirtschaft-Atomtechnik, 41(1996) S.771-73 (40646)

RASKOB, W.; HELING, R.; POPOV, A.; TKALICH, P.

Konzept zur modellmäßigen Beschreibung von Kontaminierten Einzugsgebieten in RODOS, dem

Entscheidungshilfesystem nach kerntechnischen

Notfällen in Europa.

9.Fachgespräch Überwachung der Umweltradioaktivität - Neue Regelungen auf dem Gebiet der Radioaktivitätsüberwachung, Probeentnahme-, Meß- und Analyseverfahren

für die Emissions- und Immissionsüberwachung kerntechnischer Anlagen sowie Überwachung der allgemeinen Umweltradioaktivität, Oberschleißheim,

25.-27.April 1995

Bonn : Bundesministerium f.Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, 1996 S.419-24 (37281)

REHM, W.; ROYL, P.; BREITUNG, W.; CARCASSI, M.; FINESCHI, F.; HEITSCH, M.; REINDERS, R.; FREUDENSTEIN, K. Combustion phenomena in nuclear reactor containments. Van Goethem, G. [Hrsg.]

FISA-95 Symp. EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 20-22, 1995

EUR-16896 EN (1996) S.330-57 (38481)

RITTER, B.

Finite Elemente Simulationen zur Auswirkung von Imperfektionen auf das Versagensverhalten elastisch-plastischer Druckbehälter. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5718 (März 96)

Dissertation, Universität Karlsruhe 1996 (39209)

ROYL, P.; HAYTCHER, E.A.; TRAVIS, J.R.; WILKENING, H.

Dreidimensionale Simulationen von Wasserstoffverteilung und -verbrennung im äußeren Sicherheitsbehälter eines

Druckwasserreaktors.

Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 28(1996) S.192-208 (40024)

SAMSTAG, M.

Experimentelle Untersuchungen von Transportphänomenen in vertikalen turbulenten Luft-Wasser-Blasenströmungen. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5662 (Februar 96) Dissertation, Universität Karlsruhe 1996 (39291)

SCHÄFER, L.

Einfluß von Deltaferrit und Karbiddendriten auf die Zug- und Kerbschlageigenschaften martensitischer Chromstähle. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.356-58 (39886)

SCHÄFER, L.

An austenitic steel remainig ductile after neutron irradiation. Journal of Nuclear Materials, 231(1996) S.63-68 EUROMAT '96 : Conf.on Materials and Nuclear Power, Bournemouth, GB, October 21-23, 1996 London : The Institute of Materials, 1996 S.541-49 (40042)

SCHÄFER, L.

An austenitic steel remainig ductile after neutron irradiation. EUROMAT '96 : Conf.on Materials and Nuclear Power, Bournemouth, GB, October 21-23, 1996 London : The Institute of Materials, 1996 S.541-49 (40472)

SCHÜLE, O.; RAFAT, M.; KOSSYKH, V. The software environment of RODOS. Karaoglou, A. [Hrsg.] The Radiological Consequences of the Chernobyl Accident : Proc.of the 1st Internat.Conf., Minsk, Belarus, March 18-22, 1996 S.1109-18 EUR-16544-EN (39955)

SCHLECHTENDAHL, E.G. First moment fields for turbulent multi-phase flow analysis. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5849 (Dezember 96) (40320)

SCHMUCK, P. Analysen mit dem Programm MELCOR. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.276-80 (39876)

SCHULZ, B. Thermophysikalische Charakterisierung von Werkstoffen. Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 28(1996) S.353-62 (40537)

SEGEV, M.; KÜSTERS, H.; PELLONI, S. Transmutation of neptunium, americium, technetium, and iodine in fast spectrum cores driven by accelerated protons. Nuclear Science and Engineering, 122(1996) S.105-20 (39332)

SHERSHAKOV, V.; EHRHARDT, J.; ZHELEZNYAK, M.; MIKHALEVICH, A. The implementation of RODOS in Belarus, Russia and Ukraine, and future perspektives. Karaoglou, A. [Hrsg.] The Radiological Consequences of the Chernobyl Accident : Proc.of the 1st Internat.Conf., Minsk, Belarus, March 18-22, 1996 S.1097-1108 EUR-16544-EN (39954)

SIEGEL, U.; EHRHARD, P. Theoretische Untersuchungen zum fernen, turbulenten Nachlauf über einem beheizten Zylinder.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5859 (Dezember 96) (40469)

STARFLINGER, J.; KOCH, M.K.; BROCKMEIER, U.; SCHÜTZ, W.; UNGER, H. Analysis of energies of stationary bubbles at liquid pool surfaces and the subsequent droplet release due to bubble burst based on RESUS code calculations. Rao, A.S. [Hrsg.] Proc.of the ASME/JSME 4th Internat.Conf.on Nuclear Engineering (ICONE-4), New Orleans, La., March 10-14, 1996 Vol. 1, Pt.B. Basic Technological Advances New York, N.Y. : ASME, 1996 S.733-41(39265)

STEINBOCK, L. Quenchverhalten von Brennstäben. Analytische und experimentelle Begleituntersuchungen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.326-28 (39881)

STEINER, H. Untersuchungen mit dem Programm WSPAN zu schweren Kernschäden. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.329-30 (39882) STRUWE, D. SAS4A-Programmentwicklung. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.392 (39897)

STRUWE, D. Reaktoranalysen. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.393-94 (39898)

TARTAGLIA, G.P.; DE VRIES, M.I.; HORSTEN, M.G.; SCHMITT, R. Irradiation devices and testing facilities for small specimens of low-activation steels. Journal of Nuclear Materials, 212-215(1994) S.1655-60 (40287)

THURNAY, K. AQUA liefert thermische Eigenschaften des Wassers. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.123-28 (39865)

UNGER, H.; STARFLINGER, J.; BROCKMEIER, U.; KOCH, M.K.; SCHÜTZ, W. Modelling of fission product release by reentrainment due to bursting bubbles. Kerntechnik, 61(1996) S.16-22 (39015)

VESHCHUNOV, M.S.; HOFMANN, P. Modelling of zircaloy dissolution by molten (Ag,In,Cd) absorber alloy. Journal of Nuclear Materials, 228(1996) S.318-29 1996 National Heat Transfer Conf., Houston, Tex., August 3-6, 1996 (39339)

VESHCHUNOV, M.S.; HOFMANN, P.; BERDYSHEV, A.V. Critical evaluation of uranium oxide dissolution by molten Zircaloy in different crucible tests. Journal of Nuclear Materials, 231(1996) S.1-19 (40014)

WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G. Analysis of thermal variance equation for natural convection of air and sodium. Hanjalic, K. [Hrsg.] Turbulence, Heat and Mass Transfer : 1 ; Proc.of the Internat.Symp., Lisboa, P, August 9-12, 1994 New York, N.Y. [u.a.] : Begell House Inc., 1995 S.332-37 (36028) WEINBERG, D.; RUST, K.; HOFFMANN, H. Overview report of RAMONA-NEPTUN program on passive decay heat removal.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5667 (März 96) (39074)

WILL, H.; HUBER, F.; KAISER, A.; SCHÜTZ, W.;

STEINBRÜCK, M.

Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX). Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1995. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5780 (August 96) S.101-06 (39863)

WILLERDING, G.; BAUMANN, W. FLUTAN 2.0 input specifications. Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5712 (Mai 96) (39295)

ZHELEZNYAK, M.; HELING, R.; RASKOB, W.; POPOV, A.; BORODIN, R.; GOFMAN, D.; LYASHENKO, G.; MARINETS, A.; POKHIL, A.; SHEPELEVA, T.; TKALICH, P. Modelling of hydrological pathways in RODOS. Karaoglou, A. [Hrsg.] The Radiological Consequences of the Chernobyl Accident : Proc.of the 1st Internat.Conf., Minsk, Belarus, March 18-22, 1996 S.1139-48 EUR-16544-EN (39956)

Vorträge, die nicht in gedruckter Form vorliegen

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.B.; TRAVIS, J.R.

A mechanistic approach to safe igniter implementation for hydrogen mitigation. OECD/NEA CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, CDN, May 13-15, 1996 (V40032)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I.; KESSLER, G.; KIEFHABER, E. Recent neutron physics investigations on the incineration of plutonium and other transurania elements. NATO Advanced Research Workshop on Advanced Nuclear Systems Consuming Excess Plutonium, Moskva, GUS, October 13-16, 1996 (V40087)

CACUCI, D.G. Remarks on recent reactor physics activity. Internat.Conf.on the Physics of Reactors, Mito, J, September 16-20, 1996 (V40001) CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; NEITZEL, H.J. Passive containment cooling for next generation water cooled reactors. 4th Internat.Conf.on Nuclear Engineering (ICONE-IV), New Orleans, La., March 10-14, 1996 (V38875)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; PANG, F.G.; MÜLLER, U. Critical heat flux in uniformly heated circular tubes of different diameters. European Two-Phase Flow Group Meeting, Grenoble, F, June 3-5, 1996 (V39990)

EHRHARDT, J.

The RODOS system: decision support for off-site emergency management in Europe. 4th Internat.Workshop on Real-Time Computing of the Environmental Consequences of an Accidental Release from a Nuclear Installation, Aronsborg, S, October 6-11, 1996 (V40009)

EHRHARDT, J.

RODOS: real-time on-line decision support for off-site emergency management. Internat.Symp.on Nuclear Energy and the Environment ('96 NEE), Beijing, China, October 14-18, 1996 (V40251)

EHRHARDT, J.; HASEMANN, I.; QU, J. The program package COSYMA for assessing the consequences of nuclear accidents and its application in parameter studies on countermeasures.

Internat.Symp.on Nuclear Energy and the Environment ('96 NEE), Beijing, China, October 14-18, 1996 (V40250)

ERBACHER, F.J.; CHENG, X.; NEITZEL, H.J. Research at Forschungszentrum Karlsruhe on passive containment cooling by natural air convection and thermal radiation. Jahrestagung Kerntechnik, Mannheim, 21.-23.Mai 1996 (V39261)

HOFMANN, P.; NOACK, V. Experiments on the quench behavior of fuel rod segments. 2nd Internat.Quench Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 (V40379)

HOFMANN, P.; NOACK, V. Hydrogen generation in water and steam quenched experiments. OECD/NEA Task Group Meeting on Degraded Core Cooling, Paris, F, June 18-19, 1996 (V40399) HOFMANN, P.; NOACK, V.; PIEL, D.; SCHMIDT, L. Status of the QUENCH program. CEA/FZK-Sminar on EPR Related Severe Accident Research, Karlsruhe, November 7-8, 1996 (V40265)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; PIEL, D.; SCHMIDT, L. Design status of the QUENCH facility. 2nd Internat.Quench Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 EU-Meeting on Investigation of Core Degradation, Ispra, I, July 17-18, 1996 (V40380)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; PIEL, D.; SCHMIDT, L. Status of the QUENCH facility. Quench experiments with fuel element simulators. 2nd Internat.Quench Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 (V40381)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; SCHMIDT, L. Physico-chemical behavior of zircaloy fuel rod cladding during quenching. Cooperative Severe Accident Research Program Meeting, Bethesda, Md., May 6-10, 1996 (V40043)

HOMANN, CH.; HERING, W.; MESSAINGUIRAL, CH.; SENGPIEL, W.; STRUWE, D. Analysis of LWR fuel bundle experiments with SCDAP/RELAP5. 1996 RELAP5 Internat.Users Seminar, Dallas, Tex., March 17-21, 1996 (V39162)

HOMANN, CH.; HERING, W.; SANCHEZ-ESPINOZA, V.H. Status of FZK/IRS calculations for the projected QUENCH facility. 2nd Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 (V40107)

KNEBEL, J.U. Passive decay heat removal for future LWR. Vortr.: Inst.de Protection et de Surete Nucleaire, Fontenaix aux Roses, F, 8.Oktober 1996 (V40099)

KNEBEL, J.U.; MÜLLER, U. Passive decay heat removal by sump cooling after core melt down accident. 4th Internat.Conf.on Nuclear Engineering (ICONE-IV), New Orleans, La., March 10-14, 1996 (V38872) MASCHEK, W.; FLAD, M.; ARNECKE, G.; LO PINTO, P. Mitigation of core disruptive accident energetics in burner cores. 2nd Conf.on Global Environment and Energy Systems (GENES-2), Tsuruga, J, October 29 -November 1, 1996 (V40138)

PÄSLER-SAUER, J.; SCHICHTEL, T. The simulation of early emergency actions in RODOS. 4th Internat.Workshop on Real-Time Computing

of the Environmental Consequences of an Accidental Release from a Nuclear Installation, Aronsborg, S, October 6-11, 1996 (V40136)

PAYEN, L.; VERGNES, J.; BROEDERS, C.H.M. Plutonium multirecycling in PWR. Comparison of calculations with two independant codes: EDR - FZK. Internat.Topical Meeting on Radioactive Waste

(TOPSEAL '96), Stockholm, S, June 9-12, 1996 (V40100)

ROYL, P.; TRAVIS, J.R.; HAYTCHER, E.A.; WILKENING, H. Analysis of mitigating measures during steam/hydrogen distributions in nuclear reactor containments with the 3D field code GASFLOW. OECD/NEA CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, CDN, May 13-15, 1996 (V39924)

SCHÜLE, O.; RAFAT, M. The software framework of RODOS. 4th Internat.Workshop on Real-Time Computing of the Environmental Consequences of an Accidental Release from a Nuclear Installation, Aronsborg, S, October 6-11, 1996 (V40135)

SCHERMEYER, D.; REHFELD, H.; ZIMMERMANN, A.; PORSCHA, B.; ZAPPEL, B.; SOMMER, F.; NEUHÄUSER, H. Dilatometrie an metallischen Gläsern mit weitem Glasübergangsbereich. Frühjahrstagung DPG, Festkörperphysik, Regensburg, 25.-29.März 1996 Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, R.6, Bd.31 (1996) M 12.6 (V39035)

SCHIRRA, M.; EHRLICH, K. Die Entwicklungslinie von martensitischen CrNiMoVNb-Legierungen für unterschiedliche Anforderungen in der Energietechnik. Werkstoffwoche '96, Stuttgart, 28.-31.Mai 1996 Kurzfassungen S.96 (V39975) SCHMUCK, P. MELCOR severe accident simulations for a large innovative PWR. 1996 Annual MCAP Meeting, Bethesda, Md., May 1-3, 1996 (V39298)

SCHOLTYSSEK, W.; ALSMEYER, H.; WERLE, H.

Melt spreading and cooling experiments at Forschungszentrum Karlsruhe in view of the development of a core catcher system. Workshop on Severe Accident Research in Japan

(SARJ), Tokyo, J, October 28-30, 1996 (V40106)

SCHOLTYSSEK, W.; ALSMEYER, H.; WERLE, H.

Recent results of melt spreading and cooling experiments at Forschungszentrum Karlsruhe the KATS and COMET projects. Cooperative Severe Accident Research Program Meeting, Bethesda, Md., May 6-10, 1996 (V40498)

STACH, T.; MALMBERG, T. Scaled fluid structure impact experiments using a simple deformable structure. 1st Euroconf.and US Workshop on Material Instabilities in Deformation and Fracture, Porto Carras, GR, September 4-7, 1996 (V39936)

STARFLINGER, J.; KOCH, M.K.; VOSSNACKE, A.; BROCKMEIER, U.; SCHÜTZ, W.; UNGER, H. Aerosolfreisetzung durch zerplatzende Blasen an Flüssigoberflächen. 60. Physikertagung gemeinsam mit der Frühjahrstagung DPG, Jena, 11.-15.März 1996 Verhandlungen der Deutschen Physikalischen

Gesellschaft, R.6, Bd.31 (1996) AKE 3.3 (V38993)

STEINBRÜCK, M. Hydrogen absorption of zircaloy at high temperatures. 2nd Internat.Quench Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 (V40416)

STEINER, H. Recalculation of single rod quench tests with the code WSPAN. 2nd Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, September 17-19, 1996 (V39919)