

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

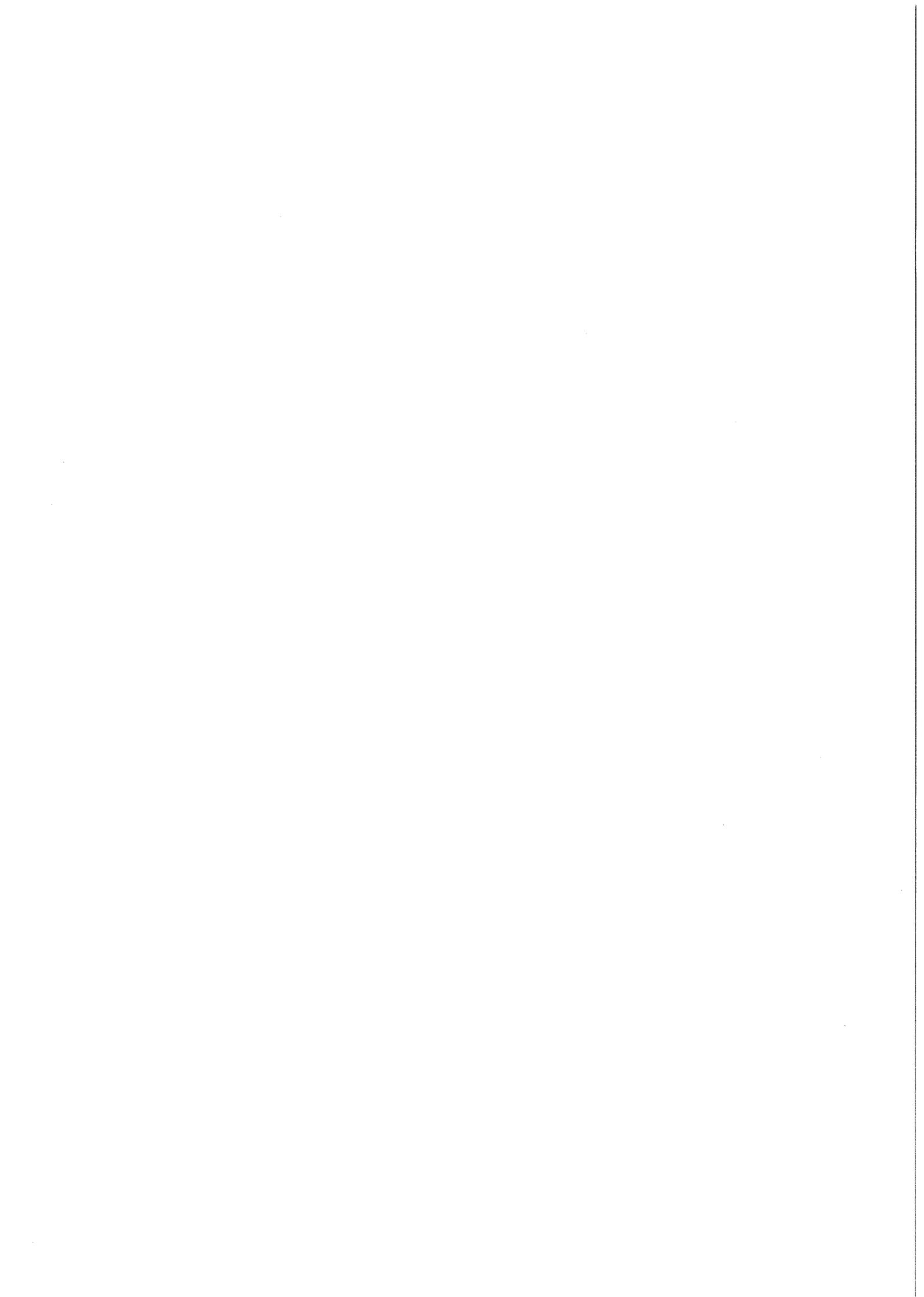
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6126

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1997

B. Mühl (Hrsg.)

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

September 1998



FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Technik und Umwelt
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6126

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Jahresbericht 1997

Herausgegeben von B. Mühl
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

1998

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 summarizes the R&D results of PSF during 1997. The research tasks cover three main topics:

- Light Water Reactor safety,
- Innovative systems, and
- Studies related to the transmutation of actinides.

Numerous institutes of the research centre contribute to the PSF programme, as well as several external partners. The tasks are coordinated in agreement with internal and external working groups.

The contributions to this report, which are either written in German or in English, correspond to the status of early/mid 1998.

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 1997 des PSF 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 Angewandte Thermo- und Fluidodynamik	IATF
Institut für Materialforschung	IMF I, II, III
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik	INR
Institut für Reaktorsicherheit	IRS
Hauptabteilung Informations- und Kommunikationstechnik	HIK
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 1998 dar und sind entsprechend dem F+E-Programm 1997 numeriert.

Inhalt
Contents

		Seite
32.21	<u>LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT</u>	1
32.21.01	Wasserstoffverbrennungsvorgänge	1
I.	Zusammenfassung (W. Breitung, A. Veser, INR)	1
II.	Hydrogen production Application of the MELCOR code to analysis of the CORA-13 experiment (A. Miassoedov, IMF, INR)	7
III.	Hydrogen distribution	27
A.	Theoretical investigations with GASFLOW (W. Baumann, H. Rochholz, H. Wilkening, INR; M. Bottoni, G. Necker, P. Royl, J.R. Travis, IRS; J. Spore, Los Alamos National Laboratory)	27
B.	Validating the GASFLOW modelling of condensation with Phebus containment thermal hydraulics (W. Baumann, INR; P. Royl, IRS)	71
IV.	Hydrogen combustion (A. Veser, W. Breitung, G. Engel, G. Stern, INR)	82
V.	COM3D code development (A. Kotchourko, INR)	127
VI.	Gitteradaption für Finite-Volumen-Verfahren auf kartesischen Gittern (F. Seegmüller, INR)	129

32.21.02	Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel	149
I.	Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS) (R. Huber, M. Kirstahler, D. Kuhn, L. Meyer, A. Roth, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, INR)	149
II.	Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX) (H. Will, F. Huber, A. Kaiser, W. Schütz, IRS)	159
III.	Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung (G. Arnecke, H. Jacobs, B. Stehle, K. Thurnay, L. Väth, INR; M. Böttcher, U. Imke, M. Lummer, IRS)	168
32.21.03	Versagen des Reaktordruckbehälters und Dispersion der Kernschmelze	176
I.	Zur Bestimmung der Materialparameter des Modells der finiten Thermoviskoplastizität mit Schädigung (H. Lämmer, B. Ritter, Ch. Tsakmakis, IMF II)	176
II.	DISCO, Experiment zur Dispersion von simuliertem Corium, die Versuchsanlage (M. Hartnagel, M. Kirstaler, L. Meyer, A. Roth, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, INR)	192
III.	Scaling Analysis for DISCO (G. Jacobs, T. Wendtlandt, D. Brunsbach, INR)	201
32.21.04	Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung	229
I.	COMET-Konzept (H. Alsmeyer, T. Cron, J.J. Foit, S. Schmidt-Stiefel, H. Schneider, W. Tromm, T. Wenz, IATF; 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)	229

II.	Untersuchungen zum EPR- Konzept – KAPOOL- und KATS-Experimente (G. Engel, F. Fellmoser, G. Fieg, H. Massier, H. Werle, INR; N. Prothmann, D. Raupp, W. Schütz, U. Stegmaier, IRS)	256
III.	Untersuchungen zum EPR- Konzept – KAJET-Versuche (G. Albrecht, H. Brüggemann, F. Huber, D. Raupp, W. Schütz, IRS)	267
IV.	Spreading of the core melt on the spreading area of the EPR (P. Ehrhard, M. Bunk, J.J. Foit, U. Müller, U. Siegel, IATF; F. Fellmoser, G. Fieg, H. Werle, INR; F. Huber, U. Stegmaier, IRS; R. Wittmaack, Siemens)	272
V.	Thermophysikalische Eigenschaften von Kernschmelzen (B. Schulz, G. Haase, IMF I)	287
32.21.05	Langfristige Containment-Kühlung	289
I.	SUCO-Programm (J.U. Knebel, G. Janssens-Maenhout, M. Daubner, IATF)	289
II.	PASCO-Programm (X. Cheng, H.J. Neitzel, He. Schmidt, J.U. Knebel, IATF)	304
32.21.06	Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen unter hochtransienten Bedingungen	310
	Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter (B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, A. Hirt, G. Hoffmann, O. Jonatzke, T. Jordan, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)	310
32.21.07	Analysen zum Containmentverhalten	320
I.	Spaltproduktausbreitung vom Primärsystem an die Umgebung bei einem schweren Unfall im EPR (R. Frutos, R.G. Gido, G. Hennes, P. Schmuck, INR)	320

II.	Containment Module for the Source Term Estimation Based on Plant Status (STEPS) The Containment Module Models (R.G. Gido, G. Henneges, INR)	333
32.21.08	Untersuchungen zur Kernzerstörung	364
I.	Ergebnisse der TE-Vorversuche zu den Experimenten in der QUENCH-Versuchsanlage (L. Sepold, S. Horn, W. Leiling, HIT)	364
II.	Inbetriebnahme-Versuche in der QUENCH-Anlage (P. Hofmann, A. Miassoedov, M. Steinbrück, H. Metzger, IMF I; J. Moch, D. Piel, L. Schmidt, IMF III; S. Horn, E. Mackert, W. Leiling, L. Sepold, HIT)	380
III.	Small-scale quench experiments (A. Miassoedov, L. Steinbock, IMF I)	418
IV.	Mechanical Effects in Single Rod Quench Tests (H. Steiner, IMF III)	429
V.	Analysen zu schweren Störfällen sowie Analysen kernzerstörender Unfälle (W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, S. Smit, D. Struwe, IRS; Ch. Messainguiral, CEA)	435
32.21.09	Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen	469
	(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)	
32.21.10	Beteiligung am PHEBUS-Projekt	480
	Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse (W. Hering, W. Sengpiel, S.-O. Smith, IRS)	480

32.22	<u>INNOVATIVE SYSTEME</u>	486
32.22.02	Passive Nachwärmeabfuhr	486
I.	Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen (G. Grötzbach, M. Wörner, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr, W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye, IRS; M. Alef, St. Genz, G. Janßen, M. Linder, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, HIK; X. Jin, Siemens/KWU)	486
II.	Experimentelle Untersuchungen von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen (W. Cherdron, G. Grötzbach, J. Aberle, P. Philipp, H. Sauter, M. Simon, I. Tiseanu, IRS)	505
32.22.04	Strukturelle Integrität	508
I.	Untersuchungen an austenitischen Stählen (B. Bennek-Kammerichs, K. Ehrlich, A. Falkenstein, S. Heger, R. Hübner, M. Schirra, IMF I)	508
II.	Charakterisierende Werkstoffuntersuchungen von Strukturmaterialien (R. Schmitt, M. Pfeifenroth, IMF II)	512
32.22.06	Untersuchungen zu Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme	515
	(W. Pfrang, B. Porscha, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)	
32.22.07	Containmentuntersuchungen für innovative Systeme	517
	KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Resuspension (J. Minges, W. Schütz, IRS; M.K. Koch, RUB-NES)	517

32.23	<u>STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG</u>	524
32.23.01	Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Transmutation von Aktiniden und Spaltprodukten	524
I.	SIRENE, ein Interface zwischen nuklearen Reaktorparametern aus ERANOS und dem Sicherheitsanalyse-Code SAS4A (A. Rineiski, INR)	524
II.	Veränderung der Pu-Qualität durch Bestrahlung in Schnellen Reaktoren (S. Jaag, E. Kiefhaber, INR)	531
32.23.02	Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen	536
	(Z. Kolarik, U. Müllich, INE)	
32.23.03	Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil	540
I.	Neutronische Untersuchungen zur verstärkten Brennstoffentladung aus hochangereicherten CAPRA-Kernen (W. Maschek, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)	540
II.	Erstellung eines neuen, verbesserten SIMMER-III-Neutronik Moduls (E. Kiefhaber, E. Hesselschwerdt, G. Buckel, W. Maschek, INR)	546
III.	SAS4A-Programmentwicklung (M. Eigemann, W. Pfrang, B. Porscha, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)	555
32.23.04	Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR	558
	(D. Freund, O. Jacobi, M. Heck, W. Ernst, H. Steiner, IMF III)	

32.23.05	Untersuchungen zu beschleunigergetriebenen, unterkritischen Anordnungen	562
I.	Thermohydraulische Auslegung einer beschleunigergetriebenen, unterkritischen Anlagenanordnung (ADS) (J.U. Knebel, X. Cheng, H.J. Neitzel, IATF)	562
II.	Vergleichende Untersuchungen zum Sicherheitspotential von unterkritischen, beschleunigergetriebenen Systemen (W. Maschek, B. Merk, INR)	569
III.	Flüssigmetallkorrosion (H. Glasbrenner, IMF III)	574
IV.	Generation of a Group Constant Library for Neutron Energy until 50 MeV. Tests and Applications (C. Broeders, I. Broeders, INR)	580
	VERÖFFENTLICHTE BERICHTE	587

32.21 LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT

32.21.01 Wasserstoffverbrennungsvorgänge

I. Zusammenfassung

(W. Breitung, A. Vesper, INR)

Abstract

The FZK research program on hydrogen behaviour in severe accidents addresses the three main phases of hydrogen specific phenomena occurring in severe accident sequences in pressurised water reactors

- hydrogen production,
- hydrogen distribution, and
- hydrogen combustion (Fig. 2.1).

These phases are investigated on three levels

- model development and verification by experiments,
- current reactor applications, and
- development of a next generation computer program (INCA).

This report describes the main results obtained in these R+D areas during 1997.

1. Wasserstoffquellen

Eine wichtige offene Frage bei der Wasserstoffproblematik ist die H₂-Erzeugung beim Fluten eines überhitzten Kerns, weil dies die Auslegung von Wasserstoffkontrollsystemen bestimmen kann. Entsprechende CORA-Versuche wurden mit einem neuen Modellansatz gedeutet, der im wesentlichen auf der isolierenden Wirkung des beim Fluten entstehenden Dampfes beruht (REFLOX-Code).

Die entsprechenden Strahlungsmodelle von REFLOX wurden in MELCOR 1.8.3 implementiert. Die Anwendung des verbesserten MELCOR-Programms auf den Versuch CORA-13 ergab zwar deutliche Verbesserungen, aber die gesamte H₂-Erzeu-

gung war zu gering (anders als mit REFLOX). Diese Abweichung liegt daran, daß MELCOR 1.8.3 keine Oxidation von verlagertem (geschmolzenem) Zircaloy erlaubt. Die neue MELCOR-Version 1.8.4 soll diese Beschränkung nicht mehr besitzen. Es ist deshalb geplant, die CORA-13-Analyse mit Version 1.8.4 und den verbesserten Strahlungsmodellen zu wiederholen. Diese MELCOR-Erweiterungen sollen dann auch an zukünftigen Einzelstabexperimenten und QUENCH-Versuchen im FZK verifiziert werden.

Falls sich die Dampfisolation und die dadurch verursachte Temperaturtransiente tatsächlich als der wesentliche Grund für die hohe transiente H₂-Erzeugung bei Flutversuchen bestätigen sollte, wäre für den Reaktorfall nur ein kleiner Effekt zu erwarten. Die Strahlungsverluste würden durch Dampfproduktion nur unwesentlich verringert.

2. Wasserstoffverteilung

Zur weiteren Modellentwicklung, Verifikation und Dokumentation von **GASFLOW** wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

- Die FZK- und Los Alamos-Entwicklungen wurden in einer gemeinsamen Version 2.1 zusammengefaßt.
- GASFLOW 2.1 wurde vollständig in FORTRAN 90 umgeschrieben.
- Theory, User und Programming Manual für GASFLOW 2.1 wurden fertiggestellt. Das Assessment Manual liegt in Draft-Form vor.
- Folgende neue Modelle wurden für die Analyse von schweren Unfällen entwickelt:
 1. Wärmeleitung in mehrschichtigen Strukturen, z.B. Liner auf Beton.
 2. Generalisierte Interface-Routine zur Eingabe beliebiger Masse-, Impuls- und Energiequellen in ein Reaktorcontainment.
 3. Mehrere Modelloptionen zur Entspannung von überhitzten Wasser/Dampfgemischen auf den Gleichgewichtscontainmentdruck.
 4. Routinen für eine integrale Massen- und Energiebilanz im Containment.
 5. Simulation von Berstscheiben oder anderen druckabhängigen Öffnungen im Containment (Klappen, Türen).
 6. Transport und Verteilung von luftgetragenen Spaltprodukten unter Berücksichtigung der Nachzerfallswärme.

7. Automatisierte Gittererzeugung mit einem kartesischen Gitter für einfache geometrische Grundformen (Kugel, Zylinder, Wand).
 8. Zusammenfassung von 3D-Gitterzellen zu einem „Raum“, für den gemittelte Temperaturen und Konzentrationen berechnet werden können (Auswertung des 7λ -Kriteriums, Vergleich zu RALOC- oder WAVCO-Analysen).
 9. Verifikation eines Einzelnode-Rekombinatormodells an Battelle Gx-Versuchen.
- Durchführung von Wiederholungsanalysen zur Verifikation der neuen GASFLOW-Version 2.1
1. HDR-Versuch T31.5
 2. Phebus-Thermohydraulik-Tests 6A, 10A, 4A, 4B
 3. Phebus-Kondensationsversuche
 4. Battelle Gx-Versuche Gx6 und Gx7.

Insgesamt wurde im Berichtsjahr 1997 die neue GASFLOW-Version 2.1 fertiggestellt, nahezu vollständig dokumentiert und weitgehend an verschiedenen Testproblemen verifiziert. Das Programm kann 1998 zusammen mit Siemens/KWU für detaillierte Analysen am EPR eingesetzt werden.

Das **Verteilungsprogramm V3D** wurde 1997 in Bezug auf die Strömungsdynamik und die Turbulenzmodellierung fertiggestellt und an FZK Rohrversuchen verifiziert (Abb. 2.3.23). V3D soll die Verteilungsrechnungen in dem geplanten modularen und adaptiven Programmsystem INCA abdecken (INtegrale Containment Analyse). V3D soll 1998 in folgenden Bereichen erweitert werden:

- Beschreibung von Kondensation und Verdampfung (2-Phasenströmung),
- Wärmeleitung in Strukturen, und
- Modelle für Zünder und Rekombinatoren.

3. Wasserstoffverbrennung

Im 12 m-Rohr wurden 1997 **Versuchsreihen** zu folgenden Fragestellungen durchgeführt:

- Löschvorgänge in mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen (8-12 % H_2),
- Flammenbeschleunigung in H_2 - O_2 -Gemischen mit verschiedenen inerten Additiven (N_2 , Ar, He, CO_2),
- Deflagrations-Detonations-Übergänge in H_2 -Luft-Gemischen.

Zu allen drei Serien wurden begleitende Experimente mit derselben Geometrie, aber unterschiedlichen Längenskalen unternommen. Ziel ist die Erstellung einer breiten Datenbasis zur Verifikation von theoretischen Modellen und konservativen Kriterien.

Bei den **Löschvorgängen** wurden folgende charakteristische Regimes beobachtet:

- pulsierende, instabile, aber noch durchgehend brennende Flammen,
- lokales Verlöschen der führenden, hochturbulenten Kernflamme, Wiederzündung durch eine nachfolgende langsamere Flammenfront, und
- globales Verlöschen des gesamten Brennvorgangs.

Die derzeit laufende Programmentwicklung im Bereich der turbulenten Verbrennungssimulation soll an diesen Versuchsergebnissen überprüft werden.

Die Versuche zur **Flammenbeschleunigung** zielen auf die Entwicklung eines konservativen Kriteriums (analog zum DDT-Kriterium), das es erlaubt, die Möglichkeit einer Flammenbeschleunigung zu beurteilen. Falls Flammenbeschleunigung nicht auftritt, kann mit vereinfachten Ansätzen, z.B. GASFLOW, gerechnet werden, ansonsten müßte das Problem mit COM3D detailliert modelliert werden.

Die bisherigen Versuche haben gezeigt, daß alle wasserstoffreichen Gemische ($\phi > 1$) unabhängig von der inerten Beimischung (N_2 , Ar, He, CO_2) nur einen geringen Sicherheitsabstand zwischen der Zündgrenze und der Beschleunigungsgrenze besitzen. Wasserstoffkontrollsysteme sollten daher so ausgelegt werden, daß keine überstöchiometrischen Gemische im Containment entstehen, um so lokale dynamische Lasten aus beschleunigten Flammen auszuschließen.

Die Versuche sollen 1998 abgeschlossen und zusammen mit den russischen Daten ausgewertet werden. Als Ergebnis wird ein allgemeines Skalierungsgesetz für unterschiedliche Gasmischungen und geometrische Skalen angestrebt.

Die **DDT-Versuche** haben zum Ziel, das 1995/96 aufgestellte halb-empirische 7λ -Kriterium durch Detailuntersuchungen und Modellrechnungen theoretisch zu untermauern. Diese Arbeiten sind auch Teil eines EU-Projektes. Es ist 1997 gelungen, die beiden verschiedenen DDT-Modes, die in der Literatur beschrieben sind, im 12 m-Rohr reproduzierbar zu erzeugen und lokale Strömungsgrößen zu messen (Abb. 2.4.19 und 2.4.26). Der Vergleich zu analogen Versuchen in Rußland auf kleinerer

Skala hat gezeigt, daß Selbstzündung und DDT mit zunehmender Skala erleichtert werden (abnehmende kritische Machzahl).

Im Bereich der **Verbrennungssimulation** wurde der **COM3D-Code** um ein PDF-Modell zur Berechnung der turbulenten Reaktionsraten erweitert. Verschiedene Schließungsansätze für das Gleichungssystem wurden implementiert und getestet. Die PDF-Entwicklung soll 1998 in Zusammenarbeit mit der Universität Stuttgart fortgeführt werden.

Das einfachere und schneller rechnende Eddy-Dissipation-Modell für die chemische Reaktionsrate wurde verallgemeinert. 1998 soll überprüft werden, ob die darin enthaltenen freien Parameter an den vorhandenen turbulenten Verbrennungsversuchen (FZK-Rohr, RUT-Anlage) festgelegt werden können.

In COM3D wurden für Vergleichszwecke verschiedene numerische Lösungsverfahren erster und zweiter Ordnung implementiert. Arbeiten zur Parallelisierung von COM3D für die Rechenanlage SP2 wurden begonnen.

Ein **Gitteradaptionsverfahren** für Finite-Volumen-Programme mit kartesischen Koordinaten wurde aus USA übernommen (AMR), auf FZK-Rechner implementiert und mit dem FZK-Programm DET3D gekoppelt. Ziel ist die Erstellung eines Adaptionsverfahrens, das modular mit den vorhandenen FZK-Programmen V3D, COM3D und DET3D gekoppelt werden kann. Das AMR-Modul wird derzeit so erweitert, daß interne Strömungshindernisse simuliert werden können.

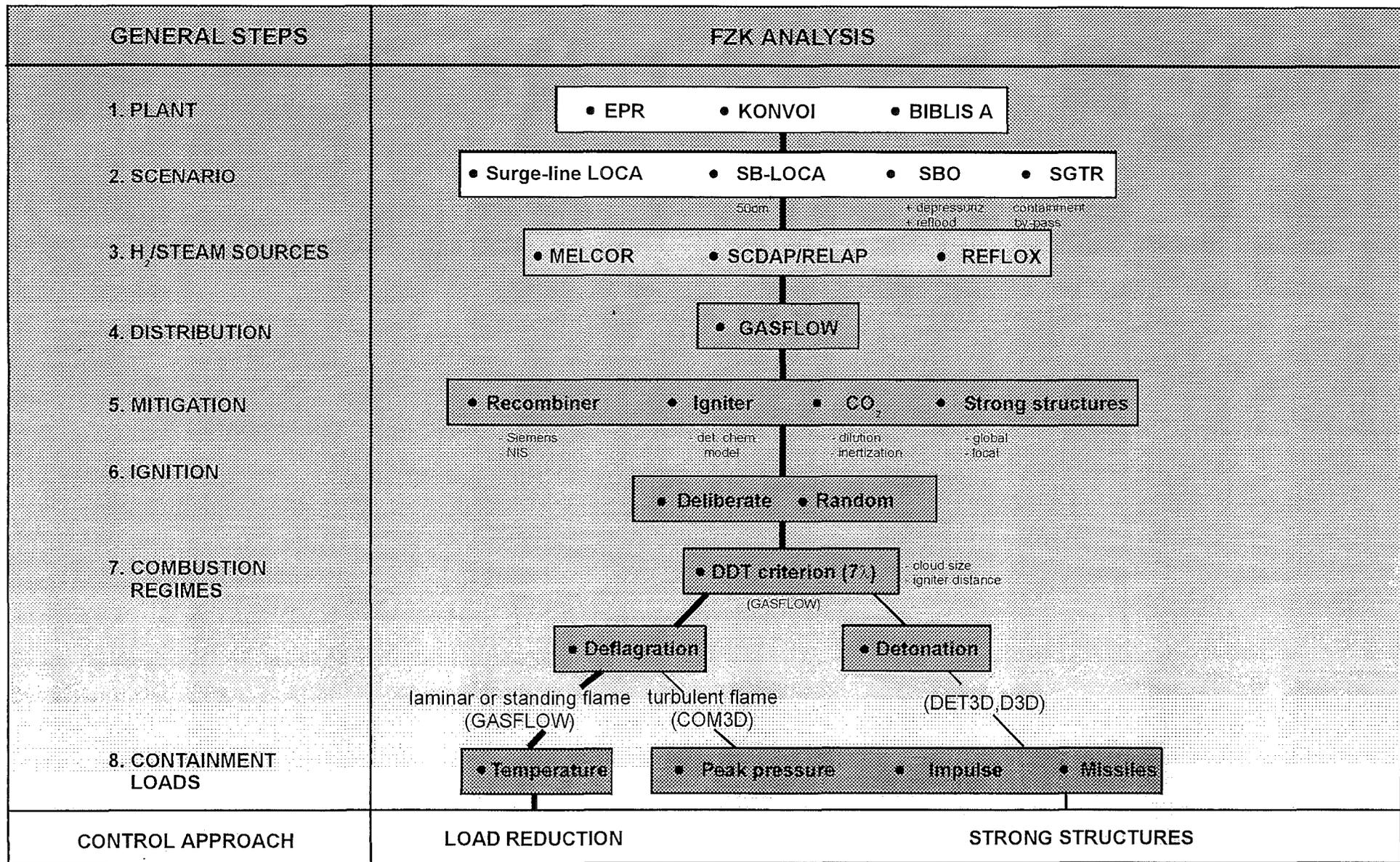


Fig.2.1: Analyses for hydrogen behaviour and control

II. Hydrogen production

Application of the MELCOR code to analysis of the CORA-13 experiment

(A. Miassoedov, INR)

Motivation

Attempts to model the hydrogen generation under reflood conditions were not successful so far, using the existing system codes like SCDAP/RELAP5, MELCOR, KESS or others. In the State of the Art Report (SOAR) [1] of the Committee on the Safety of Nuclear Installations (CSNI) it was concluded that the phenomena in quenching degraded core bundles by water injection were poorly understood and modeled by severe accident codes, and that codes need further detailed models to describe the particular reflood process.

Based on the detailed analysis of the CORA experiments which were performed at Forschungszentrum Karlsruhe between 1987 and 1992, a program package was written which describes the major physical processes during the injection of water into an overheated core [2]. The model assumes intact rod geometry. Material relocation and convective heat transfer are neglected. The initial rod geometry provides the largest possible surface area for metal/steam contact. Application of the model results therefore in worst-case hydrogen generation rates, which are needed for further accident studies. Though the proposed code shows the satisfactory predictive capabilities, the included models require further detailed development. The aim of this work was to implement developed models in the system code MELCOR 1.8.3 and validate them by analysis of the CORA-13 experiment. CORA-13 experiment with the PWR-type bundle was performed to investigate the quenching processes at high temperatures. This experiment was chosen to be the International Standard Problem by the OECD/CSNI for the computer codes validation [3].

The description of the implemented models and obtained results are discussed below.

Radiative heat transfer through the steam containing environment

Thermal radiation in MELCOR is modeled as exchange of radiation between pairs of surfaces with the intervening gray medium and, is constructed along the description provided in [4].

The net heat flux from surface i to surface j is given in terms of the surface radiosities by the expression:

$$q_{ij} = A_i F_{ij} \tau_{ij} (J_i - J_j), \quad (1)$$

where A_i is area of the surface i , F_{ij} — geometric view factor from surface i to surface j , and τ — geometric mean transmittance between surfaces i and j .

Radiation heat transfer also occurs between each of the surfaces and the steam medium, according to the expression:

$$q_{is} = A_i \varepsilon_s (J_i - E_{bs}), \quad (2)$$

where ε_s is the steam emissivity/absorptivity and E_{bs} is the blackbody emissive power of the medium. The steam emissivities ε_s are evaluated based on [5], which specifies in tabular form the steam emissivity versus steam temperature and optical depth.

It was shown in [2] that the simplified treatment of the steam absorption spectrum can lead to significant errors, therefore the model described above was modified in the following way:

The total steam absorption k_g is calculated according to the following equation:

$$k_g = \frac{\int_0^{\infty} a_{\lambda} e_{b\lambda}(T_{surf}) d\lambda}{\sigma T_{surf}^4}, \quad (3)$$

where a_λ is the absorption for monochromatic radiation of wave length λ which depends on the pressure p and mean path length L :

$$a_\lambda = 1 - \exp(-k_{g\lambda} p L), \quad (4)$$

and T_{surf} and $e_{b\lambda}$ are the surface temperature and Planck function respectively:

$$e_{b\lambda}(\lambda, T) = \frac{2\pi hc_0^2}{\lambda^5 (e^{\frac{hc_0}{k\lambda T}} - 1)}, \quad (5)$$

where

- h — Planck's constant,
- k — Boltzmann's constant,
- c_0 — speed of light,

The absorption coefficients for steam are taken from [6]. The whole absorption spectrum of steam is considered to consist of 439 bands. The spectral absorption coefficients are determined for six temperatures (300, 600, 1000, 1500, 2000 and 2500 K). At other temperatures, absorption coefficients can be obtained by linear interpolation. The values of the coefficients are assumed to be constant within each wave length band. Therefore, Equation (3) can be approximated by

$$k_g = \frac{\sum_{i=1}^{439} a_{\lambda_i} e_{\lambda_i}(T_{surf}) \Delta\lambda_i}{\sigma T_{surf}^4}, \quad (6)$$

where $e_{\lambda_i}(T_{surf})$ is the average value of the Planck function evaluated at the wave length λ_i at the band center. Finally, the steam absorption coefficient is evaluated,

$$a_g = \frac{\ln(1 - k_g)}{L}. \quad (7)$$

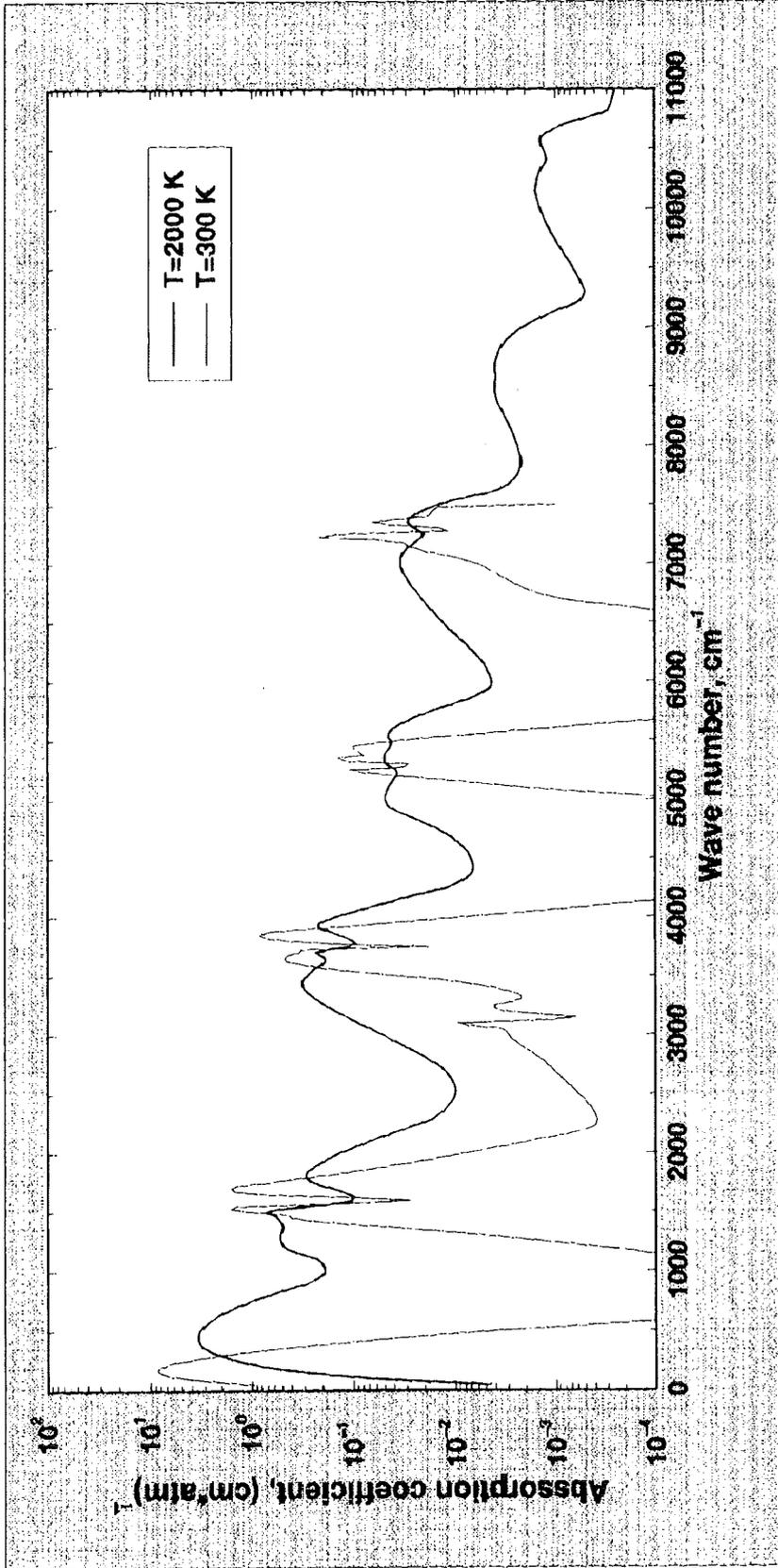


Fig.2.2.1: Absorption coefficients of steam.

The temperature dependence of the steam absorption spectrum is presented in Figure 2.2.1.

Gas transport from the bundle through the CORA facility to the location of hydrogen measurements (developed for CORA experiments)

The analysis of calculations performed for the CORA experiments shows a significant difference between the measured and calculated values of hydrogen production. In almost all the calculations, the hydrogen generation starts immediately after the beginning of the steam/zircaloy exothermic reaction and reaches its maximum soon. However, the experimental data show a slow increase in the hydrogen production during the transient phase. This discrepancy can be seen very well in the calibration test with bundle CORA-7, in which a mixture of argon and hydrogen was radially injected into the test section. It is clearly visible from the experiment that the higher gas speed in the bundle, like during quenching, gives a much better representation of the real hydrogen pressure.

A possible explanation is provided by analysis of the CORA facility. The hydrogen released in the test section is mixed with argon and steam, and is transported to the condenser and further on to the measuring chamber through capillary tubes. The mixing and transport processes are then responsible for the delay and reduction in the measured hydrogen release rates.

In order to obtain a better description for the actual hydrogen production rates in the bundle the following model is proposed. It is based on the assumption that the mixing process in the bundle is much faster than the gas transport.

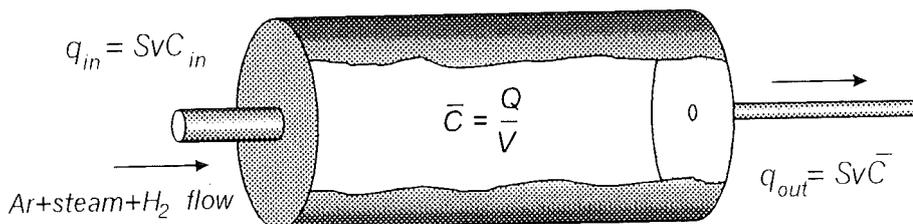


Fig.2.2.2: Simplified diagram used for gas transport modeling in CORA facility

The simplified system considered is presented in Figure 2.2.2. The volume V represents all volumes within the CORA facility between the source (bundle) and the detector location in the mixing chamber.

The expressions for the hydrogen inlet q_{in} and outlet q_{out} flows have the following form:

$$q_{in} = SvC_{in}^{\rightarrow} \quad (8)$$

$$q_{out} = SvC^{\leftarrow} \quad (9)$$

where

- q_{in} — hydrogen inlet flow,
- q_{out} — hydrogen outlet flow,
- S — inlet and outlet tube cross-section,
- v — gas flow velocity,
- C_{in}^{\rightarrow} and C^{\leftarrow} — hydrogen concentration in the inlet and outlet flows consequently.

The hydrogen outlet flow q_{out} refers to the flow in the measuring chamber in the CORA experiments.

The total amount of the hydrogen in the system volume V , has the form of:

$$Q = CV^{\leftarrow} \quad (10)$$

where C^{\leftarrow} is the mean hydrogen concentration in the system. Then the conservation law for the total H_2 amount reads as:

$$\frac{dQ}{dt} = q_{in} - q_{out} \quad (11)$$

or

$$V \frac{dC^{\leftarrow}}{dt} = SvC_{in}^{\rightarrow} - SvC^{\leftarrow} \quad (12)$$

For the aim of simplicity the product of Sv is assumed to be equal for the inlet and outlet flows. Converting the left hand side of Equation 12 to

$$\frac{V}{Sv} \frac{dC}{dt} = SvC_{in} - SvC, \quad (13)$$

leads to

$$\frac{V}{Sv} \frac{dq_{out}}{dt} = q_{in} - q_{out}. \quad (14)$$

Denoting

$$\frac{V}{Sv} = \alpha, \quad (15)$$

where α is the characteristic hydrodynamic time constant of the system response, finally the following equation for the hydrogen outlet flow q_{out} is obtained:

$$\alpha \frac{dq_{out}}{dt} = q_{in} - q_{out}, \quad (16)$$

which has the solution of the form:

$$q_{out} = e^{-\alpha t} \int_0^t q_{in}(\tau) e^{\alpha \tau} \alpha \tau. \quad (17)$$

Taking into account the delay time of the system response t_{del} and assuming that the inlet flow $q_{in} = q_0 = const$, as in the CORA-7 pre-test, then the Equation 17 is reduced to

$$q_{out}(t) = \begin{cases} q_0, & 0 \leq t \leq t_{del}: & q_{out} = 0, \\ q_0, & t_{del} \leq t \leq T + t_{del}: & q_{out} = q_0(1 - e^{-t - \alpha}), \\ 0, & t > T + t_{del}: & q_{out} = q_0(1 - e^{-(T+t_{del}) - \alpha})e^{-t - \alpha}. \end{cases} \quad (18)$$

The α parameter in Equation 18 depends on a number of variables:

$$\alpha = f(q_{Ar}, q_{steam}, q_{H_2}, V, S, \dots). \quad (19)$$

Since the exact dependence is not known, α is assumed to have the following form:

$$\alpha = \frac{V_{eff}}{q_{Ar} + q_{steam} + q_{H_2}} \quad (20)$$

where V_{eff} is the effective system volume, q_{Ar} , q_{steam} and q_{H_2} are the argon, steam and hydrogen flows respectively. The effective system volume V_{eff} was chosen from the CORA-7 pre-test in such a way, that the model gives the best description of the experimental results. The value of V_{eff} is then the fixed property used for the analysis of all other CORA experiments. The results of the gas transport model application to the CORA-7 pre-test is shown in Figure 2.2.3.

Inclusion of the transport model leads to a good agreement between calculated and measured H_2 flow rates. This shows the important role of gas transport in the CORA tests which must be described correctly for a meaningful analysis of hydrogen production in CORA experiments.

For a meaningful analysis of hydrogen production in CORA experiments, the important role of the hydrogen mixing and transport should be taken into account, which is currently not available in the existing computer codes. The appropriate model was developed on the basis of the results of the CORA-7 pre-test. Inclusion of that model in the calculations leads to a very good agreement between the calculated and measured H_2 flow rates.

Thermal conductivity of the shroud fiber insulation

The shroud insulation consists of the ZrO_2 fiber material which is located on the outer shroud surface. The technical data of the insulation given by the manufacturer (Zircar) [7] are presented in Table 1. These data were validated before application. In the CORA-13 experiment a number of measurements were performed by means of thermocouples located on the outer and inner shroud surface, but only one thermocouple (location 950 mm) survived up to the end of the experiment. All other thermocouples failed at approximately 4500 seconds.

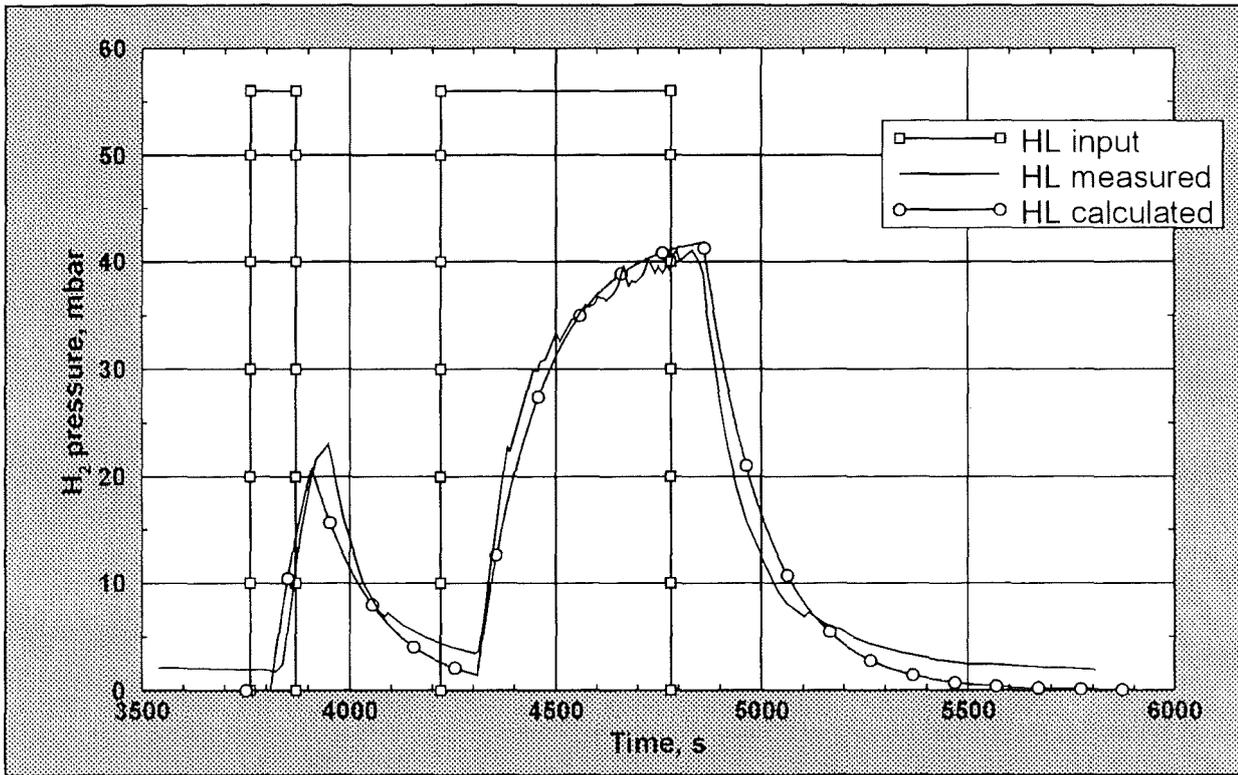


Fig. 2.2.3: Comparison of the H₂ pressure in the mixing chamber in CORA-7 pre-test with calculated data.

Composition, %	
ZrO ₂	92
Y ₂ O ₃	8
SiO ₂	<0.3
Bulk density, g/cm ³	
	0.48
Porosity, %	
	92
Maximum use temperature, °C	
	2200
Melting temperature, °C	
	2590
Heat capacity, J/kg·K	
	480
Thermal conductivity, W/m·K	
400 °C	0.08
800 °C	0.11
1100 °C	0.14
1400 °C	0.19
1650 °C	0.24

Table 1: Properties of the ZrO₂ fiber insulation

The data from Table 1 were used to calculate the temperature profile in the fiber insulation plate. A simple heat conduction problem in the planar geometry was solved using the following boundary conditions: at the inner side of the insulation plate the temperatures measured in the experiment were used as input data, the outer side of the insulation plate exchanges heat with the high- temperature shield, whose temperature was also determined from the experiment. This procedure allows to check, whether it is possible to reproduce the temperature distribution in the insulation plate using the data, indicated in Table 1. The model resolves the temperature profile in the fiber insulation plate, and the calculated temperatures at the outer shroud side were compared with the experiment.

The results of the calculations are presented in Figure 2.2.4. The use of the data presented in Table 1 leads to an underestimation of the insulation temperatures at the outer side. The values of the thermal conductivity given in the table seem to be too low to reproduce the temperature history correctly. The presence of the shroud insulation in the experiment plays a very important role in the whole process, therefore the technical data

of the fiber insulation must be determined correctly in order to get the adequate results in computer simulations. Different studies [8, 9, 10] show that the heat exchange processes in the fiber material are extremely complex. The properties of the fiber materials, mainly temperature conductivity, strongly depend on the temperature of the material. The thermal conductivity increases considerably with the increasing temperature due to the contribution of radiation heat exchange between the fibers. This temperature dependence can be well described by exponential functions [9]. Another parameter which also affects the thermal conductivity of the fiber material is the surrounding atmosphere [9, 11]. In CORA experiments, this atmosphere consists of argon, hydrogen and steam, and their influence on the insulation properties must be taken into account. Particularly steam can lead to the sharp decrease of the insulating effect at lower temperatures, but also at high temperatures the increase of thermal conductivity is significant. Moreover, the windows in the shroud also lead to an increase of the mean values of the fiber insulation. Because of the complex modeling of the fiber thermal conductivity accounting its dependence from the atmosphere and temperature the following method was proposed. The thermal conductivity coefficients of the fiber insulation were adjusted in such a way that the solution of the heat conduction problem gives the best results for the temperature values at the outer side of the shroud. The adjusted values of the thermal insulation can be represented by the two parts both having exponential temperature dependence. The first part refers to the experiment phase without steam presence in the bundle (up to 3300 seconds). The second part represents the insulation thermal conductivity values which account for the steam presence and contribution of the windows to the mean thermal conductivity values. Using these new values, the temperature profile in the fiber insulation plate was recalculated, and the results are presented in the Figure 2.2.5.

MELCOR input data

The CORA-13 input deck for MELCOR was developed at the University of Bochum [12] and was kindly made available for the model validation. In the MELCOR calculations it was assumed that 25 representative rods of the CORA-13 experiment are modeled in four concentric rings. Rings 2 and 4 are electrically heated. Shroud with the fiber insulation is modeled in the ring 4. Two absorber rods are modeled in ring 3 together with 6 unheated rods. The whole height of the core is divided in 19 axial segments. Two zircaloy grid spacers (upper and lower) and one inconel grid spacer (central) are modeled, the inconel

and zircaloy masses are taken into account in the respective CORA-cell. Electrical heating of the rods is simulated by means of a special MELCOR subroutine for CORA-13 to determine power generation in the electrically heated rods. Quench phase of the experiment (at about 4870 seconds) is modeled using two control volumes (bundle quench source and bypass quench source).

Thermal conductivity of the fiber insulation material strongly depends on the surrounding atmosphere and, as a result, on time. It is not directly possible to introduce a time dependence for the thermal conductivity values in the input decks, therefore MELCOR calculations were carried out up to the moment of the changes in the atmosphere composition (in CORA-13 steam injection starts after approximately 3300 seconds) and the new values were changed in the restart file. The calculations were then continued. The calculations were first performed using thermal conductivity values obtained in [2], but they appeared to be too high, so the escalation phase was predicted by MELCOR too late leading to a great underprediction of the bundle temperatures (Figure 2.2.6) and consequently to the total amount of generated hydrogen. Therefore, it was decided to implement the data from [9] where thermal conductivity values for the similar ZrO_2 insulation fibers in air atmosphere were estimated. These data are presented in Table 2. Results of MELCOR calculations with these data are presented in Figures 2.2.7 - 2.2.10. The start of the escalation phase is well predicted. The standard MELCOR version calculates cladding surface temperatures of the heated rods by about 150 K, whereas the modified thermal conductivity coefficients of the shroud insulation result in well predicted temperature levels. At the 150 mm elevation the cladding temperatures are overestimated up to 200 K without modeling the cross-flow inlet of argon and steam.

Hydrogen release rate and total hydrogen generation are presented in Figures 2.2.11 and 2.2.12. The generation rate during the escalation phase is well predicted, but the hydrogen spike due to quenching was not captured, therefore the total amount of hydrogen is roughly underestimated (app. 150 g in calculations compared to app. 210 g in the experiment).

Figure 2.2.13 shows the application of the gas transport model to the hydrogen production rate predicted by MELCOR. The calculated generation rate corresponds well with the measured data in the escalation phase.

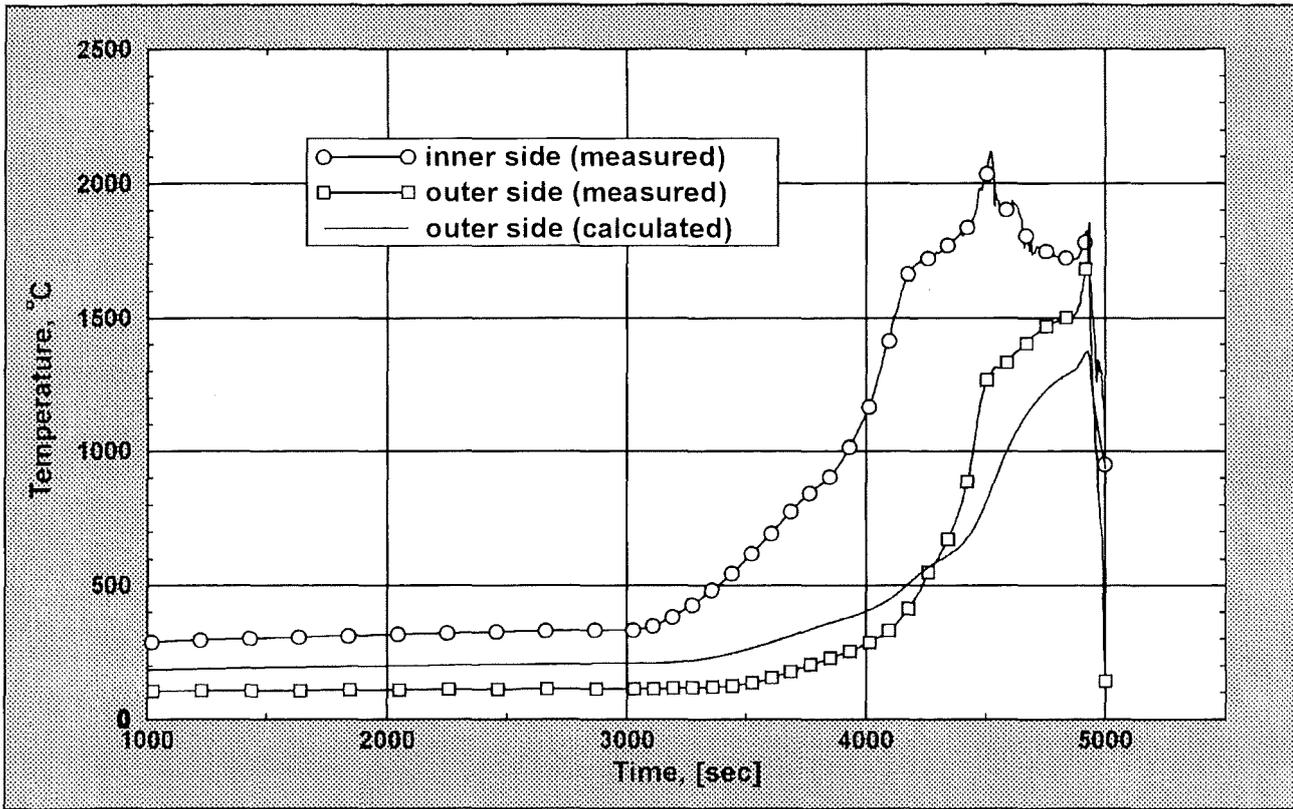


Fig.2.2.4: Comparison of the measured and calculated temperatures at the inner and outer sides of the shroud insulation. Elevation 950 mm. Thermal conductivity as given by the manufacturer.

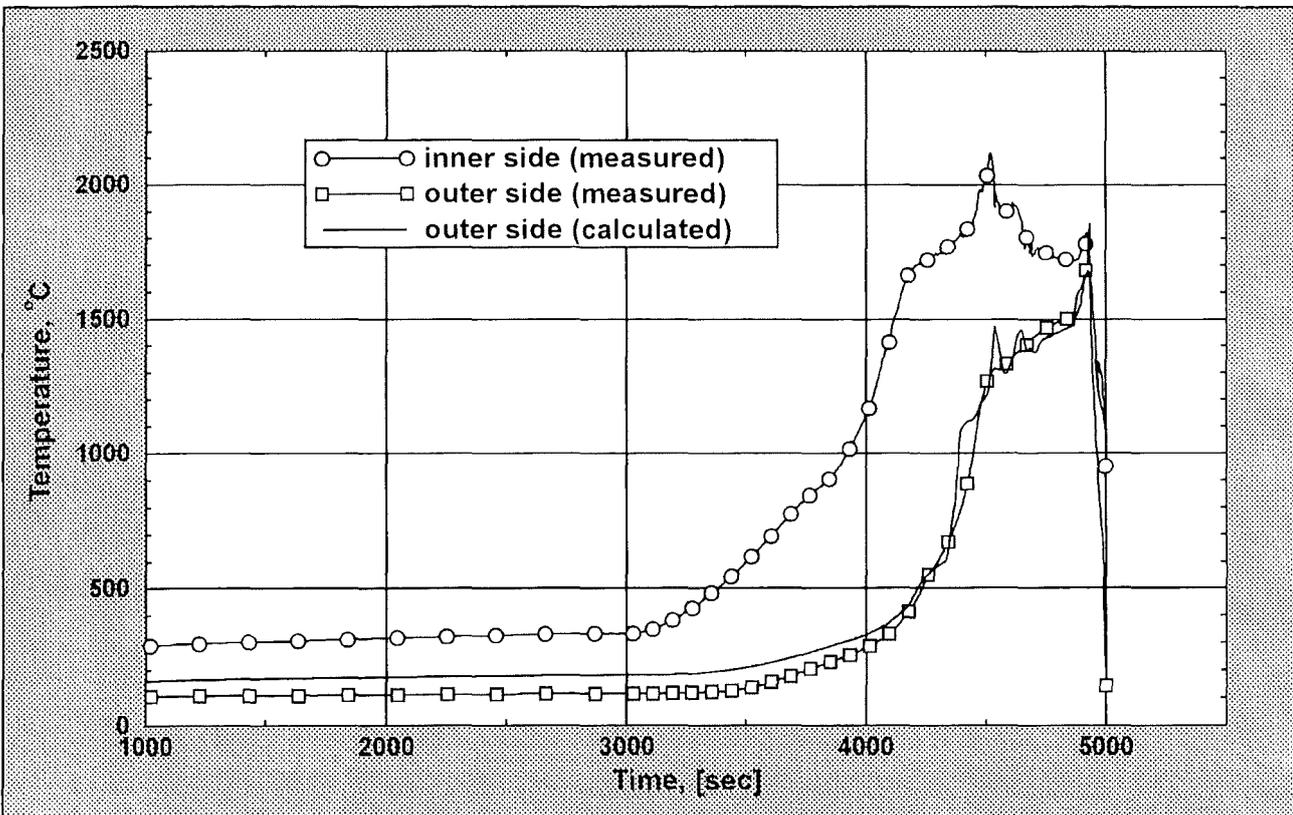


Fig.2.2.5: Comparison of the measured and calculated temperatures at the inner and outer sides of the shroud insulation. Elevation 950 mm. Adjusted thermal conductivity.

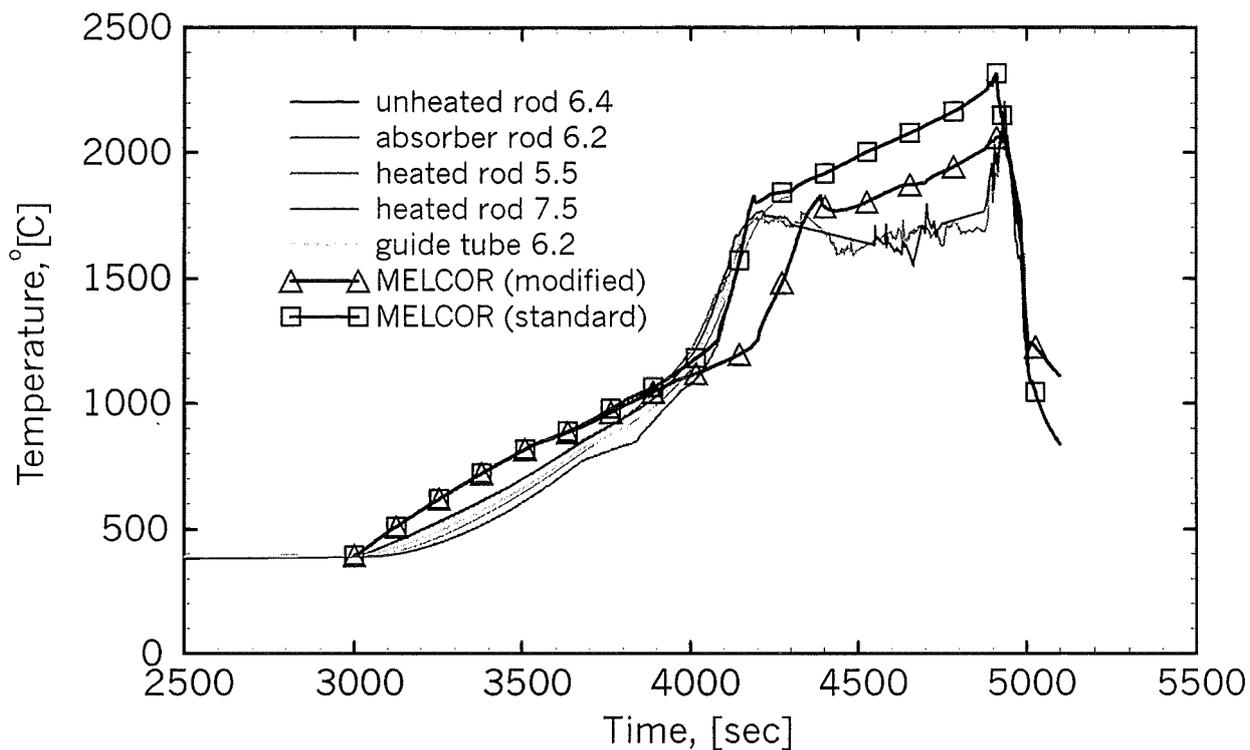


Fig.2.2.6: Comparison of the measured and calculated temperatures. Elevation 950 mm

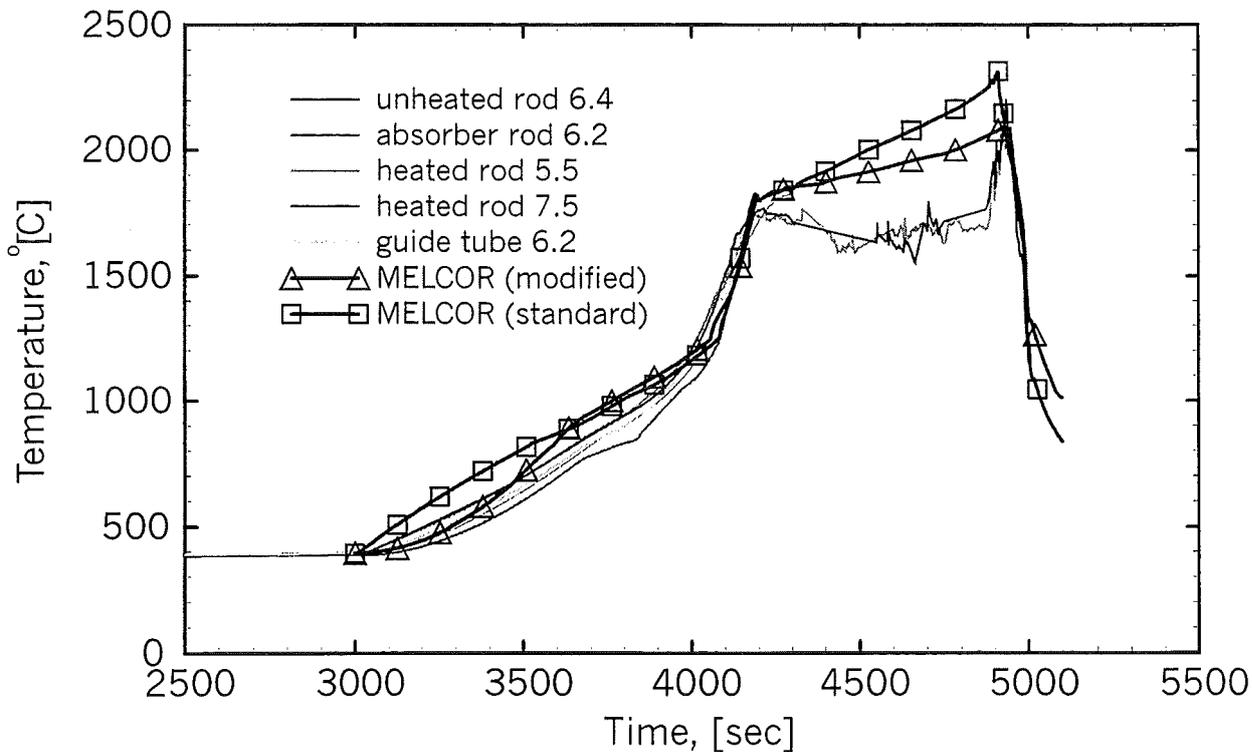


Fig.2.2.7: Comparison of the measured and calculated temperatures. Elevation 950 mm

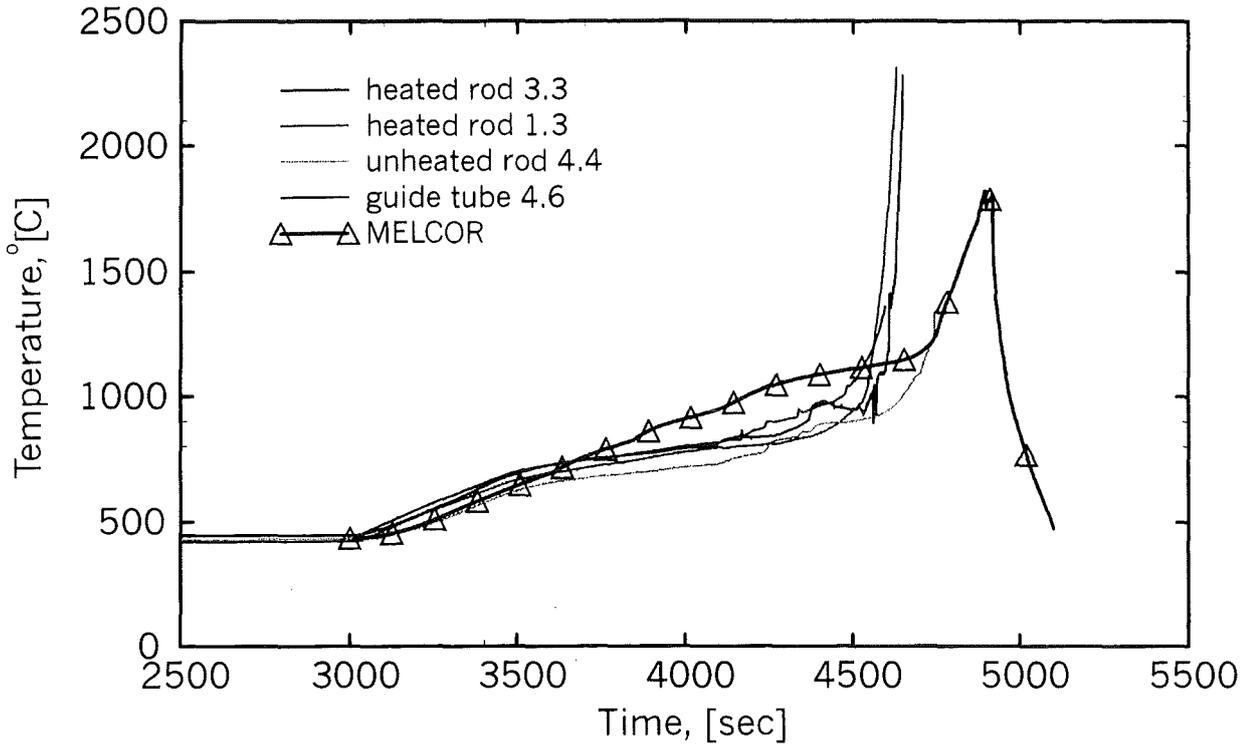


Fig.2.2.8: Comparison of the measured and calculated temperatures. Elevation 150 mm

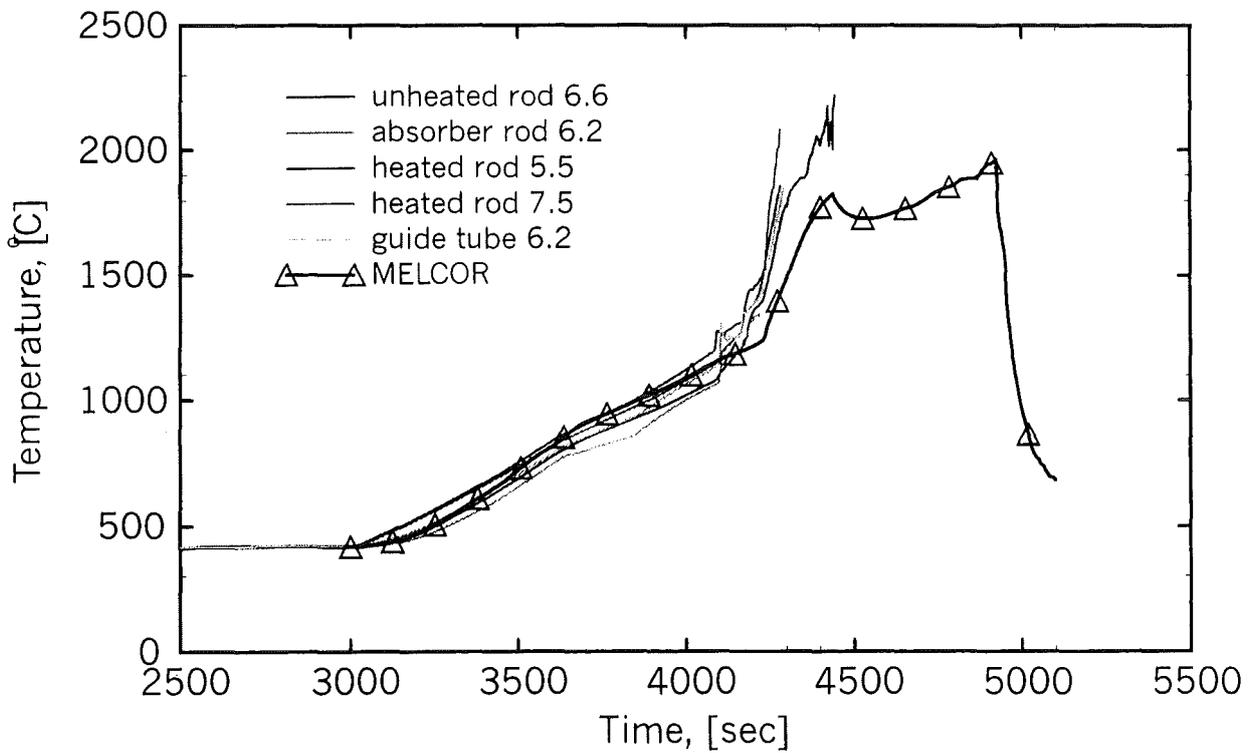


Fig. 2.2.9: Comparison of the measured and calculated temperatures. Elevation 550mm

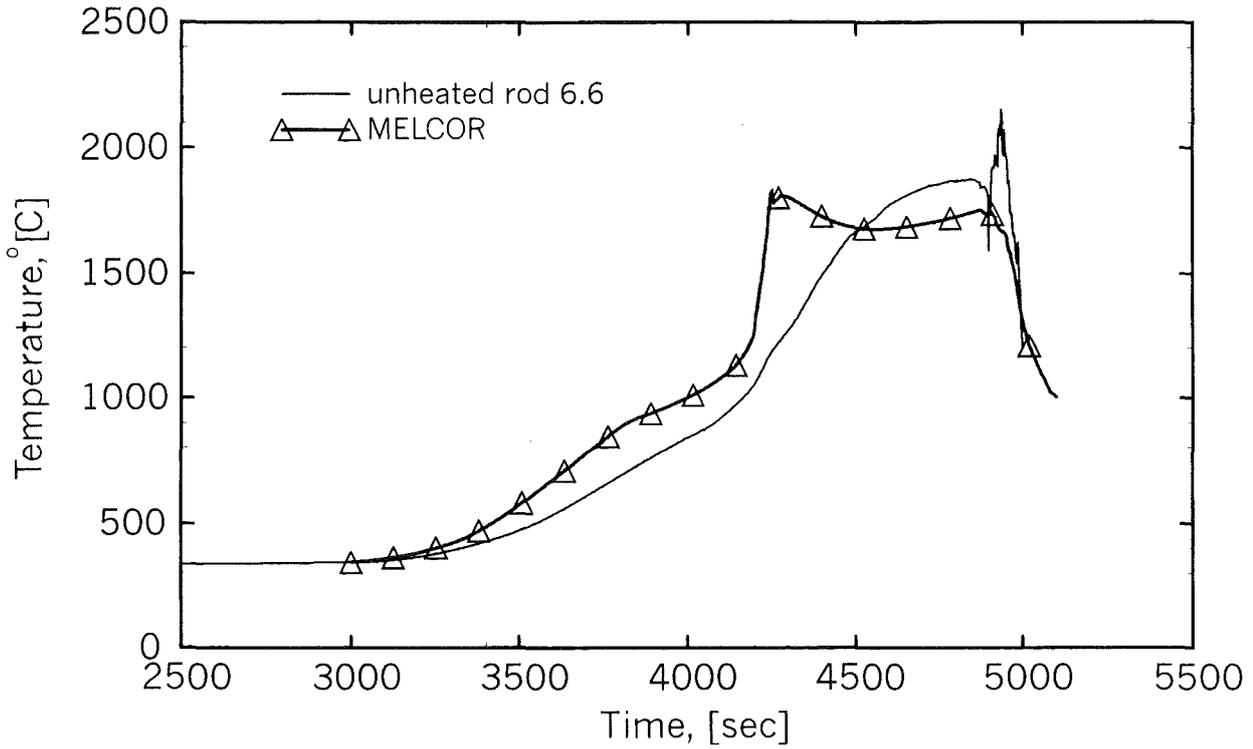


Fig. 2.2.10: Comparison of measured and calculated temperatures. Elevation 1150 mm

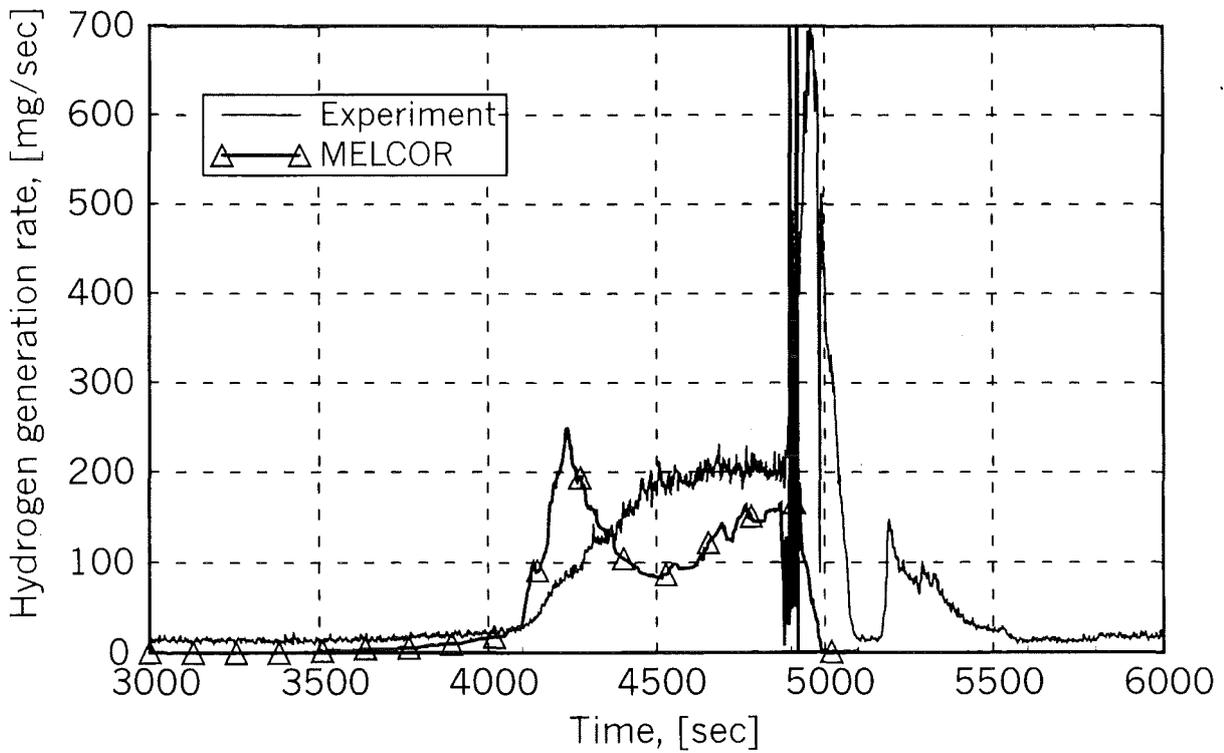


Fig. 2.2.11: Measured and calculated hydrogen generations rates (without gas transport modeling)

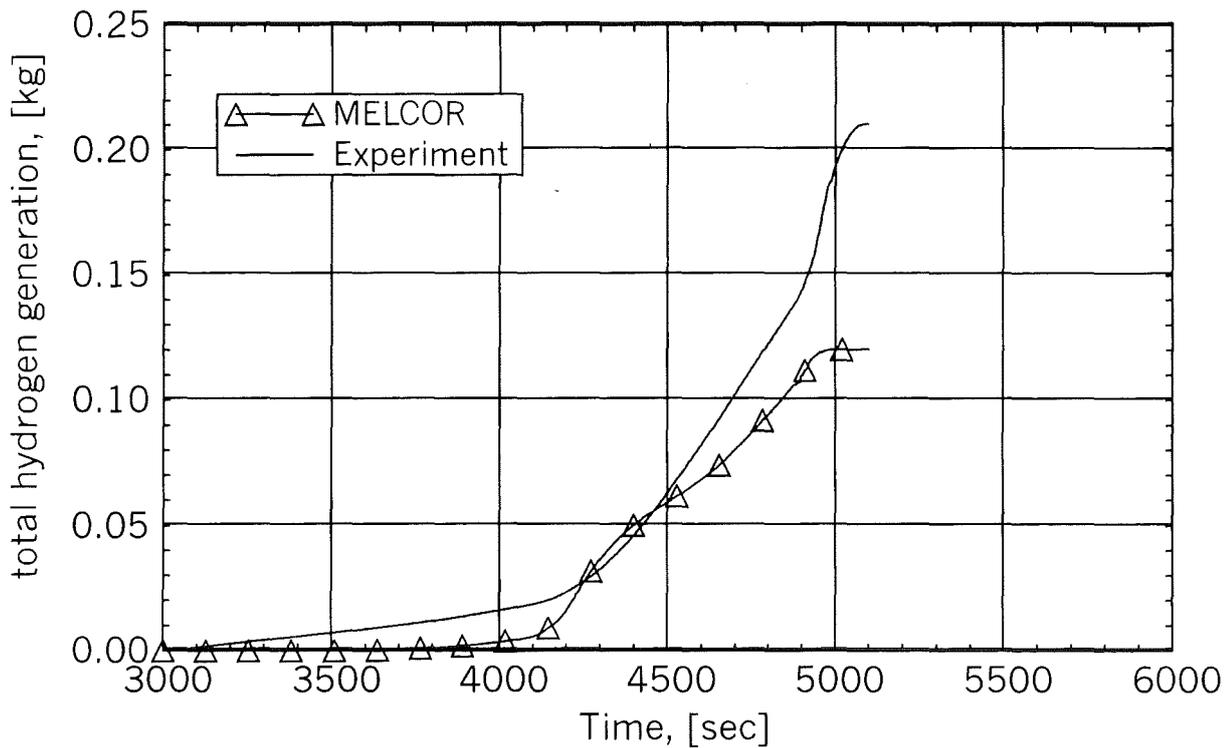


Fig. 2.2.12: Measured and calculated total hydrogen generation

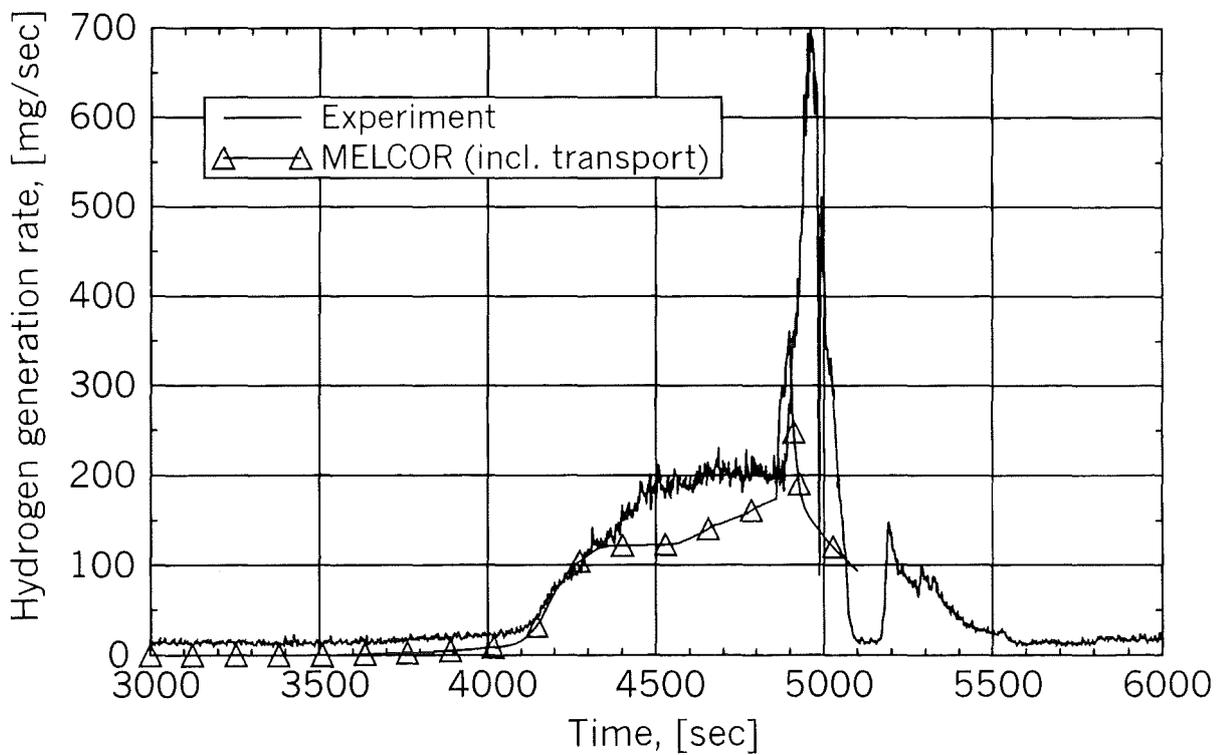


Fig. 2.2.13: Comparison of the measured and calculated hydrogen generation rates including gas transport modeling

Temperature, °C	300	550	700	873	1083	1173	1248	1700	2100	2500
Thermal conductivity, W/m·K	0.06	0.09	0.12	0.17	0.27	0.32	0.37	0.92	2.07	4.63

Table 2: Thermal conductivity coefficients of the ZrO₂ fiber insulation

Conclusion

New models were developed for an improved simulation of CORA quench tests in the following areas:

- radiation transport in steam containing atmospheres,
- gas transport in the CORA facility, and
- thermal conductivity of the shroud insulation.

The models were implemented into the MELCOR code and applied to CORA-13. The correct treatment of the H₂-Transport in CORA tests turned out to be necessary for any realistic calculation. The increased thermal insulation of the bundle during the reflood, which is caused by the increased steam partial pressure, led to a better agreement of the calculated hydrogen generation rate, but the total H₂-amount was still too low. This is attributed to the MELCOR 1.8.3 models which do not allow oxidation of relocated (molten) Zircalloy. The total H₂ amount was predicted very well with REFLOX, which suppresses relocation of molten Zr and permits oxidation throughout the experiment duration.

Further improvements of the MELCOR code are necessary and planned by using better oxidation kinetics (for finite Zr layers), removing the current MELCOR limitation with respect to oxidation of relocated material, and by validating the MELCOR model parameters with up-coming single-pin and QUENCH tests.

References

- [1] S.R.Kinnersly, J.N.Lillington, A.Paorracchia, K.Soda, K.Trambauer, P.Hofmann, Y.Waarenpera, R.A.Bari, C.E.L.Hunt, J.A.Martinez. In-Vessel Core Degradation in LWR Severe Accidents: A State of the Art Report to CSNI, January 1991. NEA/CSNI/R(91)12, November 1991.
- [2] A.Miassoedov. Ein Modell zur Beschreibung der Wasserstofferzeugung durch Kernflutung bei Kernschmelzunfällen. Bericht FZKA 6042, 1997.
- [3] S.Hagen, P.Hofmann, V.Noack, G.Schanz, G.Schumacher, L.Sepold. Results of SFD experiment CORA-13 : (OECD international standard problem 31). KfK-5054 (1993).
- [4] F.Kreith, Principles of Heat Transfer. Third Edition. Intext Educational Publishers, New York, 1973.
- [5] C.B.Ludwig and C.C.Ferriso. Prediction of Total Emissivity of Nitrogen-Broadened and Self-Broadened Hot Water Vapor, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 7, pp. 7-26.
- [6] C.C.Ferriso, C.B.Ludwig and A.L.Thomson. Empirically Determined Infrared Absorption Coefficients of H_2O from 300 to 3000 K. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. Vol.6, pp. 241-273.
- [7] ZIRCAR Products, Inc: Product Information. Bulletin#ZPI203 Zirconia Insulating Boards and Discs Types ZYFB-6 and ZYFB-3.
INTERNET: <http://www.zircar.com/ainterne/products/rigmat/zyfb.htm>.
- [8] E.Hahne, Y.W.Song, U.Gross. Measurements of Thermal Conductivity in Porous Media. In S.Kakac et al. (eds.). Convective Heat and Mass Transfer in Porous Media, 849-865. NATO ASI Series, Vol. 196.
- [9] K.Hayashi, M.Fukui, T.Nishikawa. "Thermal Conductivity of Insulating Ceramic Fibers at High Temperatures". Yogyo-Kyokai-Shi. Tokio. 89.1981, Nr.1032, pp. 403-411.

[10] Shuller Corporation: Product Information.

INTERNET: <http://www.schuller.com/main/products.html>.

[11] W. Hering. Modellierung des Experiments CORA-13 und Interpretation von Versuchsergebnissen mit dem erweiterten Kernschmelzcode SCDAP/MOD1. Februar 1993, IKE 2-100, Stuttgart.

[12] U. Brockmeier, H. Davilu, J. Paulus, H. Unger. ISP-31 Post-test Calculations with MELCOR 1.8.2. Second Annual MCAP Meeting, April 27-29, 1994, Bethesda, Maryland.

III. Hydrogen distribution

A. Theoretical investigations with GASFLOW

(W. Baumann, H. Rochholz, H. Wilkening, INR; M. Bottoni, G. Necker, P. Royl, J.R. Travis, IRS; J. Spore, Los Alamos National Laboratory)

The GASFLOW code is developed as an integral tool for the simulation of hydrogen distribution and combustion in reactor containments from steam/hydrogen releases during hypothetical core melt accidents. This annual report for the year 1997 covers the status of code documentation, the new model developments, new calculations with the new version GASFLOW 2.1, and also reports the results from the re-analysis of important experiments with the new code version GASFLOW 2.1.

1. Code Documentation

A new common version 2.1 of GASFLOW was developed and documented in a cooperative effort of FZK with Los Alamos National Laboratory with support from US-NRC. GASFLOW was completely rewritten to FORTRAN 90 for this purpose. The new code version is documented as draft in four parts [1,2,3,4], the theory, the user's, the

programming and the assessment manual. The documentation will be published jointly as FZK, Los Alamos and NUREG report and is written in Microsoft word. Besides the theory it includes the full input description with a wide example library and the necessary background for the administration and modification of the source code. The assessment manual critically reviews the analytical capabilities of GASFLOW to model the relevant thermal hydraulic phenomena for the performance of various types of light water reactor containments. Important experimental analysis is discussed with full documentation of the GASFLOW input, the results and the comparison with the test data. The assessment manual is kept as a living document with new experimental analysis being added as it comes along. It is an important background document for the qualification of 3D field code analyses of containment performance with GASFLOW. The GASFLOW documentation currently undergoes many changes through technical editors at Los Alamos and will only be available in draft form for a while.

The new version 2.1 of GASFLOW is maintained as a common version making use of CVS, which is an improved version of RCS (Revision Control System). It enables an automatic code update to include the new code developments from FZK and Los Alamos and it defines and maintains common archive code versions, so-called repositories which the user can check out through the internet and into which he feeds back his changes.

2. Model Developments

Development and improvement of GASFLOW in 1997 focussed on the specific needs for the analysis of large containments under conditions of severe accidents. Figure 1 summarizes these needs. GASFLOW 2.1 allows to couple multiple 3D blocks with different meshes through a network of 1D ducts that includes different ventilation components. 1D ducts can be defined on the boundary of the blocks with different angles of inclination and operate as blowers, check valves and filters. Different blocks can be coupled through 1D ducts only at their mesh boundaries. We are currently extending the duct model to connect also non adjacent computational cells and expose

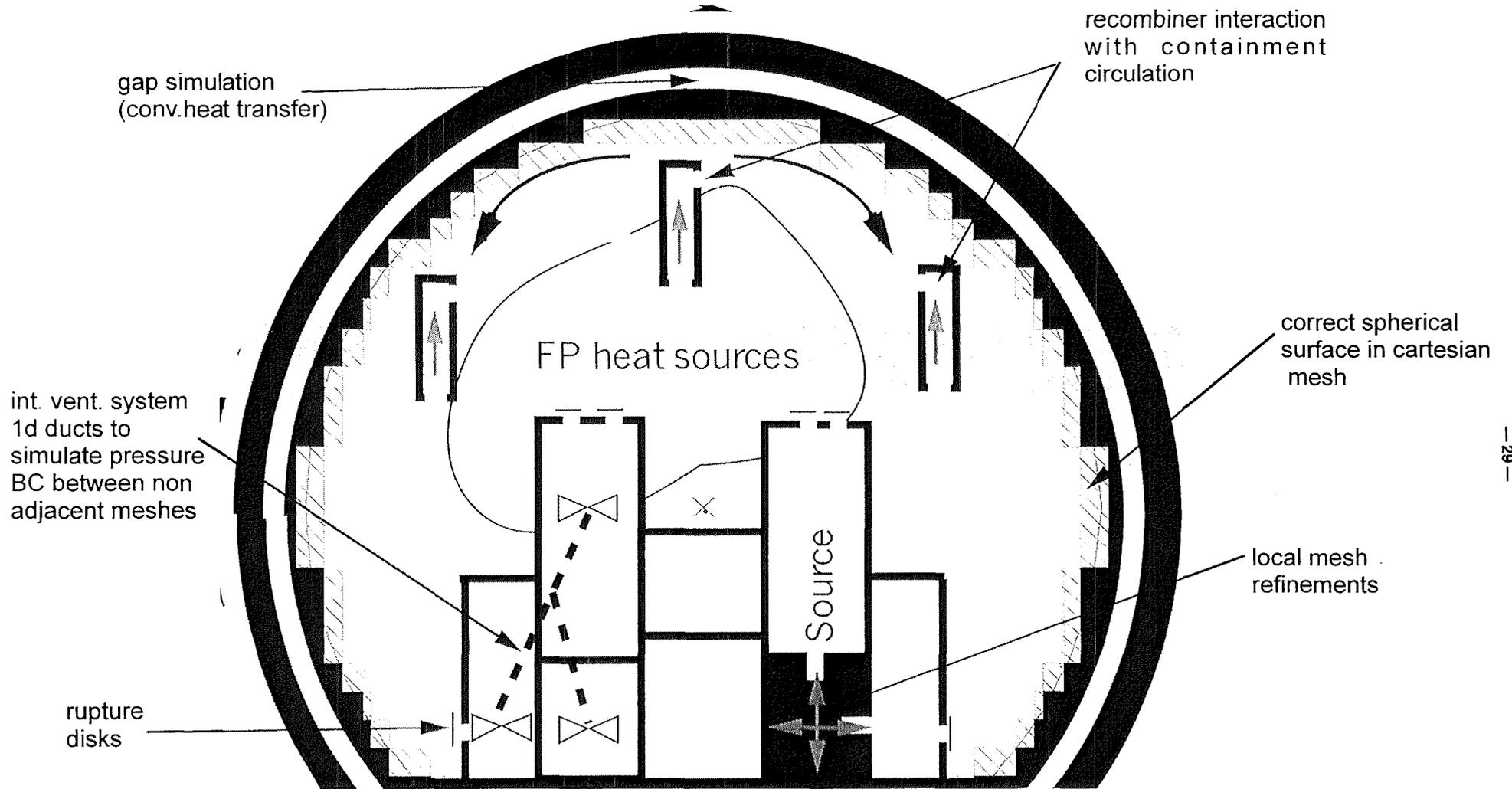


Fig. 2.3.1: New GASFLOW developments for 3 d simulation of large reactor containments

them to the same pressure boundary condition. GASFLOW 2.1 also includes a simple aerosol model. But this model needs further work and cannot be straightforwardly applied to the simulation of internal sprays.

2.1. New structure model and boundary conditions

The structure model was extended to simulate 1D heat conduction through layers with different conductivities and heat capacities. New options for simulating inner and outer structure boundary conditions were added. The user can define time dependent structure surface temperatures and heat fluxes and fluid temperatures with heat transfer coefficients. A steady state temperature profile is defined inside the structure consistently with the user specified heat flux at $t=0$ and can be used to bypass complicated and lengthy simulations of pre-conditioning phases. Structures with new material numbers that represent composite materials can be defined. A separate balancing of the structure surfaces for each material allows specific adjustments to balance and match user requests for certain structure surface areas. The transient energy absorption is determined in each material and structure type and later used in an overall energy balance.

The new structure model also allows to define composite heat conducting materials that simulate the heat conduction through the outer steel shell and the containment gap into the outer concrete shell of a reactor containment. A simplified gap model involving such composite material was recently tested in an analysis of the HDR test T31.5 (see point 3.1).

2.2. New source definition and mass/energy balance

The input of the steam/hydrogen source is now possible without making problem-specific modifications to the FORTRAN source of GASFLOW. A general interface routine has been added to GASFLOW. It reads various types of injection rates and the associated thermodynamic states of the injected materials from a so called "sortam" file

which the user has to prepare. The code is now written in such a way that analyses with the earlier version GASFLOW 1.4 can be repeated with the off-the-shelf version of GASFLOW not involving any of the previously applied specific code adaptations. New input options were introduced that relate to the sortam file.

The simulation of blowdown processes often involves the injection of two phase steam/water mixtures into a containment atmosphere with varying pressure. Strongly non-equilibrium conditions can result if the materials are injected with a thermodynamic state from inside the pressure vessel. GASFLOW then simulates the transition to thermodynamic equilibrium within the containment with a user-defined time constant while maintaining the internal energy of the injected materials. This procedure can involve strong local flashing phenomena with impact on the time-step size. A new direct thermodynamic approach has been implemented into GASFLOW. It makes use of the steam tables from Thurnay [5] and allows to add the blow-down materials in thermodynamic equilibrium with the containment atmosphere. The user can select between three options, the isentropic, the isenthalpic (throttling) and the constant internal energy expansion. The pre-expansion goes to the transient saturation pressure or saturation temperature in a reference node of the containment which the user specifies. Figure 2.3.2 shows the result from such a pre-expansion analysis during the blow-down of a 2-phase steam/water mixture in a T-s diagram. Isenthalpic expansion (throttling) results in more flashing with a higher steam quality and in the end causes higher containment pressures than the isentropic expansion. Early expansion pressures compare well with results from lumped parameter codes for the same blow-down sequence when using the new option for isenthalpic pre-expansion.

The energies and masses added from the external source are continuously balanced with the system mass and energies. The system and the source energies are calculated relative to an input reference temperature. When steam is injected, the latent heat of vaporization and the sensible heat are included in the energy balance. The result of

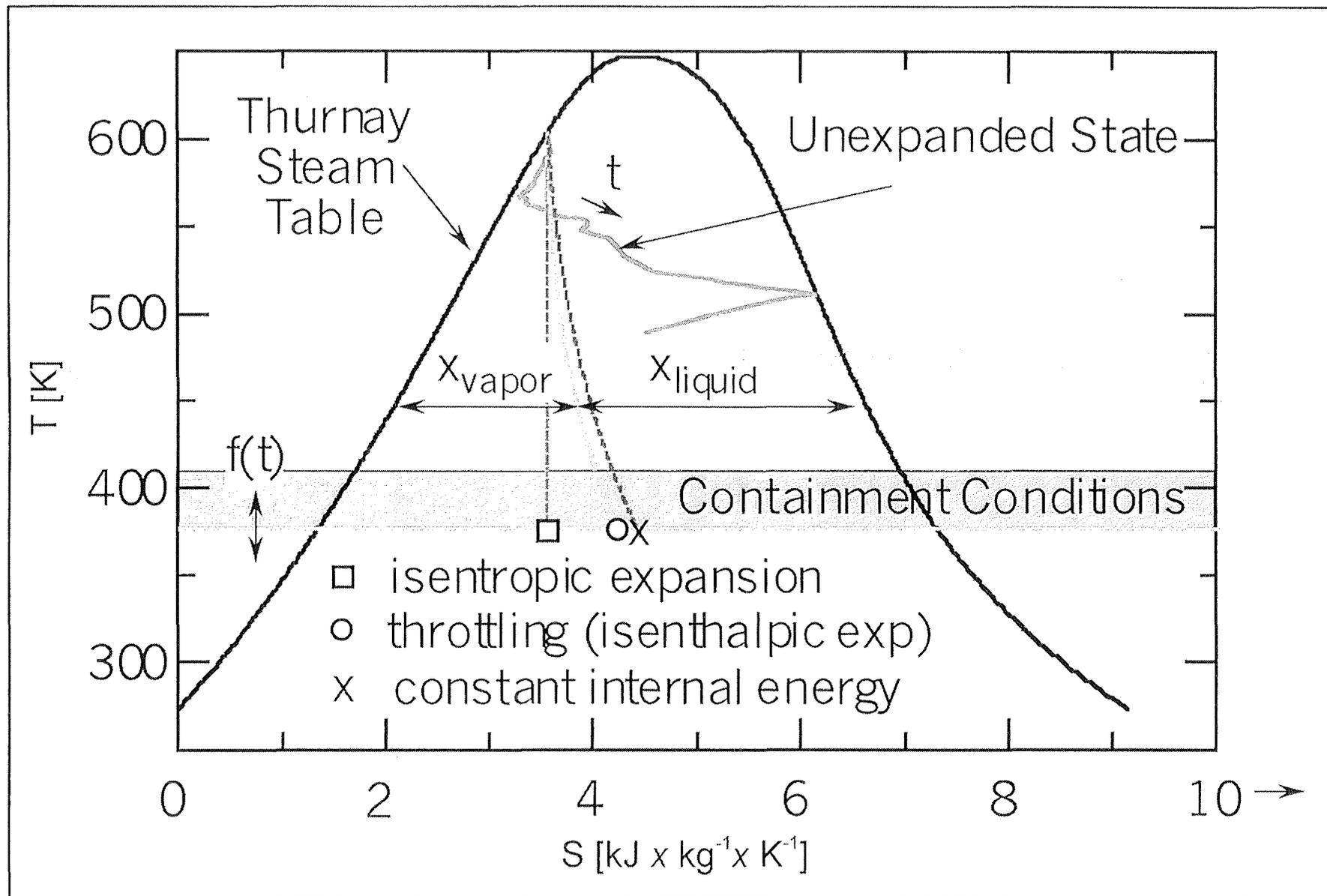


Fig. 2.3.2: Expansion of H₂O source to containment conditions in GASFLOW during blow-down from a LOCA after surge line failure

these balances are saved in a special file. In a closed system like a reactor containment, a continuous check for the conservation of masses and energies is performed. This balance also includes the transient energy deposition in the structure resulting from convective and vaporization or condensation heat transfer. Figure 2.3.3 gives an example of the mass and energy balance during a blow-down into a large reactor containment. The top figure balances the blow-down mass of H₂O. The total liquid and vapor blow-down mass is 580 to. Liquid water makes up for most of the blow-down mass. GASFLOW models this water as fog moving at the gas velocity. Thermodynamic interaction of fog and steam occurs by bulk vaporization and condensation and is simulated with a homogeneous equilibrium two-phase model. The fog and the steam stay together long enough to achieve thermodynamic equilibrium. Then the fog is removed from the gas field by a parametric rain-out model. Mass and energy of the fog are balanced in GASFLOW. The relocation of the rain which represents a significant mass and energy is subject for an ongoing further model development.

Steam condensation builds up a water film on the structure which in the end represents almost 20% of the blow-down mass. The film transfers its latent heat of condensation to the structure and attains the temperature of the structure surface on which it deposits. The difference of the steam saturation density at the temperature of the structure surface and the steam density in the fluid node adjacent to the structure defines a driving force for condensation and/or vaporization as long as a film exists on the structure surface. If the gas atmosphere becomes hot for instance by fission product heating, some of the film will vaporize from the structure thereby cooling it. The structure cooling/heating by film vaporization/condensation stops when critical temperatures are exceeded on the structure surface or in the adjacent fluid node.

Transient heat conduction changes the energy content of the structure. This change of energy is balanced relative to the initial state. In the example from Fig. 2.3.3 which is

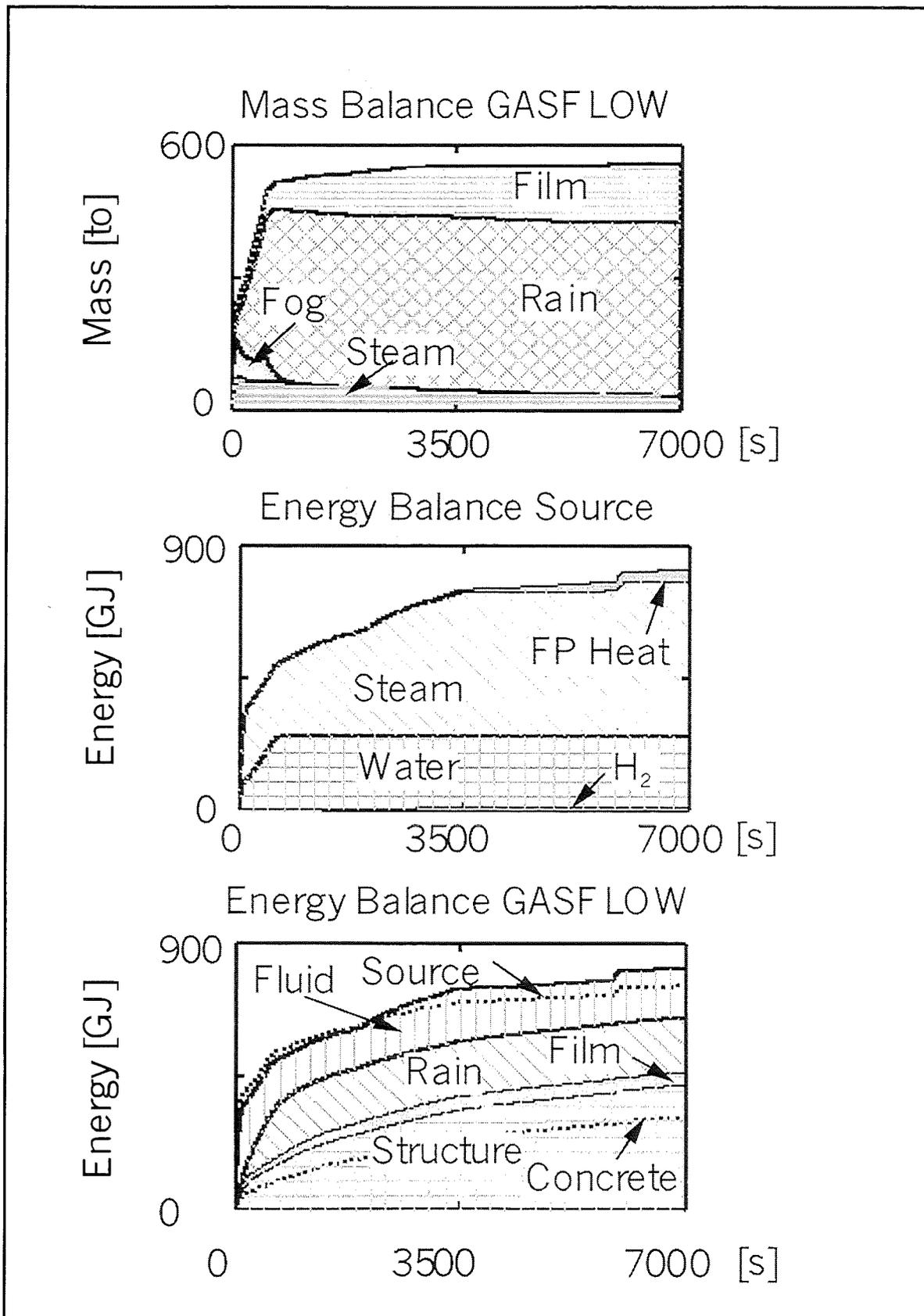


Fig. 2.3.3: Energy and mass balance for conditions of a LOCA after surge line failure

representative for the blow-down into a real reactor containment nearly half of the source energy becomes absorbed in the structure (75% in the concrete, 25% in the steel structures). The middle part of Fig. 2.3.3 shows the energy addition from the blow-down source including the heat from the volatile fission products. The lower part of Figure 2.3.3 balances the GASFLOW- calculated energy content of the steam, of the rained out water, the condensate film and the steel and the concrete structure. There are some problems with the temperature averaging in the energy balance of the water which need to be further improved. One can see that the summation of the calculated energy in the structure, film, rain and fluid still slightly exceeds the source energy.

The balance of the liquid water mass and energy which was discussed above will be taken as a starting point for new model developments. We are currently developing a model for the film relocation on inclined surfaces, that will eventually replace the current static vaporization/condensation model. In a first step we will look at the relocation of the condensed film on the inside of a hemispherical steel shell including the transition to the lower vertical cylindrical part of the containment. One objective is to define dried out regions of the steel shell in the dome with hotspots where convection controls the heat transfer. In a second step we will also simulate a redistribution of the rained- out mass which still contains a sizeable amount of energy. Simple models will describe the collection and redistribution of the rained- out and condensed water inside the containment.

2.3. Modeling of rupture disks

GASFLOW also allows to simulate rupture disks. These disks are special types of walls which are removed when the pressure difference across these walls exceeds a user defined threshold. Removal of these walls transiently opens new flow pathes and connects for instance inner and outer containment regions which are sealed off from each other during normal containment operation. Test calculations involving such rupture disks in a realistic containment indicate two principal mechanisms for the rupture disk failures, acoustic pressure waves and disk failures from a more homogeneous balloon type pressurization. Differences in the spreading and interference of the

acoustic pressure waves can result in a rather complex failure pattern of the rupture disks. An early disk failure can cause a rapid load relief that limits the failure propagation to the adjacent rupture disks. More failure coherency results from a balloon-type pressurization of certain containment regions. A strong dependency exists on the blowdown source. A convergence of the failure pattern is sometimes difficult to obtain for certain failure mechanisms.

2.4. Simulation of fission product heating

Fission products are blown into the containment together with the steam/hydrogen mixture under severe accident conditions. GASFLOW simulates the fission product release by injecting a gas component (for instance Xenon) with a very low concentration together with the steam/hydrogen mixture. The redistribution of this tracer gas with steam and hydrogen is calculated, and a time dependent volumetric heating is included in proportion to the local concentration of this tracer gas. Any settling of the fission products on walls or sumps is currently neglected. Test calculations show a significant potential for superheating of the containment atmosphere by the fission product heat in dry gas volumes without fog. Due to the use of the homogeneous equilibrium two-phase model, the superheating of the gas is not possible in fluid nodes which still contain fog.

2.5. Geometric modeler

A new geometric modeler has been developed for GASFLOW. It allows to define obstacles or walls, to construct quadric surfaces like spheres and cylinders in a cartesian mesh. Obstacles can be defined on the outside or inside of these surfaces. A gap in between the surfaces can be defined also. Solid or hollow spheres and cylinders can be input this way with automatic stair-stepping inside a given x-y-z mesh. An automatic translation and shifting algorithm allows to extend the outer boundaries of the computational mesh for instance to set up two concentric spheres with an annulus in between them, and to define the outer boundary of the free gas volume inside a spherical containment. The geometric modeler avoids the direct input of obstacles with

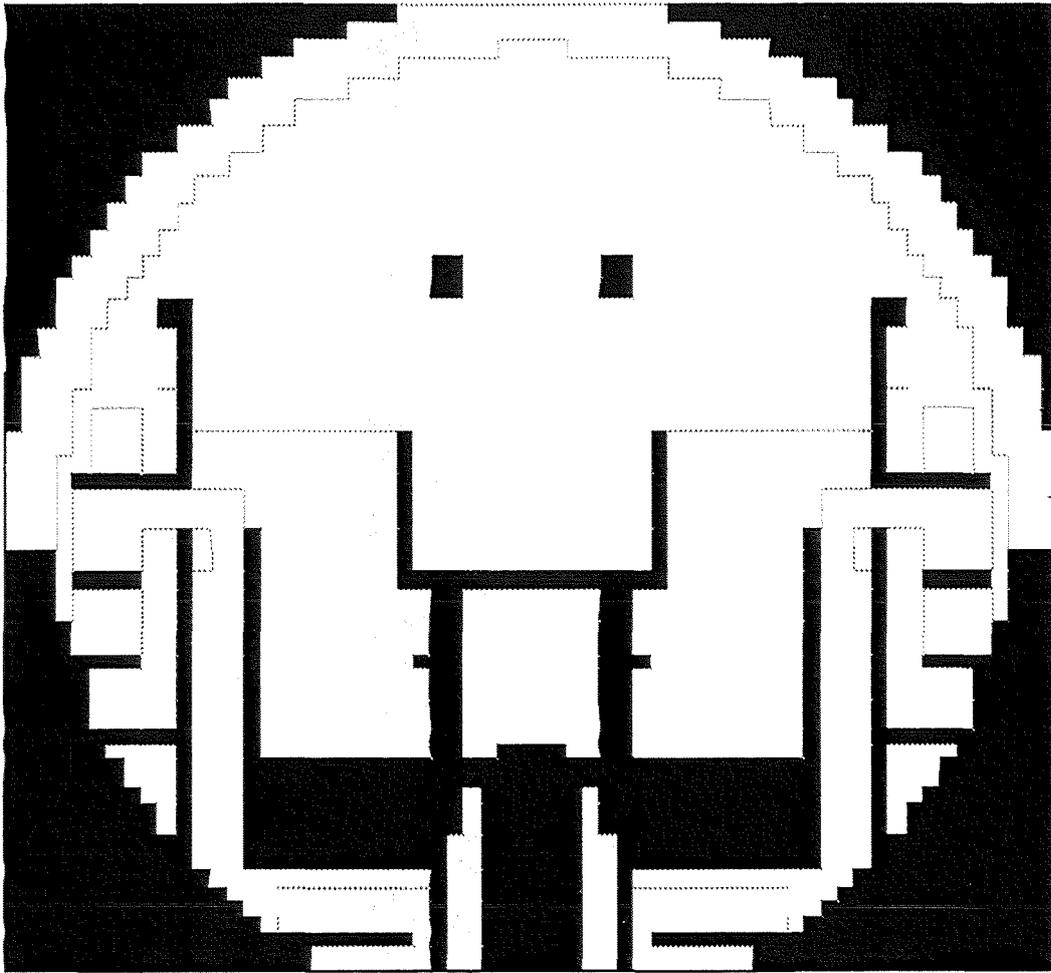


Fig. 2.3.4: GASFLOW model of the annular gap between steel and concrete shell
(y-z cut at constant $x=14.7\text{m}$; $64 \times 64 \times 46 = 188.416$ computational volumes)

a large number of complex input statements. Figure 2.3.4 demonstrates the use of the new geometric modeler in an example for a Konvoi type containment.

A new deletion and insertion algorithm allows to delete a number of mesh lines in a given location, or to refine the mesh without having to reconstruct the entire internal geometry. The new algorithm is useful for studying the impact of mesh refinements and facilitates the tedious work of adding or subtracting computational cells within a complex 3D computational model.

2.6. Definition of containment rooms

Figure 2.3.5 shows a Kismet plot of the 3D cartesian geometry model of a reactor containment (Konvoi type) which we have developed for GASFLOW. The analysis of steam- hydrogen distribution in this containment requires the precise modeling of all structure surfaces, their materials, heat capacities and distributions in space. Adding up the structure surfaces of the walls and obstacles from the mesh boundaries of this 3D model would give a total structure surface area of 49200 m² which is much less than the structure surface areas of the actual plant. A new method was developed to input exactly known data for the distribution of the structure surfaces into such complex model. The new method allows the graphical definition of containment rooms inside the 3D mesh with the possibility to define and adjust structure surfaces and heat capacities on a room- by- room basis to match input data from lumped parameter codes. A graphical user interface was developed [6]. It makes use of the Speakeasy system and automatically picks up the containment geometry from the GASFLOW input and displays it slice by slice. Figure 2.3.6 demonstrates the graphical definition of containment rooms inside a horizontal slice around the axial node 13 of the 3D containment model. The user defines the region belonging to a certain room in this slice and assigns it a number with a graphical input of the room contour through a cross hair. This is done room by room for each axial slice. Regions belonging to the same room in different axial slices are shaded and later combined to define in this case 106 different rooms representing the whole containment. The room definitions are then automatically

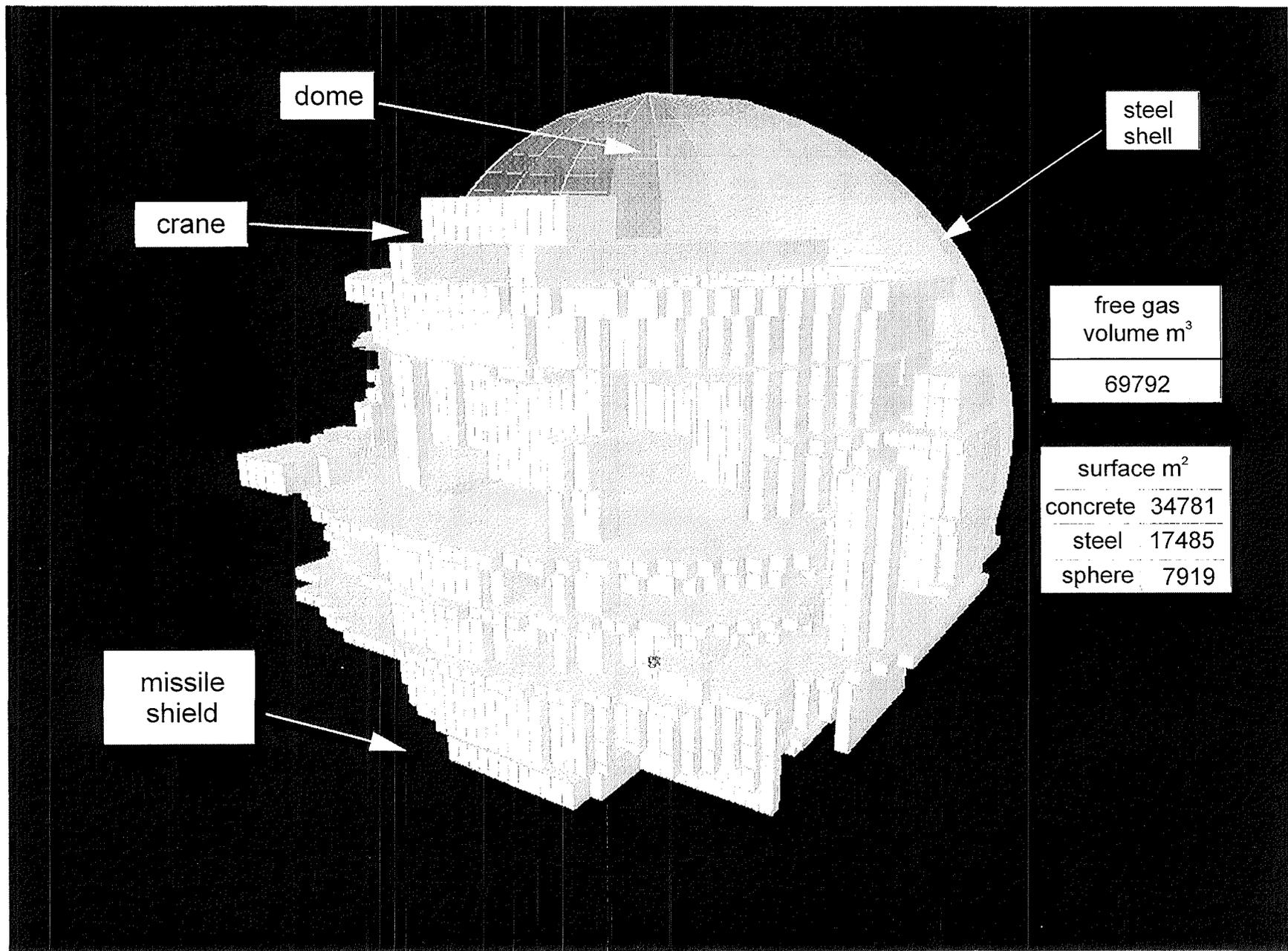


Fig.2.3.5: GASFLOW geometry model for a KONVOI plant (KISMET-plot), 144652 cells

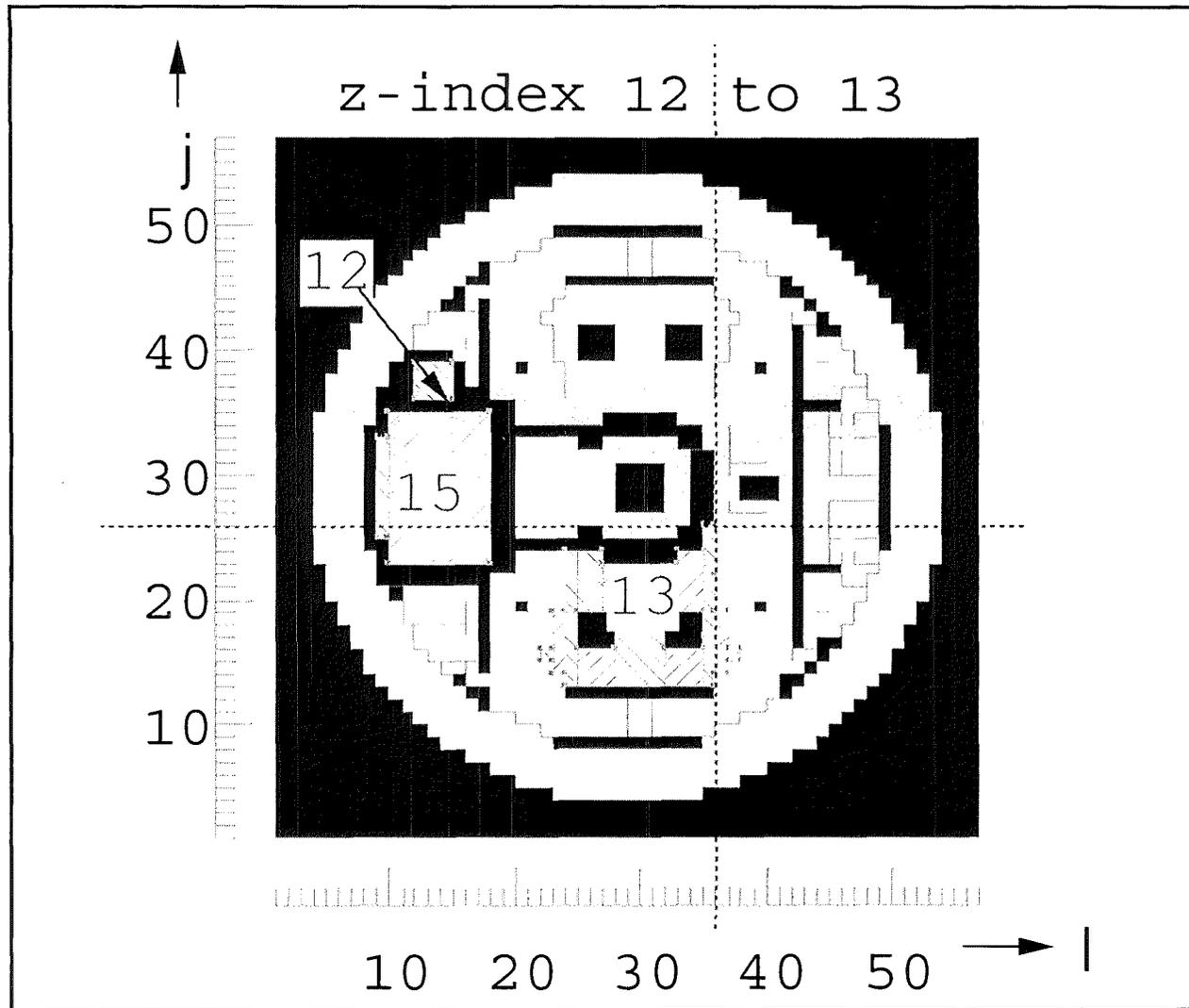


Fig.2.3.6: Graphical definition of containment rooms in a horizontal slice around node 13 of the 3d GASFLOW containment model for a KONVOI plant.

evaluated in GASFLOW for the room volume and the associated structure surfaces and heat capacities. The procedure is coupled to a spreadsheet with the room data from corresponding lumped parameter models, and automatically generates roomwise input decks that define the right structure surfaces.

We are currently thinking to make the graphical user interface developed for the room definition the starting point for an automated input of the containment geometry. The graphical cursor input could be made into the display of scanned pictures representing technical drawings of horizontal slices and also interfaced to a PC- based Autocad display of the containment cuts.

2.6.1. Roomwise averaging of GASFLOW results

The definition of rooms inside the 3D containment model is done based on so-called roomdef statements which are included in the GASFLOW input deck. GASFLOW can also make use of these roomdef statements to evaluate and average the steam and hydrogen concentrations in all computational cells for each room. The calculated average room temperatures and concentrations of steam and hydrogen can be directly compared with the results from lumped parameter simulations. Besides providing average data, GASFLOW also scans for the peak temperatures and concentrations in each room, and it provides a roomwise evaluation of the detonation potential making use of the 7- lambda criterion [7]. A new plotfile (tape 13) is prepared that contains all relevant informations from the room evaluations.

2.6.2. Adjustment of structure surfaces

There are still instances when the GASFLOW calculated heat transfer surface areas that are computed from the internal geometry are not exactly in agreement with plant, experiment, or other code data. Therefore besides the detailed local definitions for containment rooms, GASFLOW also allows to further adjust the structure surfaces and heat capacities to precisely match integral plant data. GASFLOW automatically

balances these surfaces prior to each calculation. Global corrections can be applied to match the plant data for each structure type and material prior to starting the calculation.

2.7. Reaction model for recombiner simulation

Modeling of recombiners in GASFLOW so far mainly made use of measured performance data. A recombination rate was determined in dependence of the calculated hydrogen concentration at the box inlet, and a forced flow boundary condition was applied at the box entrance that supplied the hydrogen and oxygen for the achievement of the measured recombination rates with the measured efficiency. The recombination energy heated up the entering gases, and a hot exhaust flow resulted. This model cannot capture the chimney effect that results from the differences of the density integrals outside and inside of the recombiner box. The model also cannot account for a forced flow through the recombiner box resulting from an external flow field, for instance fall winds within the containment which may blow through the recombiner in downward direction.

Meanwhile the capability of GASFLOW has been extended to model the detailed hydraulic resistances inside the recombiner box accounting for the frictional drag (linear loss term for laminar flow) in addition to the form or pressure losses at the box entrance and exit and at cross-sectional changes within the box. The modeling of the detailed hydraulic resistances made it possible to mechanistically simulate the buoyancy pump through the recombiner with full accountance of the chimney effect and with the calculation of the recombination energy from the measured performance data of the recombiner box. This so-called "reaction" model no longer applies a forced flow boundary condition at the box inlet. It takes the reference concentration in the upstream node adjacent to the recombination zone for calculating the recombination rate from the measured performance data. The recombiner is started only above a certain input threshold for the hydrogen concentration. A net flow results from the superposition of the buoyancy effect. It includes the influence of the external flow conditions from the containment winds. Test calculations were performed with this model in a numerical test

chamber. We investigated the influence of different wind directions and found only negligible differences in the recombination rates when studying mild upflowing and downflowing winds. It became clear that the buoyancy flow was controlled by the reaction rate without much influence from the external flow. This result is not surprising because the reaction model made use of the same experimental data as the forced flow model. More detailed investigations should actually attempt to calculate this reaction rate mechanistically on basis of the actual hydrogen/oxygen inflow and diffusion to the surface of the recombiner plates. This is only possible with a complex 3D micro model of the recombiner box. We are currently preparing such more detailed mechanistic recombiner analysis. However, until now there are no systematic experimental studies available yet in which the recombiner performance under different wind conditions in the containment has been investigated.

2.8. Detailed reaction model for hydrogen combustion

A detailed reaction model for the simulation of hydrogen combustion has been implemented into GASFLOW. It models up to 52 different reactions with 9 components. GASFLOW calculations using this detailed reaction model show excellent agreement with results from KIVA [8] in the laminar combustion regime. In a first step the simulation of turbulent combustion in GASFLOW is attempted with implementation of a RNG turbulence model. Turbulent parameters are accounted for in the combustion model using a modified Magnusson approach [8].

3. New calculations with GASFLOW 2.1

The new version 2.1 of GASFLOW was applied to re-analyze a number of important experiments that had been successfully calculated before with earlier code versions and whose major results had already been published. The re-analysis was done together with the preparation of the new assessment manual for GASFLOW 2.1 which documents both the input and new results from this re-analysis. We will report on the re-analysis of the HDR blow-down test T31.5, the Phebus thermohydraulics tests, and the Battelle GX-tests in which the operation of a Siemens type recombiner has been

investigated within a multi-room environment containing a steam/hydrogen/air atmosphere.

3.1. Re-analysis of HDR test T31.5

The re-analysis of the HDR blowdown test T31.5 is based on the documented GASFLOW input model from an earlier analysis which had been performed with a previous version of GASFLOW [9]. The re-analysis of test T31.5 started from an improved set of boundary conditions and included the GRS findings that the steel shell below the ceiling of the operating deck is fully accessible to steam flow due to before unnoticed cracks opened up between the steel and concrete from a series of preceding earthquake tests. The re-analysis uses a new option in the GASFLOW input to open up a gap between the steel shell and concrete structures. The same modification to the geometry model had already been applied in the GASFLOW analysis of the HDR test E11.2. The results from this re-analysis have been included in the draft of the new GASFLOW 2.1 assessment manual. The analyzed problem time of test T31.5 was 1 hour.

The HDR test T31.5 starts with a fast 2- phase blowdown which injects nearly 30 tons of water and steam in the first 60 s into the HDR containment with a free gas volume of ca. 11000 m³. The injected steam/water mixture expands to the transient containment pressure which causes a strong steam flashing while maintaining the internal energy of the blown-down materials. A second injection period after 20 min. brings in another 1.9 tons of steam (Fig. 2.3.7 gives the source for this experiment). The second steam release is followed by the injection of 168 kg of light gas which is a hydrogen simulant with 85% He and 15% hydrogen. The calculated pressure transient (Fig. 2.3.8) agrees well but slightly overpredicts the test data in the final phase. The structure cooling was simulated with the new 1D heat conduction model implemented into GASFLOW 2.1. A surface node of 0.01 cm was applied on the concrete structures with expanding mesh sizes towards the interior of the structure. The simulation of test T31.5 involves a rapid structure heat up by film condensation during the initial blowdown sequence and a

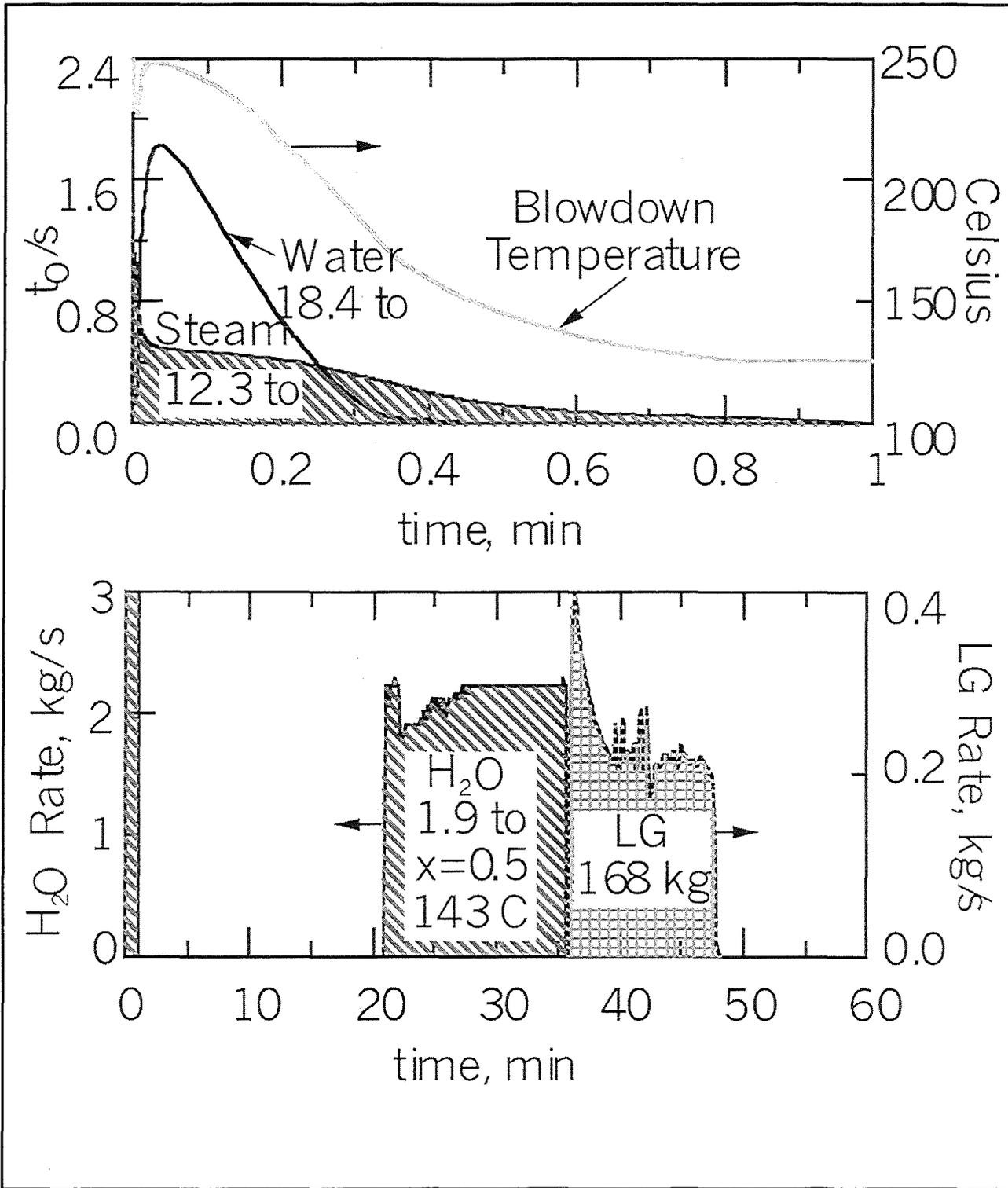


Fig.: 2.3.7: HDR test T31.5 with the H₂O and light gas (15% H₂, 85% He) sources applied in GASFLOW 2.1 analysis

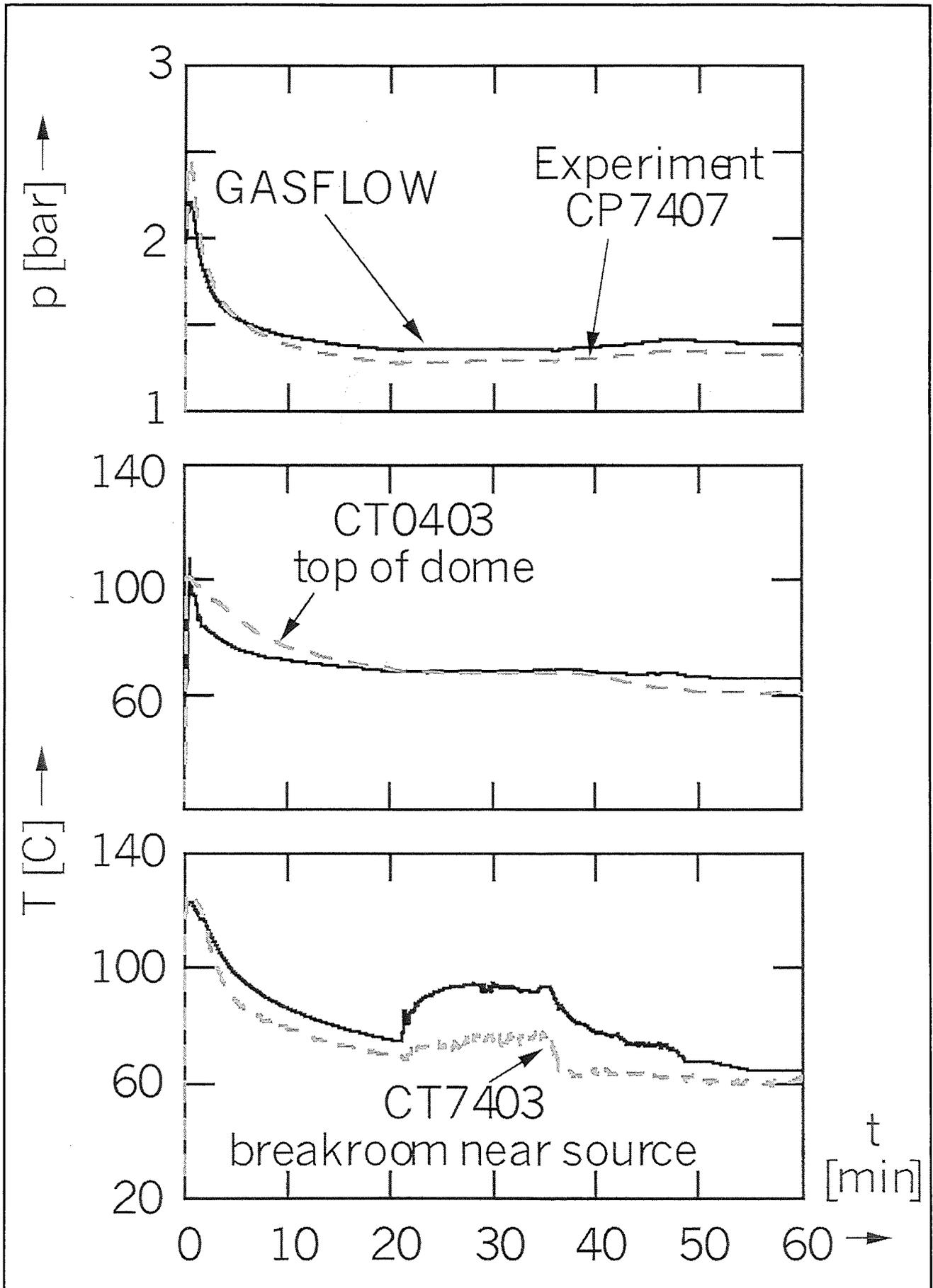


Fig.2.3.8: Pressure and temperatures test data vs. results from GASFLOW 2.1

strong cooling of the thin steel structures (mainly the cat walks) by film vaporization during the rapid depressurization after the blowdown. The condensation heat transfer is simulated with an enhancement for rapid condensation processes (Bird- Stewart Lightfoot enhancement [10]). The model was successfully applied also to analyze steam condensation in the Phebus thermohydraulic tests. The GASFLOW calculated temperatures agree well with the gas temperatures in the dome region (Fig. 2.3.8). There is some overprediction of the gas temperatures near the steam source during the second steam injection phase. This is probably related to the selected sensor location which is in a region of strong temperature gradients. GASFLOW predicts the measured stratification of the light gas in the dome region at 49 m quite well (Fig.2.3.9). The light gas volume fraction in the spiral staircase at 27 m is somewhat overpredicted which is again in a region with significant concentration gradients. Very good agreement is seen at the 12 m level with light gas concentrations around 3%. The calculated light gas concentration at the 6 m level is zero which is again in good agreement with the test data.

The re-analysis of test T31.5 simulates an outer annular gap between the steel and the concrete shell with two nodes that allow for counter- current flow in the gap region. To test the new option for 1D heat conduction through a composite layer we have used GASFLOW 2.1 also to analyze test T31.5 without simulating the convective cooling in the annulus between steel and concrete shell. This test calculation was also done in preparation of our GKN-2 analysis for a Konvoi type spherical containment with a steel shell, an air annulus and an outer concrete shell. A composite layer with a 3cm steel shell, a 90 cm air gap and a 30 cm concrete shell was defined on the outer boundary of the computational mesh at the inner side of the steel shell. Transient heat conduction through this composite layer was calculated using a structure model with 93 nodes. The analysis was done with an earlier containment model for the HDR without making use of the option to put holes between the steel shell and the inner concrete structure for the simulation of the special conditions from the earthquake tests. The neglect of convective gap cooling significantly reduced the number of computational cells for the analysis of

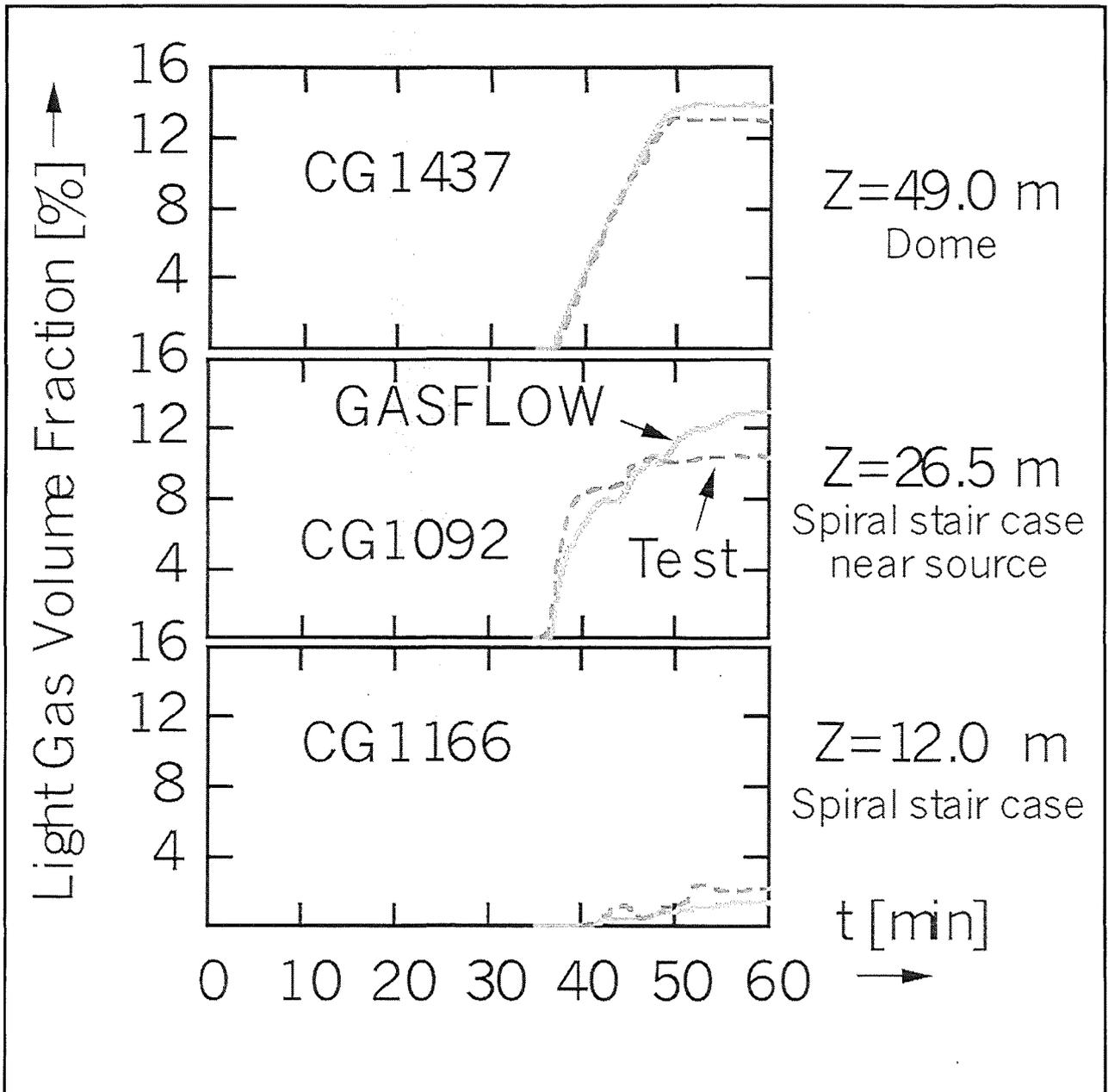


Fig.2.3.9: Light gas (15% H₂ 95%He) volume fractions. Test data vs. results from GASFLOW 2.1

composite layer heat conduction

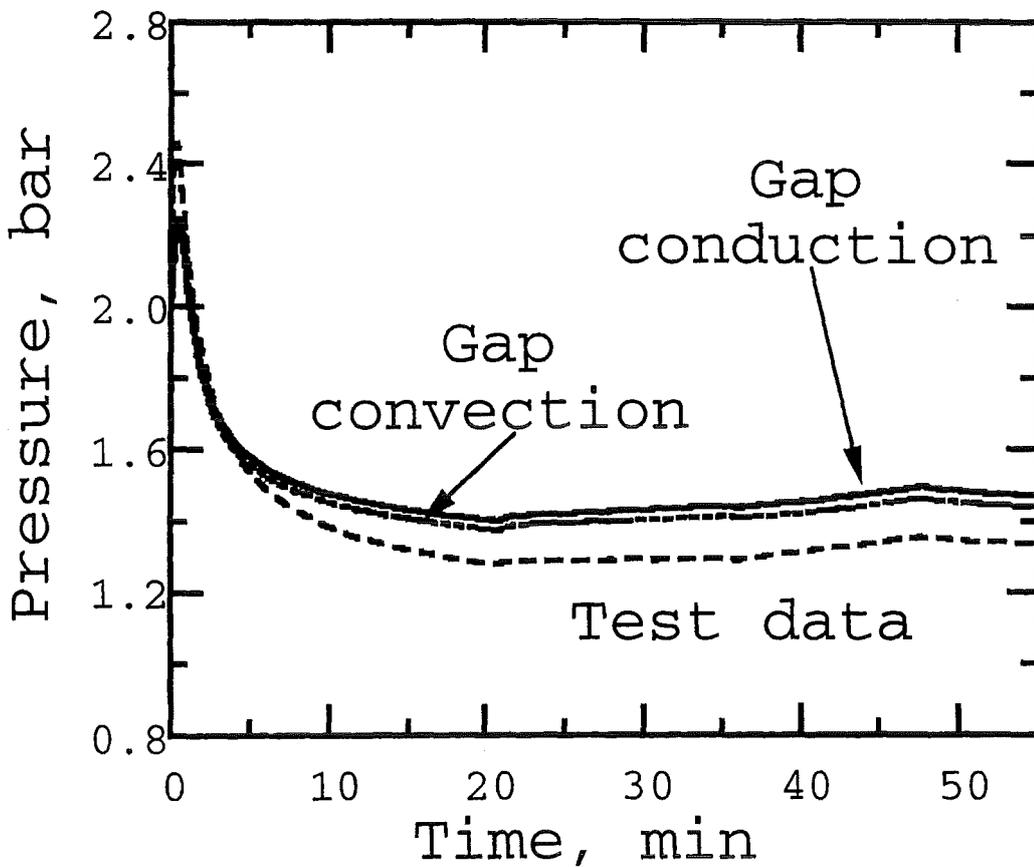
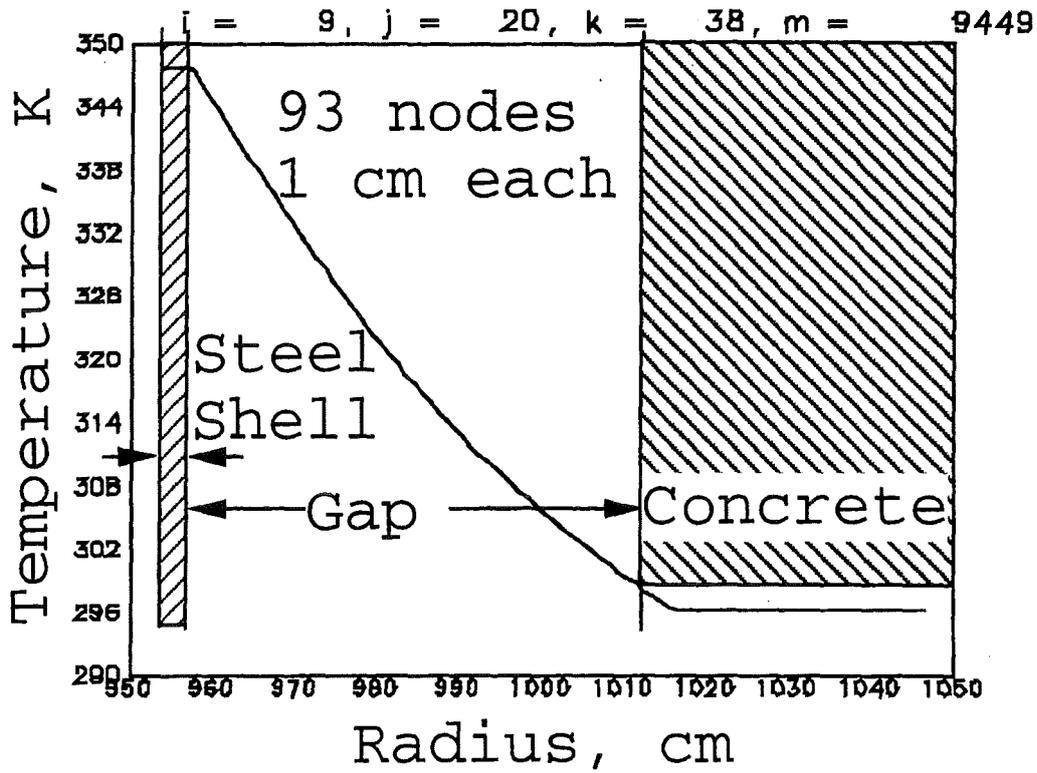


Fig.2.3.10: Steel/gap/concrete shell in GASFLOW with conduction vs. convection model

T31.5. It does lead to a slight overprediction of the containment pressure (see Fig.2.3.10) in the late phase of the analysis. But the containment pressure is generally more overpredicted with the convective gap cooling relative to the test data than it is with the simple 1D heat conduction model for the composite layer of the steel shell, the annulus and the concrete shell.

There are a number of improvements in the new version GASFLOW 2.1 which bring about some differences over the published results from the analyses with earlier GASFLOW versions. The most important differences are attributed to a refined simulation of pressure volume work associated with the simulation of steam condensation [11]. The changes over the earlier analyses are not dramatic and don't have a unique tendency. Nevertheless to be on the safe side, although this is quite costly, our planning foresees a full re-analysis of the HDR test E11.2. We plan to document the results from this re-analysis in the new assessment manual for GASFLOW 2.1.

3.2. Re-analysis of Phebus thermohydraulic tests

The Phebus thermohydraulic tests were re-analyzed to validate the GASFLOW 2.1 condensation model with the condensation parameters set to standard values. The results from this re-analysis are documented in the new version of the GASFLOW 2.1 assessment manual together with the complete listing of the input deck. These tests were performed in the Phebus containment vessel REPF 502 with a free gas volume of 10 m^3 . The total height and inner diameter of this test vessel extend to about 5.7 m and 1.8 m, resp. It is equipped with a double-skinned outer wall and an organic liquid flowing through this annulus which maintains a homogeneous temperature around 110 C on the inner wall surface. Three condenser rods of 0.15 m outer diameter are attached to the top vault in positions 120 degrees apart at a distance of 0.24 m from the centerline. The rods have a total length of 2.5 m. Their upper part covering 1.7 m are the so-called "wet condensers" where steam condenses on steel walls which have defined surface temperatures that are maintained by cooling these condensers from the inside with an

organic coolant. The lower parts with a length of 0.8 m are the so-called "dry condensers". Like the vessel walls they are heated to surface temperatures above the dew point. The test arrangement allows for steam condensation only on the wet condenser rods. The tests allow to study steam condensation under well controlled boundary conditions. Condensation can only occur on the internally cooled wet condenser rods.

The Phebus thermohydraulic tests consist of a total of 4 steady-state experiments. The initial conditions in each case were a pressure of 1.936 bars, a temperature of 110 C and an atmosphere containing 47.9 Vol% nitrogen and 12.8 Vol% oxygen. During these tests the pressure inside the vessel was measured for various rates of steam injections and different values of thermal boundary conditions (see table I in Fig. 2.3.11). For the analysis with GASFLOW a 3D model of the vessel was set up representing a 60 degree sector with 11 radial, 5 azimuthal and 13 axial nodes in cylindrical coordinates. Free-slip conditions were applied to all boundary surfaces. The condensation multiplier was set to the standard value of 4.0, and a correction factor suggested by Bird-Stewart Lightfoot [10] was used. The calculations performed for laminar flow were extended to a problem time of 3600s which was sufficient to reach steady-state pressure levels. It turns out that the calculated final pressures during the condensation process come close to the measured ones (see table in Fig. 2.3.11). Compared to the previously published GASFLOW results for these steady-state tests [12], the results from GASFLOW 2.1 show a little difference in the final pressure, which at least for the large steam flow rate is in favor to the current code version:

3.3. Re-analysis of Battelle GX-tests

Different analyses of the Battelle GX tests were performed in which a Siemens recombiner was tested in a steam hydrogen atmosphere inside the inner containment rooms of the Battelle model containment (BMC). One made use of the 1D duct models in GASFLOW to better simulate the sump valves and the leakage openings. Another

analysis was performed for a simplified model of the recombiner box providing more flexibility for the simulation of such a recombiner in a complex 3D containment model.

3.3.1. Test GX6 with containment leakage through 1D ducts

For the GX6 test, hydrogen and steam are injected into the BMC facility which included a Siemens catalytic recombiner of the type FR90/1-100. The GX6 test was performed in the BMC facility in annular compartments R5 to R8 ("banana rooms") and the central cylindrical room R1/R3. A plug on top of the central room R1/R3 and closed openings on the outside of the banana rooms sealed off this inner containment from the ring room and the dome of the BMC (see Fig. 2.3.12). The total gas volume of the participating rooms is 209 m³, and each banana room R5 to R8 has a gas volume of 49 m³. The recombiner is positioned next to the inner wall of R5 not far from the overflow opening to R6. For the GX6 test steam was nearly evenly injected into rooms R5, R6, and R7. Hydrogen was injected into room R8. Figure 13 gives the steam and hydrogen injection rates and times during which fans and valves were operated. Test GX6 was re-analyzed with GASFLOW 2.1 without any local updates to the code. The re-analysis made use of the new 1D duct models in GASFLOW 2.1 to simulate the valves on the floors of the different test rooms. As reported earlier the GX tests are influenced by a significant leakage effect. The re-analysis applies a refined leakage simulation through annular gaps around 14 instrument guide tubes which penetrated the outer walls of the banana rooms. The total included leakage area was 43 cm². A total of 14 1D ducts each with a length of 30 cm and a hydraulic diameter of 1mm were simulated on the outer boundary of the banana rooms. The simulation of the valve openings and the leakage simulation reflected the differences in the static heads at the different axial locations of the leak openings. This refinement particularly improved the simulation of the sump valve in room R1 which had been neglected in the earlier analysis due to unrecognized numerical problems from incompatibilities of the local valve pressure with the static head from outside. Input and the results from this re-analysis of GX6 are documented in the new GASFLOW assessment manual. The re-analysis covered a total problem time of 10h.

		TEST#	6A	10A	4A	4B
Experimental Conditions	Steam Source	g/s	1	2	4	4
	Pressure	bar	1.652	1.814	2.322	2.008
	Temperature	°C	114.17	117.04	124.82	120.21
	<i>Dry Condenser Temperature</i>	°C	108	108	107	98
			110	109	110	100
			98	108	104	96
	Wet Condenser Temperature	°C	75	77	91	81
	<i>Vessel Wall Temperature</i>	°C	111	111	111	101
	Sump Surface Temperature	°C	89	89	91	90
	pfinal stationary	bar	1.65	1.814	2.322	2.008
Gasflow Results (previous, cylindr.)	pfinal cons1 = 4	bar	1.66	1.852	2.62	2.23
	pfinal cons1 = 4 film enhancement	bar	1.652	1.796	2.42	2.13
Recalculation cylindr.	pfinal cons1 = 4 film enhancement	bar	1.644	1.753	2.213	1.952
Cartesian approach	pfinal cons = 4 film enhancement	bar	1.669	1.786	2.238	1.973

Fig.2.3.11: Parameters and results for the steady-state thermal hydraulic tests.

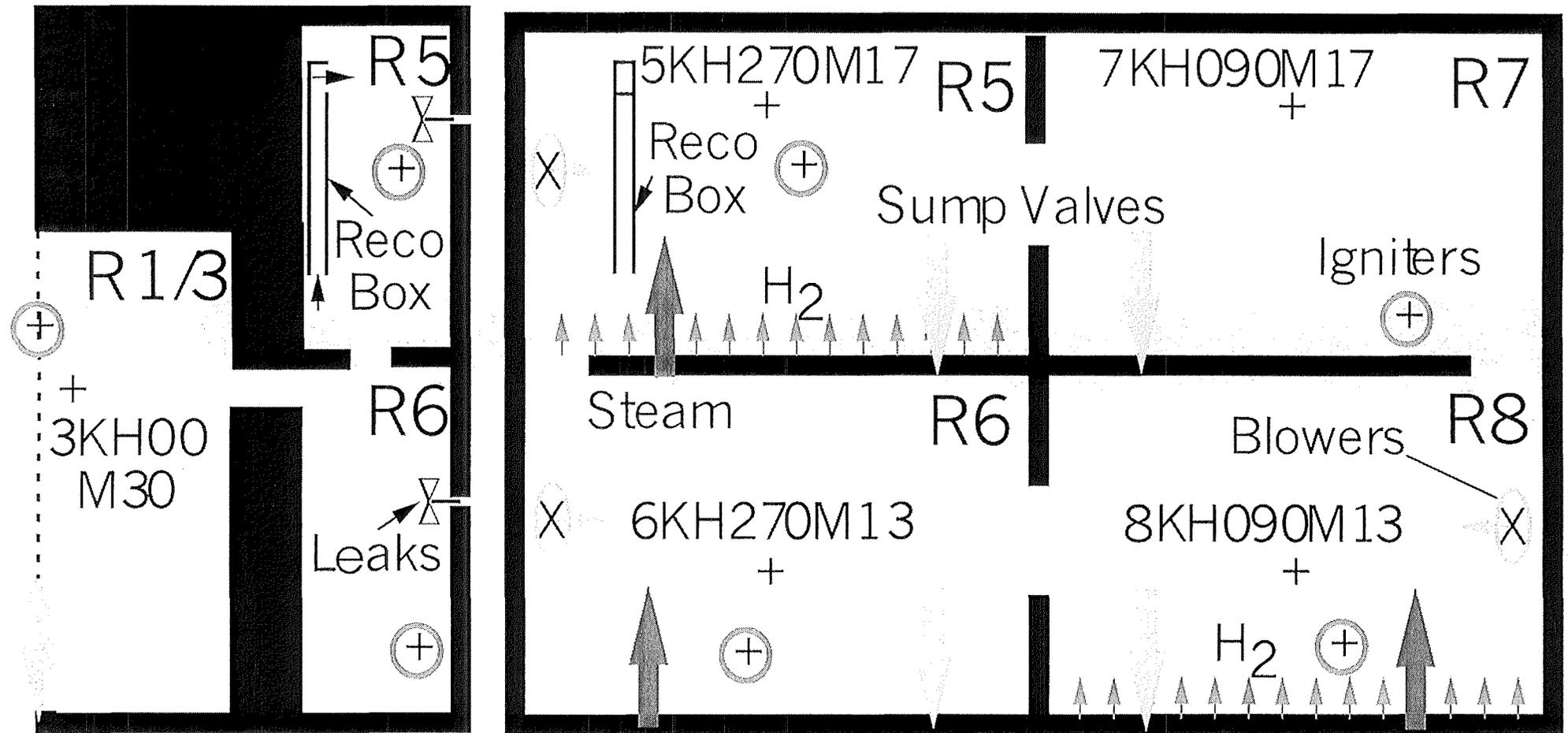


Fig. 2.3.12: Scheme of the Battelle model containment for the Battelle GX tests (radial cut and unwrapped geometry of banana rooms).

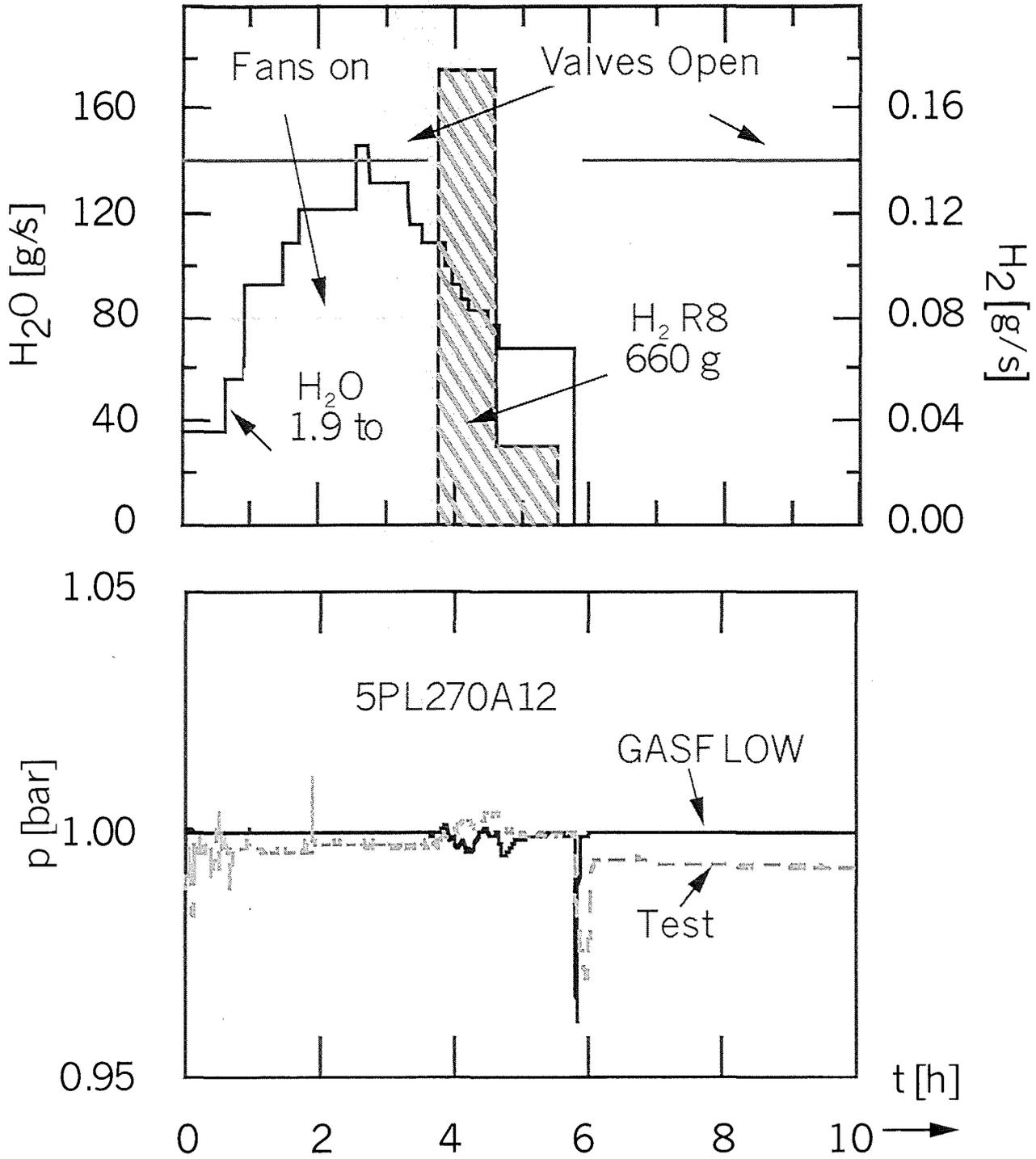


Fig.2.3.13: GX6 source data and pressure transient of GASFLOW 2.1 analysis with valve and leak simulations.

Figure 2.3.13 gives a comparison of the calculated and measured pressure for GX6. The calculated pressure before 6h into the transient is slightly higher than the measured data. This indicates a difference in the boundary condition pressures for the GASFLOW model and the actual pressure seen by the test facility. After ~6 h into the transient the calculated pressure is still higher than the measured pressure, which indicates a combination of too much in-leakage in the calculation and slightly different boundary condition pressures. The drop in pressure at ~ 6 h is caused by termination of the inflow of steam into the test facility (see upper part of Fig.2.3.13) and the condensation of steam already in the test facility. This occurs in the tests at a moment when all sump valves are closed and only the leakage effect can lead to a pressure equilibration. The GASFLOW calculated timing for this drop in pressure due to the evacuation effect from the steam condensation is correct but the pressure drop is stronger than in the test data. This indicates that the condensation model in GASFLOW is predicting a condensation rate slightly larger than is inferred in the test data. A rapid recovery of the pressure to normal atmospheric conditions occurs right after opening the sump valves. The overall agreement of the pressure data is good and captures the dominant trends in the test data.

Figure 2.3.14 is a comparison of the calculated and measured temperatures for the GX6 test at several different locations within all rooms of the test facility. The temperature comparisons are reported for the first time for this test GX6. They are excellent and capture the dominant trends in the data. In addition the temperature above the recombiner foils (i.e. temperature rise through the recombiner) is predicted quite accurately at the selected sensor location. The temperatures decay somewhat faster than the test data after the terminating the steam injection which is also reflected in the faster decay of the pressure in Fig.2.3.13.

Figure 2.3.15 compares the calculated and measured hydrogen concentrations of the GX6 test at several different locations within the test facility. The comparisons are

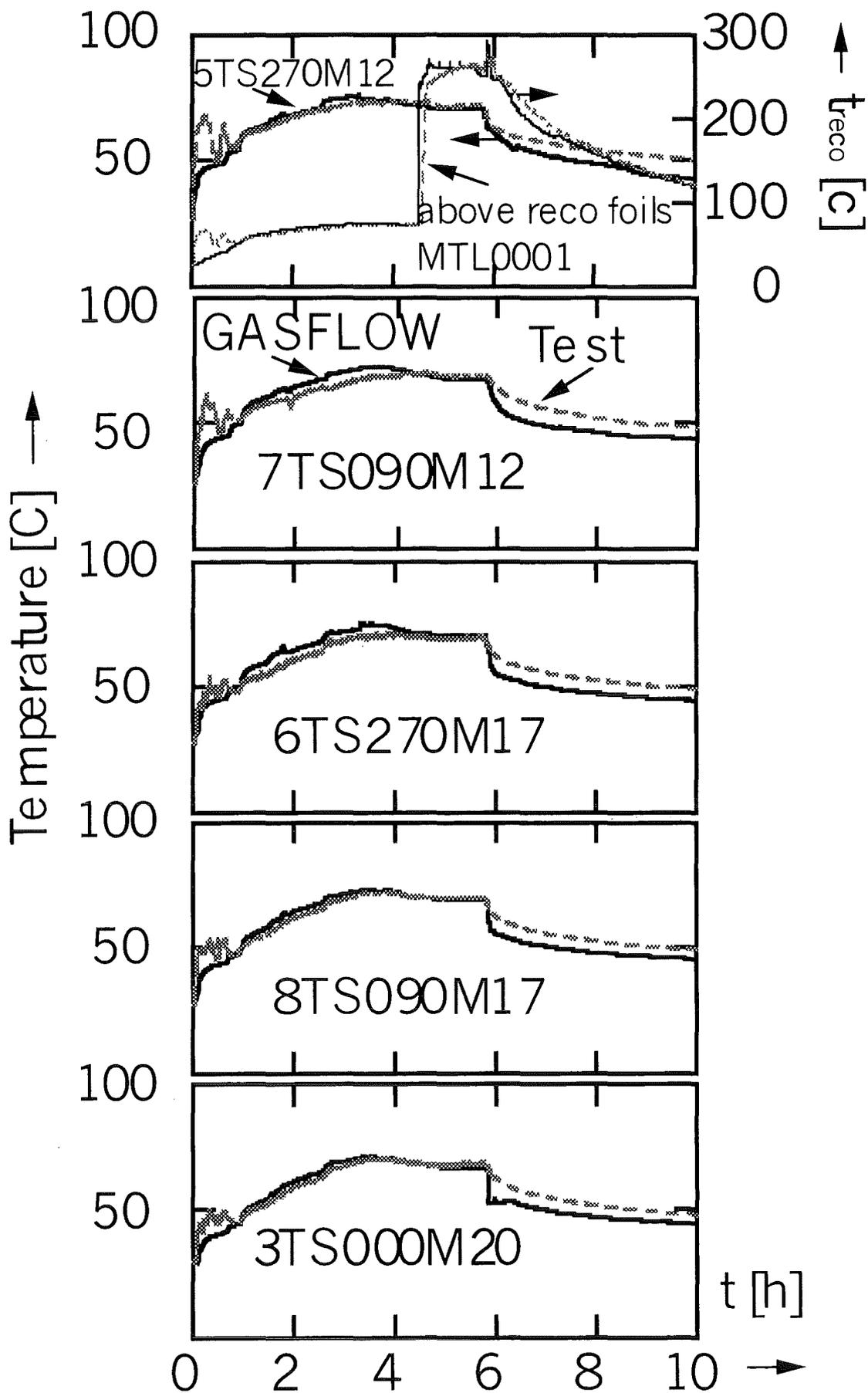


Fig. 2.3.14: Calculated and measured gas temperatures in Battelle test GX6 with GASFLOW 2.1 and use of ducts for valve and leak simulations.

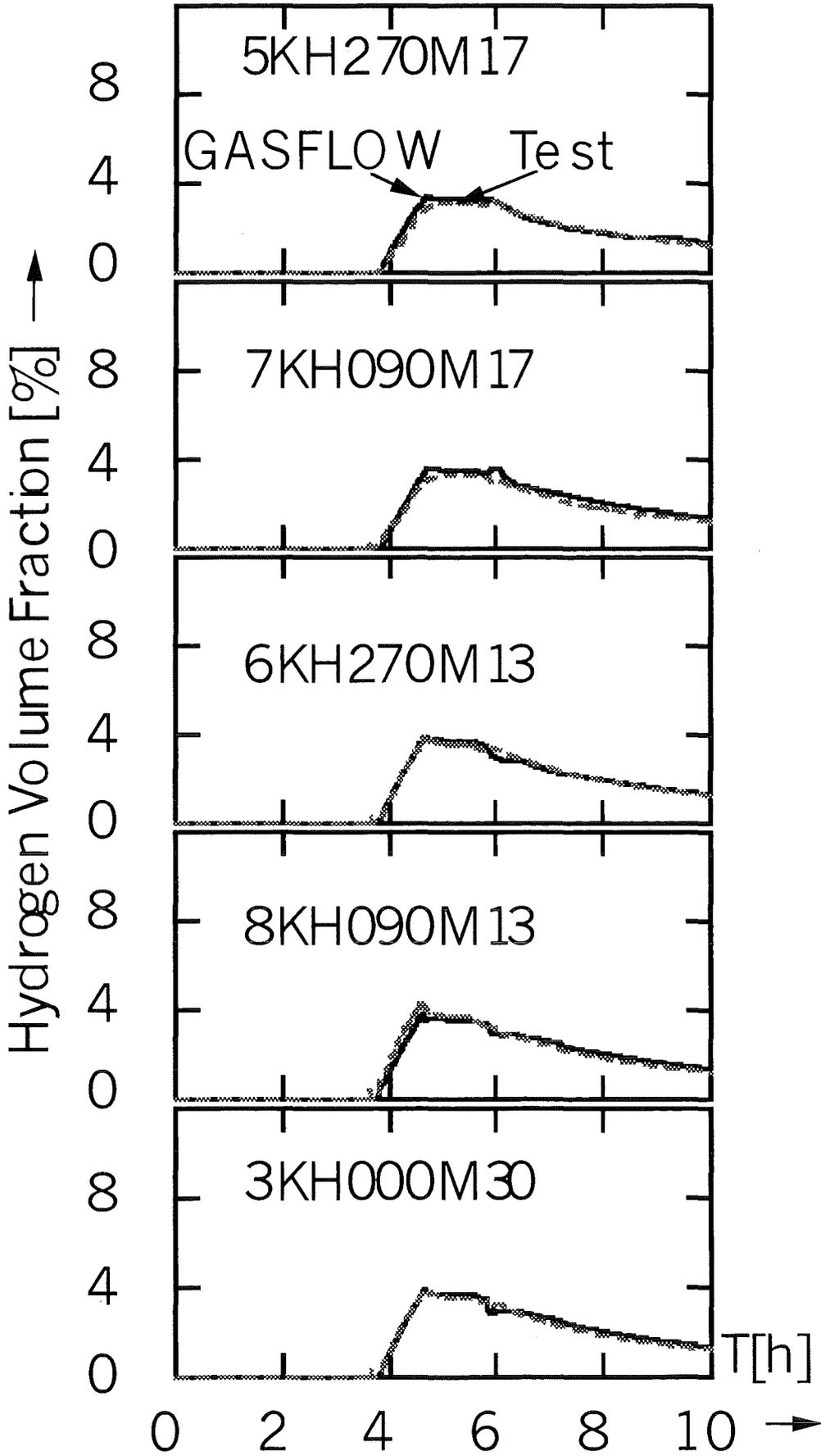


Fig. 2.3.15: Calculated and measured hydrogen volume fractions in Battelle test GX6 with GASFLOW 2.1 and use of ducts for valve and leak simulations.

excellent and demonstrate that GASFLOW accurately calculates the rise in hydrogen concentration as the hydrogen is injected into the test facility, and the reduction in hydrogen concentration as the recombiner removes hydrogen from the test facility. The new simulation of the leakage effect with the 1D ducts gives results in even better agreement with the test data than the earlier published GASFLOW results for this experiment [13]. The leakage simulation strongly cuts down the evacuation effect after the termination of the steam injection. This evacuation was responsible for the earlier temporary overprediction of the hydrogen volume fraction in the upper rooms where it caused a suction effect with a temporary underprediction of the hydrogen volume fractions in the lower banana rooms. This underprediction disappeared again right after the opening of the sump valve in the lower banana room R6. There is still a temporary hydrogen enrichment during the enhanced steam condensation after the cut-off of the steam source. This effect is also visible in the test data and well captured in the new analysis.

The re-analysis of test GX6 with GASFLOW 2.1 with the use of the 1D ducts did considerably increase the running time of the code. The problem took 1 month to complete on the Cray J90. The reason for this nearly factor 3 increase in running time is still not fully understood. The re-analysis of test GX7 and GX6 with a simplified recombiner model that is discussed in the following paragraph neglected the 1D ducts and used a more simple approach to account for the leakage effect which reduced the running time by more than a factor of 2.

3.3.2. Test GX6 and GX7 influence of different recombiner models

The previously discussed re-analysis of test GX6 modeled the catalytic recombiner of the Siemens type FR90/1-100 inside a 1D box of 11.6x16 cm² and 1.6 m height using six axial nodes (see Fig. 2.3.16). The calculations used the measured performance data of this recombiner (see Fig. 2.3.16) with a recombination rate determined in dependence of the hydrogen concentration at the box inlet, and with a forced-flow boundary condition being applied at the box entrance that supplied the hydrogen and

oxygen for the achievement of the measured recombination rates with the measured efficiency. The simulation with the forced inflow did not account for the chimney effect from the hot exhaust gases that results from the differences of the density integrals on the outside and inside of the recombiner box. Simplified calculations were performed with a single node representation of the recombiner box to find out whether the same results could also be obtained when using a single instead of the exact multi- node representation of the length of the recombiner box with a forced inflow condition at the box entrance . The simplified analysis looked at the Battelle tests GX6 and GX7 with the objective to demonstrate the approach to be suitable for the demonstration of the mitigation effect through such a recombiner box in large containment analysis with complex 3D meshes. Such single node representation (see Fig. 2.3.16) gives more flexibility for the positioning of recombiners in a complex 3D containment mesh because it avoids specific mesh adaptations for representing the exact height of the box to match the chimney effect. A series of calculations that apply the original performance data from the Battelle tests were performed for the 6- node and the single node representation of the recombiner box [14]. They are labeled as B6 and B1 (see Fig.2.3.16). We also investigated the influence of a slightly different representation of the recombiner performance which had been suggested by Siemens (Fig. 2.3.16). The simulations with the Siemens data for the recombiner performance also used a single node representation of the recombiner box. They are labeled as S1 cases in Fig.2.3.16.

All calculations made use of the new version 2.1 of GASFLOW. They did not model 1D ducts for the valve and leakage simulation to save on computer time. The leakage effect was only simulated in the analysis of test GX7 by making use of a new model option in GASFLOW 2.1 to account for a throttled flow through a small outflow area around the 14 instrument guide tubes with a given hydraulic diameter of 1mm applying a pressure boundary that represents the correct gravity head at the different axial locations of the 14 leak openings on the outside of the computational mesh. The analysis of test GX6 was done for a leak- tight containment. The comparison with the

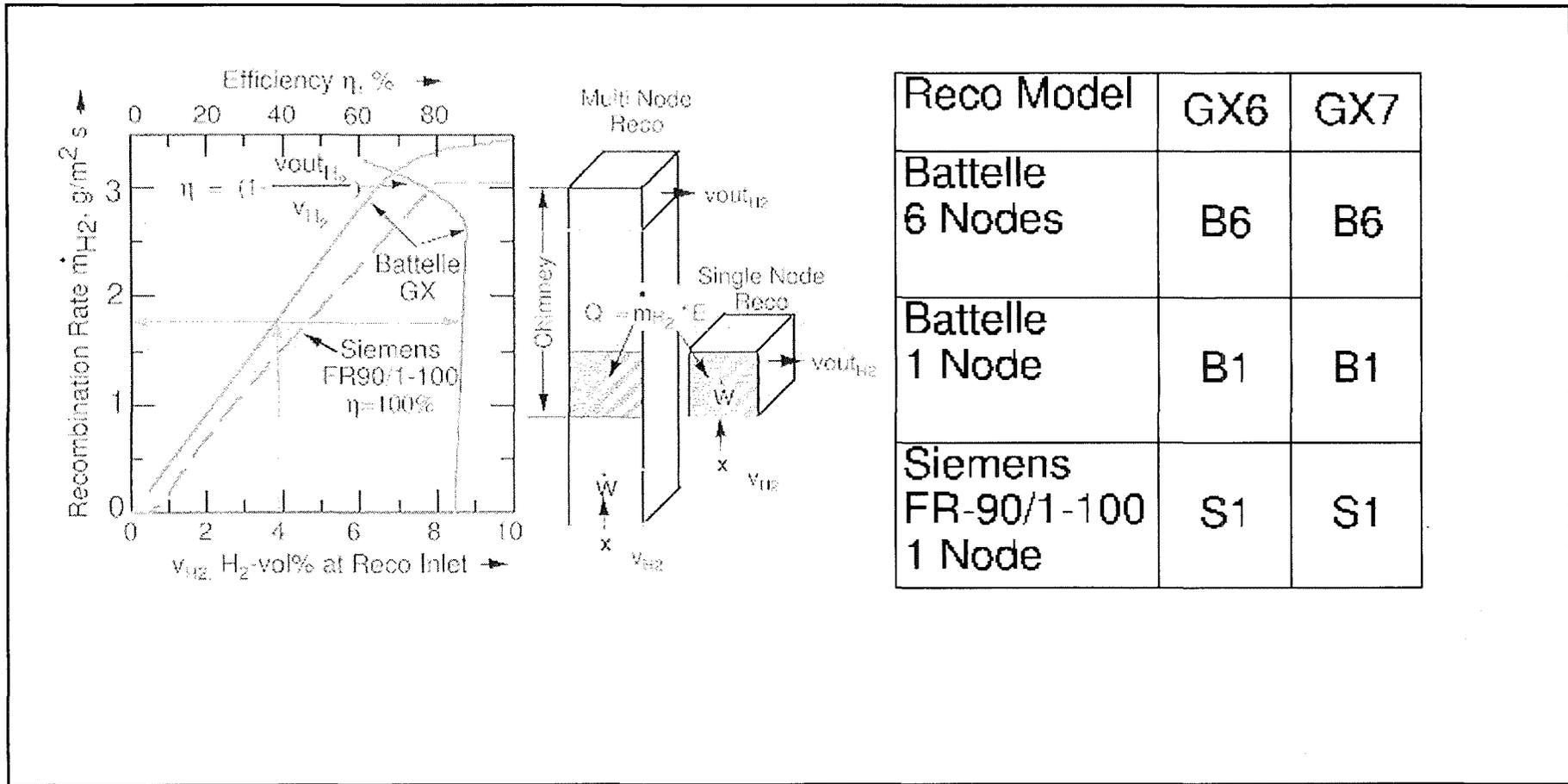


Fig.2.3.16: Sketch of the single and multi-node recombiner model and case definition for recombiner study

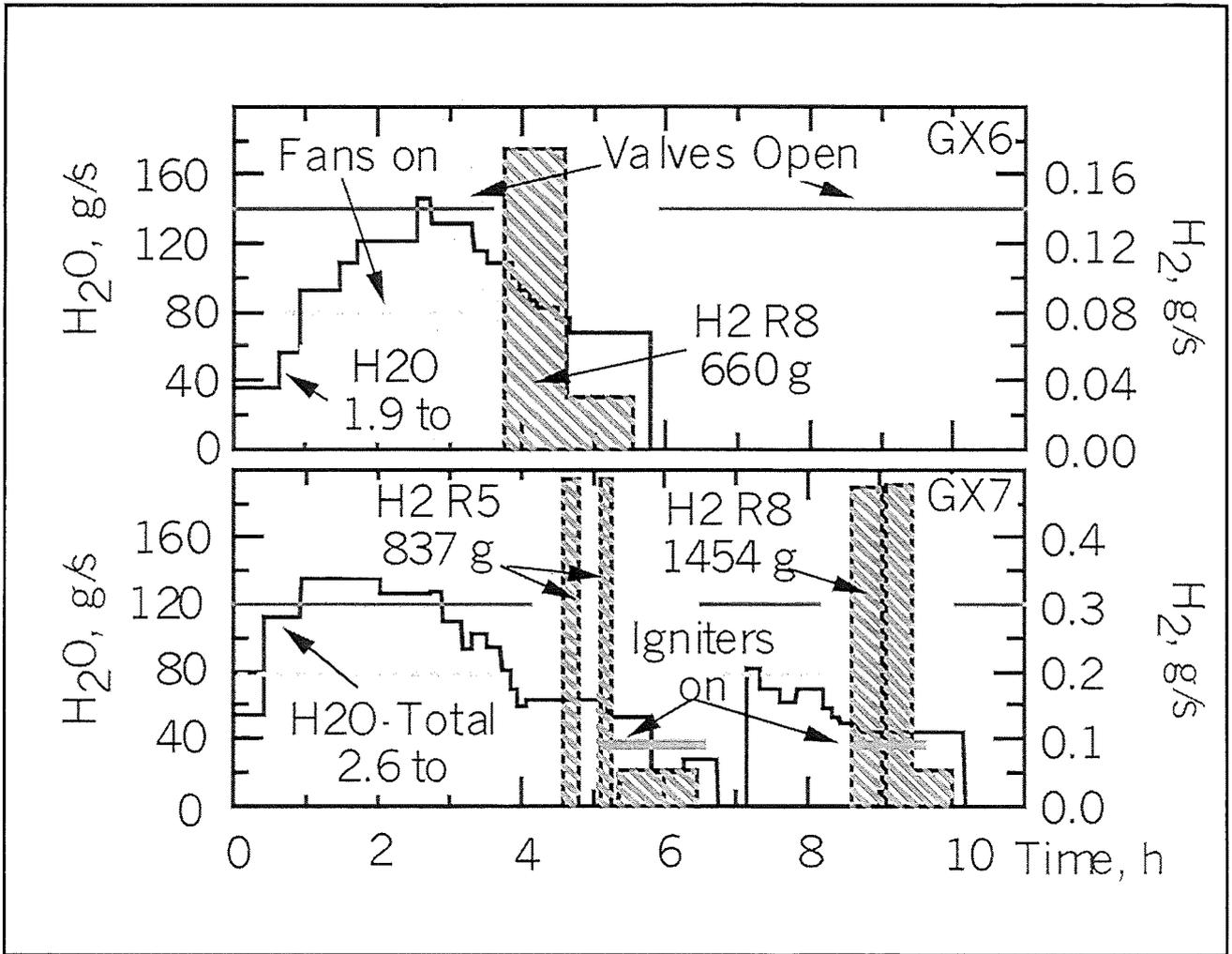


Fig.2.3.17: Steam/hydrogen sources and test conditions for the Battelle tests GX6 and GX7 with a Siemens recombiner and spark igniters.

previously discussed GX6 analysis that used 1D ducts gives some idea about the magnitude of the leakage effect.

Test GX7 studied the hydrogen recombination in an atmosphere with much higher steam concentration than GX6. Hydrogen was first injected from a line source on the floor of room R5, a second injection period brought in 1400 g of hydrogen from a line source in R8 (see Fig.2.3.17 and Fig. 2.3.12). Five spark igniters were positioned in each room at the indicated positions in Fig. 2.3.12 and operated temporarily with a 7s spark frequency. We have analyzed the steam hydrogen distributions in tests GX6 and GX7 each for a total problem time of 10h. We included the simulation of hydrogen recombination and local combustions at the spark igniters when they were active and the flammability limits were exceeded according to the Shapiro diagram [15].

Figure 2.3.18 compares the calculated and measured hydrogen concentrations in each room at the sensor locations given in Fig.2.3.13. Note the temporary differences in the GX6 results from Fig.2.3.15 and 2.3.18 which come from the neglect of leakage in the new analysis. The results for GX6 and GX7 are in good agreement with the test data. The curves for the B6 and B1 cases with a single and six axial recombiner nodes are right on top of each other. This means that the flow through this small recombiner box has only little influence on the convection inside the test rooms. The revised performance data from Fig.2.3.16 for the Siemens recombiner FR90/1-100 (cases S1) give slightly reduced recombination rates for the same hydrogen concentration. This is reflected in the prediction of somewhat higher and more conservative hydrogen concentrations.

Test GX6 had a nearly homogeneous hydrogen distribution in all rooms with maximum concentrations below 4%. The prediction of the hydrogen distribution in test GX7 was more challenging. The first period of hydrogen injection leads to strongly stratified

conditions in the upper banana rooms with peak concentrations around 9% and quite low concentrations in the lower rooms. Figure 2.3.18 displays the calculated lean flammability limit from the Shapiro diagram for the local steam concentration in each room. It shows that the upper rooms are initially steam- inert and that the active igniters cannot trigger any combustion in this period. This is consistent with the experimental findings. Most hydrogen from the first injection period reacts in the recombiner. This reduces the hydrogen in the upper rooms to below the concentrations in the lower rooms. Hydrogen concentration during the second release period rapidly exceeds the flammability limit in R8. The concentration rise is well predicted in GASFLOW during this period. But igniters are only active in R6 and R7 then. GASFLOW initiates two hydrogen combustions in R6 each time when the hydrogen concentration exceeds the flammability limit at the igniters. The combustion becomes fairly complete each time. Residual hydrogen concentrations from the test data due to quenching effects in the rooms adjacent to the source room R8 are not captured with the simple Arrhenius type combustion model applied in GASFLOW.

The results from the simplified GASFLOW analyses which represent the recombiner in the GX6 and GX7 tests with a single instead of six axial nodes are nearly identical, and they are in good agreement with the test data. This documents that the flow through the recombiner box as derived from the data for the recombiner performance has no significant influence on the convection inside the test rooms. The results demonstrate that the exact nodalization of the recombiner height for matching the chimney effect is not necessary when using measured performance data. This finding gives a lot of flexibility for the recombiner positioning in 3D simulations of steam/hydrogen distributions with mitigation in complex models of reactor containments. The results also support the use of the new performance data for the Siemens recombiners which are available for recombiners of many sizes under quite different operating conditions. A complete set of such correlations for various recombiners of the Siemens type has recently been implemented into GASFLOW and is summarized in the table of Fig.2.3.19.

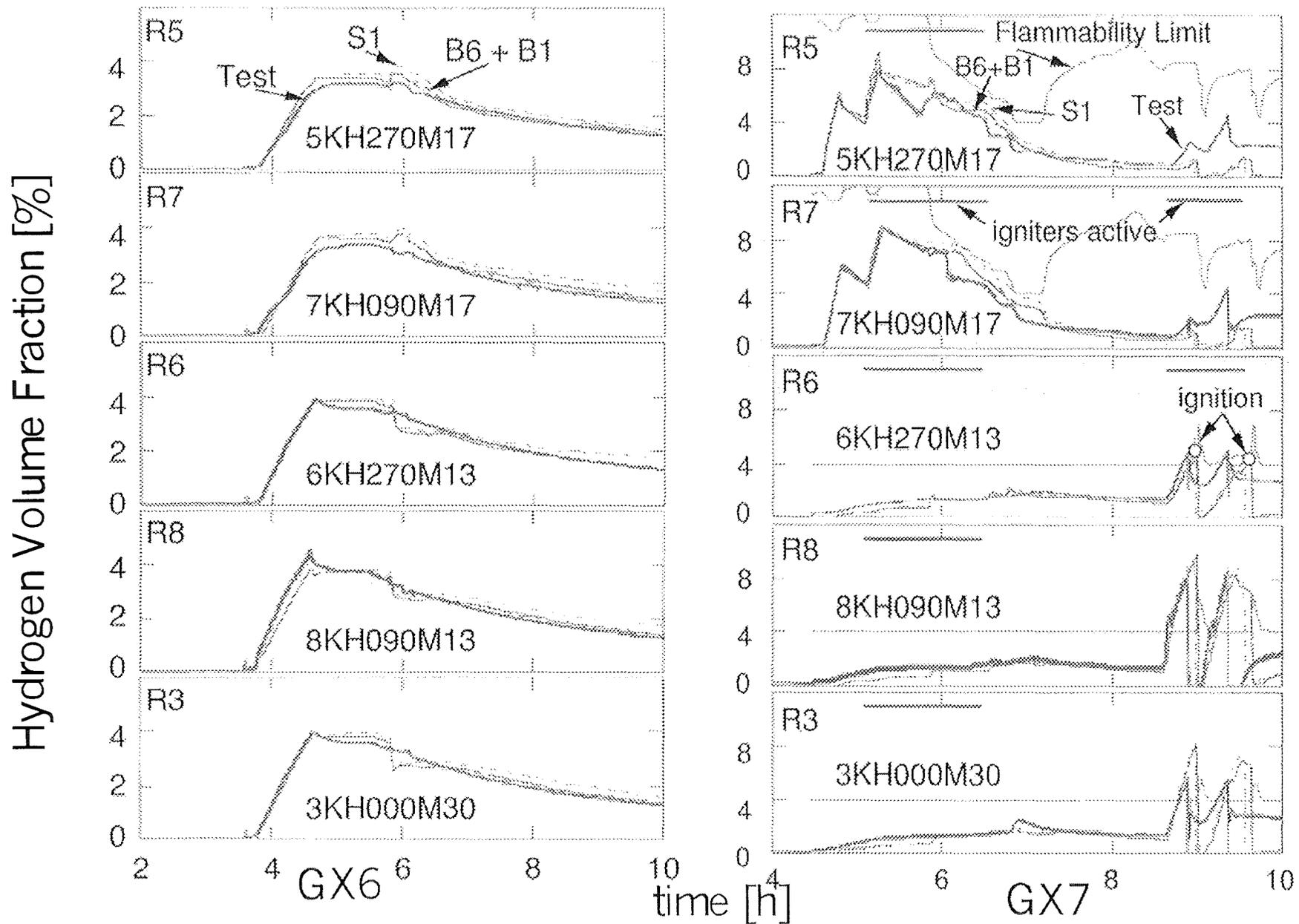


Fig.2.3.18: Comparison of calculated and measured hydrogen concentrations in Battelle tests GX6 and GX7.

		FR90 1-100	FR90 1-150	FR90 1-320	FR90 1-960	FR90 1-1500
GKN Gruppe	-	-	-	klein	mittel	groß
Finlet	cm ²	120	180	384	1152	4200
Foutlet	cm ²	242	352	726	2134	10769
Höhe der Box	cm	100	100	100	100	140
Tiefe der Box	cm	16.6	16.6	16.6	16.6	32.6
Breite der Box	cm	15	20	37	101	155
Oberfl Box	cm ²	6327.	7300.	10608.	23063.	46812.
Dicke Box	cm	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
k1	g/s/bar	0.320	0.480	1.000	3.100	13.700
k2	g/s	0.390	0.580	1.200	3.700	16.700

$$\text{conref} = \min(v_{H_2}, 0.08)$$

v_{H_2} = Wasserstoffkonzentration, v_{O_2} = Sauerstoffkonzentration am Eintritt

Rekombinationsrate:

$$dm_{H_2}/dt \text{ [g/s]} = \text{conref} \cdot (k_1 \cdot p \text{ [bar]} + k_2) \cdot \text{TANH}(100 \cdot \text{conref} - 0.5)$$

Formel verwendet konstante Effizienz $\eta = (1 - v_{H_2 \text{out}}/v_{H_2}) = 100\%$

Fig.2.3.19: Parameters of Siemens recombiners and verified recombination constants for recombiner models used in GASFLOW.

4. Conclusions

The main effort put into the computer code GASFLOW in 1997 focussed on the development and documentation of the new version 2.1. This work was jointly performed at FZK and Los Alamos National Laboratory. A first set of documentation has been prepared on schedule with the milestones from US-NRC. It includes 4 manuals which are currently still in draft form and which will undergo further rapid changes through the help of technical editors. There is still a considerable effort involved both on FZK and LANL side to finalize these manuals and issue the documentation as common FZK and LANL reports.

The new models that have been added to GASFLOW have been documented also. Model development focussed on the specific needs for the analysis of large containments under conditions of severe accidents. First calculations that were performed with the new code version have demonstrated that GASFLOW 2.1 can be used to simulate quite complex containment arrangements and that the modeling has been developed to enough detail that such large containment analyses are feasible today.

In an upcoming next step we will make use of the new code version to analyze steam/hydrogen distributions in the EPR. A detailed containment model is being developed together with our industry partners from Siemens. It is currently used to analyze different release scenarios of hydrogen both with and without steam.

References

1. J. R. Travis, J. W. Spore, P. Royl, K. L. Lam, T. L. Wilson, B. D. Nichols, C. Müller, R. Redlinger, G. A. Necker:

GASFLOW-II: A Three-Dimensional Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains

Vol. 1 Theory and Computational Model

NUREG/CR-6570, LA-13357-MS, FZKA-5994 Draft Dec. 1997

2. J. W. Spore, J. R. Travis, P. Royl, K. L. Lam, T. L. Wilson, C. Müller, G. A. Necker, B. D. Nichols:

GASFLOW-II: A Three-Dimensional Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains

Vol. 2: User's Manual

NUREG/CR-6570, LA-13357-MS, FZKA-5994 Draft Dec. 1997

3. J. W. Spore, P. Royl, J. R. Travis, E. D. Hughes, C. Müller, H. Wilkening, W. Baumann, G. F. Niederauer, J. Tills, D. R. Liles:

GASFLOW-II: A Three-Dimensional Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains

Vol. 3: Assessment Manual

NUREG/CR-6570, LA-13357-MS, FZKA-5994 Draft Ver. 0.3 11 July 97

4. J. W. Spore, G. Necker, T. Wilson

GASFLOW-II: A Three-Dimensional Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains

Vol. 4: Programming Manual

NUREG/CR-6570, LA-13357-MS, FZKA-5994 Draft Ver. 0.3 11 July 97

5. K. Thurnay:

Thermal Properties of Water

FZKA-5588 June 1995

6. H. Rochholz:

Speakeasy-tool as graphic preprocessor of GASFLOW

Interner Bericht INR 32.21.01 INR-1959, June 9, 1997

7. W. Breitung, S. B. Dorofeev, J. R. Travis:

A mechanistic approach to safe ignitor implementation for hydrogen mitigation

Procs OECD/NEA CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, Can., May 13-15, 1996

8. V. I. Golovitchev, J. R. Travis

Implementation of a Detailed Chemistry Model into the GASFLOW Code

Supplement to the Wissenschaftliche Berichte FZKA 5914, Sept. 1997

9. P. Royl, J. R. Travis:

Analysis of HDR Test T31.5 with GASFLOW

PSF-Ber. 3202, Nov. 1994

10. Bird, Stewart, Lightfoot: "Transport Phenomena", John Wiley & Sons 1960

11. J. R. Travis, P. Royl:

An Examination of the GASFLOW Pressure-Volume Work Term and Multi-Phase Homogeneous Equilibrium Model (HEM)

Interner Bericht December 4, 1996

12. P. Royl:

GASFLOW Analysis of the Phebus FPT0 Containment Thermohydraulics”

Annual Meeting on Nuclear Technology '95, Nürnberg, May 16-18, 1995

13. P. Royl, W. Breitung, J. R. Travis, H. Wilkening, L. Seyffarth:

Simulation of Hydrogen Transport with Mitigation Using the 3D Field Code GASFLOW

Procs. International Topical Meeting on Advanced Reactor Safety, Vol. I, p. 578, Orlando, Florida, June 1997

14. P. Royl, G. Necker, J. W. Spore, J. R. Travis:

3D Analysis of Hydrogen Recombination Experiments in the Battelle Model Containment with the GASFLOW Code

Accepted for Publication at Annual Meeting on Nuclear Technology '98, München, May 1998

15. Z. M. Shapiro, T. R. Moffette:

Hydrogen Flammability Data and Application to PWR Loss-of-Coolant Accident

WAPD-SC-545, Bettis Plant, September 1957

- B. Validating the GASFLOW modelling of condensation with Phebus containment thermal hydraulics
(W. Baumann, INR; P. Royl, IRS)

Abstract

The GASFLOW condensation model has been validated using Phebus experiments. The results show that the default model parameters compare well with the measurements. Minor differences against earlier performed calculations are in favor to the new code version. Applying the $k-\epsilon$ turbulence model, however, was not successful, even when the cylindrical coordinates were changed to Cartesian.

Zusammenfassung

Das Kondensationsmodell des GASFLOW-Codes wurde anhand von Phebus-Experimenten überprüft. Es zeigte sich, daß die als Standards eingestellten Modellparameter eine gute Übereinstimmung mit den Meßwerten liefern. Kleinere Unterschiede zu früheren Rechenergebnissen fallen zugunsten der neueren Code-Version aus. Rechnungen mit dem $k-\epsilon$ Turbulenzmodell verliefen jedoch erfolglos, auch wenn die zylindrischen Koordinaten durch kartesische ersetzt wurden.

1. Introduction

During a postulated core melt-down accident in light water reactors, the amount of released steam and hydrogen, their level of mixture, their transport and distribution in the containment are a major concern for the safety of nuclear power plants. To analyze related gas transport and combustion processes, the 3D thermal hydraulic computer code GASFLOW /1/ developed at Los Alamos National Laboratory serves as an important predictive tool. Valuable data for validating GASFLOW with respect to steam convection and condensation phenomena are given by the Phebus Thermal Hydraulic Test series conducted in the French Institut de Protection et de Sureté Nucléaire (IPSN) at Cadarache /2/. Preliminary test calculations were performed earlier with a previous code version /3/.

2. Description of the Phebus Containment Vessel

The Phebus containment vessel REPF 502 with its free gas volume of about 10 m³ represents a 1/5000 scale model in volume of an actual PWR containment vessel (Fig.2.3.20). Its total height and inner diameter extend to about 5.7m and 1.8m, resp. It is equipped with a double-skinned outer wall, and an organic liquid flowing through this annulus maintains a homogeneous temperature around 110°C on the inner wall surface (Tab. I). Three condenser rods of 0.15m outer diameter are attached to the top vault in positions 120° apart at a distance of 0.24m from the centerline. The rods have a total length of 2.50m. Their upper part covering 1.70 m are the so-called "wet condensers" where steam condenses on steel walls kept at an almost uniform temperature of about 70°C. The lower part with a length of 0.80 m are the so-called "dry condensers" which are heated to a similar temperature as the vessel walls to prevent condensation. Steam and hydrogen can be injected through a feed pipe which is centrally located in the lower part of the vessel. A sump at the bottom of the vault contains water whose temperature can be controlled.

3. Analysis of the Phebus Thermal Hydraulic Tests

The Phebus Thermal Hydraulic Tests consist of a total of 4 steady-state experiments. The initial conditions in each case were a pressure of 1.936 bars, a temperature of 110°C, and an atmosphere containing 47.952 Vol% nitrogen, 39.26 Vol% steam, and 12.788 Vol% oxygen. During these tests the pressure inside the vessel was measured for various rates of steam injections and different values of thermal boundary conditions (Tab. I). For the analysis with GASFLOW, first a 3D model of the vessel was set up representing a 60 degree sector with 11 radial, 5 azimuthal and 12 axial nodes in cylindrical coordinates (Fig.2.3.21). Free-slip conditions were applied to all boundary surfaces. The condensation multiplier was set to the standard value of 4.0, and a correction factor for film-model enhancement suggested by Bird-Stewart-Lightfoot /4/ was used. The calculations performed for laminar flow were extended to a problem time of 3600s which was sufficient to reach steady-state pressure levels (Tab. I). On the INRCRAY1, the computer time summed up to about one hour per run.

A subsequent attempt to conduct the simulations with the $k-\epsilon$ turbulence model had to be discontinued as the timestep size turned extremely small, a fact which could be confirmed with the latest code version as well. With the idea in mind that severe reductions in timestep size might have been caused by the narrow-spaced mesh near the origin of the cylindrical system, a 3D modeling approach using Cartesian coordinates was tried instead. This second model input was set up in half symmetry (Fig.2.3.22), consisting of 21 x 12 x 13 nodes in x-, y-, and z-direction. To compare the results with the various cylindrical cases, it was run with GASFLOW under the same conditions of laminar flow, and to the same extent of problem time, at the expense of a tenfold time consumption on the same machine (Tab. I). Running the Cartesian input with the $k-\epsilon$ turbulence model being activated, however, had the same negative consequences as for the cylindrical coordinates which were timestep reductions to very small values.

4. Conclusion

The Phebus Thermal Hydraulic Tests were used to validate the GASFLOW condensation option with the condensation parameters set to standard values. It turns out that the calculated final pressures during the condensation process come close to the measured ones (Tab. I). Compared to data obtained from a previous code version /3/ three years ago, the results show a little difference in the final pressures, which, at least for the large steam flow rate, is in favor to the current code version. Best results were obtained with the Cartesian input, however, with a considerably larger number of cell volumes and at the expense of a tenfold computer running time. These calculations ought to be repeated after the revision of the $k-\epsilon$ turbulence model in GASFLOW has been completed.

5. References

1. GASFLOW-II: A Three-Dimensional Finite-Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains, Vol. 1+2,
J. W. Spore, K. L. Lam, B. D. Nichols, T. L. Wilson, C. Muller,
Los Alamos National Laboratory,
J. R. Travis, P. Royl, G. A. Necker,
Forschungszentrum Karlsruhe.
2. P. von der Hardt, A. V. Jones, C. Lecomte and A. Tattetrain: "Nuclear Safety Research: The Phebus FP Severe Accident Experimental Programme", Nuclear Safety, Vol. 35-2, 1994.
3. P. Royl: "Gasflow Analysis of the Phebus FPT0 Containment Thermohydraulics", Annual Meeting on Nuclear Technology '95, Nürnberg, May 16-18, 1995.
4. Bird, Stewart, Lightfoot: "Transport Phenomena", John Wiley & Sons 1960.

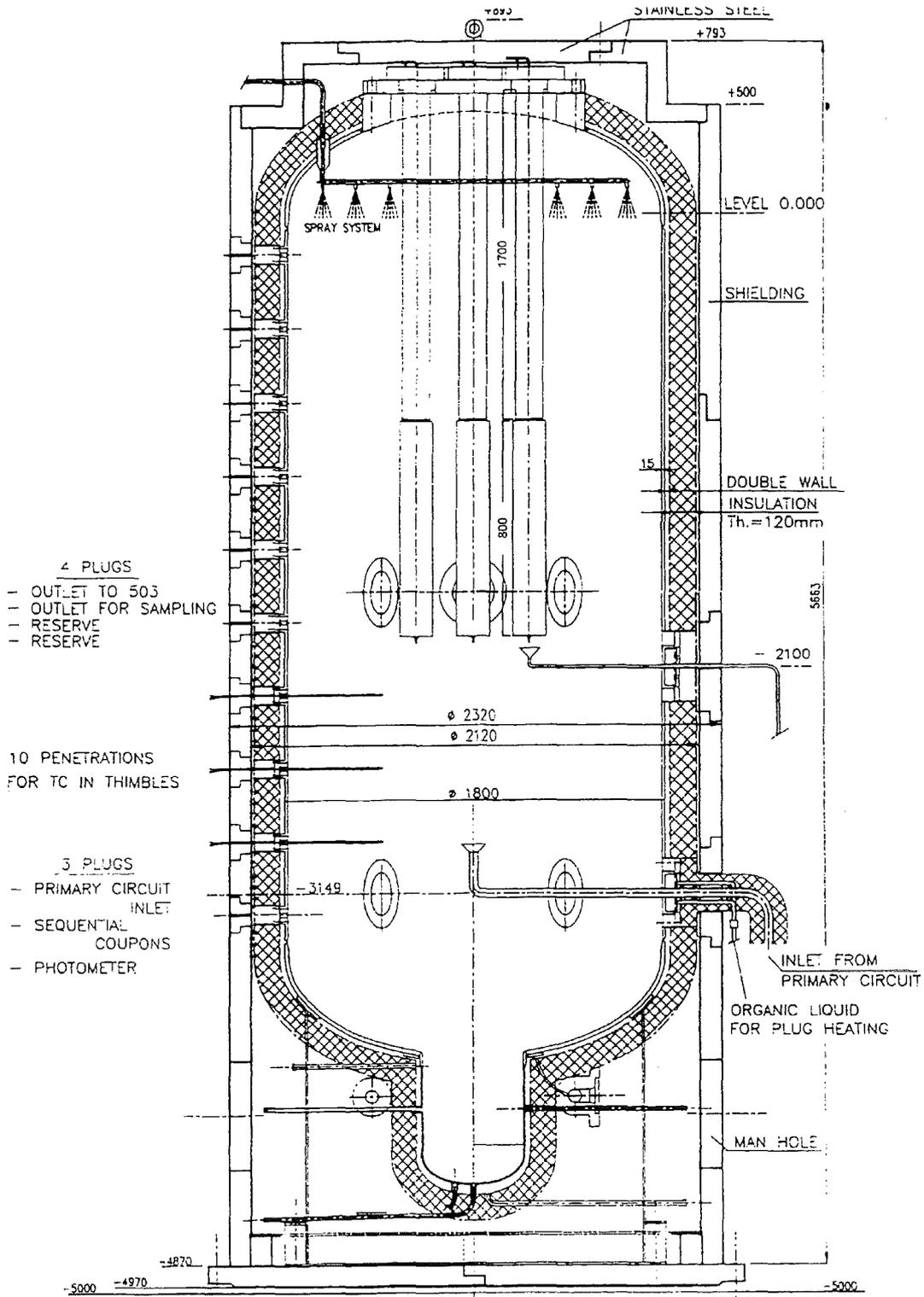


Fig.2.3.20: Phebus Containment Vessel REPF 502

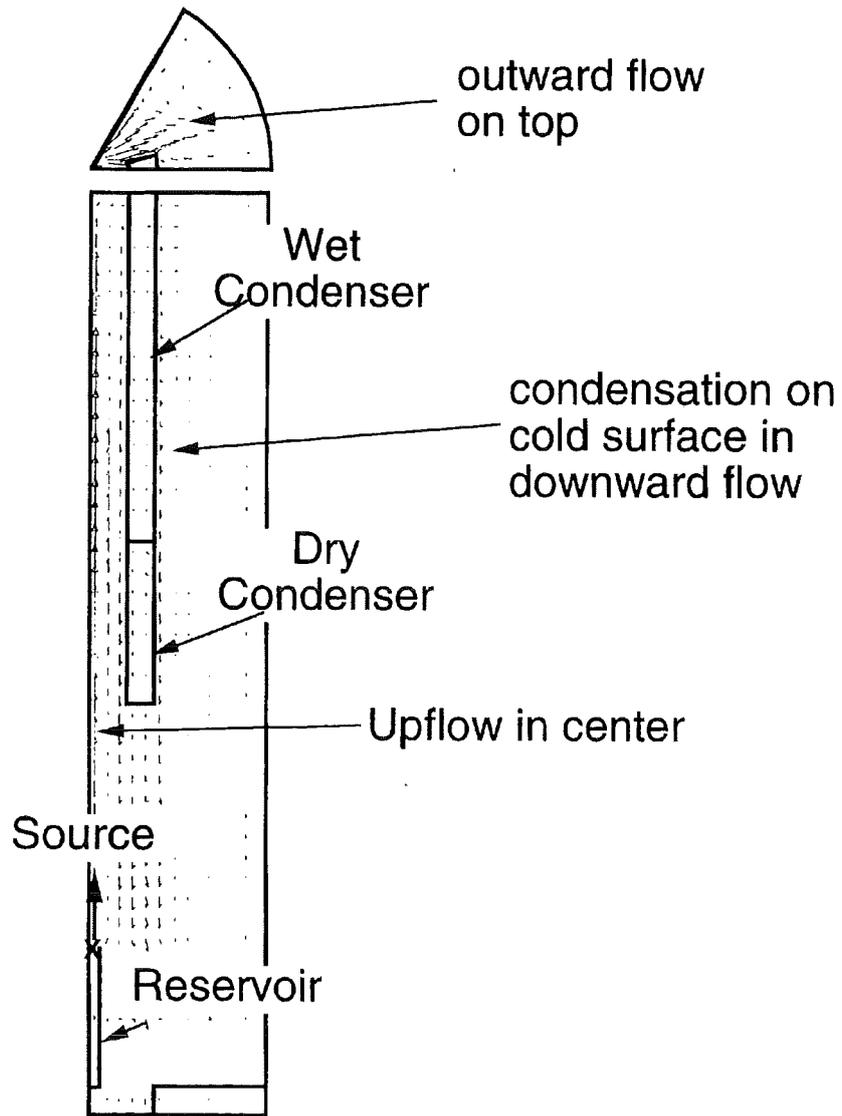


Fig.2.3.21: Characteristic Flow Field from GASFLOW

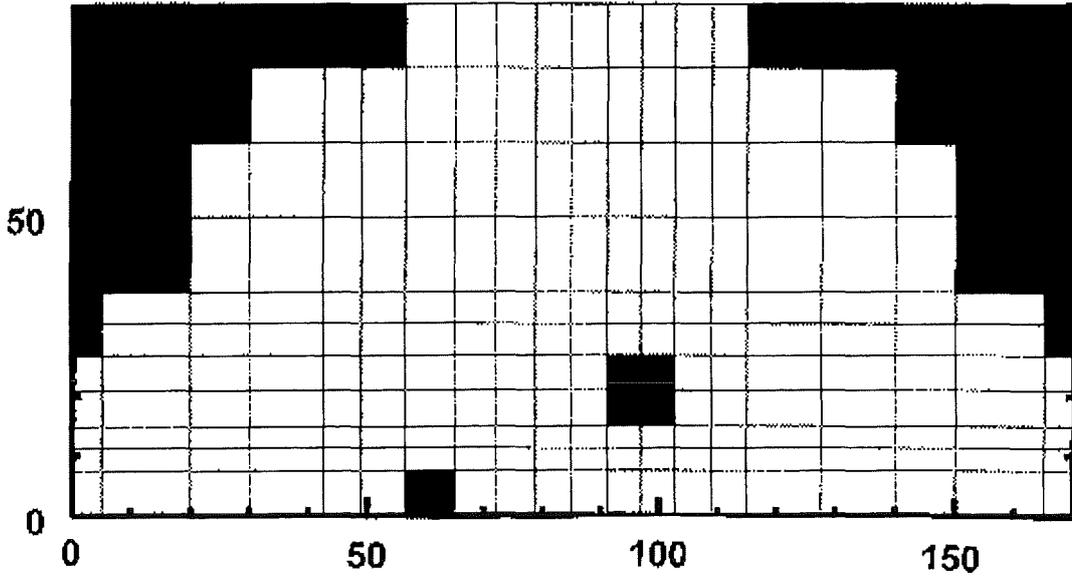


Fig.2.3.22: Modeling in Cartesian coordinates: horizontal plane $k = 12$, dimensions given in cm.

		Test#	6A	10A	4A	4B
Experimental Conditions	Steam Source	g/s	1	2	4	4
	Pressure	bar	1.652	1.814	2.322	2.008
	Temperature	°C	114.17	117.04	124.82	120.21
	Dry Condenser Temperature	°C	108	108	107	98
			110	109	110	100
			98	108	104	96
Wet Condenser Temperature	°C	75	77	91	81	
Vessel Wall Temperature	°C	111	111	111	101	
Sump Surface Temperature	°C	89	89	91	90	
	pfinal stationary	bar	1.65	1.814	2.322	2.008
Gasflow Results (previous, cylindr.)	pfinal cons1 = 4	bar	1.66	1.852	2.62	2.23
	pfinal cons1 = 4 film enhancement	bar	1.652	1.796	2.42	2.13
Recalculation cylindr.	pfinal cons1 = 4 film enhancement	bar	1.644	1.753	2.213	1.952
Cartesian approach	pfinal cons1 = 4 film enhancement	bar	1.669	1.786	2.238	1.973

Tab. I: Parameters and Results for the Steady-State Thermal Hydraulic Tests

V3D-Code development

In 1997 a new distribution code V3D (the 'V' stands for German 'Verteilung' and the '3D' stands for '3 Dimensionen') was implemented at INR/FZK.

The code solves the conservation equations for three-dimensional compressible turbulent fluid flow for an arbitrary number of gaseous components. The turbulence model used is the (compressible) $k-\varepsilon$ model. The equations solved are the same as in the COM code.

The solution algorithm itself is based on the ALE-method (Arbitrary Lagrange-Eulerian) developed at Los Alamos National Laboratory. The algorithm thus is semi-implicit. To discretize the problem domain, V3D uses an equidistant cartesian mesh. This is in accordance with the fact that V3D is planned to be part of the adaptive mesh refinement INCA-code program.

V3D is written in C with the graphics routines using the XLib library (X Window). It consists of three well-distinguished parts: input (problem setup), execution (problem run), and output (postprocessing).

Problem setup: This is done using a graphical user interface (fully included in V3D). The user can thus specify interactively the problem configuration by using mouse-clicks, mouse-movements and normal keyboard input. The results can immediately be viewed and verified (and changed, if necessary) on the screen. Moreover, at any given moment, the setup generated so far can be saved in a binary file. It should be mentioned that this binary file can also be read by the input part, and that it has the same format as the restart files produced by the run part. For this reason, checking or modifying the restart files presents no problems.

Problem run: The binary file produced by the setup part (or a restart file produced by a previous run) is used as the starting point. The user has the option to start or stop on-line 3D graphical output of the calculation at any

time he wishes to do so. Also, it is possible for the user to change many calculation parameters by sending signals to the running program. Finally, it should be noted that the calculation program and the graphics program are allowed to run on different machines as specified by the user (client-server system).

Problem output: Besides periodically writing restart files, the run part will also produce various other output files, provided the user has specified the corresponding options. At present, options are available which produce output files that can be read by commercial graphics packages like AVS or Gnuplot. It should be noted, however, that output for other graphics packages could be added without any problems.

In 1997, V3D was verified against FZK tube experiments for transient turbulence generation and -dissipation (in more plain words, against experiments in a shock tube with obstacles). As shown by Figures 2.3.23, the results are satisfying and for our needs, i.e. large containment calculations, sufficiently precise.

In the future, besides the already mentioned inclusion into the INCA program, V3D will be extended in several ways:

- inclusion of chemical reactions,
- inclusion of steam as an additional component, and hence of condensation and evaporation effects (two phase flow),
- calculation of heat flow inside structures,
- inclusion of igniters and recombiners.

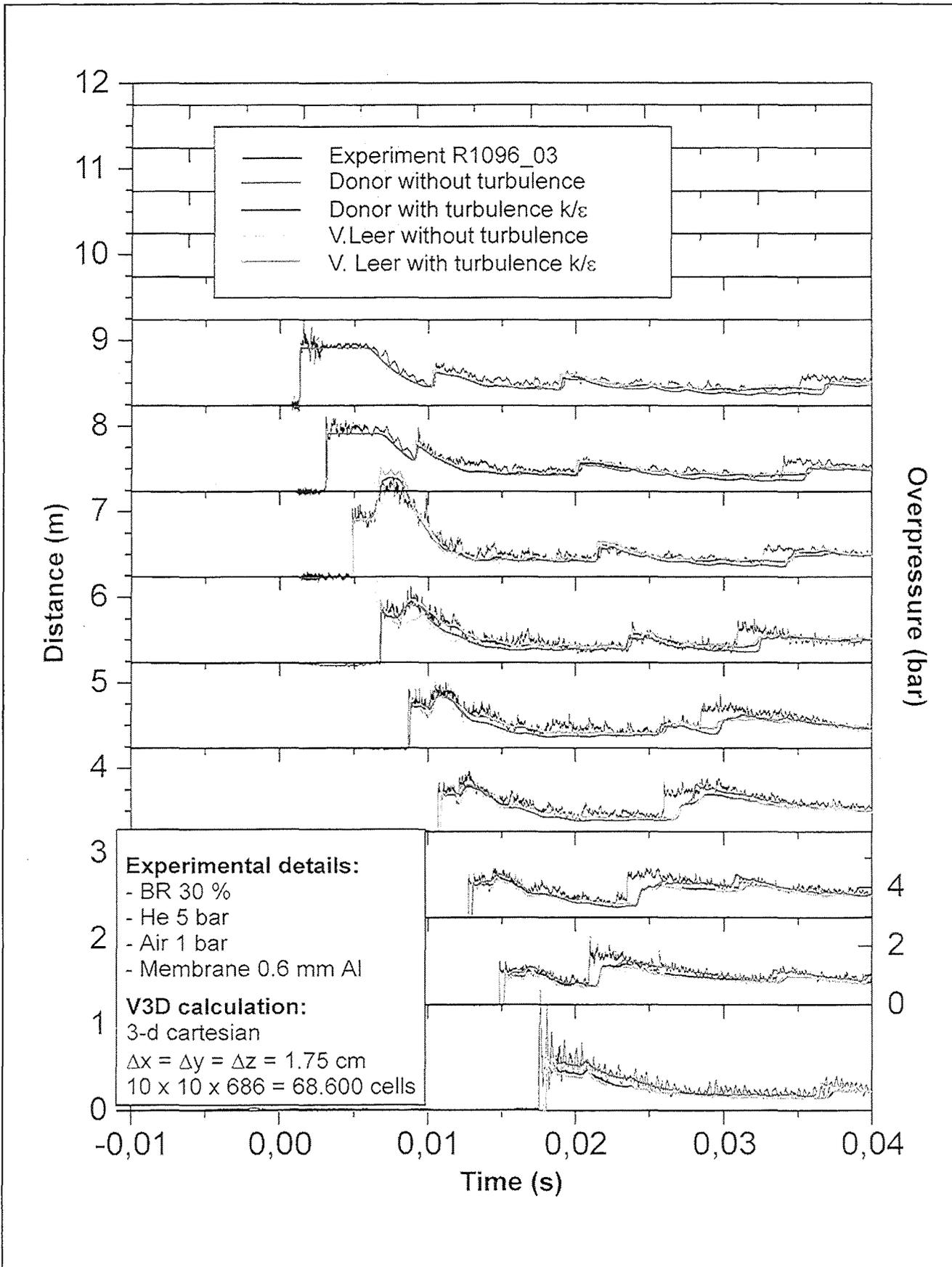


Fig.: 2.3.23: V3D verification against FZK tube experiments for transient turbulence generation and dissipation in obstructed geometry.

IV. Hydrogen combustion

(A. Vesper, W. Breitung, G. Engel, G. Stern, INR)

A large variety of experiments was performed in 1997. The summary of the different test issues are shown in figure 2.4.1. The test issues are listed as follows :

- turbulence models
- adaptive mesh refinement tests
- flame quenching
- flame acceleration
- DDT mechanisms.

In the present report the detailed information about the experiments and results will be described.

1 Experimental details

1.1 Test facility

A combustion tube (12 m long, 35 cm inner diameter) was designed and constructed at FZK (Figure 2.4.2) and equipped with an array of different ring obstacles blocking a certain portion of the flow path (blockage ratio BR= 30, 60, 90 %). The combustion was ignited at one end of the tube by a glow plug.

1.2 Instrumentation

Since the objective is to measure combustion behaviour, fast pressure transducers, germanium photodiodes, ionisation gauges and thermocouples were selected and installed along the tube.

1.3 Test procedure

The experiments were performed using the following standard procedure:

- evacuation of the air filled tube to about 1 mbar
- filling of the tube with a H₂/air mixture of defined composition to the chosen initial pressure
- ignition of the mixture with a glow plug
- data recording

TEST ISSUE	EXPERIMENTAL VARIABLES					TUBE CONFIGURATION
	Mixture composition	Pressure p_0 (bar)	Obstacles			
			Type	%BR	Spacing (m)	
Turbulence Models	He/air	HPS=3-5 LPS=1-2	- rings	60	0.35	
AMR Tests	H ₂ /air, He/air, air/air	HPS=3-5 LPS=1	5 cm cube	25	---	
Flame Quenching	lean H ₂ -air, 8-12 % H ₂	0.5-4	- rectangle - rings	30 45 60 75 90	0.25 0.5 1.0 2.0	
Flame Acceleration	H ₂ /air H ₂ /O ₂ /N ₂ H ₂ /O ₂ /Ar H ₂ /O ₂ /He H ₂ /O ₂ /CO ₂ H ₂ /air/CO ₂	1	- rings	60	0.35	
DDT Mechanisms	H ₂ /air/He H ₂ /air H ₂ /air	HPS 5-20 LPS 0.5-1 1 1-2	- flat end & conus - flat end	---	---	
H ₂ -CO combustion						

Fig.2.4.1: FZK-tube tests 1997

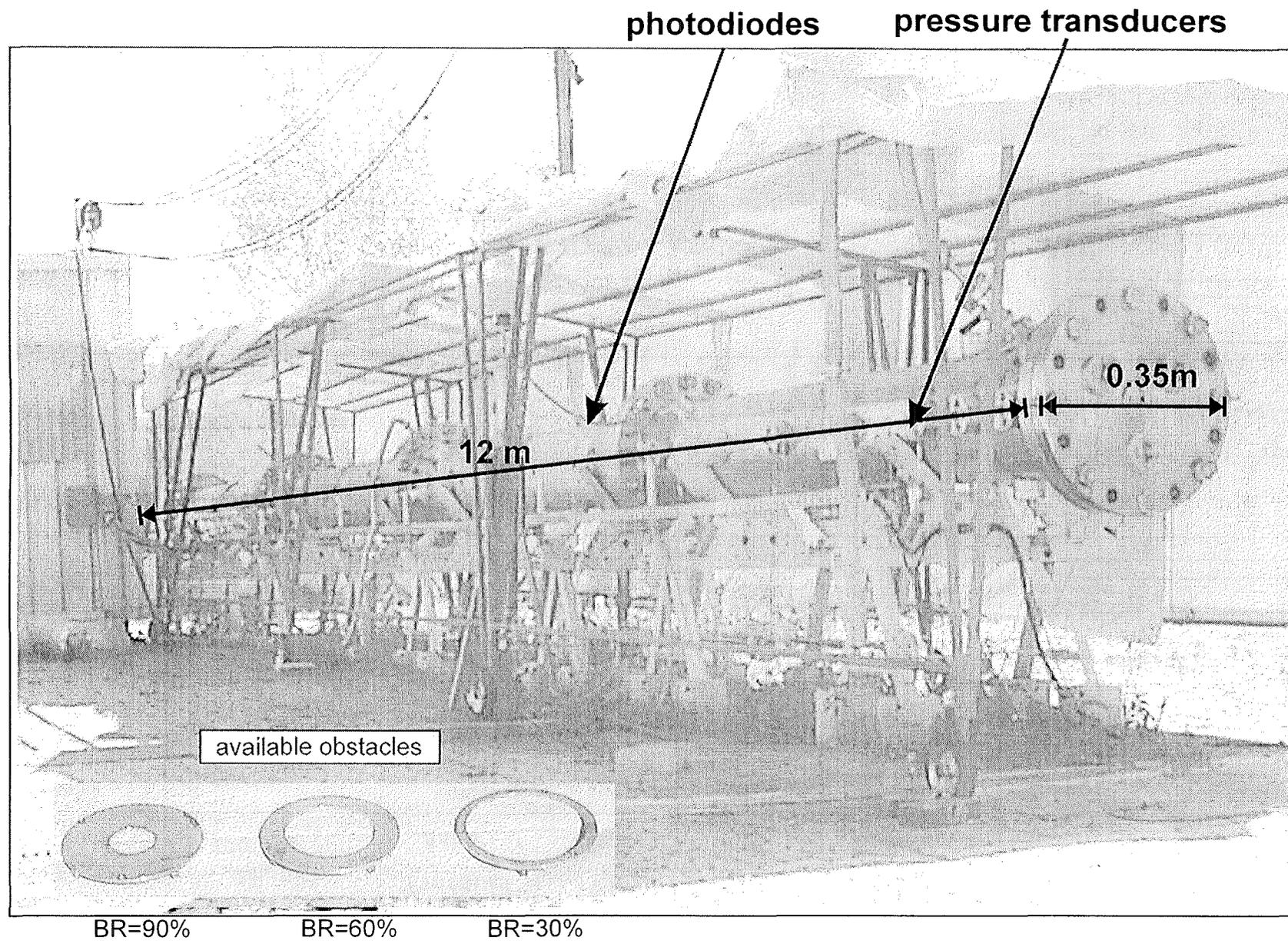


Fig.2.4.2: FZK 12-m-tube

2 He-air turbulence tests

The 12-m tube was modified to allow inert tests in a shock tube mode. In this mode the tube was divided by a membrane into a low pressure section (length: 9m) which contains circular orifices as obstacles, and a high pressure section (length: 3m). After evacuating both sections the low pressure section was filled up to the initial pressure of 1 bar with air. The high pressure section was filled with Helium until the membrane bursted. After bursting of the membrane a shock wave travels into the remaining section. The measured pressure signals at different locations can then be compared to numerical simulations using different turbulence models. These data allow to verify the turbulence modelling under inert conditions, without interference from a combustion process. These results are compared to V3D calculations in section 2.3.3.

3 Adaptive mesh refinement tests

The 3m tube was modified to allow inert tests in a shock tube mode where a 1.8m section can be pressurized. After bursting of the membrane the shock wave travels into the remaining section which is initially at low pressure and contains a cube of 5 cm x 5 cm x 5 cm). The measured pressure signals at different locations can then be compared to numerical simulations. These data allow to verify the AMR under inert conditions, without interference from a combustion process. Fig. 2.4.3 shows one example of the measured pressure decay.

4 Flame quenching

4.1 Introduction

The hydrogen production and mixing with air in a containment may result in the formation of combustible mixtures during a loss-of-coolant-accidents in a nuclear power plant. Different ignition sources can initiate combustion of the mixture deliberately or accidentally. Under certain conditions, initially slow flames can accelerate, resulting in dangerous combustion processes, such as fast turbulent deflagrations and detonations. A description of conditions for flame acceleration and DDT is an important problem in safety analysis.

DDT events and detonations are able to produce the most severe loads to confining structures. These processes and their limiting conditions have been addressed in a

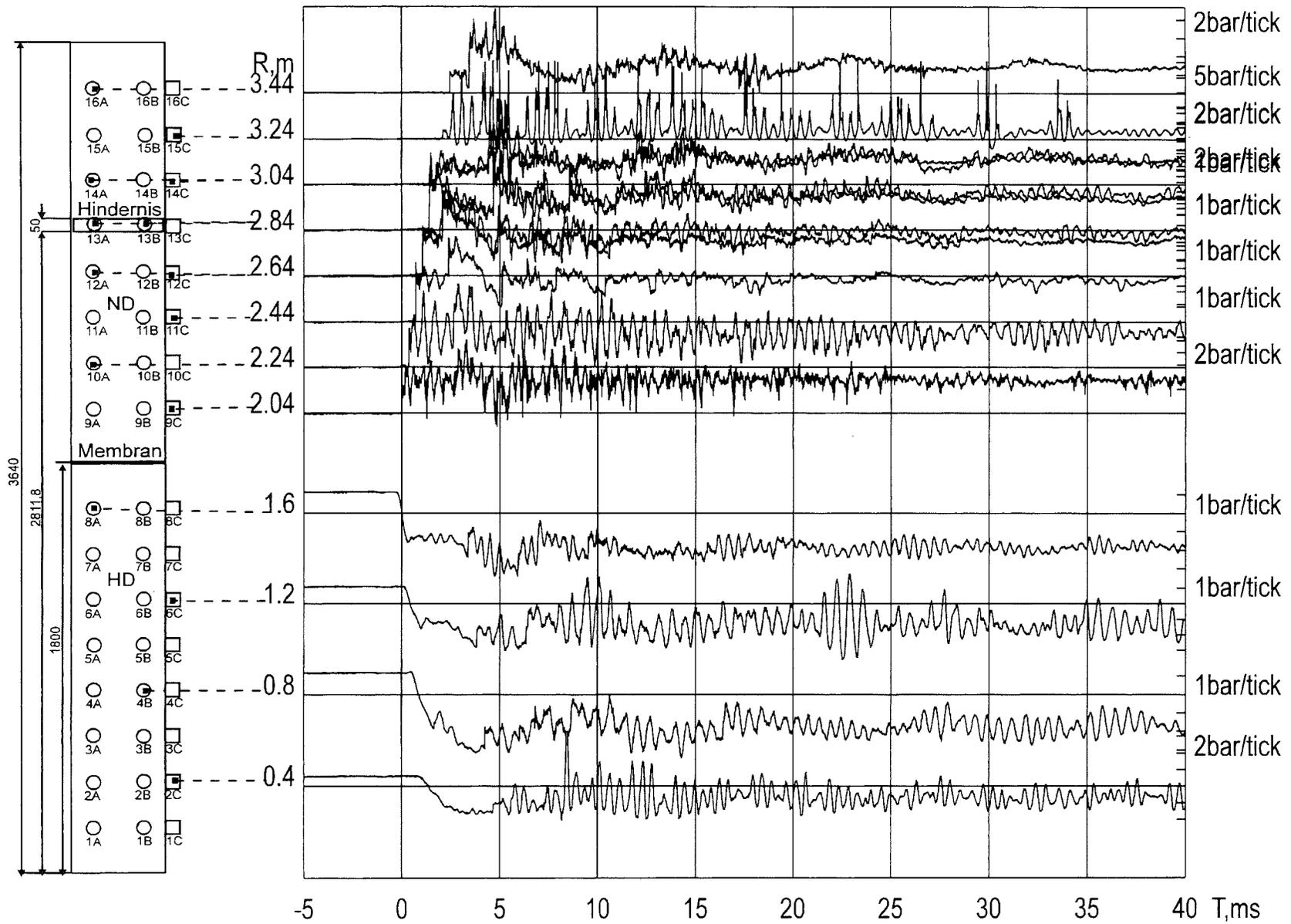


Fig.2.4.3: Measured pressure signals of experiment R1397_03

series of experimental, numerical and analytical studies. Although many aspects of these processes still need to be described in more details, a certain understanding has been achieved on the limiting conditions on DDT and on description of loads from these combustion events.

Accelerated flames and fast turbulent deflagrations can also threaten containment designs. However, the conditions, which cause the development of the fast turbulent flames, are not well understood.

In this report, the first result of experiments on flame acceleration and quenching are presented. The objective of the experimental program was to study the effects of geometrical scale and mixture properties on the evolution of turbulent flames.

4.2. H₂/air quenching experiments

To derive conservative criteria for quenching and to generate an adequate data basis for code evaluation a lot of tests on different scales (FZK: 12 m x 0.35 m, KI: 0.17m x 12 m, 0.52 m x 30 m) in an obstructed tube were performed. The evaluation of the experiments is not yet completed but preliminary results were already obtained for FZK-12-m-tube.

All experiments done so far were performed with a BR of 90 % and an initialisation part of obstacles (2 x BR 30 %, 2 x BR 60 %) by changing the obstacle spacing ($\Delta x = 25 - 200$ cm), initial pressure (0.5 - 4 bar) and the mixture composition ($H_2 = 8 - 11$ %).

All experiments that were performed so far are listed in Table 1.

The typical results obtained in the measurements, are described by using few examples.

Figure 2.4.4 summarizes the results of experiment **R0597_00** as an R-t-diagram of measured pressure and measured photodiodes signals. The test parameters used in this experiment were 11 % hydrogen in air with an initial pressure of 1 bar and an obstacle spacing of 25 cm. In this test the flame accelerated up to the end of the tube to a terminal velocity of about 260 m/s. No quenching was observed in this case.

Experiment **R0597_04** was performed by changing the initial pressure from 1 bar to 3 bar but with the same hydrogen concentration and obstacle spacing as in experiment R0597_00. The measured pressure history and history of light intensity

Table 1a: Test matrix of quench experiments

Experiment	BR [%]	p_0 [bar]	$[H_2]$ [%]	remarks
R0497_00	90	0,5	10	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_01	90	1,0	10	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_02	90	0,75	10	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_03	90	1,0	11	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_04	90	2,0	11	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_05	90	3,0	11	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0597_06	90	0,75	9	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_07	90	1,0	9	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_08	90	1,0	10	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_09	90	1,0	9	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0497_10	90	2,0	9	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0597_00	90	1	11	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_01	90	1	10	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_02	90	1	10,5	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_03	90	2	10,5	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_04	90	3	11	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_05	90	1	10,5	$\Delta x = 25\text{cm}$
R0597_06	90	1	11	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_07	90	1	10	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_08	90	0.5	9	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_09	90	1	9	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_10	90	0.5	8	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_11	90	0.5	8.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_12	90	1.5	9	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_13	90	1.5	9	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_14	90	1.5	9	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_15	90	1.5	9.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_16	90	2	10	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_17	90	2	9.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0597_18	90	2	9.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0697_00	90	1	11	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_01	90	1	10	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_02	90	1	9	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_03	90	2	10	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_04	90	0.5	9	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_05	90	3	11	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_06	90	1.5	10	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_07	90	1	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_08	90	0.5	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_09	90	2	10.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_10	90	0.5	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$

Table 1b: Test matrix of quench experiments

Experiment	BR [%]	p_0 [bar]	[H ₂] [%]	remarks
R0697_11	90	0.5	8.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_12	90	0.5	8.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_13	90	0.5	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_14	90	0.5	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_15	90	1	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0597_16	90	2	9.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_17	90	2	10.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_18	90	4	10.5	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_19	90	2	11	$\Delta x = 200\text{cm}$
R0697_20	90	3	10	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0697_21	90	2	10.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0697_22	90	3	10.5	$\Delta x = 100\text{cm}$
R0697_23	90	3	11	$\Delta x = 100\text{cm}$

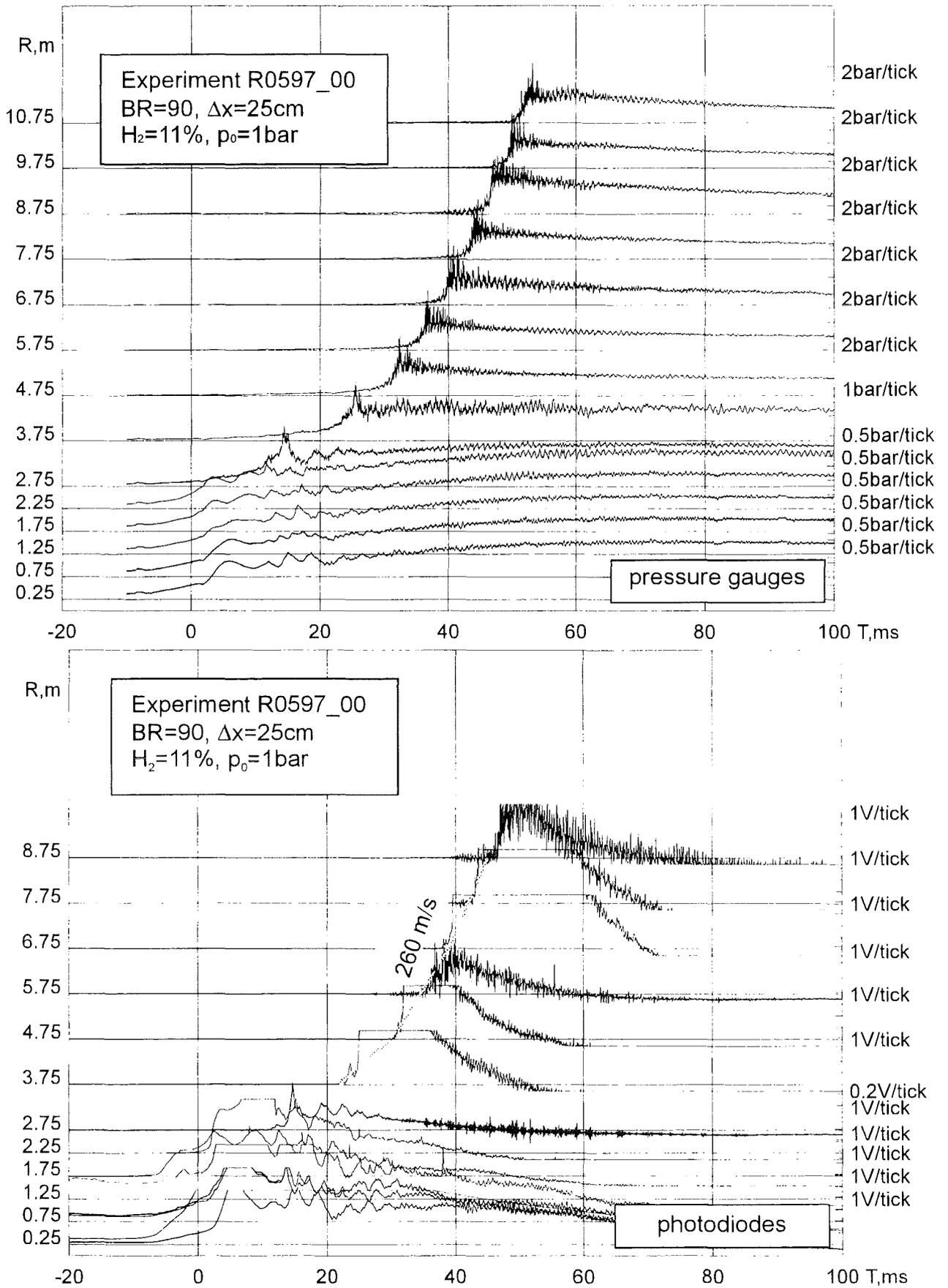


Fig.2.4.4: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0597_00

of this experiment is given in Figure 2.4.5 The photodiode at the position 5.75 m shows no signal and the pressure gauges in this area show a distinct pressure fluctuation. These two effects are a sign for local quenching.

Experiment **R0597_05** was performed with 10.5 % hydrogen in air with an initial pressure of 1 bar and an obstacle spacing of 25 cm. The R-t-diagram of this experiment is shown in Figure 2.4.6 In this test the flame accelerates during the first 6 m to a velocity of about 100 m/s. Beyond 9 m no light emission was detected any more, which indicates quenching of the flame. The pressure gauges give signals up to the 11 m position because the burned gas compresses the unburned gas between the obstacles which causes an elevation of pressure.

The R-t-diagram of experiment **R0597_03** is given in Figure 2.4.7 This experiment was performed with the same test parameters as experiment R0597_05, except that the initial pressure was raised from 1 bar to 2 bar. Signals of the photodiodes and pressure gauges were only detected up to 3.5 m. This shows that the flame was quenched in this area near the initial part of the tube (global quenching).

The other experiments show, by using the same obstacle configuration, the same behaviour in pressure and concentration dependence as these four described experiments. Figure 2.4.8 shows the results of all performed experiments for different obstacle spacings. A white point indicates that the flame was quenched during this experiment, while a black point represents an experiment which burned through to the end of the tube. Additionally the points are described by three numbers, the first number specifies the experiment, the second refers to the measured burn-out in % hydrogen, and the third refers to the burned length. The data points represent three regimes:

- completely burned (white)
- incompletely burned up to 9 m from ignition point (light grey)
- incompletely burned up to 4 m from ignition point (dark grey).

Furthermore a dependence on the initial pressure is observable.

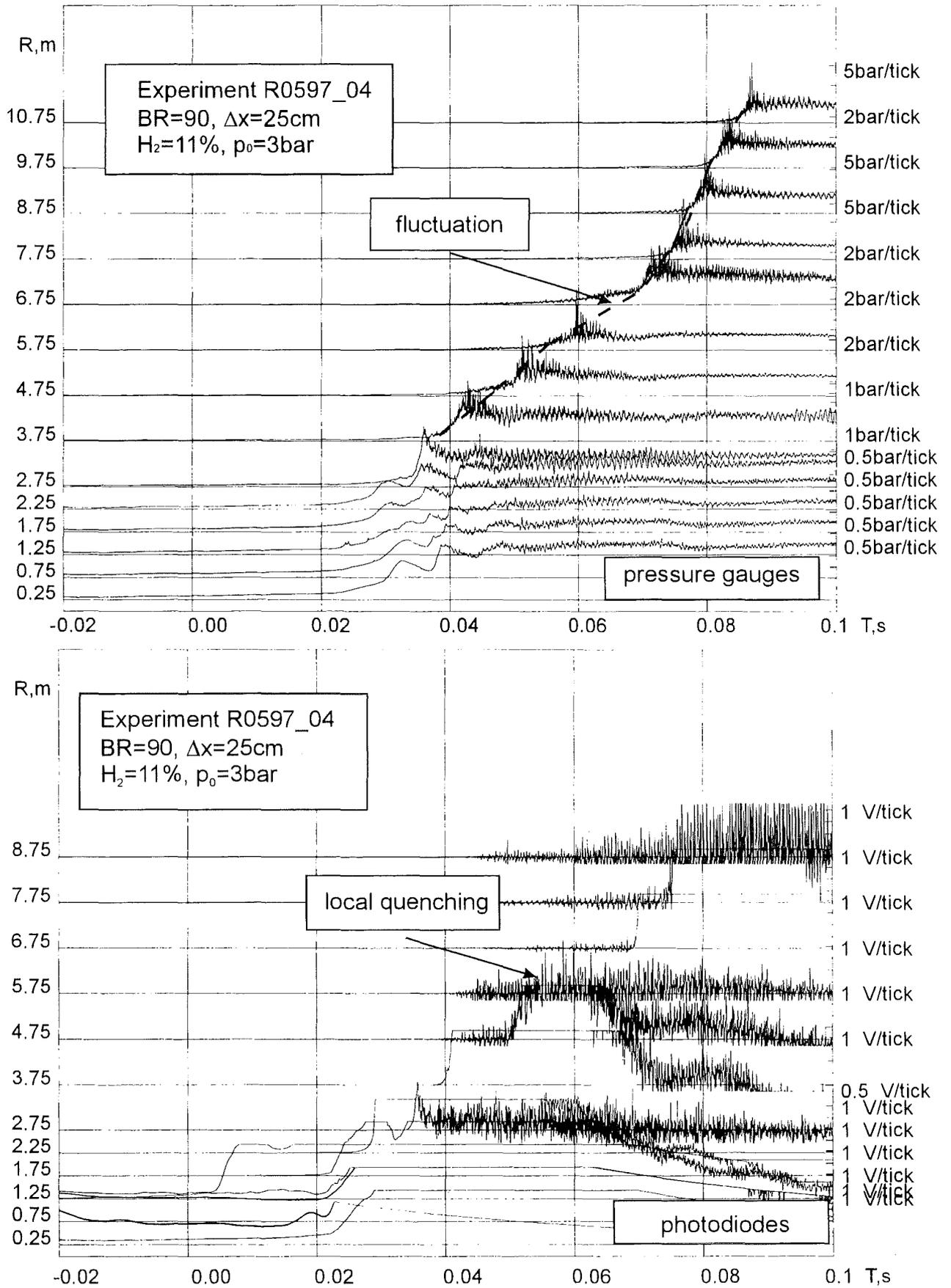


Fig.2.4.5: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0597_04

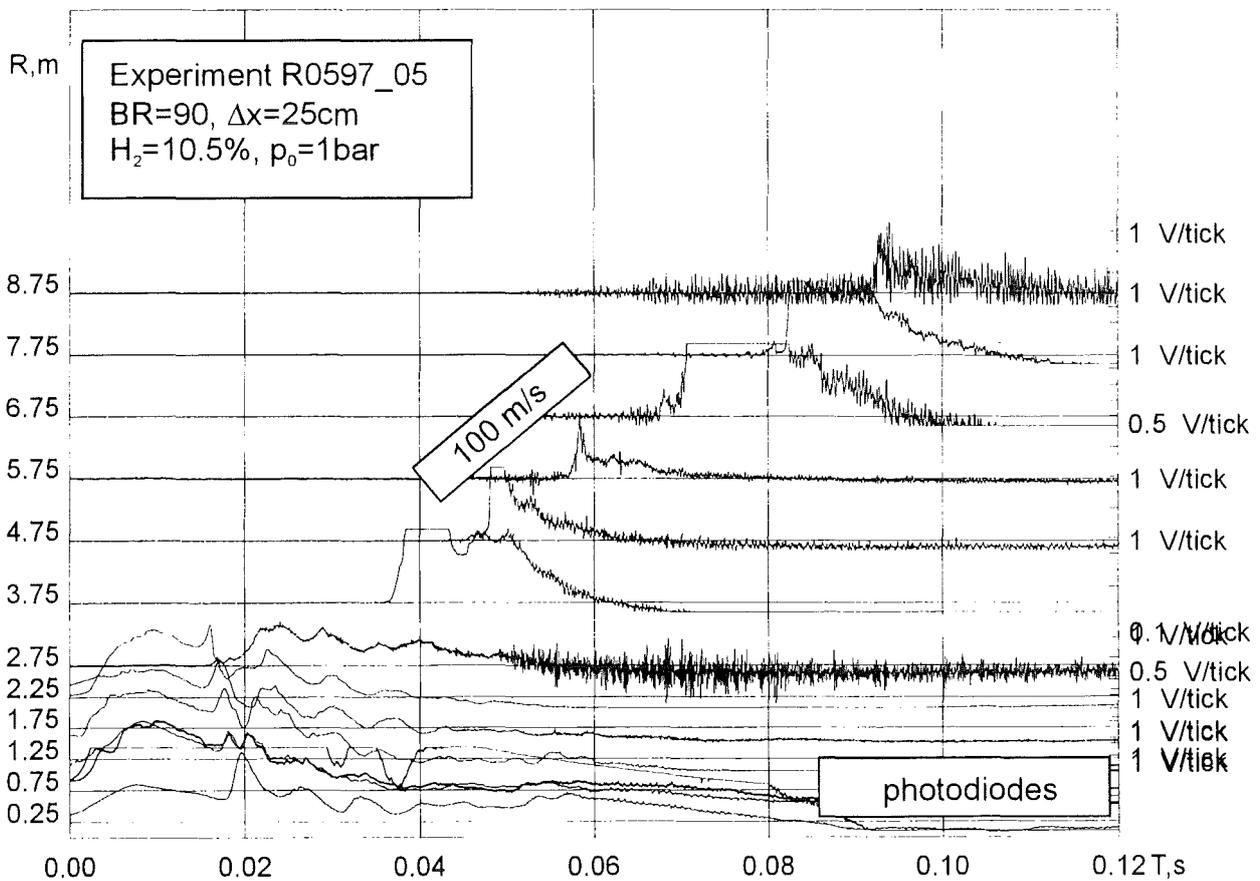
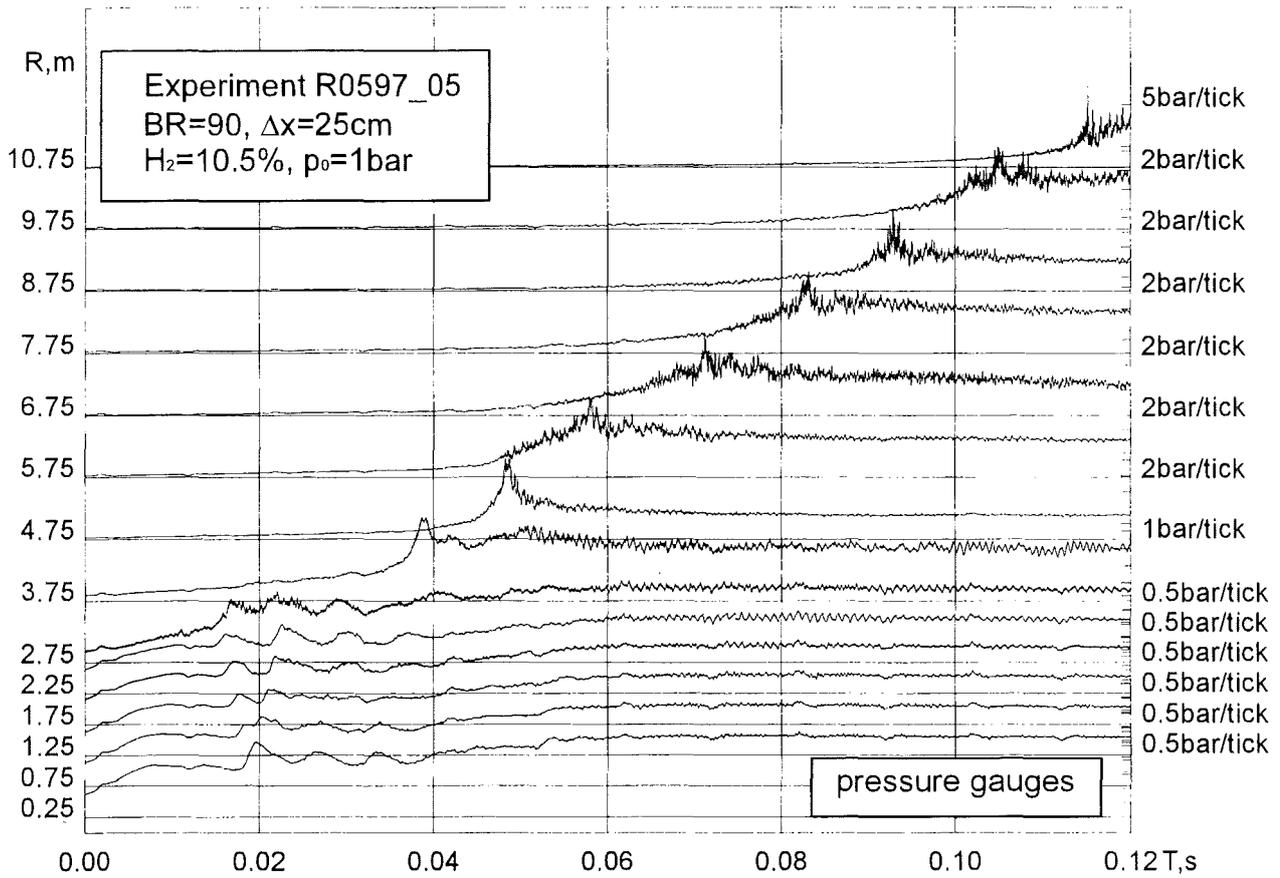


Fig.2.4.6: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0597_05

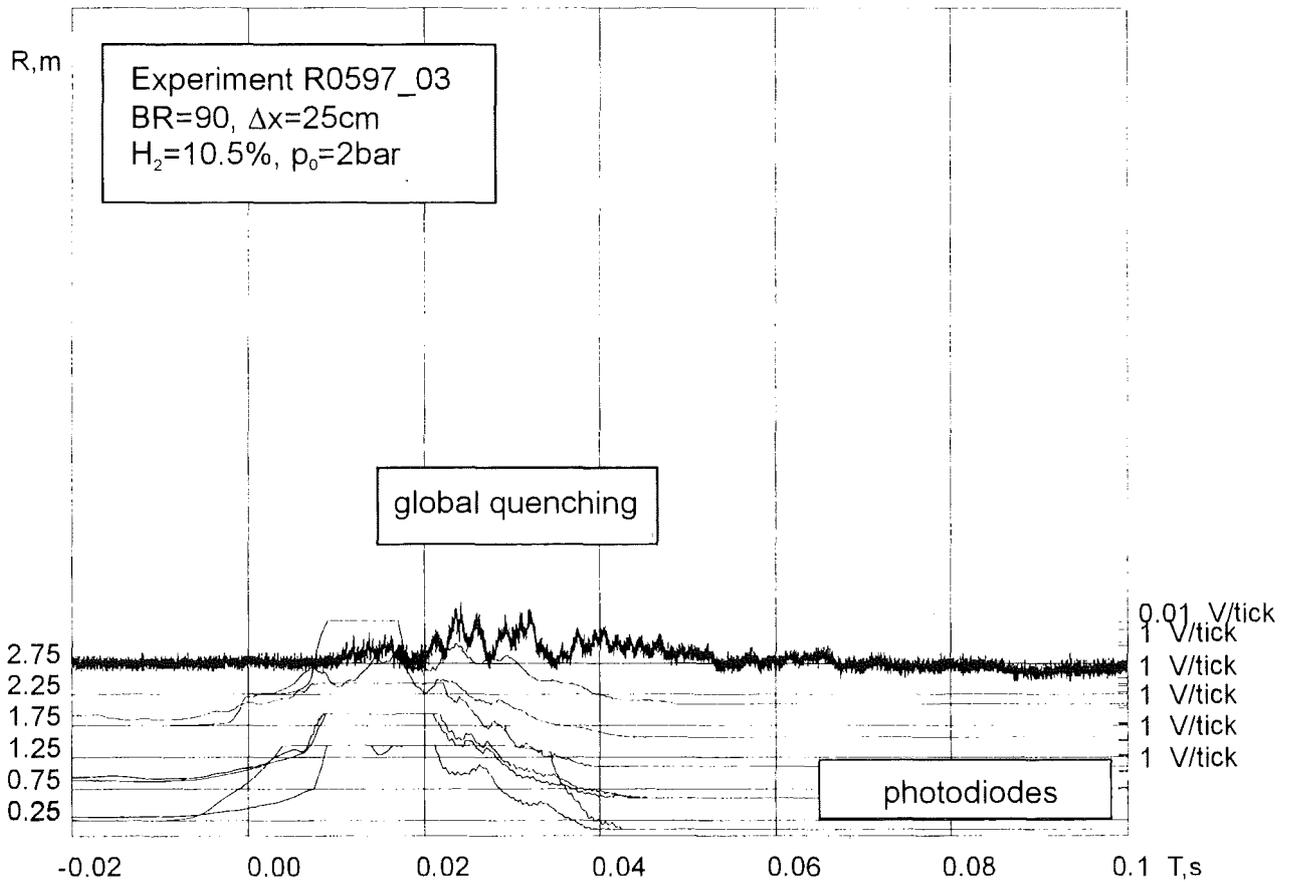
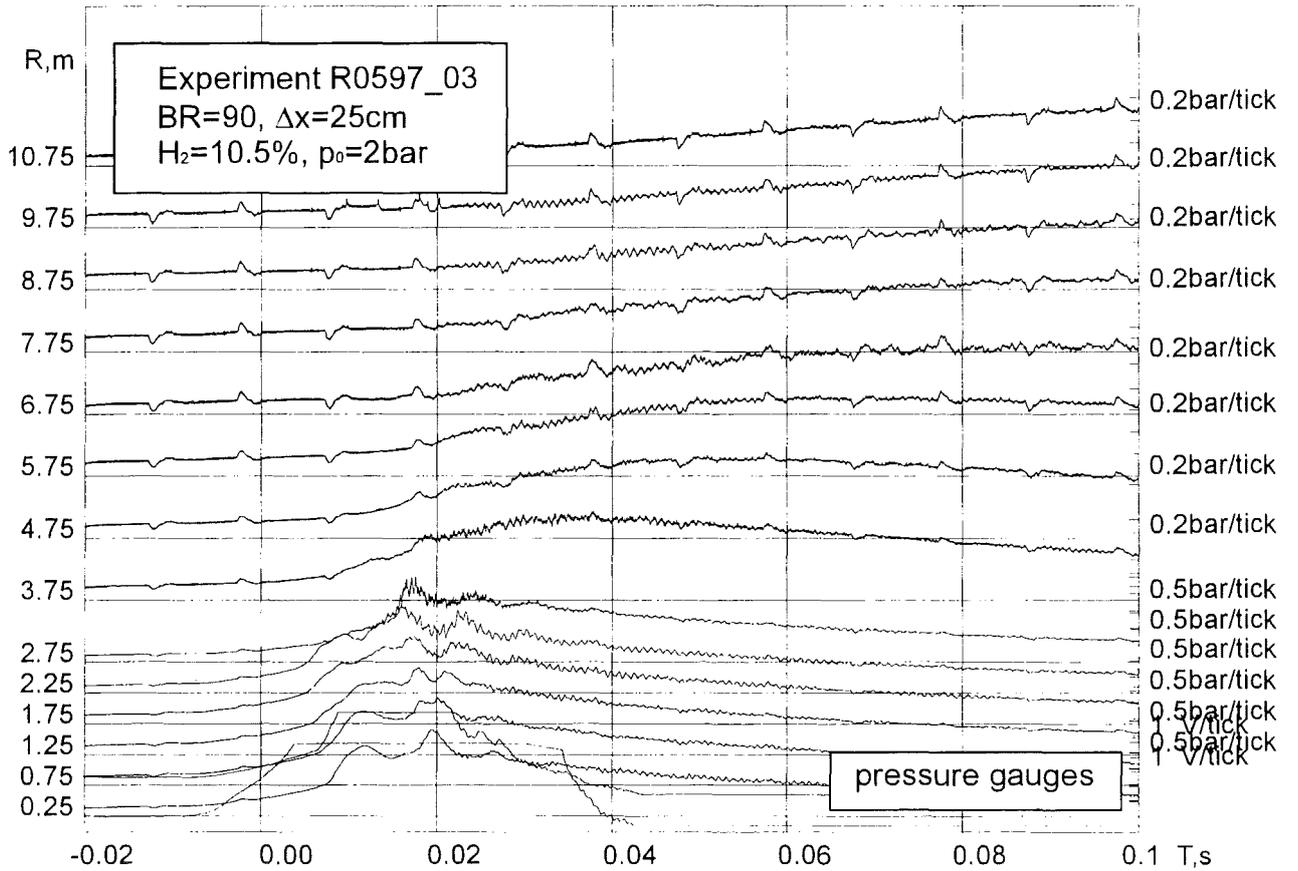


Fig.2.4.7: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0597_03

● Obstacle characteristics: annular rings, BR=90%, Δx =obstacle spacing

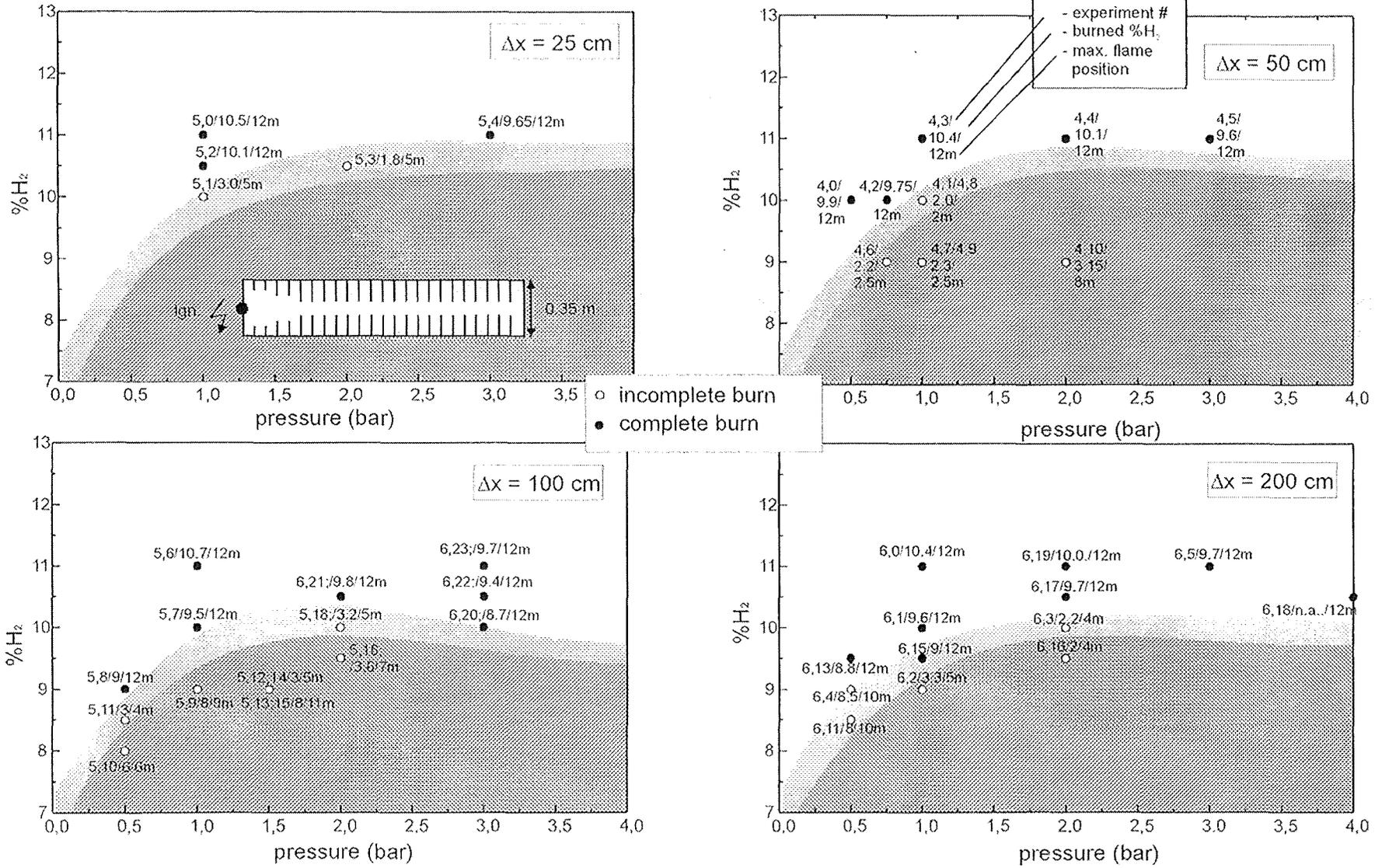


Fig. 2.4.8: Results of quench experiments in FZK 12-m tube

5 Acceleration Experiments

The most dangerous accidental gaseous explosions occur in obstructed areas with significant degree of confinement. Interactions of the flow, produced by expansion of the combustion products, with the flame itself provide the most effective means for flame acceleration. A schematic illustration of different stages of flame acceleration in a large channel with obstacles is presented in Figure 2.4.9. The laminar flame propagates initially from the ignition source. It becomes turbulent at a certain stage due to flame instabilities. The flame generates the flow ahead which appears to be turbulent due to the large enough characteristic sizes of the enclosure. A higher burning rate generates a higher level of turbulence. The flame acceleration is a result of the interaction of the flame produced flow with the flame itself (positive feedback). To derive a conservative criterion for flame acceleration, optimum conditions have to be created. Therefore a lot of tests on different scales (FZK: 12 m x 0.35 m, KI: 0.17m x 12 m, 0.52 m x 30 m, 2.5m x 34 m) in an obstructed tube were performed. The evaluation of the experiments is not yet completed, but preliminary results were already obtained for the FZK-12-m-tube.

All experiments done so far were performed with a BR of 60 %, constant obstacle spacing of 0.35 m and initial pressure of 1 bar. The parameter changed was the mixture composition. Different inert components (O_2 , N_2 , Ar, He, CO_2) were added to hydrogen.

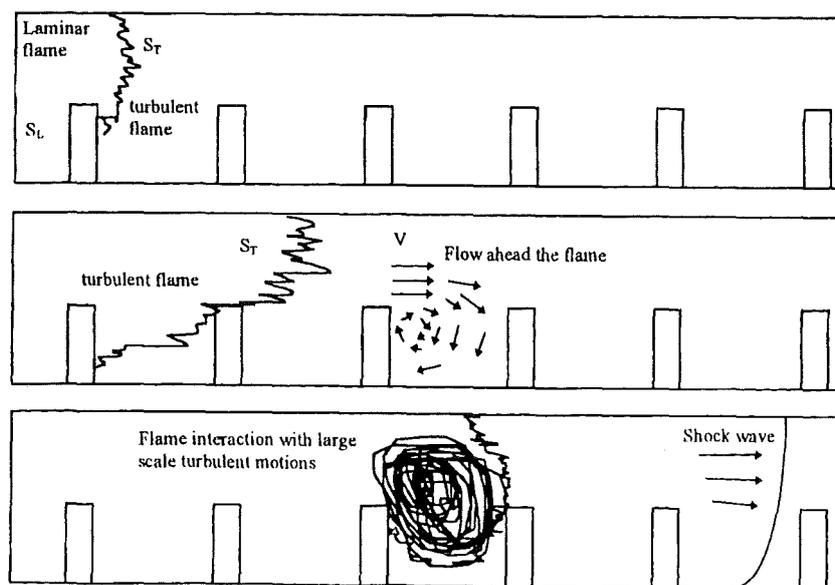


Fig.2.4.9: Flame propagation in obstructed channel

5.1 Results for H₂-O₂-diluent mixtures

Characteristic combustion sequences for H₂-O₂-diluent mixtures are presented in this section. All experiments with N₂, Ar and He diluent were performed with a constant equivalence ratio of $\Phi=1$. The following mixtures were considered:

α H₂+air,

2H₂+O₂+ β N₂,

2H₂+O₂+ β Ar,

2H₂+O₂+ β He

The values of α , β , are assumed to be variable.

The acceleration experiments, performed with hydrogen in air are listed in Table 2. Mixtures close to the lean and rich flammability limits were investigated.

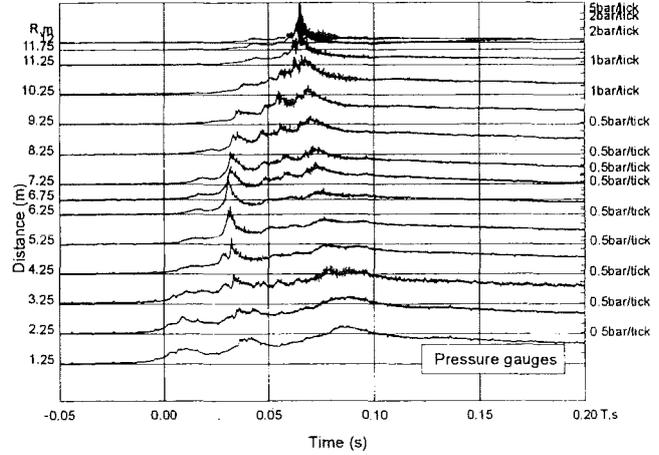
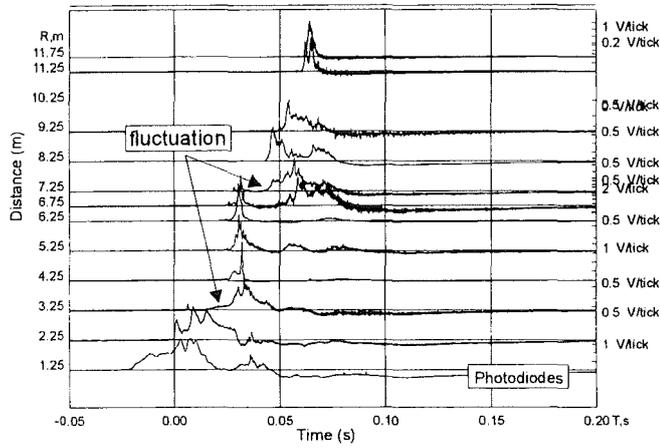
Table 2: Test matrix of acceleration experiments with H₂/air

Experiment	[H ₂] Vol%	[Air] Vol%
R0897_00	9	91
R0897_01	9	91
R0897_02	9	91
R0897_03	10	90
R0897_04	11	89
R0897_05	70	30
R0897_06	72	28
R0897_07	75	25

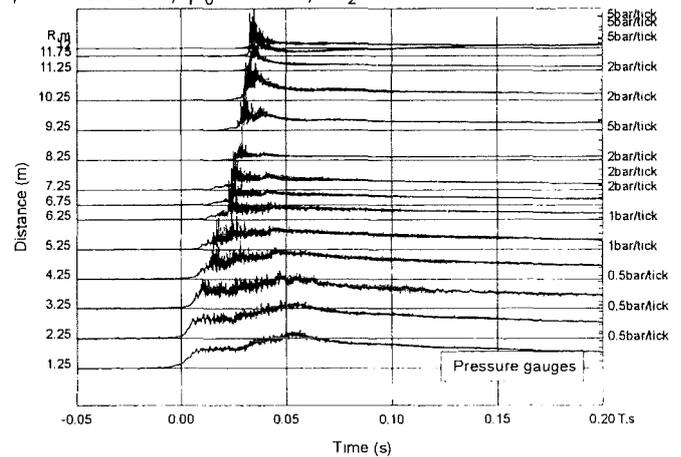
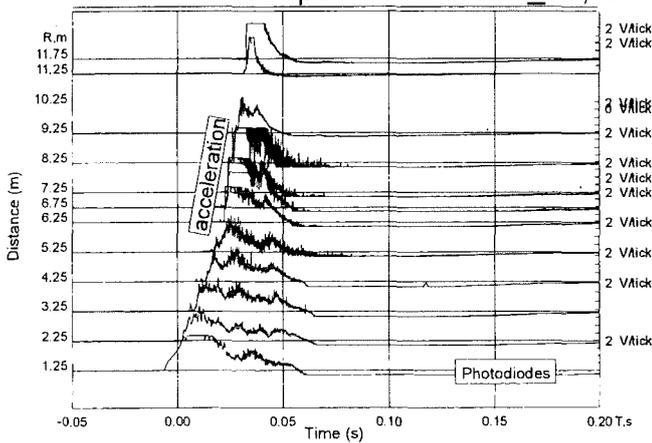
Figure 2.4.10 compares the measured pressure and light intensity signals as a function of time for experiments **R0897_01**, **R0897_03** and **R0897_04**. The hydrogen concentration was varied in these experiments from 9-11%. A hydrogen concentration of 9% (experiment R0897_01) leads to a slow combustion with a fluctuating flame. An increase of the hydrogen concentration from 9 to 10 % (experiment R0897_03) and 11% (R0897_04) shows another behaviour of the flame. The flame moves slow at first, but is then accelerated very fast up to 347 m/s (experiment R0897_03) and 494 m/s (experiment R0897_04) respectively.

All acceleration experiments, performed with a mixture of hydrogen, oxygen and, nitrogen are listed in Table 3.

Experiment R0897_01; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar; $H_2=9$ %



Experiment R0897_03; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar; $H_2=10$ %



Experiment R0897_04; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar; $H_2=11$ %

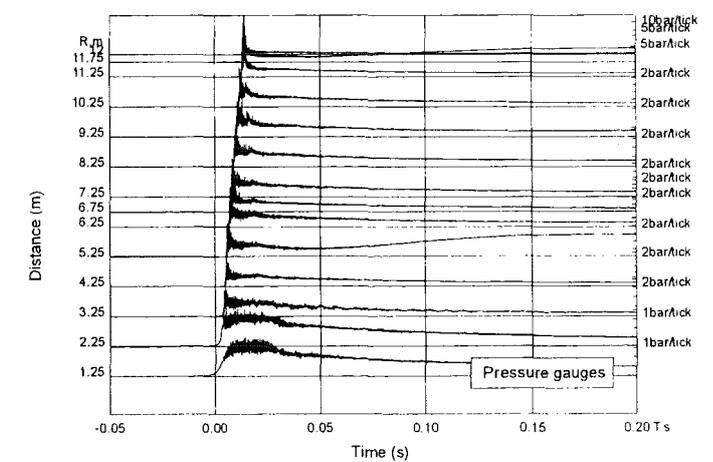
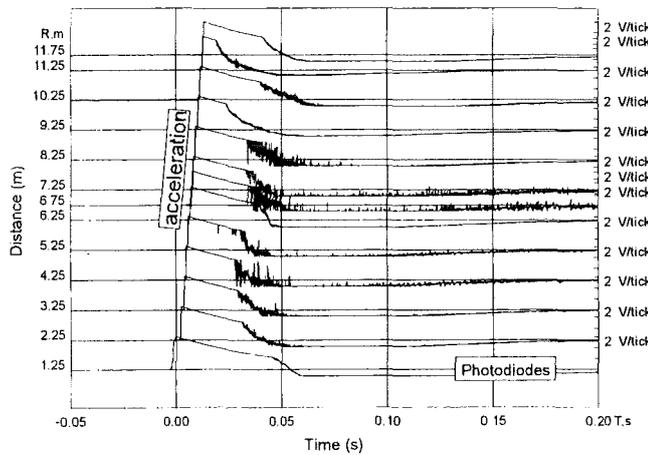


Fig.2.4.10: Measured pressure and photodiode signals for experiment R0897_01, R0897_03 and R0897_04.

Table 3: Test matrix of acceleration experiments with H₂/O₂/N₂ mixtures

Experiment	[H ₂]	[O ₂]	[N ₂]
R0897_08	11	18,69	70,31
R0897_09	11	8,5	83,5
R0897_10	12	18,48	69,52
R0897_11	12	6	82
R0997_00	11	18,69	70,31
R0997_01	11	5,5	82,5
R0997_02	12	6	82
R0997_03	12	6	82
R0997_06	10	5	85
R0997_07	10	5	85

The R-t diagram of an experiment (R0997_01) with a H₂/O₂/N₂ mixture (H₂=11%, O₂=5.5%, N₂=83,5%) is shown in Figure 2.4.11. The flame starts slow and is then accelerated to a terminal velocity of 473 m/s.

Table 4 shows the experimental matrix performed for all acceleration experiments with a mixture of hydrogen, oxygen and argon.

Table 4: Test matrix of acceleration experiments with H₂/O₂/Ar mixtures.

Experiments	[H ₂]	[O ₂]	[Ar]
R0897_12	8	4	88
R0897_13	8	4	88
R0897_14	9	4,5	86,5
R0997_12	6,67	3,37	90
no ignition:			
	5	2,5	92,5
	5,5	2,75	91,75
	6	3,0	91
	4,23	2,09	93,68

All experiments with a concentration of argon $\geq 91\%$ were not ignitable with the used glow plug. The reduction of the argon concentration to 90% (experiment R0997_12: H₂=6.67%, O₂=3.33%, Ar=90%) leads to a combustion, that starts slow but still accelerates to a maximum velocity of 473 m/s. A further reduction of the Argon concentration to 86.5% (experiment R0897_14: H₂=9%, O₂=4.5%, Ar=86.5%) causes a fast combustion with a maximum velocity of 1079 m/s, which is close to DDT. The R-t-diagrams of these two experiments are given in Figure 2.4.12.

All acceleration experiments done so far with a mixture of hydrogen, oxygen and helium shows Table 5.

Table 5: Test matrix of acceleration experiments with H₂/O₂/He mixtures

Experiment	[H ₂]	[O ₂]	[He]
R0897_15	12	6	82
R0897_16	13,5	6,75	79,75
R0997_04	11	6,43	82
R0997_05	11,68	5,79	82,52
R0997_08	10	5	85
R0997_09	9	4,5	86,5
R0997_10	8,5	4,25	87,25
R0997_11	12	6	82
no ignition:			
	8	4	88
	8	4	88
	6,5	3,24	90,2
	7,47	3,7	88,83
	6,55	3,24	90,2
	6,42	10,8	82,78

All experiments with a concentration of helium $\geq 88\%$ were inignitable. The reduction of the helium concentration to 87.25% (experiment R0997_10: H₂=8.5%, O₂=4.25%, He=87.25%) leads to a fast combustion. The ignition and the acceleration limit are very close together. The flame burns slowly for about 7 m but then rapidly accelerates to a maximum velocity of 1200 m/s. Figure 2.4.13 shows the R-t-diagram of this experiment.

The experiments with argon and helium as diluent don't show a regime of slow combustion which is detected in lean hydrogen/air mixtures.

The measured flame propagations of all experiments are given in Figure 2.4.14.

5.2 Results for hydrogen-air-CO₂ mixtures

In a real accident scenario in a containment CO₂ appears as a part of the mixture from the core/concrete interaction. Therefore it is also necessary to study the flame behaviour and the acceleration limits. By changing the equivalence ratio ($\Phi=0.25, 0.5, 1.0, 2.0, 4.0$) a large number of experiments were performed. These experiments are listed in Table 6.

Experiment R0997_01; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0 = 1$ bar;
 $H_2=11$ %, $O_2=5.5$ %; $N_2=83.5$ %

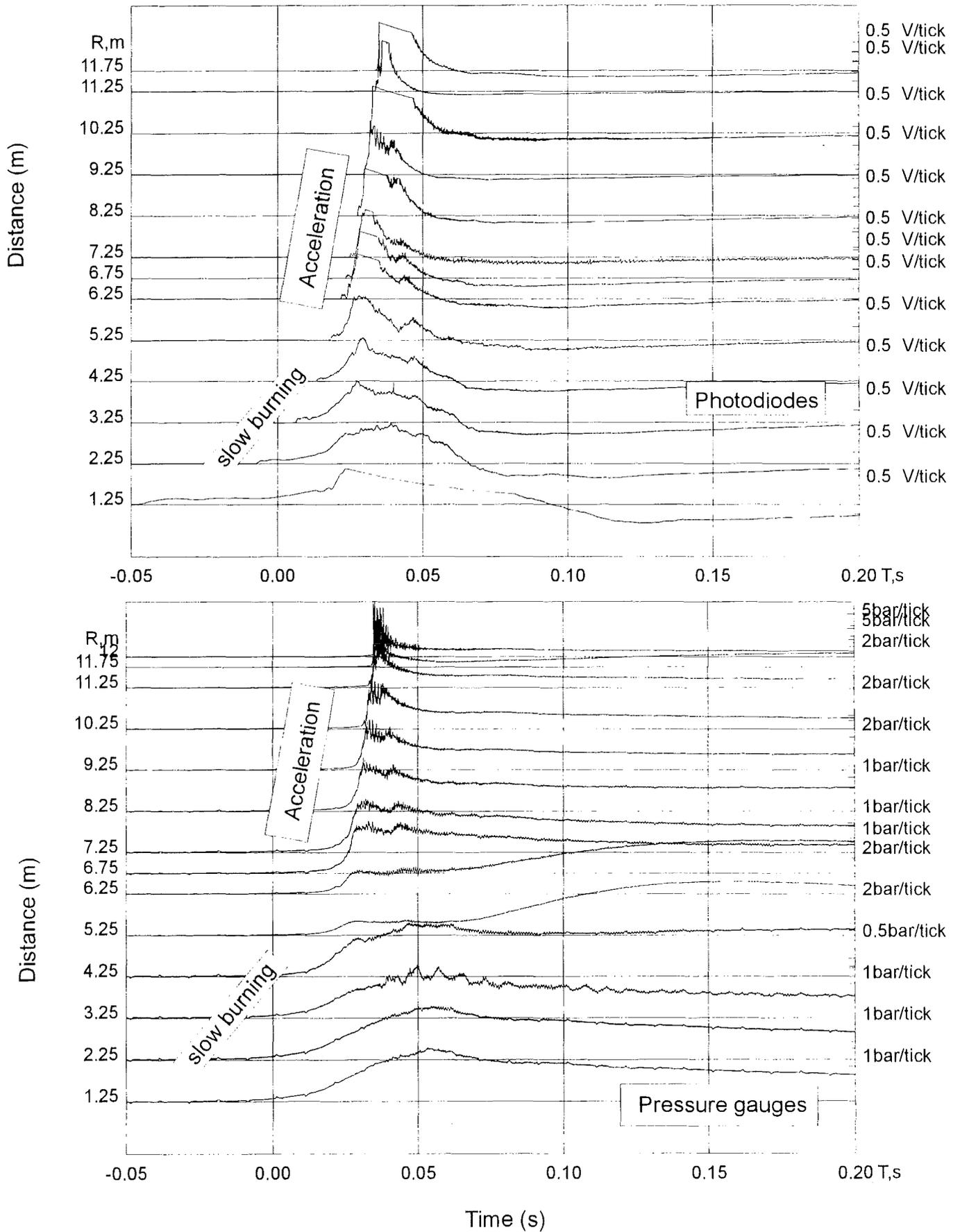
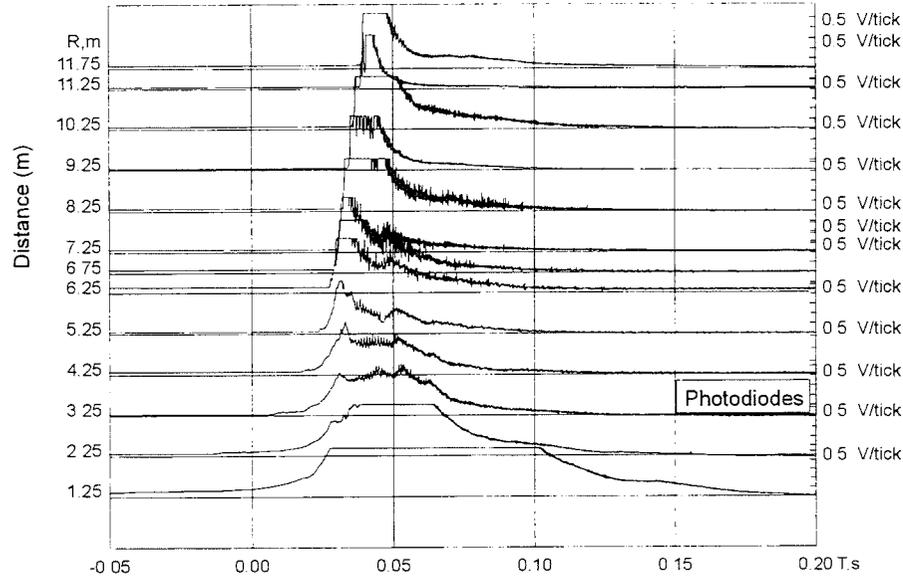
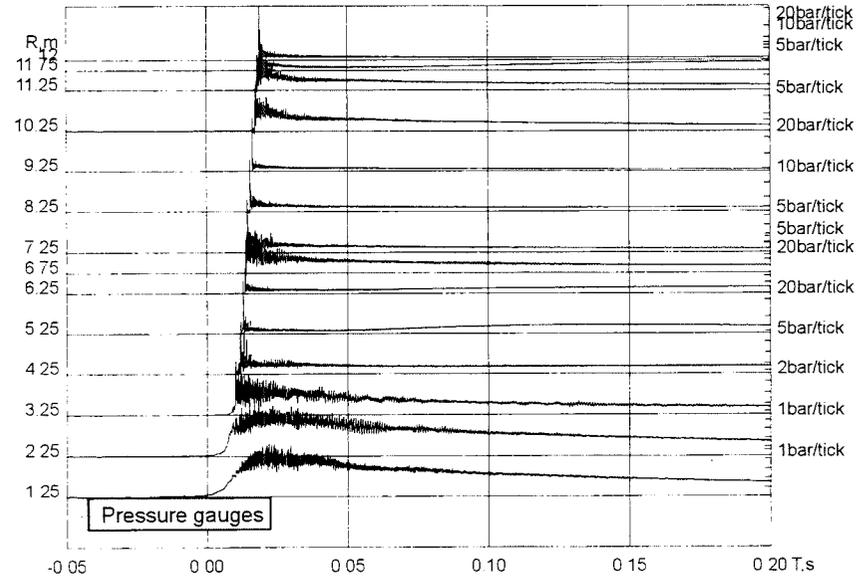
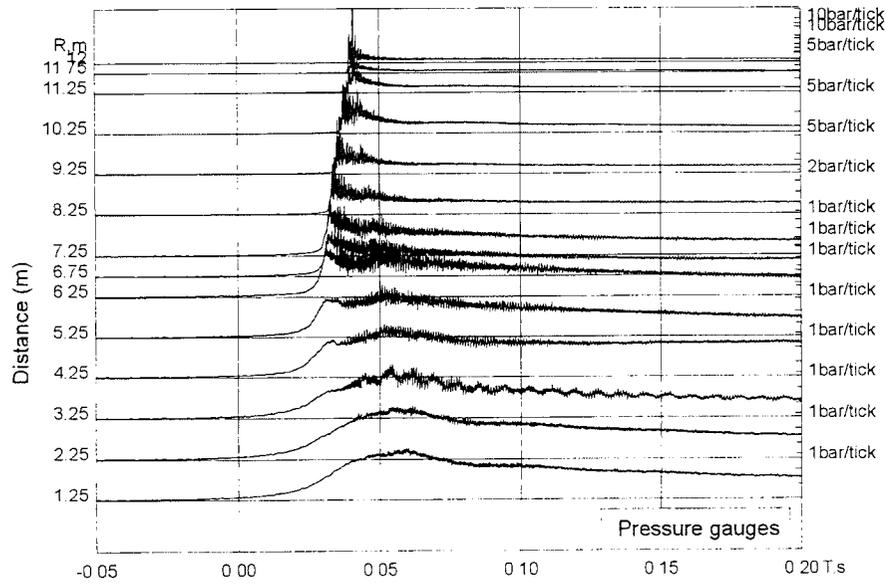
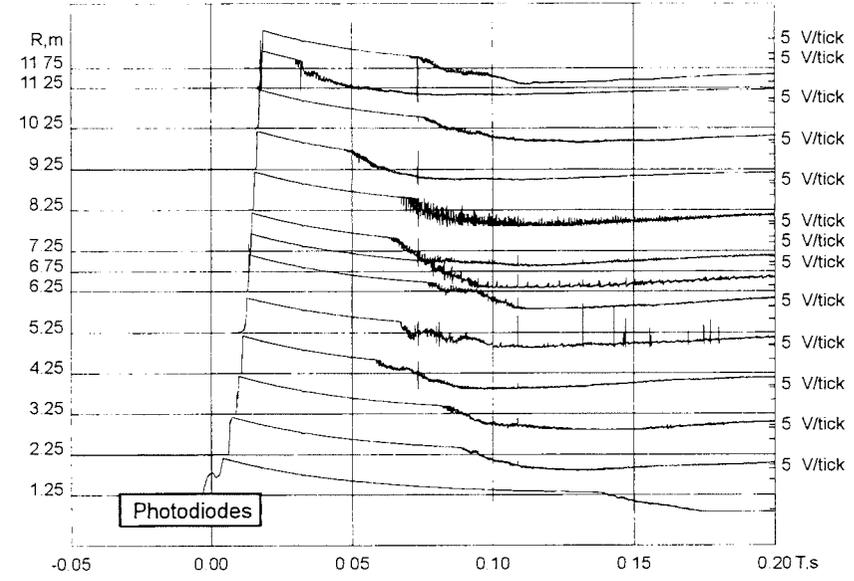


Fig.2.4.11: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0997_01.

Experiment R0997_12; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar;
 $H_2=6,67$ %, $O_2=3,33$ %; Ar=90%



Experiment R0897_14; BR=60%; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar;
 $H_2=9$ %, $O_2=4,5$ %, Argon=86,5%



Time (s)

Fig.2.4.12: Measured pressure and photodiode signals of the experiments R0997_12 and R0897_14.

Experiment R0997_10; BR=60; $\Delta x=35$ cm; $p_0=1$ bar;
 $H_2=8.5\%$, $O_2=4.25\%$; He=87.25%

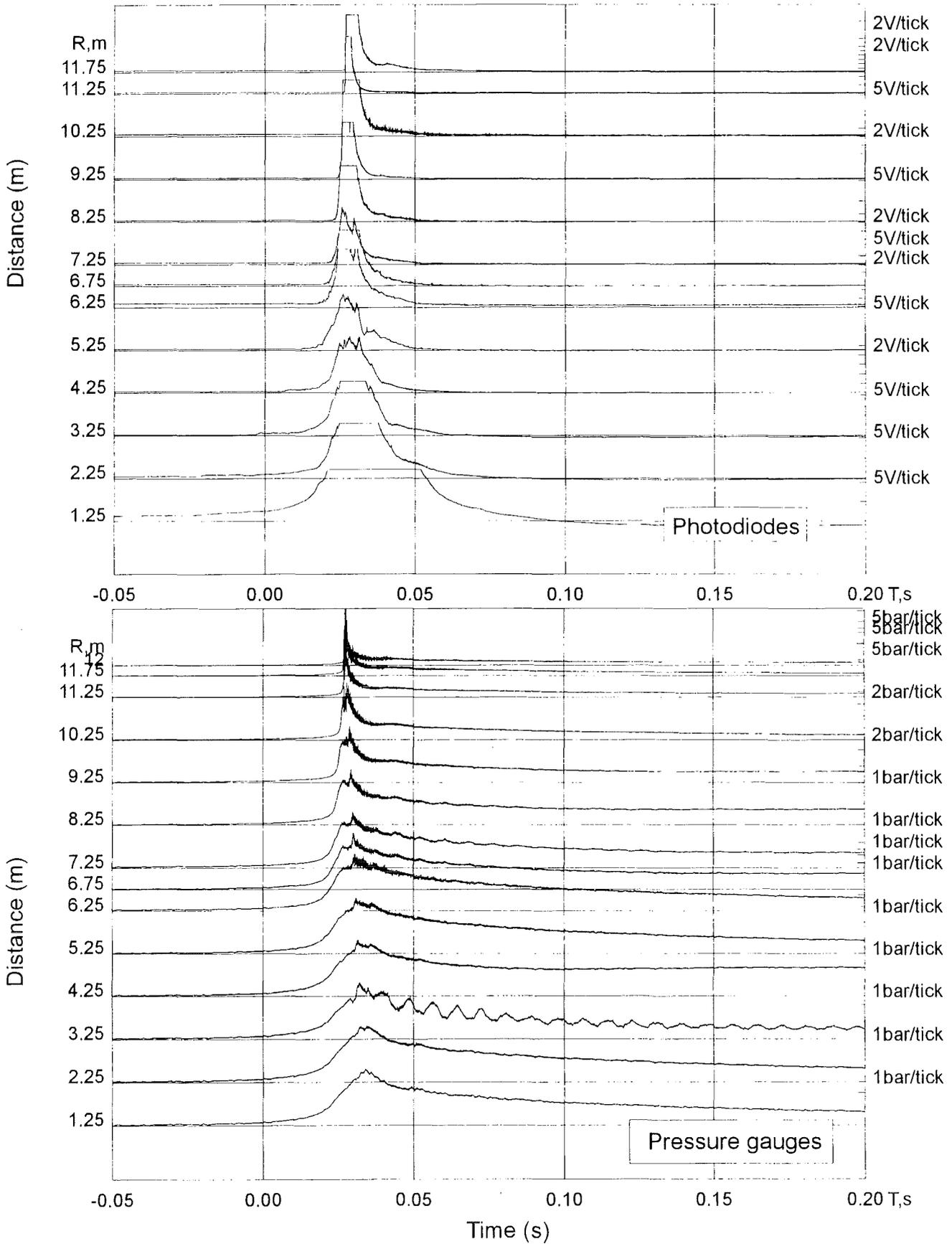


Fig.2.4.13: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0997_10.

FLAME-ACCELERATION EXPERIMENTS IN FZK-12m-TUBE

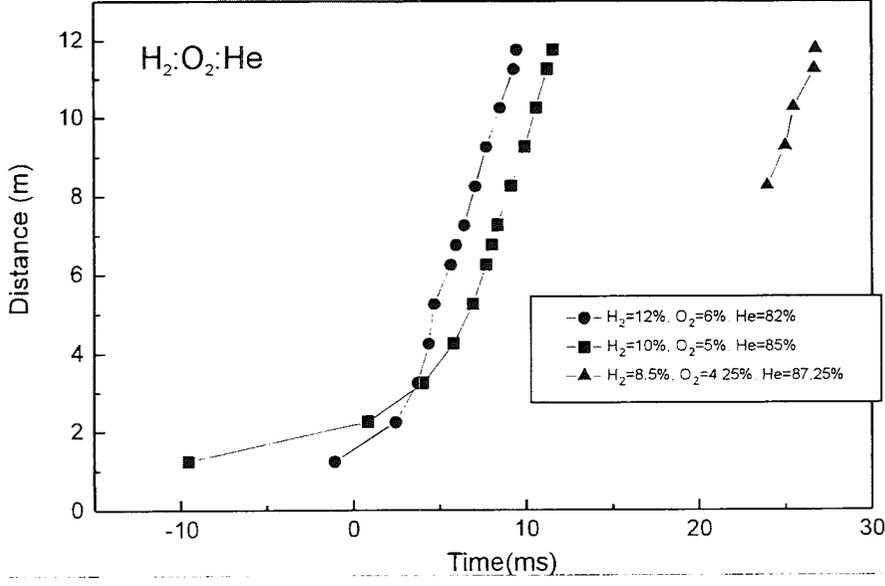
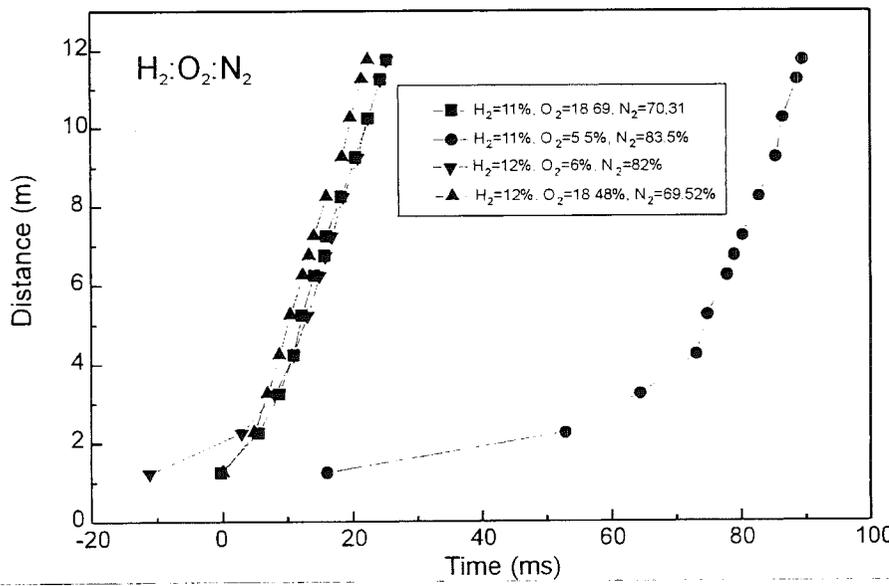
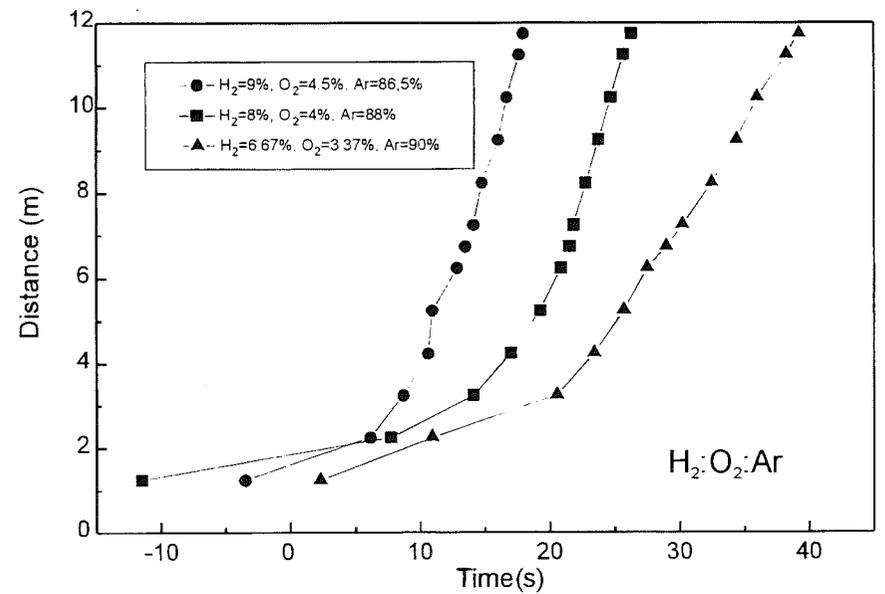
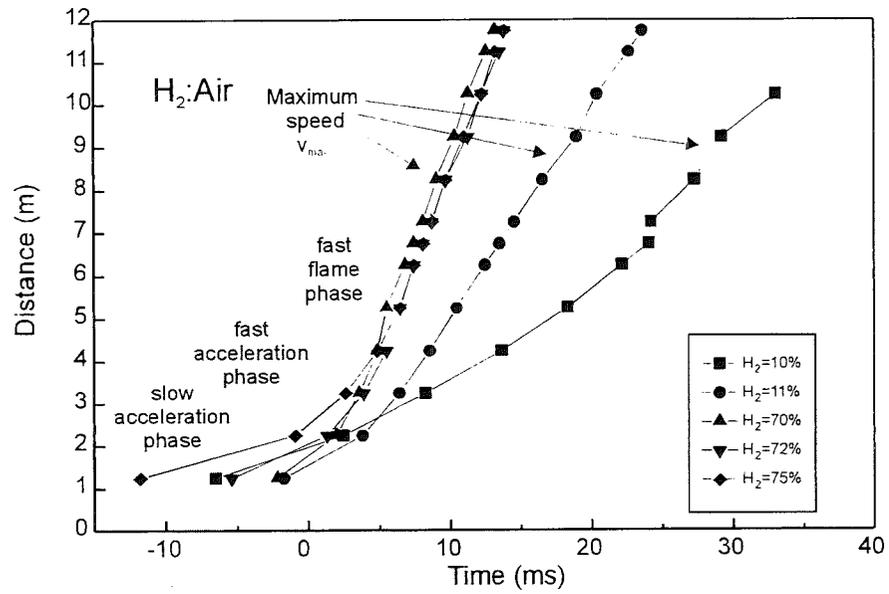


Fig.2.4.14: Flame propagation of all experiments.

Table 6: Test matrix of hydrogen/air/CO₂-experiments

Equivalence ratio $\Phi=1$			
Experiment	[H₂]	[CO₂]	[Luft]
R0997_12	12	0	88
R0997_14	14,8	35,2	50
R0997_15	17,7	40	42,3
R0997_16	20	30	50
R0997_17	23,6	20	56,4
R0997_18	26,5	10	63,5
R0997_19	28	5	67
R0997_20	29,5	0	70,3
R1097_00	25	15	60
R1097_01	19,19	35	45,81
R1097_02	16,8	43	40,2
R1097_03	15,6	47	37,4
R1097_04	26	12,5	61,5
R0997_05	15,2	48,5	36,3
R0997_21	20	70	10
R0997_22	30	55	15
R0997_23	30		70 %Luft
R0997_24	18	73	9
R0997_25	16	76	8
R0997_26	17	74,5	8,5
no ignition			
	14	79	7
	10	85	5
	11,8	60	28,2
	13,3	55	31,7

$\phi=0.25$			
R1197_06	9,5	0	90,5
$\phi=0.5$			
Experiment	[H₂]	[CO₂]	[Luft]
R1197_11	10,39	40	49,61
R1197_12	11,26	35	53,74
R1197_13	12,12	30	57,88
R1197_14	12,12	30	57,88
R1197_15	12,99	25	62,01
R1197_16	13,86	20	66,14
R1197_17	14,72	15	70,28
R1197_18	15,59	10	74,41
R1197_19	16,45	5	78,55
R1197_20	17,31	0	82,69
R1197_21	17,31	0	82,69
R1197_22	14,72	15	70,28

R1197_23	16,89	2,5	80,61
R1197_25	16,89	2,5	80,61
R1197_26	17,31	0	82,69
R1197_28	12,56	27,5	59,94
$\phi=2$			
R1197_01	41	10	49
R1197_02	36,5	20	43,5
R1197_03	31,91	30	38,09
R1197_04	27,35	40	32,65
R1197_05	45,59	0	54,41
R1197_07	29,63	35	35,37
R1197_08	28,49	37,5	34
R1197_09	43,31	5	51,69
R1197_10	44,45	2,5	53,03
R1197_24	42,88	3,75	52,37
R1197_27	26,21	42,5	31,29
$\phi=4$			
R1097_06	50	20	30
R1097_07	56	10	34
R1097_08	53,2	15	31,8
R1097_09	59,5	5	40,45
R1097_10	62,62	37,38	
R1097_11	48,5	22,5	29
R1097_12	47,75	23,75	28,5
no ignition			
	44	30	26
	38	40	22

As an example the flame propagation of all experiments with $\Phi=1$ are given in Figure 2.4.15. The maximum flame velocities calculated from these flame trajectories are presented as a function of the CO_2 concentration in Figure 2.4.16. The following regimes have been distinguished:

- inert regime (no ignition)
- slow burn regime ($v_{\max} < 250$ m/s)
- acceleration or choked flow regime (250 m/s $< v_{\max} < 900$ m/s)
- quasidetonation regime ($v_{\max} > 900$ m/s)

The experiments with $\Phi=1,2$ and 4 shows a fast transition from inert behaviour to an accelerated flame within a narrow range of CO_2 concentrations. This is an important result because the velocity of a combustion in a containment should not be higher than 100 m/s, because of the resulting pressure waves.

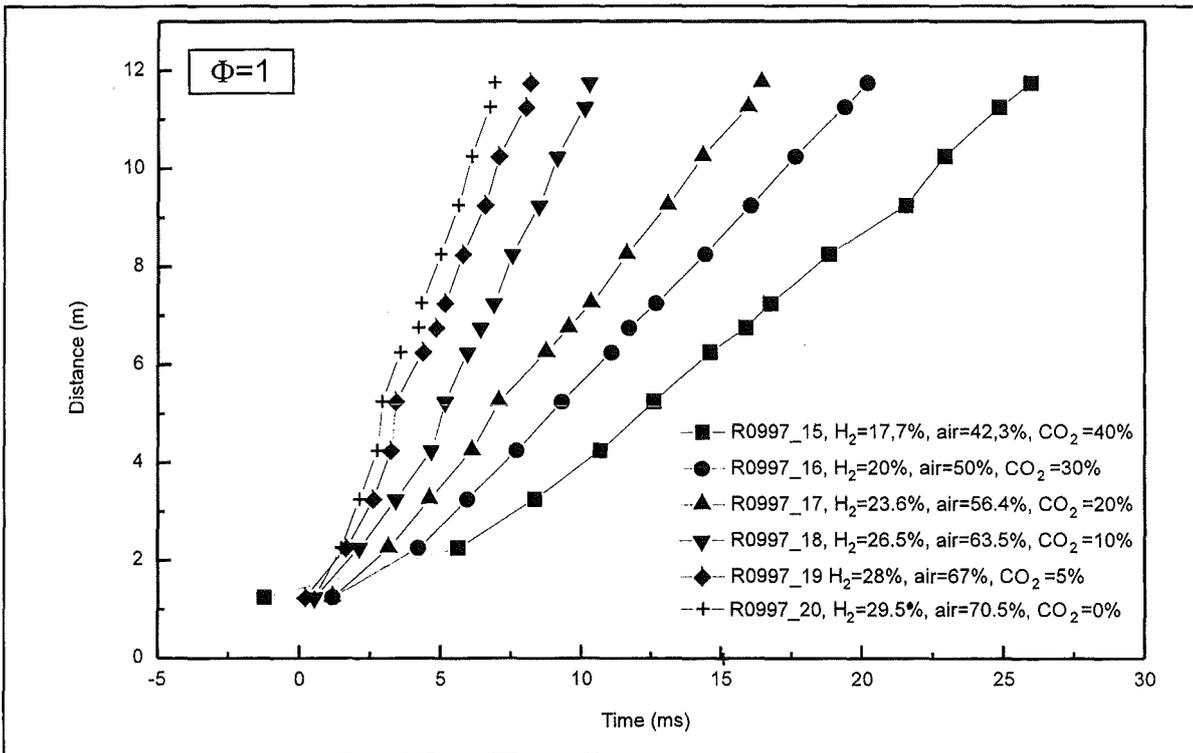


Fig.2.4.15: Flame propagation of experiments with $\Phi=1$

The current conclusion from the acceleration experiments is that all investigated rich mixtures, with one-, two- and three-atomic dilutents, have only a small safety margin between inert and rapidly accelerating combustion. The lean mixtures for one- and three-atomic gases shows the same behaviour. Currently there is no final explanation for this observation. It appears difficult to control rich mixtures, which means that large and extended hydrogen accumulations to $\Phi > 1$ should be avoided by early ignition or by recombiners.

- **Obstacle configuration:** equidistant rings, BR=60%, $\Delta x=35\text{cm}$, $p_0=1\text{bar}$, $T_0=298\text{K}$ (± 10), glow plug ignition
- **Investigated mixtures:** $\text{H}_2:\text{air}:\text{CO}_2$, $\Phi=0.25$, $\Phi=0.5$, $\Phi=1$, $\Phi=2$, $\Phi=4$

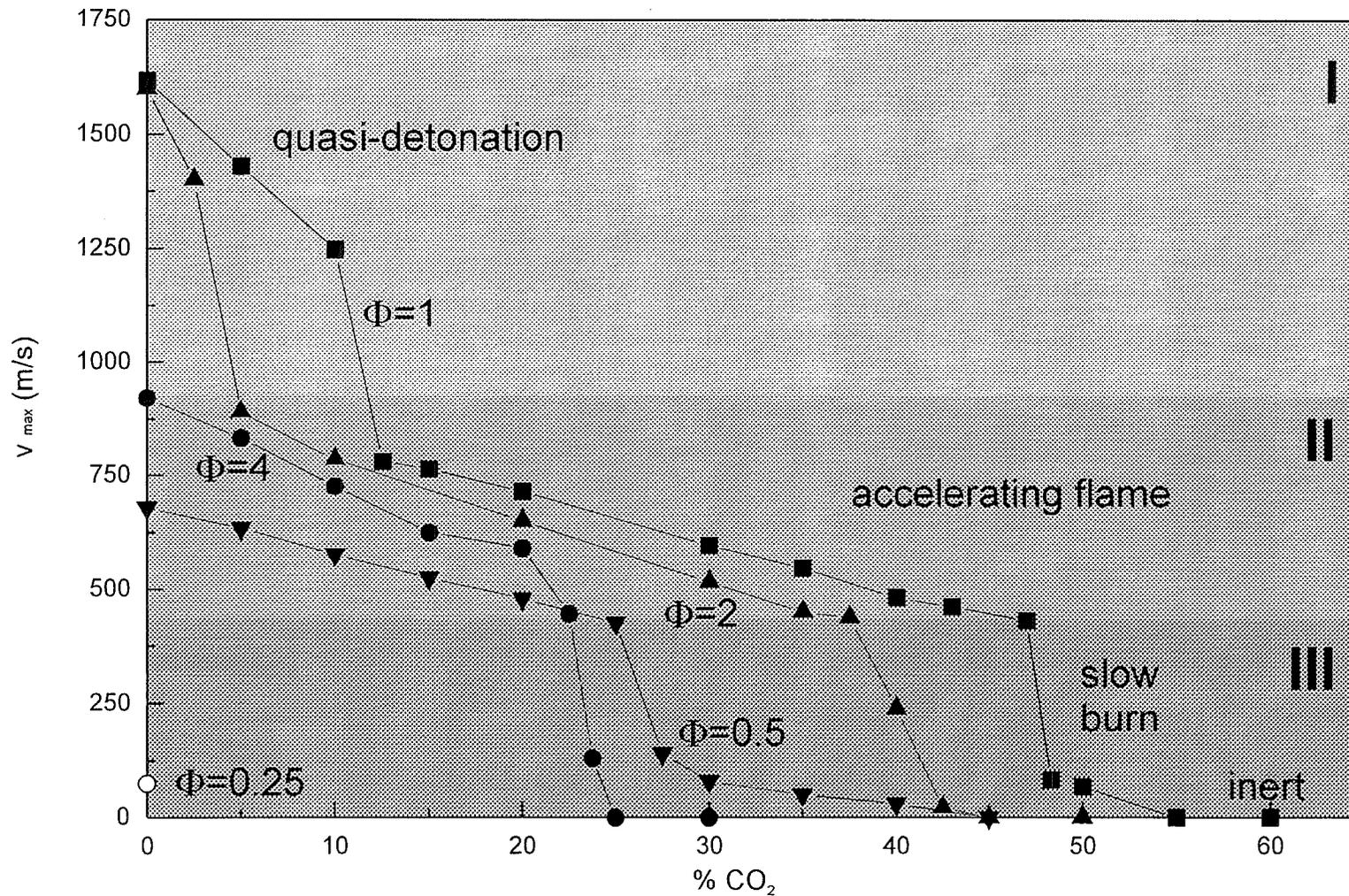


Fig.2.4.16: Measured maximum flame velocity as a function of the CO_2 concentration.

6 DDT- experiment

A. Vesper, W. Breitung, G. Engel, G. Stern, INR, A. Polenov, S. Medvedev, RAS

Different series of DDT experiments have been performed in the FZK research facility. Fig.2.4.17 shows the used three main experimental configurations of the FZK-12m-tube, which has an inner diameter of 0.35 m. Mode A refers to DDT processes far in front of the flame, mode B refers to DDT in or near the turbulent flame.

a) Shock tube with conus (idealized mode A)

The tube was divided by a membrane into a low pressure section (length: 9 m) and a high pressure section (length: 3 m). The experiments were carried out with a conus at the end of the low pressure section to focus the reflected pressure wave to reach selfignition. The main idea behind this experiment design is the observation that in many tests with fast combustion modes, DDT events are apparently triggered by waves reflected in corners or other converging geometries. The conus is used to produce local hot spots in the combustible gas as they can develop in general from the interaction of a pressure wave with a complex multidimensional target.

After evacuating both sections, the low pressure section was filled up to the initial pressure with a defined hydrogen/air mixture. The parameters changed during experiments were the initial pressure (0.5-1.5 bar) and the composition of the hydrogen/air mixture (9-20 % H₂). The high pressure section was filled with helium until the membrane bursted. To detect DDT processes pressure transducers, photodiodes and film thermocouples were located along the tube. Ionization gauges were installed in and near the conus.

b) Partially obstructed tube with conus (prototypic mode A)

In this case a part of the tube was equipped with an array of ring obstacles blocking 30 % of the flow cross section (BR=30%) over a length of 5-6 m to accelerate the flame to a high velocity. It also contained a conus to focus the precursor shock wave. The tube was evacuated and then filled with a defined

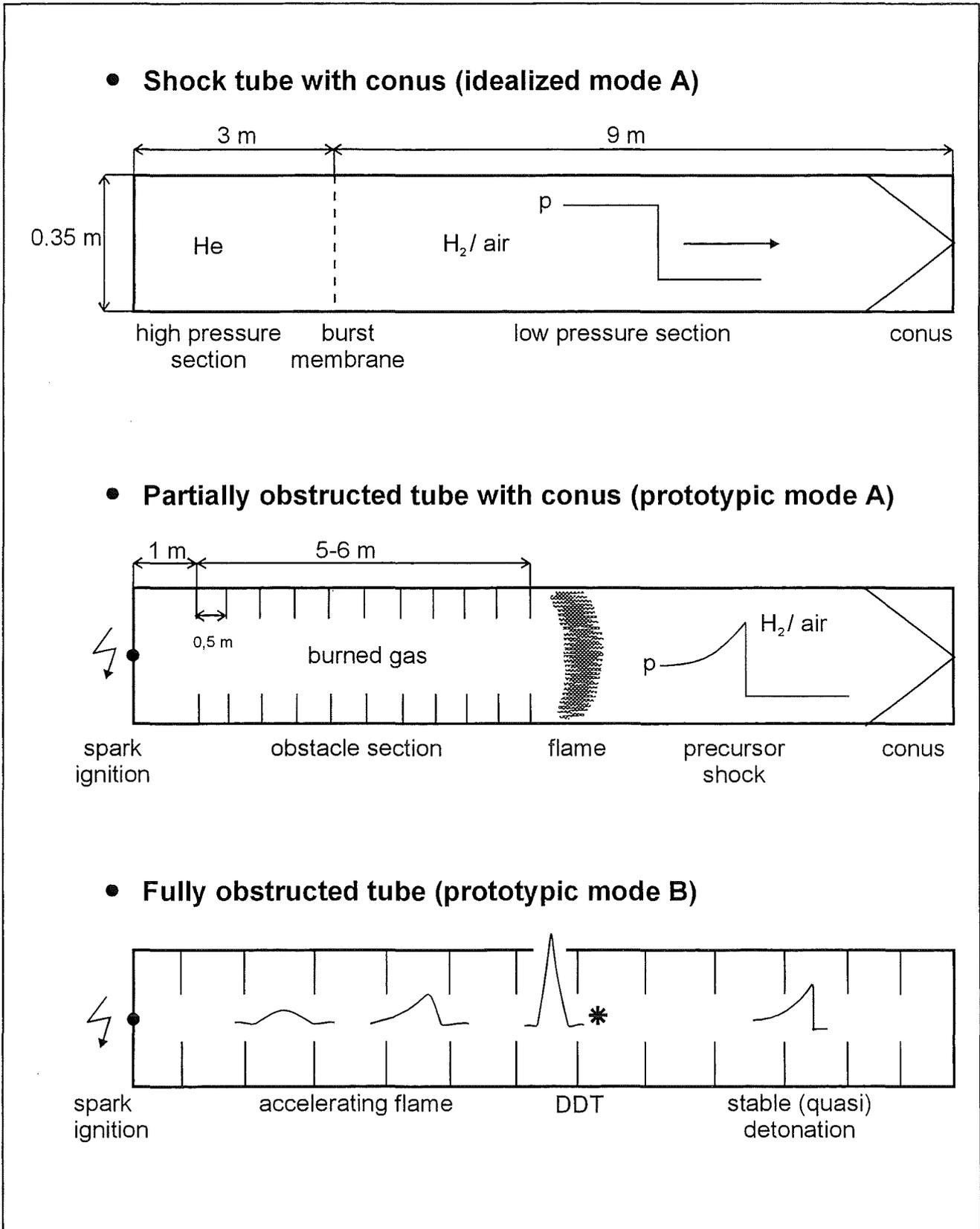


Fig.2.4.17: FZK experiments on DDT mechanisms using three experimental configurations of the 12 m tube. Instrumentation concentrated at expected DDT locations. Pressure transducers, photodiodes, film thermocouples, and ionization gauges were installed

hydrogen/air mixture (9-20 % H₂) to the initial pressure (1 bar). The mixture was ignited with a glow plug. To locate the expected DDT events, pressure transducers, ionization gauges, photodiodes and film thermocouples were used.

c) Fully obstructed tube (prototypic mode B)

The combustion tube was equipped with an array of ring obstacles (BR = 60 %) over its full length of 12 m. The evacuated tube was filled with a defined hydrogen/air mixture (9-20 % H₂) up to the initial pressure (0.5-2.0 bar) and then ignited with a glow plug. To observe the combustion process pressure transducers, photodiodes and film thermocouples were located along the tube.

6.1 Results

The evaluation of the experiments with prototypic mode A and prototypic mode B is not yet completed, but preliminary results were already obtained for the idealized mode A and prototypic mode A tests.

6.1.1 Results of idealized mode A experiments

All experiments that were performed so far with the idealized mode A tube configuration are listed in Table 7, where p_1 and p_4 designate the initial pressure of the low and high pressure section, respectively.

Figure 2.4.18 summarizes the results of experiment R0797_20 as an R-t-diagram. It shows the incident shock wave (ISW), the reflected shock wave (RSW) and the flame front (FF). The ISW and the RSW were measured with pressure transducers, the FF was detected with photodiodes. The test parameters used in this experiment were 15 % hydrogen in air with an initial pressure in the low pressure section of 1.25 bar. The high pressure section was filled with helium up to the burst-pressure of 8.2 bar, resulting in a Mach number of 1.76.

Table 7: Test matrix of DDT experiments in idealized mode A tube configuration

Experiment	% H ₂	p ₁ (bar)	p ₄ (bar)	Mach number	Remarks
R0797_15	0	0.3	7	2.55	membrane 0.1 mm Al
R0797_16	30	0.9	14		membrane 2x0.1 mm Al
R0797_17	15	0.45	7.7	2.49	0.1 mm Al
R0797_18	30	0.9	7.8		"
R0797_19	15	1	8	1.99	"
R0797_20	15	1.25	8.2	1.76	"
R0797_21	15	1.1	8.4	1.96	"
R0797_22	0	1	8	1.94	"
R0797_23	15	1.2	8	2.13	"
R0797_24	15	0.7	7.9	2.14	"
R0797_25	15	1	7.2		no conus
R0797_26	15	0.8	5.15		no conus
R0797_27	13	1.1	7.9	1.84	0.1 mm Al
R0797_28	13	1.25	6.8	1.66	"
R0797_29	17	1.25	8	1.7-1.72	"
R0797_30	13	0.7	7.4		"
R0797_31	17	1.1	6.9		"
R0797_32	14	1.1	6.75		"
R0797_33	14	0.8	6.25	1.902	"
R0797_34	12	1.1	6.0	1.72	"
R0797_35	12	0.8	6.2	1.8972	"
R0797_36	11	1.1	7.4	1.834	"
R0797_37	11	0.8	8.5	1.99	"
R0797_38	10	0.8	8.4	no measurement	"
R0797_39	10	1.1	8	1.815	"
R0797_40	9	1.1	8.3	1.839	"
R0797_41	9	0.8	7.8	1.94	"

This R-t-diagram shows an example for selfignition and decoupled flame-shock complex without DDT. This can be concluded from the fact, that on the

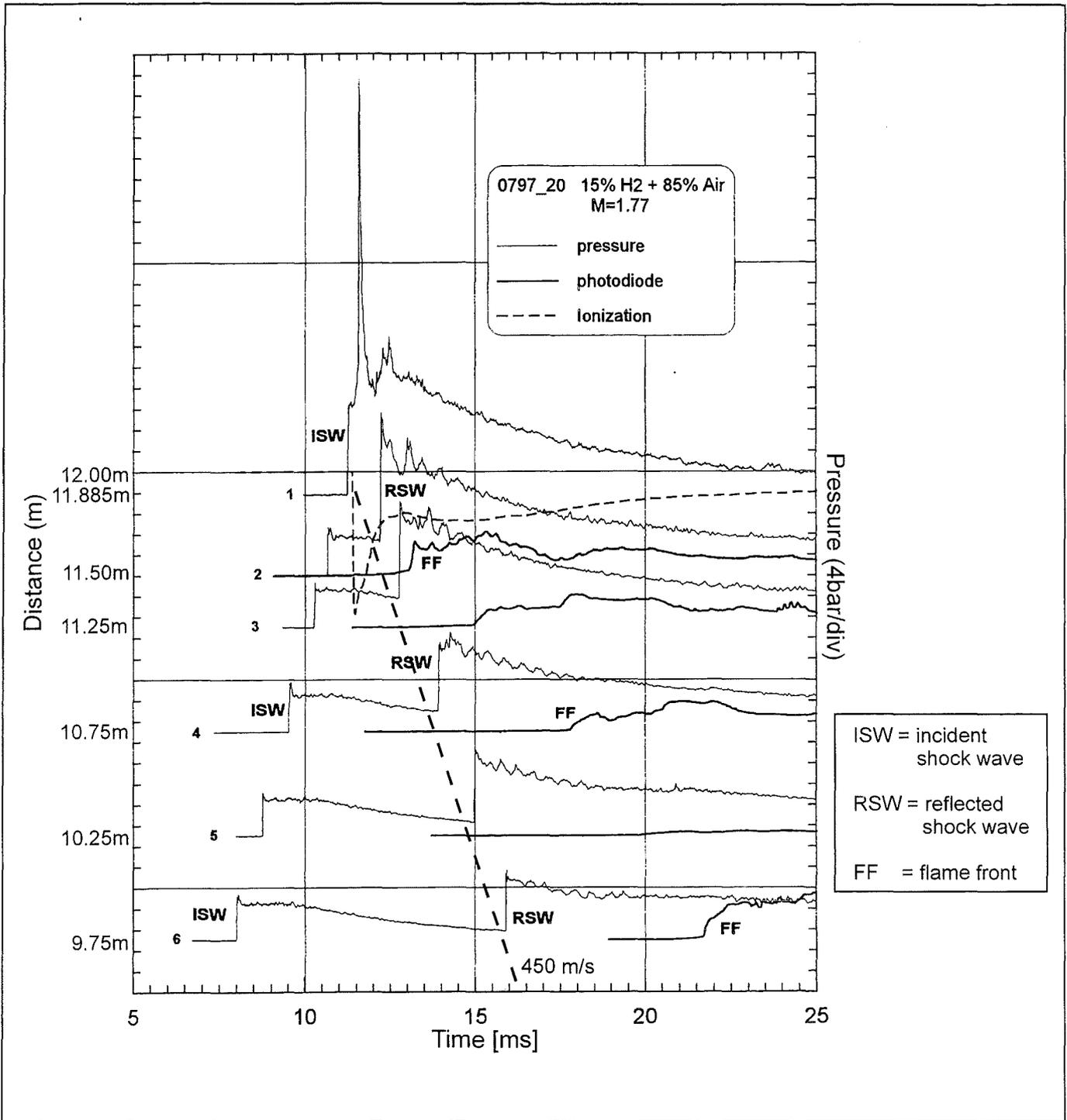


Fig.2.4.18: Example for selfignition and decoupled flame-shock complex (idealized mode A; no DDT)

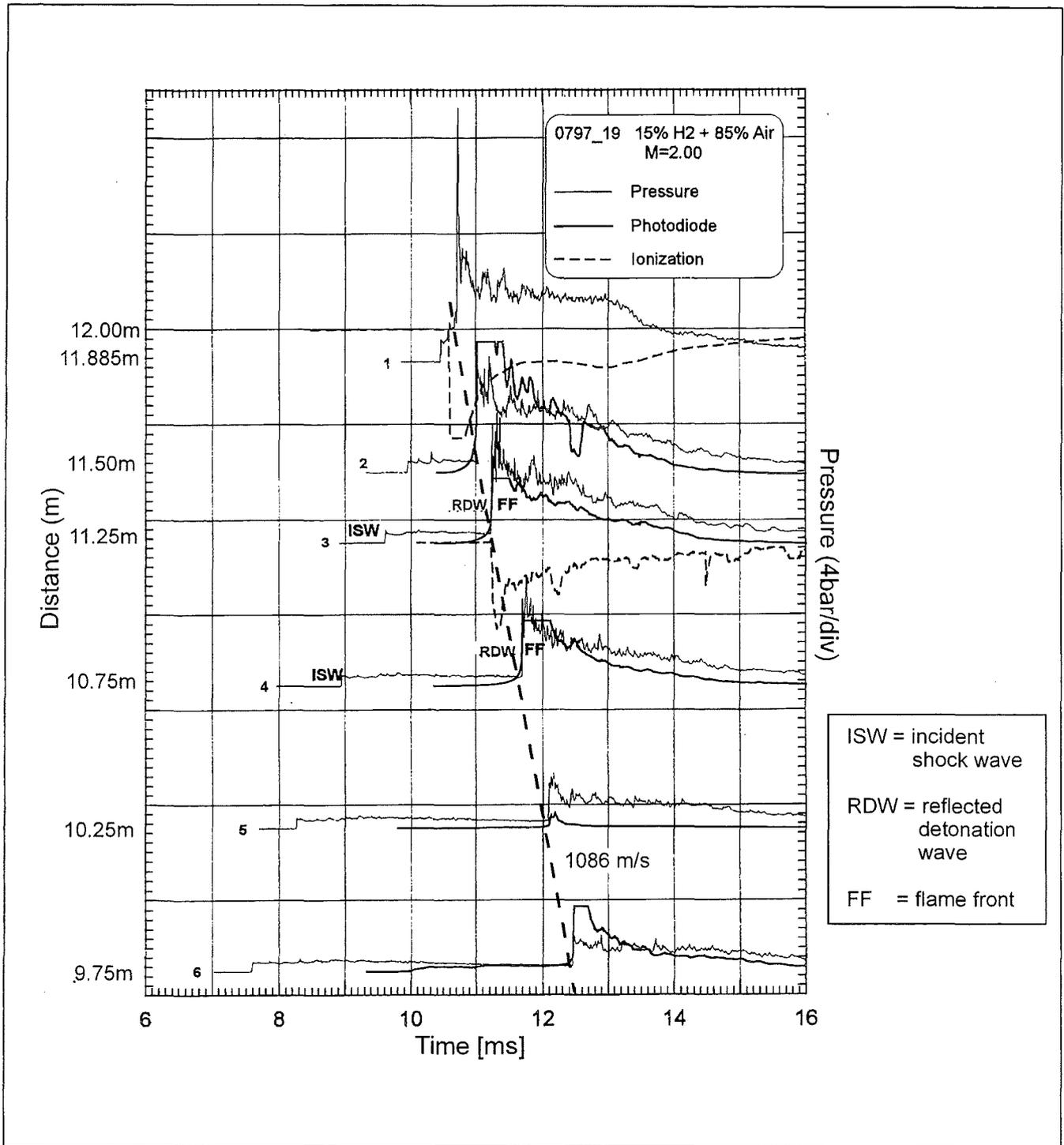


Fig.2.4.19: Example for delignition and formation of a coupled flame-shock complex, leading to a stable detonation wave (idealized mode A experiment).

one hand the ISW is focussed in the conus and ignites the mixture there, but on the other hand the RSW moves faster than the FF. For the resulting RSW a velocity of 450 m/s was measured. This velocity is comparable to that of a normally reflected inert shock wave, without reaction.

An example for selfignition and formation of a coupled flame-shock complex, leading to a stable detonation wave (DDT) is shown in Figure 2.4.19. This R-t-diagram was recorded during experiment R0797_19. The test parameters used in this experiment were 15 % hydrogen in air with an initial pressure of 1.0 bar. The high pressure section was filled with helium up to a burst-pressure of 7.7 bar, resulting in a Mach number of 2.00. Again the ISW is focussed in the conus and thereby ignites the mixture, but this time the resulting RSW and the FF remain coupled. The measured velocity of the RSW is 1086 m/s, which is close to the theoretical detonation speed in the moving H₂-air mixture.

A comparison of measured and calculated reflected wave speeds is given in Figure 2.4.20. The different wave velocities are plotted as function of the Mach number of the incident shock wave. All experiments in this Figure were carried out with a mixture of 15 % hydrogen in air and different Mach numbers of the incident shock wave (black triangles). Calculated were the theoretical velocity of normally reflected shock waves in the inert cases (line 1), and the theoretical relative detonation speed (D_{CJ} minus particle velocity) (line 2). The calculated speeds describe the measured speeds very well. Points along line 2 correspond to DDT events, points near line 1 correspond to no DDT.

An important question is the scaling of such DDT processes, because the experiments on smaller scale must be extrapolated to reactor relevant dimensions using a theoretical model. Analog tests were therefore performed at the Russian Academy of Sciences in Moscow (RAS) on smaller scale.

The results of the experiments of our Russian partners, performed with the same geometrical arrangement on smaller scale (54 mm tube diameter), are

- ① theoretical velocity of normally reflected shock waves (inert case)
- ② theoretical relative detonation speed (D_{CJ} - particle velocity)
- ▲ measured speeds of reflected waves (low point no DDT, high points with DDT)

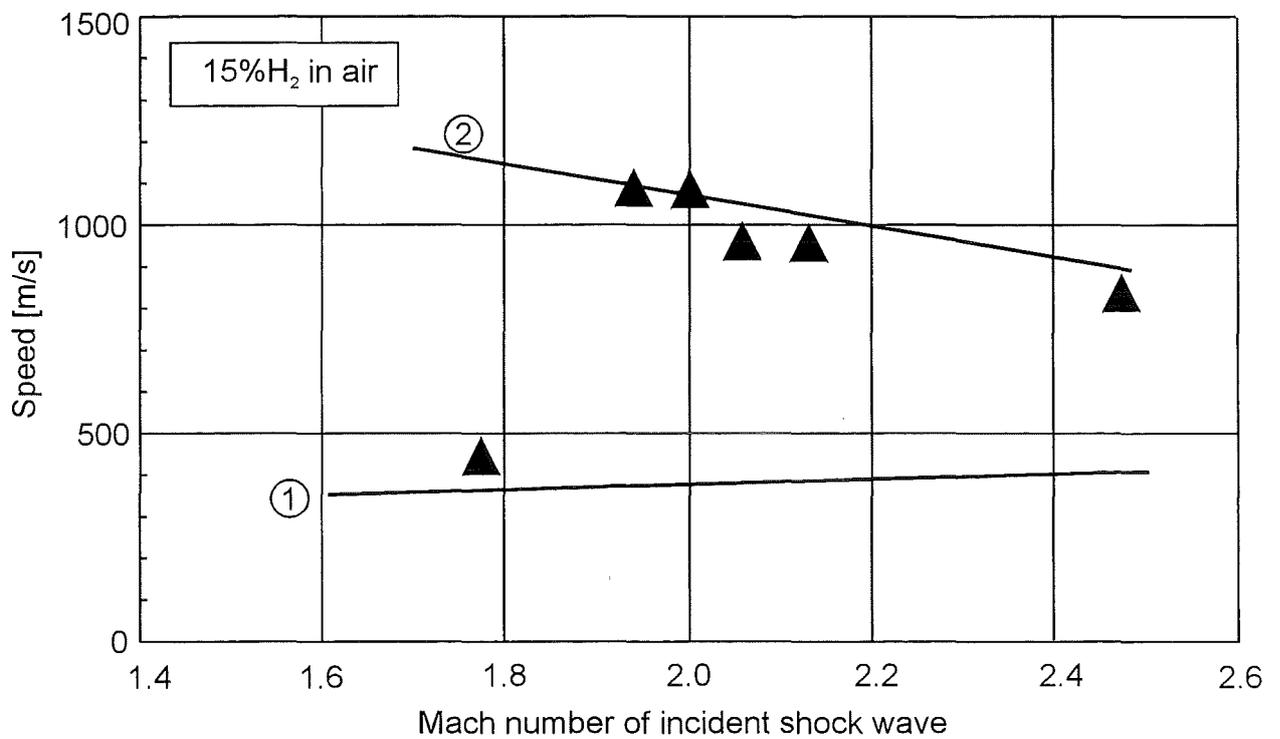


Fig.2.4.20: Comparison of measured and calculated reflected wave speeds confirm transition from unstable complex (no DDT) to stable, coupled flame / shock complex (DDT).

compared to our measured and calculated reflected wave speeds in Figure 2.4.21. Again the calculated speeds describe the measured speeds quite well, and two regimes were obtained. One regime with normal RSW-velocity (450-550 m/s) and another with a relative detonation velocity around 1000 m/s. A higher Mach number is needed on smaller scale to cause DDT than on larger scale (shaded regions).

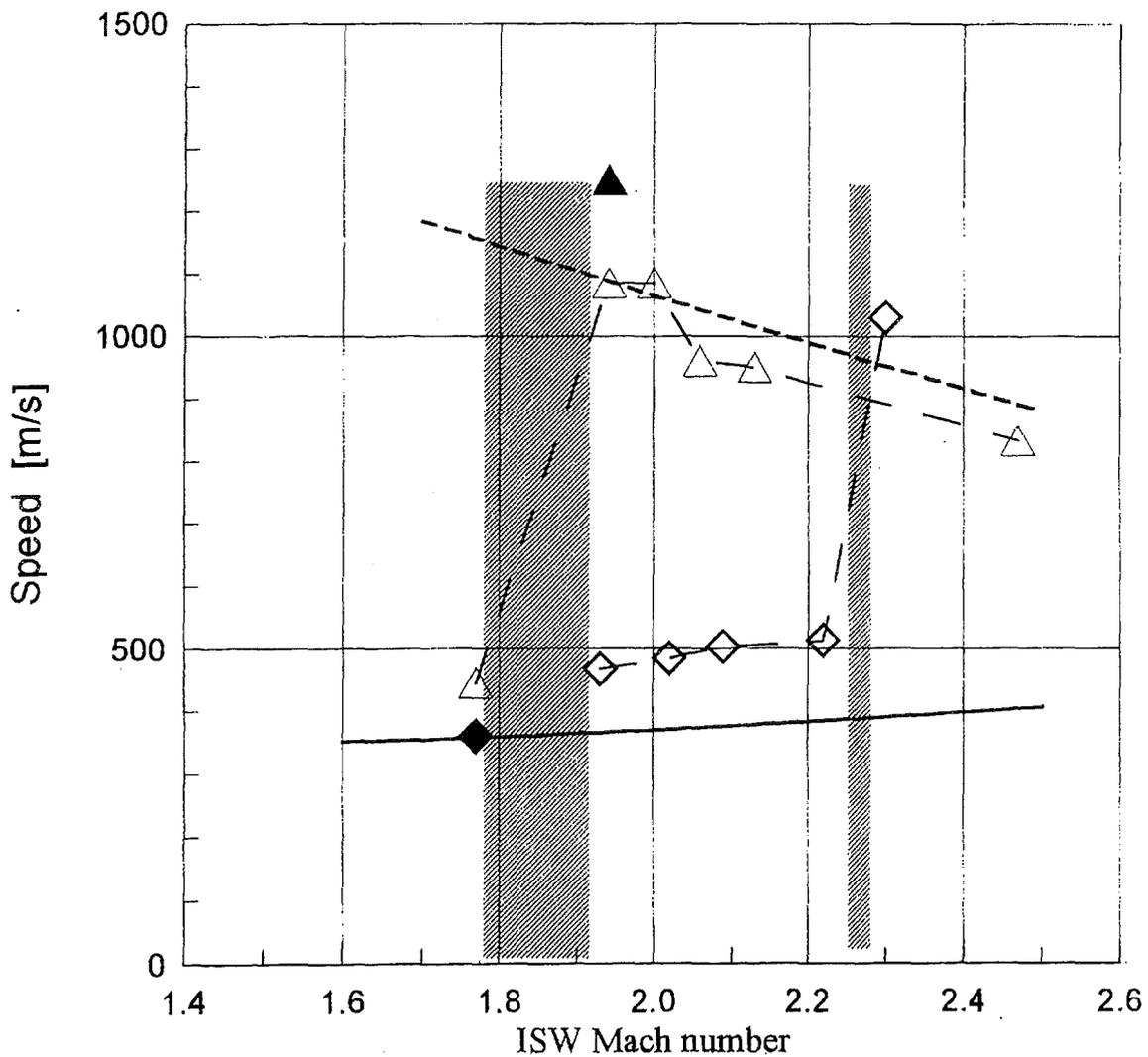
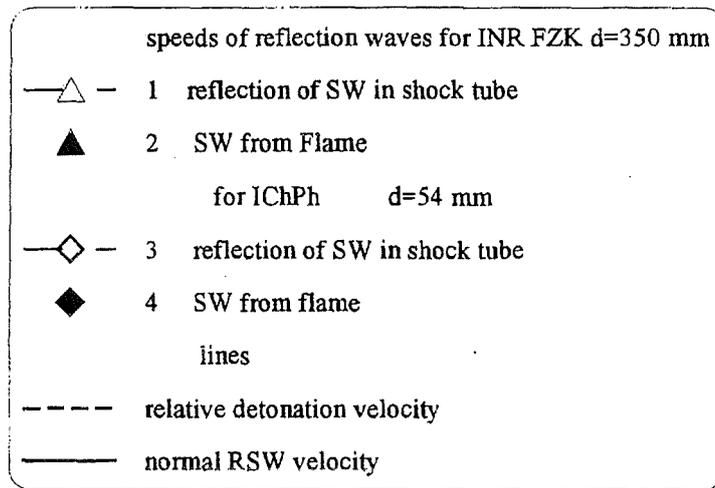
Figure 2.4.22 shows all FZK-experiments in dependence of the Mach number of the incident shock wave and hydrogen concentration in air. These data were obtained in joint FZK/RAS measurement campaigns. The experiments can be classified into three areas:

The first area (1) describes an uncoupled propagation of SW and FF with time and length differences of $dt \approx 1-2$ ms and $dL \approx 0.5-1$ m confirming no DDT.

The second area (2) describes a coupled propagation of SW and FF with $W+u_2=D$, which confirms DDT (W =measured wave speed in laboratory frame, u_2 = particle velocity, D =CJ detonation wave speed in stationary gas).

The third area (3) also describes an uncoupled regime but with very close propagation of SW and FF ($dt < 0.1$ ms, $dL \approx 0.05$ m in the FZK tests). This is an intermediate behavior between DDT and no-DDT cases. Future test will concentrate on this regime to provide detailed experimental data on the conditions close to DDT events.

The described shock tube with conus (idealized mode A) allows to carry out experiments that lead to a reproducible DDT in medium scale (FZK-12-m-tube, ID=350 mm) as well as in small scale (Russian-2-m-tube, ID=54 mm). Future tests in the next project period will investigate a scale-up criterion for DDT.



Laboratory of heterogeneous combustion

Fig. 2.4.21: Comparison of measured and calculated reflected wave speeds confirms transition from unstable complex (no DDT) to stable, coupled flame/shock complex (DDT).

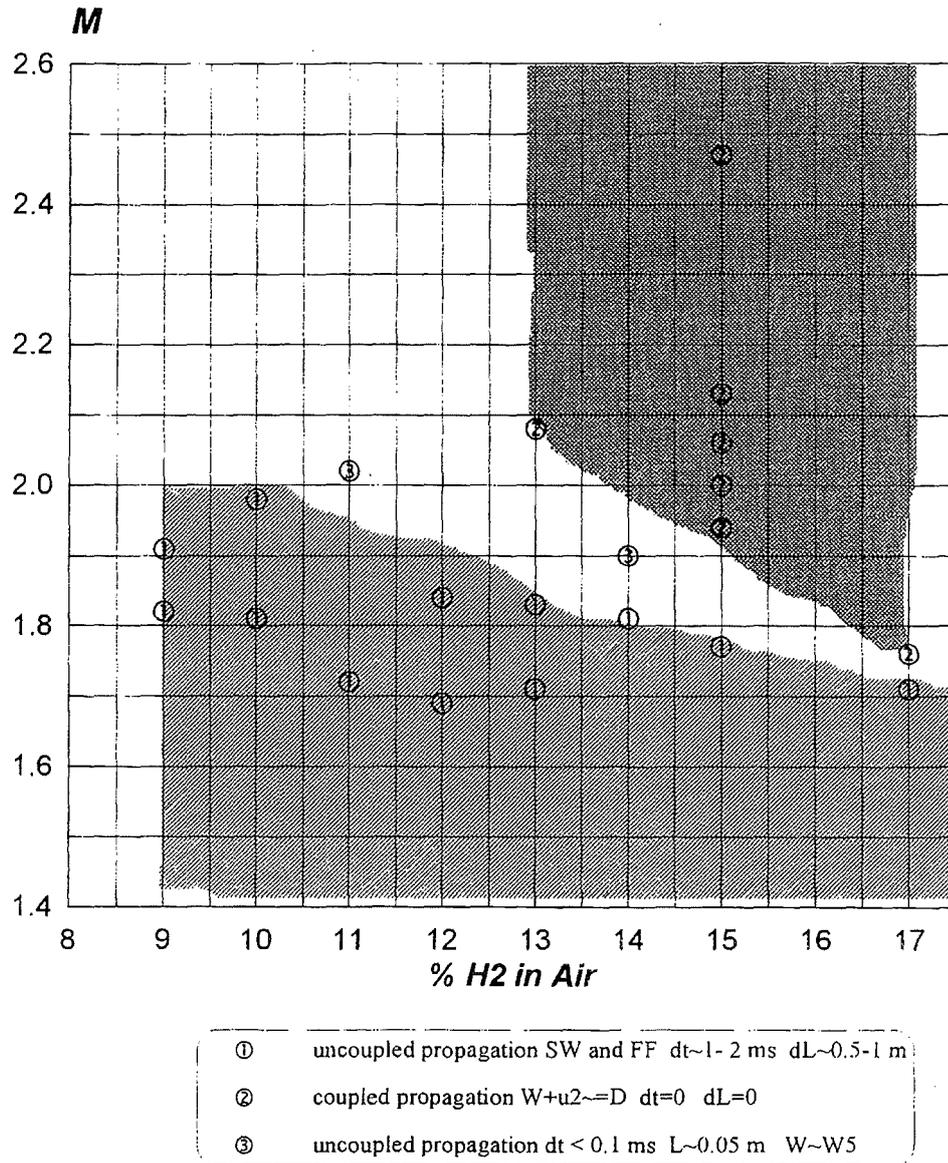


Fig. 2.4.22: Regimes of propagation of RSW and FF under conditions of reflection from conic cavity in INR FZK.

6.1.2 Results of prototypic mode A

All experiments that were performed so far in the prototypic mode A are listed in Table 8.

Table 8: Test matrix of DDT experiments in prototypic mode A tube configuration

Experiment	BR [%]	p_0 [bar]	[H ₂] [%]	Obstacle separation
R0797_00	60	1	15	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_01	60	1	20	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_02	60	1	18	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_03	60	1	17	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_04	60	1	17	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_05	60	1	17	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_06	60	1	16	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_07	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_08	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_09	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_10	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_11	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_12	60	1	16,5	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_13	60	1	17	$\Delta x = 50\text{cm}$
R0797_14	60	1	15	$\Delta x = 50\text{cm}$

The results obtained so far with prototypic mode A will be described by two examples. Figure 2.4.23 shows the R-t-diagramm of experiment R0797_14. The test parameters of this experiment were 15.0 % hydrogen in air with an initial pressure of 1 bar. After being ignited, the flame accelerated in the obstacle section. When leaving the obstacle section, the flame seems to be quenched. Figure 2.4.24 shows an enlarged part of the R-t-diagram for the tube section close to the conus of this experiment (9.75 m - 12.0 m). No photodiode and ionization signals from the incoming wave can be observed, which leads to conclusion that the flame has already been quenched. The measured velocity of this precursor shock wave is about 680 m/s. In the conus this precursor shock wave is focussed and reflected. But the absence of photodiode signals indicates that no selfignition has taken place in the

conus. The reflected wave may have initiated a local explosion at the 10.75 m position. The sudden increase in light at the 9.75 m position (19ms) is due to the compression of burned gas. The average velocity of the reflected shock wave is measured to 650 m/s, which indicates that no DDT event did occur in this test.

Experiment R0797_10, with 16.5 % hydrogen in air and an initial pressure of 1 bar leads to different conclusions. The resulting R-t-diagram is shown in Figure 2.4.25. This diagram also shows an acceleration of the flame in the obstacle-section of the tube and also a quenching of the flame in the smooth part of the tube. Figure 2.4.26 again shows an enlarged part of the R-t-diagram near the conus (9.75 m - 12.0 m). This time the precursor shock wave is focussed in the conus leading to selfignition, which is due to the higher wave speed and the more sensitive mixture. This is shown by the signals of the photodiodes, the ionization gauges and the pressure transducers. The flame front and the reflected shock wave remain coupled and travel with a measured velocity of 1360 m/s. Such a velocity is typical for the velocity of a detonation in the counterflowing gas, indicating that a DDT event has occurred.

The presented results show that it is possible to reliably generate a DDT with this new experimental approach. As in the shock tube tests, a surprisingly high degree of reproducibility was observed for the occurrence of DDT events.

In summary important milestones were reached during the reporting period of the project:

- Mode A DDT events can now be produced reliably with two different experimental configurations (shock tube mode and accelerating flame). This allows the systematic investigation of local properties close to the DDT location in the future tests, which can then be compared to numerical simulations.
- Analog tests on two significantly different experimental scales (factor 6.5)

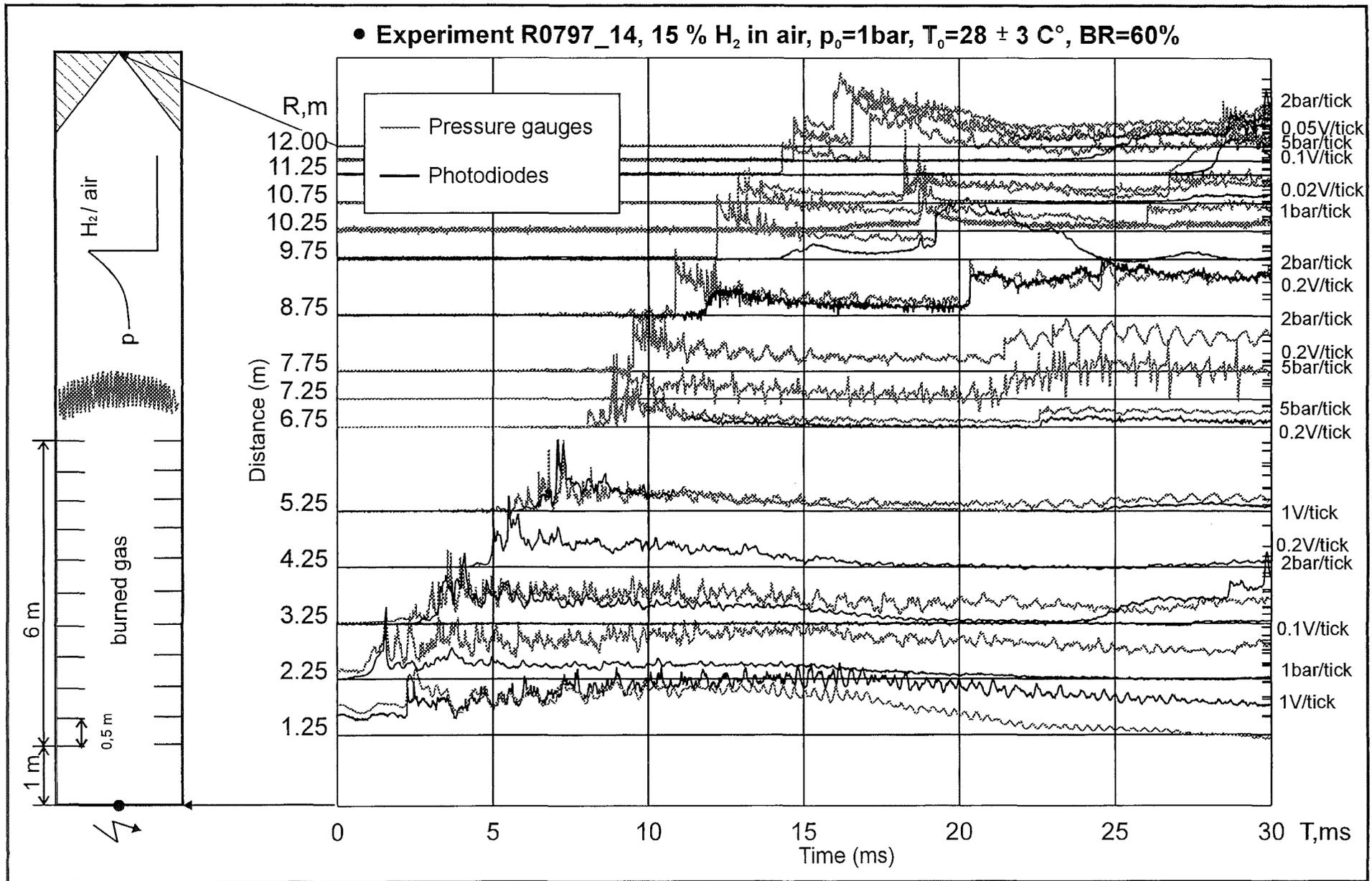


Fig.2.4.23: Measured pressure and photodiode signals of experiment R0797_14.

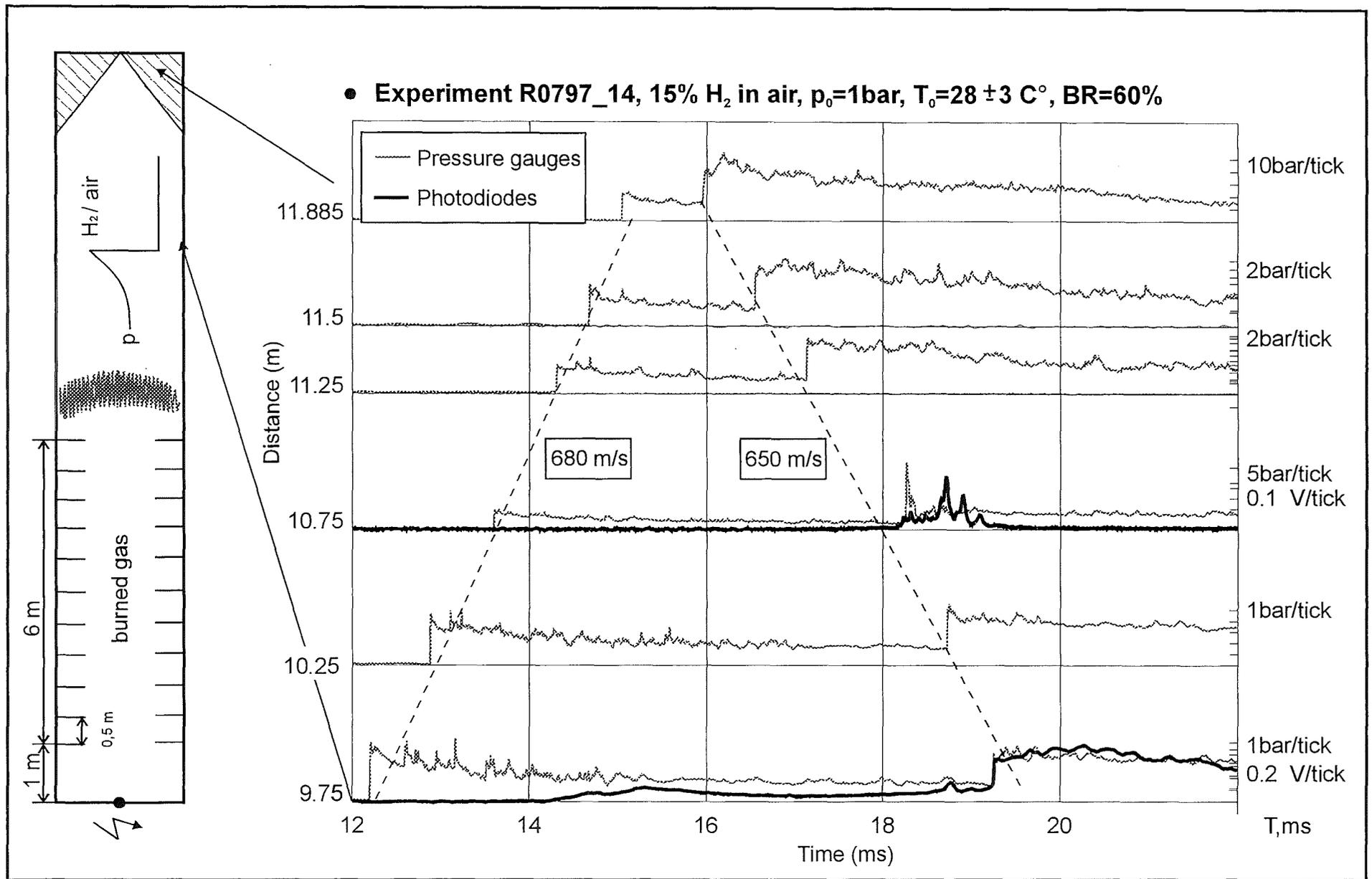


Fig.2.4.24: Measured pressure and photodiode signals in experiment R0797_14. Enlarged part of the R-t diagram near the conus (9.75-12.0 m).

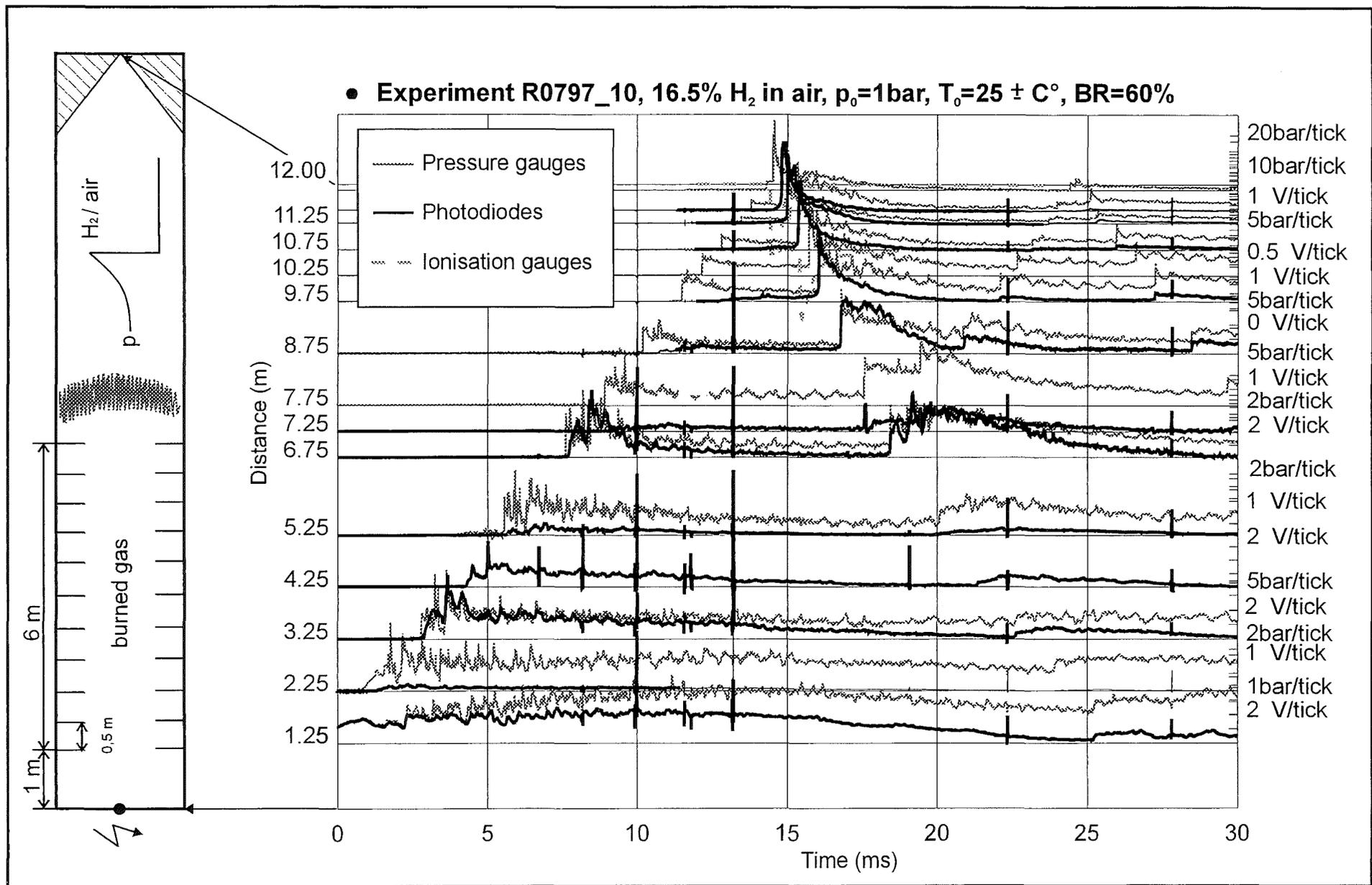


Fig. 2.4.25: Measured pressure, photodiode and ionisation signals of experiment R0797_10.

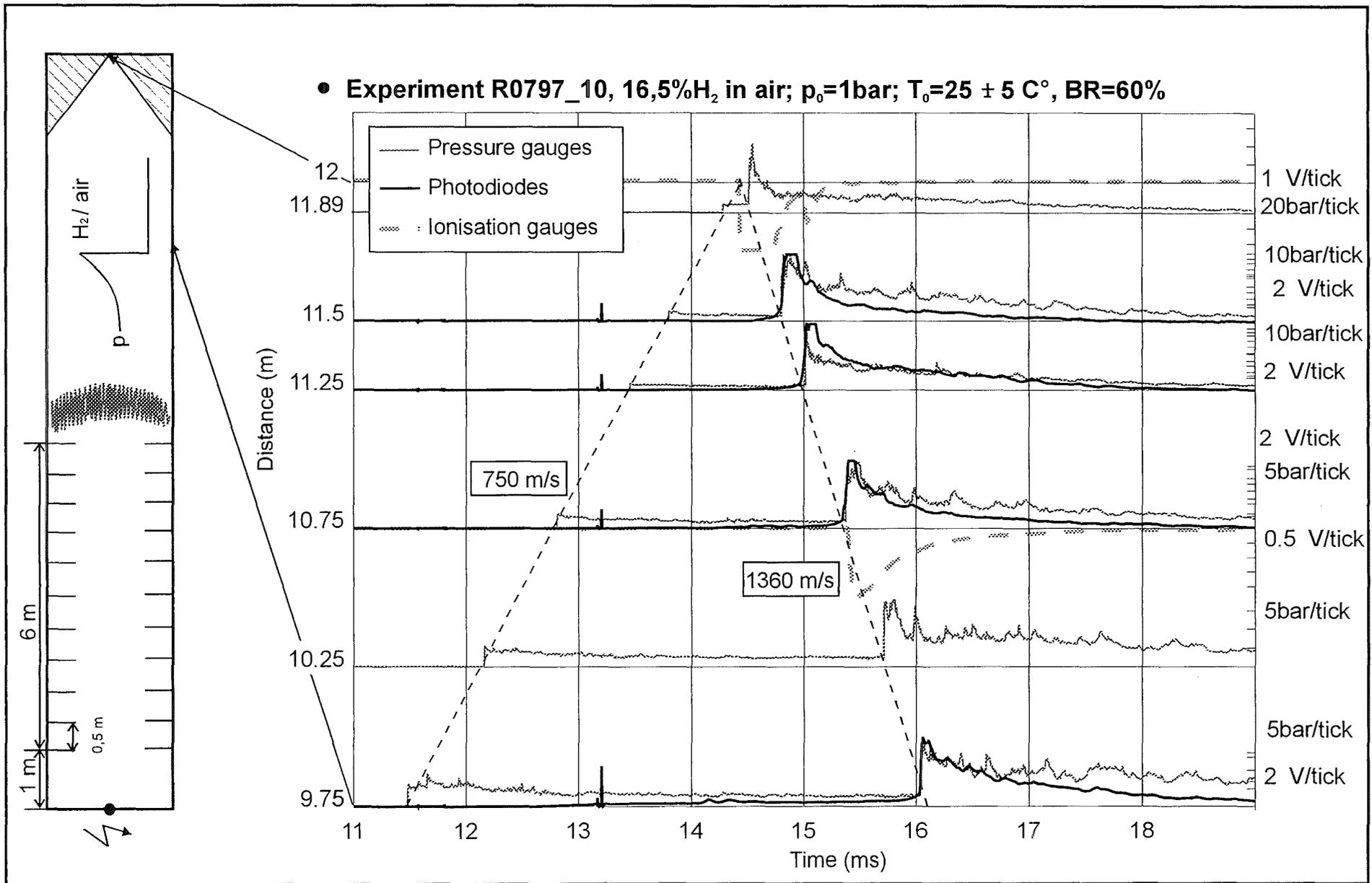


Fig. 2.4.26: Measured pressure, photodiode and ionisation signals of experiment R0797_10. Enlarged part of the R-t diagram near the conus (9.75-12.0 m).

have provided first data on scaling of DDT processes. Increasing scale seems to facilitate self-ignition and DDT due to longer compression times. The current test data indicate that leaner mixtures can undergo DDT with increasing linear scale.

V. COM3D code development
(A. Kotchourko, INR)

The presumed PDF (probability density function) approach was implemented into the COM3D-code. A multicomponent version of a β -PDF model was considered and at the present time a model for two components was implemented. Two different models for closing the PDF model were considered: one based on the transport equations for the mean scalar turbulent energy; and, a balance equation for mean f' . Various test runs were performed.

An analysis of the applicability of the EBU model was made. (Kotchourko et al., 1997). The following conclusions were made in this work. The simple turbulent combustion model used in the calculations showed quite satisfactory description of different combustion regimes observed experimentally in the tube with obstacles. The rates of flame acceleration and pressure fields can be described satisfactorily for a range of mixture compositions and configurations of obstacles with the same model parameters. Additional model development is required for the slow flame regimes. Description of fast deflagrations in conditions close to transition to detonation requires certain reduction of the eddy-break-up constant.

The development of numerical tools was continued. A number of numerical schemes for solving fluid dynamic problems in the frames of interest for turbulent combustion were investigated. As a result a library of numerical hydrodynamic solvers was created, including different first and second order algorithms based mainly on TVD (total variation diminishing) schemes with different delimiters.

Further vectorization and parallelization efforts were performed to allow adaptation of the COM3D-code on computers with different architectures. The computers under consideration included VPP and SP2.

References

A. Kotchourko, W. Breitung, A. Vesper, and S.B. Dorofeev. Tube experiments and numerical simulation on turbulent hydrogen-air combustion. In Twenty First Symp. (Int.) on Shock Waves, Great Keppel Island, Australia, 1997.

VI. Gitteradaption für Finite-Volumen-Verfahren auf kartesischen Gittern
(F. Seegmüller, INR)

Zusammenfassung

Die Verwendung des Gitteradaptionsverfahrens „Adaptive Mesh Refinement“ (AMR) ermöglicht einen effizienten Einsatz gegebener Rechenressourcen bei der Simulation von Gasströmungen mit expliziten Finiten-Volumen-Verfahren auf strukturierten, kartesischen Gittern. Das Adaptionsverfahren AMR wird vorgestellt und der darauf aufbauende und aus dem „Lawrence Berkeley National Laboratory“ stammende Hydrodynamik-Code „Hyperbolic Adaptive Mesh Refinement“ (HAMR) eingeführt. Dieses Programm bildet die Grundlage zur Entwicklung des adaptiven Hydrodynamik-Programms HAMRObj3D, das zur Berechnung dreidimensionaler Körperumströmungen dient, und des adaptiven Detonationscodes AMRDET3D. Numerische Tests zeigen die Leistungsfähigkeit der verwendeten Algorithmen und Programme.

1 Einführung

Die numerische Simulation von Wasserstoffverbrennungen, wie sie bei Kernschmelzunfällen im Kernkraftwerken auftreten können, und deren Wirkungen auf den Reaktorsicherheitsbehälter ist von großer Bedeutung bei der Auslegung der Sicherheitsanforderungen aktueller und zukünftiger Kernkraftwerke [7,6]. Dazu werden am Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) numerische Programme entwickelt, die eine genaue Analyse des Wasserstoffverhaltens in Kernschmelz Szenarien ermöglichen [6]. So kann das am Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik (INR) entwickelte Programm DET3D [6,7] die bei solchen Wasserstoffverbrennungen entstehenden Wasserstoff-Luft-Dampf Detonationen sowie die daraus folgenden Belastungen am Sicherheitsbehälter berechnen. DET3D löst die dreidimensionalen Eulergleichungen der Gasdynamik auf einem strukturierten, kartesischen Gitter mit einem expliziten, gesplitteten, hochauf-

lösenden Finite-Volumen-Verfahren, ergänzt um Quell- und Senkenterme, wie sie zur Beschreibung von chemischen Reaktionsschemata einer reaktiven Wasserstoffverbrennung entspringen. Dabei ermöglicht DET3D Berechnungen in Rechengebieten, die eine komplizierte Berandungsgeometrie besitzen, insbesondere werden im Stömungsgebiet liegende Körper berücksichtigt. Diese Anforderungen sind nötig, um ein korrektes Modell der komplexen 3D-Geometrie eines Containments zu ermöglichen. Die Simulation der reaktiven Strömungen mit H_2 -Detonationen in einem Reaktorcontainment stellt jedoch ein typisches Mehrskalenproblem dar, wobei sowohl der räumliche als auch der zeitliche Skalenbereich betroffen ist [6]. Eine möglichst genaue Berechnung sowohl räumlicher als auch zeitlicher klein- und großskaliger Strukturen einer solchen instationären, reaktiven 3D-Mehrkomponentenströmung mit DET3D erfordert ein Rechengitter, das im Vergleich zu den Dimensionen des Rechengebietes eine sehr feine Auflösung besitzen muß. Gleichzeitig ist eine relativ zu den langen physikalischen Problemzeiten sehr feine zeitliche Auflösung nötig. Daraus resultieren sehr lange Rechenzeiten und ein sehr großer Speicherplatzbedarf, sodaß solche Simulationen auch für heutige Hochleistungsrechner eine echte Herausforderung darstellen. Eine erfolgreiche und vielfältig eingesetzte Strategie zur Reduzierung von Rechenzeit und Speicherplatzbedarf in numerischen Programmen wie DET3D bilden Gitteradaptionenverfahren. Der Einsatz eines solchen Verfahrens innerhalb einer auf einem Rechengitter arbeitende Integrationsmethode bewirkt, daß nur dann und dort auf feinen Gitterzellen mit kleinen Zeitschritten gerechnet wird, wenn es die Qualität der numerischen Lösung bedarf. Die Entscheidung wo und ob eine Verfeinerung (oder Vergrößerung) stattfindet, wird mittels mathematischer oder physikalischer Verfeinerungskriterien durch das Programm selbst während der Laufzeit („dynamisch“) gefällt. Für den in DET3D vorliegenden Fall eines expliziten Finite-Volumen-Verfahrens auf einem strukturierten, kartesischen Gitters ist die Methode des „Adaptive Mesh Refinement“ (AMR) besonders gut geeignet. Das AMR-Verfahren wurde 1984 von M. Berger und J. Olinger [5] vorgeschlagen, und ist in den nachfolgenden Jahren von zahlreichen

Autoren [3, 17, 2, 8, 15, 11, 16] beschrieben, implementiert, weiterentwickelt und verfeinert worden. Dabei wurden auch software-technische Fragestellungen wie die eines leistungsfähigen Datenmanagements für AMR-Implementierungen behandelt, da der AMR-Algorithmus komplexe Daten- und Programmstrukturen erfordert. Zugleich jedoch kann das AMR-Verfahren als eigenständiger Programmteil aufgefaßt und programmiert werden, dessen (nachträgliche) Kopplung an verschiedene bereits existierende Stömungscodes möglich ist. Der Aufbau eines adaptiven DET3D-Programms AMRDET3D durch die Kopplung des bereits programmierten DET3D-Lösungsverfahrens mit dem AMR-Algorithmus ermöglicht eine effiziente Ausschöpfung gegebener Rechnerressourcen, sodaß optimierte numerische Simulationen erzielt werden können. Die Grundlage für AMRDET3D bildet dabei das am „Center for Computational Sciences and Engineering“ (CCSE) des „Lawrence Berkeley National Laboratory“ (LBLN) frei erhältliche adaptive Hydrodynamikprogramm „Hyperbolic AMR“ (HAMR, [12]), das eine vollständige und vom Strömungslösungsverfahren getrennte Implementierung des AMR-Algorithmus enthält. Über eine stufenweise Modifikation und Erweiterung dieses Programms erfolgt die Erstellung von AMRDET3D, das letztlich die um eine Gitteradaption erweiterte Leistungsfähigkeit von DET3D besitzen soll. Eine Zwischenstufe stellt dabei das Programm HAMRObj3D dar, welches die Funktionalität von HAMR um die Erfassung von Körperumströmungen erweitert. Numerische Tests mit diesen Programmen zeigen, daß der Einsatz von AMR gegenüber Rechnungen ohne Gitteradaption bei Lösungen gleicher Qualität zu einer deutlichen Reduzierung des Rechenaufwandes und der Rechenzeit führen.

2 Das Gitteradaptionsverfahren „Adaptive Mesh Refinement“ (AMR)

Die folgende Beschreibung des AMR-Algorithmus folgt den Ausführungen [5, 3, 2, 4, 17, 15], wo die einzelnen Abläufe genauer dargestellt werden. Der AMR-Algorithmus ist ein Gitteradaptionalgorithmus insbesondere für auf strukturierte, kartesische Gitter arbeitende, explizite Finite-Volumen-Verfahren [14,13], wie sie zur Lösung von Gasströmungen bei Vernachlässigung von Viskosität und Wärmeleitung eingesetzt werden. Durch die Organisation ihres Aufbaus und Ablaufs beweist sich die AMR-Methode als eine vielseitig einsetzbare Adaptionstechnologie, um nicht-adaptive, auf strukturierten Gittern arbeitende Anwendungsprogramme zu einem adaptiven Verfahren umzugestalten, ohne daß grundlegende Änderungen in der Implementierung des Lösungsverfahrens notwendig sind. Der wichtigste Grund hierfür findet sich in der Art der lokalen Gitterverfeinerung oder –vergrößerung: trotz Einfügen oder Entfernen von Gitterpunkten arbeitet der Löser stets nur auf strukturierten, kartesischen Rechteckgittern. Der AMR-Algorithmus benutzt nämlich nicht nur ein einzelnes Gitter, um das Rechengebiet zu diskretisieren, sondern eine Gitterhierarchie. Diese Hierarchie baut sich bildlich aus übereinander gelagerten Ebenen („Level“) auf. Der unterste Level (Level 0) der Hierarchie enthält das gröbste Gitter, welches den gesamten Rechenbereich abdeckt. Über feiner aufzulösende Teilbereiche des Rechengebiets werden rekursiv und automatisch feinere strukturierte Rechteckgitter gelegt, indem die bisher nur mit einem groben Gitter abgedeckten Teile des Rechengebiets nun mit feineren Teilgitter überdeckt werden (Abb. 2.6.1). Diese Teil- oder Komponentengitter werden dabei je nach Feinheit einem höheren Level der Hierarchie zugeordnet und existieren getrennt von allen anderen Teilgittern. Je höher ein Level in der Hierarchie liegt, um so feinere Teilgitter befinden sich in ihm, jedoch liegen in jedem Level nur Gitter gleicher Auflösung. Damit werden mit wachsender Gitterhierarchie Teile des Rechengebietes immer feiner diskretisiert, wobei ein feineres Gitter immer im Bereich eines nächstgröberen Gitters liegt. Das

feinere Gitter entsteht, indem ein Teil des groben „Eltern“-Gitters weiterverfeinert wird. So entstehen hierarchisch angeordnete Folgen immer feiner werdender strukturierter Rechteckgitter, die „AMR-Gitterhierarchie“ (Abb. 2.6.2). Zur Anwendung eines Lösungsverfahrens auf eine bestehende AMR-Gitterhierarchie wird jedes seiner strukturierten, kartesischen Teilgitter so aufbereitet, daß es unabhängig von den anderen Komponentengittern zeitlich entwickelt werden kann. So kann ein gegebener Löser, der auf strukturierten Gittern arbeitet, ohne Änderung auf der Gitterhierarchie arbeiten. Das ist der Grund, weshalb sich das AMR-Verfahren sehr gut zur nachträglichen Umstellung eines strukturierten Löser auf ein adaptives Verfahren eignet. Gleichzeitig berücksichtigt der AMR-Algorithmus auch eine Verfeinerung der zeitlichen Diskretisierung. Auf feineren Gittern werden mehrere, jedoch kleinere Zeitschritte ausgeführt. Einem Zeitschritt Δt_g auf einem groben Gitter folgen zunächst mehrere Zeitschritte Δt_g auf dem nächst feineren Gittern, bis dergleiche Zeitpunkt erreicht ist wie auf dem gröberen Gitter. Dieser Vorgang wird rekursiv wiederholt, bis alle Teilgitter der Gitterhierarchie denselben Zeitpunkt erreicht haben. Bevor also ein weiterer Zeitschritt auf einem groben Gitter ausgeführt wird, müssen erst alle kleineren Zeitschritte auf allen feineren, eingebetteten Gitter abgeschlossen sein. Dabei ermöglicht der hierarchische Aufbau der Gitteranordnungen im AMR-Verfahren eine koordinierte und synchronisierte Abarbeitung und Orchestrierung aller Teilaufgaben, indem die Evolution aller Teilgitter der Gitterhierarchie in einem rekursiven Ablauf organisiert wird. Die AMR-Gitterhierarchie ineinander verschachtelter Teilgitter bleibt während einer Rechnung nicht so bestehen, wie sie sich anfangs bildete. Sondern die Hierarchie variiert dynamisch sowohl bezüglich der Höhe (Anzahl der Level = Anzahl der Verfeinerungsstufen) als auch bezüglich der Anzahl, der Ausdehnung und der Orte der Teilgitter in jedem Level. Über die Erzeugung oder Entfernung von feineren Teilgittern eines Levels entscheidet das Programm automatisch und rekursiv in Abhängigkeit von numerischen Fehlern oder großen Gradienten (Verfeinerungskriterien) der aktuellen Lösung des nächstgröberen Levels. Zu verfeinernde Gitterzellen eines Levels werden in Rechteckbereichen

gesammelt, die die Vorlage für verfeinerte Teilgitter des nächstfeineren Levels abgeben. Sind diese feineren Komponentengitter erzeugt und initialisiert, so können die alten auf diesem feineren Level enthaltenen Gitter entfernt werden, was in diesen Rechenbereichen eine Vergröberung bewirkt. So wird es möglich, daß die Verfeinerungen (räumlich und zeitlich) nur den Strömungsmerkmalen folgen, die einer besonders feinen Auflösung bedürfen. Es entsteht dadurch eine Lösung, die im ganzen Rechengebiet die gleiche Genauigkeit und Güte besitzt. Die Abb.2.6.3 zeigt diesen Ablauf der dynamischen Gitteradaption beim AMR-Verfahren in Abhängigkeit von der Steilheit des Gradienten einer Strömungsgröße. Die besondere Effizienz des AMR-Verfahrens beim Einsatz expliziter Finiter-Volumen-Verfahren rührt daher, daß die aufgrund des Verfahrens auf kleineren Gitterzellen nötigen kleinen Zeitschritte nur auf den zugehörigen feinen Gittern ausgeführt werden müssen, während für gröbere Zellen auch größere Zeitschritte verwendet werden. Gleichzeitig jedoch erfolgt trotzdem eine koordinierte, übersichtliche Abarbeitung der gesamten, sich dynamisch den Strömungsverhältnissen anpassenden Gitterhierarchie, in der je nach Notwendigkeit nur bestimmte Teilbereiche der Strömung räumlich und zeitlich feiner diskretisiert werden. Insgesamt entsteht so ein adaptives Lösungsverfahren, bei dem sich für viele Anwendungen der Rechenaufwand, sowie der Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf deutlich gegenüber einer Rechnung auf einem Gitter mit gleichmäßig feiner räumlicher oder zeitlicher Gitterauflösung über das ganze Rechengebiet hinweg reduziert. Die Qualität der Lösung bleibt bei diesem Vergleich jedoch erhalten.

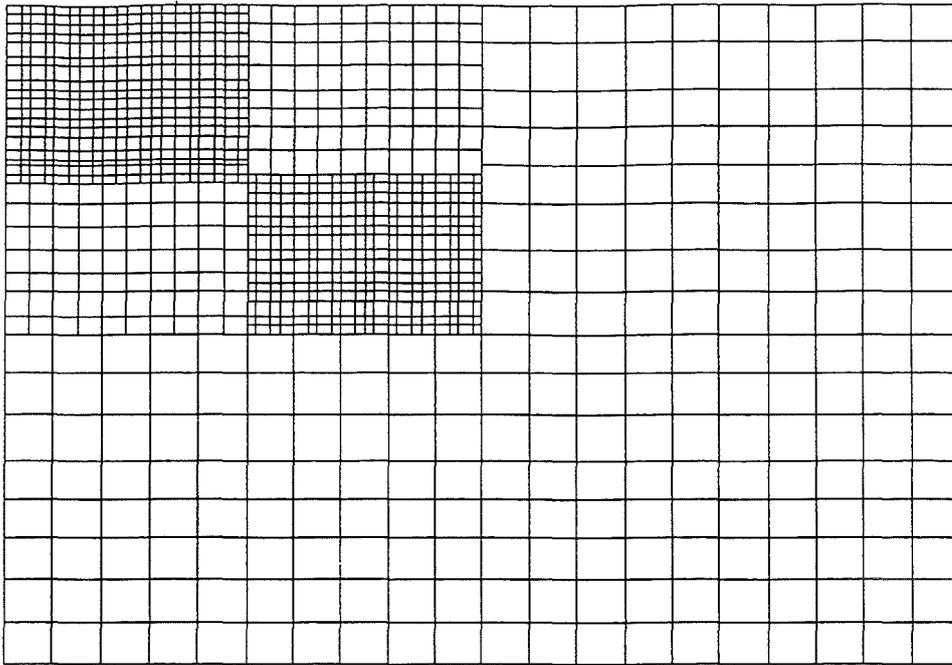


Abb.2.6.1: Einbetten strukturierter, verfeinerter Rechteckgitter in größere, strukturierte Gitter ergibt ein verfeinertes, aber nun unstrukturiertes Gitter. Daher erfolgt im AMR-Algorithmus die Anordnung der Teilgitter in einer Hierarchie (Abb.2.6. 2).

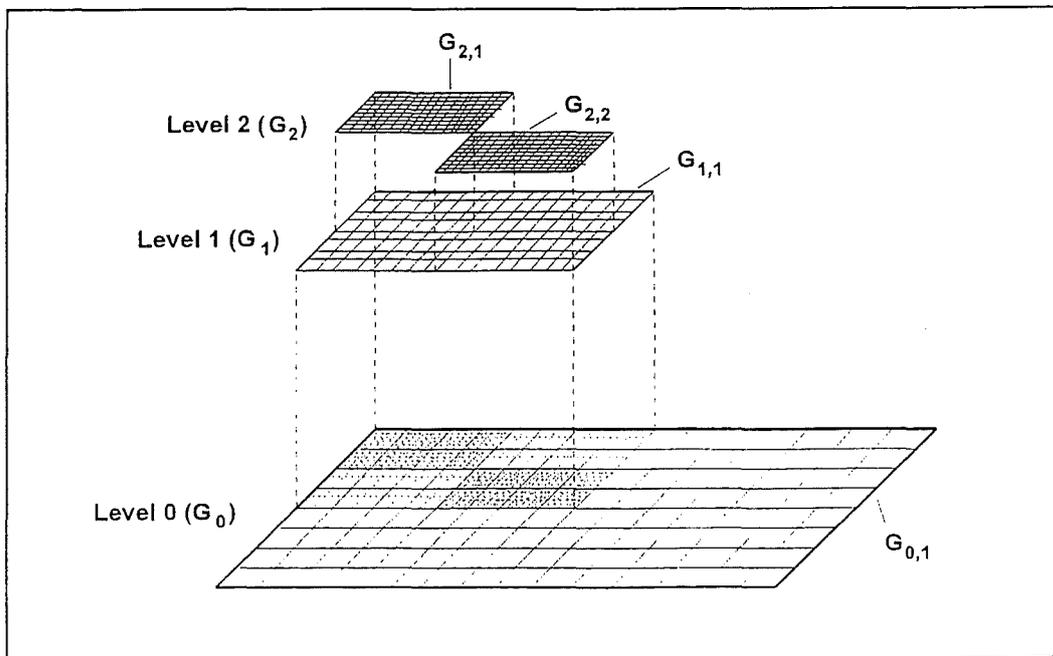


Abb.2.6.2: Die AMR-Gitterhierarchie: Beim AMR-Algorithmus werden die feiner werdenden, eingebetteten Rechteckgitter G_{ij} innerhalb einer Hierarchie von Verfeinerungsebenen (Level) G_j eingeordnet. So liegen nur strukturierte Gitter mit verschiedenen Auflösungen vor.

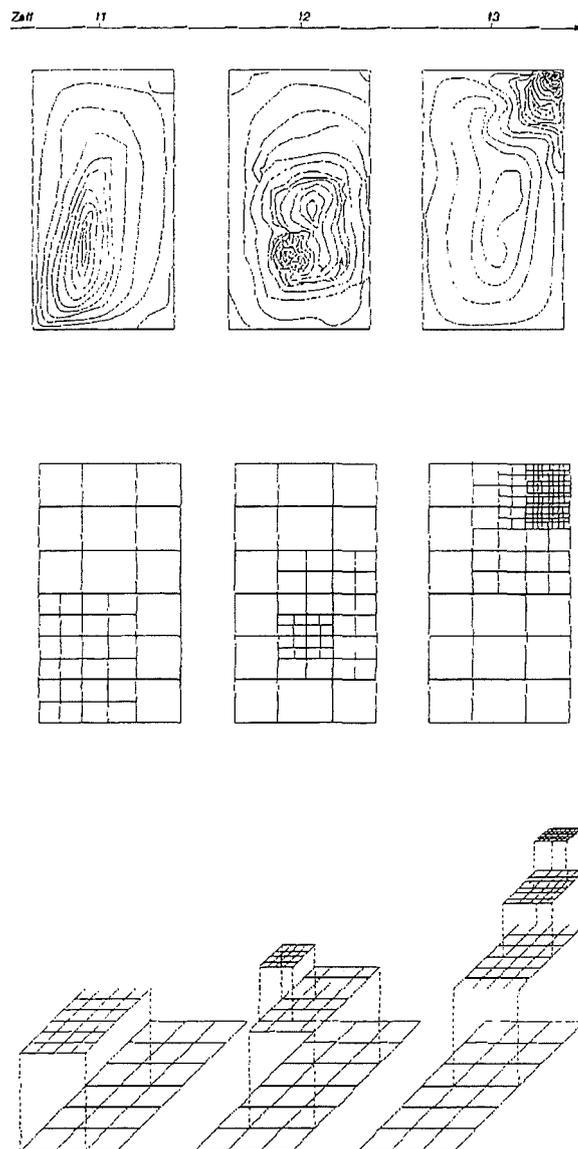


Abb.2.6.3: Prinzip der dynamischen Gitteradaption beim AMR-Algorithmus: Feinere Teilgitter werden in Abhängigkeit von physikalischen oder mathematischen Kriterien während der Programmlaufzeit (dynamisch) auf den verschiedenen Level erzeugt oder entfernt. Die obere Bildreihe führt drei Isolinien-Bilder auf, die den aufeinanderfolgenden Zeitpunkten t_1 , t_2 und t_3 zugeordnet sind und die die Entwicklung von Bereichen großer Gradienten einer physikalischen Größe darstellt. Die mittlere Bildreihe zeigt das Einsetzen oder Entfernen von Teilgittern in Abhängigkeit dieser großen Gradienten. Die untere Bildreihe demonstriert die Umsetzung dieser Gitteradaption beim AMR-Algorithmus: es entsteht eine sich dynamisch verändernde Gitterhierarchie, die aus strukturierten, kartesischen Teilgittern verschiedener Feinheit besteht.

3 Programme und Programmentwicklungen

HAMR

Die Grundlage zum Testen und Erlernen des Adaptionalgorithmus AMR sowie für eigene auf AMR basierende Programmentwicklungen bildet das Programm „Hyperbolic Adaptive Mesh Refinement“ (HAMR, [12]), dessen Quellcode unter der WWW-Adresse <http://www.nersc.gov/research/CCSE/software/software.html> am „Center for Computational Science and Engineering“ (CCSE) des „Lawrence Berkeley National Laboratory“ (LBNL) frei erhältlich ist. HAMR ist ein adaptiver Anwendungscode zur Lösung der Eulergleichungen der Gasdynamik in ein, zwei oder drei Raumdimensionen auf strukturierten Gittern, bei dem der AMR-Algorithmus für die Gitteradaption benutzt wird. In HAMR wurde das AMR-Verfahren als eigenständige Adaptionmethode und getrennt vom Lösungsverfahren für die Eulergleichungen hauptsächlich objekt-orientiert mit der Programmiersprache C++ implementiert. Nur numerisch aufwendige Programmteile wurden in Fortran77-Unterprogramme umgesetzt, sodaß insbesondere das Lösungsverfahren in Fortran77 programmiert wurde. Dabei existieren diese Programmteile getrennt von der AMR-Implementierung und sind nur über eine Schnittstelle an diese gekoppelt. So werden in HAMR die Vorteile des objekt-orientierten Programmierens mit C++ zur Umsetzung der komplexen Daten- und Verwaltungsstrukturen des AMR-Verfahrens für eine autonome, übersichtliche, wiederverwendbare und effiziente AMR-Implementierung genutzt [11], die zudem bereits für dreidimensionale Anwendungen auf kartesischen Gittern ausgelegt ist. In dieser Form wird HAMR seit vielen Jahren am CCSE eingesetzt, sodaß eine gut ausgetestete Version vorliegt. Diese Eigenschaften prädestinieren HAMR zum einen als adaptives Anwendungsprogramm mit einem sehr guten Lösungsverfahren (gesplittetes und ungesplittetes Godunov-Verfahren erster und zweiter Ordnung von Colella [9,10]) zum Ertesten der Leistungsfähigkeit des AMR-Algorithmus bei der Berechnung von 2D- und 3D-Gasströmungen, zum anderen liefert es die Basis zur Erstellung eines eigenen, mittels AMR adaptiven DET3D-

Programms. In HAMR sowie in den beiden darauf aufbauenden Programmen ist als Verfeinerungskriterium eine Abschätzung des Diskretisierungsfehlers der Näherungslösung implementiert (siehe z.B. [15]). Dieses ist jedoch erweiterbar oder kann durch ein anderes Kriterium ausgetauscht werden.

HAMRObj3D

HAMR ist geeignet zur Lösung reibungsfreier, nicht leitender, einkomponentiger 3D-Gasströmungen innerhalb eines quaderförmigen, kartesischen Rechengitters. Jedoch ist die Berechnung der Umströmung von Hindernissen nicht möglich, da das Programm keine sich im Strömungsfeld befindlichen Körper vorsieht. Die Berücksichtigung von umströmten Objekten innerhalb des AMR-Verfahrens und innerhalb des damit gekoppelten Löser ist jedoch eine wichtige Voraussetzung zur Berechnung der in der Einführung beschriebenen Strömungen. Deshalb wurde das HAMR-Programms hinsichtlich der Erfassung von Körperumströmungen erweitert. Dabei richten sich die behandelbaren Körper sowie deren Erfassung an den Vorgaben des DET3D-Codes aus. Die Implementierung der Körpererfassung erfolgte jedoch fast ausschließlich als eigenständiges, modulares C++ Programmteil, dessen Einbau in HAMR aufgrund der übersichtlichen und auf Modifizierbarkeit ausgelegten AMR-Implementierung relativ einfach und ohne einen Umbau anderer Strukturen durchführbar war. Das so entstandene Programm heißt HAMRObj3D und ermöglicht in seiner ersten Version die AMR-gestützte Berechnung von dreidimensionalen Gasströmungen in einem quaderförmigen Rechengbiet, das bestimmte Hindernisse enthält. HAMRObj3D benutzt dabei unverändert das in HAMR gegebene, gesplittete Godunov-Verfahren erster Ordnung.

AMRDET3D

Ein entscheidendes Kriterium der Auswahl von HAMR war die in diesem Programm enthaltene, vom Lösungsverfahren getrennte AMR-Implementierung. Dieser Autonomie-Charakter ermöglicht einen vereinfachten, überschaubaren Austausch des gegebenen Löser durch einen anderen. In diesem Sinne wurde im Programm HAMRObj3D der HAMR-Löser herausgenommen und die AMR-Implementierung mit den in

DET3D enthaltenen Strömungslösungsroutinen gekoppelt. Da DET3D ein C-Programm ist, entstand bei der Kopplung mit HAMRObj3D ein C++/Fortran77/C-Code, der die erste Version von AMRDET3D darstellt. AMRDET3D ermöglicht in der momentanen Form die Berechnung mehrkomponentiger, dreidimensionaler Gasströmungen, wobei auch bestimmte Hindernisse berücksichtigt werden können. Es benutzt dabei das in DET3D implementierte gesplittete HLL-Verfahren erster Ordnung für quaderförmige, kartesische Gitter. Jedoch beinhaltet AMRDET3D gegenüber DET3D auch das AMR-Verfahren und ermöglicht daher mittels Gitteradaption einen effizienten Einsatz gegebener Rechenressourcen. Die Hauptarbeit im Umbau von HAMRObj3D hin zu AMRDET3D lag dabei in einer geeigneten Anpassung der Schnittstellen zwischen der AMR-Implementierung in HAMRObj3D und der Löserrountinen aus DET3D, die ja jeweils für sich bereits fertig programmiert vorlagen. Die vorliegende AMRDET3D-Version wird ausgebaut, um im Bereich des Löser die komplette Funktionalität von DET3D zu erhalten.

4 Testrechnungen

Um die Programme HAMR, HAMRObj3D und AMRDET3D vorzuführen und um insbesondere die Leistungsfähigkeit des AMR-Algorithmus zu demonstrieren, werden vier Testrechnungen aufgeführt. Die Rechnungen wurden dabei alle auf einer IBM RS/6000 Workstation unter AIX 4.1 durchgeführt.

Zur Visualisierung wurde entweder Graphtool oder AmrVis eingesetzt. Graphtool dient der Darstellung von Isolinienbilder bei 2D-HAMR-Rechnungen und ist zusammen mit einer auch für HAMR notwendigen C++ Klassenbibliothek namens BoxLib [18] wie HAMR am CCSE frei erhältlich. Das Visualisierungsprogramm AmrVis [1] ist dort ebenfalls kostenfrei über das Internet zu bekommen. HAMR erzeugt bei der Berechnung von zwei- oder dreidimensionalen Strömungen eine speziell für AmrVis geeignete Ausgabe, die insbesondere die Existenz der AMR-Gitterhierarchie

berücksichtigt und visualisiert. Mit AmrVis können Farbbilder zur Darstellung der Verteilung aller Zustandsgrößen der berechneten Strömungsfelder erzeugt werden. Im 3D-Fall werden Schnitte durch das Rechengebiet parallel zu den Koordinatenachsen gezeigt. Die ersten beiden Beispiele führen 2D-Rechnungen mit HAMR auf und dienen insbesondere dazu, den AMR-Algorithmus vorzuführen. Die beiden anderen Tests demonstrieren Rechnungen mit HAMRObj3D und AMRDET3D.

HAMR-Rechnungen

Das erste Beispiel zeigt eine 2D-Simulation der Interaktion zwischen einer ebenen Stoßwelle und einer kreisförmigen Gasblase, die sich vom umgebenden Gas nur durch eine höhere Dichte unterscheidet ("Dichtebase"). Der Stoß befindet sich anfangs noch parallel zum rechten Rand des rechteckigen Rechengebiets und läuft auf die im Umgebungsgas ruhende Dichtewolke zu. Die Abb.2.6.4 zeigt links ein Isolinienbild dieser Dichteanfangsverteilung. Nach dem Aufprall des Stosses auf die Blase, wird diese zerstört, dabei entstehen verschiedene Wellen. Das rechte Bild der Abb.2.6.4 zeigt dieses Strömungsbild kurz vor Rechnungsende. Die HAMR-Rechnung wurde dabei mit drei möglichen Verfeinerungslevel im AMR-Algorithmus durchgeführt. Das größte Gitter, das das gesamte Rechengebiet abdeckte, besitzt eine Auflösung von 40x30 Zellen. Die in den Dichtekonturbildern der Abb.2.6.4 zu sehenden Rechtecke zeigen die Lage der AMR-Teilgitter feinerer Auflösung. Da der Verfeinerungsfaktor von Level zu Level zwei betrug, besitzen die Gitter mit der zweitgrößten Auflösung eine effektive Auflösung von 80x60 Zellen, die feinsten Gitter besitzen eine effektive Auflösung von 320x240 Zellen¹. Die feinsten Teilgitter wurden nur dazu benutzt, die durch den Aufprall des Stosses entstandenen Wellen möglichst genau zu berechnen. Das restliche Strömungsfeld wird weniger fein oder sogar grob aufgelöst. Ein Vergleich dieser Rechnung mit einer HAMR-Rechnung ohne Gitteradaption, wobei dann die Auflösung mit 320x240 Gitterzellen über das gesamte Rechengebiet so fein war wie bei Rechnung mit

¹ D.h. ein Gitter der maximal feinen Auflösung über das gesamte Rechengebiet hinweg besäße diese Zellenanzahl.

AMR nur auf den feinsten Teilgittern, zeigt gleichwertige Lösungen, d.h. die Rechnung mit AMR auf teilweise sehr groben Gittern hat kein Nachteil auf die Qualität der Lösung. Jedoch zeigt die Tabelle 1 eine Reduzierung des Rechenaufwandes für Gitterzellenintegrationen um ca. 70% und eine Reduzierung der Rechenzeit auf ungefähr die Hälfte bei Einsatz der Gitteradaption mit AMR. Auch der zweite Test mit HAMR zeigt die Leistungsfähigkeit des AMR-Algorithmus und seiner Implementierung in HAMR an einem 2D-Beispiel. Es wird ein barotrope Wirbelbildung in einer HAMR-Rechnung einmal mit und einmal ohne Verwendung von AMR gezeigt, letzteres dann jedoch auf einem insgesamt feinen Gitter. Dabei wird der Einfluß schwacher Kompressibilitätseffekte auf eine nahezu inkompressible Grundströmung in einem rechteckigen Rechengebiet simuliert. Die Anfangsdichteverteilung besitzt dabei eine Dichteschichtung, die in der Mitte des Gebiets einen Sprung vorweist (Abb.2.6.5, oben). Es bewegt sich nun eine schnelle Druckwelle über diese Dichteverteilung, die zur Ausbildung von Wirbeln führt, die auf dem unteren Bild der Abb.2.6.5 zu sehen sind. Die HAMR-Rechnung mit AMR startete auf einem Grundgitter der Auflösung von 100x20 Zellen, erlaubt waren zwei Verfeinerungsstufen, die zu einer maximalen, effektiven Auflösung von 400x80 Zellen führte. Wieder zeigen die in den Bildern zu erkennenden Rechtecke die Lage feinerer Teilgitter der AMR-Gitterhierarchie. Eine feinere Diskretisierung wurde nur in der Umgebung der Wirbel durchgeführt. Der Vergleich mit der Rechnung ohne AMR auf einem insgesamt 400x80 feinen Gitter führt zu gleichwertigen Ergebnissen, jedoch war bei Rechnung mit AMR ein Verkleinerung des Rechenaufwandes für Gitterzellenintegrationen um ungefähr 75% festzustellen, die Rechenzeit verringerte sich um 50% (Tabelle 2).

HAMRObj3D- und AMRDET3D-Rechnung

Das dritte Beispiel zeigt eine HAMRObj3D-Rechnung. In einem quaderförmigen Rechengebiet liegt in einer von links nach rechts fließenden Strömung am rechten Rand ein quaderförmiger Körper. Das linke Bild der Abb.2.6.6 zeigt die zugehörige Anfangsverteilung der Dichte in einem Schnitt

parallel zum vorderen Rechengebietsrand ungefähr in der Rechengebietsmitte. Die auf den Quader prallende Strömung wird reflektiert, wodurch ein sich nach links bewegender Stoß entsteht (rechts in Abb.2.6.6). Die HAMRObj3D-Rechnung erfolgte mit einem Grundgitter von 20x20x20 Zellen und einem Verfeinerungslevel mit Verfeinerungsfaktor vier, sodaß ein effektiv feinste Auflösung von 80x80x80 Zellen vorlag. Ein insgesamt so feines Gitter hätte 512000 Gitterzellen, so jedoch werden Gitter dieser Feinheit nur um den Quader- und Stoßbereich plaziert, was in dem abgebildeten Zeitschritt zu insgesamt nur 238400 Gitterzellen führt. Das vierte Beispiel zeigt ein AMRDET3D-Rechnung. In einem würfelförmigen Rechengebiet befindet sich an der linken Wand ein halbkugelförmiger Helium-Einschluß, während das restliche Strömungsfeld mit Stickstoff gefüllt ist. Die Gase befinden sich in Ruhe, jedoch liegt in der Heliumblase ein höherer Druck und eine größere Dichte vor. Die Abb.2.6.7 zeigt links die Dichteverteilung bei einem Schnitt in der Rechengebietsmitte parallel zum Boden im achten Zeitschritt. Das rechte Bild zeigt in demgleichen Schnitt die Geschwindigkeitsverteilung in y-Richtung. Die AMR-gestützte Rechnung erfolgte dabei auf einem 20x20x20-Grundgitter, zwei Verfeinerungslevel mit dem Verfeinerungsfaktor zwei führten zu feinsten Gittern der effektiven Auflösung 80x80x80. Die Rechtecke in den Bildern zeigen die Lage der AMR-Teilgitter. Nur die Umgebung der Blase wurde fein aufgelöst, für das restliche Gebiet genügte das grobe Gitter.

Tabelle 1: Gitterzellenintegrationen und Rechenzeiten bei HAMR-Rechnung ohne und mit AMR beim "Dichteblase"-Beispiel.

	Rechnung ohne AMR Gitter 320x240	Rechnung mit AMR Grob-gitter 40x30 Effektiv feinste Auflösung: 320x240
Zellenintegrationen	27.684×10^6	8.43232×10^6
CPU-Rechenzeit	23min	13min

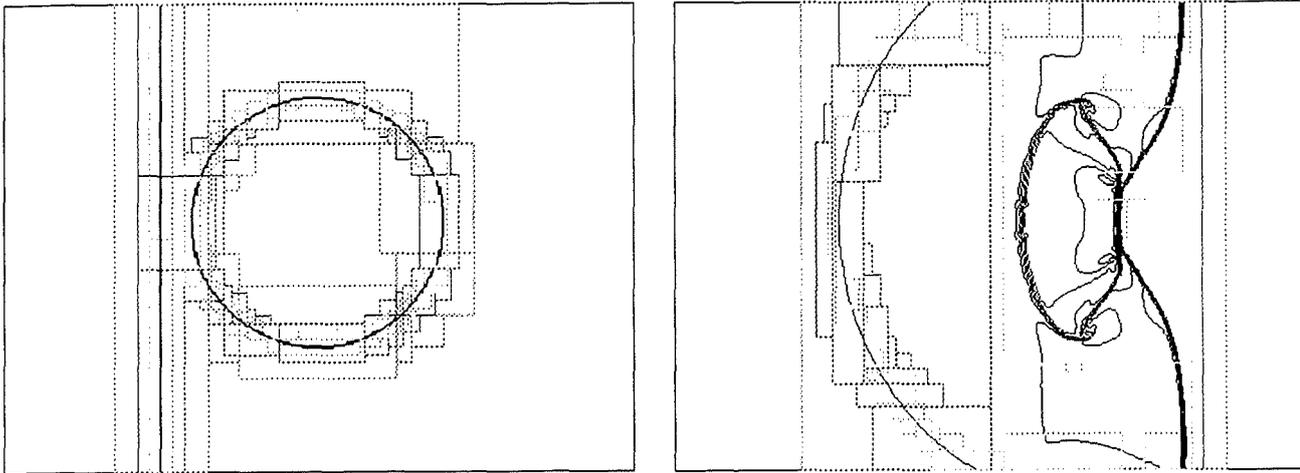


Abb.2.6.4: Dichte-Isolinienbilder am Rechnungsanfang (links) und nach 40 Zeitschritten der HAMR-Rechnung im „Dichteblaste“-Beispiel. Die Rechtecke zeigen die Lage aller AMR-Teilgitter feinerer Auflösung an.

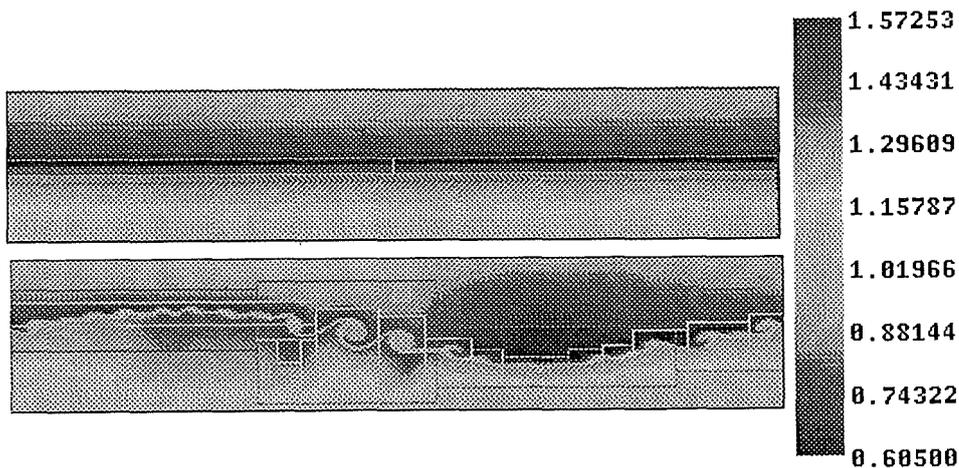


Abb.2.6.5: Dichteverteilungen am Anfang (oben) und am Ende der HAMR-Rechnung beim Beispiel „barotrope Wirbelbildung“. Die Rechtecke zeigen die Lage der feineren AMR-Teilgitter.

Tabelle 2: Gitterzellenintegrationen und Rechenzeiten bei HAMR-Rechnung ohne und mit AMR beim Beispiel „barotrope Wirbelbildung“.

	Rechnung ohne AMR Gitter 400x80	Rechnung mit AMR Grobgitter 100x20 Effektiv feinste Auflösung: 400x80
Zellenintegrationen	206.368×10^6	$50,144272 \times 10^6$
CPU-Rechenzeit	3h	1.45h

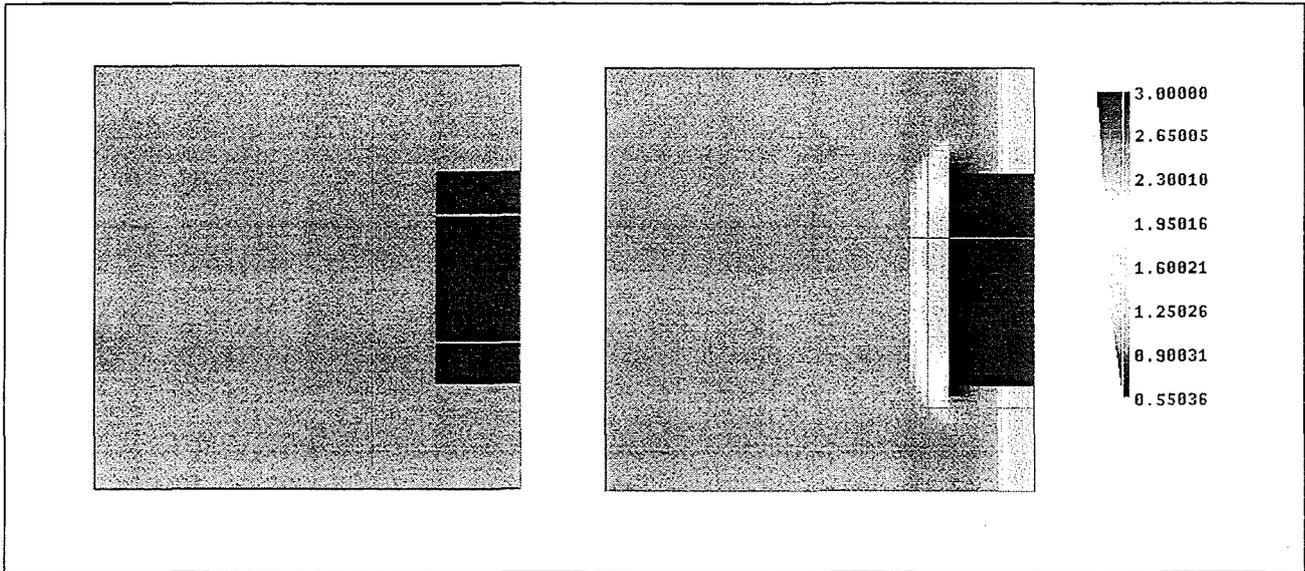


Abb.2.6.6: Dichteverteilungen am Rechnungsanfang (links) und nach 10 Zeitschritten der HAMRObj3D-Rechnung. Ein an der rechten Wand liegender quaderförmiger Körper wird konstant angeströmt, sodaß es zu einer Reflektion der Strömung kommt. Zu sehen ist ein Schnitt parallel zum vorderen Rand des Rechengebiets ungefähr in der Rechengebietsmitte. Die Rechtecke zeigen die Lage von AMR-Teilgittern feinerer Auflösung.

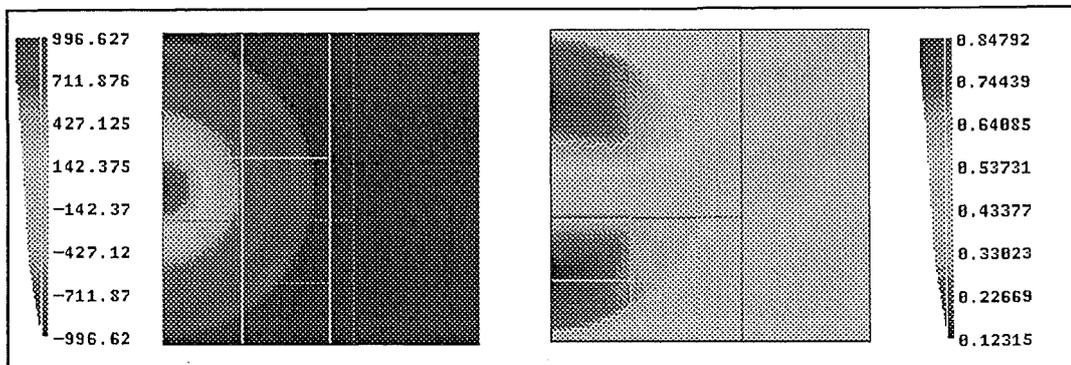


Abb.2.6.7: Dichteverteilung (links) und Verteilung der y-Geschwindigkeit im achten Zeitschritt der der AMRDET3D-Rechnung. Ein an der linken Wand liegender, halbkugelförmiger Heliumeinschluß breitet sich in das umgebende Stickstoff aus, weil die Heliumblase gegenüber dem umgebenden Stickstoff eine größere Dichte und einen höheren Druck besitzt. Beide Gase sind anfänglich in Ruhe. Zu sehen ist ein Schnitt parallel zum Boden des Rechengebiets ungefähr in der Rechengebietsmitte. Die Rechtecke zeigen die Lage von AMR-Teilgitter feinerer Auflösung

5 Zusammenfassung und Ausblick

Durch Einführung des adaptiven Gitterverfahrens „Adaptive Mesh Refinement“ (AMR) und des darauf basierenden Strömungsmechanikcodes HAMR liegt eine leistungsfähige AMR-Implementierung vor, die als Grundlage zur eigenen Programmentwicklung dient. Tests mit HAMR zeigen, daß durch den Einsatz von AMR der Rechenaufwand und die Rechenzeiten deutlich reduziert werden können. Die Erweiterung von HAMR zwecks einer Berücksichtigung umströmter Körper (HAMRObj3D) und die darauf aufbauende Kopplung mit DET3D durch einen Austausch des in HAMR gegebenen Löser mit dem aus DET3D sind die ersten Schritte zu dem Code AMRDET3D, eines mittels AMR adaptiven DET3D-Programms. In Tests zeigen die jeweils ersten Versionen von HAMRObj3D und AMRDET3D zufriedenstellende Ergebnisse, jedoch ist die Entwicklung an diesen Programmen noch nicht abgeschlossen, da eine Anzahl von weiterführenden, aber notwendigen Teilaufgaben, wie zum Beispiel eine Anpassung auf Finite-Volumen-Verfahren höherer Ordnung, die Berücksichtigung von kleinen Körpern auf groben Gittern oder die Anpassung des AMR-Algorithmus an Körper, verbessert oder eingebaut werden müssen. Desweiteren ist die Einführung einer kartesischen Gittermethode zu prüfen, mit der die Berechnung der Umströmung von im Strömungsfeld liegenden Körpern verbessert werden kann. Schließlich sind geeignete Schnittstellen für eine weiterführende Visualisierung notwendig.

Dabei ist die Erweiterung von DET3D zu einem adaptiven Anwendungsprogramm nur der erste Schritt innerhalb der INCA Code STRUCTURE, eines im Forschungszentrum Karlsruhe entwickelten Programmpakets zur umfassenden numerischen Simulation des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzunfällen in Druckwasserreaktoranlagen. Denn erst die Kombination aller in diesem Paket enthaltenen Anwendungsprogramme mit Gitteradaptionsverfahren wie AMR ermöglichen einen effizienten Einsatz gegebener Rechenressourcen und damit insbesondere realistische Simulationen in vertretbaren Rechenzeiten.

Literatur

- [1] V. Beckner. Amrvis User's Guide Center for Computational Sciences and Engineering (CCSE), National Energy Research Supercomputer Center (NERSC), 1996. Als HTML-Test im WWW unter der Adresse:
<http://www.nersc.gov/research/CCSE/software/software-html> erhältlich.
- [2] J. Bell, M.J. Berger, J. Saltzman, and M. Welcome. Three-Dimensional Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal Sci. Comput.*, 15(1):127-138, January 1994.
- [3] M. J. Berger and P. Colella. Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 82:64-84, 1989.
- [4] M. J. Berger and R. LeVeque. Cartesian Meshes and Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations. In Engquist, B. and B. Gustafsson, editor, *Third International Conference on Hyperbolic Problems; Theory, Numerical Methods and Applications*, pages 67-73. Chartwell-Brat, 1990.
- [5] M. J. Berger and J. Olinger. Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, 53:484-512, 1984.
- [6] W. Breitung. Analyse und Kontrolle des Wasserstoffverhaltens bei Kernschmelzenunfällen. *Nachrichten des Forschungszentrums Karlsruhe, Technik und Umwelt*, 29(4/97):347-362, 1997.
- [7] W. Breitung und A. Kotchourko. Numerische Simulation von turbulenten Wasserstoffverbrennungen bei schweren Kernreaktorunfällen. *Nachrichten des Forschungszentrums Karlsruhe, Technik und Umwelt*, 28(2-3/96):175-191, 1996.

[8] K. D. Brislawn, D. L. Brown, G. S. Chesshire, and J. S. Saltzman. Adaptively-Refined Overlapping Grids For The Numerical Solution Of Systems Of Hyperbolic Conservation Laws. Draft-Version under preparation, US-Department of Energy, Los Alamos National Laboratory, LA-UR-95-257, Proceedings of the ICASE/LaRC Workshop on Adaptive grid Methods, November 7-9, 1994, im WWW erhältlich unter der Adresse : <http://www.c3.lanl.gov/coc19/pubs/pubs/teams/Numerical.shtml>, 1994.

[9] P. Colella. A direct Eulerian MUSCL scheme for gas dynamics. Journal Of Computational Physics, 82(1):64-84, May 1989.

[10] P. Colella. Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation laws. Journal Of Computational Physics, (87):171-200, 1990.

[11] W.Y. Crutchfield and M.L. Welcome. Object-oriented Implementation of the Adaptive Mesh Refinement Algorithm. Scientific Programming, 2:145-156, 1993. Im WWW als HTML-Text unter der Adresse: <http://www.nersc.gov/research/CCSE/people/wyc/wyc.html> erhältlich.

[12] J. A. Greenough. A Users's Guide for Using HAMR. Center for Computational Sciences and engineering (CCSE), National Energy Research Supercomputer Center (NERSC), September 1996. Im WWW als HTML-Text unter der Adresse: <http://www.nersc.gov/research/CCSE/software/hamr.manual/doc.htm> erhältlich.

[13] R. J. LeVerque. Numerical Methods for Conservation Laws. Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.

[14] C.-D. Munz. Godunov-Typ Verfahren für die Gleichungen der kompressiblen Strömungsmechanik. KfK-Bericht 5058, Kernforschungszentrum Karlsruhe, August 1992.

[15] H. J. Neeman. Autonomous Hierarchical Adaptive Mesh Refinement For Multiscale Simulations. PhD thesis, Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1996. Im WWW unter der Adresse:

<http://zeus.ncsa.uiuc.edu:8080/~hneeman/hamr.html> erhältlich.

[16] M. Parashar and J. C. Browne. On Partitioning Dynamic Adaptive Grid Hierarchies. Präsentiert auf der HICSS-29, Januar 1996; erhältlich im WWW unter der Adresse:

http://www.ticam.utexas.edu/~parasharDAGH/public_html/DAGH,1996.

Department of Computer Science, University of Texas at Austin.

[17] J. J. Quirk. An Adaptive Grid Algorithm for Computational Shock Hydrodynamics. PhD thesis, College of Aeronautics, Cranfield Institute of Technology, 1991.

[18] Software Infrastructure Group, Center for Computational Sciences and Engineering (CCSE), Lawrence Berkely National Laboratory (LBNL). BoxLib, 1996. Im WWW unter der Adresse:

<http://www.nersc.gov/research/CCSE/software.html> verfügbar.

32.21.02 Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel

I. Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS)

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

Zusammenfassung

Zur Untersuchung der Vorvermischungsphase einer Dampfexplosion wurde in der QUEOS-Anlage die zweite Serie von Experimenten mit heißen Kugeln bei den höchsten Temperaturen beendet. Bei diesen Versuchen wurde der Dampfblasenanteil mit einer neu konstruierten Meßeinrichtung zum erstenmal zuverlässig gemessen. Der Bericht stellt die Ergebnisse von zwei Versuchen mit niedriger Kugelvolumenfraktion zwei Versuchen mit hoher Volumenfraktion gegenüber; jeweils ein Versuch bei geringer Unterkühlung und ein Versuch bei gesättigtem Wasser. Die Ergebnisse vertiefen das Verständnis der Vorgänge während der Vorvermischungsphase bei verschiedenen Anfangsbedingungen und liefern neue mehr das Detail beschreibende Daten zum Vergleich mit Codeergebnissen. Zusammen mit den früheren experimentellen Ergebnissen aus den QUEOS-Experimenten und anderen lassen sich einige Aussagen über die Menge des heißen Materials, das mit Wasser gut vermischt wird, für verschiedene Fälle machen.

1. EINLEITUNG

Das experimentelle Programm zur Untersuchung der Vorvermischungsphase einer Dampfexplosion mit heißen Kugeln anstelle von Schmelze ist nahezu abgeschlossen. Während in einer ersten Versuchsserie ein Kugelstrahldurchmesser von 180 mm verwendet wurde, wurde in der zweiten Serie der Durchmesser auf 100 mm reduziert, was bei gleicher Kugelmenge zu längeren Strahlen geführt hat [1-4]. Die Unterschiede im Ergebnis wurden im letzten Jahresbericht beschrieben. Die zweite Versuchsserie wurde mit den drei Kugelsorten (ZrO_2 , \varnothing 5 mm und 10 mm und Mo \varnothing 4.3 mm) bei hohen Temperaturen (2100-2550 K) beendet. Außerdem wurden noch einige Versuche bei unterkühltem Wasser durchgeführt. Gleichzeitig wurde bei die-

sen Versuchen der Dampfblasenanteil mit einer neu konstruierten Meßeinrichtung zum erstenmal zuverlässig gemessen. Deswegen wird hier insbesondere über diese Messungen berichtet werden. Das experimentelle Programm wird mit einigen speziellen Versuchen beendet werden. Dies werden Versuche sein mit (1.) Wolframkugeln, (2.) mit einem geschlossenen Versuchsbehälter und (3.) mit drei dünnen Kugelstrahlen anstelle des einen dicken Strahles.

2. MESSUNG DES DAMPFBLASENANTEILS

In einer Tiefe von 60 cm unterhalb der Wasseroberfläche (40 cm über dem Behälterboden) befindet sich ein horizontaler Sondenträger genau in der Behälterachse. Der Träger ist 5 mm breit und ca. 50 mm hoch. Die Kugelwolke wird durch diesen Träger geteilt, so daß unterhalb dieses Trägers keine sinnvolle Messung möglich ist. Die Meßsonden, bestehend aus einem 2 mm dünnen isolierten Koaxialdraht, ragen deswegen seitlich, waagrecht und im rechten Winkel aus dem Träger heraus, mit der Meßspitze ca. 30 mm vom Träger entfernt. Auf jeder Seite des Trägers sind 25 Sonden im Abstand von 20 mm angebracht, so daß die Messungen für den Kernbereich in zwei parallelen Reihen, im Abstand von ca. 60 mm, über eine Länge von 500 mm erfolgen.

Gemessen wird der Widerstand zwischen dem inneren und dem äußeren Leiter des Koaxialdrahtes. Der äußere Leiter liegt auf einer gemeinsamen Masse. Ist die Spitze des inneren Leiters, die etwa 1.5 mm frei liegt, von einer Dampfblase umschlossen, so steigt der Widerstand. Dieser Wert wird in eine digitale 1 verwandelt, während ein niedrigerer Widerstand Wasser anzeigt und mit 0 codiert wird. Die Abtastrate beträgt 12.5 kHz. Die Daten werden über ein Zeitintervall von 8 ms gemittelt. Das Ergebnis liegt dann zwischen 0 und 1. Werden die Koaxialdrähte von Kugeln getroffen, so geben sie nach und federn in ihre Ausgangslage zurück, ohne in der Regel Schaden zu nehmen. Trotzdem fallen in jedem Versuch ein oder mehrere Sonden aus, so daß nach einigen Versuchen die Meßvorrichtung ausgebaut und erneuert werden muß.

3. ERGEBNISSE

Die Tabelle 1 zeigt die Daten der durchgeführten Versuche. Neben diesen Versuchen wurden noch einige Experimente mit kalten Kugeln wiederholt. Es war geplant, die Kugeltemperaturen bis auf 2600 K zu steigern. Da ZrO₂-Kugeln teilweise schon bei 1800 K begannen zusammenzubacken, konnten hiermit nur maximal 2250 K erreicht werden. Zwar war dies bei den Molybdänkugeln in geringerem Maße der Fall, jedoch entstand bei hohen Temperaturen ein Mo-Oxidrauch, der die Sicht auf die fallenden Kugeln behinderte, so daß die Eintrittsbedingungen nicht genau bestimmt werden konnten. Deswegen wurde nur ein Versuch (Q45) bei 2550 K durchgeführt.

Tabelle 1: Experimente der 2. Serie bei hohen Kugeltemperaturen

Nr.	Material	Ø [mm]	Masse [kg]	Volumen [cm ³]	Anzahl der Kugeln	Temp. [K]	Wasser [°C]
40	ZrO ₂	5	2.61	650	6500	1800	95
41	ZrO ₂	5	1.25	330	3240	2250	100
42	ZrO ₂	5	2.40	630	6220	2100	100
47	ZrO ₂	5	10.0	2600	25900	1800	97
43	ZrO ₂	10	7.0	1900	2340	2250	100
44	ZrO ₂	10	11.9	3230	3982	2200	100
45	Mo	4.3	7.9	1415	19330	2550	100
48	Mo	4.3	10.0	1800	24540	2000	100

Zwei Versuche wurden mit einer geringen Unterkühlung des Wassers von 3 bzw. 5 K durchgeführt. Bei den anderen war das Wasser im gesamten Behälter auf Siedetemperatur. Durch das Zusammenbacken der Kugeln im Ofen ergaben sich bei einigen Versuchen sehr kleine Kugelmengen, die ins Wasser fielen. Dabei breiten sich die Kugeln im Wasser schnell zu einer kugelförmigen Wolke geringer Dichte aus, die sich nur noch wenig verändert, während sie zu Boden sinkt (s. Abb. 1). Große Kugelmengen fallen, wie früher beschrieben, völlig anders. Sie bilden anfangs einen Gasschlauch im Wasser, durch die die nachfolgenden Kugeln fallen und die Kugel-front im Wasser beschleunigen. Sie erreichen dadurch wesentlich früher den Boden des Behälters (s. Abb.1).

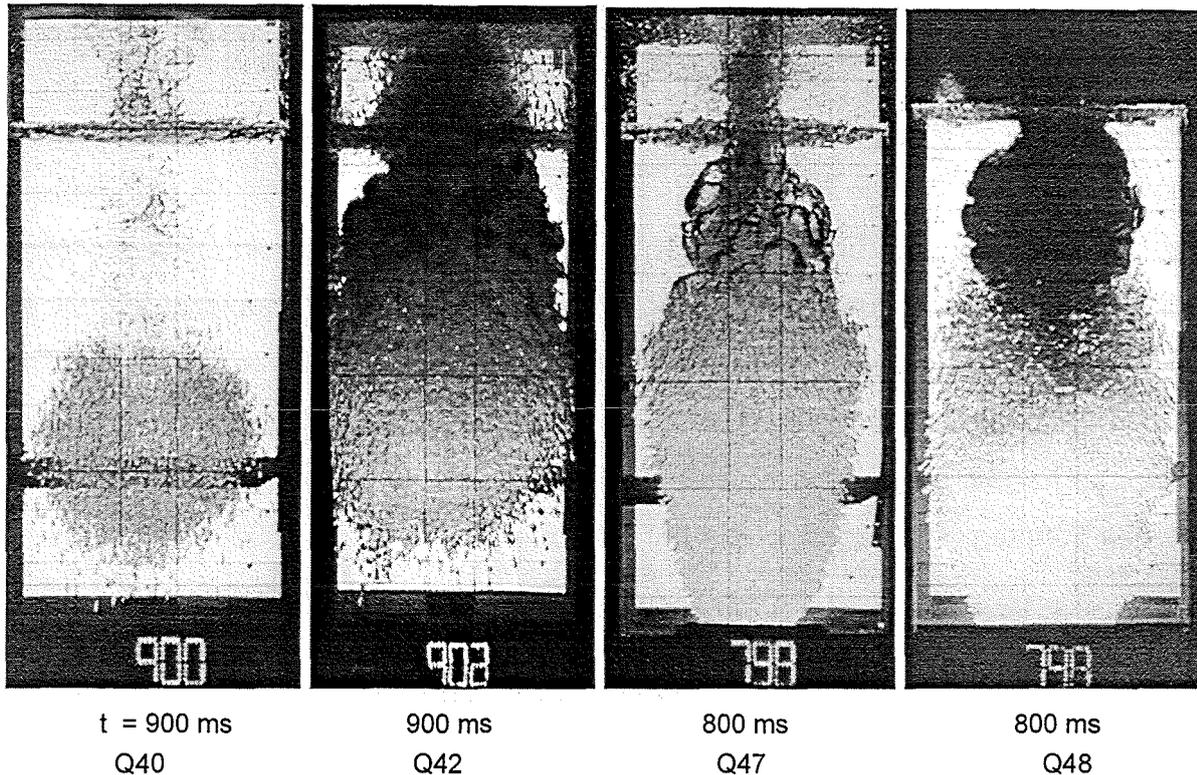
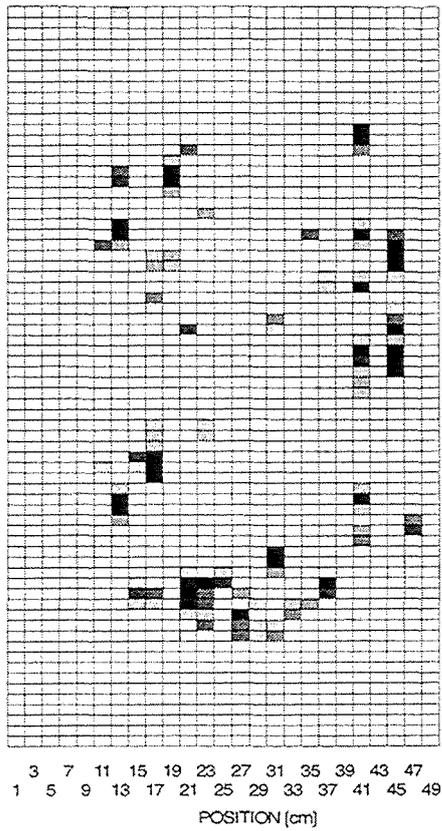


Abb. 1. Fotos der vier hier beschriebenen Versuche

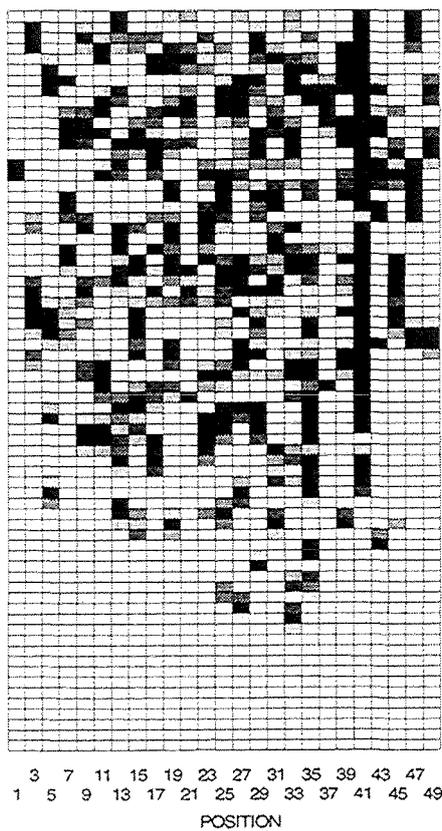
Hier sollen die Ergebnisse von zwei Versuchen, bei denen die Kugelwolke im Wasser eine niedrige Dichte hat (niedrige Kugelvolumenfraktion, Q40 und Q42), zwei Versuchen mit hoher Dichte (Q47 und Q48) gegenübergestellt werden; jeweils ein Versuch bei geringer Unterkühlung und ein Versuch bei gesättigtem Wasser.

Die über 8 ms gemittelten Ergebnisse jeweils einer Reihe von 25 Blasensonden sind in Abb.2 für die vier Versuche dargestellt. Die Zeitachse läuft dabei von unten nach oben. Der Blasenanteil ist durch den Graukeil gegeben, weiß entspricht 0% Dampf und schwarz 100%. Bei den Versuchen Q40 und Q42 waren alle 25 Sonden der gezeigten Sondenreihe intakt. Bei Q47 war die Sonde an der Position 39 defekt und bei Q48 waren zwei Sonden (32 und 34) von Anfang an defekt; die Sonde 30 wurde während des Versuches zerstört. Die Ergebnisse der jeweils zweiten Sondenreihe (nicht gezeigt) sind ähnlich und unterscheiden sich nur im Detail.

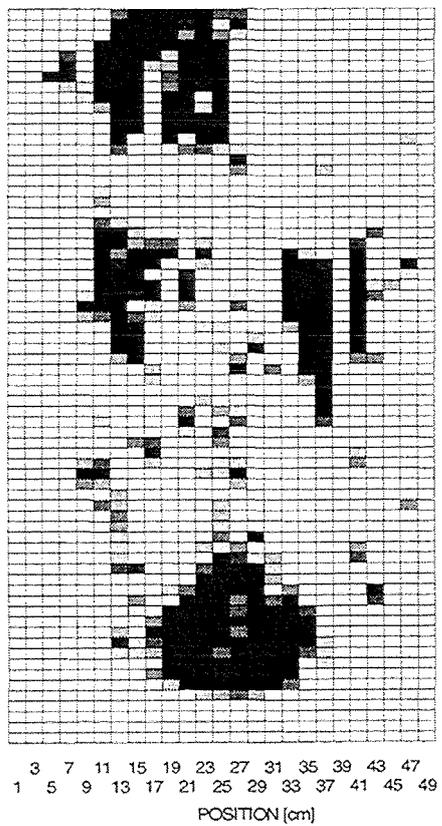
Für einen einfachen quantitativen Vergleich und den Vergleich mit Rechenergebnissen wurden die Daten weiterverarbeitet. Die Daten von je drei Sonden im Zentrum und drei Sonden am Rand, jeweils von beiden Reihen, also insgesamt je 6 Sonden, wurden gemittelt. Das ergibt Mittelwerte über horizontale Flächen von etwa



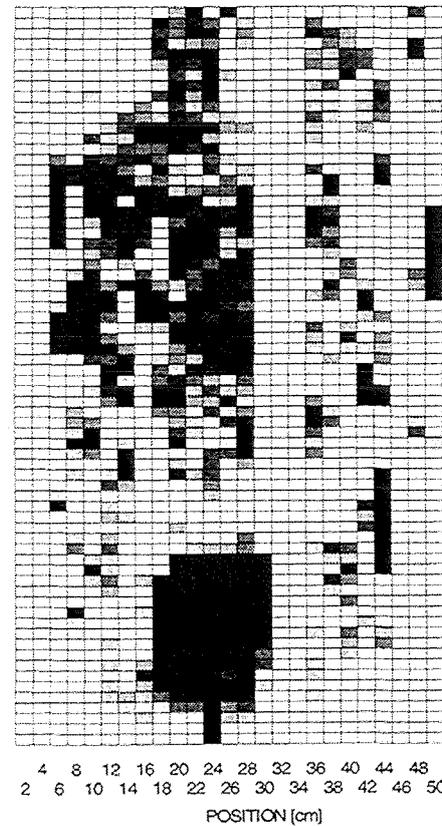
Q40



Q42



Q47



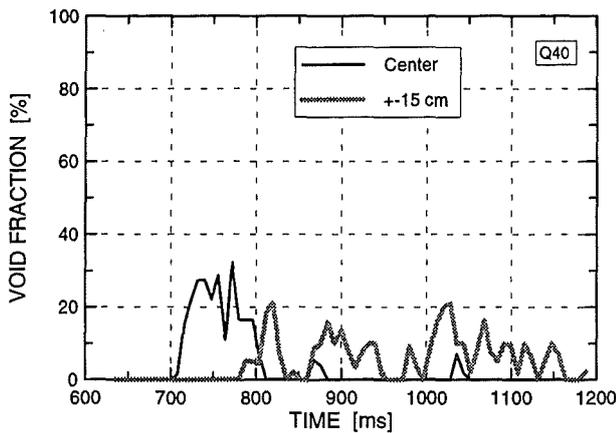
Q48

Abb. 2. Dampfanteil entlang einer Linie im Zentrum 60 cm unter der Wasseroberfläche

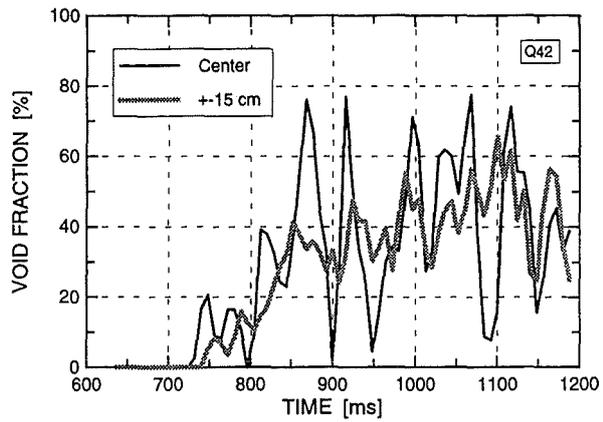
65x55 mm. Der Abstand zwischen der Behältermitte und dem Flächenzentrum am Rand beträgt 15 cm. Die Kurven beider Randflächen, die sich nur im Detail unterscheiden, wurden zu einer Kurve vereinigt. Abb.3 zeigt die Ergebnisse der vier Versuche.

Wie aufgrund der Fotos schon zu erwarten war, sind bei geringer Kugeldichte im 5 K unterkühltem Wasser nur wenige Blasen vorhanden; im Zentrum der Kugelwolke befinden sich offensichtlich keine Kugeln. Der Dampfanteil in der Mitte liegt, abgesehen von der Kugelfront, bei nahezu 0% und am Rand bei ca. 10%. Bei gesättigtem Wasser (Q42) und etwas höherer Kugeltemperatur ist der Dampfanteil wesentlich höher. Er steigt im gesamten Querschnitt auf bis zu 60% an (Abb3.), wobei im Zentrum offensichtlich periodisch mittelgroße Blasen aufsteigen, die hier nicht kondensieren. Die Verteilung der Kugeln ist wahrscheinlich ähnlich wie in Q40. Die große Dampfblase, die man im Foto zum Zeitpunkt $t = 900$ ms sieht, wird von den aufsteigenden und dabei zusammenwachsenden kleineren Blasen geformt. Die Sonden 60 cm unter der Wasseroberfläche "sehen" diese Blase nicht. Der große Dampfanteil befindet sich also in der Nähe der Wasseroberfläche, wo sich keine Kugeln mehr befinden. Hätte man einen langen Kugelstrom niedriger Dichte (low solid volume fraction), wie in den MAGICO Experimenten, so würden die späteren Kugeln durch dieses Gebiet mit hohem Dampfanteil fallen, ohne daß sie im Wesentlichen Ursache dieses Dampfes sind.

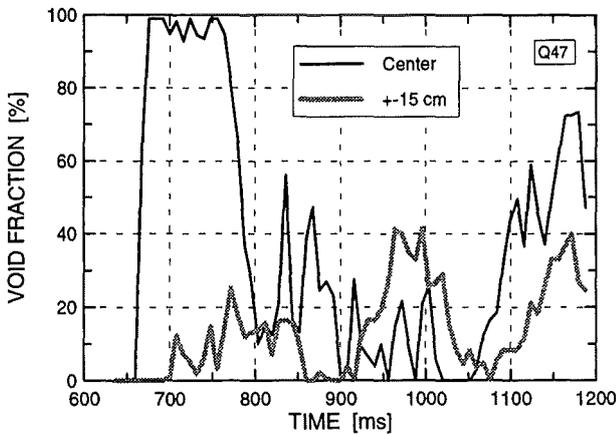
Die Versuche Q47 und Q48 wurden mit 10 kg Kugeln durchgeführt. Obwohl es sich bei Versuch Q47 um ZrO_2 -Kugeln und bei Versuch Q48 um Molybdänkugeln handelt, ist die Anzahl der Kugeln mit ca. 25000 Stück sehr ähnlich; die unterschiedlichen Materialien und der Temperaturunterschied von 200 K sind Effekte zweiter Ordnung. Wesentlich ist der Unterschied der Wassertemperaturen von 3 K.



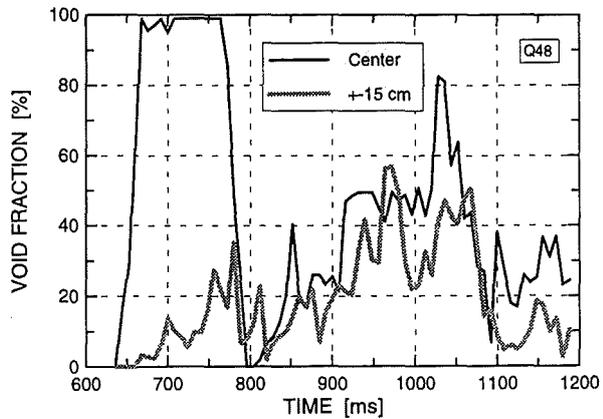
Q40: 2.6 kg ZrO₂, Ø 5 mm, 1800 K,
Wasser 95°C



Q42: 2.4 kg ZrO₂, Ø 5 mm, 2100 K,
Wasser 100°C



Q47: 10 kg ZrO₂, Ø 5 mm, 1800 K,
Wasser 97°C



Q48: 10 kg Mo, Ø4.3 mm, 2000 K,
Wasser 100°C

Abb. 3. Anteil des Dampfes im Zentrum und am Rand des Versuchsgefäßes 60 cm unter der Wasseroberfläche

An den Ergebnissen der Blasensonden erkennt man deutlich, daß 60 cm unter der Wasseroberfläche der Hauptteil der Kugeln als kompakte Kugelwolke zu Boden sinkt. Bei Versuch Q47 mit unterkühltem Wasser wird die große Dampfblase für eine Dauer von etwa 100 ms registriert. Hinter der Kugelwolke steigt die Dampfblase nach oben und ist damit länger als die Kugelwolke. Die Fallgeschwindigkeit der Kugeln an dieser Stelle liegt bei 3.5 m/s. Daraus ergibt sich, daß die Kugelwolke weniger als 35 cm lang ist, dagegen betrug ihre Länge bei Eintritt ins Wasser etwa 75 cm. Hinter der ersten großen Dampfblase ist im Zentrum im wesentlichen Wasser. Es dauert 300 ms bis die zweite Dampfblase aufsteigt. Am Rand fallen die Kugeln langsamer und es zeigen sich kleinere Dampfblasen. Die Ergebnisse für Q48 mit gesättigtem Wasser sind ähnlich, mit dem Unterschied eines wachsenden Dampfanteils

nach der ersten Blase, sowohl am Rand wie auch im Zentrum. Die Druckkurven (Abb.4) spiegeln im Wesentlichen die unterschiedlichen Dampfpraten wider, allerdings ist der Druckanstieg bei Q40 (mit Unterkühlung) etwas höher als bei Q42 (ohne Unterkühlung), entgegen der Erwartung. Beide Drücke sind aber so niedrig, daß ein anderer, unbekannter Effekt dies bewirken kann.

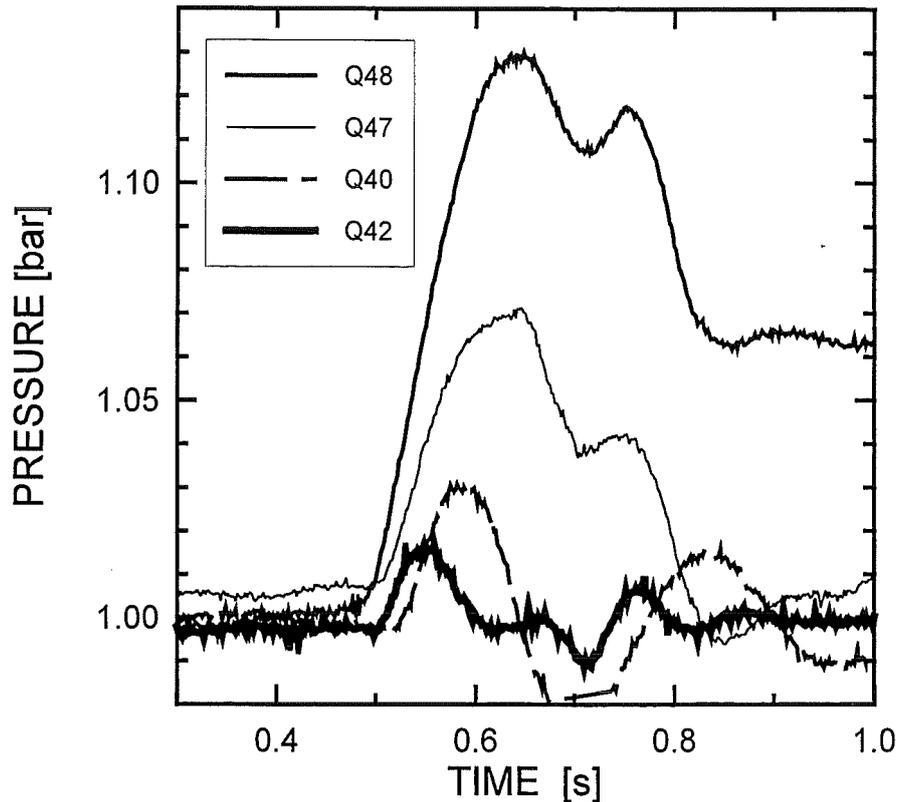


Abb. 4. Drücke oberhalb der Wasseroberfläche in den vier Versuchen

4. SCHLUSSFOLGERUNGEN

Die neuen Versuche mit den Ergebnissen zum Dampfblasenanteil im Wasser sind ein weiterer Schritt zum Verständnis der Vorgänge während der Vorvermischungsphase bei verschiedenen Anfangsbedingungen. Außerdem liefern sie neue mehr das Detail beschreibende Daten zum Vergleich mit Codeergebnissen. Zusammen mit den früheren experimentellen Ergebnissen aus den QUEOS-Experimenten und anderen lassen sich einige Aussagen über die Menge des heißen Materials, das mit Wasser gut vermischt wird, für verschiedene Fälle machen.

Bei einem kompakten langen Strahl und einer geringen Wassertiefe (1-2 m) wird der größte Teil des heißen Materials schnell den Boden unvermischt erreichen, und nur Randbereiche werden langsamer zu Boden sinken und von Wasser in ihrer unmittelbaren Nähe umgeben sein. Kleine Mengen in kurzen Strahlen (Klumpen) verteilen sich nach einer kurzen Fallstrecke im Wasser und sinken als eine dünne Wolke, -das Material im wesentlichen an der Front und an den Seiten, langsamer zu Boden und sind dabei gut mit Wasser vermischt. Ähnlich gute Vermischung tritt natürlich bei sehr dünnen Einzelstrahlen auf, oder wenn die Partikel mit niedriger Volumenfraktion ins Wasser fallen. Die Höhe des Dampfanteils in den Mischungszonen, sowohl im ersten als auch im zweiten Fall, hängt dabei im wesentlichen vom Grad der Unterkühlung ab. Wenige Grad Unterkühlung, für die eine Drucksteigerung von wenigen Zehntel Bar ausreicht, führen zu einer starken Rekondensation, so daß keine großen Dampfblasen entstehen und auch nachfolgende heiße Partikel gut mit Wasser vermischt werden. Bei gesättigtem Wasser vereinigen sich jedoch die kleinen Blasen zu größeren und der Dampfanteil steigt auf hohe Werte an und eine gute Vermischung von heißen Partikeln und Wasser ist für die nachfolgenden Partikel nicht mehr gegeben.

REFERENZEN

1. L. Meyer, 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, "QUEOS, a Simulation-Experiment of the Premixing Phase of a Steam Explosion with Hot Spheres in Water, Results of the second test series," Interner Bericht, INR 1962, PSF 3267, Forschungszentrum Karlsruhe, Juli 1997.
3. L. Meyer, "QUEOS, an Experimental Investigation of the Premixing Phase with Hot Spheres," *Proc. OECD/CSNI Spec. Meeting on Fuel-Coolant Interactions*, JAERI-Tokai, Japan, May 19-21, 1997.

4. L. Meyer, G. Schumacher, H. Jacobs, K. Thurnay, "Investigation of the Premixing Phase of a Steam Explosion with Hot Spheres," 2nd International Conference on Advanced Reactor Safety, ARS '97, Orlando Florida , June 1-4 , 1997.

II. Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX)¹
(H. Will, F. Huber, A. Kaiser, W. Schütz, IRS)

Abstract

A series of three experiments (PM12, PM13, and PM14) has been performed in the reconstructed PREMIX test facility. The tests whose parameters were identical aimed at checking and demonstrating the reproducibility of PREMIX test results. The geometry and the parameters had been chosen to allow for a direct comparison of the results with those of the FARO/FAT tests performed with corium by JRC, Ispra. These results have not yet been published.

The general course of events of the experiments was rather similar. The measured quantities, such as pressures and steam generation rates, differ by no more than 12 and 7%, respectively. Noticeable differences exist in the time between the first melt/water contact and the onset of violent interaction and in the speed of melt penetration.

Zusammenfassung

Zur Überprüfung und Demonstration der Reproduzierbarkeit der Ergebnisse aus den PREMIX-Versuchen wurden in der wiederhergestellten Versuchsanlage drei Experimente mit gleichen Versuchsbedingungen durchgeführt. Die Geometrie der Teststrecke und die Versuchsparameter wurden so gewählt, daß ein direkter Vergleich mit den Ergebnissen der FARO/FAT-Versuche, die von JRC in Ispra mit Corium durchgeführt wurden, möglich ist, sobald diese Daten veröffentlicht sind.

Der generelle Ablauf in den drei Versuchen war sehr ähnlich. Die Meßgrößen, wie Drücke und Dampfproduktionsraten, unterscheiden sich um bis zu 12 bzw. 7%. Wesentliche Unterschiede bestehen in der Zeitdifferenz zwischen dem ersten Schmelze-Wasser-Kontakt und dem Beginn heftiger Wechselwirkung sowie in der Geschwindigkeit, mit der die Schmelze in das Wasser eindringt.

1. INTRODUCTION

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

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

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 goals mentioned above.

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. melt volume and 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.

2. EXPERIMENTAL SET-UP AND TEST PROCEDURE

The experimental set-up (Fig. 1) mainly consists of a container (also called test vessel) filled with water to a specified level. Note that the origin of the axial co-ordinate 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, concave 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

development 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.

3. RESULTS

Three experiments (PM12, PM13, and PM14) have been performed with identical preset parameters (Table 1). However, differences in the course of events may occur due to uncertainties in the melt generator preparation procedure and in the actual starting conditions, e.g. the mode of melt release. The most significant difference in the test parameters was the total melt mass released from the source.

PM12	28.98 kg	fragment mass
PM13	23.78 kg	fragment mass
PM14	23.19 kg	fragment mass

The larger melt mass released in PM12 did not noticeably affect the course of events in the initial period of the test. This result is supported by the time histories of the driving pressure acting on the melt of the three tests (not shown) which are comparable. The results of the three tests which in fact show good general agreement are discussed below using pressure and steam flow data as well as void probe and water level measurements.

A feature of the PREMIX tests performed so far is the delay in time of a significant pressure rise after the first melt-water contact. This delay is between 0.15 and 0.40 s in the three tests whose pressure data are compared in Fig. 2. Both the earliest rise and the largest pressure peak occur in PM14. The difference between the largest and the lowest traces is always less than 0.020 MPa corresponding to about 12% related to the maximum value. At times later than 1.5 s, when quasi-steady pressure had established, the difference in the pressure is reduced to 0.012 MPa.

The traces of the pressures measured in the freeboard volume (Fig. 3) are rather similar to those measured in the water.

Noticeable steam production (Fig. 4) is indicated earlier than the corresponding pressure rise. The steam flow meters react at about the same time (0.08 s) in PM13 and PM14, whereas the increase is faster in PM14. Note that no data are available from

PM12 because the flow measurement failed in this test. The difference in the maximum flow rates is less than $0.3 \text{ m}^3/\text{s}$ which corresponds to about 7%. Signal break down due to the entering of water into the venting lines occurred somewhat earlier in PM14 than in PM13. Similar behaviour can also be stated for the later period:

- the choking steam flow pattern
- the flow obstruction comprising only two of the four venting lines.

The point in time when a significant portion of water had reached the height of the exit to the venting lines can be anticipated from the data shown in Fig. 5. In this figure, comparison is made between the water level measurement and a series of data gained from void probes positioned in the freeboard volume. Additionally, the steam flow rates available are shown for comparison. The two chains of void data indicate the instants when water drops and slugs, respectively, appeared at distinct axial heights for the first time. These data, of course, precede the level measurement which in fact gives the net water level (i.e. only the water fraction is considered in the signal). The sequence of the void data allows to make an approximate extrapolation to the time when the first water particles started to enter the venting pipes. This time seems to coincide with the time when the steam flow rate was going to reach its first maximum. An early break down of the flow rate signal is prevented by the water separators. It can be concluded from the data shown in Fig. 5 that the interaction process went on quickest in test PM14.

This result is also supported by Fig. 6 where the progression of the interaction region into the water pool is shown with the time as a parameter. The boundary lines (isochrones) have been constructed using the information provided by the void signals. In the plots, rotational symmetry has been assumed. One can deduce average axial penetration rates from the graphs. These are about 1.2, 1.3, and 1.6 m/s, for PM12, PM13, and PM14, respectively. One can also see from the graphs that the penetration rates diminished in all cases after the time of about 0.8 s. This result can be taken as an evidence of a complete disintegration of the melt stream which partly consisted of a compact core up to that time.

Fig. 7 shows the result of the sieve analyses. The particle size distribution is rather similar. The curve of PM13 appears to be shifted a bit to smaller particle sizes.

**Table 1: Experimental parameters
specified for PM12, PM13, PM14**

Melt:

- mass	20 kg
- temperature	2600 K
- composition	>90 % oxides, <10 % iron
- composition of oxides	83 % alumina 6 % magnesia 11 % iron oxide

Melt release:

- effective orifice diameter	57 mm
- mode of release	compact stream
- calculated speed	4.3 m/s
- falling height	193 - 213 mm

Water:

- temperature	373 K
- pool depth	1340 - 1360 mm
- bottom (fragment catcher)	concave

System pressure:

0.1 MPa

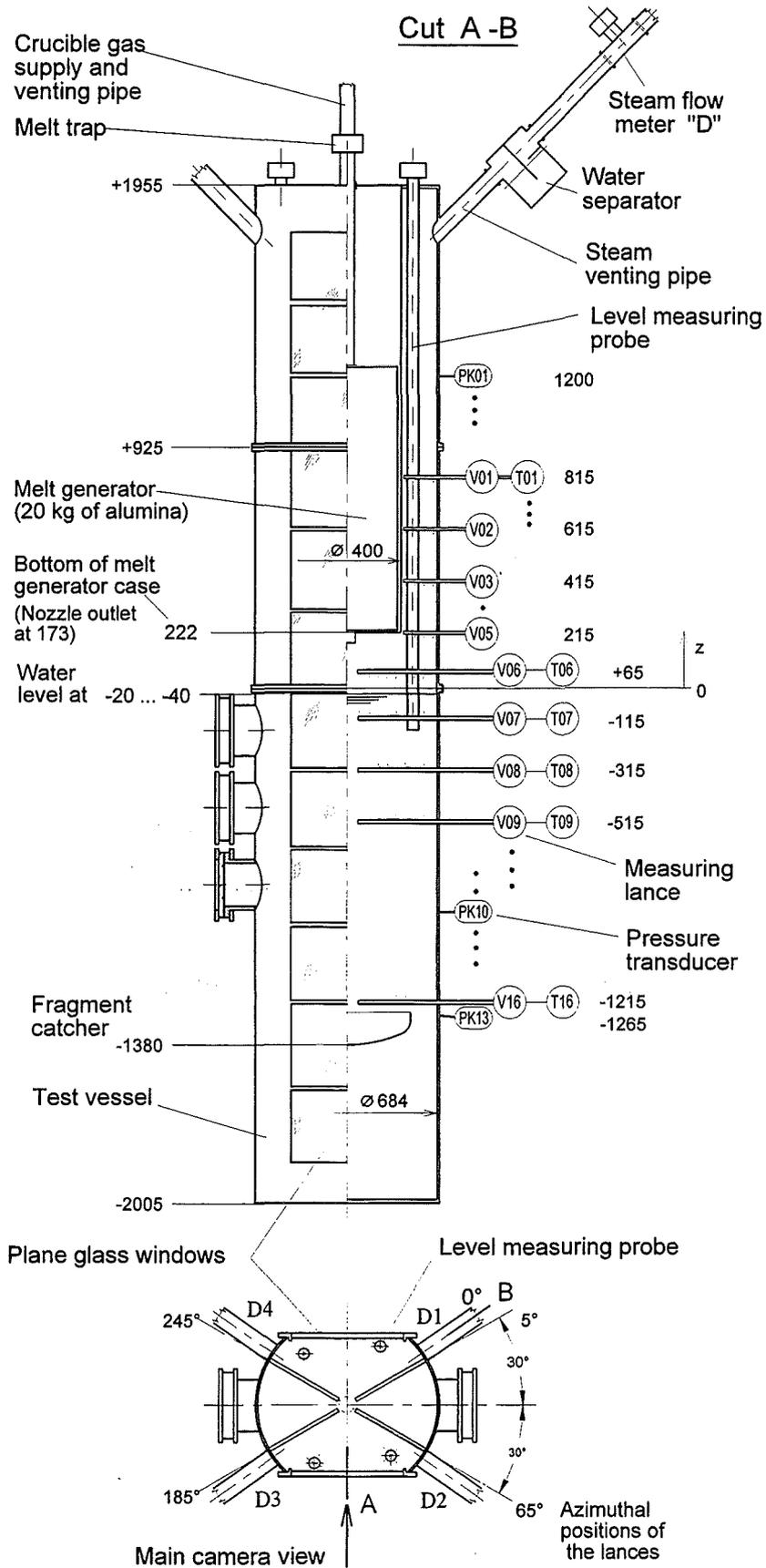


Fig. 1: Test facility for PM12, PM13 and PM14

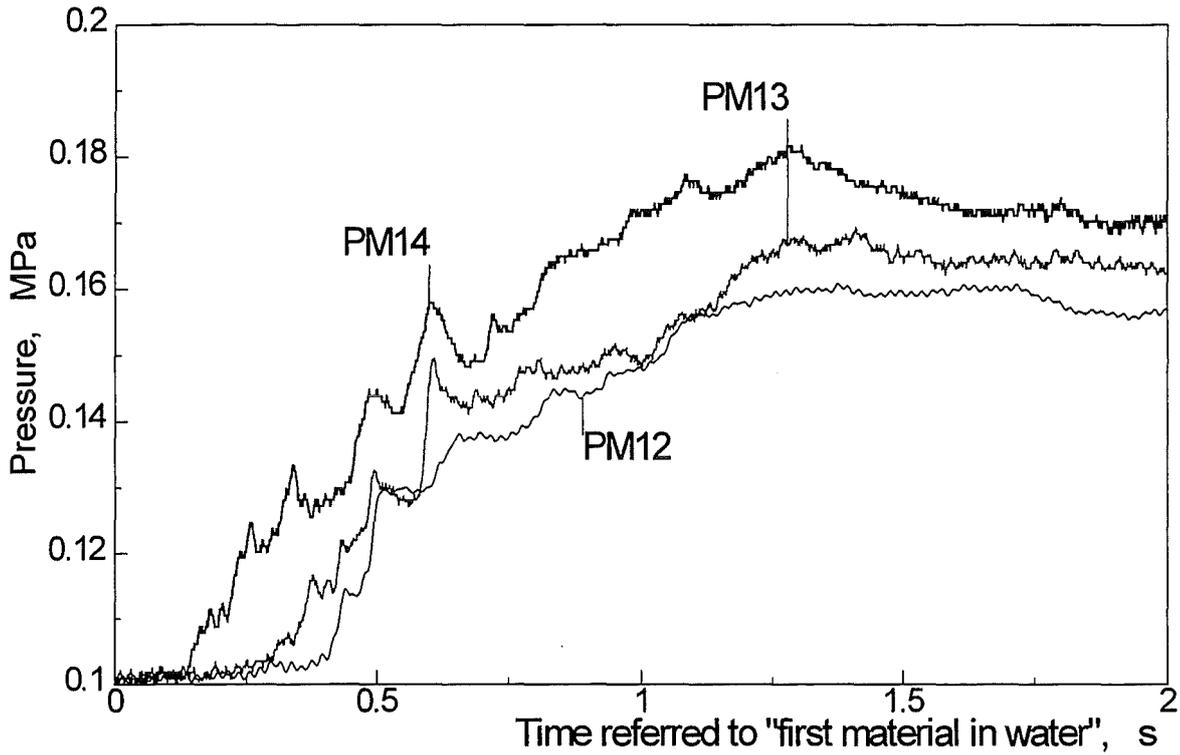


Fig. 2: Pressure traces obtained from the PK11 transducers located in the water at -1065 mm height

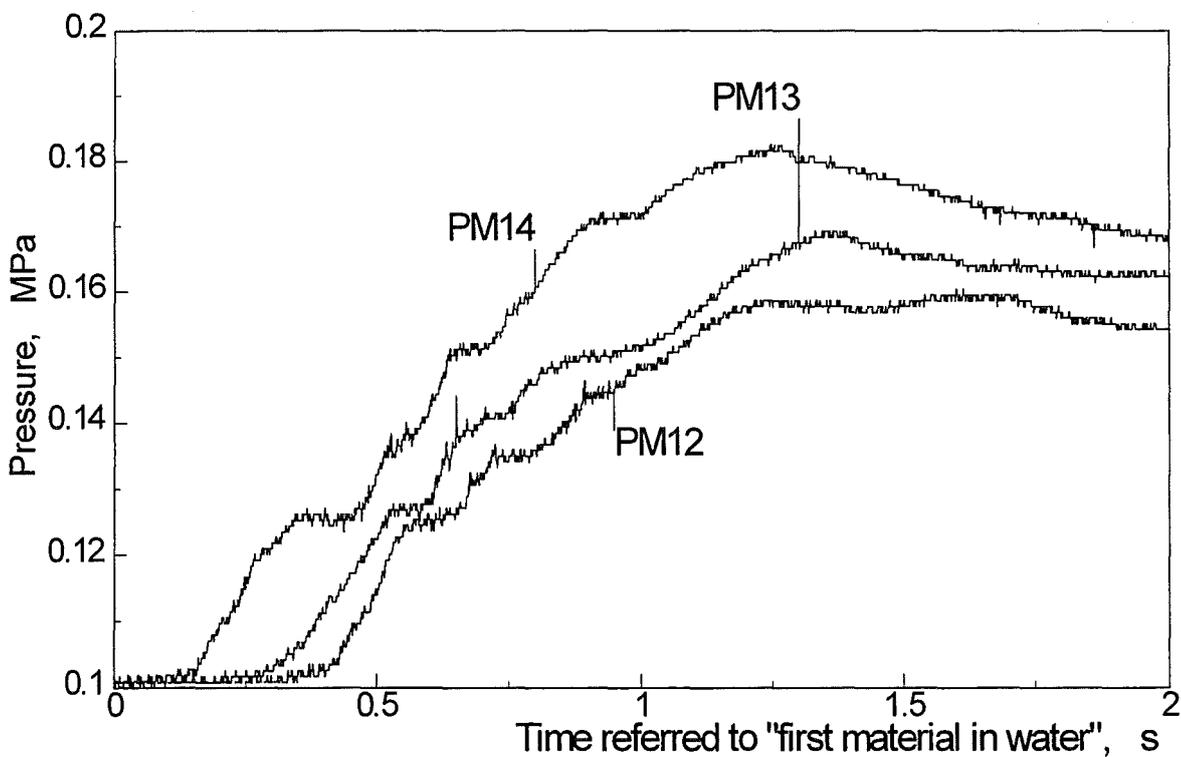


Fig. 3: Pressure traces obtained from the PK02 transducers located in the freeboard volume at +515 mm

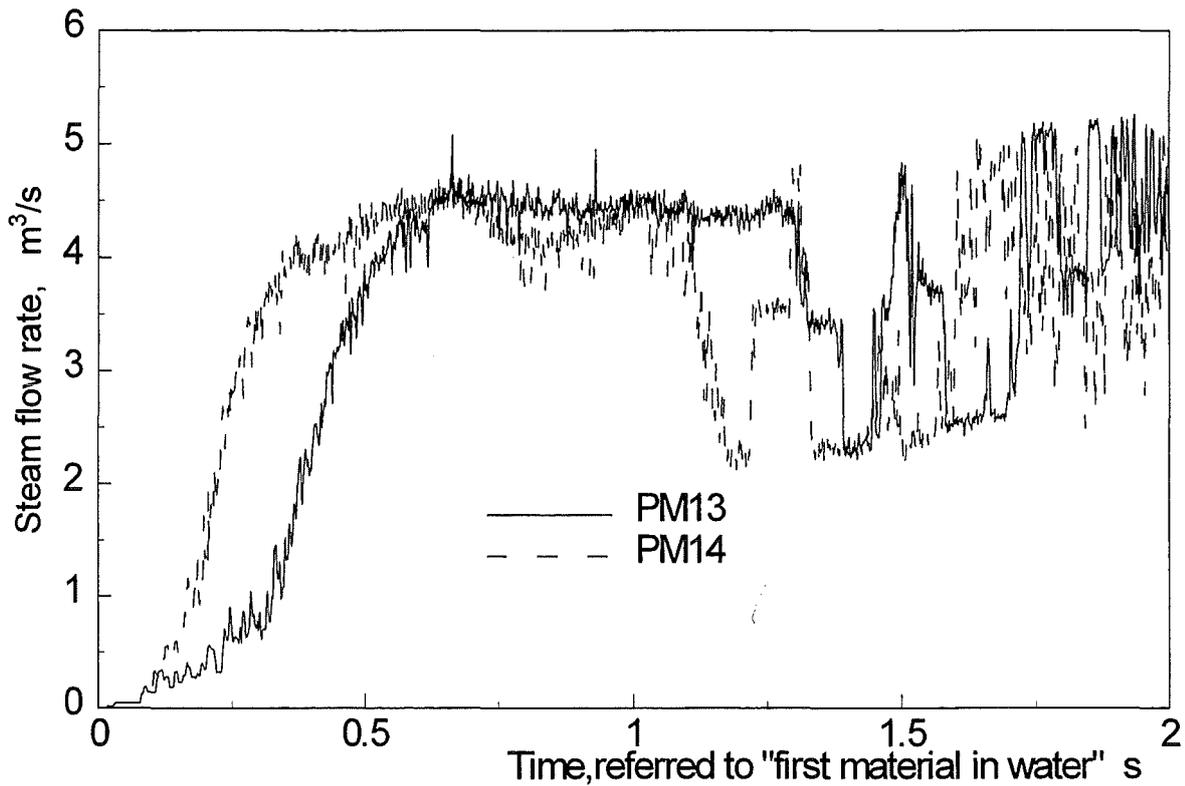


Fig. 4: Total steam volume flow rates

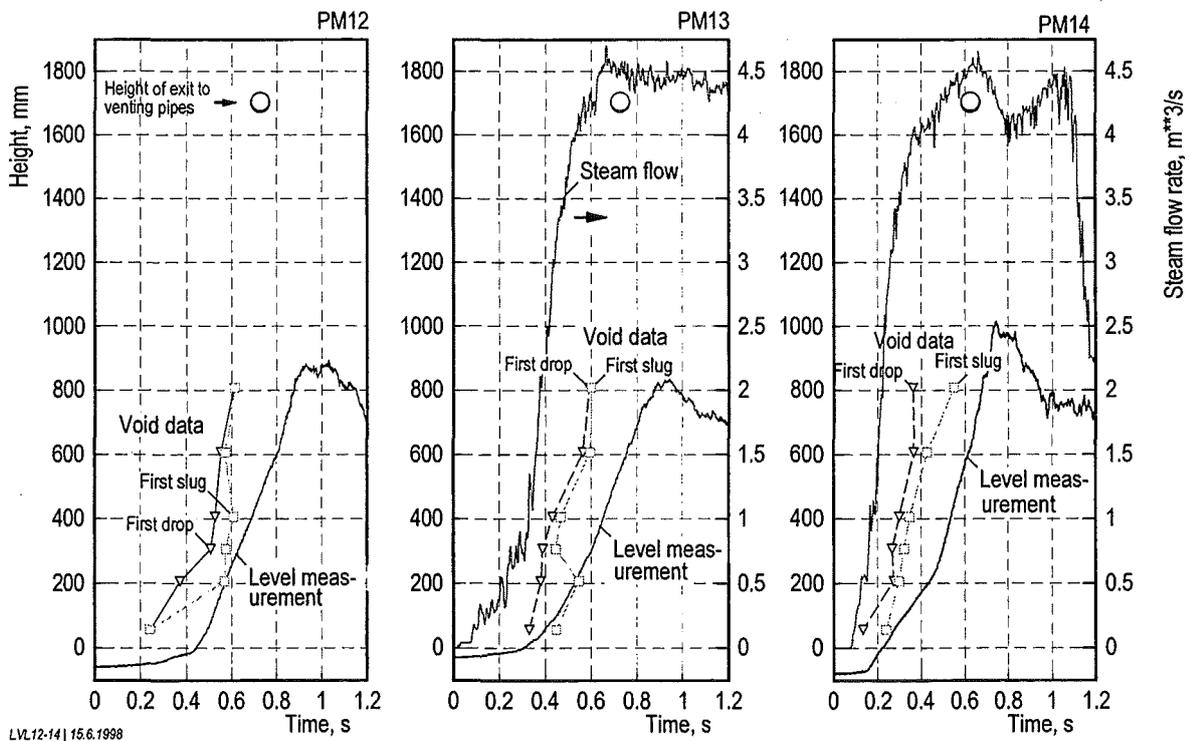


Fig. 5: Comparison of void probe data with the water level measurement showing the progression of water in the free-board volume

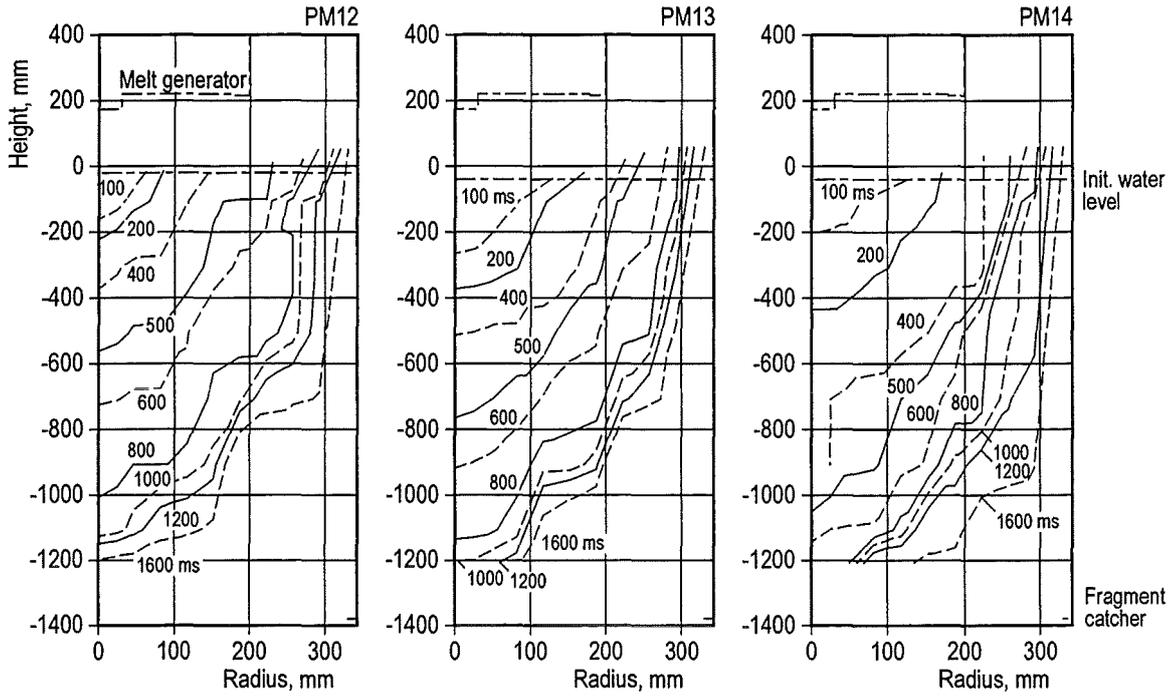


Fig. 6: Progression of the melt into the water with the time as a parameter.

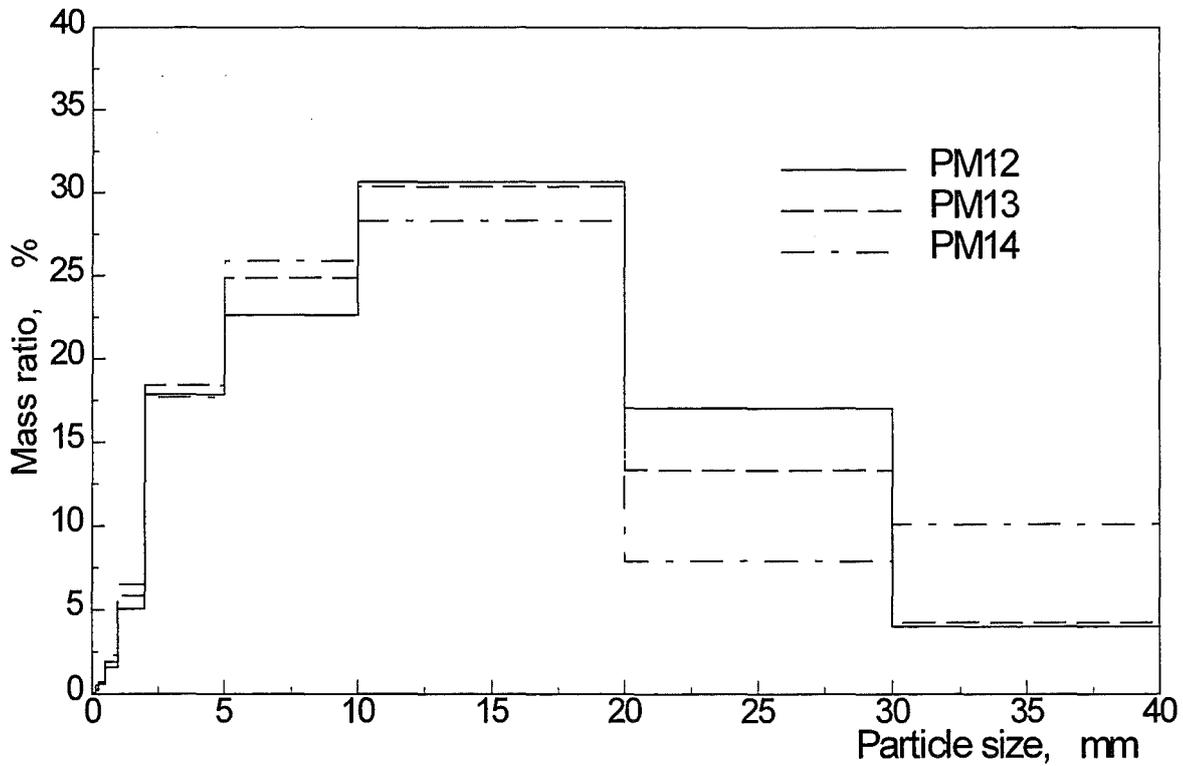


Fig. 7: Sieve analyses of the melt fragments

- III. Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung
(G. Arnecke, H. Jacobs, B. Stehle, K. Thurnay, L. Väh, INR; M. Böttcher, U. Imke, M. Lummer, IRS)

Abstract

Work in 1997 concentrated on the following points:

- Investigation of the reasons for the failure of the codes to describe the PREMIX experiments satisfactorily.
- Further improvement of the code MATTINA (previously IVA-KA)
- Recalculations of QUEOS experiments and preparation of contributions to conferences.

Zusammenfassung

Die Arbeiten in 1997 konzentrierten sich auf folgende Punkte:

- Untersuchung der Ursachen für die mangelhafte Beschreibung der PREMIX Experimente durch die Rechenprogramme.
- Weitere Verbesserung des Programms MATTINA (früher IVA-KA).
- Nachrechnung von QUEOS Experimenten und Erstellung von Konferenzbeiträgen.

Theoretische Interpretation der PREMIX-Experimente mit MC3D

Die Arbeit mit dem Programmsystem MC3D (CEA-Grenoble) war im vergangenen Jahr durch drei Schwerpunkte geprägt:

- Untersuchung der numerischen Fähigkeiten des Programms.
- Nachrechnung von QUEOS-Experimenten.
- Untersuchung physikalischer Vorgänge, die für die schlechten Ergebnisse bei PREMIX-Rechnungen verantwortlich sein könnten.

Die teilweise auftretenden numerischen Schwierigkeiten bei der Nachrechnung der Experimente veranlaßten uns, einfache Testbeispiele zu berechnen. Mit der 3-Feld-applikation (Dampf, Wasser, Schmelzetröpfchen) wurden im Dampf fallende Partikel

untersucht. Mit der 4-Feldapplikation (Dampf, Wasser, Schmelzetröpfchen, Schmelzestrah) wurde versucht, einen in Dampf fallenden Schmelzestrah zu simulieren. Dabei zeigte sich, daß die Impulskopplung in Bereichen verschwindender Komponenten das Ergebnis stark beeinträchtigen kann. Fallende Partikel kommen zum Stillstand und der Schmelzestrah verformt sich unrealistisch stark. Dies ist eine Folge der numerischen Diffusion der Donor-Cell Methode in Kombination mit der künstlichen Impulskopplung verschwindender Komponenten. Es wurden Änderungen in den Code eingebaut, die die Auswirkungen dieser numerischen Schwierigkeiten minimieren. Ein weiterer Testfall war eine in einem U-Rohr schwingende Flüssigkeitssäule. Hier führt die numerische Diffusion zu einer starken Dissipation kinetischer Energie und damit zur Dämpfung der Schwingung. Bessere Ergebnisse erhält man nur bei der Verwendung einer extrem feinen räumlichen Diskretisierung, die sich im Falle einer Nachrechnung von Experimenten aufgrund der Begrenzung durch Rechnerressourcen nicht realisieren läßt. Es wurde damit begonnen, Möglichkeiten zu untersuchen, Verfahren höherer Ordnung einzusetzen. Der hiermit verbundene Aufwand ist außerordentlich groß und ein erfolgversprechendes Verfahren ist zur Zeit noch nicht erkennbar. Für die Anwendung auf PREMIX wird gegenwärtig nur die 3-Feldapplikation benutzt, da die Option der Strahloberflächenverfolgung noch nicht zuverlässig arbeitet.

Es wurden zwei QUEOS-Experimente mit kalten (10 kg) und heißen (7 kg) Molybdänkugeln nachgerechnet. Der rechteckige Querschnitt des Versuchsbehälters wird dabei zylindersymmetrisch abgebildet, da dreidimensionale Simulationen aufgrund der langen Rechenzeiten nicht durchführbar sind. Die Anfangsverteilung der Kugeln über dem Wasserspiegel wird vorgegeben, da bei den verwendeten groben Gittern eine Nachrechnung der fallenden Kugelschüttung nicht sinnvoll erscheint. Es ergibt sich eine recht gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen und gerechneten Druckverläufen und Geschwindigkeiten im Gasauslaß, solange keine Blockade der Öffnung durch hochgeschleudertes Wasser stattfindet. Das Wasser erreicht die Öffnung jedoch erst, nachdem die Kugeln den unteren Rand des Rechengbietes erreicht haben und der wesentliche Teil des Mischungsvorganges abgeschlossen ist. Speziell bei Rechnungen mit kalten Kugeln zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit des Druckverlaufes von der Anfangsverteilung der Kugelwolke

über dem Wasserspiegel. Dies ist jedoch wenig überraschend, da der Druckaufbau in diesem Fall nur über die Impulswechselwirkung zwischen Kugeln und Wasser geschieht, die empfindlich vom Volumenanteil der beteiligten Phasen abhängt.

Die Nachrechnungen von PREMIX-Experimenten zeigen im allgemeinen noch keine gute Übereinstimmung. Ein konsistentes Bild aller wichtigen Meßgrößen (Druckaufbau, Verdampfungsrate, Fragmentierung) kann mit MC3D noch nicht erreicht werden. Dies gilt im besonderen für das Spektrum unterschiedlicher experimenteller Programme, das heute verfügbar ist (QUEOS, BILLEAU, FARO, PREMIX). Durch intensive Parameteranalysen und Veränderung der Anfangs- und Randbedingungen haben wir versucht herauszufinden, worin die Gründe des Mißerfolgs bei PREMIX-Nachrechnungen zu suchen sind.

Das Problem der zu geringen Verdampfungsrate in allen Nachrechnungen konnte durch Einführung eines Wärmeübertragungsmodells zwischen Wassertropfen und Schmelzetropfen teilweise behoben werden. Ein ähnliches Modell wird im SIMMER-III Code verwendet. Damit kann jedoch noch nicht der zeitliche Druckverlauf und die damit verbundene Dampfproduktionsrate des Experiments gleichzeitig gut beschrieben werden. Ein Hauptproblem stellt der große Unterschied in der Dichte von Dampf und flüssigem Wasser dar. Dies führt nicht nur zu numerischen Schwierigkeiten sondern erfordert auch eine hohe Genauigkeit in der Simulation der Vorgänge in der Wechselwirkungszone. Entstehen dort zum Beispiel 100 g Dampf so können dadurch bis zu 167 kg Wasser verdrängt. Es befinden sich etwa 500 kg Wasser im Versuchsbehälter und mehr als 1000 g Dampf entstehen in der ersten Sekunde der Wechselwirkung. In der Simulation werden die folgenden drei Phasen des Experimentes nur unzureichend abgebildet, wobei auch darauf hingewiesen werden sollte, daß die experimentellen Informationen über diese Phasen unvollständig sind:

- Ausbildung des Schmelzestrahls und Fragmentierung
- Umverteilung der Schmelze im Wasser
- Bewegung von Dampf und Wasser in Richtung der Austrittsöffnungen

Die Vorgänge an der Austrittsdüse für die Schmelze werden im Code nicht simuliert. In der 3-Feldapplikation wird ein Tröpfchendurchmesser vorgegeben, wenn in einer

Rechenzelle der Volumenanteil der Schmelze unter 0.7 fällt. Beginnt man mit großen Teilchen (Durchmesser der Düse) so reicht die Fragmentierung nicht aus und es entsteht nur eine schwache Wechselwirkung. Kleine Anfangsdurchmesser führen zu einer starken Fragmentierung, so daß diese künstlich begrenzt werden muß, um eine Dampfexplosion zu vermeiden. Auch die zeitliche Verzögerung des Beginns der intensiven Wechselwirkung, die im Experiment beobachtet wird, wird bei Benutzung des jetzigen Fragmentierungsmodells nicht wiedergegeben. Alle Rechnungen zeigen im Vergleich zum Experiment eine zu schwache radiale Ausbreitung der Wechselwirkungszone. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit in axiale Richtung hängt stark von dem anfänglichen Tröpfchendurchmesser und damit von der Fragmentierungsrate ab. Um den Schmelzestrahle herum bildet sich eine Dampfblase, die starke Verdrängung des Wassers führt zu einer Beschleunigung des Wassers im Ringkanal nach oben und zu einer Blockade der Dampfaustrittsöffnung. Damit steigt der Druck und eine weitere Verdampfung wird verhindert. Besonders die frühzeitige vollständige Blockade der Abströmrohre wurde in den Experimenten nicht beobachtet. Sie stellt ein Haupthindernis dar, in den derzeitige Simulationen von PREMIX-Experimenten zu einigermaßen realistischen Ergebnissen zu kommen.

In einer vereinfachten Simulation der Strahlfragmentierung läßt sich der Schmelzestrahle in Anlehnung an die experimentellen Ergebnisse durch einen radial verbreiterten Tropfenschauer mit großen Tropfendurchmessern darstellen. Wird zusätzlich noch die Oberflächenspannung der Schmelze erheblich erniedrigt, so ergibt sich eine Erhöhung des Dragkoeffizienten zwischen der Schmelze und dem Wasser-Dampf Gemisch, wobei die Fragmentierung verstärkt wird. Dies führt zu einer besseren radialen Ausbreitung der Schmelze im Wasser. Es werden jedoch noch erhebliche Mengen Wasser in den Ringkanal transportiert und die Austrittsöffnungen werden durch Wasserpfropfen zeitweise blockiert. Entfernt man das Wasser im Ringkanal künstlich durch die Verwendung gemischter Randbedingungen (Wasser wird abgesaugt), dann ergibt sich eine dem Experiment entsprechende Dampfproduktion. Der Druckaufbau kann durch einen geschätzten Druckverlustkoeffizienten für die Abströmrohre eingestellt werden.

Bei der Nachrechnung von FARO-Experimenten bei hohem Umgebungsdruck (5 MPa) und geschlossenen Versuchsbehältern treten die oben beschriebenen Schwierigkeiten nicht auf, da der Dichteunterschied zwischen Wasser und Dampf erheblich kleiner ist. Verwendet man hier Parameter, die bei den PREMIX-Rechnungen notwendig sind, um eine realistische Dampfproduktion zu erreichen, wird der Druckaufbau überschätzt. Zur Zeit sind wir mit MC3D nicht in der Lage, die Hoch- und Niederdruckexperimente konsistent nachzurechnen. Dies wäre jedoch eine wichtige Voraussetzung zur Anwendung des Codes auf Reaktorbedingungen.

Modellverbesserungen an MATTINA und ihre Auswirkungen auf die Rechen- ergebnisse

Bei MATTINA handelt es sich um den Nachfolgecode von IVA-KA, dessen Modelle im Laufe der Jahre soweit gegenüber dem Ursprungscode IVA3 fortentwickelt wurden, daß eine neue Namensgebung angebracht erschien. MATTINA steht für "material thermal interaction".

Die Entwicklungsarbeiten an MATTINA im Jahre 1997 umfaßten folgende Punkte:

- Aufgrund einer Umstellung der Rechner mit Änderung des Betriebssystems mußten die Codeorganisation und Versionswartung auf das Betriebssystem UNIX mit dem Versionsführungsprogramm RCS umgestellt werden. Die Codeorganisation wurde dabei etwas modernisiert und vereinfacht, um die Handhabung zu erleichtern.
- Die wichtigste Modelländerung betrifft die Bilanzgleichung für die Energie, für die in IVA-KA eine Entropieformulierung benutzt wurde. 1997 hatte sich herausgestellt, daß diese Gleichung die Entropiezunahme durch konvektive Vermischung nicht beschreibt, was zu einem Energieverluste und zum anderen lokale Druckinstabilitäten zur Folge hat, die die Effizienz des Codes stark beeinträchtigen. Infolgedessen wurde die Entropiebilanz durch eine Enthalpiebilanz ersetzt.
- Eine kleinere Modelländerung betrifft die Wichtung der Masse-, Impuls- und Energieübertragungsterme bei drei Materialien in einer Rechenzelle, die einen Fehler enthielt. Dadurch wurde die Kontaktfläche zwischen Schmelze und Wasser in einigen Fällen unterschätzt. Die Beseitigung dieses Fehlers führt zu

einer etwas höheren Energieübertragung in das Wasser und daher einen etwas höheren Druckaufbau bei der Simulation von Quenching-Experimenten.

- Die Rechengeschwindigkeit des Codes wurde gesteigert durch geschicktere Vorausschätzung der Zeitschrittlänge und effizientere Durchführung der Iterationen.

Nach Einführung der Enthalpiegleichung wurde als erste umfangreichere Rechnung das Internationale Standard Problem ISP-39, das 1996 mit IVA-KA berechnet worden war ("Case A"), mit MATTINA neu berechnet ("Case C"). Die Abbildung zeigt einen Vergleich dieser beiden Rechnungen zusammen mit dem experimentellen Ergebnis von FARO Experiment L-14, das die Spezifikationen für das Benchmarkproblem lieferte. Die (wenig auffälligen) Unterschiede zwischen den Rechnungen betreffen

- das Verschwinden der Unstetigkeiten bei Zeiten unterhalb 0.6 s, das mit einer deutlichen Abnahme der Rechenzeiten verbunden ist (vergl. Tabelle);
- eine leichte Erhöhung des Drucks bei Zeiten bis 1.2 s, die auf die Beseitigung der Energieverluste zurückzuführen sein dürfte. Allerdings wurden in der Zeit zwischen den beiden Rechnungen einige kleinere Codeänderungen vorgenommen. Obwohl sie im wesentlichen nur die Effizienz der Rechnungen betrafen, machen sie doch die beiden Rechnungen nicht voll vergleichbar.
- einen zu späteren Zeiten leicht erniedrigten Druck trotz nicht mehr vorhandener Energieverluste, der auf das Fehlen der Druckinstabilitäten an der Strahloberfläche zurückzuführen ist. Diese hatten ein verstärktes Aufbrechen des Schmelzstrahls in radialer Richtung zur Folge. Die jetzt weniger stark fragmentierte Schmelze kann nicht mehr so viel Energie an des Wasser übertragen wie früher.

Eine weitere Berechnung desselben Problems ("Case E") wurde durchgeführt, nachdem die weiteren oben genannten Änderungen (Wichtigungsfehler, Codebeschleunigung) vorgenommen worden waren. Die Ergebnisse sind ebenfalls in der Abbildung enthalten. Die durch die Beseitigung des Fehlers bewirkte Druckerhöhung beträgt maximal etwa 18%. Der Druckanstieg kommt jedoch nach wie vor etwa 0.2 s zu früh, was von der durch das Lösungsverfahren bedingten numerischen Diffusion verursacht sein könnte.

Die Tabelle zeigt die Entwicklung der Rechenzeiten für die drei Berechnungen von ISP-39. Bei der Berechnung des Beschleunigungsfaktors in der letzten Spalte wurde dabei berücksichtigt, daß die IBM-3090 etwa einen Faktor 2 schneller war als die jetzigen RISC-Rechner. Die Beschleunigung der Rechnung in ihrer Anfangsphase ist besonders eindrucksvoll, aber auch die Beschleunigung der gesamten Rechnung um einen Faktor 3 ist sehr erfreulich. Die Arbeit ist allerdings in diesem Punkt noch nicht abgeschlossen, da einige einzelne Phasen der Rechnung immer noch erhebliche Rechenzeiten erfordern und einer Beschleunigung bedürfen.

Problemzeit bis	Fall	Maschine	CPU-Zeit (min.)	Faktor
0.467 s	Case A	IBM-3090	232	
	Case C	RISC	50	9
	Case E	RISC	28	16
0.900 s	Case A	IBM-3090	774	
	Case C	RISC	713.5	2
	Case E	RISC	200	8
2.465 s	Case A	IBM-3090	1609	
	Case C	RISC	2596	1.2
	Case E	RISC	1061	3

Tabelle: ISP39: Vergleich der Rechenzeiten mit IVA-KA und MATTINA.

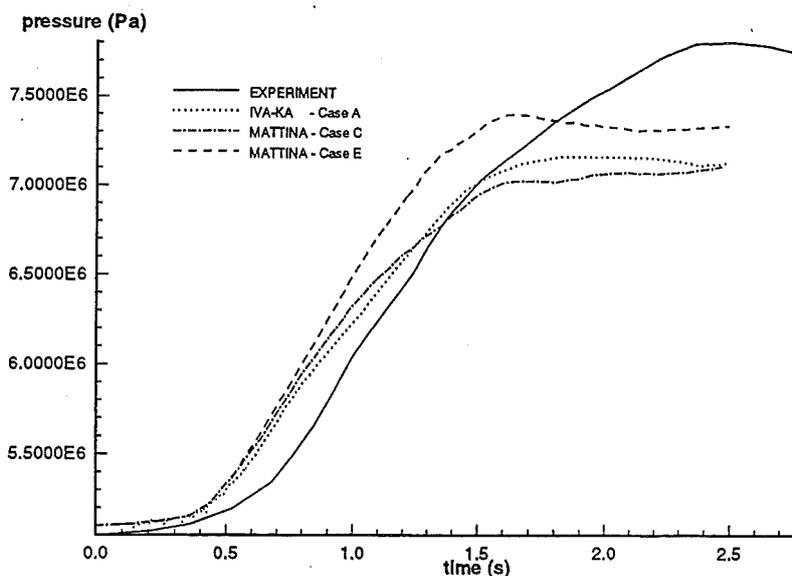


Abbildung: Zeitlicher Druckverlauf für ISP-39. Vergleich der Ergebnisse mit IVA-KA und MATTINA.

Veröffentlichungen

Jacobs, H., V äth, L., Thurnay, K.; Constitutive relations for multiphase flow modeling. OECD/CSNI Specialist Meeting on Fuel-Coolant Interactions, Tokai-Mura, Japan, 19-21 May 1997; Atomic Energy Research Institute Report JAERI-Conf 97-011, NEA/CSNI/R(97)26 (January 1998) pp.205-217

Jacobs, H., Meyer, L.; Highly transient and intense multiphase intreractions in the QUEOS premixing experiments. Proc. of Intl. Sem. on Vapor Explosions and Explosive Eruptions, Sendai, J, 22-25 May 1997; pp. 253-262

Meyer, L., Schumacher, G., Jacobs, H., Thurnay, K.; Investigation of the premixing phase of a steam explosion with hot spheres. Proc. of ARS '97: 2nd Intl. Conf. on Advanced Reactor Safety, Orlando, FL, 1-4 June 1997, 503-513
Erscheint demnächst in Nuclear Technology.

Imke, U., Jacobs, H., Lummer, M., Meyer, L., Schütz, W., V äth, L., Will, H., Steam Explosion Research at Forschungszentrum Karlsruhe. Proc. The European Pressurized Water Reactor EPR, Köln, 19-21 October 1997, pp. 149-152

Jacobs, H., Meyer, L., Thurnay, K., V äth, L., Schütz, W., Huber, F., Imke, U., Kaiser, A., Lummer, M., Will, H., Schadenspotential von Dampfexplosionen bei Kernschmelzunfällen in Druckwasserreaktoren; Teil A: Die Dampfexplosion. NACHRICHTEN (des Forschungszentrums Karlsruhe), Jahrgang 29, Heft 4/97, pp. 285-296

32.21.03 Versagen des Reaktordruckbehälters und Dispersion der Kernschmelze

- I. Zur Bestimmung der Materialparameter des Modells der finiten Thermo-viskoplastizität mit Schädigung
(H. Lämmer, B. Ritter, Ch. Tsakmakis, IMF II)

Abstract

In 1997, first steps to identify the material parameters of the finite deformation damage thermoviscoplasticity model developed in '96 were taken. The identification was performed by means of neural networks. Since the tensile and creep tests available for the French RPV steel 16 MND 5 are unsuitable to identify all parameters of the model, isotropic hardening and damage were neglected. The data used for the training of the networks were generated by numerical simulations of the tests for numerous sets of parameters. The simulations were performed with a FORTRAN program selecting those sets of parameters which lead to unsatisfying results. For the remaining sets of parameters the data used for the training of the networks were prepared in a suitable way for the neural network program SNNS. On the basis of these data a neural network was trained for each temperature. After the training the experimental data was prepared and fed into the neural network – output were the desired material parameters.

Kurzfassung

Im Berichtsjahr wurde damit begonnen, die Materialparameter des in '96 entwickelten finiten Thermo-viskoplastizitätsmodells mit Schädigung mittels neuronaler Netze zu identifizieren. Es standen hierzu für den französischen Reaktorbaustahl 16 MND 5 ermittelte Zug- und Kriechkurven zur Verfügung. Da diese Art von Experimenten zur Identifikation aller Parameter des Modells ungünstig sind, wurde der Einfluß isotroper Verfestigung und der Schädigung vernachlässigt. Zur Generierung geeigneter Eingabedaten für das zu trainierende neuronale Netzwerk, wurde ein Programm entwickelt, das für eine Vielzahl von Parametersätzen die Experimente nachrechnet und jene Sätze aussortiert, die keine zufriedenstellenden Ergebnisse liefern. Für jene Parametersätze, die bei den Simulationen zufriedenstellende Ergebnisse lieferten, wurden die zu trainierenden Daten in geeigneter Art und Weise für das Neuronale-Netzwerk-Programm SNNS aufbereitet. Auf der Basis dieser Daten wurde für jeden Temperaturwert ein neuronales Netz trainiert. Nach abgeschlossenem Training wurden die experimentellen Ergebnisse aufbereitet und in das Netzwerk eingegeben - ausgegeben wurden die gesuchten Materialparameter.

1 Einleitung

Zur Ermittlung kritischer Zustände, die nach einem schweren Störfall zum Versagen des Reaktor-druckbehälters (RDB) führen können, wurde in den vergangenen Jahren ein für große Deformationen formuliertes Thermoviskoplastizitätsmodell mit Schädigung entwickelt und in das Finite-Elemente-Programm ABAQUS implementiert [6, 7, 4, 5]. Die Evolutionsgleichungen der isotropen und kinematischen Verfestigung enthalten Terme, die die Temperaturabhängigkeit, das Verfestigungsverhalten sowie die Effekte der statischen Erholung und Schädigung des Materials in thermodynamisch konsistenter Weise beschreiben. Weiterhin können in diesem Modell Temperaturänderungen bei Verformung des Materials (thermomechanische Kopplung) berücksichtigt werden. Mit diesem Modell können somit neben der Dehnratenabhängigkeit und der thermomechanischen Kopplung die folgenden Verfestigungs- und Entfestigungsmechanismen beschrieben werden:

- Verfestigungsmechanismen:
 - Nichtlineare isotrope Verfestigung
 - Nichtlineare kinematische Verfestigung
- Entfestigungsmechanismen:
 - Statische Erholung der isotropen Verfestigung
 - Statische Erholung der kinematischen Verfestigung
 - Isotrope Schädigung.

Im Berichtsjahr wurde begonnen, die Materialparameter des Modells für den französischen Reaktorbaustahl 16 MND5 mit Hilfe neuronaler Netze zu identifizieren. Im Rahmen zweier europäischer Projekte wurden von CEA-Saclay¹ Zug- und Kriechkurven im Temperaturbereich zwischen 600 °C und 1000 °C zur Verfügung gestellt. Da anhand dieser Experimente nicht alle Materialparameter zufriedenstellend identifiziert werden können, wurden einige vereinfachende Annahmen getroffen.

2 Materialmodell

Im folgenden wird das System der Differentialgleichungen mit den zu identifizierenden Materialparametern kurz dargelegt. Für ein genaueres Verständnis des Modells und dessen numerischer Umsetzung sei nochmals auf die in der Einleitung genannte Literatur verwiesen. Im folgenden bleibt die thermomechanische Kopplung unberücksichtigt.

¹Commissariat A L'Energie Atomique, Departement de Mécanique et de Technologie (CEA/DMT), F-Saclay

2.1 Notation

Vektoren, Tensoren zweiter und vierter Stufe werden in Fettdruck dargestellt, wobei Tensoren vierter Stufe zusätzlich durch kalligrafische Buchstaben gekennzeichnet sind.

t	Zeit
θ	Temperatur
λ, ν	Lamésche Konstanten
F	Fließfunktion
s	Plastische Bogenlänge
k	Innere Variable von Spannungstyp zur Beschreibung der isotropen Verfestigung
d	Schädigungsvariable
\mathbf{F}	Deformationsgradient
\mathbf{L}	Geschwindigkeitsgradient
\mathbf{D}	Symmetrischer Anteil des Geschwindigkeitsgradienten
\mathbf{S}	Gewichteter Cauchy'scher Spannungstensor
\mathbf{Z}	Innere Variable von Spannungstyp zur Beschreibung der kinematischen Verfestigung
$\mathbf{1}$	Einheitstensor zweiter Stufe
\mathcal{C}	Elastizitätstensor vierter Stufe
\mathcal{I}	Einheitstensor vierter Stufe
$\dot{(\)}$	Materielle Zeitableitung von $(\)$, $\dot{(\)} = \frac{\partial(\)}{\partial t}$
$(\)'$	Ableitung von $(\)$ nach der Temperatur, $(\)' = \frac{\partial(\)}{\partial \theta}$
$\langle \ \rangle$	McAuley Klammern; $\langle X \rangle = X$, falls $X > 0$; $\langle X \rangle = 0$, sonst
\cdot	Skalarprodukt
\otimes	Diadisches Produkt
$\text{Sp } \mathbf{A}$	Spur des Tensors zweiter Stufe \mathbf{A}
\mathbf{A}^D	Deviator von \mathbf{A} , $\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - (\frac{1}{3} \text{Sp} \mathbf{A}) \mathbf{1}$
\mathbf{A}^T	Transponierte von \mathbf{A}
\mathbf{A}^{-1}	Inverse von \mathbf{A}
$\ \mathbf{A}\ $	Euklidische Norm von \mathbf{A} , $\ \mathbf{A}\ = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$
$\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$	Obere Oldroyd-Ableitung von \mathbf{A} , $\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} - \mathbf{L}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{L}^T$

Indizes:

e	Elastischer Anteil
t	Thermischer Anteil
p	Inelastischer Anteil

2.2 Differentialgleichungssystem

Die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells lauten wie folgt:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_e + \mathbf{D}_t + \mathbf{D}_p = 1/2(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T), \quad \mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \quad (1)$$

$$\mathbf{D}_t = \{\alpha + \alpha'(\theta - \theta_{Ref})\} \dot{\theta} \mathbf{1} \quad (2)$$

$$\mathbf{D}_p = \dot{s} \sqrt{\frac{3}{2} \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D}{\|(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D\|}}, \quad \dot{s} = \frac{\langle \mathbf{F} \rangle^m}{\eta} \quad (3)$$

$$\mathbf{F} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{\mathbf{S} - \mathbf{Z}}{1-d}\right)^D \cdot \left(\frac{\mathbf{S} - \mathbf{Z}}{1-d}\right)^D} - \frac{\mathbf{k}}{1-d} \quad (4)$$

$$\left(\frac{\mathbf{S}}{1-d}\right)^\nabla = \mathbf{c}[\mathbf{D}_e], \quad \mathbf{c} = 2\mu\mathbf{I} + \lambda(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) \quad (5)$$

$$\left(\frac{\mathbf{k}}{1-d}\right)^\cdot = \phi \left\{ \gamma - \beta \left(\frac{\mathbf{k}}{1-d} - \mathbf{k}_0\right) \right\} \dot{s} - \pi \left(\frac{\mathbf{k}}{1-d} - \mathbf{k}_0\right)^\omega + \left\{ \frac{\gamma'}{\gamma} \left(\frac{\mathbf{k}}{1-d} - \mathbf{k}_0\right) + \mathbf{k}'_0 \right\} \dot{\theta} \quad (6)$$

$$\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right)^\nabla = \mathbf{c}\mathbf{D}_p - b\dot{s} \left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right) - p \left\| \frac{\mathbf{Z}}{1-d} \right\|^{w-1} \left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right) + \frac{c'}{c} \left(\frac{\mathbf{Z}}{1-d}\right) \dot{\theta} \quad (7)$$

$$\dot{d} = \left\{ a_0 + (a_1 + a_2 d) \frac{(-\Omega_{et})^n}{(1-d)^q} \right\} \dot{s}, \quad (8)$$

mit

$$\Omega_{et} = -\frac{1}{(1-d)^2} \left\{ \frac{1}{4\mu} \mathbf{S}^D \cdot \mathbf{S}^D + \frac{1}{6(2\mu + 3\lambda)} (\text{Sp } \mathbf{S})^2 \right\}.$$

2.3 Zu identifizierende Parameter

Das oben gezeigte Differentialgleichungssystem besitzt 19 temperaturabhängige, materialspezifische Parameter. Für den französischen Reaktorbaustahl waren der Elastizitätsmodul E und der Wärmeausdehnungskoeffizient α gegeben. Für die Querkontraktionszahl ν sowie den bei thermomechanischer Kopplung benötigten Parameter ϕ in Gleichung (6), wurden die Werte 0.3 bzw. 1.0 angenommen. Somit verbleiben 15 zu identifizierende temperaturabhängige Materialparameter.

Es wird deutlich, daß mit diesem Modell ein typisches Kriechverhalten sehr einfach beschrieben werden kann. Abbildung 1 zeigt typische Kriechkurven, wie sie aus Simulationen von Kriechexperimenten resultieren. Die Rechnungen wurden mit einem FORTRAN-Programm durchgeführt, in dem die einachsige Formulierung des oben gezeigten Differentialgleichungssystems mit einem Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung numerisch integriert wird. Vorgegeben werden die Materialparameter sowie die Lastgeschichte. Als Last kann entweder die Dehnung (technisch/wahr), oder die Spannung (technisch/wahr) in Abhängigkeit von der Zeit vorgegeben werden.

Alle zu Abb. 1 durchgeführten Rechnungen basieren auf denselben Parametern der kinematischen Verfestigung b, c und Viskositätsparametern η, m . Isotrope Verfestigung wurde vernachlässigt, da sie den prinzipiellen Verlauf einer Kriechkurve nicht entscheidend beeinflußt. Die Kurven "A - C" zeigen

Predicted Creep Behavior
(Uniaxial Homogeneous Deformation)

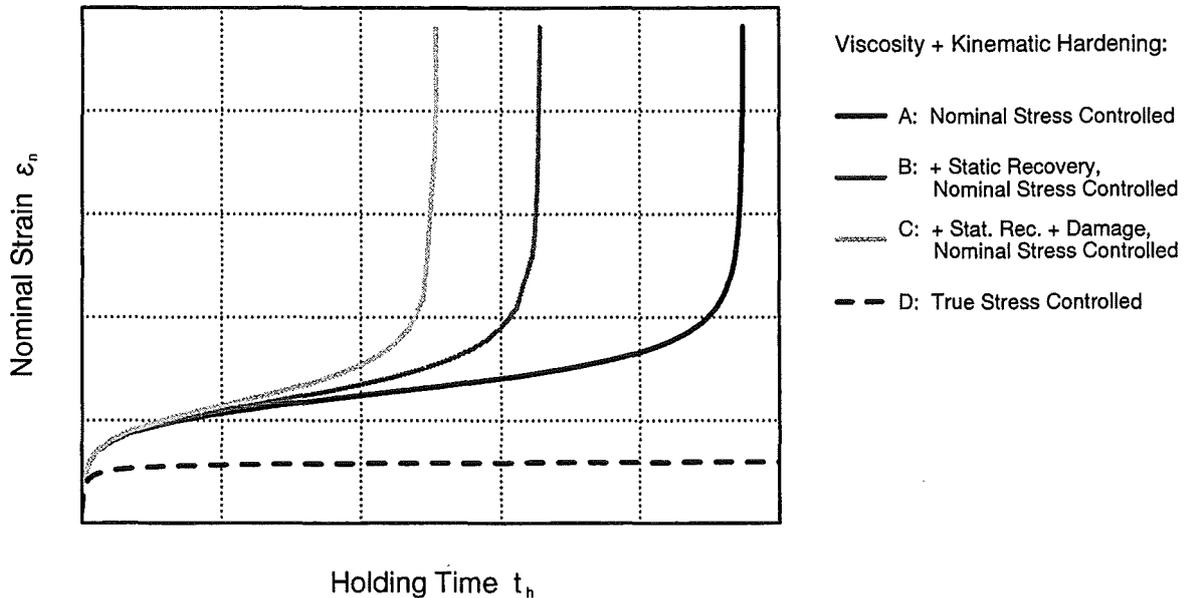


Abb. 1: Berechnete Kriechkurven für dieselben Viskositätsparameter und Parameter der kinematischen Verfestigung.

das typische Deformationsverhalten bei Kriechen. Es sind die Bereiche des primären, sekundären und tertiären Kriechens gut erkennbar. Speziell das tertiäre Kriechen beruht darauf, daß der Probenquerschnitt stark abnimmt und somit bei konstant gehaltener Kraft zu einer Instabilität der Probe führt. Kurve "A" zeigt das typische Deformationsverhalten, wie es aus der Simulation eines Kriechversuchs unter Berücksichtigung von Viskosität und Verfestigung resultiert, bei "B" wurde zusätzlich statische Erholung und bei "C" statische Erholung und Schädigung berücksichtigt. Das prinzipielle Verhalten bleibt erhalten, die Berücksichtigung jedes weiteren, eine Entfestigung beschreibenden Terms verringert erwartungsgemäß die Versagenszeit.

Kurve "D" macht deutlich, daß tertiäres Kriechen mit konstant gehaltener wahrer Spannung (Cauchy-Spannung) nicht beschrieben werden kann. Die Annahme konstanter Cauchy-Spannung führt bei großen Deformationen zu einem ähnlichen Verhalten wie konstante Spannung (Nennspannung) bei kleinen Deformationen.

In Abbildung 2 sind Kriechkurven, für zwei verschiedene angelegte Nennspannungen dargestellt. Für Nennspannung σ_1 wurden verschiedene Parametersätze so gewählt, daß dieselbe Versagenszeit resultierte. In einem weiteren Schritt wurden die Simulationen für eine zweite Nennspannung $\sigma_2 > \sigma_1$ wiederholt.

Predicted Creep Behavior
(Uniaxial Homogeneous Deformation)

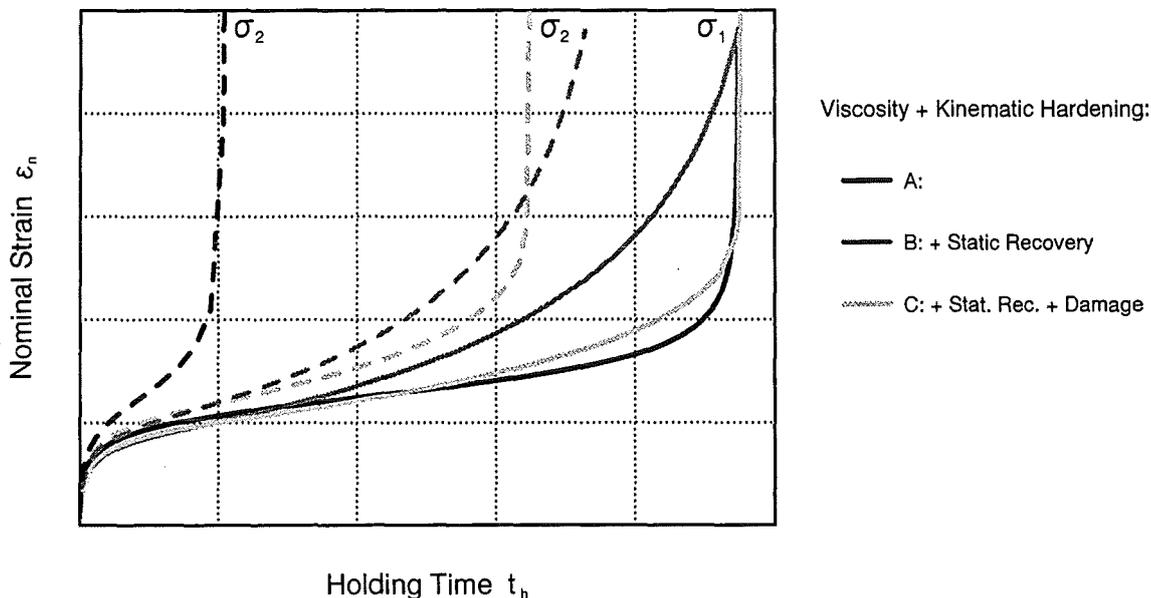


Abb. 2: Einfluß der mit dem Modell beschreibbaren Entfestigungsmechanismen auf das Deformationsverhalten und die Versagenszeit bei Kriechen für die Nennspannungen σ_1 (durchgezogene Linien) und σ_2 (gestrichelte Linien), mit $\sigma_2 > \sigma_1$. Die Berechnungen der Kurven "A" bis "C" basieren auf unterschiedlichen Parametersätzen.

Wird ausschließlich Viskosität und Verfestigung unterstellt (Kurven "A"), zeigt sich eine extrem starke Abhängigkeit der Versagenszeit von der angelegten Spannung. Dieses Verhalten kann so im Experiment nicht beobachtet werden. Bei zusätzlicher Berücksichtigung der statischen Erholung, d.h. $p, w > 0$ (Kurven "B"), nehmen die Dehnungen im Bereich des tertiären Kriechens langsamer zu, die extreme Abhängigkeit der Verformung von der angelegten Spannung verschwindet bei geeigneter Wahl von p und w . Um einen steileren Anstieg der Dehnungen im tertiären Bereich zu erzielen, muß Schädigung, wie in Kurve "C" demonstriert, berücksichtigt werden. Da zur Erlangung der Kurve "C" für σ_1 der Einfluß der statischen Erholung verringert werden mußte, steigt die Differenz zwischen den Versagenszeiten $t_h(\sigma_1)$ und $t_h(\sigma_2)$ wieder an.

Es sollte somit prinzipiell möglich sein, einen Parametersatz zu finden, mit dem die experimentell ermittelten Ergebnisse gut wiedergegeben werden können. Durch Hinzunahme der isotropen Verfestigung lassen sich die experimentellen Kurven im allgemeinen noch besser wiedergeben. Jedoch wird mit jedem weiteren zu identifizierenden Parameter, unabhängig vom Anpassungsverfahren, die dazu benötigte Rechenzeit deutlich erhöht. Speziell stellt die zuverlässige Ermittlung der Schädigungsparameter sehr hohe Anforderungen an das Verfahren (siehe z.B. [10, S. 28 f]). Je mehr Ver- und Entfestigungsmechanismen zur besseren Reproduzierung der Experimente benötigt werden, umso

schwerer ist es die Parameter sicher zu identifizieren. Dies bedeutet, daß in ungünstigen Fällen mit mehreren verschiedenen Parametersätzen die Experimente ähnlich gut wiedergegeben werden können.

Dies wiederum erschwert es, einem äußerst wichtigen Aspekt zu genügen, dem bei der Verwendung eines finiten Elemente Programms Rechnung getragen werden muß. Sollen beispielsweise Festigkeitsuntersuchungen an Bauteilen mit nichtkonstanter und/oder nichthomogener Temperaturverteilung durchgeführt werden, werden im FE-Code die Parameter für eine Temperatur θ , $\theta_1 < \theta < \theta_2$, durch Interpolation aus den gegebenen Parametersätzen für die Temperaturen θ_1 und θ_2 berechnet. Dies erfordert somit, daß bei mehr als drei Stützpunkten pro Parameter, die Werte im betrachteten Temperaturbereich zumindest nicht springen dürfen.

Zur sichereren Bestimmung der Parameter sind daher Experimente mit komplizierteren Lastgeschichten notwendig, die zum momentanen Zeitpunkt nicht zur Verfügung stehen. Der Einfachheit halber wurde bei der Parameteridentifikation isotrope Verfestigung und Schädigung vernachlässigt, d.h. die rechte Seite von Gleichung (8) verschwindet und Gleichung (6) reduziert sich auf

$$\dot{k} = k'_0 \dot{\theta} , \quad (9)$$

mit dem Anfangswert k_0 (Fließgrenze). Mit diesen Vereinfachungen wurde die Anzahl der zu identifizierenden Parameter auf 7 reduziert.

Wie bereits erwähnt, ergaben sich die oben gezeigten Kurven aus Simulationen, bei denen ein einachsig homogener Deformationszustand unterstellt wurde. Eine Schwierigkeit besteht nun darin, daß aus Kriechkurven in der Regel nicht entnommen werden kann, wie lange ein näherungsweise homogener Deformationszustand vorliegt, oder ob die Probe bereits einschnürt, was fälschlicherweise als tertiäres Kriechen interpretiert wird.

3 Parameteridentifikation

Die sieben zu identifizierenden Parameter k_0, b, c, p, w, η und m wurden für 600 °C bis 1000 °C (100 °C -Schritte) mit Hilfe neuronaler Netze bestimmt. Bei diesem Verfahren wird zunächst einem neuronalen Netzwerk die Antwort des Materialmodells auf ein und dieselbe Lastgeschichte für verschiedene Parametersätze trainiert. Nach erfolgreichem Training werden dann die experimentell ermittelten Daten wie die Daten für das Training aufbereitet und in das Netzwerk eingegeben - ausgegeben werden die gesuchten Parameter.

Die Funktionsweise eines neuronalen Netzes sowie die Vorgehensweise bei der Parameteridentifikation wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

3.1 Neuronales Netzwerk

Mit Hilfe neuronaler Netze werden in stark vereinfachter Form einige Fähigkeiten des Gehirns, nämlich die Fähigkeit des Erkennens und Lernens, mathematisch nachgebildet. Es werden hier nur kurz die wichtigsten Begriffe erläutert, zur Einführungen in neuronale Netze und deren Anwendungen ist inzwischen umfangreiche Literatur vorhanden, beispielsweise [1, 2, 14].

Als Anwendung lassen sich mit neuronalen Netzen unter anderem nichtlineare Probleme der computerunterstützten Mechanik lösen. In unserem Fall werden mit Hilfe sogenannter mehrlagiger Perzeptronen die Parameter des Materialmodells anhand der zur Verfügung stehenden Zug- und Kriechkurven identifiziert. Dieses Verfahren zur Parameteridentifikation wurde bereits vielfach erfolgreich eingesetzt (s. z.B. [11, 13] sowie die darin zitierte Literatur, oder [3]).

Eines der Ersatzmodelle für ein biologisches Neuron ist in Abbildung 3 zu sehen. Es handelt sich hierbei um den Grundbaustein eines Mehrlagen-Perzeptrons (siehe z.B. [1, Kapitel C1.2]). Es besitzt J Eingänge (Inputs), $j = 1, 2, \dots, J$ und einen Ausgang (Output). Im Innern des Neurons k werden die Eingänge mit Gewichtungsfaktoren w_{kj} multipliziert und aufaddiert, w_{k0} definiert eine Nullverschiebung. Die Summe aller gewichteten Eingänge und der Nullverschiebung bildet v_k . Der Wert der Aktivierungsfunktion φ an der Stelle v_k ist der Output y_k des Neurons. In unserem Fall wurde als Aktivierungsfunktion die hyperbolische Tangensfunktion $\varphi(v_k) = \tanh(v_k)$ gewählt, so daß y_k zwischen -1 und 1 liegt.

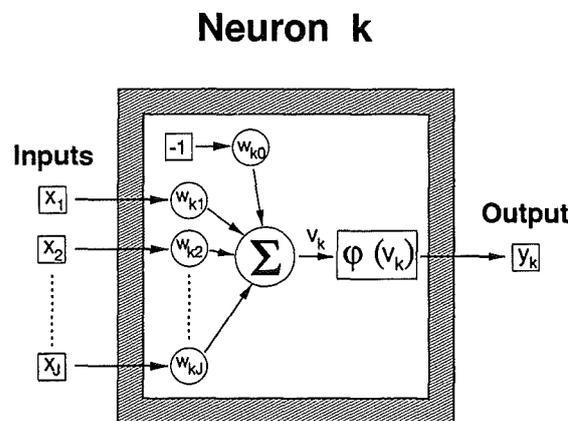


Abb. 3: Grundbaustein eines Mehrlagen-Perzeptrons.

Dieses Neuron stellt eine Verallgemeinerung des von Rosenblatt in den späten 50-er Jahren eingeführten Perzeptrons [9] dar. Grundlage für das Perzeptron ist das McCulloch-Pitts Modell [8] eines biologischen Neurons. Das Perzeptron besteht aus einem einzigen Neuron und besitzt eine Sprungfunktion als Aktivierungsfunktion mit der Eigenschaft $y = 1$, falls $v_k \geq 0$ und $y = -1$, sonst (hard limiter). Neuronen dieser Art eignen sich besonders zur Mustererkennung. Stetige und stetig differenzierbare Funktionen eignen sich besser zur Lösung der hier gestellten nichtlinearen Probleme.

Zur Parameteridentifikation wurden dreilagige neuronale Netze verwendet, bei denen jedes Neuron mit allen Neuron der nachfolgenden Lage verbunden war, die Neuronen derselben Lage waren jedoch nicht miteinander verbunden. Abbildung 4 zeigt die Topologie eines solches Netzes. Der Signalfluß verläuft vom Input ausschließlich in Richtung Output, daher werden solche Netze als *feedforward neural networks* bezeichnet.

Neural Network

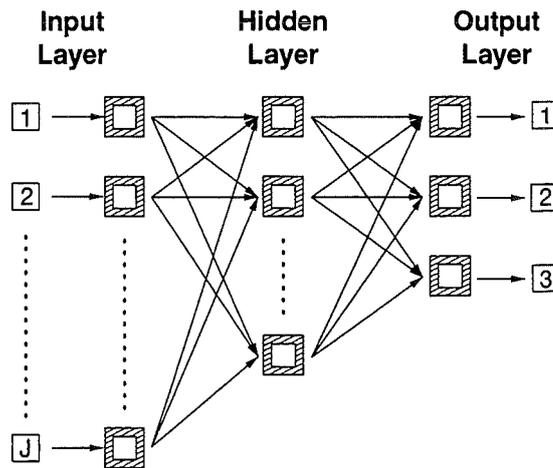


Abb. 4: Prinzipieller Aufbau eines Mehrlagen-Perzeptrons.

Ein neuronales Netz dieser Art besitzt die Fähigkeit während des sogenannten Trainings nichtlineare Zusammenhänge zwischen gegebenen Eingangsgrößen (Input) x und Ausgangsgrößen (Output) y zu erkennen ("erlernen"). Ein Satz aus Input- und Output-Daten wird als Muster bezeichnet. Werden für das Training mehrere Muster (Trainingsmuster) verwendet, vermag das neuronale Netz die erlernten Zusammenhänge in gewissem Maße zu verallgemeinern. Die Fähigkeit des Verallgemeinerns führt letztendlich dazu, daß mit Hilfe eines neuronalen Netzes aus den experimentell ermittelten Daten die gesuchten Parameter ermittelt werden.

Die Input- und Output-Daten stammten in unserem Fall aus numerischen Simulationen der von CEA durchgeführten Zug- und Kriechexperimenten (siehe Kapitel 3.2). Bei dem hier durchgeführten *supervised learning* wurden als Input-Daten spezielle Punkte aus den simulierten Zug- und Kriechkurven gewählt, Output-Daten waren die bei der Simulation verwendeten Parameter des Materialmodells. Es wurden zwischen 170 und 1849 Trainingsmuster verwendet. Als Software für die neuronalen Netze wurde das Programmpaket SNNS, Version 4.1, vom Institut für Parallele und Verteilte Höchstleistungsrechner der Universität Stuttgart verwendet [12].

Wie bereits erwähnt, sind beim Training die Größen auf beiden Seiten des Netzes, x und y , für N verschiedene Muster gegeben. Die freien Variablen bilden die Gewichte innerhalb der Neuronen. Zu Beginn des Trainings werden die Gewichte nach dem Zufallsprinzip innerhalb eines definierbaren

Bereichs initialisiert. Werden nun die Rechenoperationen auf einen gegebenen Input angewendet, so ergibt sich ein Output y^* am anderen Ende des Netzes. Dieser Output wird nun mit dem gewünschten (gegebenen) Output y verglichen. Die Differenz zwischen dem feedforward berechneten Output und dem gewünschten Output definiert einen Fehler E , der somit eine Funktion von y, y^* und w ist. Dieser Fehler wird nun durch Anpassung der Gewichte minimiert. Es wurde hierbei ein *backpropagation*-Verfahren verwendet, bei dem die Gewichte erst am Ende einer Epoche, d.h. nach Abarbeitung aller N Trainingsmuster, angepaßt wurden (*batch learning*). Auf eine genauere Darstellung des *backpropagation* Verfahrens wird verzichtet und in diesem Zusammenhang auf die zuvor erwähnte Literatur verwiesen. Als Lernregel wurde die sog. *resilient backpropagation* Lernregel gewählt. Nach Unterschreiten eines gewissen Fehlers wurde das Training abgebrochen, es waren hierfür ca. 5000 - 10000 Epochen notwendig.

3.2 Simulation und Ermittlung der Trainingsmuster

Wie bereits erwähnt wurden mittels neuronaler Netze die Zusammenhänge zwischen den Antworten des Materialsmodells auf ein und dieselbe Lastgeschichte für verschiedene Parametersätze trainiert. In unserem Fall wurden charakteristische Punkte aus Zugkurven und Kriechkurven verwendet. Im Vordergrund stand somit die Generierung dieser Daten für das Training des jeweiligen Netzes.

Für diesen Zweck wurde das oben erwähnte FORTRAN-Programm so erweitert, daß nun vollautomatisch für eine Vielzahl von Parametersätzen jeweils der Zugversuch und die vier Kriechexperimente für die vier Nennspannungen nachgerechnet wurden. Dazu wurden in einer Eingabedatei Intervalle für die sieben zu identifizierenden Parameter sowie die Anzahl der Zwischenwerte innerhalb des Intervalls festgelegt, wobei mehrere Größenordnungen abgedeckt werden können. Es können weiterhin Bereiche definiert werden, in denen Parameterkombinationen, wie z.B. das Verhältnis c/b oder $\log(\eta) - m$ liegen müssen. Weiterhin wurden nur jene Parametersätze für das Training übernommen, für die die Ergebnisse innerhalb definierter Bereiche um die experimentellen Ergebnisse lagen. Als experimentelle Bezugsgrößen wurden aus dem Zugversuch die Zugfestigkeit und die zugehörige technische Dehnung, hier σ_u und ε_u bezeichnet, und aus den vier Kriechexperimenten jeweils die Zeit zum Erreichen einer definierten Grenzdehnung ε_m verwendet. Durch letzteres wurde der Tatsache Rechnung getragen, daß im Bereich des tertiären Kriechens die Probe bereits bei niedrigeren Dehnungen als beim Versagenszeitpunkt einschnüren kann, wodurch die Annahme eines homogenen Deformationszustands im Meßbereich klar verletzt wird.

Beispielsweise konnte für das Training für $\theta=900^\circ\text{C}$ mit all den oben genannten Einschränkungen die Anzahl der Parametersätze von ursprünglich 94500 (3 Werte für k_0 , 6 Werte für b , 5 Werte für c , 5 Werte für p , 7 Werte für w , 5 Werte für η und 6 Werte für m) auf 176 reduziert werden. Als sehr hilfreich bei der Ermittlung geeigneter Parametersätze erwiesen sich die vom Programm gelieferten Tabellen, die besagten wie oft jeder einzelne Wert eines Parameters zum Erfolg führte.

Für das Training des neuronalen Netzes wurden pro Trainingsmuster 5 Werte aus der Zugkurve und jeweils 3 Werte aus jeder der 4 Kriechkurven, somit 17 Werte, als Eingabegrößen verwendet. Als Ausgabegrößen dienten die sieben zur Simulation dieser Kurven verwendeten Parameter in der Form $k_0, b, c/b, \log(p), w, \log(\eta), m$.

Abbildung 5 verdeutlicht, wie die Eingabegrößen aus den Kurven ermittelt wurden. Und zwar waren dies bei der Zugkurve die Zugfestigkeit und die zugehörige Dehnung (Gleichmaßdehnung) sowie die Nennspannung bei 40%, 60% und 80% der Gleichmaßdehnung. Bei den Kriechkurven waren es die Haltezeiten zum Erreichen der zuvor definierten Grenzdehnung, $t_{m,i}, i = 1, 2, 3, 4$, sowie die technischen Dehnungen bei 40% und 80% von $t_{m,i}$.

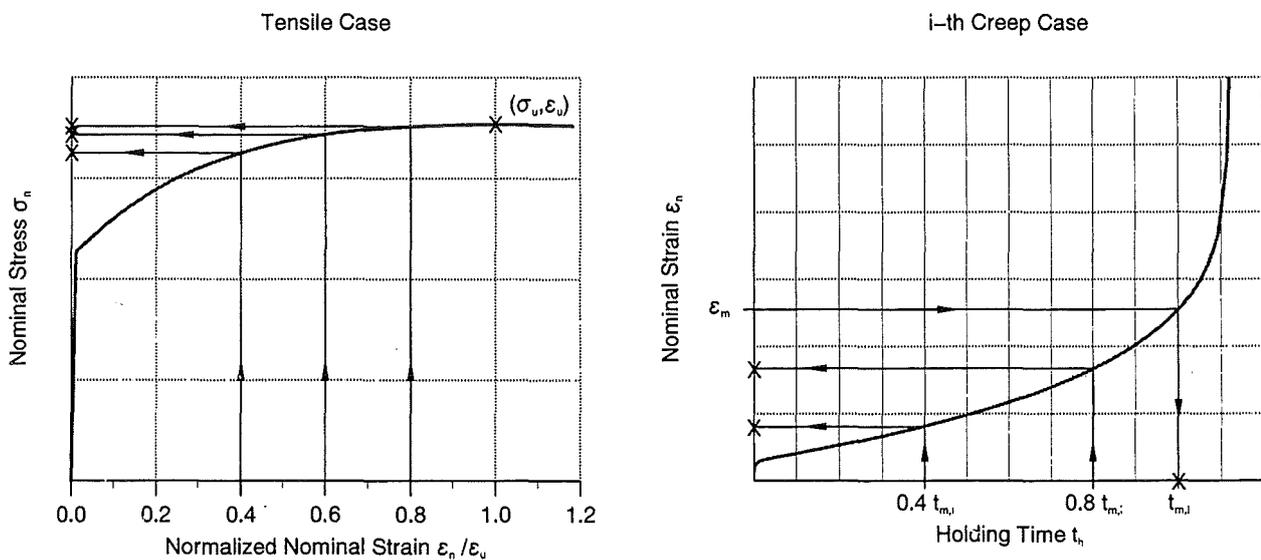


Fig. 5: Ermittlung der Input-Daten für das neuronale Netz (durch "X" gekennzeichnet).

Von den aus den Simulationen resultierenden Mustern wurden einige als Testmuster, die restlichen als Trainingsmuster für das Training des neuronalen Netzes verwendet. Dazu wurden die Daten in eine für SNNS geeignete Form transformiert. Nach Initialisierung der Gewichte wurden mehrere tausend Epochen trainiert, bis der Fehler der Trainings- und Testmuster unterhalb eines gewissen Grenzwertes lag. Nach erfolgreichem Training wurden gemäß dem in Abbildung 5 gezeigten Schema die 17 benötigten Werte aus den experimentell ermittelten Kurven entnommen und in das trainierte Netz eingegeben, woraus die gesuchten Parameter resultierten. Es zeigte sich jedoch, daß einige der Eingabe- und Ausgabegrößen außerhalb der Trainingsgrenzen lagen, woraus folgende Schlußfolgerungen gezogen werden konnten. Zum einen besteht die Möglichkeit, daß mit den angenommenen Vereinfachungen (keine isotrope Verfestigung und keine Schädigung) das im Experiment ermittelte Verhalten nicht beschrieben werden kann. Zum anderen war vielfach nicht bekannt, mit welcher Rate die Nennspannung bei den Kriechexperimenten aufgebracht wurde, was sich speziell bei hohen Nennspannungen und gleichzeitig niedrigen Versagenzeiten durchaus negativ auf die Qualität

der Parameter auswirken kann, da bei der Simulation auch die Lastaufbringung berücksichtigt wird. Weiterhin wurden Kriechversuche nicht wiederholt, wodurch keine Aussage über die bei Kriechexperimenten bekannte Streuung der Versagenszeiten bei nominell gleicher Belastung gemacht werden kann.

3.3 Identifizierte Parameter

Die mittels der neuronalen Netze identifizierten Parameter des vereinfachten Modells (isotrope Verfestigung und Schädigung blieben unberücksichtigt) sind in den Abbildungen 6 und 7 dargestellt. Abbildung 8 zeigt den Vergleich zwischen den Experimenten und den mit den ermittelten Parametern simulierten Experimenten. Es wird deutlich, daß für $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ zwei verschiedene Parametersätze identifiziert wurden. Satz B zeigte eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten, jedoch war der Verlauf über der Temperatur, speziell für w , η und m , unbefriedigend. Nach einem erneuten Training des Netzes auf der Basis derselben Trainingsmuster, jedoch verschieden initialisierten Gewichten, resultierte Satz A, der die Experimente bei $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ schlechter wiedergab, dafür jedoch einen besseren Verlauf über der Temperatur brachte.

3.4 Schlußfolgerungen

Diese Arbeit zeigte, daß die Materialparameter unseres Modells mit Hilfe neuronaler Netze prinzipiell bestimmt werden können. Die vorhandenen Ergebnisse aus Zug- und Kriechexperimenten sind jedoch nicht besonders gut zur Identifikation aller Parameter geeignet, da sich die mit dem Modell beschreibbaren Ver- und Entfestigungsmechanismen nur bedingt dem experimentell beobachtbaren Ver- und Entfestigungsverhalten des Materials zuordnen lassen. Es ist durchaus mit einem besseren Ergebnis bei der Identifikation zu rechnen, wenn isotrope Verfestigung und/oder Schädigung nicht vernachlässigt worden wäre. Die hier durchgeführte Identifikation ist daher nur als erster, vielversprechender Schritt zur Ermittlung der Parameter unseres Modells anzusehen. Zur Verbesserung des Verfahrens werden von uns zyklische Experimente mit dazwischengeschalteten Haltephasen durchgeführt.

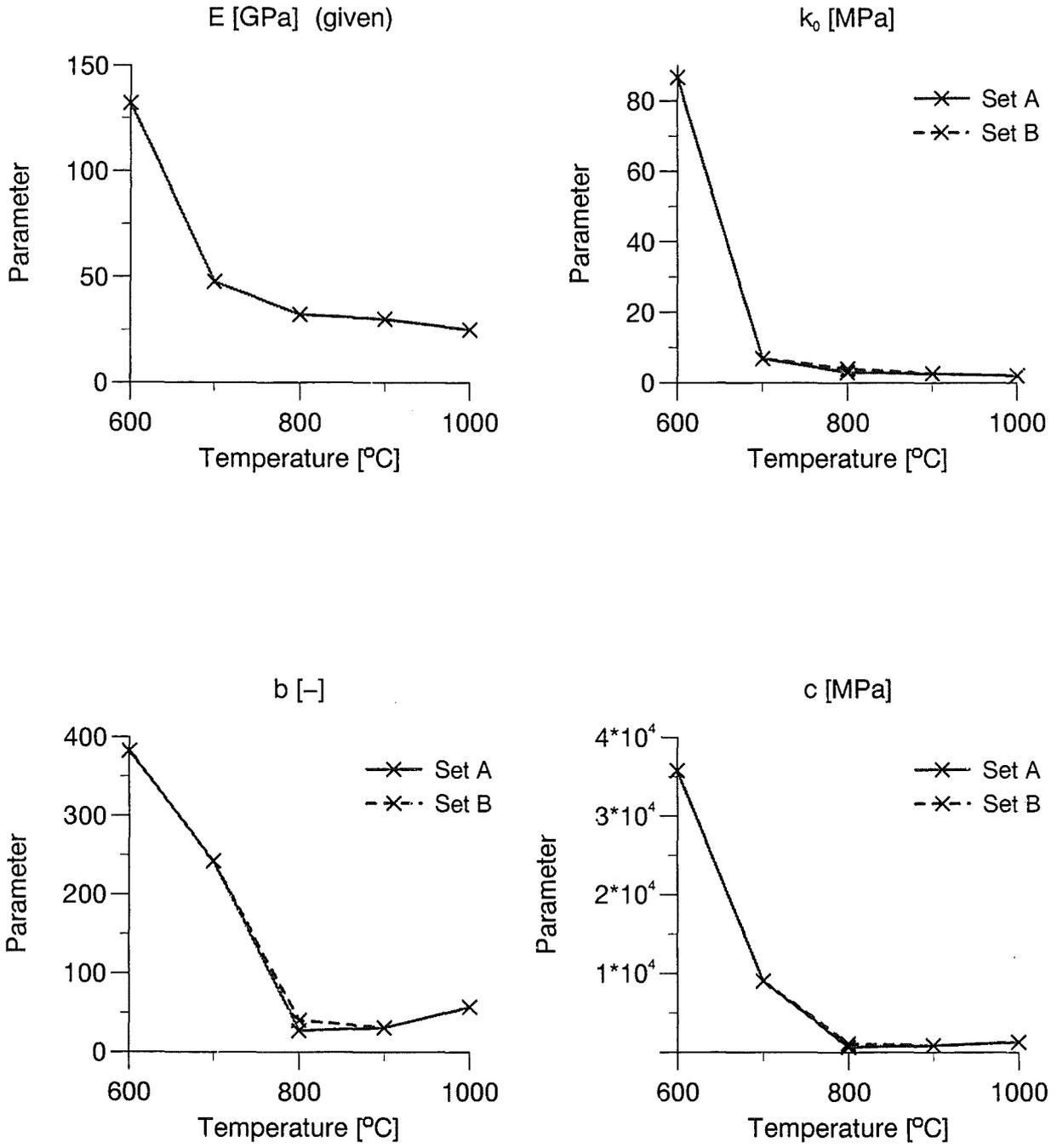


Fig. 6: Elastizitätsmodul und identifizierte Parameter k_0, b, c .

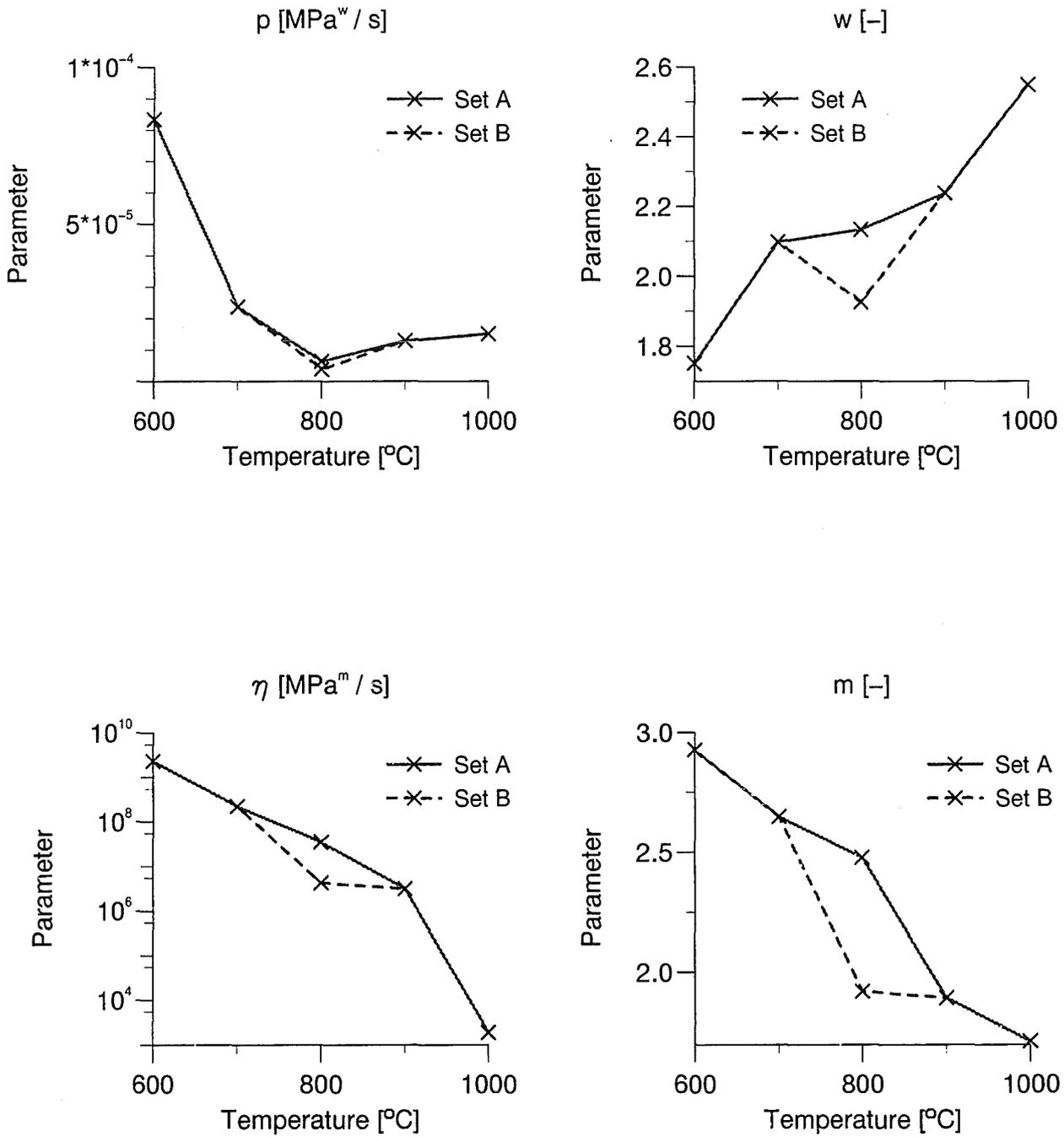


Fig. 7: Identifizierte Parameters p, w, η, m .

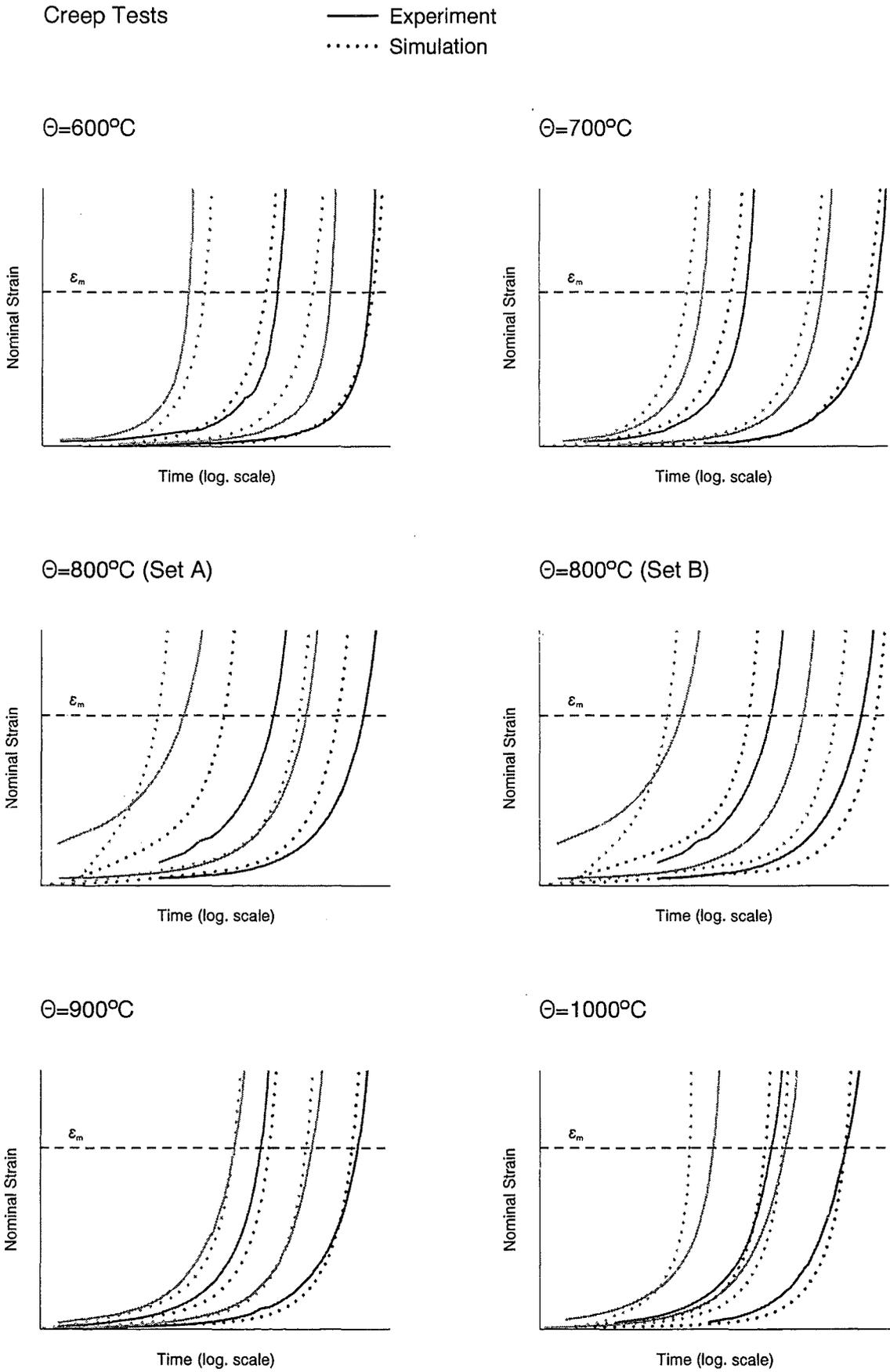


Fig. 8: Experimentelle und simulierte Kriechkurven.

Literatur

- [1] FIESLER, E. and R. BEALE (editors): Handbook of Neural Computation. *IOP Publishing Ltd and Oxford University Press*, (1997).
- [2] HAYKIN, S.: Neural networks: a comprehensive foundation. *Macmillan New York*, (1994).
- [3] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural networks - Part I: The case of pure kinematic hardening in plasticity laws. (*to appear*).
- [4] JANSOHN, W.: Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität und -viskoplastizität. *Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)*, (1996).
- [5] LÄMMER, H.: Thermoplastizität und Thermoviskoplastizität mit Schädigung bei kleinen und großen Deformationen. *Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)*, (1997).
- [6] 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, FZKA-Bericht 5600, Forschungszentrum Karlsruhe*, (1996).
- [7] LÄMMER, H., B. RITTER und CH. TSAKMAKIS: Thermodynamisch konsistente, finite Thermoviskoplastizität mit Schädigung. In MÜHL, B. (*Herausgeber*): Projekt Nukleare Sicherheitsforschung - Jahresbericht 1996, *Seiten 161-182, FZKA-Bericht 5963, Forschungszentrum Karlsruhe*, (1997).
- [8] MCCULLOCH, W.S. and W.H. PITTS: A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bull. Math. Biophys.*, 5, 115-133, (1943).
- [9] ROSENBLATT, F.: The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychol. Rev.*, 65, 386-408, (1958).
- [10] SCHWERTEL, J.: Modellierung des einachsigen mechanischen Verhaltens von Werkstoffen durch viskoplastische Stoffmodelle. *Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)*, (1992).
- [11] SUMPTER, B.G. and D.W. NOID: On the design, analysis and characterization of materials using computational neural networks. *Annu. Rev. Mater. Sci.*, 26, 223-277, (1996).
- [12] UNIVERSITY OF STUTTGART, INSTITUTE FOR PARALLEL AND DISTRIBUTED HIGH PERFORMANCE SYSTEMS (IPVR): SNNS Stuttgart Neural Network Simulator, User Manual, Version 4.1. *Report No. 6/95*.
- [13] YAGAWA, G. and H. OKUDA: Neural networks in computational mechanics. *Archive of Computational Methods in Engineering*, 3, 435-512, (1996).
- [14] ZIMMERMANN, H.J.: Neuro + Fuzzy: Technologien – Anwendungen. *VDI-Verlag, Düsseldorf*, (1995).

- II. DISCO, Experiment zur Dispersion von simuliertem Corium,
die Versuchsanlage
(M. Hartnagel, M. Kirstahler, L. Meyer, A. Roth, M. Schwall, E. Wachter,
G. Wörner, INR)

Zusammenfassung

Die diversen Aspekte der Schmelzedispersion bei moderatem Versagensdruck (ca. 20 bar) und großem Versagensquerschnitt sollen experimentell und analytisch für den Europäischen Druckwasserreaktor (EPR) untersucht werden, um zu einer soliden Datenbasis zu kommen, speziell für die Beurteilung der Rückhaltefähigkeit der Reaktorgrube.

Der Versuchstand DISCO modelliert die EPR-Reaktorgrube im linearen Maßstab 1:18. Die Pumpen- und Wärmetauscherräume, der Beschickungsraum über dem RDB und der Schmelzeausbreitungsraum werden nur nach ihrem Volumen, nicht nach ihrer Form modelliert. Ziel der Versuche ist es, unter realistischen Ausströmbedingungen Daten zur Verteilung der Schmelze bzw. der Simulationsmaterialien in den verschiedenen Reaktorräumen zu erhalten. Die Parameter Anfangsdruck, Lochform und -größe und Grubengeometrie sind variabel. Es soll sowohl eine obere Grenze für den Druck als auch eine optimale Grubengeometrie gefunden werden, bei der der Austrag der heißen Schmelze einen tolerierbaren Wert nicht übersteigt. In der ersten Stufe des DISCO-Programmes werden keine thermischen und chemischen Effekte untersucht. Es werden kalte Simulationsflüssigkeiten verwendet. Da die Dichten der Flüssigkeit und des Treibgases wichtige Parameter für die Skalierung auf den prototypischen Fall sind, werden für beide Fluide drei bzw. zwei verschiedene Stoffe verwendet, nämlich Wasser, eine Galliumlegierung ($\rho = 6 \text{ g/cm}^3$) und eine Wismutlegierung ($\rho = 10 \text{ g/cm}^3$) für die Schmelze und Stickstoff und Helium für Dampf. Die Drücke werden zwischen 3 und 20 bar variiert. Der Versuchstand befindet sich im Aufbau und wird im Frühjahr 1998 in Betrieb genommen.

1. EINLEITUNG

Die Versuche werden im Rahmen der Sicherheitsforschung für Leichtwasserreaktoren durchgeführt. Bei einem schweren Störfall mit Verlust der Kühlung und nachfolgendem Niederschmelzen des Reaktorkerns wird eine Druckabsenkung auf unter 2 MPa im Reaktordruckbehälter (RDB) vorgenommen. Bei ausbleibender Kühlung wird der RDB durchschmelzen und das geschmolzene 'Corium' wird gezielt in den Schmelzeausbreitungsraum geführt und langfristig gekühlt. Es besteht jedoch die Möglichkeit der Einspeisung einer Notkühlung zu einem späten Zeitpunkt. Da sich das gesamte Inventar im RDB, dessen Wände und die Wände des Kühlsystems auf hohen Temperaturen ($>1000^{\circ}\text{C}$) befindet, setzt eine intensive Verdampfung des eingepumpten Wassers ein. Die Verdampfungsrate kann dabei größer werden als die Entlastungsrate durch die Ventile, insbesondere bei Einsetzen einer Zweiphasenströmung. Dadurch kann der Druck im RDB innerhalb weniger Minuten wieder auf Drücke größer 2 MPa steigen [1]. Ist zu diesem Zeitpunkt der RDB durch den Schmelzesee in der unteren Kalotte genügend geschwächt, so kann die Kalotte versagen und Schmelze wird unter Druck ausgetrieben.

Der Hauptzweck der Versuche ist es, unter realistischen Ausströmbedingungen Daten zur Verteilung der Schmelze bzw. der Simulationsmaterialien in den verschiedenen Reaktorräumen zu erhalten. Die Parameter Anfangsdruck, Lochform und -größe und Grubengeometrie müssen variabel sein. Dabei wird sowohl eine obere Grenze für den Druck als auch eine optimale Grubengeometrie zu finden sein, bei der der Austrag der heißen Schmelze einen tolerierbaren Wert nicht übersteigt.

Für die Anwendung der experimentellen Ergebnisse auf den Reaktorfall sind eine Reihe von dimensionslosen Ähnlichkeitsgrößen maßgebend. Diese Größen können mit Hilfe von Modellgleichungen bestimmt werden [2, 3]. Eine Überprüfung der darin gemachten Annahmen erfordert die Kenntnis von Details der Strömungsvorgänge. Im einzelnen sind dies die Druckverläufe im RDB und in der Grube, die Ausströmzeiten von Flüssigkeit und Gas, die Geschwindigkeiten des Gases und der Tropfen, die Tropfengröße und die Filmdicke an den Grubenwänden.

Die Ergebnisse werden mit den Referenzexperimenten verglichen, die im Maßstab 1:10 mit Thermit-Schmelze in der Surtsey-Anlage in Sandia durchgeführt werden, sowie mit Simulationsexperimenten im Maßstab 1:20 von Bertodano et al. [3].

2. SKALIERUNG

Der Versuchstand DISCO modelliert die EPR-Reaktorgrube (Abb.1) im linearen Maßstab 1:18. Entsprechend skalieren die Flächen 1:324 und die Volumina 1:5832. Die Pumpen- und Wärmetauscherräume, der Beschickungsraum über dem RDB und der Schmelzeausbreitungsraum werden nur nach ihrem Volumen aber nicht nach ihrer

Form modelliert. Die Hauptabmessung von DISCO sind:

Lichte Höhe	ca. 2100 mm	
Durchmesser	ca. 2300 mm	
Durchmesser des RDB	298.5 mm	(EPR 5373 mm)
Ringspaltweite (variabel)	21.75 mm	(386 mm)
Volumen unter Druck	0.069 m ³	(440 m ³)
Max. Flüssigkeitsvolumen ca.	3.4 dm ³	(17 m ³)

Die Frage der Ähnlichkeit zwischen den prototypischen Vorgängen im EPR und den Vorgängen im kleinen Maßstab in DISCO mit Simulationsmaterialien wird ausführlich im folgenden Bericht [2] behandelt. Natürlich sind bei der Vielzahl der physikalischen Prozesse die dimensionslosen Ähnlichkeitszahlen im EPR und in DISCO nicht gleich. In der ersten Stufe des DISCO-Programmes werden keine thermischen und chemischen Effekte untersucht. Es werden kalte Simulationsflüssigkeiten verwendet ($T < 80^{\circ}\text{C}$ gegenüber $T > 2000^{\circ}\text{C}$ bei Corium-Schmelze). Da die Dichten der Flüssigkeit und des Treibgases wichtige Parameter sind, werden für beide Fluide drei bzw. zwei verschiedene Stoffe verwendet. So können die Einflüsse bestimmter Ähnlichkeitszahlen studiert und obere und untere Schranken für die Dispersion gefunden werden.

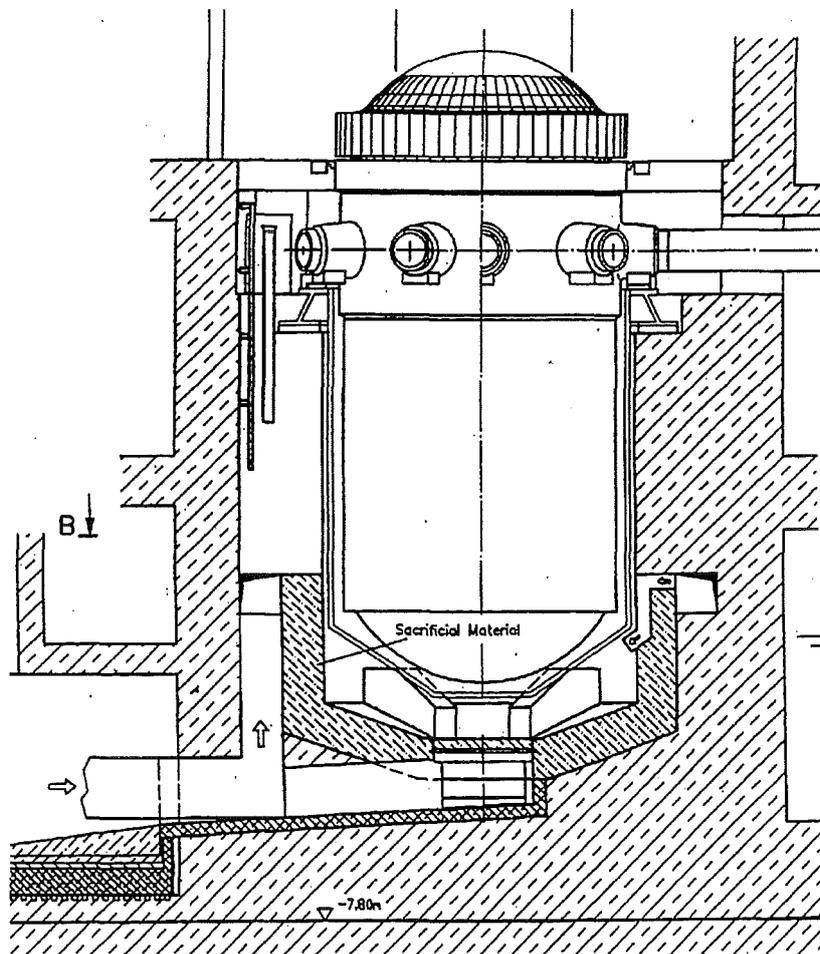


Abb. 1. Das Referenzkonzept der EPR-Reaktorgrube

3. BESCHREIBUNG DER ANLAGE

3.1. Der Druckbehälter

Abb.2 zeigt das Schema der Gesamtanlage. Der Kern der Anlage ist der Druckbehälter, ein 1.40 m langes Rohr mit einem Innendurchmesser von 227 mm. Das obere Ende ist mit einem Flansch verschlossen, in den die Gaszuführung und Drucktransmitter eingebaut sind. Am unteren Ende befinden sich zwei Berstscheiben. Die beiden Berstscheiben halten einzeln jeweils nur etwas mehr als den halben Gesamtdruck im Behälter aus. Durch eine zweite Gasleitung wird der Raum zwischen den Berstscheiben mit etwa der Hälfte des Gesamtdruckes beaufschlagt. Der Start des Experiments, also das Bersten beider Scheiben, wird durch Erhöhung oder Verminderung des Druckes im Zwischenraum eingeleitet.

Das Volumen des Gasbehälters modelliert das Volumen des Reaktordruckbehälters (RDB) und das des Kühlsystems (RKS). Eine Trennung beider Volumina wird durch eine Lochscheibe im Druckrohr hergestellt (nicht im Schema gezeigt) mit einem Anteil von 60% vom Gesamtvolumen oberhalb dieser Scheibe entsprechend des größeren Kühlsystemvolumens. Der Gasdurchfluß durch diese Scheibe entspricht der Ausströmung aus den Hauptkühlmitteleitungen in den RDB. Es wird eine einfache lineare Skalierung vorgenommen. Dazu besitzt die Scheibe 8 kreisrunde Löcher (\varnothing 44 mm) mit jeweils einem eingeschweißten kurzen (250 mm) Rohrstück. Wenn das Verhältnis der Drücke vor und hinter der Scheibe größer als 2 wird, strömt das Gas mit Schallgeschwindigkeit aus den Rohren.

Um die Reststrukturen im RDB zu modellieren, und insbesondere eine ungestörte Schockwellenausbreitung im Druckbehälter zu verhindern, sind unterhalb der Trennscheibe weitere Einbauten mit allerdings wenig Versperrung vorgesehen (nicht in Abb. 2 dargestellt).

3.2. Das RDB-Modell mit unterer Kalotte

Das RDB-Modell besteht aus einem Stahlrohr, dessen Innendurchmesser nur wenig größer als der Außendurchmesser des Druckbehälters ist. Der Außendurchmesser beträgt 298,5 mm und ist damit genau skaliert zum EPR. Eine halbkugelförmige Kalotte ($r = 150$ mm) schließt das RDB-Modell nach unten hin ab. In der Kalotte befindet sich die Modellflüssigkeit. Der Druck über der Flüssigkeit ist gleich dem Außendruck. Ziel war es, das drucklose Volumen zwischen unterer Berstscheibe und Flüssigkeitsoberfläche so klein wie möglich zu halten.

Oberhalb der Kalotte befindet sich eine Lochplatte, die die Kerntirageplatte modelliert. Der freie Querschnitt dieser Platte ist ein variabler Versuchsparameter. Diese Platte wird allerdings auch den Druck- und Gasmassenstoß auf die Flüssigkeitsoberfläche vermindern, der eventuell ohne diese Platte zu einem unprototypischen Verhalten der

Flüssigkeit führen könnte. Das muß durch spezielle Vorversuche untersucht werden. In der Kalotte befindet sich das Ausströmloch, das durch eine dünne Membran verschlossen ist. Für verschiedene Löcher gibt es jeweils eine Kalotte.

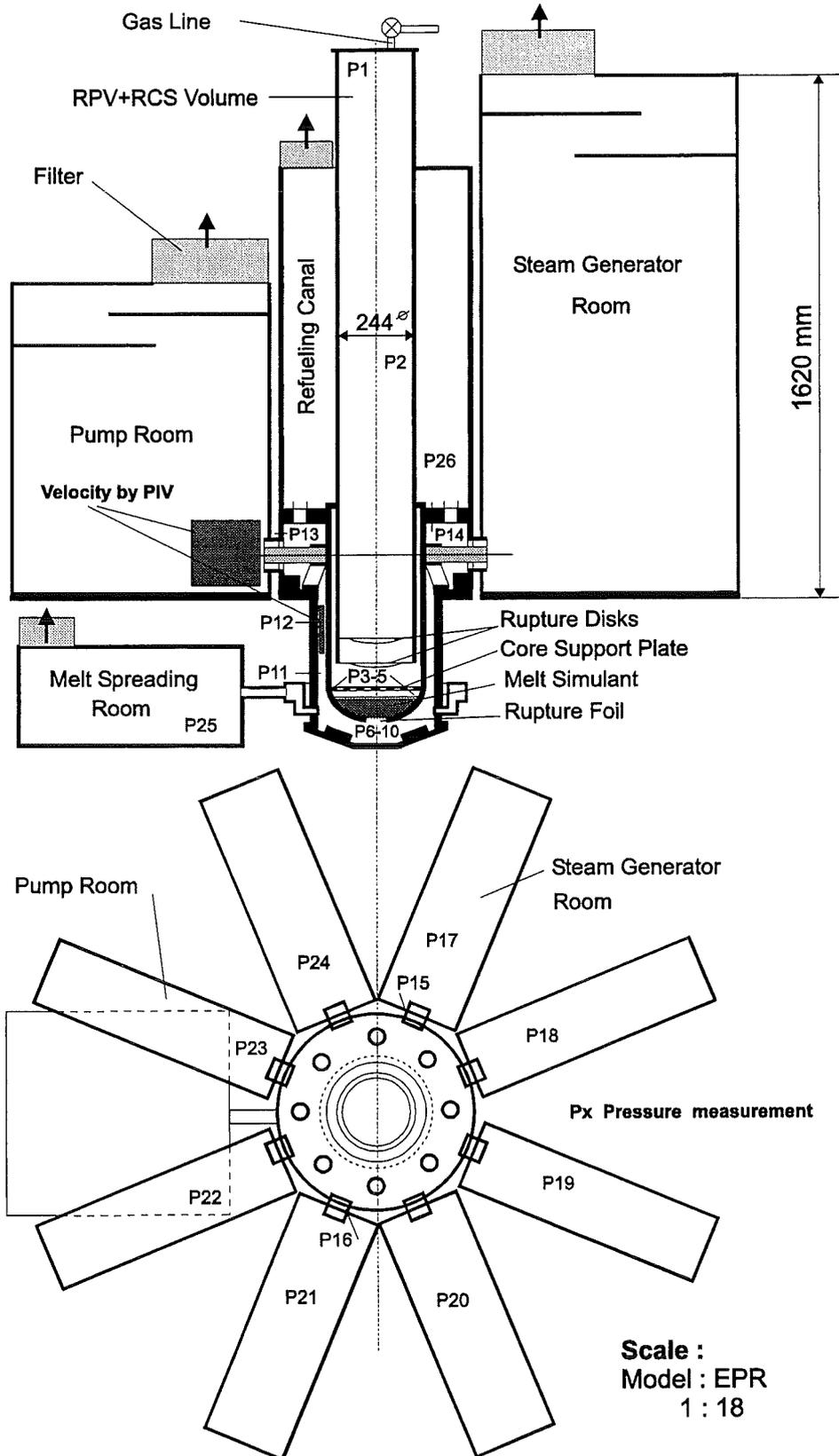


Abb. 2. Schema der DISCO-Anlage

Im oberen Abschnitt des RDB-Behälters sind 8 kegelstumpfförmige Teile am Umfang angeschweißt, die die Anschlußstutzen der Hauptkühlmittelleitungen modellieren.

3.3. Die Reaktorgrube

Der untere Teil der Reaktorgrube besteht aus einem Hohlzylinder (Rohr) und einem Bodenteil, die beide leicht zu demontieren sind. Die Kräfte auf den Boden werden von unten abgefangen; der Boden wird von einem Hubtisch in Position gehalten. Es werden verschiedene Modelle der Reaktorgrube (Rohre) hergestellt, um die Parametervariationen (s. Abschnitt 4) durchführen zu können. Die ersten Tests werden mit einem durchgehend transparenten Rohr aus Polycarbonat (Makrolon®) durchgeführt. Später wird der Mittelteil aus einem Stahlrohr bestehen, das mit Fenstern für Geschwindigkeitsmessungen versehen ist.

Da Position und Art der vier Lüftungskanalöffnungen im EPR-Entwurf noch nicht festliegen (Abb.1 und 2 zeigen alte Version), werden drei vertikale Positionen vorgesehen für je vier Öffnungen jeweils um 90° am Umfang versetzt. Der Ringkanal lässt sich auf die gewählte Höhe verschieben, die anderen Öffnungen werden verschlossen.

Der obere Teil der Reaktorgrube wird von einem Ring gebildet, der aus vier Segmenten zusammengesetzt wird und der 8 Rohrstützen trägt, die die Durchbrüche für die Hauptkühlmittelleitungen modellieren. An diese Stutzen werden die Modelle der Dampferzeuger- und Pumpenräume angeschlossen.

Der kleinste Strömungsquerschnitt aus dem Ringraum nach oben in die Reaktorräume befindet sich am RDB-Tragring. Die Abströmfläche durch den Tragring beträgt im Original 2,7 m² und zwischen RDB und Tragring 1,6 m². Die Auflager im DISCO-Modell versperren den Querschnitt nur wenig, deswegen wird der entsprechende Strömungsquerschnitt durch Einlegen eines Ringes an den Stützen eingestellt. Der Querschnitt kann durch Verwendung verschiedener Ringe einfach variiert werden, um eine zusätzliche Versperrung durch Isolationsmaterial zu modellieren.

3.4. Die Reaktorräume

Die Reaktorräume (vier Pumpenräume, vier Dampferzeugerräume und der Schmelzeausbreiter) sind rechteckige Kästen, die nur das Volumen der jeweiligen Räume skalieren, nicht deren Form. Zur Bestimmung der in sie gelangten Flüssigkeitsmenge und zur Reinigung können sie nach einem Versuch einfach von den Stützen an der Reaktorgrube abgezogen werden. Die Öffnung nach außen an der Oberseite ist jeweils mit einem Filter versehen, der Flüssigkeitstropfen bis hinunter zu einer Größe >5 µm bei einem maximalen Druckverlust von 100 Pa abscheidet. Falls notwendig werden Feinstfilter nachgeschaltet. Der Beschickungsraum über dem RDB besteht aus zwei kreisförmigen Halbschalen. Er ist nach oben ebenso durch Filter mit der Umgebung verbunden. Das Containment wird nicht modelliert.

4. MESSTECHNIK

Die Positionen der Druckmessstellen ist in Abbildung 2 angegeben. Die Temperaturen werden an den gleichen Positionen gemessen, im wesentlichen zur Überwachung des Aufheizvorganges bei der Verwendung von Flüssigmetallen. Die Verteilung der dispergierten Flüssigkeitsmassen in den Reaktorräumen und der Reaktorgrube wird durch Wiegen der Kästen vor und nach dem Versuch mit einer Präzisionswaage (Auflösung 0.3 g) bestimmt. Die Flüssigkeit in den übrigen Teilen muß teilweise durch Auswischen und durch Berechnung der Fehlmenge bestimmt werden.

Die Position und damit die Geschwindigkeit der Front des Flüssigkeitsfilmes in der Grube wird durch Widerstandssonden gemessen. Parallele Leiterbahnen (Raster 1mm) sind in eine dünne Folie von 0.1 mm Gesamtdicke eingeschweisst. Von je drei Leiterbahnen ist die mittlere eine Masseleitung. Ein Fenster in der Deckfolie (Breite 1.5 mm, Länge 5 mm), das sich über dem Masseleiter und einer benachbarten Leiterbahn befindet, bildet eine Einzelsonde. Der Widerstand zwischen diesen beiden Leitern ändert sich bei Benetzung mit der Simulationsflüssigkeit. Die Fenster sind längs der Folie im Abstand von 10 mm angeordnet, jeweils um ein bzw. zwei Leiter versetzt. Vier Folien schmiegen sich an die Innenwand der Reaktorgrube an, und zwar zwei am Boden mit je 17 Messstellen (26 Leiter, Breite 28 mm, Länge 170 mm) und zwei an der senkrechten Wand mit je 38 Messstellen (57 Leiter, Breite 59 mm, Länge 380 mm), an zwei gegenüberliegenden Seiten.

Tabelle 1. Messgrößen und Messtechnik

Größe	Technik	Anzahl
Druck	Piezo-resistiv , Kistler	25
Temperatur	Thermoelement, Typ K	25
Verteilung der Massen	Wiegen nach Test	12
Filmfront- Geschwindigkeit	Widerstandssonde	110
Filmdicke	Ultraschall alternativ	1
Geschwindigkeit des Gases	PIV (Particle Imaging Velocimetry)	1
Geschwindigkeit der Tropfen	PIV	1
Tropfengröße	Video	1
Ausströmzeit der Flüssigkeit	HS-Film	1
Ausströmzeit aus Grube	HS-Film	1
Ausströmzeit des Gases	über Druck	

Die Flüssigkeitsfilmdicke kann durch zwei verschiedene Verfahren bestimmt werden. Bei transparenten Medien wie Wasser kommt die Absorptionsmethode in Betracht. Ein Laserstrahl einer Halbleiter-Laserdiode ($\lambda = 1460 \text{ nm}$, Nahes Infra-Rot - NIR) wird auf den Flüssigkeitsfilm gerichtet und eine Photozelle dahinter registriert die Abschwächung der Intensität als Maß für die Filmdicke. Der Einbau der Messvorrichtung ist kompliziert und die Methode ist beschränkt auf durchsichtige Medien. Deshalb wird eine zweite Methode verfolgt, die Messung durch Ultraschallreflektion. Hier wird ein Ultraschallsender und -empfänger von außen auf die Behälterwand aufgesetzt. Durch Auswertung der Echos kann auf die Filmdicke geschlossen werden.

Die Geschwindigkeit des Gases und der Tropfen wird mit der PIV-Methode (Particle Imaging Velocimetry) bestimmt. Es werden dazu zwei Laser benötigt, die zwei kurze (typisch 5 ns) Pulse innerhalb einer kurzen Zeit (je nach Geschwindigkeitsbereich) abgeben. Der Strahl wird zu einem Lichtschnitt aufgeweitet und senkrecht zu Strömungsrichtung und Wand gerichtet. Eine synchronisierte CCD-Kamera nimmt pro Lichtpuls jeweils ein Bild des an Partikeln gestreuten Laserlichtes auf. Bei einem reinen Gas werden Tracerpartikel zur Erzeugung von Streulicht benötigt. Sind sehr kleine Tröpfchen vorhanden, so können diese als Tracer dienen. Das System kann so eingestellt werden, dass entweder die Tracer oder die größeren Tropfen ($< 1 \text{ mm}$) die Bildinformation liefern. Aus dem Versatz der Tracerabbilder wird Richtung und Größe der Geschwindigkeit berechnet. Die derzeitigen Anlagen liefern 10 bis 15 Messungen pro Sekunde.

Die Tropfengröße kann mit Hilfe entsprechender Software aus den gleichen Bildern bestimmt werden. Für die Messung im Ringspalt der Grube wird ein Fenster für den Laserstrahl in den Grubenhohlzylinder an der Messposition angeflanscht. Für die Kamera muss senkrecht dazu, tangential im Ringspalt, ein Fenster eingesetzt werden. Für beide Fenster gilt die Forderung, dass sie einerseits die Strömung wenig stören sollen, andererseits sollte sich kein Flüssigkeitsfilm auf dem Fenster bilden. Die Fenster müssen also von der Wand etwas zurückgesetzt und mit einer Ablenkkante für den Film versehen werden.

Um die Art und die Zeit des Ausströmens der Flüssigkeit aus dem RDB und aus der Grube in die Reaktorräume zu bestimmen, sollen Hochgeschwindigkeitsaufnahmen gemacht werden. Der untere Teil der Reaktorgrube und eine Wand eines Kastens wird deshalb aus transparentem Makrolon[®] hergestellt.

5. EXPERIMENTELLE PARAMETER

Die folgenden sieben Parameter sollen in den Versuchen variiert werden:

Simulationsmaterial Schmelze:	Wasser (T = 20°C, $\rho = 1.0 \text{ g/cm}^3$) Gallium- Legierung (T _m = 11°C, $\rho = 6.4 \text{ g/cm}^3$) Wismut-Legierung (T _m = 58°C, $\rho = 9.1 \text{ g/cm}^3$)
Simulationsmaterial Dampf:	N₂ , He
Druck (MPa):	0.25, 0.5, 1.0 , 2.0 , (3.0)
Form des Bruchs:	Rundes Loch (zentral und seitlich) , Riß (vertikal und am Umfang)
Lochgröße (cm):	2.8, 5.55 , 11 (50, 100, 200 cm bei EPR) und Absturz der Kalotte
Grubengeometrie:	mit/ ohne Isolation (Variation d. Strömungsquerschnittes) mit/ ohne Instrumentierungsschlitz mit/ ohne vertikalen Öffnungen in den Beschickungsraum Variation im RG-Bodenbereich (Lüftungskanaleinlass)
Kerntrageplatte:	Größe und Verteilung der Löcher

Wegen der großen Zahl der möglichen Kombinationen der Parameter (ca. 50000) wird ein Standardfall definiert von dem aus einzelne oder Gruppen von Parametern systematisch geändert werden, sodass die Gesamtzahl der Experimente etwa bei 100 liegen wird. Die Kombination der oben fett gedruckten Daten könnten diesem Standardfall entsprechen. Bei der Verwendung von Wasser und der Galliumlegierung befindet sich die Versuchsanlage bei Raumtemperatur, während für die Wismutlegierung die Anlage durch Heißluft auf ca. 70°C aufgeheizt wird.

6. SCHLUSSBEMERKUNGEN

Der Versuchsstand befindet sich im Aufbau und mit den ersten Versuchen ist im April 1998 zu rechnen. Genaue Daten vom Versuchsstand und den Simulationsmaterialien und eine Beschreibung des Versuchsablaufes sind in dem Internen Bericht [4] zu finden. Die Skalierungsanalyse wird im folgenden Bericht [2] ausführlich dargelegt.

Referenzen

1. W. Baumann, G. Jacobs, M. Lau, L. Meyer, "Druckaufbau bei spätem Fluten in einem 'Station Blackout'." Beitrag zum PSF-Jahresbericht 1996.
2. G. Jacobs, "Skalierungsanalyse zum DISCO-Experiment", Beitrag in diesem Jahresbericht 1997.
3. M.L. de Bertodano, A. Becker, A. Sharon, R. Schnider, "DCH dispersal and entrainment experiment in a scaled annular cavity," Nucl. Engng. Design **164**, p.271-285, (1996)
4. L. Meyer, A. Roth, " DISCO, Experiment zur Dispersion von simuliertem Corium, Die Versuchsanlage", Interner Bericht 32.21.03, INR 1972, PSF 3284, Nov. 1997

III. Scaling Analysis for DISCO

(G. Jacobs, T. Wendlandt, D. Brunsbach, INR)

Zusammenfassung

Die Skalierungsanalyse für DISCO, die auf Arbeiten von Tutu, Ginsberg u. a. am Brookhaven National Laboratory (BNL) basiert, liefert einen Satz von dimensionslosen Kennzahlen, die die Übertragung der Modellversuche auf den EPR ermöglichen sollen. Die Skalierungsanalyse verwendet eindimensionale, Zwei Phasen Erhaltungsgleichungen. Die Bewertung der Kennzahlen für einen realistischen 1:1-Fall im Vergleich mit entsprechenden, fiktiven DISCO-Läufen zeigt zwar größere Abweichungen für mehrere Kennzahlen, läßt aber erkennen, daß aus den erwarteten DISCO-Versuchsergebnissen brauchbare Näherungen, speziell für untere und obere Schranken des Anteils der dispergierten Schmelze zu gewinnen sind.

Abstract

The scaling analysis for DISCO, based on the work of Tutu, Ginsberg et al. at Brookhaven National Laboratory (BNL), yields a set of scaling groups, which should enable the extrapolation of the model tests to the EPR. The scaling analysis uses one-dimensional, two-phase flow conservation equations. The evaluation of the scaling groups for a realistic full scale case compared with corresponding fictive DISCO runs showed considerable mismatches of several groups, but it seems possible, to get useful approximations from the expected DISCO data, especially for lower and upper bounds of the melt fraction dispersed.

Introduction

The purpose of a scaling analysis is in general, and in particular for the melt dispersal problem, to make it easier to extrapolate the experimental results to the real case. The dimensionless scaling parameters obtained quantify the physical similarity between the model and the reality. As the dispersal phenomena are essentially fluid-mechanic in

nature, low-temperature experiments like DISCO [9] are well suited to simulate dispersal phenomena. However, the physical similarity cannot be achieved completely, because thermal and chemical interactions of high-temperature corium melt and steam have an important effect on the dispersal processes. Particularly, the melt/steam heat transfer, the metal/steam reaction, and the melt/concrete reaction are processes which have to be kept in mind when one tries to apply low-temperature data to the corium case. The melt/steam heat transfer is large, because the heat capacity of the steam is much smaller than that of the melt. Therefore, the flowing steam heats up to the melt temperature in a very short time and distance, which leads to a higher gas velocity in the cavity and consequently to an enhanced droplet entraining. The metal/steam reaction increases the temperature and reduces the density of the gas in the cavity by replacing steam with hydrogen. By this the droplet entraining rate and the drag on the droplets are influenced. The erosion of the concrete surfaces by the high-temperature corium melt produces large amount of steam and carbon dioxide gas, which blow away the melt film on the concrete surfaces and enhances the melt dispersal. These important processes will be addressed by the forthcoming high-temperature experiment at the Sandia National Laboratories in the US and by a similar experiment planned at FZK with the use of more prototypic melt simulants. Furthermore, some other important aspects were left aside in the scaling analysis up to now, e.g. the mode of melt discharge, the outset of subsonic flow conditions at the break, and two-dimensional effects in space. These tasks have to be considered in the near future.

The usual method of developing scaling parameters is the dimensional analysis using Buckingham's π -theorem [1]. The weakness of the method is that the individual dimensionless terms may have little physical meaning. The scaling method we have performed was adopted from the work of Tutu and Ginsberg et al. at Brookhaven National Laboratory (BNL) [2], which is based on the differential equations describing the processes of the problem. The scaling parameters found by this method are well known or have a clear physical meaning. The first step of the approach is to envision a simplified physical model for the melt dispersal processes in the reactor cavity, which results in a set of conservation equations, constitutive relationships and boundary

conditions. Next, all the equations are rewritten in terms of dimensionless variables, for which reference values of all the variables have been selected before. The constant terms appearing in the dimensionless equations are the parameters that must be preserved (π -terms), to guarantee physical similarity between the small scale model experiment and the full scale prototype. Finally, an appropriate set of independent scaling groups can be derived, to express the π -terms by products of these groups.

Conservation equations

The simplified model of the cavity dispersal processes is as follows: First, we don't care of the mode of melt discharge and assume that after discharge of the melt from the vessel the melt spreads along the floor and the walls of the cavity as a liquid film. Thereafter, during steam blow-down, melt droplets are entrained from the film into the gas flow. It is assumed that the melt-steam flow is a one-dimensional two-phase dispersed annular film flow with no chemical reactions. About the droplet dispersal process simple assumptions are made for the purpose of modeling the interfacial gas-liquid drag and heat transfer. The dispersal process modeled is regarded as one-way neglecting droplet deposition, trapping and re-entraining. Thus the fraction of melt dispersed is the net fraction of melt carried over as droplets.

The continuity equations for the gas and liquid phases are given by:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\rho_g j_g A) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(1 - \alpha) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x}(j_f A) = 0$$

The liquid density doesn't appear in the liquid continuity equation since it is assumed constant. The duct flow area is time independent. For notations the reader is referred to the section on **Nomenclature**. With the use of the continuity equations the linear momentum equations for both phases can be written:

$$\rho_g \frac{\partial}{\partial t} (j_g) - \frac{\rho_g j_g}{\alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \rho_g j_g \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{j_g}{\alpha} \right) = -\alpha \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha \rho_g g_x - F_{film}^i - F_{drop}^i$$

and

$$\begin{aligned} & \rho_f \frac{\partial}{\partial t} (j_f) - \frac{\rho_f j_f}{(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} (1-\alpha) + \rho_f j_f \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{j_f}{(1-\alpha)} \right) \\ & = -(1-\alpha) \frac{\partial P}{\partial x} + \rho_f (1-\alpha) g_x + F_{film}^i + F_{drop}^i - F_{film}^w \end{aligned}$$

The exchange terms $F_{film}^i, F_{drop}^i, F_{film}^w$ account for the interfacial drag on the liquid film and droplets and the wall friction respectively. The energy equation for the gas phase is written

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha \rho_g u_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_g u_g j_g A) = -P \frac{\partial \alpha}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (j_g A) + Q_{film}^i + Q_{drop}^i$$

where u_g is the specific gas internal energy and Q_{film}^i and Q_{drop}^i account for heat transfer through the film and droplet interface respectively, however, without radiation heat transfer. In order to rewrite the above equation in terms of P - and T -derivatives we introduce the specific enthalpy $h_g = u_g + Pv_g$ of the gas. Setting h_g zero at absolute zero temperature and assuming ideal gas properties as well constant specific heat we obtain the approximation

$$u_g \approx c_p T_g - P/\rho_g.$$

With the use of the gas continuity equation and the ideal gas approximation above the gas energy equation can be written:

$$c_p \alpha \rho_g \left[\frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{j_g}{\alpha} \frac{\partial T_g}{\partial x} \right] - \alpha \left[\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{j_g}{\alpha} \frac{\partial P}{\partial x} \right] = Q_{film}^i + Q_{drop}^i.$$

For details of the constitutive terms $F_{film}^i, F_{drop}^i, F_{film}^w, Q_{film}^i, Q_{drop}^i$ in the field equations the reader is referred to [12].

Initial and boundary conditions

According to the simple model we assume that the melt has been spread already on the floor and the walls of the cavity as a liquid film of initial thickness δ_0 , i.e. $1 - \alpha = \frac{4\delta_0}{D_h}$.

The upstream boundary conditions of the dispersal process are defined by a choked flow gas blow-down process. Wulff [3] has shown that isothermal conditions can be used for greater simplicity in the analysis of cavity dispersal, because the mass flow rates are nearly indistinguishable between isothermal and isentropic blow-down conditions. The preset pressure function of time is then given by

$$P = P_0 \exp(-t / \tau_b)$$

and the gas mass flow rate into the cavity is given by

$$\dot{m}_g(t) = \rho_g A j_g = \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{A_0 P_0}{\sqrt{\frac{RT_0}{M_g}}} \exp(-t / \tau_b)$$

with the blowdown time constant $\tau_b = \sqrt{e} \frac{V_0}{A_0 \sqrt{\frac{RT_0}{M_g}}}$, which holds as long as the break

flow remains sonic, i.e. $P > \sqrt{e} P_c$. By setting $P = P_c$ we obtain the isothermal blow-down time

$$t = \sqrt{e} \frac{V_0}{A_0 \sqrt{\frac{RT_0}{M_g}}} \ln\left(\frac{P_0}{P_c}\right)$$

Table 1: Reference Values for fundamental variables

Variable	Reference Value
Pressure	P_c
Temperature	T_f
Density	$\rho_R = P_c / \left(\frac{RT_0}{M_g}\right)$
Velocity	$w_R = \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{A_0 P_0}{A_c P_c} \sqrt{\frac{RT_0}{M_g}}$
Length	Characteristic Length, L
Time	$t_R = L / w_R$

Dimensionless equations

To write the differential equations and the boundary conditions with dimensionless variables, all the variables are normalized using the reference values listed in **Table 1**.

The reference values were derived from known or estimated values, which are relevant for the cavity dispersal. For instance, the reference velocity w_R was chosen as the average gas velocity in the cavity assuming isothermal blow-down and choked conditions at the break hole. The continuity equations are invariant under the transformation and don't yield constant terms, and consequently no scaling parameters.

The transformation of the momentum equations yields:

$$\begin{aligned} & \rho_g^* \frac{\partial j_g^*}{\partial t^*} - \frac{\rho_g^* j_g^*}{\alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial t^*} + \rho_g^* j_g^* \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{j_g^*}{\alpha} \right) \\ &= - \left\{ \frac{P_c}{\rho_R w_R^2} \right\} \alpha \frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \left\{ \frac{gL}{w_R^2} \right\} \alpha \rho_g^* g_x^* - \left\{ \frac{f^i}{D_h^*} \right\} \frac{2 \rho_g^* j_g^{*2}}{\alpha^2} \\ & \quad - \left\{ C_d \frac{f^i}{D_h^*} \frac{\rho_R^2 w_R^2 L \mu_f w_R}{\sigma \rho_f} \right\} \frac{\rho_g^{*3} j_g^{*5} (1 - w_f^* / w_g^*)^4 x^*}{\alpha^5 (w_f^* / w_g^*)} \end{aligned}$$

for the gas phase, and

$$\begin{aligned} & \frac{\partial j_f^*}{\partial t^*} - \frac{j_f^*}{1 - \alpha} \frac{\partial}{\partial t^*} (1 - \alpha) + j_f^* \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{j_f^*}{(1 - \alpha)} \right) \\ &= \left\{ \frac{P_c}{\rho_R w_R^2} \right\} (1 - \alpha) \frac{\partial P^*}{\partial t^*} + \left\{ \frac{gL}{w_R^2} \right\} (1 - \alpha) g_x^* + \left\{ 2 f^i \frac{\rho_R}{\rho_f} \right\} \frac{\rho_g^* j_g^{*2}}{\alpha^2 D_h^*} \\ & \quad - \left\{ \frac{8 \mu_f}{\rho_f w_R L} \right\} \frac{j_f^*}{(1 - \alpha) \delta^* D_h^*} + \left\{ \frac{5}{8} C_d f^i \frac{w_R^2 \rho_R^2 L w_R \mu_f \rho_R}{\rho_f \sigma} \right\} \frac{\rho_g^{*3} w_g^{*2} (w_g^* - w_f^*)^4 x^*}{w_f^* D_h^*} \end{aligned}$$

for the liquid phase.

The dimensionless form of the energy equation is written:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial T_g^*}{\partial t^*} + \frac{j_g^*}{\alpha} \frac{\partial T_g^*}{\partial x^*} \right] - \left\{ \frac{P_c}{c_p \rho_R T_f} \right\} \left[\frac{1}{\rho_g^*} \frac{\partial P^*}{\partial t^*} + \frac{j_g^*}{\alpha \rho_g^*} \frac{\partial P^*}{\partial x^*} \right] \\ &= \left\{ \frac{1}{2} \frac{f^i}{D_h^*} \right\} \frac{j_g^* (1 - T_g^*)}{\alpha^2} + \left\{ 0.275 C_d \frac{f^i}{D_h^*} \frac{w_R^2 \rho_R^2 L w_R \mu_f}{\rho_f \sigma} \right\} \frac{\rho_g^{*2} w_g^{*2} (w_g^* - w_f^*)^3 (1 - T_g^*) x^*}{\alpha w_f^*} \end{aligned}$$

Similarly, the boundary conditions have to be transformed into the dimensionless form.

For $x^* = 0$, $t^* > 0$, the upstream boundary condition, we obtain for the pressure

$$P^* = \left\{ \frac{P_0}{P_c} \right\} \exp\left(-t^* / \tau_b^*\right),$$

the gas mass flow rate

$$A^* j_g^* \rho_g^* = \frac{A_c}{L^2} \exp\left(-t^* / \tau_b^*\right) \quad \text{with} \quad \tau_b^* = \left\{ \frac{P_0 V_0}{P_c A_c L} \right\},$$

and the gas temperature

$$T_g^* = \left\{ \frac{T_0}{T_f} \right\}.$$

The expressions within the curly brackets in all the equations above have to be the same for the prototype and the model. It should be added that the preservation of the friction factor f^i , which is a function of δ / D_h , can be replaced by the requirement that the dimensionless liquid volume V_f / L^3 is preserved. The droplet drag coefficient C_d

should only be a function of the droplet Reynolds number, i.e. $C_d = f\left(\frac{\rho_R w_R d}{\mu_g}\right)$.

Assuming a Weber number of $12 = \frac{\rho_g (w_g - w_f)^2 d}{\sigma}$, the drag coefficient is a function of

$\frac{\sigma}{\mu_g w_R}$. Thus, the preservation of C_d can be replaced by the requirement and the group

$\frac{\sigma}{w_R \mu_g}$ is preserved.

Similarity groups

The π -terms in the dimensionless equations above are not independent. Following Tutu and Ginsberg and examining carefully the π -terms we have found 11 independent dimensionless groups (**Table 2**), which are slightly different from those identified by Tutu and Ginsberg . The differences come from that we assume isothermal blow-down and use a slightly different energy equation. The basic requirement is of course the geometrical similarity, which imply the required invariance of $A_c^* = A_c / L^2, D_h^* = D_h / L, D_0^* = D_0 / L$. Further, some modeling assumptions like $Pr_g = 1$ or $We_d = 12$, which must preserved also, have to be kept in mind.

Table 2: Similarity Parameters for the Melt Dispersal Processes

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{\sigma \rho_f}{\rho_R^2 w_R^2 L} & N_2 &= \frac{\rho_R}{\rho_f} & N_3 &= \frac{\sigma}{\mu_g w_R} & N_4 &= \frac{P_0 V_0}{P_c A_c L} & N_5 &= \frac{\rho_R w_R^2}{\sqrt{g \rho_f \sigma}} \\
 N_6 &= \frac{\mu_f w_R}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_R}{\rho_f}} / N_\mu^{4/5} & \text{with } N_\mu &= \mu_f / \left[\rho_f \sigma \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_f g}} \right]^{1/2} \\
 N_7 &= \left(\frac{P_0 A_0}{P_c A_c} \right)^2 & N_8 &= P_0 / P_c & N_9 &= T_0 / T_f & N_{10} &= \frac{w_R^2}{c_p T_0} & N_{11} &= V_f / L^3
 \end{aligned}$$

It is clear that this particular set is not unique. By recombining the groups one can form an alternative set of independent dimensionless groups. The only requirement for achieving complete similarity is that all the groups for the model be identical to those for the prototype and that the geometrical similarity between model and prototype is preserved.

On the pre-condition that the fraction of melt dispersed, F_d , is a function of all the relevant parameters $P_0, D_0, P_c, A_c, D_h, V_0, V_f, T_0, T_f, L, g, M_g, c_p, \mu_g, \rho_f, \mu_f, \sigma$, it follows from

Buckingham's π -theorem that F_d can be expressed as a function of the dimensionless numbers N_i . If all the numbers could be matched for the model and the prototype, then the experimental results could be directly extrapolated to the full-scale prototype. Since it is extremely unlikely that all the numbers can be preserved, it is important to know the physical significance of the individual numbers so that the effect on the melt dispersal can be assessed. The similarity numbers N_i have been examined to reveal their physical significance. Primarily, we are interested in the influences of the numbers on F_d , the fraction of melt dispersed, which are discussed next.

(1) Resolving Newton's equation of motion for a droplet $\frac{dw_d}{dt} = \frac{3}{4} \frac{C_d \rho_g}{\rho_f d} (w_g - w_d)^2$,

the time constant of a droplet, which is the time required for a droplet to reach

2/3 of the gas velocity, becomes $\tau_d = \frac{4\rho_f d}{C_d \rho_g w_g}$. Assuming a critical Weber

number of 12 and a constant drag coefficient C_d the droplet time constant is

proportional to $\frac{\rho_f \sigma}{\rho_R^2 w_R^3}$. Since the transit time of the gas in the cavity τ_t is

proportional to L/w_R , we obtain $\frac{\tau_d}{\tau_t} \propto \frac{\rho_f \sigma}{\rho_R^2 w_R^2 L} = N_1$. Obviously, the smaller τ_d or

the larger τ_t , the larger is the tendency of the droplets to follow the gas stream, and therefore the larger is the dispersal. Thus, N_1 has a negative effect on F_d

(2) N_2 is the density ratio. It is expected that the debris dispersal is increased when density ratio is increased. Thus N_2 has a positive effect on F_d .

(3) We follow the discussion of the preservation of the drag coefficient C_d above. Since N_3 is proportional to the droplet Reynolds number and since C_d is inversely proportional to the square root of Re_d , it follows that debris decreases as N_3 increases. Thus N_3 has a negative effect on F_d .

(4) N_4 is the dimensionless blowdown time constant. Obviously, as N_4 is increased the debris dispersal can only increase. Thus N_4 has a positive effect on F_d .

(5) N_5 is the well-known Kutadeladze number and is used in a criterion for the outset of liquid flow reversal in a vertical annular flow. Using the critical Weber

number N_5 can be written:
$$N_5 = \left(\frac{\rho_R^2 w_R^4}{g \rho_f \sigma} \right)^{1/2} = \left(\frac{12 \rho_R w_R^2}{g \rho_f d} \right)^{1/2} = \left(\frac{12 \rho_R w_R^2 d^2}{g \rho_f d^3} \right)^{1/2},$$

which can be interpreted as $\left(\frac{\text{drag force}}{\text{gravity force}} \right)^{1/2}$. From this it follows that the debris dispersal increases with increasing N_5 , i.e. N_5 has a positive effect on F_d .

(6) N_6 has been introduced by Ishii and Grolmes for a criterion of onset of droplet entraining. If $N_6 < 1$, no droplet entraining is expected. The larger N_6 above unity, the larger the expected droplet entrainment rate. Therefore N_6 has a positive effect on F_d . It is the only group which depends on the melt viscosity.

(7) N_7 is proportional to the Euler number $\frac{\rho_R w_R^2}{P_c}$, which has been used by several authors in entrainment correlations [4]. N_7 has obviously a positive effect on F_d .

Table 3: Effect of increasing group N_i on fraction of melt dispersed F_d

Group	Effect	Comment
N_1	-	Ratio of droplet time constant and gas transit time
N_2	+	Ratio of reference density and liquid density
N_3	-	Droplet Reynolds number
N_4	+	Dimensionless gas blowdown time
N_5	+	Square of Kutadeladze number
N_6	+	Number of Ishii and Grolmes
N_7	+	Euler number

N_8	+	Dimensionless initial pressure
N_9	-	Dimensionless initial gas temperature
N_{10}	+	Ratio of kinetic energy per unit volume to enthalpy density
N_{11}	+	Dimensionless liquid volume

- (8) N_8 , which is the dimensionless initial pressure, has a positive effect on F_d .
- (9) N_9 is the dimensionless initial gas temperature. The larger N_9 , the less the temperature difference between the gas and the melt, and hence the smaller the increase of the gas velocity due to heat transfer, and therefore the less the debris dispersal. N_9 has a negative effect on F_d .
- (10) Because of $N_{10} = \frac{w_R^2}{c_p T_0} = \frac{\rho_R w_R^2}{\rho_R c_p T_0}$, N_{10} can be interpreted as the ratio of gas kinetic energy per unit volume to the gas enthalpy density. The larger the ratio, the larger the debris dispersal. Therefore, N_{10} has a positive effect on F_d .
- (11) N_{11} is the dimensionless melt volume. The larger N_{11} , the larger the liquid film thickness δ and the interfacial drag between the gas and the liquid film. Hence, a small positive effect on the debris dispersal is expected.

The influences of all the scaling groups on the fraction of melt dispersed F_d are summarized in **Table 3**, and will be used later for the evaluation of the groups. A + sign means a positive impact on F_d , a – sign a negative impact on F_d . Unfortunately, it is not possible to estimate the individual impacts on F_d more quantitatively.

Evaluation of the similarity groups for a benchmark case

The purpose of this evaluation is merely to obtain some information on the agreement or disagreement of the similarity groups between model and prototypic conditions. The evaluation is not intended to simulate the entire range of possible initial conditions. That

would be a task in the future. We have chosen a set of initial conditions as a benchmark case, which reflects what we essentially assume for the EPR: *a large amount of molten corium ejected from the vessel (~ 180 Mg), a low failure pressure (~ 1 M Pa), and a large break hole size (~ 1 m)*. **Table 4** shows the conditions for this prototypic case and 54 DISCO model cases with the three melt simulants water, gallium alloy, and Wood's metal, two driving gases, helium and nitrogen, for three various initial pressures and three various initial hole sizes.

Since a large and rapid heat transfer between melt and steam is expected just in the beginning of dispersal process, it is assumed that the steam has initially already a temperature near that of the melt. Therefore, we replace for the evaluation the initial gas temperature T_0 for the full-scale case by the estimate $T_0' = (T_0 + T_f) / 2$. Assuming the same gas mass flux into the cavity, we obtain from the perfect gas laws the modified conditions: $P_0' = P_0 (T_0' / T_0)^{1/2}$ and $V_0' = V_0 (T_0' / T_0)^{1/2}$.

Table 4: EPR Benchmark conditions and DISCO model cases

Parameter	Unit	EPR (1:1)	DISCO (1:18)
P_0	M Pa	1.0	0.75, 1.0, 1.33
D_0	m	1.0	0.042, 0.056, 0.075
L	m	11.0	0.61
A_c	m ²	7.0	0.0216
P_c	M Pa	0.2	0.1
V_0	m ³	440.0	0.075
V_f	m ³	22.5	0.0039
T_f	K	2500.0	306.0 (H ₂ O), 323.0 (GaA), 373 (BiA)
T_0	K	486.0	306.0 (H ₂ O), 323.0 (GaA), 373 (BiA)
M_g	Kg/mol	0.018	0.004 (He), 0.28 (N ₂)

Table 5: Log of Ni – values (divided by

i=1,2,3 (Po=0.75,1.0,1.33 MPa)
 j=1,2,3 (Do=0.042,0.056,0.075 m)
 k=1,2 (N2,He)
 l=1,2,3 (h2o,BiA,GaA)

ijkl	ref	dens	ref vel	N1	N2	N3	N4	N5
0	.290	495.263	.033	.000	120.750	87.454	262.829	
1111	1.101	87.921	-.416	1.466	-.421	-.311	.086	
1112	.903	97.070	1.316	.421	.222	-.311	-.737	
1113	1.043	90.330	1.200	.636	.353	-.311	-.710	
1121	.157	232.699	.430	.620	-.892	-.311	.086	
1122	.129	256.914	2.162	-.425	-.249	-.311	-.737	
1123	.149	239.076	2.045	-.209	-.118	-.311	-.710	
1211	1.101	156.303	-.915	1.466	-.671	-.311	.586	
1212	.903	172.569	.817	.421	-.028	-.311	-.237	
1213	1.043	160.586	.700	.636	.103	-.311	-.210	
1221	.157	413.688	-.070	.620	-1.142	-.311	.586	
1222	.129	456.737	1.662	-.425	-.499	-.311	-.237	
1223	.149	425.024	1.546	-.209	-.368	-.311	-.210	
1311	1.101	280.359	-1.423	1.466	-.925	-.311	1.093	
1312	.903	309.534	.309	.421	-.281	-.311	.270	
1313	1.043	288.042	.193	.636	-.151	-.311	.297	
1321	.157	742.026	-.578	.620	-1.396	-.311	1.093	
1322	.129	819.243	1.154	-.425	-.752	-.311	.270	
1323	.149	762.359	1.038	-.209	-.622	-.311	.297	
2111	1.101	117.228	-.666	1.466	-.546	-.187	.336	
2112	.903	129.427	1.066	.421	.097	-.187	-.487	
2113	1.043	120.440	.950	.636	.228	-.187	-.460	
2121	.157	310.266	.180	.620	-1.017	-.187	.336	
2122	.129	342.553	1.912	-.425	-.374	-.187	-.487	
2123	.149	318.768	1.796	-.209	-.243	-.187	-.460	
2211	1.101	208.405	-1.165	1.466	-.796	-.187	.836	
2212	.903	230.092	.567	.421	-.153	-.187	.013	
2213	1.043	214.115	.450	.636	-.022	-.187	.039	

prototypic values in row 1) of 54 DISCO runs

N6	N7	N8	N9	N10	N11	MIS
4.397	.967	8.764	.597	.055	.017	
.081	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.783
-.441	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.833
-.347	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.805
.081	-.621	-.068	.224	-.213	.007	1.401
-.441	-.621	-.068	.224	-.213	.007	2.497
-.347	-.621	-.068	.224	-.213	.007	2.334
.331	-.121	-.068	.224	.144	.007	2.019
-.191	-.121	-.068	.224	.144	.007	1.060
-.097	-.121	-.068	.224	.144	.007	1.071
.331	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.548
-.191	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.880
-.097	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.694
.584	.386	-.068	.224	.651	.007	2.700
.063	.386	-.068	.224	.651	.007	1.074
.157	.386	-.068	.224	.651	.007	1.141
.584	.386	-.068	.224	.795	.007	2.266
.063	.386	-.068	.224	.795	.007	1.757
.157	.386	-.068	.224	.795	.007	1.598
.206	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.812
-.316	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.378
-.222	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.363
.206	-.371	.057	.224	.037	.007	1.354
-.316	-.371	.057	.224	.037	.007	2.131
-.222	-.371	.057	.224	.037	.007	1.953
.455	.129	.057	.224	.393	.007	2.304
-.066	.129	.057	.224	.393	.007	.886
.028	.129	.057	.224	.393	.007	.933

Table 5:(continued) : Log of Ni – values (divided by

i=1,2,3 (Po=0.75,1.0,1.33 MPa)
 j=1,2,3 (Do=0.042,0.056,0.075 m)
 k=1,2 (N2,He)
 l=1,2,3 (h2o,BiA,GaA)

ijkl	ref	dens	ref vel	N1	N2	N3	N4	N5
2221	.157	551.583	-.320	.620	-1.267	-.187	.836	
2222	.129	608.983	1.412	-.425	-.623	-.187	.013	
2223	.149	566.698	1.296	-.209	-.493	-.187	.039	
2311	1.101	373.812	-1.673	1.466	-1.050	-.187	1.343	
2312	.903	412.712	.059	.421	-.406	-.187	.520	
2313	1.043	384.056	-.057	.636	-.276	-.187	.547	
2321	.157	989.368	-.827	.620	-1.521	-.187	1.343	
2322	.129	1092.324	.905	-.425	-.877	-.187	.520	
2323	.149	1016.478	.788	-.209	-.747	-.187	.547	
3111	1.101	155.913	-.913	1.466	-.670	-.063	.584	
3112	.903	172.137	.819	.421	-.027	-.063	-.239	
3113	1.043	160.185	.703	.636	.104	-.063	-.213	
3121	.157	412.653	-.068	.620	-1.141	-.063	.584	
3122	.129	455.595	1.664	-.425	-.497	-.063	-.239	
3123	.149	423.961	1.548	-.209	-.367	-.063	-.213	
3211	1.101	277.178	-1.413	1.466	-.920	-.063	1.083	
3212	.903	306.022	.319	.421	-.276	-.063	.260	
3213	1.043	284.773	.203	.636	-.146	-.063	.287	
3221	.157	733.606	-.568	.620	-1.391	-.063	1.083	
3222	.129	809.947	1.164	-.425	-.747	-.063	.260	
3223	.149	753.708	1.048	-.209	-.617	-.063	.287	
3311	1.101	497.170	-1.921	1.466	-1.174	-.063	1.591	
3312	.903	548.907	-.189	.421	-.530	-.063	.768	
3313	1.043	510.794	-.305	.636	-.400	-.063	.795	
3321	.157	1315.859	-1.075	.620	-1.645	-.063	1.591	
3322	.129	1452.790	.657	-.425	-1.001	-.063	.768	
3323	.149	1351.916	.541	-.209	-.870	-.063	.795	

prototypic values in row 1) of 54 DISCO runs

N6	N7	N8	N9	N10	N11	MIS
4.397	.967	8.764	.597	.055	.017	
.081	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.783
-.441	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.833
-.347	-.621	-.068	.224	-.356	.007	1.805
.081	-.621	-.068	.224	-.213	.007	1.401
-.441	-.621	-.068	.224	-.213	.007	2.497
-.347	-.621	-.068	.224	-.213	.007	2.334
.331	-.121	-.068	.224	.144	.007	2.019
-.191	-.121	-.068	.224	.144	.007	1.060
-.097	-.121	-.068	.224	.144	.007	1.071
.331	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.548
-.191	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.880
-.097	-.121	-.068	.224	.287	.007	1.694
.584	.386	-.068	.224	.651	.007	2.700
.063	.386	-.068	.224	.651	.007	1.074
.157	.386	-.068	.224	.651	.007	1.141
.584	.386	-.068	.224	.795	.007	2.266
.063	.386	-.068	.224	.795	.007	1.757
.157	.386	-.068	.224	.795	.007	1.598
.206	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.812
-.316	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.378
-.222	-.371	.057	.224	-.106	.007	1.363
.206	-.371	.057	.224	.037	.007	1.354
-.316	-.371	.057	.224	.037	.007	2.131
-.222	-.371	.057	.224	.037	.007	1.953
.455	.129	.057	.224	.393	.007	2.304
-.066	.129	.057	.224	.393	.007	.886

The results of the evaluation are shown in **Table 5**. The material properties used for the evaluation can be found in **Appendix A**. To identify each DISCO-case a packed word with four digits $ijkl$ in the first column is used. The notation is explained in the header of the table. For instance 2112 identifies the DISCO-case with $P_0=1$ M Pa, $D_0=0.042$ m, N_2 driving gas, and Woods metal (BiA) melt simulant. The second and the third columns contain for additional information only the reference values ρ_R and w_R , which are used for the calculation of the groups. The values in the first row are the N_i -values for the EPR-case. The remaining values in the N_i -columns are log-values of the N_i -values for the DISCO-cases divided by the EPR-values of the same column. Thus for instance, 0.0 would mean perfect agreement of the N_i -value of model and prototype, and -1.0 would indicate that the model value is smaller than the EPR value by a factor of 10. The last column of the table shows the square root of the sum of the squares of the N_i -numbers in the same row, and is therefore a measure of the total mismatch of the N_i -numbers for each case.

The Table reveals both, large individual mismatches and rather good matches. Comparing the numbers in this last column one finds the best agreement for the cases 2212 and 2213, i.e. the DISCO-cases with $P_0=1.0$ M Pa, $D_0=0.056$ m, N_2 , and Bismuth alloy (BiA) and gallium alloy (GaA) respectively. On the other hand, the cases 3311 and 3321 with water as melt simulant show the largest mismatches. Concerning the fraction of melt dispersed F_d we are looking in the table for lower and upper bounding cases.

Accounting for the effect of the N_i -numbers on F_d discussed above (**Table 3**), we observe, that there is no model case in the table, which would represent a strict upper or lower bound for F_d (prototype). However, there are cases (**Table 6**) which are very near to upper and lower bounds for F_d respectively. A + sign, a – sign or 0 in the additional columns indicate that the N_i -value in the column left beside it has a positive, negative or negligible effect on F_d . Thus, if a case show only + signs, it would be an upper bound for the fraction of melt dispersed for the prototypic case or analogously

Correlations

The main goal of the theoretical effort is to make a best estimate of the fraction of melt dispersed for prototypic conditions. The data base will be used to improve available correlations for F_d . Tutu and Ginsberg et al. [5],[6] identified the four groups N_1, N_2, N_4 , and N_5 among the 11 presented above and the dimensionless hole diameter D_0/L for geometric similarity to be sufficiently important for inclusion into a correlation for the fraction of melt dispersed. The correlation was developed using the experimental data base generated at BNL for three different cavity designs in 1/42nd scale: Zion, Surry, and Watts Bar with five different sets of fitting parameters C_1 to C_{13} (Table 7).

Table 7: Tutu-Ginsberg correlation

$$F_d = uf(x - C_1) [1 - (FX + FY)],$$

$$uf(x - \varphi) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq \varphi \\ 1 & \text{if } x > \varphi \end{cases}$$

$$x = \log_{10} \left[N_5 \left(\frac{L}{D_0} \right)^{C_2} N_2^{C_3} \frac{1 + C_4 N_4^{C_5}}{1 + C_6 N_1^{C_7}} \right]$$

$$FX = \frac{C_8}{1 + C_9 z^{C_{10}}}, \quad FY = C_{11} \exp \left[- \left(\frac{z}{C_{12}} \right)^{C_{13}} \right], \quad z = |x - C_1|$$

Williams and Griffith [7] assessed various relevant correlations for F_d on the base of about 600 test results in different scales (BNL: 1/42 and SNL:1/10). Of all the correlation tested, the Tutu-Ginsberg-correlation gave the best fit of all the data. Therefore, we consider this correlation as an appropriate starting point for use of the expected DISCO

data. However, to give an impression of the quality of the Tutu-Ginsberg correlation, in **Figure 1** a scatter plot of all the BNL and SNL data for the Surry and Zion cavities taken from [7] is shown, where the observed F_d -values are plotted against the predicted F_d -values. It can be seen that there is the need for improvement of the correlation. Kim et al. from Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI) also investigated the BNL correlation, and found based on the work at BNL a correlation, which better fits the Korean low temperature experiments [11]. The original correlation is a rather complex nonlinear function of the groups with 13 fitting coefficients, but its particular functional structure allows a very flexible fitting of the experimental data. We examined the functional structure of the correlation very carefully and developed a computer code PARTU to determine the fitting coefficients for any given relevant experimental F_d -data base [10].

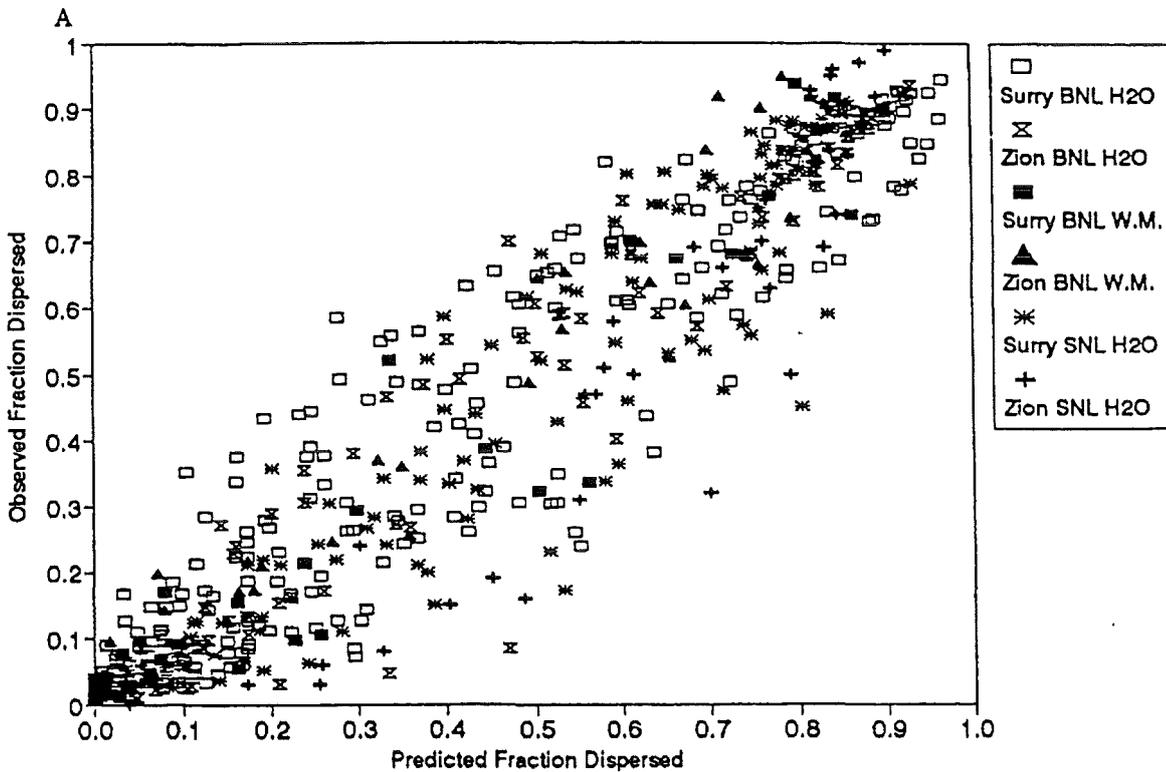
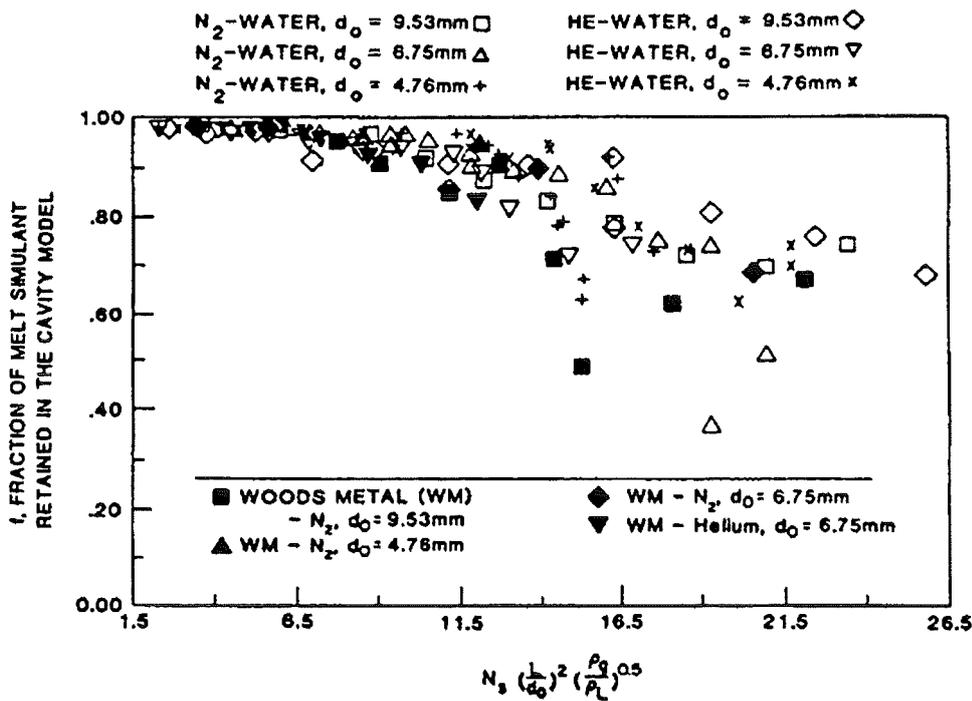


Figure 1: Tutu-Ginsberg correlation for melt fraction dispersed from cavity

Based on BNL's 1/42nd scaled data for the Surry cavity Tutu and Ginsberg et al. [8] found a criterion for the low-pressure cutoff, which is uses a modified Kutateladze number:

$$N_2^{1/2} N_5 \left(\frac{L}{D_0} \right)^2 = C$$

C is a constant, which depends on the data source. For C = 7 all the Surry data of the 1/42nd scaled tests at BNL lie in the region where F_d is smaller than 10 % (Figure 2)



Correlations of all the Debris Dispersal Data Near the Threshold for Debris Dispersal. Results for Surry Cavity Model.

Figure 2: Threshold for debris dispersal from Surry cavity model (BNL)

Certainly, we will obtain another constant for the EPR cavity model. From the criterion it follows that the low-pressure cutoff is inversely proportional to the hole size:

$$P_{cutoff} \propto 1 / D_0 .$$

Conclusions

The melt retention capability of the EPR cavity with respect to melt dispersal at low failure pressures and large break holes is an important issue to be resolved. Important insights and experimental data are expected from the three model experiments which are under way at FZK and SNL:

- (1) the low-temperature isothermal DISCO experiment at FZK (under construction),
- (2) the high-temperature Surtsey experiment at SNL (forthcoming), and
- (3) the high-temperature experiment at FZK (in planning).

Supporting and completing the experimental investigations a first scaling analysis was performed for the isothermal low-temperature experiment DISCO. Based on the work of Tutu and Ginsberg et al. at BNL a set of relevant dimensionless scaling groups was derived from one-dimensional two-phase dispersed flow conservation equations. The scaling groups were evaluated for 54 fictive DISCO runs in comparison with a EPR benchmark case. As expected large mismatches of the groups between model and reality can be observed. Nevertheless, there are model cases which can be regarded as useful approximations. With respect to the carry-over of dispersed melt from the cavity model cases were found that can be almost regarded as lower and upper bounds of the fraction of melt dispersed from the cavity, which is certainly the key parameter in this context. However, it should be kept in mind that the meaningfulness of low-temperature experiments with non-reactive corium melt simulants is limited. The scaling considerations are primarily aimed at correlational models, for instance the Tutu-Ginsberg correlation presented, usable for extrapolation of the data obtained from the small scale model experiments directly to the full-scale case of the EPR.

Nomenclature

Latin symbols

a^i	Interfacial area per unit volume
A	Flow area
A_c	Cavity flow area
A_o	Vessel hole area
C_d	Drag coefficient for a liquid droplet
c_p	Gas heat capacity at constant pressure
D_h	Cavity hydraulic diameter
D_o	Initial vessel hole diameter
d	Liquid droplet diameter
F_d	Fraction of melt dispersed
F_{film}^i	Interfacial drag on the liquid film
F_{drop}^i	Interfacial drag on the liquid droplets
F_{film}^w	Wall friction of the liquid film
f^i	Friction factor
g	Acceleration of gravity
h_g	Specific gas enthalpy
h	Heat transfer coefficient
j	Volumetric flux (superficial velocity), $j = \alpha w$
L	Characteristic length
L_c	Cavity length
\dot{m}_g	Gas mass flow rate
M_g	Mole mass of gas
n_d	Number of droplets per unit volume
N_i	Dimensionless number
P	Pressure
P_c	Initial cavity pressure
P_o	Initial vessel pressure
Q_{film}^i	Interfacial heat transfer from liquid film to gas
Q_{drop}^i	Interfacial heat transfer from droplets to gas
S	Perimeter
T_o	Initial gas temperature
T_f	Melt temperature
t	Time
u_g	Specific gas internal energy
v_g	Specific gas volume
V_o	Initial gas volume of primary system
V_f	Melt volume
w	Velocity

W_g	Gas velocity
W_d	Droplet velocity
W_f	Liquid film velocity
x	Space coordinate along the cavity duct

Greek symbols

α	Void fraction
γ	c_p/c_v isentropic exponent
δ	Liquid film thickness
$\dot{\epsilon}$	Liquid mass entraining rate per unit film area
λ	Thermal conductivity
μ	Dynamic viscosity
ρ	Density
σ	Surface tension of liquid/gas pair
τ	Characteristic time
τ^i	Interfacial shear stress

Subscripts

c	Cavity
d	Droplet
$drop$	Droplet
f	Liquid
$film$	Liquid film
g	Gas
h	Hydraulic
p	Constant pressure
R	Reference
v	Vessel
x	Along x coordinate
0	Initial

Superscripts

i	Interfacial
w	Wall
$*$	Dimensionless

Well known dimensionless groups

Eu	Euler number,	$\frac{\rho w^2}{P}$
Fr	Froude number,	$\frac{w^2}{gL}$

<i>Ku</i>	<i>Kutadeladze number,</i>	$\frac{\rho_g w^2}{\sqrt{g\rho_f\sigma}}$
<i>Nu</i>	<i>Nusselt number,</i>	$\frac{hL}{\lambda}$
<i>Pr</i>	<i>Prandtl number,</i>	$\frac{\mu c_p}{\lambda}$
<i>Re</i>	<i>Reynolds number,</i>	$\frac{\rho w L}{\mu}$
<i>We</i>	<i>Weber number,</i>	$\frac{\rho w^2 L}{\sigma}$

Constants

<i>e</i>	e -constant, 2.71828
<i>π</i>	π -constant, 3.14159
<i>R</i>	Molar gas constant, 8.31451 J/mol-K

References

- [1] Baker, W.E., P.S. Westine, F.T. Dodge, Similarity Methods in Engineering Dynamics, Elsevier, Amsterdam-Oxford-NewYork-Tokyo, revised edition 1991.
- [2] Tutu, N.K., T. Ginsberg, C. Finrock et al., "Debris Dispersal from Reactor Cavities during High-Pressure Melt Ejection Accident Scenarios," BNL, NUREG/CR-5146, 1988.
- [3] Wulff, W., "Top-Down Scaling of Reactor Primary System Depressurization by Single Phase Gas Discharge," Appendix K of NUREG/CR-5809 (1991).
- [4] Levy, S., "Debris Dispersal from Reactor Cavity during Low Temperature Simulant Tests of Direct Containment Heating (DCH)," Appendix O of NUREG/CR-5809 (1991).
- [5] Tutu, N.K., Ginsberg,C., Finrock,C. et al., "Melt Dispersal Characteristics of the Watts Bar Cavity," BNL, A-3024 (1990).
- [6] Tutu, N.K., Ginsberg, T., "A letter report on the results of melt dispersal experiments with the Surry and Zion cavity models," transmitted to the USNRC (1990).
- [7] Williams, D.C., Griffith, R.O., "Assessment of Cavity Dispersal Correlations for Possible Implementation in the CONTAIN Code," SNL, SAND94-0015 (1996).
- [8] Tutu, N.K., Ginsberg, T., Finrock, C., "Low-pressure Cutoff for Melt Dispersal from Reactor Cavities," ANS 4. Proc. Nuclear Thermal Hydraulics (1988).
- [9] Meyer, L., A. Roth, "DISCO, Experiment zur Dispersion von simuliertem Corium – Die Versuchsanlage," FZK Interner Bericht 32.21.03, PSF 3284 (1997).
- [10] Wendlandt, T., G. Jacobs, "PARTU – ein Programm zur Bestimmung der Koeffizienten der Tutu-Ginsberg Korrelation," FZK Interner Bericht (in Vorbereitung).
- [11] Kim, S-B, M-K Chung, et al., 'A Parametric Study of Geometric Effect on the Debris Dispersal from a Reactor Cavity during High Pressure Melt Ejection,' Int. Communications in Heat and Mass Transfer, 22, pp. 25-34 (1995)
- [12] Jacobs,G., Low pressue corium dispersal (LPCD) – Scaling analysis for the isothermal melt dispersal experiment DISCO, Internal report, Forschungszentrum Karlsruhe, INR 1977 (1998).

Appendix A: Material properties

Property	Unit	Corium ¹	Thermite ²	Water	Ga-Alloy ³	Woods Metal ⁴
Mole mass	kg/mol	0.1215	0.0631	0.018	0.082	0.165
Density	kg/m ³	7698.	3879.	1000.	6400. ⁵	9104.
Melting point	K	2450.	2200.	273.15	284.	331.
Specific heat	J/kg/K	556.	1100.	4181.8	340. ⁶	201. ⁷
Viscosity	Pa s	0.0076	0.0074	0.0010	0.0044 ⁵	0.0016 ⁸
Surface tension	N/m	0.97	1.0	0.072	0.44 ⁵	0.35 ⁹
Therm. conductivity	W/m/K	14.1	25.3	0.598	29.4 ⁶	10.0 ⁷

References:

[1] Macbeth, R.V., D.W. Rose, D.J. Mogford, 'Experimental Modeling of Core Debris Dispersion from the Vault Under a PWR Pressure Vessel, Part 3: Results of Varying the Size Scaling Factor of Model Used,' UKAEA Winfrith, AEEW-R2426 (1989).

[2] Atomic Energy Commission, 'Liquid Metals Handbook,' NAVEXOS P-733 (Rev.) (1952).

¹ Corium melt composition mass fractions: 0.61 UO₂, 0.15 ZrO₂, 0.173 Fe, 0.043 Cr, 0.024 Ni from NUREG/CR-6044

² Thermite melt composition mass fractions: 0.5315 Fe, 0.4543 Al₂O₃, 0.0142 Al

³ Gallium alloy melt mass fractions: 0.62 Ga, 0.16 Sn, 0.22 In

⁴ Bismuth alloy (Woods metal) melt composition mass fractions: 0.495 Bi, 0.176 Pb, 0.116 Sn, 0.213 In

⁵ Values taken from [1]

⁶ Manufacturer information, Johnson Matthey Karlsruhe

⁷ Manufacturer information, MCP-HEK, Lübeck

⁸ Value estimated

⁹ Value calculated based on composition, data from [2]

32.21.04 Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung

I. COMET-Konzept

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

1. Einführung

Die Kühlung der Schmelze nach dem COMET-Konzept beruht vor allem auf dem passiven Zutritt des Kühlwassers von unten in die Schmelze, nachdem diese eine Opferschicht erodiert und die darin eingebetteten Kühlkanäle geöffnet hat. Durch die schnelle Verdampfung des Wassers in der Schmelze bricht die Schmelze in ein poröses Bett auf, so daß große innere Oberflächen entstehen, über die die Wärme kurz- und langfristig sicher abgeführt werden kann. Diese sehr wirksame Wärmeabfuhr läßt die Schmelze schnell erstarren, so daß die angrenzenden Strukturen auf sehr niedrigen Temperaturen bleiben.

Ein wesentliches Ergebnis aus den Untersuchungen des Jahres 1996 ist, daß nachbeheizte Schmelzen mit 32 cm Höhe (ohne Gasblasenanteil) sicher kühlbar sind, und zwar kurz- und langfristig. Im Berichtszeitraum 1997 wurden diese Untersuchungen auf unterschiedliche Bedingungen und Zusammensetzungen der Schmelze erweitert, um die verschiedenen möglichen Situationen bei einem Kernschmelzunfall angemessen zu berücksichtigen. Von besonderer Bedeutung sind dabei auch die inzwischen abgeschlossenen Experimente mit realistischen, Uranoxid-haltigen Corium-Schmelzen, die die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf Reaktorschmelzen untersuchen.

Einen Überblick über die 1997 durchgeführten Experimente gibt Tabelle 1:

Tab. 1: Überblick über die 1997 durchgeführten COMET-Experimente

Experiment	Zielsetzung	Ergebnisse
a) Transiente Experimente ohne Nachheizung		
COMET-T 8.x	Kühlung rein oxidischer Schmelzen (Basis Aluminiumoxid)	40 cm hohe Schmelzen sicher gekühlt. Kein wesentlicher Unterschied zu geschichteten Metall/Oxid-Schmelzen. Einfluß des Wasserdrucks quantifiziert.
COMET-U 1 COMET-U 2	Realistische Corium-Schmelzen aus UO_2+ZrO_2 +Beton: 110/150 kg (30/40 cm)	Fragmentierung und schnelle Kühlung der Schmelze ähnlich wie COMET-H ⇒ Experimente mit simulierten Schmelzen auf Corium übertragbar
COMET-T 9.x	Kühlbarkeit einer später nachfließenden Schmelze auf porös erstarrter Schmelze	Sekundäre Schmelze kühlbar wegen poröser Erstarrung und teilweiser Granulierung, gute Kühlung der unteren Schmelze nicht vermindert
b) Experimente mit Nachheizung entsprechend Nachwärmenniveau		
COMET-H 2.2	Einfluß ungleichmäßiger Erosion der Opferschicht	Keramische Unterschicht unter der Opferschicht stabilisiert die Schmelze und gibt Zeit für ausreichende Fragmentierung
COMET-H 3.1	Einfluß von Zr-Metall in der Schmelze	Zr durch Opferbeton oxidiert. Anschliessender Wasserzutritt bewirkt sichere kurz- und langzeitige Kühlbarkeit
COMET-H 3.2	Spezifische EPR Bedingungen: (niedriger Kühlwasserdruck, vergrößerte Kühlkanäle, ...)	Flut- und Kühlrate nur wenig vermindert. Geringe Schmelzemengen in Wasserschicht abgelaufen und dort erstarrt.

Die transienten Experimente mit Schmelzenmassen von 50-140 kg untersuchen die Kurzzeitvorgänge bei Wasserzutritt. Dies sind vor allem die Kopplung von Wasserzutritt, Aufbrechen der Schmelze und poröser Erstarrung, die - bei den eingesetzten Mengen - in einem typischen Zeitbereich von unter 5 Minuten ablaufen. Wegen der kurzen Zeitskala, in der diese Vorgänge ablaufen, liefern daher die transienten Experimente für die Fragestellung der Fragmentierung und porösen Erstarrung sehr nützliche Aussagen. Darüber hinaus gelingt es bei den Experimenten mit nachbeheizten Schmelzen von Massen bis über 800 kg, zusätzlich die Langzeitkühlbarkeit zu untersuchen. Damit werden also in den COMET-H Experimenten alle Vorgänge vom Beginn der Erosion der Opferschicht über das Einsetzen der Kühlung und Erstarrung bis zur Langzeit-Wärmeabfuhr jeweils in einem einzelnen Experiment dargestellt.

Im folgenden wird über die in der Tabelle aufgeführten Experimente berichtet.

2. COMET-T Experimente: Durchführung von weiteren Oxidexperimenten

Die Untersuchungen über oxidische Schmelzen konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Bereits in dem letztjährigen Fortschrittsbericht /1/ wurden der Versuchsaufbau und Ergebnisse der ersten Versuche dargestellt, weshalb hier nur die Ergebnisse der letzten 3 Experimente erläutert werden.

Wie aus Tabelle 2 ersichtlich, wurden in den Versuchen Schmelzenmassen von ca. 65 kg Oxid eingesetzt. In dem Experiment 8.4 wurde auch ein geringer Metallanteil in den Versuchsbehälter mit abgegossen, der aber, wie die Nachuntersuchungen zeigen, dispergiert in der Oxidschmelze vorliegt. Da die Erosionszeiten der Betonopferschicht in diesen 3 Experimenten sehr gut übereinstimmen, und damit der Zustand der Schmelze bei Beginn Wasserzutritt praktisch gleich ist, kann der Einfluß

Tab. 2: Überblick der Oxid Experimente COMET-T 8.4-8.6

Experiment	8.4	8.5	8.6
Masse/ kg	83	56	64
Fe/ kg	11	0	0
Oxid/ kg	72	56	64
Einguß Temperatur/ K	> 2000		
Wasservordruck/ bar	0.4	0.0	0.2
Erosionszeit/ Wasserkontakt/ min	1:30	1:25	1:20
Oberfläche erstarrt/ min	2:00	2:00	1:50
bedeckt mit Wasser/ min	2:30	≥ 2:30	2:34
Gesamt Wasserzutrittsrate/ ml/s	425	180	330
Verdampfungsrate durchschn.(erste 5:00 min nach Wasserkontakt)/ ml/s	150	70	120
Porosität/ %	51	30	50

des Flutwasserdrucks sehr gut untersucht werden. Dabei wurde der Wasservordruck von 0-0,4 bar variiert, die Geometrie der Schmelzkappen wurde nicht verändert.

Die Experimente zeigen deutlich die Abhängigkeit des Erstarrungsverhaltens vom Wasservordruck. Bei einem hohen Wasservordruck von 0,4 bar in Experiment 8.4 wird die Schmelze durch den ersten Wasserkontakt stark aufgewirbelt und erstarrt mit einer hohen Porosität von größer 50 %. Aus diesem Grunde ist auch die Wasserzutrittsrate mit 425 ml/s sehr hoch, siehe Tab. 2. Die Schmelze ist bereits nach 2:30 min geflutet. Das Experiment mit 0,2 bar Wasservordruck zeigt ein ähnliches Verhalten. Die Volumenstromrate ist größer als 300 ml/s und die Porosität etwa 50 %.

Bei einem Wasservordruck von 0 bar in Experiment 8.5 ist die Wechselwirkung der Schmelze mit dem zutretenden Wasser schwächer und die Porosität der erstarrten Schmelze mit ca. 30 % geringer. Die Volumenstromrate beträgt maximal 180 ml/s und ist damit zwar niedriger als in den anderen Oxid-Experimenten, aber immer noch groß genug, um die Schmelze schnell zu kühlen.

In Abb. 1 sind die Verdampfungsraten der Experimente 8.4, 8.5, 8.6 dargestellt, die aus der Differenz des zutretenden Wasservolumens und der Gewichtszunahme des Versuchsbehälters gebildet werden. Da die Versuchsbedingungen bis auf den Wasservordruck gleich sind, lassen sich diese 3 Versuche sehr gut miteinander vergleichen.

Zu Beginn wird das zutretende Kühlwasser in allen 3 Experimenten vollständig verdampft. Aufgrund des hohen Wasservordrucks wird in dem Experiment 8.4 die höchste Verdampfungsrates von etwa 400 ml/s ca. 30 s nach Wasserzutritt erreicht. Anschließend wird die Schmelze durch das zutretende Wasser langsam geflutet, die Verdampfungsrates sinkt mit weiterer Abkühlung der Schmelze ab und ist nach ca. 200 s praktisch 0. Auch das Experiment 8.6 erreicht mit 325 ml/s verdampfendem Wasser ca. 50 s nach Wasserzutritt einen sehr hohen Wert, der dann in einem praktisch gleichen Verlauf abfällt wie in Experiment 8.4.

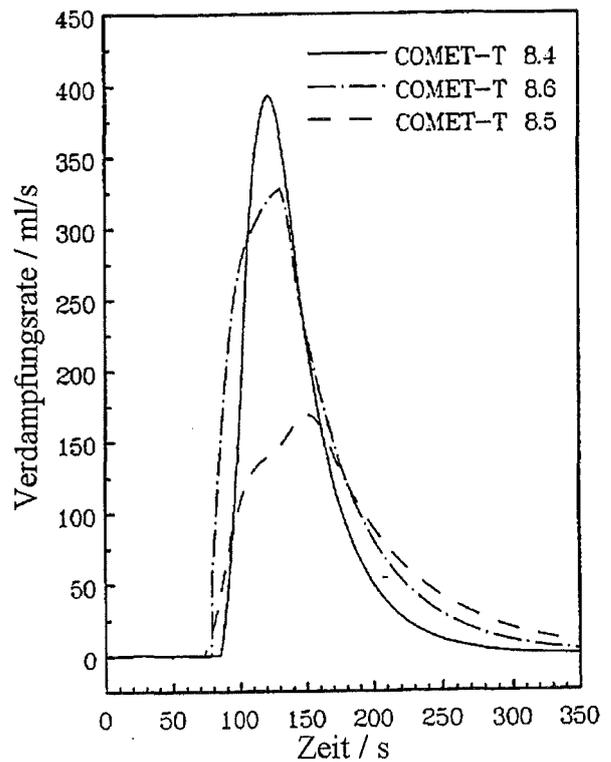


Abb. 1: Experimente 8.4, 8.5, 8.6, Vergleich der Verdampfungsrates

Einen anderen Verlauf zeigt das Experiment 8.5 mit 0 bar Wasservordruck. Der maximale Wert der Verdampfungsrates ist mit ca. 150 ml/s 50 s nach Wasserzutritt etwa halb so groß wie in Experiment 8.6. Da die Schmelze aber aufgrund des geringeren zutretenden Volumenstromes langsamer gekühlt wird, sinkt die Verdampfungsrates langsamer ab und hat etwa 200 s nach Wasserzutritt noch einen Wert von 25 ml/s. Das Integral über die Verdampfungskurve ist in allen drei Versuchen etwa gleich.

Aus der Verdampfungsrate folgt durch Multiplikation mit der Verdampfungswärme des Wassers der abgeführte Wärmestrom. Bei einem hohen Flutwasservordruck beträgt der maximale Wärmestrom aus der Schmelze fast 1 MW, aber selbst in dem Experiment 8.5 mit 0 bar Flutwasservordruck beträgt er noch 400 kW. Das ist wesentlich mehr als aus einer Kernschmelze aufgrund der Nachwärme abgeführt werden muß und erklärt die schnelle Erstarrung der Schmelze.

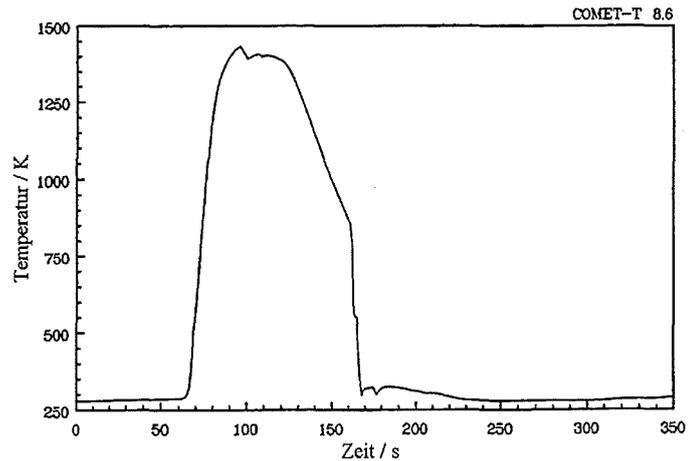


Abb. 2: Experiment 8.6, Messung der Temperaturabnahme der Schmelze im Zeitraum 125-160 s

Zum Vergleich ist in Abb. 2 die Temperaturabnahme der Schmelze während der Kühlphase für das Experiment 8.6 dargestellt. Die Tauchsonde mit einem W-Re-Thermoelement wurde ca. 60 s nach Schmelzeneinguß in die Schmelze eingefahren. Sie erreicht 90 s nach Beginn Einguß ihren Maximalwert von ca. 1400 K. Dieser Wert entspricht aber nicht der Temperatur der Schmelze zu diesem Zeitpunkt, da durch den einsetzenden Wasserzutritt die Temperatur der Tauchsonde bereits abgesenkt wird. Aus dem Temperaturverlauf der Tauchsonde in dem Zeitbereich von 125 - 160 s ergibt sich mit einer Temperaturabsenkung von $\Delta T=500$ K eine zeitliche Temperaturabnahme von 14 K/s. Das entspricht mit den Stoffdaten der Schmelze einem mittleren Wärmestrom aus der Schmelze von 650 kW. Dieser Wert bestätigt ausgezeichnet den aus der Verdampfungsrate des Kühlwassers bestimmten Wärmestrom in diesem Zeitbereich.

Schlußfolgerung

Auch diese Experimente bestätigen, daß Oxidschmelzen von ca. 40 cm Höhe durch Wasserzutritt von unten sehr effektiv gekühlt werden können aufgrund des Fragmentierungsprozesses. Die durchschnittliche Wasserzutrittsrate von mehr als 100 ml/s ist bei Extrapolation auf die Ausbreitungsfläche der Kernfängerkonstruktion um eine Größenordnung höher als zur Langzeitkühlung der Kernschmelze notwendig. Das Verhalten reiner Oxidschmelzen unterscheidet sich nicht wesentlich von dem Verhalten der 2-Komponentenschmelzen.

3. COMET-U: Untersuchungen zur Übertragbarkeit auf Corium-Schmelzen

Zielsetzung der COMET-U Experimentserie am ANL in Chicago (Ill), USA, ist die Kühlbarkeit realer, hoch UO_2 -haltiger Coriumschmelzen sowie die Übertragbarkeit der bisher durchgeführten Experimente mit Eisen-Aluminiumoxid-Simulationsschmelzen auf reale Corium-Schmelzen. Der Versuchsaufbau dieser COMET-U Experimente entspricht deshalb weitgehend den im FZK durchgeführten transienten COMET-T Experimenten.

Versuch COMET-U1

110 kg Corium-Schmelze mit den Hauptbestandteilen UO_2 52 %, ZrO_2 16 %, SiO_2 13 %, CaO 4 % und Cr 11 % werden in einem Versuchsbehälter von 30 cm Durchmesser aus einer Thermitreaktion erzeugt. Der Oxidanteil entspricht damit der Situation in einem Kernschmelzenunfall nach Erosion einer entsprechenden Betonopferschicht. In dem ersten Experiment überdeckt eine Beton-Opferschicht von 5 mm neun Stopfen, die an Wasserzuführungsleitungen angeschlossen sind. Der wirksame Wasservordruck beträgt 0.2 bar. Die Schmelze hat im Versuchstiegel eine Höhe von 30 cm (ohne Gasanteil). Das Experiment wurde, wie die COMET-T Versuche, ohne Nachheizung der Schmelze durchgeführt und deckt damit die Kurzzeitaspekte der Kühlung ab.

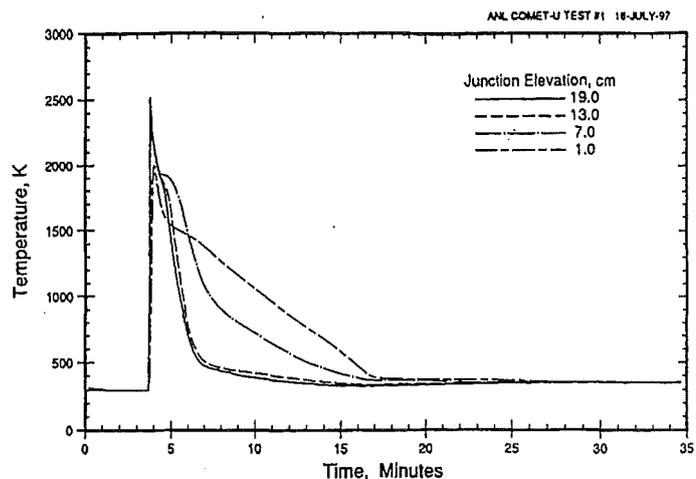


Abb. 3: COMET-U1: Temperaturverlauf in der Schmelze

Die durch die Thermitreaktion erzeugte Schmelze hat eine Anfangstemperatur von etwa 2500 K, s. Abb. 3. Die gemessenen Temperaturen in dem unteren Bereich der Schmelze erreichen nicht 2500 K, weil die Wolfram Hülle der Thermoelemente die Wärme in den kalten Beton ableitet. Die Schmelze ist zu Beginn sehr dünnflüssig. Innerhalb weniger Sekunden wird die 5 mm dicke Betonopferschicht erodiert, wodurch alle 9 Kühlkanäle öffnen und der passive Wasserzutritt einsetzt. Er erreicht innerhalb 50 s seinen praktisch stationären Wert von 325 ml/s, so daß eine sehr wirksame Kühlung der Schmelze gegeben ist,

s. Abb. 4. Bereits 4 min nach Wasserzutritt sind die Temperaturen in der Schmelze bereits unter 1400 K abgesunken. Damit ist die Schmelze sicher porös erstarrt und auch die Erosion der Betonopferschicht beendet. Ca. 13 min nach Wasserzutritt zeigen alle Temperaturen, daß die Schmelze vollständig abgekühlt ist. Die Temperaturen liegen unter 100 °C. Daraufhin wird die Wasserzufuhr beendet. Während der Flutung wurden keine dampfexplosionsähnlichen Vorgänge beobachtet.

Versuch COMET-U2

In dem zweiten Experiment COMET-U2 mit Corium-Schmelze wurde gegenüber dem ersten Experiment die Schmelzenmasse auf 150 kg erhöht, wodurch die kollabierte Höhe der Schmelze im Tiegel auf 40 cm steigt. Desweiteren wurde die Opferschichthöhe über den aufschmelzenden Stopfen von 0,5 auf 1,5 cm erhöht, um nach Ende der Thermitreaktion die Zeit bis zum Wasserzutritt zu verlängern. Die übrigen Bedingungen entsprechen dem Versuch U1.

36 s nach Einleiten der Thermitzündung steigt die Temperatur auf der Betonoberfläche steil an, weil die heiße Schmelze die Betonoberfläche erreicht hat. Die Temperaturen in der Schmelze betragen zu diesem Zeitpunkt etwa 2500 K, s. Abb. 5. Die anschließende Erosion der 1,5 cm hohen Betonopferschicht verläuft sehr schnell, so daß

bereits 1:00 min nach Zündung der Wasserzutritt einsetzt. Zunächst beträgt der Wasserstrom 120 ml/s, steigt danach innerhalb von 2 min auf seinen Maximalwert von 225 ml/s an und bleibt dann praktisch konstant, s. Abb. 6.

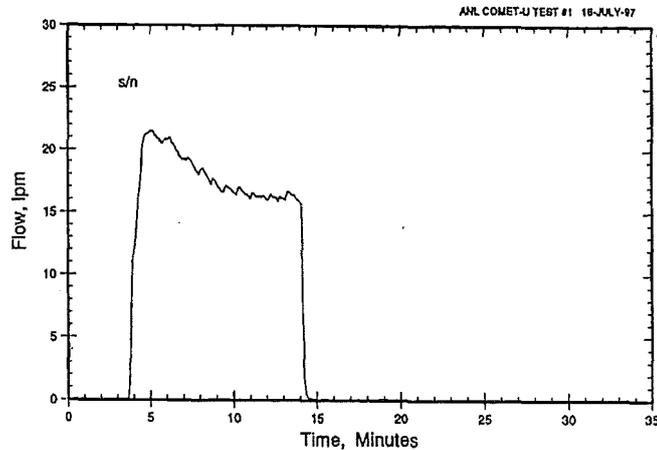


Abb. 4: COMET-U1: Wasserzutrittsrate in die Schmelze

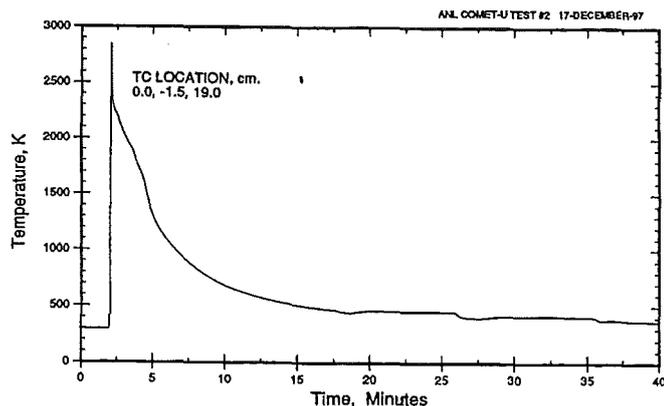


Abb. 5: COMET-U2: Temperaturverlauf in der Schmelze

Durch die einsetzende Kühlung fallen zunächst die Temperaturen in der Schmelze sehr schnell mit ca. 5-6 K/s ab. Ca. 1 min nach Einsetzen der Kühlung verlangsamt sich die Abkühlung auf ca. 1 K/s mit Erreichen der Erstarrungstemperatur von ca. 1900 K. Die Auskühlphase erstreckt sich dann über einen Zeitraum von ca. 15 min. Die Temperaturmessungen an den Seitenwänden und in der Betonopferschicht unterhalb der Stopfenoberkante zeigen, daß die umgebenden Strukturen kalt bleiben. Die Temperaturen an der Bodenplatte bleiben stets unter 50 °C.

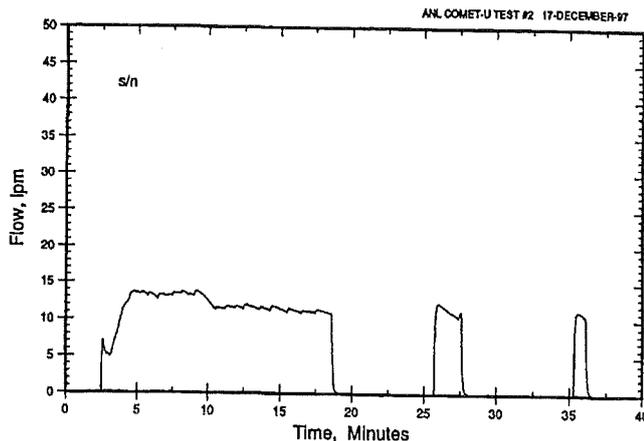


Abb. 6: COMET-U2: Wasserzutrittsrate in die Schmelze

16:15 min nach Einsetzen des Wasserzutritts wird die Bespeisung mit Wasser beendet, da die Schmelze weitgehend abgekühlt ist. Während der Flutung der Corium-Schmelze wurden Druckschwankungen von max. 0.2 bar gemessen, so daß keine heftigeren Wechselwirkungen mit der Schmelze auftraten, s. Abb. 7. Die Nachuntersuchungen zeigen, daß alle 9 Stopfen geöffnet wurden.

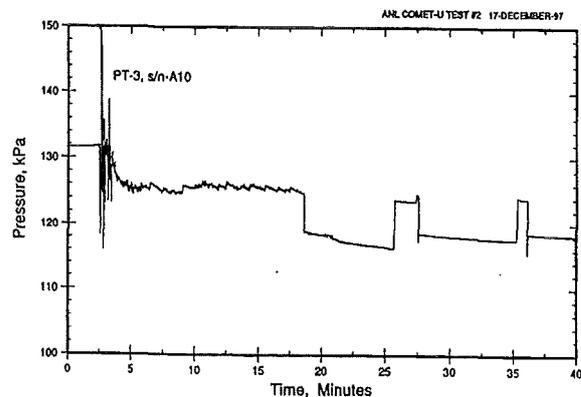


Abb. 7: COMET-U2: Druckverlauf in der Wasserzuführung

Schlußfolgerungen

Beide Experimente bestätigen, daß sich Corium-Schmelzen nicht anders verhalten als die im FZK eingesetzten Simulations-Schmelzen. Durch den Wasserzutritt von unten wird die Schmelze fragmentiert und erstarrt porös. Die Wasserzutritts- und Kühlraten liegen auf gleicher Höhe wie in den COMET-T Experimenten des FZK gemessen. Die hohe Wasserzutrittsrate gewährleistet die sichere Kurz- und Langzeitkühlung. Damit konnte auch unter Verwendung realer Schmelzen das COMET-Konzept erfolgreich bestätigt werden.

4. COMET-H Experimente mit Nachwärmesimulation

COMET-H 2.2: Experiment zur Kühlung bei ungleichmäßiger Erosion der Opferschicht

Nachdem die sichere Kühlung gleichmäßig auf der Opferschicht ausgebreiteter Schmelzen mit Nachwärmesimulation nachgewiesen wurde /1/, wird jetzt gezielt eine ungleichmäßige Erosion der Opferschicht erzeugt. Damit wird das Einsetzen einer nur lokalen Flutung und Kühlung durch Wasserzutritt von unten erzwungen, während der größere Bereich der Schmelze zunächst nicht von unten geflutet wird. Erst nach weiterem Vordringen der Schmelze würden sich weitere Kühlkanäle öffnen, so daß die Kühlung dann für die anderen Bereiche der Schmelze wirksam werden kann. Eine solche Situation des ungleichmäßigen Einsetzens der Flutung ist wegen der Größe der notwendigen Kühlfläche im Reaktor nicht auszuschließen und muß daher sicher beherrscht werden.

Im Experiment wird die Situation dadurch simuliert, daß ein kleiner Teil (22 Stück) der Kühlkanäle im Norden der Kühlfläche eine größere Länge von 80

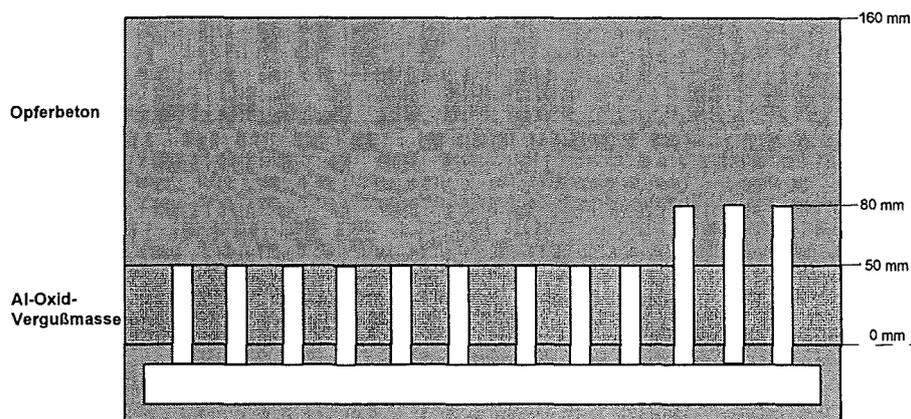


Abb. 8: Prinzipskizze Versuchsaufbau COMET-H 2.2

mm hat, während die übrigen 90 Kanäle sämtlich 50 mm lang sind, s. Abb. 8. Damit werden die langen Kanäle zuerst von der Schmelze geöffnet und der gewünschte lokale Kühlwasserzutritt beginnt. Der wirksame Wasservordruck beträgt in diesem Experiment 0,2 bar. Um ein unerwünschtes Vordringen von Teilbereichen der Schmelze, wie es im Vorläuferexperiment COMET-H 2.1 aufgetreten war /1/, zu beherrschen, wird eine 5 cm hohe Schicht aus Aluminiumoxid-Vergußmasse unter der Betonopferschicht eingebracht und damit die niedrigen Kanäle eingebettet. Diese Schicht soll als beständige Barriere wirken und den Fragmentierungs- und Kühlprozeß der Schmelze fördern.

Das Experiment startet mit dem Einguß von 650 kg Schmelze (je 50 Gew. % Metall und Oxid) mit einer Höhe (ohne Gasblasen) von 26 cm. Damit beginnt bei kontinuierlicher Beheizung von ca. 300 kW in der Schmelze zunächst die Erosion der Betonopferschicht. Die

Schmelze wird dabei von den bei der Betonzerstörung entstehenden Gasen gerührt und der oben liegende Oxid-Anteil ist auf Grund seiner Zusammensetzung so dünnflüssig, daß er sich gleichmäßig ausbreitet und vermischt. Nach 18 Minuten werden die langen Kanäle im Norden erreicht, so daß der Kühlwassereintritt in die Schmelze mit 0,1 l/s einsetzt. Daraufhin beginnt die Schmelze abzukühlen und im Norden zu erstarren. Erwartungsgemäß geht aber, wegen der noch unzureichenden Kühlung der übrigen Schmelze, die Erosion der Betonschicht in den übrigen Bereichen der Opferschicht weiter, und über einen Zeitraum von etwa 20 Minuten öffnen tiefer liegende, kurze Kühlkanäle von 50 mm Länge, vorwiegend im zentralen Bereich. Dadurch steigt der Kühlwasserstrom auf etwa 1 l/s an. In dieser frühen Phase ergibt sich aus der Dampfmesung im Abgasrohr ein aus der Schmelze abgeführter Wärmestrom von bis zu 1,5 MW (entsprechend 2,2 MW/m²). Damit kühlt die Schmelze großflächig ab und beginnt zunächst in den Bereichen der geöffneten Kanäle zu erstarren.

26 min nach Einguß ist die Schmelze durch das vor allem im Norden einströmende Wasser überflutet und auch dort von einer Oberflächenkruste bedeckt, wo eine wirksame Kühlung von unten noch nicht eingesetzt hat. Da aber in diesen Bereichen durch weitere Betonerosion und Öffnen weiterer Stopfen die starke Gasfreisetzung und Fragmentierung andauern, bricht die Oberflächenkruste der Schmelze mehrfach auf, und es bilden sich kleine Vulkane, teilweise auch unter Wasser. Dadurch wird ein kleiner Teil der Oxidschmelze nach oben ausgetragen, ohne daß es zu stärkeren Reaktionen zwischen der heißen Schmelze und dem Kühlwasser kommt. Damit wird die Kühlbarkeit der tiefer liegenden Schmelze kontinuierlich verbessert. Es kommt dann schließlich zu einem Stop der Schmelzfront.

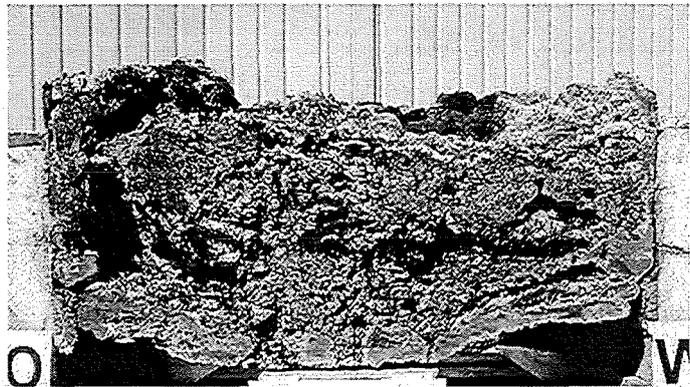


Abb. 9: Tiegelschnitt COMET-H 2.2

Wie der Tiegelschnitt, s. Abb. 9, zeigt, dringt die Schmelze maximal bis zur Aluminiumoxidschicht auf der Höhe der kurzen Kühlkanäle vor. Dann öffnen die Kühlwasserkanäle und lassen die Schmelze in dieser Position erstarren. Die volle Erstarrung der Schmelze mit Stop der Erosion ist etwa 45 Minuten nach Einguß der Schmelze erreicht, und nach-

folgend sinken alle Temperaturen, da sich ein stabiler Kühlungszustand gebildet hat. Die Beheizung der Schmelze wurde über weitere 20 Minuten bis 65 Minuten nach Einguß der Schmelze fortgesetzt, ohne daß es zu einer weiteren Erosion kommt. In dieser Phase sind alle Temperaturen niedrig, insbesondere in den wichtigen Strukturen, wo sie 100 °C kaum überschreiten. Damit wurde auch die sichere Langzeitkühlbarkeit nachgewiesen.

Das Einbringen der Unterschicht aus stabilem Aluminiumoxid hat sich sehr gut bewährt. Die Schicht stoppt das Vordringen der heißen flüssigen oder evt. schon erstarrten Schmelze und fördert durch die verbesserte Haltezeit den weiteren Fragmentierungs- und Kühlvorgang der Schmelze. Daher stellt die Kombination der stabilen Aluminiumoxidschicht mit der darüberliegenden, niedrighschmelzenden Betonopferschicht (< 1200 °C) eine Verbesserung der COMET-Kühleinrichtung dar, die eine sichere Kühlung auch bei lokal höherem Schmelzeangriff gewährleistet. Sie wird daher für die Anwendung im Reaktor vorgeschlagen und in den künftigen COMET-Experimenten eingesetzt.

Von Bedeutung ist auch, daß - trotz der frühen Ausbildung einer erstarrten Schmelzenoberfläche durch Überflutung von Kühlwasser aus gut gekühlten Bereichen der Schmelze - die weitere Fragmentierung und das Erreichen der Kühlbarkeit in den anfangs noch nicht ausreichend gekühlten Bereichen stattfinden. Hierzu tragen das Aufbrechen der Krusten und der vulkanähnliche Austrag von Schmelze bei.

COMET-H 3.1: Untersuchungen zur Kühlung einer Schmelze mit realistischem Zr-Gehalt

Ziel ist die Untersuchung der Kühlbarkeit einer simulierten und nachbeheizten Kernschmelze mit einem realistischem Gehalt von metallischem Zircalloy in der Schmelze. Die Problematik des Zircalloy, das als noch nicht oxidiertes Hüllrohrmaterial in der Kernschmelze vorhanden sein kann, liegt in seiner chemischen Aggressivität gegenüber den meisten Materialien (hohe Sauerstoff-Affinität) und in der stark exothermen chemischen Reaktionswärme bei Oxidation des Zr zu ZrO_2 . In diesem Experiment beträgt die Menge an metallischem Zr 85 kg, das entspricht im Reaktorfall einem nicht oxidierten Hüllrohranteil von 60 %, der auf einer Fläche von 150 m² verteilt ist. Zusätzlich werden der Schmelze simulierte Spaltprodukte zugesetzt, um die Spaltproduktfreisetzung zu quantifizieren.

Die thermitisch erzeugte Schmelze von 800 kg wird mit einer Temperatur von 1900 °C abgegossen. Die Schmelze besteht aus 50 Gew% Fe mit etwas Nickel und 50 Gew% Al_2O_3 + CaO. Die schwerere, unten befindliche Metallschmelze löst zunächst die auf der Kühlfläche liegenden 85 kg Zry-Schrott auf. Ebenso werden auch die in der Zry-Schicht befindlichen Spaltproduktsimulate in die Schmelze eingemischt. Damit beträgt die Gesamthöhe der anfänglich vorhandenen 885 kg Schmelze 34 cm (11,5 cm Metall unten, 22,5 cm Oxid oben, ohne Gasanteil). Während des Experiments wurde bis zum geplanten Ende nach 50 min die Nachwärmesimulation von 300 - 400 kW durch kontinuierliche, induktive Beheizung aufrecht erhalten.

Die erste Phase der Erosion des Opferbetons verläuft mit einer erhöhten Erosionsrate von 0,25 mm/s, zum einen wegen der hohen Übertemperatur der Schmelze, zum andern wegen der Zr-Oxidation, die viel chemische Energie freisetzt. Rechnerisch ermittelt man, daß bei der Oxidation von 85 kg Zry mit den Bestandteilen des Beton (Wasser und SiO_2 geben ihren Sauerstoff ab) 285 MJ Energie freigesetzt werden. Da diese Reaktion in einer Zeit von etwa 5 min erfolgt, entspricht die chemisch eingebrachte Leistung etwa 950 kW, das ist das 3-fache der Nachwärmeleistung. Diese Reaktion ist mit der Freisetzung von H_2 aus der chemischen Wasserzersetzung gekoppelt, s. Abb 10. Dennoch ist nach ca. 5 min die H_2 -Freisetzung nicht vollständig beendet, da dann die Oxidation des im Metall gelösten Si durch das Wasser aus dem Beton einsetzt. Die integrierte H_2 -Freisetzung ist damit bestimmt durch den Wassergehalt in dem Opferbeton und nicht durch den Zr-Anteil in der Schmelze. Der Zr-Anteil bestimmt aber die Freisetzungsrates des H_2 .

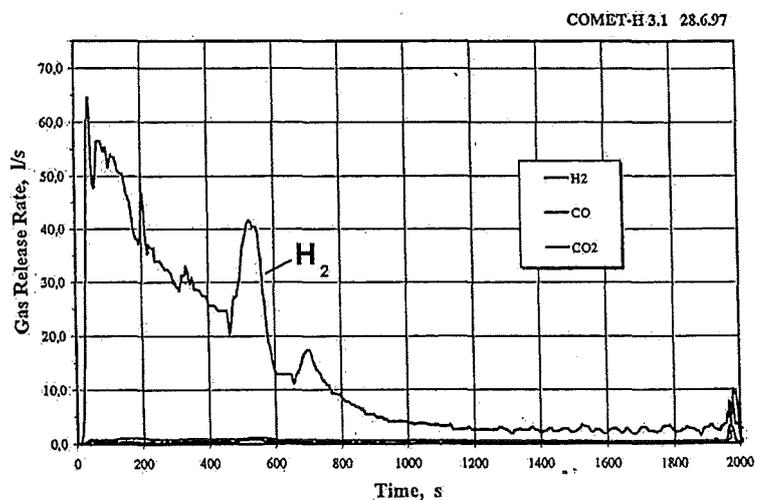


Abb. 10: Wasserstofffreisetzung COMET-H 3.1

Diese Phase der trockenen Betonerosion dauert bis 7:14 min. Dann beginnt die Flutung der Schmelze von unten durch Öffnen der ersten Schmelzkappen. Die Schmelze ist zum Zeitpunkt Wasserzutritt noch sehr dünnflüssig und heißer als in früheren Versuchen. Mit Einsetzen der Kühlung hört die Aerosolfreisetzung sehr schnell auf und der Blick auf die

Schmelze ist völlig ungestört. Die Wasserstofffreisetzung steigt kurzfristig an, fällt aber mit der Abkühlung der Schmelze innerhalb von 1 min stark ab und ist dann praktisch beendet, s. Abb. 10. Zu Beginn wird das zutretende Wasser vollständig verdampft. Dies führt dazu, daß der aus der Schmelze an das zutretende Wasser abgeführte Wärmestrom um fast eine Zehnerpotenz größer ist als die eingekoppelte Leistung in der Schmelze, s. Abb. 11. Trotz fortschreitender Abkühlung der Schmelze nach dem ersten Wasserzutritt nimmt zunächst die Zähigkeit der sichtbaren, oberen Schmelze nur wenig ab. Der Übergang von einer dünnflüssigen Schmelze zur Ausbildung einer weitgehend erstarrten Oberfläche erfolgt innerhalb von nur 15 s zum Zeitpunkt 9:45 min.

Die Schmelze besitzt dann aber noch eine größere Zahl aktiver Zonen, in denen die Schmelze noch nicht überkrustet ist und stark gerührt wird. Die Schmelze ist nach 11:40 min vollständig überflutet, aber im Innern noch nicht voll erstarrt, denn es öffnen sich noch weitere Schmelzstopfen. Das Wasser auf der überfluteten Schmelzenoberfläche siedet heftig und führt auch zu diesem Zeitpunkt deutlich mehr Energie ab, als durch Nachwärmesimulation zugeführt wird. Nach 14 min zeigt die induktiv eingekoppelte Leistung keine Schwankungen mehr, woraus sich schließen läßt, daß die Schmelze ihre geometrische Form nicht mehr ändert und also voll erstarrt ist. Nach etwa 20 min ist bei weiterhin kontinuierlicher Beheizung die Übertemperatur der erstarrten Schmelze weitgehend abgebaut. Die Temperaturen der Tragplatte der Kühleinrichtung und in ihrer Umgebung sind fortwährend unter 100 °C.

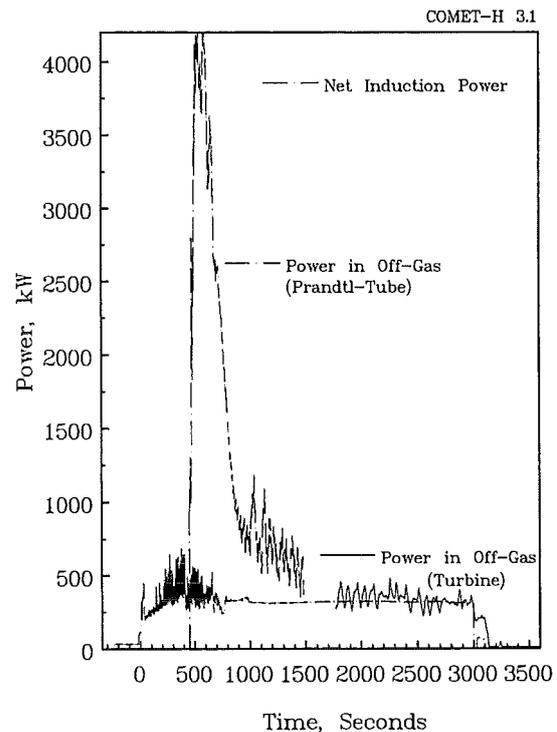


Abb. 11: Vergleich abgeführter Wärmestrom mit eingekoppelter Leistung

Das Experiment wird für weitere 30 min mit kontinuierlicher Beheizung fortgesetzt. Damit wird die sichere Langzeit-Wärmeabfuhr nachgewiesen. An keiner Stelle werden für die Strukturen und die Umgebung der Kühleinrichtung kritische Temperaturen gemessen (im Bereich der Strukturen $< 100\text{ °C}$), und es besteht ein Gleichgewicht zwischen eingespeister und abgeführter Leistung, s. Abb. 11. Die Beheizung wird planmäßig nach 50 min beendet.



Abb. 12: Tiegelschnitt COMET-H 3.1

Der Wasserzutritt verläuft über den gesamten Zeitraum ohne Druckereignisse, führt aber zum starken Aufwirbeln der Schmelze etwa während der ersten zwei Minuten des Wasserzutritts. Die Flutrate steigt von anfangs 35 ml/s stetig auf maximal 1,9 l/s 13 min nach Versuchsbeginn. Dies wird durch das Öffnen weiterer Schmelzkappen verursacht, da noch nicht gekühlte Bereiche der Schmelze die Opferschicht weiter erodieren. Wie die Nachuntersuchungen zeigen, ist die Betonopferschicht nahezu gleichmäßig bis zur Höhe der Stopfenoberkante, d. h. bis zur Al_2O_3 -Schicht, aufgeschmolzen und fast alle Kühlkanäle sind vollständig offen. Die Schmelze ist als poröse, gut wasserdurchlässige Schicht erstarrt, s. Abb. 12. Dies erklärt die sichere Kühlung der Schmelze.

Damit wurde nachgewiesen, daß auch bei Anwesenheit von Zircalloy in der Schmelze die Kühlung der Schmelze nach dem COMET-Konzept sicher erreicht wird. Sowohl der chemische Angriff durch die Schmelze wie auch die höheren Energien aus den ablaufenden chemischen Reaktionen werden sicher beherrscht. Auch die Höhe der Schmelze (34 cm ohne Beton und Gasvolumen) stellt kein Problem dar.

COMET-H 3.2: Untersuchungen zur Kühlung einer simulierten Kernschmelze unter speziellen Bedingungen für den EPR

Zielsetzung in diesem Experiment ist, EPR-spezifische Bedingungen einzustellen, die von früheren Experimenten abweichen. Dies bezieht sich vor allem auf den Wasserzutritt. Der wirksame Druck des Kühlwassers wird auf 0,1 bar reduziert bei gleichzeitig vergrößertem Drosselquerschnitt der Schmelzstopfen von 5 auf 10 mm Durchmesser. Dies kompensiert

den geringeren Wasserdruck, soll aber vor allem die Möglichkeit einer Verstopfung der Strömungswege durch Schmutzpartikel im Wasser reduzieren. 10 der 112 Schmelzstopfen haben statt der üblichen Brennkappe eine Kappe aus thermoplastischem Kunststoff, der bei ca. 300 °C aufschmilzt. Die Schmelze weist einen anfänglichen Zircalloy-Anteil von 30 % des Kerninventars und simulierte Spaltprodukte auf.

Die Schmelze von 800 kg wird mit einer Temperatur von 1900 °C abgegossen. Sie besteht aus 50 Gew% Fe und 50 Gew% Oxid. Die schwerere, unten befindliche Metallschmelze löst zunächst die auf der Kühlfläche liegenden 45 kg Zry-Schrott auf. Ebenso werden auch die in der Zry-Schicht befindlichen Spaltproduktsimulate in die Schmelze eingemischt. Damit beträgt die Gesamthöhe der anfänglich vorhandenen 845 kg Schmelze 33 cm (10,5 cm Metall unten, 22,5 cm Oxid oben, ohne Gasanteil). Die Simulation der Nachwärme in der Schmelze durch induktive Beheizung mit einer Nettoleistung von 300 - 400 kW erfolgt bis 22 Minuten nach Aufgabe der Schmelze.

Mit Einguß der Schmelze beginnt die erste Phase der Erosion der Opferbetonschicht, die bis zur Stopfenoberkante 110 mm hoch ist. Die Erosion verläuft in diesem Experiment etwas langsamer als im Vorläufer-Experiment, da die Zircalloy-Menge, die zur Oxidation zur Verfügung steht und die neben der simulierten Nachwärme die dominierende Wärmequelle ist, nur halb so groß ist. Die Zr-Oxidation ist nach Erosion einer Opferbetonschichthöhe von etwa 40 mm beendet. Zunächst erfolgt die Erosion vorwiegend im Zentralbereich der Opferschicht, und zwar mit einer lokalen Erosionsrate von etwa 0,16 mm/s, die sich bis zum Einsetzen der Wasserkühlung zeitlich kaum ändert. Der Wasserzutritt beginnt nach 702 s = 11:42 min mit einer anfänglichen Wasserzutrittsrate von 320 ml/s. Zu diesem Zeitpunkt ist das Zircalloy vollständig oxidiert. Das bei der Oxidation als Zwischenprodukt gebildete Silicium in der Metallschmelze führt aber weiterhin zu einer erhöhten H₂-Freisetzung, so daß bis Beginn Wasserzutritt noch eine - inzwischen reduzierte - Wasserstofffreisetzung existiert.

Der Wasserzutritt in die noch dünnflüssige Schmelze erfolgt, wie bei allen früheren Versuchen, wiederum ohne wesentliche Druckereignisse. Es wird lediglich in der Anfangsphase des Wasserzutritts etwas Schmelze hochgeworfen. Die Wasserzutrittsrate steigt durch Öffnen weiterer Schmelzstopfen über etwa 300 s weiter an auf den Endwert von 1,3 l/s und bleibt dann etwa konstant. Sie ist damit etwa 30 % niedriger als in COMET H 3.1, liegt

aber durchaus im Bereich der üblichen Kühlwasserraten, die im Falle der anfangs vollständigen Verdampfung die Nachwärmeleistung um etwa das 10-fache übertreffen. 200 s nach Beginn des Wasserzutritts hat die Schmelze eine stabile Oberflächenkruste ausgebildet, 300 s nach Wasserzutritt, d. h. 1000 s nach Einguß der Schmelze, wird diese Kruste durch das von unten aufsteigende Wasser überflutet. Allerdings sind zu diesem Zeitpunkt Teilbereiche im Inneren der Schmelze noch nicht vollständig erstarrt. Dies zeigt das Ansprechen weiterer Thermolemente, die außerhalb des Zentralbereichs der Kühlfläche liegen. Sie werden durch das weitere Vordringen noch nicht gekühlter Bereiche der Schmelze nach unten beaufschlagt, bis die Schmelze auf der keramischen Unterschicht durch die Wasserkühlung gestoppt wird. Die Dampfströmung im Abgasrohr nimmt nach einer intensiven Kühlphase, bei der über einen Zeitraum von 250 s ab Wasserzutritt etwa 3 MW abgeführt werden, deutlich ab, da die Übertemperatur der Schmelze weitgehend abgebaut und die Schmelze bis auf kleinere Bereiche erstarrt ist. Zum Zeitpunkt 1318 s, bei dem die Nachheizung der Schmelze durch ein Sicherheitssignal unvorhergesehen abgeschaltet wird, ist die durch Verdampfung abgeführte Leistung noch etwa 1 MW, also das 3-fache der simulierten Nachwärme, mit stark fallender Tendenz. Die Schwankungen der simulierten Nachwärme sind zu diesem Zeitpunkt auf etwa 5 % abgesunken, was ebenfalls auf nur kleine, noch flüssige Zonen hinweist. Die Messung der Wasserströme zeigt, daß die Verteilung des Kühlwassers auf die 4 Quadranten der Kühlfläche ab etwa 1000 s mit je etwa 300 ml/s gleichmäßig ist.

Die sicherheitsbedingte Abschaltung der Induktionsheizung zum Zeitpunkt 1318 s wird durch eine kleine Menge metallischer Schmelze verursacht, die durch einen geöffneten Schmelzstopfen in die untere Wasserschicht eintritt. Der dort liegende Lichtleiter wird dadurch zerstört und löst eine automatische Abschaltung aus. Der Versuch wird daraufhin ohne weitere Nachwärmesimulation zu Ende geführt und die vollständige Erstarrung sicher erreicht. Nach 1 Stunde wird das Experiment beendet. Danach wird durch wiederholtes Absenken des Wasserstandes und Neubespeisung die hohe Durchlässigkeit der erstarrten Schmelze bestätigt. Während des Experiments sind sowohl in den Außenbereichen des Tiegels wie auch in der keramischen Unterschicht und den Tragstrukturen darunter alle Temperaturen unterhalb kritischer Werte.

Die Nachuntersuchungen zeigen, daß die Schmelze die gewohnt hohe Porosität hat. Die Schmelze hat die Opferschicht nahezu vollständig bis auf die keramische Unterschicht

erodiert. Etwa ein Drittel der Schmelzstopfen ist geöffnet. Durch einzelne Schmelzstopfen ist, anders als in früheren Experimenten, Schmelze nach unten abgelaufen. Dies zeigt insbesondere der geöffnete Kühleinsatz, der in allen 4 Quadranten kleine, überwiegend metallische Schmelzemassen aufweist, die insgesamt jeweils 28, 52, 57 und 138 g betragen. Zu dieser letzten Masse gehört auch ein Kegel von 107 g ($= 14 \text{ cm}^3$), der den Lichtleiter zerstört und damit die Abschaltung ausgelöst hat. Da diese kleinen Schmelzemassen in die vorhandene Wasserschicht gelangen, kühlen sie schnell ab und erstarren. Insbesondere bei einer robusten Tragstruktur aus Stahl, wie sie für einen realen Einsatz verwendet würde, ist dadurch eine Gefährdung nicht gegeben. In dem hier verwendeten Experimentiereinsatz aus Epoxidkunststoff wurde lediglich die Lackschicht lokal angegriffen.

Die 10 Schmelzstopfen, die mit einer thermoplastischen Abdeckkappe verschlossen waren, haben die Kühlquerschnitte nicht ausreichend geöffnet und zur Kühlung nicht beigetragen. Der Grund liegt, wie aus früheren transienten Experimenten bekannt, im zu langsamen Öffnen der Kappen, das schon bei geringfügigem Einströmen von Wasser gestoppt wird.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die Schmelze mit einem charakteristischen Zircaloy-Anteil trotz "Durchregnen" kleiner Schmelzemassen sicher gekühlt wird. Da die Erosion des Opferbetons ungleichmäßig war, erfolgt die Abkühlung der Schmelze über einen längeren Zeitraum. Dabei erweist sich die keramische Unterschicht als ausreichend stabil und vergleichmäßigend. Auch bei reduziertem Wasserdruck und vergrößertem Zuströmquerschnitt der Schmelzstopfen ist der Wasserzutritt in die Schmelze ausreichend. Das in geringem Maße beobachtete Durchtreten von Schmelze ist die Folge des geringeren Wasserdrucks und der größeren Zuströmquerschnitte. Es hat wegen der geringen Mengen keine negativen Auswirkungen auf die Kühlbarkeit. Schmelzstopfen mit einer thermoplastischen Kunststoffkappe haben jedoch ein unzureichendes Öffnungsverhalten und sind keine Alternative für die bewährten Brenneinsätze.

5. COMET-T 9: Untersuchungen zur Kühlung später Schmelzen aus dem RDB

Zielsetzung

In den transienten Experimenten COMET-T mit Simulationsschmelzen wird nun ein komplizierteres Szenario in einem Kernschmelzenunfall zugrunde gelegt: Restschmelzen fließen zu einem späteren Zeitpunkt aus dem RDB auf die COMET-Kühleinrichtung, nachdem die erste Schmelze bereits die Opferschicht erodiert hat, der Wasserzutritt eingesetzt hat und die Schmelze erstarrt ist. Dabei sind zwei Fälle zu unterscheiden: Ist die erste Schmelze dabei bereits überflutet, läuft die zweite Schmelze in eine Wasserschicht ein. Hier wird jedoch der zweite Fall betrachtet, daß die zweite Schmelze auf die erstarrte Schmelze aufläuft, bevor diese mit Wasser überdeckt ist, also während der Flutvorgang noch im Gange ist (trockenes Szenario). Dabei ist zu klären, ob das Auffließen zum Verstopfen der offenen Kühlkanäle der bereits erstarrten, ersten Schmelze führen kann, oder ob auch die zweite Schmelze durch die bereits vorhandene Dampf-Wasser-Abströmung fragmentiert und damit die Gesamtschmelze ausreichend gekühlt wird.

Experimentelle Umsetzung

Im Versuch soll diese Situation dadurch simuliert werden, daß im Versuchsbehälter COMET-T auf eine porös erstarrte, Wärme freisetzende Schmelze eine zweite oxidische Schmelze aufgegossen wird. Zur Erzeugung der ersten Schmelze wird eine Thermitmischung von 54 kg im Versuchsbehälter gezündet. Die Schmelze erodiert die Opferschicht, und damit setzt der Wasserzutritt von unten ein. Nach Erstarrung dieser ersten Schmelze, aber noch vor ihrer Überflutung mit dem Kühlwasser, wird der Kühlwasserzutritt kurzzeitig unterbrochen, um den Zustand der teilgefluteten Schmelze aufrecht zu halten. Dann wird die zweite, rein oxidische Schmelze von etwa 40 kg aus

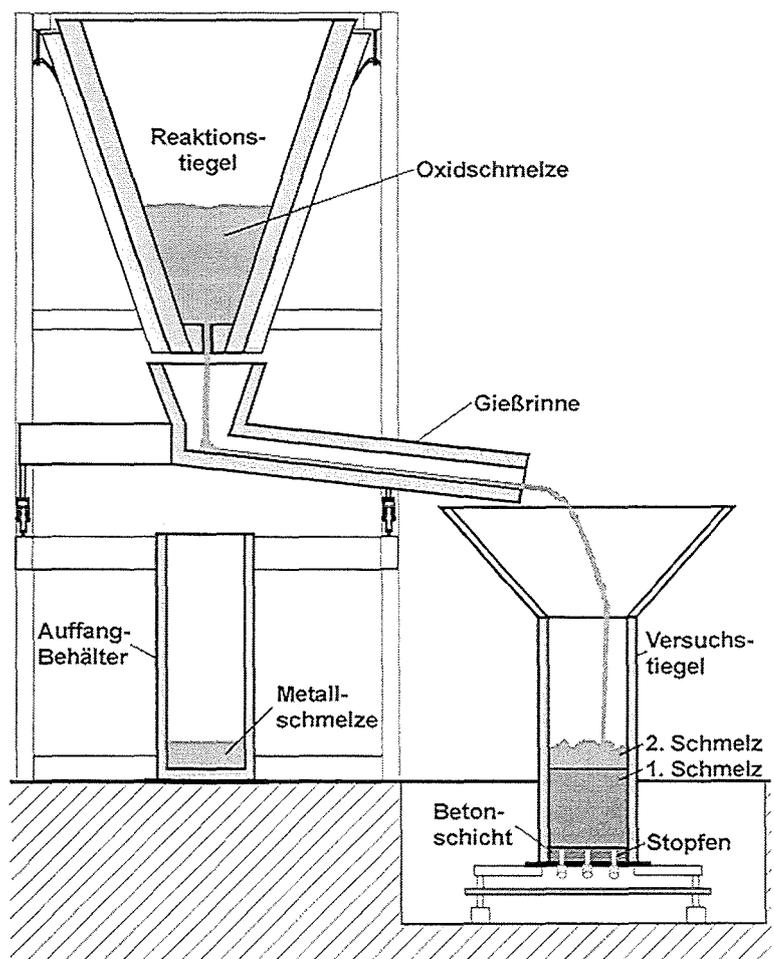


Abb. 13: Versuchsaufbau der COMET-T Experimente zur Untersuchung später nachfließender Schmelzen

dem Thermitreaktionstiegel über die Gießrinne aufgegossen, s. Abb 13. Gleichzeitig wird die Wasserzufuhr wieder geöffnet, wodurch die Anfangsbedingung für die zu untersuchende Situation in realistischer Weise eingestellt ist. Mit weiterem Ablauf des Experiments zeigt sich, ob sich eine kühlbare Konfiguration ergibt.

Der Versuchsbehälter entspricht in seinem Aufbau dem der bisher durchgeführten COMET-T Experimente. Der Wasservordruck wird auf 0,2 bar eingestellt. Zur Verminderung unerwünschter Energieverluste ist der Versuchstiegel seitlich mit einem hochisolierenden Aluminiumoxid ausgekleidet. Die Höhe der Betonschicht beträgt 75 mm. 5 Stopfen, an die die Wasserzuführungsleitungen angeschlossen sind, ragen 50 mm in die Betonschicht hinein. Die Opferschichthöhe über den Stopfen beträgt damit 25 mm.

In dem Experiment COMET-T 9.2 ist 25 s nach Zündung die Thermitreaktion der ersten Schmelze beendet und die Betonerosion setzt ein. Nach 138 s ist die Opferschicht erodiert und der Wasserzutritt setzt zunächst mit einer Zutrittsrate von ca. 100 ml/s ein, s. Abb. 14. Bereits 50 s später ist wegen der sehr wirksamen Wasserkühlung die Oberfläche der Schmelze erstarrt, und zusammen mit dem nach oben austretenden Dampf werden Wassertropfen ausgetragen. Dies ist auch zu erkennen an dem in Abb. 14 dargestellten Temperaturverlauf. Das Thermoelement befindet sich an der Betonoberfläche. Durch die einsetzende Flutung in die Schmelze sinkt die Temperatur auch hier bei 200 s auf Siedetemperatur ab. Ca. 120 s nach Beginn Wasserzutritt sind alle 5 Stopfen geöffnet und es wird die maximale Wasserzutrittsrate von ca. 300 ml/s erreicht. 240 s nach Zündung der ersten Schmelze wird die zweite Schmelze im Reaktionstiegel gezündet. 30 s später wird der Zulauf des Flutwassers in den Versuchsbehälter abgesperrt, da die gewünschte Wasserstandshöhe in der ersten Schmelze erreicht ist (Wasserstand etwa Mitte der erstarrten Schmelze). Die Verdampfung des eingedrungenen Wassers geht aber weiter, da die Schmelze noch eine erhebliche Übertemperatur hat.

Damit steigt auch die Temperatur an der Betonoberfläche wieder an, s. Abb. 14. 93 s nach Zündung der zweiten Schmelze im Reaktionstiegel, d. h. 333 s nach Zündung der ersten Schmelze, beginnt der Einguß der Oxidschmelze in den Versuchstiegel. Die Oberfläche der ersten Schmelze ist zu diesem Zeitpunkt dunkel, nur ein sehr schmaler Bereich am oberen Tiegel ist noch hellglühend. Der Stand des siedenden Wassers in der erstarrten ersten Schmelze befindet sich unter der Oberfläche, und mit der Dampfabströmung werden auch kleine Wassertropfen ausgetragen. Mit Aufgießen der zweiten Oxidschmelze wird der Wasserzulauf wieder geöffnet, wie die Zunahme der Durchflußrate bei 330 s in Abb. 14 zeigt. Die Wasserzutrittsrate ändert sich während des Aufgießens der Oxidschmelze praktisch nicht und bleibt auf einem Wert von ca. 300 ml/s. Mit dem erneuten Wasserzutritt sinkt auch die Temperatur an der Betonoberfläche sofort wieder ab. Das Aufgießen der Oxidschmelze dauert 40 s. Es verläuft vollständig ruhig und es werden keine heftigen Wechselwirkungen der Schmelze mit dem Wasser beobachtet. Etwa 7 s nach Beginn Einguß setzt ein Schmelzenaustrag in Form eines Schmelzensprühregens ein, der erst bei Ende Einguß nach 40 s aufhört. Er wird verursacht durch das Vordringen der Wasserfront in die neu einlaufende Schmelze. Die Schmelzentropfen von ca. 0,5-1 cm Durchmesser werden dabei etwa 1 m hochgeworfen. 60 s nach Beginn des 2. Eingußes ist auch die zweite Schmelze erstarrt und vollständig mit Wasser überdeckt. Etwa die Hälfte der eingegossenen Schmelze ist porös in dem Versuchsbehälter erstarrt, die andere Hälfte wurde durch den Sprühregen granuliert. Damit ist insgesamt die erstarrte Schmelze sehr gut kühlbar.

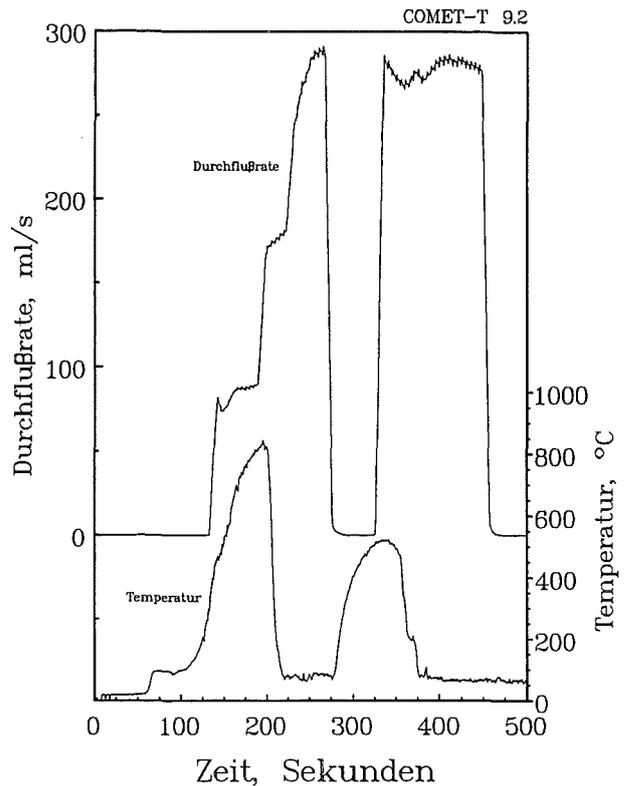


Abb. 14: Experiment COMET-T 9.2, Wasserzutrittsrate sowie Temperaturverlauf in der Wasserzutrittsebene

Zur Bestätigung dieser ersten günstigen Aussagen in Bezug auf die Kühlbarkeit von Restschmelzen wurde ein weiterer Versuch mit etwas veränderten Versuchsbedingungen durchgeführt. Die Menge der abgegossenen, zweiten Oxidschmelze wurde auf 30 kg reduziert, jedoch ihre Zähigkeit durch die Zugabe von 10 % SiO_2 erhöht. Dies wird in der postulierten Unfallsituation als kritischer angesehen, da es eher zum Verschließen bereits vorhandener offener Kühlkanäle in der ersten Schmelze führen kann.

Die Versuchsführung erfolgt wie in dem oben geschilderten Versuch. Die Kühlung der ersten Schmelze ist ähnlich, allerdings wird ein Teil der Schmelze beim frühen Wasserkontakt aus dem Versuchsbehälter ausgeworfen. 307 s nach Zündung der ersten Schmelze wird die zweite Oxidschmelze in den Versuchsbehälter eingegossen. Diese wird wiederum zum Teil in einem Schmelzensprühregen granuliert ausgetragen, wie auch in dem ersten Experiment beobachtet. Es ereignen sich aber keinerlei heftige Reaktionen. Nach etwa 20 s ist der Schmelzeneinguß beendet, kurze Zeit später ist auch die zweite Schmelze porös erstarrt und wird langsam geflutet. Wichtig ist, daß auch in diesem Experiment der Wasserzutritt durch das Aufgießen der zweiten Schmelze nicht reduziert wird, sondern den Wert von ca. 250 ml/s beibehält, so daß die gute Kühlung erhalten bleibt, s. Abb. 15.

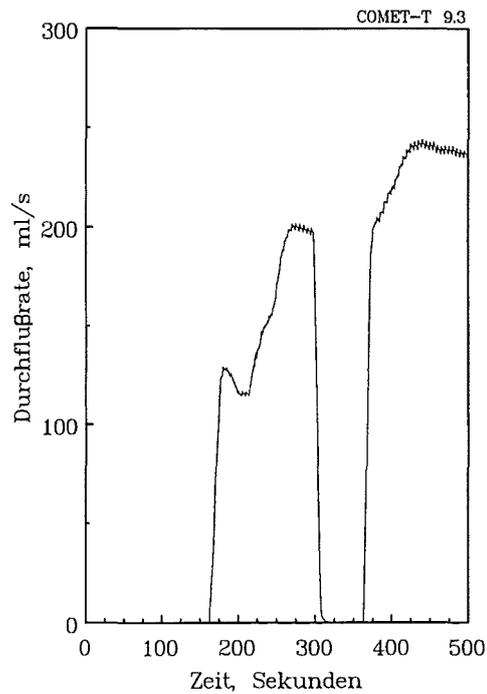


Abb. 15: COMET-T 9.3, Wasserzutrittsrate in die 1. und 2. aufgegossene Schmelze

Die Nachuntersuchungen beider Experimente zeigen, daß der in dem Versuchsbehälter verbliebene und auf die erste Schmelze aufgeflusste Anteil der zweiten Schmelze stark porös erstarrt ist, mit einer Porosität, die mindestens so hoch wie die der ersten Schmelze ist.

Schlußfolgerungen und Ausblick

Die ersten Experimente zum Verhalten von sekundären Schmelzen bei Kühlung nach dem COMET-Konzept geben Hinweise, daß sich die verzögert auslaufenden Schmelzen

hinsichtlich ihrer Kühlbarkeit nicht anders verhalten als die bisher untersuchten Schmelzen bei Wasserzutritt von unten. Die sekundäre Schmelze wird durch das verdampfende Wasser fragmentiert und erstarrt porös, teilweise wird sie versprüht und granuliert. Die Wasserzutrittsrate ändert sich dabei gegenüber der Situation vor Auflaufen der zweiten Schmelze nicht, so daß auch diese Schmelze sehr schnell gequenchet und innerhalb kurzer Zeit von Wasser überdeckt wird. Dies ist für die Beherrschung verschiedener Unfallszenarien wichtig. Die Experimente werden fortgesetzt mit einer geänderten Geometrie des Versuchsaufbaus, um das seitliche Auflaufen der zweiten Schmelze zu simulieren, wie es im EPR erwartet wird.

6. Stand der Absicherung des COMET-Konzepts

In den inzwischen durchgeführten Experimenten wurde eine große Zahl von Parametern erfolgreich untersucht. Im folgenden soll diskutiert werden, inwieweit die Probleme, die für das COMET-Konzept zu beantworten sind, abgearbeitet und gelöst sind. Wir orientieren uns dabei an einer Problemliste für das COMET-Konzept, die 1994 erstellt und inzwischen in einzelnen Punkten ergänzt wurde. Die Liste mit dem wesentlichen Ergebnisstand aus den aktuellen Experimenten ist in Tabelle 3 wiedergegeben.

Im einzelnen stellen sich die verschiedenen Aspekte in der folgenden Weise dar:

Die großflächige **Ausbreitung der Schmelze** auf der Betonopferschicht wird durch den Vorgang der trockenen Erosion der Opferschicht gefördert, die, wie die Untersuchungen belegen, die Temperatur der Schmelze zunächst auf einem solchen Niveau stabilisiert, daß ihre Ausbreitungsfähigkeit erhalten bleibt. Zudem erhöht das Einmischen des niedrigschmelzenden Opferbetons die Fließfähigkeit der Schmelze. Je nach Höhe der Opferschicht, die zwischen 10 und 20 cm betragen kann, stehen für Übertritt der Schmelze aus der Reaktorgrube und Ausbreitung ein Zeitraum von mindestens 10 Minuten zur Verfügung, bis der Wasserzutritt von unten beginnt. Auch der Flutvorgang selbst sorgt anfangs durch seine starke Rührwirkung für eine horizontale Verbreiterung der Schmelze.

Tab. 3: Problemliste, Stand und Entwicklung des COMET-Konzepts

Problemfeld	Status	Kommentar
Ausbreitung der Schmelze auf Beton-Opferschicht	durch Glasbeton begünstigt bzgl. Zähigkeit und Erstarrungstemperatur der Schmelze	durch spätes Fluten nach Betonerosion entspannt
Kühlbare Schmelzbadhöhe	35 cm in COMET-H, 40 cm in COMET-T nachgewiesen	Grenze der kühlbaren Höhe noch nicht erreicht
Stopfen: Anzahl, Durchmesser, Material	Optimierung: 8 cm Raster, 12 mm Ø, Drossel wählbar	Drosselquerschnitt auf Höhe von IRWST optimieren?
Wirksamer Wasserzulaufdruck	$\Delta p = 0; 0,1; 0,2; 0,4$ bar	Sicherheitsreserve für Auslegung vorsehen
Durchtritt von Schmelze durch Stopfen	in geringem Maße für größere Drosselquerschnitte beobachtet	verlagerte Schmelze kühlbar, da geringe Massen
Dampfexplosion bei Beginn Wasserzutritt	unwahrscheinlich, geringe Energiefreisetzung wegen kleiner Wassermengen	in COMET-H- und UO ₂ - Experimenten nicht beobachtet
Dampfexplosion bei spätem Absturz von Schmelze	abhängig von Szenario, durch Rückhaltung in Reaktorgrube unwahrscheinlich	Ausschluß oder Auslegung gegen mechanische Lasten
Wasserstoff-Freisetzung	an Betonerosion gekoppelt, abklingend bis Metallerstarrung	
Zirconium in der Schmelze	zusätzliche chemische Energie erhöht Erosionsrate; Oxidation vor Wasserzutritt abgeschlossen, daher kein Materialproblem	H ₂ -Menge entspricht etwa Molzahl des Betonwassers
Spaltprodukt-Freisetzung	Einschluß im Glasbeton, Aerosolrate → 0 bei Wasserzutritt	
Ungleichmäßige Erosion	durch keramische Unterschicht beherrscht	
Auflaufen sekundärer (später) Schmelzen	Kühlbarkeit bei Auflaufen vor vollständiger Überflutung der Primärschmelze nachgewiesen	weitere Experimente mit voll überfluteter Primärschmelze notwendig?
Materialverhalten der Strukturen	wegen schneller Erstarrung bleiben tragende Strukturen kalt	Angriff der Schmelze auf klar abgegrenzten Bereich beschränkt

Die **kühlbare Höhe der Schmelze** wurde in transienten und nachbeheizten Experimenten untersucht. Sowohl für geschichtete Schmelzen wie auch für oxidische Schmelzen wurden die gleichen Fragmentierungs- und Kühlungsmechanismen beobachtet, so daß die Kühlung unabhängig von der möglichen Schichtung der Schmelze ist. Im Reaktorfall liegt die Schmelze entweder geschichtet (Metall unter Oxid) oder vermischt (Metall in Oxid eingemischt, wobei der Oxidanteil die Transportvorgänge dominiert) vor. Beide Fälle sind durch

die Untersuchungen abgedeckt. Die Kühlbarkeit wurde für Höhen von 35 cm mit nachbeheizten Schmelzen und für 40 cm mit Schmelzen in transienten Experimenten nachgewiesen, ohne daß die Grenzen der Kühlbarkeit erreicht wurden. Falls notwendig, können diese Werte für spezielle EPR - Verhältnisse (Flutwasserdruck, ...) ergänzt werden. Von besonderer Bedeutung sind die inzwischen durchgeführten Experimente mit realen Corium-Schmelzen, die zeigen, daß deren Kühlung ebenso wirkungsvoll ist wie der eingesetzten Simulationsschmelzen, die aus einer Aluminiumthermit-Reaktion erzeugt werden.

Die **Auswahl der Schmelzstopfen** wurde optimiert. Das Rastermaß soll etwa 80 mm betragen. Bei Halbierung der Stopfenzahl würden eventuell die Bereiche zwischen den Stopfen schlecht gekühlt. Der empfohlene Abstand der Stopfen ist damit etwa doppelt so groß wie der typische Abstand der Gasblasen, die auf der Betonfläche bei deren Erosion entstehen. Die Menge des Flutwassers wird außer vom Wasservordruck wesentlich von der Größe der Drossel im Stopfen bestimmt. Hier wäre eventuell eine gewisse Optimierung auf die erwarteten EPR-Bedingungen möglich. Die Verwendung der Brennkappen hat sich im Hinblick auf ein vollständiges Öffnen der Stopfen bewährt.

Der **wirksame Wasserzulaufdruck** zur Flutung der Schmelze wurde in den Grenzen 0 bis 0,4 bar variiert, mit Schwerpunkt der Untersuchungen bei 0,2 bar. Mit dem Druck steigt erwartungsgemäß die Flutrate und damit auch die Kühlrate, vermutlich auch die kühlbare Schmelzbathhöhe. Daß bei einem Flutwasserdruck von $\Delta p = 0$ bar die Kühlung noch ausreichend erfolgt, sichert die Kühlbarkeit in bestimmten Grenzfällen. Die Auslegung sollte jedoch auf einen Druck größer Null erfolgen.

Der **Durchtritt von Schmelze** durch Stopfen wurde nur in wenigen Fällen beobachtet, speziell bei geringem Flutwasserdruck und gleichzeitig vergrößertem Drosselquerschnitt. Hierbei handelt es sich um geringe Restmengen noch nicht erstarrter Schmelze, die zu einem späten Zeitpunkt, an dem die Schmelze weitgehend erstarrt ist, in die untere Wasserschicht ablaufen, wo sie sicher gekühlt werden. Eine Rückwirkung auf die Kühlbarkeit der oben erstarrten Schmelze wurde nicht beobachtet.

Dampfexplosionen bei Beginn des Wasserzutritts von unten wurden in speziellen transienten Experimenten untersucht, bei denen Wasser mit hohem Druck in die noch sehr heiße Schmelze eintritt. Die Belastungen daraus sind sehr gering, da die Menge des re-

aktionsfähigen Wassers nur wenige cm^3 beträgt, und stellen daher keine Gefährdung dar. Weder in den COMET-H Großexperimenten noch in den Experimenten mit realem Corium wurden energetische Reaktionen beobachtet.

Dampfexplosionen bei spätem Absturz von Schmelze werden durch das EPR-Konzept der Rückhaltung der Schmelze in der Reaktorgrube über einen längeren Zeitraum weitgehend ausgeschlossen. Sollte dies nicht hinreichend sein, wären - unter Berücksichtigung der erwarteten niedrigen Überhitzung spät abstürzender Schmelzen - mechanische Belastungen aus solchen Wechselwirkungen abzuschätzen. Es ist zu erwarten, daß die Strukturen solche Lasten abtragen können.

Eine **Wasserstofffreisetzung** erfolgt überwiegend als Folge der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und nur in geringem Maße durch den Flutprozeß. Damit sind die Wasserstoffmengen an den Wassergehalt des Beton gekoppelt, von dem bei Reaktion mit der relativ dünnen Eisenschicht typisch etwa $1/3$ zu Wasserstoff reduziert wird und in den SB abströmt. Nach Einsetzen der Kühlung geht die H_2 -Freisetzung sehr schnell auf Null.

Das **Zirconium in der Schmelze** führt während der Betonerosion zu einer stark exothermen chemischen Reaktion mit dem Betonwasser und mit Bestandteilen der Zuschlagstoffe des Betons und erhöht die Erosionsrate und die Wasserstofffreisetzung. Die Zirconium-Oxidation ist nach etwa 5 cm Betonerosion abgeschlossen, also wesentlich vor Wasserzutritt. In diesem Fall entspricht allerdings die integral freigesetzte Wasserstoffmenge dem Wassergehalt des erodierten Betons, da die chemischen Reaktionen mit Zr sehr schnell ablaufen.

Die **Spaltprodukt-Freisetzung** wird durch die Zumischung und Einbindung des glasartigen Betons vermindert. Die Freisetzung während der Betonerosion ist gering und entspricht den Raten, wie sie aus früheren Experimenten zur Betonerosion bekannt sind. Mit Beginn der Erstarrung, also innerhalb von weniger als 30 Minuten, sinkt die Freisetzung auf nahe Null ab.

Die **ungleichmäßige Erosion** des Opferbetons durch lokal stärkeren Angriff der Schmelze wird durch Einbringen einer keramischen Unterschicht unterhalb der Betonopferschicht beherrscht. Diese Schicht, die eben mit den Schmelzstopfen abschließt, hat eine ausrei-

chende Beständigkeit, bis die Erstarrung wirksam ist. Die Schicht ermöglicht ein weiteres Fragmentieren und poröses Erstarren der Schmelze, auch wenn diese bereits - als Folge der zunächst nur lokal einsetzenden Kühlung - von der Oberseite her mit Wasser überflutet ist.

Das **Auflaufen sekundärer Schmelzen** als Folge später Abschmelzprozesse im RDB wurde bisher in Experimenten untersucht, bei denen die sekundäre Schmelze auf die erstarrte Schmelze aufgegossen wurde, während diese geflutet wurde, aber noch nicht mit Wasser überdeckt war. Die primäre Schmelze behielt ihre gute Kühlbarkeit, und auch die sekundäre Schmelze erstarrte in gut kühlbarer Form. Bei Bedarf können diese Experimente erweitert werden auf eine Situation, bei der die primäre Schmelze bereits von Wasser überdeckt ist.

Das **Materialverhalten der Strukturen** erwies sich in allen Experimenten als unproblematisch, da die Kühlung der Schmelze sehr schnell einsetzt und damit wegen des direkten Wasserkontakts die Strukturen Temperaturen von 100° C kaum überschreiten. (Nur dieses Verhalten ermöglichte die Verwendung von Epoxid-Kunststoffen als Strukturwerkstoff in den COMET-H Experimenten.) Damit sind die kurzzeitig hohen Temperaturen auf klar begrenzte Bereiche beschränkt.

Nach dieser Liste sind die wesentlichen Fragestellungen des COMET-Konzepts positiv beantwortet. Zur Zeit erfolgt eine Vertiefung bestimmter Fragen zum Einsatz im EPR.

Literatur

Alsmeyer, H. et al.: COMET-Konzept, in: Untersuchungen zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen (Unfällen) in Leichtwasserreaktoren, Zusammenarbeit FZK/EVU/SIEMENS, 4. Fortschrittsbericht, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Forschungszentrum Karlsruhe, März 1997, S. 256-291

Tromm, W.; Alsmeyer, H.; Wenz, T.; Mussa, M.; Ferderer, F.: Transient Oxide Experiments for the Verification of the COMET Core Catcher Concept, Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen, 13. - 15. Mai 1997

Alsmeyer, H.; Fellmoser, F.; Fieg, G. et al.: Ex-Vessel Melt Behaviour in the EPR, KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997, Proc. Part II, S. 161-64

Cognet, G.; Alsmeyer, H.; Morris, S. et al.: Corium Spreading and Coolability (CSC-Project), FISA-97 Symp. On EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 17 - 19, 1997

Alsmeyer, H.: The Role of Viscosity in In - and Ex-Vessel Corium Behaviour, EC-Workshop on Corium Viscosity and Phase Diagrams, Luxemburg, L., November 20, 1997

Alsmeyer, H.; Tromm, W.; Albrecht, G.; et al.: Beherrschung von Kernschmelzen außerhalb des Druckbehälters, Nachrichten Forschungszentrum Karlsruhe 29 (1997) S. 327-335

- II. Untersuchungen zum EPR-Konzept – KAPOOL- und KATS-Experimente
(G. Engel, F. Fellmoser, G. Fieg, H. Massier, H. Werle, INR; N. Prothmann,
D. Raupp, W. Schütz, U. Stegmaier, IRS)

Abstract

The objective of the KAPOOL and KATS experiments is to investigate basic phenomena in connection with the EPR melt spreading and cooling concept. As simulants, high temperature Al_2O_3 - and Fe-melts are used which are produced by a thermite reaction. In the KAPOOL tests, first data on the erosion behaviour of a sacrificial concrete which covers the inner surface of the reactor cavity in the EPR "Improved Reference Concept", have been determined. In a series of four KATS tests, the spreading behaviour of oxidic and metallic melts onto concrete has been investigated. The results of these tests are presented in this report.

Zusammenfassung

Die KAPOOL- und KATS-Experimente dienen der Untersuchung grundlegender Phänomene im Zusammenhang mit dem EPR-Ausbreitungskonzept zur Schmelzenkühlung. Dabei werden Al_2O_3 - und Fe-Schmelzen verwendet, die mit Hilfe einer Thermitreaktion erzeugt werden. In den KAPOOL-Tests wurden erste Daten zum Erosionsverhalten eines speziellen Opferbetons ermittelt. Mit diesem speziellen Beton ist beim "Improved Reference Concept" die Reaktorgrube ausgekleidet. In vier KATS-Tests wurde das Ausbreitungsverhalten oxidischer und metallischer Schmelzen auf Beton untersucht. Die Ergebnisse dieser Experimente werden in diesem Bericht beschrieben.

1. INTRODUCTION

Next generation LWR's shall incorporate the ability to control and retain ex-vessel corium melt after a postulated core meltdown accident with subsequent penetration of the lower head of the pressure vessel (RPV), to exclude significant radioactive

release to the environment. In the case of the European Pressurized Reactor (EPR), an ex-vessel core-catcher is foreseen to meet these requirements [1,2]. The corium melt shall first be collected temporarily (~1 h) in the reactor cavity under the RPV, to ensure that practically all core masses are gathered. The cavity is covered with a sacrificial concrete with a relatively low content of water and containing a relatively large amount of iron oxides (Fe_2O_3). The zirconium present in the corium will be oxidized by the iron oxide during the concrete erosion phase. The heat production of this strongly exothermic reaction adds to the decay heat. The oxidic phases of the concrete mix with the UO_2/ZrO_2 , thereby reducing the liquidus- and solidus temperatures as well as the density of the oxide melt. Eventually, the oxide density falls below the density of the metallic phase which can lead to a flipover of the two layers in the cavity, if gas driven convection allows separation of phases.

After erosion of the sacrificial concrete, the core melt will interact with the gate that separates the cavity from the spreading compartment. To obtain a homogeneous spreading, the melt must be of low viscosity and the gate opening must be sufficient large from the very beginning of spreading.

After meltthrough of the gate, the melt is released on the spreading area (~170 m²), where it is expected to spread homogeneously. After spreading, the melt is flooded with water from top to extract the stored and the decay heat.

Important processes for the safe control of the melt are: possible melt dispersion during pressure driven corium release from the RPV, erosion of sacrificial concrete by jets and pools of corium, gate meltthrough and melt release to the spreading compartment, homogeneous spreading of the melt on dry and wet (from condensed vapor) surfaces, passive initiation of flooding and finally melt/water interactions during flooding.

2. KAPOOL EXPERIMENTS

In the KAPOOL tests mainly the processes in the reactor cavity, i. e. erosion of the sacrificial concrete, meltthrough of and melt release through the gate are studied. In some tests, in addition, the succeeding phenomena, i. e. spreading and flooding have also been investigated. The exothermic thermite reaction $8\text{Al}+3\text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow$

$4\text{Al}_2\text{O}_3+9\text{Fe}$ is producing an iron and alumina melt with temperatures up to 2400 °C, about 50% in weight each phase. Thermite charges of 100 to 150 kg are ignited in the reaction vessel. The bottom (or part of it) of the crucible consists of a layer of sacrificial concrete on top of a steel plate, which simulates the gate of the reactor cavity. The test parameters and results of the KAPOOL experiments are summarized in table 1.

In KAPOOL-6 the goal is to study the erosion process of a sacrificial concrete layer. This means that the erosion progress in vertical direction and the homogeneity of the erosion front is studied. The erosion rate will be quantified in dependence of the melt temperature. The sacrificial concrete (fig. 1) consists of about 47 wt% Fe_2O_3 , 42 wt% SiO_2 , 8 wt% cement and 3 wt% water (after drying). In this test the concrete layer is instrumented with type K thermocouples to detect the erosion front. There are five layers of thermocouples in vertical direction and in each layer there are five thermocouples at different radial positions. The inner walls of the steel vessel, except the gate at the bottom, are protected by 40 mm thick, porous isolation layer consisting essentially of Al_2O_3 ("PLICAST Petrolite 39"). The temperature of the iron and the oxide melt is measured by inserting in ~30 s intervals W-Re thermocouples into the melt. The test is documented with several video cameras.

At the beginning of the test, the 150 kg thermite (type R70HC) is ignited at the top of the vessel. The exothermic reaction takes about 14 s and then the concrete erosion starts. During the experiment, seven times the melt temperature is measured. After about 200 s the melt is released through two eroded openings in the steel plate, one with an area of about 1 cm² and the other of about 100 cm².

Fig. 2 shows the temperature of the iron and oxide melt of KAPOOL-6 together with the temperature of the iron melt of the previous tests. These data are from readings of W/Re-thermocouples which have been dipped into the melt from above. The erosion progress in the sacrificial concrete layer (fig. 3) is much faster than in the previous experiments where a "glass" concrete was used. Fig. 4 shows the correlation between the erosion rate and the temperature of the iron melt. Although the melt temperature in all experiments is nearly equal, the erosion rate of the $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ -based concrete of KAPOOL-6 is much higher than that of the "glass" concrete. The measured concrete erosion rates as a function of melt temperature are used to check the COSACO [3] code.

3. KATS EXPERIMENTS

The main goal of the KATS experiments is to provide experimental spreading data for code verification, especially CORFLOW [4]. Yet, the KATS spreading tests are of more generic character, their results can also be applied to other core catcher concepts like COMET [1,2].

Metallic and oxidic melts are generated by the thermite reaction. Generally about 300 kg of thermite powder are ignited in a reaction crucible and, after the reaction is complete, are released into a container, where the two melt components separate. 300 kg thermite produce about 150 kg of iron and oxide each. The two melt components are released separately through different gates and are allowed to spread on different surfaces, generally until solidification.

Thermocouples of the types W/Re and NiCr/Ni are installed at several locations on the spreading surfaces; the first type is to measure the melt bulk temperature, the second type to record the arrival time of the leading edge. Several video cameras are installed to record the spreading process, and an infrared thermal camera measures transient surface temperatures.

In this test series the conditions of the "Improved Reference Concept" of the EPR were simulated. The spreading surfaces in three of these tests were made of concrete which can interact with the melt during spreading. By adding about 10 % SiO₂ to the alumina melt, the liquidus and solidus temperatures of the melt are reduced (liquidus ~1900 °C, solidus ~1600 °C) and correspond better to the values of the corium melt after mixing with the sacrificial concrete in the reactor cavity. The temperatures at the onset of spreading were about 2050 °C and 1950 °C for the oxidic and metallic melts, respectively.

Four tests have been performed to investigate the spreading of high temperature iron and oxide melts on silicate concrete surfaces, table 2 lists experimental parameters of these tests. Except for the different surface conditions, these four tests are identical in respect to geometry and melt conditions, table 3. The influence of coating the concrete surface with an epoxy layer had to be investigated (KATS-10 and 11), in addition the effect of a thin layer of water (KATS-10). KATS-12 is the reference test using a dry ceramic as a spreading surface. Finally, with KATS-13, the spreading onto a dry concrete surface without any coating has been investigated. The results

for the oxide melts are shown in figs. 5 and 6. On epoxy-coated concrete surfaces (with and without water, KATS-10 and -11), a small part of the oxide melt (several ten kg) spread rapidly over very large distances (>9 m). This is due to gas-production during melt/epoxy contact, which reduces both the friction and the heat transfer to the bottom. After the passage of this fast moving melt front, a second one follows transporting the main part of the melt to a distance of about 6.5 m, which is close to the spreading distance for the dry uncoated concrete case (KATS-13). The spreading length of an oxide melt on a dry ceramic surface (KATS-12) is larger compared to the spreading of the second melt fronts onto a concrete surface. This is due to the increased heat losses during spreading on concrete surfaces. Both, W/Re thermocouple measurements and the infrared camera recording, prove this increased heat loss of the melt during spreading on concrete surfaces. Fig. 7 shows a comparison of surface temperatures at a distance of 4 m in the channel for the tests KATS-12 and KATS-13. At the arrival time of the leading edge front, the temperatures rise to about 1950-2000 °C. This is in between the liquidus temperature (1900 °C) and the temperature of the oxide melt at the onset of spreading (2050 °C). At later times the surface temperatures differ appreciably from each other: whereas KATS-12 shows a rather fast drop to temperatures below the liquidus temperature (crust formation), the surface temperature in KATS-13 stays high in the same time interval, leading to higher radiation heat losses.

The height distributions of the oxide melts are different for ceramic and concrete surfaces (fig. 6). Due to the larger spreading lengths on ceramic the crust heights are smaller than in the case of concrete. In addition, the larger outgassing for concrete surfaces results in a higher porosity of the oxide melts.

In addition to the large KATS tests, a series of small-scale tests (miniKATS) have been started with the goal to answer, by detailed studies of the melt front, the question, what finally stops melt spreading (surface tension, crust formation, increased viscosity).

4. SUMMARY

4.1 KAPOOL

For sacrificial concrete based on borosilicate-glasses and on $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$, respectively, the temperature dependant erosion rates for iron melts have been investigated and applied to verify the COSACO code. The $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ -based concrete shows a much higher erosion rate than the borosilicate-based one.

4.2 KATS

The spreading of high temperature melts onto concrete is reduced compared to spreading on ceramic because of intense vapour transfer through the melt and consequently larger heat losses. The presence of water layers (~1 mm) on the surfaces does not reduce the final spreading length compared to dry spreading.

5. REFERENCES

- [1] H. Alsmeyer et al., "Studies on Core Melt Retention Concepts for the EPR", Proc. SFEN/KTG Conf. on the EPR Project, Strasbourg, Nov. 1995, p. 204
- [2] H. Alsmeyer et al. , "Ex-Vessel Melt Behaviour in the EPR", Proc. SFEN/KTG Conf. on the EPR Project, Cologne, Oct. 1997, p.
- [3] M. Fischer, Siemens/KWU, priv. comm
- [4] R. Wittmaack, "CORFLOW: A code for the numerical simulation of free-surface flow", Nuclear Technology, Vol.119 Aug. 1997, 158-180

Table 1 Test parameters and results of KAPOOL experiments

Test (date)	Goals	Gate			Thermite mass (kg)		Melt temperature (°C)		Erosion rate (mm/s)	Melt release (s)		Gate erosion Eroded area	
		area (cm)	thickness (mm)	concrete steel	initial	added	initial	end		start	end	(cm ²)	(%)
KAPOOL-1 (26.06.96)	Gate erosion	15 x 15	20	10	100	-	~2100	~1970	~0.5	52	58	84	37
KAPOOL-2 (10.07.96)	Gate erosion	40 x 40	50	20	100	15 x 2	~2100	-	0.4 - 0.2	Melt not released			
KAPOOL-3 (08.10.96)	Gate erosion Spreading Flooding initiation Flooding (100g/s)	20 x 20	40	15	100	3 x 3	~2450	~2070	0.5 - ~0.4	72	95	10	2.5
KAPOOL-4 (14.11.96)	Gate erosion Spreading Flooding	20 x 20	40	15	150	-	~2450	-	-	11	Melt released through side wall		
KAPOOL-5 (16.01.97)	Gate erosion Spreading Flooding (250g/s)	Ø 22.5	40	15	150	-	~2550	~2060	0.8 - 0.6	75	83	82	21
KAPOOL-6 (15.12.97)	Gate erosion	Ø 40	100	10	150	-	~2450	~1700	1.1 - 0.5	200	~209	~100	~8

Table 2 KATS, performed tests and results

Test	Spreading surface	Results/ comments on oxide spreading
KATS-10 20.2.97	Concrete coated with epoxy Wetted by 1mm water layer	<ul style="list-style-type: none"> • Fast spreading of a first melt front: > 12 m • Slower spreading of main melt masses: 6.5 m • Water layer does not obstruct spreading • Only weak energetic melt/water interactions
KATS-11 23.4.97	Concrete coated with epoxy Dry	<ul style="list-style-type: none"> • Fast spreading of a first melt front: 9.5 m • Slower spreading of main melt masses: 7 m • Gas development of epoxy coating reduces friction for a minor part of the melt (10-20 kg)
KATS-12 24.7.97	Ceramics (Cordierite) Dry	<ul style="list-style-type: none"> • No division of spreading melt masses • Spreading length 11 m
KATS-13 23.10.97	Concrete uncoated Dry	<ul style="list-style-type: none"> • No division of spreading melt masses • Spreading length 7.5 m • Higher surface temperatures due to concrete erosion and gas development

Table 3 Test parameters for KATS-10 to KATS-13

Parameters	Oxide melt	Metallic melt
Mass (kg)	ca. 180 kg	ca. 130 kg
Composition (wt%)	79% Al ₂ O ₃ , 8% SiO ₂ , 8% FeO, 4% MgO	ca. 100% Fe
Pouring rates (l/s) at onset of spreading	12.5	6.7
Window size height × width (cm)	5.0 × 14.0	5.0 × 8.0
Channel dimension length × width (m)	12 × 0.25	15 × 0.15

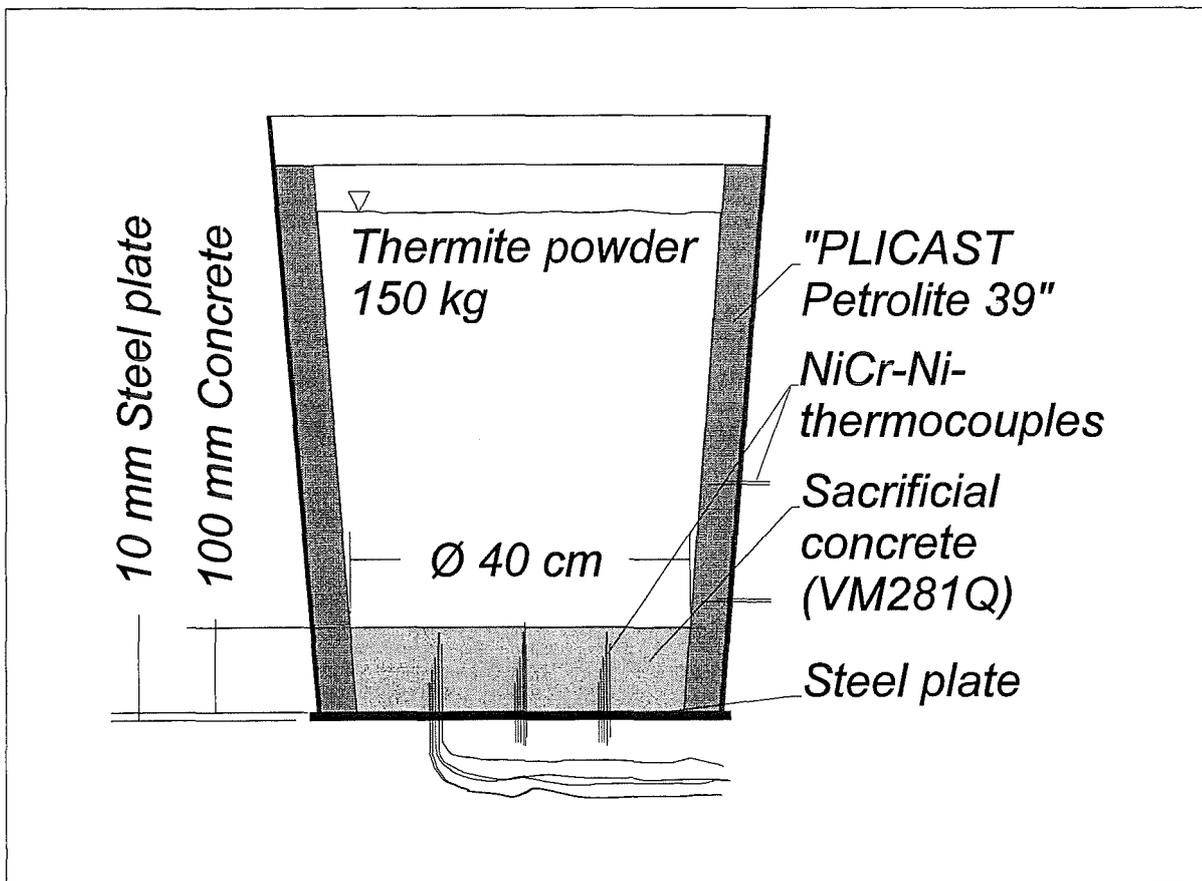


Fig. 1 Reaction vessel of KAPOOL-6

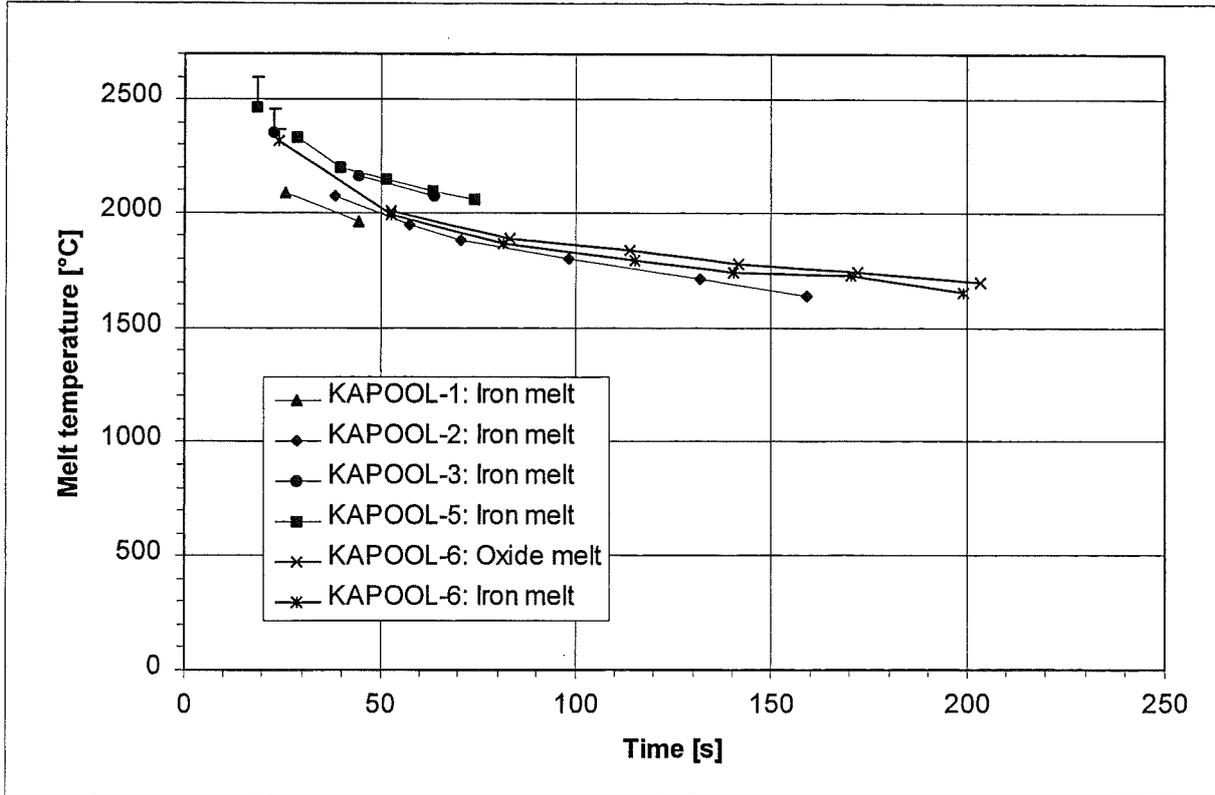


Fig. 2 Transient temperatures of melt pool in KAPOOL tests

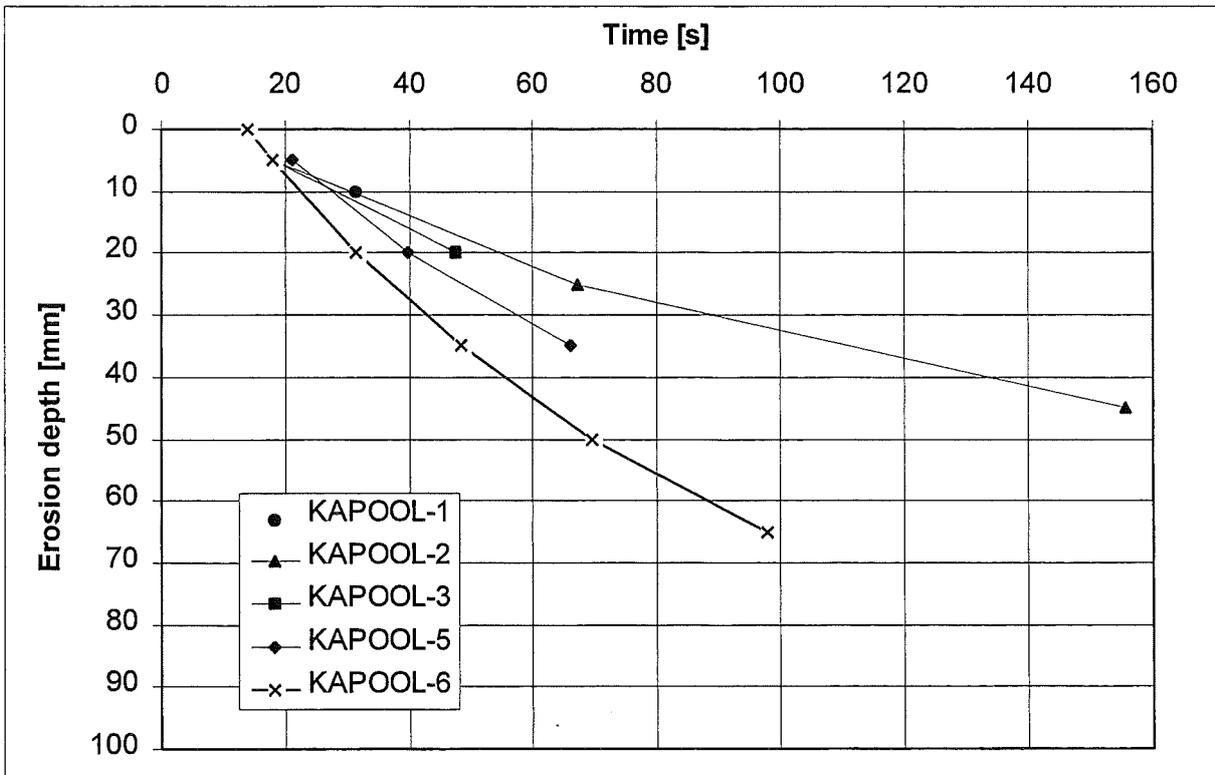


Fig. 3 Progress of the erosion front in the sacrificial concrete of KAPOOL tests

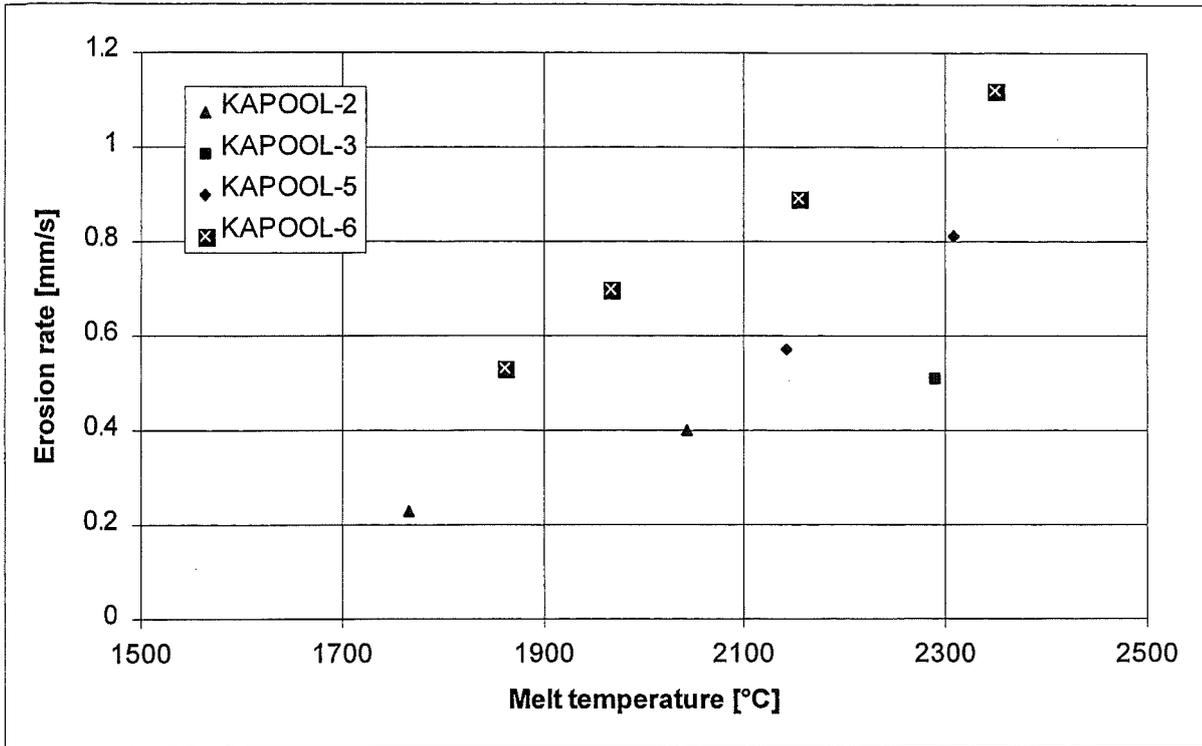


Fig. 4 Temperature dependent erosion rates of sacrificial concrete of KAPOOL tests

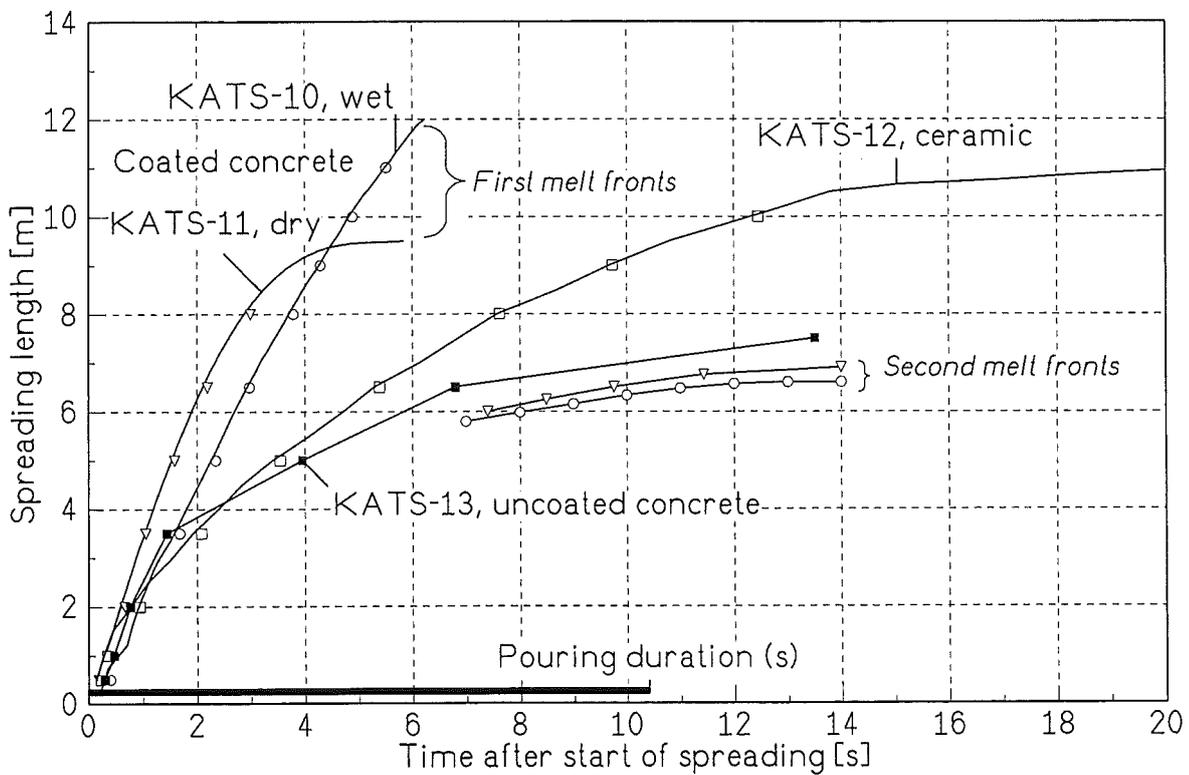


Fig. 5 Comparison of oxide spreading of KATS-10, 11, 12 and 13

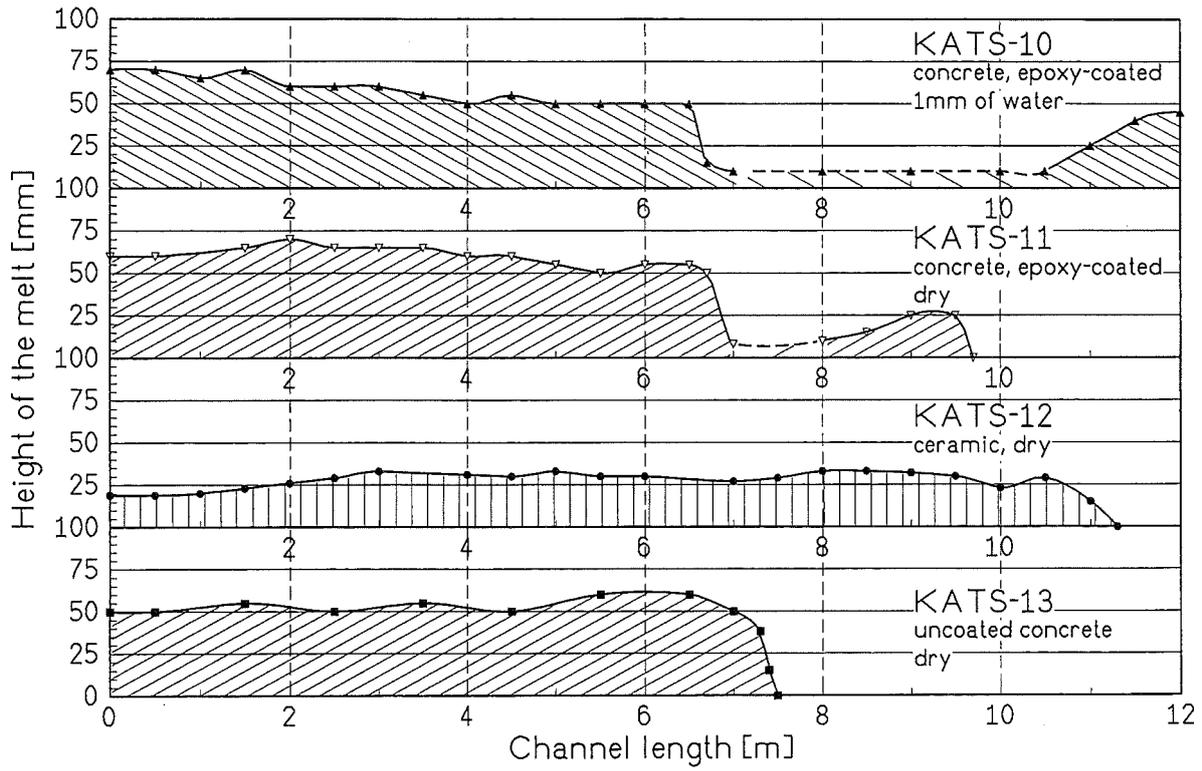


Fig. 6 Height distribution of oxide crust after spreading of KATS-10, 11, 12 and 13

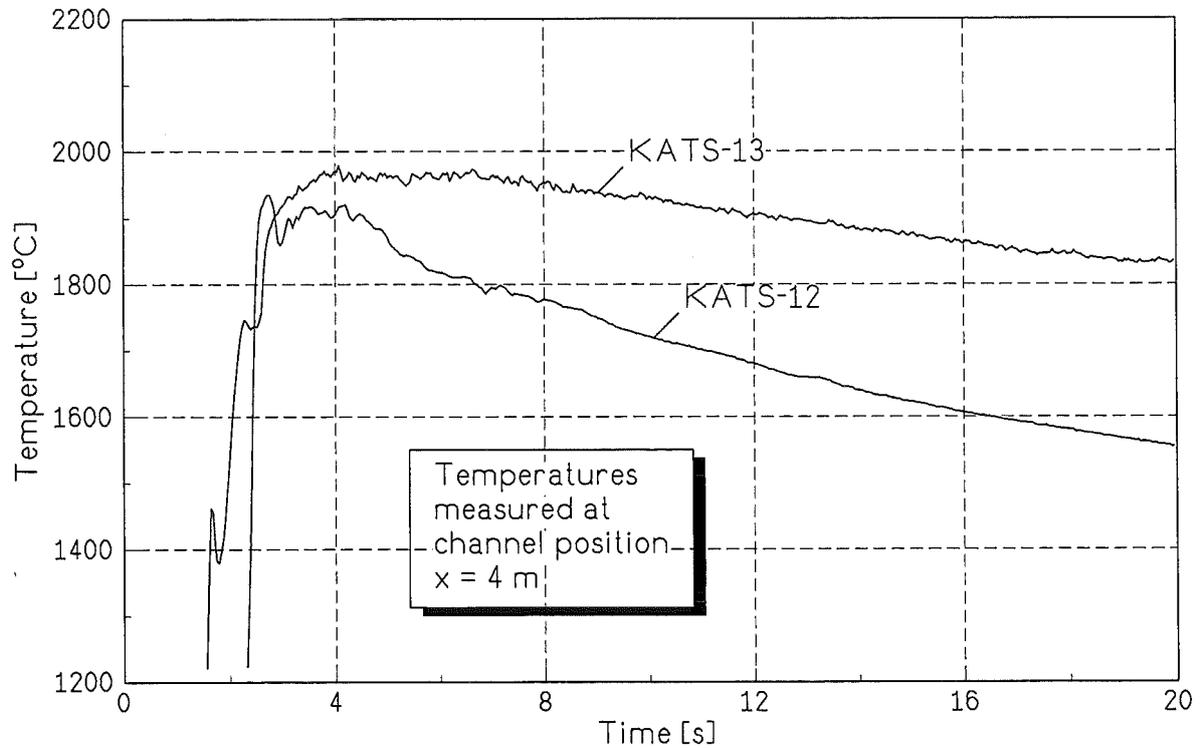


Fig. 7 Oxide surface temperatures during spreading of KATS-12 and 13

III. Untersuchungen zum EPR-Konzept – KAJET-Versuche

(G. Albrecht, H. Brüggemann, F. Huber, D. Raupp, W. Schütz, 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 is released as a high-pressure melt jet which interacts with the protective liner of the reactor pit. This interaction is investigated in the KAJET experiments in which the molten corium is simulated by thermitic melts. In the period reported, the influence of the driving pressure on the jet behaviour was investigated using melt masses of up to 20 kg. The tests aimed at achieving a compact melt jet with a velocity of up to 25 m/s as well as testing the working life of the nozzle.

1. Einleitung

In den KAJET-Versuchen wird mit Thermitschmelzen als Simulationsmaterial die Wechselwirkung eines Hochdruckschmelzestrahls (2 MPa) auf die in der Diskussion befindlichen Auskleide- und Opfermaterialien untersucht. Eine wichtige Voraussetzung 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.

Nach den Vorversuchen mit Wasser wurden ausgewählte Düsengeometrien in Versuchen mit Thermitschmelzen getestet. Dabei wurde untersucht, ob unter den gleichen geometrischen Bedingungen die Erzeugung eines kompakten Schmelzestrahls möglich ist und ob die Düsen über eine ausreichende Standzeit verfügen.

2. Versuche

Nach den ersten Versuchen (VJ01-VJ04) mit einer Thermitmenge von 10 kg wurde ein neuer Generatortyp eingesetzt, der für eine Thermitmenge von 20 kg ausgelegt ist und bei dem die Eisenschmelze vor dem Schmelzeaustritt separiert werden kann. Damit ist es möglich, die metallische und oxidische Schmelze getrennt voneinander zu untersuchen. Durch die nahezu verdoppelte Ausflußdauer konnte die Anstiegsdauer des treibenden Drucks von Schwerkraftbedingung bis auf einen maximalen Wert von 15 bar auf eine Sekunde ausgedehnt werden. So kann innerhalb eines Versuchs der Einfluß des

treibenden Druckes auf das Strahlverhalten untersucht werden. Nach einer kurzen Haltezeit (ca. 0,1 s) wurde der Druck im Generator innerhalb einer halben Sekunde wieder auf Schwerkraftniveau abgesenkt, um so einen Gasdurchbruch am Ende des Schmelzenaustritts zu vermeiden. Der Düsenwinkel von 30°, und die Länge der Auslaufstrecke (Strecke nach der Düse mit konstantem Durchmesser) von 110 mm wurden wie bisher beibehalten. Das Verhalten der austretenden Schmelze wurde mit Videokameras aufgezeichnet. Um auch unter schlechten Sichtbedingungen eine Information über das Strahlverhalten zu bekommen, wurde eine bewegliche Drahtgitterfläche im Abstand von 300 mm unter dem Schmelzenaustritt montiert. Diese konnte unter dem austretenden Schmelzestrahle mit konstanter Geschwindigkeit horizontal verschoben werden. Anhand der zeitlichen Zuordnung der durchgeschmolzenen Breite im Gitter läßt sich der Strahldurchmesser in Abhängigkeit vom treibenden Druck rekonstruieren. Unter diesen Bedingungen konnte in den Versuchen VJ05 und VJ06 (Tab. 1) mit oxidischer Schmelze ein annähernd kompakter Schmelzestrahle mit einer errechneten maximalen Geschwindigkeit von 25 m/s erzeugt werden. Beim bereits vorbereiteten Versuch VJ07 wird unter sonst gleichen Bedingungen das Strahlverhalten mit metallischer Schmelze untersucht.

Tab. 1. Thermitversuche zur Strahlbildung

Versuch Nr.	Schmelze	Gasdruck (bar)	Auftreffgeschw. (m/s)	Länge der Auslaufstrecke (mm)	Austrittsdurchmesser (mm)
VJ05	Oxid	12	23	110	12
VJ06	Oxid	15	25	110	12
VJ07 ¹⁾	Metall/ Oxid	15	17 (Eisen) 25 (Oxid)	110	12

1) Beim Versuch VJ07 wird das Eisen nicht separiert, d. h. es tritt zunächst das Eisen und dann das Oxid aus.

3. Ergebnisse

Die Versuche VJ05 und VJ06 lieferten gute Ergebnisse zum Strahlverhalten während der Druckaufbauphase. Die durch die austretende Aluminiumoxidschmelze durchgeschmolzenen Gitterflächen (Bild 1) hatten im Druckbereich von ca. 2 bis 4 bar eine Breite von ca. 40 mm. Im Bereich von 4 bis 15 bar war das Gitter annähernd konstant auf einer Breite von ca. 70 mm durchgeschmolzen. Bei einem Abstand von 300 mm zwischen Austrittsöffnung und Gitterebene kann der Strahl (Bild 2) als ausreichend kompakt bezeichnet werden. Das Verhältnis Strahldurchmesser in Gitterebene zum Düsendurchmesser (D/d) liegt hier im Bereich von 3 bis 5,8. Zum Vergleich: Bei den Vorversuchen mit Wasser wurden Werte für D/d von 1,5 bis 2,9 ($p_{\max} = 5 - 25$ bar) erreicht. Die guten Sichtverhältnisse bei den Versuchen VJ05 und VJ06 weisen darauf hin, daß die starke Raumentwicklung bei den vorangegangenen Versuchen zum großen Teil durch verdampfendes Eisen (rote Färbung des Rauchs) bzw. durch dessen Kondensationsaerosol entstanden sein könnte. Durch die Druckentlastung gegen Ende des Austritts konnte ein Gasdurchbruch, der den Schmelzestrahler auseinandergerissen hätte, verhindert werden.

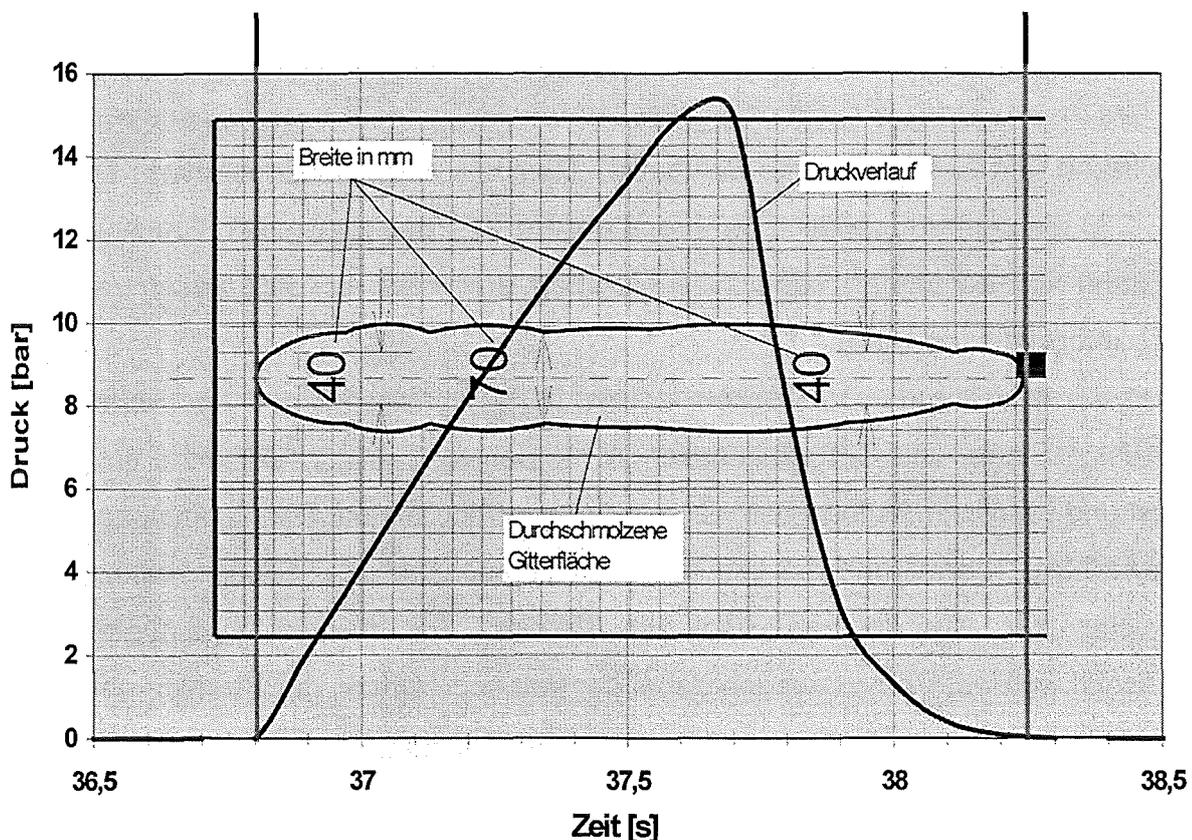


Bild 1. Druckverlauf über der vom Schmelzestrahler durchgeschmolzenen Gitterfläche

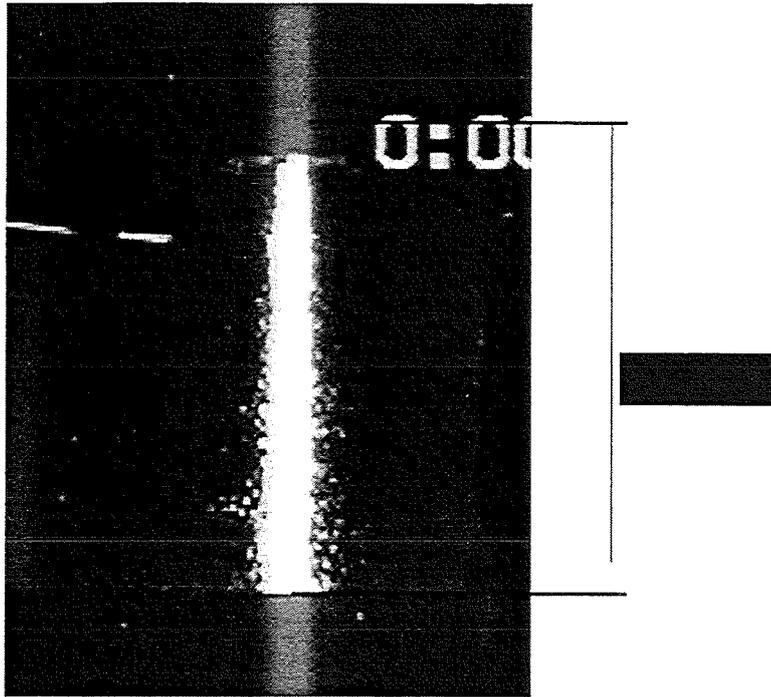


Bild 2. Versuch VJ06, kompakter Strahl beim Einsatz oxidischer Schmelze

4. Weiteres Vorgehen

Bei VJ07 wird das Verhalten eines metallischen Schmelzestrals untersucht. Eingesetzt wird hierzu ein Generator, mit dem insgesamt 40 kg Schmelze erzeugt werden (ca. 18 kg metallische und 22 kg oxidische Schmelze). Damit ist auch ein langsamerer Druckanstieg (1,5 - 2 s) als bei VJ06 möglich. Während der Periode des maximalen Druckes erfolgt der Übergang von der metallischen zur oxidischen Schmelze, so daß dieser Versuch auch hierzu Informationen liefert.

In den darauf folgenden Versuchen stehen die Wechselwirkungen des Schmelzestrals mit Auskleidungs- und Opfermaterialien im Vordergrund. Diese Versuche finden in einer neuen und bereits im Aufbau befindlichen Anlage (Bild 3) statt. Der Schmelzgenerator für bis zu 300 kg Thermit und der geschlossene Versuchsbehälter können wahlweise für die Versuche zur Strahlbildung und zur Erosion der Auskleidungs-/Opfermaterialien eingesetzt werden. Variiert werden dabei der treibende Druck, der Strahldurchmesser, der Düsenwinkel, die Temperatur der Schmelze und die Substratmaterialien.

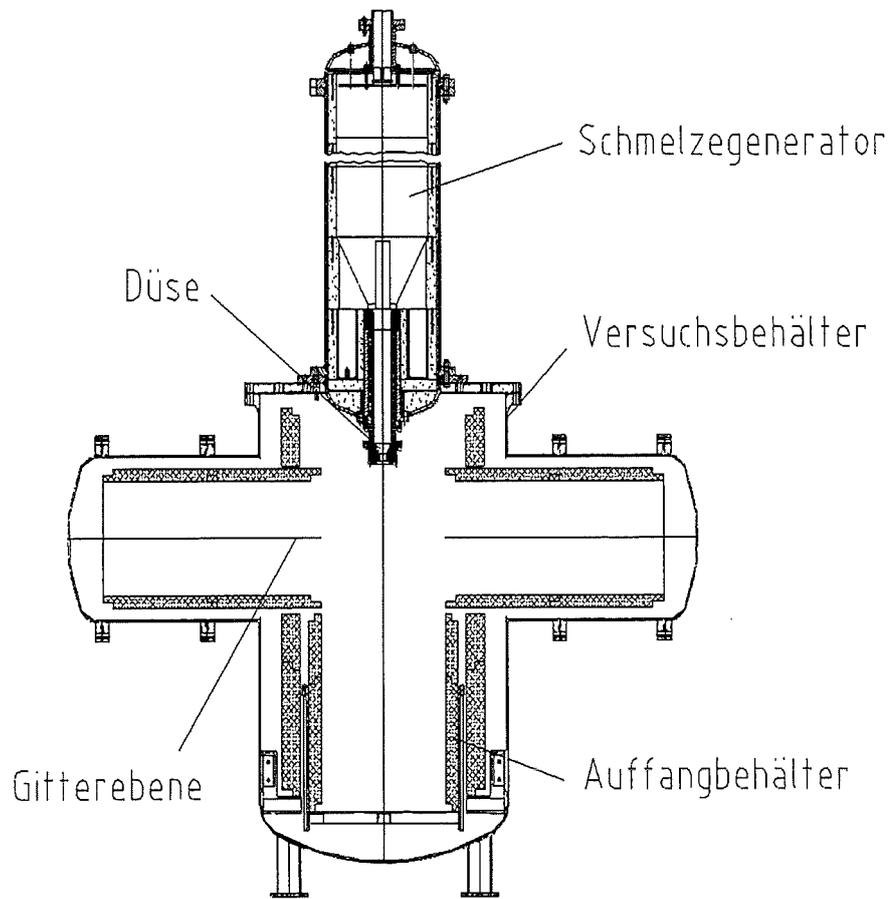


Bild 3. Neue KAJET-Versuchsanlage

- IV. Spreading of the core melt on the spreading area of the EPR
(P. Ehrhard, M. Bunk, J.J. Foit, U. Müller, U. Siegel, IATF; F. Fellmoser, G. Fieg, H. Werle, INR; F. Huber, U. Stegmaier, IRS; R. Wittmaack, Siemens)

Abstract

The safety concept for the “European Pressurized Water Reactor” (EPR) relies on ex-vessel spreading of the corium melt on a horizontal spreading area of sufficient extent for the unlikely event of a severe core melt down accident. Based on a homogeneous spreading of the melt, the solidified layer will be of sufficiently-low thickness to allow for an effective removal of the decay heat.

For licensing purposes, therefore, a validated code needs to be available, which simulates the spreading and solidifying melt in a reliable manner. Within a major project at the Forschungszentrum Karlsruhe (FzK) a variety of both experimental and theoretical investigations is in progress with the goal of validating and extending the CORFLOW code, developed by Siemens, for that purpose. The paper outlines the overall concept of these investigations and presents recent and typical results.

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-initiated 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 spread 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 the 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 validate 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 the identification of the basic physical phenomena occurring 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 pursued. Thirdly, within the framework of 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 plane 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 validate 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 will on the one hand present the above program conducted at the Forschungszentrum Karlsruhe with respect to non-isothermal spreading processes. On

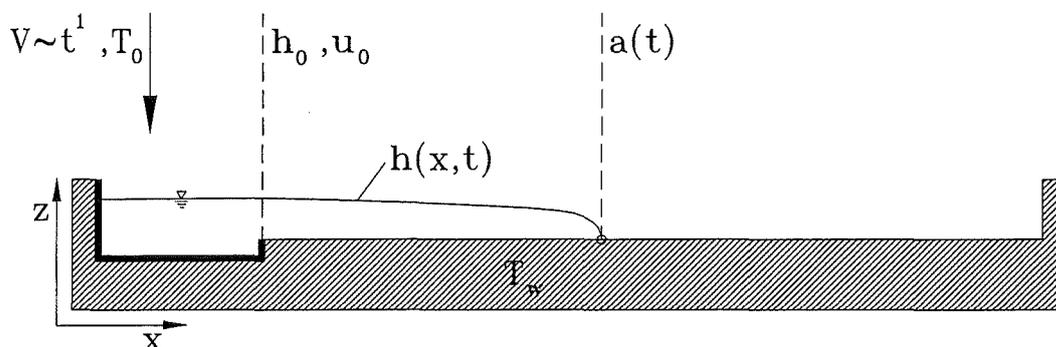


Figure 1: Experimental setup of the small-scale experiments.

the other hand, typical results from both small-scale and large-scale experiments will be presented. The experimental findings will be compared to theoretical results and models. A discussion of the physical phenomena controlling the process will be developed, based on the theoretical and experimental findings.

2 Small-scale experiments

While in a severe accident scenario the spreading melt experiences heat losses both towards the ambient and towards the basemat, the small-scale experiments focus on the single effects. These are (i) heat losses into the substrate in conjunction with the build-up of a solid crust attached to the substrate, (ii) heat losses at the melt/gas-interface in conjunction with the growth of a floating crust on top of the melt. The model melts in the small-scale experiments have been chosen such that a convenient temperature range allows for carefully controlled experiments at low costs. Thus, as model melts we use Woods-metal (MCP58) with $Pr = 0.74$ and wax (Canauba) with $Pr = 560$. The solidification temperatures of these melts are $T_{sol} = 58^{\circ}C, 78^{\circ}C$.

The experimental setup of the small-scale experiments is sketched in figure 1. A copper plate, at the controlled temperature T_w , represents the spreading substrate and forms the base plane of a channel of about $80cm$ length (in x) and $10cm$ width (in y). A constant volumetric flux of melt is fed at a well-controlled temperature $T_0 > T_{sol}$ into the themally-insulated cavity at the left end of the spreading plane. Thus, the total volume of melt increases linearly in time. As soon as the cavity is filled, the melt starts spreading across the substrate, featuring some shape $h(x,t)$ and some front position $a(t)$. We focus on the plane spreading problem in (x,z) and if any minor dependencies are present in y , we average all measurements in y . The means of cooling are twofold: in a first set of experiments the substrate temperature is varied such that solidification of the melt at the substrate occurs, i.e. $T_w < T_{sol}$. Here the influence of the crust attached to the substrate is the focus. In a second set of experiments we cool the melt/gas-interface by spraying cooled water on top of the melt. This allows a focus

onto a floating crust, whereas in this case the substrate temperature is chosen well above solidification temperature, i.e. $T_w = T_0$. The experiments are carried out in a range of Reynolds numbers $0.5 \leq Re \leq 40$, where the Reynolds number is based on the inlet height h_0 and the average inlet velocity u_0 at the left end of the spreading plane. Thus, the definition is $Re = u_0 h_0 / \nu(T_0)$. The Prandtl number is likewise defined based on the properties at initial temperature T_0 , i.e. $Pr = \nu(T_0) / \kappa(T_0)$.

2.1 Results for $Pr \gg 1$

As in all experiments we have roughly $Re = O(1)$, the Péclet number governing the heat transport will be fairly large due to $Pr \gg 1$. Given $Pe = Pr Re \gg 1$, the spreading flow is expected to develop pronounced thin thermal boundary layers at the cooled boundaries. These thermal boundary layers are typically of thickness $\delta_{th} \sim h_0 (Pr Re)^{-1/2}$. Consequently, only thin crusts at the boundaries develop, while most of the melt in the bulk remains at initial temperature T_0 . In fact, clearly the influence of this thin solid crust onto the spreading flow of height $h_0 \gg \delta_{th}$ will be weak.

In all experiments with spreading wax ($Pr \gg 1$), cooled and solidified from the substrate we clearly confirm these theoretical arguments. We observe generally only a very weak influence of the solidified crust onto the time behaviour $a(t)$ of the front. In particular the solid crust attached to the substrate tends to decrease the speed of the front $da(t)/dt$ slightly. We have not yet completed our experiments with interfacial cooling, though.

2.2 Results for $Pr = 0.74$

Given $Pr = O(1)$ in conjunction with $Re = O(1)$, we expect $Pe = O(1)$ and, thus, heat losses at cooled boundaries will penetrate fairly deep into the bulk of spreading melt. Therefore, within the Woods-metal experiments a thick solid crust may develop and a strong influence of this crust onto the spreading flow is possible. As a typical example our results for the front position $a(t)$ are given in figure 2 for the parameters $Re = 40$, $Pr = 0.74$ and various substrate temperatures. A full discussion of the Woods-metal experiments can be found in Ehrhard et al. (1997). We have introduced a time offset of $\Delta t = 10s$ between different experiments to make the picture more clear. The first two experiments (big closed circles) are carried out with $T_w = T_0 = 75^\circ C$. Here we see the isothermal viscous/gravitational spreading without any solidification effects. These experiments follow fairly accurate the theoretical time behaviour $a(t) \propto t^{4/5}$, as predicted by Huppert (1982). The experiments given by big closed squares, on the other hand, feature a substrate temperature of $T_w = 50^\circ C$. Here substantial solidification at the substrate obviously slows down the spreading around $a(t) \simeq 20cm$ for the first time. After this first slow-down we observe an effective flow of hot melt over the solidified rim, which leads to a reacceleration of the front until a final stop of the front and complete solidification occurs at a position $a(t \rightarrow \infty) \simeq 45cm$. The three

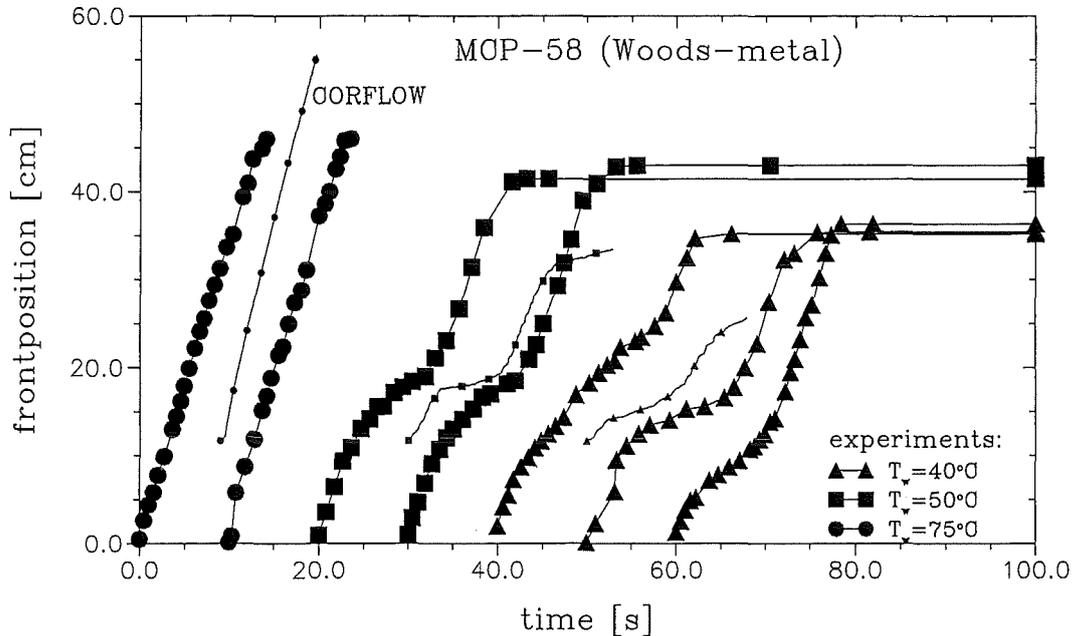


Figure 2: Front propagation within some Woods-metal experiments.

experiments with $T_w = 40^\circ C$ (big closed triangles) confirm these observations, while complete solidification occurs already at $a(t \rightarrow \infty) \simeq 35cm$. In figure 2 we have, moreover, given three curves, marked by small symbols. These correspond to associated computations with CORFLOW and will be discussed in section 5.

3 Theoretical models

There are various reasons for the development of theoretical models. Firstly, while the resolution of the flow field for a given Reynolds number Re is the most important basis for a spreading code, the resolution of the thermal field occurs to be hardly possible for some melts, in particular in view of limited computer resources. This difficulty arises specifically for large Prandtl number melts ($Pr \gg 1$), i.e. for melts of relatively poor heat conductivity as e.g. oxidic melts. A local refinement of the grid only on a first view seems to resolve this difficulty. In the given problem a free melt/gas-interface, featuring a thermal boundary layer due to radiative cooling, moves through the entire computational domain. As the position of this interface is unknown a priori and, thus, part of the solution, the region to be refined happens to be unknown. On the other hand melts with relatively good thermal conductivity, as e.g. metallic melts, feature $Pr \leq O(1)$ and, thus, a numerical resolution of the thermal field can be obtained on the identical grid as used for the flow field.

Secondly, on the one hand the mechanical and kinematic behaviour of a crust at the

substrate may be intuitively understood. On the other hand a crust at the melt/gas-interface has a whole variety of possible behaviour as e.g. stretching, bending, rupturing, cracking, sliding or rolling at the front. Here the development of theoretical models, based on the experimental understanding of the dominant phenomena, is urgently needed.

The developed single effect models need to be implemented, finally, into the CORFLOW code. Thus, e.g. the computation of a solidified crust for $Pe \gg 1$ may be based on the theoretical model instead of an extremely-fine nodal resolution of the computational domain. Likewise, the kinematic influence of e.g. a floating crust may be implemented based on the theoretical model instead of engaging in a phase transition within the numerical code. The development of theoretical models, thus, has to be concentrated on cases where severe difficulties from the numerical treatment are expected to arise.

3.1 Asymptotic model for $Pr \gg 1$

We already have discussed the general properties of heat transport for the case $Pr \gg 1$ in section 2.1. For the problem of a spreading melt, cooled and solidified from the substrate, we have developed an asymptotic model governing both the heat transport and the modified spreading flow (cf. Bunk & Ehrhard (1997)). These ideas are presently extended towards a problem with cooling at the melt/gas-interface with subsequent growth of a floating crust.

The model approximations of Bunk & Ehrhard (1997) are valid for thin melt layers and Reynolds numbers of $Re = O(1)$. We engage, firstly, lubrication theory and neglect capillary forces to deduce a purely liquid spreading flow field (cf. Huppert (1982)). Physically, this similarity solution for the spreading flow represents a balance between a gravitational pressure head, driving the flow, and viscous shear in the melt layer, dissipating kinetic energy. Secondly, a matched asymptotic solution to the quasi-steady heat transport problem is derived, based on the above obtained flow field. Here the thermal boundary conditions ensure an adiabatic melt/gas-interface at $Z = H(X, \tau)$ and an isothermal substrate at $Z = 0$. Moreover, the liberation of latent heat is found to be not important in the leading order problem for typical oxidic melts. The inner solution for the temperature field represents a similarity solution for arbitrary time behaviour of the melt volume $V(\tau) \propto \tau^\alpha$. Based on this solution for the thermal field, the solidification isotherm is readily obtained and interpreted as location of the solid/melt-interface $S(X, \tau)$. By posing the free-interface flow problem once more on top of the solidified melt at $S(X, \tau)$ we are, thirdly, able to deduce a solution to the modified spreading problem. This is done in general by a numerical method, using the method of lines to transform the evolution equation for $H(X, \tau)$ into a system of ordinary differential equations in τ . Integration of this system is obtained employing either a Adams- or a Gear-scheme.

A typical result for the interface positions $H(X, \tau)$ and $S(X, \tau)$ from our asymptotic model is depicted in figure 3. The melt/gas-interface $H(X, \tau)$ and the solid/melt-

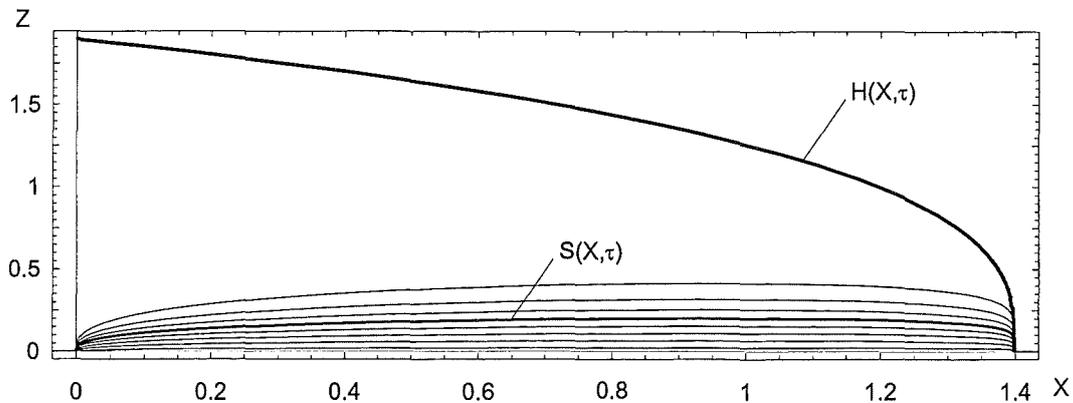


Figure 3: Interfaces and temperature field for $Pr \gg 1$.

interface $S(X, \tau)$ are plotted as thick lines, whereas various other isotherms appear as thin solid lines. The parameters in figure 3 are $Re = 1, Fr = 0.01, Pr = 10^4, \tau = 2$, a volume behaviour of $V(\tau) \propto \tau^1$ is prescribed. The dimensionless spatial coordinates (X, Z) are scaled using the initial length l_0 and height h_0 of the melt. We recognize, physically, a pronounced thermal boundary layer at the substrate. The solid/melt-interface coincides with the solidification isotherm. For lower values of X the thermal boundary layer grows in similar fashion as the well-known thermal boundary layer at a flat plate (cf. Schlichting & Gersten (1997)). We find here, however, a growth following to a first approximation $\delta_{th} \propto X^{1/3}$. When approaching the front at $A(\tau) \simeq 1.4$, the influence of the spreading flow field with strong vertical velocity components causes a compression of the thermal boundary layer. In general, we find by accounting for $S(X, \tau)$ in the modified spreading problem a weak slow-down of the front propagation. This can be understood physically by the reduced gravitational pressure head due to $S(X, \tau) > 0$.

3.2 Variable viscosity approach for $Pr \leq O(1)$

We have already explained in section 3 that for melts with $Pr \leq O(1)$ the numerical resolution of the thermal field does not cause major difficulties or dramatically higher computational costs. For such (metallic) melts, we therefore can rely on the availability of the temperature field within the complete computational domain. The most simple treatment of solidification is hereby to consider the melt as locally-Newtonian liquid, but allow for a variation of viscosity with temperature, i.e. pose $\nu(T)$. When measuring melt viscosities in the range between solidus and liquidus temperature an exponential increase of $\nu(T)$ is evident as the solidus temperature is approached from above. This exponential increase of $\nu(T)$ by a few orders of magnitude serves as a means of immobilizing the liquid. The method works particularly successfully at solid walls, where the boundary conditions for the flow ensure the attachment of the immobilized region. In

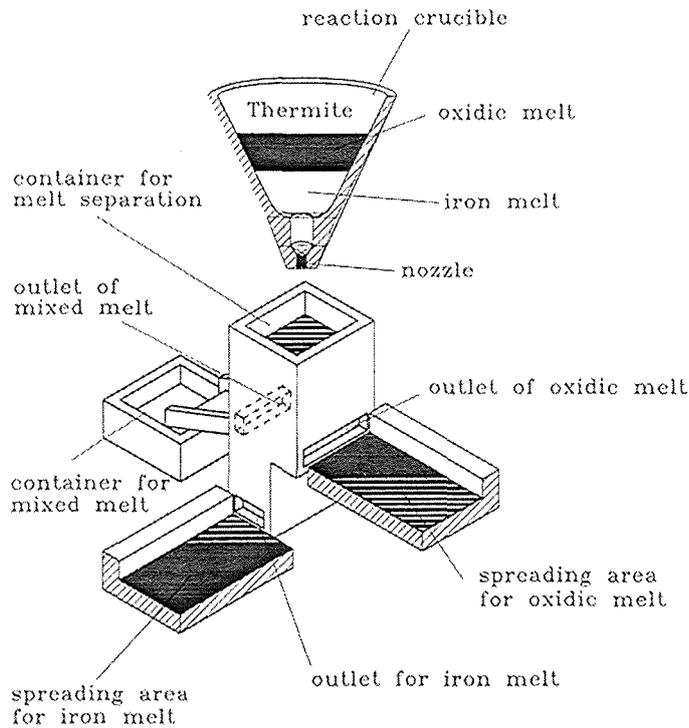


Figure 4: Schematics of the KATS facility.

model systems the dependency $\nu(T)$ can usually be measured at reasonable accuracy. For high temperature melts these data are hardly available but usually at least data on liquid viscosity, solidus temperature and liquidus temperature are supplied. Based on this information various mushy viscosity models (cf. Stedman et al. (1990), Thomas (1965)) may be employed to estimate $\nu(T)$ between liquidus and solidus temperature. The variable viscosity approach, based on a measured dependency $\nu(T)$, has e.g. been applied to the Woods-metal experiments in figure 2. This will be discussed in more detail in section 5.

4 Large-scale experiments (KATS)

The main goal of the KATS experiments is to provide experimental data for an overall code validation. Here a situation with parameters fairly close to a corium melt, spreading in an accident scenario, are present. With respect to the heat fluxes we expect both radiative heat losses at the melt/gas-interface towards the ambient and heat losses into the substrate (concrete or ceramics) by initially unsteady and later steady conduction. One difference to the accident scenario is due to the absence of internal heating during the KATS experiments. The experimental facility is sketched in figure 4.

The metallic and oxidic components of the melt are generated by the thermite reaction

$8Al + 3Fe_3O_4 \rightarrow 4Al_2O_3 + 9Fe$. Thus, about 300kg of thermite powder are ignited in a reaction crucible and afterwards released into a container, where the two components are allowed to separate. This results in about 150kg of both iron and oxide melt, layered in the container. The maximum melt temperatures at the beginning of spreading are typically 2200°C. Subsequently, the two melt components are released separately through different gates and are allowed to spread on the chosen substrates.

Measuring technique includes tungsten/rhenium- and chromel/alumel-thermocouples, installed at several locations above the substrate and downstream of the melt outlet. This allows, firstly, for a measurement of the melt bulk temperature and, secondly, gives information on the arrival time of the melt front at several locations downstream. Moreover, video cameras are installed to record the spreading process and an infrared camera allows for transient measurements of the melt surface temperature.

In a first set of experiments (cf. Fieg et al. (1997a), Fieg et al. (1997b)) spreading of both oxidic and metallic components of the melt on ceramic substrates has been studied systematically. In particular melt temperatures and flow rates have been varied and spreading is either in a channel or on a rectangular area. Moreover, the effect of a 1cm water layer on the substrate, simulating condensed vapor, has been the focus. In all spreading tests on ceramic substrates both metallic and oxidic components of the melt spread pretty homogeneously over large distances of more than 6m. Spreading of highly-superheated iron melts ($\Delta T \simeq 500^\circ C$) is found to be very likely stopped by capillary forces prior to solidification. In contrast, immobilization of the moderately-superheated oxidic melt ($\Delta T \simeq 100 - 200^\circ C$) is probably due to crust formation at the melt front. During spreading on substrates with a 1cm water layer, low-energy melt/water-interactions have been observed causing minor pressure pulses and the ejection of some kilograms of melt. Likewise a temporary stop of the spreading has been the consequence of these events. This does, however, not lead to a remarkable decrease of the final spreading distance if compared to the dry substrate behaviour.

In recent experiments the focus is the simulation of conditions closely related to the “improved reference concept” for the EPR. The substrate in these experiments is concrete, which may interact with the spreading melt. To achieve low liquidus and solidus temperatures of $T_l \simeq 1900^\circ C$, $T_s \simeq 1600^\circ C$ about 10% of SiO_2 is added to the oxidic melt. Low liquidus and solidus temperatures are likewise expected to be present for the corium melt after interaction and mixing with the sacrificial concrete in the reactor cavity during a severe accident scenario.

As a typical example we discuss two spreading experiments (KATS-12 and KATS-13) in particular with respect to the oxidic component of the melt spread on different substrates and identical geometry and melt conditions. KATS-12 spreads on a dry ceramics substrate (cordierite), while KATS-13 spreads on dry silicate concrete. In both experiments the spreading is within a channel of 25cm width. Figure 5 gives the front position $a(t)$ as it develops in time for both experiments. We recognize, firstly, in KATS-12 a spreading of the oxidic melt on ceramics to a final position of $a(t \rightarrow \infty) \simeq 11m$. The spreading of the oxidic melt on concrete (KATS-13), in contrast, leads to a final

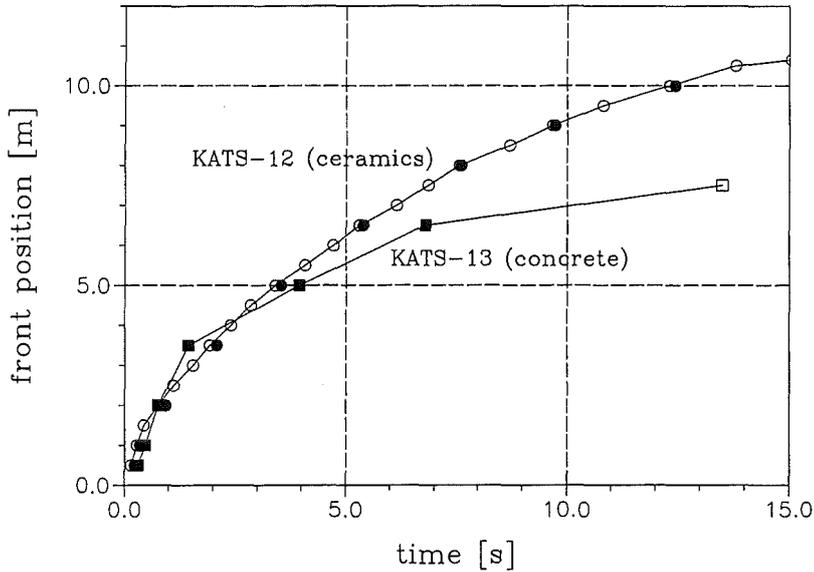


Figure 5: Front propagation within KATS-12 and KATS-13.

position $a(t \rightarrow \infty) \simeq 7.5m$. This significant difference can be understood based on the different behaviour of the substrate materials at high temperature. While ceramics remains completely passive and chemically stable, concrete liberates with increasing temperature, firstly, water deposited in pores and, secondly, bound water due to chemical destruction of the concrete. Thus, from the concrete a release of vapor and CO_2 is evident. Moreover, the solution of silicate from the concrete erosion in the melt changes the melt properties to a certain degree. In particular the silicate tends to lower liquidus and solidus temperatures, to widen the temperature range between solidus and liquidus and to lower the viscosity of the melt. We consider, however, the latter effects to be of minor importance due to the short interaction period.

The spreading oxidic melt on ceramics (KATS-12) is accordingly observed to develop a thin solid crust on top of the melt shielding to some extent radiative heat losses. Presumably, in parallel, thin crusts attached to the substrate develop forming a conductive layer with overall insulating features. The latter effect cannot be observed in the experiment, though. The situation for the concrete substrate is completely different. Here the gas liberation from the concrete penetrates through the melt layer and prevents the growth of an extended crust on top of the melt. This is obvious from the video recordings of the experiment. Similarly, we assume that no solid crust develops attached to the concrete. The overall consequences are greater heat losses of the melt spreading on concrete both towards the ambient and into the substrate. Consistently, at the melt/gas-interface we find different temperatures from the infrared measurements: we register e.g. 5m downstream of the melt outlet a melt surface temperature of $T_{12} = 1880^\circ C$ for the ceramic substrate (KATS-12) and $T_{13} = 1940^\circ C$ for the concrete substrate (KATS-13). The higher surface temperatures of the melt spreading on

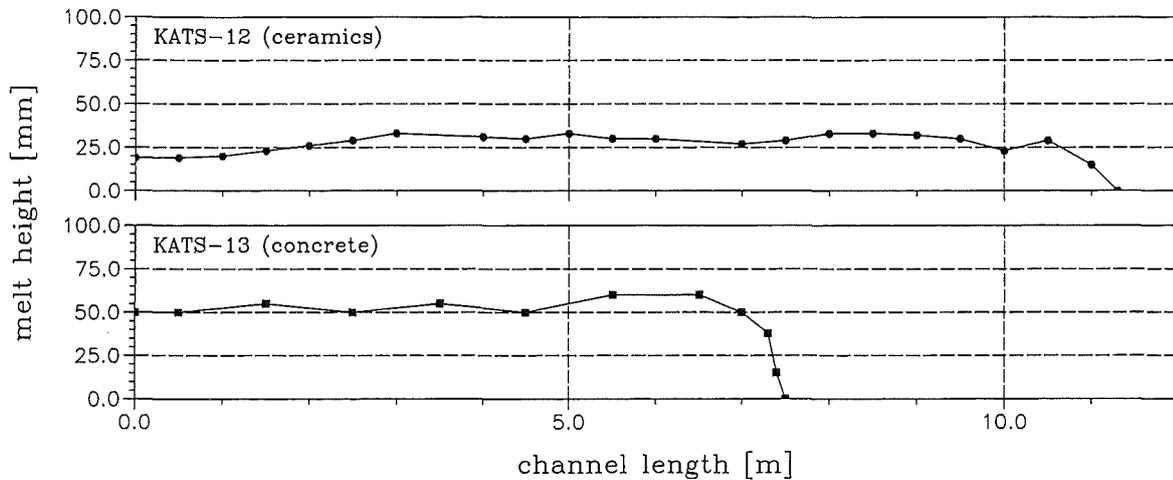


Figure 6: Height profiles of solidified melt from KATS-12 and KATS-13.

concrete obviously cause greater radiative heat losses. In summary, these greater heat losses are most likely responsible for the smaller spreading distance on concrete.

After complete solidification of the spread melt the height profiles along the channel are analyzed. The results for the above experiments are conducted in figure 6. It is obvious from figure 6 that for KATS-12 the solidified melt on ceramics is of height $h \leq 33\text{mm}$ at all locations. In contrast, the solidified layer for KATS-13 on concrete has larger heights $h \leq 60\text{mm}$. From the viewpoint of an effective heat removal of internally liberated heat, the height profile of KATS-12 is clearly more advantageous.

5 The CORFLOW code

CORFLOW simulates the free interface flow of a single-component, incompressible homogeneous fluid in a three-dimensional, plane or cylindrical geometry. The fluid under consideration may be covered by air or an isothermal ideal fluid. In addition to the fluid, several structural materials can be considered as hydrodynamic obstacles and thermodynamic heat structures. The fluid is assumed to have Newtonian or not-explicitly time-dependent non-Newtonian rheology, e.g. Bingham plastic, pseudo plastic or dilatant.

The fluid dynamics is described by the continuity- and momentum equation with the Boussinesq approximation. The rheological equation of Papanastasiou is employed to simulate Bingham fluids. Volume expansion is neglected, turbulence models are not used. The free interface boundary condition includes viscous stress and surface tension. The free interface is represented by a height function. Its dynamics is computed by an equation resulting from the free interface kinematic boundary condition and an integration of the continuity equation in vertical direction.

For temperature dependent density or material properties of the viscous stress tensor, the hydrodynamics of the fluid is coupled to the thermodynamics and to phase transitions. For this reason, internal heat transport (by conduction or convection) and heat liberation (e.g. decay heat) as well as heat transfer to the surroundings are modelled. At the rigid boundaries, conduction heat transfer is considered, whereas convective and radiative heat transfer are modelled at the free interface. The material properties, except surface tension, may depend on temperature.

A discrete phase transition model is available to simulate e.g. solidification and melting of the homogeneous fluid and phase transitions of the structural materials. Complex rheology and mechanical stability of crusts are not considered. A two-phase flow model is used to describe the mushy region of the phase diagram, where the solid phase is assumed to be dispersed in the liquid phase. Below liquidus temperature, this leads to fluid immobilization caused by an exponential increase of viscosity of the mushy fluid. Chemical interactions are not simulated.

A finite volume method is applied on a rectangular, curvilinear, not necessarily equidistant, staggered grid. It is applicable to orthogonal and curvilinear coordinate systems where the 3-direction is approximately in opposite direction to the gravitational vector, implemented in CORFLOW for Cartesian and cylindrical coordinates. The numerical representation includes implicit schemes for the momentum and free-interface equation and an explicit scheme for the heat transport equation. The system of continuity and momentum equations is solved by a pressure method. The Poisson equation for the pressure is solved by a Chebyshev method, which leads to a velocity/pressure iteration. Two representations of the free interface location are introduced, namely a second-order polynomial and a step profile.

CORFLOW has been validated using a whole variety of analytical solutions for isothermal spreading flows in the inertial/gravitational or the viscous/gravitational regime as e.g. Huppert (1982), Rottman & Simpson (1983), Foit (1997). Moreover, quite a few non-isothermal and solidifying spreading experiments like KATS, COMAS, CORINE, etc., have been simulated with variable success. As an example we shall discuss the simulation of the Woods-metal experiments, given in section 2.2, respectively in figure 2. The three simulations are carried out on a $100 \times 25 \times 3$ grid and the typical CPU-time on an IBM/RISC6000-560 workstation is 12,000min. The solidification of the melt is obtained by using the variable viscosity approach, based on a measured dependency $\nu(T)$. The numerical results for the front propagation for $T_w = 75^\circ C$ (small solid circles) are included in figure 2. Here a certain time offset of the numerical curves is likewise introduced for the sake of a clear picture. The behaviour resembles the experimental data for pure liquid spreading quite accurate. Moreover, the characteristic features of spreading with solidification in the experiments are likewise obtained from the numerical simulations (small solid squares, small solid triangles). Here the build-up of a thick solid crust attached to the substrate is adequately reproduced by the simulations. The reacceleration of the front, as observed in all experiments, is likewise obtained from the numerical simulations. Minor quantitative discrepancies are presumably caused

by non-accurate data for latent heat and specific heat of the Woods-metal. Improved simulations with a refined mesh and varied material data are presently undertaken.

6 Conclusion

The spreading of a melt in presence of heat losses and solidification is the focus of a major research project at the Forschungszentrum Karlsruhe (FzK). This problem is relevant with respect to the safety concept of the "European Pressurized Water Reactor" (EPR). A variety of investigations, such as small-scale experiments, large-scale experiments (KATS), theoretical model development, code validation and development (CORFLOW) is pursued to achieve the overall goal of a reliable prediction of such spreading flows.

The small-scale experiments concentrate on single effects and, thus, give detailed information on the influence of the developing crusts both attached to the substrate and floating on top of the melt. For the low Prandtl number (metallic) melt the heat losses penetrate well into the spreading melt developing thick crusts. Therefore, heat losses have a strong influence onto the spreading flow. For the high Prandtl number (oxidic) melt, in contrast, only thin thermal boundary layers and crusts develop. Therefore, heat losses hardly influence the spreading flow.

The theoretical treatment of the spreading and solidifying flow likewise occurs twofold: For low Prandtl number (metallic) melts a variable viscosity approach is promising. Here, via an exponential dependency $\nu(T)$ the immobilisation of the melt upon solidification is modelled. This variable viscosity approach is already available within the CORFLOW code, based on either a measured $\nu(T)$ or on mushy viscosity models. For large Prandtl number (oxidic) melts, in contrast, an asymptotic model for the temperature field is adequate, resolving particularly the thermal boundary layers at the cooled boundaries. Via an adjustment e.g. of the substrate position to the solidification isotherm, the crust attached to the substrate may be treated. These asymptotic models, though completely developed, are not yet implemented into the CORFLOW code.

The status of the CORFLOW code may be summarized as follows. The code allows to treat three-dimensional, free-surface flows in quite general geometries. Newtonian and Bingham rheology models are available for the melt and the thermal field is computed for fairly general thermal boundary conditions. The code can be viewed as validated with respect to isothermal flows both within the inertial/gravitational and the viscous/gravitational regime. For melts of moderate Prandtl numbers $Pr \leq O(1)$ the thermal field is accurately computed at reasonable costs. Here the variable viscosity approach allows to model attached crusts adequately. With respect to floating crust behaviour no thorough validation has been achieved yet due to a lack of experimental data. For melts of large Prandtl numbers $Pr \gg 1$ purely numerical methods encounter principle difficulties, as the resolution of the thermal field requires extremely fine grids.

This, in turn, causes excessive computational costs. Here the implementation of the developed analytical approximations for the thermal field occurs promising, though.

The large-scale KATS experiments on one hand demonstrate under fairly reactor-typical conditions, that the spreading of both metallic and oxidic melts occurs over large distances of more than 6m. In these integral experiments typical heat losses both towards the ambient by radiation and into the basemat by conduction are present. On the other hand the KATS experiments serve as a valuable means for the integral validation of the CORFLOW code.

References

1. M. BUNK, P. EHRHARD, "*Theoretische Beschreibung der Ausbreitung und Erstarrung viskoser Schmelzen*", Z. Angewandte Mathematik und Mechanik, in press, 1998.
2. P. EHRHARD, U. SIEGEL, S. KRAUT, "*Model experiments and CORFLOW simulations of the plane spreading of a low-melting alloy (MCP 58)*", FzKa-Report 5963, 264ff, Forschungszentrum Karlsruhe, 1997.
3. P. EHRHARD, "*Spreading of melts in presence of solidification*", Proc. ICONE-4, Vol. 1, 935ff, New Orleans, 10.-13. 3. 1997.
4. G. FIEG, F. HUBER, H. WERLE, "*Simulation experiments on the spreading behaviour of molten core melts: KATS-5 (1-dim. spreading of an oxidic melt into a dry channel)*", FzKa-Report 5920, Forschungszentrum Karlsruhe, 1997a.
5. G. FIEG, F. HUBER, H. WERLE, "*Simulation experiments on the spreading behaviour of molten core melts: KATS-7 (1-dim. spreading of highly superheated iron and oxidic melts into a dry channel at low pouring rates)*", FzKa-Report 6005, Forschungszentrum Karlsruhe, 1997b.
6. J.J. FOIT, "*Spreading with variable viscosity*", FzKa-Report 6006, Forschungszentrum Karlsruhe, 1997.
7. H. HUPPERT, "*The propagation of two-dimensional and axisymmetric viscous gravity currents over a rigid horizontal surface*", J. Fluid Mech. 121, 43ff, 1982.
8. H. SCHLICHTING, K. GERSTEN, "*Grenzschicht-Theorie*", Springer, 1997.
9. S.J. STEDMAN, J.R.G. EVANS, J. WOODTHORPE, "*Rheology of composite ceramic injection moulding suspensions*", J. Material Sci. 25, 1833ff, 1990.
10. J.W. ROTTMAN, J.E. SIMPSON, "*Gravity currents produced by instantaneous releases of heavy fluid in a rectangular channel*", J. Fluid Mech. 135, 95ff, 1983.

11. D.G. THOMAS, "*Transport characteristics of suspension: VIII. A note on the viscosity of Newtonian suspensions of uniform spherical particles*", J. Colloid Sci. 20, 267ff, 1965.
12. R. WITTMACK, "*CORFLOW: a code for the numerical simulation of free-surface flow*", Nuclear Technology 119, 158ff, 1997.

V. Untersuchungen zur Wärmeleitfähigkeit und Viskosität
(B. Schulz, G. Haase, IMF I)

Abstract

For mixtures of solid particles in melts equations for their thermal conductivities and viscosities are presented. On an oxidic melt the comparison between measured and calculated values of thermal conductivity is shown. Results of measured viscosities on two Premix materials are given (0.4 mPas).

Zusammenfassung

Für den Zweiphasenbereich fest-flüssig werden Gleichungen für ihre Wärmeleitfähigkeit und Viskosität empfohlen. An einer oxidischen Schmelze wurde Übereinstimmung zwischen gerechneten und gemessenen Wärmeleitfähigkeiten der Schmelze erzielt.

Die Viskositäten zweier Premixschmelzen liegen bei 0,4 mPas.

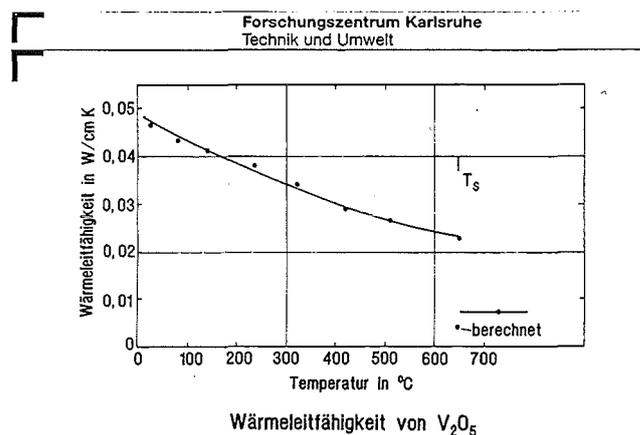
Wegen der unklaren patentrechtlichen Situation in den USA bez. des elektrostatischen Levitators wurde der Plan zum Aufbau einer eigenen Meßtechnik in HVT/HZ aufgegeben.

Der Solidus-Liquidus-Bereich in einem System ist seiner Natur nach eine Suspension, d. h. er ist den Zweiphasenmaterialien zuzuordnen. Damit können die beiden strukturempfindlichsten Eigenschaften Wärmeleitfähigkeit und Viskosität aus den allgemeinen Gleichungen für zweiphasige Werkstoffe abgeleitet werden; für sphärische Partikel gilt dann:

$$1 - c_{sol} = \frac{\lambda_{sol} - \lambda_{sus}}{\lambda_{sol} - \lambda_{schm}} \sqrt[3]{\frac{\lambda_{schm}}{\lambda_{sus}}};$$

$$\eta_{sus} = (1 - c_{schm})^{-3} \cdot \eta_{schm}$$

mit c = Volumenkonzentration; λ = Wärmeleitfähigkeit, η = Viskosität; Indizes: sol = feste Phase, sus = Suspension, schm = Schmelze. Diese Gleichungen gelten für thermodynamisches Gleichgewicht, bzw. für Ungleichgewicht, wenn die Kinetik der chem. Wechselwirkung so langsam ist, daß die Messung davon nicht berührt wird, und wenn aufgrund von Dichteunterschieden keine Segregation eintritt. Aus früheren eigenen Experimenten ist bekannt, daß Dichteunterschiede von 3 g/cm^3 zur schnellen Segregation führen, selbst bei kleinsten Partikelgrößen ($1 \mu\text{m}$) der festen Phase. Für laufende Experimente zu dieser Problematik wurde V_2O_5 ($T_s = 650^\circ\text{C}$) ausgewählt. Eine Versuchsreihe mit SiC als suspendierte Partikel ($1 \mu\text{m}$) bei einem Dichteunterschied von $0,3 \text{ g/cm}^3$ schlug fehl. Die Kinetik zur Bildung hochschmelzender V-Silizide lief zu schnell ab. An reinem Vanadiumpentoxid wurde die Wärmeleitfähigkeit in festem und flüssigem Zustand gemessen und der Wert für den flüssigen Zustand durch Rechnung bestätigt.



Wärmeleitfähigkeit von festem und flüssigem V_2O_5 in Abhängigkeit von der Temperatur

An der Universität Bayreuth wurde die Viskosität an Schmelzen von Pulvern bestimmt, die im IRS für die Experimente Premix 01 und 03 verwendet wurden. In beiden Fällen handelt es sich um komplexe Spinellphasen mit Schmelzpunkten um 2000°C . Die Viskosität lag bei $4 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ am Schmelzpunkt. An einer 60 UO_2 - 40 ZrO_2 - Schmelze wurden am Liquiduspunkt ($\approx 2800^\circ\text{C}$) $6 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ gemessen. Alle genannten Materialien sind ionische Schmelzen. Ihre gemessene niedrige Viskosität stimmt gut mit den aus der Theorie für ionische Schmelzen errechneten Werten von $(4 - 6) \text{ mPa} \cdot \text{s}$ überein.

32.21.05 Langfristige Containmentkühlung

I. SUCO-Programm

(J.U. Knebel, G. Janssens-Maenhout, M. Daubner, IATF)

Abstract

One possible concept for the decay heat removal from the containment of a future LWR after a core melt accident is based on passive sump cooling. The core-melt would spread as a dry melt and stabilise in the reactor sump, as in the reference concept for the European Pressurised Water Reactor EPR. After a number of plugs melt by passive means, water from the IRWST would flood the core melt with a low flow rate from above. The sump cooling is achieved by a stable natural circulation flow which transports the decay heat from the core melt to condensers and heat exchangers located within the sump area. The passive heat transfer mechanisms within the containment are vaporisation/condensation, convection and conduction.

The main objective of the sump cooling programme SUCO is to attain results on the feasibility of the sump cooling concept. The experimental and numerical work on this programme has progressed very well.

1. Introduction

The SUCO program consists of three consecutive scaled model experiments that are backed up by numerical calculations. A detailed description is given by Knebel et al. (1997).

The objectives of the experimental and numerical investigations are to

- Simulate the natural circulation flow in the prototype geometry with the help of model geometries,
- Simulate the model experiments using numerical computer codes,
- Transfer the model findings to a prototype geometry using similarity considerations,
- Comment on the feasibility of the sump cooling concept.

2. Results

2.1 Experiments in test facilities SUCOS

The optimisation of the heat exchanger arrangement in the small-scale test facilities SUCOS is done with respect to minimising both the surface area of the heat exchangers and the mean pool temperature. The results are given in table 1. The surface area of the heat exchangers A_{HX} and the mean pool temperature ΔT_{Pool} are normalised by the values of the original arrangement H+VR from Weisshäupl and Bittermann (1993). The pool temperature is taken relative to the heat exchanger inlet temperature.

As is demonstrated in the previous reports the stable stratification above the horizontal heat exchanger H results in a very inefficient heat transfer characteristic. A replacement of the horizontal heat exchanger by a second vertical heat exchanger VL and two array heat exchangers 2A results in a value of 0.66 for the normalised pool temperature that is considerably lower than the one in the original arrangement. At the same time, the heat transfer area and thus the technical equipment used can be kept the same. The array heat exchangers are installed along both sides of vertical concrete walls of one meter thickness in order to prevent them from damage due to shock waves.

As a result, the optimum heat exchanger arrangement is VR+VL+2A.

Table 1: Surface area of the heat exchangers and pool temperature of test facility SUCOS for different heat exchanger arrangements.

Reference arrangement is H+VR from Weisshäupl & Bittermann (1993).

HX arrangement	chimney blockage	$A_{HX} / A_{HX,Ref}$	$\Delta T_{Pool} / \Delta T_{Re}$	HX arrangement	chimney blockage	$A_{HX} / A_{HX,Ref}$	$\Delta T_{Pool} / \Delta T_{Re}$
H	0%	0.66	1.66	VR+VL	67%	0.56	1.02
VR	0%	0.35	1.38	H+VR+VL	67%	1.22	0.82
H+VR	0%	1.00	0.94	2A	67%	0.44	1.09
VR+VL	0%	0.56	0.99	H+2A	67%	0.94	0.85
H+VR+VL	0%	1.22	0.77	VR+VL+2A	67%	1.00	0.66
H+VR+VL+4	0%	1.94	0.51	H+VR+2A	67%	1.29	0.63
H	67%	0.66	1.82	H+VR+VL+2A	67%	1.50	0.56
VR	67%	0.35	1.40	H+VR+VL+4A	67%	1.94	0.53
H+VR (Ref.)	67%	1.00	1.00	VR+VL	200 mm	0.44	1.27

2.2 Experiments in test facility SUCOT

MEASUREMENT TECHNIQUES

The test facility SUCOT has been completely constructed and taken into operation. All commissioning tests were successful.

The experimental techniques that will be applied for local and whole field measurements are

- Temperature: thermocouples,
- Liquid phase velocity: Laser Doppler anemometry, particle image velocimetry,
- Velocity of vapour phase: particle image velocimetry, double fibre-optic probe,
- Void: fibre-optic probe, gamma densitometry,
- Bubble size distribution: digital imaging,

The data acquisition is done by Lefhalm et al. (1996).

CONTROL PARAMETERS AND TEST MATRIX

The control parameters are chosen according to the two main similarity groups derived from a detailed scaling analysis (volumetrically similar approach), which describe the concept-relevant physical phenomena.

- Phase change number N_{PCh} or Zuber number N_{Zu} taking into account the change of phase due to heat transfer to the sump water.

$$N_{PCh} = N_{Zu} = \frac{\Delta h}{\Delta h_{LG}} \frac{\Delta \rho}{\rho_G} = \frac{\dot{Q} / \dot{m}}{\Delta h_{LG}} \frac{\Delta \rho}{\rho_G} = \frac{\text{mass flux due to phase change}}{\text{inlet mass flux}}$$

$$N_{PCh} = \frac{\Gamma_G / \rho_G}{u_m / l} = \frac{\text{fluid residence time}}{\text{reaction time}}$$

- Subcooling number N_{Sub} scaling the subcooling of the sump water entering the heated section and, thus, the dimension of the purely liquid region along the core melt.

$$N_{Sub} = \frac{\Delta h_{sub}}{\Delta h_{LG}} \cdot \frac{\Delta \rho}{\rho_G} = \frac{\text{subcooling}}{\text{latent heat}}$$

The test matrix is mainly divided into steady-state and transient tests, e.g. the heating power is kept constant or decreased with time. In addition, the heating power is varied according to downstream location. Simulating a partial spreading of the core melt, only 2/7, 4/7 or 6/7 or the total heated length is activated.

The control parameters and their variations are

- inlet subcooling: 0 K, 10 K, 20 K, 30 K,
- inlet velocity: 0 m/s, 0.05 m/s, 0.1 m/s, 0.15 m/s,
- heating power: steady-state: 70 kW (100% case), 28 kW (40% case),
transient: $\dot{Q} \propto t^{-0.26}$.

FIRST EXPERIMENTS

To date, 20 experiments have been performed taking 480 temperature measurements at 6 downstream positions. Figure 1 gives a representative result, the abscissa giving temperature normalised by the saturation temperature. All temperatures are taken relative to inlet temperature. The temperature shows a perfect boundary layer profile. Above the boundary layer, the temperature is isothermal, identically reproducing the effect observed in the test facility SUCOS. Within the boundary layer, the temperature increases, reaching a value of 0.75 close to the wall at $x = 1400 \text{ mm}$. In the chimney, at an elevation of $y > 3 \text{ m}$, the fluid reaches saturation conditions due to geodesic pressure relief. Vapour bubbles are generated. The flow regime is bubbly flow. At a frequency of 1/60 Hz the phenomenon of geysering is observed, which results in a violent vapour production. During geysering, the fluid surface is elevated by about 0.5 m. The flow regime is observed to be churn turbulent. Characteristic flow pattern are given in figure 2.

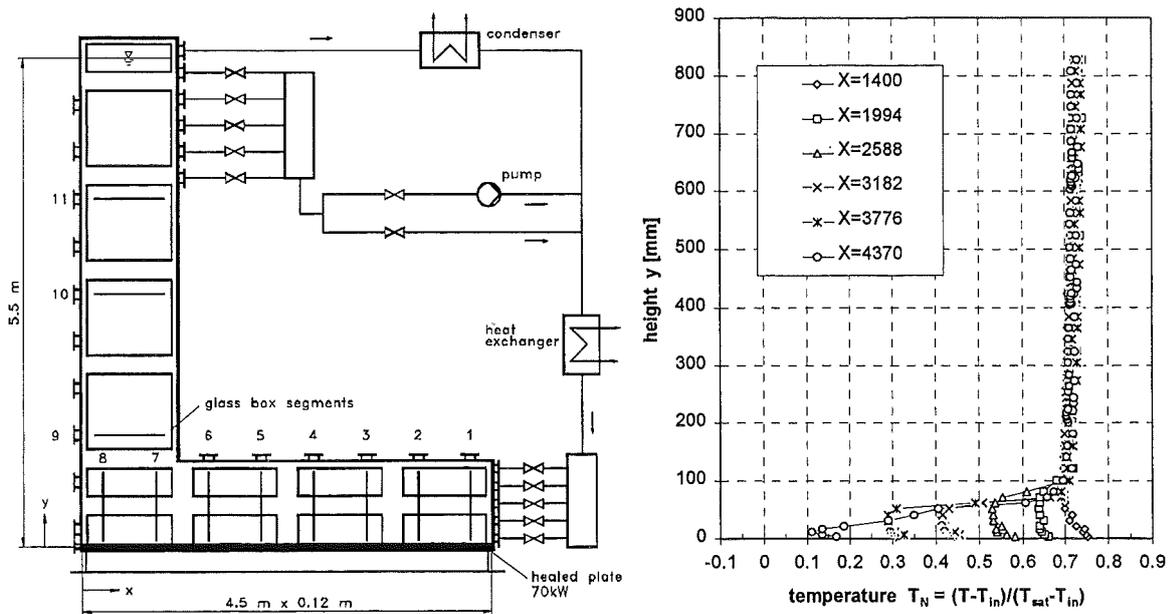
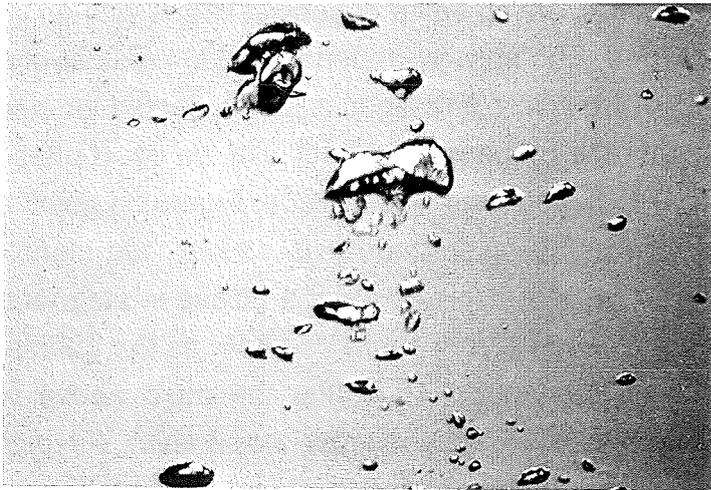
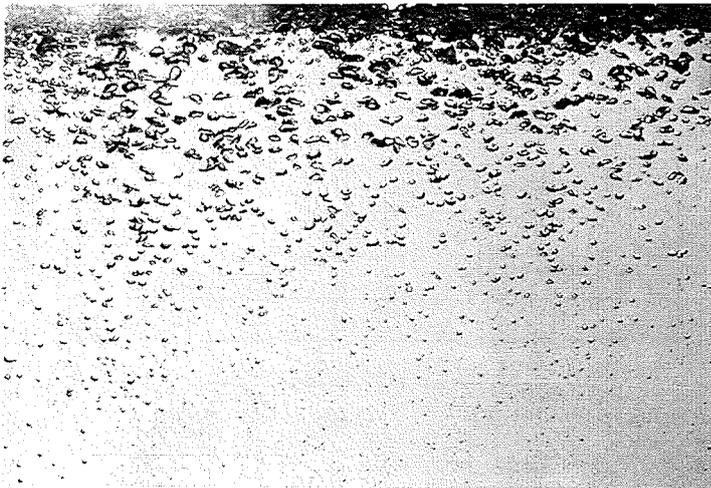


Figure 1: Characteristic temperature profiles versus height for six different downstream measurement positions in test facility SUCOT.



a)



b)



c)

Figure 2: Characteristic flow pattern in test facility SUCOT. A) Bubbly flow, B) cap bubble, C) partial geysering flow in upper part of chimney.

First local void measurements are made using a fibre-optic probe. The probe has an outer diameter of 0.6 mm , the tip being of conical shape with an internal angle of 90° . The surface is polished. The fibre is loaded with 850 nm light of an LED. The probe is used as a phase identifier: The light is not reflected or reflected from the tip depending on whether the probe is in contact with the liquid phase or the gas phase. The reflected light is detected by a photo-diode. Figure 3a gives a typical signal of a fibre-optic probe. The sampling frequency is 10 kHz , the signal shows bubbles of about 5 mm diameter being ejected through a nozzle in stagnant water at a volume flux of 8 l/h . The signal gives a very sharp rise both as the bubble hits the probe and as the probe is re-wetted again. Thus, the threshold above which the signal is considered a bubble is a level just above the noise level. A typical threshold is 10% of the difference between the gas phase level and the liquid phase level. Plotting the cumulative probability density function, fig. 3b, the void of the above signal is found to be 12% , the threshold being 10% .

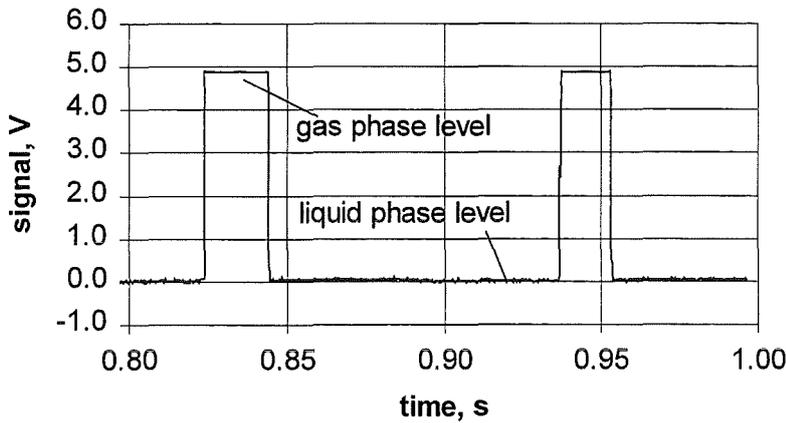


Figure 3: a) Typical signal of fibre-optic probe (recording window of 0.2 s).

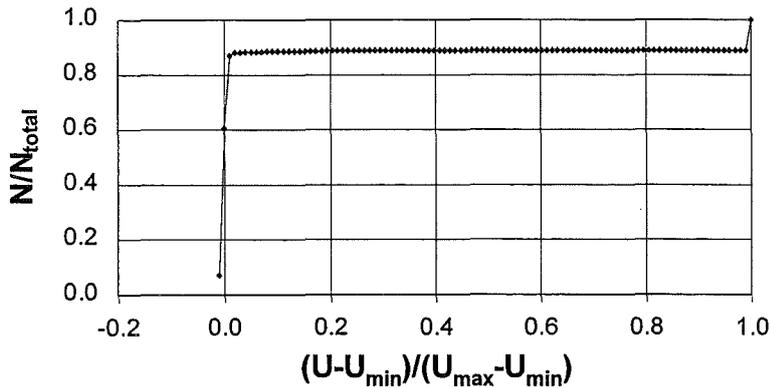


Figure 3: b) Cumulative probability density function.

2.3 Modelling subcooled nucleate boiling in SUCOT

For the numerical simulation of subcooled nucleate boiling in the test facility SUCOT, in a first step, physical models describing interfacial mass, momentum and heat transfer are developed and implemented in the commercial software package CFX4.1. In a second step, the models are validated for an isothermal air-water bubbly flow experiment and a subcooled boiling experiment in vertical annular water flow.

2.3.1 Physical models

The model of nucleate boiling originates with the two-fluid model for dilute bubbly flow under Eulerian-Eulerian approach. Both phases the continuous water and the disperse vapour phase are described by the well-known ensemble-averaged mass, momentum and energy transport equations.

First, the interphase transport phenomena for dilute, disperse bubbly flow, with bubbles as small spherical particles is modelled. The momentum exchange is described by a summation of four interfacial forces: drag force, turbulent diffusion force, lift force, virtual mass force.

$$\langle \underline{L} \rangle_L = -C_D \underbrace{\frac{3 \varepsilon_G}{4 D_B} \rho_L \langle \underline{u}_G \rangle_G - \langle \underline{u}_L \rangle_L \langle \langle \underline{u}_G \rangle_G - \langle \underline{u}_L \rangle_L \rangle}_{\text{drag force}} - \underbrace{C_{TD} \rho_L k_L \nabla \varepsilon_G}_{\text{turbulent diffusion force}} - \underbrace{C_L \rho_L \varepsilon_G \langle \underline{u}_G \rangle_G - \langle \underline{u}_L \rangle_L \times \langle \nabla \times \underline{u}_L \rangle_L}_{\text{lift force}} - \underbrace{C_{VM} \rho_L \varepsilon_G \left(\left\langle \frac{D \underline{u}_G}{Dt} \right\rangle_G - \left\langle \frac{D \underline{u}_L}{Dt} \right\rangle_L \right)}_{\text{virtual mass force}}$$

The first term represents the drag force. This friction force is modelled with the projected interfacial flow area and the drag coefficient C_D , which is in the turbulent Newton regime $C_D(Re_B)=0.44$. The second term is the turbulent diffusion force, which represents the local changes in dynamic pressure at the interface. This term is modelled with the turbulent kinetic energy and with a turbulent diffusion coefficient $C_{TD}=0.1$ for a disperse bubbly flow. The third term is the lift force, acting on bubbles which are unequally surrounded by the fluid flow. The lift term is modelled with a lift coefficient $C_L=0.5$ for weakly viscous flows. The last term represents the virtual mass force, which is implemented for steady state flows and is modelled with a virtual mass coefficient $C_{VM}=0.5$ as analytically derived for an isolated bubble.

Second, the simulation of subcooled boiling under low pressure with models valid only for water as fluid and for small wall heat fluxes is done. The vapour generation model is based on bubble formation and detachment mechanisms, the condensation

model on bubble growth and shrinking mechanisms. The vapour inside the bubble and the bubble surface are assumed to remain at saturation temperature, modelled as a function of the pressure in the bubble. The vapour generation rate Γ_G at the wall is determined under a mechanistic approach as a function of the bubble release frequency f which depends on the given wall heat flux q''_w , of the bubble departure diameter D_D , and of the active nucleation site density N which depends on the calculated wall temperature T_w .

$$\Gamma_G = \frac{\pi D_D^3}{6} \rho_G \cdot \underbrace{f(q''_w)}_{\text{detachment frequency}} \cdot \underbrace{N(T_w)}_{\text{nucleation site density}}$$

The mechanism of bubble formation is described with the active nucleation site density N given by the empirical Correlation of Dhir and Wang (1993)

$$N = 5.8 \cdot 10^{-23.4} \cdot \frac{1 - \cos \phi}{D_c^{5.4}}$$

as a function of the surface wetting angle ϕ and of the critical bubble diameter D_c , which is approximately inversely proportional to the wall superheat

$$D_c = \frac{4 \sigma T_{\text{sat}}}{\rho_G \Delta h_{LG} (T_w - T_{\text{sat}})}$$

The mechanism of bubble detachment is described with the detachment frequency f and the bubble detachment diameter D_D . The major parameter in literature characterising heat transfer in boiling is the product $f \cdot D_D^\alpha$, with the power $\alpha = 1$ for the system water/vapour under atmospheric conditions. This product $f \cdot D_D$ is given as "bubble departure velocity", depending on the wall heat flux q''_w by the Correlation of Malenkov (1971)

$$f \cdot D_D = \frac{u_B}{\pi} \left(1 - \frac{1}{1 + u_B \Delta h_{LG} \rho_G / q''_w} \right)^{-1} ; u_B = \left(\frac{D_D g \Delta \rho}{2(\rho_G + \rho_L)} + \frac{2\sigma}{D_D(\rho_G + \rho_L)} \right)^{1/2}$$

The bubble departure diameter D_D is expressed by the Correlation of Cole and Rohsenow (1969) by means of the dimensionless Jakob-Number Ja

$$D_D = 1.5 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\sigma}{g \Delta \rho} \right)^{1/2} Ja^{5/4} ; Ja = \frac{\rho_L c_{pL} T_{\text{sat}}}{\Delta h_{LG} \rho_G}$$

In the condensation model the number of bubbles is assumed constant in the whole subcooled pool region. The bubble size variations are coupled to changes in void fraction. During condensation the bubble diameter change rate obeys the following energy balance

$$\Delta h_{LG} \frac{d}{dt} \left(\rho_G \frac{\pi}{6} D_B^3 \right) = \alpha_{Bl} (T_{\text{sat}} - T_L) \pi D_B^2$$

The heat transfer coefficient α_{Bl} is defined by the Nusselt number, given by the Correlation of Ranz and Marshall (1952)

$$Nu_B = 2 + 0.6 Re_B^{0.5} Pr_L^{0.3} ; \quad Nu_B = \frac{\alpha_{Bl} D_{Bl}}{\lambda_L} .$$

Solving the equation above yields the typical proportionality between the bubble diameter D_B and the time $t^{2/3}$ with the power $2/3$, in agreement with other literature on bubble growth.

2.3.2 Validation of the physical models

ISOTHERMAL AIR-WATER BUBBLY FLOW EXPERIMENT

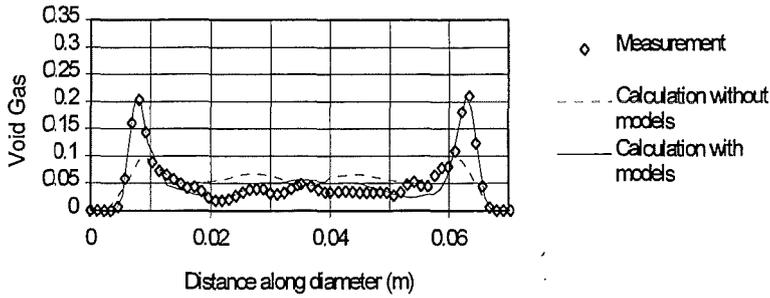
At the Forschungszentrum Karlsruhe an isothermal air-water bubbly flow experiment has been performed by Samstag (1996). In a vertical pipe of 5000 mm length and internal diameter $D = 70.34 \text{ mm}$ the axial development and the radial redistribution of air bubbles have been measured for symmetric and non-symmetric air injection types. The water was injected at the entrance section with a superficial fluid velocity of $J_L = 1.08 \text{ m/s}$. The water flow is turbulent, the Reynolds number being in the range of $0.25E5 < Re_L < 1.E5$. Air with a superficial velocity of $J_G = 0.12 \text{ m/s}$ could be injected through the central nozzle and 6 surrounding concentric nozzles. The bubbles generated by the nozzles could be characterised as spherical particles with a diameter mainly varying from 2 mm to 4 mm . Four different types of air injection have been analysed: through all nozzles, through the central nozzle, through 1 eccentric nozzle and through 2 opposite nozzles. The spatial bubble distribution is measured in distinct horizontal sections by Röntgen-Tomography, hot wire probes and resistance probes.

The simulation of the flow using CFX4.1 is done within a three-dimensional geometry. Starting from the measured profiles for the void, the velocity and the turbulent kinetic energy at the entrance section at $5D (= 35 \text{ mm})$ height, the profiles at the section at $10D (= 700 \text{ mm})$ height and $63D (= 4430 \text{ mm})$ height have been calculated for the 4 different types of air injection. The bubbles are simulated as small spherical particles with a mean diameter $D_B = 3 \text{ mm}$. Different classes of bubble sizes were not simulated, as the present models are not sensitive to bubble size and bubble interactions.

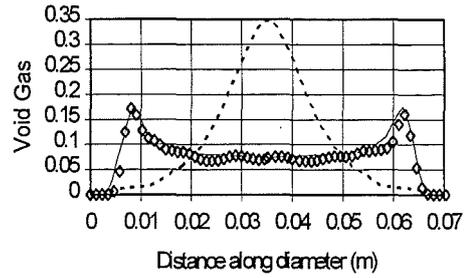
Figures 4a and 4b show the measured and calculated void profiles across the tube diameter at $10D$ ($= 700\text{ mm}$) height and at $63D$ ($= 4430\text{ mm}$) height respectively, for the symmetric case of air injection through all nozzles. The formation of a lubricated ring profile for the void and the azimuthal redistribution of the bubbles around the wall, mainly caused by the lift force in the non-developed flow region remain recognisable for all heights investigated. The calculations, with the additional models for the interfacial forces included, reproduce the void profile well. Without these additional models, the calculation shows a void profile with decreased peaks around the wall and the creation of a high void in the centre of the tube. Thus, a calculation without the additional models is not applicable for this non-developed bubbly flow.

Similar results for the other symmetric case with air injection through the central nozzle are given in Figs. 5a and 5b. In the subsequent presentation of the simulation results, the calculations without additional models have been omitted as no additional information can be gained. For the non-symmetric case of air injection through one eccentric nozzle the Figs. 6a and 6b show the measured and calculated void profiles across the middle of the open eccentric nozzle. Here a turbulent bubble transport along the wall can be observed by the decrease of bubble concentration above the eccentric nozzle and by the build-up of a bubble concentration along the wall. In this case the turbulent diffusion causes mainly the dispersion of the bubbles in the radial void profiles. For the case of air injection through two opposite nozzles, Figs. 7a and 7b, the void profiles are almost the same as in Figs. 4a and 4b, as they are again affected by the lift force and the turbulent diffusion force.

In general, the experimental and the numerical results are in good agreement and show a bubble transport towards the wall for the axial positions measured. This emphasises the importance of the lift force, partially counteracted by the turbulent diffusion force. Comparing different cases of air injection with the same global void fraction of 0.10 , a difference in void profile at 63 diameters height was still present, varying from double peaked, as expected for a non-developed two-phase flow to single peaked, as expected for a developed two-phase flow. This shows that the length of flow establishment for turbulent multi-phase flows is significantly longer than for turbulent single-phase flows.

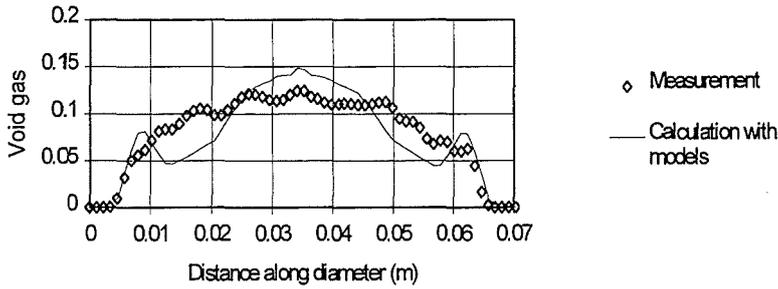


Void profile at $10 D$ height

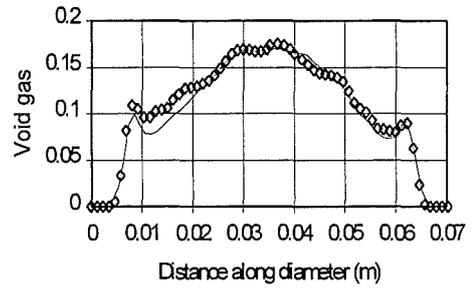


Void profile at $63 D$ height

Figure 4: Air Injection Through. All Nozzles All Nozzles

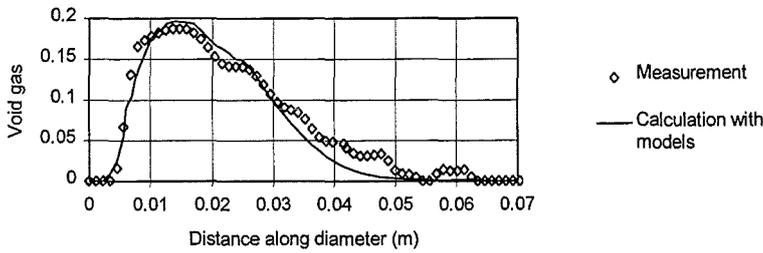


Void profile at $10 D$ height

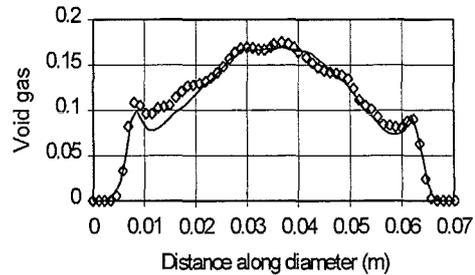


Void profile at $63 D$ height

Figure 5: Air Injection Through the Central Nozzle.

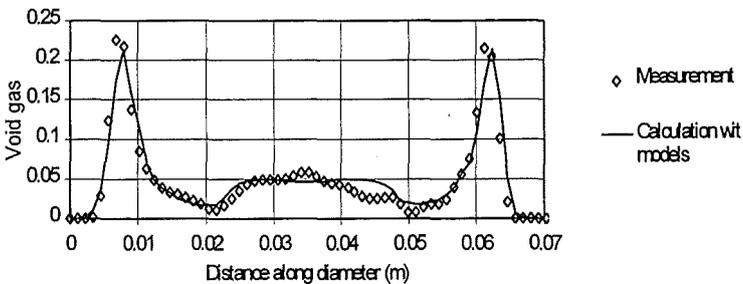


Void profile through the middle of the nozzle at $10D$ height

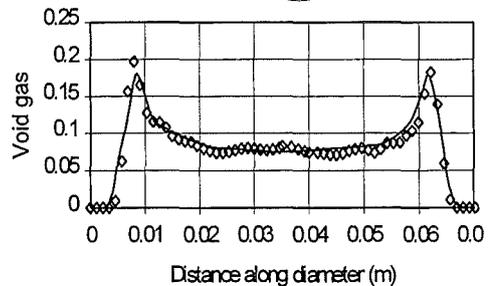


Void profile through the middle of the nozzle at $63D$ height

Figure 6: Air Injection Through One Eccentric Nozzle.



Void profile through the middle of two nozzles at $10D$ height



Void profile through the middle of two nozzles at $63D$ height

Figure 7: Air Injection Through Two Opposite Nozzles,



SUBCOOLED BOILING EXPERIMENT IN VERTICAL ANNULAR WATER FLOW

The implemented boiling model is validated against the experiment of Bibeau and Salcudean (1994), investigating subcooled boiling in vertical annular water flow. Along the symmetry axes of a vertical pipe of 600 mm length and with internal diameter $D = 17.0\text{ mm}$, an internal heater of 9 mm diameter is placed, acting as a variable heat source. Water is injected at the entrance section with a superficial fluid velocity of $J_L = 0.134\text{ m/s}$, performing a laminar annular water flow. The inlet temperature of the subcooled water could be varied as $T_{L,in} = 45^\circ\text{C}$, $T_{L,in} = 60^\circ\text{C}$ and $T_{L,in} = 75^\circ\text{C}$ and the pressure at the outlet section at $35D (= 600\text{ mm})$ could be varied as $p = 1\text{ bar}$, $p = 2\text{ bar}$ and $p = 3\text{ bar}$. The heat source Q is varied between 0 kW and 60 kW , generating vapour bubbles along the heater surface after the point of onset of nucleate boiling. At the measurement section at $32D (= 550\text{ mm})$ height the vapour volume fraction has been measured by Gamma-Densitometry for different heat sources. For steady state conditions with a given liquid flow rate each measured volume fraction thus corresponds to one imposed heat flux.

The geometry is simulated in two dimensions. The vapour generation source is additionally implemented in CFX4.1 using the models of chapter 2.3.1. Each measurement point is simulated separately. As the wall temperature is the important parameter in the vapour generation model, the temperature profile along the wall has to be calculated using a time-marching method. When steady-state conditions are reached the vapour generated at the measurement section could be integrated over the cross-section.

In Fig. 8 the integral void generated and the wall temperature achieved at the measurement section are presented versus the equilibrium quality of the mixture x_{eq} , for the case of an inlet temperature of $T_{L,in} = 60^\circ\text{C}$ and an outlet pressure of $p = 2\text{ bar}$. The equilibrium quality x_{eq} is defined as the ratio of the enthalpy consumed by the mixture to evaporate to the latent heat.

$$x_{eq} = \frac{\Delta h_L - \Delta h_{Sub}}{\Delta h_{LG}} = \frac{\dot{Q}/\dot{M} - c_{pL}(T_{Sat} - T_{L,in})}{\Delta h_{LG}}$$

Six cases of imposed heat source Q , corresponding to $x_{eq} = -11.6\%$, -10.5% , -10.1% , -7.9% , -5.5% and -4.0% , have been chosen to cover the single phase flow regime, to reach the onset of nucleate boiling and to finally cover the fully established nucleate boiling regime. Each of them are calculated with the extended two-fluid-

model. Both the onset of nucleate boiling and the total void are in good agreement with the experimental data, the experimental error bashing given in the diagram. The corresponding increasing wall temperatures are also shown. As long as no void is generated the calculated wall temperature increases with a slope as found in single-phase calculations. The difference in the calculated and experimental wall superheated temperature is within the range of standard deviations in the measured data. The influence of the outlet pressure p and the water inlet subcooling $T_{sub} = T_{sat} - T_L$ on the void generated at a certain equilibrium quality x_{eq} has also been checked. With increasing pressure, the saturation temperature increases and the enthalpy of the mixture at the inlet is further removed from the saturation point. The onset of nucleate boiling is therefore moved to a lower equilibrium quality. With decreasing water inlet subcooling, the enthalpy of the mixture at the inlet is closer to saturation. The onset of nucleate boiling occurs at higher equilibrium qualities. These physical behaviours are also found in the numerical results, indicating the correct physical behaviour of the vapour generation model. In general, the vapour generation at the heated wire in the annular flow is in good qualitative agreement with the experimental results for the onset of nucleate boiling as well as for the amount of vapour generated.

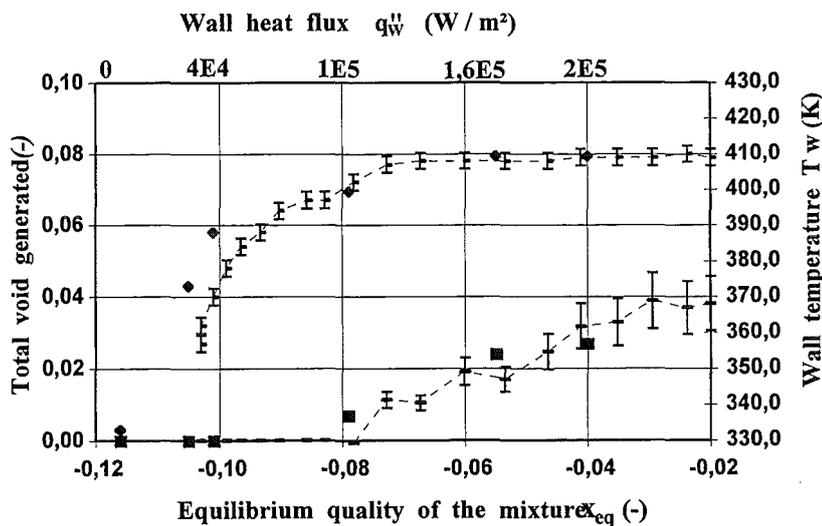


Figure 8: Void and temperature profile versus the equilibrium quality for subcooled boiling mixture. ($\bar{J}_L = 0.134 \text{ m/s}$, $T_{L,in} = 60^\circ\text{C}$, $p = 2 \text{ bar}$).
 Void: ■ CFX, — experiment; wall temperature: ♦ CFX, — experiment.

3. Main progress

- The sump cooling concept could be significantly improved by substituting the horizontal heat exchanger by several vertical heat exchangers. Providing the same heat transfer area, the pool temperature can be lowered by 44% relative to the first proposal.
- The test facility SUCOT is in operation.
- First experiments show a boundary layer flow above the heated plate and an isothermal pool above. Due to a geodesic pressure relief, violent geysering is observed in the chimney. The fibre-optic probe shows a good performance.
- The two-fluid-model of the software package CFX4.1 is extended by physical models to describe interfacial mass, momentum and heat transfer in flows with subcooled nucleate boiling. The models are thoroughly validated against two experiments, an isothermal air-water bubbly flow experiment and a subcooled boiling experiment, which represent good benchmarks to test both the fluiddynamic and the thermodynamic behaviour of the extended two-fluid-model.
- Now, a validated numerical tool is available to calculate the subcooled nucleate boiling phenomena observed in the test facility SUCOT.

4. Future activities

TEST FACILITY SUCOT

- Steady-state and transient experiments in test facility SUCOT.
- Further development of two-phase flow measurement techniques.
- Setting up of a data base.

NUMERICAL SIMULATIONS USING CFX4.1

- Calculation of test facility SUCOT,
- Calculation of prototype geometry.

5. References

- Bibeau, E.L., Salcudean, M., Subcooled Void Growth Mechanisms and Prediction at Low Pressure and Low Velocity, *Int. Journal of Multiphase Flow*, 20, pp. 837-863, 1994.
- Cole, R., Rohsenow, W., Correlations of Bubble Diameter for Saturated Liquids, *Chem. Eng. Prog.* 65, pp. 211-213, 1969.
- Dhir, V. K. and Wang, C. H., Effect of Surface Wettability on Active Nucleation Site Density During Pool Boiling of Water on a Vertical Surface, *Trans. ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 115, pp. 659-669, 1993.
- Knebel, J.U., Janssens-Maenhout, G., Daubner, M., Langfristige Containment-kühlung, in: B. Mühl (Hrsg.), *Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1996*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5963, Forschungszentrum Karlsruhe, pp. 282-295, 1997.
- Lefhalm, C.-H., Schober, P., Knebel, J.U., MEMESS V4 - Ein Modular Erweiterbares Meßwerte Erfassungs- und Steuerungs-System, *Wissenschaftliche Berichte FZKA 5788*, Forschungszentrum Karlsruhe, 1996.
- Malenkov, I. G., Detachment Frequency as a Function of Size for Vapor Bubbles, translated from *Inzhenerno-Fizicheskii Zhurnal* at the Academy of Sciences of the USSR, vol. 20, pp. 988-994, 1973.
- Ranz, W. E. and Marshall, W. R., Experimental Correlation for Heat Transfer Between Particle and Fluid, *Chemical Engineering Prog.*, vol. 48, pp. 141, 1952.
- Samstag, M., Experimental Investigations on Transport Phenomena in Vertical, Turbulent Air-Water Bubbly Flow, Ph.D. Thesis, Mechanical Eng. Dept., Karlsruhe University, 1996.
- Weisshäupl, H. A., Bittermann, D., Large Spreading of Core Melt for Melt Retention/Stabilization, *Proc. 5th Int. Seminar on Containment of Nuclear Reactors*, August 23-24, Karlsruhe, FR Germany, pp. 347-355, 1993.

II. PASCO-Programm

(X. Cheng, H.J. Neitzel, He. Schmidt, J.U. Knebel, IATF)

Abstract

In addition to the sump cooling concept explained in detail in the chapter before (SUCO program), the Forschungszentrum Karlsruhe and the Universität Karlsruhe have proposed a composite containment concept. One essential of this concept is the decay heat removal from the containment by natural air convection coupled with thermal radiation. This passive containment cooling concept is investigated in the PASCO program.

The main objective of the containment cooling programme PASCO is to attain results on the feasibility of the passive containment cooling concept. The experimental and numerical work on this programme has progressed very well.

1. Introduction

The PASCO program consists of model experiments performed in the PASCO test facility, that are backed up by numerical calculations. A detailed description is given by Erbacher et al. (1996).

The objectives of the experimental and numerical investigations are to

- Simulate the natural air convection coupled with thermal radiation present in the prototype with the help of a model geometry,
- Simulate the model experiment using numerical computer codes,
- Enhance the heat transfer characteristics by passive means,
- Develop heat transfer correlations for containment design,
- Comment on the coolability limit of the passive containment cooling concept.

2. Results

2.1 Experiments in test facility PASCO

The test facility PASCO, as shown in fig. 1, has been built at the Forschungszentrum Karlsruhe. It consists of a vertical rectangular channel of which one wall is electrically

heated. The other three walls are thermally insulated from the ambient surrounding. During the experiment the heated wall is kept at a uniform temperature distribution. Fluid temperature and velocity profiles at different elevations, wall temperature distribution and heat power removed from the heated wall are measured.

During the period of 1997 two series of experiments have been performed.

- An air filter is located at the outlet cross section of the test channel.
- Channel inserts have been used to enhance the convective heat transfer.

In addition to the experimental work, numerical calculations have been performed by using the CFD-code FLUTAN which has been developed at the Forschungszentrum Karlsruhe. The numerical results have been compared with the experimental data.

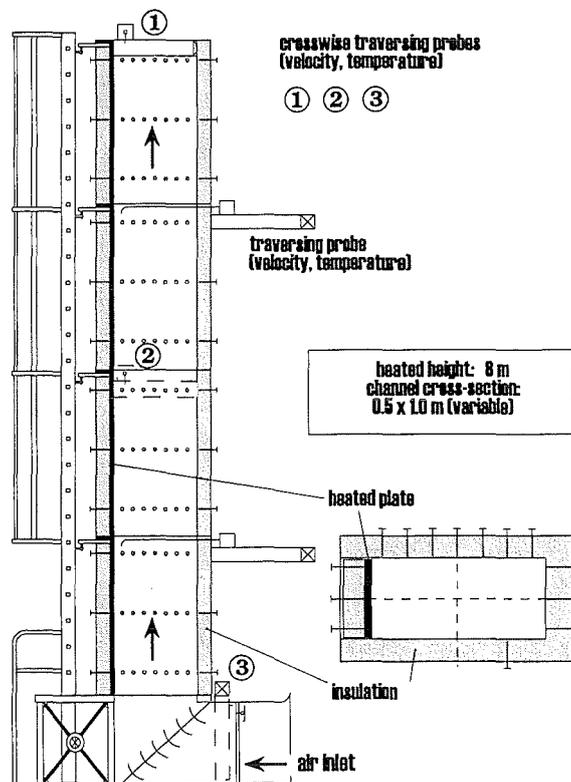


Figure 1: Test facility PASCO at the Forschungszentrum Karlsruhe.

2.2 Test series with air filter

In the composite containment an air filter is located at the outlet of the containment dome. The effect of the filter on the decay heat removal will also be studied at the PASCO test facility. Air filters for advanced reactor containment are still under development and not available up to now. At the PASCO test facility a preliminary air filter is used which has been constructed at the Forschungszentrum Karlsruhe in the

frame of developing the composite containment. It should be emphasized that the hydraulic characteristics of this air filter may differ strongly from that used in an advanced containment.

Experiments have been performed with the following test parameters:

- Heated wall temperature, T_w (°C): 100 - 175
- Channel depth, L (m): 0.25, 0.50
- Channel height, H (m): 4.0, 6.0, 8.0
- Wall emissivity, e (-): 0.4, 0.9

Figure 2 shows an example of the test results achieved. The removed heat power and air mass flow rate are presented over the heated wall temperature. For comparison the test results in the channel without air filter are also shown in this figure. It is clearly seen that the presence of the air filter leads to a strong reduction in air mass flow rate which is about 4 times lower than that in the channel without air filter. In spite of the extremely low mass flow rate of air the removed heat power decreases only about 30%.

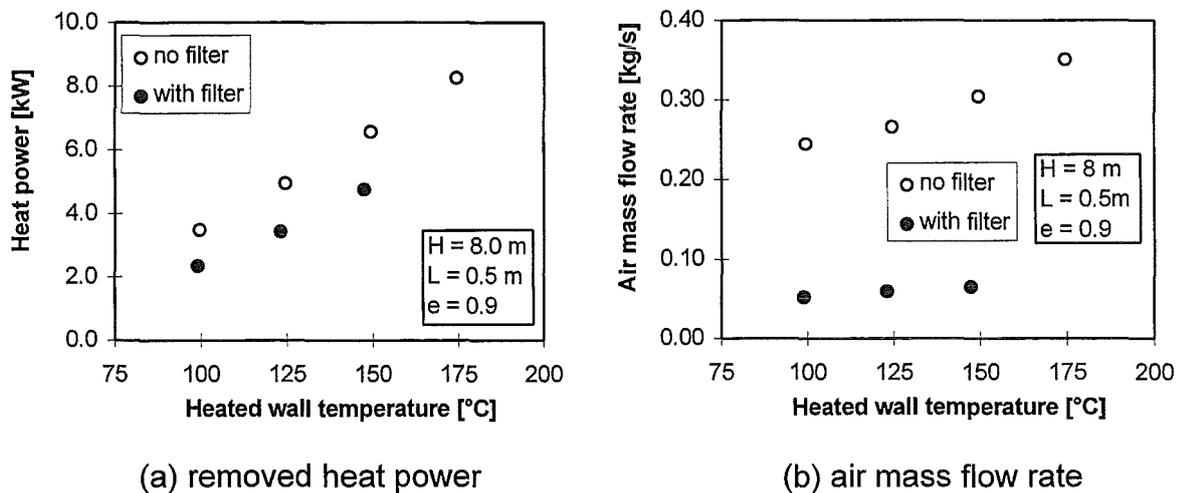


Figure 2: Influence of air filters on removed heat power and air mass flow rate.

Table 1 compares some measured heat power with the calculated values. For all test points shown the experimental data are well reproduced by the FLUTAN code. The deviation is less than 10%. Furthermore, it is found that for the condition considered the heat power transferred by thermal radiation is about 30% higher than that directly transferred by natural convection.

Table 1: Comparison of the experimental data with the numerical results
(PASCO test channel with air filter and wall emissivity of 0.9).

Test No.	Measured heat power [kW]	Calculated heat power [kW]		
		convection	radiation	total
M255	1.21	0.588	0.710	1.30
M261	1.86	0.858	1.090	1.95
M263	2.49	1.141	1.541	2.68
M269	3.18	1.338	2.019	3.36
M287	3.56	1.619	2.184	3.80
M303	2.34	1.078	1.284	2.36
M309	3.43	1.567	1.967	3.53
M311	4.75	2.006	2.700	4.71

2.3 Test series with channel inserts

Preliminary calculations with the CFD-code FLUTAN show that the convective heat transfer at the channel entrance region is much stronger than that in other regions. Figure 3 shows the calculated convective heat flux on the heated wall.

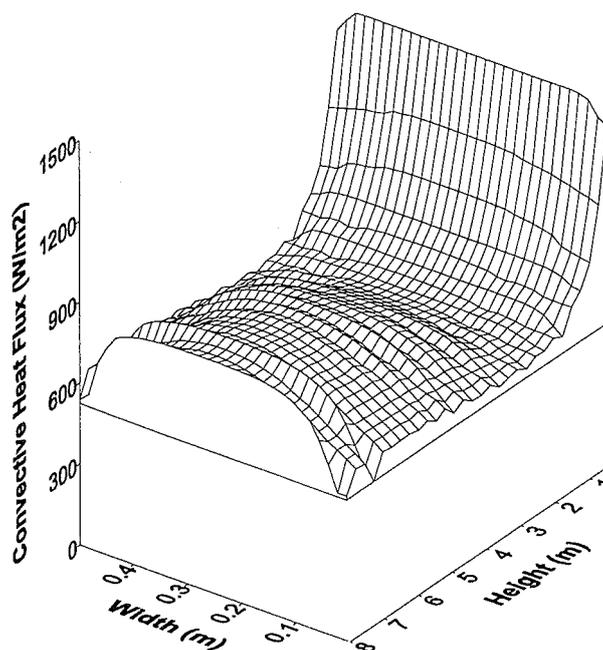


Figure 3: Distribution of the convective heat flux on the heated wall:
Numerical result.

The higher convective heat flux at the entrance region is resulted by the undeveloped boundary layer in this region. As long as the boundary layer is established, the convective heat transfer becomes less efficient. Introducing some channel inserts onto the heated wall surface will disturb the boundary layer and could improve the total heat transfer. At the same time channel inserts will result in an increase in hydraulic resistance, lead to a reduction in mass flow rate and, subsequently, to a reduction in heat transfer. At the PASCO test facility experiments are, therefore, performed with channel inserts, to study their effects on heat transfer. In the report period experiments have been performed with the following parameters:

- Heated wall temperature, T_w ($^{\circ}\text{C}$): 100 - 175
- Channel depth, L (m): 0.50
- Channel height, H (m): 8.0
- Wall emissivity, e (-): 0.9

As channel inserts circular tubes of 10 mm diameter were horizontally located on the heated wall with a axial interval of 1 m. Figures 4 show the measured distribution of air velocity and air temperature. For comparison the results without channel inserts are also presented in the same figures. It can be seen that the introduction of channel inserts has led to a reduction in air velocity and air temperature near the heated wall.

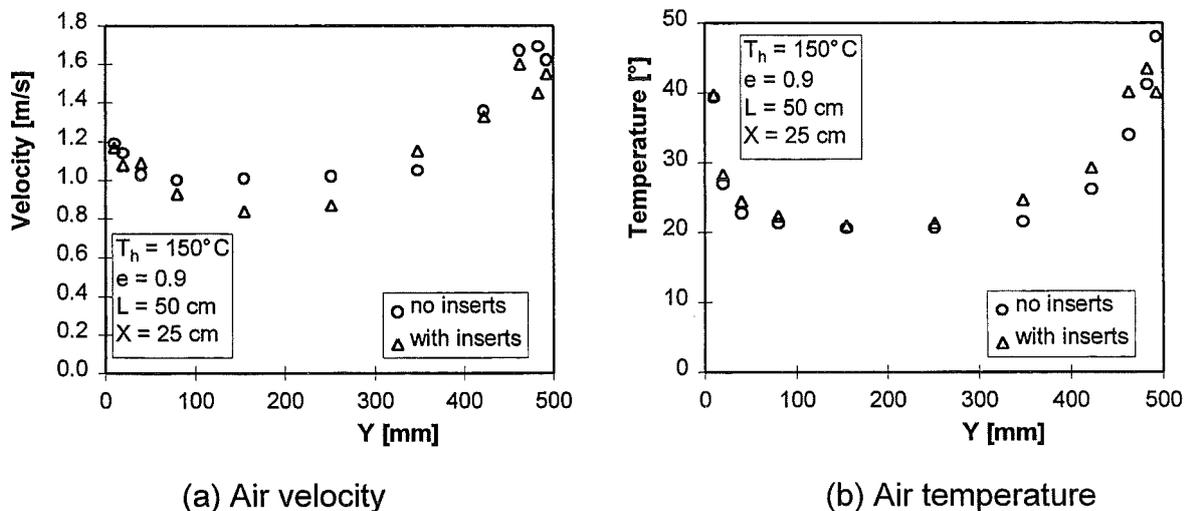


Figure 4: Profile of air velocity and air temperature in the test facility PASCO with and without channel inserts.

Table 2 shows the effect of channel inserts on air mass flow rate and heat power removed. Due to channel inserts an slight reduction in air mass flow rate, about 3%. A stronger increase in the heat power removed, about 8%, has been achieved. Considering that more than 50% of the total heat is removed from the heated wall directly by thermal radiation, the introduction of the channel inserts improves the convective heat transfer about 20%.

Table 2: Effect of channel inserts.

	with inserts	no inserts
T_h [°C]	147.3	147.7
T_{in} [°C]	15.88	15.74
T_{am} [°C]	17.92	17.01
Q [kW]	7.078	6.543
m [kg/s]	0.552	0.572
T_s [°C]	58.85	57.56
T_b [°C]	63.36	62.42

3. Main progress

- The passive containment cooling concept could be significantly improved by introducing channel inserts which break up the boundary layer along the heated wall, thus enhancing the convective heat transfer by about 20%. The total heat power removed is increased by about 8%.
- The FLUTAN code is a validated numerical tool to calculate the natural air convection coupled with thermal radiation in a composite containment.
- Next experiments are directed in optimizing the channel inserts due to shape, axial distance and distance from the wall.

References

Erbacher, F.J., Harten, U., Just, W., Neitzel, H.J., Schmidt, He., Langfristige Containmentkühlung, in: B. Mühl (Hrsg.), Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995, Wissenschaftliche Berichte FZKA 5780, Forschungszentrum Karlsruhe, pp. 240-245, 1996.

32.21.06 Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen unter hochtransienten Bedingungen

Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter

(B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, A. Hirt, G. Hoffmann, O. Jonatzke, T. Jordan, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)

1. Model experiments BERDA I simulating the liquid slug impact against the upper vessel head. Tests 08 – 13 with liquid metal and most of them with mock-ups of the upper internal structures

Description of the BERDA I facility

Since reliable computational methods for the slug impact problem are not available yet, the model experiments BERDA I are aimed to simulated the reactor scenario as close as possible. Therefore, the vessel head and its bolts are simulated by mock-ups made of the original ferritic steels. For most of the experiments carried out in 1997 also the upper internal structures were considered. In some cases the original austenitic steel was used. In other cases these structures were made of brass having a lower strength and ductility than the austenitic steel. In this way the influence of elevated accident temperatures and irradiation embrittlement can be studied. All mock-ups are precisely scaled down by the length scale $\lambda_l = 10$. The molten core is simulated by liquid metal with about the same density. The volume is scaled down by $\lambda_l^3 = 1000$. The liquid metal is contained in a crucible and accelerated against the model of the head using a pneumatic drive mechanism.

The liquid slug velocity is measured by photoelectric beams located at different positions along the slug path. The impact force is measured by strain gauges mounted at the bolts connecting the vessel head to the vessel flange. After the impact process the head deformation is measured in quite a detail by a three-dimensional measuring machine.

Experimental results

Upper internal structures neglected. In addition to the tests of 1996, the tests 07 and 09 were carried out with the same slug mass of about 80 kg and the same slug velocity of 60 m/s. The results are shown in fig. 1. For comparison the results of the preceding test are included, too. It turns out that the head deformations of test 07 and 09 are quite different. Post test analyses indicated that this likely to be caused by variations of the slug impact

areas: For test 07 the impact force may have been distributed over a central section of half the vessel diameter, for test 09 over the full vessel diameter. It should be pointed out that such scatters have to be considered for the reactor safety assessment.

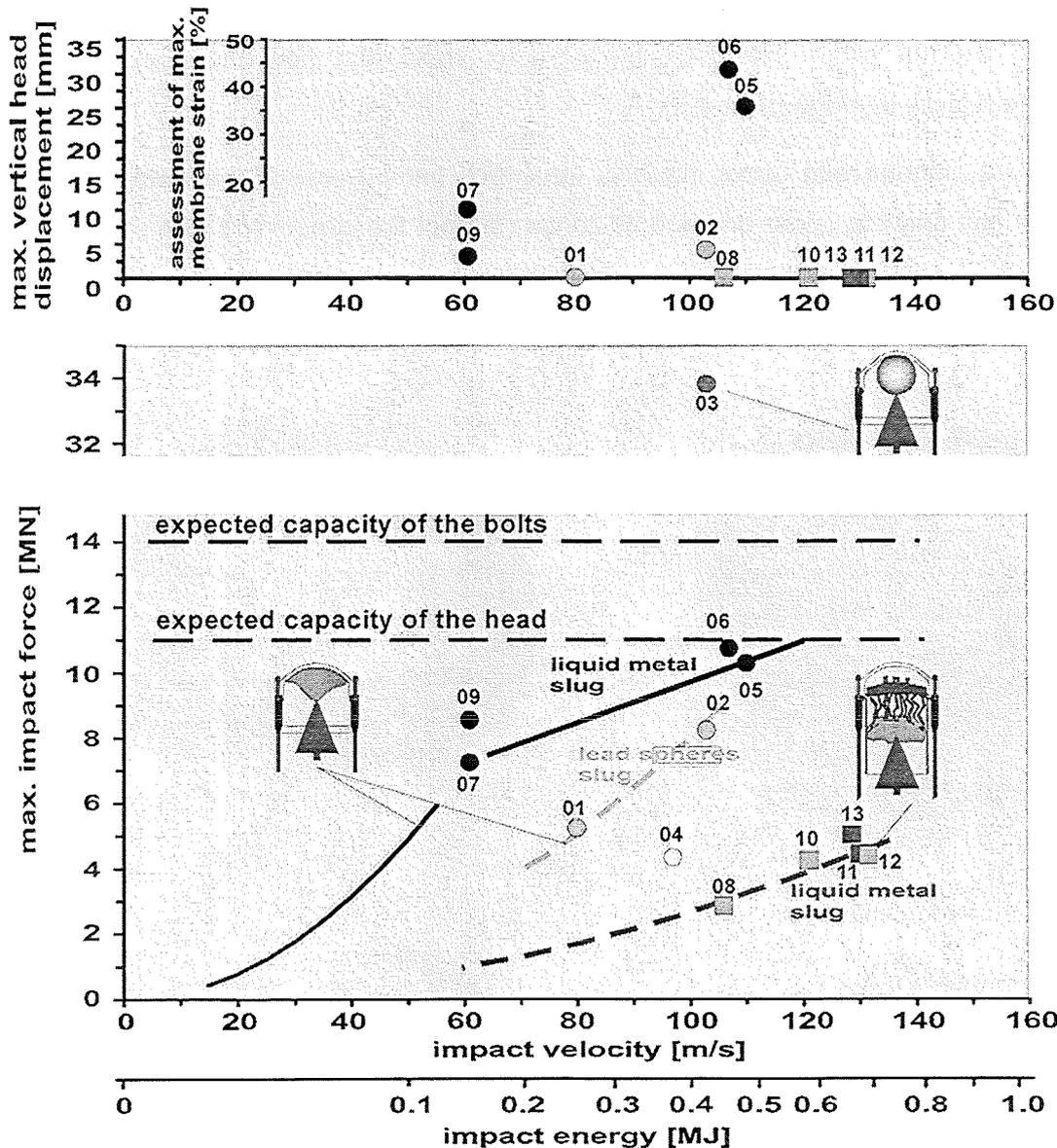


Fig. 1: Results of the BERDA I tests.
Impact forces converted to a reference mass of 80 kg

Upper internal structures made of austenitic steel. Test 08, 10 and 12 were carried out with the same slug mass of about 80 kg and slug velocities of 106, 121 and 131 m/s, respectively. The results are shown in fig. 1. It turns out that the maximum impact forces are much lower than the forces obtained without the upper internal structures. Plastic head deformations did not occur. Photographs of the models of the upper internal structures before and after the impact are shown in figs. 2 and 3.

Upper internal structures made of brass. Test 11 and 13 were carried out with the same slug mass of about 80 kg and slug velocities of 130 and 128 m/s, respectively. Again the results are shown in fig. 1. The maximum impact force do not differ significantly from the results where the upper internal structures were made of austenitic steel. Again, plastic head deformations did not occur. However, photographs show that now the upper internal structures are heavily damaged, fig. 4.

Next tests are planned with upper internals structures partly made of lead which is very weak. In one test only the upper grid and its flange (but not the control rod guide tubes) will be considered. Thus cases with very high temperatures in the upper plenum are simulated.

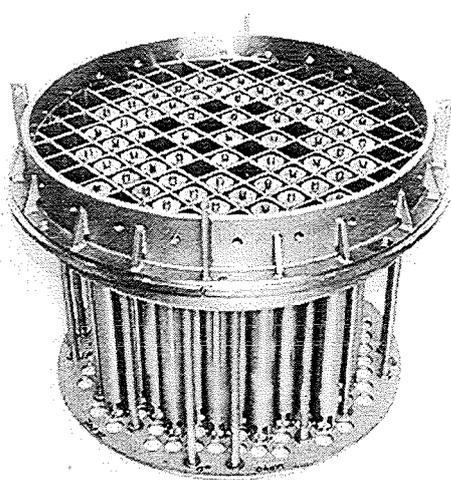


Fig. 2 Model of the upper internal structures before the impact

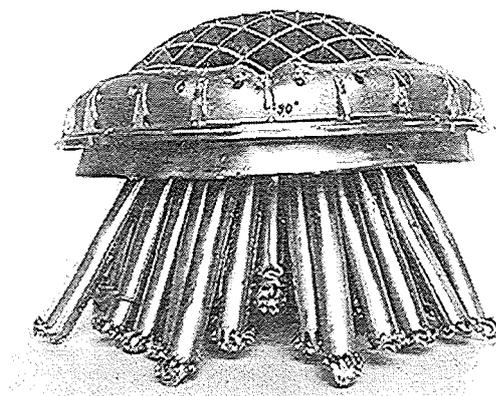
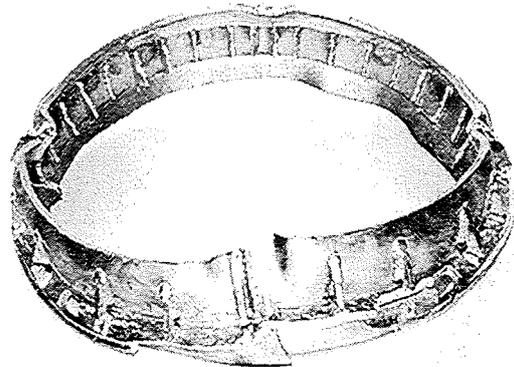


Fig. 3 Upper internal structures of austenitic steel after the impact (test12)

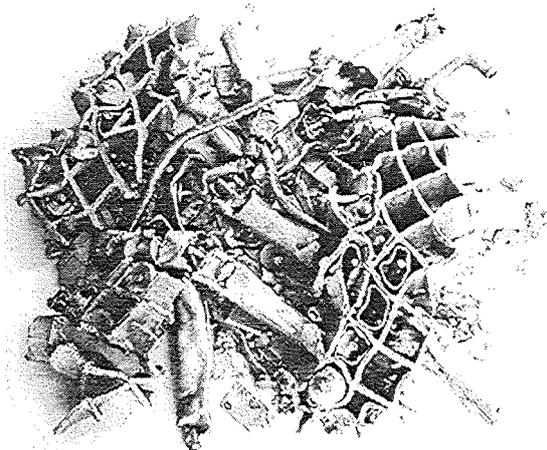


Fig. 4 Upper internal structures made of red brass after the impact (test11)

Conclusions from the model experiments BERDA I

From the test results condensed in fig. 1 and accompanying calculations (see paragraph 3.4.4) the following facts are evident:

- The impact force of a liquid slug is smaller by a factor of 3 - 4 than the force of a solid projectile of the same mass and velocity.
- The upper internal structures reduce the impact force additionally by a factor of 3 - 7. The lower value applies, if an impact velocity between 100 and 110 m/s is considered, where in the case without the upper internal structures very strong head deformations occur, while with these structures the head response is elastic. The higher value applies, if one refers to a smaller impact velocity, where in both cases the head response is elastic. The factor of 7 applies also for the impact energy without and with upper internal structures as long as the head response is elastic.
- The upper internal structures reduce the sensitivity of the impact forces and the head response considerably. Variations of the shape of the liquid slug and uncertainties of the strength and ductility of the upper internal structures have only moderate influence.

Conversion of the experimental results to reactor dimensions

The similarity laws were studied extensively using the "method of differential equations". Assuming that the material behaviour is time independent and that the elevated reactor temperature reduces the stresses in the stress-strain-diagrams of the relevant materials by the scale factor $\lambda\sigma = 0.85 - 0.9$, the BERDA quantities can be converted into reactor quantities as follows: The impact velocity must be multiplied by $\sqrt{\lambda\sigma}$, the force by $\lambda^2\lambda\sigma$ and the energy by $\lambda^3\lambda\sigma$. The validity of these scaling laws was assessed by the scaled model experiments FLIPPER done under paragraph 3.4.2.

It should be pointed out that similarity could not be approved when material damage and cracking occurs. Here, basic knowledge is lacking. Available experience suggests that the maximum strain before cracking occurs is reduced, when the size of the structural components is increased.

Therefore, only those BERDA I results are converted where the head deformations are sufficiently small such that cracking can be ruled out. Then the conclusions for the reactor are:

- Neglecting the upper internal structures the full size reactor head is able to allow a kinetic liquid slug energy of about 0.1 GJ without significant head deformations. However, here the strong influence of the slug shape may cause significant scatter.
- Including the upper internal structures the full size reactor head is able to allow a kinetic liquid slug energy of 0.8 GJ without significant head deformations. To confirm this result, additional BERDA I tests with impact velocities of 150 m/s are planned.

Furthermore, the experiments suggest that even for excessive impact loading only the head could fail. The bolts would remain intact such that the whole vessel head could never become a single, very dangerous missile.

Of course, the admissible energies would be much higher, if significant head deformations were acceptable. Here, further research and subsequent consensus about strain limits for severe accidents is strongly needed.

2. Simplified slug impact experiments FLIPPER and FLIP

The similarity experiment FLIPPER were finished during the last period. In these tests liquid structure impacts were studied in different scales. The results confirmed approximate similarity for ferritic steel. However, a considerable size effect was obtained for austenitic steel. Therefore, supplementary static material tests with austenitic steel were carried out. The results confirmed that small bending specimens of 1 and 4 mm diameter have a higher dimensionless stiffness than large-specimens of 10 mm diameter. This is a strong indication that the size effect observed in FLIPPER with austenitic steel is caused by the material behaviour.

In order to allow a more detailed check of liquid slug impact calculations, the FLIP experiments are performed, where the front wall of a rectangular water container with a free water surface is suddenly moved with a constant velocity such that some water has to be displaced. In fig. 1 the photographed splash is compared with the calculated splash 2.8 s after test begin. It can be seen that the water velocity and the direction of the splash is not calculated satisfactorily. This is in line with the discrepancy between the measured and calculated momentum transfer for BERDA I tests. As a consequence, the computational model should be improved perhaps by increasing the number of particles or by changing the particle interaction module.

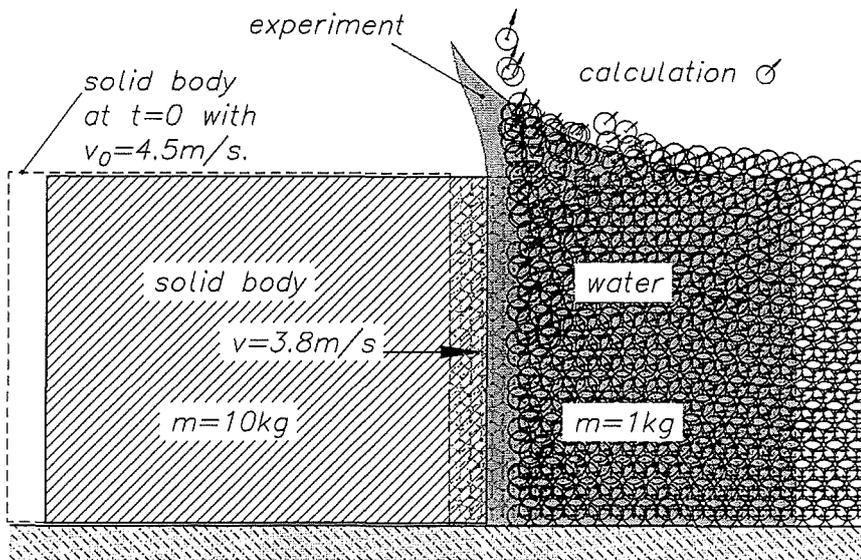


Fig. 5: Photographed splash during a FLIP experiment and calculated splash 2.8 ms after test begin

3. Analysis of slug impact on a smooth structure

Theoretical studies were performed, in which the upper internal structures were not considered. The computer code PLEXUS developed by CEA was used for these investigations. It allows to discretise the slug by an assemblage of particles; consequently, serious distortion or splashing of the slug during impact can be considered.

Fig. 6 shows the discretisation using 1203 particles for the slug. Elastic-plastic material behaviour was taken into consideration. In fig. 7 to 9 the impact forces measured in BERDA I tests 05, 06 and 07/09 are compared with corresponding PLEXUS calculations. The agreement is acceptable. However, in the calculations the transferred momentum (time integral of the forces) is too large by up to 25 %.

Table I gives the measured and calculated permanent head deformations:

Table I: Comparison between calculated and measured head deformations

Test	05	06	07	09
velocity (m/s)	109	109	61	61
calculated deformation (mm)	32	32	2.2	3.3
measured deformation (mm)	25	31	10	3

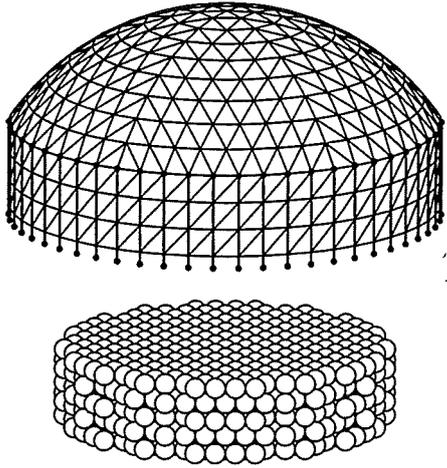


Fig. 6: Discretisation of the liquid slug impact problem for PLEXUS using 1203 particles

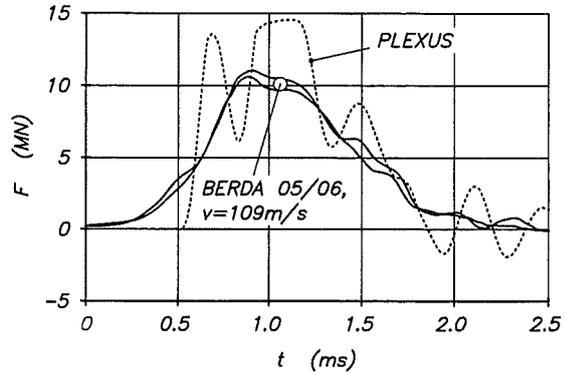


Fig. 7: Measured and calculated forces for BERDA test 05/06 with an impact velocity of 109 m/s

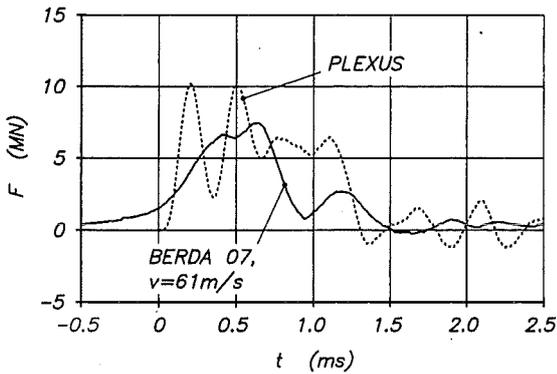


Fig. 8: Measured and calculated force for BERDA test 07 with an impact velocity of 61 m/s

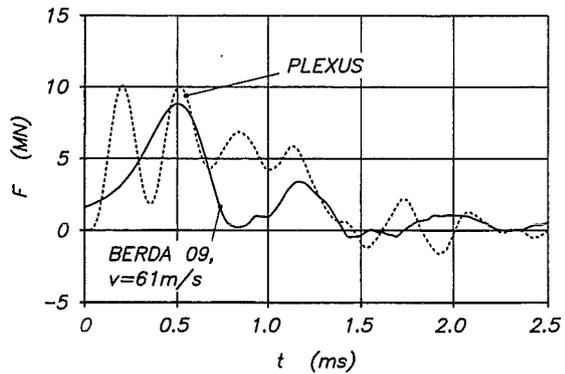


Fig. 9: Measured and calculated force for BERDA test 09 with an impact velocity of 61 m/s

The agreement is acceptable, except for test 07, where the experiment yielded a rather large head deformation. Simplified Finite Element calculations yielded better agreement, if the loading was restricted to a rather small impact area. Corresponding modifications of the slug shape will be considered in future PLEXUS calculations.

Furthermore, it turned out that, for the presented cases, the impact is dominated by the plastic deformation characteristic of the head; the agreement between calculation and measurement improves with growing plastic head deformation. Thus, a possible inadequateness of the impact model might be compensated.

4. Analysis of slug structure penetration

The development of the computational model SimSIC simulating the impact of molten core material upon the upper internal structures and the vessel head is terminated.

Since the complex geometry prevents detailed calculations of the impact, only the essential physical effects are considered. The involved structural components and the molten corium - the slug - are described by separate models. Based on the balance of momentum for a fluid domain, and applying some simplifications and assumptions, it was possible to derive a model for the motion of the slug and for the resulting forces exerted at the structural components. However, the intensity of slug-structure interaction is described by two parameters, which cannot be determined in advance, but have to be adjusted according to experimental findings. The models of the structural components are based on simplified assumptions for the dynamic relation between acting forces and deformations. Some of the structural models were checked by comparison with finite element calculations.

The model SimSIC is not intended to be applied as a stand-alone-program, but rather to give a better interpretation of experimental results, to provide deeper understanding of the physical events during the impact and to allow for interpolation and extrapolation to cases with impact parameters not covered by experiments. Figs. 10 and 11 show a comparison of calculated and measured forces for a slug impact with upper internal structures made from steel and brass, respectively. It is confirmed that for both cases the impact forces are rather similar though the internal structures behaved completely different: large deformations for steel and complete destruction for brass structures. Furthermore, SimSIC was able to predict that plastic head deformation with the upper internal structures included will occur only at velocities higher than 150 m/s, which is beyond the actual capacity of the BERDA I facility.

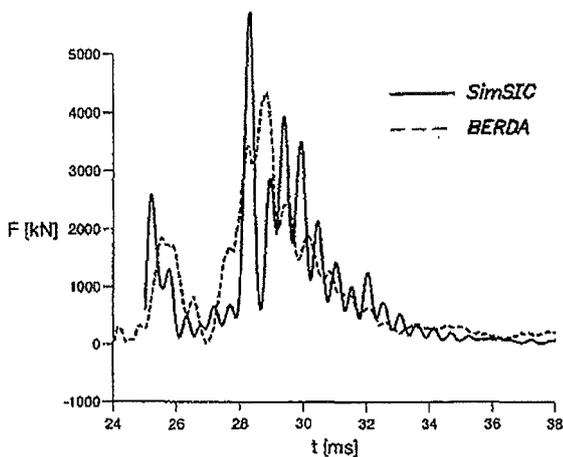


Fig. 10: Calculated and measured forces for BERDA test 10 (velocity 121 m/s, steel structures)

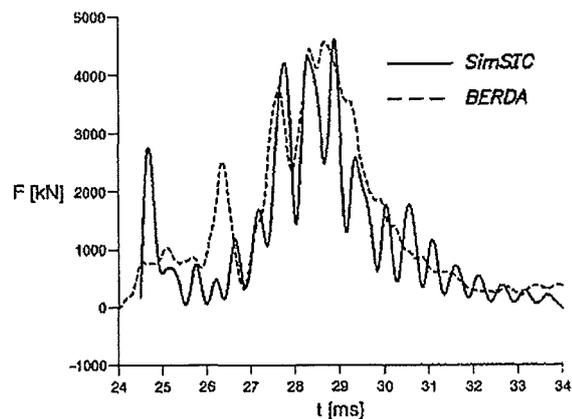


Fig. 11: Calculated and measured forces for BERDA test 11 (velocity 130 m/s, brass structures)

5. Model experiments BERDA II simulating the liquid slug acceleration against the upper vessel head

A series of model experiments BERDA II has been planned to investigate the dynamic behaviour of the core support plate and the core barrel as well as the resulting upward acceleration of the molten core material.

After having developed the test concept, now the design of the test facility is almost done, fig. 12.

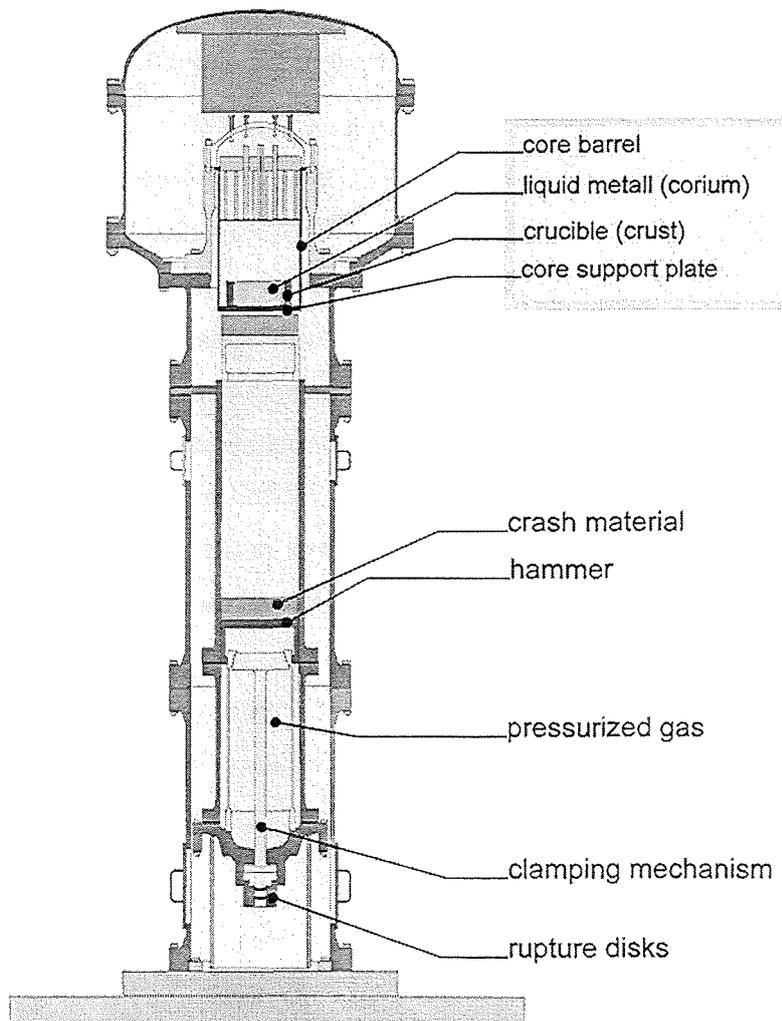


Fig. 12: Model Experiment BERDA II

The crash-material that influences the force and duration of the hammer impact on the core support plate, has been selected. The core support plate, made of an magnesium-aluminium alloy (restriction of weight), and the hammer are already manufactured. The material of the core barrel will be copper.

The measurement techniques are selected. It will be possible, even without direct measurement of the slug velocity, to detect dispersion effects that reduces the slug velocity.

The tests are scheduled to begin in 1998.

6. Analysis of the liquid slug acceleration considering dispersion effects

For the BERDA II experiments some pre-calculations regarding an expected dispersion effect of the accelerated liquid metal have been done. A fluid dynamic model based on a boundary element technique has been used. For the calculations the liquid metal was modelled cylindrically as given by the experimental set-up (fig. 13).

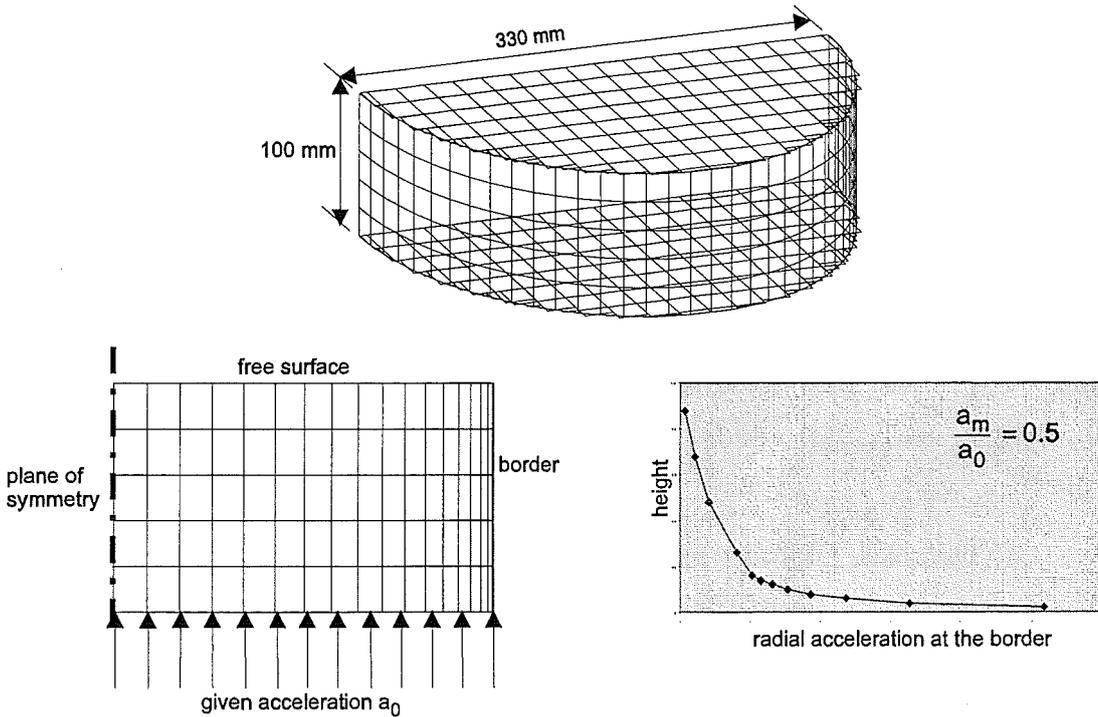


Fig. 13: Calculation with SING, radial dispersion of liquid metal

As boundary conditions an upward acceleration a_0 was given at the bottom and a free surface was assumed with the pressure set to zero at the top. At the border the pressure was also set to zero, simulating the failure of the surrounding crust of the corium.

The calculations showed that the resulting mean acceleration a_m of the liquid metal in upward direction is only half the acceleration a_0 introduced at the bottom. Variations of the geometry of the liquid metal showed that the mean acceleration of the liquid decreases if the geometry becomes more conical with a smaller diameter at the bottom and a larger diameter at the free surface.

32.21.07 Analysen zum Containmentverhalten

I. Spaltproduktausbreitung vom Primärsystem an die Umgebung bei einem schweren Unfall im EPR

(R. Frutos, R.G. Gido, G. Henneges, P. Schmuck, INR)

1. Einleitung

Die neue Fassung des Atomgesetzes für zukünftige Kernkraftwerke verlangt, „... daß auch Ereignisse, deren Eintritt durch zu treffende Vorsorge gegen Schäden praktisch ausgeschlossen ist, einschneidende Massnahmen zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlen außerhalb des abgeschlossenen Geländes der Anlagen nicht erforderlich machen würden, ...“. Dieses Gesetz soll ein Höchstmaß an Sicherheit für zukünftige Kernkraftwerke garantieren, siehe z.B. /1/.

Daher darf bei allen Störfallereignissen und Unfällen in einem Reaktor die Freisetzung von beim Betrieb entstandenen radioaktiven Spaltprodukten und Aktiniden vorgegebene Grenzwerte nicht übersteigen. Dies gilt sowohl für Ereignisse, die von außerhalb als auch für solche, die von innerhalb der Anlage ausgehen. Die Unfallfolgen bleiben daher im wesentlichen auf die Reaktoranlage beschränkt. Außerhalb der Anlage müssen Evakuierungen und Umsiedlungen nicht mehr in Erwägung gezogen werden.

Der EPR soll allen Anforderungen des Atomgesetzes genügen. Im Rahmen der Zusammenarbeit FZK/EVU/Siemens wurde FZK u.a. die detaillierte Untersuchung von Kernschmelzunfällen im EPR übertragen. Diese Arbeiten sind deshalb sehr wichtig, weil während des Unfallablaufs ein größerer Teil der im Brennstoff vorhandenen Radionuklide freigesetzt wird und sich durch das Reaktorsystem mehr oder weniger frei bewegen kann. Das gesamte Reaktorsystem und seine Komponenten müssen deshalb detailliert dargestellt werden, um alle Freisetzungs- und Transport-Vorgänge adäquat zu

erfassen. Eine solche Modellierung ist wegen der großen Komplexität nur mit Rechenprogrammen möglich.

Im vorliegenden Beitrag wollen wir auf die Berechnung des sogenannten radiologischen Quellterms näher eingehen, dessen Kenntnis nötig ist, um die vom Gesetzgeber angesprochene "schädliche Wirkung ionisierender Strahlung" außerhalb der Reaktoranlage zu beurteilen. Unter "radiologischem Quellterm" wollen wir dabei die bei dem Unfall mögliche Freisetzung von Radionukliden aus der Anlage (meist aus dem Containment) in die Umgebung verstehen.

2. Simulation von Kernschmelz-Unfällen

Die Simulation der komplexen physikalischen und chemischen Vorgänge während des Unfallablaufs wird mit Hilfe von großen Computerprogrammen durchgeführt. Die darin verwendeten Rechenmodelle wurden anhand vieler Experimente überprüft. Die Berechnung der Thermohydraulik in den verschiedenen Untersystemen (Primärkreis, Sekundärsystem, Containment) ist das vorrangige Ziel der meisten existierenden Programme, da man in der frühen Unfallphase zunächst die schnell einsetzenden, transienten Massenströme des flüssigen und verdampften Kühlmittels in und aus den defekten Systemen kennen muß. In diesem Artikel wollen wir uns jedoch weniger mit den thermohydraulischen Aspekten der Unfallsimulation auseinandersetzen. Wir wollen vielmehr fragen, was mit den Radionukliden während des Unfallablaufs geschieht.

Für diese Aufgaben werden am FZK die Computerprogramme MELCOR /2/ und CONTAIN /3/ verwendet, die am SANDIA National Laboratory (USA) während des letzten Jahrzehnts entwickelt wurden. MELCOR eignet sich dabei gut zur Verfolgung der Vorgänge im Primärsystem, während CONTAIN auf die physikalischen und chemischen Prozesse im Containment spezialisiert ist.

Kernschmelzunfälle in Druckwasserreaktoren werden durch nicht ausreichende Kühlung des Kerns verursacht, wobei es zunächst zur Aufheizung des Wassers im Kern kommt und dieser durch Verdampfung des Kühlmittels schließlich teilweise oder total freigelegt wird. In der Zeitskala von Stunden heizt sich der Kern durch die Nachzerfallswärme und andere exotherme Vorgänge (z.B. Hüllrohroxidation) auf und schmilzt nieder. Schließlich wird sich das heiße geschmolzene Kernmaterial am Boden des Reaktordruckbehälters sammeln, diesen durchschmelzen, und nach und nach in die Reaktorgrube, die zu den Containmenträumen zählt, fallen. Dieser Unfallablauf ist allerdings nur möglich, wenn nach dem einleitenden Unfallereignis die mehrfach vorhandenen Notkühlsysteme ausfallen.

Im folgenden wollen wir an einem speziellen Unfall das oben Gesagte deutlicher machen. Als einleitendes Unfallereignis nehmen wir den Bruch einer großen Leitung im Primärkreis des EPR an. Es wird ein vollständiger Abriß der Surgeline postuliert (die Surgeline verbindet einen heißen Strang der Hauptkühlmittelleitung mit dem Druckhalter). Ferner postulieren wir, daß alle aktiven Notkühlsysteme ausfallen, was ebenfalls eine hypothetische Annahme darstellt. Nur die passiv arbeitenden Druckspeicher (Akkumulatoren) werden Wasser in den Kern einspeisen. Diesen Unfallablauf werden wir im folgenden als LBLOCA bezeichnen.

2.1 LBLOCA Verlauf in der In-Vessel Phase

Der LBLOCA Unfall im Primärsystem wird gemäß MELCOR Rechnungen folgendermaßen ablaufen: Zum Zeitpunkt $t=0$ sec entsteht ein Leck von der Größe 962 cm^2 an der Verbindung heißer Strang/Surgeline.

Dann erfolgt zunächst die Schnellabschaltung (Scram) des Reaktors durch Einfahren der Regelstäbe. Das heiße Wasser aus dem Primärsystem wird über das Leck sehr rasch in das Containment ausgeblasen. Es kommt zur Druckentlastung des Primärsystems. Der anfängliche Druck von 155 bar sinkt sehr schnell auf Sättigungsniveau und fällt sodann rasch weiter ab. Die

Akkumulatoren, die bei Unterschreitung des Drucks von 45 bar im Primärsystem ansprechen, speisen daher schon nach 75 s Wasser in den Kern ein. Bald danach sind die Akkumulatoren geleert und die Wasserzufuhr versiegt. Bei niedrigem Druck siedet dann der Kern langsam aus. Sobald er nicht mehr vollständig mit Wasser bedeckt ist, werden die Brennstäbe sich stark erhitzen, da der die Kühlkanäle durchströmende Dampf viel weniger Wärme abführen kann, der Brennstoff aber noch durch die Nachzerfallswärme weiter geheizt wird. Viele komplizierte fluiddynamische und thermische Phänomene spielen jetzt eine wichtige Rolle, von denen hier noch die Wasserstoffherzeugung bei der Oxidation der Zirkaloy-Hüllrohre durch Wasserdampf erwähnt werden soll. Durch die zusätzliche Wärmeentwicklung bei der exothermen Oxidation wird das Kernschmelzen wesentlich beschleunigt.

Sobald der Brennstoff eine Temperatur von etwa 2000 K überschreitet werden Spaltprodukte in größerem Maßstab zunächst in den Spalt zwischen Brennstoff-Pellet und Hüllrohr freigesetzt, zuerst die leicht flüchtigen (z.B. Xe, Kr, Cs, I, Te), und erst bei höheren Temperaturen die schwerflüchtigen (z.B. Ba, Sr, Ru). Sie verbleiben zunächst im Spalt und können erst nach dem Versagen der Hüllrohre in die Kühlkanäle austreten. Das erste Versagen der Hüllrohre wird 1210s nach Unfallbeginn erwartet. Beim LBLOCA befindet sich dann nur mehr teilweise Wasser im Kern und die Spaltprodukte können direkt in die Dampfatosphäre des Primärkreises eintreten. Abgesehen von den Spaltedelgasen werden die anderen Spaltprodukte meistens in Form von Aerosolen durch das Primärsystem transportiert, bis sie zur Leckstelle des Primärsystems kommen und in das Containment ausströmen. Einige werden sich unterwegs an Komponenten des Primärsystem anlagern. Andere (wie z.B. die Spaltedelgase) werden nicht kondensieren und sich an keinen chemischen Reaktionen beteiligen. Sie werden daher, mit den vorhandenen Dämpfen vermischt, praktisch zu 100 Prozent in das Containment transportiert werden. Wenn das Kernmaterial aufschmilzt wird schließlich der Kern seine Integrität verlieren. Zuerst wird das Steuerstabmaterial und sodann das Hüllrohrmaterial beweglich. Danach schmilzt ein größerer Teil des Brennstoffs, und der gesamte Kern sackt im Zeitraum von einigen tausend Sekun-

den auf die Kerntrageplatte zusammen. Nach dem Verlust der Tragfähigkeit dieser Struktur fällt dann das Kernmaterial auf den Reaktortankboden. Das thermische Versagen des Reaktordruckbehälters wird 4795 sec nach Unfallbeginn erwartet.

Die wichtigsten Zeitpunkte des Unfallablaufs im Primärsystem sind in Tab. 1 nochmals aufgelistet:

Bruch der Sargeline, Leck im heißen Strang	0.0 s
Reaktor Schnellabschaltung	2.0 s
Beginn sekundärseitiges Abfahren	4.0 s
Beginn der Akku-Einspeisung	76 s
Ende der Akku-Einspeisung	106 s
Bersten von hoch belasteten Hüllrohren	1210 s
Bersten von niedrig belasteten Hüllrohren	1296 s
Verlust der Kern-Integrität	1556 s
Kern trocken (kein Wasser im aktiven Kern)	2469 s
Versagen der Kerntrageplatte	3220 s
Versagen des Druckbehälters	4795 s

Tab. 1 MELCOR Ergebnis: zeitlicher Ablauf eines LBLOCA im EPR

Die wichtigsten Transport- und Ablagerungs-Prozesse werden von MELCOR modelliert. Damit ist man in der Lage nach dem heutigen Wissenstand die bis zum Containment vordringenden Spaltprodukte und Aktiniden rechnerisch zu verfolgen. Mit MELCOR werden somit die Materialströme von Wasser, Dampf, Wasserstoff und diejenigen der Radionuklide (bis zum Versagen des Reaktordruckbehälters) an der Bruchstelle ermittelt und an das Programm CONTAIN in geeigneter Form weitergeben (siehe nächster Abschnitt).

2.2 LBLOCA Verlauf in der Ex-Vessel Phase

Hier geht es im wesentlichen um den Ablauf des Unfalls im Containment. Es interessieren das Verhalten und der Transport der Radionuklide in den Containmenträumen und deren Freisetzung in die Umgebung.

Der integrale Störfall-Code CONTAIN wird seit mehreren Jahren im FZK zur Analyse von schweren, hypothetischen Unfällen an Kernreaktoren eingesetzt. Durch Vergleich mit Rechenprogrammen, die bei Siemens und GRS verwendet werden und durch Teilnahme an internationalen Benchmarks (zuletzt ISP37 /4/) konnten die Ergebnisse verifiziert und abgesichert werden. CONTAIN erlaubt die mechanistische Behandlung der Thermohydraulik, des Aerosolverhaltens und des Spaltproduktverhaltens im Reaktorcontainment.

Für den im vorigen Abschnitt diskutierten Störfall (LBLOCA durch Surgelinebruch) übernimmt CONTAIN Daten, welche aus Siemens Berichten, sowie aus MELCOR- und KORIGEN-Rechnungen stammen.

Die Modellierung des EPR wurde mit Siemens abgestimmt, um einen späteren Vergleich mit deren Rechnungen zu erleichtern. Die Abb. 1a und 1b zeigen die zugrunde liegende EPR Geometrie und die gewählte Nodalisierung. Die Gasströmungen zwischen den Zellen 1 bis 5 werden von CONTAIN aus der Druckverlustgleichung berechnet, welche die Trägheit der Gasmasse, den Strömungswiderstand und den geodätischen Höhenunterschied entlang des Strömungsweges berücksichtigt. Die Gasströme (Leckagen) von den Zellen 4 und 5 nach Zelle 6 wurden mit konstant 1.0 Vol.%/Tag eingegeben. Dies entspricht dem Auslegungswert für den maximal zulässigen Druck von 7.5 bar. Es wurde weiterhin angenommen, daß eine Ringspaltabsaugung von 500m³/h stattfindet. Die abgesaugte kontaminierte Luft wird über einen Filter mit 99% Rückhaltung für Aerosole und 0 % für Edelgase an die Umgebung freigesetzt. Diese konservativen Annahmen entsprechen den in /7/ gemachten.

Wasser und kondensierter Wasserdampf fließen direkt nach Zelle 2 (IRWST: In-Containment Refueling Water Storage Tank) und von dort, wenn der Wasserstand 4.4m überschreitet, in die Zelle 1 (Ausbreitungsraum für die Kernschmelze mit Corefänger).

Informationen über Zellgeometrie (Volumen, Höhen, Verbindungen, Querschnitte,...), Art der Strukturen (Stahl oder Beton), deren Dicken, Oberflächen und Orientierung, Gas- und Wassertemperaturen, sowie die Drücke in den Zellen zu Beginn des Störfalls basieren auf Siemensdaten. Die im niedergeschmolzenen Kern gespeicherte Wärme wurde ebenfalls von Siemens übernommen. Die Aerosolquelle, die durch Wechselwirkung des geschmolzenen Kerns mit der Opferschicht des Corefängers entsteht, wurde von Siemens mit den MELCOR-Daten berechnet und in den CONTAIN Rechnungen als zusätzliche Aerosolquelle verwendet.

Die Nachzerfallsleistung wurde auf die Zellen 1 und 2 im Verhältnis 0.78 zu 0.20 verteilt. Die restlichen 2% werden durch die Freisetzung der Edelgase in die Zelle 5 eingebracht.

Aus den MELCOR Rechnungen wurden die folgenden Größen als Eingabe für die CONTAIN Rechnung verwendet:

- Wasserdampffreisetzung und spezifische Enthalpie
- Wasserstofffreisetzung und spezifische Enthalpie
- Integrale Edelgasfreisetzung
- Integrale Aerosolmassen für 4 Gruppen mit ähnlichen chemischen und physikalischen Eigenschaften

Aus Abb. 2 läßt sich der von CONTAIN berechnete Druckaufbau im Reaktorgebäude ablesen. Er steigt in den ersten 12h bis zu 5.1bar an. Spätestens dann soll die Containmentkühlung, die ein Absaugen des Sumpfwassers, externe Kühlung und Rückführung als Containmentspray vorsieht, verfügbar sein und eingeschaltet werden, um eine Überlastung des Containments durch zu hohen Druck zu vermeiden. Die Auswirkung dieses Systems auf die

thermohydraulischen Größen und das Auswaschen von luftgetragenen Aerosolen im weiteren Zeitverlauf sollen demnächst detailliert untersucht werden.

Die CONTAIN Rechnungen wurden mit stabilen Nukliden (Halbwertszeit unendlich) durchgeführt. Außerdem wurden die Aerosole als nicht hygroskopisch betrachtet, was sehr konservativ ist. In der Abb. 3 sind beispielhaft die luftgetragenen Aerosolmassen in der Reaktorkuppel bis 12h nach Unfallbeginn dargestellt. Wie weiter oben beschrieben, gelangt ein geringer Teil mit der angenommenen Leckrate von 1 Vol.%/Tag in den Ringspalt. Mit diesen von CONTAIN berechneten Aerosolmassen wurden nun entsprechend der Ringspaltabsaugung ($500\text{m}^3/\text{h}$) und den angenommenen Filterwirksamkeiten die an die Umgebung freigesetzten Aerosol- bzw. Edelgasmassen abgeleitet.

Danach wurde mit dem Rechenprogramm KORIGEN /5/ das Nuklidinventar des EPR als Funktion der Zeit (alle 60min) ab Störfallbeginn analysiert. Aus diesen Rechnungen lassen sich die Massenverhältnisse der Spaltnuklide ableiten. Aus dem Verhältnis der an die Umgebung freigesetzten Aerosole zum primären Quellterm und den zeitabhängigen KORIGEN-Verhältnissen für die wichtigsten radioaktiven Isotope ergeben sich nuklidabhängigen Aktivitäten. Sie sind in den Abb. 4 und 5 für die Edelgase und die wichtigsten Spaltprodukte gezeigt.

Sie könnten als Eingabe für das Programmsystem COSYMA /6/ zur probabilistischen Abschätzung der Unfallfolgen verwendet werden. Diese Rechnungen wurden nicht durchgeführt, da die mit den zuvor beschriebenen Randbedingungen abgeleiteten Spaltproduktaktivitäten (der radioaktive Quellterm an die Umgebung) sehr nahe bei bzw. unter den in /7/ beschriebenen Werten liegen. Diese garantieren laut /8/, daß die Bestimmungen des neuen Artikelgesetzes erfüllt werden.

3. Schlußfolgerungen

Mit den im FZK verfügbaren Rechenprogrammen lassen sich vollständige Containment- und Unfallfolgenanalysen durchführen, vorausgesetzt die Daten zum Aufbau des Kernreaktors und zur Einleitungsphase des Störfalls sind vorhanden.

Für einen postulierten LBLOCA (Large Break Loss of Coolant Accident) im EPR wurden erstmals im FZK die ersten 12 Stunden durchgerechnet und der radioaktive Quellterm an die Umgebung bestimmt. Mit den beschriebenen Annahmen bzgl. Leckrate in den Ringspalt (1 Vol.%/Tag), Ringspaltabsaugung mit 500m³/Stunde und 99% Filtereffizienz ergeben sich so niedrige Werte für den radioaktiven Quellterm, daß keine Evakuierungs- und Umsiedlungsmaßnahmen in Betracht gezogen werden müssen.

Die Autoren danken den Herren Eyink, Hein und Plank von Siemens/KWU für die Überlassung der Basisdaten des EPR und ihre konstruktive Mitarbeit bei Fragen zum Verständnis dieser Daten. Herrn Wiese vom FZK/INR danken wir für die Überlassung von KORIGEN-Rechnungen zum EPR.

Literatur

/1/ G. Heusener,
FZK-Nachrichten, Jahrg. 29, 4/97 S. 277ff.

/2/ R.M. Summers et al.,
MELCOR 1.8.3: A Computer Code for Severe Nuclear Reactor Accident
Source Term and Risk Assessment Analyses, NUREG/CR-6119, 1994

/3/ K.K.Murata et al.,
Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Con-
tainment Analysis to be published

/4/ G. Henneges, H. Peter,
The International Standard Problem ISP37; Calculations with CONTAIN 1.12
for VANAM M3, FZKA 5795, 1996

/5/ U. Fischer, H.W. Wiese
Verbesserte konsistente Berechnung des nuklearen Inventars abgebrannter
DWR-Brennstoffe auf der Basis von Zell-Abbrand-Verfahren mit KORIGEN,
KfK 3014, 1983

/6/ COSYMA: A new program package for accident consequence assess-
ment; CEC Brussel, EUR-13028EN, 1991

/7/ EPR Techn. Report TR 94/19, Assessment of EPR Source Term, 1994

/8/ I. Hasemann, J. Ehrhardt,
Probabilistische Unfallfolgeabschätzungen mit COSYMA, Interner FZK
Bericht, 1995

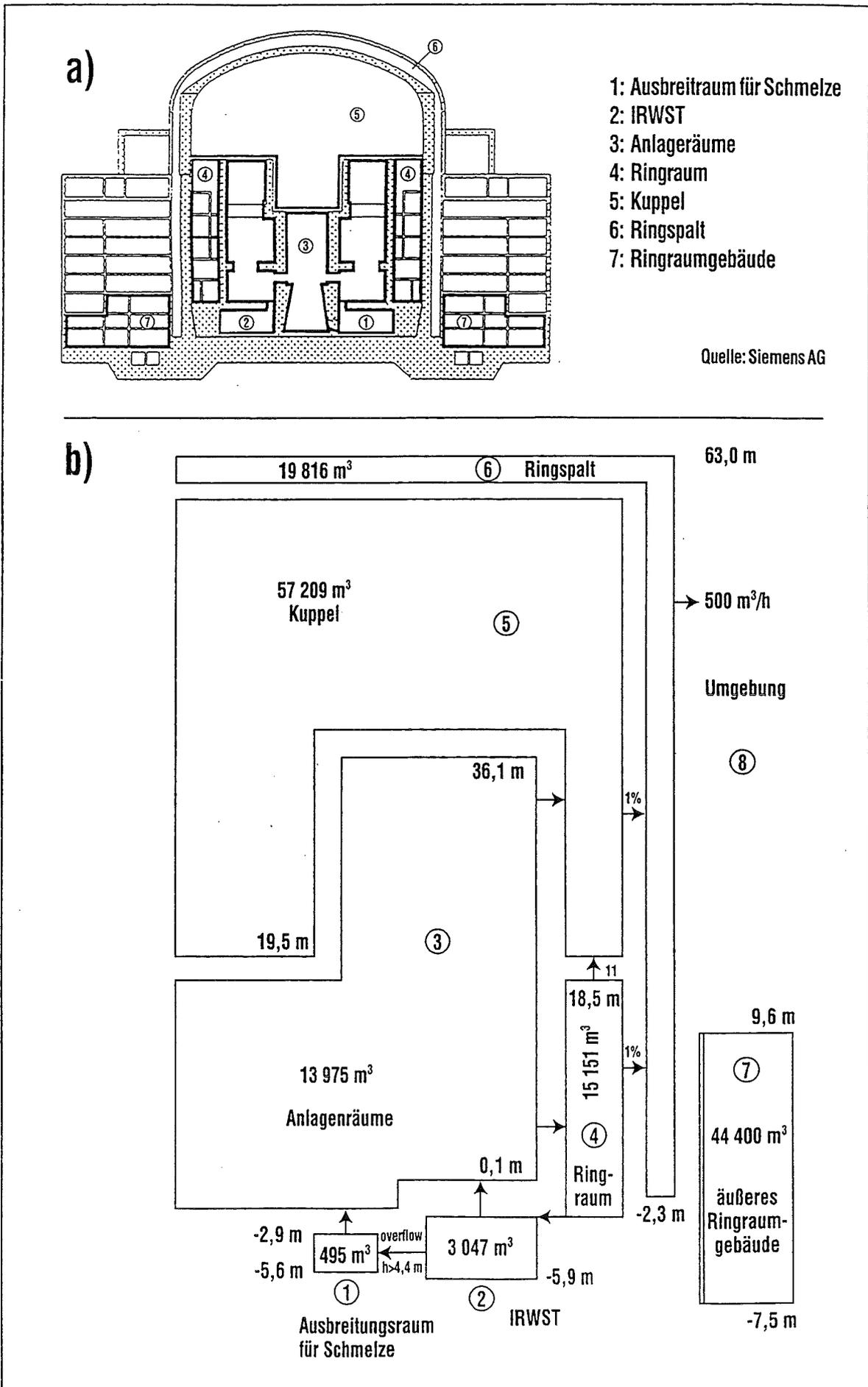


Abb. 1: a) EPR Benchmark: Reaktorgebäude mit Zellnummern
 b) EPR Nodalisierung

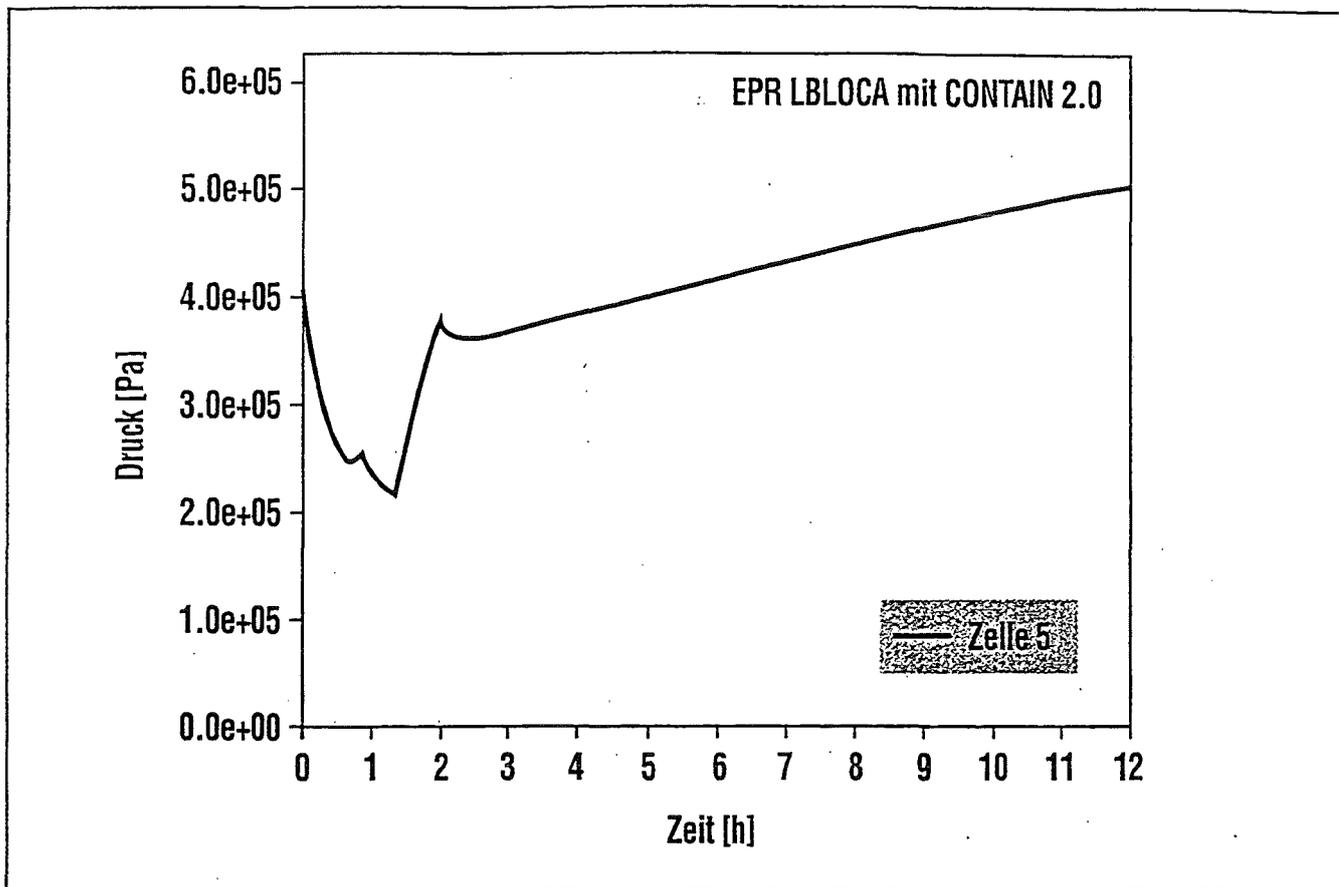


Abb. 2: Druck im Containment (Reaktorkuppel).

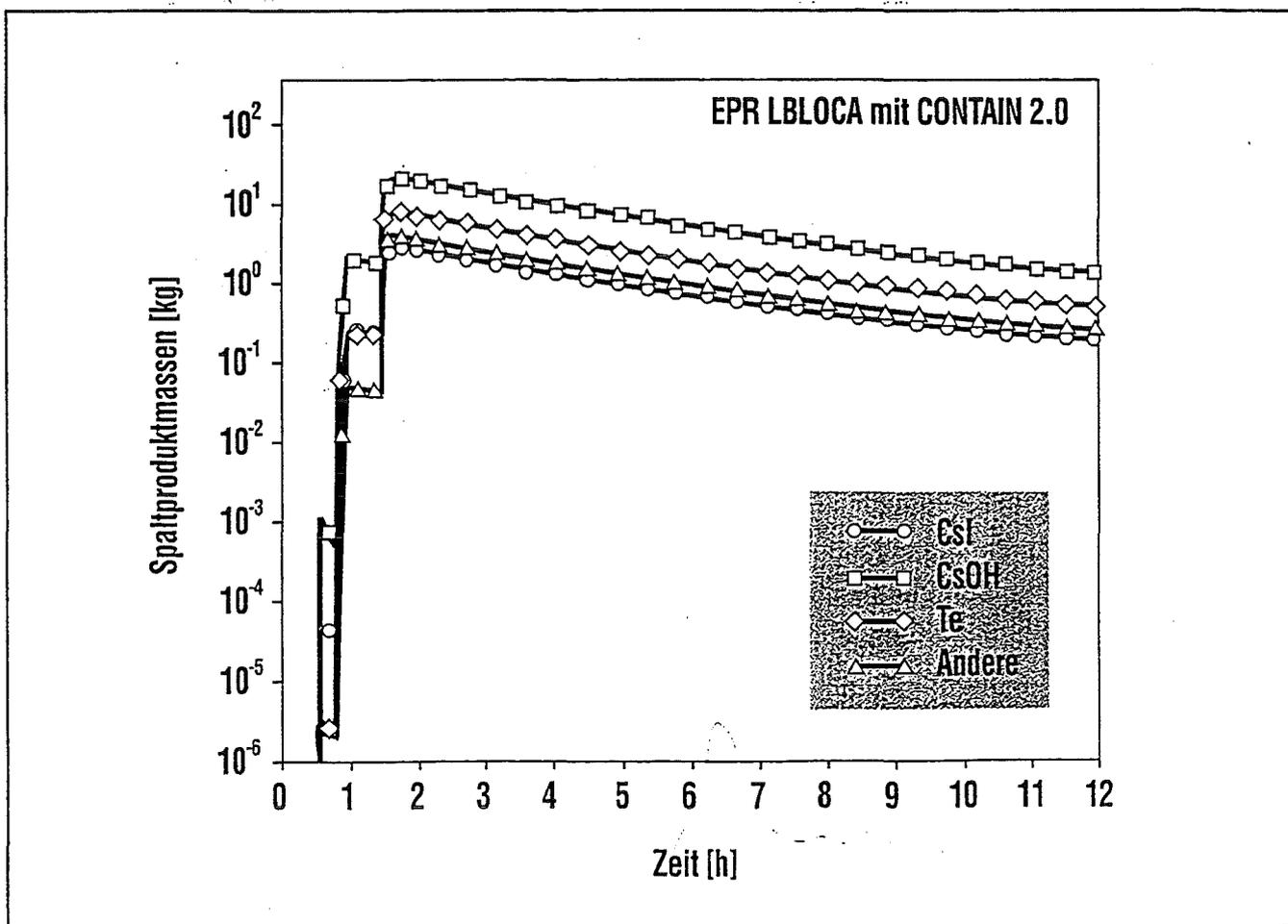


Abb. 3: Luftgetragene Aerosolmassen in der Reaktorkuppel.

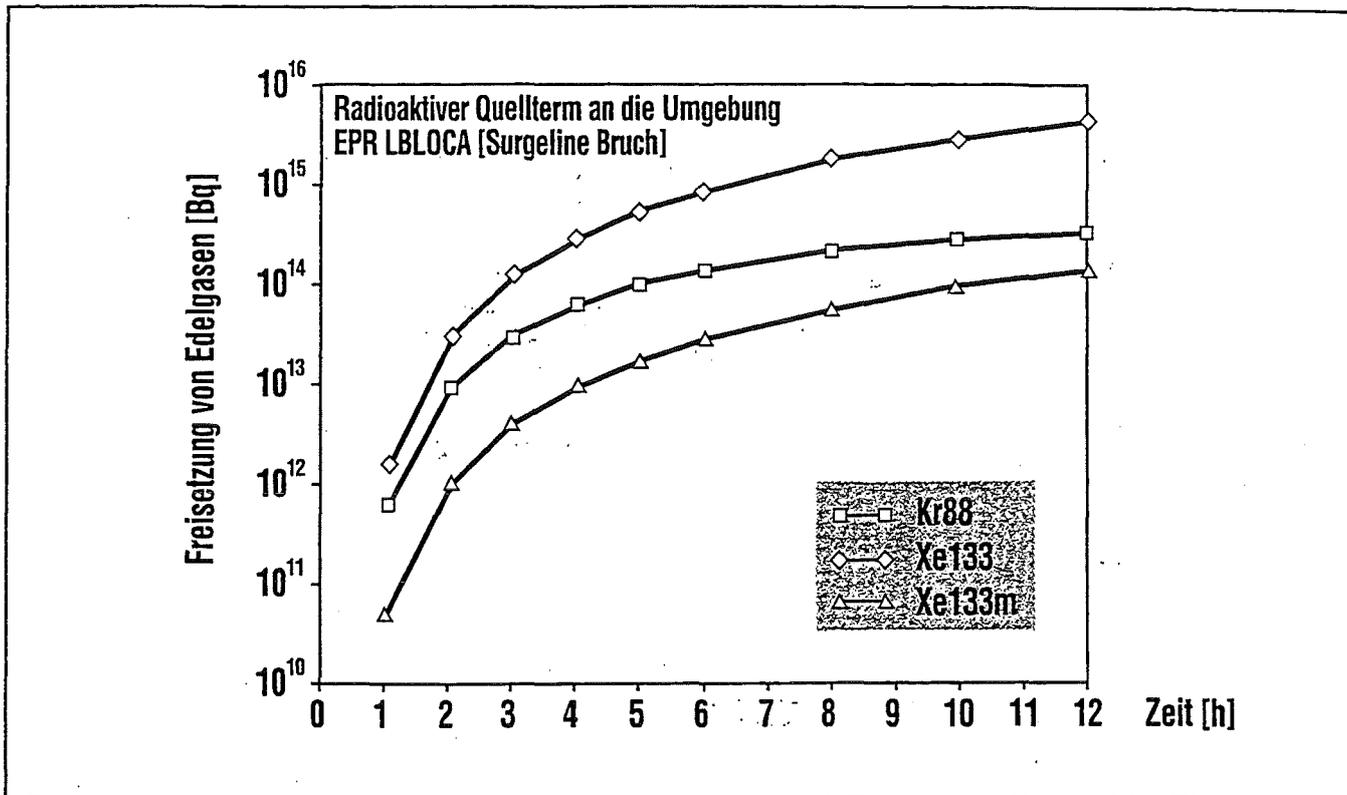


Abb. 4: Quellterm für Edelgase.

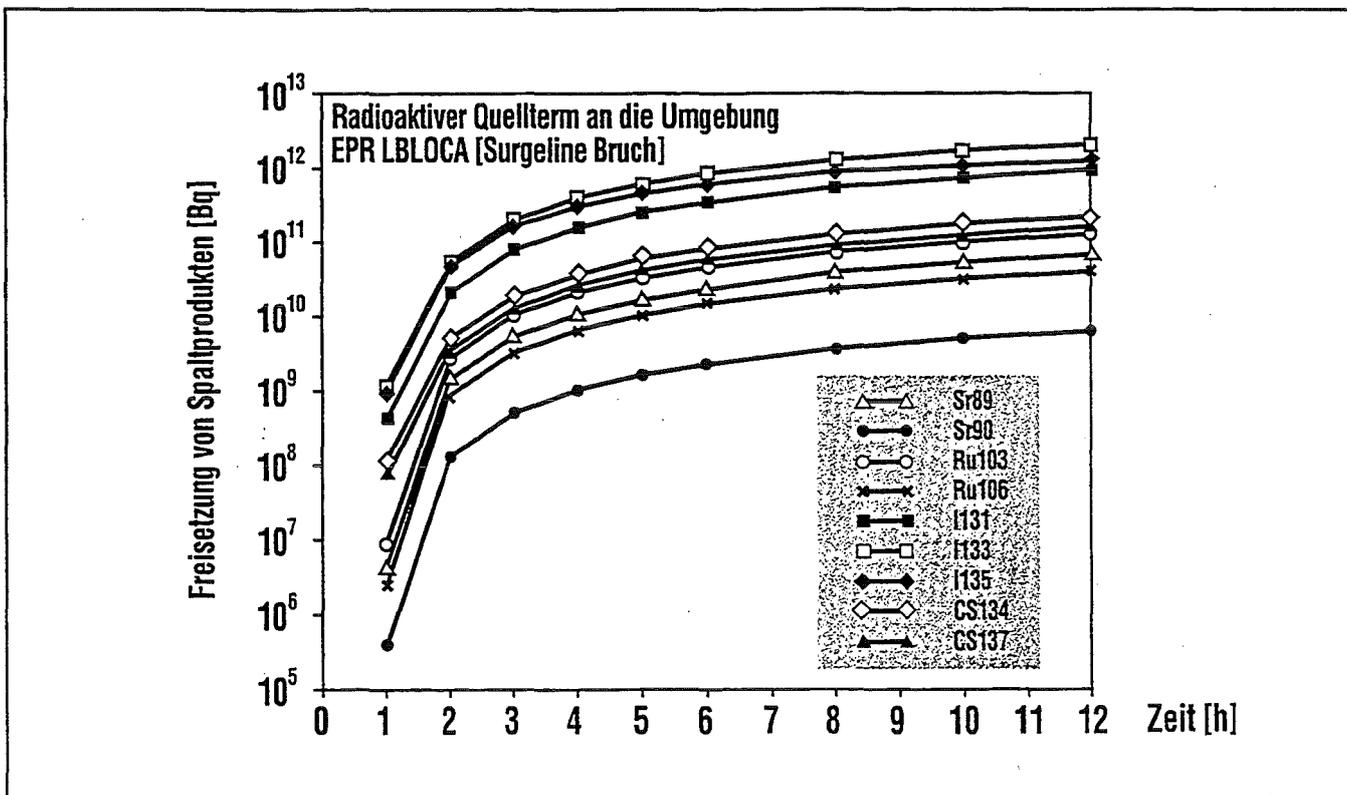


Abb. 5: Quellterm für die wichtigsten Spaltprodukte.

II. Containment Module for the Source Term Estimation Based on Plant Status (STEPS)

The Containment Module Models

(R.G. Gido, G. Hennes, INR)

Abstract

This report describes the Containment Module developed for the **Source Term Estimation based on Plant Status (STEPS)** program. The STEPS program should provide fast, flexible and easily understood software to estimate the probable consequences of an accident at a wide variety of European nuclear power plants. The estimation of the probable consequences may be used to provide guidance regarding the possible need for activation of emergency response systems. In addition to the STEPS Containment Module, the STEPS program includes modules to calculate the accident response of the nuclear power plant fuel, the nuclear power plant primary system and the possible consequences of emissions from the plant with the RODOS (**Real-time On-line DecisiOn System**). This work is performed in the frame of EU contract FIP-CT96-0048.

1. Introduction

The STEPS Containment Module depends on information from the fuel and primary-system module regarding the fission-product (FP) masses released into the containment. With this FP information, the STEPS Containment Module can be used to calculate the FP concentration in the reactor containment. The calculation of the containment concentration includes an accounting for the effects of aerosol depletion by natural processes and sprays. Then, the containment concentration becomes the driving potential for the transfer of the FP mass from the containment to other volumes (for example, the auxiliary building) and the environment. The mass transfer process models include those that could be used to account for volumetric flow, filters, a wet-well pool, etc. As a result, the STEPS Containment Module provides calculated values for the FP mass in the cells and the FP mass released to the environment. The FP masses are readily converted to nuclide activity in the cells or environment.¹

¹ Another approach that could be taken to describe the performance of a nuclear power plant containment would be to perform numerous calculations with a more complete computer program as was done in Reference Henn98.

The STEPS Containment Module described in this report can be used for a wide variety of nuclear power plants including the following:

- PWR (French Dry 900 MW_t & 1300 MW_t), German PWRs, French/German EPR (4250 MW_t)
- BWR (US Type Mark I, II, III and closely related European BWRs, German BWRs
- VVER 213 & 440

However, plant containment modules for specific nuclear power plants must await review and acceptance of the containment module approach described in this report. As a result, the emphasis of this report is to describe the procedures and modeling capability for review and comment. After the review and response to the comments, improvements of the models can be made and models can be added if needed. Then, appropriate specific plant features will be matched with the modeling capabilities of this report to create plant containment modules. The following discussion recognises several references of previous work that we used:

Reference Dub97 provided an example of an appropriate format that we used for this report. Dub97 described the containment module for the VVER 440/213 type of PWR used in the Czech Republic, the Slovak Republic and Hungary. The containment module in Reference Dub97 is based on the Institute de Protection et de Suréte Nucleaire (IPSN) PERSAN² approach for assessing the release in a nuclear power plant accident scenario. Also, the Dub97 approaches for the modeling of dry deposition and wet deposition were included as decontamination factor options in this report.

Other useful information about the PERSAN approach was provided by reference Vam97. For example, it described ideas for an **Expanded SESAME Concept** and compiled a very helpful list of accident pathways consistent with the Reference Technical Manual (RTM) approach described in Reference McK95.

Also, Chau97 provided a useful description of the French 900MW_t and 1300MW_t nuclear power plant containment characteristics. In addition, Chau97 provided other general information regarding features that are appropriate for a containment module.

The series of reports Pow93, Pow96 and Pow97 addressing the removal of aerosols were found to be most useful. This is because they provide relatively simple equations

² PERSAN is a French acronym for a computer program for assessing the release in a nuclear power plant accident scenario.

for the estimation of aerosol removal for a wide range of nuclear power plants and for various aspects of accident scenarios. In particular, we used (1) the Pow93 approach for calculation of aerosol removal by sprays, (2) the Pow96 approach for the calculation of decontamination factors by natural process, and (3) the Pow97 approach for the calculation of aerosol removal by boiling water reactor suppression pools.

2. Scope and Applicability

The STEPS Containment Module software is part of the suite of STEPS software tools available to experts working in the Emergency Centres of the European Safety Authorities. These software tools could be used in the event of a nuclear power plant accident that calls for activation of the national emergency response system. The STEPS Containment Module can be used for assessment of the radioactive releases into the environment in case of an accident. To do this, the specialist uses information from the power plant unit where the accident occurred and calculated results obtained using other STEPS software tools, for example the Primary System Module. Then, the STEPS Containment Module could be activated and its results (output) could be used as input for the RODOS atmospheric dispersal and radiological consequences calculations. These calculated results could then be used in the evaluation of possible countermeasures that might be adopted to minimize off-site-consequences of the accident.

The STEPS Containment Module as suggested here, can be used to calculate the fission products in containment volumes and the fission products released to the environment. The range of accidents that can be treated is large, but does not include station black out (SBO) scenarios. Also, steam generator tube rupture accidents are not dealt with. The STEPS Containment Module can be used to calculate the fission product deposition that already has taken place (that is, post-accident) and that might occur based on current plant status (that is, possible results).

To facilitate the calculation of consequences of possible nuclear power plant accidents, References Vam97 and McK95 use accident phases to characterize the accident progression. For example, Reference Vam97 relates the accident phase to the core/clad temperature $T_c(^{\circ}\text{C})$ as follows:

IF $T_c < 316^{\circ}\text{C}$ THEN Core Condition is NORMAL
IF $316^{\circ}\text{C} < T_c \leq 1250^{\circ}\text{C}$ THEN Core Condition is GAP RELEASE

IF $1250^{\circ}\text{C} < T_c \leq 1650^{\circ}\text{C}$ THEN Core Condition is IN-VESSEL CORE DAMAGE
IF $1650^{\circ}\text{C} < T_c$ THEN Core Condition is VESSEL MELT THROUGH

In a similar manner the options described below include certain assumptions regarding the accident phases that are appropriate for the option. In particular, the Reference Pow96 procedure for the accounting of aerosol removal by natural processes utilizes the assumption that the accident phases involved are as follows:

Gap Release Phase

In-vessel Release Phase

Ex-vessel Release Phase

Late In-vessel Release Phase

Clearly, these release phases follow the pattern described in References Vam97 and McK95. In addition, it should be noted that some of the options below have operating limitations. For example, the use of some of the options only is appropriate after most of the fission product mass has been released to the containment. The above discussion demonstrates that the use of the STEPS Containment Module requires that the model option initial requirements and limitations be understood when the options are used in a representation of a particular plant.

3. Input and Output Data (Results)

The following Table 3.1 describes the general information that might be needed to use the STEPS Containment Module in its current version. Of course, the specific input needed depends on the options incorporated into a specific plant model. Also, the addition of modification of the options could change or increase the input required. In addition, Table 3.2 is input described in Reference Dub97 that might be considered for future versions. It is noted that Reference Dub97 discusses two ways of data input for the STEPS Containment Module depending on whether the calculation is done before or after an accident. Such considerations must be postponed until this containment module has been finalized and specific plant representations have been completed.

Finally there are input variables for calculation control:

Calculation start time; Calculation end time; Calculation time step; Output time step; Selection of control volumes and flow processes.

The primary parameter calculated by the STEPS Containment Modules is the mass distribution of fission product volatility groups (FG). For example, the FG mass that has leaked to the environment. The STEPS Containment Module has the capability to follow seven FG. The FGs are characterized by their number and names as follows:

FG1: Csl (Csl, Rbl)

FG2: CsOH (CsOH, RbOH)

FG3: Te

FG4: Others (Sr,Zr,Nb,Mo,Tc,Ru,Rh,Sb,Ba,La,Ce,Pr,Nd mainly oxides)

FG5: Nobles (Kr, Xe)

FG6: Molecular iodine (I₂)

FG7: Organic iodine (CH₃I)

FG mass is calculated because accident analysis results from the fuel and primary system modules are often given in terms of FG. And, FGs are used instead of individual nuclides because fewer parameters are needed. It is noted that other references (for example Vam97) discuss the calculation of parameters such as the activity of specific nuclides. However, the STEPS Containment Module equations presented here have the same format as that used to calculate other parameters, including, nuclide activity, nuclide mass, nuclide concentration, FP element mass or FG mass.

The equations are identical in general form because the nuclide activity, nuclide mass, element mass and FG mass are related to each other by simple factors. The factors that relate the nuclide activity, nuclide mass and element mass are easily obtained from a code like KORIGIN (Reference Wie83). KORIGIN calculates the nuclear inventory of a specific reactor at a certain burn up level. The factors relating the STEPS Containment Module calculated FG mass to nuclide activity are provided by the STEPS Fuel and Primary System Modules.

Table 3.1 General Input Data For Current Version

Input data	Comment
Type of Reactor	PWR, BWR, VVER, etc.
Reactor Design Power	Should be in MW _t
Mass flow rates released to the containment for the fission product volatility groups	Has to come from the STEPS Primary System Module
Containment volume	The is CV1
Volumes of other CV	User input
Description of mass transfer flow paths between control volumes	Depends on the mass transfer option
Spray system water flux	Units are H ₂ O-cm ³ /cm ² -s
Ratio of unsprayed / sprayed volume	A value of 1.0 means: 50% has no spray
Spray fall height	Should be in cm
Time when sprays start	User input or measurement
Time when sprays end	User input or measurement
Quencher (X- or T-type)	User input
Depth of quencher under water level	Should be in cm
Filter retention for aerosols other than iodine species	
Filter retention for CsI	
Filter retention for I ₂	
Filter retention for CH ₃ I	

Table 3.2 Input Data For Possible Future Versions

Input data	Comments
Accident category	
Volume activity at the stack	Measurement
Dose rate in containment	Measurement
Use of the special aerosol removal materials	Information about system usage
Delay between reactor shutdown and core uncover	Calculated in Primary System Module
Evolution of pressure in containment	Measurement
Filtered depressurization (time as start and end, flow rate, filter efficiency)	Hypothesis about system availability and accident procedures application

As a result, the FG mass is easily converted to nuclide activity for dose analysis or potential consequence analysis. The following are the Reference ROD95 nuclides of primary interest - Kr88, Xe133, Xe133m, I131, I132, I133, I135, Rb88 Cs134, Cs137, Te132, Sr89, Sr90, Ru103, Ru106, and Ba106.

4. General Description

The sections that follow discuss the STEPS Containment Module in general. Section 5 (Detailed Model Description) provides more specific information. In the following, modeling parameters are used to characterize the modeling features. However, it is expected that the actual software programming will use different parameters, for example, parameters with indexes.

Control Volume Mass Balance

The STEPS Containment Module described in this report was developed to be similar to that proposed in Vam97, Chau97 and Dub97. In these references and here, the formulations are based on successive examination of barriers and processes provided at the nuclear power plants to prevent release to the environment of FPs that have accidentally been released from the reactor pressure vessel. Examples of the containment structural barriers for a PWR are the containment building and an auxiliary building. Examples of containment structural barriers for a BWR are the dry well, the wet well and an auxiliary building. Examples of processes utilized to control FP release are a spray system or an ice condenser and/or filters. For a BWR there could be a water pool and/or filters.

The primary parameter that we calculate in the STEPS Containment Module is the mass distribution of a FP Volatility Group (FG), including the mass that has leaked to the environmental cell. For each FG, a mass balance equation is applied for each control volume (CV). For example, for CV n the equation has the following form:

$$M_n(t + \Delta t) = M_n(t) + \sum m_n^{\text{in}} * \Delta t - \sum \Delta M_n^{\text{D}} - \sum m_n^{\text{out}} * \Delta t \quad (4.1)$$

where

$M_n(t+\Delta t)$ is the FG mass (kg) in CV n at time $t+\Delta t$ (s).

t is the calculation time (s).

Δt is the calculation time step (s).

$M_n(t)$ is the FG mass (kg) in CV n at time t (s).

m_n^{in} is a mass transfer rate (kg/s) into CV n.

This mass transfer rate could be, for example:

the FG release into the first CV (CV 1) from the STEPS Primary System Module,

the mass transfer to CV n from its upstream cell (CV n-1), or

the mass transfer from the non-environmental cells to the environmental cell.

See also, the below discussion of the parameter m_n^{out} .

ΔM_n^{D} is a change in the FG mass in CV n because of a deposition and/or depletion processes such as, aerosol deposition by natural processes, aerosol removal by a spray system, etc. Note that the effectiveness of the removal process may be different for different FGs.

The aerosol mass removal within a CV is calculated based on a decontamination factor DF. In equation form,

$$DF = \frac{M(t)}{M(t + \Delta t)} \quad \text{so} \quad (4.2)$$

$$\Delta M_n^{\text{D}} = M_n(t) - M_n(t + \Delta t) = M_n(t) \left(1 - \frac{1}{DF} \right)$$

m_n^{out} is a mass transfer rate (kg/s) out of CV n.

This mass transfer could be to the environmental cell CVE or to the downstream CV n+1 (where it becomes an input for the CV n+1). This mass flow rate depends on user input or plant specification. For example, the user may input a value for a leak flow of 1 vol%/day or a engineered safety system flow rate from the CV to the environment through a stack. In addition, it should be noted that the flow could be through a filter, a wet-well pool or an ice condenser that could selectively remove some of the FG mass that is transferred to the CV receiving the flow.

Control Volume (CV) Analysis Procedures

Here we discuss the general procedures followed to apply Equation (4.1) to each CV used in the representation of a plant. There will be the possibility of seven CV composed of six non-environmental CV and the environmental CVE. The discussion will briefly describe the mathematical models used and will specify the Section 5 subsections of this report that describes these models in greater detail. For this discussion, it is assumed that there are

seven Fission Product Volatility Groups (FG). The FG are groups (also called classes in the literature) of fission products that have similar chemical volatility characteristics. It is noted that the MELCOR, CONTAIN and FIPLOC computer codes also use fission product volatility groups. The FG used in this report are described in the above Section.

In the following discussion, the expression <i> is used to designate any of the seven FG and the expression <n> is used to designate any of the six non-environmental CV. The environmental CVE is referred to with the character e.

Flow into CV1: Mass transfer into CV 1 is the FG mass provided by the STEPS Primary System Module. This mass transfer should only go into CV 1. The information must be mass rate (kg/s) as a function of time. A possible parameter that could be used follows: **fig<i>p<k> (kg/s)**. It is the mass transfer rate of the FG <i> mass into CV 1 for release phase <k>. The release phases are the gap release phase (g), the in-vessel release phase (i), the ex-vessel release phase (e), and the late-in-vessel release phase (l). Thus, for example, the mass flow rate for the third FG introduced into the containment during the in-vessel phase would be identified by the variable fig3pi. Because there could be seven FGs and 4 release phases, this parameter could have 28 values.

Flow into a CV other than CV 1: The mass flow into a CV (other than into CV 1) can only come from an upstream CV, which would have a CV number one less than the CV into which the flow is going. As discussed in the above Section the mass flow into CV1 is special because it can only come from the mass released from the STEPS Primary Module. A possible parameter for the flow into a CV is: **fig<i>n<n> - (kg/s)**. It is the mass transfer rate of the FG <i> mass into CV <n> because of the mass-transfer process between CV n and CV n+1. The values of n are limited to 2 through 7. For example, fog2n2 would be the mass flow rate of CsOH out of CV 1 and into CV 2. There could be 7 FGs and 6 flow paths between the 7 cells. This parameter could have 42 values as follows: fig1n2, fig2n2, ..., fig1n3, ..., fig7n7. There could be more than one mass transfer process into a CV. Then, the above variable will have to be modified accordingly.

CV Mass: The CV mass parameters below are first increased by mass flow into the CV. For CV 1, the mass flow would be from the STEPS Primary System Module (PSM). For other CV, the mass flow would come from the CV immediately upstream. For the environmental CVE, the mass flow could come from any of the other CV. It is noted that the CV mass is

first calculated based on incoming mass flow. Then, depletion processes accounting is performed. Finally, the mass concentration is used as the source value for flow out of the cell, which could go to the next downstream cell or the environmental cell (see Section 5). **cmg<i>n<n> - (kg)** is the FG <i> mass in CV <n>. For example, cmg3n1 is the mass of the tellurium FG in CV 1 and cmg5n2 is the mass of the noble gas FG in CV 2. Because there could be six non-environmental cells and seven FGs. This parameter could have 42 values, cmg1n1, cmg2n1, ..., cmg6n1, cmg1n2, ..., cmg7n6. **emg<i> - (kg)** is the FG <i> mass in the environmental CVE. For example, emg6 is the mass of the molecular iodine FG in the environmental CV and emg3 is the mass of the tellurium FG in the environmental cell. Because there could be seven FGs, this parameter could have seven values as follows, emg1, emg2, ..., emg7. It is noted that the environmental cell is special and can receive mass from all other CV.

CV Mass Removal: The CV mass in a non-environmental CV could be reduced by aerosol removal, spray-system aerosol removal, etc. See Section 5.2 (Determination of Decontamination Factors (DF)). A possible parameter that accounts for the removal is: **cdg<i>n<n> - (kg)**. It is the FG <i> mass removed in CV <n>. For example, cdg2n1 could be the removal of CsOH mass in CV 1 by aerosol deposition. Because there could be six non-environmental cells and 7 FGs, this parameter could have 42 values as follows, cdg1n1, cdg2n1, ..., cdg1n2, ..., cdg7n6. There could be more than one mass removal process in a CV. Therefore, the above variable would have to be modified accordingly. There is no mass removal in the environmental cell. Because iodine entering CV1 has physical and chemical different forms, one has to model its behaviour in different ways. These differences in behaviour apply to iodine retention in filters, deposition and repartition, as well as reaction with spray). Also, for organic iodine and noble gases, it is assumed that no natural depletion processes occur.

Flow out of a CV The mass flow out of CV could go to the environmental CVE or to a downstream cell, which would have a CV number increased by 1. Of course, the last CV (number 6) could only have outflow to the environmental cell. **fog<i>n<n> - (kg/s)**. This is the mass flow rate of the FG <i> mass out of CV <n> because of a flow process between CV n and CV n+1. For example, fog2n1 could be the mass flow rate of CsOH out of CV 1 as a result of a leakage of 1 vol%/day. Because there could be 7 FGs and six flow paths between the seven cells, this parameter could have 42 values as follows: fog1n1,

$fog_{2n1}, \dots, fog_{7n6}$. There could be more than one mass transfer process out of a CV. Therefore, the above variable would have to be modified accordingly.

Mass Transfer Between CV

The mass flow between two CVs could be controlled, for example by a fan. This would result in the specification of the volumetric flow rate. Also some characteristic of the flow could be changed, for example, a filter could remove material. This section briefly introduces flow process models available: It is noted that the below discussion does not change the sign for an outflow that becomes an inflow. This is OK because the basic control volume mass-balance equation (Equation 4.1) accounts for the change of sign.

Direct Mass Transfer from CV n to CV $n+1$: For direct mass transfer from a CV to a downstream CV or to the environment CVE, the characteristics of the material transferred will not change during the flow process. That is, the same rate of mass concentration and mass is put into the downstream CV as is taken out of the upstream CV. Thus, direct flow from one CV to another is modeled in this STEPS Containment Module by equating the mass outflow rate from the upstream CV and the mass inflow rate to the downstream CV. For example, $fig_{2n2} = fog_{2n1}$ if the process for the mass transfer from CV 1 to CV 2 is a direct flow. This says that the mass transfer rate of the CsOH FG from CV 1 because of the direct-flow process equals the mass flow rate of the CsOH FG into CV 2. Note, that for direct flow a volumetric flow rate often is specified. In addition, this specification often is a value for volume % per some time unit. For example, the Reference Vam97, discusses volumetric flow-rate values of less than 1 vol%/day (a design leak rate), 100 vol%/day and 100 vol%/hr (a catastrophic leak).

Filtered Mass Transfer: For filtered mass transfer, some of the FG mass is removed. Usually, only a simple percentage of the mass is allowed to pass. The filtering effect depends on the FG and the filter. For more information of the modeling of filtered flow, see Section 5.

Mass Transfer Through a Wet-Well Pool: For mass transfer through a wet-well pool, some of the FG mass is removed. The amount of mass removed depends on the pool depth. For additional information of the modeling of flow through a wet-well pool see Section 5.

Mass Transfer Through an Ice Condenser: Ice condensers remove aerosols. The modeling of this process has not been thoroughly studied. Therefore, a simple ice-condenser effect on aerosols from Reference Vam97 is described in Section 5.

Treatment of Iodine in CV1

Because iodine can enter the containment in different chemical forms, one has to describe its physical and chemical behaviour based on the form. The specific processes for which the iodine chemistry is important include the effects of filters, deposition and repartition, and reaction with spray systems.

It is assumed that the iodine present in the reactor coolant system is released essentially in the form of CsI aerosol. This will be deposited on walls and may reach the sump by condensation and wash out processes. When present in the liquid phase CsI immediately dissociates completely into Cs⁺ and I⁻ ions. Also, due to radiolysis, molecular iodine (I₂, a gas) will be produced. The amount is strongly dependent on the pH of the sump water. If the pH is smaller than 5, nearly all I⁻ ions repartition to molecular iodine (Reference Lin80). This is the reason why most safety systems inject water mixed with hydrazine, NaOH etc. to insure higher pH. The injection of basic (i.e., pH>7) water with the spray system significantly reduces the concentration of molecular iodine in the containment atmosphere and hence the radioactive source term to the environment. Organic iodine could be produced by interaction of the iodine present in the liquid and gaseous phases with paint and cables. In Dub97 the following repartition of iodine I₂ gas out of the sump is proposed for VVER 440/213:

Table 4.1: Repartition of chemical forms of iodine

	Aerosol iodine	Molecular iodine	Organic iodine
pH-control off	97.69 %	2.00 %	0.31 %
pH control on	99.99 %	0.00008 %	0.007 %

For VVER 440/213 the spray system is fed by hydrazine, the French reactors use NaOH lye.

With respect to the newest PHEBUS and RTF experiments (Jacq97) and literature studies (e.g. Reference Kess93) we propose the more conservative values of Table 4.2.

Table 4.2: Proposed repartition of chemical forms of iodine for PWRs and BWRs

	Aerosol iodine	Molecular iodine	Organic iodine
pH-control off	96.00 %	3.00 %	1.00 %
pH control on	99.90 %	0.001 %	0.10 %

5. Detailed Model Description

The sections that follow discuss the STEPS Containment Module in detail. Section 4 (General Description) provides additional information, in particular, modeling parameters to characterize the modeling features.

Main Calculation Cycle

The CV analysis requires that the user specify certain basic information. The specific information needed is as follows:

Tables of the mass flow rates of the fission product volatility groups (FG) that will be introduced into the Containment Module CV 1. These mass-flow rates should be step values (constant over time intervals). They are supplied by the Primary System Module (PSM). The STEPS Containment Module basically uses control volumes (CV) to represent major physical containment volumes. It is noted that Reference Vam97 discusses a similar approach that is referred to as the box model. In each CV there may be mass added, mass depleted and mass transferred to another CV. Examples of *mass addition* are (1) a mass source from the STEPS Primary System Module and (2) a flow from another cell. Examples of *mass depletion* are (1) aerosol removal by natural processes and (2) aerosol removal by sprays. Examples of *mass transfer* are (1) flow to a downstream CV because of volumetric flow and (2) mass transfer to the environmental cell. During the mass transfer process some of the aerosol mass may be removed by filters, a water pool, etc.

The sections that follow discuss the initial information needed for the calculation, the control volume 1 (CV1) calculation, the next CV calculation, the environmental volume calculation, the mass removal options and the mass transfer options. The following are worthy of note: all CV (except for the environmental cell, see below discussion) perform the same basic procedures of receiving mass, mass removal and mass transfer out of

the CV. CV1 is unique because it receives mass from the STEPS Primary-System Module. The environmental cell only receives mass from the other cells. The CV-calculation discussion below only addresses one mass-removal process and one mass-transfer process. However, another parallel process for each of these could readily be added with the understanding that this should be done carefully.

Initial Information

The Primary System Module (PSM) will provide the mass flow rate (dM/dt) variation with time of the Fission Product Volatility-Groups (FG) released into the containment. As a result, the mass dM from $dM = dt \times dM/dt$ will be added to the first (CV1) over the time step dt . CV1, for example, would be the main containment of a PWR or the dry well of a BWR. Mass flow rates are given as a function of time (t)[s], for each FG and for each of the four aerosol release phases. The FG could be identified by its number. The release phases are the gap release phase (g), the in-vessel release phase (i), the ex-vessel release phase (e), and the late-in-vessel release phase (l). Thus, for example, the mass flow rate for the third FG introduced into the containment during the in-vessel phase would be identified by the variable $fig3pi$ as suggested in Section 4.

The PSM also will provide fractions that can be used to determine the mass fractions of the element and/or compounds that are in the FG (f_{coeFG}). For example, FG5 (noble gases) usually is composed of Kr and Xe. Also, the Xe usually is a larger fraction (about 0.9) of the FG and the Kr fraction is much smaller (about 0.07). Thus, the variable specifications might be $f_{coeKr}=0.90$ and $f_{coeXe}=0.07$.

Note that the fuel module or the STEPS data base will provide the information needed to calculate the activity of nuclides. We will refer to this information as the FG-mass-to-nuclide-activity data. The FG-mass-to-nuclide-activity data would include element/compound fractions, nuclide fractions and nuclide activity variation with time. The activity for any CV or flow path would then be readily calculated based on the FG-mass-to-nuclide-activity data and the FG masses or FG mass flow rates calculated by the procedures described below.

Control Volume 1 Calculation

1. Start with the previous-time value for the CV1 mass M_{old} . At the beginning one has $t = 0.0s$ and $M_{old} = 0.0kg$.
2. Increase the M_{old} by dM so now $M = M_{old} + dM$.

3. Calculate the CV1 concentration C based on the mass from the above Step 2 and the containment volume V , that is, $C = M/V$. This value of C will be used for the determination of the decontamination factor.

4. For a user-specified mass-removal option, obtain the decontamination factor DF for the user-specified process for the removal of aerosol mass. Examples of such processes include aerosol removal by natural processes, aerosol removal by sprays, etc. The DF determination usually is based on the problem time step dt and on the concentration determined in the above Step 3. Note that a parallel mass-removal option also could be addressed.

5. Calculate the post-decontamination CV1 mass from the definition of the decontamination factor $DF = M/M_{ad}$. That is, the CV1 mass after decontamination M_{ad} is now the above Step 2 mass M divided by the DF . It is noted that the mass increment $M - M_{ad}$ is removed from CV1 and the analysis. This mass removal should be recognized in the accounting used to verify the analysis procedure.

6. Calculate the CV1 concentration after decontamination C_{ad} based on the above Step 5 post-decontamination mass M_{ad} and the containment volume V , that is, $C_{ad} = M_{ad}/V$. This value of C_{ad} will be used for the determination of the mass flow out of CV1.

7. For a user-specified mass-transfer option, obtain the volumetric flow rate dV/dt flowing out of CV1. This volumetric flow rate could be to CV2 or the volumetric flow rate could be to the environmental CV (CVE). Examples of possible volumetric flow rate options could be a one volume%/day option ($dV/dt [m^3/s] = 1.157 \times 10^{-7} V[m^3]$) or a 500m³/hour option ($dV/dt [m^3/s] = 0.1389 V[m^3]$). Note that a parallel mass-transfer option could be addressed by repeating the procedures described here.

8. Calculate the mass transferred from CV1 because of the above Step 7 flow out. In general, this will be the Step-7 volumetric flow rate times the Step 6 concentration C_{ad} . For example, for the user-specified mass transfer option 1 volume % per day, the mass flow out of CV1 dM would be $dM = C_{ad} \times dt \times dV/dt = C_{ad} \times dt \times 1.157 \times 10^{-7} V(m^3)$.

9. Decrease the CV1 mass by the dM determined in the above Step 8. That is, $M = M_{ad} - dM$ from above.

10. The final determination of the CV1 mass for this time step is now complete and we have the $M(t+dt)$. This will be the CV1 mass at the beginning of the next time step, which corresponds to Step 1 above.

Next Control Volume CV_n Calculation

The calculation procedures for cells other than CV1 and CVE will be essentially the same as above for CV1. The main difference is that only CV1 receives mass from the PSM and the environmental cell has no mass removal (it only receives mass).

Environmental Cell

The environmental cell only receives mass from any or all of the upstream CV. The mass received represents the FP mass released to the environment. Because the mass received will be the mass for a FG, the FG mass must be converted to nuclide activity. Note that the PSM would provide the information needed to calculate the activity of nuclides, that is, the FG-mass-to-nuclide-activity data. The FG-mass-to-nuclide-activity data would include element/compound fractions, nuclide fractions and nuclide activity variation with time. The homogeneous activity for any CV or flow path could then be readily calculated based on the FG-mass-to-nuclide-activity data and the FG masses or FG mass flow rates that have been calculated.

Determination of Decontamination-Factors (DF)

The Equation (4.1) requires models for the decontamination factors (DF) in CV and models for mass transfer between CV. The models proposed for the STEPS Containment Module are described below. Each model description includes specification of the input information needed, the model procedure and the model parameter output.

The fission products released into a control volume are subject to removal by natural processes, sprays, or to "wet" or "dry" depletion. In addition, the removal can depend strongly on the particular fission product and whether or not the spray systems is operating. For example, noble gases and organic iodine (ICH₃) are not removed from the atmosphere by any of these processes.

The aerosol-removal models described in the following subsections were obtained from References Pow96, Pow93 and Dub97. Specifically, Pow96 was used for *DF by Natural Processes in the Main Containment of a PWR* and for *DF by Natural Processes in the Dry Well of a BWR*, Pow93 was used for *DF for Containment Sprays*, Dub97 for *DF for Dry Deposition in VVERs* and for *DF for Wet Deposition in VVERs*.

It is noted that decontamination during mass transfer is discussed in the Section Mass Transfer Options. In particular, Reference Pow97 was used to model the decontamina-

tion by BWR steam suppression pools and Reference Vam97 was used to model the decontamination by ice condensers.

DF by Natural Processes in the Main Containment of a PWR

Input Information

- ∅ Plant thermal power (pbwr), MW_t , (Note that the thermal power (MW_t) often is three times the electric power (MW_e)).
- ∅ Release phase of the aerosol, that is, either the gap release phase (rpg), the in-vessel release phase (rpi), the ex-vessel release phase (rpe), or the late in-vessel release phase (rpl).
- ∅ Problem time (t), s.
- ∅ Time step (dt), s (200 s is recommended).

Data Base Information

The decontamination coefficients for PWRs for different release phases, reactor power and time (from Reference Pow96, Table 26) given in Table DCP. Note that the times in Table DCP could be changed when applied in an analysis.

DF Determination

- For convenience we use $c_{10}=\lambda_e(10)$, $c_{50}=\lambda_e(50)$ and $c_{90}=\lambda_e(90)$ from Tab. DCP.
- Obtain the 50 percentile (c_{50}), 10 percentile (c_{10}) and 90 percentile (c_{90}) coefficients (1/hr) for a specific combination of plant thermal power (ppwr), release phase (rpg, rpi, rpe, or rpl), and problem time (t). For example, the expression for ppwr=4250MW_t, the gap-release phase and time=7000s Table DCP provides the values $c_{50}=0.128$, $c_{10}=0.0618$, and $c_{90}=0.202$.
- Calculate the 50 percentile (DF50), 10 percentile (DF10) and 90 percentile (DF90) decontamination factors from the equations

$$DF_{50} = \exp (c_{50} \times dt / 3600)$$

$$DF_{10} = \exp (c_{10} \times dt / 3600)$$

$$DF_{90} = \exp (c_{90} \times dt / 3600),$$

where the 3600 division of the dt is needed because the coefficient units are 1/hr and the dt unit is s.

The decontamination factors (DF50, DF10 and DF90) will have values equal to or greater than 1.0. The DF should be used to reduce the aerosol mass (or concentration) by dividing the before decontamination value by the new DF. For example a before decontamination concentration of 0.05 kg/m³ with a DF of 1.02 will result in an after decontamination concentration of (0.050/1.02)= 0.049 kg/m³.

Output Information

The output will be the decontamination coefficients DF in Equation (4.2):

DF50, DF10 and DF90.

Limitations

It is noted that Reference Pow93 recommends that decontamination factors values greater than 10⁶ be considered unrealistic and should be reduced to 10⁶. In addition, it is noted that the PERSAN (References Dub97 and Chau97) containment models limit the calculated aerosol concentration to 0.001. As a result, it is recommended that (1) the DF be limited to 10⁶ and (2) the concentration after application of the DF be limited to 0.001, that is, C(t)/DF > 0.001.

DF by Natural Processes in the Dry Well of a BWR

Input Information

- Ø Plant thermal power (pbwr), MW_t.
- Ø Release phase of the aerosol.
- Ø Problem time (t) s
- Ø Time step (dt), s, (200s is recommended).

Data Base Information

The Table DFB correlations of BWR decontamination coefficients based on release phase, reactor power and time (from Reference Pow96, Table 44). Note that the times in Table DCP could be changed a little when applied in an analysis.

DF Determination

- For convenience we use $c_{10}=\lambda_e(10)$, $c_{50}=\lambda_e(50)$ and $c_{90}=\lambda_e(90)$ where the λ_e are obtained from Table DCB.
- Obtain the 50 percentile (c_{50}), 10 percentile (c_{10}) and 90 percentile (c_{90}) coefficients (1/hr) for a specific combination of plant thermal power (pbwr), release phase (rpg, rpi, rpe, or rpl), and problem time (t). For example, for pbwr=2500MW_t, the gap-release phase and time=7000s Table DCB provides the values $c_{50}+1.4813$, $c_{10}+0.5909$ and $c_{90}+5.5258$.
- Calculate the 50 percentile (DF50), 10 percentile (DF10) and 90 percentile (DF10) decontamination factors from the equations

$$DF_{50} = \exp (c_{50} \times dt / 3600) \quad DF_{10} = \exp (c_{10} \times dt / 3600) \text{ and}$$

$$DF_{90} = \exp (c_{90} \times dt / 3600)$$

where the 3600 division of the dt is needed because the coefficient unit is 1/hr and the dt unit is s.

Table DCP Correlation of important PWR decontamination coefficients with reactor *thermal* power, P (from Reference Pow96)

Phase	Time Interval (s)	Correlations ³ (hr ⁻¹)
rpg, gap	0 - 1800	$\lambda_e(90) = 0.0349 + 3.755 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0256 + 3.90 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0167 + 3.25 \times 10^{-6} P(\text{MW})$
rpg, gap	1800 - 6480	$\lambda_e(90) = 0.0808 + 5.955 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0474 + 8.39 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0322 + 7.16 \times 10^{-6} P(\text{MW})$
rpg, gap	6480 - 13680	$\lambda_e(90) = 0.1146 + 371.9/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0948 + 141.2/P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0472 + 62.0/P(\text{MW})$
rpg, gap	13680 - 42480	$\lambda_e(90) = 0.378 + 161.6/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.269 + 141.2/P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.068 + 81.8/P(\text{MW})$
rpg, gap	42480 - 80000	$\lambda_e(90) = 0.210 + 50.6/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.144$ $\lambda_e(10) = 0.0915(1-\exp(-2.216P(\text{MW})/1000))$

³ $\lambda_e(50)$ is the median of the uncertainty distribution, the 90th and the 10th percentile values are $\lambda_e(90)$ and $\lambda_e(10)$, respectively.

rpg, gap	80000 - 100000	$\lambda_e(90) = 0.0933 + 12.0/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0838$ $\lambda_e(10) = 0.0377$
rpg, gap	100000 - 120000	$\lambda_e(90) = 0.0717 + 10.8/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0669$ $\lambda_e(10) = 0.0277$
rpi, in-vessel	1800 - 6480	$\lambda_e(90) = 0.0505 + 0.94 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0257 + 3.87 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0166 + 3.49 \times 10^{-6} P(\text{MW})$
rpe, ex-vessel	6480 - 13680	$\lambda_e(90) = 0.0754 + 184.9/P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0551 + 84.65/P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0272 + 42.0/P(\text{MW})$
rpl, late in- vessel	13680 - 42480	$\lambda_e(90) = 0.0829 - 3.40 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.0547 - 0.62 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(10) = 0.0222 + 6.44 \times 10^{-6} P(\text{MW})$

Output Information

The output will be the decontamination coefficients DF in Equation (4.2): DF50, DF10 and DF90.

Decontamination Factor (DF) with Containment Sprays

Input Information

- ∅ Spray-water volumetric flow rate per unit area (Q) [$\text{cm}^3\text{-H}_2\text{O/s/cm}^2$].
- ∅ Spray fall distance (H) [cm]
- ∅ Ratio of volume not contacted by the spray droplets to the volume contacted by the spray droplets (R)
- ∅ Problem time (t) [s]
- ∅ Concentration when sprays begin operation (C(0)), which does not change with time [kg/m^3]
- ∅ Current concentration (C(t)), which changes with time [kg/m^3]
- ∅ Time step (dt) [s]

Limitations

As explained above Reference Pow93 recommends that decontamination factors greater than 10^6 be considered unrealistic and should be reduced to 10^6 .

DF Determination

In general, the DF will be obtained from the equation

$$DF = \left[1 - \frac{[DC(0.9)] \times \left[\frac{DC(C)}{DC(0.9)} \right] \times \frac{dt}{3600}}{1+R} \right]^{-1} \quad (5.1)$$

Note that the 3600 division of the dt is needed because the coefficient (DC) units from the equations below are 1/hr and the dt unit is s. DF values will be determined for the 50% (median), 10% and 90% cases, that is, DF(50), DF(90) and DF(10).

Table DFB Correlation of decontamination coefficients with boiling water reactor *thermal* power, P (from Reference Pow96)

Release Phase	Time Interval (s)	Correlations ⁴ (hr ⁻¹)
rpg, gap	- 3600	$\lambda_e(90) = 2.912(1-\exp(-0.798P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 4.186(1-\exp(-0.134P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 2.131(1-\exp(-0.140P(\text{MW})/1000))$
rpg, gap	600 - 9000	$\lambda_e(90) = 6.201(1-\exp(-0.887P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 4.611(1-\exp(-0.155P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 2.217(1-\exp(-0.124P(\text{MW})/1000))$
rpg, gap	000 - 19800	$\lambda_e(90) = 3.303 + 5.75 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 1.563(1-\exp(-0.897P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.579 + 87.0 \times 10^{-6} P(\text{MW})$
rpg, gap	19800 - 45000	$\lambda_e(90) = 1.561(1-\exp(-1.210P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 0.787(1-\exp(-1.318P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.591(1-\exp(-1.255P(\text{MW})/1000))$
rpg, gap	45000 - 80000	$\lambda_e(90) = 1.200(1-\exp(-1.004P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 0.462(1-\exp(-0.893P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.274(1-\exp(-0.902P(\text{MW})/1000))$
rpg, gap	80000 - 100000	$\lambda_e(90) = 1.085(1-\exp(-1.018P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 0.398(1-\exp(-0.673P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.210(1-\exp(-0.579P(\text{MW})/1000))$
rpg, gap	100000 - 120000	$\lambda_e(90) = 1.041(1-\exp(-1.084P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 0.388(1-\exp(-0.695P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.190(1-\exp(-0.558P(\text{MW})/1000))$

⁴ $\lambda_e(50)$ is the median of the uncertainty distribution, the 90th and the 10th percentile values are $\lambda_e(90)$ and $\lambda_e(10)$, respectively.

rpi, in-vessel	3600 - 9000	$\lambda_e(90) = 4.495(1-\exp(-0.120P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 2.188(1-\exp(-0.131P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 1.089(1-\exp(-0.124P(\text{MW})/1000))$
rpe, ex-vessel	9000 - 19800	$\lambda_e(90) = 0.756 + 3.50 \times 10^{-6} P(\text{MW})$ $\lambda_e(50) = 0.532(1-\exp(-1.232P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = 0.374(1-\exp(-1.263P(\text{MW})/1000))$
rpl, ate in-vessel	19800 - 45000	$\lambda_e(90) = 0.0648(1-\exp(-0.959P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(50) = 0.0254(1-\exp(-0.0943P(\text{MW})/1000))$ $\lambda_e(10) = -0.089 + 10.72 \times 10^{-6} P(\text{MW})$

For the below equation, $\ln\{DC(0.9)\}$ depends on Q and H and does not vary with problem time. However, $\{DC(C)/DC(0.9)\}$ depends on Q and C(t) and varies with problem time because of the variation of C(t) with time. DC(0.9) is the decontamination coefficient when the remaining fraction of the mass introduced into the containment is 0.90. This value for the decontamination coefficient is taken in Reference Pow93 to be indicative of the initial rate of decontamination when aerosol is first exposed to the action of the spray. It also is the value for the decontamination coefficient that would be applied to an analysis with a steady source of aerosols. The following are the necessary equations for the 50% (median), 10% and 90% cases.

For the 50% (median) case calculation of DF(50)

$$\begin{aligned} \ln DC(0.9) = & \\ & 6.83707 + 10074 \ln Q - 4.1731 \times 10^{-3} Q^2 H - 12478 Q \\ & - 2.4045 \times 10^{-5} H + 9.006 \times 10^{-8} QH^2 \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\frac{DC(C)}{DC(0.9)} = (0.1815 - 0.01153 \log_{10} Q) \times \left[1 - \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.5843} \right] + \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.5843} \quad (5.3)$$

For the 90% case calculation of DF(90)

$$\ln C(0.9) = 7.10927 - 8.0868 \times 10^{-4} Q^2 H + 0.92549 \ln Q \quad (5.4)$$

$$\frac{DC(C)}{DC(0.9)} = (0.3751 + 0.00648 \log_{10} Q) \times \left[1 - \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.2786} \right] + \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.2786} \quad (5.5)$$

For the 10% case calculation of DF(10)

$$\begin{aligned} \ln C(0.9) = & \\ & 5.5750 + 0.94362 \ln Q - 7.327 \times 10^{-7} QH^2 - 6.9821 \times 10^{-3} Q^2 H \\ & + 3.555 \times 10^{-6} Q^2 H^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\frac{DC(C)}{DC(0.9)} = (0.1108 - 0.00201 \log_{10} Q) \times \left[1 - \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.8945} \right] + \left(\frac{C}{0.9} \right)^{0.8945} \quad (5.7)$$

- Specifically calculate the 50 percentile case DF(50) based on the values of C(0.9) and DC(C)/DC(0.9) from Equations (5.2) and (5.3). Then calculate the DF based on Equation (5.1). This will give DF(50).
- Specifically calculate the 90 percentile case DF(90) based on the values of C(0.9) and DC(C)/DC(0.9) from Equations (5.4) and (5.5). Then calculate the DF based on Equation (5.1). This will give DF(90).
- Specifically calculate the 10 percentile case DF(10) based on the values of C(0.9) and DC(C)/DC(0.9) from Equations (5.6) and (5.7). Then calculate the DF based on Equation (5.1). This will give DF(10).
- Calculate the 50 percentile (DF50), 10 percentile (DF10) and 90 percentile (DF90) decontamination factors from the equations.

The decontamination factors (DF50, DF10 and DF90) will have values equal to or greater than 1.0. The DF should be used to reduce the aerosol mass (or concentration) by dividing the before decontamination value by the DF. For example, a before decontamination concentration of 0.05 kg/m³ with a DF of 1.2 will result in an after decontamination concentration of 0.0417 (0.050/1.2) kg/m³.

Output Information

The output will be the decontamination coefficients DF in Equation (4.2): DF50, DF10 and DF90

Limitations

The spray is expected to start after the fission product release has finished. The time step for the determination of the removal of aerosols by sprays cannot be too large because the aerosol reduction can be very rapid. Therefore, it is recommended that the time step for the above calculations be limited to 10 s. Therefore, general problem time steps significantly greater than 10 s would require that the above calculation be done iteratively with 10 s time steps. For example, a general problem time step of 200 s would require that the above calculation be done 20 times with time steps of 10 s. As explained above Reference Pow93 recommends that decontamination factors greater than 10⁶ be considered unrealistic and should be reduced to 10⁶.

The above approach is based on the decontamination coefficient when the remaining fraction of the mass introduced into the containment is 0.90. This value for the decontamination coefficient is taken in Reference Pow93 to be indicative of the initial rate of decontamination when aerosol is first exposed to the action of the spray. It assumes that there will be no additional aerosol mass.

DF Determination According to PHARE Approach for VVER

The next two subsections describe the determination of DF for VVER reactors according to Reference Dub97. Therefore, these options were included to describe the decontamination effects in VVER440/213 and, possibly, other reactors. It is noted that the models below treat the iodine chemical forms differently and the other DF models described earlier do not.

DF Determination for Dry Deposition

This section came from Reference Dub97. In addition, this option is recommended in References Chau97 and Vam97. We have not had time to thoroughly understand this option. Therefore, the option description that follows is essentially identical to that presented in Reference Dub97.

This "dry" deposition model (that is, when the spray system is not in operation) for aerosols and molecular iodine (I_2) in the containment is based on a unique function corresponding to the assumption that the maximum amounts of fission-products and structural masses released are in suspension in the containment at time = 0.0s. Because the application of this function might be when the mass in suspension less than the maximum possible, the deposition in a time step is calculated by finding a virtual time t_v on reference curve ${}^{DC}C_i(t_v)$ corresponding to actual fraction of aerosols in the atmosphere $C_i(t)$, and from equation:

$$D_i(t) = \frac{{}^{DC}C_i(t_v) - {}^{DC}C_i(t_v + \Delta t)}{\Delta t}$$

where:

- t_v represents virtual time, which is found by solving numerically equation: ${}^{DC}C_i(t_v) = C_i(t)$, see following table,
- $C_i(t)$ represents the fraction of aerosols of FG i suspended in the atmosphere at the calculation time t;
- ${}^{DC}C_i(t_v)$ represents the fraction of aerosols of FG i suspended in the atmosphere calculated from deposition curve for virtual time t_v ;
- $D_i(t)$ represents the deposition rate of aerosols of FG i suspended in the atmosphere.

And, $DF = {}^{DC}C_i(t_v) / {}^{DC}C_i(t_v + dt)$.

Dry deposition correlations (spray systems not in operation) are given in the following table:

	${}^{DC}C_i(t_v)/{}^{DC}C_i(0)$
Aerosols (Csl, CsOH, Te, Others)	$0.6543e^{-0.1665t_v} + 0.3748e^{-0.1665t_v} + 0.0002e^{-0.02t_v}$
I ₂	$0.96e^{-1.42t_v} + 0.04e^{-0.01436t_v}$

Dry deposition correlation for aerosols was established for the release of the quantity of fission products corresponding to total core meltdown into the containment. For lower masses of fission products in suspension corresponding to partial cladding rupture or core meltdown, it leads to excessive subsidence and thus to an estimation of the release which is too optimistic. Indeed, the structural materials should not be involved in their totality, and the sedimentation kinetics should be slower, where the masses of fission products in suspension are lower. However, this correlation is the worse case (provides the smallest falling rate) from the cases analyzed, and borders the calculated data base from above especially on the long term.

DF for Wet Deposition

The "wet" deposition is considered only when the spray system is operating.. However, it is to be noted that this function should not be applied beyond a certain threshold of the fraction in suspension in the atmosphere, corresponding to a one thousandth of the quantity emitted from each FG since the beginning of the calculation. The wet deposit formula is as follows:

$$D_i(t) = C_i(t) \cdot \frac{1 - e^{-\lambda_i \cdot \Delta t}}{\Delta t}$$

or $D_i(t) = 0$ when

$$C_i(t) < \frac{\sum_k^{RCS} S_i(t_k) \cdot \Delta t}{1000}$$

And, $DF = {}^{DC}C_i(t_v)/{}^{DC}C_i(t_v + dt)$.

where: λ_i represents a function coefficient, it is dependent on spray system flow rate (1, 2 or 3 trains in operation) see following table;

Summation index k goes over all time steps up to current time t and therefore sum

$\sum_k^{RCS} S_i(t_k) \cdot \Delta t$ represents fraction of total FG i mass released into the containment up to current calculation time t.

For the wet deposition correlation expressed by the above equation, the values of λ_i are (one spray system in operation):

	λ_i values when one spray system train is operating
Aerosols (Csl, CsOH, Te, Others)	1.58
Molecular iodine	20

It is noted that the effectiveness of the spray system on the aerosols should be taken into account in different ways depending on the number of trains in service. The correlations mentioned above consider that only a single train of the spray system is operating. As 100 % of the function is assumed by one train, the second and third trains, when operating, should be stopped.

It has to be checked if the much higher efficiency of the spray system on molecular iodine ($20/1.58=12.7$) could also be used for all other reactor types dealt with in our report. (We found in the CONTAIN 2.0 manual (Reference Mur97) a method to determine the effect of sprays on iodine species which could be a basis for a simplified model to be used in a later version of this modul).

Aerosol Deposition in other CVs then CV1:

The determination of deposition coefficients in other rooms then CV1 could follow the PERSAN approach where $DF=1.0$ (no decontamination) is default value and it is conservative. For French reactors and the planned EPR a model is given which seems to be proven for annular buildings, that is

$$c(t)/c(t_0) = 0.015 \times \exp (-0.043 t).$$

In Pow96 it is said that the simplified method which we describe may be used to estimate aerosol behaviour in:

- the containment buildings of large dry containment and subatmospheric containment pressurized water reactors
- drywells of boiling water reactors
- secondary containments of boiling water reactors, and
- upper and lower volumes of icecondenser containment buildings which implies that for small volumes ($< 20000 \text{ m}^3$) the DF values could be calculated as proposed.

Mass Transfer Between CV:

The mass flow between two CV could be controlled or some characteristic of the flow could be changed. An example of controlled flow would be a constant volumetric flow rate fan. A filter could change the mass concentration of the flowing material. The sections below describe the mass-transfer process models available in the Containment Module. It is noted that the below discussion does not change the sign for an out flow

that becomes an inflow. This is OK because the basic Control Volume mass-balance equation (Equation 4.1) accounts for the change of sign.

In the below models, values for the variation with time of the mass-transfer rate are needed. This information must be specified for this Containment Module. Examples of possible specifications are a constant volumetric flow rate dV/dt , which could be a constant vol%/day or a fan flow rate. For the constant volumetric flow rate case, the mass-transfer rate dM/dt (kg/s), would be calculated from the equation

$$dM/dt = dV/dt \cdot C(t)$$

where $C(t)$ is the source-volume mass concentration (kg/m^3) at time.

Direct Mass Transfer from CV n to CV n+1:

For direct flow from a CV to a downstream CV or to the environment CV, the characteristics of the material transferred will not change during the flow process. That is, the same rate of mass concentration and mass is put into the downstream CV as is taken out of the upstream CV. Therefore, the following equations could be used for a mass transfer from cell n to cell n+1:

$$f_{i,n+1} = f_{i,n}$$

Filtered Mass Transfer:

Filters can be used to remove radioactive materials. The following equations could be used to account for the mass transfer filter process between cell n and cell n+1:

$$f_{i,n+1} = (1 - E_{i,n+1}) \cdot f_{i,n}$$

where $E_{i,n+1}$ is the filter efficiency for the process for FG i. That is, for a particular FG, the fraction E of the FG mass flowing out of a CV is removed from the flow and the remainder of the FG mass is transferred into the downstream CV. The appropriate filter efficiencies for the different chemical forms (CsI, I₂ and CH₃I) will be established in future discussion.

In Reference Kess93 the following retention of filters are assumed:

	Filter retention
Aerosols (CsI, CsOH, Te, Others)	99%
Molecular iodine	90%

Mass Transfer Through a Wet-Well Pool

Steam suppression pools have qualitative similarities in all major types of BWRs: Pressure relief lines from the reactor coolant system discharge gases and vapors into the

suppression pools (SPs) through quenchers. The dry well atmospheres of the containment vent to the SPs through large diameter downcomers or horizontal vents. The gas discharged to the SP can contain substantial amounts of radioactive aerosols. In the process the SPs remove radioactive materials in BWRs. The equations used for this Containment Module are based on Reference Pow97.

Input Information

- ∅ Quencher type (either X or T type)
- ∅ Pressure that the wet-pool can sustain > or < 5 bar during the in-vessel release phase
- ∅ Release phase of the aerosol: either the gap release phase (rpg) or the in-vessel release phase (rpi)
- ∅ Depth of quenchers under water level, H(cm)

Data Base Information

The proposed decontamination coefficients for BWRs based on release phase and depth of quenchers (from Reference Pow97).

DF Determination

In the following, Median corresponds to the 50% confidence level, Lower Bound corresponds to the 10% confidence level, and Upper Bound corresponds to the 90% confidence level:

1. Gap release through either X or T quencher submerged to depth H(cm):

Median	$c_{50} = \log_{10}DF(\text{total}) = 1.350 + 1.933 \times 10^{-3} H(\text{cm})$
Lower Bound	$c_{10} = \log_{10}DF(\text{total}) = 0.980 + 1.006 \times 10^{-3} H(\text{cm})$
Upper Bound	$c_{90} = \log_{10}DF(\text{total}) = 1.485 + 5.554 \times 10^{-3} H(\text{cm})$

2. In-vessel release through a T quencher submerged to depth H(cm) with a wet well that can sustain pressures in excess of 5 atms:

Median	$c_{50} = \log_{10}DF(\text{total}) = 1.752 + 1.92 \times 10^{-3} H(\text{cm})$
Lower Bound	$c_{10} = \log_{10}DF(\text{total}) = 0.930 + 0.870 \times 10^{-3} H(\text{cm})$
Upper Bound	$c_{90} = \log_{10}DF(\text{total}) = 3.444 + 5.38 \times 10^{-3} H(\text{cm})$

3. In-vessel release through a T or X quencher at a submergence H(cm) and a wet well that can only sustain pressures less than 5 atms:

Median	$c_{50} = \log_{10}DF(\text{total}) = 1.791 + 2.477 \times 10^{-3} H(\text{cm})$
Lower Bound	$c_{10} = \log_{10}DF(\text{total}) = 1.034 + 0.875 \times 10^{-3} H(\text{cm})$

Upper Bound $c_{90} = \log_{10}DF(\text{total}) = 3.964 + 6.528 \times 10^{-3} H(\text{cm})$

Calculate the 50 percentile (DF50), 10 percentile (DF10) and 90 percentile (DF90) decontamination factors from the equations

$$DF50 = 10^{c_{50}}$$

$$DF10 = 10^{c_{10}}$$

$$DF90 = 10^{c_{90}}$$

The decontamination factors (DF50, DF10 and DF90) will have values equal to or greater than 1.0. The DF should be used to reduce the aerosol mass (or concentration) by dividing the before decontamination value by the new DF. For example a before decontamination concentration of 0.05 kg/m³ with a DF of 10 will result in an after decontamination concentration of (0.050/10)= 0.005 kg/m³.

Output Information

The output will be the decontamination coefficients:DF50, DF10 and DF90

Limitations

It is noted that Reference Pow97 recommends that decontamination factors values greater than 10⁶ be considered unrealistic and should be reduced to 10⁶. In addition, it is noted in Reference Pow97 that 1% of the discharge to the suppression pool may bypass the action of the pool.

Mass Transfer Through an Ice Condenser:

Ice condensers can remove significant amounts of aerosols because of the large areas of the ice and the ice baskets. However, for this draft report, we have not thoroughly studied the modeling of aerosol removal by ice condenser. If deemed to be important, we will investigate the modeling in the future. Also, reviewers of this draft report may provide suggested literature or approaches that might be taken.

Therefore, for this draft report, the following simple ice-condenser effect on aerosols from Reference Vam97 and Reference Mck95 is used. Based on the assumption that the reduction factors RF given in the references are equal to 1/DF, we recommended the following ice-condenser DF

- | | |
|--|----------|
| One pass through condenser (no circulation working): | DF = 2.0 |
| Continual recirculation (1h or more): | DF = 4.0 |
| Ice bed exhausts before core damage: | DF = 1.0 |

References

- Chau97 B. Chaumont, IPSN, Personal communication regarding the SESAME Version 3.0 modelling for the French 900MW_t and 1300MW_t nuclear power plants, 1997.
- Dub97 Ph. Dubiau, "PHARE Project: Emergency Preparedness for On-Site and Off-Site, Methodologies and Software Tools for Emergency Technical Centres", Description of Physical Models; IPSN, 12.05.97.
- Hen98 G. Henneges and R.G. Gido, "Containment Analysis for a Pressurized Water Reactor Similar to the Planned EPR with CONTAIN2.0", Forschungszentrum Karlsruhe, report to be published, 1998.
- Jacq97 D. Jacquemain, Minutes of the seventh PHEBUS containment chemistry interpretation circle, held in Aix en Provence, France 22.1.97 by IPSN.
- Kess93 G. Kessler et al., "Zur Eingrenzung des radiologischen Quellterms bei auslegungsüber-schreitenden Ereignissen in zukünftigen DWRs", KfK5199, 1993. I
"On the Confinement of Radiological Source Term During Beyond Design Basis Events in Future Pressurized Water Reactors", english translation."
- McK95 T.J. McKenna, J.A. Trefan and Z. Li, "International RTM-95 (Response Technical Manual)", U.S. Nuclear Regulatory Commission report (for Interim Use and Comment), May 1995.
- Mur97 K.K. Murata et al., "Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Containment Analysis", NUREG/CR-4XXX (draft, to be published), 1997
- Pow93 D.A. Powers and S.B. Burson, "A Simplified Model of Aerosol Removal by Containment Sprays", Sandia National Laboratories, Albuquerque New Mexico, USA, report NUREG/CR-5966, SAND92-2689, June 1993.
- Pow96 D.A. Powers, K.E. Washington, S.B. Burson and J.L. Sprung, "A Simplified Model of Aerosol Removal by Natural Processes in Reactor Containments", Sandia National Laboratories, Albuquerque New Mexico, USA, report NUREG/CR-6189, SAND94-0407, July 1996.
- Pow97 D.A. Powers and S.B. Burson, "A Simplified Model of Decontamination by Boiling Water Steam Suppression Pools", Sandia National Laboratories, Albuquerque New Mexico, USA, report NUREG/CR-6153, SAND93-2588, May 1997.

- ROD95 J. Ehrhardt et al., "RODOS, a real-time on-line decision support system for nuclear emergency management in Europe", Proc. of the Oslo Conf. on Int. Aspects of Emergency Management and Environmental Technology, Skoyen: A/S Quasar Consultants, June 1995.
- Vam97 D.V. Vamanu, "STEPS, Source Term Estimation Based on Plant Status: The Containment Module Technical Specifications", ETH Zürich, Switzerland, August 1997.
- Wie83 H.W. Wiese, U. Fischer, "Verbesserte konsistente Berechnung des nuklearen Inventars abgebrannter DWR Brennstoffe auf der Basis von Zell-Abbrand-Verfahren mit KORIGIN", KfK3014, 1983.

32.21.08 Untersuchung zur Kernzerstörung

I. Ergebnisse der TE-Vorversuche zu den Experimenten in der QUENCH-Versuchsanlage

(L. Sepold, S. Horn, W. Leiling, HIT)

Zusammenfassung

Zu einer ersten groben Ermittlung des Messfehlers bei der Hüllrohrtemperaturmessung an Brennstabsimulatoren (BS) des QUENCH-Versuchsbündels wurden Tests mit verschiedenen Thermoelementen (TE) in einer Einzelstabanordnung bis 1100 °C durchgeführt. In der Testanordnung wurde ein BS fünf Aufheizungen unter identischen Bedingungen unterzogen. Der BS wurde elektrisch mittels Wolfram-, Molybdän- und Kupferelektroden beheizt und war baugleich zum BS des QUENCH-Versuchsbündels. Die Einspeisung der elektrischen Leistung für die Stabheizung in Kombination mit der Wärmeverlustleistung ergab typische Aufheizraten (0,1 - 1 K/s). Ein typischer Argon-Gasstrom, basierend auf einem Massenstrom pro 21-Stab-bündel von 6 g/s, durchströmte die Stabanordnung von unten nach oben. Ein zusätzlicher Dampfstrom, wie er in den QUENCH-Versuchen vorgesehen ist, konnte in der Anordnung nicht realisiert werden.

Der BS war in der Heizzone auf einer axialen Höhenkote mit vier verschiedenen Thermoelementen bestückt. Die "wahre" Hüllrohrtemperatur wurde mit einem Thermoelement von 0,5 mm Ø ermittelt, das in einer 0,5 mm tiefen Nut der Hülle verlegt worden war. Die so ermittelte Temperatur wurde mit den Temperaturen der TE verglichen, die auf der Zirkaloy-Hülle befestigt waren, und zwar mit dem TE, das in den künftigen QUENCH-Bündelversuchen verwendet wird: 2,1 mm Ø, W/Re-Adern, HfO₂-Isolation, Zry-Ta-Doppelmantel, einem gleichen TE mit Strahlenschirm an der Messspitze, einem von der Abmessung vergleichbaren TE aus anderen Materialien: 2,0 mm Ø, NiCr/Ni, Inconel-Mantel.

Ein Korrekturwert für die auf der BS-Hülle befestigten TE ergab sich dann aus der jeweiligen Differenz $T_{\text{wahr}} - T_{\text{außen}}$. Auf der Grundlage von fünf Aufheiztests kann ein mittlerer Korrekturwert bei 900 - 1100 °C von

ca. 90 ± 20 K

angegeben werden. Um diesen Wert ist die wirkliche Hüllrohrtemperatur gegenüber der gemessenen Temperatur erhöht.

Es wird empfohlen, den TE-Fehler in einem künftigen QUENCH-Experiment unter Dampf- (Aufheizphase) und Quench-Wasser- (Abkühlphase)-Bedingungen zu ermitteln.

Aufgabenstellung, Einleitung

Die Messung der Hülltemperatur der Brennstabsimulatoren innerhalb der QUENCH-Testbündelanordnung (s. Abb. 1) erfolgt im heißen Bereich mittels Hochtemperatur-Thermoelementen (2,1 mm \varnothing , W/Re-Adern, HfO₂-Isolation, Zry-Ta-Doppelmantel, s. Abb. 2)¹. Dabei werden die Thermoelemente (TE) mittels einer Schelle aus Zr-Blech (0,25 mm dick) an der gewünschten Position des Hüllrohrs fixiert und zusätzlich mittels Bindedraht Ir 60/Rh 40 gemäß Abb. 3 gehalten. Der Bindedraht ist notwendig, da die Schelle aus Zr-Blech die notwendige Vor-Oxidationsphase nicht überleben kann. Der genannte Draht aus Ir 60/Rh 40 wurde gewählt, da er die beste Handhabbarkeit beim Festziehen und zusätzlich den höchsten Schmelzpunkt (2300 °C) unter den getesteten Drahtmaterialien aufwies.

Bei der Ermittlung der Hüllrohrtemperatur ergibt sich grundsätzlich ein Messfehler, wenn der Temperaturfühler außen auf der Hüllrohroberfläche angebracht ist. Die "wahre" Hüllrohrtemperatur ist höher als die mit dem Temperaturfühler gemessene. Um dafür einen ersten groben Korrekturwert der gemessenen Temperaturen in der Aufheizphase (Transiente) der Bündelversuche in der QUENCH-Anlage zu ermitteln, wurden TE-Tests bis 1100 °C in einer Einzelstabanordnung gefahren.

¹ Für die hier beschriebenen TE-Tests wurden vorhandene Thermoelemente mit 2,3 mm \varnothing verwendet, wohingegen die künftigen TE 2,1 mm \varnothing aufweisen werden.

Versuchsaufbau und –durchführung

Die Versuchsanordnung (Abb. 4) bestand aus einem Brennstabsimulator (BS) und einem Umgebungsrohr mit Isolation. Der BS wurde elektrisch mittels Wolfram-, Molybdän- und Kupferelektroden beheizt und war identisch zum BS des QUENCH-Versuchsbündels. Die Einspeisung der elektrischen Leistung für die Stabheizung in Kombination mit der Wärmeverlustleistung ergab typische Aufheizraten (0,1 - 1 K/s).

Eine Dampfströmung durch das Bündel konnte nicht realisiert werden. Es wurde jedoch ein typischer Trägergasstrom (Argon) eingestellt. Auf der Basis von 6 g/s Argon für das Bündel mit 21 Stäben ergaben sich für einen Einzelstab 0,29 g/s \rightarrow 0,16 l/s = 9,6 l/min (Argon). Da die Wärmeübergangszahl α u. a. vom hydraulischen Durchmesser d_h gemäß

$$\alpha = Nu \lambda / d_h$$

abhängig ist, wurde d_h für die Dimensionierung des Gasführungsrohrs benutzt. Das heißt, der hydraulische Durchmesser bei der konzentrischen Versuchsanordnung (Heizstab/Gasführungsrohr) sollte dem eines Brennstabbündels quadratischer Anordnung entsprechen. Mit dem sog. Gitterabstand $a = 14,3$ mm und dem Hüllrohrradius $r_{Ha} = 5,375$ mm beträgt der hydraulische Durchmesser eines Brennstabbündels quadratischer Anordnung $d_h = 13,47$ mm. Damit ergab sich der Innendurchmesser des Rohrs zu $D = d_h + d = 13,47 + 10,75$ mm = 24,22 mm. Gewählt: $D = 28$ mm, da ein Keramikrohr mit den Abmessungen 34 x 3 mm, $L = 600$ mm vorhanden war.

Auf der Basis der Messwerte aus Test 06 (erste Versuchsserie) wurde der radiale Wärmeverlust abgeschätzt:

der Wärmeverlust durch Konvektion zu 126 W,

der Wärmeverlust durch Strahlung zu 1564 W (entspr. 92,5 % des Wärmeverlusts aus Konvektion + Strahlung),

der Verlust durch Wärmeaustrag des Gases zu 30 W.

Die "wahre" Hüllrohrtemperatur wurde mit einem in die Hüllrohrwand eingebrachten Thermoelement ermittelt. Diese Temperatur wurde mit den Temperaturanzeigen der auf der Hüllrohrwand befestigten TE verglichen (TE-Anordnung: Tabelle 1 sowie Abb. 5).

Das wesentliche Versuchsziel war die Ermittlung der Temperaturdifferenz $T_{\text{wahr}} - T_{\text{außen}} = T_{02} - T_{01} = \Delta T$.

ΔT stellt also die Abweichung der gemessenen von der "wahren" Hüllrohrwandtemperatur dar.

Zur Ermittlung des Streubands der möglichen Korrekturwerte wurden fünf Aufheizversuche unter identischen Bedingungen gefahren: Test 9 - 13. Der zeitliche Temperaturverlauf des Tests 9 ist in der Abb. 6 wiedergegeben.

Ergebnisse

Die Auswertung der Temperaturdaten erfolgte bei 600, 900 und 1100 °C. Dabei wurden folgende Temperaturdifferenzen ermittelt (s. a. Tabelle 2):

Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{02} - T_{01}$ (in das Hüllrohr eingebettetes TE im Vergleich zum Oberflächen-TE 2,3 mm \varnothing)

Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{02} - T_{08}$ (in das Hüllrohr eingebettetes TE im Vergleich zum Oberflächen-TE 2,3 mm \varnothing mit Strahlenschirm)

Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{02} - T_{10}$ (in das Hüllrohr eingebettetes TE im Vergleich zum Oberflächen-TE 2,0 mm \varnothing mit Inconel Mantel)

Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{08} - T_{01}$ (Einfluß des Strahlenschirms)

Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{10} - T_{01}$ (Vergleich der Oberflächen-TE mit Duplex-Mantel 2,3 mm \varnothing mit TE 2,0 mm \varnothing , Inconel-gemantelt)

Die in erster Linie interessierende Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{02} - T_{01}$ ist in Abb. 7 als Streubereich aus fünf Aufheizversuchen für 600, 900 und 1100 °C dargestellt.

Bei den Tests 09 bis 13 betragen die Streubreiten der Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_{02} - T_{01}$:

62 - 78 K	bei 600 °C
74 - 108 K	bei 900 °C
76 - 108 K	bei 1100 °C.

Der Messfehler des außen aufgebrachteten TE für die Aufheizphase bei 900 und 1100 °C kann in erster grober Näherung angegeben werden zu:

ca. 90 ± 20 K.

Um diesen Wert ist die wirkliche Hüllrohrtemperatur gegenüber der gemessenen Temperatur erhöht.

Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_{02} - T_{08}$:

Aufgrund des Strahlenschirms am TE 08 reduziert sich das ΔT , d. h. das TE mit Strahlenschirm kam näher an die "wahre" Wandtemperatur heran. So beträgt z. B. $\Delta T_{\max} = 77$ K ($T_{02} - T_{08}$ im Test 09, 900 °C) gegenüber 108 K ($T_{02} - T_{01}$ im Test 09, 900 und 1100 °C). In den Tests 09 bis 11 nimmt das ΔT ab, in den Versuchen 12 und 13 steigt es wieder.

Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_{08} - T_{01}$:

Der Einfluss des Strahlenschirms ist im direkten Vergleich der Temperaturen T_{08} und T_{01} zu erkennen. Das maximale ΔT nimmt von Test zu Test ab: Bei 1100 °C beträgt das $\Delta T = 41$ K im Versuch mit neuem Brennstabsimulator (Test 09), ab Test 11 beträgt es nur noch 11 - 12 K. Dann also hat der Strahlenschirm keine praktische Bedeutung mehr.

Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_{02} - T_{10}$ und $\Delta T = T_{10} - T_{01}$:

Das Inconel-gemantelte TE 2,0 mm \varnothing kommt der "wahren" Wandtemperatur am nächsten. So betragen die Abweichungen $\Delta T = T_{02} - T_{10}$:

17 - 44 K	bei 600 °C
24 - 62 K	bei 900 °C
28 - 71 K	bei 1100 °C.

$\Delta T = T_{02} - T_{10}$ nimmt in den Tests 09 bis 11 ab, in den Versuchen 12 und 13 steigt es wieder.

Die Abweichungen $\Delta T = T_{10} - T_{01}$ liegen zwischen 27 und 66 K, lassen aber keine Systematik erkennen.

Zur Reproduzierbarkeit:

In Test 12 und 13 war die Aufheizrate bei 1100 °C mit 0,1 - 0,18 K/s etwas geringer als in Test 9 (0,3 K/s). Betrachtet man ausschließlich die Temperaturdifferenzen der beiden letzten Tests (Test 12 und 13), so erkennt man, dass der Streubereich zwischen den beiden Versuchen im Hinblick auf die Temperaturdifferenzen klein ist:

ΔT	Test 12	Test 13
T02 - T01	94 K	100 K
T02 - T08	83 K	88 K
T02 - T10	28 K	43 K
T08 - T01	11 K	12 K
T10 - T01	66 K	57 K

Schlussfolgerung, Empfehlung

Die Kenntnis der genauen Hüllrohrtemperatur und damit des Temperaturmessfehlers auf Grund der Thermoelementanbringung ist insbesondere für die Verifizierung von Rechnungen mit Hilfe von Rechenprogrammen von großer Bedeutung.

Der in den TE-Vorversuchen gefundene Temperaturkorrekturwert gilt streng genommen ausschließlich für die Bedingungen in der Versuchsapparatur. Da die radialen Wärmeverluste in der QUENCH-Versuchsanlage geringer sind, würde demnach auch der Messfehler kleiner sein. Das gilt für eine Argongasatmosphäre in der Teststrecke. In der Dampf- oder vor allem in der Abschreckphase dürfte der radiale Wärmetransport auf Grund des verbesserten Wärmeübergangs von der Stabhülle an die Umgebung zunehmen. Und diese Zunahme würde wiederum zu einem größeren Temperaturgradienten im Bereich des außen aufgebrachten Thermoelements und damit zu einem größeren Messfehler führen. Es könnte sein, dass der Messfehler dadurch doch in die Größenordnung des in den TE- Vorversuchen ermittelten Fehlers kommt. Genauen Aufschluss kann aber nur eine Überprüfung unter den wirklichen Testbedingungen in der QUENCH-Versuchsanlage geben. Deshalb wird empfohlen, zusätzlich zu den hier beschriebenen Vorversuchen ein künftiges QUENCH-Experiment der Bestimmung des TE-Fehlers zu widmen. Das Versuchs-bündel könnte dann auch unter Dampf- (Aufheizphase) und Quench-Wasser- (Abkühlphase)-Bedingungen getestet werden.

Tabelle 1: Verwendete Thermoelemente in den TE-Vorversuchen

TE	TE-Typ	TE-Lage
T 01	W/Re, HfO ₂ -Isolation, Duplex-Mantel Ta/Zry, 2,3 mm Ø	auf Zry-Hüllrohr
T 02	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 0,5 mm Ø	im Zry-Hüllrohr, in 0,5 mm tiefer Nut verlegt ("wahre" Hüllwandaußentemp.)
T 03	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 1,0 mm Ø	Wand des Gasführungsrohrs
T 04	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 1,0 mm Ø	Isolation außen
T 05	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 1,0 mm Ø	Gaseintritt (unteres Ende d. Heizzone)
T 06	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 1,0 mm Ø	Gaseintritt (oberes Ende d. Heizzone)
T 07	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 1,0 mm Ø	Elektrode oben
T 08	wie T 02, jedoch mit Strahlenschirm an der TE-Messspitze	auf Zry-Hüllrohr
T 10	NiCr/Ni, Inconel-Mantel, 2,0 mm Ø	auf Zry-Hüllrohr

Tabelle 2: Temperaturdifferenzen zwischen dem Wand-TE
(T02, Referenz) und den Oberflächen-TEs

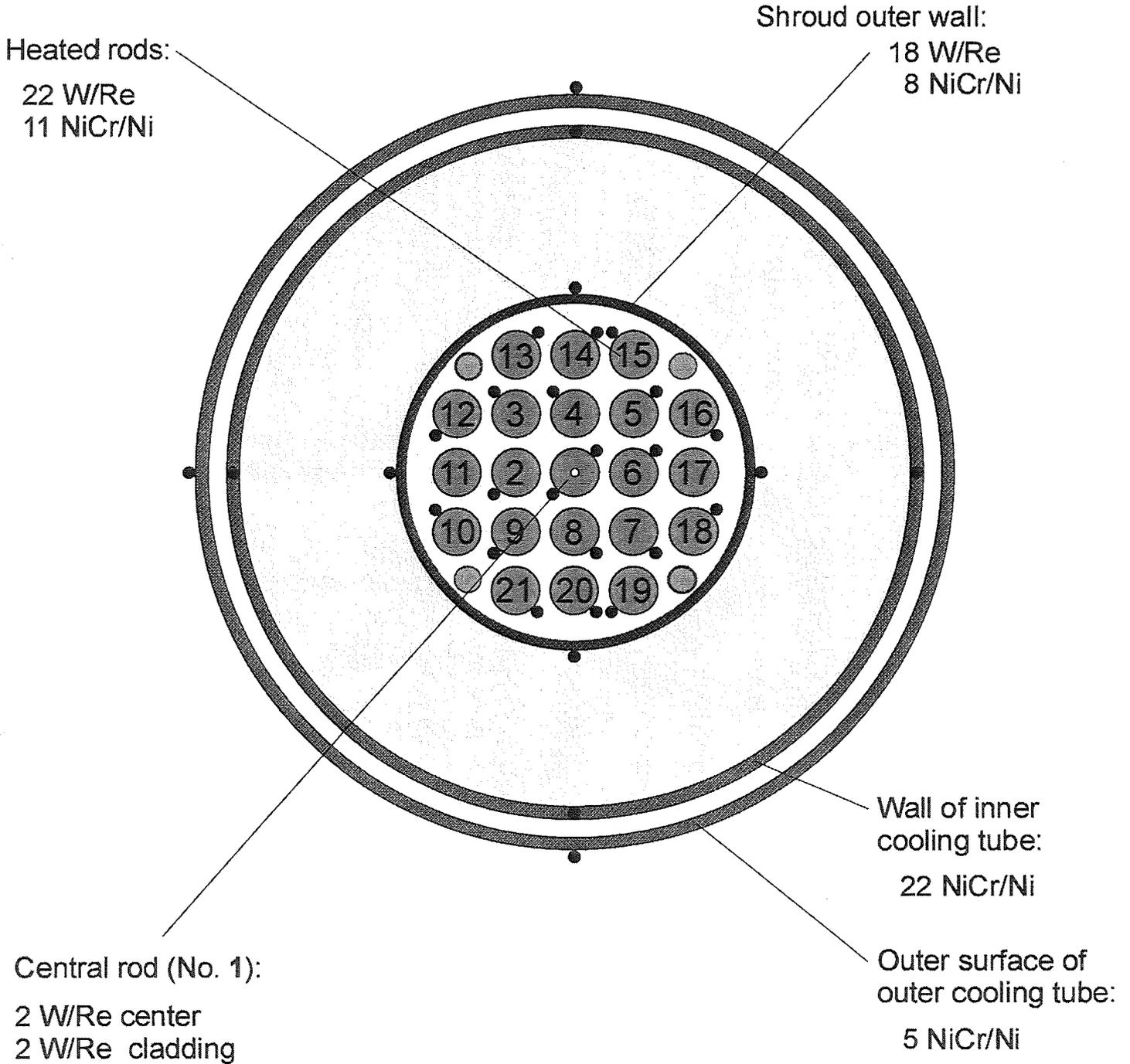
	T02 - T01 [K]			T02 - T08 [K]		
	600 °C	900 °C	1100 °C	600 °C	900 °C	1100 °C
Test 09	78	108	108	54	77	67
Test 10	73	82	76	56	66	60
Test 11	64	74	79	52	63	68
Test 12	62	89	94	55	77	83
Test 13	70	93	100	66	84	88

	T02 - T10 [K]			T08 - T01 [K]		
	600 °C	900 °C	1100 °C	600 °C	900 °C	1100 °C
Test 09	38	62	71	24	36	41
Test 10	34	43	51	18	16	16
Test 11	23	24	29	12	11	11
Test 12	17	29	28	7	13	11
Test 13	44	40	43	4	9	12

	T10 - T01 [K]		
	600 °C	900 °C	1100 °C
Test 09	40	49	37
Test 10	40	40	25
Test 11	41	50	50
Test 12	45	59	66
Test 13	27	53	57

QUENCH Test Bundle

TC Instrumentation and Rod Designation (Top View)

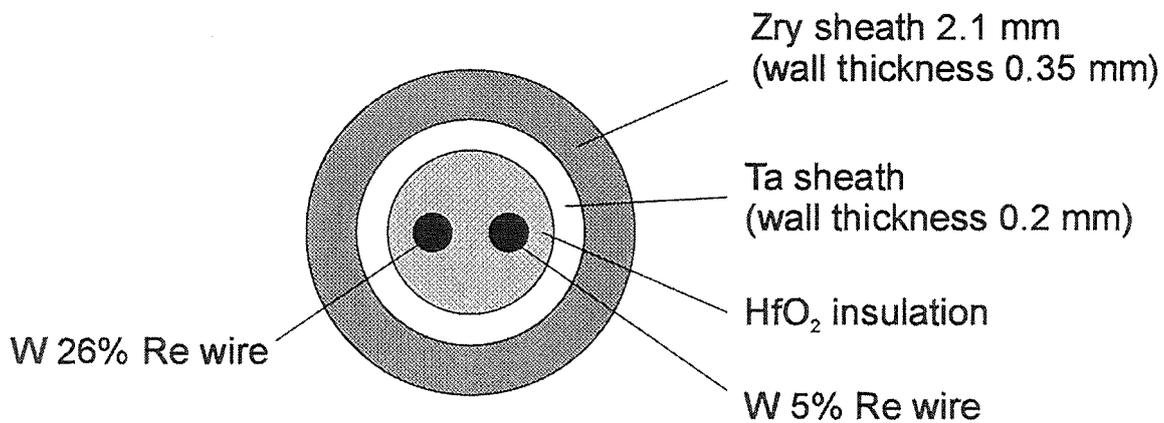


Total of 90 thermocouples (44 W/Re, 46 NiCr/Ni)

at 17 axial elevations from -250 mm to +1350 mm with distances of 100 mm

Abb.: 1

TC Instrumentation of the QUENCH Test Bundle with High-Temperature Thermocouples



TC Fastening Concept for the QUENCH Test Rods **Detail**

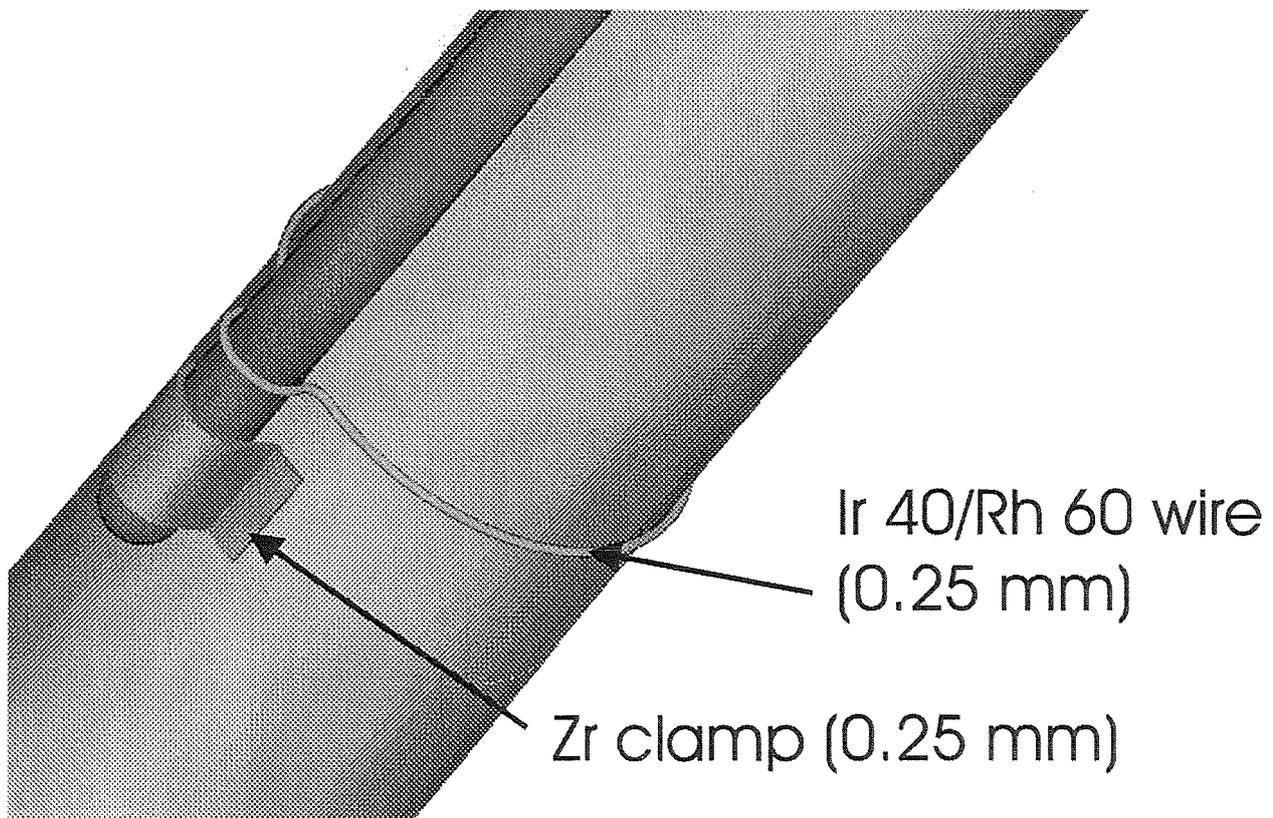


Abb.: 3

TC Pre-Test Arrangement

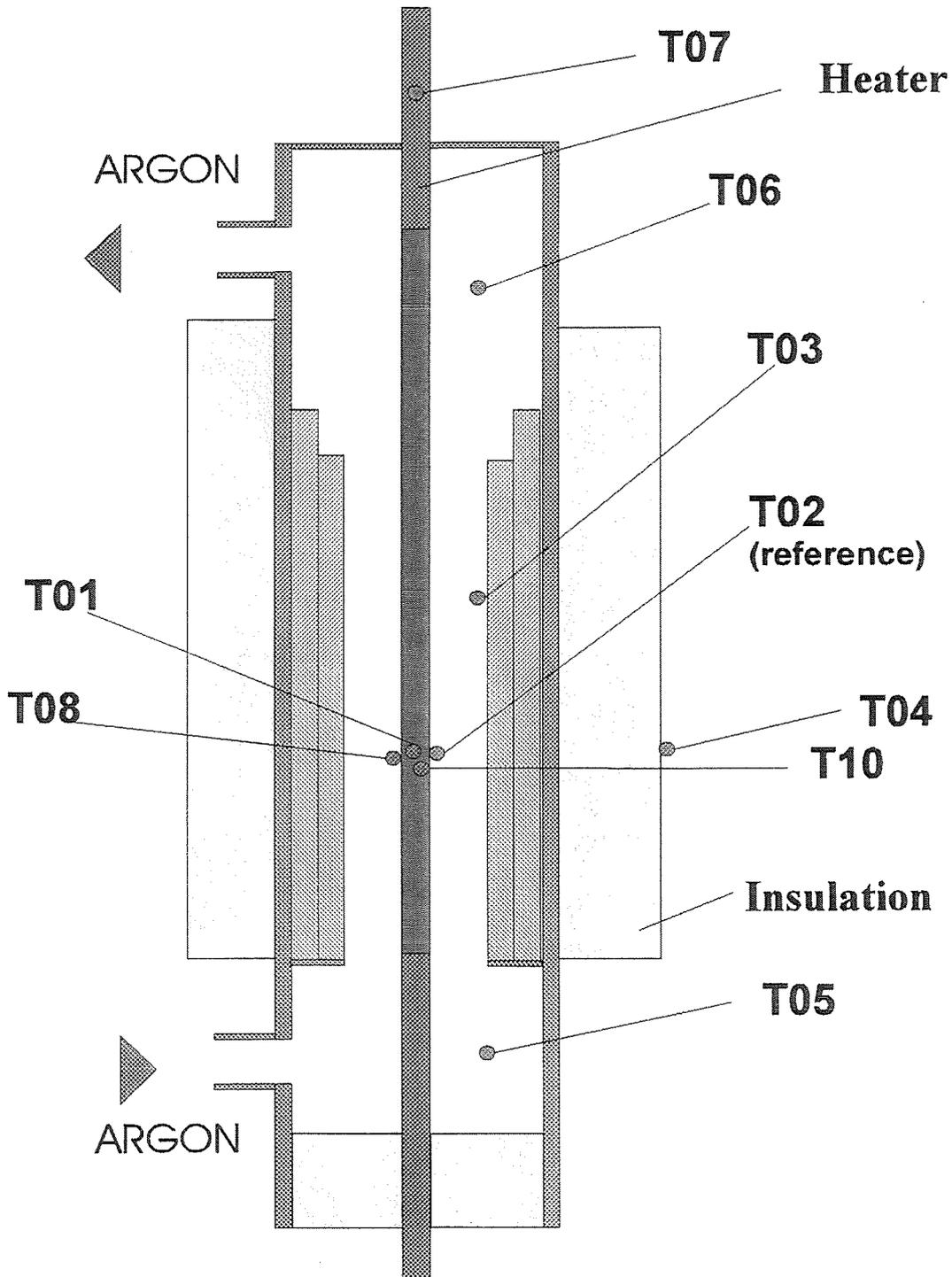


Abb.: 4

QUENCH Project; Thermocouple Positions in the TC Pre-Tests

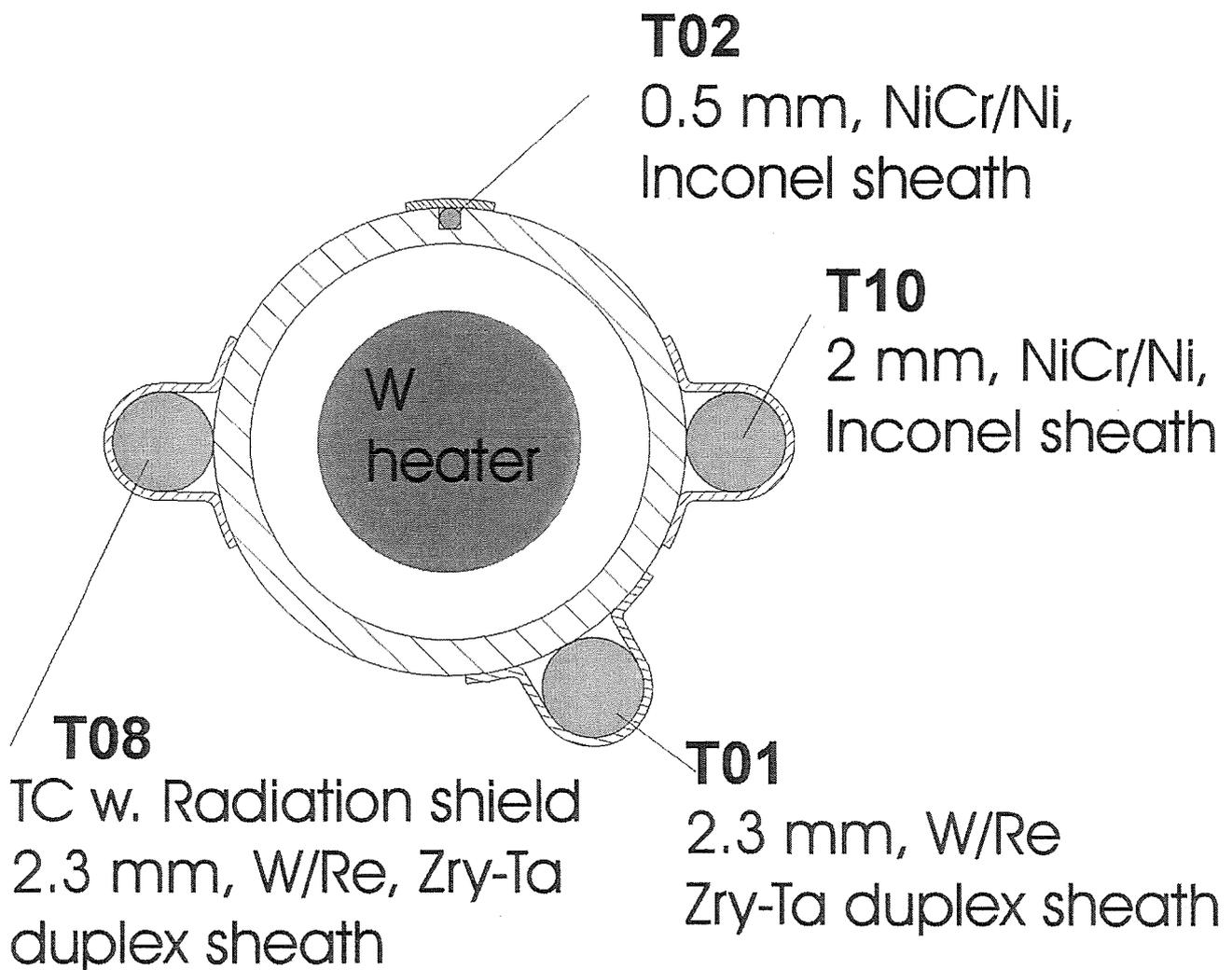
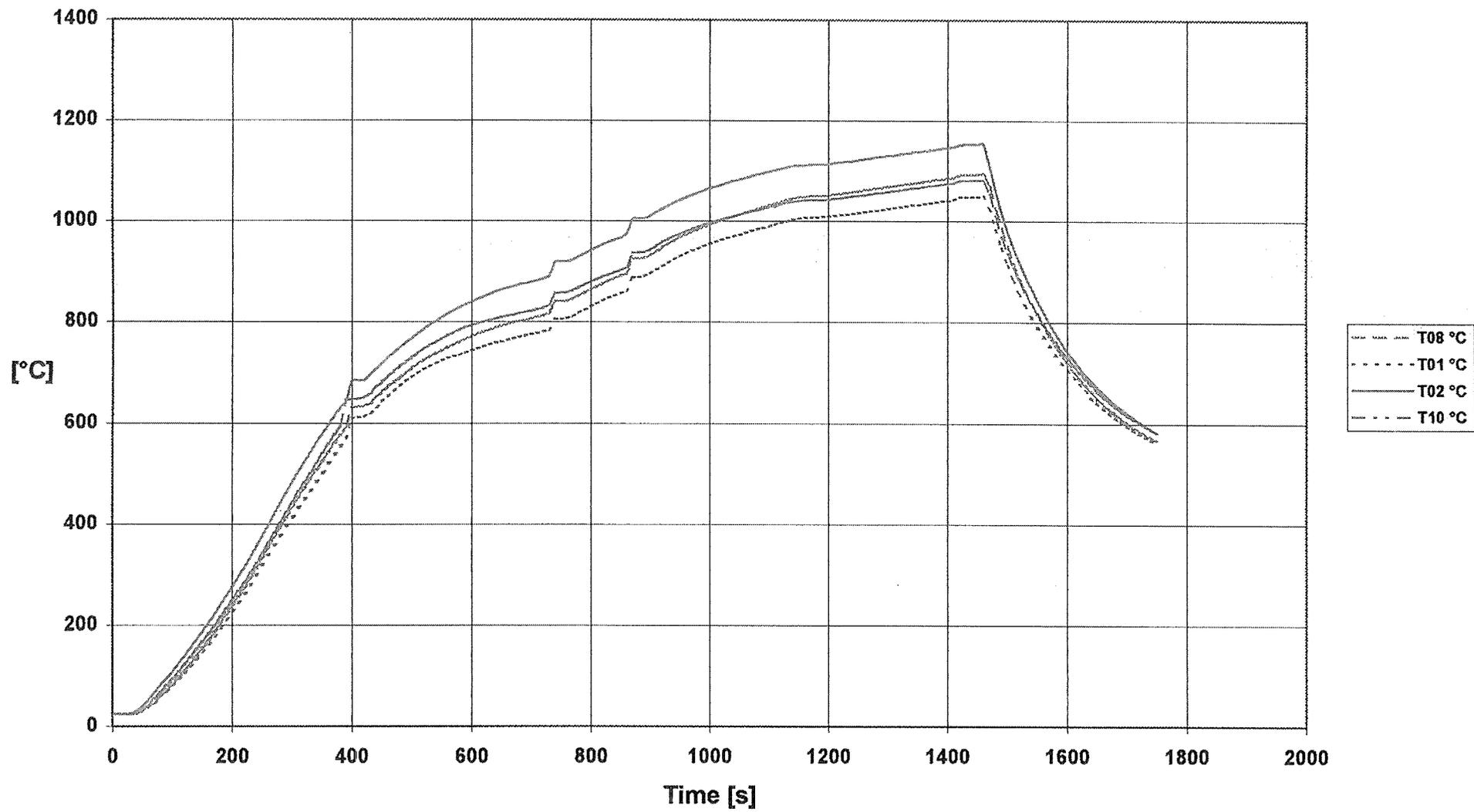


Abb.: 5

Test 9: Temperatures T 01, T 02, T 08, T 10



Temperature difference T02-T01

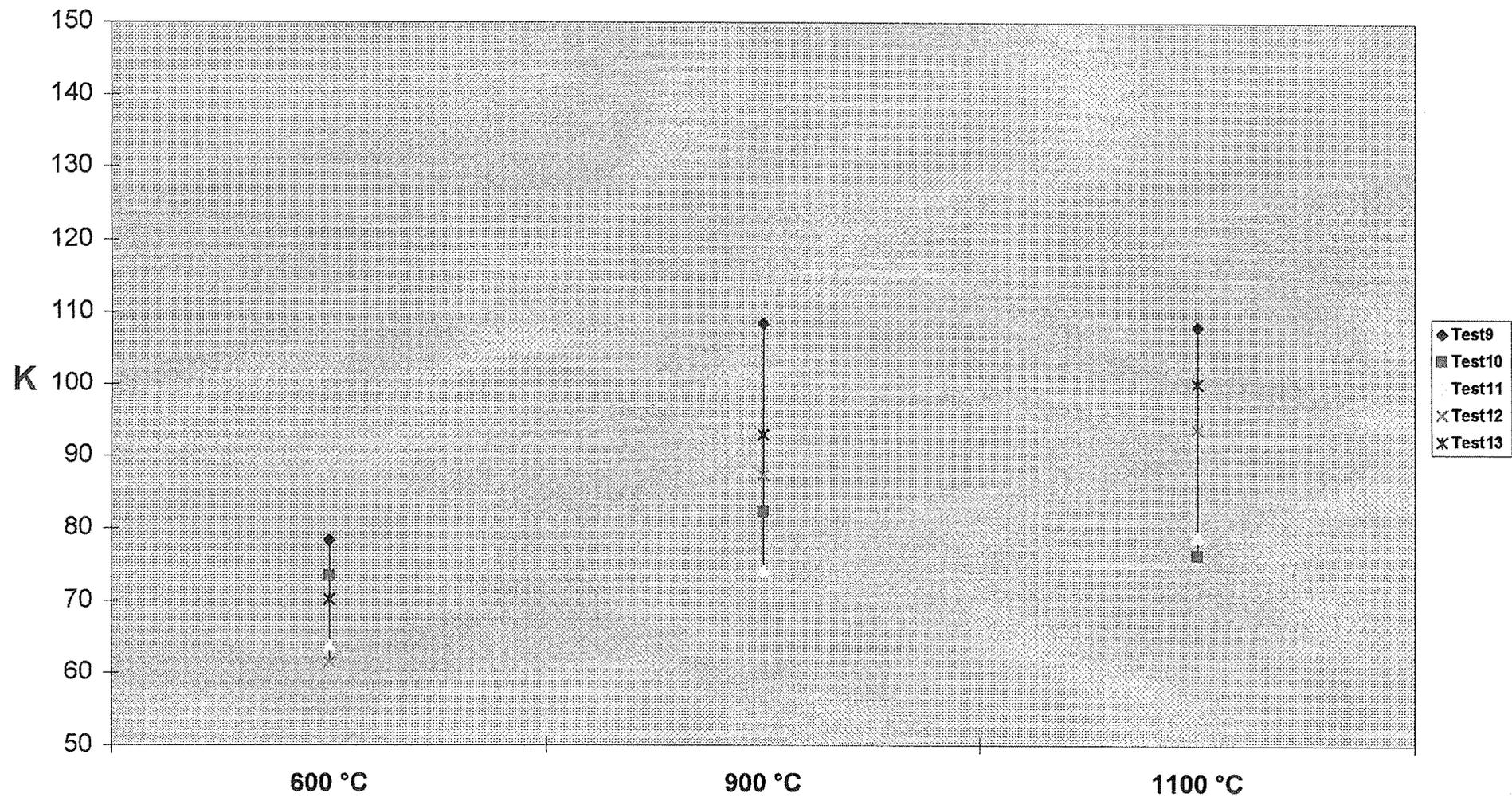


Abb.: 7

II. Inbetriebnahme-Versuche in der QUENCH-Anlage

(P. Hofmann, A. Miassoedov, M. Steinbrück, H. Metzger, IMF I; J. Moch, D. Piel, L. Schmidt, IMF III; S. Horn, E. Mackert, W. Leiling, L. Sepold, HIT)

Zusammenfassung

Die QUENCH-Versuchsanlage dient zur Ermittlung des Wasserstoffquellterms, der sich bei einer Einspeisung von Notkühlwasser in einen überhitzten, ausgedampften Reaktorkern eines Leichtwasserreaktors (LWR) ergibt. Die Experimente werden mit elektrisch beheizten Brennelementsimulatoren bestehend aus 21 Brennstabsimulatoren von ca. 2,50 m (beheizte Länge = 1024 mm) durchgeführt. Von den 21 Stäben sind 20 beheizt, der Zentralstab ist unbeheizt. Die Anlage konnte mit der Fa. Siemens/KWU innerhalb von zwei Jahren konstruiert und errichtet werden. Dabei erwiesen sich die Erfahrungen aus dem Betrieb der CORA-Versuchsanlage und den CORA-Versuchen als sehr hilfreich. Begleitende Auslegungsrechnungen des FZK/IRS, der AEA Technology und Ruhr-Universität Bochum trugen zur Konzeptgestaltung bei.

Vom 9. - 16. Oktober 1997 wurden Kalibrierversuche und ein erster Abschrecktest erfolgreich durchgeführt. Dabei wurden die thermischen Daten der Anlage ermittelt und die Funktionsfähigkeit der Komponenten und Messeinrichtungen nachgewiesen. Die Kalibrierversuche wurden bei quasistationären Temperaturen gefahren. Der abschließende Abschrecktest gliederte sich in mehrere Phasen, d.h. in eine Voroxidationsphase, eine transiente Phase (Aufheizphase) und eine Abschreck- bzw. Quench-Phase.

Die Voroxidation ergab eine maximale Oxidschichtdicke von 500 μm in der 900 mm-Bündelebene. Die transiente Phase wurde mit einer Aufheizrate von 1 K/s bis zu einer maximalen Stab-Hüllrohrtemperatur von 1700 K durchgeführt. Bei dieser Temperatur wurde das Fluten des Versuchsbündels von unten mit Wasser ausgelöst und der dabei entstandene Wasserstoff quantitativ ermittelt.

Einleitung

Eine der wichtigsten Unfallschutzmaßnahmen bei einem sehr unwahrscheinlichen Reaktorstörfall mit lokalen Kernschmelzen ist das Einspeisen von Wasser in den überhitzten, teilzerstörten Kern, um diesen wieder abzukühlen. Bei diesem Vorgang kommt es zu sehr heftigen exothermen chemischen Reaktionen zwischen dem entstehenden Wasserdampf und den Zirkaloy-Brennelementhüllrohren unter gleichzeitiger Bildung von ZrO_2 und Wasserstoff. Es wird angenommen, daß das Wiederfluten eines z. T. ausgedampften Reaktorkerns das Störfallszenario mit der größten Erzeugungs- und Freisetzungsrates von Wasserstoff in das Containment darstellt. Der entstehende Wasserstoff muß im Reaktorcontainment katalytisch abgebunden oder kontrolliert verbrannt werden, um eine Knallgasreaktion zu verhindern. Es ist deshalb wichtig, den sogenannten Wasserstoffquellterm, d. h. Gesamtmenge und Rate der Wasserstoffproduktion zu kennen.

Der Wasserstoffquellterm kann aufgrund des komplexen physikalisch-chemischen Hochtemperatur-Materialverhaltens beim Abschrecken nicht durch die derzeit vorhandenen Zirkaloy/Dampf-Oxidationskorrelationen bestimmt werden. Diese in isothermen Experimenten ermittelten Korrelationen liefern im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen deutlich geringere Werte. Um die erforderlichen experimentellen Daten für die Entwicklung neuer analytischer Modelle zu erhalten, ist es deshalb notwendig, entsprechende Abschreckexperimente durchzuführen. Neben der Durchführung von Einzeleffektuntersuchungen (s. Beitrag im gleichen Bericht) mit kurzen Brennstababschnitten sind integrale Experimente mit Brennelementbündeln unter praxisrelevanten thermohydraulischen Randbedingungen erforderlich. Das Verhalten des Wasserstoffes gegenüber dem Zirkaloy-Hüllmaterial wird darin systematisch untersucht. Die Kombination von Integralexperimenten und Einzeleffektuntersuchungen ist unerlässlich, da nicht alle wichtigen Versuchsparameter in den erheblich komplizierteren und damit teureren Integralexperimenten untersucht werden können.

Für die wissenschaftliche Auswertung und Bewertung der QUENCH-Experimente ist das IMF I in Zusammenarbeit mit dem IMF III, dem IRS und der HIT verantwortlich. Die Experimente sind in das 4. Rahmenprogramm der EG "Investigation of Core Degradation" (COBE-Projekt FI4S-CT95-0013) eingebettet und sind außerdem Bestandteil der

FZK/Siemens-Industriekooperation. Beide Institutionen sind auch finanziell an dem Vorhaben beteiligt. Die Versuchsergebnisse dienen als Datenbasis für die Entwicklung von sogenannten "Abschreckmodellen", die in Rechenprogrammen zur Beschreibung des Hochtemperatur-Materialverhaltens im Reaktorkern bei schweren Reaktorstörfällen integriert werden sollen.

Aufbau der Versuchsanlage

Die QUENCH-Versuchsanlage besteht im wesentlichen aus der Teststrecke mit dem Brennelementsimulator, dem Wasser-, Gas- und Dampfsystem, den Wasserstoff-Meßsystemen, dem Prozessleit- und Datenerfassungssystem (s. Fließschema der Anlage, Abb. 1). Wasser-, Gas- und Dampfsystem benötigen eine elektrische Leistung von ca. 180 kW während der Brennelementsimulator mit max. 70 kW (zwei Gruppen à 35 kW) elektrisch beheizt werden kann. Zur Kühlung der Teststrecke und des Abgasrohrs wurde ein Wasserkühlkreislauf installiert, der eine Wärmeleistung von über 200 kW abführen kann.

Die Hauptkomponente der Versuchsanlage ist die Teststrecke mit dem Brennstab-simulatorbündel bzw. Brennelementsimulator (Abb. 2). Der überhitzte Dampf, den ein Verdampfer und ein nachgeschalteter Überhitzer liefern, wird zusammen mit einem Trägergasstrom (Argon) am unteren Bündelfuß in die Teststrecke eingeleitet. Dampf und Argon sowie der bei der Zirkonium-Dampf-Reaktion gebildete Wasserstoff verlassen die Teststrecke am Bündelkopf. Das Abgas wird durch das wassergekühlte Abgasrohr zum Kondensator geleitet. Hier wird der Dampf abgeschieden und das Argon-H₂-Gemisch ins Freie geleitet. Am Abgasrohr wird ein kleiner Teilstrom des Dampf-Argon-H₂-Gemischs abgezapft und einem Massenspektrometer (Abb. 3) zur H₂-Messung zugeführt. In der Abgasstrecke hinter dem Kondensator wird ein Bypass-Strom des Argon-H₂-Gemischs über ein zweites H₂-Analysegerät ("Caldos", Abb. 4) geleitet. Aufgrund der unterschiedlichen Montageorte der beiden Wasserstoffanalysesysteme in der Anlage ergeben sich unterschiedliche Verzögerungszeiten, und damit unterschiedliche Korrekturen für die Messsignale. Da das Massenspektrometer nahe am Teststreckenaustritt gelegen ist,

beträgt die Verzögerungszeit lediglich 4 – 8 s während beim Caldos-Gerät eine Korrektur von ca. 100 s angesetzt werden muss.

Das QUENCH-Testbündel (Querschnitt in Abb. 5) besteht aus 21 Brennstabsimulatoren mit einer Gesamtlänge von ca. 2,50 m. Zwanzig Brennstabsimulatoren sind auf einer Länge von 1024 mm beheizt (Abb. 6). Der Zentralstab (Abb. 7) ist unbeheizt. Die Hüllrohre sind den DWR-Hüllrohren identisch¹: Zircaloy-4, 10,75 mm Außendurchmesser und 0,725 mm Wanddicke (Tab. 1). Die Heizung der Stäbe erfolgt elektrisch mit Hilfe eines 6 mm-Wolfram-Heizers, der sich in der Mitte der Brennstabsimulatoren befindet und von ZrO₂-Ringtabletten umgeben ist. Die vier Eckpositionen im Bündel sind mit sogenannten Instrumentierungsstäben aus Zircaloy 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 Oxidschichtdickenermittlung nach dem Experiment. Eine Eckposition ist mit einem Kalibrierrohr ausgerüstet, über das während des Betriebes von außen Gas in das Bündel eingespeist werden kann, um z. B. Laufzeitmessungen am Massenspektrometer und dem Caldosgerät durchzuführen. Das Testbündel ist von einem Dampfführungsrohr, dem sogenannten Shroud, aus Zircaloy umgeben. Der Shroud ist bis zur Oberkante der beheizten Bündelzone mit ZrO₂-Fasermaterial isoliert. Der außen angeordnete Kühlmantel wird im isolierten Bereich des Shrouds mit Argon-Gas gekühlt und im oberen, nicht isolierten Shroud-Bereich mit Wasser.

Testbündel, Shroud und Kühlmantel sind mit 90 Thermoelementen instrumentiert, die auf 17 Meßebenen von -250 mm bis +1350 mm angeordnet sind (s. Abb. 8). Im heißen Bereich von Bündel und Shroud werden spezielle Hochtemperatur-Thermoelemente eingesetzt und im kälteren Bereich ($T < 1000^{\circ}\text{C}$) sowie am Kühlmantel NiCr/Ni-Thermoelemente.

Die Bündelthermoelemente auf den unteren zehn Meßebenen (sieben Hochtemperatur-Thermoelemente und elf NiCr/Ni-Thermoelemente) werden nach unten durch den Bündelfuß über Verschraubungen dicht nach außen geführt und die Thermoelemente von den oberen sieben Meßebenen (19 Hochtemperatur-Thermoelemente) nach oben durch den

¹ Da bei den QUENCH-Experimenten das Verhalten des Hüllrohrs gegenüber Wasser und Dampf untersucht wird, kann auf den Einsatz von UO₂-Tabletten verzichtet werden.

Bündelkopf ebenfalls über Dichtverschraubungen. Die Shroud-Thermoelemente (18 Hochtemperatur-Thermoelemente und acht NiCr/Ni-Thermoelemente) werden alle nach unten durch den Bündelfußflansch geführt. Auch hier werden Dichtverschraubungen verwendet. Die Thermoelemente sind auf den Hüllrohren und außen auf dem Shroud mit punktgeschweißten Zircaloy-Laschen befestigt. Zusätzlich werden die Hochtemperatur-Thermoelemente an den Meßstellen noch mit Iridium-Rhodium-Drähten festgebunden (siehe Beitrag "Ergebnisse der TE-Vorversuche zu den Experimenten in der QUENCH-Versuchsanlage" von L. Sepold, S. Horn und W. Leiling im gleichen Bericht).

Fertigung der Brennstab-Simulatoren

Nach der Fertigung der Einzelteile werden die Kupfer- und Molybdän-Elektroden mittels Hochtemperatur-Lötung miteinander verbunden. Die Lötung wird unter Vakuum durchgeführt, das verwendete Lot (VH950, AuNi18 in Pulverform, Körnung < 250 µm) hat hervorragende Benetzungs- und Fließigenschaften. Größte Aufmerksamkeit ist der Vorbereitung der Lötstelle zu widmen (reinigen von Fett etc., entfernen der Oxidschichten). Die gelöteten Elektroden werden anschließend plasmabeschichtet mit ZrO_2 . Die 0.2 mm dicke ZrO_2 -Schicht stellt die elektrische Isolation zwischen den Elektroden und dem Hüllrohr dar. Nach dem Auffädeln der ZrO_2 -Ringpellets auf den Wolfram-Heizer wird dieser beidseits mit den Elektroden verschraubt. Das über die Elektroden bzw. die Ringpellets geschobene Hüllrohr muß dann noch richtig positioniert und zwischen Hüllrohr und oberer Cu-Elektrode die elektrisch isolierende Bornitridhülse eingeführt werden. Das anschließende Hämmern des Hüllrohres im Bereich der Bornitridhülse bringt die Fixierung von Hüllrohr und Elektrode über die Bornitridhülse. Relativbewegungen bei Temperaturänderungen zwischen Hüllrohr und Elektroden bzw. Wolfram-Heizer sind um diesen Fixpunkt möglich. Die axiale Fixierung des Brennstab-Simulators im Testbündel (Brennelement-Simulator) ist gegeben durch eine Nut in den oberen Cu-Elektroden. In diese Nut wird ein geteilter Ring eingelegt, der sich auf der sogenannten Kopfplatte abstützt.

Beim unbeheizten Zentralstab werden im Bereich der Heizzone ZrO_2 -Pellets eingefüllt. Die in den Pellets vorhandene Zentralbohrung von 2,5 mm ermöglicht das Einführen von je einem Thermoelement vom oberen bzw. unteren Simulatorende.

Der Isolationswiderstand ist zwischen den einzelnen Arbeitsschritten zu prüfen. Er soll immer $> 5 M\Omega$ sein (gemessen zwischen Elektroden und Hüllrohr).

Bündelmontage

Die Teststrecke besteht aus drei Baugruppen, die getrennt von einander vormontiert werden. Eine Baugruppe umfaßt den Kühlmantel mit Bündelkopfgehäuse, die zweite Baugruppe das instrumentierte Dampfführungsrohr (Shroud) mit dem Bündelfuß und die dritte Baugruppe das instrumentierte Testbündel mit dem Bündelkopf. Testbündel und Shroud einschließlich der zugehörigen Thermoelemente müssen für jedes Experiment erneuert werden. Bündelkopf und -fuß sowie der Kühlmantel sind ebenfalls mit Thermoelementen bestückt, bleiben aber unverändert. Beim Quenchen des Bündels von oben müssen am Bündelkopf Veränderungen vorgenommen werden.

Die Montage des Testbündels ist sehr aufwendig und diffizil. Zunächst wird die Bündelstruktur bestehend aus Bündelkopf, Bündelfußplatte und den Abstandshaltern mit Hilfe des Zentralstabes und von zwei Randstäben auf einer speziellen Montagehelling in horizontaler Lage aufgebaut. Dann wird ein Stab nach dem anderen von innen beginnend von oben durch die Keramikplatte im Bündelkopf (Hitzeschild) in die Bündelstruktur hineingeschoben und die Thermoelemente zugeführt. Erst nach einer Dichtheitsprüfung an der Bündelfußplatte (He-Lecktest) nach jedem Stabeinbau - Stäbe und Thermoelemente sind in der Fußplatte mit O-Ringen abgedichtet - werden die Thermoelemente auf dem Stab befestigt. Stäbe und Thermoelemente werden nach jedem Montageschritt elektrisch geprüft (Isolationswiderstand und Durchgangswiderstand).

Nach oben im Bündelkopf wird das Bündel über eine Keramikplatte (Al_2O_3) mit Hochtemperatur-O-Ringen abgedichtet und danach die Isolierplatte aus Kunststoff (PEEK) ebenfalls mit O-Ring-Dichtungen montiert. Der Raum zwischen Keramik- und

Kunststoffplatte bildet die Kopfkühlkammer (Wasserkühlung). Auch bei dieser Montageprozedur sind umfangreiche Dichtheitsprüfungen erforderlich.

Abschließend werden die Stäbe über eine Nut-Sicherungsring-Anordnung an der Oberkante der Isolierplatte fixiert und die Stromzuführungen für die Heizer montiert.

Die Shroud-Montage ist etwas weniger problematisch als die Bündelmontage. Zunächst wird der Shroud mit dem Bündelfuß verschraubt. Nach dem Anbringen der Thermo-elemente wird der Shroud mit ZrO_2 -Halbschalen isoliert, in den Kühlmantel eingebaut und abschließend eine Dichtheitsprüfung durchgeführt. Wie bei der Bündelmontage sind auch hier nach den einzelnen Montageschritten elektrische Prüfungen an den Thermo-elementen erforderlich.

Kühlmantel und Bündelkopfgehäuse werden nun miteinander verschraubt in den Testbehälter eingebaut und an die verschiedenen Versorgungsleitungen (Dampfzuführung, Abgasrohr, Quench-Leitung, Gas- und Kühlwasserleitungen) angeschlossen. Für die zahlreichen Verbindungen insbesondere bei höheren Temperaturen haben sich u. a. Graphitdichtungen bewährt.

Vor dem Einbau wird das Bündel von der Horizontalen in die Vertikale gebracht, mit dem Hallenkran in die Teststrecke von oben abgesenkt und der Bündelkopf mit dem Bündelkopf-Gehäuse verschraubt. Dann wird am Bündelfuß die Isolierplatte - sie bildet den Abschluß der Bündelfuß-Kühlkammer nach außen - in einem aufwendigen Verfahren montiert und die Stromzuführungen über Kontaktgleitringe auf die Heizer aufgeschoben. Abschließend werden Kabelverbindungen zwischen den Heizerstromanschlüssen und der Hochstromanlage hergestellt sowie alle Meßkabel angeschlossen.

Datenerfassung und Prozesssteuerung

Die Quench-Experimente werden über ein leistungsfähiges Prozessleit- und Datenerfassungssystem auf PC-Basis geführt. Drei Rechnersysteme mit Netzwerkverbindung übernehmen jeweils Datenerfassung, Datenaufzeichnung,

Online-Visualisierung sowie Prozeßführung, Regeln/Steuern, Anlagenschutz.

Die Datenerfassungsanlage ermöglicht die Erfassung von ca. 200 Messkanälen mit einer Frequenz von max. 25 Hz pro Kanal. Die Versuchsdaten werden mit Datums- und Zeitangaben versehen und im Binär-Format als Rohdaten gespeichert. Nach dem Experiment erfolgt eine Konvertierung in ein ASCII-Format mit gleichzeitiger Umrechnung in SI-Einheiten².

Bei der Messwerterfassung der Inbetriebnahme-Versuche waren 146 Kanäle mit Meßsignalen belegt. Die Daten wurden während der einzelnen Versuchsphasen mit verschiedenen Frequenzen aufgezeichnet.

Für die Prozessführung wird vom Leitreechner ein Systemschaltbild mit ausgewählten aktuellen Messwerten dargestellt. Außerdem wird der Betriebszustand der aktiven Komponenten (Pumpen, Dampferzeuger, Überhitzer, Gleichstromanlage, Ventile) angezeigt. Die Parameter-Einstellungen der Regelkreise und Steuerungen können online verändert werden. Verriegelungen und Grenzwertabschaltungen sorgen für einen sicheren Betrieb der Anlage. Durch Umschalten des Anlagenstatus (1 ... 6) können vordefinierte Betriebsphasen (z.B. Aufheizphase, Quenchphase) automatisch angesteuert werden.

Mit Hilfe der Online-Visualisierung ist es möglich, die aktuellen Werte ausgewählter Meßstellen in tabellarischer sowie grafischer Form zu beobachten und zu protokollieren. Die grafische Darstellung ermöglicht die Einstellung von acht Diagrammen mit je sechs Kurvenzügen, also insgesamt 48 Messkanälen, die online - entsprechend dem Verlauf des Experimentes - immer neu ausgewählt werden können.

Datenaufbereitung

Die Auswertung der Versuchsdaten erfolgt mit den Rechenprogrammen "Excel 7" (Microsoft) und "Origin 5.0" (Microcal). Folgende Testdaten werden gruppenweise aufbereitet:

- a) Elektrische Leistung der beiden Leistungsgruppen (E 501 x E 503 und E 502 x E 504)

² Die Einheit für die Temperatur wird in [°C] ausgegeben und später in der Datenaufbereitung in [K] umgerechnet.

b) Anlagedaten

- T 511/T 512 Bündel Eintritts-/austrittstemperatur
- F 401 Argondurchsatz (mit T 401, P 401)
- F 205 Dampfdurchsatz (mit T 205, P 205)
- F 901 Abgasmengenstrom vor CALDOS (mit T 901, P 901)
- Q 901 Wasserstoff (CALDOS)
- F 104 Quenchwassermengenstrom

c) Zeitliche Temperaturverläufe der Ebenen 1 (- 250 mm), 4 (50 mm), 9 (550 mm), 12 (850 mm), 13 (950 mm), 15 (1150 mm)

d) Radialprofile für die Ebenen 4 (50 mm), 9 (550 mm), 13 (950 mm), 15 (1150 mm) für eine bestimmte Zeit bei Temperaturkonstanz

e) Axialprofile für eine bestimmte Zeit bei Temperaturkonstanz

Wasserstoffmessung

Für die Messung des Wasserstoffs stehen zwei unabhängige Meßsysteme zur Verfügung: (1) ein Massenspektrometer , (2) ein "Caldos 7 G" Wasserstoffanalyse-System.

Das Messprinzip des Caldossystems beruht auf den unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeiten unterschiedlicher Gase. Das Caldosgerät in der QUENCH-Anlage ist für ein Wasserstoff-Argon-Gemisch kalibriert. Um jegliche Feuchtigkeit aus dem Messgas zu entfernen, ist dem Analysator ein Gaskühler und ein Trockner (Molekularsieb, Zeolith) vorgeschaltet (Abb. 4). Die Ansprechzeit des Gasanalysators ist mit 2 s (Zeit, in der 90 % des Endwerts erreicht sind) angegeben.

Das in der QUENCH-Anlage eingesetzte Massenspektrometer (MS) "BALZERS GAM 300" ist ein Computer-gesteuertes Quadrupol-MS mit 8 mm-Stabsystem. Das System

ermöglicht Konzentrationsmessungen in Gasen im ppm-Bereich. Vor jedem Versuch wird das MS mit Argon/Wasserstoff-Kalibriergasen und Argon/Dampfmischungen bekannter Zusammensetzung kalibriert.

Zur Gasentnahme für die MS-Messungen ist ein Rohr durch den Kühlmantel in das Heißgasrohr geführt, welches mit mehreren Bohrungen in verschiedenen Höhen versehen ist, um eine repräsentative Probenahme zu gewährleisten. Die Gasrohre zwischen Entnahmestelle und MS sind alle beheizt, somit ist im Prinzip auch die Messung der Wasserdampferzeugungsrate beim Abschrecken möglich. Bei den Inbetriebnahmeversuchen kam es jedoch zu einer partiellen Kondensation des Dampfes im Bereich der Durchführung durch den Kühlmantel, was eine quantitative Dampfmessung verhindert hat. Dieser Mangel wird bei den nächsten Versuchen behoben sein.

Ein Wärmetauscher vor dem Massenspektrometer reguliert die Messgastemperatur zwischen 110 °C (zur Verhinderung von Wasserdampfkondensation) und 150 °C (der oberen Betriebstemperatur der MS Einlassventile).

Während der Inbetriebnahme-Versuche wurden mit dem Massenspektrometer folgende Daten mit einer Messfrequenz von ca. 0.5 Hz gemessen: die Konzentrationen von H₂, Ar, H₂O, N₂, O₂, He sowie Temperatur und Druck des Gases am MS-Eingang. Diese Daten und die Daten des Datenerfassungssystems der Anlage wurden über zwei Funkuhren synchronisiert. Zur Auswertung der MS-Daten wurden auch einige Kanäle des Hauptdatenerfassungssystems einbezogen, insbesondere die Durchflussraten für Argon, Dampf und Quenchwasser sowie einige interessante Temperaturen. Aufgrund unterschiedlicher Messfrequenzen beider Systeme wurden die Datensätze mit einer Frequenz von 1Hz interpoliert.

Die Massenflussrate von Wasserstoff wird aus den gemessenen Konzentrationen von Wasserstoff und Argon mit Bezugnahme auf den bekannten Argon-Massefluss entsprechend Gleichung 1 berechnet:

$$\dot{m}_{H_2} = \frac{M_{H_2}}{M_{Ar}} \cdot \frac{C_{H_2}}{C_{Ar}} \cdot \dot{m}_{Ar} \quad (1)$$

mit den Molmassen M , den Konzentrationen C und den Masseflussraten \dot{m} der entsprechenden Gase.

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass mit dem Massenspektrometer und dem Caldosgerät natürlich nur der in die Gasphase freigesetzte Wasserstoff gemessen werden kann. Es ist bekannt, dass Zirkoniumlegierungen bei hohen Temperaturen große Mengen an Wasserstoff absorbieren können. Dieser Anteil wurde in Nachuntersuchungen an einem Hüllrohr bestimmt (siehe Kapitel "Nachuntersuchung des Versuchsbündels").

Durchführung und Ergebnisse der Inbetriebnahme-Versuche

Die Inbetriebnahmeversuche bestanden aus: (a) Kalibrierversuchen, d. h. mehreren Phasen stationärer Temperaturen (Nominalwerte: 900, 1100, 1300 K) mit 3 g/s Argon bzw. 3 g/s Argon + 3 g/s Dampf, (b) einer Voroxidationsphase mit 3 g/s Argon + 3 g/s Dampf bei 1500 K und 3000s, (c) einer transienten Phase (Aufheizphase) mit 1 K/s bis auf 1700 K und (d) einer Abschreck- bzw. Quench-Phase. Tab. 2 und Abb. 9 geben die tatsächlichen Temperatur/Zeit-Verhältnisse wieder, die z. T. von dem geplanten Ablauf abweichen.

Die Voroxidation ergab eine maximale Oxidschichtdicke von 500 μm in der 900 mm-Ebene (Abb. 10). Die transiente Phase wurde mit einer Aufheizrate von 1 K/s bis zu einer maximalen Stab-Hüllrohrtemperatur von 1700 K durchgeführt. Bei dieser Temperatur wurde das Fluten des Versuchsbündels von unten mit Wasser ausgelöst. Die Wassereinspeiserate betrug ca. 300 l/h entsprechend einer Geschwindigkeit im Testbündelfuß von 2,8 cm/s (Abb. 11). Das Quenchwasser wurde 270 s lang in die Teststrecke eingespeist. Damit betrug die Gesamtmenge des eingespeisten Wassers 22,5 l. (Dieser Wert entspricht dem vierfachen Leervolumen der Teststrecke). Während des Abschreckvorgangs waren sowohl die elektrische Bündelheizung als auch die Dampf- und Argonzufuhr abgeschaltet. Die ermittelten Quench-Temperaturen lagen zwischen 638 K und 1128 K und die Abschreckgeschwindigkeiten zwischen 0,5 cm/s (Stab 21, 470/1250 mm) und 2,7 cm/s (Stab 19, 350/1150 mm), wie aus den Abb. 12 und 13 hervorgeht. Die maximalen Abkühlraten während des Abschreckens wurden auf der Grundlage der

gemessenen Temperaturen zu 160 bis 420 K/s bestimmt (Tab. 3). Eine genauere Beschreibung der Ergebnisse der Inbetriebnahme-Tests ist in [1] gegeben.

Im Hinblick auf die Wasserstofferzeugung sind drei Versuche, namentlich die Tests IBS_03, IBS_04 und IBS_05, von Bedeutung. Da in der Quenchphase des Tests IBS_05 kein Argon als Trägergas für einen unverzögerten Transport des Wasserstoffs zur Abgasleitung hinter dem Kondensator zur Verfügung stand, sind die Messergebnisse mittels Caldos-Analysator nicht zeitkorreliert. Deshalb wird im Folgenden ausschließlich über die Messungen mittels Massenspektrometer eingegangen. Tabelle 4 fasst die Ergebnisse der massenspektroskopischen Wasserstoffmessungen zusammen. Insgesamt wurden 105 g (entsprechend 1,2 Nm³) Wasserstoff freigesetzt, der größte Teil während der Voroxidation und der Abschreckphase.

Entsprechend Gleichung 2 wurden (bei Vernachlässigung der Bildung von sauerstoffstabilisierter α -Zr(O) Phase) 3.2 kg ZrO₂ gebildet.



Diese Menge entspricht einer Oxidschicht von 1 mm Dicke, wenn man annimmt, dass sich das ZrO₂ auf einer Länge von 500 mm gleichmäßig auf den 21 Hüllrohren, den je 2 Instrumentierungsrohren, auf den 6-mm-Eckstäben sowie auf der inneren Oberfläche des Shrouds gebildet hat.

In den Abbildungen 14, 15 und 16 sind die Wasserstoffproduktionsrate und die integrale Wasserstofferzeugung sowie einige relevante Anlagedaten (TCRC13 Zentrale Temperatur im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temperatur im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme und Argon- und Dampfmengenstrom) für die einzelnen Versuche in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt.

Abbildung 17 zeigt die Wasserstofffreisetzung und die Temperatur des zentralen Thermoelements im Zentralstab in der heißen Zone (TCRC13, 950 mm) zusammen in einem Diagramm. Die Feinstrukturen beider Kurven sind nahezu identisch, d. h., dass das MS sehr empfindlich und nur mit geringer Verzögerung die Wasserstoffproduktion misst.

Eine aufwendige Korrektur der Daten, wie sie z. B. bei den CORA-Versuchen vorgenommen wurde, ist bei den QUENCH-Versuchen somit nicht notwendig. Der große Wasserstoffpeak bei ca. 9800 s ist durch die verstärkte Oxidationskinetik des Bündels bei Temperaturen oberhalb 1200 °C verursacht.

Abbildung 18 zeigt die Wasserstoffproduktion und andere Daten (TCRC13 Zentrale Temperatur im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temperatur im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme sowie Argon-, Dampf- und Quenchwasser-Mengenstrom) während der Abschreckphase. Durch den Ausfall eines Ventils wurde der konstante Argonfluss von 3 g/s zu Beginn dieser Phase unterbrochen, was zu einem zeitabhängigen Abfall des Argonstroms führte. Da einerseits dieser Durchsatz am unteren Bündelfuß gemessen wird, die MS-Probenahme andererseits am Ende des Abgasrohres erfolgt, ist die auf Gleichung 1 basierende Auswertung "mit Vorsicht zu genießen". Allerdings führte eine alternative, auf den gemessenen Dampfstrom bezogene Auswertung zu einem vergleichbaren Ergebnis, so dass die angegebenen 40 g zumindest größenordnungsmäßig richtig sind.

Wie schon erwähnt, wurden mit dem MS neben Wasserstoff auch andere Gase gemessen. Die Sauerstoffkonzentration in der Anlage war mit einer Ausnahme immer geringer als 20 vppm. Während des Tests IBS_04 wurde ein Sauerstoff (Stickstoff)-Peak von 2 (9) Vol-% gemessen. Zu diesem Zeitpunkt gab es also einen kurzen Lufteinbruch in die Anlage.

Beginnend mit dem Test IBS_04 wurde eine hohe Helium-Konzentration gemessen, die auf das Versagen mindestens eines Hüllrohres zu diesem Zeitpunkt deutet. Abhängig vom Helium-Druck in den Brennstabsimulatoren sind zwischen 3 und 30 g/h Helium in die Anlage geströmt.

Nachuntersuchung des Versuchsbündels

Nach dem Experiment ließ das Versuchsbündel und die innere Oberfläche des Shroud eine deutliche Oxidationszone zwischen 400 und 1300 mm Höhe erkennen (Abb. 19). Zwischen 730 und 1020 mm Höhe (oberes Ende der Heizzone) waren die Stabhüllen

durch die Oxidation so versprödet, dass sie weggebrochen sind. Genau in diesem Bereich hatte sich eine weiße Oxidschicht auf der inneren Oberfläche des Shroud gebildet. Alle Hüllrohr-Thermoelemente der heißen Zone waren zerstört. Durch die Vielzahl der Versuchs- bzw. Erprobungsphasen bedingt erschien eine ausführliche metallografische Nachuntersuchung des Testbündels als nicht sinnvoll. Lediglich die Untersuchung der H₂-Absorption einer Stabhülle (Stab 13) wurde durchgeführt. Den axialen Verlauf der H₂-Absorption zeigt Abb. 20. Es ist zu sehen, dass in der heißen Zone, in der der größte Teil des Wasserstoffs erzeugt wurde, auch der Hauptanteil des Wasserstoffs von den Zirkaloy-Hüllen und der -Shroud absorbiert wurde (s. Bereich 450 – 1200 mm Höhe).

Begleitende Rechnungen

Begleitende Rechnungen zur Gestaltung der Versuchsanlagen-Konzepts wurden von FZK/IRS, AEA Technology und Ruhr-Universität Bochum durchgeführt. Die Ergebnisse der Rechnungen zu den QUENCH-Inbetriebnahme-Versuchen mit dem Rechenprogramm SCADAP/RELAP5 durch FZK/IRS sind in dem Beitrag des Instituts für Reaktorsicherheit (IRS) beschrieben.

Referenzen

[1] P. Hofmann, C. Homann, W. Leiling, A. Miassoedov, D. Piel, L. Schmidt, L. Sepold, M. Steinbrück, "Results of the QUENCH Commissioning Tests", FZKA 6099, 1998

Tabelle 1: Daten des QUENCH-Testbündels

Bündeltyp		DWR
Bündelgröße		21 Stäbe
Anzahl der beheizten Stäbe		20
Anzahl der unbeheizten Stäbe		1
Gitterabstand		14,3 mm
Hüllrohr-Außendurchmesser		10,75 mm
Hüllrohrwerkstoff		Zircaloy-4
Hüllrohrwandstärke		0,725 mm
Heizerlänge	beheizter Stab	2480 mm (-690 bis 1790 mm)
	unbeheizter Stab	2842 mm (-827 bis 2015 mm, einschl. Verlängerung)
Heizermaterial		Wolfram
Heizerlänge		1024 mm
Heizerdurchmesser		6 mm
Ringtabletten	beheizter Stab	ZrO ₂ ; Ø 9,15/6,15 mm; L=11 mm
	unbeheizter Stab	ZrO ₂ ; Ø 9,15/2,5 mm; L=11 mm
Tablettenlage	beheizter Stab	0 mm bis ~1020 mm
	unbeheizter Stab	0 mm bis 1553 mm
Abstandshalter	Material	Zircaloy-4, Inconel 718
	Länge	Zry 42 mm, Inc 38 mm
	Höhenkote d. Unterkante	-200 mm Inconel 50 mm Zry-4 550 mm Zry-4 1050 mm Zry-4 1410 mm Zry-4
Shroud	Werkstoff	Zircaloy-4
	Wanddicke	2,38 mm
	Außendurchmesser	84,76 mm
	Länge (Kote)	1600 mm (-300 bis 1300 mm)
Shroud-Isolation	Dicke der Isolierung	ZrO ₂ Faser ~ 35 mm
	Kote	-300 bis 1000 mm
Molybdän/Kupfer-Elektroden:		
Länge der oberen Elektroden (Mo + Cu)		766 mm (576 Mo, 190 mm Cu)
Länge der unteren Elektroden (Mo + Cu)		690 mm (300 Mo, 390 mm Cu)
Durchmesser der Elektroden:		
- vor der Beschichtung		Ø 8,6 mm
- nach der Beschichtung mit ZrO ₂		Ø 9,0 mm
Mantelrohre (Ar-gekühlt):	Material	Edelstahl, W.Nr. 1.4541
	Innenrohr-Abmessung	Ø 158,3 / 168,3 mm
	Außenrohr-Abmessung	Ø 181,7 / 193,7 mm

Tab. 2: QUENCH Commissioning Test Overview

Test	Phase	Argon [g/s]	Steam [g/s]	Inlet temp.*) [K]	Maximum temperature [K]	Time at temp. [s]
IBS_01	A	3.6	-	350	950	4000
	B	3.6	-	390	1150	2500
	C	3.6	-	390	1440	3000
IBS_02	A	3.3	-	325	990	2500
	B	3.3	-	360	1120	2500
	C	3.3	-	360	1280	3000
IBS_03	A	3.1	3.0	600	940	2000
	B	3.1	3.0	610	1120	2000
	C	3.1	3.0	610	1270	1000
IBS_04	Heatup (< 0.1 K/s; 0 – 7000 s)	2.8	4.7	650	≤ 1100	7000
	Heatup (< 0.15 K/s; 7000 – 10000 s)	2.8	2.9	610	≤ 1500	3000
	Plateau	2.8	2.9	610	1500	4000
IBS_05	A (1500 – 2250 s)	3.1	-	325	1200**)	750
	B (4000 – 5000 s)	3.1	2.9	500	800**)	1000
	C (7000 – 8500 s)	3.1	2.9	500	1050**)	1500
	D (10500 – 12500 s)	3.1	2.9	530	1270**)	2000
	Transient (1 K/s)	3.1	2.9	620	1750**)	-
	Quenching	- ***)	-	350	-	-

*) Based on T 511 that was attached to the wall of the inlet annulus. So, temperatures given tend to be somewhat low.

***) Max. temperatures of IBS_05 extrapolated due to TC failures.

***) Ar flow turned off accidentally due to a malfunction of a magnetic valve.

Tabelle 3: Evaluation of cool-down data

Cladding Thermo- couple	Elevation Rod number	Onset of cooling		Onset of quenching		Max. cooldown during quenching (K/s)
		Time (s)	Temp. (K)	Time (s)	Temp. (K)	
TFS2/1	- 250 mm (rod 4)	-	-	19	638	420
TFS2/2	- 150 mm (rod 6)	-	-	19	737	420
TFS2/3	- 50 mm (rod 8)	-	-	19	815	320
TFS2/5	150 mm (rod 2)	19	1034	35	943	260
TFS2/6	250 mm (rod 4)	19	1171	42	1040	210
TFS2/7	350 mm (rod 6)	19	1231	62	977	280
TFS2/17	1350 mm (rod 6)	46	1341	92	834	420
TFS3/8	470 mm (rod 5)	18	1220	55,5	971	300
TFS3/16	1250 mm (rod 7)	43	1483	92	767	320
TFS5/4/0	50 mm (rod 15)	19	877	33	803	230
TFS5/4/180	50 mm (rod 21)	19	867	33	803	160
TFS5/5	150 mm (rod 16)	19	1015	34	946	200
TFS5/6	250 mm (rod 18)	19	1133	50	896	280
TFS5/7	350 mm (rod 19)	19	1222	69	881	260
TFS5/8	470 mm (rod 21)	19	1166	35	1128	300
TFS5/9	570 mm (rod 10)	19	1209	40	1094	280
TFS5/10	670 mm (rod 12)	19	1338	39	1036	370
TFS5/15	1150 mm (rod 19)	43	1500	99	900	220
TFS5/16	1250 mm (rod 21)	43	1416	92	870	310
TFS5/17	1350 mm (rod 10)	43	1310	82	735	340
TCR9	570 mm (rod 1)	19	1259	46	1000	350

Tab. 4: Integrale Wasserstofffreisetzung während der Inbetriebnahmetests

Test	Versuchsziel	Integrale H₂- Freisetzung, g
IBS_03	Thermische Kalibrierung in Dampf	13
IBS_04	Voroxidation bei 1500 K	35
IBS_05	a) Wiederholung des Kalibrierversuches in Dampf	17
	b) Abschrecktest	40
Σ		105

QUENCH Test Facility

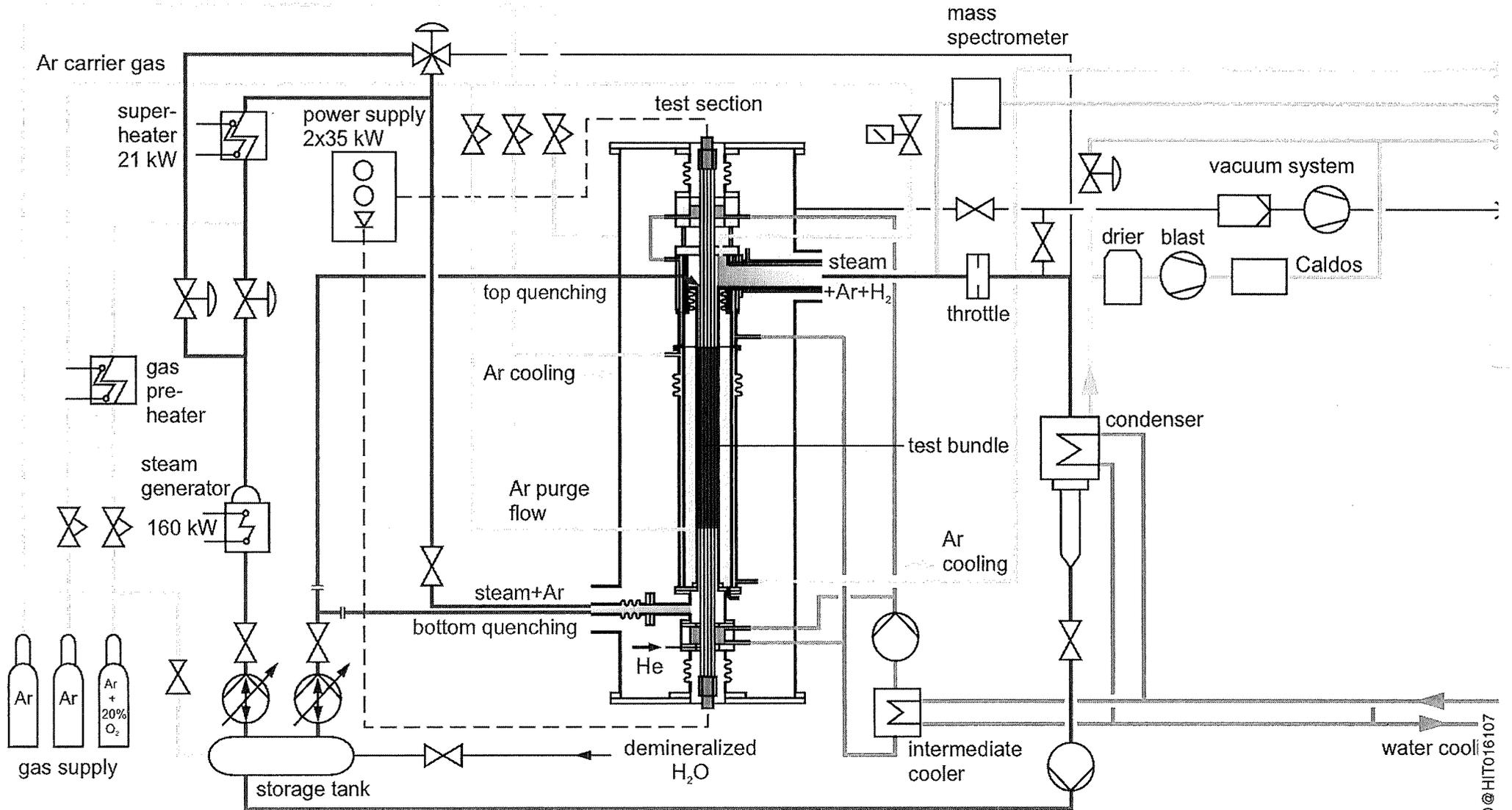


Abb. 1

QUENCH Test Section - Flow Lines

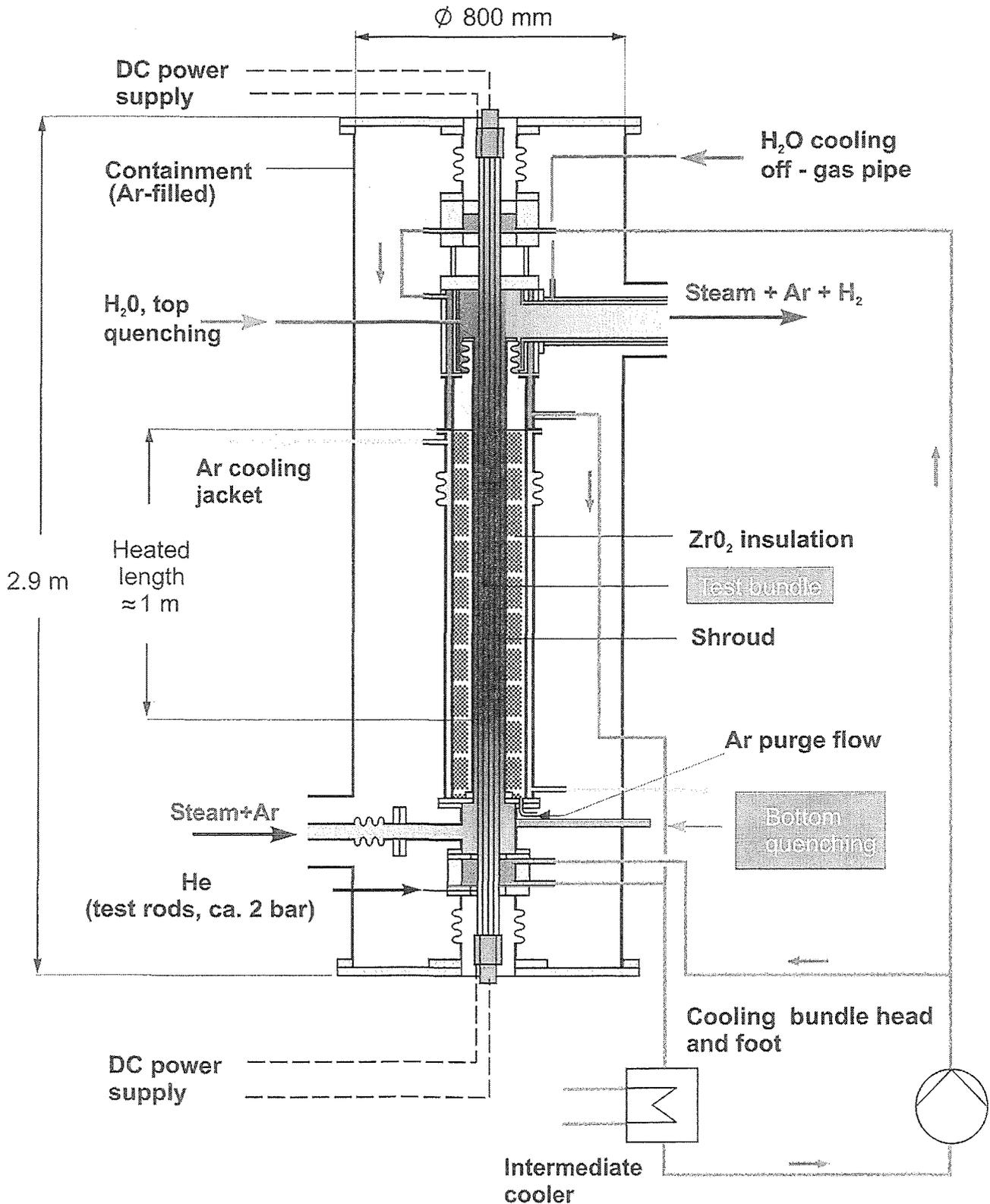
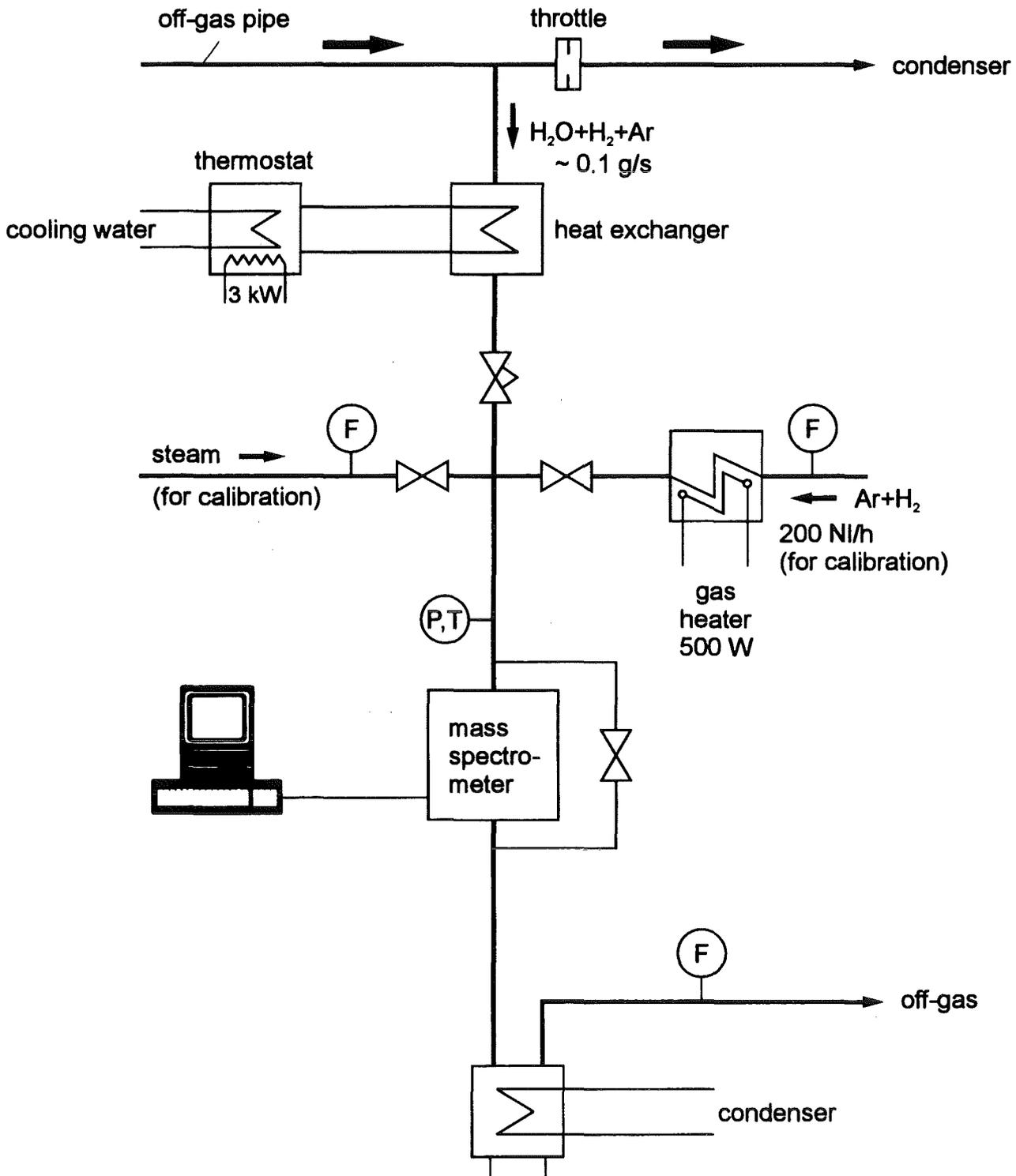


Abb. 2

Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

QUENCH - Facility

H₂ - Measurement mass spectrometer



QUENCH Facility

H₂ measurement with CALDOS
(bypass to off-gas line)

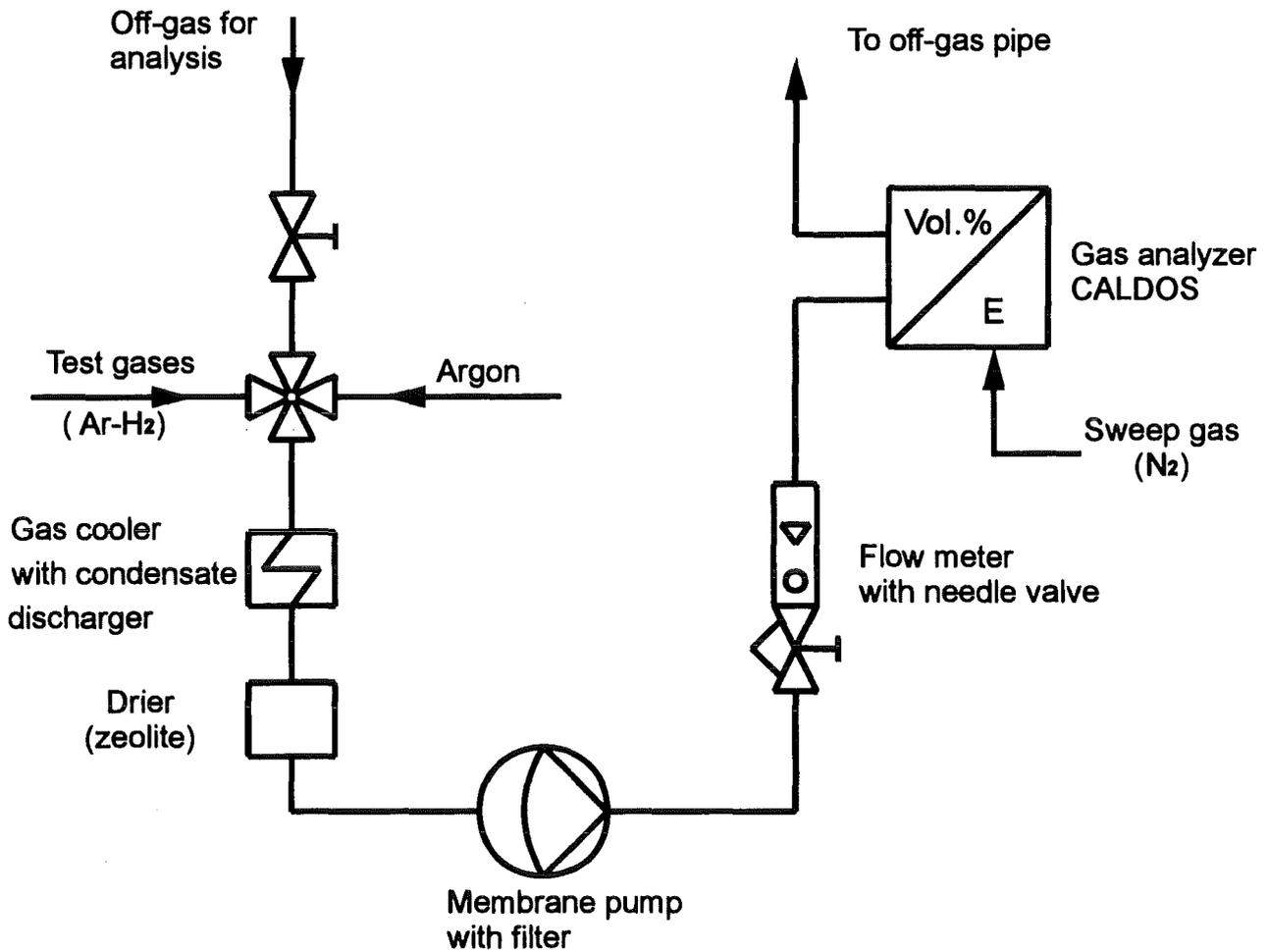


Abb. 4

QUENCH Fuel Rod Simulator Bundle (Top View)

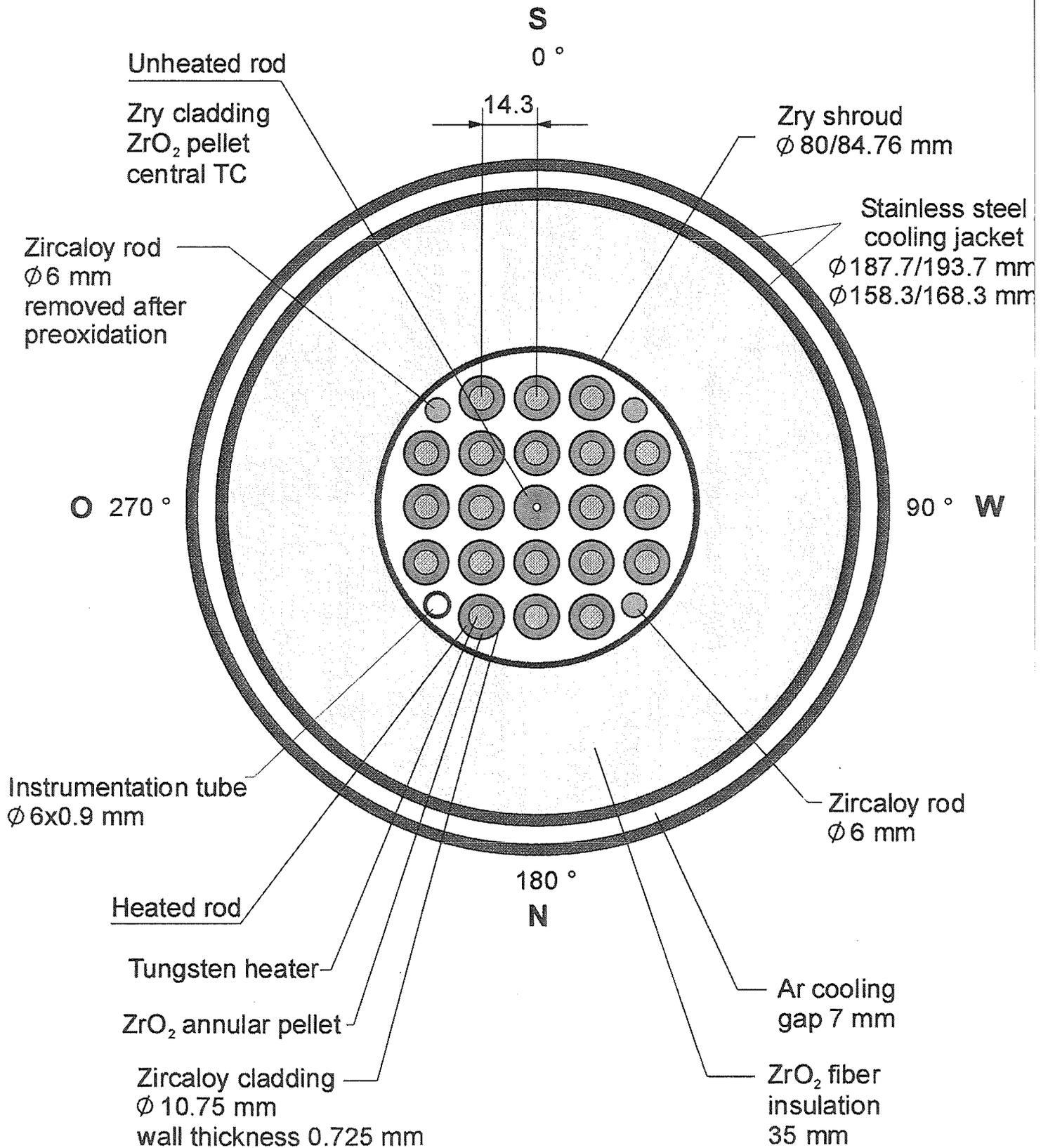


Abb. 1

Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

Heated Fuel Rod Simulator

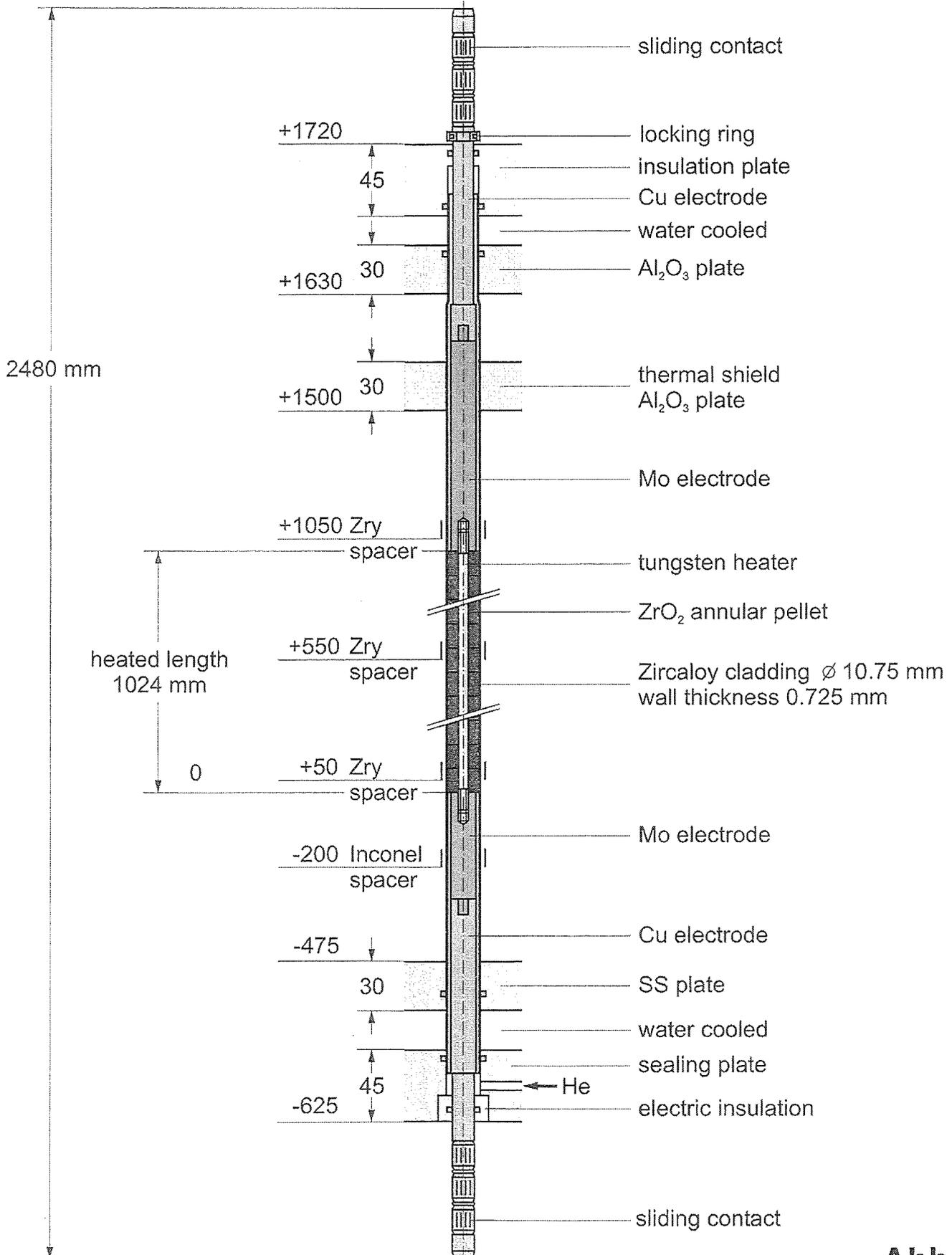


Abb. 6

Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt

Unheated Fuel Rod Simulator

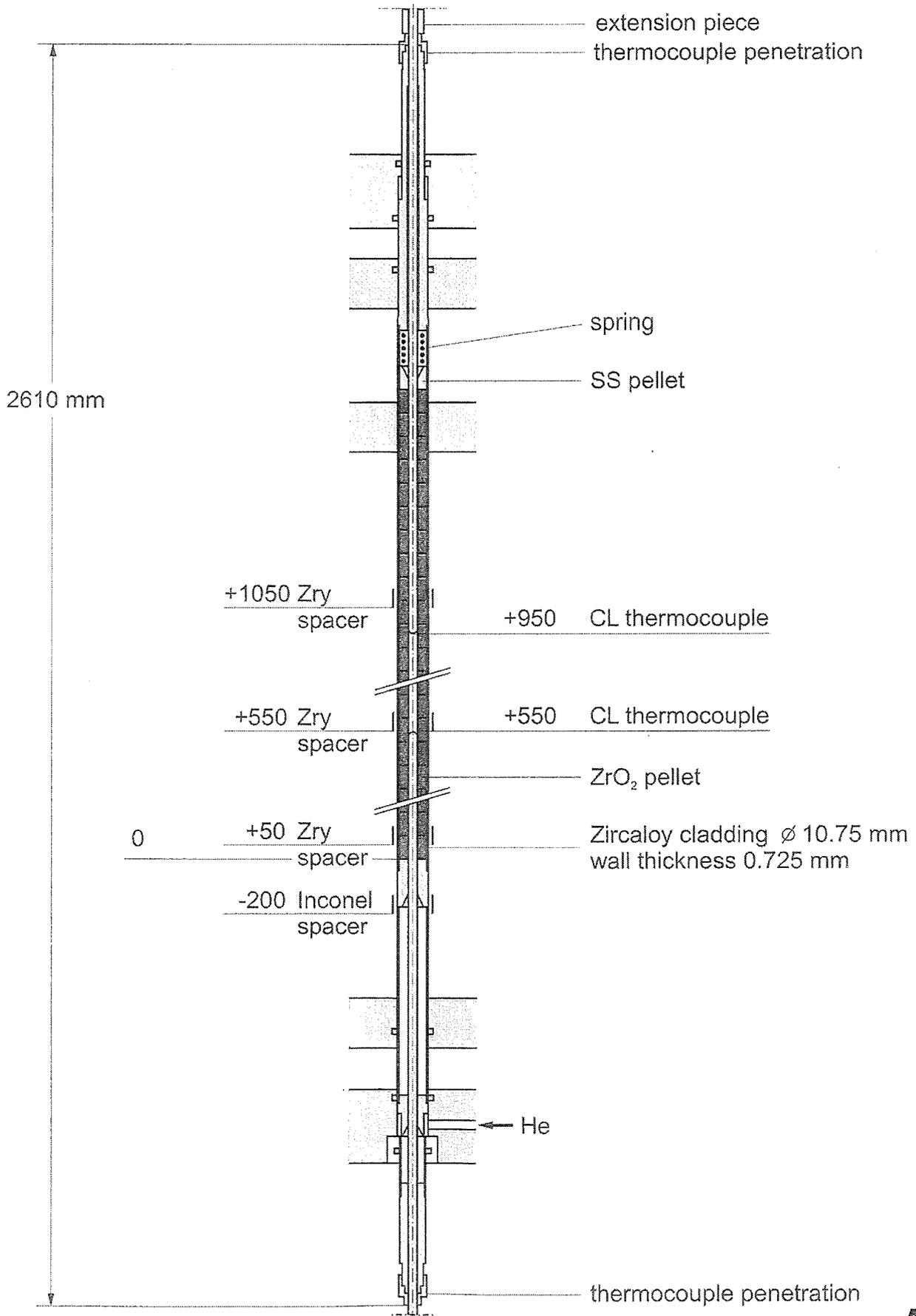


Abb. 7

TC Instrumentation of the Test Bundle

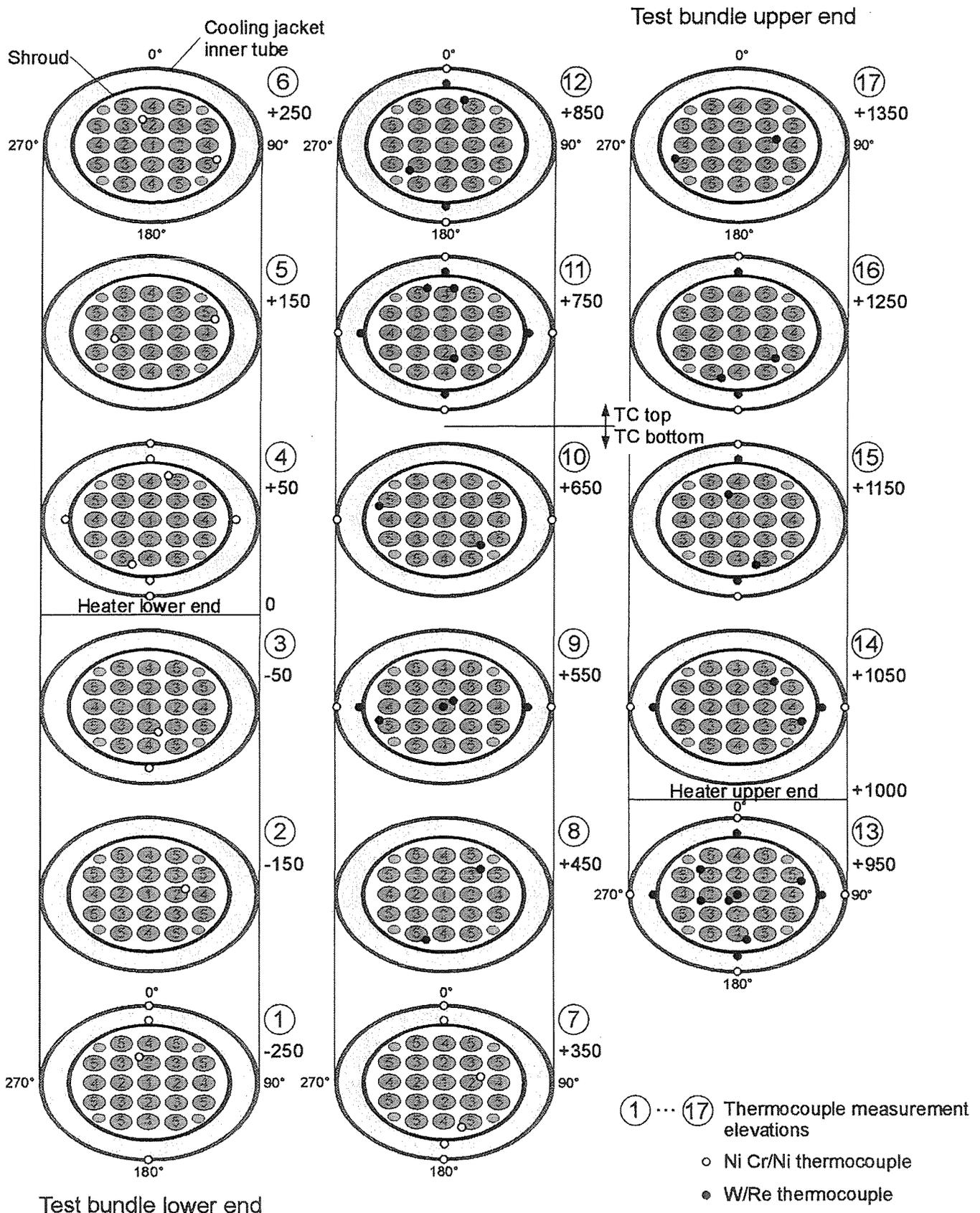
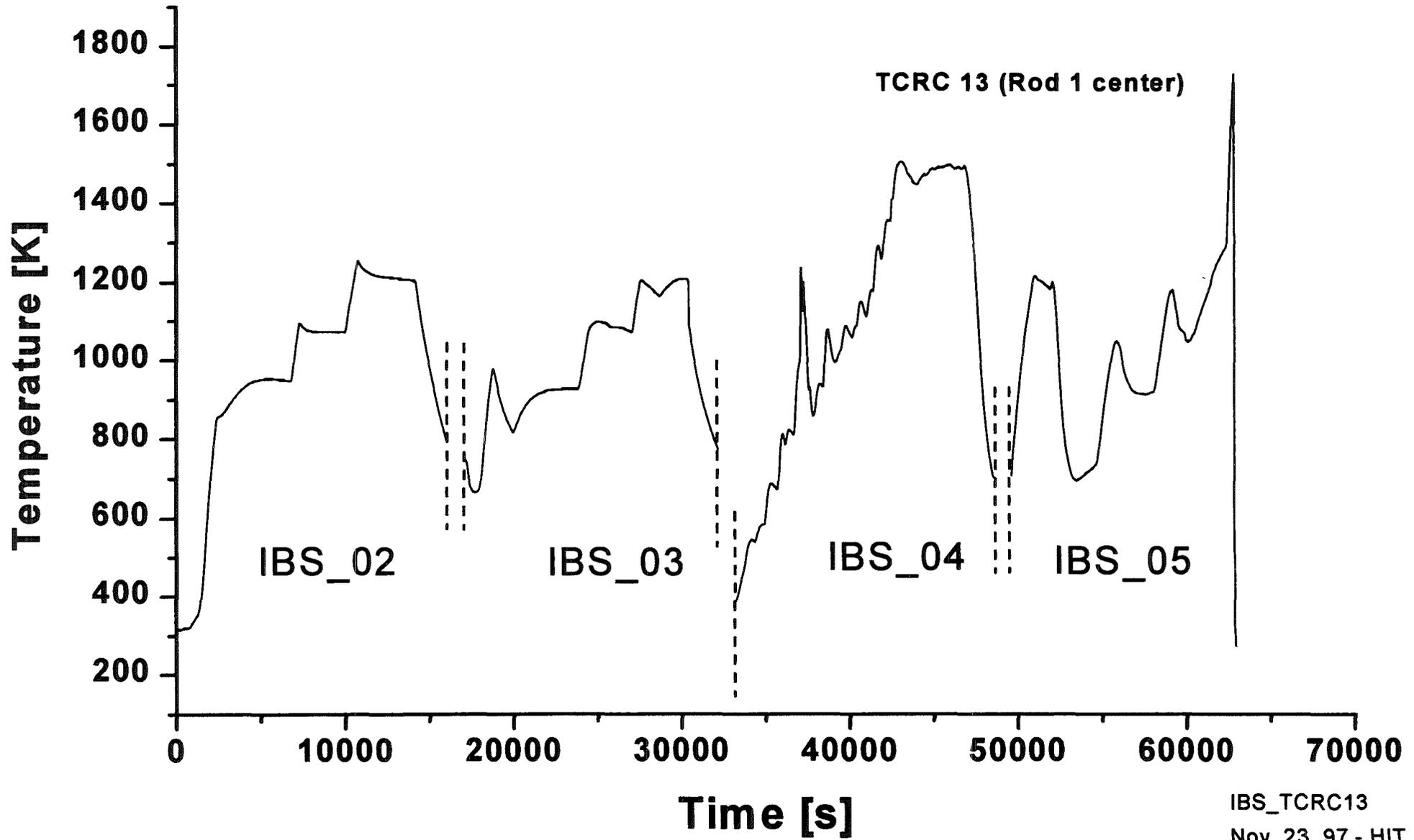


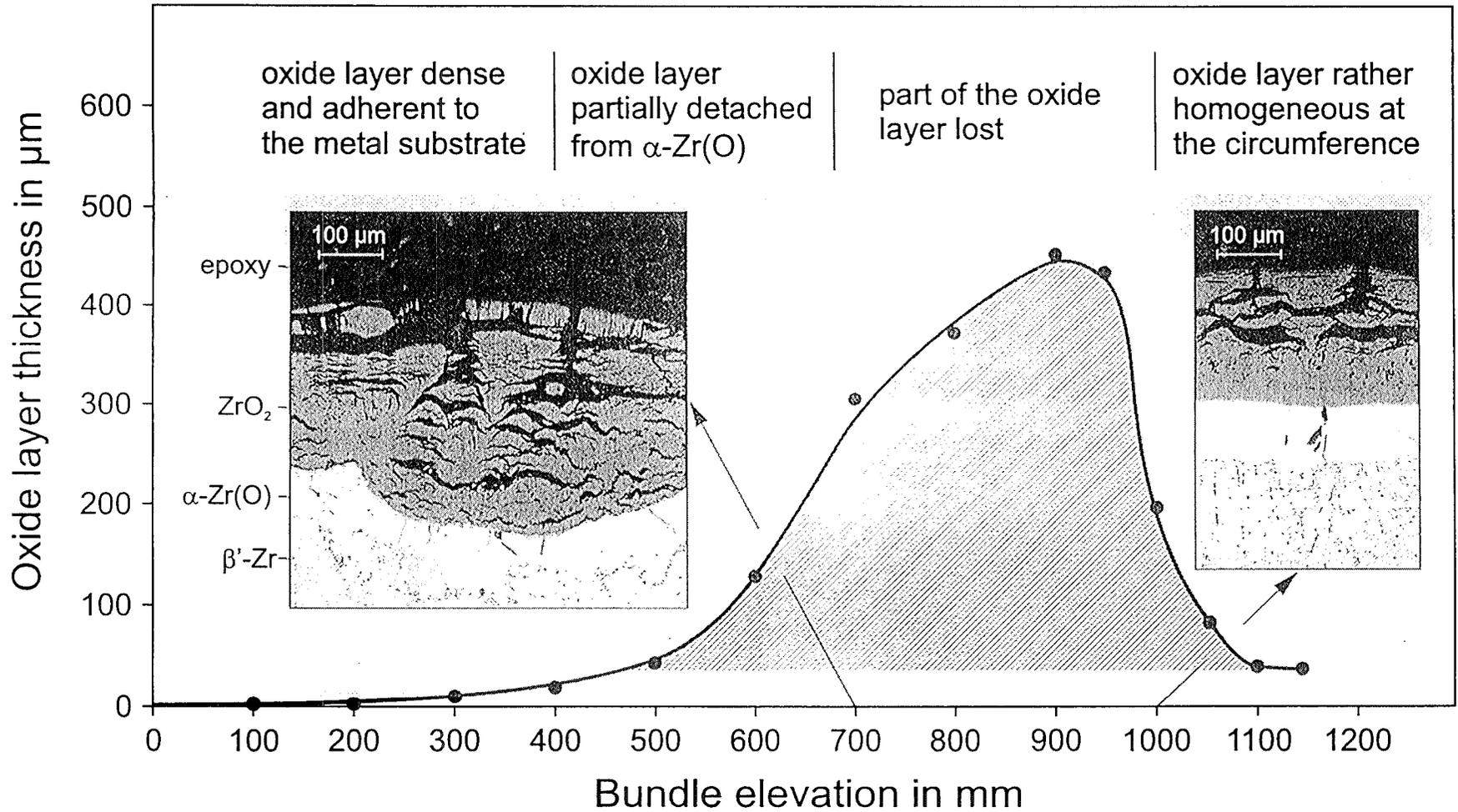
Abb. 8

QUENCH Commissioning Test 9 - 16 Oct., 1997



Oxide layer thickness of a removed oxidation calibration rod

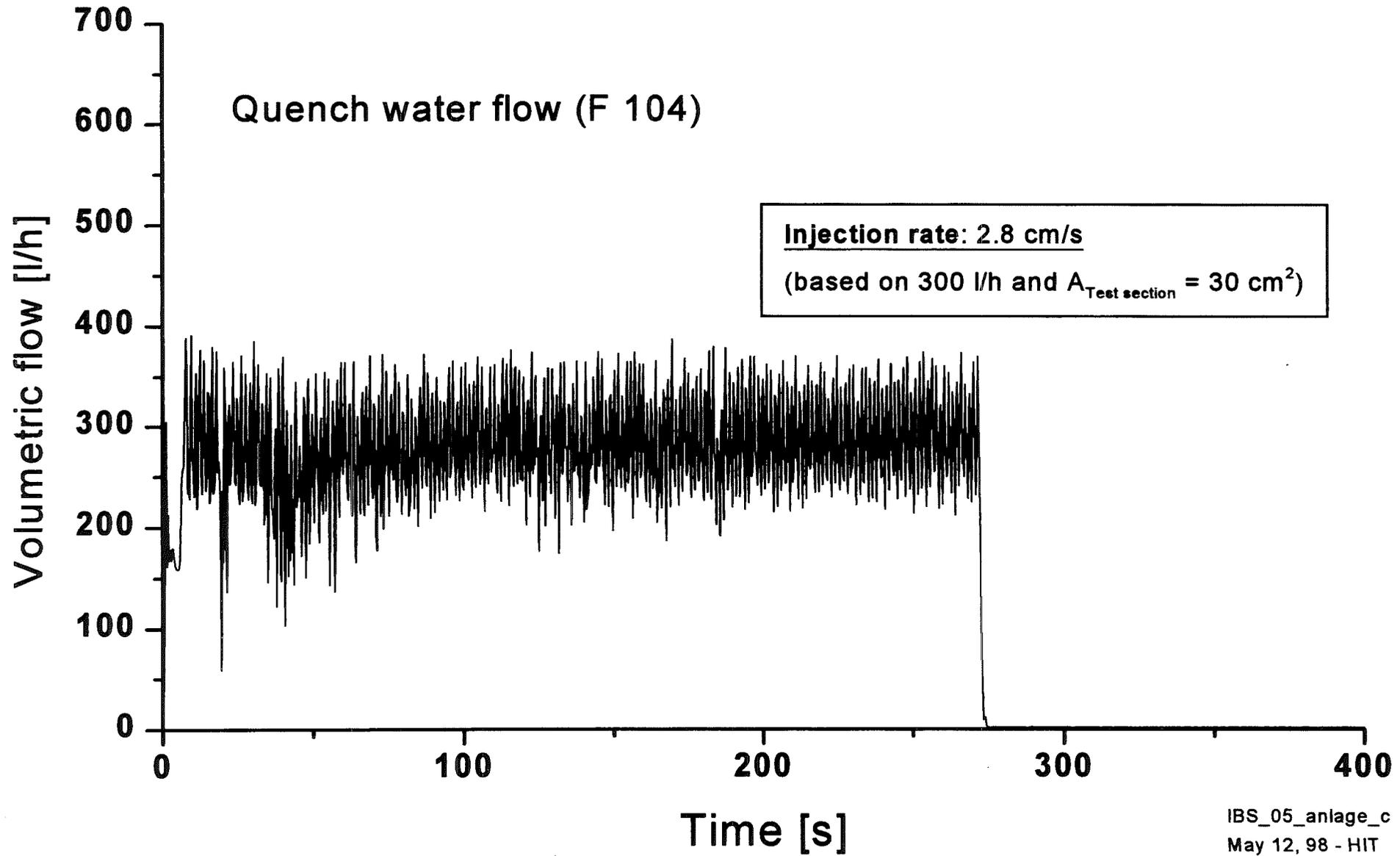
Commissioning tests performed in October 1997



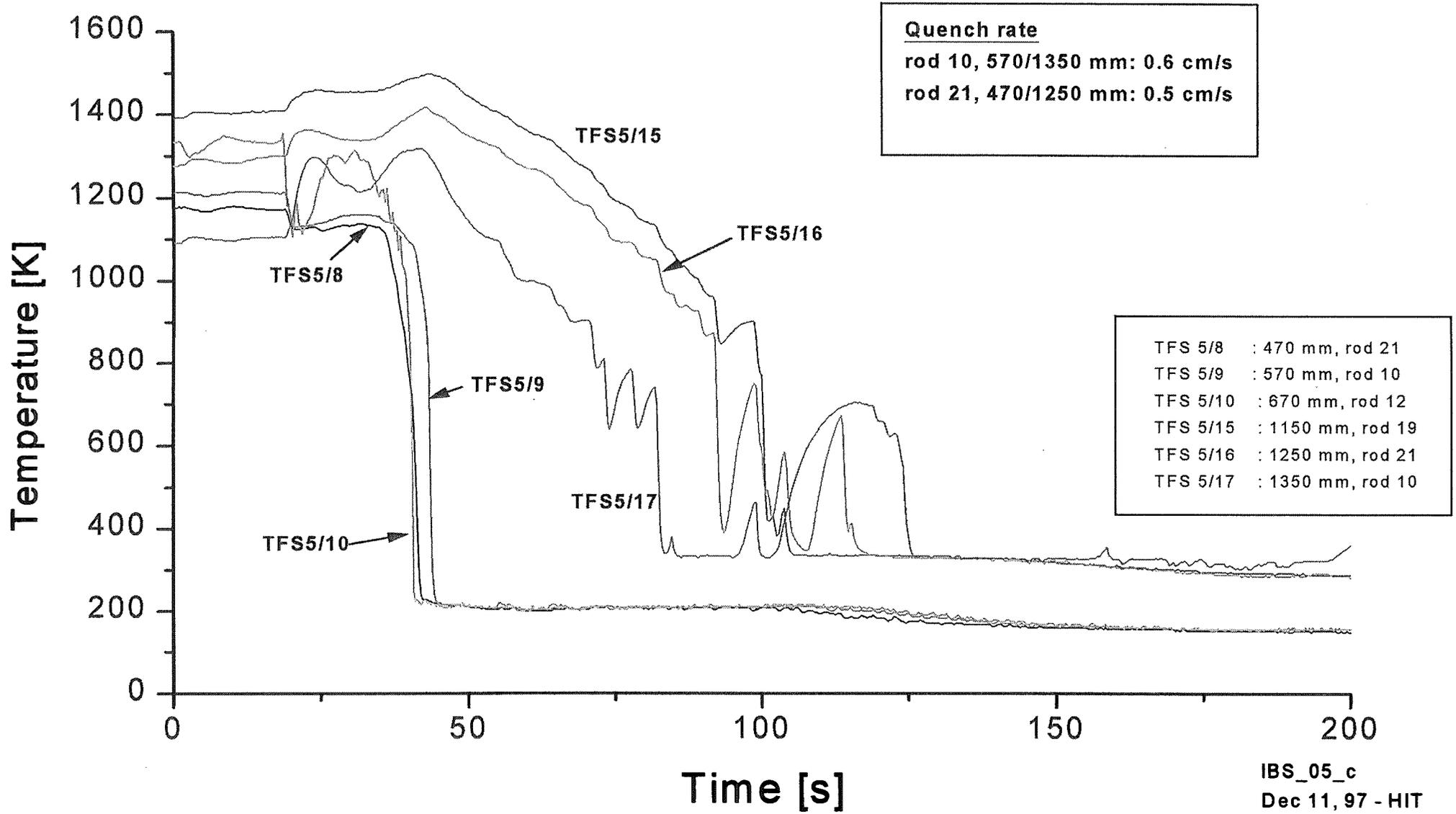
— 407 —

Abb. 10

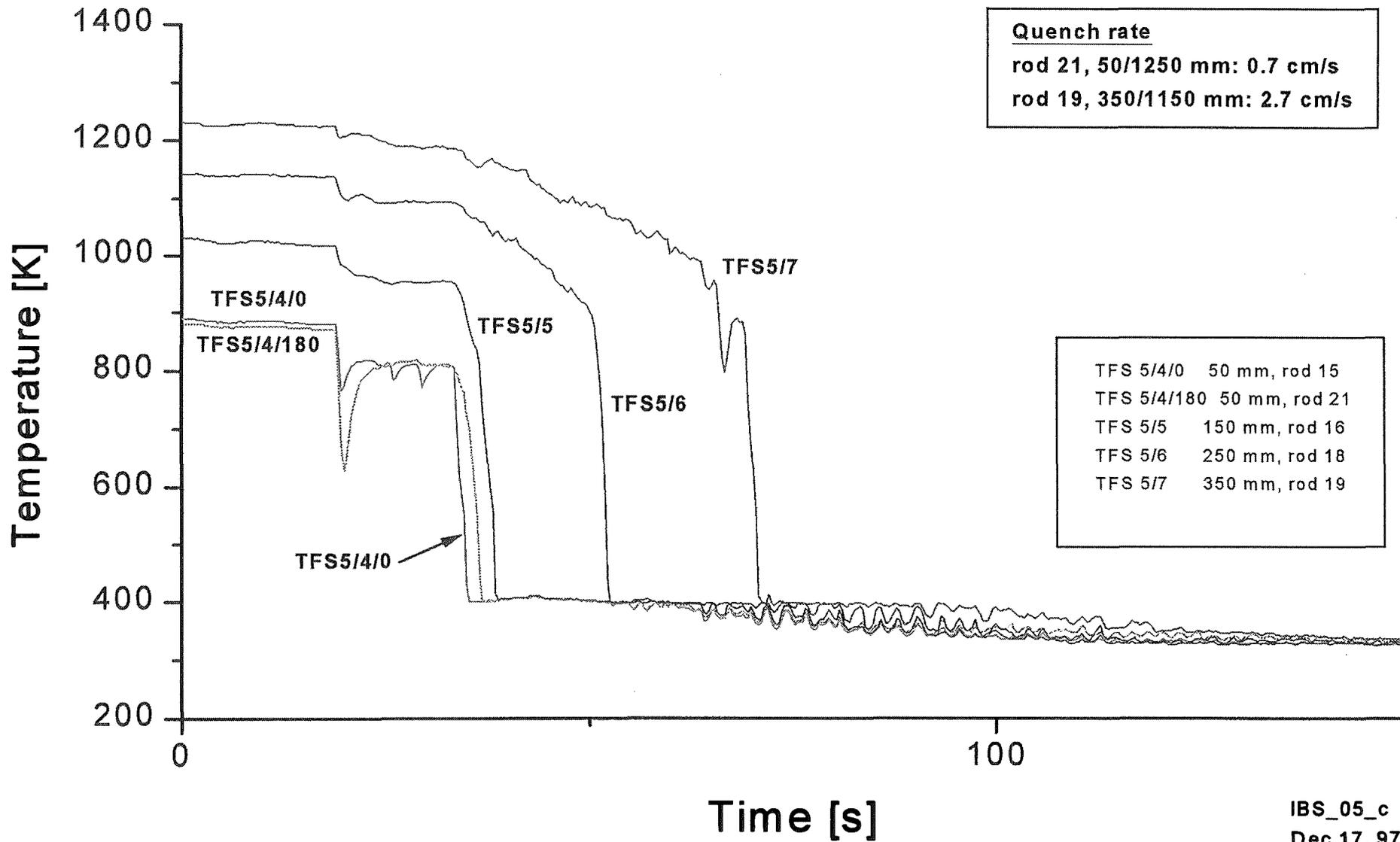
QUENCH Test IBS_05 (Oct. 16, 1997) - Quenching Phase



Test IBS 05 - Quenching of rods 10, 12, 19 and 21 (rod type 5)



Test IBS 05 - Quenching of rods 15, 16, 18, 19 and 21 (rod type 5)



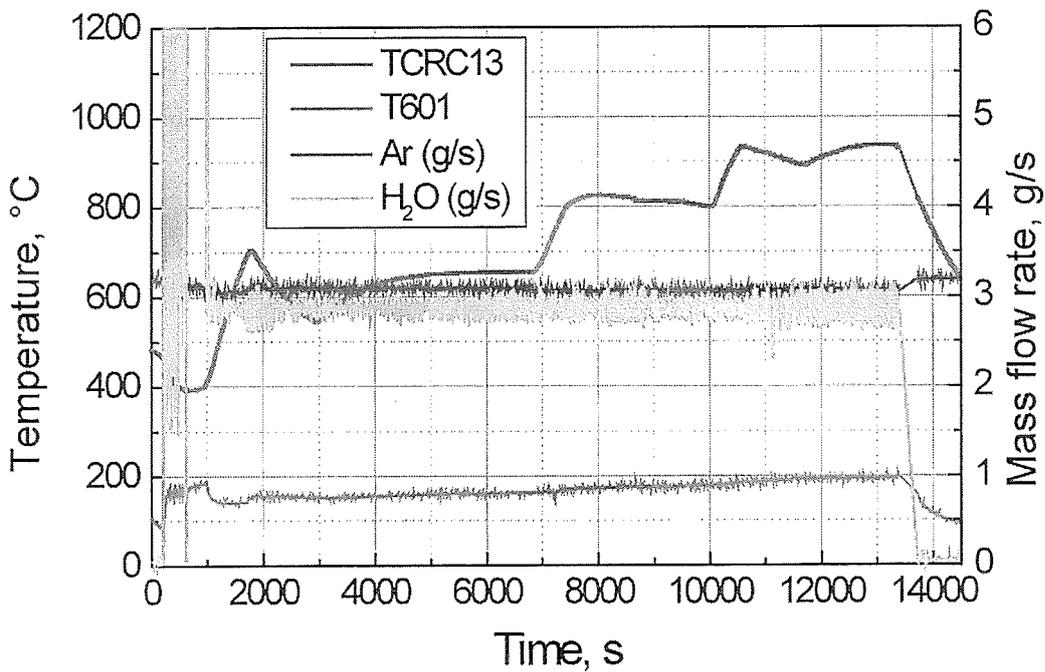
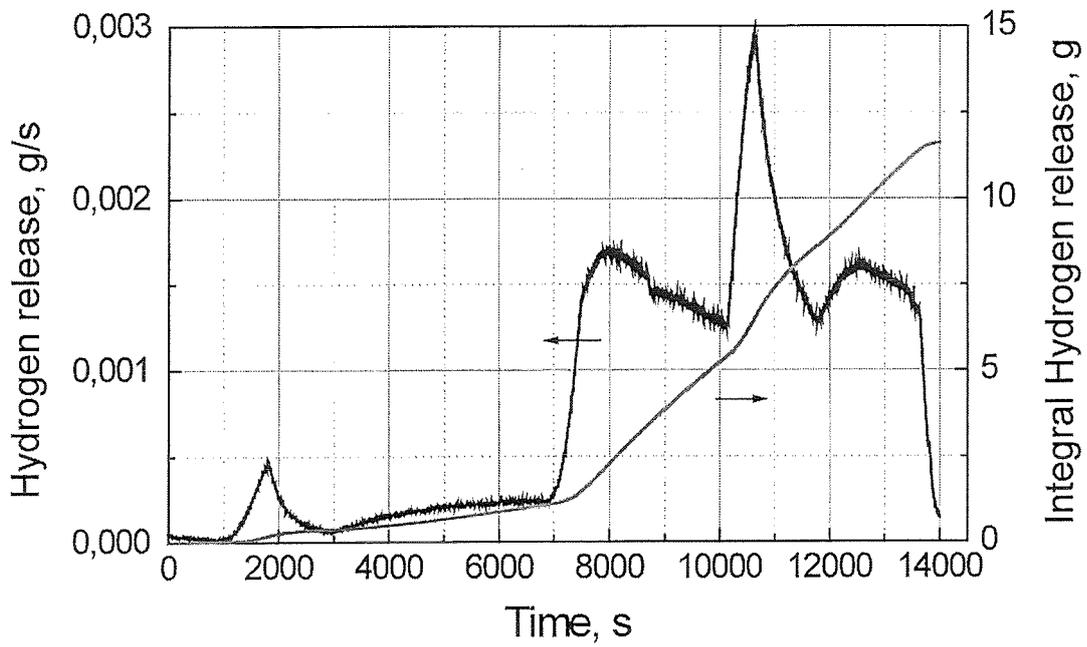


Abb. 14: IBS_03: Wasserstofffreisetzung (oberes Diagramm) und Daten der Anlage TCRC13 Zentrale Temp. im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temp. im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme und Argon- und Dampfmenstrom (unteres Diagramm)

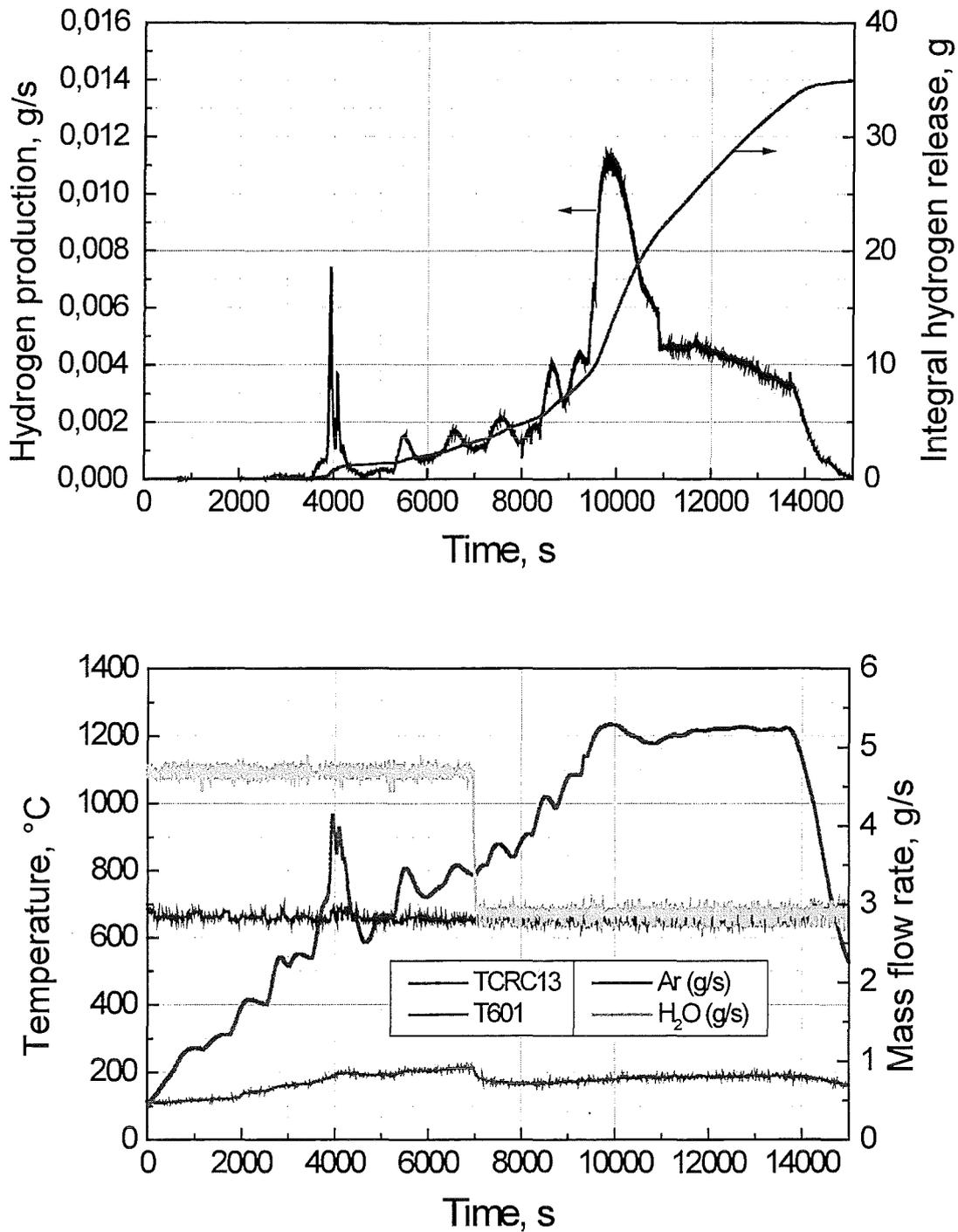


Abb. 15: IBS_04: Wasserstofffreisetzung (oberes Diagramm) und Daten der Anlage TCRC13 Zentrale Temp. im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temp. im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme und Argon- und Dampfmengenstrom (unteres Diagramm)

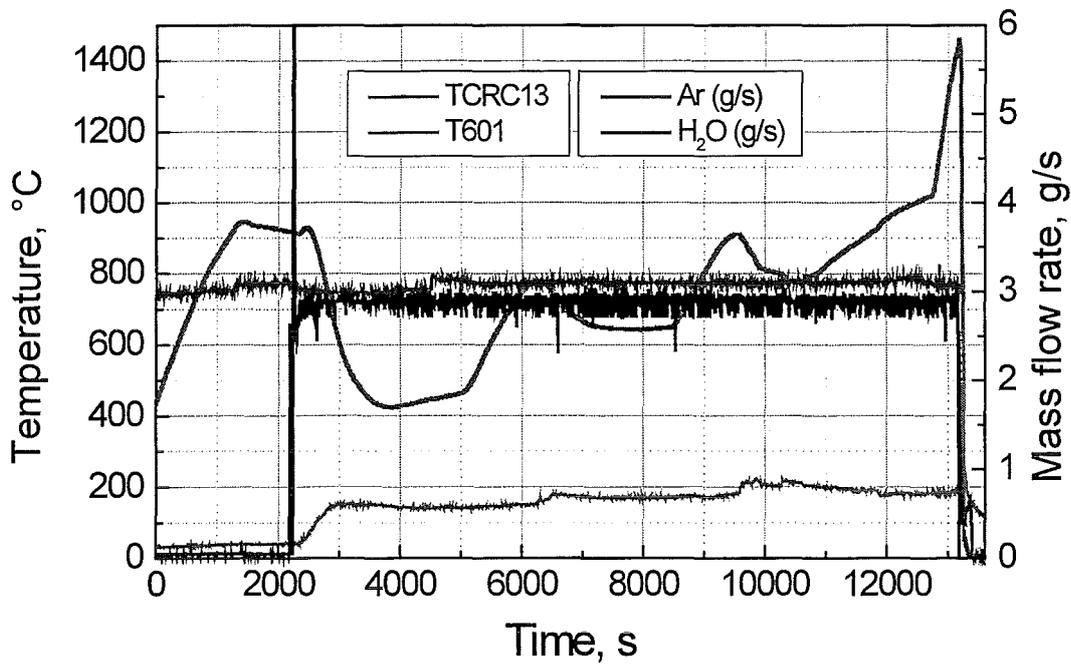
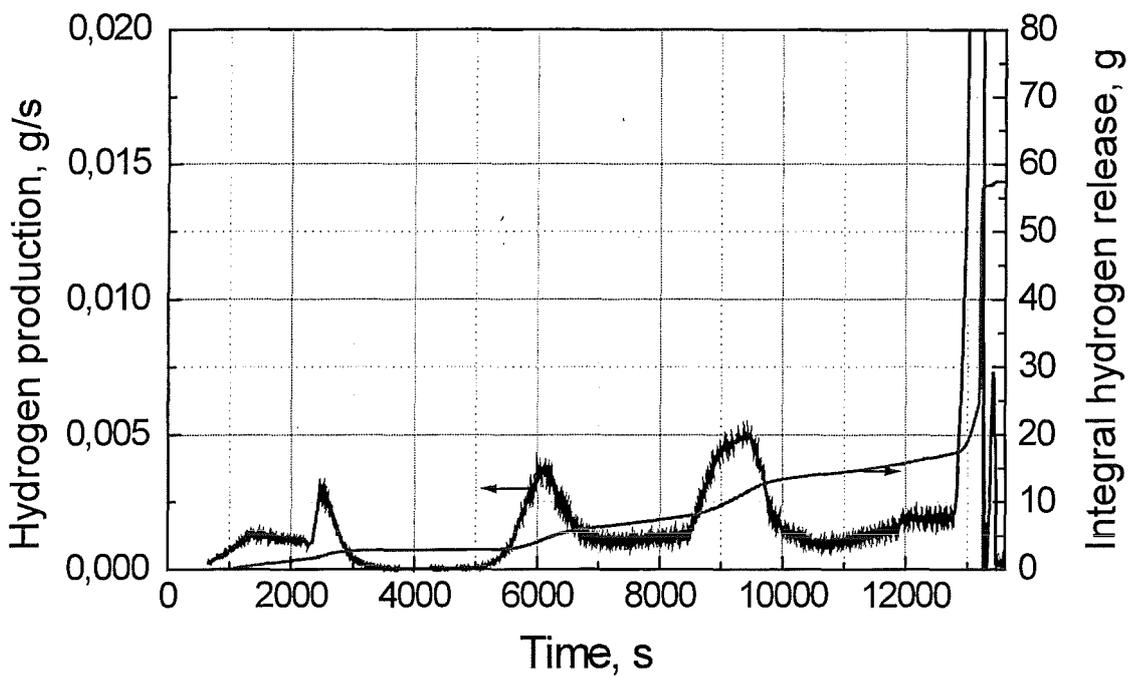


Abb. 16: IBS_05: Wasserstofffreisetzung (oberes Diagramm) und Daten der Anlage TCRC13 Zentrale Temp. im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temp. im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme und Argon- und Dampfmenstrom (unteres Diagramm)

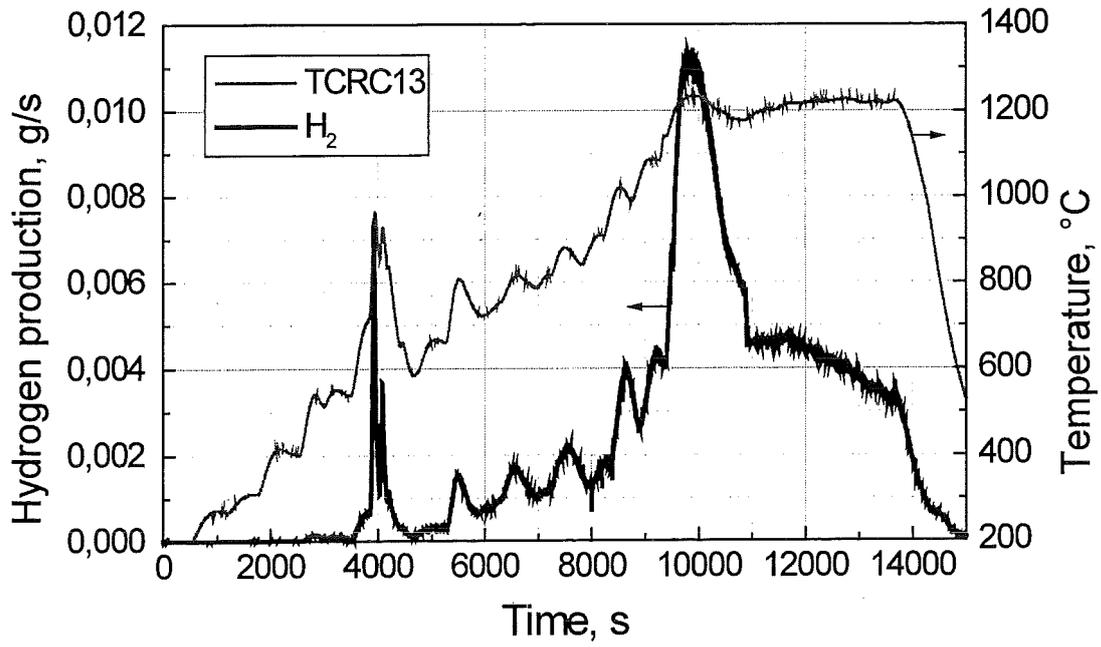


Abb. 17: IBS_04: Wasserstofffreisetzung und Temperatur des Zentralstabes in axialer Höhe 950 mm

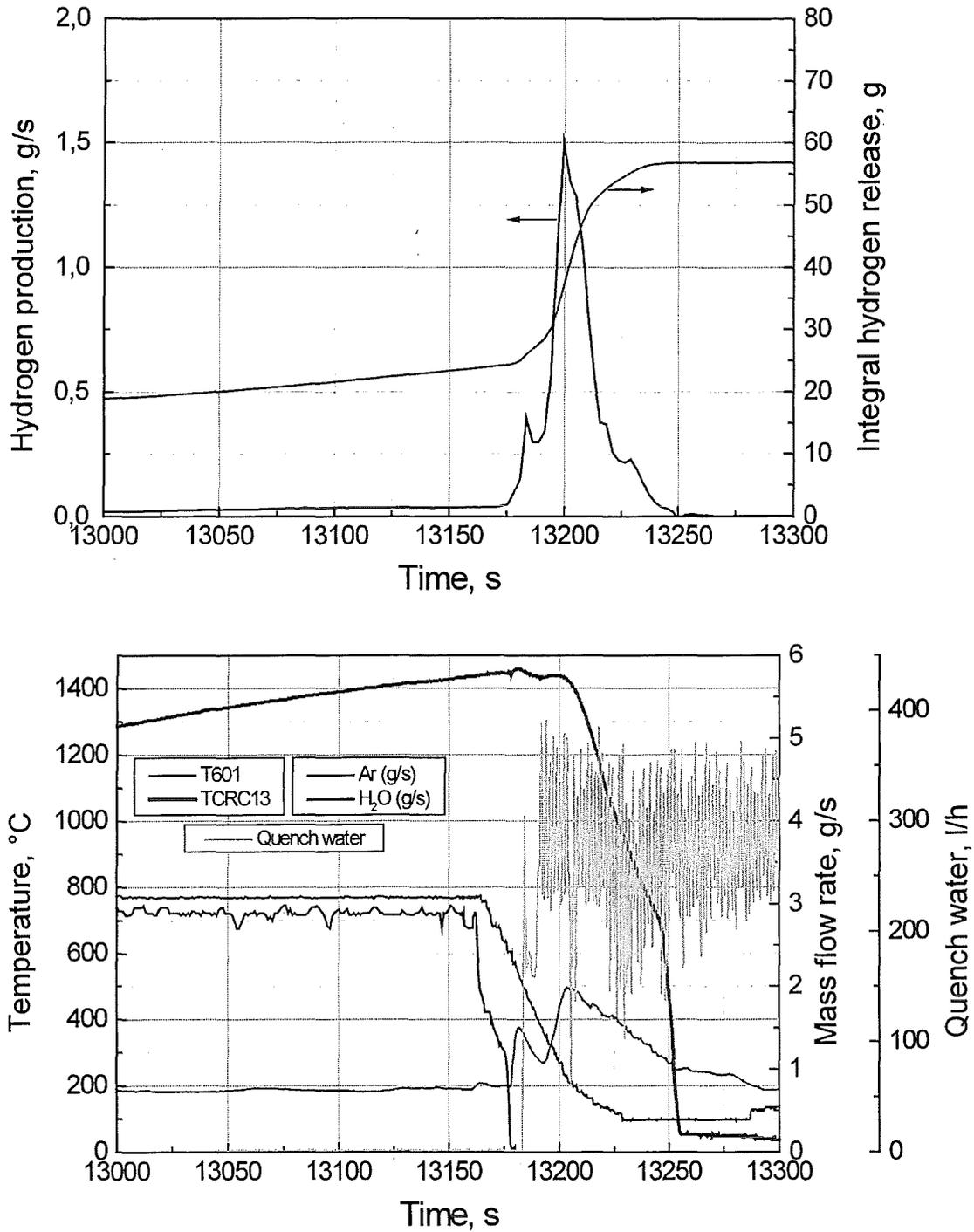


Abb. 18: IBS_05: Wasserstofffreisetzung (oberes Diagramm) sowie Anlagendaten TCRC13 Zentrale Temp. im Zentralstab bei 950 mm, T601 Temp. im Heißgasrohr nahe der MS-Probenahme und Argon- und Dampfmenngstrom (unteres Diagramm) während der Abschreckphase

QUENCH Commissioning Tests

Posttest view of the bundle



QUENCH Commissioning Tests

Hydrogen absorbed in cladding tube #13

and oxide thickness after quenching

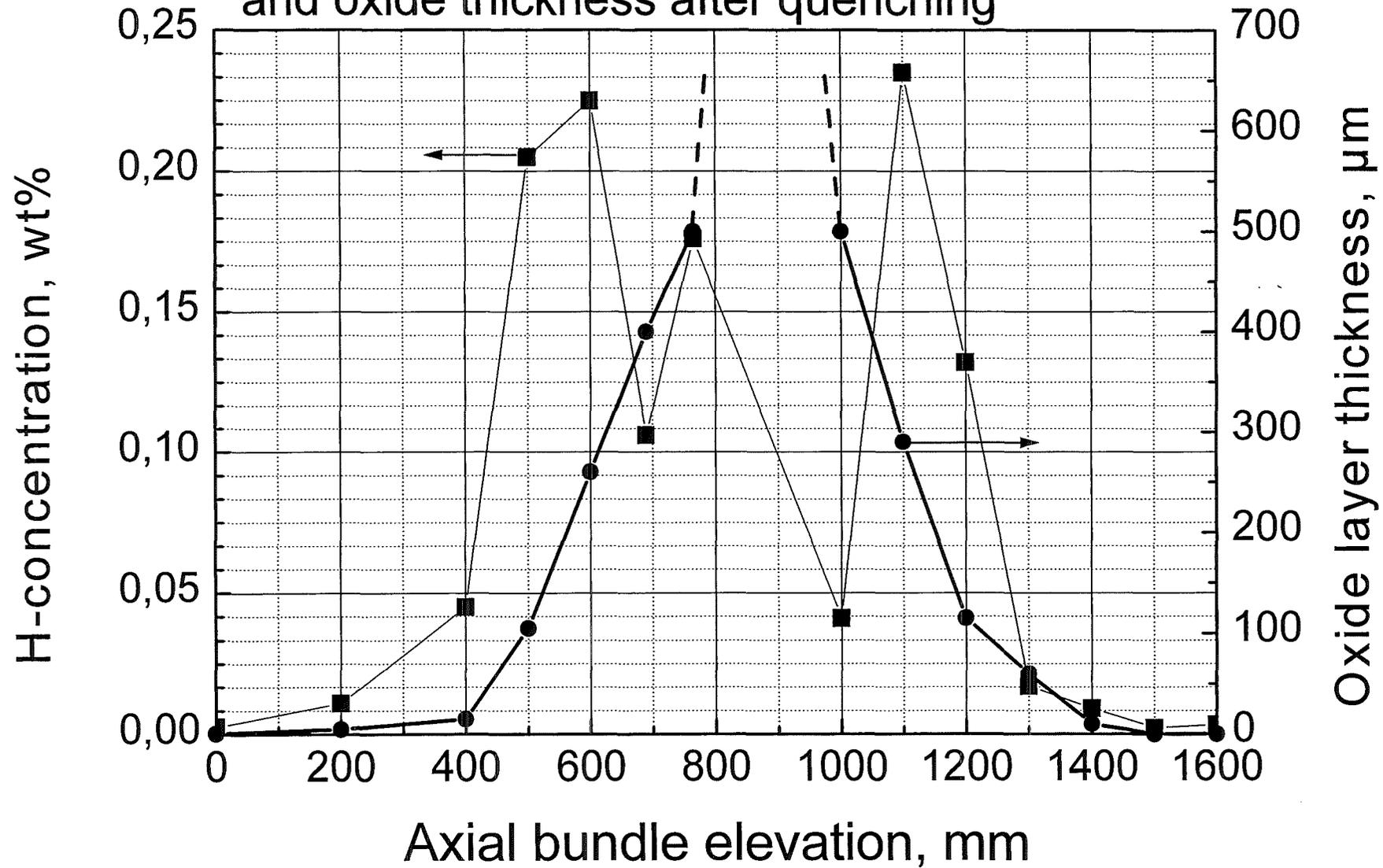


Abb. 20

III. Small-scale quench experiments
(A. Miassoedov, L. Steinbock, IMF I)

1. Experimental program

The separate-effects tests with short LWR fuel rod segments to determine the critical conditions (oxide layer thickness, temperature at onset of quenching) which result in crack formation and fragmentation of the oxygen-embrittled Zircaloy cladding during fast cool-down in a steam flow have been continued. It is assumed that the newly formed metallic surfaces result in enhanced oxidation and hydrogen generation during quenching as observed in the TMI-2 accident and in several integral tests.

The tube specimen of a length of 150 mm, filled with ZrO_2 pellets, is suspended inside a quartz tube which is surrounded by an induction heating coil (Fig. 1.1). Pre-oxidation of the Zircaloy tube specimen (0 - 300 μm ZrO_2 layer thickness) is executed at 1400 °C by steam/argon gas mixture in the QUENCH rig before quenching. The specimen is rapidly cooled down by injected steam of 1.5 g/s (Fig. 1.2). During the quench test the temperature of the specimen at three elevations and the hydrogen generation are continuously recorded (Fig. 1.3). A temperature deviation from the regular cool-down curve during the quench phase was observed in all experiments with quench temperatures less than 1600 C° when the ZrO_2 layer thickness was larger than 200 μm (Fig. 1.4). No temperature increase was observed in experiments with 1600 °C even for large ZrO_2 layer thicknesses (Fig. 1.5). The mechanical behavior of the cladding tubes depends on the quench temperature and the extent of pre-oxidation. Formation of macroscopic through-wall cracks can be observed in steam quenched experiments with ZrO_2 layer thickness larger than 200 μm . Crack formation is more pronounced at lower specimen temperatures at onset of quenching. The surfaces of the cracks in the remaining metallic part of the cladding tubes are oxidized. Oxidation of crack surfaces increases with decrease of the specimen temperature at onset of quenching. Due to the experiment conduct it is not possible to proof the crack oxidation during quench on the basis of measured hydrogen generation which was clearly demonstrated in the experiments performed before (pre-oxidized in Ar/O₂) [1].

The uptake of the hydrogen in Zircaloy and its additional release during oxidation of the metal and during the quench phase can influence the kinetics of hydrogen release and has therefore to be studied quantitatively in more detail. Future activities are directed to investigations of critical oxide layer thickness and critical cool-down rates which result in cracking of the tube specimen. The crack densities of through-wall cracks will be estimated to support the modeling of the observed phenomena. It is planned to perform the quantitative analysis of the hydrogen absorbed by metallic Zircaloy during small-scale experiments and to carry out post-test calculations of the quench experiments with SVECHA code.

2. Determination of the crack patterns of quenched Zircaloy tubes

When partially oxidized Zircaloy fuel rod cladding tubes are quenched from high temperatures by steam, cracks develop in the oxide layer and the α -Zr(O) substrate.

As already done for earlier experiments [2] a similar crack analysis was performed for the new experiments in which the fuel rod segments were cooled down (quenched) by injected steam. The previous method for visualizing the crack patterns with solvent was enhanced by adding a small amount of red color to the injected solvent, giving a permanent track of the cracks. The red color also allows green filtering. With coloring and filtering together, cracks are better distinguishable from other surface structures resembling cracks. Furthermore the coloring width gives an indication of the crack width.

If the oxide layer is thin (less than 100 μm) and the β and α -phase of the Zry is still thick enough, no cracks develop. Between 100 and 150 μm one first short axial crack is generated (27028_1). When the oxide thickness increases to 200 μm axial cracks are generated on opposite sides and the tube begins to show bending after the cool down.

The oxide layer has a different appearance dependent on the temperature the cool down was initiated (1200 – 1600 °C). At high temperatures (1600 °C) the oxide layer is bright and without stains. At low temperature (1200 °C) the oxide layer shows chains of dark spots where the oxide is semitransparent with almost no microcracks,

thus allowing to view down to the black Zr,Sn alloy layer inside the oxide layer. With increasing temperature these dark spots disappear. In some experiments the bright and the dark oxide types coexist: The experiment 18028_1 shows a long axial crack inside a bright area with very few black stains, whereas the 180 degree opposite area is spotted with dark stains but has cracked only in the upper and lower region (Fig. 1.6).

The experiment 19028_1 shows two axial cracks extending over the whole length of the hot region and many more axial and azimuthal cracks. The black monocrystalline stains are spread over the whole surface. This experiment was repeated because an unusual hydrogen release was observed. In the repeated experiment 25028_1 the crack pattern has no dominant long axial crack and the rod is broken along an azimuthal crack in the center. The surface shows no black stains.

The different crack patterns, black stain frequency and the varying hydrogen release in the quench phase indicate that other "hidden" parameters must be considered. Thus one aim of future experiments should be to determine the variability of crack patterns for identical experimental conditions.

The total length of the cracks was compared as a function of the initial oxide layer thickness (Fig. 1.7). At about 150 μm oxide layer thickness the total visible crack length rises sharply. But the spread of the crack length is high for experiments with about the same oxide layer thickness. In earlier experiments (water quenched) a sharp increase of crack length was found for about 200 μm initial oxide layer thickness. The current analysis shows that cracking begins already at thinner oxide layers and increases further for thicker oxide layers.

The hydrogen release should depend on the open crack length. A plot (Fig. 1.8) of the measured release as a function of the visible crack length indicates that there is a reasonable correlation.

References

- [1] P. Hofmann, V. Noack. Physico-chemical behavior of zircaloy fuel rod cladding tubes during LWR severe accident reflood. Part I: Experimental results of single rod quench experiments. FZKA 5846, Mai 1997.
- [2] Experimente zum Wasserstoffqueillterm und zur UO_2 und ZrO_2 -Auflösung durch geschmolzenes Zirkaloy, FZKA 5963, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1996, Seite 386-388.

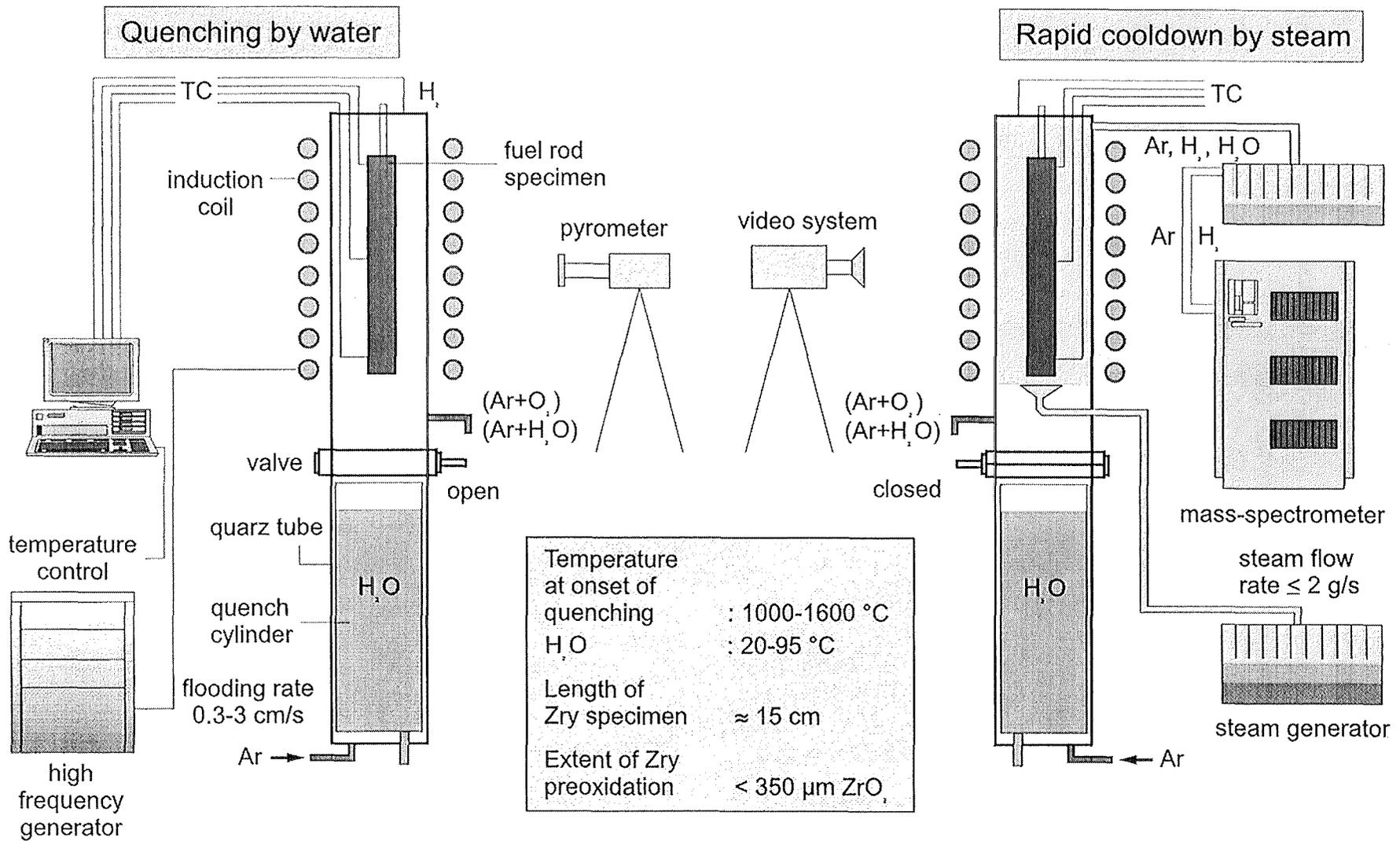


Figure 1.1: Quench apparatus simulating flooding conditions of a degraded LWR core.

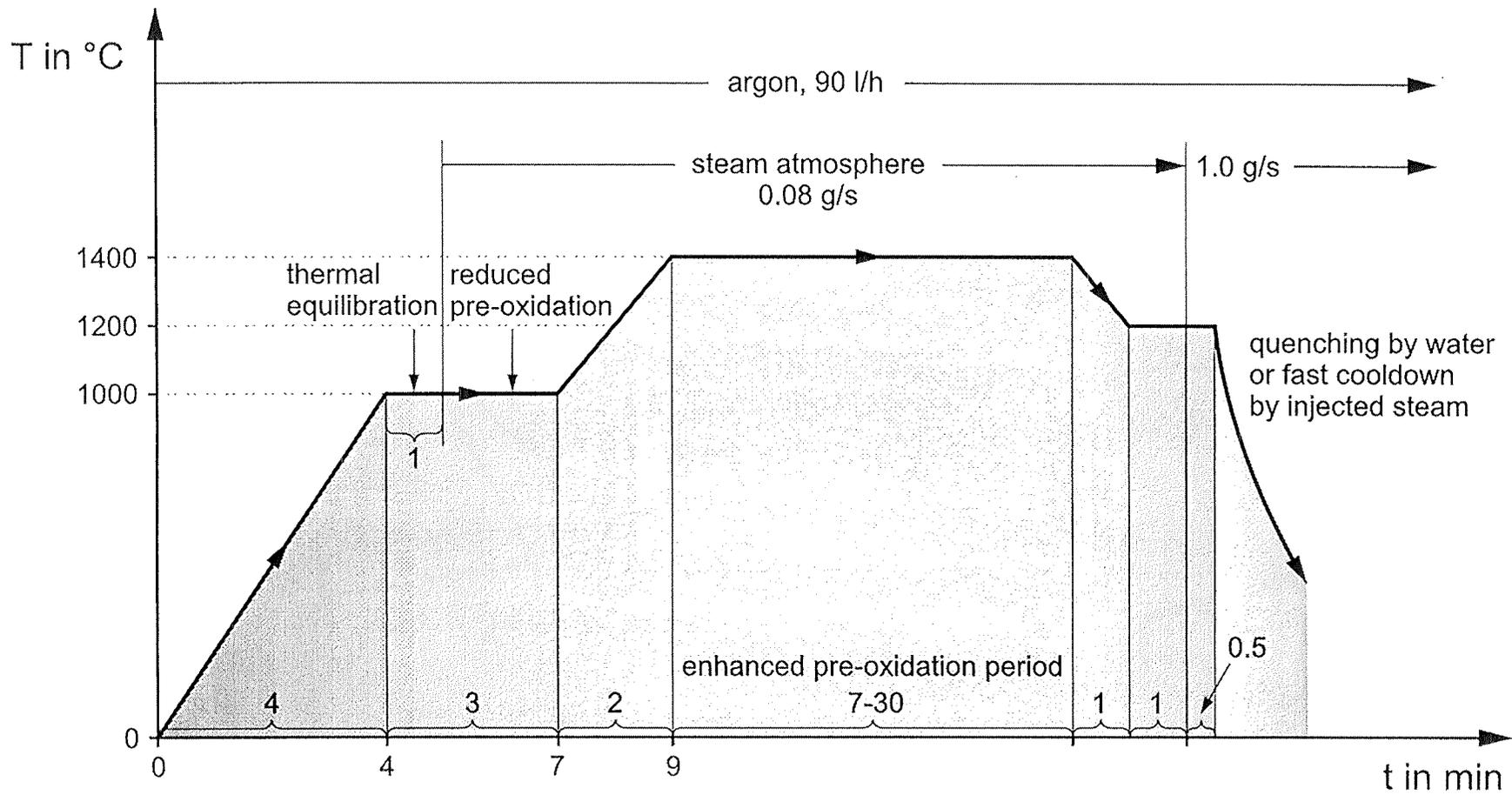


Figure 1.2: Test conduct of single rod quench experiments.

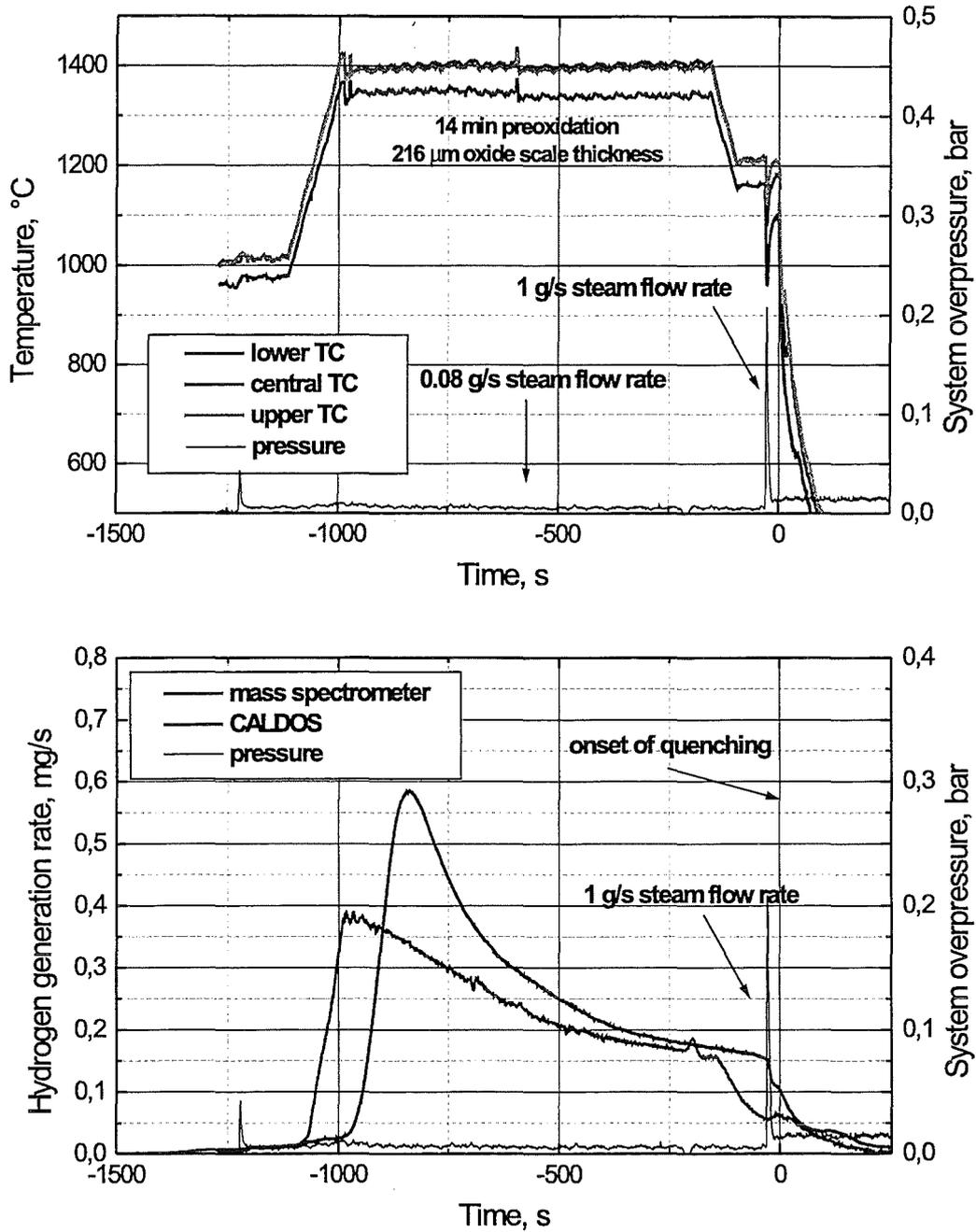


Figure 1.3: Temperature history and corresponding hydrogen release; steam cooling from 1200 °C.

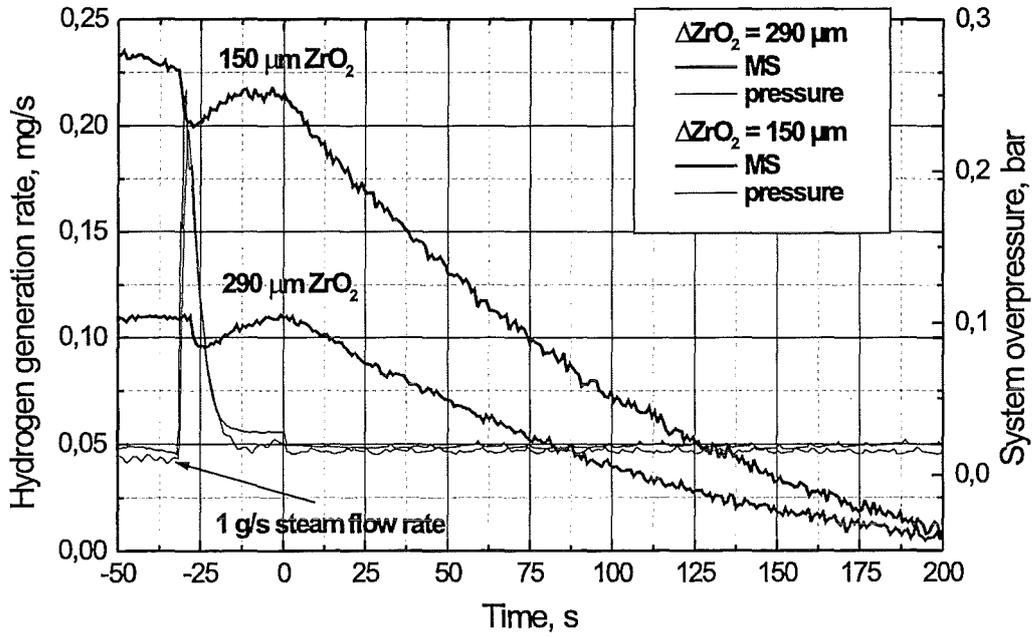
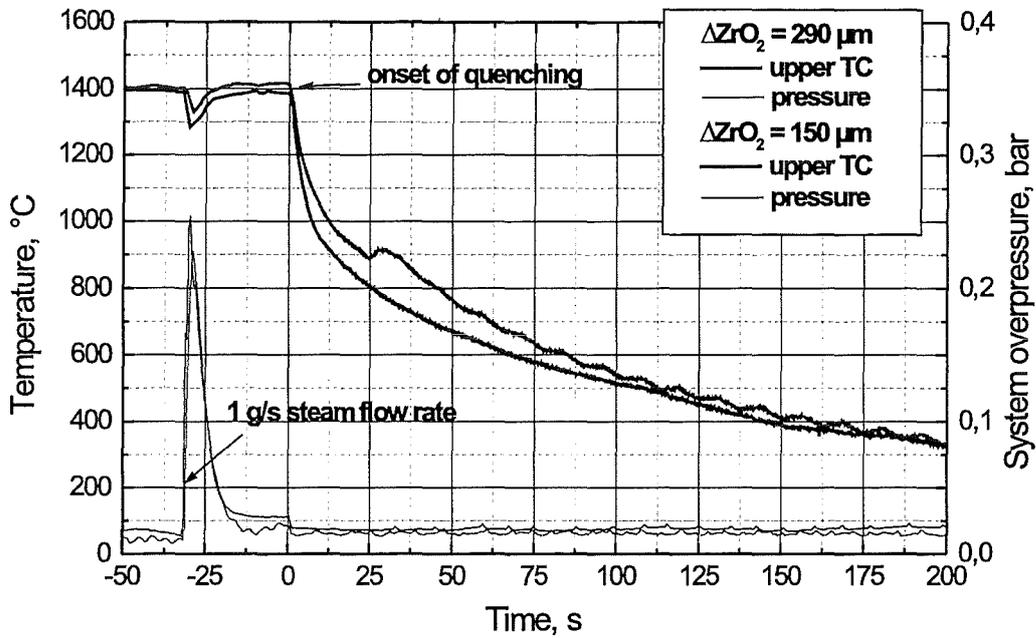


Figure 1.4: Temperature deviation from the regular cool-down curve; steam cooling from from 1400 °C.

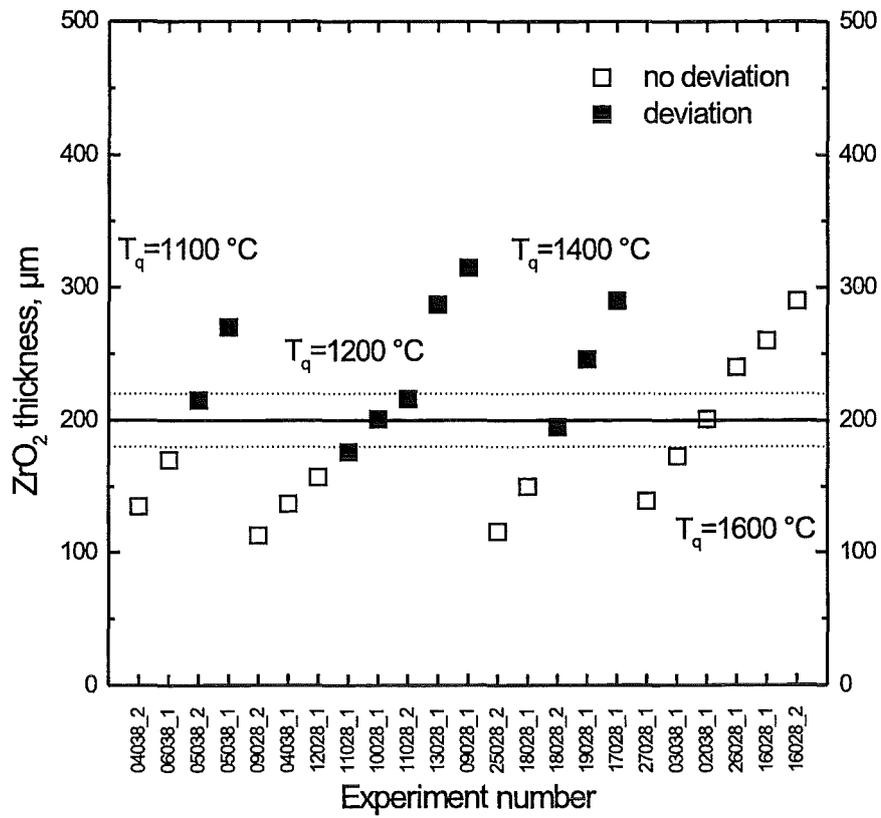


Figure 1.5: Temperature deviation from the regular cool-down curve in small-scale quench experiments.

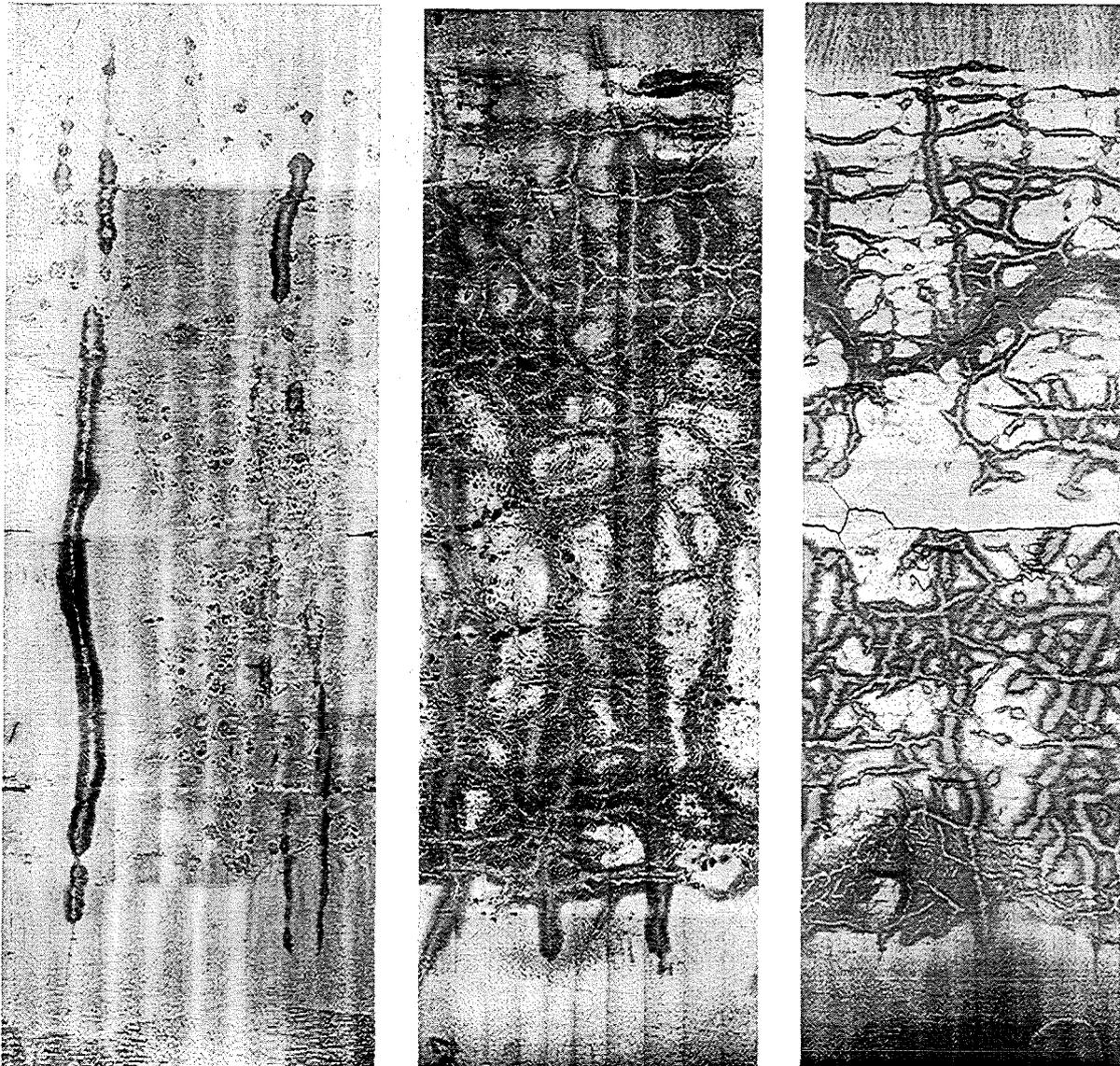


Figure 1.6: Surface patterns of three cladding tubes after the quench experiments (the images show tube surfaces, regular stripes are due to varying illumination because of curvature and bending).

left: 18028_1 (1400 °C, 150 μm oxide layer) one long axial crack on white oxide; two small cracks on the opposite side with many dark stains;

center: 19028_1 (1400 °C, 246 μm oxide layer) four axial cracks in lower part, irregular cracks in upper part, many dark stains;

right: 25028_1 (1400 °C, 246 μm oxide layer) irregular cracks and breach along azimuthal crack in the center position.

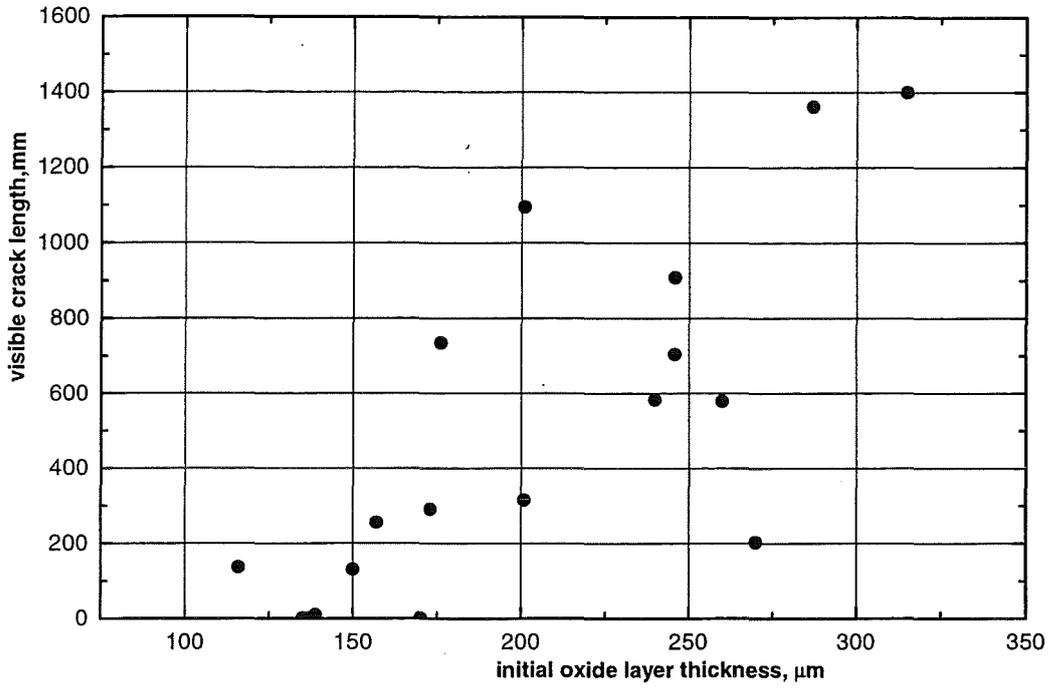


Figure 1.7: Visible crack length as function of initial oxide layer thickness

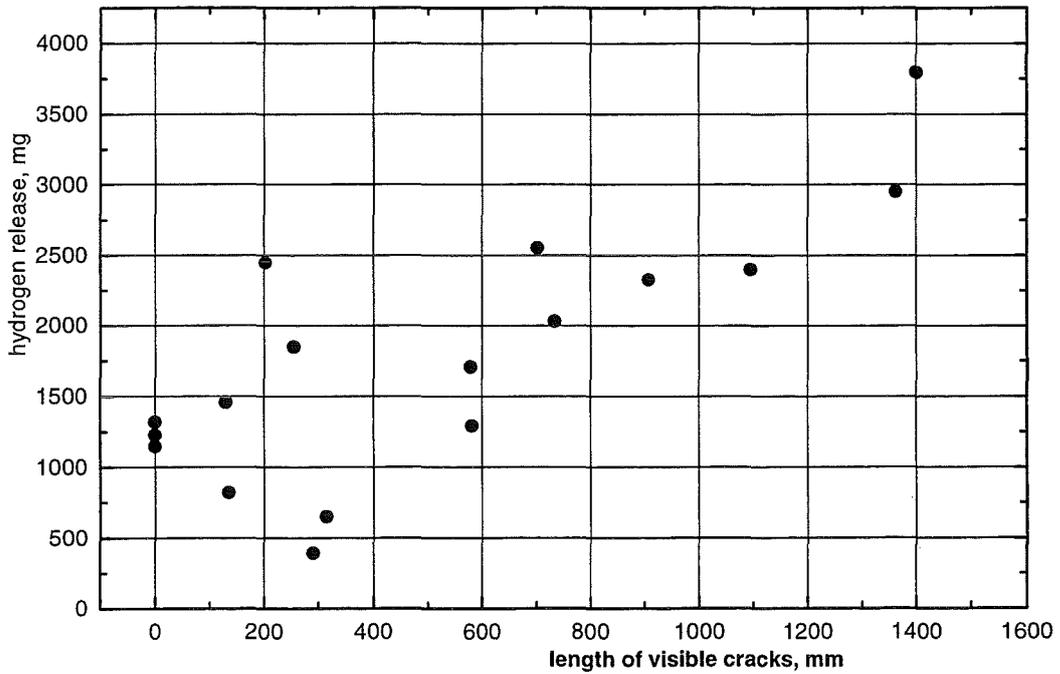


Figure 1.8: Hydrogen release vs. visible crack length

IV. Mechanical Effects in Single Rod Quench Tests
(H. Steiner, IMF III)

Abstract

The mechanical stability of oxide scales on Zry cladding may be of great importance for the accident course during the reflooding phase in a loss-of-coolant accident in an LWR. In this report the experience gained from the single rod quench tests done at IMF I is discussed. The main effects are a severe degradation of the oxygen-stabilized α -Zry and the occurrence of through-wall cracks mainly for thick oxide scales. With the help of calculations with the clad mechanics code WSPAN mechanisms are discussed which lead to the observed mechanical effects.

1. Introduction

The mechanical stability of oxide scales on Zry claddings can be of great importance for the accident course during the reflooding phase in a loss-of-coolant accident in an LWR. Their degradation allows renewed oxidation of the cladding leading to hydrogen production and eventually to a temperature excursion in the fuel rod bundle.

At FZK single rod quench tests have been carried out, which figure as separate effects tests [1]. These tests allow to study the mechanical behaviour of oxidized Zry cladding under quench conditions. Therefore, some of these tests have been recalculated with a 1-dimensional code for fuel rod mechanics (WSPAN).

2. Single rod quench tests at FZK

A series of quench tests is performed with fresh and pre-oxidized Zry single rod specimens at FZK [1]. The majority of specimens of 100 - 150 mm length are pre-oxidized at 1400 °C in steam or in an argon/oxygen mixture to the desired extent. The specimens are then brought to the so-called T_0 temperature (800 - 1600 °C) and then quenched either by water or steam. The temperature of the specimen and the hydrogen production are continuously recorded.

3. Observed mechanical effects

A number of mechanical effects have been observed on the claddings of the test rods by post test examinations (PTE). That of greatest importance are:

- a) a severe degradation of the oxygen-stabilized α -Zry (see Fig. 1)
- b) the occurrence of through-wall cracks (see Fig. 2).

Both phenomena seem to be rather independent of the quench medium. The severity of damage in the α -phase increases with the scale thickness. Through-wall cracks are mainly found in claddings with thick oxide scales ($\delta_{ox} \geq 180 \mu\text{m}$): An oxidation of some microns is found at some crack faces and at the inner clad surface. Many examples of cracks, having been formed in the α -Zry and then propagated into the ZrO_2 scale and even into the β -Zry, have been found in PTE, indicating that the occurrence of through-wall cracks is linked to crack initiation in the α -phase.

The extent of spalling seems to be very much determined by the oxidation temperature. With a temperature of 1400 °C, the oxide scales are in an intact condition at the end of the pre-oxidation phase and there is only some local spalling in water quenched tests to a small extent and some buckling of thin surface layers of the oxide scale. With an oxidation temperature of 1050 °C, the oxide scales are already degraded at the end of the pre-oxidation phase (break-away oxidation) and extensive spalling of the oxide scale is observed.

4. Results of recalculation of single rod quench tests with the mechanics code WSPAN

In WSPAN the clad is treated as a composite cylinder consisting of three layers (ZrO_2 , α -Zry and β -Zry) and each layer is broken up into a certain number of annular regions by node points [2]. Approximating the stress-strain equations by finite difference expressions one arrives at matrix relations between the stresses at neighbouring node points:

$$\sigma_{j+1} = L(j) \cdot \sigma_j + M(j) \quad (1)$$

These equations can be solved recursively using the boundary conditions for the radial and axial stress.

The results are, of course, very much dependent on the assumptions on the material behaviour of the three phases in the cladding. In a first step the material correlations provided by MATRO were used, that means α - and β -Zry are treated as ductile materials. Some typical examples of stress evolution and stress distribution are shown in Fig. 3 to Fig. 6 for this case.

The most important feature is a very high stress pulse of more than 2000 MPa in the oxide scale at the phase change from the tetragonal to the monoclinic state occurring at about 1200 °C according to the Zr-O phase diagram (see Fig. 3 and 4). In a later stage of the quench event, tensile stresses arise in the outer part of the oxide scale due to radial temperature gradients when the heat flux becomes high with the arrival of the quench front. The stresses in the metal phase remain rather low (see Fig. 6) due to our assumptions on its ductile behaviour.

The phase change in the oxide is of a martensitic type and therefore athermal. As high stresses arise, there must be some subcooling that the transformation can propagate. This leads then to high strain rates in the metal phase as well.

Under these conditions α -Zr(O) and eventually β -Zry with a high oxygen content seem to behave in a brittle manner as the results of PTE are indicating. The phase change in the oxide would then lead to rather high tensile stresses in the α -phase and may be even in the β -phase (see Table I) depending on the oxygen content.

Table I: Stresses in the cladding for purely elastic behaviour of α -Zr(O), $T \approx 1150$ °C

oxide scale thickness [μm]	σ_{θ} [MPa] β -Zry	σ_{θ} [MPa] α -Zry	σ_{θ} [MPa] ZrO ₂
300	-	1600	-2150
200	(2)*	(1850)*	(-1950)*
150	400	1200	-2500
100	300 (2)*	900 (1400)*	-2850 (-2400)*

**plastic flow in β -Zry*

No values for the critical stress in α -Zr(O) are known from the literature. Based on published data for fracture toughness [3] and stress intensity factors [4] an estimate

was made in [2]. For flaw sizes between 10 and 20 μm the critical stress level ranges from 1400 to 900 MPa.

With oxide scales of about 300 μm , no β -layer is any longer present in the cladding and the formation of through-wall cracks can be expected. With oxide scales of about 180 - 200 μm there is still a β -layer existing in the inner part of the cladding. If this β -layer of relatively high oxygen content (≈ 1 wt-% O) is also brittle in nature, stresses cannot be relaxed by plastic flow and cracking is to be expected at some critical stress level in the β -phase, which we do not know at the moment. For the intermediate stress state with a cracked α -layer and intact ZrO_2 and β -layers values of 700 to 900 MPa have been calculated in the β -layer with thickness values ranging between 200 and 150 μm . Thus, the critical stress values should have been lower than 700 MPa.

5. Conclusion

The single rod quench tests have provided valuable insight into the mechanical behaviour of oxidized Zry tubes under quench conditions. A result of great importance is the occurrence of through-wall cracks for thick oxide scales. These cracks are due to the phase change in the oxide and therefore their formation does not depend on thermohydraulic boundary conditions.

References

- [1] P. Hofmann, et al.: „Physico-Chemical Behaviour of Zircaloy Fuel Rod Cladding Tubes During LWR Severe Accident Reflood“, FZKA 5846 (1997)
- [2] H. Steiner, M. Heck: „Stresses in an Oxidized Zry Cladding under Quench Conditions: Recalculations of Single Rod Quench Tests“, to be published in Nucl. Technology
- [3] G.R. Anstis, et al.: „A Critical Evaluation of Indentation Techniques for Measuring Fracture Toughness I, Direct Crack Measurement“, Journal Am. Ceramic Society 64, 533 (1983)
- [4] H. Tada, et al.: „The Stress Analysis of Cracks“, Handbook, Second Edition, Paris Product. Inc., St. Louis (1985)

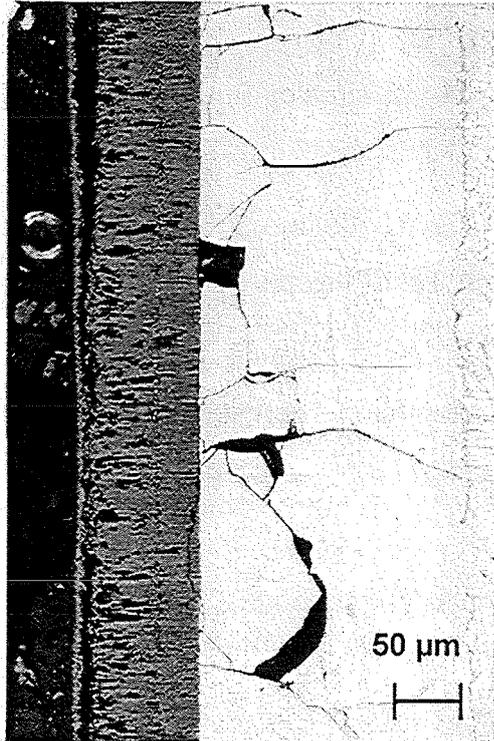


Fig. 1 : Cracks in the α -Zry (taken from [1]).

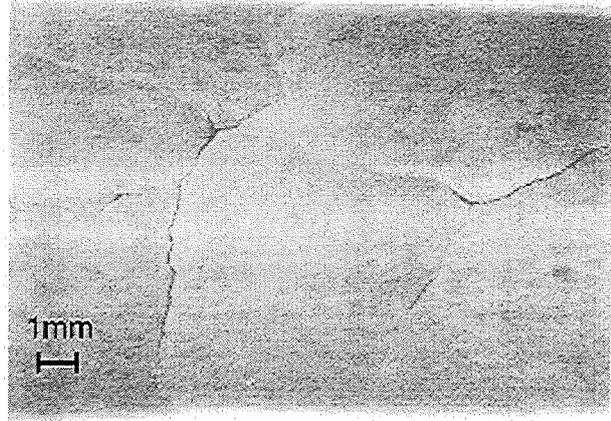


Fig. 2: Irregular pattern of through-wall cracks ; view on the clad surface (taken from [1]).

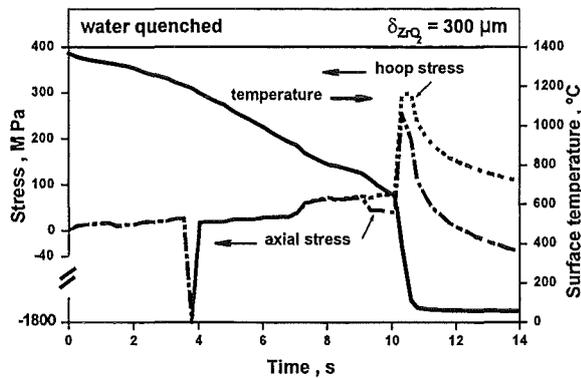


Fig. 3 : Stress and temperature at the outer radius of the oxide scale versus time.

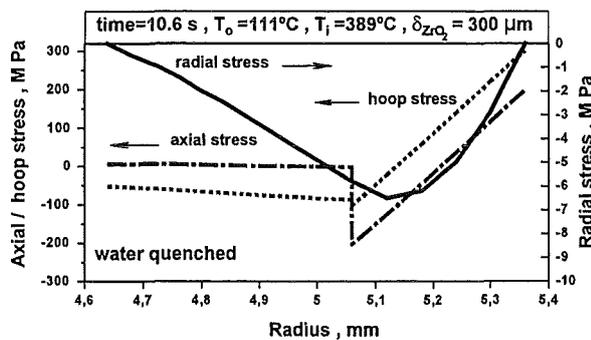


Fig. 5 : Radial distribution of stresses at Time = 10.6 s.

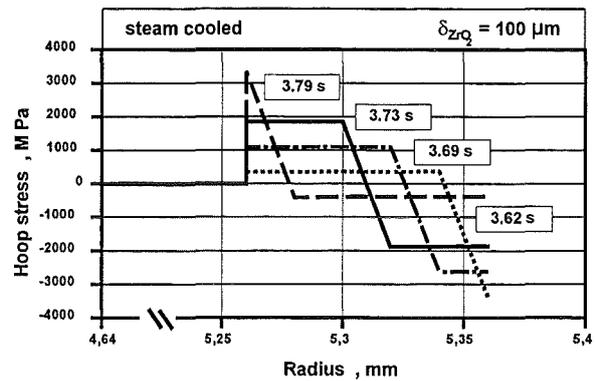


Fig. 4 : Radial distribution of hoop stress at different times during phase transition in the oxide.

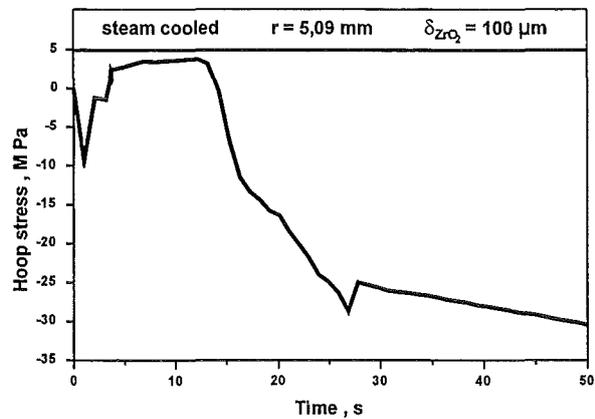


Fig. 6 : Hoop stress in the Zry versus time.

- V. Analysen zu schweren Störfällen sowie Analysen kernzerstörender Unfälle
(W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, S. Smit, D. Struwe, IRS;
Ch. Messaingiral, CEA¹)

Abstract

At the Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) the Institute for Reactor Safety (IRS) supports the experimental activities focused on the enhanced safety features of the European Pressurized Water Reactor by plant calculations with SCDAP/RELAP5 mod3.1 (S/R5) and RELAP5 mod3.1 (R5m31). These codes have been validated and improved significantly in close cooperation with INEEL.

To define reactor specific boundary conditions for the bundle quench experiments in the newly erected QUENCH facility several plant calculations based on a „Loss-of-Offsite-Power“ scenario were performed. The facility model designed for pre-design and pre-test calculations has been refined using the commissioning tests. The post-test analysis of the first quench test QUENCH-01 is under way. The deviations observed may be explained by errors in the convective heat transfer and the surface mounting of the thermocouples on the fuel rods. Also a S/R5 input deck for the single rod test rig is finished and used for quench model development. The RELAP5 code validation with the improved Chen correlation shows significant improvements with respect to NEPTUN, FLECHT SEASET, and LOFT LP-LB-1 experiments. To explain the temperature deviations in the LOFT calculations prior to quench the film boiling model will be analyzed. Reactor reflood calculations are under way.

For in-vessel late phase situations code validation using Phebus FP experiments showed that some improvements are necessary especially in the transition phase between nearly intact geometry (individual structures) and a debris / molten pool configuration. The new shroud model which includes dynamic gap behavior and radiative heat transfer significantly improves the results of S/R5 mod3.1. The validation will be continued with S/R5 mod3.2.

Code comparisons with MELCOR and MAAP revealed that S/R5 mod 3.1 still has some shortcomings which do not allow to interpret the results after pool formation. When S/R5 mod3.2 will be available in June 1998, code validation and code improvement have to be continued.

Due to the lack of reliability of S/R5 mod3.1 Rel.F under late phase conditions, calculations with ICARE2V2 were initiated to identify the influence of pool interaction with remaining reactor internals.

Zusammenfassung

Für Reflood Analysen zum EPR wurde das detaillierte Inputdeck (epr5B2) um das Emergency Core Cooling System ergänzt und damit Rechnungen zum „Loss-Of-Offsite-Power“ (LOOP) Szenario durchgeführt. Als Code wurde SCDAP/RELAP5 mod3.1 Rel. F

¹ Von CEA-DRN (Frankreich) an FZK/IRS delegiert.

(S/R5) verwendet. Die Modellschwächen des Codes speziell in der späten In-vessel-Phase wurden durch den Einsatz von ICARE2 mit Randbedingungen aus S/R5 abgedeckt. Für die projizierten QUENCH-Versuche wurden aus den LOOP Flutrechnungen charakteristische Kenngrößen abgeleitet. Die Flut- bzw. Quench-Modelle in RELAP5 wurden anhand von Experimenten in der NEPTUN (PSI), FLECHT, und LOFT-Anlage (INEL) und der Einzelstab-Quenchanlage (FZK/IMF) getestet und verbessert. Die S/R5 Validierungsrechnungen bestätigten die adäquate Modellierung der Prozesse in der frühen In-vessel Kernschmelz-Phase, gefundene Fehler wurden bzw. werden behoben. Die Test zur Inbetriebnahme der QUENCH-Anlage (FZK/IMF) wurden mit Vorausrechnungen unterstützt, das Anlagenmodell wurde anhand des IBS02 verifiziert und verbessert.

1.1.1 Unfallanalysen mit SCDAP/RELAP5 und ICARE2

1.1.1.1 EPR Modellierung

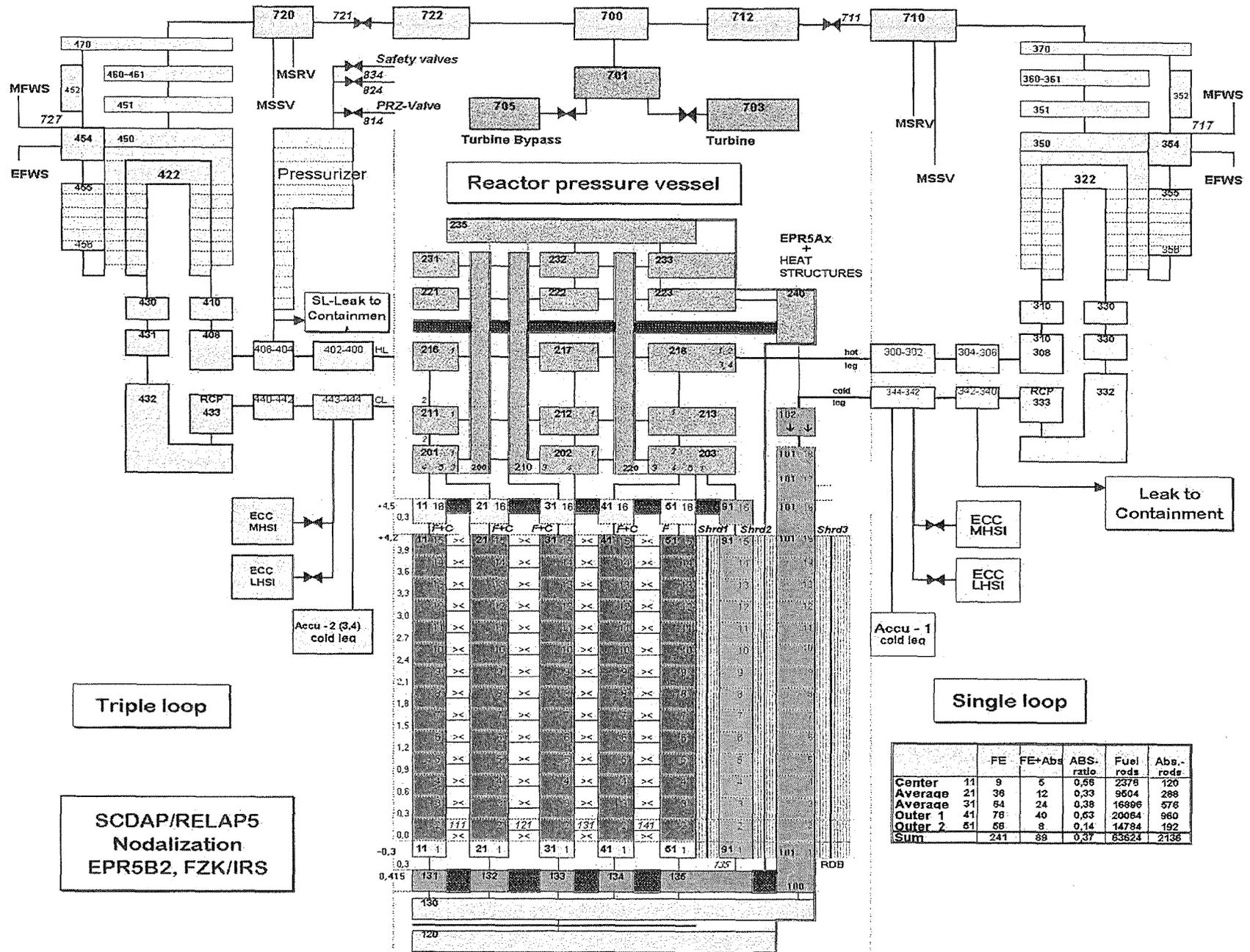
Im IRS werden für Störfallanalysen das mechanistische Programm SCDAP/RELAP5 (S/R5) /1/ sowie - auf den Reaktorkern beschränkt - das französische Programm ICARE2 /2/ verwendet. Während des Berichtszeitraumes wurde die Version S/R5 mod. 3.1 Rel. F verwendet. Die detaillierten Ergebnisse sind in /3/ und /4/ dokumentiert.

Das aktuelle EPR Modell (epr5B2, s. Abbildung 1)) beschreibt den Reaktorkern mittels fünf konzentrischen Ringen, die in radialer Richtung von zwei konzentrischen Shrouds umgeben sind. Der innere Shroud beschreibt den „Heavy Reflektor“ sowie den Kernbehälter. Auf der Außenseite des Downcomers wird die RDB-Wand als zweiter Shroud modelliert. Die Brennstäbe und die Shrouds sind durch radialen Strahlungsaustausch miteinander gekoppelt. Das obere Plenum sowie der obere Deckelraum sind durch drei Ringe dargestellt. Upper Head und Kernbereich sind durch repräsentative Steuerelement-Führungsrohre miteinander verbunden. Die Kerntragestruktur, die obere Kernplatte und die Plenumseinbauten wurden durch RELAP „heat structures“ modelliert. Der Primärkreis besteht aus 2 Loops, dem repräsentativen Loop (3xx), dem Loop 4xx, der die restlichen drei Kreise simuliert, dem Emergency Core Cooling (ECC) System und dem Druckhalter.

Modellierung des Druckhalters

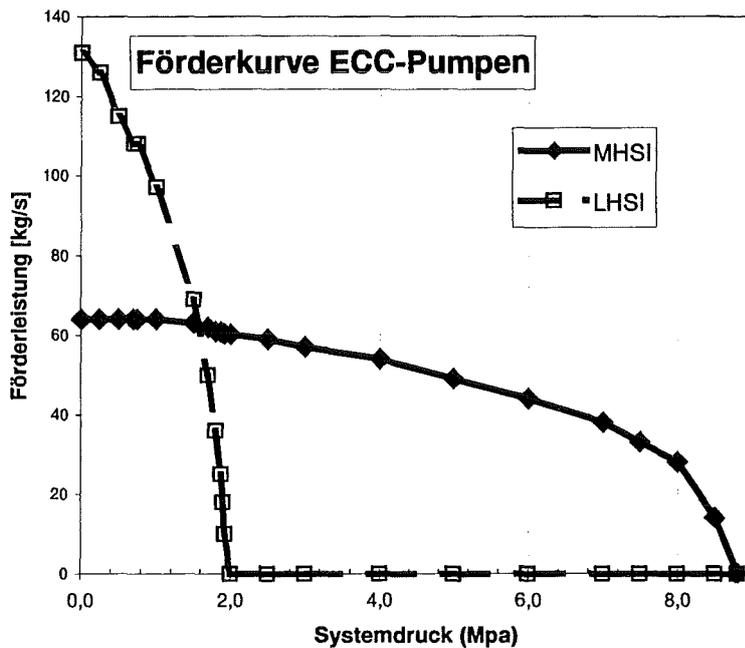
Aufgrund von Schwierigkeiten mit der Synchronisation verschiedener Druckrandbedingungen (Primärseite, Sekundärseite, Druckhalterventile, Leckvolumen) wurde ein Containmentvolumen bestehend aus 4 Teilvolumina modelliert. Damit kann das Ausströmen durch die Sicherheitsventile bzw. Abblaseventile des Druckhalters besser beschrieben werden, d.h. der sich aufbauende Gegendruck in den Rohrleitungen sowie im Containment kann adäquat berücksichtigt werden. Die Druckrandbedingung kann von Containment-Programmen übernommen werden. Der In-Reactor Water Storage Tank (IRWST) kann zur Zeit nicht berücksichtigt werden.

Abbildung 1: Nodalisierung des EPR-Systems im S/R5 epr5B2 Modell, Druckhalter und Leck werden dem Szenario entsprechend angeschlossen.



Modellierung des ECC Systems

Das Emergency Core Cooling System (ECC) wurde entsprechend dem EPR Datenbuch realisiert. Da für das untersuchte Szenario primär das Flutverhalten des überhitzten Kerns wichtig ist und kein Leck im Primärkreis simuliert wird, wurde das ECC der beiden Loops zusammengefaßt und im Dreifachloop realisiert. Für Reflood-Analysen bei LOCA Störfällen oder für den Abriß der Druckhalterleitung müssen jedoch die Systeme Loop-spezifisch modelliert werden, da ein Teil der ECC-Einspeisung durch das Leck entweicht. Die Modellierung ist entsprechend vorbereitet.



Die druckabhängige Förderleistung der ECC Systeme, dem Medium Head Safety Injection (MHSI) System und dem Low Head Safety Injection (LHSI) System sind in Abbildung 2 dargestellt. Als Gegendruck wurde der Druck im kalten Strang angesetzt. Zur Aktivierung der ECC Pumpen wurde für die Parameterstudien die maximale Kerntemperatur herangezogen (s. Kap. 1.1.1.2).

Abbildung 2: Förderkurven für die ECC-Pumpensysteme

1.1.1.2 Untersuchte Szenarios

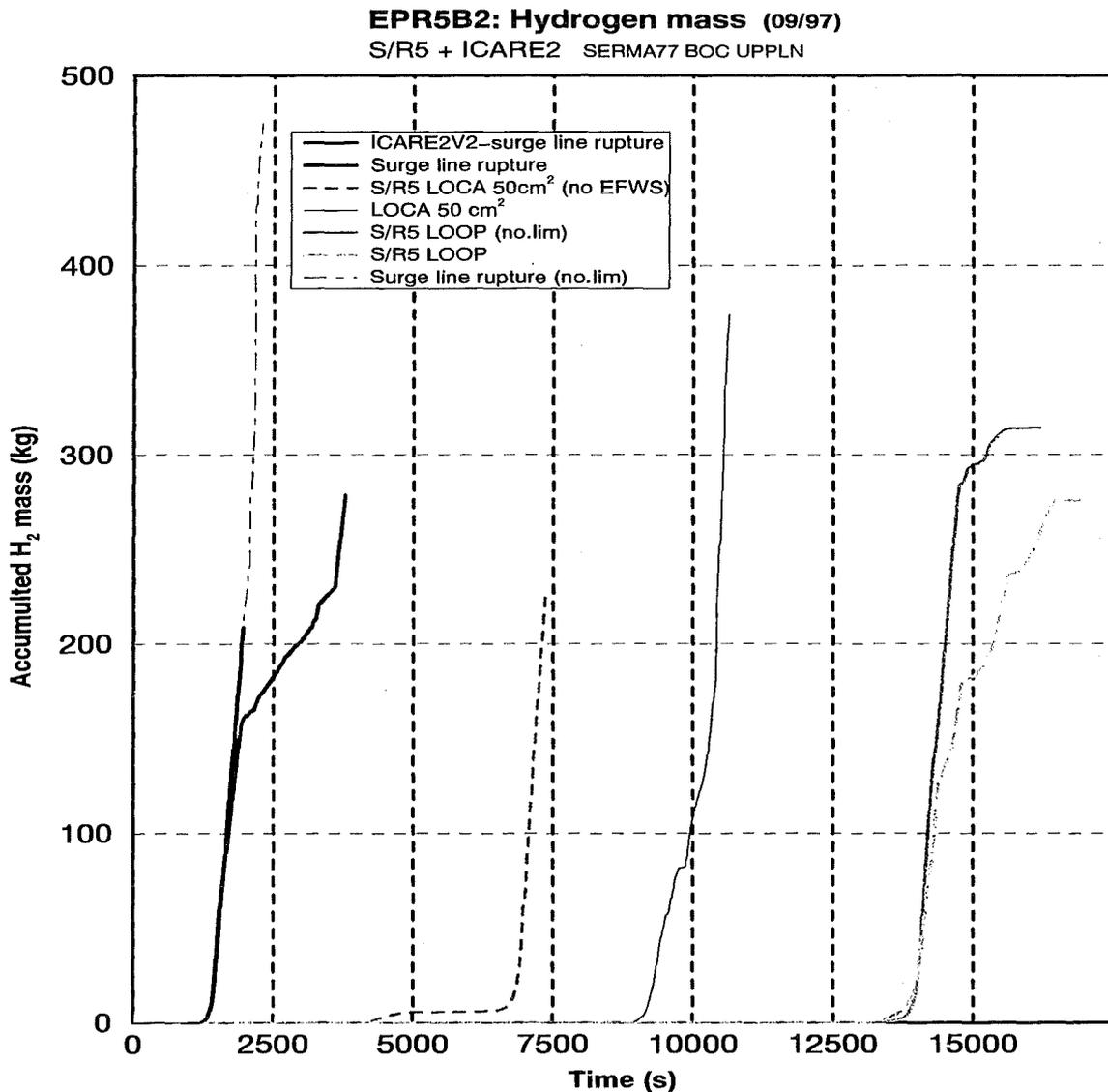
Im Berichtszeitraum wurden Kernschmelzanalysen mit S/R5 mod3.1 durchgeführt, die wesentlichen Ergebnisse werden in einem Bericht dokumentiert /3/. Die Arbeiten zum Wiederfluten eines zerstörten Reaktorkerns konzentrierten sich auf den Ausfall der Eigenbedarfsversorgung, „Loss-Of-Off-site“ (LOOP). Wegen der Aktualität der QUENCH-Versuche wurde vor allem das Fluten eines teilzerstörten Kerns untersucht. Die wesentlichen Ergebnisse werden in einem eigenen Bericht zusammengefaßt /5/.

Ferner wurde anhand des Szenarios „Abriss der Druckhalterleitung“ untersucht, in wie weit der französische Kernschmelzcode ICARE2 geeignet ist, Reaktorbedingungen zu simulieren. Das wesentliche Ergebnis dieser Analyse (siehe auch Kap. 1.1.2) kann wie folgt zusammengefaßt werden:

1. ICARE2 ist aufgrund der unzulänglichen Thermohydraulik-Modellierung zur Zeit nicht in der Lage, die Vorgänge im Reaktorkern adäquat zu beschreiben.
2. ICARE2 kann jedoch sehr gut zur lokalen Detailanalyse eingesetzt werden, wenn die Randbedingungen von S/R5 vorgegeben werden. Die Rechnungen zur Verhalten des „Heavy Reflektors“ bei Bildung und Ausbreitung eine Schmelzepools im Kern zeigen dies deutlich (siehe Kap. 1.1.2).

Diese Arbeiten werden mit dem Ziel fortgesetzt, genauere Aussagen über das Aufschmelzverhalten von „Heavy reflector“ und Kerntagestruktur zu erhalten.

In Abbildung 3 sind die derzeit berechneten Wasserstoffmassen für die untersuchten Szenarios mit S/R5 und ICARE2 zusammengestellt. Aufgrund von Fehlern und Instabilitäten in S/R5 (die z.T. schon behoben sind) sind diese Werte noch nicht voll belastbar, die von uns identifizierten Fehler lassen eine um ca. 15 % erhöhte H₂-Gesamtmenge erwarten. Das Szenario 50 cm² LOCA wird in Absprache mit SKWU noch einmal mit S/R5 mod3.1 Rel.F berechnet, die anderen Szenarios werden mit Verfügbarkeit von S/R5 mod3.2 (voraussichtlich April 98) erneut analysiert.



W. Hering, Chr Messaiguiral

Abbildung 3: Zusammenstellung aller H₂-Massen aus Rechnungen mit S/R5 mod3.1 Rel.F und ICARE2.

1.1.1.3 Untersuchungen zum Fluten des EPR

Das Fluten eines überhitzten Kerns ist eine wesentliche Maßnahme zur Gewährleistung einer langfristigen Kernkühlung und dadurch zur Verhinderung weiterer Kernzerstörung. Genaue Kenntnisse über diese thermohydraulischen Flutvorgänge sind von großer Be-

deutung für die Erarbeitung effektiver Notfallmaßnahmen. Die Rechnungen dienen zur Analyse des Primärkreisverhaltens beim Fluten, zur Bestimmung der Wasserdampf- und Wasserstoffquellterme für Containmentanalysen sowie zur Definition reaktorspezifischer Flutbedingungen für die anstehenden QUENCH Experimente (s. Kap. 1.1.1.4).

Für die Untersuchungen wurde das im S/R5 integrierte lokale „Shattering“-Modell verwendet. Hierbei wird ein vollständiges Abplatzen der Oxidschicht beim Quenchen unterstellt, wenn folgende Randbedingungen erfüllt sind /1/ :

- Überschreiten der Mindestabkühlrate von 5 K/s für mehrere Zeitschritte
- Hüllrohrtemperatur im Bereich von $1150 \text{ K} < T_{\text{Hülle}} < 1560 \text{ K}$
- Restdicke der metallischen Zry-Schicht (β -Zry) $< 100 \text{ }\mu\text{m}$.

Für die Rechnungen wurde das verbesserte Chen-Modell für das Übergangssieden implementiert (s. 1.1.3.3). Der prinzipielle Ablauf des ECC-Flutvorganges ist in den vier Teilbildern von Abbildung 4 für das Szenario „1 MHSI und 1 LHSI verfügbar“ dargestellt. Im obersten Bild ist der Druckverlauf im Primärkreis, darunter die Einspeiseraten der ECC-Systeme zu sehen. Zuerst speisen alle Systeme ein, was zu einem schnellen Anstieg des Gemischspiegels im Kern führt (s. Abbildung 4 Mitte). Die Flutraten für die untere Kernhälfte liegen hierbei im Bereich von ca. 15 cm/s (s. Tabelle 2).

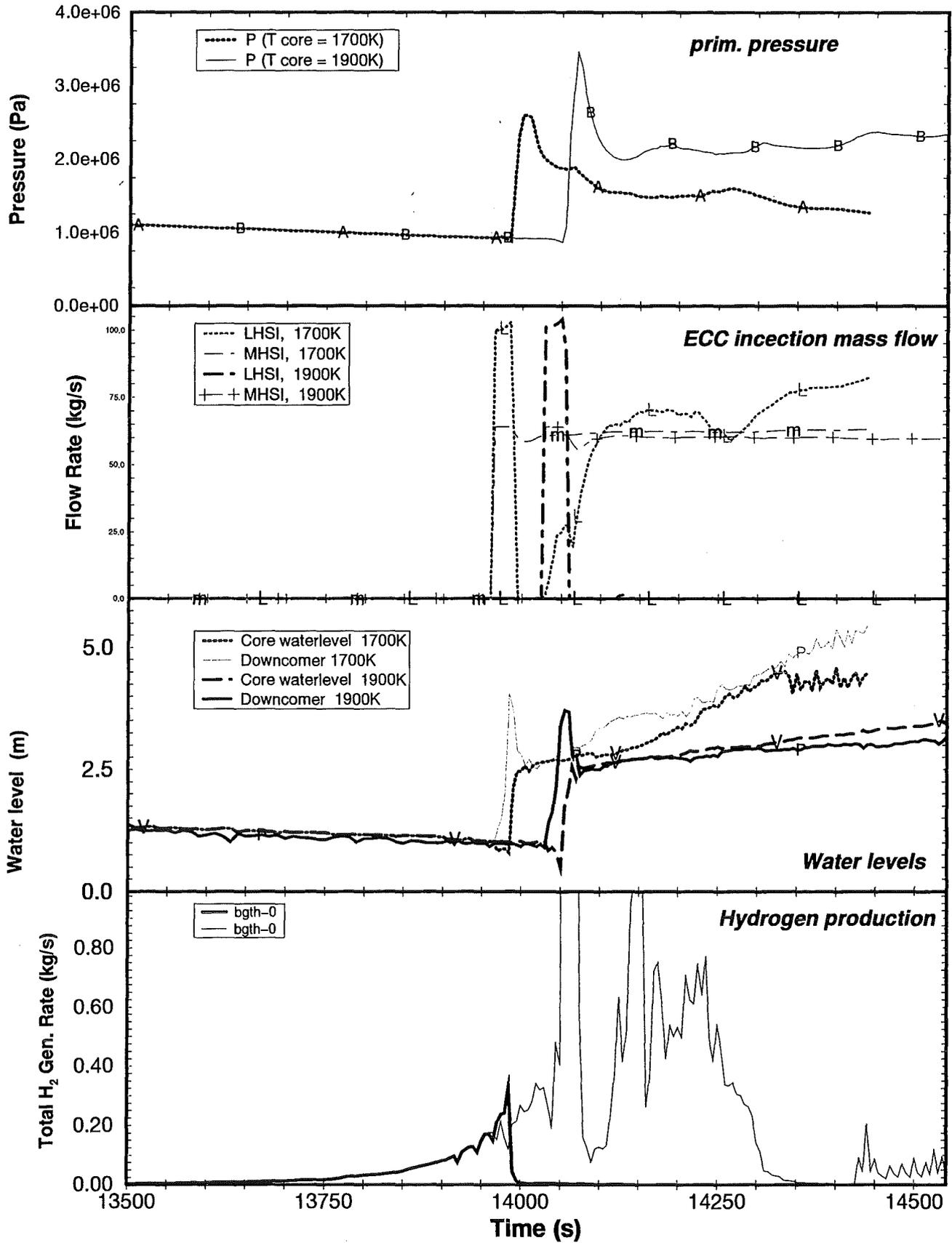
Da der untere Kernbereich zudem durch die Wasservorlage und die Zweiphasenströmung relativ kalt ist, wird hier relative wenig Wasserdampf erzeugt. Der eigentliche Druckanstieg wird durch verdampfendes Wasser im mittleren Teil des Kernes ($> 2.4 \text{ m}$) hervorgerufen. Nach Überschreiten von 2.0 MPa hat das LHSI System seine maximale Förderhöhe erreicht, so daß nur noch das MHSI System mit ca. 60 kg/s einspeisen kann.

Wird das ECC bei $T_{\text{max}}=1700 \text{ K}$ aktiviert, so sinkt der Systemdruck jedoch nach ca. 50 s wieder ab, so daß das LHSI erneut einspeisen kann, was zu einer erhöhten Flurrate im Kern führt. Die zusätzliche Oxidation aufgrund des Shattering-Modells ist hier gering (s. Abbildung 4 unten), da nur ein Knoten die Bedingungen (s.o.) erfüllt und die zusätzliche Fördermenge des LHSI Systems eine effektive Wärmeabfuhr erlaubt.

Bei einer späteren ECC Aktivierung, bei $T_{\text{max}}=1900\text{K}$, ist der Gemischspiegel im Kern nur unwesentlich abgefallen (s. Abbildung 4). Jedoch wird durch die verstärkte Oxidation im oberen Kerndrittel eine höhere Wasserstoffproduktionsrate und ein Temperaturanstieg berechnet. Wasserstoff- und Wasserdampfproduktion lassen den Druck im Primärkreis auf über 4 MPa ansteigen (s. Abbildung 6 Mitte). Der Primärkreisdruck sinkt erst nach Wiederfluten des Kerns unter 2.0 MPa, so daß das LHSI System keinen Beitrag liefert.

Aus dem Verlauf der Wasserstoffproduktionsrate ist ersichtlich, daß jetzt mehrere Komponenten in mehreren axialen Zonen die Bedingungen für das Abplatzen der Oxidschicht erreicht haben. Eine detaillierte Analyse der Rechnungen sowie die Verbesserung des Fragmentationsmodells aufgrund der Ergebnisse der QUENCH-Einzelstabuntersuchungen wird in /5/ zusammengefasst werden.

EPR-5B2: LOOP+Reflow 1MHSI+1LHSI SERMA77 BOC (04/97)



W.Hering, (SELP31ft.irPQ2) 4Qm

Abbildung 4: Dynamik des Wiederflutvorganges bei Kerntemperaturen für 1700K und 1900K mit 1 MHSI und 1 LHSI.

In Abbildung 5 und Abbildung 6 sind die wesentlichen Ergebnisse der Flutrechnungen zusammengefasst. Abbildung 5 zeigt die Ergebnisse für ein MHSI und ein LHSI System für Einspeisezeitpunkte von $T_{\max} = 1700 \text{ K} - 2300 \text{ K}$ (3h 52min - 3h 54min, s. Tabelle 2) nach dem einleitenden Ereignis („LOOP“). Im obersten Teilbild von Abbildung 5 sind die maximalen Kerntemperaturen dargestellt. Bis auf den frühesten Einspeisezeitpunkt wird keine zufriedenstellende Kühlung des teilzerstörten Reaktorkernes berechnet. Oberhalb einer Kerntemperatur von 1900K findet bei der geringen Einspeisung die Aktivierung des ECC-Systems im oberen Kerndrittel für längere Zeit keine Abkühlung statt. Das eingespeiste Notkühlwasser wird für die Oxidation verbraucht, so daß nur ein geringer Wasserdampfmassenstrom aus dem Primärkreis entweicht (s. Abbildung 5 Mitte). Hingegen ist die Wasserstoffproduktionsrate zuerst sehr groß (s. Abbildung 5 unten), nimmt dann aber schnell wieder ab, liegt jedoch für die hier analysierten Zeiträume dennoch über dem nichtgefluteten Fall (-N-). Der Druckaufbau ist ohne Berücksichtigung des Gegen-druckes im Containment z.B. durch verzögerte Kondensation berechnet.

In den Hüllrohrtemperaturen (s. z.B. Abbildung 5, oben) ist eine deutliche Quenchttemperatur zu beobachten. Der stufenförmige Verlauf der Temperaturkurven wird durch den Quenchprozess in unterschiedlichen axialen Zonen verursacht, wobei die Zone mit bisher maximaler Temperatur auf Sättigungstemperatur abgekühlt wird. Dies ist ein wichtiger Hinweis auf den erhöhten Wärmeübergang aufgrund der verbesserten Wärmeübergangskorrelation im Bereich des Übergangssiedens.

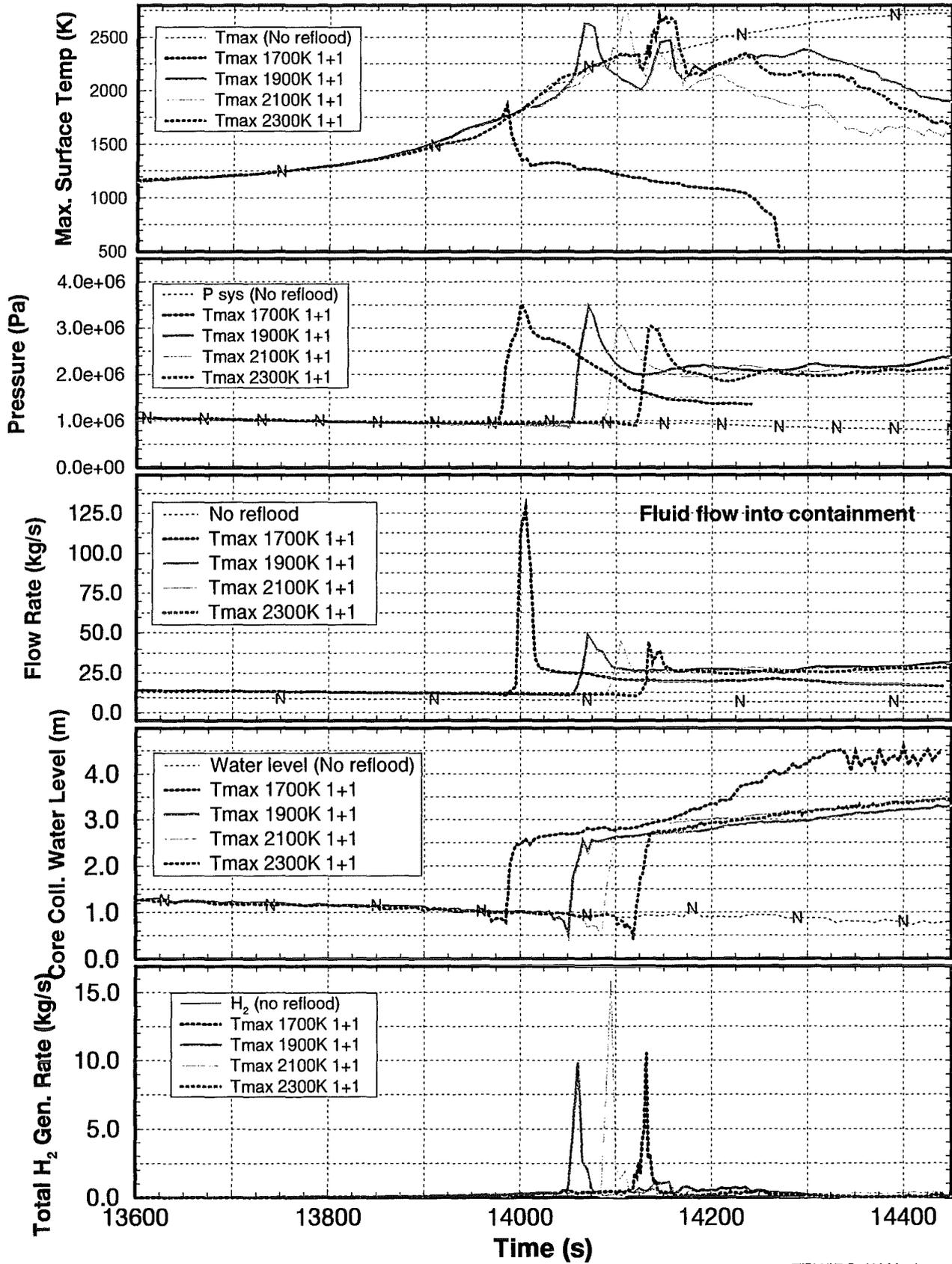
Deutlicher tritt dieses Phänomen bei der Aktivierung aller ECC-Systems („4 LHSI und 4 MHSI“) auf, wie in Abbildung 6, oben, deutlich zu sehen ist. In diesen Szenarios wird aufgrund der 4-fachen ECC-Einspeisung der Kern schneller und bis auf 3.0 m Kernhöhe („1MHSI+1LHSI“: 2.5 m) geflutet. Die aus dem Primärkreis freigesetzte Dampfmenge ist dementsprechend größer und führt dementsprechend auch mehr Wärme aus dem Kernbereich ab. Diese kühlt den Kern schneller ab, so daß der Kern innerhalb von ca. 2-3 min vollständig geflutet ist. Aufgrund der gespeicherten Wärme und Nachzerfallswärme wird jedoch weiterhin Wasser verdampft und Wasserstoff produziert (s. Abbildung 6 unten).

Die produzierten Wasserstoffmengen liegen (s. Tabelle 1) jedoch deutlich unter denen des ersten Szenarios. Durch den Verbrauch von Wasserdampf für die Oxidation der neugeschaffenen metallischen Oberflächen wird bei hohen H_2 -Produktionsraten nur wenig Wasserdampf aus dem Kern freigesetzt. Die berechneten H_2 -Raten sind aufgrund eines Codefehlers (s. Kap. 1.1.4) nach oben zu korrigieren.

In beiden untersuchten Szenarios findet man für eine Einspeisung bei einer maximalen Kerntemperatur von ca. 2100 K maximale Wasserstoffproduktionsraten, darüber nehmen die maximalen Produktionsraten wieder ab. Als mögliche Ursache sind die zugrunde liegenden Modell-Annahmen zu sehen, die eine fest metallische β -Zry Schicht voraussetzen. Oberhalb von 2100 K verflüssigt sich jedoch das metallische Zircaloy und beginnt das UO_2 -Pellet aufzulösen. Bei Fragmentation der ZrO_2 Hülle wird daher eine (U-Zr-O) Schmelze freigesetzt. Prozesse wie Schmelze-Verlagerung oder Brennstoffauflösung sind bei der Wasserstoffproduktion beim Quenchen nicht berücksichtigt, wodurch sich auch die Reduktion der produzierte Wasserstoffmenge bei zunehmender Kerntemperatur erklärt.

EPR LOOP Reflood (1LHSI+1MHSI) S/R5 mod3.1F

(09/97)

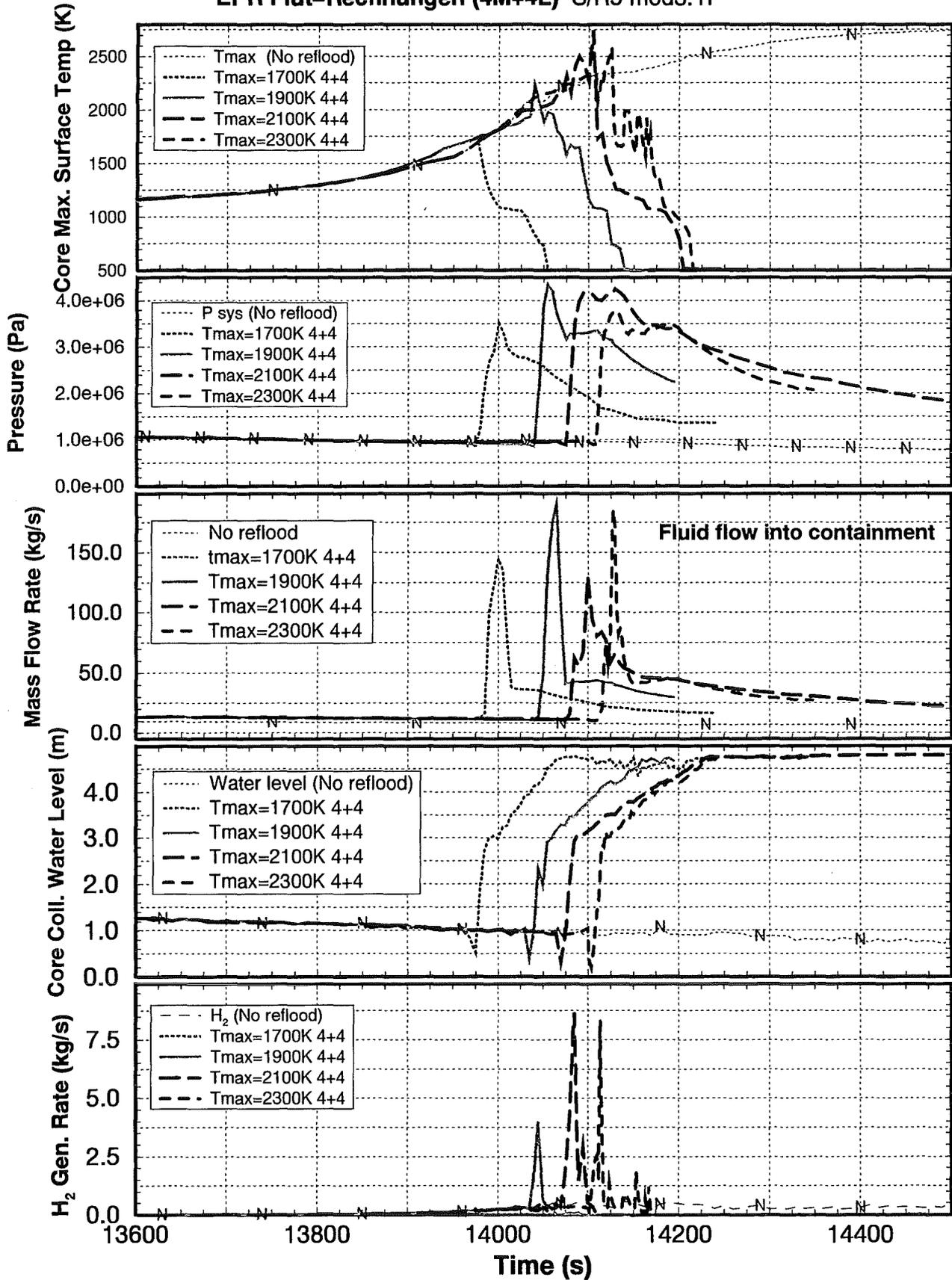


FZK/IRS, W.Hering

Abbildung 5: Reflood Ergebnisse bei unterstellter Verfügbarkeit eines MHSI und eines LHSI Systems für verschiedene Flutzeitpunkte.

EPR Flut-Rechnungen (4M+4L) S/R5 mod3.1f

(9/97)



FZK/IRS, W.Hering

Abbildung 6: Reflood Ergebnisse bei unterstellter Verfügbarkeit aller MHSI und aller LHSI Systeme für verschiedene Flutzeitpunkte.

	Reflood-Scenario (Starttemp)	Max. Temperature (K)	Max. Steam rate (kg/s)	Max. H ₂ rate (kg/s)	Max. H ₂ mass (kg)	Δ P sys (MPa)
All ECC	1700K	1850	150	< 0.5	25	2.5
	1900K	2250	200*	≈ 4	≈ 71	3.5
	2100K	2700	130	≈ 8.8	≈ 148	3.3
	2300K	2550	180	8.5	≈ 118	2.8
1 MHSI + 1 LHSI	1700K	1700	130	0.5	25	2.5
	1900K	2500	50	≈ 10	≈ 234	2.5
	2100K	2750	45	≈ 16	≈ 180	2.0
	2300K	2600	42	10.5	≈ 192	2.0

Tabelle 1: Vorläufiges Ergebnis der Flutrechnungen zum LOOP Störfall unter Berücksichtigung von zusätzlicher Oxidation aufgrund von Oxidschicht-Fragmentation beim Quenchen.

Derzeit tragen (U-Zr-O) Blockaden nur durch ihre Masse und ihr geringes Oberfläche/Volumenverhältnis zur Dampfproduktion aber nicht zur Wasserstoffproduktion bei. Ferner sind die derzeit im Code verfügbaren Wärmeübertragungskorrelationen für rauhe Oberflächen nur bedingt geeignet.

Der Wärmeübergang und damit der Quenchprozeß von Blockaden mit ihrer naturgemäß unregelmäßigen Oberfläche ist daher nur idealisiert zu berechnen. Eine Weiterentwicklung der Korrelationen und Modelle zum Quenchprozess und deren Validierung anhand von CORA und QUENCH-Versuche ist daher notwendig.

1.1.1.4 Reaktorspezifische Flutbedingungen für die QUENCH-Anlage

Zur Bestimmung typischer Anlagen- bzw. Kernzuständen als Referenz für die Versuche in der QUENCH-Anlage (s. 1.1.5) wurden die Reflood-Rechnungen gezielt ausgewertet.

	Reflood Temperature (K)	Reflood time (s)/ (h m s)	Lower half of the core (cm/s)	Upper half of the core
Temperature range:			<1200K	1400 - 2400K
All ECC	1700K	13965 s	15	2.5
	1900K	14028 s	12	1.8
	2100K	14062 s	15	1.3
	2300K	14096 s	20	1.5
1 MHSI + 1LHSI	1700K	3h 52m 45s	17	0.3- 1.04
	1900K	3h 53m 48s	12	≈ 0.2
	2100K	3h 54m 22s	15	≈ 0.13
	2300K	3h 54m 55s	11	≈ 0.21

Tabelle 2: Flutraten für verschiedene ECC Konfigurationen und Flutzeitpunkte unterteilt in untere und obere Kernhälfte (s. Kap. 1.1.1.3).

Neben der charakteristischen Flutgeschwindigkeit (s. Tabelle 2), den Kerntemperaturen /5/ , sind auch das axiale Temperaturprofil sowie die axiale Verteilung der Oxidschichtdicken wichtig für die Versuchsführung. Auch die zu erwartenden Dampf- und Wasserstoffmassen wurden aus den S/R5 Rechnungen abgeleitet. Aus den Rechnungen wurde die beim Quenchvorgang zu simulierende Nachzerfallsleistung auf 4 - 5 kW für das Quenchbündel bestimmt.

Der in den Rechnungen ermittelte Druckanstieg im Primärkreis kann in der Anlage aus sicherheitstechnischen Gründen nicht nachgebildet werden. Wie der Tabelle 2 entnommen werden kann, liegen zwischen den einzelnen Einspeisezeitpunkten nur jeweils 1-2 Minuten. Dennoch ändert sich das Flutverhalten beträchtlich, was auch aus der Tabelle 1 ersichtlich ist.

1.1.2 Aufschmelzen des "Heavy Reflectors"

Basierend auf den Ergebnissen der Rechnungen zum Abriss der Druckhalterleitung wurde die Möglichkeit untersucht, den französischen Kernschmelzcode ICARE2 /2/ auf den EPR anzuwenden. Insbesondere die Fähigkeit von ICARE2 das Aufschmelzen und Verlagern von Shroud-Strukturen zu berechnen wurde hierbei ausgenutzt.

1.1.2.1 Ausgangspunkt

In der späten Phase eines Unfallszenarios, wenn der Kern zum Teil geschmolzen ist und ein Schmelzepool gebildet hat, ist es wichtig abzuschätzen wie und wann die Kruste versagt und sich das geschmolzene Material in das untere Plenum des Reaktordruckbehälter verlagert.

Prinzipiell kann dies auf zwei Wegen geschehen:

- es dringt durch die untere Gitterplatte
- es fließt seitlich durch den lokal aufgeschmolzenen Heavy Reflector

Im folgenden wird das Aufschmelzen des Heavy-Reflectors anhand des „Surge line rupture“ Szenarios untersucht (s. Kap. 1.1.1.2).

1.1.2.2 Verfahren

Kein derzeitig verfügbares, deterministisches Programm kann ein Unfallszenario von Anfang an bis zum (und inklusive) Aufschmelzen der RDB-Einbauten berechnen. Daher wird S/R5 für die Anfangsphase bis zum Beginn der Poolausbildung benutzt. Die daraus abgeleiteten Hüllrohr-, Fluid- und RDB-Außenwand Temperaturen dienen dann als Eingabe für die Berechnung mit ICARE2. Dieses Verfahren sollte eine vernünftige Temperaturverteilung im Kern und im Heavy-Reflector liefern, solange die konvektive Wärmeabfuhr zwischen Kern und Dampf eine wesentliche Rolle spielt (Ergebnis aus S/R5). Kann der konvektive Wärmeverlust gegenüber Strahlung und Wärmeleitung vernachlässigt werden, so kann ICARE2 ohne Einschränkung zur Berechnung des Heavy-Reflector Verhaltens verwendet werden.

Die Nodalisierung für ICARE2 (s. Abbildung 7) entspricht dem äußersten Teil der Kernnodalisierung von S/R5 (s. Abbildung 1). Im Detail enthält das ICARE2-EPR Models:

zwei äußere Kernkanäle (vergl. S/R5 Ring 4 und 5),

- ch 4 (S/R5 Ring 4)
- ch 5 (S/R5 Ring 5)

drei Stahlstrukturen:

- Kernumfassung (HR1: ca. 4 cm, 4 Knoten),
- Heavy-Reflector (HR2: ca. 16 cm, 4 Knoten), und
- Kernbehälter (HR3: ca. 6 cm, 4 Knoten).

Die „Kernumfassung beschreibt die gezackte – nicht zylindersymmetrische Innenwand des Heavy Reflectors. Die Bohrungen für den Bypass zum Kühlen des Heavy Reflectors sind durch eine geringere Dichte des Stahls wiedergegeben. Die äusserste Stahlstruktur simuliert die RDB-Wand. Zwischen RDB und Kernbehälter wurde stagnierender Wasserdampf angenommen.

Im Zuge des Datentransfers von S/R5 zu ICARE2 werden die in S/R5 berechneten Kerntemperaturen von jeder ICARE2-Masche und für jeden Zeitpunkt, soweit sie verfügbar sind, übernommen. Damit ist die Wärmequelle für die Aufheizung des Heavy Reflectores korrekt wiedergegeben. Basierend auf diesen Temperaturen wird die Temperaturentwicklung im Heavy Reflectores von ICARE2 zweidimensional neu berechnet. Die rechtsseitige Randbedingung ist die Außenseite der RDB-Wand.

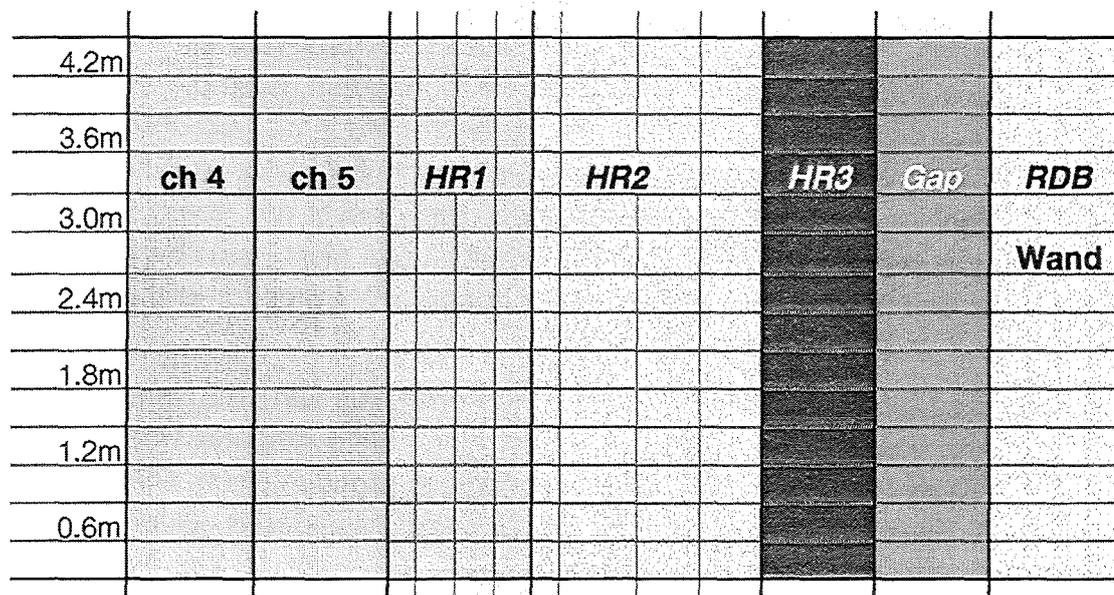


Abbildung 7 Axiale und radiale Nodalisierung des ICARE2 EPR-Teilmodells zur Untersuchung des Aufschmelzverhaltens des „Heavy Reflectors“.

Das „Surge line rupture“ Szenario wurde von S/R5 bis 3900 s berechnet, danach traten numerische Instabilitäten auf, so daß keine weitere Analyse möglich war. Ab 2500 s tritt ein Schmelzpool auf. Die ICARE2-Rechnung startet bei 2100 s, d. h. vor der Zerstörung der Brennstäbe und Bildung eines Debris-Betts. Zu diesem Zeitpunkt sind die Temperaturen im Heavy-Reflector noch unter dem Schmelzpunkt von Edelstahl. ICARE2 benutzte die S/R5 Temperaturen bis 3900s, danach wurde dieses Temperaturfeld stationär

beibehalten. Die Rechnung wurde bis zum vollständigen lokalen Aufschmelzen der Stahlstrukturen bis zum Kernbehälter fortgeführt. Danach ist eine Verlagerung der Kernschmelze in der Downcomer möglich

1.1.2.3 Ergebnisse

Auf der Abbildung 8 sind die Temperaturen und Massenverteilungen der simulierten Stahlstrukturen HR1 (die ersten 4 Balken), HR2 (Balken 5 bis 8) und HR3 (letzte Balken) zu sehen. Angelagerte Stahlschmelze ist durch breitere Balken, abgeschmolzener Stahl durch dünnere Balken dargestellt. Zu Ende der transienten Berechnung mit S/R5, bei ca. 3900 s ist der Heavy-Reflector über eine Dicke von 7 cm aufgeschmolzen (s. Abbildung 8 unten links).

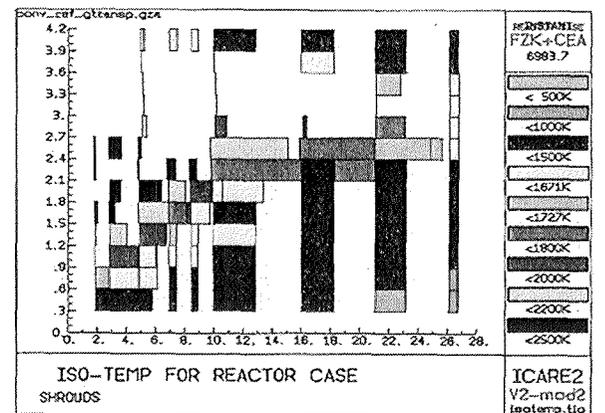
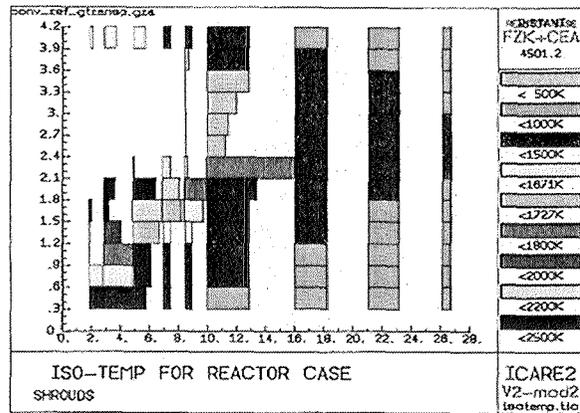
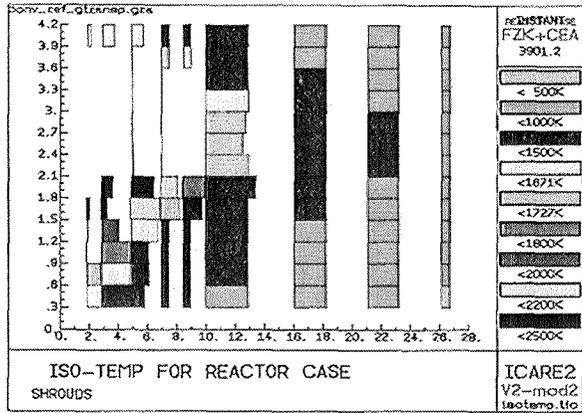
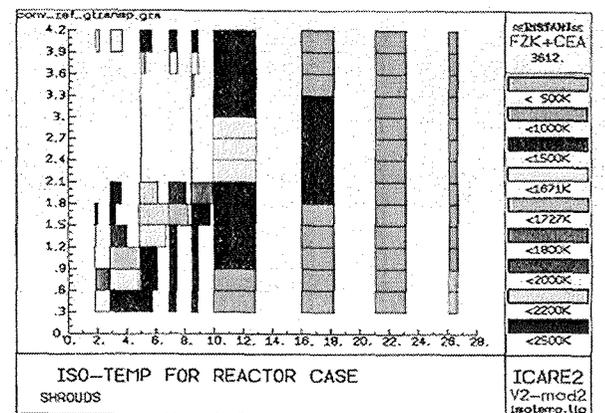
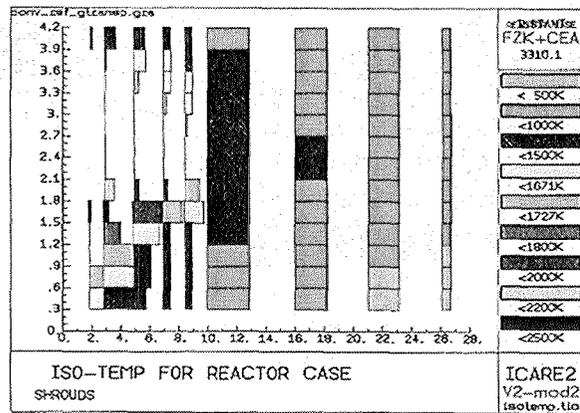
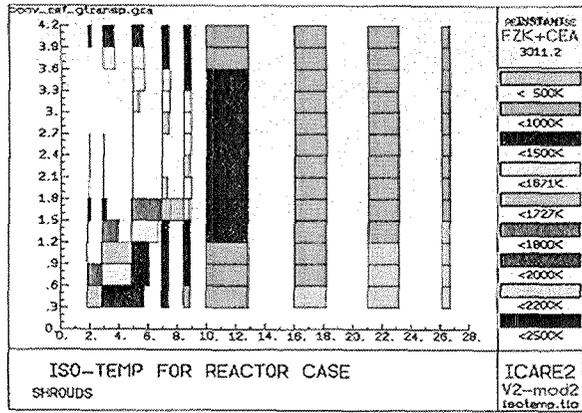
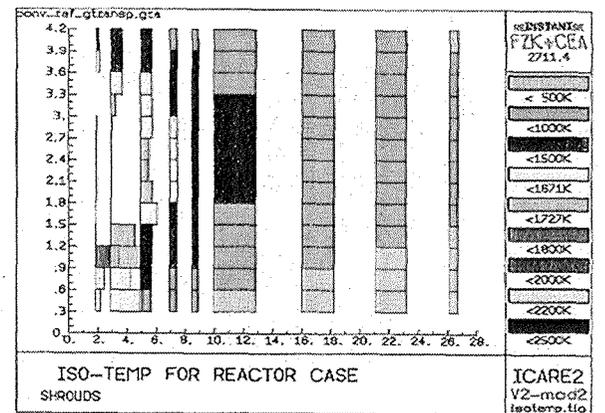
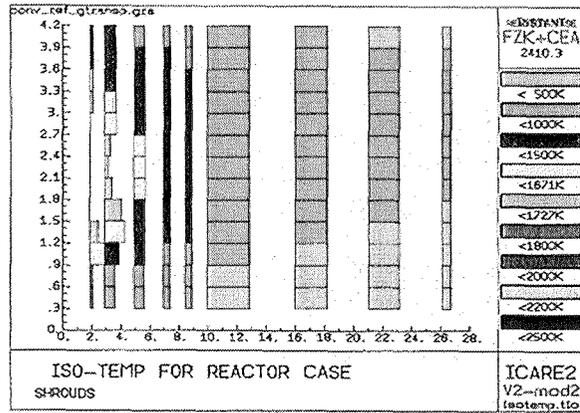
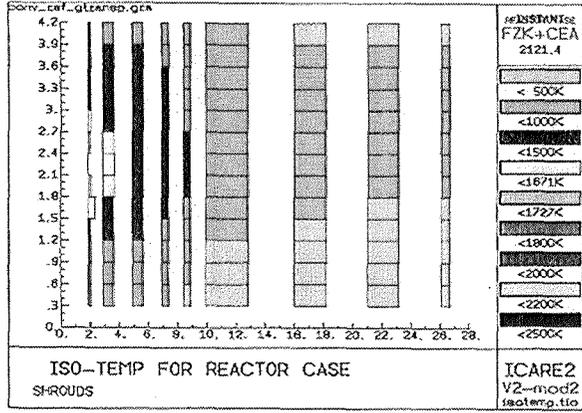
Nach 3900 s wird die Rechnung mit dem stationären Temperaturfeld fortgesetzt, was zu einer konstanter Aufheizung der Stahlstrukturen und zur Lokalisierung des „hot-Spots“ d.h. der axialen Position des Schmelzepools führt. Dementsprechend wird auch nach ca. 7000 s der Heavy-Reflector lokal ganz durchgeschmolzen. Zu diesem Zeitpunkt nähert sich auch der Kernbehälter lokal seiner Schmelztemperatur.

1.1.2.4 Anmerkungen

Das hier vorgestellte Verfahren ermöglicht eine erste Abschätzung der Geschwindigkeit des Aufschmelzens von Heavy Reflector und Kernbehälter. Man darf jedoch nicht die Tatsache übersehen, dass ab 3900 s die Wärmequelle als axial lokalisiert ist, d.h. es findet keine weitere axiale Pool - Verlagerung statt. Dies bedeutet auch, dass die axiale Position des Durchschmelzens des Heavy-Reflektors zu hoch berechnet wird. Ferner sind die Zeiträume zu kurz berechnet, da normalerweise, wie auch in Abbildung 8 zu sehen, erst der verlagerte Stahl wieder aufgeschmolzen werden muß, bevor der Heavy Reflektor angeschmolzen werden kann. Eine weitere Unsicherheit ist das nicht berücksichtigte radiale Anwachsen des Schmelze-Pools, was zu einer höheren Wärmestromdichte führen kann.

Eine andere Möglichkeit ist die Modellierung des EPR Kernes als ICARE2 Debris Struktur. Diese erlaubt dann axiale Verlagerung, jedoch ist eine richtig skalierte Übertragung der S/R5 Brennstab-Temperaturen sowie der Massenanteile problematisch. Die nächste ICARE2 Version (V3. Ende 98 lieferbar) soll diesen Übergang zur Debris- Geometrie inhärent ermöglichen.

Abbildung 8: Zwischenzustände des lokalen Aufschmelzens des Heavy-Reflektors zwischen 2121 s und 6983 s. (Gültig bis 3900s, danach stationäre Extrapolation).



1.1.3 Validierung von SCDAP/RELAP5

Als Basiscode wurde im Berichtszeitraum S/R5 mod 3.1 Rel. F verwendet. Da von USNRC-Seite gegen Ende 1997 eine neues Release angekündigt war, wurden die Validierungsaktivitäten bzgl. Rel. F reduziert und detektierte Fehler nur an INEEL weitergeleitet. Da jedoch Ende 1997 das Freigabedatum jedoch auf April 1998 verschoben wurde, mußten die Fehlerkorrekturen nun in Rel. F durchgeführt werden.

Bereits im vergangenen Jahr wurde von der USNRC ein Assessment Programm initiiert, das entsprechend dem für MELCOR als S/R5 Code Assessment Programme (SR5CAP) der Weiterentwicklung von S/R5 dienen soll (s. Kap. 1.1.3.2).

1.1.3.1 Oxidation

Da die berechnete Wasserstoffmenge immer unterschätzt wurde (Phebus, Abbildung 17, CORA), analysierten wir das Codesystem detailliert. Neben der Identifikation von programmtechnischen Fehlern, die an INEEL weitergeleitet wurden, konnte auch der Beitrag der Wasserstoffproduktion der Führungsrohre der Absorberstäbe zur Gesamtmenge korrigiert werden.

Eine weitere Unzulänglichkeit wurde im Zusammenhang mit der Oxidationslimitierung gefunden. Der Code stellt die gesamte verflüssigte Zirkaloymasse der Brennstoffauflösung zur Verfügung, eine weitere Oxidation findet nicht mehr statt. Die ausgetretene Schmelze kann jedoch im Debris-Oxidationsmodell weiter oxidiert werden. Der wesentliche Grund ist die Nichtberücksichtigung der „Saturation“ Phase der Hofmann-Korrelation. Der Code beginnt sofort mit der „precipitation“ Phase.

Da die Gesamtmenge an H₂ hiervon nicht betroffen ist, wird die detaillierte Fehleranalyse in der neuen S/R5 Version (mod3.2) durchgeführt.

1.1.3.2 Validierungsaktivitäten im Rahmen von SR5CAP

Am 1. Dezember 1997 fand im FZK das letzte SR5CAP Start-up treffen statt. Die Vorgehensweise orientiert sich zum einen an /12/ zum anderen an den Erfahrungen des Melcor Code Assessment Programme (MCAP). Die Validierung von Codes für Kernschmelzunfälle umfaßt entsprechend /12/ vier Phasen :

1. Thermohydraulik und neutronische Transienten, (s. Kap. 1.1.3.3 und Kap. 1.1.5.2)
2. Kernfreilegung bis ca. 1500 K, (s. Kap. 1.1.4)
3. Oxidation, Schmelzen und Poolbildung, (s. Kap. 1.1.4)
4. Verlagerung ins untere Plenum und Versagen der RDB-Wand.

Die derzeitige Version von S/R5 kann keine realistische Verlagerung ins untere Plenum berechnen und das 2D-FEM-Paket (COUPLE) liefert keine adäquate Modellierung eines geschmolzenen Pools mit Konvektion oder gar Stratifikation. Hier sind wir auf die Weiterentwicklung des Codes in USA angewiesen (S/R5 mod 3.2).

1.1.3.3 Validierung des Übergangssiedemodells mit RELAP5/mod3.1

In RELAP5 werden die Wärmeübergangskoeffizienten für die jeweiligen Wärmeübertragungsformen, (Film-, Übergangs- und Blasensieden) anhand einer Siedekurve und in Abhängigkeit weiterer Parameter wie Wandüberhitzung, Dampfgehalt, Massenströme, Kühlkanalabmessungen berechnet. Im Rahmen des Code Assessment and Maintenance Programs (CAMP) der US Nuclear Regulatory Commission (USNRC) beteiligt sich das IRS an der Qualifizierung des Flutmodells von RELAP5/MOD3.

Ziel dieser Arbeiten ist die Verfügbarmachung von geeigneten Analyse-Werkzeugen entsprechend dem heutigen Stand von Wissenschaft und Technik, die für die Durchführung belastbarer Sicherheitsanalysen eingesetzt werden können. Da der Thermohydraulik-Teil des Kernschmelzcodes S/R5 durch RELAP5 beschrieben wird, fließen alle RELAP5-Modellverbesserungen direkt in S/R5 ein.

Umfassende Untersuchungen /14/ , /15/ des RELAP5-Flutmodells haben gezeigt, daß das in RELAP5 implementierte Chen-Übergangssiedemodell /13/ grundlegende Defizite aufweist. Ursachen dafür sind die fehlerhafte Implementierung des Chen-Modells im RELAP5 und die Beschränkung des Modells auf hohe Drücken und Massenströme (Bennett-Experimente).

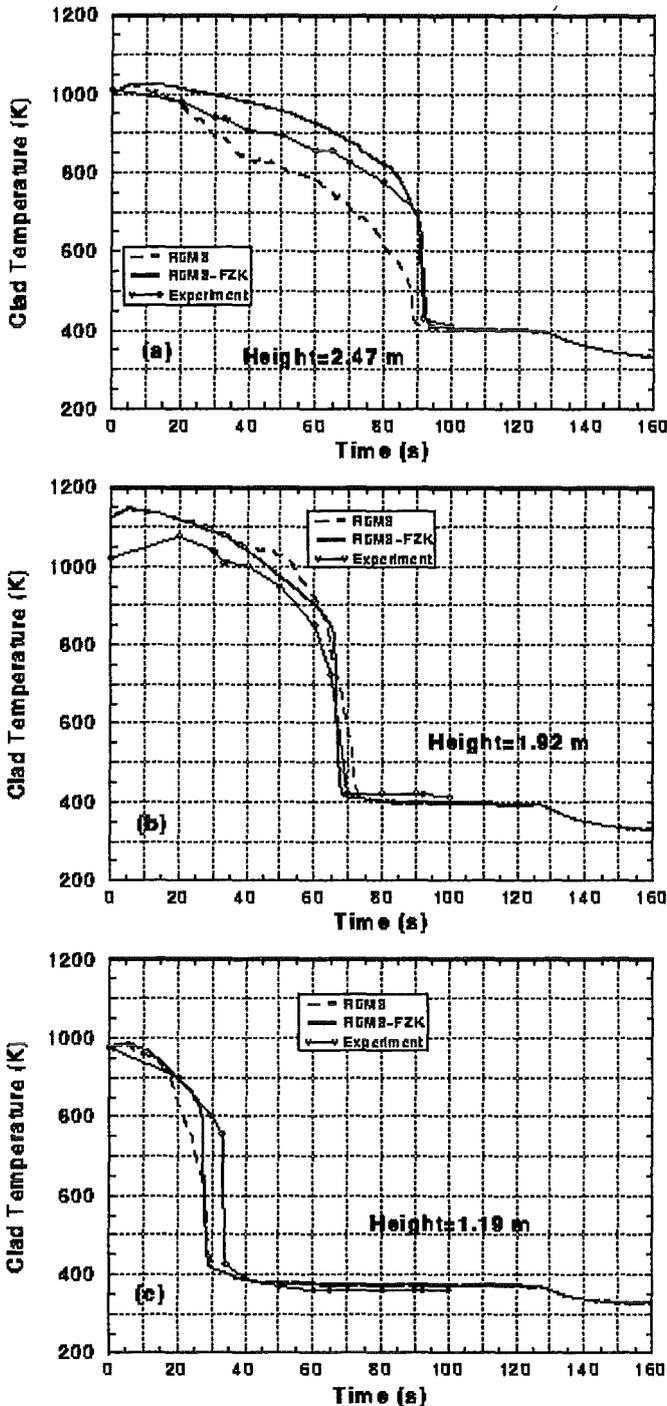
Die Validierung dieses Modells gegenüber einer Vielzahl von stationären Versuchsdaten (Johannsen, Weissman) im Bereich niedriger Drücke und Massenströme, die für Flutsituationen relevant sind, ergaben eine starke Unterschätzung des totalen Wärmestromes im Übergangssiedebereich. Zur Anwendung des RELAP5-Flutmodells auf relevante Flutszenarios (niedrige Drücke und Massenströme) wurde das Chen-Modell auf der Basis von neueren experimentellen Daten (Johannsen und Weissman) so erweitert, daß die komplexe Abhängigkeit des Wärmestromes im Übergangssiedebereich vom Druck, Dampfgehalt, Massenstrom, etc. berücksichtigt wurde. Darüber hinaus wurde die fehlerhafte Implementierung des Chen-Formalismus in RELAP5 berichtigt.

Das erweiterte und modifizierte Übergangssiedemodell wurde anhand verschiedener stationärer und transienter Daten aus Einzelstab- und Bündelversuchen (FZK Single Rod Quench Rig und PSI NEPTUN Reflood Bündel Test) validiert /16/ . Die Vorhersage des Flutvorganges wurde durch die eingeführten Modellerweiterungen und Modifikationen signifikant verbessert.

Um die Leistungsfähigkeit und Grenzen des neuen Modelles besser aufzeigen zu können, ist es notwendig, das erweiterte Übergangssiedemodell unter reaktorähnlichen Bedingungen, wie sie bei Integralversuchen (LOFT /16/ , PKL /17/ , CCTF /18/ etc.) vorliegen, zu validieren. Die Versuche FLECHT-SEASET und LOFT wurden hierzu zusätzlich herangezogen. Die FLECHT-SEASET-Anlage stellt ein großes PWR-Bündel mit 177 Brennstabsimulatoren einer vollen Länge von 3.66 m dar. Im Versuch 31701 wurde das Bündel von unten mit einer Einspeiserate von 0.15 m/s bei einem Druck von 0.28 MPa und einer Unterkühlung von 80 K geflutet . Die LOFT-Anlage bildet alle relevante Primärkreislauf-Komponenten und einige Sekundärkreislaufkomponenten eines viersträngigen PWRs mit 1300 Brennstäben einer Länge von 1.66 m nach. Die drei intakten Stränge sind in einem intakten Strang zusammengefaßt. Der Test LOFT LP-LB-1 simuliert ein 2F-Rohrbruch an der Hauptkühlmittelleitung im kalten Strang mit gleichzeitig an-

genommenem Ausfall der Eigenenergieversorgung. Ausserdem wurde ein schneller Pumpenausfall und minimale Notkühleinlieferungen gemäß dem United Kingdom (UK)-Kriterium für Sicherheitseinspeisung (keine Hochdruckeinspeisung) angenommen. Die Anfangsbedingungen, Nodalisierung sowie weitere Geometriedaten beider Tests sind in /14/ und /15/ ausführlich beschrieben.

Ergebnisse zu FLECHT SEASET 31701



In der Abbildung 9 ist ein Vergleich der berechneten mit den gemessenen Hüllrohrtemperaturen für drei axiale Höhen des FLECHT-Bündels dargestellt. Die mit R5M3 gekennzeichneten Temperaturverläufe wurden mit der Original RELAP5-Version berechnet. In den drei Höhen konnte eine bessere Übereinstimmung der mit dem verbesserten Übergangssiedemodell (R5M3-FZK) ermittelten Temperaturverläufe mit den Meßdaten erzielt werden. In der Höhe 1.19 m zeigt die R5M3-FZK Rechnung eine eindeutige Rewetting-Temperatur.

In der Abbildung 10 ist der berechnete und gemessene Dampfgehalt im Bündel 60 Sekunden nach Flutbeginn dargestellt. Hier kann erneut festgestellt werden, daß die eingeführten Verbesserungen in der Modellierung des Übergangssiedens zu einer besseren Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment geführt haben.

Abbildung 9: Berechnete und gemessene Hüllrohrtemperaturen in drei verschiedenen Bündelhöhen von FLECHT SEASET 31701.

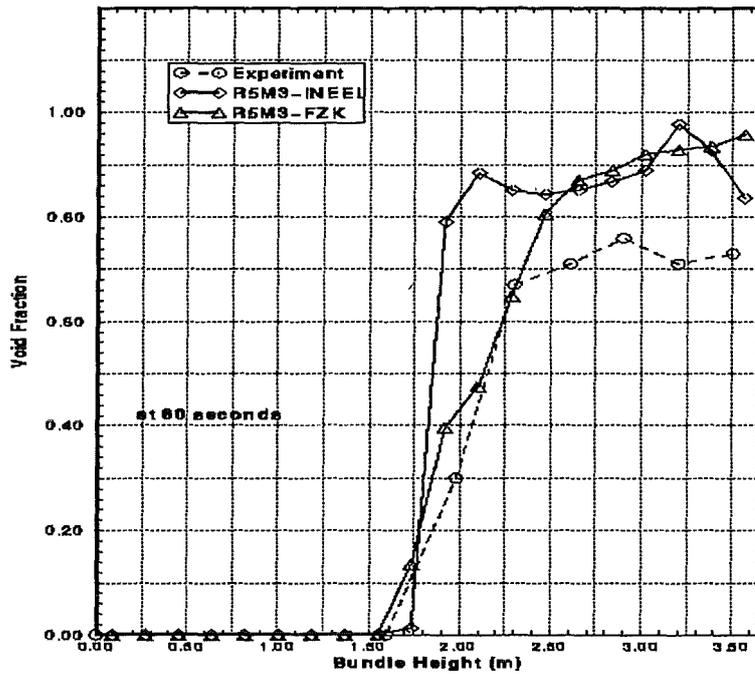


Abbildung 10: Berechneter und gemessener Dampfgehalt im Bündel

Ergebnisse zu LOFT LP-LB-1

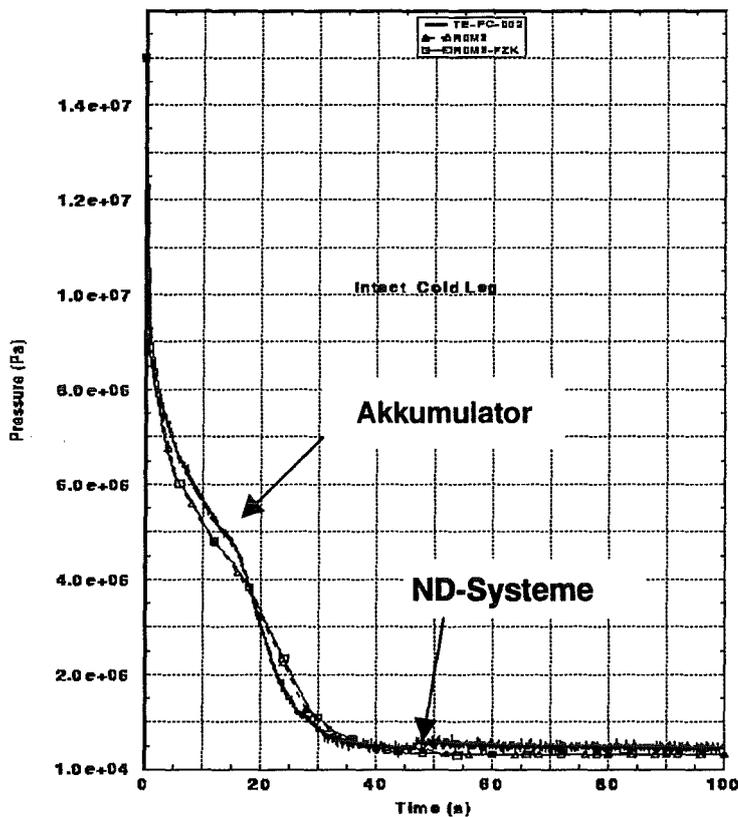
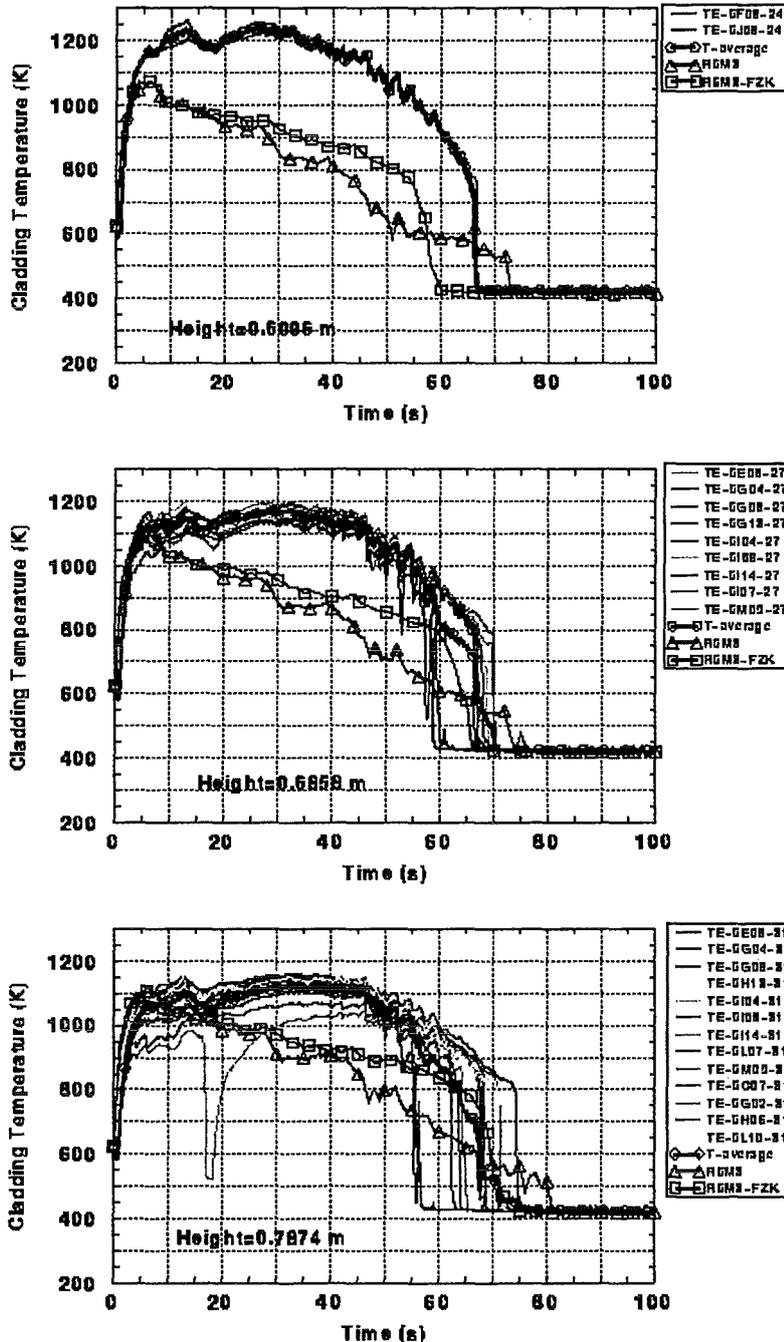


Abbildung 11: Berechneter und gemessener Druckabfall im LOFT Primärsystem

Beim in-pile Test LOFT-LP-LB-1 wurde die Transiente durch Öffnen schnell-öffnender Leckventile in dem Bruchstrang initiiert. Es folgte die Blowdown-Phase, wobei der Druck im Primärsystem schnell abfiel und das Wasserinventar im Core infolge der hohen Ausströmraten durch die Bruchstelle stark abnahm (s. Abbildung 11). Der Massenstrom durch den Kern stagnierte, da die Hauptkühlmittelpumpen 0.1 Sekunden nach Störfallbeginn abgeschaltet und von deren Fliehkraft-Körpern getrennt wurden. Dem Blowdown folgte die

Wiederauffüll- und Flutphase, welche durch das Einsetzen des passiven Notkühlensysteme (Akkumulatoren) beim Unterschreiten von 4.2 MPa eingeleitet wurde.

Nach Entleerung der Akkumulatoren folgte die Einspeisung durch die Niederdruck-Systeme, wodurch die langfristige Kernkühlung gewährleistet wurde. Da die Wärmeabfuhr aus dem Kern durch den Wasserinventar-Verlust im Primärkreis-System stark beeinträchtigt wurde, stieg die Hüllrohrtemperatur unmittelbar nach Störfallbeginn sehr stark an. Maximale Hüllrohrtemperaturen von ca. 1100 K wurden in einer Höhe von ca. 0.79 m berechnet, während im Experiment Temperaturen von über 1200 K in der Höhe 0.61 m gemessen wurden (s. Abbildung 12).



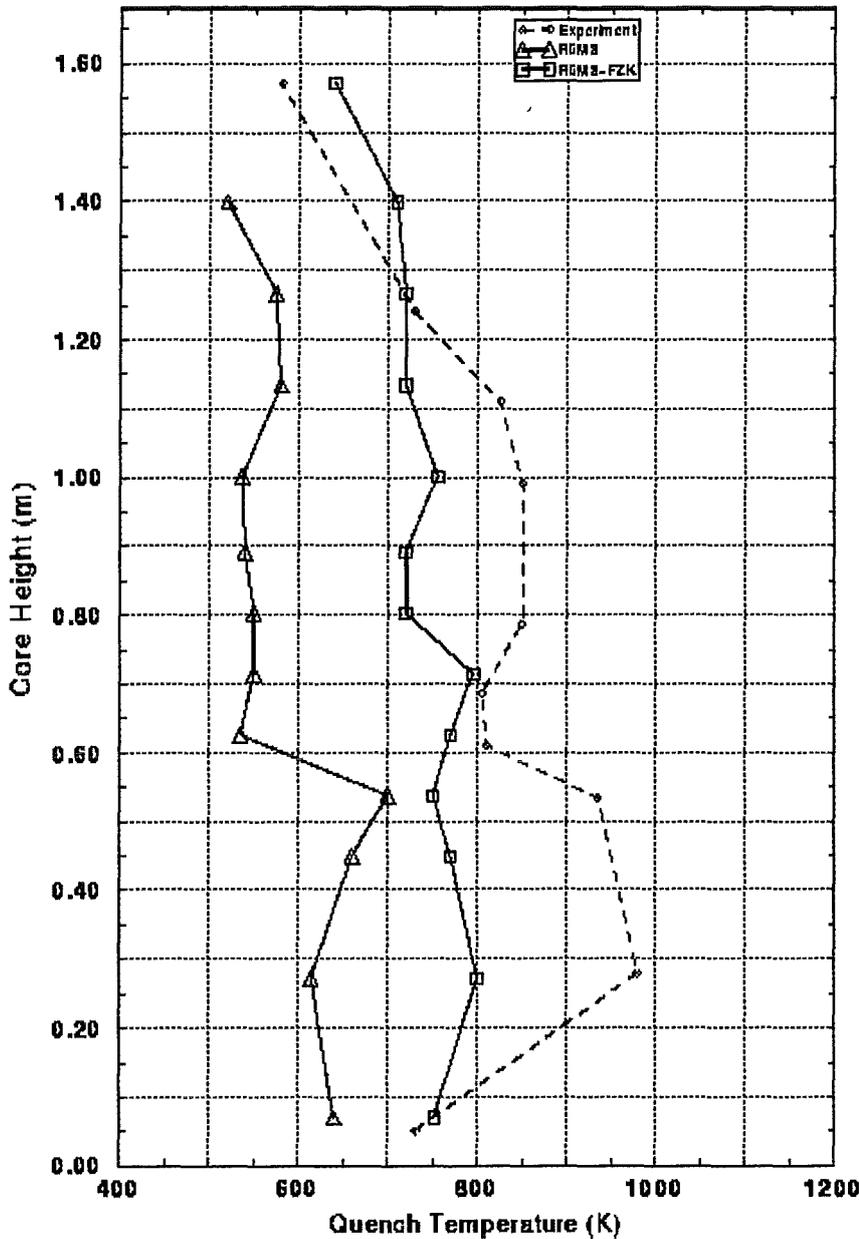
In der Abbildung 12 ist ein Vergleich der gemessenen und berechneten Temperaturen für bestimmte axiale Höhen des zentralen Heißkanals von LOFT dargestellt.

In den angegebenen Höhen wurden mehrere Thermoelemente radial verteilt, deren Signale in der Abbildung 12 dargestellt sind. Da nicht alle Thermoelemente den gleichen Temperaturtrend aufwiesen, wurde eine mittlere Temperatur (T-average) aus allen Messdaten zum Vergleich mit den berechneten Temperatur-Verläufen bestimmt. Aus dem Vergleich geht hervor, daß die Ergebnisse der R5M3-FZK-Version den Quench-Vorgang besser wiedergeben als die der R5M3-INEEL-Version. Jedoch werden weiterhin die Temperaturen im Post-dryout Bereich unterschätzt.

Abbildung 12: Vergleich berechneter mit gemessener Hüllrohr-Temperaturen

Bei der R5M3-FZK-Vorhersage ist die Rewetting-Temperatur eindeutig erkennbar, während R5M3 die Rewetting-Temperatur stark unterschätzt (s. Abbildung 13). Generell kann gesagt werden, daß die bisherige Modellvalidierung anhand unterschiedlicher Flut-

versuche, von Einzelstabtests bis hin zu Integralversuchen, gezeigt hat, daß die eingeführten Modellerweiterungen zu einem bedeutenden Fortschritt in der physikalischen Beschreibung des Flutvorgangs geführt haben.



Da eine realistischere Simulation der zwei-phasigen Thermo-hydraulik nicht nur für Flutszenarios sondern auch für Reaktivitäts-störfälle aufgrund der Rückkopplung der Dampfgehaltsverteilung im Kern auf die Neutronik von besonderer Sicherheitsrelevanz ist, sind weitere Untersuchungen hierzu erforderlich.

Darüber hinaus sind weitere Verbesserungen der Modellierung des Wärmeübergangs weit oberhalb der Quenchfront (Film-Sieden) als auch der Simulation SWR-spezifischer Flutszenarios (Fluten von oben) von großer Bedeutung.

Abbildung 13: Vergleich berechneter und gemessener Rewetting-Temperaturen

1.1.4 Codevalidierung anhand von Phebus Experimenten

Die Phebus FP Testserie besteht aus einer Reihe von in-pile-Versuchen zur Simulation einer Kernschmelze in einem Leichtwasserreaktor. Das Ziel dieser Versuche ist es, Daten über die Freisetzung von Spaltprodukten im Reaktor und deren Transport durch die Kreislaufkomponenten ins Containment zu gewinnen sowie Informationen über den Ablauf eines Kernschmelzunfalls und die dabei auftretenden kernzerstörenden Prozesse und ihre Wechselwirkung zu bekommen /9/ (siehe auch: 32.21.10)

Von den insgesamt sechs geplanten Versuchen haben FPT0 und FPT1 bereits stattgefunden. Die beiden Testbündel unterscheiden sich nicht wesentlich voneinander, jedoch wurde in FPT0 frischer Brennstoff (9 Tage in-situ vorbestrahlt) und in FPT1 abgebrannter Brennstoff (Abbrand ca. 23 GWd/tU) verwendet. Die entscheidenden Versuchsparameter, nuklearer Leistungsverlauf und Dampfeinströmrates, waren sehr ähnlich, so dass die Versuchsabläufe und Ereignissequenzen vergleichbar waren. Ein wichtiger Aspekt bei den Nachuntersuchungen und Versuchsanalysen von FPT0 und FPT1 wird den möglichen Einfluss des Abbrandes auf den Ablauf der Brennstabzerstörung betreffen; hierüber gibt es zur Zeit noch keine gesicherten Erkenntnisse. Derzeit hat S/R5 keine Modelle, die den Abbrandeinfluss berücksichtigen.

1.1.4.1 Phebus FPT0

Im Rahmen der Code-Validierung anhand von Phebus FPT0 wurde eine umfangreiche Parameterstudie durchgeführt /10/. Dabei wurde deutlich, dass Unsicherheiten in der Modellierung der Wärmeverluste durch den Shroud einen grossen Einfluss auf das Temperaturniveau im Bündel und damit auf Zeitpunkt und Ausmass der physico-chemischen Prozesse der Bündelzerstörung haben. Deshalb wurde im IRS ein verbessertes Shroudmodell fuer S/R5 entwickelt.

Die Phebus-spezifischen Shrouds - ebenso wie die der CORA und QUENCH Experimente - haben gasgefüllte Ringpalte zwischen einzelnen Materialschichten. Diese Ringpalte können in der Originalversion von S/R5 nur als unveränderliche wärmeleitende Materialschichten simuliert werden. In der Realität jedoch verändern sich die Spaltweiten aufgrund der thermischen Dehnungen benachbarter Shroudmaterialien, und bei hohen Shroudtemperaturen ist der Strahlungsanteil am Wärmedurchgang durch die Spalte nicht vernachlässigbar. Beide Effekte sind im neuen Shroudmodell berücksichtigt /10/ .

In Abbildung 14 sind gerechnete Brennstab- und Shroud-Temperaturen mit den experimentellen Daten verglichen. Der Vergleich der Brennstabtemperaturen (1a) zeigt, dass die Temperaturen von Rechnung und Experiment quantitativ recht gut übereinstimmen, das gilt insbesondere für die frühe Phase des Experiments bis zur Temperatureskalation durch Zry-Oxidation. Der qualitative Verlauf in den gerechneten Temperaturen weist jedoch im oberen Bündelbereich eine deutliche zeitliche Verschiebung auf; hier wird die Temperatureskalation mit dem Original-Shroudmodell ca. 500 s früher als im Experiment berechnet, während die Rechnung mit dem verbesserten Shroudmodell die experimentelle Beobachtung gut wiedergibt.

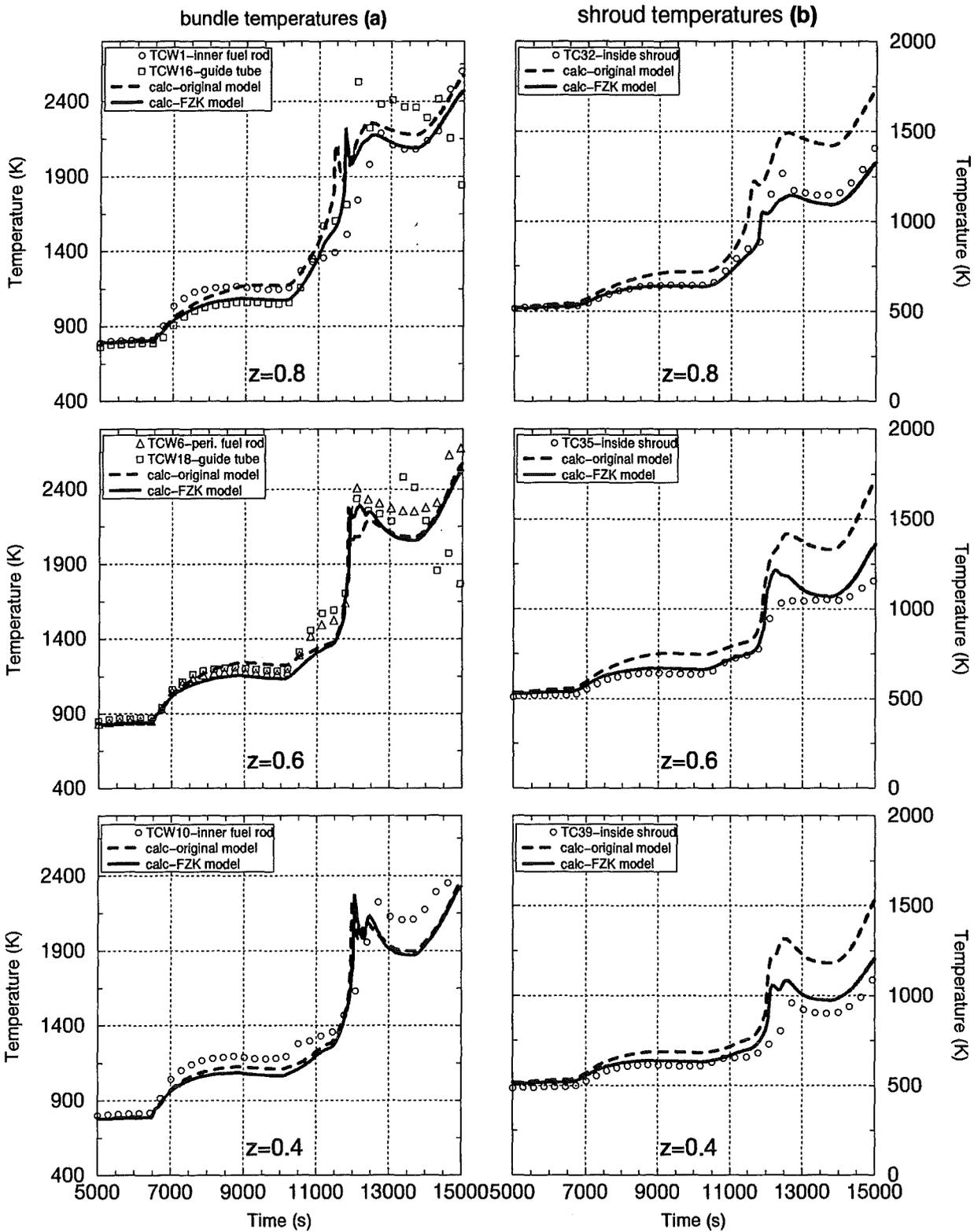


Abbildung 14: Experiment Phebus FPT0: Gemessene und berechnete Brennstab-Temperaturen (a) und Shroud-Temperaturen (b) an den axialen Bündelpositionen 0.4 m, 0.6 m und 0.8 m; Symbole entsprechen den gemessenen Temperaturen.

Noch deutlicher treten die Unterschiede beim Vergleich der Shroudtemperaturen hervor (s. Abbildung 14, 1b). Da die Shroud-Temperaturen den Bündeltemperaturen nahezu di-

rekt folgen, sind auch hier die zeitlichen Verschiebungen im oberen Shroudbereich zu sehen. Die gerechneten Temperaturverläufe mit dem verbesserten Shroudmodell geben die gemessenen sehr gut wieder, während die mit dem S/R5-Originalmodell berechneten Shroud-Temperaturen zu hoch sind.

Abbildung 15 zeigt einen Vergleich der gemessenen und gerechneten Wasserstoffmassen. Der zeitliche Verlauf der Wasserstoffproduktion, insbesondere der Zeitpunkt des Anstiegs, wird bei Anwendung des neuen Shroudmodells besser berechnet, quantitativ ist die Differenz zwischen Experiment und Rechnung erhalten geblieben. Hier zeigen sich Schwächen im S/R5-Oxidationsmodell und Codefehler, die erkannt sind und behoben werden.

Abbildung 16 vergleicht die mit dem neuen Shroudmodell gerechnete Sequenz charakteristischer Ereignisse der Bündelzerstörung mit den entsprechenden experimentellen Daten, die sich hier auf die Spannungssignale von "On-line Aerosol Monitoren" (OLAM) beziehen.

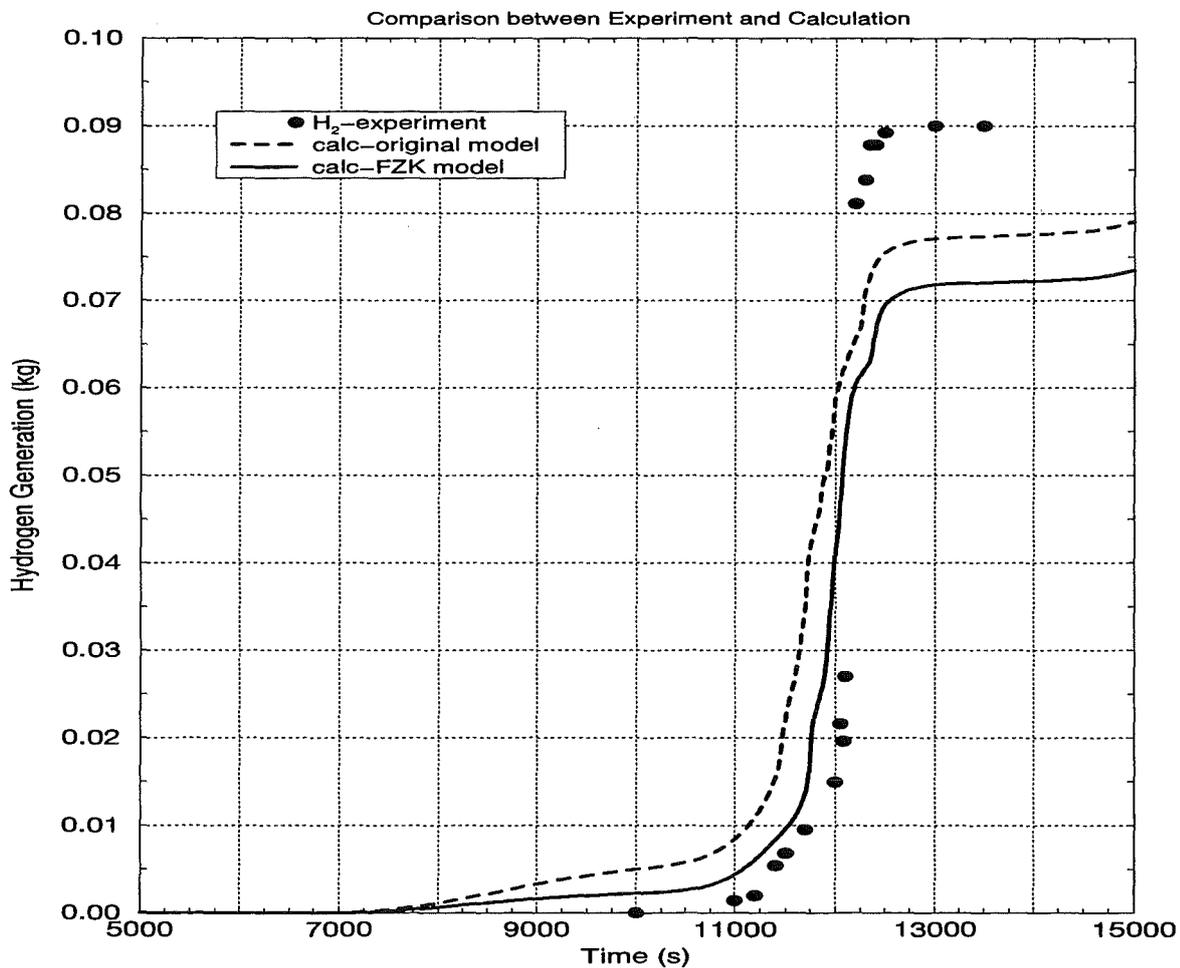


Abbildung 15: Experiment Phebus FPT0: Gemessene und berechnete kumulative Wasserstoffmassen.

Die Übereinstimmung in den Zeitpunkten, die den Beginn der entsprechenden Ereignisse angeben, ist sehr gut. Die Rechnungen wurden wegen signifikanter Schwächen von Modellen zur Beschreibung der späten Kernzerstörungsphase sowie zur Beschreibung der thermischen Kopplung des Schmelzepools an den Shroud bei 16000s beendet.

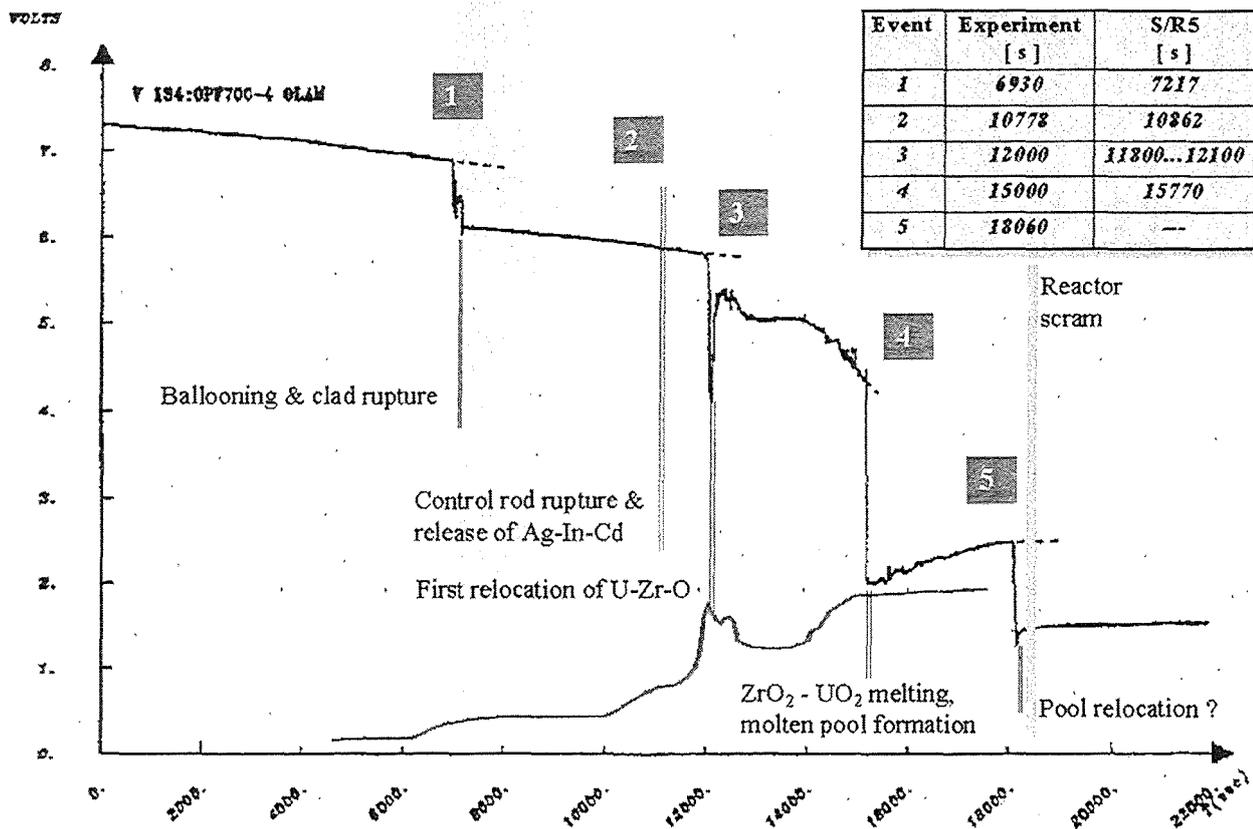


Abbildung 16: Experiment Phebus FPT0: Gemessene und berechnete Sequenzen charakteristischer Ereignisse der Bündelzerstörung

1.1.4.2 Phebus FPT1

Wie erwähnt, war die Versuchsführung von FPT1 der von FPT0 sehr ähnlich. Die experimentelle Information über den Verlauf der Brennstabtemperaturen ist gering, da einige der Thermoelemente frühzeitig versagten. Statt dessen stehen aber die Messergebnisse der Ultraschallthermometer (UST) in vollem Umfang zur Verfügung (bei FPT0 haben die Ultraschallthermometer versagt). Aufgrund der radialen Positionierung der UST zwischen äußerer Brennstabreihe im Bündel und der Shroudinnenseite ist nur ein qualitativer Vergleich mit den gerechneten Brennstabtemperaturen möglich, quantitativ sollten die Temperaturen der UST zwischen gerechneten Brennstab- und Shroudinnen-Temperaturen liegen. Zusätzliche Unsicherheiten im nuklearen Leistungsverlauf aufgrund unsicherer Kopplungsfaktoren zwischen Reaktor- und Bündelleistung erschweren die Beurteilung der Rechenergebnisse für FPT1. Für die Analyse von FPT1 sind die gleichen "best-estimate"-Modelle und -Modellparameter benutzt wie für FPT0. Die Rechnungen wurden nach Beginn der Schmelzpoolbildung abgebrochen.

Abbildung 17 zeigt den zeitlichen Verlauf gemessener und berechneter Wasserstoffmassen. Die gute zeitliche Übereinstimmung in den gemessenen und gerechneten Temperatureskalationen der Brennstäbe infolge Hüllrohroxidation führt bei Verwendung des verbesserten Shroudmodells zu einer entsprechenden qualitativen Verbesserung der zeitabhängigen Produktionsraten. Die kumulative Wasserstoffmasse wird in der Rechnung unterschätzt, jedoch weniger als bei FPT0.

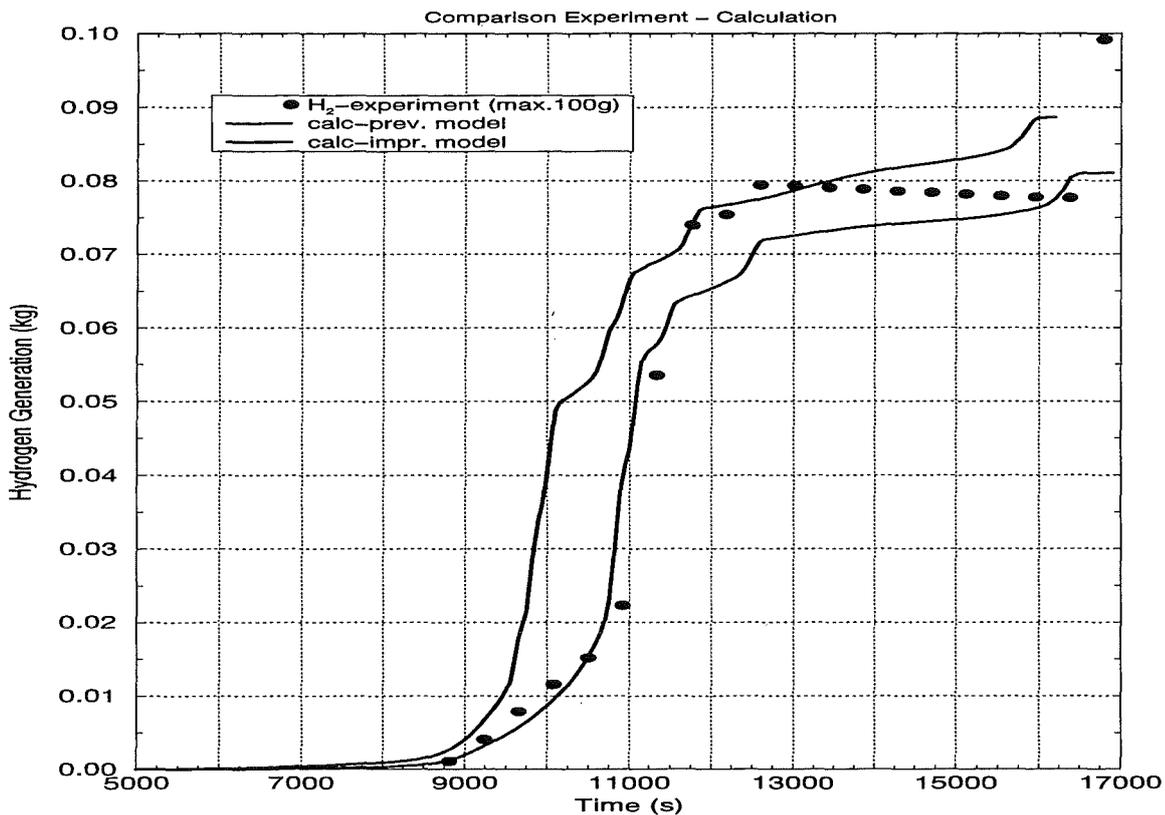


Abbildung 17: Experiment Phebus FPT1: Gemessene und berechnete kumulative Wasserstoffmassen

Abbildung 18 zeigt den Vergleich gerechneter Brennstab- und Shroudtemperaturen mit den Messdaten für FPT1. Der Vergleich bestätigt die Ergebnisse und Schlussfolgerungen aus FPT0: die Rechenergebnisse mit verbessertem Shroudmodell spiegeln die experimentellen Ergebnisse der Temperaturen im Bündel qualitativ gut wieder (Abbildung 18 a); die gemessenen Temperaturen bei $z=0.7$ m sind allerdings unzuverlässig, Messdaten oberhalb 0.7 m liegen nicht vor. Der Vergleich der Shroud-Temperaturen (Abbildung 18 b) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen.

1.1.4.3 Ausblick

Die Experimentanalysen zu Phebus FPT0 und FPT1 haben gezeigt, dass zwei Arbeiten vordringlich durchgeführt werden müssen:

1. die kritische Durchsicht und Verbesserung der Oxidationsmodelle in S/R5;
2. die Experimentauswertung von FPT1 im Hinblick auf den Einfluss abgebrannten Brennstoffs auf den Verlauf der Bündelzerstörung und die Modellierung von Abbrandeinflüssen.

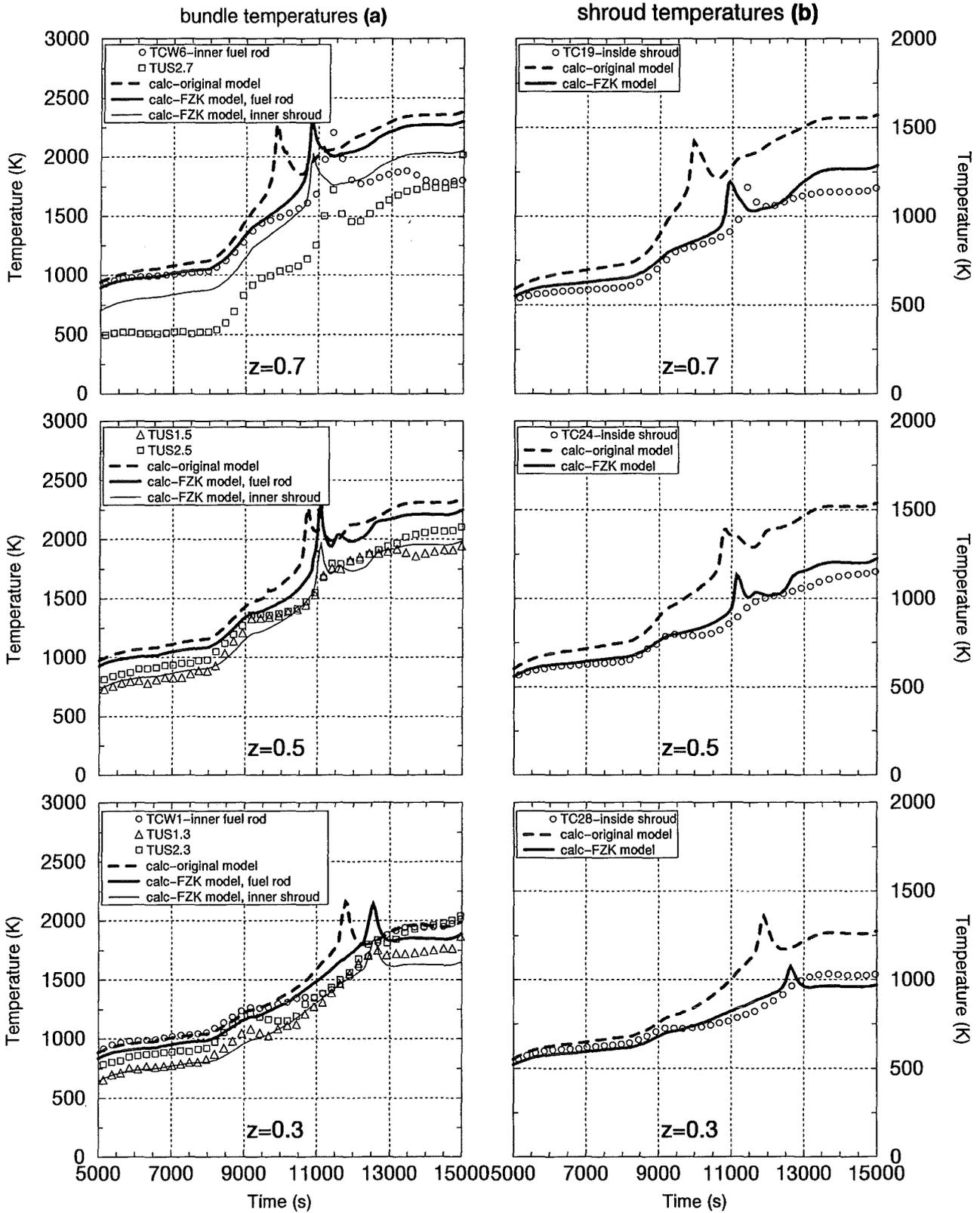


Abbildung 18: Experiment Phebus FPT1: Gemessene und berechnete Brennstab- (a) und Shroud-Temperaturen (b) an den axialen Bündelpositionen 0.3 m, 0.5 m und 0.7 m.

1.1.5 Quenchversuche

Zielsetzung:

In der geplanten QUENCH-Anlage im FZK/IMF sollen die physikalischen und chemischen Vorgänge bei einer Abschreckung des überhitzten Bündels mit Wasser oder einer schnellen Abkühlung durch Dampf untersucht werden.

Die Vorbereitung der Quenchversuche wird unterteilt in Auslegungsrechnungen zur Optimierung des Anlagendesigns sowie der Versuchsführung und Validierung des Anlagenmodells anhand der verfügbaren Inbetriebsetzungstests.

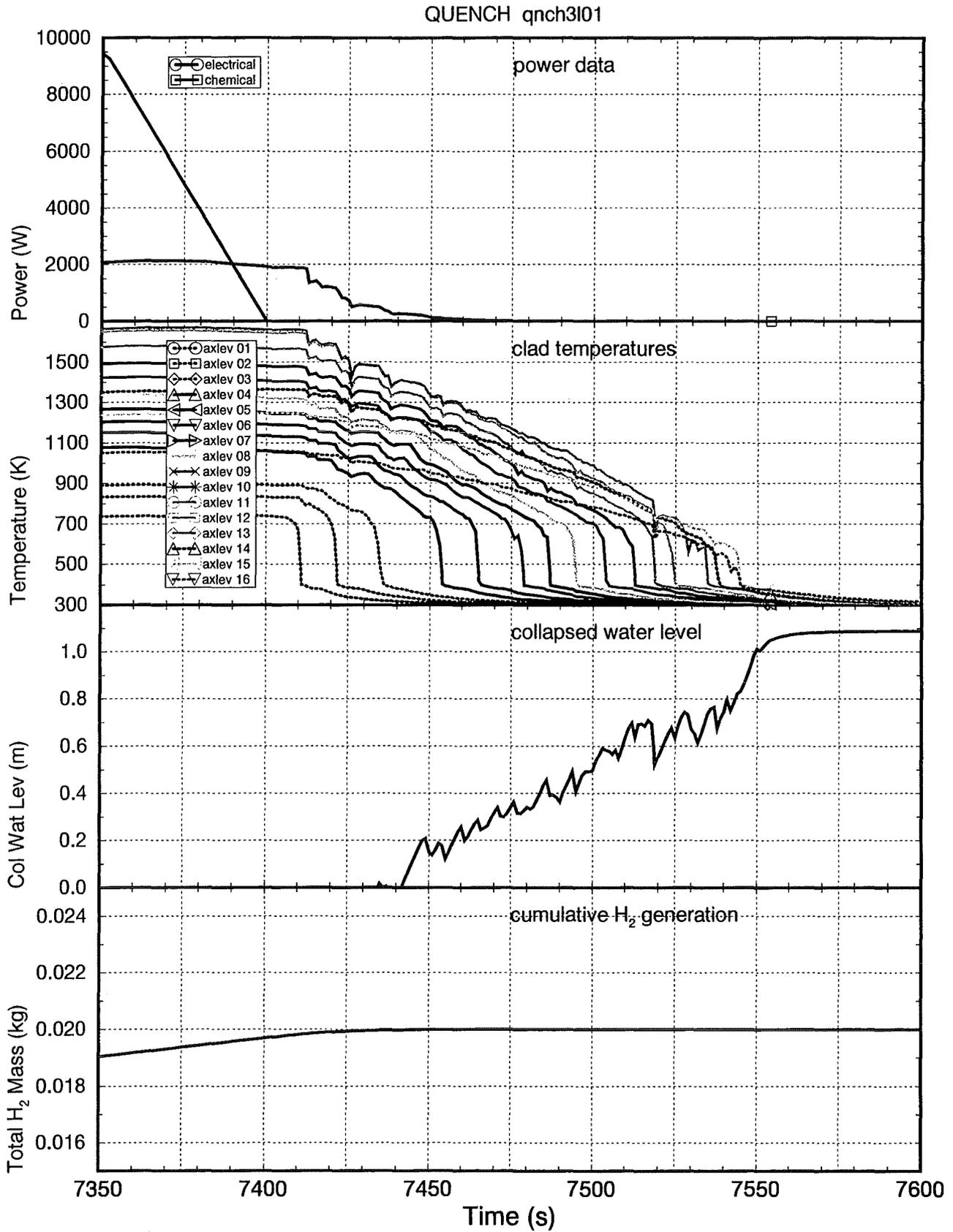
1.1.5.1 Auslegungsrechnungen

Im IRS werden diese Versuche durch Rechnungen, vor allem mit S/R5, analytisch begleitet werden. Das berichtigte und erweiterte Modell des Wärmeüberganges beim Übergangssieden, das in RELAP5 erfolgreich getestet wurde, ist jetzt auch in S/R5 verfügbar. Damit kann der Temperaturverlauf während des Abschreckens deutlich besser berechnet werden als vorher (s. Kap. 1.1.3.3) .

Die Auswahl von reaktorspezifischen Bedingungen für die QUENCH-Versuche nach Reaktorrechnungen zum EPR, vor allem zu einem unterstellten Verlust der Eigenbedarfsversorgung, ist in Kap. 1.1.1.4 beschrieben (s. auch Tabelle 2).

Für die Voroxidationsphase wurde eine Parameterstudie durchgeführt, um den Bereich möglicher Massenströme und Fluidzusammensetzung im Bündel zu untersuchen (s. Abbildung 19). Bei geringen Durchsätzen und gleichzeitigem geringen Dampfanteil liegt das Maximum der Oxidschichtdicke bei ca. 0,7 m der beheizten Zone. Unter solchen Versuchsbedingungen lassen sich jedoch nur relativ niedrige Temperaturen erreichen, so dass die Voroxidationsphase zu lange dauert. Wegen der geringen Wärmekapazität von Argon muss die elektrische Leistung niedrig sein. Bei nur geringfügig erhöhter Leistung kann es zu einer Temperaturexkursion kommen, d. h. die Anlage reagiert unter diesen Versuchsbedingungen sehr empfindlich (s. Abbildung 20). Aus diesem Grunde wurde festgelegt, dass die Voroxidationsphase bei einem Durchsatz von 3 g/s Argon und 3 g/s Dampf durchgeführt werden soll. Das Maximum der Oxidschichtdicken wird nahe des oberen Endes der beheizten Zone erreicht (s. auch Abbildung 22).

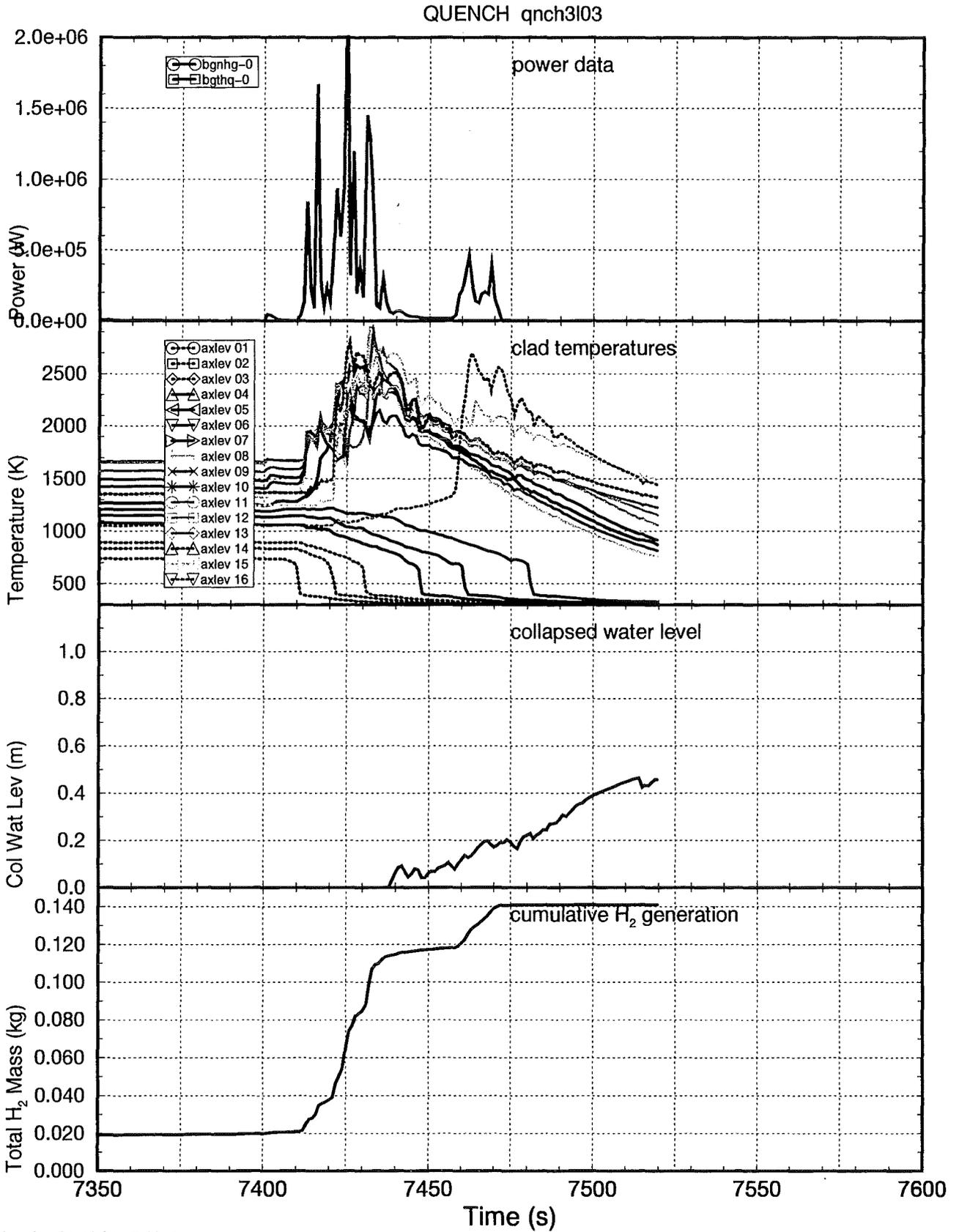
Zur Absicherung der S/R5-Rechnungen wurden Vergleichsrechnungen mit ICARE bei gleicher axialer Diskretisierung wie mit S/R5 durchgeführt. Der radiale Wärmeverlust in die Kühlungsströmung wurde als Randbedingung von einer entsprechenden S/R5 Rechnung übernommen, da eine bessere Modellierung der Anlage mit ICARE derzeit nicht möglich ist. Im Rahmen dieser Einschränkungen wurden für einen repräsentativen Fall befriedigende Übereinstimmungen zwischen den jeweiligen Ergebnissen gefunden.



Mon Jan 26 11:22:41 1998

Ch. Homann selp31ft.gapE.x

Abbildung 19: Vorausrchnung fr die Flutphase in der Quench-Anlage ohne unterstelltes Abplatzen der Oxidschichten.



Mon Jan 26 11:32:47 1998

Ch. Homann selp31ft.gapE.x

Abbildung 20: Vorausrchnung fr die Flutphase in der Quench-Anlage mit unterstelltem vollstndigem Abplatzen der Oxidschichten.

1.1.5.2 Validierung des S/R5 Modells anhand der Inbetriebsetzungstests

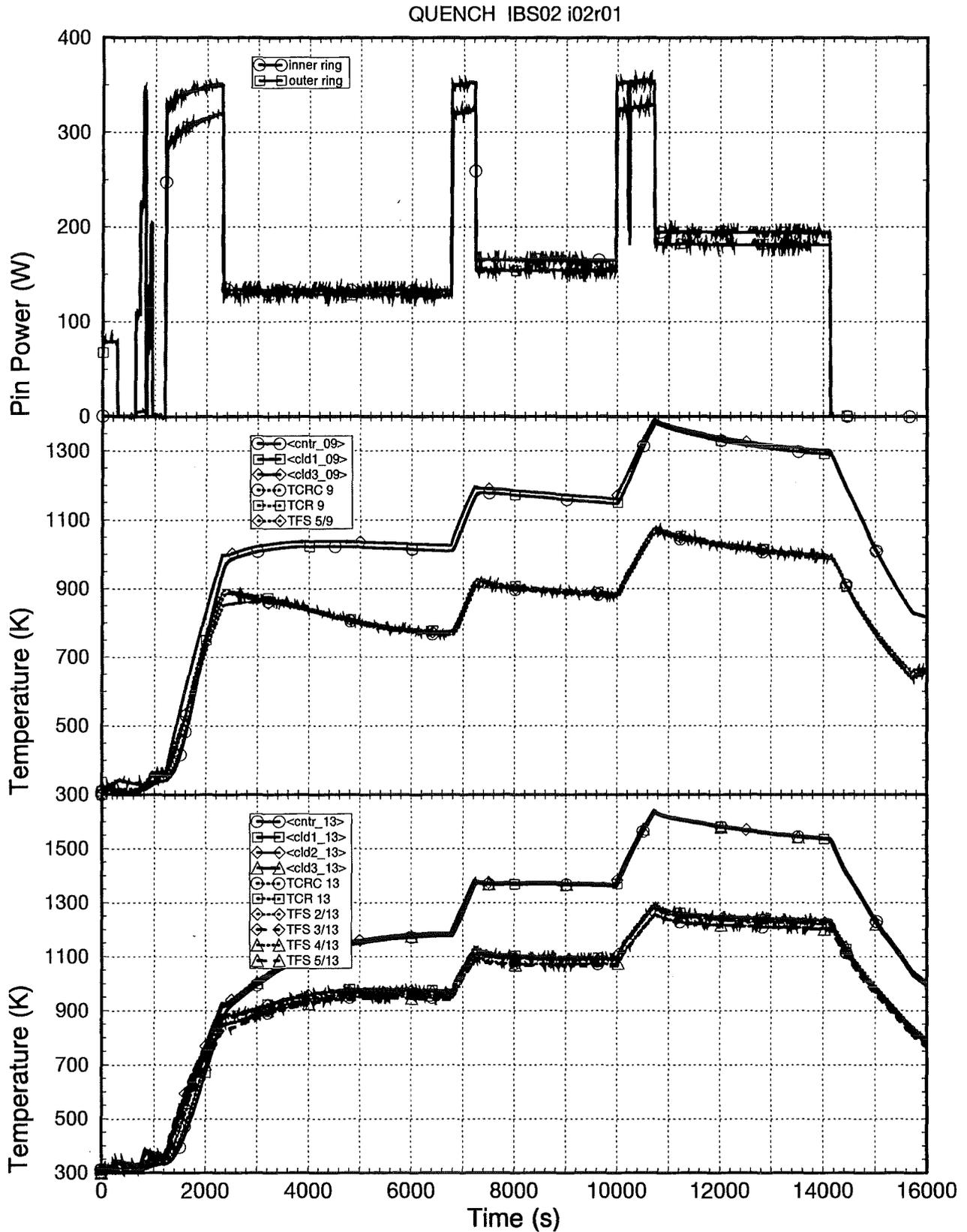
Vor der Durchführung der eigentlichen QUENCH-Versuche waren Vorversuche geplant, um das Verhalten der Anlage zu testen und gegebenenfalls die Modellierung der Anlage für die Rechnungen anzupassen. Bei diesen Vorversuchen sollten eine reine Argonströmung und ein Gemisch aus Argon und Dampf bei drei verschiedenen Temperaturniveaus, nämlich 900, 1100 und 1300 K, untersucht werden, ausserdem eine Voroxidation und eine Abschreckung mit kaltem Wasser.

Für diese Vorversuche wurden Vorausrechnungen mit S/R5 durchgeführt. Dabei wurde zusätzlich zu den bisher modellierten Teilen der Anlage auch die Abgasleitung und ihre Kühlung in ihrer vollen Länge von 3 m berücksichtigt. Die entsprechende Eingabe wurde von AEAT Winfrith übernommen und überarbeitet. Die Rechnungen zeigen, dass bei einer reinen Argonströmung die Aufheizung der Struktur sehr langsam ist. Vor dem Einleiten von Dampf muss daher die Anlage über längere Zeit mit Argon vorgeheizt werden, um Kondensation des Dampfes, vor allem in der Abgasleitung vor der Messstellenblende zu vermeiden. Rechnungen zur Quenchphase zeigen, dass die Temperaturverläufe, vor allem die maximalen Werte, wesentlich von Annahmen zum Abplatzen der Oxidschicht zu Beginn des Flutens abhängen (Abbildung 19 und Abbildung 20). Durch die Verbesserung des Modells der Wärmeübertragung im Übergangssieden (s. Kap. 1.1.3.3) werden realistische Temperaturverläufe berechnet. Die Quenchrate sowie die erzeugte Wassermenge sind deutlich unterschiedlich. Ein Programmfehler, der bei dieser Gelegenheit festgestellt wurde, ist an INEEL gemeldet worden.

Für den Vorversuch IBS02 (s. Abbildung 21), bei dem eine reine Argonströmung im Bündel vorlag, sind Nachrechnungen mit S/R5 durchgeführt worden. Die Eingabe ist - abgesehen von den aktuellen Werten für die Strömung und die Leistung - dieselbe wie für die Vorversuche. In der Rechnung wird der Versuch qualitativ richtig wiedergegeben, jedoch sind die berechneten Maximaltemperaturen im Vergleich zum Experiment zu hoch (s. Abbildung 22).

Als Ursachen für die Abweichungen werden verschiedene Gründe vermutet. Der Shroud lässt sich in S/R5 nur als ebene Geometrie darstellen. Dadurch wird die radiale Wärmeabfuhr unterschätzt. Die Wärmeleitfähigkeit des Isolationsmaterials ist möglicherweise nicht genau genug bekannt. Die Modellierung der unbeheizten Teile ist mit S/R5 nicht genau genug möglich, so dass die nach der Rechnung eingekoppelte elektrische Energie ungenau ist. In der Modellierung muss die Strahlung zwischen dem äusseren Kühlmantel und dem Containment trotz der recht niedrigen Temperaturen (ca. 350 K) berücksichtigt werden. Der Unterschied der Materialdaten zwischen dem im Experiment benutzten ZrO_2 für die Tabletten und dem modellierten UO_2 hat wahrscheinlich geringeren Einfluss.

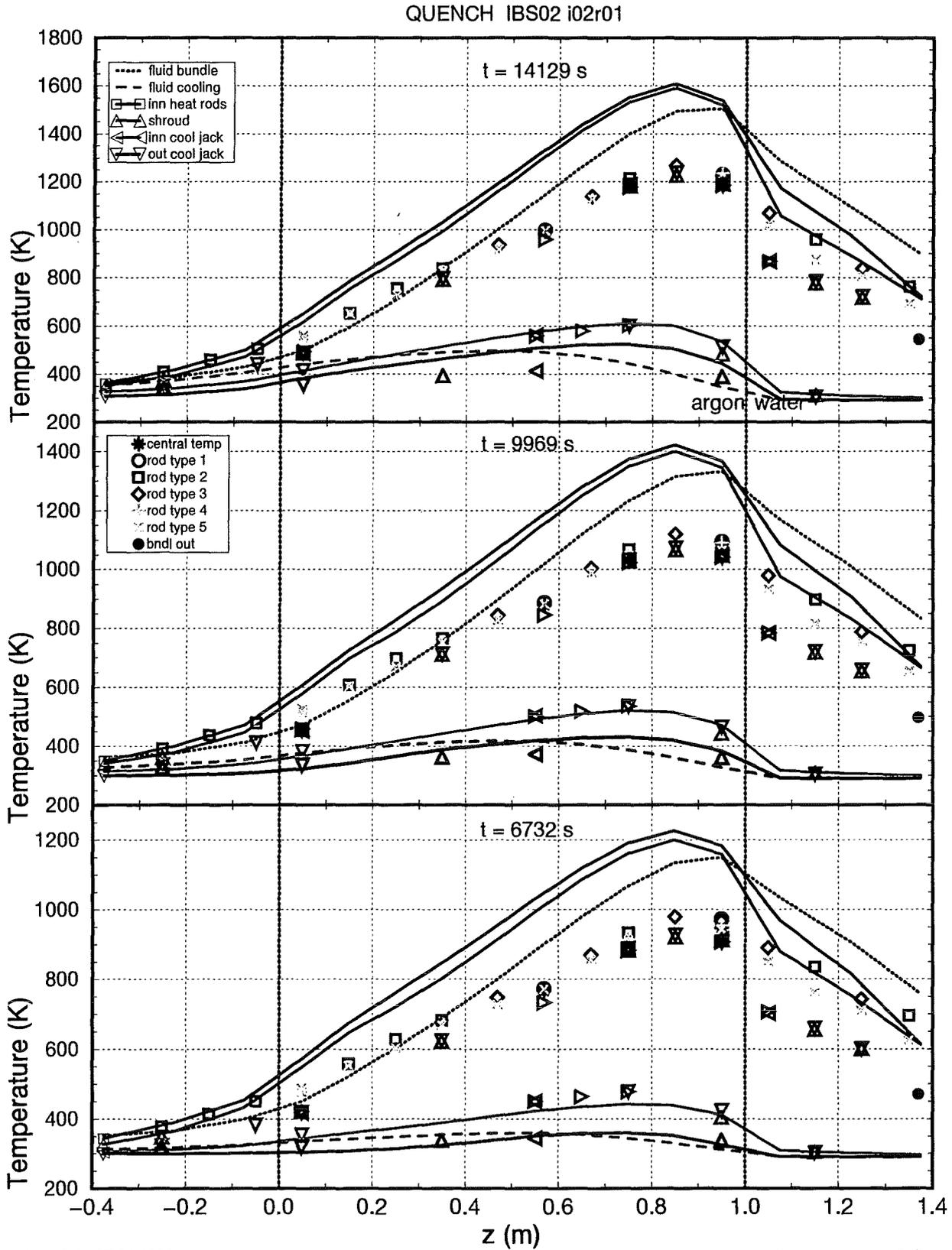
Die Arbeiten werden fortgesetzt mit weiteren Nachrechnungen der Vorversuche (Inbetriebsetzungstests), Vorausrechnungen für die geplanten QUENCH-Versuche und der Interpretation ihrer Ergebnisse.



Mon Jan 26 11:38:48 1998

Ch. Homann selp31ft.gapE3.x

Abbildung 21: Quenchttest IBS02: vorgegebene Stableistung (oben), gemessene (Symbole) und berechnete Temperaturen in Bündelmitte und am oberen Ende der beheizten Zone (Mitte und unten).



Mon Jan 26 11:37:01 1998

Ch. Homann selp31ft.gapE3.x

Abbildung 22: Axiale Temperaturverteilung Quenchttest IBS02: gemessene Temperaturen (Symbole) und berechnete Temperaturen am Ende der drei Leistungsstufen.

1.1.6 Literaturverzeichnis

- /1/ Allison et al.: SCDAP/RELAP5 mod3.1 Code Manual, Vol I - IV. NUREG/CR-6150, EGG-2720, Oct. 1993.
- /2/ R. Gonzales, D. Chatelard, F. Jacq, ICARE2 Version 2 Mod 1, Description of physical models, Note Technique DRS/SEMAR 92/43, 1996
- /3/ W. Hering, Status of Accident sequence analyses using SCDAP/RELAP5, PSF report, 1998.
- /4/ 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.
- /5/ W. Hering, Status of Reflood Analyses for the LOOP Scenario using SCDAP/RELAP5, PSF report, 1998.
- /6/ C. Messainguiral: Computing reactor severe degradation with ICARE2-V2-mod2. Icare2 2nd. International users seminar, Aix-en-Provence, 21-22 October 1996.
- /7/ C. Messainguiral, W. Hering: Computing reactor core severe degradation with ICARE2-V2-mod2. Interner Bericht CEA/SERA/LAPE-FZK/IRS.
- /8/ C. Messainguiral, W. Hering: Steel annular core structures; temperature evolution during a severe accident. Calculation with Icare2-V2-mod2~. Interner Bericht CEA/SERA/LAPE-FZK/IRS.
- /9/ P.von der Hardt,A.V.Jones,C.Lecomte,A.Tattegrain:"Nuclear Safety Research: The Phebus Severe Accident Experimental Program",Nuclear Safety 35(2),1994
- /10/ S. Smit, W. Hering, W. Sengpiel: Analysis of Fuel Bundle Behaviour in Phebus FPT0 with SCDAP/RELAP5, FZKA 5882, 1998.
- /11/ 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.
- /12/ T. Haste et. al., In-vessel Core Degradation Code Validation Matrix, NEA/CSNI/R(95)21, Fankreich 1996.
- /13/ J.C. Chen, R.K. Sundaram, T.F. Ozkaynak, A phenomenological correlation for post-CHF heat transfer, Lehigh University, NUREG-0237, Juni 1977.
- /14/ Sanchez, V. and Elias, E. and Homman, Ch. and Hering, W. and Struwe, D.; Development and validation of a transition boiling model for RELAP5/MOD3 Reflood Simulation. Forschungszentrum Karlsruhe FZK, Germany. FZKA-5954, September 1997
- /15/ Sanchez, V. , Homann, Ch.; Validation of a transition boiling model for RELAP5/MOD3 Reflood Simulation against the Integral Test LOFT LP-LB-1. Forschungszentrum Karlsruhe FZK. Postfach 3640 D-76021 Karlsruhe, Germany. FZKA-.....in preparation. 1998
- /16/ M. J. Loftus, L. E. Hochreiter, C. E Conway, C. E. Dodge, Tong A., Rosal E. R. , Valkovic M. M. , Wong S.: PWR FLECHT SEASET Unblocked Bundle, Forced and Gravity Reflood Task Data Report. Electric Power Research Institute, EPRI. 3412 Hillview Avenue, Palo Alto, California 94304. NUREG/CR-1532, WCAP-9699 1980
- /17/ Compensium of ECCS Research for Realistic LOCA Analysis, Volume 3. NUREG-1230, USNRC. Division of Reactor Plant Systems, Washington, DC 20555, 1987
- /18/ Murao, Y. and Fujiki, K. and Akimoto, H.; Evaluation report on CCTF Core-1 Reflood Test CI-19 (RUN 38)-Experimental Assessment of the Evaluation Model for the Safety Analysis on the Reflood Phase of PWR-LOCA. JAERI. Tokai-mura, Ibaraki-ken, 319-11, Japan. JAERI-M)83- 029. 1983
- /19/ Sanchez, V., Homann, Ch.: Validation of the improved RELAP5 transition boiling model against the full-length FLECHT-SEASET reflood test. FZKA-..... in preparation. 1998.

32.21.09 Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen

(G. Benz*, J. Ehrhardt, D. Faude, F. Fischer, Ch. Haller*, I. Hasemann, A. Lorenz, J. Päsler-Sauer, M. Rafat*, T. Sauder*, T. Schichtel, O. Schüle, C. Steinhauer, INR)

Abstract

Uncertainty and sensitivity analyses with the program system COSYMA have been performed in close cooperation with the University of Delft, NL, and the NRPB, UK. The results are evaluated on the submodule level and for the overall code system.

The first operational version PV 3.0 of the real-time on-line decision support system RODOS has been prepared in 1997. It is being enhanced and customised to the various regions of Europe in close cooperation with some 40 contract partners in East and West Europe.

Zusammenfassung

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Programmsystem COSYM werden in Zusammenarbeit mit der Universität Delft, NL, und dem NRPB, UK, durchgeführt. Die Ergebnisse werden sowohl für Einzelmodule als auch für das gesamte Programmsystem ausgewertet.

Die erste operationelle Version PV 3.0 des Echtzeit- und On-line-Entscheidungshilfesystems RODOS wurde in 1997 fertiggestellt. Es wird in Zusammenarbeit mit etwa 40 Vertragspartnern in Ost- und Westeuropa erweitert und zur Anwendung in den verschiedenen Regionen Europas angepaßt.

* Fa. D.T.I., Dr. Trippe Ingenieurgesellschaft m.b.H., Karlsruhe

Probabilistic Accident Consequence Assessments

1. Probabilistische Abschätzungen von Unfallfolgen

Im Rahmen des Vertrags FI4P-CT95-0006 mit der Europäischen Kommission (EK) werden in Abstimmung mit der Universität Delft, NL, und dem NRPB, UK, 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.

Die Unsicherheitsanalysen erfolgen in mehreren Stufen: zunächst werden die vier Programmteile zur Berechnung der atmosphärischen Ausbreitung und Ablagerung, des Verhaltens von Radionukliden in Nahrungsketten, der Stahldosen durch externe und interne Exposition sowie der gesundheitlichen Schäden (deterministisch und stochastisch) separat untersucht. Aufgrund der Analyse der Einzelergebnisse werden die wichtigsten Parameter für die abschließenden Unsicherheitsanalysen mit dem gesamten Programmpaket COSYMA bestimmt. Sämtliche Analysen werden für drei typische Quellterme durchgeführt.

Im Berichtszeitraum wurden die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für den COSYMA-Modul "Atmosphärische Ausbreitung und Ablagerung" abgeschlossen. Die Fehlerbandbreiten (5%-95% Fraktilwerte) der 120 bei der Auswertung zu berücksichtigenden Zwischen- und Endergebnisse wurden aus 100 COSYMA-Läufen bestimmt, denen durch Stichprobenauswahl (Latin Hypercube Sampling) jeweils unterschiedliche Wertesätze der 28 unsicheren Modellparameter zugewiesen wurden.

Parallel zu den genannten Arbeiten wurden Überlegungen zur Erstellung einer speziellen COSYMA-Version zur Anwendung im Rahmen von probabilistischen EPR-Untersuchungen mit langanhaltenden Quelltermen von mehreren Tagen angestellt und bereits teilweise realisiert.

2. Rechnergestützte Entscheidungshilfeinstrumentarien für den Notfallschutz

Mit Unterstützung des BMU (Vorhaben St. Sch. 1054/1) und der EK (Verträge FI4P-CT95-0007, FI4C-CT96-0006 und IC15-CT96-0318) 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 Hauptkoordinator involviert. 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 Notfallschutzzentralen der Ukraine, Polens, der Slowakischen Republik und Ungarns, sowie die Errichtung eines Informationsnetzes zwischen ost- und westeuropäischen Staaten für den schnellen Austausch von radiologischen Informationen in den Jahren 1998 und 1999 zur Zielsetzung haben. Die vorbereitenden Arbeiten hierzu (Unterstützung bei der Erstellung von Ausschreibungsunterlagen, Abfassung von Förderungsanträgen) wurden in 1997 abgeschlossen.

2.1 Gegenwärtiger Entwicklungsstand von RODOS

Mitte des Jahres 1997 wurden die Arbeiten zur Fertigstellung der ersten operativen RODOS Version PV3.0 abgeschlossen. In der Folge wurde die RODOS-Software unter dem neuen Betriebssystem HP-UX 10.20 während des RODOS Contractors Meeting, Kiew, 14.-18. Oktober 1997, an die Vertragspartner verteilt; zuvor erfolgte die Implementierung in China und Portugal.

2.1.1 Betriebsabwicklungssystem OSY

Betriebsweisen von RODOS/RESY und Dateneingabe

Zu den wesentlichen Arbeiten am Betriebsabwicklungssystem gehörten Entwurf, Implementierung und Test der Real-time Datenbank und der Bereitstellung der zugehörigen Softwarewerkzeuge zur Adaptierung von SQL-C Programmen in ALLBASE-SQL und INGRES-SQL Syntax. Die Anzeige und graphische Darstellung von Real-time Daten wurde entwickelt. Das Hauptdialog-Layout wurde durch Gliederung be-

stimmter Funktionalitäten in entsprechende Funktionsgruppen und deren Visualisierung durch Icons neu gestaltet. Weiterhin wurde eine anpassungsfähige Benutzerschnittstelle zur Eingabe und Modifizierung der Initialisierungsdaten der externen Programme bereitgestellt. Die Client- und Server-Softwarefunktionen zum Transfer von on-line Daten auf verteilte Rechner wurde entwickelt und mit den meteorologischen Daten des FZK-Meßmastes getestet. Darüber hinaus wurden eine Reihe weiterer Verbesserungen vorgenommen; zu den wesentlichen gehören die Zeitoptimierung der Datenmanager-Zugriffsfunktionen, die Entwicklung des RODOS-Datenbank-Generators und die Trennung von Programmdatenbank und Stammdatenbank. Eine verbesserte Version des Systemhandbuchs liegt vor.

Praktische Erprobung der on-line Ankopplung an meteorologische und radiologische Datennetze

Im Hinblick auf den zukünftigen operationellen Betrieb des RODOS Systems wurden die notwendigen Hardware- und Software-Komponenten zur on-line Ankopplung an meteorologische und radiologische Datennetze installiert. Im Einzelnen wurden bisher erfolgreich getestet (siehe Abb. 1):

- Transfer einer Auswahl von KFÜ-Daten des KKP (Meßstellen des meteorologischen Meßmastes und der ODL) durch den Rechnerknoten Philippsburg und die LfU Karlsruhe zum RODOS System. Die Übertragung kann sowohl über X.25 (Datex-P) als auch über TCP/IP erfolgen; es wurde der stündliche und der 10-minütige Datentransfer über INTERNET getestet.
- Transfer von IMIS-Daten im zweistündigen Zeitintervall über ISDN vom BfS Freiburg zum RODOS System.
- Transfer von - soweit bisher realisiert - europaweiten EURDEP-Daten (ODL) des JRC Ispra über TCP/IP-Netz.
- Transfer von HIRLAM-Prognosedaten des Dänischen Meteorologischen Instituts (DMI); die Daten werden 4 mal täglich mit einer Auflösung von 16 km x 16 km in einem regionalen Bereich von 120 km x 120 km als 1-stündige Prognosedaten über einen Zeitraum von 48 Stunden, sowie mit einer Auflösung von 48 km x 48 km europaweit als 3-stündige Prognosedaten geliefert.

Die Daten werden im Softwarepaket zur Real-Time-Datenverarbeitung des RODOS Systems überprüft, gespeichert und den anderen Programmmodulen zur Weiterverarbeitung zur Verfügung gestellt. Durch die Real-time Grafik können die Daten kontinuierlich mit verschiedenen Auswertearithmen bearbeitet und dargestellt werden.

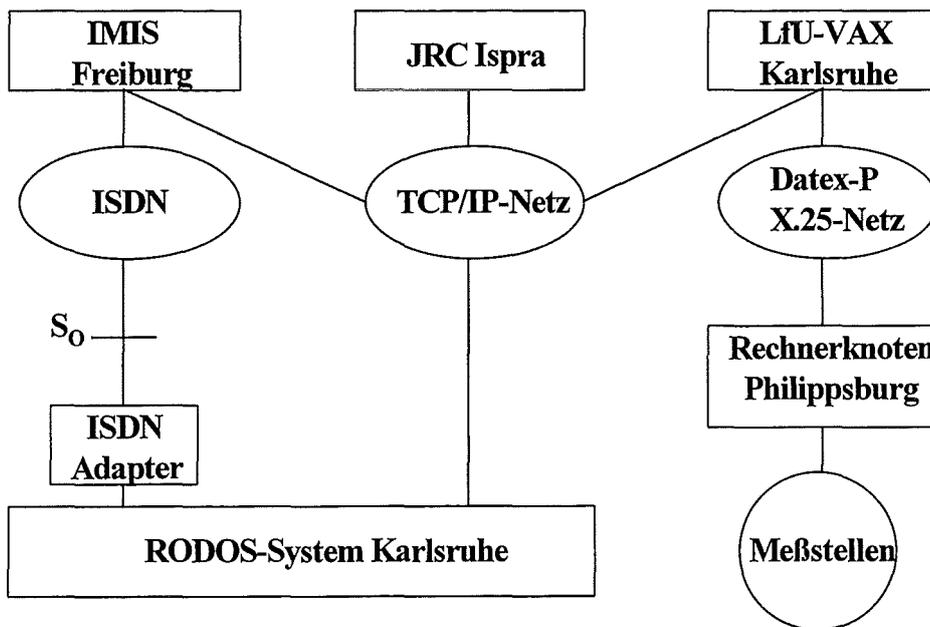


Abb. 1 Derzeitige Meßnetzverbindungen von RODOS

Test der Netzwerkverbindungen für den aktiven und passiven Remote-Betrieb

Auf Wunsch von Interessenten und möglichen zukünftigen Benutzern wurde die Möglichkeit geschaffen, auf das im FZK/INR installierte RODOS System über INTERNET und ISDN zuzugreifen. Mit Hilfe eines X-Window-fähigen Terminals kann der Benutzer nach Erteilung der Zugangsberechtigung die verfügbaren Funktionen der aktuellen Version ausführen. Allerdings hat sich gezeigt, daß bei Verbindung über INTERNET während der normalen Arbeitszeiten mit langen Antwortzeiten zu rechnen ist.

Im Hinblick auf den möglichen zukünftigen Remote-Betrieb mit schnellen Antwortzeiten wurde der RODOS Betrieb über eine ISDN-Verbindung zwischen dem BfS Freiburg und FZK/INR erfolgreich getestet. Es zeigte sich, daß durch Kanalbündelung die Antwortzeiten erheblich verkürzt werden können.

Geographisches Informationssystem RoGIS

Basierend auf den bei verschiedenen Vorführungen und Trainingskursen ergangenen Rückmeldungen wurde die Grafikoberfläche neu realisiert. Dabei wurde vor allem auf die leichte Bedienbarkeit auch für solche Personen geachtet, die mit dem System nicht dauernd arbeiten. Die Gestaltung der neuen Grafikoberfläche lehnt sich eng an die Bedienoberfläche des weit verbreiteten Geographischen Informationssystems ArcView sowie die bei anderen MS Windows Programmen und PCs verwendeten Fenster und Menüanordnungen an.

Die neue Grafik ist vollständig an die Datenbanken von RoGIS angekoppelt und benutzt in Deutschland die von ESRI bereitgestellten NavTech-Daten. Sie wurden um Produktionsdaten auf Landkreisebene des BfS (IMIS) erweitert. Die Arbeiten zum geographischen Informationssystem RoGIS wurden mit der Bereitstellung des Austauschformats RIF zum Austausch von Informationen mit anderen (kommerziellen) GIS Produkten abgeschlossen.

2.1.2 Teilsystem ASY zur Ermittlung der radiologischen Lage

Zur Berechnung der radiologischen Lage im Diagnose- und Prognosebetrieb können bis zu 15 Nuklide aus einer Liste von 64 Nukliden ausgewählt werden. Es sind verschiedene Eingabemöglichkeiten für Quellterme vorhanden, einerseits die direkte Benutzereingabe von nuklidspezifischen Freisetzungsraten, Freisetzungshöhen, thermischer Energie etc., andererseits die Auswahl vordefinierter in der Stammdatenbank enthaltenen Quellterme, wie z.B. Freisetzungskategorien aus der Deutschen Risikostudie Kernkraftwerke, Phasen A und B. Das Prognose-Zeitintervall wurde von 12.5 Stunden auf 24 Stunden und die Freisetzungsdauer von 8 Stunden auf 12 Stunden erweitert. Die zeitliche Auflösung beträgt bei Prognoserechnungen 30 Minuten.

Im Prozeß der Integration befindet sich die gesamte meteorologische Modellkette (siehe Abb. 2) bestehend aus

- dem meteorologischen Präprozessor LSP, der Einzelprozessoren zur Verarbeitung sowohl von Meßmast- als auch SODAR- Daten ermöglicht, und den Modulen MCF und LINCOM zur Berechnung von lokalen Windfeldern,

- den Ausbreitungsmodellen RIMPUFF und ATSTEP für Rechnungen im Nahbereich, und
- dem an RIMPUFF und ATSTEP angekoppelten Ausbreitungsmodell MATCH für kontinuierlich anschließende Rechnungen über größere Entfernungen.

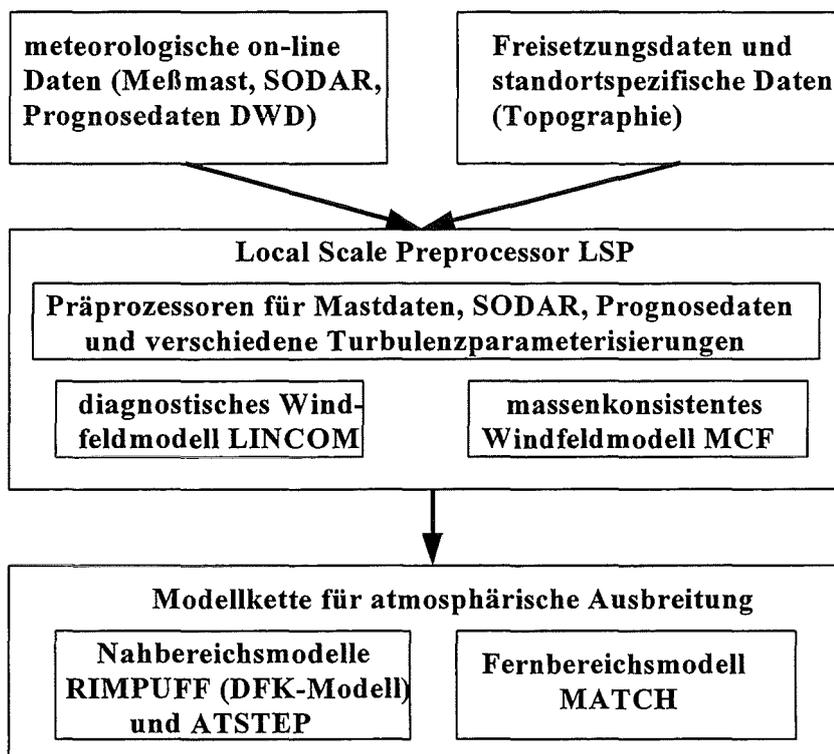


Abb. 2 Modellkette zur Berechnung der atmosphärischen Ausbreitung in RODOS PV 3.0/3.1

Die Arbeiten werden in enger Zusammenarbeit zwischen RISØ, GRS und FZK/INR durchgeführt.

Der Präprozessor für SODAR- Daten wurde von der GRS entwickelt. Bei dem Modul MCF handelt es sich um ein von der GRS zum operationellen Einsatz weiterentwickeltes massenkonsistentes Windfeldmodell. LINCOM berechnet das Windfeld basierend auf den linearisierten Strömungsgleichungen. Beide erzeugen ein divergenzfreies räumliches Windfeld für den Nahbereich. Sie können sowohl mit aktuellen lokalen meteorologischen Meßdaten einer oder mehrerer Meßstationen betrieben

werden, als auch (für Prognoserechnungen) die Vorhersage-Windfelder nationaler Wetterdienste (z.B. Deutschlandmodell des DWD mit einer Auflösung von 14 km) benutzen, um lokale Windfeld-Prognosen unter Einbeziehung der Orographie des Standorts zu bestimmen.

Für die Berechnung der Ausbreitung und Ablagerung freigesetzter Radionuklide stehen zwei Modelle zur Verfügung: ATSTEP, ein vereinfachtes Gauß-Puff-Modell mit Puff-Längen von 10 min im Diagnosebetrieb bzw. 30 min im Prognosebetrieb ("elongated puffmodel") und RIMPUFF97, ein Gauß-Puff-Code. RIMPUFF97 enthält mehrere Verfahren zur Berechnung der Diffusionskategorien einschließlich desjenigen des deutsch-französischen Ausbreitungsmodells, das aufgrund einer Empfehlung der Deutsch-Französischen Kommission zukünftig für Ausbreitungsrechnungen im Fall von kerntechnischen Unfällen anzuwenden ist. Aufgrund der größeren Anzahl betrachteter Puffs ist RIMPUFF besser geeignet Ausbreitungsvorgänge bei inhomogenen Windfeldern zu beschreiben. Vor allem wegen der kürzeren Rechenzeiten wird bei Tests und zu Ausbildungszwecken vorzugsweise der Modul ATSTEP Verwendung finden.

Inzwischen ist auch die Modellkette RIMPUFF/ATSTEP-MATCH realisiert, die es ermöglicht den Transport von radioaktivem Material vom Nahbereich kerntechnischer Anlagen bis an die Grenzen Europas durchzuführen. Die Funktionalität der Modellkette wurde mit den HIRLAM Analyse- und Prognosedaten des Dänischen Meteorologischen Instituts (DMI) getestet. Die Mitte 1998 vorliegende Version 3.1 von RODOS wird die Modellkette RIMPUFF/ATSTEP-MATCH für Ausbreitungsrechnungen vom Nah- bis zum Fernbereich enthalten.

Das Modulpaket FDMT der GSF zur Berechnung radioökologischer Vorgänge - insbesondere in Nahrungsketten - und zur Abschätzung der Dosisbelastung in der Bevölkerung wird in seiner neuesten Version in die Version 3.01 von RODOS Anfang 1998 integriert. Die entsprechende Software in IMIS/PARK basiert auf den gleichen Rechenmodellen und Datensätzen.

In einer im Auftrag des BMU durchgeführten Studie (St. Sch. 4089) wurden Computerprogramme zur Beschreibung des Oberflächenabflusses, des Transports in Fließgewässern und des Verhaltens von Radionukliden in Seen im Hinblick auf ihren ope-

rationellen Einsatz mit dem IMIS-System untersucht. Obwohl derzeit keines der getesteten Programme allen gestellten Anforderungen genügt, wurde die in RODOS integrierte Modellkette als am besten geeignet identifiziert.

2.1.3 Teilsystem CSY zur Simulation von Schutz- und Gegenmaßnahmen

Das Evakuierungssimulationsmodell ECM: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. Softwareverbesserungen, die es ermöglichen, Verkehrsnetzdaten nicht wie bisher aus einer von Hand editierten Datei, sondern aus der geographischen Datenbank einzulesen, wurden abgeschlossen. Existierende Evakuierungsrouten können damit einfach über die graphische Benutzeroberfläche via "mouse-click" eingegeben werden. Der Evakuierungssimulationsteil mußte ebenfalls an die neue Datenstruktur angepaßt werden. Das Konzept hierfür wurde erstellt und die entsprechenden Modifikationen der Software weitgehend abgeschlossen. Die Dokumentation wurde durch eine Modellbeschreibung in deutscher Sprache ergänzt.

Im Programm für die Simulation früherer Schutz- und Gegenmaßnahmen (ECM:EMERSIM) werden in Übereinstimmung mit der Verlängerung der Prognosedauer in ASY von 12.5 Stunden auf 24 Stunden die Maßnahmen „Aufsuchen von Häusern“, „Evakuierung“ und „Einnahme von Jodtabletten“ nun auch über eine Dauer von 24 Stunden nach Freisetzungsbeginn simuliert. Weiterhin wurde das Rechenmodell für die deterministischen gesundheitlichen Schäden durch ein realistischeres Modell ersetzt, das auch die Dosisraten berücksichtigt. Im Aufbau befindet sich die Ausdehnung der Dosisberechnung in ECM:EMERSIM auf weitere Organe, insbesondere das Organ Haut.

Der Modul LCM:FRODO dient zur Simulation von späteren oder langfristigen Schutz- und Gegenmaßnahmen, wie "Umsiedlung", "Dekontamination" und die Vermeidung und Behandlung kontaminierter landwirtschaftlicher Produkte betreffend. In LCM:FRODO wird auch die Berechnung von Individualdosen unter Berücksichtigung dieser Maßnahmen durchgeführt. Die neueste Version von LCM:FRODO wird in der Version 3.01 von RODOS/RESY Anfang 1998 enthalten sein.

2.2 Entwicklung und Durchführung von Trainingskursen für RODOS Benutzer

Vom 18. bis 21.2.1997 fand der erste „Trainingskurs für zukünftige Benutzer des Entscheidungshilfesystems RODOS/RESY im deutschsprachigen Raum“ im FZK/INR statt. Kernstück dieses dreitägigen Kurses waren zwei jeweils eintägige Übungsblöcke zur Bedienung des RODOS Systems im interaktiven Betrieb für den Aufgabenbereich des Katastrophenschutzes. Die Übungsblöcke wurden eingerahmt von zwei halben Tagen Einführung und Demonstration sowohl von allgemeinen und den Katastrophenschutz betreffenden Systemkomponenten als auch von darüber hinausgehenden Modulen zu radioökologischen Berechnungen (ECOAMOR) und Strahlenschutzvorsorgemaßnahmen (FRODO). Der Kurs wurde von 18 Teilnehmern von Behörden und Institutionen des Bundes und der Länder sowie aus Österreich besucht.

Im Zeitraum 18.-21.1.1997 wurde ein im INR organisierter deutschsprachiger RODOS-Kurs für zukünftige Benutzer durchgeführt. Der zweite "Computer-based Training Course on Decision Support for Off-Site Emergency Management in the Early Phase of a Nuclear Accident" fand mit technischer und personeller Unterstützung des INR vom 3.-7. November 1997 in der FTU statt. Ein entsprechender Kurs für die Mittel- und Spätphase eines kerntechnischen Unfalls wird derzeit in Zusammenarbeit von EdF, ECN, IPSN und INR entwickelt.

2.2 Errichtung und Betrieb von RODOS an zentraler Stelle

Die technischen, administrativen und finanziellen Aspekte der zukünftigen Nutzung von RODOS in Notfallschutzzentralen wurden in verschiedenen Gremien des Bundes und der Länder sowie mit Vertretern des BMU diskutiert. Aus den Beratungen resultiert der Beschluß des BMU, das RODOS System in den Jahren 1998/1999 zum operationellen Betrieb durch den Bund und die Länder an zentraler Stelle zu installieren. Die entsprechenden Arbeiten zur Einrichtung des Systems, seine on-line Ankopplung an Datennetze zur Übermittlung meteorologischer und radiologischer Informationen sowie zur Realisierung des passiven und interaktiven Betriebs durch externe Benutzer werden von FZK/INR durchgeführt.

Veröffentlichungen

Ehrhardt, J.; Kelly, G.N.

The RODOS System: Decision Support for Off-Site Emergency Management in Europe

Proceedings of the ANS 6th Topical Meeting in Emergency Preparedness and Response, San Francisco, California, 22-25 April 1997

Brown, J.; Smith, K.; Päsler-Sauer, J.

Simulation of Countermeasures in RODOS

Proceedings of the ANS 6th Topical Meeting in Emergency Preparedness and Response, San Francisco, California, 22-25 April 1997

Popov, A.; Borodin, R.; Pokhil, A.; Zheleznyak, M.; Gofman, D.; Lyashenko, D.; Marinets, G.; Shepeleva, A.; Tkalich, P.; Heling, R.; Raskob, W.

Overview of the Modelling of Hydrological Pathways in RODOS

Proceedings of the ANS 6th Topical Meeting in Emergency Preparedness and Response, San Francisco, California, 22-25 April 1997

Ehrhardt, J.; Brown, J.; French, S.; Kelly, G.N.; Mikkelsen, T.; Müller, H.

RODOS: Real-time On-Line Decision Support System for Off-Site Emergency Management in Europe

International Conference on Severe Accident Risk and Management, SARM97, 16 - 18 June 1997, Piestany, Slovakia

Ehrhardt, J.; Weis, A.

Development of RODOS, a Comprehensive Real-Time On-Line Decision Support System for Nuclear Emergency Management in Europe

FZKA-Bericht 5772, RODOS-R1-1997

32.21.10 Beteiligung am PHEBUS-Projekt

Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse

(W. Hering, W. Sengpiel, S.-O. Smit, IRS)

Abstract

The international PHEBUS FP project is currently one of the most important experimental programs on the field of nuclear safety concerning core degradation processes during severe LWR core melt accidents. FZK/IRS participates in this project by supporting pre-calculations for the preparation of the experiments, by analyses of the experiments, and their interpretation. Key points of experimental information covered by FZK/IRS analyses are:

- the chemical and physical processes during bundle degradation, the material interactions, material composition and masses of a molten pool;
- the hydrogen production by Zry oxidation.

The code SCDAP/RELAP5 is the main tool for the test analyses up to now because of its importance for reactor safety studies. Besides, the ICARE2 code is used also in the frame of code comparison work. Because of the proximity in substance to the PSF project 32.21.08 (Untersuchungen zur Kernzerstörung / In-Vessel-Unfallabläufe) the PHEBUS FP activities are included there in the context of code validation efforts, concerning test analyses results for PHEBUS FPT0 and FPT1. The analyses for PHEBUS FPT0 are documented in [1].

Zusammenfassung

Das PHEBUS FP-Projekt ist gegenwärtig eines der wichtigsten experimentellen Vorhaben zur Untersuchung des Ablaufes und der Konsequenzen eines Kernschmelzunfalles in einem Leichtwasserreaktor. Das internationale Programm wird von Frankreich, der EG, den USA, Japan, Kanada, Korea und der Schweiz finanziell getragen und unter der Leitung von IPSN in Cadarache ausgeführt. Die Versuchsplanung umfaßt insgesamt 6 In-Pile-Versuche im PHEBUS Reaktor, daneben wird das Versuchsprogramm zur Versuchsvorbereitung und -auswertung von einer Reihe kleinerer Einzeleffekt-Tests begleitet, die u.a. im Rahmen des EG-Rahmenprogramms finanziert werden. Die

Ergebnisse aus dem PHEBUS FP-Projekt werden die wissenschaftlichen Kenntnisse über die Ereignisabfolge bei einem Kernschmelzunfall vertiefen und dazu dienen, zuverlässige Unfallfolgenabschätzungen vornehmen zu können, sowie Regeln und Maßnahmen zur Unfallfolgenbeschränkung auf der Basis gesicherter wissenschaftlicher Erkenntnisse festzulegen.

Die von PHEBUS FP gelieferten experimentellen Informationen umfassen:

- (a) die chemischen und physikalischen Prozesse der Kernzerstörung und die resultierende Materialzusammensetzung und Masse des Corium-Schmelzepools (der mit der RDB-Wand eines LWR wechselwirken und diese versagen lassen kann),
- (b) die Wasserstoffproduktion infolge Zry-Oxidation,
- (c) die Eigenschaften und Massen radioaktiver Spaltprodukte und aktivierter Strukturmaterialien, die ins Containment eines LWR transportiert werden können und als radioaktiver Quellterm in die Unfallfolgenabschätzungen eingehen.

In der Tabelle sind einige charakteristische Versuchsbedingungen bzgl. des Bündelverhaltens für die 6 PHEBUS FP-Versuche zusammengestellt.

FPT0	Frischer Brennstoff 9 Tage in-situ vorbestrahlt Ag-In-Cd Absorbermaterial	Oxidierende Atmosphäre mit hohen Dampfmassenströmen 2.2 bar Systemdruck	Versuchsziele u.a. Abschmelzkinetik des Bündels, Verhalten flüchtiger Spaltprodukte in Kreislaufkomponenten (Jodchemie im Containment)
FPT1	Bestrahlter Brennstoff mit 24 MWd/kg U Abbrand	Wie FPT0	
FPT2	Bestrahlter Brennstoff	Reduzierende Atmosphäre mit geringen Dampfmassenströmen	Versuchsziele u.a. Abschmelzkinetik mit metallreichen Schmelzen, Spaltproduktverhalten

FPT3	Noch nicht festgelegt, 3 Optionen: * Wie FPT1, aber mit Borkarbidabsorber * Wie FPT1, bei hohem Systemdruck * Hoher Abbrand >> 24 MWd/kg U		
FPT4	Partikelbett aus Brennstabbruchstücken (4-5 mm Durchmesser), 24 MWd/kg U Abbrand	Geringe Dampf- massenströme Aufheizung des Partikelbetts bis Schmelzepoolbildung	Untersuchung der Freisetzung schwer- flüchtiger Spaltpro- dukte und der Akti- niden aus einem Partikelbett und Schmelzepool
FPT5	Bestrahlter Brennstoff	"Air ingress"-Versuch (entspr. Lufteinbruch in offenen RDB)	Versuchsziele u.a. Oxidations- und Versagenskinetik der Brennstäbe, Ver- halten der schwer- flüchtigen Spalt- produkte (Ru)

Die Beteiligung von FZK/IRS am PHEBUS FP-Projekt bezieht sich z.Zt. auf die Punkte (a) und (b) (s. oben). Dabei wurde bisher vor allem das Rechenprogramm SCDAP/RELAP5 eingesetzt, mit dem Reaktorsicherheitsstudien durchgeführt werden und das dafür u.a. anhand der PHEBUS FP-Experimente validiert wird. Daneben wird - auch im Rahmen eines Codevergleichs - das Rechenprogramm ICARE2 verwendet. Wegen der engen thematischen Anbindung an das PSF-Vorhaben 32.21.08 (Untersuchungen zur Kernzerstörung/In-Vessel-Unfallabläufe) werden dort auch die Ergebnisse von Versuchsanalysen zu FPT0 und FPT1 beschrieben und diskutiert. In [1] sind die Rechnungen mit SCDAP/RELAP5 zu PHEBUS FPT0 und der Vergleich mit den experimentellen Daten dokumentiert. Im folgenden werden die wichtigsten Erkenntnisse aus den bisherigen Arbeiten zu PHEBUS FP-Versuchsanalysen mit SCDAP/RELAP5 zusammengefaßt.

Wir unterscheiden in der simulierten Unfalltransiente eine "frühe" Phase bis etwa in den Zeitbereich der Temperatureskalation durch Zry-Oxidation bei weitgehender Erhaltung der Brennstab- bzw. Bündelgeometrie und eine "späte" Hochtemperaturphase mit massiver Verlagerung oxydischer Materialien und Schmelzepoolbildung [2].

"Frühe" Phase:

Der lokale und zeitliche Temperaturverlauf im Brennstabbündel bestimmt die Abfolge der frühen Versagensmechanismen: Hüllrohrdehnung und -versagen, Hüllrohroxidation, Schmelzen des Absorbermaterials, chemische Wechselwirkung des SS-Absorberstabhüllrohres mit dem Zry-Führungsrohr und Verflüssigung des Zry unterhalb des Zry-Schmelzpunktes, Absorberstabversagen mit Materialfreisetzung und -verlagerung, Auflösung von UO_2 -Brennstoff durch schmelzflüssiges Zry, erste Verlagerungen metallischer (U-Zr-O)-Schmelzen. Dabei werden die Temperaturen im Bündel bei gegebenem lokalen und zeitlichen Leistungsverlauf in den Komponenten durch Konvektion, Strahlungswärmeaustausch zwischen den Komponenten und Wärmetransport (-verluste) über die wärmeisolierende Bündelumhüllung (Shroud) nach außen berechnet. Die Rechnungen zeigten, daß nur bei genauer Modellierung der Wärmeverluste über den PHEBUS-typischen Shroud mit seinen gasgefüllten Spalten zwischen den Shroud-Materialschichten der Temperaturverlauf im Bündel und damit auch der Verlauf der Bündelzerstörung zufriedenstellend berechnet werden kann [1]. Daraus folgt, daß die SCDAP/RELAP5-Modelle die dominanten Versagens- und Zerstörungsmechanismen in der "frühen" Phase gut beschreiben, insbesondere auch die Zry-Oxidation mit der damit einhergehenden Wasserstoffproduktion [1], sofern der Wärmetransport im Brennstabbündel und über die Bündelgrenzen hinweg richtig gerechnet wird - neben der genauen Modellierung der Eigenschaften des PHEBUS-Shrouds darüberhinaus eine Frage der Genauigkeit von Stoffdaten und der Nodalisierung der Anlage. Das für PHEBUS FP entwickelte Shroud-Modell wird auch für die Analysen anderer Bündelversuche (z.B. QUENCH) eingesetzt.

"Späte" Phase:

Massive Brennstoffverlagerungen sind als Folge unterschiedlicher mechanischer und physiko-chemischer Wirkungsmechanismen ab ca.2500 K möglich und in den bisherigen PHEBUS FP-Versuchen beobachtet worden:

- Verlagerung von UO_2 -Bruchstücken als Folge der Destabilisierung der Brennstoffsäule nach Versagen des oxidierten Hüllrohres. Bestrahlter Brennstoff (der Brennstoff von FPT1 hatte einen Abbrand von ca. 24MWd/kg U) kann eine ausgeprägte Rißstruktur und Fragmentierung des Brennstoffs aufweisen; in die Risse kann, begünstigt durch Kapillarkräfte, schmelzflüssiges Zry eindringen, an deren Oberflächen UO_2 auflösen und somit die Beweglichkeit von Brennstofffragmenten fördern. Die Destabilisierung der Brennstoffsäule kann darüberhinaus dadurch zu niedrigeren Temperaturen hin verschoben werden, indem Absorbermaterial mit dem Zry der benachbarten Brennstäbe chemisch wechselwirkt und es unterhalb des Zry-Schmelzpunktes verflüssigt. Dies hat eine Schwächung der mechanischen Festigkeit des Hüllrohres zur Folge und/oder eine Auflösung von UO_2 -Brennstoff unterhalb der Zry-Schmelztemperatur. Dieser Wirkungsmechanismus spielte im Verlauf des FPT0-Experiments sehr wahrscheinlich eine Rolle [1], während bei FPT1 zusätzlich die Pelletfragmentierung abgebrannten Brennstoffs hinzukommt. Die Auswertung des FPT1-Versuchs hat erste massive Brennstoffverlagerungen im Temperaturbereich zwischen 2450 K und 2650 K ergeben, ca. 300 K unter der Schmelztemperatur des (U, Zr) O_2 -Gemisches (s.u.).
- Spätestens bei Erreichen der Liquidustemperatur des pseudobinären Systems UO_2 - ZrO_2 gemäß dem UO_2 - ZrO_2 -Phasendiagramm (~2850 K) beginnt das Abschmelzen der verbliebenen oxydischen Brennstabkomponenten, wobei Abweichungen von der Stöchiometrie beim UO_2 den Schmelzpunkt herabsetzen. Inwieweit geringe Mengen an anderen Oxyden (Fe) in diesem System den Schmelzpunkt beeinflussen können, ist z. Zt. noch nicht klar.
- Die Modelle für die Berechnung der Verlagerung oxydischer Materialien (UO_2 - ZrO_2) in SCDAP/RELAP5 basieren auf der Ermittlung der Liquidustemperaturen mittels des UO_2 - ZrO_2 -Phasendiagramms. Die Verlagerung von Brennstoffpartikeln mittels der oben beschriebenen Wirkungsmechanismen wird nicht berücksichtigt. Derzeit existiert weder ein Modell zur Beschreibung der chemischen Wechselwirkung von verlagertem flüssigem Absorbermaterial mit den benachbarten Zry-Hüllrohren noch ein Modell, das Brennstoffeigenschaften und Brennstoffverhalten in Abhängigkeit vom Abbrand beschreibt. Dementsprechend groß sind - noch die Unterschiede zwischen den experimentell beobachteten bzw. aus den experimentellen Daten abgeleiteten

Szenarien des Brennstabversagens und der Materialverlagerungen bis zur Schmelzpoolbildung und den gerechneten. Hier ist ein großer Bedarf an Modellentwicklung offenkundig.

- [1] S.-O.Smit, W.Sengpiel, W.Hering, "Investigation of the Phebus FPT0 bundle degradation with SCDAP/RELAP5", FZKA 6083, April 1998
- [2] T.J. Haste, et.al., In-Vessel Core Degradation Code Validation Matrix, NEA/CSNI/R (95) 21, OCDE/GD(96)14

32.22 INNOVATIVE SYSTEME

32.22.02 Passive Nachwärmeabfuhr

I. Entwicklung von Thermofluidodynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen

(G. Grötzbach, M. Wörner, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr, W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye; IRS; M. Alef, St. Genz, G. Janßen, M. Linder, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner; HIK; X. Jin; Siemens/KWU)

Zusammenfassung

Die Interpretation des Sumpfkühlexperimentes SUCOS-2D mit dem Rechenprogramm FLUTAN zeigt, daß das Experiment sehr stark durch dreidimensionale Effekte bestimmt ist. Die gefundenen Phänomene werden die Nachrechnung des dreidimensionalen Experimentes sehr aufwendig machen, können andererseits durch geeignete bauliche Gestaltung zur Optimierung des Wärmeübergangs benutzt werden. Die in FLUTAN verwendeten Turbulenzmodelle wurden unter Verwendung von Simulationsergebnissen aus TURBIT deutlich für Naturkonvektion verbessert. Das neue Konzept für die Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmung wurde weiter ausgearbeitet und mit der Realisierung in TURBIT und CFX begonnen. Die numerischen Eigenschaften von CFX wurden an Zweiphasenströmung näher analysiert und Empfehlungen für die Wahl geeigneter Lösungsverfahren und Parameterbereiche erarbeitet.

A. Interpretation der einphasigen SUCOS-Experimente mit FLUTAN

1. Einleitung und Zielsetzung

Für die quantitative Übertragung der Ergebnisse der SUCOS-Experimente [1] zur einphasigen Langzeitkühlung der Kernschmelze im Sumpf des EPR soll das FLUTAN-Rechenprogramm geeignet weiterentwickelt und validiert werden. Insbesondere soll die Eignung von FLUTAN mit Anwendungen auf die entsprechenden Modellexperimente SUCOS nachgewiesen werden und auch zur Interpretation benutzt werden.

Das Rechenprogramm FLUTAN [2] wird bei FZK für die Analyse der passiven Nachwärmeabfuhr in neu konzipierten Reaktorsystemen weiterentwickelt und eingesetzt [3,4,5]. 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 [6,7,8], auf die Verbesserung der Effizienz der verwendeten numerischen Methoden [9,10,11] und auf die Bereitstellung von Methoden für den Einsatz bei Zweiphasenströmung, wie sie z. B. bei der Analyse der Sumpfkühlung erforderlich sind. Die Vorbereitungen zur Nachrechnung der einphasigen zweidimensionalen Experimente SUCOS-2D wurden kurz in [4,10] vorgestellt. Hier wird über die inzwischen abgeschlossenen Rechnungen und die daraus folgende Interpretation dieses Experimentes berichtet.

2. Weiterentwicklung von FLUTAN

Die in den Vorjahren begonnenen Weiterentwicklungen von FLUTAN haben folgenden Stand erreicht: Die zwei neu implementierten $k-\varepsilon-\sigma_t$ Turbulenzmodelle für kleine Reynolds-Zahlen wurden unter Verwendung von Ergebnissen aus direkten numerischen Simulationen überprüft [12]. Das $k-\varepsilon-\sigma_t$ Modell nach Nagano ist besonders für Wandströmungen geeignet, weil es vom Wandabstand abhängige Korrekturfunktionen enthält. Das zweite implementierte $k-\varepsilon-\sigma_t$ 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.

Desweiteren wurden Einzeltermine des TMBF-Modells und sonst gängiger Turbulenzmodelle mittels Analysen von Ergebnissen aus direkten numerischen Simulationen turbulenter Konvektion auf ihre Brauchbarkeit und Verbesserbarkeit untersucht. Die bei Auftriebsströmungen wichtige Transportgleichung für

Temperaturvarianz weist einen recht problematischen Diffusionsterm auf, für den Verbesserungen angestrebt werden sollten [13]. Außerdem wird in dem darin verwendeten Modell für den Vernichtungsterm ein Zeitskalenverhältnis R benutzt, dessen Werte als stark abhängig von Wandabstand und Prandtl-Zahl gefunden wurden. Um den erweiterten Modellierungsaufwand mit unsicherem empirischem Input zu umgehen, wird daher im TMBF von FLUTAN eine separate Transportgleichung für diesen Vernichtungsterm gelöst. Die darin verwendeten Modelle konnten für Naturkonvektion als geeignet bestätigt werden [14]. Die zur Modellierung des turbulenten Impulsaustauschs benutzte k -Gleichung benötigt einen Ansatz für die Diffusion durch Druckfluktuationen. Die Analysen zeigen allerdings, daß dieser Term in Naturkonvektion sehr stark von den Mechanismen der jeweiligen Strömungsart abhängt und in Zukunft entsprechend erweitert werden sollte [15]. Für die zugehörige Dissipationsgleichung wurde aus den Simulationsdaten ein Vorschlag für die Verbesserung der auftriebsbedingten Produktion erarbeitet [16].

Das im Vorjahr entwickelte und analysierte Verfahren zur lokalen Verfeinerung eines strukturierten Gitters wurde in FLUTAN in den Impuls-, der Druck-, der Enthalpiegleichung und den Transportgleichungen des k - ε Turbulenzmodells implementiert [9]. Es wurde an die neueste FLUTAN-Basisversion angekoppelt und an verschiedenen zweidimensionalen Experimenten erfolgreich verifiziert. Die bei HIK entwickelten dafür geeigneten neuen iterativen SOR-Poisson-Gleichungslöser für die Druck- (SORAL) und Energiegleichung (SORALH) wurden übernommen und für FLUTAN bereitgestellt. Sie werden mit und ohne lokaler Gitterverfeinerung (LGV) an verschiedenen zweidimensionalen Beispielen verifiziert und optimiert. 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 [11] und die Umsetzung der Entkopplung der Zeitintegration in den Transportgleichungen von Impuls und Enthalpie realisiert.

Im Rahmen einer Doktorarbeit, die von SIEMENS-KWU finanziert wird, wurden Vorstudien zur Entwicklung eines Verfahrens zur Diskretisierung der Transportgleichungen in komplexen Geometrien mit Hilfe von Körper-angepaßten Koordinaten begonnen. Damit soll eine effiziente und genaue Lösung bei der Gestaltung krummliniger Oberflächen, die bisher in FLUTAN nur durch stufige Ränder modelliert werden können, angestrebt werden. Die Stufendarstellung ist aus Genauigkeitsgründen zu vermeiden. In Zusammenarbeit mit HIK wird die Möglichkeit einer weiteren Beschleunigung des Rechenprogramms und besonders einer Erweiterung des nutzbaren Speichers durch eine Parallelisierung des FLUTAN-Programms mit High Performance FORTRAN untersucht.

Die Arbeiten zur Ankopplung moderner Grafikwerkzeuge wurde abgeschlossen; über die im INR entwickelte VISART-Datenschnittstelle ist es jetzt auch im DCE-Verbund möglich, die Rechenergebnisse mit den unterschiedlichen Standardgrafikpaketen zu analysieren. Die Anforderungen an einen Präprozessor für FLUTAN wurden erarbeitet. Die Erstellung einer neuen flexiblen Datenschnittstelle hat begonnen. Durch Bereitstellen einer graphischen Konvergenzbeobachtung mit der Möglichkeit von Eingriffen durch den Benutzer wird eine Option für einen interaktiven Betrieb des Programmes vorbereitet.

3. Anwendung von FLUTAN auf die zweidimensionalen Sumpfkühlexperimente

3.1 Zweidimensionale Nachrechnungen

Nachdem die Weiterentwicklungen von FLUTAN weit fortgeschritten sind, ist es jetzt möglich, Anwendungsrechnungen zur Untersuchung der Sumpfkühlung durchzuführen. In einem ersten Schritt konzentrieren sich die Arbeiten auf die Nachrechnung und Interpretation der zweidimensionalen Modellversuche SUCOS-2D aus dem IATF zum einphasigen Langzeitverhalten [1]. Dabei wurde zunächst mit Vorstudien der Modellierungsbedarf und Aufwand geklärt [4]; mit genaueren numerischen Abbildungen des Experimentes wird dann eine möglichst gute Reproduktion des Experimentes versucht und die Mechanismen in der Strömung detaillierter analysiert. Aufbauend auf diesen Erfahrungen soll anschließend das dreidimensionale Experiment mit Hilfe des neu implementierten Verfahrens zur lokalen Verfeinerung untersucht und, falls mit dem Rechenprogramm und der vorhandenen Hochleistungsrechnerhardware realisierbar, die Interpretation der Bedingungen im Reaktorsumpf vorgenommen werden.

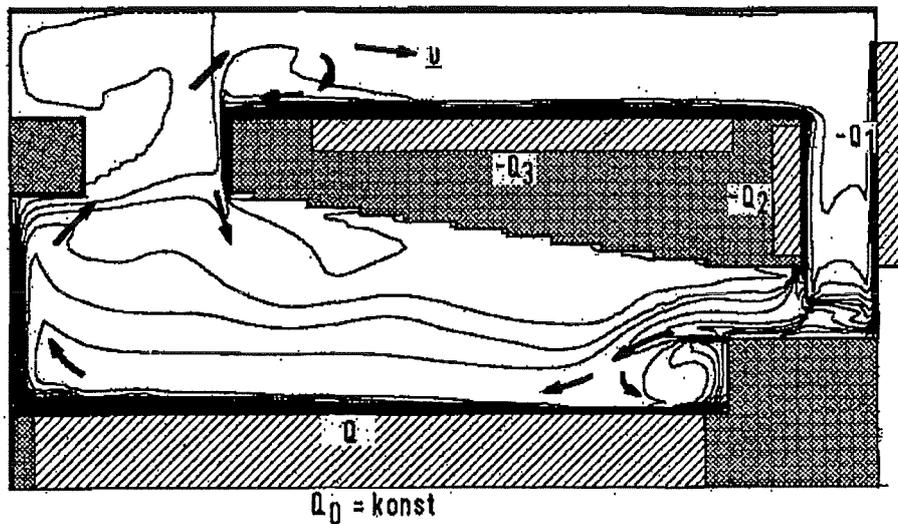


Abb. 1: Wärmetauscheranordnung und mit FLUTAN berechnetes momentanes Isothermenfeld und Strömungswege in SUCOS-2D [4].

Im Experiment SUCOS-2D wird Wasser über eine unten positionierte Heizplatte aus Kupfer, die die Kernschmelze simuliert, mit dem Wärmestrom Q beheizt und durch drei horizontale bzw. vertikale Wärmetauscher mit $-Q_1$, $-Q_2$ und $-Q_3$ gekühlt, Abb. 1. Für eine genauere Überprüfung von FLUTAN und der gewählten numerischen Abbildung des Experimentes, die die Wärmeleitung in allen Strukturen einschließt, wurde aus der Experimentreihe SUCOS-2D ein Experiment ausgewählt, bei dem das über die unten positionierte Heizplatte aus Kupfer beheizte Wasser durch nur einen vertikalen und die beiden oben nebeneinander liegenden horizontalen Wärmetauscher gekühlt wird. Trotz einer qualitativ und quantitativ richtigen Simulation des Geschwindigkeitsfeldes ergeben die zweidimensionalen, wie auch dreidimensionale Nachrechnungen für SUCOS-2D mit 32,6 K eine um 2,5 K höhere mittlere Sumpftemperatur als im Experiment, Abb. 2.

Der Vergleich der berechneten mit den experimentellen Daten der Kühler zeigt, daß die Leistung des vertikalen Kühlers, an dem sich eine sehr dünne Grenzschicht bildet und für den zunächst der Einsatz eines Turbulenzmodells notwendig erschien, auch ohne Turbulenzmodelle gut nachgebildet wird. Die Auflösung der Grenzschichten ist also

ausreichend. Dagegen wird die Leistung der horizontalen Kühler nicht richtig wiedergegeben. Dieses liegt offensichtlich daran, daß sich in der Rechnung eine ausgeprägte stabile Temperaturschichtung auf den horizontalen Kühlern bildet, wie sie in vergleichbarer Ausprägung nicht im Experiment zu finden ist.

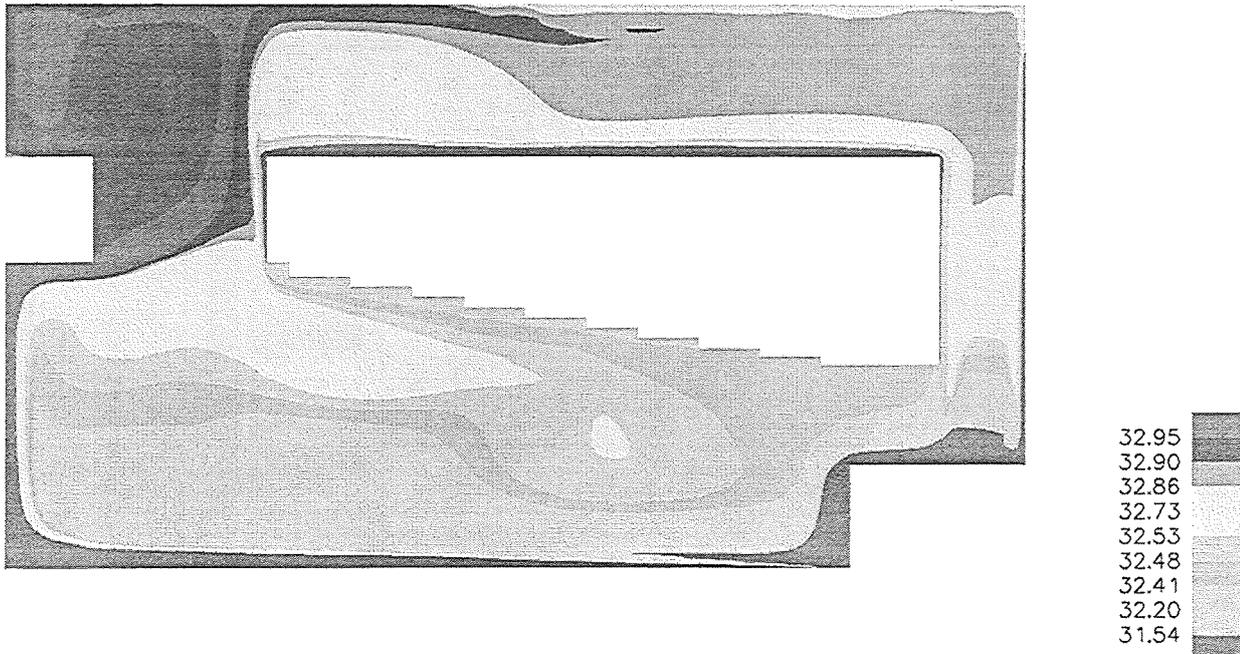


Abb. 2: Mit FLUTAN berechnetes, über 120 s zeitlich gemitteltes Temperaturfeld in °C. Zweidimensionale Nachrechnung von SUCOS-2D. Rechter vertikaler Kühler in Betrieb.

3.2 Dreidimensionale Nachrechnungen

Im Experiment sind im Strömungsgebiet Befestigungsbolzen und Kupferrohre oberhalb der horizontalen Kühler vorhanden, die dreidimensionale Störungen des idealen Scheibenmodells darstellen. Da diese durchaus dazu geeignet sind die Schichtung etwas aufzubrechen, wurde zunächst mit einem groben Abbild dieser Strukturen in einer nun dreidimensionalen Simulation des Scheibenmodells SUCOS-2D geklärt, daß dieses zu einer Verbesserung des Wärmeübergangs am horizontalen Kühler führen kann. Nach diesem qualitativ positiven Ergebnis wurde ein detailliertes Abbild der Strukturen für ein Halbmodell erstellt. Senkrecht zur Bildebene wird Symmetrie mit einer undurchlässigen, nicht haftenden Wand angenommen. Auf den Fluidbereich entfallen ca. 157.000 Maschen, auf die wärmeleitenden Strukturen, wie Wände, PVC-Einbauten, Kupferheizplatte und Tragbolzen entfallen mehr als 62.000 Maschen. Die Kühlerzu- und

Ableitungen haben wie im Experiment keine Isolation und können damit Wärme mit dem Sumpfwasser austauschen. Diese thermische Wechselwirkung wird daher ebenfalls im Rechenmodell zugelassen.

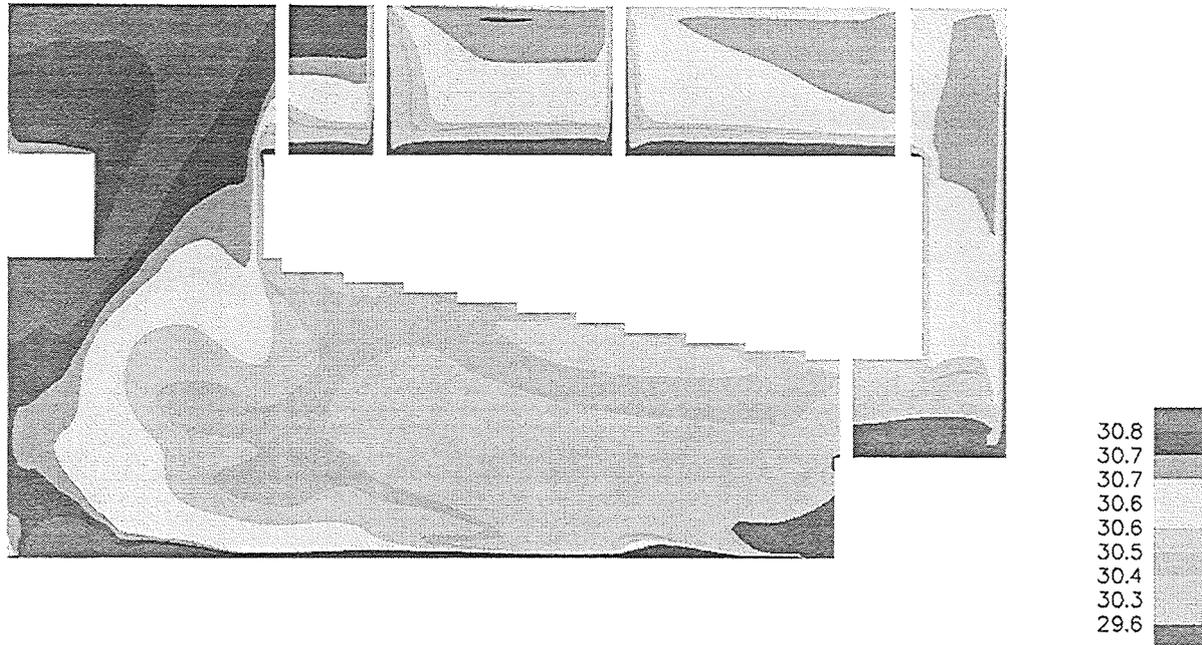


Abb. 3: Mit FLUTAN berechnetes, zeitlich gemittelttes Temperaturfeld in °C.

Dreidimensionale Nachrechnung von SUCOS-2D mit Anschlußrohren auf der Austrittsseite der horizontalen Kühler und Befestigungsbolzen. Rechter vertikaler Kühler in Betrieb.

In der Abb. 3 sind für dieses Rechenmodell die Ergebnisse der zeitlich gemittelten Temperaturfelder von FLUTAN dargestellt. In der abgebildeten Schnittebene sind die Anschlußrohre auf der Austrittsseite der horizontalen Kühler gezeigt. Es wird deutlich, daß die wärmeleitenden Tragebolzen links und rechts das Temperaturfeld etwas beeinflussen. Die Kühlwirkung der Kühleraustrittsrohre dagegen ist erheblich. Sie übernehmen etwa 40% der nach oben abgeführten Wärme und verursachen damit durch Abtriebseffekte eine erhebliche Störung der Strömung; an ihnen bildet sich eine starke Abwärtsströmung aus. Diese bricht die Temperaturschichtung auf und verbessert lokal den Wärmetransport der horizontalen Kühler besonders im Nahbereich dieser Zuleitungen. Während der mittlere Wärmestrom etwas über 1.400 W/m^2 beträgt, werden lokale Maxima von bis zu 1.800 W/m^2 erreicht, Abb. 4. Durch die erhöhte Wärmeabfuhr oben im Bereich der horizontalen Kühler wird die Sumpftemperatur nur noch um ungefähr 0.5 K höher berechnet als die gemessene.

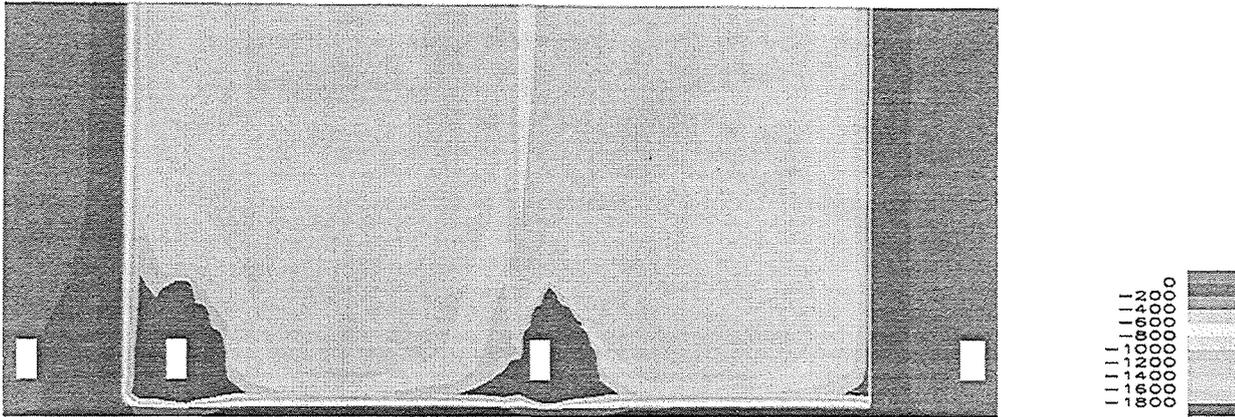


Abb. 4: Mit FLUTAN berechnete, zeitlich gemittelte Wärmestromdichte in W/m^2 auf der Oberfläche der horizontalen Kühler. Dreidimensionale Nachrechnung von SUCOS-2D mit Anschlußrohren (innen) der horizontalen Kühler und Befestigungsbolzen (außen liegend).

In wieweit die mit diesem Rechenmodell gewonnenen Ergebnisse für das Geschwindigkeitsfeld noch realistisch sind, wo doch schon das zweidimensionale Modell trotz zu hoher Temperaturen im Pool gute Geschwindigkeitsprofile erbrachte, muß an Vergleichen von berechneten Geschwindigkeitswerten und gemessenen überprüft werden, Abb. 5. Da in der Rechnung eine Symmetrieannahme gemacht wurde, können für den Vergleich nur die Rechenergebnisse in einiger Entfernung von der Mittelebene mit den Meßwerten für die Mittelebene herangezogen werden. Es zeigt sich, daß die Rechenergebnisse für einen weiten Tiefenbereich (verschiedene y -Werte) recht gut im Streuband der experimentellen Ergebnisse liegen, bzw. sehr gut mit diesen übereinstimmen.

4. Schlußfolgerungen

Die wichtigen Aussagen zu den bisher mit FLUTAN durchgeführten numerischen Analysen von SUCOS-2D sind, daß diese Testanlage nicht zufriedenstellend mit einer zweidimensionalen Rechnung simuliert werden kann, da bedeutende dreidimensionale Vorgänge im Experiment auftreten. Zweidimensionale Rechnungen können das Aufbrechen besonders über die kalten Kühlleitungen der oberen Wärmetauscher nicht abbilden, die aber hier eine wesentliche Intensivierung des Wärmeübergangs am oberen Kühler erbringen. Dieser Effekt wird im Experiment SUCOS-3D wegen der geringeren Flächenanteile der Kühlrohre im Grundriß des Modells einen geringeren Einfluß haben, so daß die dort tatsächlich höher gefundenen Pooltemperaturen auf diesen in der Nachrechnung von

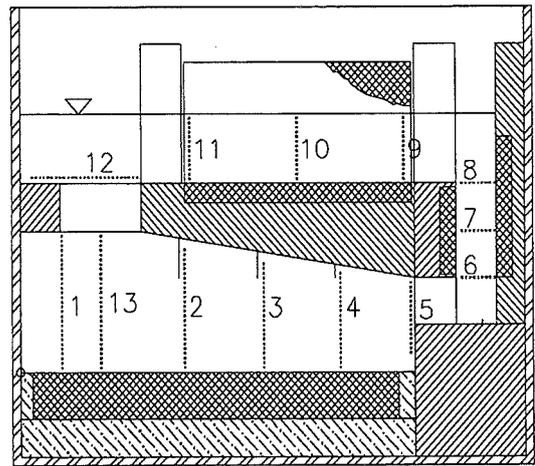
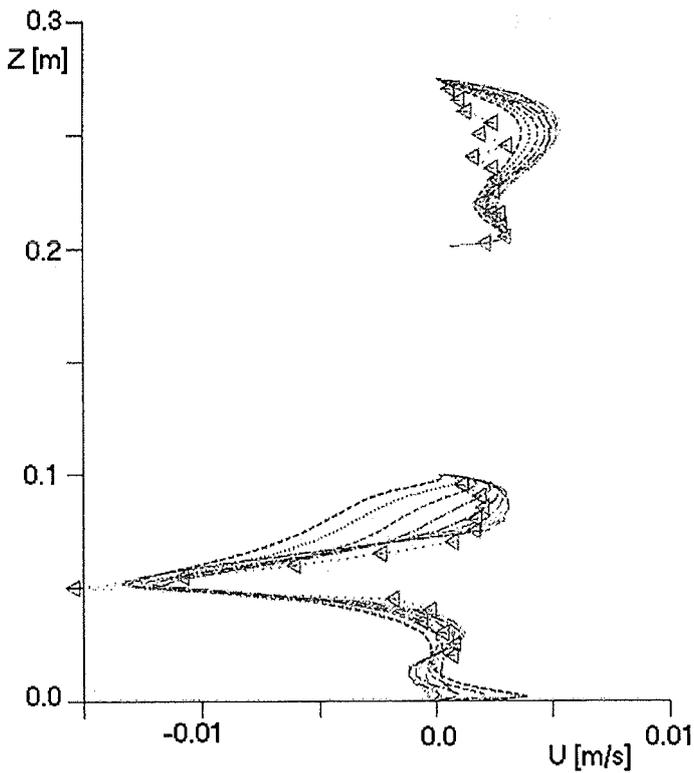
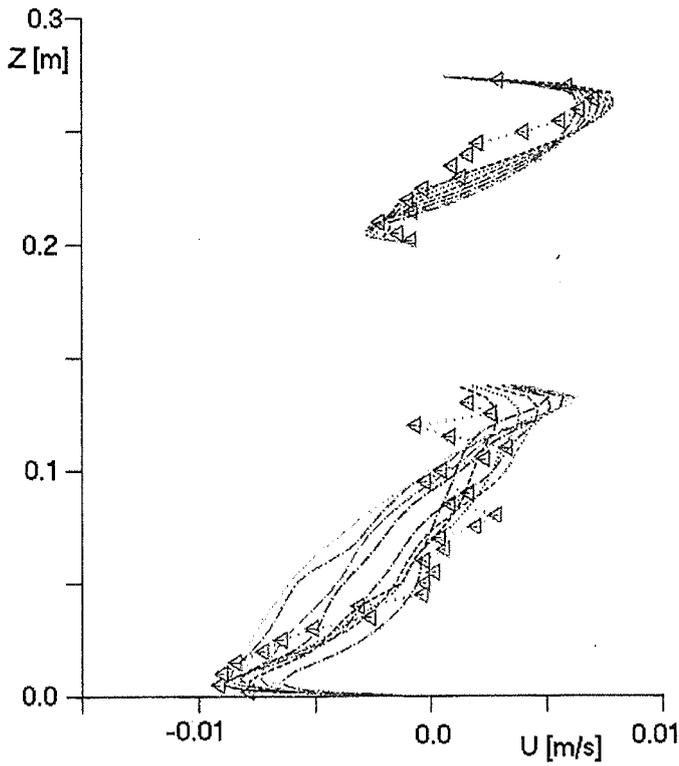


Abb. 5: Vertikale Verteilungen der horizontalen Geschwindigkeit. Vergleich zwischen Meßwerten [1] und dreidimensionalen FLUTAN-Rechnungen mit Anschlußrohren und Befestigungsbolzen. Rechter vertikaler Kühler in Betrieb.

SUCOS-2D gefundenen Aufbrechvorgang zurückzuführen sind. Der Einsatz eines Turbulenzmodells ist nicht notwendig. Die Erfassung der Wärmeverluste und Umverteilung in den Strukturen hat sich bei der Nachrechnung dieser Modellexperimente als absolut notwendig erwiesen. Für die Nachrechnung des dreidimensionalen Experimentes SUCOS-3D heißt das aber, daß diese Effekte, auch wenn sie teilweise von relativ geringerer Bedeutung sind als in SUCOS-2D, dennoch erfaßt werden müssen. Der numerische Aufwand für solche Rechnungen wird also erheblich sein. Die Güte der hier vorgestellten Ergebnisse rechtfertigt diesen Schritt jedoch; das wird dann schließlich den Nachweis erbringen, daß FLUTAN auch für die detaillierte Übertragung der Ergebnisse der Modellexperimente auf die dann aktuelle Sumpfgeometrie des EPR geeignet ist. Die in den bisherigen Rechnungen gefundenen Phänomene können in der Detailkonstruktion der Anlage durchaus zum Erarbeiten von Modifikationen benutzt werden, die bei diesem oder ähnlichen Konzepten zu Verbesserungen der Effizienz der einphasigen Kühlung des Sumpfes führen.

B. Numerische Simulation turbulenter Naturkonvektion

Die Arbeiten am Rechenprogramm TURBIT zur numerischen Simulation von Turbulenz in Kanalströmungen dienen dazu, die im Rechenprogramm FLUTAN verwendeten Turbulenzmodelle auf eine breitere Basis zu stellen. Insbesondere soll mit Hilfe der Ergebnisse der Anwendungsbereich von Turbulenzmodellen auf Naturkonvektion in verschiedenen Fluiden überprüft und methodisch erweitert werden.

Die von TURBIT mit der Methode der direkten numerischen Simulationen (DNS), bei der alle Skalen von Geschwindigkeits- und Temperaturfeld durch das Maschennetz aufgelöst werden, für Rayleigh-Bénard-Konvektion in verschiedenen Fluiden und die Konvektion in einer Fluidschicht mit volumetrischer Wärmequelle zuvor bereitgestellte Datenbasis wurde weiter analysiert. Mit der Zweipunkt-Korrelationstechnik, der Invariantentheorie und den DNS-Daten wurde die Transportgleichung für die Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie, die in gängigen statistischen Turbulenzmodellen eine zentrale Rolle spielt, detailliert untersucht [16]. Ein wichtiges Ergebnis betrifft den Produktionsterm durch Auftriebskräfte in dieser Gleichung, der für Naturkonvektionsströmungen von besonderer Bedeutung ist. Modellvorschläge aus der Literatur für diesen Term tragen bisher dem

Einfluß der molekularen Stoffeigenschaften des Fluides in Form der Prandtl-Zahl Pr nur unzureichend Rechnung. Es wurde ein verbessertes Modell entwickelt, das die Prandtl-Zahl in geeigneter Weise berücksichtigt, Abb. 6.

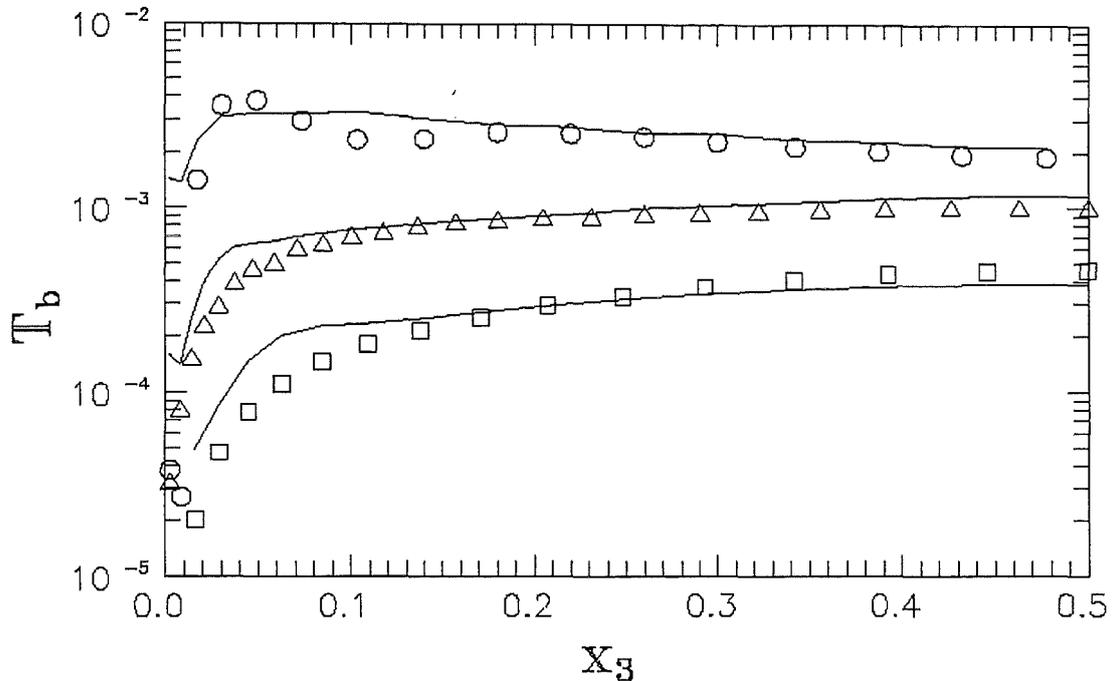


Abbildung 6: Vertikales Profil des Auftriebsproduktionsterms T_b in der Dissipationsgleichung. Vergleich von Modell (—) mit DNS-Daten für Luft (\circ ; $Pr=0.71$) und Natrium ($Pr=0.006$) bei niedriger (\square) und hoher (Δ) Turbulenzintensität in Rayleigh-Bénard-Konvektion; x_3 = dimensionsloser Wandabstand.

Die Überprüfung der Gültigkeit von Ansätzen in empirischen Turbulenzmodellen für die Konvektion in Fluidschichten mit volumetrischer Wärmequelle anhand der DNS-Daten hatte ergeben, daß einfache Gradientenmodelle für den turbulenten Wärmetransport nicht sinnvoll sind [17]. Statt dessen sind Turbulenzmodelle erforderlich, die auf den vollen differentiellen Transportgleichungen für die turbulenten Wärmeflüsse basieren, und nun auch in FLUTAN verfügbar sind. Unter Verwendung der DNS-Daten wurde die entsprechende Gleichung detailliert analysiert, und für verschiedene Schließungsterme die Gültigkeit von Modellansätzen untersucht [18]. Dabei zeigt sich u.a., daß der molekulare Vernichtungsterm ein wichtiger Senkenterm ist, der bei niedrigen und mittleren Turbulenzintensitäten modelliert werden muß und nicht vernachlässigt werden kann.

Analysen der turbulenten Diffusionsterme in Transportgleichungen statistischer Turbulenzgrößen hatten gezeigt, daß bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion der Beitrag von Druckfluktuationen gegenüber dem von Geschwindigkeitsfluktuationen dominiert. Bei dem geometrisch und physikalisch sehr ähnlichen Fall der Konvektion in einer Fluidschicht mit volumetrischer Wärmequelle ist dies dagegen umgekehrt. Für dieses zunächst überraschende Ergebnis wird anhand der jeweiligen makroskopischen Strukturen und dynamischen Vorgänge in beiden Konvektionsschichten eine anschauliche Erklärung gegeben [15]. Ergebnisse dieser Analysen zur Turbulenz in Naturkonvektion sind bereits in Form verbesserter Modelle in FLUTAN eingeflossen, siehe Kapitel A.

Die Weiterentwicklung von TURBIT konzentrierte sich auf das Postprocessing der Daten. Es wurde ein Programm mit graphischer Benutzeroberfläche entwickelt, mit dem in einfacher Art und Weise publikationsfähige Diagrammdarstellungen von Ergebnissen aus TURBIT-Simulationen generiert werden können. Daneben wurde die Schnittstelle von TURBIT zur Visualisierung der dreidimensionalen, zeitabhängigen Ergebnisse mit dem Softwarepaket AVS wesentlich vereinfacht.

C. 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 detailliert simuliert werden können.

Grundlegende numerische Untersuchungen sollen den aus laufenden Experimenten ableitbaren Kenntnisstand zu den Eigenschaften der Turbulenz in Blasenströmungen erweitern und ergänzen. Aus den Ergebnissen der experimentellen und numerischen Untersuchungen werden dann physikalische Modelle abgeleitet, wie sie in anwendungsorientierten Rechenprogrammen für Zweiphasenströmungen benötigt werden.

Für die numerische Berechnung von Zweiphasenströmung wurde ein Konzept erarbeitet, das die von einphasiger Strömung bekannte Methode der Grobstruktursimulation [19] erweitert [20]. Es erfolgt eine Separierung von Turbulenz und Phasengrenzfläche in Grobstruktur und Feinstruktur, siehe Abbildung 7. Das mathematische Konzept basiert auf

den kombinierten Erhaltungsgleichungen von Gesamtmasse, Gesamtimpuls und Gesamtenergie beider Phasen. Zusätzlich wird eine Transportgleichung für die Volumenfraktion der flüssigen Phase und für die spezifische Phasengrenzfläche gelöst. Diese beiden Größen bilden den Ansatzpunkt für die Rekonstruktion der durch das Maschennetz aufgelösten großräumigen Blasen und separierten Strömungsbereiche und für eine detaillierte physikalische Modellierung der nicht durch das Gitter aufgelösten Blasen. Für letztere wird basierend auf der Arbeit [21] eine modifizierte Transportgleichung für die spezifische Phasengrenzfläche eingeführt.

Diese Methode bietet den Vorteil, daß eine Verfeinerung des Maschennetzes automatisch eine Verminderung des Einflusses der empirisch zu modellierenden physikalischen Vorgänge mit sich bringt. Der Modellierungsbedarf kann damit in Abhängigkeit der

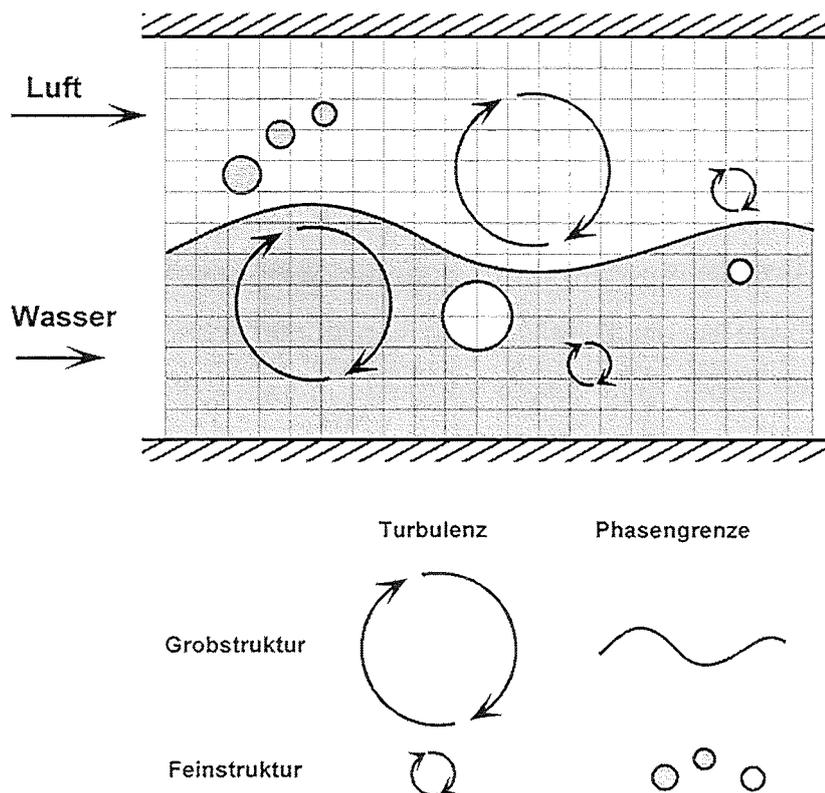


Abbildung 7: Aufteilung von Turbulenz und Phasengrenze in Grob- und Feinstruktur am Beispiel einer Wellenströmung. Bei der skizzierten Maschengröße werden die großräumigen Wirbel und die wellenförmige Phasengrenzfläche durch die Grobstruktur, die kleinräumigen Wirbel und die Tropfenchen und Blasen durch die Feinstruktur beschrieben.

gewählten Maschenweite in Bezug zum Durchmesser der kleinsten Wirbel und dem Durchmesser der kleinsten Blasen in verschiedene Fälle klassifiziert werden. Im speziellen Fall einer sehr feinen Diskretisierung werden sowohl die kleinsten Wirbel als auch die kleinsten Blasen vollständig durch das Gitter aufgelöst („DNS-RBS = direct numerical simulation - resolved bubble simulation“). Der physikalische Modellierungsbedarf ergibt sich hier allein daraus, daß die Vorgänge in unmittelbarer Nähe der Phasengrenze nicht aufgelöst werden. Wichtig sind insbesondere die Zwischenphasenreibungskräfte. Die Entwicklung von lokalen Modellen hierfür stützt sich auf analytische und grundlegende experimentelle Untersuchungen ab. Die detaillierten Anforderungen und Parameterbereiche für entsprechende Labor-Experimente wurden erarbeitet. Für den allgemeinen Fall der Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmung wurde die Größenordnung der verschiedenen Schließungsterme abgeschätzt und eine Klassifizierung in die mit Modellen zu beschreibenden und die vernachlässigbaren Terme vorgenommen.

Zur Durchführung von grundlegenden numerischen Untersuchungen von wenigen Blasen in einem schwach turbulenten Umfeld soll das Rechenprogramm TURBIT um die „DNS-RBS“ Methode erweitert werden. Mit einem ENO-Verfahren für die konvektiven Flüsse und einem Runge-Kutta-Zeitintegrationsverfahren wurden dabei numerische Verfahren hoher Genauigkeit ausgewählt, die sicherstellen, daß Diskontinuitäten in der Zweiphasenströmung nicht unphysikalisch verschmiert werden.

Eine Abschätzung zeigt, daß die „DNS-RBS“ Methode auch mit der angestrebten Anzahl von einigen Millionen Maschen und der Verwendung von Hochleistungsrechnern auf eine kleinere Anzahl von Blasen und schwach turbulente Strömung beschränkt sein wird. Höhere Blasenanzahlen und Turbulenzintensitäten erfordern die Grobstruktursimulation der Zweiphasenströmung. Die Realisierung der allgemeinen Grobstruktursimulationsmethode für Zweiphasenströmung erfolgt unter Verwendung eines kommerziellen Rechenprogramms, an das die physikalischen Modelle angekoppelt werden, und das im wesentlichen als Gleichungslöser dient. Analog zur Erweiterung von TURBIT werden hier zunächst die „DNS-RBS“-Methode und die physikalischen Modelle realisiert und später auf Zweiphasenströmungen in thermischem Nicht-Gleichgewicht erweitert.

Aufgrund der positiven Erfahrungen mit der Testversion wurde das kommerzielle Rechenprogramm CFX beschafft. Zur Bewertung der Genauigkeit und Leistungsfähigkeit des Codes wurde in einer numerischen Studie eine schwingende Manometersäule nachgerechnet, für die eine analytische Lösung bekannt ist. Hauptaugenmerk wurde dabei auf die numerische Diffusion, eine scharfe Phasengrenzfläche und die benötigte Rechenzeit gelegt. Da das Programmpaket eine Vielzahl von Möglichkeiten bietet, wurden verschiedene Parameter wie Gitterauflösung, numerische Verfahren, Zeitschrittweite, Abbruchkriterium, Gleichungslöser und spezielle Optionen für Strömungen mit scharfen Grenzflächen variiert. Die Rechnungen haben gezeigt, daß der wichtigste Parameter zur Beeinflussung der numerischen Dissipation die Zeitschrittweite ist. Mit Hilfe der Abmessung einer Rechenzelle und der Maximalgeschwindigkeit der Strömung im U-Rohr läßt sich eine Courant-Zahl $CFL = u_{\max} \Delta t / \Delta x$ definieren. Abbildung 8 zeigt deutlich die Abnahme der numerischen Dissipation mit kleiner werdenden Courant-Zahlen und die entsprechende Erhöhung der Rechenzeit. Bei der analytischen Lösung ist die Schwingung ungedämpft. Eine zufriedenstellend kleine Dämpfung, d.h. ausreichend geringe numerische Dissipation, wird mit CFX nur mit sehr kleinen Courant-Zahlen erreicht. Als Ergebnis dieser Untersuchung hat sich die prinzipielle Eignung von CFX für die zukünftigen Aufgabenstellungen gezeigt. Die aus der numerischen Studie gewonnenen Erfahrungen erlauben es, die numerischen Optionen und Parameter in CFX so auszuwählen und festzulegen, daß in den geplanten Grobstruktursimulationen von Zweiphasenströmungen die relevanten lokalen, momentanen Phänomene mit der dafür notwendigen Genauigkeit beschrieben werden. Allerdings zeigen die benötigten Rechenzeiten, daß die geplanten Anwendungen den Einsatz von Höchstleistungsrechnern, wie z.B. den Parallelrechner VPP 300, erfordern.

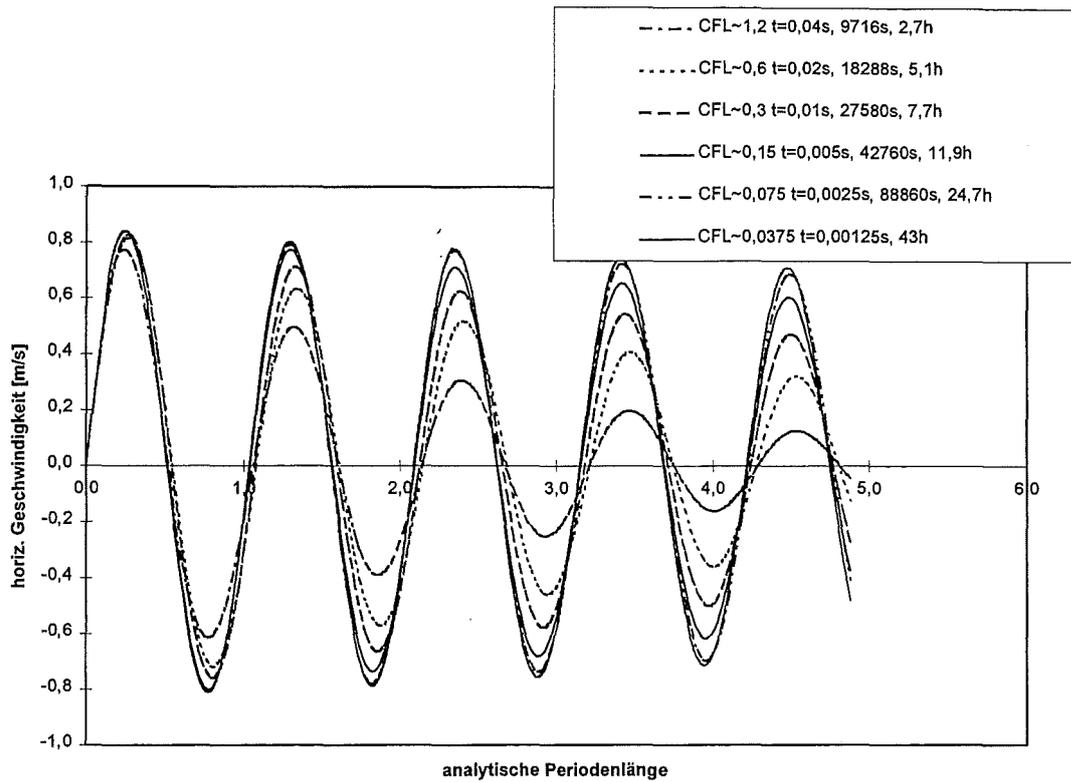


Abb. 8: Einfluß der Zeitschrittweite in Form der Courant-Zahl CFL auf die numerische Dämpfung einer ungedämpften Schwingung in einem U-Rohr Manometer.

Als Vorbereitung einer Verallgemeinerung der „DNS-RBS“ Methode auf die Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen wurde ein Rechenprogramm entwickelt, das für eine vorgegebene Topologie der Blasenströmung für verschiedene Maschennetze die räumliche Verteilung der Volumenfraktion und der spezifischen Phasengrenzfläche liefert. Dieses Programm bildet die Basis für die Entwicklung eines Mustererkennungsalgorithmus, der aus dem bei der Grobstruktursimulation vorliegenden inversen Problem einer vorgegebenen räumlichen Verteilung von Volumenfraktion und spezifischer Phasengrenzfläche die Rekonstruktion der Phasengrenzen leistet.

Literatur

- 1 J. U. Knebel,
SUCO-Programm
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5780, August 1996, pp. 319 - 332
- 2 G. Willerding, W. Baumann,
FLUTAN 2.0 - Input Specifications.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5712, Mai 1996
- 3 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
- 4 G. Grötzbach, M. Wörner, T. Ammann, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr, Y. Kimhi,
W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye, M. Alef, St. Genz, A. Hennemuth, G. Janßen,
M. Linder, D. Seldner
Entwicklung von Thermofluidodynamikprogrammen und ingenieurtechnische
Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1996,
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5963, September 1997, pp. 411 - 427
- 5 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
- 6 L. N. Carteciano,
Entwicklung eines Turbulenzmodells für Auftriebsströmungen.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5775, Dezember 1996
- 7 L. N. Carteciano,
Analysis of a turbulent model for buoyant flows implemented in the 3D thermal-
hydraulic 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

- 8 L. N. Carteciano, D. Weinberg, U. Müller,
Development and Analysis of a Turbulence Model for Buoyant Flows.
Proc. of the 4th World Conf. on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and
Thermodynamics, Brussels, Belgium, June 2-6, 1997. Vol. 3, S. 1339-46. Pisa
Edition ETS.
- 9 T. Ammann,
Entwicklung eines impliziten Verfahrens zur lokalen Verfeinerung eines strukturierten
Gitters.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5864, Januar 1997
- 10 T. Ammann, L. N. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach,
Modellierung der Sumpfkühlung in LWR-Systemen mit FLUTAN.
Jahrestagung Kerntechnik 1997, Aachen 13. - 15.5.1997,
Kerntechnische Gesellschaft e.V., INFORUM Bonn 1997, S. 165-168
- 11 B. Moser
Entkopplung der Zeitintegration bei der Lösung der verschiedenen
Erhaltungsgleichungen des Thermo-Fluidodynamikrechenprogramms FLUTAN.
Fachhochschule Stuttgart, Fachbereich Mathematik, Diplomarbeit am FZK/IRS, Mai
1996
- 12 C. Philippe,
Untersuchung von k-eps-Sigma-t Turbulenzmodellen für kleine Reynolds-Zahlen.
Ecole Nationale Supérieure d'Art et Métiers Paris, Diplomarbeit am FZK/IRS, Juni
1996
- 13 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
- 14 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
- 15 M. Wörner, G. Grötzbach,
Pressure transport in DNS of turbulent natural convection in horizontal fluid layers.
In: „Turbulence, Heat and Mass Transfer 2“, Eds.: K. Hanjalic, T. W. J. Peeters,
Delft University Press, 1997, pp. 351-360
- 16 Q.-Y. Ye, M. Wörner, G. Grötzbach, J. Jovanovic,
Modelling turbulent dissipation rate for Rayleigh-Bénard convection.
In: „Turbulence, Heat and Mass Transfer 2“, Eds.: K. Hanjalic, T. W. J. Peeters,
Delft University Press, 1997, pp. 331-340

- 17 Schmidt, M., Wörner, M., Grötzbach, G.,
Direkte numerische Simulation der Konvektion in einer Fluidschicht mit interner Wärmequelle.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5916, August 1997
- 18 Wörner, M., Schmidt, M., Grötzbach, G.,
DNS of turbulence in an internally heated convective fluid layer and implications for statistical modelling.
Journal of Hydraulics Research, Vol. 35, 1997, pp. 773-797
- 19 Grötzbach, G.,
Direct and large eddy simulation of turbulent heat transfer.
GAMM Jahrestagung, 24. - 27. März 1997, Regensburg, MiniSymposium on Direct and Large Eddy Simulation of Turbulent Flows, Internet http://www.uni-regensburg.de/Fakultaeten/nat_Fak_I/Mennicken/gamm97/gamm97.html
- 20 M. Wörner, A. Blahak, W. Sabisch, G. Grötzbach, D. G. Cacuci,
Ein Konzept zur Grobstruktursimulation turbulenter Zweiphasenströmungen.
Tagung des Fachausschusses Mehrphasenströmungen der Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC), Aachen, 2.-4. März 1998
- 21 A. Blahak,
Modellierung der Transportprozesse für Masse, Impuls und Energie in Zweiphasenströmungen auf der Grundlage der spezifischen Phasengrenzfläche
Diss., Universität Stuttgart, 1997, JRC Ispra, EUR 17719 DE

II. Experimentelle Untersuchungen von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen

(W. Cherdron, G. Grötzbach, J. Aberle, P. Philipp, H. Sauter, M. Simon, I. Tiseanu, IRS)

Abstract

The X-Ray Tomograph, used at the TWOFLEX 1 facility, had been tested for the attainable accuracy and the operation had been improved.

Zusammenfassung

Der bestehende Röntgen-Tomograph an der TWOFLEX 1-Anlage wurde detaillierten Tests unterzogen um Erfahrungen zu sammeln für die Auslegung und Konstruktion des neuen Tomographen, der an der TWOFLEX 2-Anlage eingesetzt werden soll. Die TWOFLEX 2-Anlage wurde vorbereitet für Messungen der Strömungsbedingungen (Geschwindigkeit und Turbulenz) in der Nähe des Einlaufs.

Experimentelle Untersuchungen in turbulenter Zweiphasenströmung

Der Röntgen-Tomograf von TWOFLEX 1 wurde qualifiziert und weiter optimiert. Zunächst wurden die geometrische Auflösung und die Dichte-Auflösung im Detail untersucht. In Probekörpern wurden durch Bohrungen unterschiedlichen Durchmessers (zwischen 1,6 mm und 12 mm) Blasengehalte von 0,05 % bis 12 % simuliert. Die Rekonstruktion der gemessenen Bilder zeigte eine gute Übereinstimmung hinsichtlich Lage und Form der Bohrungen. Eine geometrische Auflösung unterhalb der Pixelgröße (ca. $1,3 \times 1,3 \text{ mm}^2$) wurde erzielt. Bild 1 zeigt die Abbildung und das Histogramm eines rekonstruierten Dichteprofiles durch eine Polyethylen-Probe. Für die Dichte-Auflösung wurden verschiedene Materialien (Plexiglas, PE, PVC und Kombinationen) eingesetzt. Je nach Materialkombination betrug der Fehler bei kleinen simulierten Blasengehalten maximal 10 %, bei höheren Blasengehalten jedoch nur 1 %.

Für die Simulation aufsteigender Blasen wurde eine Probe mit kugelförmigen Hohlräumen im Strömungsrohr auf und ab bewegt. Wie Bild 2 zeigt, konnten auch hier zufriedenstellende Resultate erzielt werden.

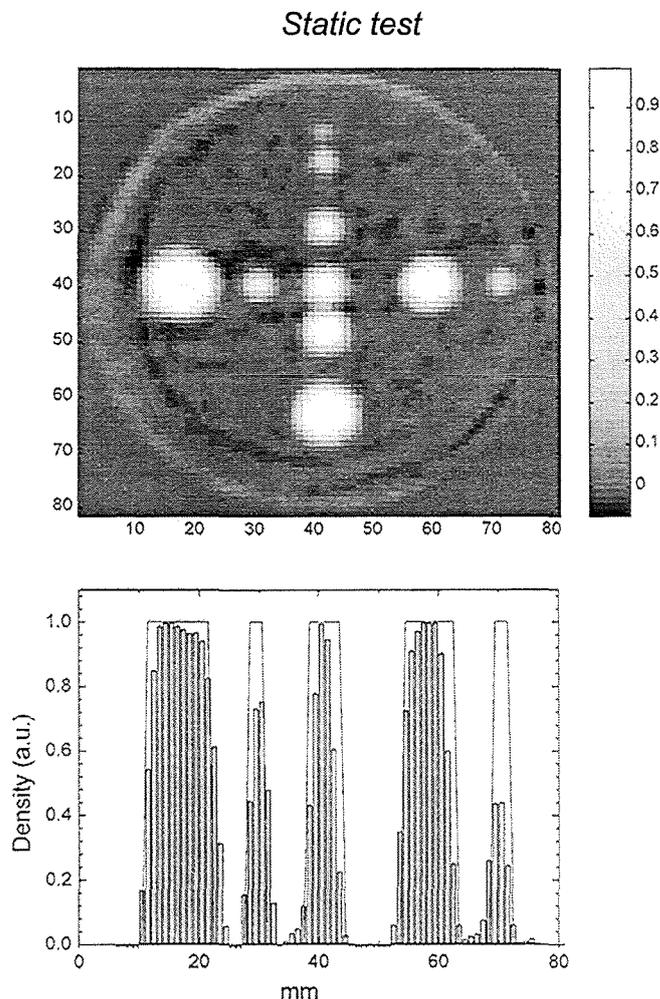


Abb. 1 Rekonstruiertes Bild und Dichtefunktion einer Polyethylen-Probe mit zylindrischen Bohrungen

Auch die Zeitauflösung wurde verbessert. Mit der bisherigen Meßzeit von 10 Minuten waren nur quasistationäre Vorgänge exakt meßbar. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen führten zum Entwurf eines neuen Detektors, der eine Szintillator/Photodioden-Kombination darstellt. Damit sind sowohl kürzere Meßzeiten als auch höhere Ortsauflösungen erreichbar. Dieser Detektor machte eine Neukonstruktion der Abschirmung notwendig. Nach erfolgreicher Strahlenschutzprüfung können nun die ersten Messungen durchgeführt werden.

Dynamic test

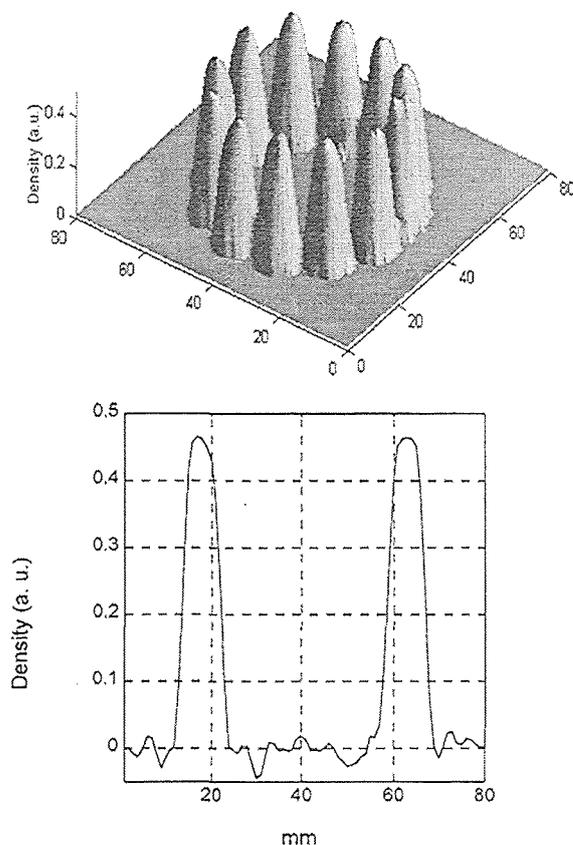


Abb. 2 Rekonstruiertes Bild und Dichtefunktion einer bewegten Probe mit kugelförmigen Hohlräumen

Der Versuchsstand TWOFLEX 2 wurde weiter ausgebaut. Die Montage des Blasengenerators (Luftblasen) ist erfolgt, die Konstruktion der Sondendurchführungen ist beendet. Für die zukünftigen Arbeiten mit Dampfblasen wurden Tests mit einem neuen Dampfblasengenerator durchgeführt. Dazu wurde eine Teststrecke aufgebaut, die aus einem 10 m langen Rohr aus Makrolon (doppelwandig) besteht, das isoliert und beheizbar ist. Da invasive Sonden nur eingeschränkt benutzt werden können, wurde eine optische Einzelblasenerkennung mittels digitaler Bildverarbeitung erarbeitet. Bei dieser Technik folgt eine bewegte Videokamera selbständig einer Blase entlang eines Strömungskanals und ermöglicht so eine kontinuierliche Beobachtung des Blasenverhaltens.

32.22.04 Strukturelle Integrität

I. Untersuchungen an austenitischen Stählen

(B. Bennek-Kammerichs, K. Ehrlich, A. Falkenstein, S. Heger, R. Hübner, M.Schirra, IMF I)

Abstract

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.

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 im niedrigen Spannungsbereich. 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.

1. Einflüsse minorer Legierungselemente auf das Schwellen und das In-pile Kriechen, Bestrahlungsprojekt PFR-M2

1.1 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 6mm Durchmesser und 28mm Länge hergestellt und im Prototype Fast Reactor (PFR) in Dounreay, Schott-

land 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 $106\text{dpa}_{\text{NRT}}$ bei 420°C, $81\text{dpa}_{\text{NRT}}$ bei 500°C und $61\text{dpa}_{\text{NRT}}$ 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.

1.2 Stand der Untersuchungen

Als erste Materialien wurden verschiedene Chargen des austenitischen 15/15CrNi Stahls DIN 1.4970 für die Nachuntersuchungen ausgewählt. Die Dimensionsvermessungen der Druckkapseln zeigten, daß durch die gezielte Wahl der minoren Legierungselemente das Schwellen drastisch reduziert werden kann. Bei 420°C, wo das stärkste Schwellen auftritt, bewirkt die Erhöhung des Si-Gehaltes von 0,4% auf 1,0% eine Erhöhung der Inkubationsdosis, d.h. der Bestrahlungsdosis nach der Volumenschwellen auftritt, um ca. $25\text{dpa}_{\text{NRT}}$. Wird zusätzlich noch der Ti-Gehalt von 0,5% auf 0,3% (Unterstabilisierung) reduziert, reduziert sich die lineare Schwellrate bei gleicher Inkubationsdosis von $0,07\%/ \text{dpa}_{\text{NRT}}$ auf $0,04\%/ \text{dpa}_{\text{NRT}}$ bei $105\text{dpa}_{\text{NRT}}$. Damit weist die Charge mit den besten Schwelleigenschaften nach $105\text{dpa}_{\text{NRT}}$ ein lineares Schwellen von nur 2% auf [1]. Die Analyse der Ausscheidungen, die sich während der Bestrahlung bilden, eröffnet die Möglichkeit, die Mechanismen, die dieses Verhalten verursachen, zu erklären. In der Charge mit dem stärksten Schwellen (0,4% Si, 0,5% Ti) finden sich nach Abschluß der Bestrahlung ($74\text{dpa}_{\text{NRT}}$) nur intragranulare M_{23}C_6 -Ausscheidungen, die oftmals mit den Poren direkt assoziiert sind. Diese Ausscheidungen finden sich in allen Chargen. Erhöht man den Si-Gehalt (1% Si, 0,5% Ti) findet man bei $36\text{dpa}_{\text{NRT}}$, wenn erste Poren beobachtet werden können, neben den M_{23}C_6 auch sehr feine γ' -Ausscheidungen. Diese Si-haltigen Ausscheidungen (Ni_3Si) werden häufig in austenitischen Stählen beobachtet. Untersucht man jedoch Proben derselben Charge nach Abschluß der Bestrahlung bei $105\text{dpa}_{\text{NRT}}$, so findet man keine γ' -Ausscheidungen mehr. Statt dessen treten Ausscheidungen der G-Phase ($\text{Ni}_{16}\text{Si}_7\text{Ti}_6$) auf. Diese Ausscheidungen sind wesentlich größer als die beob-

achteten γ' -Ausscheidungen. Die Reduktion des Ti-Gehaltes scheint die Auflösung der γ' und die Bildung der G-Phase zu verhindern, denn in der Charge mit der besten Schwellresistenz (1% Si, 0,3% Ti) werden auch bei 105dpa_{NRT} noch γ' -Ausscheidungen gefunden. Dieses Verhalten läßt sich folgendermaßen erklären: Durch die Erhöhung des Gehaltes an schnelldiffundierendem Silizium erhöht sich auch die Leerstellenbeweglichkeit. Dies führt zu einer kleineren Leerstellenübersättigung, was wiederum die Porenbildungsrate reduziert. Das Silizium ist jedoch nur wirksam, solange es in der Matrix gelöst ist. Durch die Bildung der Si-haltigen γ' wird der Si-Gehalt in der Matrix reduziert und die Porenbildung beginnt. Dieser Effekt erklärt die vergrößerte Inkubationsdosis bei erhöhtem Si-Gehalt. Da an der Matrix-Ausscheidungsgrenzfläche die Punktdefektrekombination erhöht ist, tritt bei den sehr feinen γ' -Ausscheidungen eine stärkere Punktdefektrekombination auf, als bei den gröberen Ausscheidungen der G-Phase. Diese höhere Punktdefektrekombinationsrate bewirkt wiederum eine reduzierte Leerstellenübersättigung, wodurch die Porenwachstumsrate reduziert wird. Dies bewirkt die kleinere Schwellrate der Charge mit reduziertem Ti-Gehalt. Diese Untersuchungen zeigen, daß das bestrahlungsinduzierte Schwellen durch geeignete Wahl der Gehalte an minoren Legierungselementen drastisch reduziert werden kann. Hierbei sind nicht nur die Auswirkungen der Legierungselemente auf die Leerstellenbeweglichkeit zu berücksichtigen, sondern auch die Form und Verteilung der bestrahlungsinduzierten Ausscheidungen.

[1] Jahrestagung Kerntechnik '98, München
Tagungsband Beitrag 511, S. 737 - 740

2. Untersuchungen an Strukturmaterialien

2.1 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

2.2 Stand der Untersuchungen

Im Jahresbericht 1996 wurde detailliert über die Ergebnisse von Kriechversuchen mit stufenweiser Belastung und die Kriechversuche im niedrigen Spannungsbereich bei 550°C und 600°C bis zu 40 000 h Laufzeit berichtet [1]. Die Versuche haben mittlerweile 50 000 h Laufzeit überschritten und werden planmäßig weitergeführt. Die in Abb. 1.2 [1] erstmals dargestellte Tendenz, daß z.B. die Spannungsabhängigkeit der minimalen Kriechgeschwindigkeit $\dot{\epsilon}_{pmin}$ im auslegungsrelevanten Spannungsbereich ($< R_{p0,2}$) sich deutlich ändert, wird erhärtet. Daraus folgt, daß sich der Spannungsexponent von > 10 auf einen Wert < 7 erniedrigt, also mit deutlich höheren Kriechgeschwindigkeiten gerechnet werden muß, als vom höheren Spannungsniveau bisher extrapoliert wurde. Daß auch die technologisch wichtigen Zeit-Dehngrenzen (0,01-1%) z.T. deutlich früher erreicht werden, bedarf noch einer wesentlichen Verlängerung der bisher erreichten Versuchszeiten.

[1] FZKA 5963, Sept. 1997, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Veröffentlichungen

M. Schirra: "Untersuchungen zum Kriechverhalten am Strukturwerkstoff 316-L(N) im niedrigen Spannungsbereich bei 550° und 600°C". Jahrestagung Kerntechnik '97, Aachen, Beitrag 506, S. 656-659

II. Charakterisierende Werkstoffuntersuchungen von Strukturmaterialien
(R. Schmitt, M. Pfeifenroth, IMF II)

Abstract

The creep-fatigue behaviour of AISI Type 316 L(N) plate material has been investigated in the temperature range of 450°C to 750°C performing axial strain controlled test with GRIM specimens. A newly developed damage model for time dependent damage was applied to describe the failure behaviour of AISI 316-CL in the cyclic tests performed. 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.

Zusammenfassung

Um das Kriech-/Ermüdungsverhalten des Strukturwerkstoffes AISI 316-CL zu untersuchen, wurden dehnungskontrollierte Ermüdungsversuche mit GRIM-Proben im Temperaturbereich 450 bis 750°C durchgeführt. Mit Hilfe eines neu entwickelten Schädigungs-Modells erfolgte die Beschreibung des Versagensverhaltens des Werkstoffes AISI 316-CL. Die mit dem neuen Modell berechneten Ergebnisse wurden mit den Werten verglichen, die mit der häufig benutzten Summenregel des französischen Regelwerkes RCC-MR und dem amerikanischen ASME-Code berechnet wurden.

Kriechermüdungsverhalten von Reaktorwerkstoffen

Zur Beschreibung des Versagensverhaltens bei kombinierter Kriech-Ermüdungsbeanspruchung gibt es eine Vielzahl von Ansätzen. Überwiegend verwendet wird - speziell bei Genehmigungsverfahren für Reaktoren - die lineare Summenregel, die auch in dem „Boiler Pressure and Vessel Code“ der amerikanischen „Society of Mechanical Engineers“ (ASME) und dem französischen Regelwerk RCC-MR enthalten ist. Bei der linearen Summenregel, die auf der schon etwas älteren Palmgren-Miner-Regel basiert, wird zwischen *zeitabhängiger* Schädigung (Kriechen) und *zeitunabhängiger* Schädigung (Ermüdung) unterschieden.

Die experimentellen Ergebnisse der Haltezeitversuche bei 550°C, die im Rahmen eines gemeinsamen Projektes mit dem „Materials Testing Department“ von ECN Petten, Nie-

derlande (M. de Vries und M. Horsten), durchgeführt wurden, sind in Abb. 1 mit nach der *linearen Summenregel* berechneten Werten verglichen. Dabei zeigt sich keine sehr gute Übereinstimmung der Rechnungen mit dem Experiment. Dies gilt sowohl für den Referenz-Zustand (offene Symbole) als auch für die bestrahlten Proben (geschlossene Kreise).

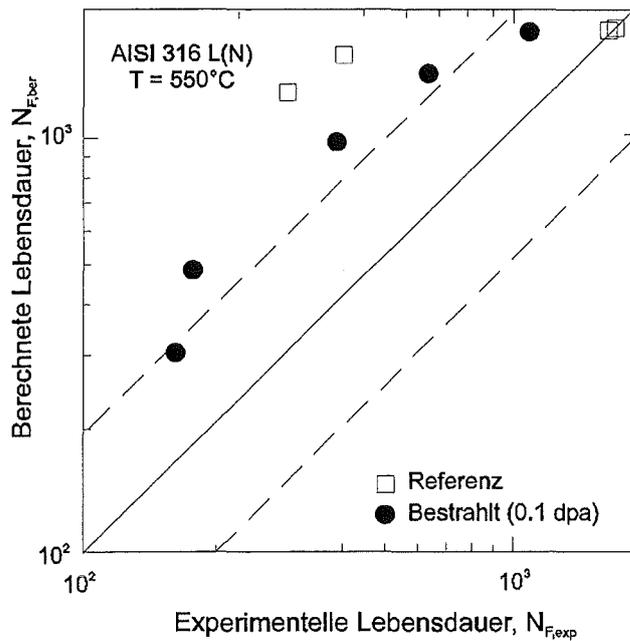


Abb. 1 Vergleich von experimentellen mit nach der linearen Summenregel berechneten Bruchlastwechselzahlen am Werkstoff 316-CL (Creusot-Marrel-Charge)

Wertet man die Versuche mit Hilfe des *ISRM-Modells* (*Inelastic Strain Rate Modified-model*) aus, so erhält man eine bessere Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment bezüglich der Lebensdauer.

Sie liegt innerhalb eines Streubandes von einem Faktor 2 (s. Abb.2). Bei dem ISRM-Modell wird die Schädigung *einheitlich*, d.h. ohne explizite Unterscheidung zwischen Kriech- und Ermüdungsanteil, berücksichtigt.

32.22.06 Untersuchungen zum Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme

(W. Pfrang, B. Porscha, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)

Diese Arbeiten umfassen den Beitrag des Forschungszentrums Karlsruhe zum CABRI-FAST bzw. CABRI-RAFT Programm, das in internationaler Zusammenarbeit mit dem französischen IPSN und dem japanischen PNC durchgeführt wird. Die Experimente dieses Programms zielen auf die Untersuchung des transienten Verhaltens von Brennstäben mit Hohltabletten unterschiedlichen Durchmessers, unterschiedlichen Abbrands und unterschiedlicher Vorbestrahlungsgeschichte. Nach wie vor stehen zwei Fragestellungen im Mittelpunkt: Die Ermittlung des Brennstabverhaltens bis zum Brennstabversagen bei langsamen Leistungstransienten (Steigerung der nominellen Leistung um 1% pro Sekunde) und der Einfluß des Zentralkanals auf die Brennstoffbewegung vor und nach Brennstabversagen bei schnellen Leistungstransienten. Die Qualifizierung der neu entwickelten theoretischen Modelle zur Beschreibung dieser Phänomene stand im Mittelpunkt der Arbeiten (siehe 32.23.03).

Zur Evaluierung des Verhaltens von Brennstäben mit Hohltabletten wurden die Analysen auf neuere Experimente ausgedehnt, bei denen Brennstäben der SCARABIX-Vorbestrahlungsserie langsame Leistungstransienten aufgeprägt wurden. Im Experiment MF2 mit einem SCARABIX-Brennstab wurde die lineare Leistung ausgehend von 396 W/cm bis zum maximal im CABRI-Reaktor erreichbaren Wert von 1247 W/cm gesteigert. Der Brennstab blieb intakt, da bei einer linearen Leistung von 1100 W/cm der Druck in der Schmelzkavität durch axiale Expansion der Schmelze innerhalb des Brennstabs abgebaut wurde und nicht durch plastische Deformation des Hüllrohrs. Die zeitliche Entwicklung des Brennstoffenthalpieniveaus wurde von der Rechnung richtig wiedergegeben. Die axial gerichtete Schmelzeexpansion kann mit SAS4A.Ref96 nicht berechnet werden. Die berechneten plastischen Hüllrohrdeformationen lagen oberhalb der gemessenen, führten aber auch in den Rechnungen nie zu Brennstabversagen.

Im Experiment RB1 wurde einem besonders präparierten Brennstab eine langsame Leistungstransiente ausgehend von einer linearen Leistung von 395 W/cm aufgeprägt. Bei

einer linearen Leistung von 841 W/cm wurde für 70 s ein Leistungsplateau eingestellt. Während dieser Zeit wurde der Kühlmittelmassendurchsatz anfänglich schnell auf ein Niveau von etwa 50% des nominellen Durchsatzwertes reduziert. Der RB1-Brennstab hatte an der axialen Position maximaler Leistung eine künstlich aufgebrachte Vorschädigung des Hüllrohrs. Untersucht werden sollte, ob bei kleinen Schmelzfraktionen des Brennstoffs ein Brennstoff-Spaltgasgemisch in den Kühlkanal ausgespritzt wird und nachfolgend die Kühlbarkeit des Brennstabs gefährdet ist. Das Experiment war insofern erfolgreich, als der Brennstab an der vorgesehenen axialen Position versagte, aber erst beim Abfahren der linearen Leistung Spaltgas aus dem Brennstab austrat. Den Zeitpunkt des Brennstabversagens aus den Meßdaten zu ermitteln ist außerordentlich schwierig.

Die Meßdaten der Mikrophone lassen vermuten, daß Brennstabversagen am Ende der Leistungstransiente erfolgte, unter Umständen als Folge der ersten schnellen Kühlmitteldurchsatzreduktion. Die Schmelzeverteilung im Brennstoff zeigt, daß nur sehr kleine Anteile geschmolzen waren. Schmelzbeginn war erst spät in der Transienten, d.h. im zweiten Drittel des Leistungsplateaus. Die Nachrechnung des Experiments mit SAS4A.Ref96 und dem modifizierten DEFORM-4C Modul lieferte Ergebnisse, die mit dem Experiment unter der Annahme übereinstimmen, daß der Wärmeübergangskoeffizient vom Brennstoff zum Hüllrohr am Anfang der Leistungstransiente aufgrund hoher Kontaktdrücke sehr stark ansteigt, d.h. der Einfluß von Oberflächenrauigkeiten an der Grenzfläche Brennstoff-Hüllrohr vernachlässigbar ist.

Die erneut durchgeführten Analysen von Experimenten des CABRI-1/2 und CABRI-FAST Programms führten auch zu einer wesentlich besseren Übereinstimmungen zwischen Rechnung und Experimenten, so daß DEFORM-4C heute als experimentell weitgehend validiert angesehen werden kann.

32.22.07 Containmentuntersuchungen für innovative Systeme

KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Resuspension

(J. Minges, W. Schütz, IRS; M.K. Koch, RUB-NES)

Zusammenfassung

Die Wiederfreisetzung schwerflüchtiger Substanzen aus Flüssigkeiten (nasse Resuspension oder Reentrainment) kann als Langzeitbeitrag zum radiologischen Quellterm nach einem Unfall mit Kernzerstörung eine wichtige Rolle spielen. Im Versuchsprogramm KAREX wurden Laborexperimente zur Freisetzung verschiedener Metallpulver aus einem Wasserpool über Jettropfen aus zerplatzenden Gasblasen durchgeführt. Zunächst wurden die Jettropfen charakterisiert im Hinblick auf den zeitlichen Ablauf der Entstehung, die Größenverteilung und die Sprunghöhe. Die experimentellen Werte wurden mit Ergebnissen des RUB-Codes RESUS verglichen. Danach wurden Experimente zur Freisetzung von Metallpulver (Fe, Cr, Zn, Cu, Ag bei Korngrößen von 2 μm bis 50 μm) über aufplatzende Gasblasen von 1,25 mm bis 4,1 mm Durchmesser durchgeführt. Dies geschah bei zwei verschiedenen Randbedingungen. Im ersten Fall befand sich eine dünne Schicht des Metallpulvers auf der Flüssigkeitsoberfläche. Im zweiten Fall wurde eine annähernd homogene Suspension erzeugt. Die Versuche mit einer Oberflächenschicht hatten orientierenden Charakter. Bei den Versuchen mit einer Suspension konnten hingegen die Konzentrationsverhältnisse in den Jettropfen und im Pool bestimmt und verglichen werden. Ein wichtiges Ergebnis ist, daß die über die Jettropfen ausgetragene Konzentration in den meisten Fällen von gleicher Größenordnung ist wie die Poolkonzentration. Die RESUS-Rechnungen bei RUB wurden auf sehr kleine Blasen- bzw. Jettropfen-größen erweitert. Mit den Arbeiten zur Berechnung der Filmtropfenbildung beim Zerplatzen größerer Blasen wurde begonnen.

1. ÜBERBLICK

Bei der Betrachtung radiologischer Quellterme sind Kurzzeit- und Langzeitbeiträge zu beachten. Normalerweise gilt das Interesse den „intensiven“ Kurzzeitbeiträgen. Die Langzeitbeiträge haben meist geringe Massenstromdichten, aber sie können

über lange Zeiträume (Monate, Jahre) aktiv sein und deshalb eine besondere Bedeutung erlangen. Ein wichtiger Langzeitbeitrag ist die Wiederfreisetzung von bereits abgedehntem Material.

Zwei Arten der Wiederfreisetzung sind zu unterscheiden: Zunächst gibt es die „trockene Resuspension“ von abgelagerten Partikeln durch turbulente Gasströmungen. Darüber hinaus gibt es die „nasse Resuspension“, zur Unterscheidung oft auch als „Reentrainment“ bezeichnet, bei der bereits abgedehntes Material aus Wasserpools (z. B. dem Sumpfwasser) über Flüssigkeitströpfchen wieder in die Containmentatmosphäre ausgetragen wird. Durch Resuspension bzw. Reentrainment können, weil es sich um mechanische Prozesse handelt, auch schwerflüchtige Substanzen freigesetzt werden. Voraussetzung ist, daß sie in Partikelform vorliegen (z. B. UO_2 -Pulver) oder in der Flüssigkeit gelöst sind (z. B. Salze). Ein Reentrainment aus der flüssigen Phase ist auf folgenden Wegen möglich:

1. Bei Gasströmung parallel zur Flüssigkeitsoberfläche können Tropfen von Oberflächenwellen mitgerissen werden.
2. Bei hohen Gasvolumenströmen innerhalb der Flüssigkeit (z. B. bei heftigem Sieden) erfolgt der Austrag durch Flüssigkeitsabscherung von den Wänden zusammenhängender Gaskanäle (Churn-Turbulent-Flow).
3. Bei niedrigen Gasvolumenströmen, d. h. bei aufsteigenden Einzelblasen, werden nach dem Blasenzerplatzen an der Flüssigkeitsoberfläche Tröpfchen erzeugt, die in die Atmosphäre gelangen und Material aus oberflächennahen Schichten mitführen können. Hierbei ist zu beachten, daß man in oberflächennahen Schichten oft eine Anreicherung schwerflüchtiger Substanzen beobachtet.

Die Aktivitäten zur Untersuchung radiologischer Quellterme, derzeit speziell zum Thema Wiederfreisetzung aus Flüssigkeiten, werden im IRS unter der Bezeichnung KAREX (Karlsruher Reentrainment-Experimente) weitergeführt. Im KAREX-Programm sollen die o. g. mechanischen Prozesse im Detail untersucht und in ihren Auswirkungen interpretiert werden. Theoretische Arbeiten dazu wurden als Entwicklungsauftrag an die Ruhr-Universität Bochum (RUB) vergeben. Dies hat

inzwischen zur Erstellung des Rechenprogrammes RESUS mit den Modulen BUBGROW, BUBSHAPE und BUBBURST geführt. Damit kann die Bildung von Jettropfen (als Träger schwerflüchtiger Substanzen) beim Aufplatzen von Gasblasen berechnet werden. RESUS soll später in die LWR-Version der Programmsysteme CONTAIN und MELCOR eingebaut werden.

Das KAREX-Versuchsprogramm besteht zunächst aus Laborexperimenten, in denen das Aufplatzen von Gasblasen an der Oberfläche eines Wasserpools, die dadurch erzeugten Jettropfen und die Mitführung schwerflüchtigen, partikelförmigen Materials in diesen Tropfen untersucht werden. In einer späteren Phase werden auch die Filmtropfen untersucht, die beim Zerplatzen der Blasenlamelle entstehen. Ein Versuchsstand für Experimente im technischen Maßstab für reaktorspezifische Experimente mit hohen Gas- bzw. Dampfvolumenströmen befindet sich zur Zeit in der Aufbauphase.

Die KAREX-Versuche sind u. a. für die Erfassung des Langzeitquellterms beim EPR von Bedeutung. Im EPR-Design ist vorgesehen, daß sich die Kernschmelze außerhalb des Reaktordruckbehälters auf einer ca. 170 m² großen Fläche bis zu einer stabilen, kühlbaren Konfiguration ausbreiten kann. Zur langfristigen Kühlung (Monate bis Jahre!) wird die Schmelze mit Wasser überdeckt (Wasserhöhe ca. 2 m). Durch den Nachwärmeeintrag Schmelze-Wasser (Größenordnung 100 kW/m²) wird ein Langzeit-Sieden mit entsprechenden Reentrainmentprozessen aus dem Pool in das Containment aufrechterhalten. Das Reentrainment kann wegen des langen Freisetzungszeitraumes einen wesentlichen Beitrag zum Quellterm leisten.

2. KAREX-LABORVERSUCHE

Im Berichtszeitraum wurden Laborexperimente zur Wiederfreisetzung verschiedener Metallpulver aus Wasser über Jettropfen aus zerplatzenden Gasblasen durchgeführt.

Zunächst wurden die Jettropfen charakterisiert und die experimentellen Werte mit RESUS-Berechnungen verglichen. Oberflächenkonturen einer zerplatzenden 2,7 mm-Blase bis zur Tropfenablösung wurden mit Hilfe von Hochgeschwindigkeits-

Videoaufnahmen erstellt. RESUS gibt die Konturen relativ gut wieder. Der Zeitpunkt der Tropfenablösung wird geringfügig überschätzt.

Die Größe der Jettropfen mit den entsprechenden Verteilungen wurde für Gasblasen von 1,4 mm bis 4,1 mm Durchmesser bestimmt. Die mittlere Tropfengröße steigt dabei von 0,25 mm bis 0,83 mm an (grob: ca. 1/5 Blasendurchmesser). RESUS liefert bei kleinen Blasen gute Übereinstimmung, bei großen Blasen jedoch etwas zu geringe Werte. Hierbei ist allerdings zu beachten, daß die Experimente stets eine Größenverteilung liefern.

Die Sprunghöhe der Jettropfen zeigt ebenfalls eine Verteilung mit Maximalwerten von 14 cm bei 3,1 mm-Blasen und 22 cm bei 1,25 mm-Blasen. Ab einer bestimmten Sprunghöhe reicht die Gesamtenergie zur Ausbildung und Ablösung eines zweiten Tropfens aus, z. B. ab 11 cm bei 1,25 mm-Blasen. RESUS berechnet die kinetische Energie der Jettropfen und könnte somit auch die Sprunghöhe errechnen. Dies geschieht in der aktuellen Version noch nicht.

Mit Pulver von Fe, Cr, Zn, Cu und Ag bei verschiedener Korngröße (2 μm bis 50 μm) wurden Resuspensionsversuche zu zwei Szenarien durchgeführt. Im ersten Fall befand sich das Metallpulver als dünne Schicht auf der Flüssigkeitsoberfläche, im zweiten Fall wurde eine annähernd homogene Suspension erzeugt. Mit Hilfe chemischer Analysen konnte in fast allen Fällen ein deutlicher Resuspensionseffekt nachgewiesen werden.

Die Versuche mit der Oberflächenschicht hatten orientierenden Charakter. Mit den verwendeten Metallpulvern konnte in nahezu allen Fällen eine stabile Schicht erzeugt werden. Die Effekte der Resuspension über Jettropfen sowie des Gegenjets waren deutlich nachzuweisen. Es wurden allerdings beachtliche Schwankungen beobachtet. Quantitative Aussagen zur Partikelfreisetzung, bezogen auf die Partikelkonzentration in der Oberflächenschicht, stehen noch aus, weil dazu die Oberflächenschicht selbst noch genauer zu charakterisieren ist.

Bei den Versuchen mit homogener Vermischung der Partikeln mit dem Wasser ist auch die Poolkonzentration bestimmt worden. Hier kann man quantitative Aussagen zur Resuspension machen, z. B. durch Vergleich der Tröpfchenkonzentration mit der Poolkonzentration. Der Effekt der Resuspension war auch hier in den meisten Fällen deutlich nachweisbar. Mit Ausnahme von Cu waren die beiden Konzentrationen von gleicher Größenordnung, d. h. die Resuspensionsfaktoren hatten die Größenordnung 1 für Jettropfen unter diesen Bedingungen. Der Cu-Wert war um 2 Größenordnungen niedriger (siehe dazu Abb.1).

Die KAREX-Laborversuche sollen nun mit Filmtropfen fortgesetzt werden. Hier wird ein wesentlich geringerer Resuspensionseffekt erwartet, weil der Entstehungsmechanismus vom Zerplatzen der Lamelle einer größeren Blase ausgeht. Die Lamelle kann sich vor dem Zerplatzen möglicherweise selbst reinigen.

Für Experimente im technischen Maßstab unter Beachtung der EPR-Bedingungen (heftiges Sieden, Churn-turbulent Flow) wird gerade ein neuer Versuchsstand errichtet. Hier sollen u. a. Experimente mit schwerflüchtigem Silberjodid (AgI) und Caesiumjodid (CsI) durchgeführt werden. Der Versuchsbehälter hat einen Durchmesser von 0,6 m, eine Höhe von 1,1 m und besitzt am Boden eine Heizplatte, die Leistungen bis zu 50 kW liefern kann.

3.0 MODELLTHEORETISCHE ARBEITEN BEI RUB

3.1 Sehr kleine Jettropfen

Ein Thema der Arbeiten im Berichtszeitraum war die Untersuchung des Vorgangs der Freisetzung winziger Jettropfen beim Zerplatzen sehr kleiner Blasen. Als Beispiele dienen dabei Luftblasen an einer Wasseroberfläche mit einem Äquivalentdurchmesser von 0,1 mm sowie 0,2 mm. Blasen dieser Größe liegen fast am unteren Ende des experimentell nachweisbaren Durchmesserpektrums, das gemäß den Untersuchungen von Blanchard und Woodcock mit etwa 50 μm angegeben werden kann.

Anhand der BUBBURST-Simulationsrechnung der 0,1 mm-Blase kann das Ablösen mehrerer Jettropfen nachgewiesen werden. Neben zwei Tropfen mit mehr als 10 μm

im Durchmesser entsteht auch ein sogenannter Satellitentropfen mit etwa $7,5 \mu\text{m}$ Durchmesser, der fast zeitgleich mit dem ersten Jettropfen freigesetzt wird. Daher sind auch keine nennenswerte Unterschiede in der Tropfenanfangsgeschwindigkeit, die bei etwa 17 m/s liegt, festzustellen. Vom Beginn der Simulation bis zum Ablösen des ersten Jettropfens vergehen etwa $28 \mu\text{s}$, der zweite Tropfen wird nach etwa $35 \mu\text{s}$ freigesetzt. Um den Transport von sehr kleinen Feststoffpartikeln in die Jettropfen nachzuvollziehen, sind sogenannte Layer-Partikel vor dem Start der BUBBURST-Rechnung in 5 nicht-äquidistanten Schichten direkt unter die freie Oberfläche des Blasenkraters implementiert worden. Die nach Schichten aufgeschlüsselte Analyse der Partikelverteilung im Jet und in den Jettropfen zeigt, daß keine der Schichten bevorzugt in die Jettropfen transportiert wird. Insgesamt befinden sich bei dieser Rechnung etwa 5% der Layer-Partikel im ersten Jettropfen, der größte Teil (mehr als 50%) wird, wie bei anderen Rechnungen in vorangegangenen Arbeitsberichten bereits dokumentiert, mit dem Gegenjet in die Flüssigkeitsvorlage hineingedrückt. Es ist beachtenswert, daß sich die Partikel im atmosphärischen Jet ebenfalls direkt unter der freien Oberfläche befinden, was die oben schon erwähnte Nichtbevorzugung einer einzelnen Schicht zum Transport in die Jettropfen unterstützt.

Die zweite Beispielrechnung zeigt die Bildung eines Flüssigkeitsjets und das Ablösen eines Jettropfens bei einer Blase mit einem Äquivalentdurchmesser von $0,2 \text{ mm}$. Bei dieser Beispielrechnung ist besonderen Wert auf die Nachverfolgung der Layer-Partikel gelegt worden. Eine Analyse des Prozesses verdeutlicht, daß sich ein Großteil der Layer-Partikel nach der Ausformung des kegelförmigen Blasenkraters in der direkten Nähe des Blasenkraterbodens angesammelt hat. Deutlich ist die gleichzeitige Ausbildung des atmosphärischen und des in die Flüssigkeitsvorlage hinein gerichteten Flüssigkeitsjets zu erkennen (Impulserhaltung). Auch bei dieser Beispielrechnung befinden sich ca. 5% der unter der freien Oberfläche des Blasenkraters implementierten Partikel im ersten Jettropfen.

Ein abschließender Vergleich der mit BUBBURST berechneten Jettropfendurchmesser mit experimentellen Daten zeigt bei diesen sehr kleinen Blasendurchmessern eine durchweg gute Übereinstimmung.

3.2 Filmtropfen

Eine große Anzahl von Filmtropfen kann aber insbesondere auch durch den Zerfall der Blasenlamelle erzeugt werden. Zur Vorbereitung einer späteren mechanistisch basierten Modellierung der Filmtropfenbildung wurde die experimentelle Datenbasis zur Untersuchung der Lamellenauflösung sowie zur Quantifizierung charakteristischer Tropfengrößen zusammengefaßt und analysiert. Aus experimentellen Untersuchungen zum Zerplatzen von Seifenblasen kann dabei abgeleitet werden, daß die Auflösung der Blasenlamelle nicht unter der sprengenden Wirkung des Füllgases erfolgt, sondern sich vielmehr, von einer lochartigen kleinen Störstelle ausgehend, durch Sekundäreffekte infolge der kontrahierenden Wirkung der Oberflächenspannung vollzieht. Am Rande der fortschreitenden Öffnung bildet sich durch Aufstauen der Flüssigkeit ein immer größer werdender ringförmiger Wulst, der bei Überschreiten eines Grenzwertes instabil wird und in eine große Anzahl von Filmtropfen zerfällt.

Die bisher vorliegende experimentelle Datenbasis zur Quantifizierung charakteristischer Tropfengrößen der Filmtropfenbildung - wie Anfangsgeschwindigkeit, Größe und Anzahl - zeigt insbesondere bezüglich möglicher Einflußfaktoren zum Teil widersprüchliche Ergebnisse. Die Tropfengröße weist dabei einen großen Streubereich auf, wobei Tropfen mit Durchmessern zwischen einem halben Millimeter und einem zehntel Mikrometer beobachtet werden konnten. Die Tropfenanzahl nimmt dabei im wesentlichen mit steigender Blasengröße zu und liegt in einer Größenordnung von mehreren hundert. Einige Experimente zeigen jedoch ein lokales Maximum der Anzahl entstehender Tropfen bei Blasengrößen im Bereich von ca. zwei Millimetern, wobei dieses Maximum aus sehr kleinen Tropfen gebildet wird.

32.23 STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG

32.23.01 Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Transmutation von Aktiniden und Spaltprodukten

- I. SIRENE, ein Interface zwischen nuklearen Reaktorparametern aus ERANOS und dem Sicherheitsanalyse-Code SAS4A
(A. Rineiski, INR*)

Up to now, SAS4A input was mainly prepared at FZK on the basis of the KAPROS code system and the associated 26-groups cross section libraries KFKINR-1 and KFKINR-2 using an associated evaluation package. In the future, all partners cooperating in CAPRA work should be enabled to prepare SAS4A input parameters based on ERANOS (with VARIANT/TGV using the 25-groups cross section sets CARNAVAL-IV or ERALIB and/or the ECCO package for treating heterogeneity effects using collision probabilities and cross section libraries having up to about 2000 energy groups). The nuclear code system ERANOS, developed by France, Great Britain, and Germany for Fast Reactor analysis, is currently applied as a common basic tool for calculating neutronic parameters of modern Fast Burner Reactor cores of the CAPRA type.

In the past the calculation of the neutron flux and power distribution was restricted in ERANOS to the application of 3-dimensional diffusion methods in HEX-Z- and XYZ-geometry using finite difference spatial discretization (H3D module) and of 2-dimensional transport methods (BISTRO module, in rectangular geometries (rz,xy) using discrete ordinates (S_N) angular discretization and finite difference spatial discretization).

Recently, a new nodal diffusion/transport solver, VARIANT/TGV, was included into ERANOS providing now for the first time the capability to determine the neutron flux distribution and associated quantities for 3-D rectangular and hexagonal-Z reactor

* on leave from IPPE, Obninsk, Russia

models by applying transport theory. However, the power distributions and reactivity curves required for the safety analysis code SAS4A could not yet be prepared directly by employing ERANOS with VARIANT/TGV.

The ECCO/ERANOS package includes the following main parts:

- calculation of basic nuclear data (cross-sections),
- diffusion and transport calculations, power and perturbation calculations,
- burnup calculations, detailed calculation of subassembly irradiation,
- post-processing and printouts, and
- the management of user libraries.

The code is written in the ESOPE language (extended FORTRAN) and the user employs a special command language, LU, for the execution of an ERANOS job.

The code VARIANT/TGV is based on the Variational Nodal Method (VNM), which was promoted in USA (by E. Lewis et al.) and incorporated as a VARIANT module into the DIF3D code system of ANL. Later, VARIANT was implemented into ERANOS as TGV module.

VARIANT/TGV solves the real/adjoint neutron transport (or diffusion) equation in HEX-Z or XYZ geometry, with or without an external source.

According to VNM, the even-parity neutron flux $(\varphi(\Omega)+\varphi(-\Omega))/2$ is approximated within the nodes by a linear combination of the basis functions which are the products of the spatial basis functions (Legendre polynomials) and angular basis functions (even spherical harmonics). At the node interfaces, the partial currents are approximated in a similar manner (with odd spherical harmonics). Due to inherent limitations of the method of solving the equation for the even-parity flux, VNM cannot be used to simulate neutron transport in completely empty (vacuum) nodes because in order to obtain the even-parity flux, one must calculate integrals containing a $1/\sigma$ term).

The user can choose the expansion order both in space and in angle. The lowest angular expansion order corresponds to the diffusion approximation (P0) within the nodes, P1 on the node interfaces). Currently, the highest angular order is P5. In

space, the within node flux may be approximated up to the 4th order (6th order in plane in HEX, HEX-Z), the interface currents up to the 2nd order.

The neutron source (fission, scattered, and external source neutrons) during iterations is approximated in space in the same manner as the within node flux (i.e. using the same spatial basis functions). To calculate accurately the perturbation theory integrals (such as reactivity effects), the **same** spatial approximations should be currently used for the real flux, adjoint flux, real source, and adjoint source.

The total number of coefficients and the associated storage required per node and energy group for the moments of the flux and the partial current is quite considerable. Before starting the calculations for determining the solution for the even-parity flux and partial current moments, VARIANT/TGV computes several large matrices: the response matrices for the partial currents iteration, the matrices to recompute the flux moments from the reiterated partial currents, etc. These matrices are prepared for each 'representative' node (if there are several nodes with identical dimensions and cross-sections, the matrices are calculated for one of these nodes only). One has to be aware that for a zero power critical assembly or for a fresh power reactor core, the number of 'representative' nodes could be fairly small. However, this advantage is unfortunately no longer valid for a power reactor core during burnup. Due to the different irradiation history, the number of 'representative' nodes (and therefore the number of the response matrices to be calculated) increases significantly. By specifying a special option in the KIN3D input parameters, the user can decide if only the real and adjoint flux moments for a single axial layer are stored in the core memory and all other moments are kept on a disk file during the computations. This option alleviates the computer memory requirements. By default, all flux moments are available in the core memory.

Recently, a new KIN3D module for space-time reactor kinetics and perturbation theory calculations was included into VARIANT at Cadarache/France. It extends the capabilities of the code to solve the time-dependent transport (or diffusion) equations, provided that changes in the cross-sections during the transient are known. It can also calculate the reactivity effects caused by changes in the cross-

sections by employing the first order or exact perturbation theory approaches. Besides, the scalar products of the real and adjoint flux moments may be saved (in a binary file) and subsequently used by KIN3D again (instead of the real/adjoint flux moments).

The code package SAS4A for reactor safety analyses employs the point-kinetics model to compute the reactor power during a transient. These computations are based on the reactivity and power curves which are usually calculated for the nominal conditions at the beginning of the transient (with the exception of the Doppler constants which are to be prepared for the both wet and dry core states and interpolated for the actual transient conditions).

SAS4A simulates the transient core behavior for a set of the thermal-hydraulics channels each of which usually represents an 'average' fuel pin of a group of S/As (these groups are chosen by the SAS4A user). For the CAPRA core, use of 21 channels was proposed, the material inside the diluent pins is currently ignored by SAS4A, the cladding of these pins being associated with the structure which represents a share of the duct wall per pin in a SAS4A thermal-hydraulics channel.

Each channel is subdivided axially into segments which are treated as nodes in SAS4A.

The parameters, which are required by the SAS4A user, are of two types: the very SAS4A neutronic input parameters and a set of the additional parameters required for evaluations.

SAS4A input includes the parameters provided for each channel and each axial pin segment:

- relativ power,
- wet and dry Doppler,
- coolant, cladding and fuel reactivity worths (per kg);

and the channel-independent parameters (provided for the whole reactor): the effective delayed neutron fractions, effective decay constants of the associated delayed neutron precursors and mean neutron lifetime.

Additional parameters are usually needed, such as

- maximum pin linear ratings,
- maximum pin powers,
- axial/radial form factors, etc.

in order

- to facilitate the choice of attributing the S/As to the SAS4A channels,
- to follow the power history of S/As,
- to evaluate the probability of pin failure during the specified S/A residence time
- to analyze the results of SAS4A transient simulations.

Optionally, these data are to be provided for each start/end of fuel (sub)cycle.

A specific tool was developed for preparing a SAS4A input file by postprocessing the results of ERANOS calculations using VARIANT and the KIN3D features: SIRENE, the SAS4A Interface to Reactor data Evaluated using the Nuclear code system ERANOS.

A two-step scheme was developed for preparing SAS4A data:

1. ERANOS is employed to create a SIRENE file that contains a large 'intermediate' set of neutronics parameters (power, reactivity contributions) for each S/A.
2. The SIRENE file prepared in a flexible manner as ASCII file consisting of several data sections is transformed into SAS4A input, the SAS4A channel and axial node specifications being employed. The SIRENE file is also used to compute the additional parameters which are required for evaluations. These calculations are done by a stand-alone post-processing program named SIPOST (which is not a part of ERANOS).

In the SAS4A analyses of reactor transients, the following material reactivity worths [1/kg] are of interest:

- $\rho_{\text{coolant}}/\Delta_{\text{coolant_mass}}$, $\rho_{\text{clad}}/\Delta_{\text{clad_mass}}$, and $\rho_{\text{fuel}}/\Delta_{\text{fuel_mass}}$ (void, clad, and fuel coefficients)

The wet and dry (void) Doppler constants are calculated as:

$(\rho_{\text{hot}} - \rho_{\text{cold}})/\ln(t_{\text{hot}}/t_{\text{cold}})$ and $(\rho_{\text{void hot}} - \rho_{\text{void cold}})/\ln(t_{\text{hot}}/t_{\text{cold}})$,

where t_{hot} , t_{cold} are two different values related to the fuel temperature.

The reactivity parameters (Doppler, material worths) must be calculated for the core segments and for some segments up and below the core (for a breeder reactor, these segments belong to the blankets). The upper/lower segment contributions to the Doppler constant are equal to zero if these segments contain no heavy isotopes (and contributions of other isotopes to Doppler are neglected). On the contrary, the fuel reactivity worths are always greater than zero and must be calculated assuming a change in **fuel** concentration even in the non-fuel segments: these worths are used by SAS4A to compute the reactivity contributions related to fuel movement during the transient (axial expansion due to temperature changes, fuel movement during the post-failure phase of the transient).

Currently, SAS4A employs in each channel (1) the two (wet and dry) Doppler constants for the whole channel and (2) the normalized (sum is equal to unity) related nodal contributions which are assumed by SAS4A to be the same for the wet and dry states.

As a new feature a method was developed for calculating the response matrices for axially heterogeneous nodes without numerical integration, **provided** that the cross-sections are stepwise constant functions in axial direction. The proposed remapping technique allows also to compute the reactivity and power contributions from fine axial sub-nodes (containing e.g. an interface between absorber and follower in a control rod), on the basis of the 'coarse' nodal real and adjoint fluxes.

Previously real and adjoint fluxes from finite differences solution schemes were used in ERANOS for determining neutron kinetics parameters. The associated integration formalism was no longer suitable for the nodal fluxes obtained from VARIANT.

Therefore, a new capability was implemented in the corresponding ERANOS module for calculating these parameters using a scalar product file containing the nodal real and adjoint flux moments computed by VARIANT.

For preparing the SIRENE file, a stepwise procedure has been established as a sequence of successive ERANOS runs for the various tasks, e.g. cross section preparation, real and adjoint flux calculations, perturbation calculations for determining reactivity coefficients for various conditions (nominal, voided, hot fuel etc.), burnup calculations, and determination of kinetics parameters.

Postprocessing of the SIRENE file by the SIPOST routine can be applied not only to generate the SAS4A input but, in addition, to prepare data that are usually very convenient to obtain a quick lookup on the power distribution in the reactor and gain correlated information e.g. on power form factors. This information is very helpful for easily assessing and intercomparing the reactor physics properties of various reactor designs. Normally such quantities as max. lin. rating or S/A power can easily be deduced from the conventional ERANOS output. However, the corresponding modules have not been written for dealing with fluxes from nodal calculations but are based on the solution of finite difference discretization schemes. Therefore, this additional option in SIPOST facilitates considerably the reactor physics evaluation aspects of VARIANT calculations.

The flexible SIRENE file and the SIPOST module established within the ERANOS/VARIANT computing environment will enable all partners participating in the framework of the multinational cooperation on Fast Burner Reactors of the CAPRA type to prepare in their own computer installations the reactor physics related input data needed for SAS4A safety analysis.

II. Veränderung der Pu-Qualität durch Bestrahlung in Schnellen Reaktoren
(S. Jaag, E. Kiefhaber, INR)

1 Einleitung

Durch Rezyklierung von Plutonium in Thermischen Reaktoren (z.B. MOX-LWRs) verschlechtert sich erfahrungsgemäß die Plutonium-Qualität. Als Maß für die Pu-Qualität wird meistens der Anteil Pu_{fiss} von ($^{239}\text{Pu} + ^{241}\text{Pu}$), also derjenigen Pu-Isotope, die durch thermische Neutronen spaltbar sind, am Gesamt-Pu-Gehalt verwendet.

Näherungsweise kann die zeitliche, abbrandbedingte Änderung der Pu-Qualität anhand einer einfach zu bestimmende Größe dem "quality improvement index", qii , abgeleitet werden. Diese Größe vermittelt einen groben Eindruck über die Veränderung der Pu-Qualität bei Bestrahlung. Minore Aktiniden wie Np, Am, Cm werden dabei ebenso vernachlässigt wie ortsabhängige Effekte oder Spektralveränderungen und Änderungen der Resonanzselbstabschirmung.

2 Ableitung des "Quality Improvement Index"

Eine brauchbare Näherung für die (instantane) Veränderung der Pu-Qualität, dem "Instantaneous Quality Improvement Index", $iqii$, kann unter den genannten, vereinfachten Annahmen aus der Abbrandgleichung mittels leicht nachvollziehbarer Überlegungen für die Pu-Isotope abgeleitet werden:

$$iqii = \frac{(N(^{238}\text{U}) \cdot \sigma_c(^{238}\text{U}) + N(^{238}\text{Pu}) \cdot \sigma_c(^{238}\text{Pu}) - N(^{239}\text{Pu}) \cdot \sigma_a(^{239}\text{Pu}) + N(^{240}\text{Pu}) \cdot \sigma_c(^{240}\text{Pu}) - N(^{241}\text{Pu}) \cdot \sigma_a(^{241}\text{Pu})) \cdot \Phi \Delta t}{(N(^{238}\text{Pu}) + N(^{239}\text{Pu}) + N(^{240}\text{Pu}) + N(^{241}\text{Pu}) + N(^{242}\text{Pu}))}$$

Es ergibt sich eine einfache Beziehung für $iqii$, in der - außer dem Neutronenfluß, Φ - lediglich die effektiven mittleren Querschnitte und die (Core-gemittelten) Konzentrationen der Brennstoff-Isotope auftreten. Diese Werte sind i.a. als Eingabedaten für übliche Auslegungsrechnungen und Abbrandcodes leicht verfügbar. Als Normierung wurde $\Delta t = 1 \text{ s}$ gewählt. In der Regel ist für die folgenden Betrachtungen nur das Vorzeichen von $iqii$ bedeutsam. Der Zahlenwert ist i.a. nur für Relativ-Vergleiche von Interesse, d.h. wenn der Einfluß verschiedener Pu-Isotopenzusammensetzungen oder unterschiedlicher Pu-Anteile

verglichen werden soll.

Zusätzlich zu der Veränderung der Pu-Qualität ist, insbesondere für die Pu-Verbrennung in Reaktoren vom CAPRA-Typ, auch die zugehörige spezifische Pu-Verbrennungsrate von Interesse. Analog zu *iqii* kann auch eine Größe *ipri*, "instantaneous production rate index" definiert werden, die für Relativ-Vergleiche sehr nützlich sein kann:

$$\begin{aligned} ipri = & (N(^{238}\text{U}) \cdot \sigma_c(^{238}\text{U}) - N(^{238}\text{Pu}) \cdot \sigma_f(^{238}\text{Pu}) \\ & - N(^{239}\text{Pu}) \cdot \sigma_f(^{239}\text{Pu}) - N(^{240}\text{Pu}) \cdot \sigma_f(^{240}\text{Pu}) \\ & - N(^{241}\text{Pu}) \cdot \sigma_f(^{241}\text{Pu}) - N(^{242}\text{Pu}) \cdot \sigma_a(^{242}\text{Pu})) \cdot \Phi \Delta t / \\ & (N(^{238}\text{Pu}) + N(^{239}\text{Pu}) + N(^{240}\text{Pu}) + N(^{241}\text{Pu}) + N(^{242}\text{Pu})) \end{aligned}$$

Zur gleichzeitigen Einschätzung des Kritikalitätspotentials einer gewählten Brennstoffzusammensetzung, d.h. abhängig vom Pu-Anteil und der "Schmutzigkeit" bzw. dem Pu_{fiss} -Anteil des Plutoniums, ist es häufig nützlich, den Wert von k_∞ zusätzlich anzugeben:

$$k_\infty = \sum_i N_i \nu \sigma_{fi} / \sum_i N_i \sigma_{ai}$$

Dabei erstreckt sich die Summierung über alle (für schnelle Reaktoren) relevanten Brennstoffisotope (d.h. ^{238}U ... ^{242}Pu).

3 Ergebnisse

Zur Verdeutlichung der Abhängigkeiten wurden 3 typische Pu-Isotopenzusammensetzungen und 10 Pu/(U+Pu)-Verhältnisse untersucht. Zur Vereinfachung wurde der ^{241}Am -Anteil dem ^{241}Pu zugeschlagen. Für die mittleren effektiven Querschnitte und Neutronendichten wurden Zahlenwerte für einen typischen CAPRA-Reaktor verwendet. Die Ergebnisse für verschiedenen Typen von Schnellen Reaktoren (z.B. CAPRA bzw. EFR) unterscheiden sich qualitativ nur wenig.

Wie aus Abb.3 zu erkennen ist, verschlechtert sich für den Referenzfall und das high-quality-Pu die Pu-Qualität bei CAPRA-Reaktoren, die einen Pu-Gehalt von ca. 40-45% aufweisen. Die Neubildung von ^{239}Pu aus ^{238}U ist zu gering, um die Verbrennung von ^{239}Pu und ^{241}Pu zu kompensieren. Andererseits verdeutlicht Abb. 3, daß durchaus eine Verbesserung der Pu-Qualität erreichbar ist – allerdings nur bei niedrigen Pu-Anteilen und einer entsprechend hohen Pu-Neubildungsrate aus ^{238}U (das Erbrüten von Plutonium in den Blankets sogenannter Schneller Brüter wird hier nicht betrachtet)! Niedrige Pu-Anteile führen naturgemäß auch zu niedrigen Werten für $k_\infty(\text{Fuel})$; siehe Abb.1. D.h. es muß hier sorgfältig auf die Neutronenökonomie geachtet werden.

Bei dem besonders schmutzigen Plutonium (poor quality Pu) ergeben sich etwas andere Verhältnisse: Abb.1 zeigt, daß der Pu-Anteil im MOX mindestens über 40% liegen sollte ($k_\infty(\text{Fuel}) \approx 1.4$), da sonst kein praktisch realisierbarer Reaktorentwurf möglich sein dürfte. Erst oberhalb eines Pu-Anteils von 47% setzt eine Verschlechterung der Pu-Qualität im Verlauf des Abbrands ein. Jedoch bereits ab einem Pu-Anteil von etwa 26%, findet noch eine Verbrennung, d.h. ein Netto-Verbrauch von Pu satt. Daraus kann man den Schluß ziehen, daß in einem CAPRA Reaktor mit ca. 45% Pu-Anteil bei Verwendung

von sehr schmutzigem Plutonium eine beträchtliche Pu-Verbrennungsrate erreicht werden kann, ohne daß sich die Pu-Qualität merklich verschlechtert. Wie aus Abb.1 erkennbar ist ($k_{\infty}(\text{Fuel}) \approx 1.42$), ist dies jedoch nicht mit den üblichen CAPRA-Merkmalen (viele Diluenten, hoher Verdünnungsgrad) vereinbar, sondern erfordert einen Entwurf, bei dem möglichst niedrige Neutronenverluste angestrebt werden müssen.

Der Vergleich der Kurven von *ipri* und *iqii* zeigt, daß lediglich für das sehr schmutzige Plutonium die Vorzeichenänderung von *ipri* bei einem deutlich niedrigeren Pu-Anteil (26%) auftritt als beim Pu-quality improvement index, *iqii*, (47%). Bei den anderen Pu-Qualitäten ist der Pu-Anteil beim Nulldurchgang der Koeffizienten *ipri* und *iqii* vergleichbar.

Es ist klar ersichtlich, daß die Verbesserung der Pu-Qualität und eine hohe spezifische Pu-Verbrennungsrate konträre Ziele sind, die sich nicht gleichzeitig erreichen lassen. Nur in beschleunigergetriebenen Anlagen kann diese für kritische Kernspaltungsreaktoren geltende enge Kopplung zwischen Pu-Verbrennungsrate und Veränderung der Pu-Qualität aufgehoben bzw. umgangen werden, da in ADSs die für die Verbrennung benötigten Überschußneutronen durch die vom Protonenstrahl erzeugten Spallationsneutronen bereitgestellt werden.

4 Zusammenfassung

Der Vergleich von Abb. 2 und Abb. 3 hat gezeigt, daß bei guter Pu-Qualität sowie bei Pu mit LWR-UOX-Entladequalität (Referenzfall) eine Verbrennung, d.h. ein Nettoverbrauch von Pu in Schnellen Reaktoren ohne Blankets nur unter Inkaufnahme einer gleichzeitigen Verschlechterung der Pu-Qualität erreicht werden kann. Je höher die Verbrennungsrate ist, umso ausgeprägter ist die Verschlechterung der Pu-Qualität. Abb.1 macht deutlich, daß die Reaktorauslegung modifiziert werden muß, wenn die Pu-Qualität sich ändert und/oder eine veränderte Pu-Verbrennungsrate angestrebt wird.

Pu-Qualität	High				Reference Case				Poor			
Pu-Vektor:	1.8, 57.9, 22.5, 12.2, 5.6				5.6, 39.1, 26.7, 14.3, 14.3				2.8, 16.9, 50.4, 9.1, 20.8			
Pu[%]	k_{∞}	$ipri \cdot 10^9$	$iqii \cdot 10^9$	$lqii1$	k_{∞}	$ipri \cdot 10^9$	$iqii \cdot 10^9$	$lqii1$	k_{∞}	$ipri \cdot 10^9$	$iqii \cdot 10^9$	$lqii1$
10	1.051	+6.531	+6.103	+0.1596	0.976	+7.351	+8.181	+0.2094	0.786	+9.395	+12.02	+0.2925
15	1.254	+1.437	+1.009	+0.0304	1.167	+2.256	+3.086	+0.0908	0.935	+4.300	+6.929	+0.1924
20	1.409	-1.110	-1.537	-0.0502	1.315	-0.290	+0.539	+0.0171	1.057	+1.753	+4.382	+0.1309
25	1.532	-2.638	-3.066	-0.1054	1.435	-1.818	-0.988	-0.0330	1.160	+0.225	+2.854	+0.0893
30	1.630	-3.657	-4.085	-0.1456	1.532	-2.837	-2.007	-0.0695	1.248	-0.793	+1.835	+0.0593
35	1.712	-4.385	-4.813	-0.1761	1.614	-3.565	-2.735	-0.0971	1.323	-1.521	+1.107	+0.0366
40	1.780	-4.931	-5.358	-0.2001	1.683	-4.111	-3.281	-0.1189	1.388	-2.067	+0.561	+0.0189
45	1.838	-5.355	-5.783	-0.2194	1.742	-4.536	-3.705	-0.1363	1.446	-2.492	+0.137	+0.0046
50	1.888	-5.695	-6.123	-0.2353	1.793	-4.875	-4.045	-0.1507	1.497	-2.831	-0.202	-0.0070
55	1.932	-5.973	-6.400	-0.2487	1.838	-5.153	-4.323	-0.1628	1.542	-3.109	-0.480	-0.0168
	Indices gleich null für Pu-Anteil von:											
\leftrightarrow Pu[%]		17.8	17.0	16.9		19.4	21.8	21.7		26.1	47.0	47.0

Tabelle 1: Indices für die Veränderung der Pu-Qualität und für die Pu-Verbrennungsraten für verschiedene Pu-Vektoren. Die letzte Zeile der Tabelle gibt die Pu-Anteile im MOX an, bei denen durch den Abbrand die Pu-Gesamtmenge nicht verändert wird.

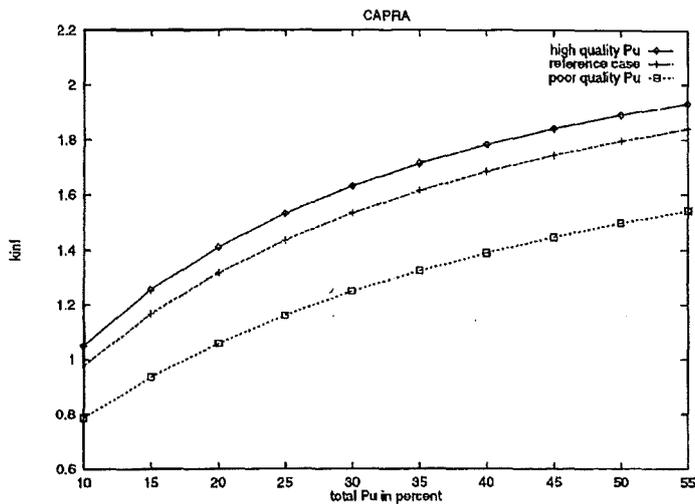


Abbildung 1: k_{∞} des Brennstoffs (k_{∞}) für die unterschiedlichen Pu-Qualitäten abhängig vom Pu-Anteil des Brennstoffs eines CAPRA Reaktors (bzgl. der angewandten Näherungen, siehe Text).

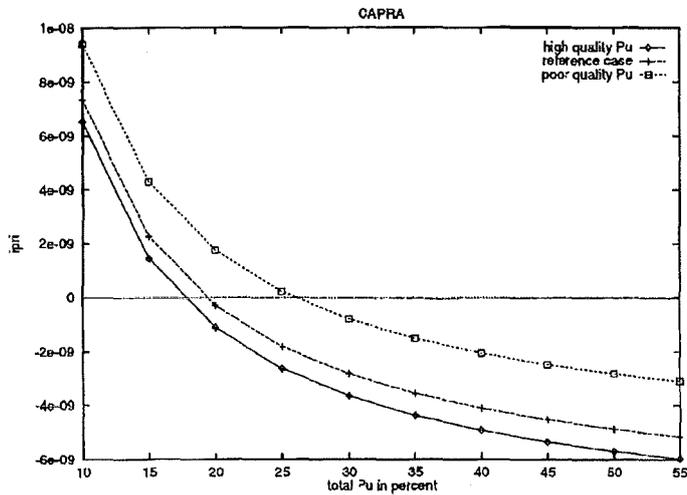


Abbildung 2: Der 'instantaneous production rate index' (ipri) für die unterschiedlichen Pu-Qualitäten abhängig vom Pu-Anteil des Brennstoffs eines CAPRA Reaktors (bzgl. der angewandten Näherungen, siehe Text).

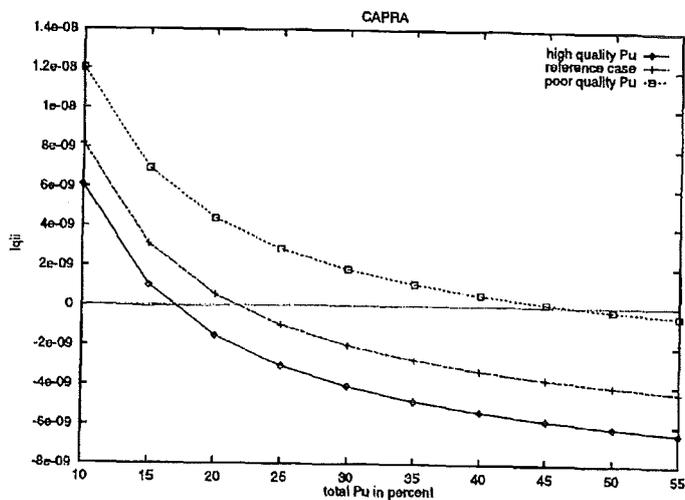


Abbildung 3: Der 'instantaneous quality improvement index' (iqii) für die unterschiedlichen Pu-Qualitäten abhängig vom Pu-Anteil des Brennstoffs eines CAPRA Reaktors (bzgl. der angewandten Näherungen, siehe Text).

32.23.02 Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen

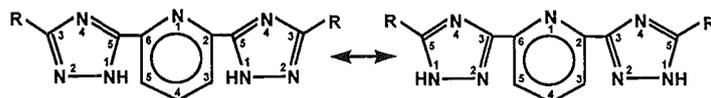
(Z. Kolarik, U. Müllich, INE)

Das Vorhaben wird im Rahmen des EU-Programms „Safety of Nuclear Reactors. A.2. Fuel Cycle Concepts (Partitioning and Transmutation)“ bearbeitet (Projekt NEWPART). Gemäß der Arbeitsverteilung innerhalb des Projekts liegt der Schwerpunkt unserer Arbeit in der Untersuchung der Abtrennung von Transplutoniden von Spaltlanthaniden.

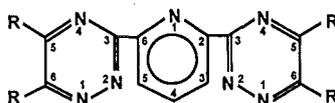
Das Ziel unserer Arbeiten ist Entwicklung von effektiven Extraktionsmitteln für selektive Extraktion von Transplutoniden(III) im Bezug auf Spaltlanthaniden(III). Es wurden hauptsächlich neutrale, solvatisierende Verbindungen (B) untersucht, die Transplutoniden(III)- und Lanthaniden(III)-Ionen (M^{3+}) durch Stickstoffatome binden und als Komplexe des Typs $MX_3 \cdot nB$ extrahieren. Die zu gewinnenden Kenntnisse betrafen den Einfluß der molekularen Konfiguration des Extrahenten, des Charakters des Anions X^- und des Charakters des benutzten Verdünnungsmittels auf die Extraktions- und Trenneffektivität.

Unsere Arbeit umfaßte Synthesen der Extrahenten und Untersuchungen ihrer Eigenschaften in Extraktionsversuchen, die mit Spuren Mengen von Am(III) und Eu(III) als Repräsentanten der Transplutoniden(III)- bzw. Lanthaniden(III)-Gruppe durchgeführt werden.

Im Berichtsjahr konzentrierte sich unsere Arbeit auf solche Extrahenten, die das extrahierte Metallion durch mindestens drei N-Atome binden können. Unerwartet gute Extraktions- und Trenneffektivität wurde bei substituierten 2,6-Ditriazolyl- und 2,6-Ditriazinylpyridinen gefunden (s. Struktur A bzw. B).



Structure A, R = methyl, butyl or phenyl



Structure B, R = methyl to butyl, isobutyl, phenyl, p-tolyl or p-tert-butylphenyl

Untersucht wurden Verbindungen mit den in der Abbildung angegebenen Substituenten R. Aromatisch substituierte Verbindungen sind in organischen Lösungsmitteln zu wenig löslich und wir konzentrierten uns auf Verbindungen mit R = Alkyl. Wie schon im letzten Jahresbericht erwähnt, ergibt die Ditrizolyilverbindung (Struktur A) mit R = Butyl in verzweigtem Dodekan bei der Extraktion von Am(III)- und Eu(III)-2-Bromhexanoaten bei pH 1 einen beträchtlichen Trennfaktor von 150 (in der Literatur beschriebene N-Donoren geben typisch einen Am(III)/Eu(III)-Trennfaktor von ~10, in günstigen Fällen bis 20). Eine enorm hohe Extrahierbarkeit von Am(III)- und Eu(III)-2-Bromhexanoaten bei pH 0.7 - 1.3 wurde mit einer Ditrizolyilverbindung (Struktur B) mit R = Ethyl gefunden, wobei der Verteilungskoeffizient von Am(III) >300 war und der Trennfaktor bei etwa 140 lag. Extrahenten dieser Klasse sind zwar in der Anwesenheit von 2-Bromhexansäure nicht genug stabil, aber das stellt keinen gravierenden Nachteil vor. Sie bieten für die Trennung der Transplutoniden(III) von den Lanthaniden(III) eine viel attraktivere Möglichkeit als die Extraktion von 2-Bromhexanoaten, nämlich die Extraktion von Nitraten. Extrahenten der Struktur B sind in salpetersäure- und nitrathaltigen Systemen viel stabiler als in der Anwesenheit von 2-Bromhexansäure und weisen für Am(III)- und Eu(III)-Nitrate eine überraschend hohe Extraktions- und Trenneffektivität aus. Als Beispiel können hier Verteilungskoeffizienten von Am(III) und Eu(III) (D_{Am} bzw. D_{Eu}) und die entsprechenden Trennfaktoren ($\alpha_{Am/Eu} = D_{Am}/D_{Eu}$) gegeben werden, die bei der Extraktion mit einer 0.0344 M Lösung der Verbindung der Struktur B mit R = Propyl aus 1.9 M ($HNO_3+NH_4NO_3$) gefunden wurden (TPH ist stark verzweigtes Dodecan):

Verdünnungsmittel	HNO_3 -Konz. (Mol/l)	D_{Am}	D_{Eu}	$\alpha_{Am/Eu}$
Xylol/1-Butanol = 7/3 (Vol/Vol)	0.30	1.66	0.023	72
Xylol/1-Butanol = 7/3 (Vol/Vol)	0.50	1.15	0.017	68
Xylol/1-Butanol = 7/3 (Vol/Vol)	0.90	0.68	0.010	68
TPH/2-Ethyl-1-hexanol = 4/1	0.30	45	0.32	140

(Vol/Vol)

TPH/2-Ethyl-1-hexanol = 4/1	0.50	33	0.26	125
-----------------------------	------	----	------	-----

(Vol/Vol)

TPH/2-Ethyl-1-hexanol = 4/1	0.90	23	0.17	135
-----------------------------	------	----	------	-----

(Vol/Vol)

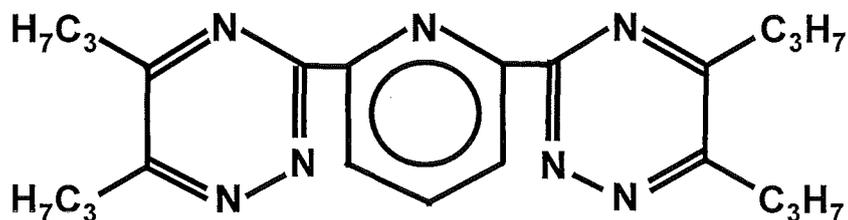
Die hier gezeigte Extraktions- und Trenneffektivität für Am(III)- und Eu(III)-Nitrate wurde noch bei keinem stickstoffhaltigen Extrahenten beobachtet. Die Ergebnisse zeigen, daß das Verdünnungsmittel einen starken Einfluß auf die Verteilungskoeffizienten und Trennfaktoren hat. Die Extraktionseffektivität des obigen Extrahenten für Am(III) sinkt in der folgenden Reihe von Lösungsmitteln (jedes von ihnen ist mit 20 vol% 2-Ethyl-1-hexanol modifiziert): TPH > Cyclohexan > Methylisobutylketon > 2-Ethylhexylacetat > Chlorbenzol > Benzol > Xylol. Die Trenneffektivität sinkt in der Reihe TPH > Cyclohexan > Methylisobutylketon ~ 2-Ethylhexylacetat > Chlorbenzol ~ Benzol ~ Xylol. Wenn TPH mit 10 - 20 Vol% 2-Ethyl-1-hexanol modifiziert ist, sind die Verteilungskoeffizienten von Am(III) und Eu(III) von der Alkoholkonzentration unabhängig.

Das Extrahent der Struktur B mit R = Propyl oder Isobutyl extrahiert Am(III) und Eu(III) in der Form der Komplexe $M(\text{NO}_3)_3 \cdot 3\text{B}$ (M = Am oder Eu, B ist ein Molekül des Extrahenten). Solch eine hohe Solvatationszahl, die mit einem tridentaten extrahierenden Komplexbildner erreicht wird, ist ungewöhnlich. Die hohe Trenneffektivität ist der Fähigkeit der Extrahenten der Struktur B zuzuschreiben, das Am^{3+} - oder Eu^{3+} -Ion in dem extrahierten Komplex überwiegend kovalent an 9 Stickstoffatome zu binden.

In weiterer Arbeit wird versucht, die Struktur B durch Einführung von größeren und verzweigten Alkylgruppen R so zu ändern, daß die chemische Stabilität und die Löslichkeit der Verbindungen in organischen Lösungsmitteln erhöht wird.

Extraction of Am(III) and Eu(III) nitrates by

0.0344 M 2,6-di(5,6-dipropyl-1,2,4-triazin-3-yl)-pyridine



in modified TPH

from 1.90 M (HNO₃ + NH₄NO₃)

(room temperature).

Modifier (20 vol%)	Molarity of HNO ₃	D _{Am}	D _{Eu}	α _{Am/Eu}
2-Ethyl-1-hexanol	0.30	45.3	0.316	143
	0.50	33.1	0.258	128
	0.90	22.6	0.173	131
Butyraldehyde	0.30	41.6	0.327	127
	0.50	49.4	0.353	140
	0.90	61.4	0.47	130

32.23.03 Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil

I. Neutronische Untersuchungen zur verstärkten Brennstoffentladung aus hochangereicherten CAPRA Kernen

(W. Maschek, INR; M. Flad, D.T.I. GmbH)

1. Introduction

The design of CAPRA cores for burning plutonium and other MAs significantly deviates from conventional fast cores /1/. This refers especially to the high Pu-enrichment, the additional MA load and the presence of numerous diluent sub-assemblies in the core. The core design leads to altered safety parameters and accident scenarios during core melt-down /2/. The high Plutonium enrichment of ca. 45% (oxide core) enhances significantly the problem of recriticalities under core-melt conditions. Though, compared to a conventional core the risk of a recriticality is increased, the special design of burner cores can be utilized as well to **mitigate** the recriticality risk by both exploiting inherent features of the pin design (hollow pellets), introducing special measures/devices on the subassembly level and using the available diluent system (Fig. 1) on the core level to enhance the fuel discharge from the core under core melt-down conditions. Note that the CAPRA oxide core contains about 50 diluent subassemblies. By an early fuel relocation from the core the escalation into a neutronically active whole-core-melt with its associated energetics can thus be prevented /3/. For the enhanced fuel removal through dedicated structures the term 'Controlled **M**aterial **R**emoval (**CMR**)' has been coined. The analyses described in /3/ were performed with the SIMMER-III code /4/ without it's neutronic part. Power profiles and power levels were prescribed as boundary conditions and remained unchanged during the calculation. In the present analyses the neutronic behavior of the core materials have been taken into account by turning on the neutronics transport option in SIMMER-III. The fuel motion through the diluent and in the surrounding pool changes the reactivity and power level of the core and influences by it's feedback the fuel motion itself. Of special interest in this investigations was, if the net-fuel motion leads to

a continuous decrease of reactivity or if compaction processes could also lead to a transient reactivity/power increase during the discharge process /5/.

2. Neutronic analyses of the fuel discharge through a diluent

After melt-through of the hexcan and intrusion of the fuel/steel melt into the diluent subassembly, the hot fuel interacts with the sodium in the diluent (Fig. 2), as the fuel relocation takes place into a non-voided diluent. The interaction with sodium in the diluent leads to fuel motions in the surrounding pool. There are competing effects of fuel discharge and compaction both in the diluent and the pool. The fuel discharge globally leads to a strong reduction of reactivity. Any flow reversal and fuel motion towards midplane in the diluent could however lead to an intermittent reactivity increase. At the same time also within the pool a highly transient fuel motion takes place. Firstly, the contact with sodium leads to a local pressure source which redistributes fuel, secondly, also the discharge and pressure relief could lead to a local compaction. With these investigations it was intended to check if the time derivative of reactivity is $dp/dt < 0$ for all times (which would be the most favorable condition) and if in case of a reactivity increase neutronic criticality could be achieved again.

In Fig. 3 the reduction of the pool inventory for ULOF and UTOP conditions are displayed. For conditions with particulate fuel no large discharge rates can be expected. However under these conditions with high-viscosity fuel (rubble) also no rapid compaction can be envisioned. From Fig. 3 one could deduce a steady and global decrease in reactivity and definite subcriticality when several hundred kg of fuel have been swept out of the core. The sensitive time and material configuration is during the very beginning of the discharge, where only little fuel has left the pool (the core region), thus having only slightly subcritical reactivity levels. In this period compaction processes in the pool could add some reactivity.

For investigating the neutronics effects, the pool region and the local diluent were embedded in a whole core configuration. For the neutronics analyses all feedback effects have been turned on with all its impact on power level, pressure and material distribution. Standard neutron transport (S_4) theory has been applied for analyzing

the neutronics effects of fuel relocation. As was already suspected from the fuel motion pattern of the simulations without neutronics - the first discharge leads to a transient reduction of the core- reactivity, but compaction processes in the pool can lead to a re-increase in reactivity afterwards. Flow reversal processes in the diluent are neutronically not significant due to the little fuel losses at that time. Based on these analyses, the optimal condition for a CMR, namely that the time derivative of reactivity $dp/dt < 0$ for the whole transient could not be proven (Fig. 4). However, in all the calculations performed so far, also no significant reactivity increase took place (if any). It should be remembered, that for these calculations the pool inventory was increased from 6 to 18 fuel bundles to obtain conservative results. An important finding is, that in the hydraulically open system any power increase which enhances the pressure levels directly results in an increased fuel discharge and a reduction of the reactivity level. This is different from the situation with a blocked/confined pool which can hold the fuel together and can delay the discharge. Reactivity/power surges under these conditions are more severe as can be seen in /6/. In addition, the calculations show, that with CMR measures the overall fuel removal rates and related reactivity effects in liquid molten fuel/steel pools are less sensitive to the chosen initial and boundary conditions.

It was checked, if any possibility exists for the fuel, which has escaped from the core region, to assemble in neutronically critical configurations below the core. Analyses showed - for enrichments typical for burner-cores and for a coherent discharge process through all available diluents - that critical configurations below the core are conceivable. This can be prevented by installing absorber materials or depleted uranium at the lower and upper ends of the diluents (Fig. 1).

3. Conclusions

The influence on the recriticality potential by an early and enhanced fuel discharge through the diluent system of a highly enriched burner core has been investigated. The necessity for a sufficient fuel discharge in a burner-core is much more stringent due to the high Pu-enrichment. The fuel discharge measures - called CMR (controlled

material removal) should provide well defined and reliable fuel removal paths out of the core which can not be blocked in the case of a core-melt accident. According to the current assessment indeed a good potential exists that these additional passive measures, to which no credit has been given up to now in core disruptive accident calculations, could indeed reduce the risk of severe recriticalities. For fuel release through the diluent system large fuel relocation rates could be found. During the first phase of the 'fuel unloading' process some local compaction processes could lead to a transient increase of reactivity. These reactivity increases are however much lower than those reactivity surges observed in core disruptive accident calculations without CMR measures. The formation of a whole core pool could be prevented by the early fuel discharge. The successful CMR measure will both reduce the probability for a recriticality and will also diminish its consequences.

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," ICON-4, New Orleans, USA (1996).
- /3/ W. Maschek et al.: "Risk Reduction of Core-Melt Accidents in Advanced CAPRA Burner Cores", ARS'97, Orlando, USA (1997).
- /4/ S. Kondo et al.: "SIMMER-III: An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis," ANP '92, Tokyo, Japan (1992).
- /5/ W. Maschek et al.: "SIMMER-III Analyses of Enhanced Fuel Removal Processes Under Core Disruptive Accident Conditions, " ICON-6, San Diego, USA (1998)
- /6/ W. Maschek et al.: "Energetic Potentials of CDA's in Fast Reactors with Transmutation/Burning Capabilities," ARS'94, Pittsburgh, USA (1994)

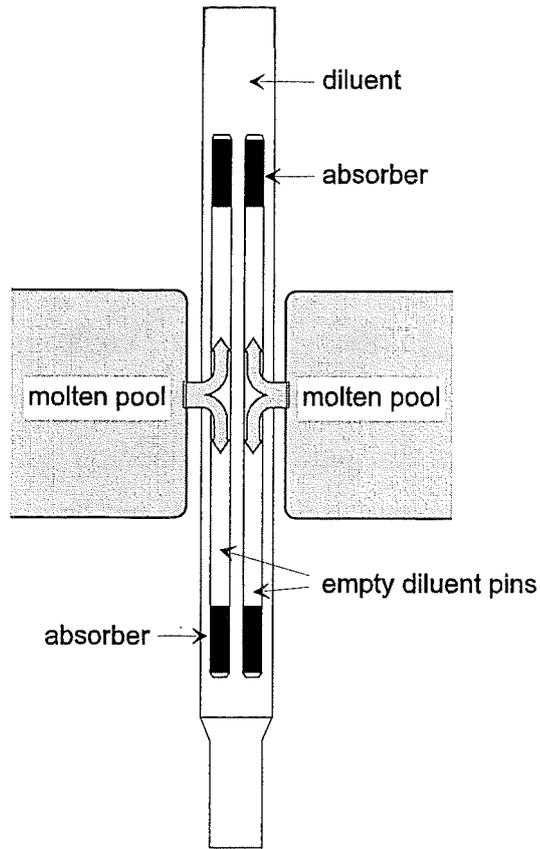


Fig. 1 Diluent assembly concept

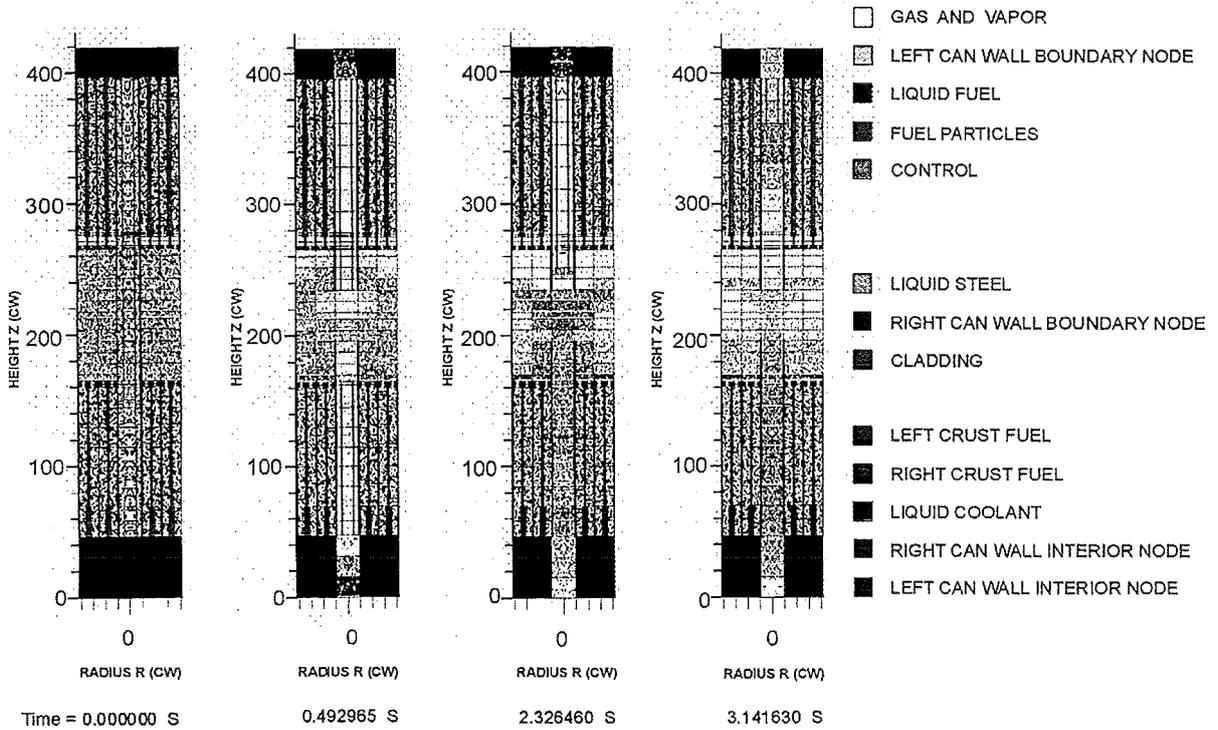


Fig.2 Fuel discharge via diluent under ULOF conditions.

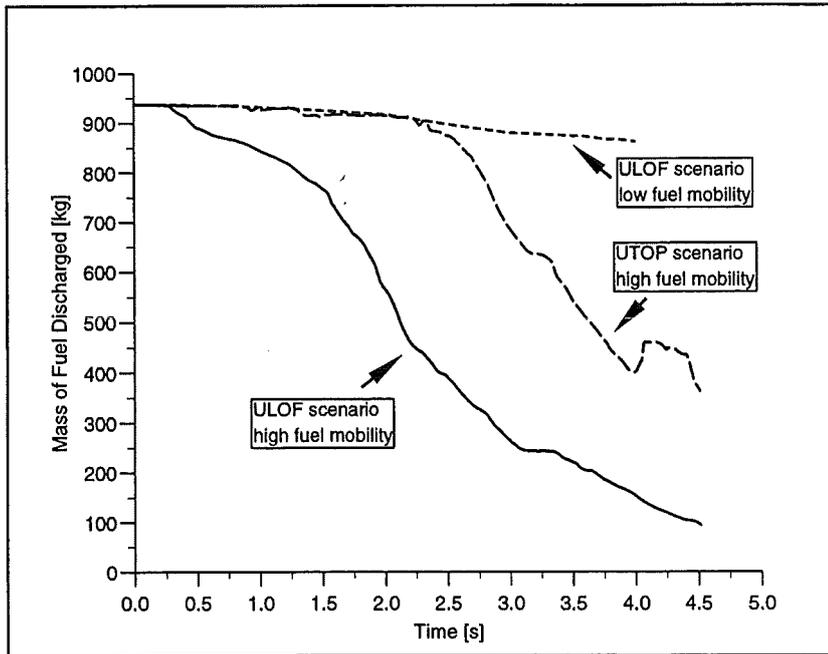


Fig. 3 Reduction of pool inventory (fuel mass) for a ULOF scenario with high and low fuel mobility and for UTOP conditions with high fuel mobility.

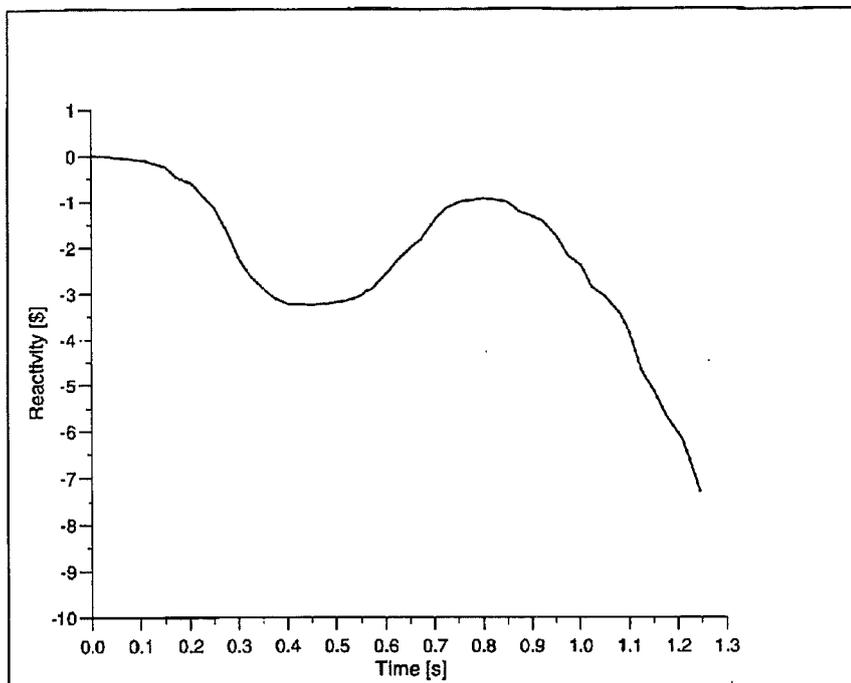


Fig. 4 Reactivity trace during initial discharge phase

II. Erstellung eines neuen, verbesserten SIMMER-III-Neutronik Moduls
(E. Kiefhaber, E. Hesselschwerdt, G. Buckel, W. Maschek, INR)

Abstract

SIMMER-III is a computer code to investigate severe accidents in liquid metal reactors (LMRs) but should also be applied to safety related problems in other types of advanced reactors. The code is developed by PNC with cooperation of the European partners FZK and CEA. SIMMER-III is a two-dimensional, three-velocity-field, multiphase, multicomponent, Eulerian, fluid-dynamics code coupled with a space-, time-, and energy-dependent neutron dynamics model. The neutronics is based on the discrete ordinate method (S_N -method) coupled into a quasistatic dynamic model. FZK took the responsibility to improve the neutronics module by replacing the former TWOTRAN routines for the neutron flux calculation by a new solver module based on the TWODANT code. Additionally, many other new features were implemented into the code.

TWODANT is a modular computer program designed to solve the two-dimensional, time-independent, multigroup discrete-ordinates form of the Boltzmann transport equation. It is based on the modular construction of the DANTSYS code system package which was contributed by Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, USA, /1/. This modular construction separates the input processing, the transport equation solving, and the postprocessing, into distinct, independently executable code modules, the INPUT, SOLVER, and EDIT modules, respectively. These modules are connected to one another solely by means of binary interface files. TWODANT is, in general, more robust, more reliable, and faster than its predecessor version TWOTRAN.

TWODANT solver adapted to the quasistatic solution method

In the quasistatic approach an external-source problem is treated as a pseudo-eigenvalue problem, where a pseudo-eigenvalue parameter - usually denoted γ - characterizes the quality of the obtained solution. The standard TWODANT solver module does only allow to deal with a standard eigenvalue problem, such as the real

and adjoint stationary cases, or an inhomogeneous source problem with specified external sources. The conversion of a source problem (in SIMMER e.g. due to the delayed neutrons and their precursors) to a pseudo-eigenvalue problem was a new feature which had to be implemented in the TWODANT subroutines in a very careful manner. The associated modifications were much more complicated than in the existing SIMMER version - based on the TWOTRAN solution scheme - mainly caused by the diffusion synthetic acceleration (DSA) scheme. This new and attractive feature improves considerably the convergence behavior but requires particular attention to be attributed to the correlations between the transport and diffusion part of the solution algorithms. In particular the inherent renormalizations of (pseudo-) eigenvalues and associated fluxes had to be modified accordingly when converting the source problem to a pseudo-eigenvalue problem. Eventually, the instationary test case (mentioned as STN in the following) from the code manual /2/ could be run successfully using the standard TWODANT solver module incorporating conventional diamond differencing and negative flux fixup.

Inclusion of the time-derivative of the shape-function

In the existing SIMMER version, the (usually small influence of the) time-derivative of the shape function ($d\psi/dt$), is taken into account in an approximative manner:

- (A) Only the space dependent scalar flux is considered, i.e. the angular dependence is neglected
- (B) The time-derivative of the scalar flux, $d\phi/dt$, is dealt with approximately during the rebalancing procedure.

Since in TWODANT there does no longer exist such a rebalancing feature, an alternative method had to be found. Due to the claimed minor effect of this term, $d\psi/dt$, an approximate treatment was still considered to be sufficient (being aware that the contribution of this term is even neglected completely in some codes). In the new version, this additional term is neglected in all but the last transport sweep. Therefore the computational effort remains almost unchanged and, furthermore, in this final transport sweep (which is inevitably needed for other reasons explained below) it is not at all necessary to deal with transport-diffusion correlations because in those circumstances the diffusion part is completely omitted. It should be

mentioned that, in contrast to the previous SIMMER version, in the current version really the rigorous angular dependent shape function is considered. In the corresponding SIMMER subroutines, the associated time derivatives, $d\psi/dt$, are treated in a completely analogous manner (for interpolations and extrapolations in time) than that previously applied to $d\phi/dt$. Originally one reason for using $d\phi/dt$ instead of $d\psi/dt$ was the increase of computer storage requirements when applying the latter, rigorous option. Although this argument is still valid, with currently available computer capacities there is no longer any need to adhere to the decision of the past to reduce storage requirements and corresponding data transfer.

The restriction to the final transport sweep is - most probably - well justified by the usually almost negligible influence of the $d\psi/dt$ term on the reactivity, and on the flux - and power - distributions of the system during a transient. In one example the associated influence on the pseudo-eigenvalue $\gamma = \text{gamma}$ of the quasi-static method was found to amount to about $3 \cdot 10^{-8}$. The mentioned final transport sweep is needed in any case because in the TWODANT solution procedure the angular fluxes will only be provided and stored upon performing such an additional final transport sweep. These angular fluxes are needed for preparing the mesh-wise neutron balance tables which in turn are a pre-requisite for establishing the associated mesh leakages. These leakages, together with the adjoint fluxes, are evaluated for determining the corresponding contribution to the overall reactivity of the system and its reactivity variation during a transient.

Adaptive weighted diamond difference (AWDD) scheme

As is well-known, the standard diamond difference discretization scheme is affected by negative fluxes frequently arising due to extrapolations in rather coarse meshes with dimensions sometimes appreciably exceeding one average transport mean free path. This might not always be a severe disaster: Lathrop's comment in the second paragraph of the Introduction in /3/ should be recalled: "In many cases the negative fluxes, while annoying, can be tolerated because they occur in regions in which fluxes are small and unimportant, but in an increasing number of situations, negative fluxes interfere with the solution process." As a potential remedy, negative flux fixup is applied for obtaining non-negative solutions for the distributions of scalar and

angular fluxes, although mesh refinement would be the more suitable alternative but this could sometimes lead to a prohibitive increase of the computational effort. Therefore, in the existing SIMMER version an option can be used that yields non-negative scalar fluxes. However, as mentioned in the SIMMER-Manual, even this modification cannot completely exclude negative angular fluxes at the mesh edges (or surfaces). In fact, in a test case such negative values were really detected. Being aware that the angular fluxes are used for determining the mesh leakages and, subsequently, the reactivity, even the application of such an improved discretization scheme casts some slight doubts concerning the reliability of such a method for some exceptional cases. Unfortunately, the user is not notified about the occurrence of such a situation (presumably because there is no easy way to avoid it).

Fortunately, in the TWODANT solver there was also an option available which allowed the application of the AWDD method in RZ-geometry (/4/ indicates the basic features for XYZ geometry). This option can be applied too in the current version of SIMMER (by specifying the associated TWODANT input data WDAMP). The application of this option (as an alternative to the standard solution scheme with fixups, i.e. setting negative fluxes to '0' and recalculating the other values) is appreciably facilitated by the existence of the fixup tables which indicate the percentages of negative flux fixups in each energy group and for each coarse mesh when using the standard solution scheme. The analysis of these tables (which were slightly extended at FZK) provides very useful information (regarding space and energy dependence) from which experienced users could obtain a deeper insight into the potential significance and relevance of the monitored fixups with respect to the accuracy and reliability of the associated solution.

The same tables could as well be used for monitoring negative angular fluxes when trying to apply the AWDD scheme. Such negative values may still be encountered when the "tuning" parameters specified in the input were not chosen suitably. The choice of appropriate values still has to be done on a trial and error basis. However, it can be expected that experienced users with sufficient knowledge in reactor neutronics will be able to determine near-optimum input values when applying the AWDD option.

Although this option was mainly intended to deal with deep penetration (shielding) problems, it may be useful too for SIMMER applications related to criticality problems with a rather coarse mesh spatial discretization. Nevertheless, it should be emphasized that its application implies that the intra-mesh correlation between the angular fluxes is modified and no longer corresponds to the familiar linear relationship (between the fluxes at the mesh center and the mesh edges) assumed to be valid in the diamond difference (DD) discretization. Thus, applying the AWDD scheme always means that the intra-mesh neutron balance is modified compared to that one used customarily in standard DD discretization. Naturally, the global flux distribution is modified, too, as a consequence of the intra-mesh deviation from the standard diamond difference spatial discretization rule.

At the end, it belongs to the user to take the most appropriate decision between two possibilities both affected by intrinsic deficiencies, namely (1) using the conventional fixup solution algorithm with its well-known disadvantage described already e.g. in /5/, namely: "Unfortunately, all fixup methods can lead to spatial flux distortions ..." or (2) switching to the alternative AWDD solution scheme with suitably chosen empirical "tuning parameters", thus avoiding negative flux fixups at the expense of fairly arbitrarily modifying the relationship between the angular fluxes at the mesh edges and the associated mesh center. At present there exists not enough experience to give a general recommendation which choice is the most suitable one for certain classes of applications or which alternative is superior to the other one for particular kinds of problems. In any case the flux and power distributions will be changed to some extent compared to the correct ones and it cannot be decided a priori which change will be the more severe one or which solution scheme will be the better one, i.e. will come closer to the true solution. Most probably this decision will be case-dependent and a final conclusion may only be achievable by a suitable mesh refinement if that could be afforded without too severe penalties concerning the computational effort to be devoted to SIMMER neutronics.

Originally the DANTSYS package (more specifically subroutine MASWEPW) contained only the AWDD option with adaptive weighting for the angular dependence as well as for the spatial dependence (in r- and z-direction). In the AWDD discretization scheme as implemented in MASWEPW the step-start method was

applied. Unfortunately this fact did not allow a continuous transition to the standard DD scheme (in subroutine MASWEP) where the starting-direction method was applied. For that reason a new method was supplemented to the package (subroutine MASWEPD) where AWDD is restricted to the spatial discretization only and DD with the starting-direction method (and angular flux fixup) is used for the angular discretization).

Test calculations

The new neutronics module was applied to several test problems, including static and transient cases, in order to validate and verify the code and to demonstrate its robustness and advantages compared to the previous module.

When calculating the FCA (Fast Critical Assembly) case, the predicted reactivity change agreed fairly well with the experiments with C/E deviations of less than 20 %. The results of SIMMER-III using TWOTRAN and TWODANT modules agree almost completely. The effect of negative flux fixing up on the relative reactivity change seems to be negligible in this case although the maximum percentage of the fixing up operation in the AWDD-off case was around 20 % but probably in regions of low importance, i.e. outside the zones with fissile material.

Another test case was the SRA (Static Reactor Analysis). Parametric cases were set up to investigate the reactivity change due to the hypothetical one-dimensional compaction in the core of a large scale LMR. In the compacted configuration, a dense steel slab, which works as an effective neutron reflector, in the upper blanket region lies over the empty space produced by the compaction in the core. This problem is a good example to show the superiority of the new neutronics module based on the TWODANT code, because the former neutronics module in SIMMER-III based on TWOTRAN failed to converge for the compact configuration.

Two series of test calculations were done in the SRA case; the first one by using the options POSDIF ON and AWDD on, respectively, the second one using FIXUP ON and AWDD-off, respectively.

POSDIF ON - AWDD on

	SIMMER / TWOTRAN		SIMMER / TWODANT	
	adjoint	real	adjoint	real
compact	-	-	1.04216938	1.04190530
uniform	0.98453313	0.98452505	0.98448339	0.98426495

FIXUP ON - AWDD off

	SIMMER / TWOTRAN		SIMMER / TWODANT	
	adjoint	real	adjoint	real
compact	-	-	1.04235340	1.04236921
uniform	0.98453422	0.98451724	0.98453418	0.98452736

The new neutronics module based on TWODANT converged successfully in the compact configuration in this test problem whereas the former TWOTRAN module failed as well in the FIXUP ON case as in the POSDIF ON case. Although convergence could be achieved eventually when using another option for the rebalancing scheme, the resulting criticality values, both for the adjoint and the real case, and for POSDIF ON and FIXUP ON, were considered to be unreliable because they were differed appreciably from those obtained when using TWODANT. These results confirmed the robustness and superiority of TWODANT over TWOTRAN. The effect of the fixing up operation of negative flux influences the absolute value of the effective multiplication factor. As could be expected, this influence is more pronounced for the compact than for the uniform configuration and is more important for the real than for the adjoint case. However, the relative reactivity change of the compact case from the uniform case is not affected by the selection of differencing scheme, i.e. the reactivity change is 0.05784185 in the AWDD-off case and 0.05764035 in the AWDD-on case.

The STN (Standard Test Problem for Neutronics) is intended to test the space- and energy-dependent neutron kinetics model and its coupling with fluid dynamics. From the point of view of reactor physics it is rather simple, consisting in moving a small plug of fissile material in axial direction along the central channel of a core (in a cylindrical model). The resulting reactivity and power transient discrepancies between the TWOTRAN and TWODANT neutronics modules are fairly small. In addition, the affect of the flux fixup procedure is larger than the effect of the

difference between the old and new neutronic modules. Both TWOTRAN and TWODANT produce a little bit larger amplitude peak with the fixing up procedure than the positive differencing scheme or AWDD scheme.

The SIMMER-TWODANT version was also applied for transient analyses. This again showed the superiority of the new module as cases which were not solvable by the old method or showed very poor convergence, could now be calculated and analyzed.

Conclusions

The new neutronic module is implemented, verified and validated successfully both for stationary and transient cases. While in some cases convergence couldn't be achieved with the former neutronic module based on TWOTRAN, the TWODANT module up to now gives satisfying results in all cases dealt with so far. The tests also showed that the coupling of SIMMER-III fluid dynamics and TWODANT is performed successfully.

As our preliminary results indicate, the choice of the discretization may have important consequences for the calculated reactor physics properties of the investigated configuration and for the neutronic feedback during accident progression. The differences observed between the options POSDIF ON and FIXUP ON (when applying the SIMMER/TWOTRAN) version and, as well, between the standard version, with diamond difference discretization and fixups, and the AWDD-version, with adaptive diamond differencing in space and angle, (when applying the new SIMMER/TWODANT) illustrate the significance of a suitable choice of the discretization scheme and of the appropriate specification of the spatial mesh grid and the Sn-order. It is intended to study these effects in a future separate research effort, when all necessary tools will become available. In particular, a graphical evaluation (visualization) of the fixup-tables would appreciably facilitate rapid progress of these studies. The merits of AWDD in space and angle (or in space only) will then have to be assessed in comparison with mesh refinement and increasing Sn-order.

References

- /1/ RSIC COMPUTER CODE COLLECTION, DANTSYS 3.0, One-, Two-, and Three-Dimensional, Multigroup, Discrete Ordinates Transport Code System, contributed by: Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1995
- /2/ SIMMER-III Manual Version 2 c
- /3/ K. Lathrop, J. Comp. Phys. 4,475 (1969)
- /4/ R.E. Alcouffe, „An Adaptive Weighted Diamond Differencing Method for Three-Dimensional XYZ Geometry, „, Trans. Am. Nucl. Soc. 68, Part A, 206 (1993)
- /5/ W.A. Rhoades & W.W. Engle, Transact. ANS 27, 776, 1977
- /6/ E. Hesselschwerdt, „Implementation of TWODANT in SIMMER-III“, Delegation report, 1998

III. SAS4A-Programmentwicklung

(M. Eigemann, W. Pfrang, B. Porscha, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)

Für sicherheitsorientierte Untersuchungen zum dynamischen Verhalten von innovativen Na-gekühlten Reaktorkernen mit schnellem Neutronenspektrum wird das Programmsystem SAS4A eingesetzt. Es wird in Zusammenarbeit zwischen dem französischen IPSN, dem japanischen PNC und dem Forschungszentrum Karlsruhe kontinuierlich weiter entwickelt. Die im Programmsystem verwendeten Modelle zur Beschreibung physikalischer Phänomene werden an experimentellen Ergebnissen überprüft (siehe 32.22.06). Das sicherheitstechnische Verhalten neu entwickelter Reaktorkerne für den CAPRA-Reaktor und des russischen BN-800 Reaktors steht hierbei im Mittelpunkt. Die Eigenschaften dieser Kernentwürfe werden verglichen mit denen konventioneller Kernentwürfe wie denen des EFR und des französischen SPX.

SAS4A-Programmentwicklung

Im Sommer 1997 wurde eine neue Programmversion SAS4A.Ref96.Rel1 von den Programm-Managern des IPSN offiziell freigegeben. Diese Programmversion enthält eine Reihe von verbesserten Einzelmodellen und insbesondere erstmals den von IPSN entwickelten Programmmodul EJECT zur Beschreibung der Brennstoffbewegung im Brennstab vor Brennstabversagen. Der offiziellen Freigabe der Programmversion folgte ein breit angelegtes Validierungsprogramm anhand der experimentellen Ergebnisse des CABRI-1/2, CABRI-FAST und CABRI-RAFT-Programms. Der EJECT-Modul ist nur für einige wenige Fälle einsetzbar, da die Kopplung zum Deformationsmodul DEFORM-4C noch nicht ausreichend ausgetestet ist. Die Beschreibung der Brennstoffmechanik mit DEFORM-4C zeigte Schwächen bei langsamen Leistungstransienten und bei der Bestimmung von Brennstabversagensbedingungen. Es wurden daher zunächst einige Modellierungsannahmen des DEFORM-Moduls neu formuliert und in ihren Konsequenzen analysiert. Von besonderem Gewicht war hierbei die Festlegung des Pivotradius des Brennstoffpellets, von dem aus die Ausdehnung des Brennstoffs nach innen bzw. außen erfolgt. Die neu eingeführte Vorgehensweise korreliert die Position des Pivotradius mit der Plastifizierungstemperatur des Brennstoffs und dem radialen Porositätsprofil im Brennstoff. Die Plastifizierungstemperatur ist als Funktion des Abbrands formuliert. Darüber hinaus wurde eine iterative Berechnung der Brennstabbelastung für den Fall eingeführt, bei dem das

Brennstoffpellet sich in einem voll gerissenen Zustand befindet. Andere Ansätze zur besseren Simulation des Brennstabverhaltens bezogen sich auf modifizierte Formulierungen zur Erfassung des spaltgasinduzierten Brennstoffschwellens und des Verhaltens von Materialien im Spalt zwischen Brennstoff und Hüllrohr. Alle diese Aktivitäten führten zu einem modifizierten Brennstabdeformationsmodul DEFORM-4C, der das Brennstabverhalten beim Leistungsbetrieb, bei langsamen und auch schnellen Leistungstransienten besser erfaßt. Hierbei spielt auch die zuverlässige Kenntnis der Hüllrohrmaterialeigenschaften in ihrer Abhängigkeit von Temperatur und Dehnrate eine entscheidende Rolle.

Reaktoranalysen

Die neu entwickelte Programmversion SAS4A.Ref96.Rel1-mod FZK wurde zu Untersuchungen des Verhaltens von unterschiedlichen Kernentwürfen bei kernzerstörenden Unfällen herangezogen. Im Mittelpunkt des Interesses stand das Verhalten des oxidischen Referenzkerns des CAPRA-Projekts bei einem unkontrollierten Kühlmitteldurchsatzstörfall (UKDS). Untersucht wurden Auswirkungen einer leicht unterschiedlichen Kühlgruppenstrategie: Für eine Gruppe von Brennelementen, die mit dem gleichen Kühlmitteldurchsatz gekühlt werden, wurde ein etwas größerer Wert gewählt als vom Projekt vorgegeben. Als Folge dieser Änderung kann im stationären Betrieb ein etwas homogeneres Profil der Brennelementaustrittstemperaturen erreicht werden. Die dann für einen UKDS berechnete Leistungsexkursion führt zu sehr hohen thermischen Energiefreisetzung in der Einleitungsphase des Unfalls und zu nicht unerheblichen mechanischen Belastungen des Primärsystems und Reaktortankdeckels von einigen 100 MJ. Vor diesem Hintergrund ist die Frage einer ausgewogenen Wahl für eine optimierte Kühlgruppenstrategie beim CAPRA-Kernentwurf erneut zu diskutieren.

Einen zweiten Schwerpunkt der Reaktoranalysen stellten die Untersuchungen zum sicherheitstechnischen Verhalten eines russischen natriumgekühlten Reaktors vom Typ BN-800 mit innovativem Kernentwurf dar, die im Rahmen einer von der IAEA und der EU unterstützten und koordinierten internationalen Studie durchgeführt wurden. Der Kernzustand am Ende eines Gleichgewichtszyklus mit komplexem Beladezustand wurde ermittelt. Eine Besonderheit des untersuchten Reaktorkernentwurfs ist, daß der integralen Reaktivitätseffekt aufgrund Na-Siedens mit $-0.6 \text{ \$}$ negativ ist, während der maximale positive Reaktivitätseffekt $+4.5 \text{ \$}$ beträgt. Darüber hinaus kann durch radiale Kernexpansion bei Aufheizung der Abstützebenen am oberen Ende der Brennelemente eine negative Reakti-

vitätswirkung von $-0.5 \text{ \$}$ freigesetzt werden. Neben Analysen eines UKDS und von zwei Reaktivitätsstörfällen ($0.05 \text{ \$/s}$ und $0.5 \text{ \$/s}$) wurde ein Reaktivitätsstörfall mit strukturierter Rampe und überlagertem Kühlmitteldurchsatzstörfall untersucht. Dieses Einleitungsereignis spielt im Rahmen der Risikostudie zum BN-800 eine Rolle. Trotz der Besonderheiten der neutronenphysikalischen Auslegung des BN-800 setzt nach Einleitung der Kühlmitteldurchsatzreduktion Natriumsieden ein, und die Siedevorgänge machen den Reaktor nahezu promptkritisch. Brennstoffdispersion nach Brennstabaufließen verhindert aber das Überschreiten von prompter Kritikalität in der Einleitungsphase des Unfalls.

Die berechneten Leistungsexkursionen in der Einleitungsphase der untersuchten Unfälle führen nur zu geringen thermischen Energiefreisetzung, aber zu langfristig nicht kühlbaren Kernkonfigurationen. Mechanische Belastungen des Reaktortanks und des Reaktordeckels lassen sich daher nur nach einer eingehenden Analyse der „Transition Phase“ bis zur permanenten Abschaltung des Reaktors ermitteln.

32.23.04 Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR

(D. Freund, O. Jacobi, M. Heck, W. Ernst, H. Steiner, IMF III)

Abstract

In the first experiment of the TRABANT series in the HFR Petten three fuel pins with (U, Pu)O₂, (U, Pu, Np)O₂ and (Pu, Ce)O₂ fuels have been irradiated in a TRIOX carrier. The irradiation started with Pin 1 (U, Pu)O₂ in HFR cycle 95-05 until cycle 95-10. After a neutronography in cycle 95-11, which showed an intact pin, irradiation was continued with cycle 95-12 with the newly loaded pins Pin 2 (U, Pu, Np)O₂ and Pin 3 (Pu, Ce)O₂, resp. (Pu, Ce)O_{2-x}. Then, the irradiation was interrupted after cycle 96-05 for a neutronography. This inspection showed clearly fuel melting in Pin 1 and the Pin 3 with the hypostoichiometric fuel. Furthermore, a defect in Pin 1 with local fuel ejection into the coolant channel was visible. After unloading of Pin 1 and 3 irradiation with Pin 2 was continued until mid 1997. A final neutronography showed an intact Pin 2.

A detailed analysis of the irradiation data, especially the coolant and clad temperatures of Pin 1 was carried out to detect the time of failure. There are strong indications that failure occurred in cycle 96-03. The reason for fuel melting in Pin 1 is not quite clear, however, significant axial mass transport as observed may be a trigger effect. Melting of the hypostoichiometric part of Pin 2 has already been predicted by the design calculations with SATURN-S if initial rod powers of more than about 440 W/cm are obtained (see PSF Annual report 1996, FZKA 5963, Sept. 1997).

Preliminary design work for the second experiment TRABANT-2 has been carried out. On the basis of the thermocouple data evaluation of TRABANT-1 a proposal for a new thermocouple arrangement in the capsule has been worked out. Due to a change of the fuel pin design fission gas pressure calculations for burn-ups up to 10% have been carried out which do not reveal any significant gas pressures leading to pin failure.

Bestrahlungsexperiment TRABANT-1

Die Arbeiten zu dem Bestrahlungsexperiment TRABANT-1 im HFR wurden mit der Auswertung von Bestrahlungsdaten und Ergebnissen der zerstörungsfreien Nachuntersuchung fortgesetzt.

In der ersten Bestrahlungsphase, die über sechs Reaktorzyklen (Zyklen 95/05 – 95/10) lief, wurde nur der Prüfling Pin 1 mit $(U_{0,55}, Pu_{0,45})O_2$ bestrahlt. Nach einer Neutrografie des (intakten) Pin 1 wurde die Bestrahlung zusammen mit den zwei anderen Prüflingen, Pin 2 mit $(U_{0,55}, Pu_{0,40}, Np_{0,05})O_2$ und Pin 3 mit $(Pu, Ce)O_2$, fortgesetzt. Nach sechs Zyklen (95/12 – 96/05) wurde eine weitere neutrografische Untersuchung durchgeführt. Hierbei stellte sich heraus, daß in den Prüflingen Pin 1 und Pin 3 Brennstoffschmelzen aufgetreten waren, welches bei Pin 1 zu einem Stabdefekt im oberen Brennstoffsäulenteil mit Brennstoffaustrag führte. Nach Ausbau dieser beiden Stäbe wurde die Bestrahlung mit Pin 2 ab Zyklus 96/07 fortgesetzt und Mitte 1997 beendet. Eine abschließende Neutrografie zeigte, daß der Stab intakt war.

Zur Klärung von Ursache und Zeitpunkt des Stabschadens von Pin 1 wurde eine eingehende Analyse der Bestrahlungsdaten, insbesondere der Kühlmittel- bzw. Hülltemperaturen durchgeführt. Da der Stabschaden in der zweiten Bestrahlungsphase aufgetreten war, wurde insbesondere dieser Zeitraum genauer untersucht. Wie die über je einen Reaktorzyklus gemittelten axialen Temperaturverteilungen zeigen, steigen diese mittleren Temperaturen im oberen Brennstoffbereich etwa ab dem 5. Zyklus (95/09) nahezu kontinuierlich an, mit einem deutlichen Sprung hin zu höheren Werten in Zyklus 10 (96/03), wie in Abb. 1 erkennbar.

Neben diesen Mittelwerten aus den in fünf axialen Positionen angeordneten Thermoelementen gewonnenen Meßwerten wurden jeweils auch die Meßwerte der einzelnen Thermoelemente untereinander verglichen. Hier zeigen die azimuthalen Gradienten in Zyklus 10 Besonderheiten. Deutlich wird dies zusätzlich an einem Thermoelementpaar, welches sich ca. 235 mm oberhalb der Brennstoffsäule im isothermen Natrium befindet: Bei $t = 409$ h erhöht sich die Na-Temperatur sprunghaft in beiden Thermoelementen um 6 – 8 °C, wie aus der nachstehenden Abb. 2 ersichtlich.

Die Veränderung des axialen Temperaturgradienten ist vermutlich auf axialen Brennstofftransport zurückzuführen. Der in der Neutrografie bei Bestrahlungsende

nachgewiesene Massetransport ist bereits in der Neutrografie nach Zyklus 95/10 im noch intakten Brennstab erkennbar. Im unteren (heißeren) Teil der Brennstoffsäule ist eine Verringerung des Herstellungszentralkanals erkennbar, die oberste Brennstofftablette ist zugepumpt. Diese Befunde, die auch aus anderen Bestrahlungsexperimenten mit Hohltabletten bekannt sind (POUSSIX, MEDINA), wurden modelltheoretisch bereits 1988 untersucht und werden jetzt weiterverfolgt. Axialer Massetransport in der Dampfphase findet durch Diffusion und Konvektion statt mit den wichtigsten Einflußgrößen: Zentralkanaldurchmesser, axialer Temperaturgradient und Dampfdruck. Wie erste Modellrechnungen zu diesem Experiment zeigen, können unter extremen Temperaturbedingungen Schichtdickenwachstumsraten von $10 \mu\text{m}/100 \text{ h}$ durch Kondensation auftreten. Begleitende Rechnungen dazu mit SATURN-S an Volltabletten, wie sie im oberen Brennstoffteil nach sechs Zyklen gemäß Neutrografie vorliegen, zeigen, daß die Anschmelzleistungen bereits bei ca. 435 W/cm liegen. Ob diese Leistungen tatsächlich geherrscht haben, ist noch zu verifizieren.

Bestrahlungsexperiment TRABANT-2

Mit Auslegungsarbeiten zu diesem Folgeexperiment wurde begonnen. Aufgrund der Analyse der Meßdaten von TRABANT-1 mit der dort vorliegenden Thermoelementanordnung wurde ein Vorschlag erarbeitet, der zu einer neuen axialen und azimutalen TC-Anordnung in der TRIOX-Kapsel führt, um eventuelle Stabschäden u. U. während des Betriebes feststellen zu können. Änderungen im inneren Aufbau der Prüflinge führten zu neuen Berechnungen des maximal zu erwartenden Gasdrucks im Brennstab. Bei Abbränden bis zu 10 % FIMA und vollständiger Gasfreisetzung ist mit Gasdrücken bis zu 3 Mpa bei Raumtemperatur zu rechnen, Werte, die bei Betriebstemperaturen zu keiner nennenswerten Hüllrohrbelastung führen.

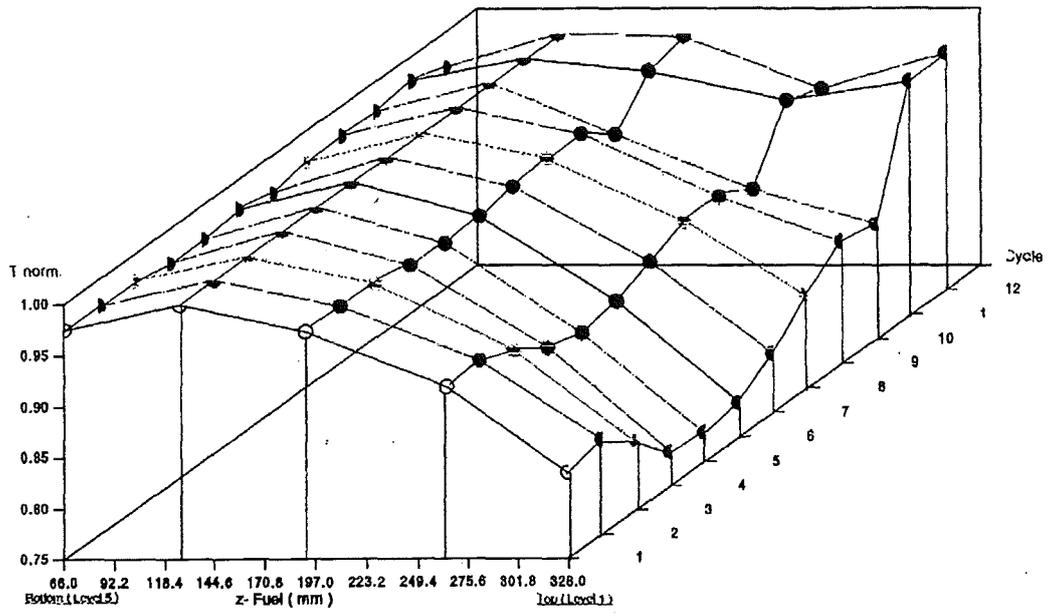


Abb. 1: TRABANT Pin 1: Normierte axiale Hülltemperaturen über zwölf HFR-Zyklen

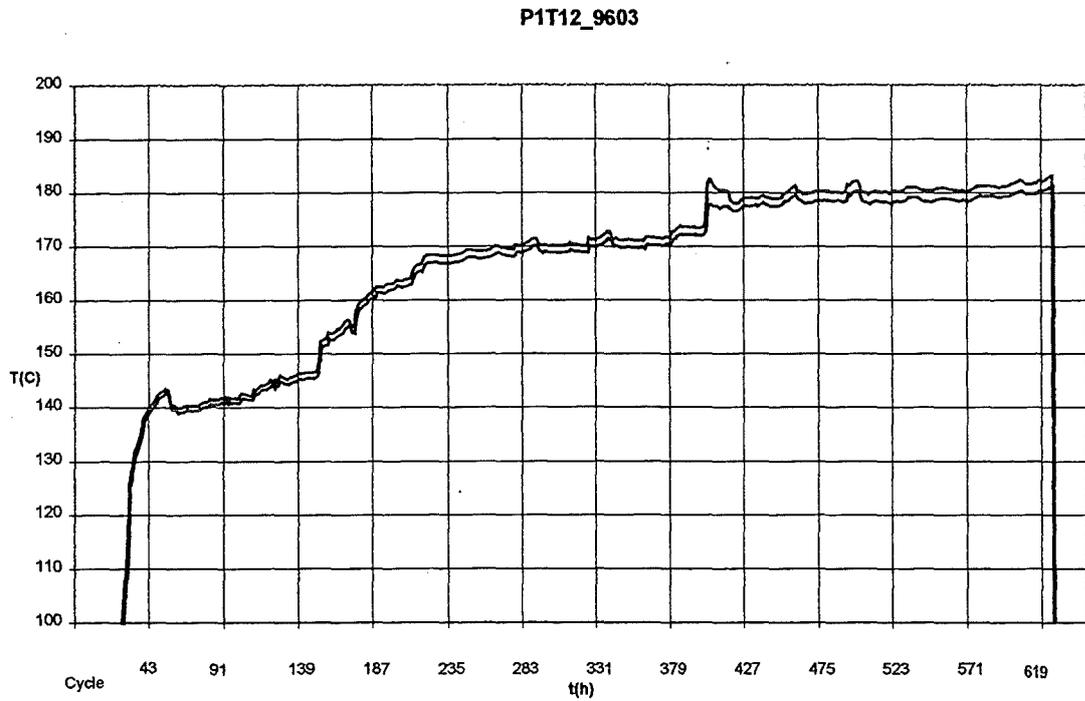


Abb. 2: TRABANT Pin 1: Temperaturverlauf im oberen Na-Bereich (Zyklus 96/03)

32.23.05 Untersuchungen zu beschleunigergetriebenen, unterkritischen Anordnungen

- I. Thermohydraulische Auslegung einer beschleunigergetriebenen, unterkritischen Anlagenanordnung (ADS)
(J.U. Knebel, X. Cheng, H.J. Neitzel, IATF)

Abstract

At the Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) a project study is performed that investigates accelerator-driven subcritical reactor systems (ADS). The aim of this study is to critically evaluate the characteristics of a subcritical system with a critical system, mainly with respect to the potential of transmutation of plutonium and long-lived actinides, to the feasibility and to safety aspects. The comparison is done with respect to core design, neutronics, safety, system analyses, materials and corrosion. This article describes the numerical and experimental work performed up to now at the Institute of Applied Thermo- and Fluidynamics (IATF) that investigates the heat removal from a liquid metal target, e.g. the window and the spallation zone. The work is done in cooperation with the Institute of Physics and Power Engineering (IPPE), Obninsk Russia, and aims at designing and optimising a 1 MW_{th} liquid metal spallation target for an ADS system. The spallation target will be tested under irradiation in Los Alamos National Laboratories (LANL), USA.

1. Introduction

An accelerator-driven subcritical reactor system (ADS) mainly consists of three parts: an accelerator for primary particles (protons), a target in which the protons produce free nucleons (neutrons) in a spallation reaction, and a subcritical blanket in which the fission reaction and the release of thermal energy takes place, see figure 1. The protons are introduced into the target through a vacuum beam tube, the beam tube

being closed by a window at the end. The target is a heavy liquid metal (e.g. lead bismuth alloy PbBi). The spallation neutrons produced in the target are completely independent of the subcritical blanket. A shut-down of the accelerator or a interruption of the beam immediately stops the fission reaction.

ADS systems, in general, are proposals that contain an interesting potential for a possibility to improve the way in which nuclear energy could be used for electricity production and, what might even be more important, for plutonium and actinide burning. An ADS system provides a powerful proton beam (coming from an accelerator) which, having a spallation in a liquid lead target, produces a high number of neutrons. These neutrons are a good requirement for a transmutation machine. Due to the subcriticality of the system advantages to safety are expected. Such an ADS system is usually associated with Professor Carlo Rubbia's Energy Amplifier, Carminati et al. (1993).

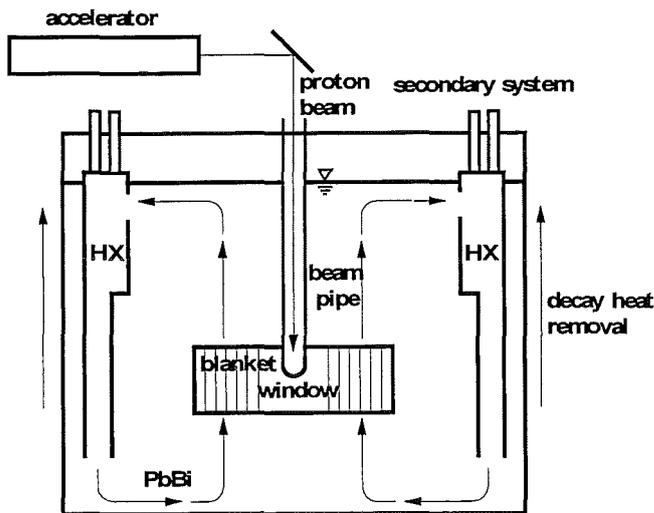


Figure 1: Sketch of an accelerator-driven subcritical reactor system (ADS).

Such a new reactor system involves the development of new technologies, e.g. a new reactor system, new accelerators to drive the reactor, new fuel, new fuel fabrication and fuel reprocessing systems, new waste management arrangements, Pooley (1997).

The main characteristics of an ADS system are: Accelerator-driven and subcritical, fast neutron spectrum, lead as coolant, thorium-based fuel, possibly natural circulation in normal operation.

One of the crucial problems of such an ADS system is the design of the target, mainly the heat removal from the window and the spallation zone. This holds for

normal operation and for decay heat removal.

2. Results

In the framework of a project that is funded by the International Science and Technology Centre (ISTC), IPPE is designing, manufacturing a 1 MW_{th} liquid metal spallation target which will be tested under irradiation in LANL, USA.

Three target designs are proposed by IPPE, which are sketched in figure 2, Gromov et al. (1997) and Yefimov (1997). The target is arranged horizontally, the proton beam entering from left. The window is made from ferritic-martensitic steel (HT9 type). The flow direction of the PbBi coolant is indicated by arrows.

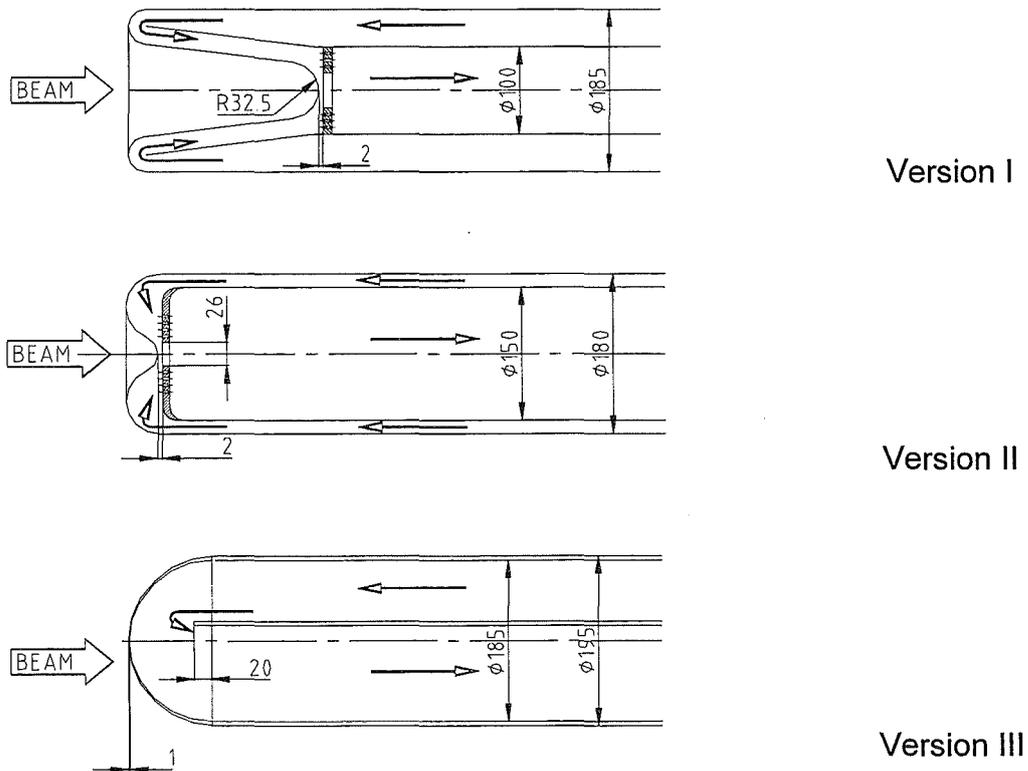


Figure 2: Target designs proposed by IPPE.

In order to assess and quantify the heat removal from the window and to compare the different designs, first numerical calculations using the software package FIDAP have been performed. For all three target designs the inlet mass flux is set to $15\text{ m}^3/\text{h}$, the inlet temperature is set to 220°C . The heat source distribution is taken from MARS-10 calculations performed at IPPE. The axial heat distribution shows an

exponential decay within a distance range of 0.5 m , the radial distribution is Gaussian.

In general, the calculations show that the cooling of the stagnation point is a critical issue. The lowest flow velocities and thus the highest temperatures are found in the vicinity of the stagnation point.

One possibility to improve the heat transfer characteristics is to introduce a flow resistance downstream of the beam window, e.g. a perforated plate. In table 1 the maximum temperatures in the target are given. The introduction of the perforated plate in the target design of version I reduces the maximum temperature from 884°C to 325°C and prevents an early separation of the liquid metal flow from the window surface.

Table 1: Maximum temperatures for the target designs from figure 2.

target design	max. temperature
version I without plate	884°C
version I, with plate	325°C
version II	387°C
version III	605°C

As an example, figure 3 gives a typical temperature and velocity distribution for a target design of version I. The heating is simulated by a liquid sodium jet impinging on the inner surface of the window. This heating could be realized in a model experiment. Due to the high mass flux of the forced PbBi-flow, the convective heat transfer is large in comparison to the molecular heat transfer perpendicular to the window surface. This results in a thermal boundary layer which is comparably thin for a liquid metal coolant. The major temperature gradient is within the first 10 mm from the window.

Another possibility to reduce the high temperatures in the stagnation point is to reduce the heat flux at the window surface. Having one beam pipe in the centre of the blanket the heat flux is in the range of 500 W/cm^2 . A proposal of the Forschungszentrum Karlsruhe is to divide the strong central beam into three or six weaker beams, which are symmetrically arranged at the periphery of the blanket. Thus, the local heat flux at the beam windows can be significantly reduced. In

addition, the multiple-beam approach leads to a more favourable neutron and power distribution in the blanket. The multiple-beam approach could be realised by providing one small accelerator for each beam, or by splitting one main beam into several single beams, or by rotating the main beam over the beam pipes using a kicker.

The numerical calculations will be backed up by a water experiment that is being designed to investigate a similarly scaled target model. In a first step, the hydraulic behaviour of the target is investigated in isothermal flow, the velocity being measured by Laser Doppler anemometry. In a second step, the window will be heated to investigate the cooling of the window and to measure the heat transfer characteristics.

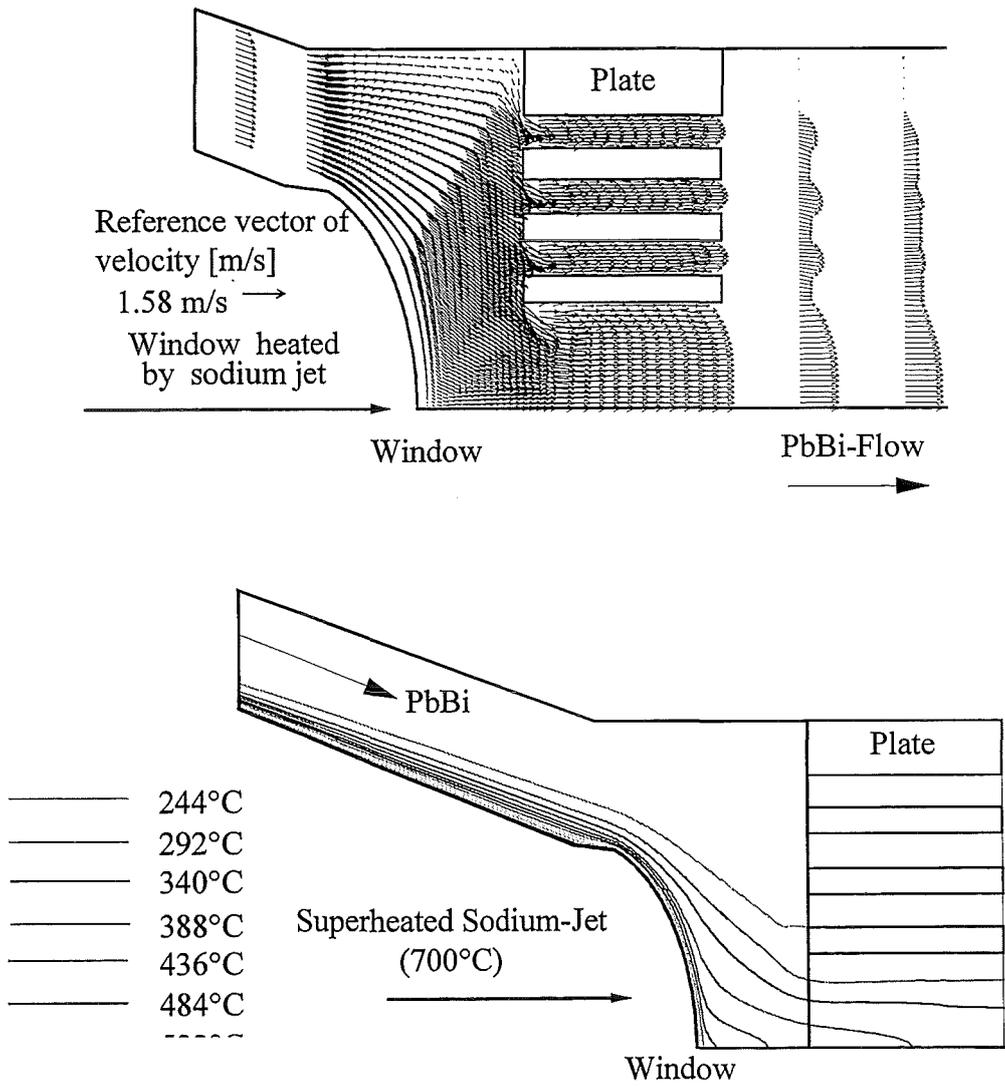


Figure 3: Typical temperature and velocity distribution for a target design, version I.

3. Main progress

The article gives an overview of the work at FZK that is related to an accelerator-driven subcritical reactor system ADS, especially focusing on the heat removal from the liquid metal target.

First numerical results of heat removal from a liquid metal spallation target, e.g. the window and the spallation zone, are presented. The target designs under consideration are proposed by IPPE. With the help of this work, the target design will be optimised to such an extent that a 1 MW_{th} target can be manufactured and tested under irradiation in LANL.

In order to reduce the high temperatures in the stagnation point and to reduce the heat flux at the window surface, a multiple-beam approach is proposed that divides the strong central beam into three or six weaker beams, which are symmetrically arranged at the periphery of the blanket.

4. Future activities

- Pre-experiments using water as fluid to investigate hydraulic and thermohydraulic behaviour of a target in scaled 2D and 3D geometry. The objective is to optimise the target geometry.
- Design and construction of main experiment using PbBi as fluid with the objectives:
 - Single-effect investigations (flow in target, flow in fuel element/s) and
 - Integral-effect investigations (forced-convection or natural-convection flow in primary system for normal operation condition or decay heat removal condition).
- All experiments are accompanied by numerical calculations using CFD-codes, such as CFX4.1, FIDAP or FLUTAN.

5. References

Carminati, F., Klapisch, R., Revol, J.P., Roche, Ch., Rubio, J.A., Rubbia, C., An Energy Amplifier For Cleaner and Inexhaustible Nuclear Energy Production Driven by a Particle Beam Accelerator, European Organisation for Nuclear Research Report CERN/AT/93-47 (ET), November 1, 1993.

Gromov, B.F., Yefimov, E.I., Leonchuk, M.P., Liquid lead-bismuth targets as intense neutron sources in accelerator-driven systems for actinides transmutation and plutonium utilisation, Proc. GLOBAL'97, Japan, October 6-10, pp. 1285, 1997.

Yefimov, E.I., private communications during IATF-seminar presentation at Forschungszentrum Karlsruhe, 02.12.1997.

Pooley, D., Opinion of the Scientific and Technical Committee (STC) on a nuclear energy amplifier, nuclear science and technology, European Commission, EUR 17616 EN, 1997.

II. Vergleichende Untersuchungen zum Sicherheitspotential von unterkritischen, beschleunigergetriebenen Systemen

(W. Maschek, B. Merk, INR)

Introduction

In recent years the interest for reactors coupled with proton accelerators has been revived /1, 2, 3/. The application areas are related to the burning (transmutation) of plutonium / minor actinides / long lived fission products and power production. A European proposal for an accelerator driven system is being promoted by Rubbia /2/. This is a **fast** lead-cooled subcritical core connected to a proton accelerator. Though the design of the system is not yet fixed, some first estimates on the potential safety behavior are made.

Comparison of basic safety issues

Up to now no systematic safety evaluation of the new system is available. Some first estimates on the safety behavior of the ADS are given here and in /2, 4-6/. These analyses are mostly related to class 4 (**beyond design basis**) accidents. Though it might be surprising that in a first safety assessment BDBAs play an outstanding role to judge the safety of an ADS this can be explained as follows: In the area of fast reactor safety the core disruptive accidents have played a central role since the very beginning of this reactor line. The main reasons were the positive void coefficient and that the core was not in its most reactive configuration (possibility for recriticalities). In lead cooled accelerator driven subcritical systems the void problem is greatly alleviated, because (1) the high boiling point of lead does not lead to a classical 'voiding', (2) the overall void of the core is generally negative and (3), the 'subcriticality' of the system is larger than any positive void contribution. Concerning recriticalities it can be shown, that the ADS has a significantly reduced recriticality potential.

For sodium-cooled LMRs, in the BDBA area, traditionally **unprotected** (= no scram) accidents are **postulated** and analyzed, as the ULOF (unprotected loss of flow), UTOP (unprotected over power) and the ULOHS (unprotected loss of heat sink). For LMR designs of the past, energetically mild core disruption accident scenarios are

calculated under these conditions. In 'bounding scenarios' however also energetic power excursions could be found /7, 8, 9/. Similar analyses have been performed for an ADS type reactor /4, 5/. They show, that for **unprotected** (= with neutron source 'on') accidents, mild power transients with slow core disruption could take place, but that the general accident behavior is benign. In case the neutron source can be shut-off, no core melting would occur. In a 'critical' LMR this would correspond to a successful and safe scram, also without core melting.

Safety achievements in 'critical' Fast Reactor designs

A good line for comparison and also the yard stick for safety of ADS systems could be the design of the EFR (European Fast Reactor) /9/ or IFR (Integral Fast Reactor) /10/ with their related new safety philosophy. For the EFR, e.g. in addition to the conventional two diverse shutdown systems, the so-called third shut-down level has been developed. This 3rd shutdown-level comprises a certain amount of measures/devices which ultimately eliminate ULOFs, UTOPs and ULOHSs by design. By these measures the classical initiators will no more lead to core disruption and core-melting. Nevertheless, for EFR also core disruptive accident analyses have been performed. The core was driven into voiding and melting by suppressing inherent safety features as e.g. control rod driveline expansion. The main reason for performing these analyses was the acceptance of a 'limit of human understanding' despite all the safety precautions and to evaluate the safety margins and reserves of the system/12/.

Analyses of core disruptive accidents for ADS

To prevent the propagation of accident initiators in an ADS, the accelerator has to be switched off or the proton beam has to be interrupted. To shut-off the beam simple passive devices will flood the vacuum pipe through which the proton beam enters the reactor /2/. Reactivity insertion accidents with fast or slow ramp rates and total reactivity insertions similar to the subcriticality margin of the ADS can lead to power increases of a few tenths of nominal power and could lead to a limited number of fuel pin failures. If (hypothetically) reactivities are inserted, which are considerably above the subcriticality margin, more extended pin failures will occur - but due to the

favorable 'void - behavior', the molten fuel sweep-out will dominate and will reduce reactivities and bring the power back to nominal /5/.

Severe cooling accidents such as the ULOF or ULOHS lead to a heating up of the core with some reduction in the power due to negative feedbacks like the Doppler and fuel pin expansions /5/.

Recriticalities possible in ADS?

In the same sense as done for EFR one could analyze core compaction scenarios for ADS systems. It was investigated, if starting from a typical U233/Th232 oxide ADS-reactor configuration with one central beam/target hole, critical or even prompt critical material assemblies could be realized. Various compaction scenarios - e.g. with previous steel relocation - have been analyzed. In the case that the 'fuel' assemblies axially after disruption as a particle bed, already a reactivity increase of 7000 pcm is obtained. In the case of a complete compaction 10000 pcm are reached. The U233/Th232-oxide configuration with the above enrichment contains about two critical masses. This is by an order of magnitude lower than in a 'critical' fast system /13/. Transient analyses show that under recriticality conditions a power excursion can result irrespective of shutting down the beam.

Safety advantages for ADS in the BDBA area

In a subcritical system with an external neutron source generally more design flexibility is available to optimize safety parameters compared to a 'critical' system. Based on the preliminary safety analyses, for an ADS one can deduce the following advantages/disadvantages in the BDBA area compared to a 'critical' fast sodium cooled reactor:

- + Much is gained by the favorable void values of the ADS. In addition also the low clad worth is noteworthy.
- + In a 'critical' core like the EFR, many of the 'third shut-down level' measures aim at reducing the reactivity of the system and keep it permanently subcritical by inherent measures. In a 'subcritical' core this status is achieved per se.

- + If core-melt accidents are postulated, the above neutronic analyses show that the ADS has a significantly reduced recriticality potential compared to a conventional LMR. The ADS core will contain an order of magnitude less 'critical masses' than a LMR core.
- + To assess the recriticality potential it is also important to analyze possible driving forces for compaction. As the contact temperature between a fuel-melt and lead is below the saturation point no significant concerns about fuel/coolant interactions (FCI) and 'pressure driven recriticalities' exist.
- + An important point related to the favorable void coefficient is that LOF driven TOPs with their autocatalytic (cliff-edge) potential is significantly reduced.
- + Safety advantages can also be seen in the use of lead as coolant because of the non-flammability of the coolant and that it reacts mildly with water.
- The high melting point of 600°K might cause some problems because of the freezing potential. Overcooling transients and loss of decay heat removal scenarios have to be carefully analyzed.

Conclusions

A preliminary comparison of generic issues of core disruptive accident conditions and scenarios (for BDBA) of an ADS with a 'critical' fast LMR shows significant advantages for the ADS system. However, also current design strategies for LMRs try to eliminate core disruptive accidents as a safety concern by specific inherent measures or special devices. The same strategy will be followed for ADS and as a target, at least a level of safety as for a modern LWR or LMR should be achieved. This might be easier to realize because of inherent features of the ADS. Detailed studies along the defense in depth strategy will finally reveal the actual 'gain' in safety. Due to the large range of applicability and the possibly achievable high level of safety the ADS might indeed be a promising system of the future.

References

- /1/ C.D. Bowman et al.: Nucl. Instr. and Methods A320,336 (1992)
- /2/ C. Rubbia et al.: CERN/LCH/96-11 (EET) (1996)
- /3/ G.J. Van Tuyle et al.: Nucl. Techn., Vol 101,1 (1993)
- /4/ H. Rief et al.: NATO Adv. Research Workshop on Consid. Excess Plutonium, Moscow, Russia (1996)
- /5/ H.U. Wider et al.: 2nd. Int Conf. on ADS Transmutation, Kalmar, Sweden (1996)
- /6/ J. Magill et al.: IAEA Tech. Com. Mtg. on Hybrid Concepts, Madrid, Spain (1997)
- /7/ W. Maschek et al.: Nucl. Techn. 63, 330 (1983)
- /8/ T.G. Theofanous et al.: NUREG/CR-3225 (1984)
- /9/ Sa. Kondo et al.: Int. Conf Fast Reactor Safety, Snowbird, USA (1990)
- /10/ G. Heusener et. al.: ARS'94, Pittsburgh, USA (1994)
- /11/ D.C. Wade: ARS'94, Pittsburgh, USA (1994)
- /12/ H. Vossebrecker: IA Ident.- 35.026027 (1990)
- /13/ W. Maschek et al.: ICON-4, New Orleans, USA (1996)

III. Flüssigmetallkorrosion
(H. Glasbrenner, IMF III)

Abstract

The corrosion behaviour of structural materials and possible beam window materials in liquid lead and in the eutectic melt lead-bismuth is important for the development of a future accelerator driven system. This literature survey mirrors available information on corrosion attack and which candidates might be promising for future corrosion investigations.

It was found that the attack of molten metal on structural material is qualitatively related to the solubility of the solid in the melt. This is in agreement with the order of the resistance of steels described in the literature. The corrosion attack by liquid uninhibited lead increases from carbon and low alloy steels over chromium stainless steels to austenitic stainless steels. The attack can be greatly reduced by an inhibitor added to the melt and/or by the presence of a protective layer on top of the structural material. The most promising candidates as inhibitors are zirconium and titanium, an iron aluminide or molybdenum layer seems to be the best to reduce corrosion attack by liquid lead.

Zusammenfassung

Das Korrosionsverhalten verschiedener Strukturmaterialien und möglicher Fenstermaterialien in flüssigem Blei bzw. in der eutektischen Schmelze Blei-Wismuth ist für die Entwicklung einer zukünftigen beschleunigergetriebenen unterkritischen Anordnung eine wichtige Fragestellung. Eine durchgeführte Literaturstudie gibt erste Informationen über die Art des Korrosionsangriffes. Des weiteren konnte anhand der Studie die Materialgruppe mit dem geringsten Korrosionsangriff ermittelt werden. Die aussichtsreichsten Materialien sollen in einem zukünftigen Korrosionsexperiment getestet werden. Der Korrosionsangriff von flüssigem Blei und Blei-Wismuth auf das Strukturmaterial steht qualitativ im Verhältnis zur Löslichkeit des entsprechenden Elements in der Schmelze. Dies stimmt mit der Reihenfolge der Korrosionsbeständigkeit von Stählen, die in der Literatur beschrieben werden, überein. Der Korrosionsangriff von flüssigem Blei nimmt von niedrig legierten Stählen über Chromstähle bis hin zu den Austeniten merklich zu. Der Angriff kann deutlich re-

duziert werden, in dem der flüssigen Schmelze ein Inhibitor zugesetzt wird und/oder in dem eine Schutzschicht auf dem Strukturmaterial erzeugt wird. Zirkonium und Titan sind die wohl aussichtsreichsten Kandidaten als Inhibitoren, Deckschichten aus Eisenaluminid oder Molybdän scheinen die Korrosion in flüssigem Blei ebenfalls wesentlich zu reduzieren.

1. Introduction

Liquid Pb and the eutectic alloy Pb-Bi (55.5 wt% Bi) are both proposed as spallation target and coolant in a future accelerator driven system (ADS). The heavy metals Pb and Bi are much more aggressive corrodents than the alkali metals. The corrosive attack by these metals is primarily the result of the high solubility of many metals. For example molten lead has a significant solubility for Ni and Mn > 100 ppm and Fe, Cr, Mo 1 - 10 ppm at 600 °C. The corrosion of steels in lead is about 40 times less than in Bi under similar conditions. The Pb-Bi eutectic is less aggressive than Bi.

For the development of an ADS, the corrosion resistance of different structural materials is consequently important in liquid Pb and Pb-Bi up to 650 °C and a flow velocity of the molten metal in the order 3 - 5 m/s. Additionally the corrosion behaviour of beam window materials in Pb and Pb-Bi is of great interest. The temperature for the window is above 1000 °C. The alloy W-Re (Re 26 wt%) is discussed as primary candidate for a beam window. Alternative window materials are Nb, Ti, Be and their heat resistant alloys.

Some work was already done in the field of corrosion. Most experience concerning Pb-corrosion of structural materials exist in the former Soviet Union, but unfortunately these are unpublished results. This literature survey has been carried out to select the most promising candidates for future corrosion investigations to be done in our laboratory. In the following the main results described in the literature will be presented.

2. Literature survey

2.1 Corrosion in lead

The liquid lead corrosion tests described in the literature used no standard test procedures. A direct comparison of the results is, therefore, difficult, because there are many parameters which can be varied, e.g. temperature, time, temperature range, static or flowing Pb, flow velocity, sample preparation, different inhibitors.

In general, the order of attack resistance of steels in uninhibited liquid lead is carbon and low alloy steels > chromium stainless steels > austenitic stainless steels. The corrosion effects observed in liquid are liquid metal embrittlement (LME) and depleting corrosion.

LME of ferritic and austenitic steels is expected to occur over a range of about 50 °C on either side of the lead melting point [1]. The operating temperature, therefore, has to be above 375 °C. If an oxide or other coatings can be maintained, LME will not be a problem.

Some corrosion experiments reported in the literature at higher temperature (< 400°C) will be briefly described for different materials.

Hastelloy N for example contains 70 wt% nickel, which is highly soluble in lead (\approx 8000 ppm at 700 °C). Attack was severe in only 4 days tested in a loop at 700 °C with $\Delta T = 150$ °C [2].

The low alloy steel Croloy 2 1/4 the major components of which (Fe and Cr) have solubilities of ca. 8 ppm and ca. 6 ppm resp., at 700 °C. It was attacked quite severely by lead with extensive pitting. However, in this case the exposure required much longer (15 d) than for the nickel alloy [2].

The ferritic steel HT-9, for instance, immersed in liquid lead for 50,000 h exhibits a corrosion loss of about 80 μm at 500 °C [3].

In general, ferritic steels are moderately corroded by lead and in particular they do not exhibit intergranular damage. The effect of intergranular damage is more pronounced for austenitic steels and Ni base alloys because of the preferential depletion of nickel due to the enhanced solubility.

Corrosion tests of W, Re and of W-Re alloys in lead are not noted in the literature. The solubility of W and Re in lead is quite low at high temperature [4]. Therefore, the depletion of both metals should be low.

Molybdenum has a very low solubility (ca. 0.1 ppm at 700 °C) in lead. No detectable attack was found after 282 d and even more severe tests (300 d at 800 °C and 22 d at 1000 °C) gave equally good results [2].

Ti is attacked by lead at 816 to 1000 °C [5].

In thermal convection loop tests the specimens V, Nb, Nb-5%V, Nb-1%Zr were not attacked at 625 °C over a period of 1658 h [6]. At 700 °C ($\Delta T = 152$ °C) no corrosion

attack was observed in V and Nb specimens in circulating molten lead over a period of 306 h.

Inhibitors and coatings

Corrosion of ferrous alloys by Pb and Pb-Bi can be inhibited to varying degrees by addition of zirconium, titanium, thorium, tellurium, chromium and aluminium to the liquid metals. Zr and Ti are by far the most effective inhibitors.

Mg in conjunction with Zr and Ti is also an effective addition in the inhibition of corrosion by Pb and Pb-Bi [5].

The Russians (IPPE Obninsk) have built large lead loops made of SS 316L which operate up to 600 °C. To avoid corrosion by nickel depletion the oxygen content in the liquid melt has to be kept constant and is therefore continuously controlled. The oxygen reacts with the steel and a corrosion resistant layer existing of chromium iron oxides is formed on the surface [7]. This oxide film on ferrous structural material can give considerable protection against attack [2].

In the literature two coatings were described which show good corrosion resistance in Pb. Plasma sprayed Mo onto Croloy showed no visible cracking of the coating after 56 d at 720 °C. Calorising of Al onto a steel remained unchanged in weight and in dimensions after 56 d at 720 °C. Aluminium alloyed with iron forms a high melting coating, well bonded to the substrate with a good matching of thermal expansion coefficients, which reacted with traces of oxygen to form a self-healing protective alumina rich scale at the specimen lead interface [2]. Hot-dip aluminised ferritic MANET steel was exposed to Pb-17Li in a loop at 450 °C up to 10,000 h. No corrosion attack was observed [8].

2.2 Corrosion in lead-bismuth and bismuth

Bismuth is about 40 times more aggressive than lead. The eutectic melt Pb-Bi is less corrosive than Bi. Stainless steels are less resistant to Pb-Bi eutectic than carbon or low alloy steels. In general, the austenitic stainless steel exhibit good resistance at 230 °C, some attack at 570 °C and poor resistance at 1000 °C. Experiments described in the literature were mostly carried out with inhibited Pb-Bi by addition of Ti and Zr [9]. No corrosion occurred in inhibited loops operated for 10,000 h at high temperature as high as 550 °C in bismuth and temperature as high as 650 °C in

lead-bismuth eutectic [9]. The authors concluded that Ti and Zr inhibited corrosion by forming the compounds ZrN, TiN and TiC on the sample surface.

3. Conclusions

Two different corrosion effects are described in liquid metals: liquid metal embrittlement (LME) and depleting corrosion. LME occurs about 50 °C above and below the melting point of the metal. Therefore, LME is unimportant in the case of ADS. In the contrary to this, depletion corrosion increases with increasing temperature and hence this phenomena cannot be neglected.

Austenitic steels are severe attacked by lead and lead-bismuth because of preferential depletion of nickel. The addition of oxygen to lead can reduce the corrosion rate down to zero by temperature up to 600 °C [2, 7].

Ferritic steels such as HT-9 are quite resistant to liquid metal corrosion and may be workable up to 500 °C. Corrosion inhibitors and /or oxide coatings should allow temperatures up to or above 500 °C with HT-9 [1].

Refractory metals show excellent corrosion resistance in stationary and as well as in circulating molten lead [6].

The most promising inhibitors are Zr and Ti added to the liquid melt. No corrosion occurred in inhibited loops operated for 10,000 h at high temperature in bismuth and lead-bismuth [9].

To coat the structural material with an iron aluminide or molybdenum layer on the surface is another method of great promise to reduce the corrosion attack [2].

However, irradiation on corrosion attack are unknown until now. The investigation in this field should be started in the near future because these are very time consuming experiments.

In conclusion there is no doubt that some type of additive and/or coating can effectively reduce corrosion in the domain of interest. It is essential to perform experimental validation, also with new material on the market, e.g. low activation steels (Eurofer).

4. References

- [1] J.D. Gordon, J.K. Garner, J. Hoffman, *Liquid Met. Eng.* 1 (1984) 329.
- [2] R.C. Asher, D. Davies, S.A. Beetham, *Cor. Sci.* 17 (1977) 545.
- [3] E. Branover, Private Communication.
- [4] C. Guminski, *Metallkunde* 81 (1990) 105.
- [5] W.E. Berry in „Corrosion in Nuclear Applications“, John Wiley and Sons, New York 1971, p. 308.
- [6] I. Ali-Khan in „Material Behavior and Physical Chemistry in Liquid Metal Systems“, ed. H.U. Borgstedt, Plenum Press New York 1982, p. 243.
- [7] A. Rusanov, Private Communication.
- [8] H. Glasbrenner, H.U. Borgstedt, *Fus. Eng. Des.* 27 (1995) 659.
- [9] G.M. Tolson, A. Taboada, ORNL-Report 1437 (1966).

IV. Generation of a Group Constant Library for Neutron Energy until 50 MeV.
Tests and Applications
(C. Broeders, I. Broeders, INR)

Introduction:

Evaluated nuclear data libraries that are in use for the analysis of fission- and fusion-reactors (e.g. ENDF/B-VI, JEF2.2, JENDL3.2) cover the energy range from $1 \cdot 10^{-5}$ eV to 20 MeV. In accelerator driven systems the energies of the neutrons may reach several hundreds of MeV and even more than 1 GeV. Neutron flux densities at these high energies are calculated with codes like HETC or LAHET, the neutron cross sections are calculated in the codes from nuclear models. Below 20 MeV evaluated data files are applied together with transport codes like TWODANT or MCNP. Since several years work is in progress at different laboratories in order to extend the upper energy boundary of evaluated nuclear data to energies above 20 MeV, e.g. to 50 MeV, 150 MeV, 300 MeV.

In the following we describe the generation of a group constant set for the energy range from 10^{-5} to 50 MeV and its application in transport calculations. The work has been carried out in cooperation with the Obninsk Institute of Nuclear Engineering (INPE). INPE contributed the evaluated nuclear data in ENDF-6 format, the generation of the group constant library, test and application have been carried out at FZK.

Generation of a 75 group constant set in the energy range from 10^{-5} eV to 50 MeV

The evaluation of the nuclear data files up to 50 MeV has been carried by the Institute of Nuclear Power Engineering (INPE), Obninsk [1, 2]. Above 20 MeV these cross sections have been obtained from nuclear model calculations and from available experimental

data. Most of the data **below 20 MeV** have been adopted from evaluated nuclear data libraries (ENDF/B-VI, JENDL3.2). The data for $10^{-5}eV \leq E \leq 50MeV$ have been made available in ENDF-6 format.

Cross sections of the following isotopes are included in our investigations: O^{16} , Pb^{208} , Th^{232} , Pa^{233} , U^{233} , U^{238} , Pu^{239} and Pu^{240} up to 50 MeV, and U^{235} (up to 300 MeV). Data for Fe^{56} and Cr^{52} which have been evaluated at INPE for the IFMIF project have been made available to us and are used in our calculations.

The nuclear data processing code NJOY [6] version 94.105 has been applied for the generation of the group constants. The 75 energy group structure is that of the 69 group WIMS set extended by 6 energy groups up to 50 MeV. The additional group boundaries are: 13.8, 15.0, 20.0, 27.1, 36.8 and 50.0 MeV. The group constants have been calculated for six temperatures: 300, 900, 1200, 1500, 2100 and 3000 K and for the seven values of the background cross section σ_0 : 10^{-3} , 10, 100, 1000, 10^4 , 10^5 , 10^{10} barn. Neutron transfer matrices are given until Legendre order P_5 .

The group cross sections in 75 energy groups have been transformed to the Karlsruhe GRUBA format [7] which is the standard group constant format in the Karlsruhe Program System KAPROS [8] and can also be used with the deterministic transport code TWODANT [3]. By its secondary input option the GRUBA format allows easy change of group constants for selected isotopes, selected reaction types and for selected energy groups and therefore is a very useful tool for cross section testing.

Tests of the new 75 group constant library and its steering file

The GRUBA library and its steering file had to be modified to take into account reactions typical for energies above 10 MeV as e.g. $(n,4n)$, $(n,2n+\alpha)$, $(n,3n+\alpha)$, $(n,2n+p)$, $(n,3np)$, $(n,2p)$, (n,pd) . A new data type (MT=201) has been used on the Obninsk files: the energy angle distributions for continuum inelastic scattering and all threshold reactions with neutrons in the exit channel (e.g. $(n,2n)$, $(n,3n)$, $(n,4n)$, $(n,n+p)$, $(n,2n+\alpha)$ are given as sum over all reactions; not included are discrete inelastic scattering and fission (MT=3,MF=18). Consequently neutron transfer matrices are calculated for elastic scattering, discrete inelastic scattering and for the sum of continuum inelastic scattering, $(n,2n)$, $(n,3n)$, $(n,4n)$, $(n,2n+\alpha)$, The steering file for the new group constant set had to be modified accordingly.

These modifications have been intensively tested. As a typical test case a Pb^{208} - cylinder has been used with density and geometry corresponding to the lead target in the ADS

Neutronic Benchmark [9] (radius: 10 cm, height: 50 cm). In the model that we used for our calculations a spatially homogeneous neutron source within a cylinder of radius 5 cm and height 10 cm in the center of the target was assumed. The energy dependence of the external source is similar to the one given in the Benchmark specification. The highest neutron energy of the external neutron source (source 1) is 10 MeV, the lowest energy is 111 keV. Comparisons have been carried out for results obtained from calculations with TWODANT in S_{16}/P_3 approximation with the 69 group constant library that has been used for the Benchmark calculations [9] and with the new 75 group constants. Comparisons for total neutron leakage, the neutron flux density and for different reaction rates are shown in Table 1. The first 2 columns of Table 1 show calculations for Pb^{208} . Pb^{208} data from INPE, Obninsk are based on ENDF/B-VI below 20 MeV. In order to eliminate from the comparison differences in nuclear data new Pb^{208} group constants in the 69 energy group structure have been calculated from ENDF/B-VI. The deviations of the results obtained with the old and with the new group constant set (relative to the results obtained with the old (69 group) set) are less than 1% except for a large deviation in the (n, α) reaction rate which is due to different data on ENDF/B-VI and on the Obninsk library.

Columns 4 and 5 show calculations with the 75 group set. The energy of the external source neutrons (source 2) is between 50 MeV and 111 keV. Neutron flux density and reaction rates are given for two coarse energy groups: coarse group 1 between 10 MeV and 50 MeV and coarse group 2 between 10^{-5} MeV and 10 MeV. The contribution of neutrons above 10 MeV to the total neutron flux is about 6 %. The contribution of neutrons above 10 MeV to the total reaction rate, the reaction rates for (n, γ) , elastic and inelastic scattering is around 5 %. The contribution of neutrons above 10 MeV to the $(n, 2n)$ rate is about 93 %. For other threshold reactions ($(n, 3n)$, (n, p) , $(n, 2p)$, ...) the contribution of neutrons above 10 MeV is more than 99 %.

Column 3 of Table 1 shows, that the capture reaction rate of Pb^{207} in the spectrum of the lead cylinder is only about 20 % of the capture reaction rate of Pb^{208} .

Application of the 75 group constant set for the calculation of k_{eff} and k_{source} of the ADS Neutronic Benchmark reactor

As a first application of the new 75 group constant set for a reactor we have recalculated the fresh core of the ADS Neutronic Benchmark [9]. The calculations have been carried out with TWODANT in S_8/P_3 approximation. Table 2 shows the results for k_{eff} and

k_{source} for different U^{233} enrichment of the fuel.

The U^{233} enrichment that is necessary to obtain $k_{eff} = 0.96$ is lower (8.722 at %), when the new group constant set is applied. This is mainly due to the difference in the basic nuclear data below 10 MeV. On the Obninsk library the data for U^{233} and Th^{232} below 20 MeV are mainly from JENDL-3.2, most of the data for Pb^{208} below 20 MeV are from ENDF/B-VI. In order to eliminate most of the differences in the data the cross sections for U^{233} and Th^{232} in the 69 group constant library were replaced by data from JENDL-3.2 and the cross sections of Pb^{208} were replaced by group constants obtained from ENDF/B-VI. In Table 2 the 69 group constant library with the replacements discussed above is called modified 69 group constant set.

The results for k_{eff} calculated with this modified 69 group constant set and with the 75 group constant set differ by about 1 % as is shown in Table 2. For k_{source} a similar difference is found.

Influence of different basic nuclear data for Th^{232} on k_{eff} of the ADS Neutronic Benchmark

In our original calculation for the ADS Neutronic Benchmark we used a 69 group constant set developed at FZK and mainly based on JEF-2.2. In further studies we found a remarkable change in k_{eff} of the ADS Neutronic Benchmark, when data for Th^{232} from other nuclear data libraries were used. In the calculations shown in Table 3 the 69 group constant set is used for the basic calculation (case 1). In additional calculations (case 2, 3, 4) the group constants for Th^{232} are replaced by group constants calculated from other nuclear data libraries, all other group constants are left unchanged. In case 2 the Th^{232} data are taken from ENDF/B-VI, k_{eff} is increased by 2.7 %, with Th^{232} group constants calculated from JENDL3.2 the increase is even larger, namely 4.6 % (case 3). Finally in case 4 only the (n, γ) cross section of Th^{232} was replaced from JENDL-3.2. As seen from the table k_{eff} is 4.3% larger than in the calculation with the unchanged group constant set (case 1).

The influence of the (n, γ) cross sections of Th^{232} has also been investigated in calculations with 75 energy groups. The group constants for the (n, γ) reaction were replaced by data from ENDF/B-VI in all energy groups below 20 MeV. This reduced k_{eff} by 1.6 % from 1.02431367 to 1.00795309.

Table 1 : Lead Target with external source TWODANT calculations in S_8/P_3 approximation comparison of neutron flux densities and reaction rates as a test of the 75 group gruba library and the steering file					
case	75 groups	69 groups	69 groups	75 groups	
	source 1	source 1	source 1	source 3	
	Pb^{208}	Pb^{208}	Pb^{207}	Pb^{208}	
		$E \leq 10MeV$		$E \leq$	$E \geq$
				10MeV	10MeV
net leakage	1.016E+0	1.016E+0	1.021E+0	1.195E+0	1.195E+0
neutron flux	2.131E+1	2.119E+1	2.240E+1	2.281E+1	1.523E+0
reaction rates					
total	3.873E+0	3.865E+0	4.342E+0	4.142E+0	2.478E-1
capture	4.236E-4	4.217E-4	1.850E-3	4.332E-4	7.601E-4
(n, γ)	4.232E-4			4.330E-4	1.475E-5
(n, α)	4.147E-7	1.512E-6		1.973E-7	2.042E-4
(n, p)	4.978E-8	4.969E-8		8.350E-9	4.987E-4
(n, 2p)					4.789E-5
(n, p d)					1.053E-5
elastic	3.648E+0	3.637E+0	3.961E+0	3.999E+0	1.414E-1
inelastic	2.098E-1	2.111E-1	3.564E-1	1.400E-1	1.017E-2
(n,2n)	1.643E-2	1.641E-2	2.292E-2	2.594E-3	3.618E-2
(n,3n)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.393E-2
(n,4n)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.156E-2

Table 2: ADS Neutronic Benchmark
 k_{eff} and k_{source} calculated with different group constant libraries

A. criticality calculations

U^{233} enrichment	75 energy groups from Obninsk data (0-50 MeV)	k_{eff} 69 energy groups modified set (0-10 MeV)
9.68	1.0243136	1.01362481
8.7216	.96000698	.94995146

B. source calculations

U^{233} enrichment atom percent	75 energy groups source up to 50MeV	k_{source} 69 energy groups modified set source up to 10 MeV
8.7216	.97643827 ⁽¹⁾ .97158054 ⁽²⁾	.96300135

$$k_{source}^{(1)} = \frac{R(\nu \cdot fiss) + R(n,2n) + R(n,2n+x) + 2 \cdot [R(n,3n) + R(n,3n+x)] + 3R(n,4n)}{L + R(abs)}$$

$$k_{source}^{(2)} = \frac{R(\nu \cdot fiss) + R(n,2n)}{L + R(abs)}$$

R: reaction rate

(n,2n+x): (n,2n + p) + (n, 2n + α) + (n, 2n + 2 α)

(n,3n+x): (n,3n + p) + (n, 3n + α)

L: net leakage

Table 3 : ADS Neutronic Benchmark
Influence of different nuclear data for Th^{232} on k_{eff}
TWODANT calculations in S_8/P_3 approximation

data base for Th^{232}	FZKG69-set (Th^{232} from JEF-2.2) (case 1)	Th^{232} from ENDF/B-VI (case 2)	Th^{232} from JENDL-3.2 (case 3)	only $\sigma(n, \gamma)$ for Th^{232} from JENDL-3.2 (case 4)
k_{eff}	.96142897	.98713736	1.00546073	1.00271764
$(k_{eff} - k_{eff,1})/k_{eff,1}$	$(k_{eff,1})$	2.7 %	4.6 %	4.3 %

References

- [1] Yu.A. Korovin, A.Yu. Konobeyev, P.E. Pereslavytsev, A.Yu. Stankovsky, C. Broeders, I. Broeders, U. Fischer, U.v. Möllendorff, P. Wilson, D. Woll
Internat. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Trieste, I, May 19-27, 1997.
- [2] Yu.A. Korovin et. al. ICENES'98 Tel Aviv, July 1998
- [3] R.E. Alcouffe, R.S. Baker et. al. LA-12969-M, (June 1995)
- [4] P. Cloth, D. Filges et. al., Jül-2203, (May 1988)
- [5] R.E. Prael and H. Lichtenstein LA-UR-89-3014 Los Alamos National Laboratory (September 1989)
- [6] R.E. MacFarlane, D.W. Muir, LA-12740-M (Oct. 94)
- [7] D. Woll KfK 3745 (August 1984) and unpublished report (September 1990)
- [8] H. Bachmann, G. Buckel, W. Höbel, S. Kleinheins Proc. Conf. Computational Methods in Nuclear Energy, Charleston, CONF-750413 (1975)
- [9] C. Broeders, I. Broeders, , FZKA-5963 (September 1997) p.464-72

Veröffentlichte Berichte

- AHLBRECHT, M.; BORODIN, R.; BORZENKO, V.; EHRHARDT, J.; FRENCH, S.; SHERSHAKOV, V.; SOHIER, A.; TRAKHTENGERTS, E.; VERBRUGGEN, A.
Decision support issues in RODOS: the needs of decision makers.
4th Internat. Workshop on Decision Making Support for Off-Site Emergency Management, Aronsborg, S, October 7-11, 1996
Radiation Protection Dosimetry, 73(1997) S.81-84 (42224)
- AKTAA, J.; HORSTEN, M.G.; SCHMITT, R.
Effects of hold-time and neutron-irradiation on the low-cycle fatigue behaviour of type 316-CL and their considerations in a damage model.
Structural Mechanics in Reactor Technology : Transactions of the 14th Internat. Conf., Lyon, F, August 17-22, 1997
Vol. 9 Div.L S.157-64
Bayeux : Xerox Business Service, 1997 (41949)
- ALBRECHT, G.; BRÜGGEMANN, H.; HUBER, F.; RAUPP, D.
Untersuchungen zum EPR-Konzept.
KAJET-Experimente.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.260-63 (42092)
- ALSMEYER, H.; ADELHELM, C.; CRON, T.; DILLMANN, H.G.; SCHÖCK, W.; SCHUMACHER, G.; TROMM, W.
Large scale experiments for the COMET core-catcher-concept.
Jahrestagung Kerntechnik, Mannheim, 21.-23.Mai 1996
Bonn : INFORUM GmbH, 1996 S.243-46 (40788)
- ALSMEYER, H.; CRON, T.; FOIT, J.J.; SCHMIDT-STIEFEL, S.; SCHNEIDER, H.; TROMM, W.; WENZ, T.; MUSSA, S.; FERDERER, F.; 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 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.202-38 (42089)
- ALSMEYER, H.; FELLMOSE, F.; FIEG, G.; HUBER, F.; STEGMAIER, U.; TROMM, W.; WERLE, H.
Ex-vessel melt behaviour in the EPR.
The European Pressurized Water Reactor EPR : KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997
Proc. Part II S.161-64
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 (42152)
- ALSMEYER, H.; TROMM, W.; ALBRECHT, G.; HUBER, F.; STEGMAIER, U.; BENZ, H.; FELLMOSE, F.; FIEG, G.; WERLE, H.
Beherrschung und Kühlung von Kernschmelzen ausserhalb des Druckbehälters.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 29(1997) S.327-35 (42601)
- AMMANN, T.
Entwicklung eines impliziten Verfahrens zur lokalen Verfeinerung eines strukturierten Gitters.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5864 (März 97) (41052)
- AMMANN, T.; CARTECIANO, L.N.; DORR, B.; GRÖTZBACH, G.
Modellierung der Sumpfkühlung in LWR-Systemen mit FLUTAN.
Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 13.-15.Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.165-68 (41324)
- ARBOGAST, E.; CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; HARTEN, U.; NEITZEL, H.J.; SCHMIDT, H.
Thermohydraulische Untersuchungen zur passiven Containment-Kühlung.
PASCO-Programm.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.296-98 (42097)
- ARNECKE, G.; JACOBS, H.; STEHLE, B.; THURNAY, K.; VÄTH, L.; IMKE, U.; LUMMER, M.
Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung.
Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Wasser.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.147-60 (42086)
- BÖHME, R.; BERGER, H.D.; CHAWLA, R.; HAGER, H.; SEILER, R.; WILLIAMS, T.
Void coefficient analysis of an LWR lattice experiment with high-enrichment MOX fuel.
Nuclear Engineering and Design, 168(1997) S.261-70 (42549)
- BAUMANN, W.; HENNEGES, G.; HEIN, H.
Aerosol-Rechnung mit CONTAIN als Beitrag zum Vergleich von Containment-Codes.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.314-27 (42099)
- BAUMANN, W.; JACOBS, G.; LAU, M.; MEYER, L.
Druckaufbau bei spätem Fluten in einem 'Station Blackout'.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.182-201 (42088)

BAUMANN, W.; SCHOLTYSSEK, W.
Bewertung des COMET-Corecatcher-Konzepts mit
Hilfe des Codes CONTAIN.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.328-37 (42100)

BEAVER, S.; LIU, J.; VOHRA, Y.K.;
KLEYKAMP, H.
Phase transformation in Mo-Ru alloy induced
by laser heating at high pressures.
Journal of Physics: Condensed Matter, 8(1996)
S. L674-L652 (40745)

BEJAN, A.; DAN, N.; CACUCI, D.G.; SCHÜTZ, W.
On the thermodynamic efficiency of energy
conversion during the expansion of a mixture
of hot particles, steam and liquid water.
Energy - the International Journal, 22(1997)
S.1119-34 (42742)

BREITUNG, W.
Analyse und Kontrolle des
Wasserstoffverhaltens bei
Kernschmelzenunfällen.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.347-62 (42603)

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.B.; TRAVIS, J.R.
A mechanistic approach to safe igniter
implementation for hydrogen mitigation.
Proc.of the OECD/NEA CSNI Workshop on the
Implementation of Hydrogen Mitigation
Techniques, Winnipeg, CDN, May 13-15, 1996
S.199-218
AECL-11762 (1997)
NEA/CSNI/R(96)8 (40032)

BREITUNG, W.; ROYL, P.
FZK results on hydrogen behaviour and
mitigation in severe PWR accidents.
The European Pressurized Water Reactor EPR :
KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997
Proc. Part II S.165-68
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 (42153)

BREITUNG, W.; ROYL, P.; VESER, A.
Results on hydrogen behaviour and mitigation
in severe PWR accidents. Annual report 1996
of the Forschungszentrum Karlsruhe hydrogen
program.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5914 (Juni
97) (41473)

BREITUNG, W.; VESER, A.
Untersuchungen zum Wasserstoffverhalten und
zu Gegenmaßnahmen bei schweren Störfällen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.28-124 (42083)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I.
IAEA-koordinierte
Neutronik-Benchmark-Rechnungen für
Beschleuniger-getriebene Systeme.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.464-72 (42116)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I.
Neutronenphysikalische Analysen von
beschleunigergetriebenen unterkritischen
Anordnungen.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.411-20 (42607)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I.; KESSLER, G.;
KIEFHABER, E.
Recent neutron physics investigations for the
back end of the nuclear fuel cycle.
Khankhasayev, M.K. [Hrsg.]
Proc.of the Internat.Workshop on Nuclear
Methods for Transmutation of Nuclear Waste :
Problems, Perspectives, Cooperative Research,
Dubna, GUS, May 29-31, 1996
Singapore [u.a.] : World Scientific, 1997
S.50-59 (39443)

BROEDERS, C.H.M.; BROEDERS, I.; KESSLER, G.;
KIEFHABER, E.
Recent neutron physics investigations on the
incineration of plutonium and other
transurania elements.
Merz, E.R. [Hrsg.]
Advanced Nuclear Systems Consuming Excess
Plutonium : Proc.of the NATO Advanced
Research Workshop, Moskva, GUS, October
13-16, 1996
Dordrecht [u.a.] : Kluwer, 1997 S.27-42
(NATO ASI Series : Ser. 1: Disarmament
Technologies ; 15) (40087)

BROEDERS, C.H.M.; KIEFHABER, E.; WIESE, H.W.
Verbrennung von Transuran-Isotopen in
Thermischen und Schnellen Reaktoren.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.382-97 (42605)

BROWN, J.; SMITH, K.R.; PÄSLER-SAUER, J.
Simulation of countermeasures in RODOS.
Proc.of the 6th Topical Meeting on Emergency
Preparedness and Response, San Francisco,
Calif., April 22-25, 1997
Livermore : Lawrence Livermore Nat.Lab.,
1997 S.423-26 (41922)

CACUCI, D.G.
Perturbation methods and deterministic
sensitivity analysis in nuclear engineering:
a brief critical review.
Proc.of the Joint Internat.Conf.on
Mathematical Methods and Supercomputing for
Nuclear Applications, Saratoga Springs,
N.Y., October 5-9, 1997
LaGrange Park, Ill. : American Nuclear Soc.,
1997 Vol.2 S.1201-21 (42199)

CARTECIANO, L.N.; WEINBERG, D.; MÜLLER, U.
Development and analysis of a turbulence
model for buoyant flows.

Giot, M. [Hrsg.]

Proc.of the 4th World Conf.on Experimental
Heat Transfer, Fluid Mechanics and
Thermodynamics, Bruxelles, B, June 2-6, 1997
Vol. 3 S.1339-46

Pisa : Edizioni ETS, 1997 (41512)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; MÜLLER, U.;
PANG, F.G.

Critical heat flux in uniformly heated
vertical tubes.

International Journal of Heat and Mass
Transfer, 40(1997) S.2929-39 (41099)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; MÜLLER, U.
Critical heat flux in a tight 37-rod bundle
using freon-12.

Saito, T.; Müller, U. [Hrsg.]

Proc.of the 2nd Japanese-German Symp.on
Multiphase Flow, Tokyo, J, September 25-27,
1997 S.223-32

Tokyo : The University of Tokyo, 1997
(41593)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; NEITZEL, H.J.
Natural air convection cooling for advanced
reactor containments.

Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 1, S.177-84

La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41545)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; NEITZEL, H.J.
Convection and radiation heat transfer in a
passive containment cooling system.

ICONE-5 : Proc.of the 5th Internat.Conf.on
Nuclear Engineering, Nice, F, May 25-29,
1997

New York, N.Y. : ASME, 1997, CD-ROM (41639)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; NEITZEL, H.J.

Passive containment cooling by natural
convection coupled with thermal radiation.

8th Internat.Topical Meeting on Nuclear
Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-8),
Kyoto, J, September 30 - October 4, 1997

Proc. Vol. 1 S.500-07 (41591)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; PANG, F.G.;
MÜLLER, U.

Critical heat flux in circular tube
geometries using freon-12.

8th Internat.Topical Meeting on Nuclear
Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-8),
Kyoto, J, September 30 - October 4, 1997
Proc. Vol. 2 S.965-72 (41592)

CHERDRON, W.; ABERLE, J.; GRÖTZBACH, G.;
PHILIPP, P.; SAUTER, H.; SELBER, K.;

SENGPIEL, W.; HENNEMUTH, A.
Experimentelle Untersuchung von
Wechselwirkungsmechanismen und
Phasentransportprozessen in
Zweiphasenströmungen.

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.428-34 (42109)

CRACIUNESCU, O.; BEJAN, A.; CACUCI, D.G.;
SCHÜTZ, W.

Time-dependent interaction between water at
supercritical pressures and a hot surface.

Numerical Heat Transfer A, 30(1996) S.535-53
(40720)

DAUM, E.

Re-evaluation of irradiation parameters.
DPA-volume relations.

Proc.of the IEA-Technical Workshop on the
IFMIF Test Facilities, Karlsruhe, July 7-9, 1997.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5993
(Dezember 97) S.151-60 (42612)

DEISINGER, M.; FRUTOS, R.; SCHMUCK, P.;
WILLERDING, G.

Analysen von Kernschmelzunfällen im EPR mit
MELCOR.

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.338-42 (42101)

DIETZ, W.; EHRlich, K.; PICKER, C.;
TAVASSOLI, A.A.

Structural materials for advanced reactor
systems.

EUROMAT '96 : Conf.on Materials and Nuclear
Power, Bournemouth, GB, October 21-23, 1996

London : The Institute of Materials, 1996
S.243-55 (40842)

DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.; HAILFINGER, G.;
HIRT, A.; HOFFMANN, G.; JONATZKE, O.;
KRIEG, R.; LANG, K.H.; MALMBERG, T.;
MESSEMER, G.; STACH, T.; STRATMANN, E.;

VORBERG, G.
Mechanische Auswirkungen auf den
Reaktordruckbehälter. BERDA-Versuche und
Ähnlichkeitsexperimente FLIPPER.

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.

Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.299-313 (42098)

DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.; HIRT, A.;
KRIEG, R.

Theoretical models describing the impact
loading of a PWR vessel head.

Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 2, S.1227-33

La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41909)

- DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.; KRIEG, R.
Analysis of slug impact against the reactor
pressure vessel head.
Structural Mechanics in Reactor Technology :
Transactions of the 14th Internat.Conf.,
Lyon, F, August 17-22, 1997
Vol. 10 Div.P S.315-22
Lyon : IASMIT, 1997 (41948)
- DOROFEEV, S.B.; SIDOROV, V.P.; BREITUNG, W.;
KOTCHOURKO, A.
Large scale combustion tests in the RUT
facility: experimental study, numerical
simulations and analysis on turbulent
deflagrations and DDT.
Structural Mechanics in Reactor Technology :
Transactions of the 14th Internat.Conf.,
Lyon, F, August 17-22, 1997
Vol. 10 Div.P S.275-82
Lyon : IASMIT, 1997 (42227)
- EHRHARD, P.; SIEGEL, U.; KRAUT, ST.
Modellversuche und Simulationen mit CORFLOW
zur Ausbreitung erstarrender Schmelze
(Legierung MCP 58).
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.264-73 (42093)
- EHRHARDT, J.
The RODOS system: decision support for
off-site emergency management in Europe.
4th Internat.Workshop on Decision Making
Support for Off-Site Emergency Management,
Aronsborg, S, October 7-11, 1996
Radiation Protection Dosimetry, 73(1997)
S.35-40 (40009)
- EHRHARDT, J.; BROWN, J.; FRENCH, S.;
KELLY, G.N.; MIKKELSEN, T.; MÜLLER, H.
RODOS: decision-making support for off-site
emergency management after nuclear accidents.
Kerntechnik, 62(1997) S.122-28 (41399)
- EHRHARDT, J.; FAUDE, D.; FISCHER, F.;
HASEMANN, I.; LORENZ, A.; PÄSLER-SAUER, J.;
SCHICHTTEL, T.; SCHÜLE, O.; STEINHAEUER, C.;
BENZ, G.; HALLER, CH.; RAFAT, M.; SAUDER, T.
Probabilistische Abschätzungen von
Unfallfolgen und rechnergestützte
Entscheidungshilfsmittel für den
Katastrophenschutz.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.404-09 (42106)
- EHRHARDT, J.; FAUDE, D.; FISCHER, F.;
PÄSLER-SAUER, J.; SCHÜLE, O.; SCHICHTTEL, T.;
STEINHAEUER, C.; LORENZ, A.; RAFAT, M.;
BENZ, G.
Status and perspectives of the RODOS decision
support system for nuclear emergencies in
Europe.
CEC Workshop on the Technical Aspects of
International Exchange of Radiological
On-line Monitoring Data, Arona, I, June 1-3,
1994
EUR-16415-EN (1996) (36030)
- EHRHARDT, J.; KELLY, G.N.
The RODOS system: decision support for
off-site emergency management in Europe.
Proc.of the 6th Topical Meeting on Emergency
Preparedness and Response, San Francisco,
Calif., April 22-25, 1997
Livermore : Lawrence Livermore Nat.Lab.,
1997 S.399-402 (41919)
- ENGEL, G.; FELLMOSE, F.; FIEG, G.;
MASSIER, H.; WERLE, H.; HUBER, F.;
PROTHMANN, N.; RAUPP, D.; ZIEGLER, U.
Untersuchungen zum EPR-Konzept. KATS- und
KAPOOL-Experimente.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.239-55 (42090)
- ERBACHER, F.J.; SCHMIDT, H.; SAEY, P.;
HÄUSLER, R.; WETZEL, L.; BÖHMERT, J.;
LÜBKE, L.
Temperaturtransiente Kriechberstversuche an
Zirkonium-Niob1-Hüllrohren.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5726 (August
97) (41646)
- FALKENSTEIN, A.; HEGER, S.; HÜBNER, R.;
MATERNA-MORRIS, E.; SCHIRRA, M.;
SCHNEIDER, W.; STÖBER, T.
Untersuchungen an austenitischen und
martensitischen Stählen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.435-45 (42110)
- FIEG, G.; HUBER, F.; WERLE, H.
Simulation experiments on the spreading
behaviour of core melts: KATS-6 (1-dim
spreading of a low superheated iron melt into
a dry channel).
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5956 (August
97) (41622)
- FIEG, G.; HUBER, F.; WERLE, H.
Simulation experiments on the spreading
behaviour of core melts: KATS-7 (1-dim
spreading of highly superheated iron and
oxidic melts into a dry channel at low
pouring rates).
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6005
(November 97) (42347)

FIEG, G.; WERLE, H.; HUBER, F.
Simulation experiments on the spreading
behaviour of molten core melts: KATS-3b and
KATS-4.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5887 (März
97) (40992)

FIEG, G.; WERLE, H.; HUBER, F.
Simulation experiments on the spreading
behaviour of core melts: KATS-5 (1-dim
spreading of an oxidic melt into a dry
channel).
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5920 (Juni
97) (41788)

FLAD, M.; MASCHEK, W.; FIEG, G.
Verification of the Simmer-III code with the
KATS dry and wet melt spreading experiments.
Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 13.-15.Mai
1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.251-54 (41265)

FOIT, J.J.
Ausbreitung mit variabler Viskosität.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.274-78 (42094)

FOIT, J.J.
Modeling oxidic molten core-concrete
interaction in WECHSL.
Nuclear Engineering and Design, 170(1997)
S.73-79 (42197)

FOIT, J.J.
Spreading with variable viscosity.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6006
(Dezember 97) (42501)

FOIT, J.J.; SCHMIDT-STIEFEL, S.
Assessment of Uncertainties in the analysis
of molten core-concrete interaction using the
WECHSL code.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5710 (März
97) (40973)

FREUND, D.; ERNST, W.
Bestrahlungsnachuntersuchungen und
modelltheoretische Analyse.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.448-52 (42112)

FREUND, D.; ERNST, W.; JACOBI, O.
Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von
Aktiniden im HFR.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.487-90 (42121)

FRUTOS, R.; GIDO, D.; HENNEGES, G.;
SCHMUCK, P.
Spaltproduktausbreitung vom Primärsystem an
die Umgebung bei einem schweren Unfall im
EPR.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.279-84 (42597)

GÖLLER, B.; KRIEG, R.; HIRT, A.;
MESSEMER, G.
Experiments on liquid slug impact against a
vessel head.
Euromech 369 Colloquium on Fluid-Structure
Interactions in Acoustics, Pier
Scheveningen, NL, September 23-26, 1997
Programme and Abstracts S.4-5
Delft : Univ., 1997 (41907)

GÜNTHER, C.
Locally exact finite difference schemes with
four points for convection-diffusion problems
with source terms.
Taylor, C. [Hrsg.]
Numerical Methods in Laminar and Turbulent
Flow : Proc.of the 10th Internat.Conf.,
Swansea, GB, July 21-25, 1997 Vol. 10
S.73-84
Swansea : Pineridge Press, 1997 (41461)

GRÖTZBACH, G.
Simulations of turbulent heat transfer in
nuclear reactor safety.
Technisch wissenschaftliches Rechnen,
Mathematisches Forschungsinstitut,
Oberwolfach, 9.-15.November 1997 (42395)

GRÖTZBACH, G.; WÖRNER, M.; AMMANN, T.;
BLAHAK, A.; CARTECIANO, L.N.; DORR, B.;
KIMHI, Y.; OLBRICH, W.; SABISCH, W.; YE, Q.;
ALEF, M.; GENZ, ST.; HENNEMUTH, A.;
JANSSEN, G.; LINDER, M.; SELDNER, D.
Entwicklung von Thermofluidikprogrammen und
ingenieurtechnischen Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.411-27 (42108)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;
SEPOLD, L.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.
Pre-oxidised BWR test CORA-28: test results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5571 (Juni
97) (41480)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;
SEPOLD, L.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.
Pre-oxidised PWR test CORA-29: test results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5928 (August
97) (41645)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;
SEPOLD, L.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.
Cöld lower end test CORA-10: test results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5572
(November 97) (42249)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;
SEPOLD, L.; SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.
Slow heat-up PWR test CORA-30: test results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5929
(Oktober 97) (42251)

HASEMANN, I.; JONES, J.A.; VAN DER STEEN, J.;
VAN WONDEREN, E.
Experience with COSYMA in an international
intercomparison of probabilistic accident
consequence assessment codes.
Nuclear Technology, 113(1997) S.291-303
(42747)

HASTE, T.J.; FRY, C.; HILES, R.; HOFMANN, P.;
NOACK, V.; HERING, W.; HOMANN, CH.;
LINNEMANN, TH.; KOCH, M.K.; UNGER, H.
Design studies for FZK degraded core bundle
quench experiments.
AEAT-1360 (May 97) (42007)

HAYTCHER, E.A.; NECKER, G.; ROYL, P.;
SPORE, J.; TRAVIS, J.R.; WILKENING, H.
Theoretische Untersuchungen mit GASFLOW.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.1-27 (42082)

HENNEGES, G.
Calculations with contain 1.12 for the
international standard problem ISP37.
ICONE-5 : Proc.of the 5th Internat. Conf.on
Nuclear Engineering, Nice, F, May 25-30,
1997
New York, N.Y. : ASME, 1997, CD-ROM (41897)

HENNIES, H.H.
Light water reactor safety perspectives
derived from 25 years R&D experience at the
Karlsruhe Research Center.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 1, S.14
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41952)

HERING, W.; HOFMANN, CH.; SANCHEZ, V.H.;
SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.; HOFMANN, P.;
PIEL, D.; SCHMIDT, L.; STEINBRÜCK, M.
Current FZK-investigation on core
degradation.
The European Pressurized Water Reactor EPR :
KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997
Proc. S.157-60
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 (42304)

HERING, W.; HOMANN, CH.; SANCHEZ, V.H.;
SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.; SMIT, S.O.;
HOFMANN, P.; STEINBRÜCK, M.; PIEL, D.;
SCHMIDT, L.; MESSAINGUIRAL, CH.
Untersuchungen zur Kernzerstörung.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.309-26 (42600)

HERING, W.; HOMANN, CH.; SENGPIEL, W.;
SANCHEZ-ESPINOZA, V.; SMIT, S.O.; STRUWE, D.;
MESSAINGUIRAL, CH.; ELIAS, E.
In-Vessel Unfallabläufe.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.343-68 (42102)

HERING, W.; SENGPIEL, W.; SMITH, S.O.
Theoretische Interpretation der
experimentellen Ergebnisse.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.410 (42107)

HOFMANN, P.; HAGEN, S.; NOACK, V.;
SCHANZ, G.; SEPOLD, L.
Chemical-physical behavior of light water
reactor core components tested under severe
reactor accident conditions in the CORA
facility.
Nuclear Technology, 118(1997) S.200-24
(42008)

HOFMANN, P.; NOACK, V.
Experiments on the quench behavior of fuel
rod segments.
Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen,
13.-15.Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.227-31 (42305)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; STEINBRÜCK, M.;
STEINBOCK, L.; STUCKERT, J.; BURBACH, J.;
METZGER, H.
Experimente zum Wasserstoff-Quellterm und zur
UO₂ und ZrUO₂-Auflösung durch
geschmolzenes Zircaloy.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.383-99 (42104)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; VESHCHUNOV, M.S.;
BERDYSHEV, A.V.; BOLDYREV, A.V.;
MATWEEV, L.V.; PALAGIN, A.V.; SHESTAK, V.E.
Physico-chemical behavior of zircaloy fuel
rod cladding tubes during LWR severe accident
reflood. Part I: Experimental results of
single rod quench experiments.
Part II: Modelling of quench phenomena.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5846 (Mai
97) (41180)

HUBER, R.; KIRSTAHLER, M.; KUHN, D.;
MEYER, L.; ROTH, A.; SCHWALL, M.;
WACHTER, E.; WÖRNER, G.
Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS).
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.125-38 (42084)

IMKE, U.; JACOBS, H.; LUMMER, M.; MEYER, L.;
SCHÜTZ, W.; VÄTH, L.; WILL, H.
Steam explosion research at Forschungszentrum
Karlsruhe.

The European Pressurized Water Reactor EPR :
KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997
Proc. Part II S.149-52
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 (42151)

JAAG, S.; KIEFHABER, E.
Untersuchungen und Vorschläge für ein
geeignetes neutronisches Berechnungsschema
zur Auslegung und Optimierung von
CAPRA-Reaktoren.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.459-63 (42115)

JACKSON, C.J.
A dimensionally adaptive neutron kinetics
algorithm for efficient nuclear plant safety
analysis calculations.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5922 (Juni
97)
Dissertation, Universität Karlsruhe 1997
(41385)

JACKSON, C.J.; CACUCI, D.G.; FINNEMANN, H.B.
Comparison of a dimensionally adaptive
algorithm with conventional neutron kinetics
models for reactor safety transients.
Proc.of the Joint Internat.Conf.on
Mathematical Methods and Supercomputing for
Nuclear Applications, Saratoga Springs,
N.Y., October 5-9, 1997
LaGrange Park, Ill. : American Nuclear Soc.,
1997 Vol. 2 S.1128 (42200)

JACOBS, G.; MEYER, L.
Planned melt dispersal experiments in a
scaled annular cavity.
Proc.of the Seminar on Containment of Nuclear
Reactors held in Conjunction with the 14th
Internat.Conf.on Structural Mechanics in
Reactor Technology, Saclay, F, August 25-26,
1997 S.63-91 (41996)

JACOBS, H.; MEYER, L.
Highly transient and intense multiphase
interactions in the QUEOS premixing
experiments.
Proc.of the Internat.Seminar on Vapor
Explosions and Explosive Eruptions
(AMIGO-IMI), Sendai, J, May 22-24, 1997
S.253-62 (41894)

JACOBS, H.; MEYER, L.; THURNAY, K.; VÄTH, L.;
SCHÜTZ, W.; HUBER, F.; IMKE, U.; KAISER, A.;
LUMMER, M.; WILL, H.
Schadenspotential von Dampfexplosionen bei
Kernschmelzenunfällen in
Druckwasserreaktoren. Teil A: Die
Dampfexplosion.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.285-96 (42598)

JANSENS-MAENHOUT, G.; KNEBEL, J.U.;
MÜLLER, U.
Transport phenomena in vertical turbulent
air-water bubbly flow.
35th European Two-Phase Flow Group Meeting,
Bruxelles, B, June 6-7, 1997
Saito, T.; Müller, U. [Hrsg.]
Proc.of the 2nd Japanese-German Symp.on
Multiphase Flow, Tokyo, J, September 25-27,
1997 S.33-41
Tokyo : The University of Tokyo, 1997
(41757)

KAISER, A.; SCHÜTZ, W.; WILL, H.
PREMIX experiment on steam explosion.
Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen,
13.-15.Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.244-50 (41478)

KAMLAH, M.; KÜHNER, R.; TSAKMAKIS, CH.
Theoretische und experimentelle
Untersuchungen zur zyklischen
Thermoviskoplastizität.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5958
(Dezember 97) (42578)

KLEINHEINS, S.
Das VISART-Konzept einer standardisierten
Schnittstelle zwischen Codes und
Auswerteprogrammen.
Teil 1: Einführung und Überblick.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5995
(November 97) (42349)

KLEINHEINS, S.
Das VISART-Konzept einer standardisierten
Schnittstelle zwischen Codes und
Auswerteprogrammen.
Teil 2: VISART - ein standardisiertes
Postprocessor-Dateiformat.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5996
(November 97) (42350)

KLEYKAMP, H.
Phase equilibria in the UO₂-austenitic steel
system up to 3000°C.
Kleykamp, H. u.a. [Hrsg.]
Thermodynamics of Nuclear Materials :
Proc.of the 9th Internat.Symp.on
Thermodynamics of Nuclear Materials (STNM-9),
Toyonaka, Osaka, J, August 25-30, 1996
Journal of Nuclear Materials, 247(1997)
S.103-07 (39839)

KLEYKAMP, H.
The chemical state of defective
uranium-plutonium oxide fuel pins irradiated
in sodium cooled reactors.
Interfacial Effects in Quantum Engineering
Systems (IEQES-96) : Proc.of the
Internat.Workshop, Mito, J, August 21-23,
1996
Journal of Nuclear Materials, 248(1997)
S.209-13 (39840)

- KLEYKAMP, H.
Alloys of uranium with transition metals of group VIII.
Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry
8th Ed. System Nr.55. U-Uranium
Suppl. Vol. B,5
Berlin [u.a.] : Springer, 1997 (42308)
- KNEBEL, J.U.; ARAYA, F.
Investigation on natural circulation two-phase flow instability.
Saito, T.; Müller, U. [Hrsg.]
Proc. of the 2nd Japanese-German Symp. on Multiphase Flow, Tokyo, J, September 25-27, 1997 S.447-53
Tokyo : The University of Tokyo, 1997 (42236)
- KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; NEITZEL, H.J.; ERBACHER, F.J.; HOFMANN, F.
Untersuchungen zur passiven Containmentkühlung.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 29(1997) S.336-46 (42602)
- KNEBEL, J.U.; JANSSENS-MAENHOUT, G.; DAUBNER, M.
SUCO-Programm.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.282-95 (42096)
- KNEBEL, J.U.; KUHN, D.; MÜLLER, U.
Experimental and numerical simulation of passive decay heat removal by sump cooling after core melt down.
Proc. of the Internat. Topical Meeting on Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla., June 1-5, 1997 Vol. 1, S.153-63
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Soc., 1997 (40778)
- KNEBEL, J.U.; KUHN, D.; MÜLLER, U.
Experimental and numerical simulation of passive decay heat removal by sump cooling.
Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen, 13.-15. Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.148-52 (40776)
- KNEBEL, J.U.; MÜLLER, U.
Scaling of passive decay heat removal by sump cooling.
Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen, 13.-15. Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.144-47 (40777)
- KNEBEL, J.U.; MÜLLER, U.
Passive decay heat removal after core melt down.
ICONE-5 : Proc. of the 5th Internat. Conf. on Nuclear Engineering, Nice, F, May 25-29, 1997
New York, N.Y. : ASME, 1997, CD-ROM (41638)
- KNEBEL, J.U.; MÜLLER, U.
Experimental and numerical simulation of passive decay heat removal by sump cooling after core melt down.
8th Internat. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-8), Kyoto, J, September 30 - October 4, 1997
Proc. Vol. 2 S.1059-66 (41610)
- KOLARIK, Z.
Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.473-75 (42117)
- KOLARIK, Z.; MÜLLICH, U.
Extraction of Am(III) and Eu(III) by 2-substituted benzimidazoles.
Solvent Extraction and Ion Exchange, 15(1997) S.361-79 (42547)
- KONDO, S.; BREAR, D.J.; TOBITA, Y.; MORITA, K.; MASCHEK, W.; COSTE, P.; WILHELM, D.
Status and achievement of assessment program for SIMMER-III, a multiphase, multicomponent code for LMFR safety analysis.
8th Internat. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-8), Kyoto, J, September 30 - October 4, 1997
Proc. Vol. 3 S.1340-48 (42194)
- KRAUT, S.; SIEGEL, U.; EHRHARD, P.
Experimentelle Untersuchung zur Ausbreitung metallischer Modellschmelzen bei gleichzeitiger Erstarrung.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6018 (Dezember 97) (42669)
- KRIEG, R.
Mechanical efficiency of the energy release during a steam explosion.
Nuclear Technology, 117(1997) S.151-57 (41165)
- KRIEG, R.
Behaviour of the reactor pressure vessel under mechanical and thermal loadings caused by core melt-down and steam explosion accidents - RPVSA.
EUR-17852-EN (1997) S.98-102 (42272)
- KRIEG, R.; DEVOS, J.; CAROLI, C.; ALBERTINI, C.; ENNIS, P.J.; DUIJVESTIJN, G.
Behaviour of the reactor pressure vessel under mechanical and thermal loadings caused by core melt-down and steam explosion accidents (RPVSA).
FISA-97 Symp. on EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 17-19, 1997
Preprints S.109-18
Luxembourg : European Commission, 1997 (42743)

KRIEG, R.; DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.;
HALFINGER, G.; HOFFMANN, G.; MALMBERG, T.;
MESSEMER, G.; BENZ, H.; RATAJCZAK, W.
Schadenspotential von Dampfexplosionen bei
Kernschmelzenunfällen in
Druckwasserreaktoren. Teil B: Mechanische
Auswirkungen.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.297-308 (42599)

KRIEG, R.; GÖLLER, B.; HIRT, A.;
HOFFMANN, G.; JORDAN, T.; MALMBERG, T.;
MESSEMER, G.; STACH, T.; VORBERG, G.
Mechanical behaviour of the reactor vessel
during an in-vessel steam explosion.
The European Pressurized Water Reactor EPR :
KTG/SFEN Conf., Köln, October 19-21, 1997
Proc. S.153-56
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 (42234)

KRIEG, R.; MALMBERG, T.; MESSEMER, G.;
HOFFMANN, G.; STACH, T.; STRATMANN, S.
Model experiments BERDA describing the impact
of molten core material against a PWR vessel
head.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 2, S.1219
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41910)

LÄMMER, H.; RITTER, B.; TSAKMAKIS, CH.
Thermodynamisch konsistente, finite
Thermoviskoplastizität mit Schädigung.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.161-81 (42087)

MÜHL, B.; [HRSG.]
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) (42081)

MADIC, C.; HUDSON, M.J.; KOLARIK, Z.;
NANNICINI, R.; FACCHINI, A.
High-level waste partitioning: status and
prospects in Europe.
McMenamin, T. [Hrsg.]
Management and Disposal of Radioactive Waste
: Proc.of the 4th European Conf., Luxembourg,
LUX, March 25-29, 1996 S.89-103
EUR-17543 EN (1997) (39594)

MASCHEK, W.; FIEG, G.; FLAD, M.
Untersuchungen zur Validierung des Codes
SIMMER-III mit den KATS-Experimenten.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.256-59 (42091)

MASCHEK, W.; FLAD, M.
Passive Maßnahmen zur Reduzierung des
Rekritikalitätsrisikos in CAPRA-Kernen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.476-81 (42118)

MASCHEK, W.; STRUWE, D.
Störfallanalysen und Maßnahmen zur
Reduktion des Rekritikalitätsrisikos in
hochangereicherten CAPRA-Reaktorkernen.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.398-410 (42606)

MASCHEK, W.; STRUWE, D.; EIGEMANN, M.;
FLAD, M.; LO PINTO, P.
Risk reduction of core-melt accidents in
advanced CAPRA burner cores.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 2, S.820-27
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41598)

MEYER, L.; SCHUMACHER, G.; JACOBS, H.;
THURNAY, K.
Investigation of the premixing phase of a
steam explosion with hot spheres.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 1, S.503-13
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41655)

MIASSOEDOV, A.
Ein Modell zur Beschreibung der
Wasserstoffzeugung durch Kernflutung bei
Kernschmelzunfällen.
Dissertation, Universität Karlsruhe 1997
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6042
(Dezember 97) (42745)

MINGES, J.; SCHÜTZ, W.; KOCH, M.K.
KAREX-Experimente zum radiologischen
Quellterm infolge Reentrainment.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.456-58 (42114)

MISHRA, M.P.; BORGSTEDT, H.U.; MATHEW, M.D.;
MANNAN, S.L.; RODRIGUEZ, P.
A comparative study of creep rupture
behaviour of modified 316L(N) base metal and
316L(N)/16-8-2 weldment in air and liquid
sodium environments.
International Journal of Pressure Vessels and
Piping, 72(1997) S.111-18 (42332)

- MISHRA, M.P.; BORGSTEDT, H.U.; VALSAN, M.; MANNAN, S.L.; RODRIGUEZ, P.
Effect of flowing sodium and prior exposure to sodium on LCF and creep-fatigue interaction behaviour of type 316 L(N) stainless steel.
Workshop on Creep, Fatigue, and Creep-Fatigue Interaction, Kalpakkam, IND, February 15-17, 1995
Transactions of the Indian Institute of Metals, 49(1996) S.497-503 (37747)
- MISHRA, M.P.; PACKIARAJ, C.C.; RAY, S.K.; MANNAN, S.L.; BORGSTEDT, H.U.
Influence of sodium environment and load ratio (R) on fatigue crack growth behaviour of a type 316 LN stainless steel at 813 K.
International Journal of Pressure Vessels and Piping, 70(1997) S.77-82 (41055)
- NOACK, V.; HAGEN, S.; HOFMANN, P.; SCHANZ, G.; SEPOLD, L.
Material distribution in light water reactor-type bundles tested under severe accident conditions.
Nuclear Technology, 117(1997) S.158-70 (41825)
- OTT, L.; HAGEN, S.
Interpretation of the results of the CORA-33 dry boiling water reactor test.
Nuclear Engineering and Design, 167(1997) S.287-306 (42508)
- PÄSLER-SAUER, J.; SCHICHEL, T.
The simulation of early emergency actions in RODOS.
4th Internat. Workshop on Decision Making Support for Off-Site Emergency Management, Aronsborg, S, October 7-11, 1996
Radiation Protection Dosimetry, 73(1997) S.71-74 (40136)
- PAYEN, L.; VERGNES, J.; BROEDERS, C.H.M.
Plutonium multirecycling in PWR. Comparison of calculations with two independent codes: EDF - FZK.
Neerdael, B. [Hrsg.]
The Belgium Underground Research Facility : Status on the Demonstration Issues for Radioactive Waste Disposal in Clay ; Proc. of the Internat. Topical Meeting on Radioactive Waste (TOPSEAL '96), Stockholm, S, June 9-12, 1996 Vol. 2 S.83-86
Bern : ENS, 1997 (40100)
- PENZHORN, R.D.; BERNDT, U.; KIRSTE, E.; CHABOT, J.
Performance tests of palladium/silver permeators with tritium at the tritium laboratory Karlsruhe.
Fusion Technology, 32(1997) S.232-45(42649)
- PFEIFENROTH, M.; SCHMITT, R.
Hochtemperatur-Ermüdungsverhalten des austenitischen EFR-Strukturwerkstoffes 316 L(N), DIN 1.4909.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5659 (März 97) (41065)
- PIEL, D.; SCHMIDT, L.
Abschreckexperimente mit Brennelements simulatoren. QUENCH-Anlage. Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963 (September 97) S.369-82 (42103)
- POPOV, A.; BORODIN, R.; POKHIL, A.; ZHELEZNYAK, M.; GOFMAN, D.; LYASHENKO, G.; MARINETS, A.; SHEPELEVA, T.; TKALICH, P.; HELING, R.; RASKOB, W.
Overview of the modelling of hydrological pathways in RODOS.
Proc. of the 6th Topical Meeting on Emergency Preparedness and Response, San Francisco, Calif., April 22-25, 1997
Livermore : Lawrence Livermore Nat. Lab., 1997 S.419-22 (41921)
- RAICEVIC, J.J.; MERKLE, M.; EHRHARDT, J.; NINKOVIC, M.M.
Loss of lifetime due to radiation exposure. Averaging problems.
Health Physics, 72(1997) S.550-57 (41991)
- REINKE, N.; BROCKMEIER, U.; KOCH, M.K.; SCHÜTZ, W.; UNGER, H.
MECO: a code for numerical modelling of melt spreading phenomena.
Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 13.-15. Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.255-58 (41281)
- ROYL, P.; BREITUNG, W.; TRAVIS, J.R.; SEYFFARTH, L.; WILKENING, H.
Simulation of hydrogen transport with mitigation using the 3D field code gasflow.
Proc. of the Internat. Topical Meeting on Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla., June 1-5, 1997 Vol. 1, S.578-88
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Soc., 1997 (41437)
- 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.
Proc. of the OECD/NEA/CSNI Workshop on the Implementation of Hydrogen Mitigation Techniques, Winnipeg, CDN, May 13-15, 1996 S.129-41
AECL-11762 (1997)
NEA/CSNI/R(96)8 (39924)

ROYL, P.; TRAVIS, J.R.; ROCHHOLZ, H.;
WILKENING, H.
Verteilung von Dampf und Wasserstoff bei
Unfällen in Druckwasserreaktoren.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe,
29(1997) S.363-81 (42604)

SANCHEZ-ESPINOZA, V.; ELIAS, E.; HOMANN, CH.;
HERING, W.; STRUWE, D.
Development and validation of a transition
boiling model for the RELAP5/MOD3 reflood
simulation.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5954
(September 97) (41831)

SCHÜLE, O.; RAFAT, M.
Structure, concept and functions of RODOS.
Proc.of the 6th Topical Meeting on Emergency
Preparedness and Response, San Francisco,
Calif., April 22-25, 1997
Livermore : Lawrence Livermore Nat.Lab.,
1997 S.403-06 (41920)

SCHÜLE, O.; RAFAT, M.
The software framework of RODOS.
4th Internat.Workshop on Decision Making
Support for Off-Site Emergency Management,
Aronsborg, S, October 7-11, 1996
Radiation Protection Dosimetry, 73(1997)
S.41-44 (40135)

SCHÜTZ, W.; HUBER, F.; KAISER, A.; WILL, H.
PREMIX, an experimental approach to
investigate the mixing behaviour of a hot
melt being poured into water.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 2, S.887-94
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41908)

SCHIRRA, M.
Untersuchungen zum Kriechverhalten am
Strukturwerkstoff 316 L(N) im niedrigen
Spannungsbereich bei 550°C und 600°C.
Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 13.-15.Mai
1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.656-59 (41319)

SCHMIDT, M.; WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.
Direkte numerische Simulation der Konvektion
in einer Fluidschicht mit interner Wärmequelle.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5916 (August
97) (41654)

SCHMITT, R.; PFEIFENROTH, M.
Charakterisierende Werkstoffuntersuchungen
von Strukturmaterialien.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.446-47 (42111)

SCHNEIDER, W.
Gerät zur Dichtebestimmung kleiner Massen.
DE-PS 19 645 950 (25.7.1997) (42060)

SCHULZ, B.
Thermophysikalische Eigenschaften von
Kernschmelzen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.279-81 (42095)

SHEPERD, I.; ADROGUER, B.; BARRACHIN, M.;
BANDINI, G.; EDERLI, S.;
FERNANDEZ BENITEZ, J.; FRY, C.; HASTE, T.;
HERING, W.; HILES, R.; HOMANN, CH.;
HOFMANN, P.; JAEGER, M.; KNORR, J.;
KOCH, M.K.; KOURTI, N.; KRETSCHMER, S.;
LEONARDI, M.; LINNEMANN, TH.; MEDALE, M.;
MÜLLER, K.; NOACK, V.; ORIOLO, F.;
STEINBRÜCK, M.; TURLAND, B.; VESHCHUNOV, M.
Investigation of core degradation.
FISA-97 Symp.on EU Research on Severe
Accidents, Luxembourg, L, November 17-19,
1997
Preprints S.49-58
Luxembourg : European Commission, 1997
(42463)

SIMON, M.
Experimentelle Untersuchungen zu
Strömungsformen in horizontalen und
geneigten Verdampferrohren.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5950 (Juni
97)
Dissertation, Universität Karlsruhe 1997
(41789)

STACH, T.
Zur Skalierung von Modellversuchen zum
Aufprall flüssiger Massen auf deformierbare
Strukturen.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5903
Dissertation, Universität Karlsruhe 1997
(41401)

STARFLINGER, J.; KOCH, M.K.; SCHÜTZ, W.;
UNGER, H.
Numerical investigation on jet-droplet
formation due to bubble bursting at liquid
surfaces.
Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 13.-15.Mai
1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.210-13 (41282)

STEINBOCK, L.; STUCKERT, J.
Determination of the crack pattern of
quenched zircaloy tubes.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6013
(November 97) (42250)

STEINER, H.
Interpretation der mechanischen Auswirkungen
bei Einzelstab-Abschreckversuchen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.400-03 (42105)

STRUWE, D.; PORSCHA, B.; EIGEMANN, M.;
PFRANG, W.
Verbesserung und Qualifizierung des DEFORM-4C
Programmpakets.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.453-55 (42113)

STRUWE, D.; PORSCHA, B.; EIGEMANN, M.;
PFRANG, W.
SAS 4A-Programmentwicklung.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.482-83 (42119)

STRUWE, D.; PORSCHA, B.; EIGEMANN, M.;
PFRANG, W.
Reaktorstudien.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.484-86 (42120)

TEYSSIER, P.; FLAD, M.; MASCHEK, W.
SIMMER-III code verification with the 'QUEOS'
premixing and the 'KATS' core melt spreading
experiments.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 2, S.895-901
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (41599)

TEYSSIER, P.; MASCHEK, W.; JACOBS, H.
Assessment of the SIMMER-III code with the
experiments QUEOS and PREMIX.
ICONE-5 : Proc.of the 5th Internat.Conf.on
Nuclear Engineering, Nice, F, May 25-30,
1997
New York, N.Y. : ASME, 1997, CD-ROM (41896)

TROMM, W.; ALSMEYER, H.; BÜRGER, M.;
WIDMANN, W.; BUCK, M.
Experiments and theoretical modelling for a
core catcher concept for future light water
reactors.
El-Genk, M.S. [Hrsg.]
Heat Transfer : Papers Accepted for
Presentation at the 31st Nat.Heat Transfer
Conf., Houston, Tex., August 3-5, 1996
New York, N.Y., 1996 S.304-09
(AIChE Symposion Series ; Vol. 92 ; 310)
(41144)

TROMM, W.; ALSMEYER, H.; WENZ, T.; MUSSA, M.;
FERDERER, F.
Transient oxide experiments for the
verification of the COMET core catcher
concept.
Jahrestagung Kerntechnik 97, Aachen,
13.-15.Mai 1997
Bonn : INFORUM GmbH, 1997 S.240-43 (41458)

VÄTH, L.
A model for radiative heat transfer in
mixtures of a hot solid or molten material
with water and steam.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5912 (Mai
97) (41276)

WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.
Pressure transport in DNS of turbulent
natural convection in horizontal fluid
layers.
Hanjalic, K. [Hrsg.]
Turbulence, Heat and Mass Transfer : 2 ;
Proc.of the 2nd Internat.Symp., Delft, NL,
June 9-12, 1997
Delft : Delft Univ.Pr., 1997 S.351-60
(41386)

WILHELM, D.
Steady state and transient operation of a
natural convection decay heat removal system
in a LMR model.
Proc.of the Internat.Topical Meeting on
Advanced Reactors Safety, Orlando, Fla.,
June 1-5, 1997 Vol. 1, S.164-70
La Grange Park, Ill. : American Nuclear
Soc., 1997 (42494)

WILL, H.; HUBER, F.; KAISER, A.; SCHÜTZ, W.
Experimente zur Vorvermischungsphase
(PREMIX).
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1996.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5963
(September 97) S.139-46 (42085)

YE, Q.Y.; WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.;
JOVANOVIĆ, J.
Modelling turbulent dissipation rate for
Rayleigh-Benard convection.
Hanjalic, K. [Hrsg.]
Turbulence, Heat and Mass Transfer : 2 ;
Proc.of the 2nd Internat.Symp., Delft, NL,
June 9-12, 1997
Delft : Delft Univ.Pr., 1997 S.331-40
(41387)

Vorträge, die nicht in gedruckter Form vorliegen

WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.
DNS database of turbulent natural convection
in horizontal fluid layers.
[http://hbksun17.fzk.de:8080/IRS/eng/IRS3/TURB
IT_DNS_database.html](http://hbksun17.fzk.de:8080/IRS/eng/IRS3/TURB
IT_DNS_database.html) (E41634)

ALSMEYER, H.
The role of viscosity in in- and ex-vessel
corium behaviour.
EC-Workshop on Corium Viscosity and Phase
Diagrams, Luxembourg, L, November 20, 1997
(V42563)

BABELOT, J.F.; CONRAD, R.; GRUPPELAAR, H.; MÜHLING, G.; PRUNIER, C.; SALVATORES, M.; VAMBENEPE, G.

EFTTRA irradiation experiments for the development of fuels and targets for transmutation.

4th NEA P and T Internat. Information Exchange Meeting, Mito, J, September 11-13, 1996 (V41145)

BHAT, N.P.; BORGSTEDT, H.U.

Threshold oxygen levels in liquid sodium for the formation of MnO, NaMnO₂ and Na₄Mn₂O₅ on austenitic steels.

Symp. on Localised Corrosion and Environmental Cracking (SOLCEC), Kalpakkam, IND, January 22-24, 1997 (V41428)

BREITUNG, W.

The analysis of hydrogen behaviour in severe accidents.

Eurocourse on Analysis of Severe Accidents in LWRs, Madrid, E, October 13-17, 1997 (V42148)

BREITUNG, W.; ROYL, P.; SCHOLTYSEK, W.; ARMAND, P.; HULD, T.; KLENK, B.

Multidimensional simulation of hydrogen distribution and turbulent combustion in severe accidents.

FISA-97 Symp. on EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 17-19, 1997 (V42337)

BUNK, M.; EHRHARD, P.

Theoretische Beschreibung der Ausbreitung und Erstarrung viskoser Schmelzen.

GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27. März 1997 (V40985)

BUNK, M.; EHRHARD, P.

Theory and experiments related to the spreading of solidifying, oxidic melt.

3rd European Fluid Mechanics Conf. (EUROMECH), Göttingen, September 15-18, 1997 (V41953)

CHENG, X.; ERBACHER, F.J.; MÜLLER, U.

Critical heat flux in tight 7-rod bundles.

Convective flow and pool boiling II, Irsee, May 18-23, 1997 (V41460)

CHERDRON, W.; SAUTER, H.

Detailuntersuchungen zum Signalverhalten invasiver Blasendetektoren bei definiert reproduzierbaren Einzelblasen.

Tagung der GVC-Fachausschüsse, Würzburg, 25.-28. Februar 1997 (V41039)

EHRHARD, P.

Experimente zur Ausbreitung erstarrender Schmelzen.

GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27. März 1997 (V41793)

EHRHARD, P.

Einige Bemerkungen zur Bedeutung freier Grenzflächen in der Strömungsmechanik.

Votr.: Universität Karlsruhe, 9. Juli 1997 (V41794)

EHRHARDT, J.; BROWN, J.; FRENCH, S.;

KELLY, G.N.; MIKKELSEN, T.; MÜLLER, H.

RODOS: real-time on-line decision support system for off-site emergency management in Europe.

Internat. Conf. on Severe Accident Risk and Management (SARM '97), Piestany, Slovakia, June 16-18, 1997 (V41924)

GRÖTZBACH, G.

Direct and large eddy simulation of turbulent heat transfer.

GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27. März 1997 (V41100)

GRÖTZBACH, G.

Direct and large eddy simulation of turbulent heat transfer.

GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27. März 1997 (V41974)

HÜBNER, R.; EHRlich, K.

Swelling and in-pile creep of neutron irradiated 15Cr15NiTi austenitic steels in the temperature range of 400 to 600°C.

IAEA Technical Committee Meeting on Influence of High Dose Irradiation on Advanced Reactor Core Structural and Fuel Materials, Obninsk, Russia, June 16-21, 1997 (V42223)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;

SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.; SEPOLD, L.

The CORA-program: out-of-pile experiments on severe fuel damage.

5th Internat. Topical Meeting on Nuclear Thermal Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-5), Beijing, China, April 14-18, 1997 (V40823)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; NOACK, V.;

SCHANZ, G.; SCHUMACHER, G.; SEPOLD, L.

Lessons learned from the CORA quench experiments.

Accident Management and Simulation Symp., Jackson Hole, Wyo., August 18-22, 1997 (V42665)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; SCHANZ, G.;

SEPOLD, L.

Essential results of the CORA program.

3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe, December 2-4, 1997 (V42652)

HAGEN, S.; HOFMANN, P.; SCHANZ, G.;

SEPOLD, L.

Results of the CORA bundle experiment.

SCDAP/RELAP5 Accident Analysis Workshop, Wien, A, November 10-15, 1997 (V42666)

HERING, W.; HOMANN, CH.; STRUWE, D.
EPR reflood calculations using the improved
transition boiling model.
3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe,
December 2-4, 1997 (V42727)

HOFMANN, P.
Core melt progression and relocation
processes.
Eurocourse on Analysis of Severe Accidents in
LWRs, Madrid, E, October 13-17, 1997(V42242)

HOFMANN, P.; HOMANN, CH.; MOCH, J.; PIEL, D.;
SCHMIDT, L.; STEINBRÜCK, M.
Assembly and putting into operation of the
QUENCH facility. Conduct of commissioning
tests.
3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe,
December 2-4, 1997 (V42761)

HOFMANN, P.; NOACK, V.; STEINBRÜCK, M.;
SCHMIDT, L.
Investigation on hydrogen generation during
flooding of an overheated core.
Spring Meeting, Cooperative Severe Accident
Research Program (CSARP), Bethesda, Md., May
5-8, 1997 (V42243)

HOMANN, CH.; HERING, W.; MASSAINGUIRAL, CHR.
Analytical activities for test preparation.
3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe,
December 2-4, 1997 (V42728)

JAAG, S.; KIEFHABER, E.
Definition of a suitable project route for
CAPRA neutronic calculations.
4th Internat. CAPRA Seminar (Consommation
Accrue de Plutonium dans les RApidés),
Cadarache, F, June 16-18, 1997 (V41927)

JACOBS, H.
Arbeiten zur Dampfexplosion am
Forschungszentrum Karlsruhe.
Kolloquium, Universität Stuttgart, 13. Juni
1997 (V42149)

JACOBS, H.; VÄTH, L.; THURNAY, K.
Constitutive relations for multiphase flow
modeling.
OECD/CSNI Specialist Meeting on Fuel Coolant
Interactions (FCI), Tokai, J, May 19-21,
1997 (V41895)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; KNEBEL, J.U.;
MÜLLER, U.
Transport phenomena in vertical turbulent
air-water bubbly flow.
GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27. März
1997 (V41457)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; KNEBEL, J.U.;
MÜLLER, U.
Modelling of subcooled boiling.
1. CFX-Mehrphasen-Workshop, Bad Dürkheim,
16.-17. September 1997 (V42500)

JONES, J.A.; BROWN, J.; GOOSSENS, L.;
KRAAN, B.; EHRHARDT, J.; HASEMANN, I.;
FISCHER, F.
Uncertainty analysis on COSYMA.
Internat. Conf. on Severe Accident Risk and
Management (SARM '97), Piestany, Slovakia,
June 16-18, 1997 (V41925)

KESSLER, G.; FAUDE, D.
The future of fission reactors.
Internat. IAEA Technical Committee Meeting
'Innovative Approaches to Fusion Energy',
Pleasanton, Calif., October 20-23, 1997
(V42309)

KLEIN, R.; BREITUNG, W.; REHM, W.;
OLIVIER, H.; HE, L.; ARMAND, P.; ANG, M.
Models and criteria for prediction of
deflagration-to-detonation transition (DDT)
in hydrogen-air-steam systems under severe
accident conditions.
FISA-97 Symp. on EU Research on Severe
Accidents, Luxembourg, L, November 17-19,
1997 (V42338)

KLOOSTERMAN, J.L.; KIEFHABER, E.; ROME, M.;
TOMMASI, J.
Strategies for the transmutation of
americium.
Internat. Conf. on Future Nuclear Systems,
Challenge towards 2nd Nuclear Era with
Advanced Fuel Cycles, Yokohama, J, October
5-10, 1997 (V42493)

KNEBEL, J.U.
Karlsruhe Research Center Germany. An outline
about organization and activities,
emphasizing on LWR-safety research.
Votr.: JAERI, Tokai-Mura, J, 5. Februar 1997
Votr.: Kansai University, Osaka, J, 3. März
1997
Votr.: Hokkaido University, Sapporo, J,
7. April 1997 (V41342)

KNEBEL, J.U.
EPR-related safety research at
Forschungszentrum Karlsruhe FZK, Germany.
Votr.: Toshiba Corp., Kawasaki, J, 16. April
1997 (V41343)

KNEBEL, J.U.
SUCO-program at FZK: passive sump cooling
program.
Votr.: Japan Atomic Energy Research
Institute, Tokai-Mura, J, 3. März 1997
(V41344)

KNEBEL, J.U.
Core-melt cooling in the European pressurized
water reactor (EPR).
Votr.: University of Manchester, GB,
27. Oktober 1997 (V42418)

KOLARIK, Z.

Research work on the separation of actinides from high-level radioactive waste in Europe.

Fall Meeting of the Nuclear Society of Japan '97, Naha, J, October 20-24, 1997 (V42548)

KOTCHOURKO, A.; BREITUNG, W.; VESER, A.; DOROFEEV, S.B.

Tube experiments and numerical simulation on turbulent hydrogen-air combustion.

21st Internat. Symp. on Shock Waves, Great Keppel Island, AUS, July 20-25, 1997 (V41898)

KOTCHOURKO, A.; DOROFEEV, S.B.; BREITUNG, W.; SIDOROV, V.P.

Experiments and numerical simulation on turbulent H₂-air combustion in large enclosure.

16th Internat. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Krakow, PL, August 3-8, 1997 (V42339)

MASCHEK, W.; FLAD, M.; LO PINTO, P.

Mitigation of recriticalities in CAPRA burner cores.

4th Internat. CAPRA Seminar (Consommation Accrue de Plutonium dans les RAPides), Cadarache, F, June 16-18, 1997 (V41926)

MEYER, L.

QUEOS, an experimental investigation of the premixing phase with hot spheres.

OECD/CSNI Specialist Meeting on Fuel Coolant Interactions (FCI), Tokai, J, May 19-21, 1997 (V41874)

MEYER, L.; SCHÜTZ, W.

The experimental program at FZK for the investigation of the premixing phase of a steam explosion.

Spring Meeting, Cooperative Severe Accident Research Program (CSARP), Bethesda, Md., May 5-8, 1997 (V42188)

PIEL, D.; SCHMIDT, L.

Planned temperature measurement in the QUENCH facility.

Special Meeting on Temperature Measurement Methods, Karlsruhe, March 5, 1997 (V42760)

SANCHEZ-ESPINOZA, V.; HOMANN, CH.

Assessment of the improved RELAP5/mod3 transition boiling model using various reflood experiment.

3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe, December 2-4, 1997 (V42729)

SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.; HERING, W.

Investigation of Phebus FPT1 test.

Meeting of the Phebus bundle interpretation Circle, Ispra, I, April 8, 1997 (V42685)

SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.; HERING, W.

Progress of FPT0 and FPT1 modelling at FZK: an improved heat transport model for the shroud inserted into SCDAP/RELAP5.

Meeting of the Phebus Bundle Interpretation

Circle, Aix-en-Provence, F, September 24-25, 1997 (V42686)

SMIT, S.O.; SENGPIEL, W.; HERING, W.

Influence of an improved shroud heat transfer model for S/R5 on PHEBUS FPT0 and FPT1 post-test calculations.

2nd SCDAP/RELAP5 Code Assessment Workshop, Karlsruhe, December 1, 1997

3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe, December 2-4, 1997 (V42730)

STEINER, H.; HECK, M.

Oxidation stresses and creep in Zry tubes at high temperatures.

3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe, December 2-4, 1997 (V42726)

STEINER, H.; HECK, M.

Potential for a temperature escalation in a fuel rod bundle under Quench conditions.

3rd Internat. Quench Workshop, Karlsruhe, December 2-4, 1997 (V42756)

TENCHINE, D.; KNEBEL, J.U.; JACKSON, J.D.; AN, P.; NAVIGLIO, A.

Thermalhydraulics of passive decay heat removal systems, POOLTHY.

FISA-97 Symp. on EU Research on Severe Accidents, Luxembourg, L, November 17-19, 1997 (V41817)

WIESE, H.W.

Actinide transmutation properties of thermal and fast fission reactors including multiple recycling.

Internat. Conf. 'Actinides 97', Baden-Baden, September 21-26, 1997 (V41902)

WIESE, H.W.

Recent results for a scenario of PWRs and CAPRA burners with heterogeneous irradiation of Am.

4th Internat. CAPRA Seminar (Consommation Accrue de Plutonium dans les RAPides), Cadarache, F, June 16-18, 1997 (V41928)