Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6480

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1999

B. Mühl (Hrsg.)

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

August 2000

FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6480

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Jahresbericht 1999

Herausgegeben von B. Mühl

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2000

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 1999. The research tasks cover three main topics:

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

The importance of the Light Water Reactor safety, however, has decreased during the last year in favour of 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 2000.

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 1999 des PSF enthält Beiträge zu aktuellen Fragen der Sicherheit von Leichtwasserreaktoren und innovativen Systemen sowie der Umwandlung von minoren Aktiniden. Der Anteil der Arbeiten zur Leichtwasserreaktorsicherheit ist jedoch zugunsten der Studien zur Aktinidenumwandlung zurückgegangen. 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 Hochleistungsimpuls- und Mikrowellentechnik	IHM
Institut für Kern- und Energietechnik	IKET
Institut für Materialforschung	IMF I, II, III
Institut für Nukleare Entsorgungstechnik	INE
Institut für Reaktorsicherheit	IRS
Institut für Technische Chemie	ITC
Hauptabteilung Informations- und Kommunikationstechnik	HIK
Hauptabteilung Versuchstechnik	HVT

sowie vom FZK beauftragte externe Institutionen.

Die einzelnen Beiträge stellen den Stand der Arbeiten im Frühjahr/Sommer 2000 und sind entsprechend dem F+E-Programm 1999 nummeriert.

Inhalt
Contents

		Seite
32.21	**LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT**	**1**
32.21.01	**Wasserstoffverhalten und Gegenmaßnahmen**	**1**
I.	Assessment of In-Vessel Hydrogen Sources (J. Starflinger, IKET)	1
II.	A Computationally Efficient Thermal Radiation Transport Model for the GASFLOW Code (J.R. Travis, Engineering & Scientific Software, Inc.)	7
III.	Wasserstoffverhalten und Gegenmaßnahmen (P. Royl, IRS)	39
IV.	Measured Turbulence Data Compared to FLUTAN Calculations (W. Baumann, IKET)	48
V.	Numerical Simulation of ignition processes in H_2-air-steam mixtures (U. Bielert, IKET)	64
VI.	Numerische Simulation der turbulenten Verbrennung von vorgemischten Gasen in komplexen 3d-Geometrien (A. Kotchourko, W. Breitung, IKET)	97
VII.	On the Hydrogen-Air Adiabatic Isochoric Complete Combustion Pressure (B.F. Burgeth, IKET)	136
32.21.02	**Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel**	**152**
I.	PREMIX und ECO, Experimente zur Schmelze/Wasser-Wechselwirkung (H.-H. Brüggemann, W. Cherdron, E. Jenes, A. Kaiser, I. Kornelson, N. Prothmann, D. Raupp, W. Schütz, H. Will, IRS)	152

II.	Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung (H. Jacobs, P. Ruatto, B. Stehle, E. Stein, IKET; M. Böttcher, U. Imke, M. Lummer, D. Struwe, IRS)	173
32.21.03	**Versagen des Reaktordruckbehälters und Dispersion der Kernschmelze**	**184**
I.	On material modelling, identification of material parameters and application to two benchmark exercises (H. Lämmer, E. Diegele, IMF II)	184
II.	Experimente zur Dispersion von Corium (M. Gargallo, M. Greulich, M. Kirstahler, L. Meyer, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, IKET)	215
III.	Rechnungen zur Dispersion der Kernschmelze (D. Wilhelm, IKET)	227
IV.	Nachrechnungen der SNL-Experimente Sup1 und Sup2 mit CONTAIN 2.0 (G. Jacobs, R. Nöbel, T. Wendtlandt, IKET)	239
32.21.04	**Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung**	**256**
I.	COMET-Konzept (H. Alsmeyer, T. Cron, S. Schmidt-Stiefel, H. Schneider, W. Tromm, T. Wenz, IKET; C. Adelhelm, IMF; H.-G. Dillmann, H. Pasler, ITC-TAB; W. Schöck, IMK; H. Benz, C. Grehl, G. Merkel, W. Ratajczak, HVT; Ing.-Büro F. Ferderer; Ing.-Büro G. Schumacher)	256
II.	Investigations for the EPR Concept — KAPOOL and KATS Experiments (G. Engel, B. Eppinger, G. Fieg, S. Schmidt-Stiefel, IKET; C. Messainguiral, N. Prothmann, D. Raupp, W. Schütz, IRS; U. Stegmaier, IMF I; H. Massier, IHM; G. Stern, A. Veser, Fa. Pro-Science)	288

III.	Untersuchungen zum EPR-Konzept — KAJET-Versuche (G. Albrecht, H. Brüggemann, E. Jenes, D. Raupp, W. Schütz, IRS)	301
IV.	Nachrechnung des KATS15-Experiments mit CORFLOW (A. Veser, Fa. Pro-Science, J.J. Foit, IKET	310
V.	Analysis of FARO Spreading Experiments (J.J. Foit, W. Tromm, IKET)	315
VI.	Viscosity and characterisation of samples of the KATS and Premix experiments (B. Schulz, P. Severloh, IMF I)	324
32.21.05	**Langfristige Containmentkühlung**	**336**
I.	Two-dimensional Geysering (G. Janssens-Maenhout, H. Umekawa, M. Daubner, U. Müller, T. Schulenberg, IKET)	336
II.	Rechenprogramm FLUTAN für thermo- und fluiddynamische Anwendungen (L.N. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach, IRS)	345
III.	Passive Containment Cooling (PASCO-Programme) (X. Cheng, H.J. Neitzel, He. Schmidt, J.U. Knebel, IKET)	363
32.21.06	**Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen**	**369**
	Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter (B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, O. Jonatzke, J. Jordan, I. Kornelson, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)	369
32.21.07	**Analysen zum Containmentverhalten**	**378**
I.	Analyses of Severe Accidents for the EPR using MELCOR (P. Schmuck, IKET)	378

II.	Parameterstudien für einen EPR-ähnlichen PWR (G. Henneges, IKET)	397
32.21.08	**Untersuchungen zur Kernzerstörung**	**415**
I.	QUENCH Programme (P. Hofmann, M. Steinbrück, L. Steinbock, J. Stuckert, IMF I; W. Leiling, A. Miassoedov, L. Schmidt, L. Sepold, D. Piel, IMF III)	415
II.	Recalculation of the temperature transient in QUENCH-03 with the code CALUMO (H. Steiner, M. Heck, IMF III)	442
III.	Severe Accident Investigations (W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, D. Struwe, IRS; Ch. Messainguiral, CEA)	448
IV.	Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 in Luft (W. Krauss, G. Schanz, IMF III)	472
32.21.09	**Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen** (G. Benz, J. Ehrhardt, F. Fischer, Ch. Haller, I. Hasemann, E. Hesselschwerdt, C. Landmann, A. Lorenz, J. Päsler-Sauer, M. Rafat, W. Raskob, T. Schichtel, A. Steidlinger, IKET)	**485**
32.21.10	**Beteiligung am PHEBUS-Projekt**	**494**
	Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse (W. Hering, W. Sengpiel, IRS)	494
32.21.11	**Untersuchungen zur Reaktor- und Anlagendynamik**	**499**
I.	Investigations on Reactor and Plant Dynamics (D.C. Cacuci, M. Ionescu-Bujor, W. Hering, V.H. Sanchez, IRS)	499
II.	Implementation of a concentration equation for the turbulent transport of Boron in FLUTAN (L.N. Carteciano, IRS)	508

32.22	**INNOVATIVE SYSTEME**	**513**
32.22.02	**Passive Nachwärmeabfuhr**	**513**
	Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen für ingenieurtechnische Anwendungen (G. Grötzbach, M. Wörner, IRS; M. Alef, HIK; W. Baumann, IKET)	513
32.22.03	**Entwicklung von Methoden zur Grobstruktursimulation turbulenter Zweiphasentrömungen**	**516**
I.	Theoretische Untersuchungen (M. Wörner, D.G. Cacuci, B. Ghidersa, G. Grötzbach, S. Mitran, A. Müller, A. Oberhof, W. Sabisch, IRS; T. Dunker, HIK)	516
II.	Experimentelle Untersuchungen zum Strömungsumfeld aufsteigender Gasblasen in ruhendem Fluid und dessen Wechselwirkung mit dem Aufstiegsverhalten der Blasen (G. Grötzbach, V. Heinzel, A. Jianu, P. Philipp, H. Sauter, W. Sengpiel, M. Simon, IRS)	527
32.22.04	**Strukturelle Integrität**	**541**
I.	Untersuchungen an Strukturmaterialien der Kerntechnik (M. Schirra, A. Falkenstein, R. Hübner, E. Materna-Morris, B. Bennek-Kammerichs, K. Ehrlich, IMF I)	541
II.	Untersuchung des Größeneinflusses auf das Verformungs- und versagensverhalten von gelochten Flachzugproben im Rahmen des LISSAC-Programms (J. Aktaa, M. Klotz, M. Pfeifenroth, R. Schmitt, H. Schneider, IMF II)	555
32.22.06	**Untersuchungen zu Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme** (W. Pfrang, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)	**557**

32.22.07	**Containmentuntersuchungen für innovative Systeme**	**561**
	KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Resuspension (J. Minges, W. Schütz, IRS; M.K. Koch, RUB-NES)	561
32.22.08	**Oberflächenvergütung mit gepulsten Elektronen- und Ionenstrahlen**	**569**
I.	Behandlung von MCrAlY-Schutzschichten (R. Huber, G. Müller, G. Schumacher, D. Strauß. F. Zimmermann, IHM)	569
II.	Mikromechanische Modellierung von Wärmedämmschichten (J. Aktaa, K. Sfar, IMF II)	581
32.23	**STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG**	**582**
32.23.01	**Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Transmutation von Aktiniden und Spaltprodukten**	**582**
	Updating of an 11-Groups Nuclear Cross Section Set for Transmutation Applications (E. Kiefhaber, IKET)	582
32.23.02	**Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen**	**593**
	(A. Geist, M. Weigl, U. Müllich, K. Gompper, INE)	
32.23.03	**Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil**	**598**
I.	Status of SIMMER-III and SIMMER-IV Code Development (W. Maschek, IKET)	598
II.	Status of SIMMER-III Code Verification (W. Maschek, IKET; S. Kondo, JNC; P. Coste, J. Louvet, CEA)	602

III. Neutron Kinetics of the SIMMER-III Safety Code for ADS Application 606
(A. Rineiski, E. Kiefhaber, B. Merk, W. Maschek, IKET; M. Flad, DTI)

IV. THREEDANT test calculations for a particular FCA VIII-2 assembly 612
(G. Buckel, E. Kiefhaber, A. Rineiski, IKET)

32.23.04 Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR 620

(H. Plitz, PSF)

32.23.05 Untersuchungen zu Beschleuniger getriebenen, unterkritischen Anlagenanordnungen (ADS) 624

I. Thermohydraulic Investigations on Accelerator Driven Systems (ADS) 624
(J.U. Knebel, H.Y. Chen, X. Cheng, G. Janssens-Maenhout,
K.J. Mack, H.J. Neitzel, He. Schmidt, IKET)

II. Untersuchungen an Hüll- und Strukturwerkstoffen für den Einsatz in ADS 637
(R. Hübner, K. Ehrlich, IMF I)

III. Liquid metal corrosion 640
(J. Konys, H. Glasbrenner, IMF III; G. Müller, G. Schumacher, IHM;
A. Rusanov, IPPE Obninsk)

IV. Entwicklung des Rechenprogramms FLUTAN für thermo- und fluid-dynamische Anwendungen 652
(G. Grötzbach, L. Carteciano, B. Dorr, N. Lehmann, W. Olbrich, IRS;
X. Jin, Siemens/KWU))

32.23.06 **HGF-Strategiefonds-Projekt: Thermohydraulische und material-spezifische Untersuchungen zur Realisierung einer Beschleuniger getriebenen Anlagenanordnung zur Transmutation von Aktiniden** 656

(J.U. Knebel, F. Fellmoser, C. Lefhalm, K. Mack, C. Pettan, H. Piecha, IKET; J. Konys, C. Adelhelm, H. Glasbrenner, H. Muscher, J. Novotny, Z. Voss, O. Wedemeyer, IMF; G. Müller, A. Heinzel, G. Schumacher, R. Huber, F. Zimmermann, IHM; G. Grötzbach, B. Dorr, L.N. Carteciano, IRS)

VERÖFFENTLICHTE BERICHTE 683

32.21 LEICHTWASSERREAKTORSICHERHEIT

32.21.01 Wasserstoffverhalten und Gegenmaßnahmen

I. Assessment of In-Vessel Hydrogen Sources

(J. Starflinger, IKET)

Abstract

An assessment of the in-vessel hydrogen source term is being performed, which is summarised in a Table, briefly describing open questions and knowledge of hydrogen generation models, related experiments and codes.

Zusammenfassung

Eine Bewertung des "In-Vessel"-Wasserstoffquellterms wird durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Form einer Tabelle zusammengefaßt, welche offene Fragen und aktuelles Wissen zu Wasserstofferzeugungsmodellen, zu Versuchen bzw. Versuchsreihen zum Wasserstoffquellterm sowie zu Computercodes beinhaltet.

INTRODUCTION

During the so-called in-vessel phase of a severe nuclear accident, hydrogen is generated in the reactor core and together with steam, it is released through the break into the containment building. In some compartments of this building, hydrogen can accumulate up to concentration levels at which a deflagration or - in the worst case - a detonation can occur, when the combustible mixture is ignited. Resulting high pressure loads or "missiles" of debris could threaten the containment integrity beyond failure and possibly lead to environmental hazards.

BOUNDARY CONDITIONS

As revealed from sophisticated three-dimensional containment analysis studies performed with GASFLOW [1], the formation of a combustible mixture of air and hydrogen inside the containment building is strongly influenced by

- the mass flow rate of steam,
- the underlying accident scenario defining the location of the break and the strength of the source as well as
- the system boundary conditions (atmospheric temperature and pressure in the containment, temperature of the inner structures, etc.).

The mass flow rate of hydrogen represents the material available for burning and hence determines the potential for a deflagration/detonation event.

The history of steam generation is important, because a certain amount of steam inside the containment can serve as an inert gas diluting the combustible mixture. For instance, if the hydrogen is generated early (e.g. in course of a Large Break Loss-Of-Coolant Accident; LB-LOCA), the steam concentration in the containment building can remain high and possibly prevent or delay the ignition of the hydrogen-air-steam mixture (for flammable limits of those mixtures, see Fig. 21 in [2]). In case of a late release of hydrogen into the containment building (e.g. in case of a SB-LOCA), condensation of steam causes a relatively dry atmosphere where the same amount of hydrogen could initiate a more severe combustion compared to the accident scenario mentioned before.

Beside the strength of the source, the accident scenario determines the location of the break. The so-called E11 series of the HDR Security Program [3] led to the result that a break (source) which is located "high" in the containment building caused a diversion of the hydrogen and the steam (experiment E11.2). The hydrogen accumulated in the dome whereas the steam remained in the lower part of the containment atmosphere. Even an additional injection of steam through the break was not able to break up this stratification. In contradiction to this, a hydrogen source located "low" led to a well mixture of hydrogen and steam due to natural convection effects.

The atmospheric temperature and pressure are per se important boundary conditions for the containment analysis. The temperature of the structural material has a strong influence on the condensation of steam inside the containment building, which could lead to an increase of the hydrogen mass fraction resulting in a higher potential for a severe combustion event (fast deflagration, detonation, etc).

ASSESSMENT

As shown before, the hydrogen source term plays an important role in case of containment combustion analyses. To assess the accuracy of the in-vessel hydrogen sources, a group of French and German experts from CEA and FZK composed a table containing a survey of open questions and current knowledge of hydrogen generation models, related experiments and codes. The results which are summarized in Table 1 will be discussed in detail.

Table 1 depicts typical stages of the in-vessel hydrogen generation in course of a severe accident, which can be named as follows: Cladding oxidation, steel oxidation, boron carbide oxidation; hydrogen generation during reflood, during relocation, debris bed- and molten pool formation as well as hydrogen generation during in-vessel molten fuel coolant interaction.

Table 1 also consists of different rows containing questions under three topics: Models, experiments and codes. For example under the topic of models, it is asked Are all hydrogen generations processes are understood, are models available, are modifications necessary etc. Under the topic experiments: Are experimental data available or what experimental limits are known. Finally, it is asked which code (codes under concern: ASTEC V0, ICARE/CATHARE V1, MAAP-4; MELCOR 1.8.4, SCDAP/RELAP5 mod3.1) covers which hydrogen generation phenomena and whether it is possible to give some brief data on the hydrogen source during these generation phases.

The results can be stated as follows (for more details, see Table 1):

- The early hydrogen source due to **cladding oxidation** can be predicted within the error of experiments. Data are available. Codes are validated. The same is valid for **steel oxidation**.

- Uncertainties exist in case of **high burn-up fuel**. Experiments will be performed in order to show whether modifications of the existing models/codes will be necessary. There are large uncertainties for oxidation of the fuel rod cladding in air after vessel failure. Small scale experiments are currently under way.

- The **boron carbide oxidation** is uncertain for temperatures higher than 1100°C. Experiments will be performed as a part of the 5th Framework Program of the EC, e.g. in the QUENCH facility at FZK or in PHEBUS-FP facility at CEA/ISPN [4]. The results shall be used to close the gap of available data and later to improve models for boron carbide oxidation in severe accident analysis codes.

- The hydrogen source term and underlying physics during **reflood** of an overheated reactor core are under current experimental investigation (see for example the COBE project in the framework of the 4th Framework Program for Nuclear Safety [5]). Codes are currently being developed; especially models for material behavior and thermal-hydraulics will soon be improved and implemented into codes.

- The main uncertainties during the in-vessel hydrogen generation can be found in the late in-vessel phase, i.e. during **debris bed- and molten pool formation**, addressing especially the oxidation behavior of Zr-rich material mixtures including both the kinetics of oxidation and the available steam-debris interaction surface. Very few experiments are available. The accuracy of the coarse models implemented in the codes is insufficient.

- The hydrogen generation rate und integral mass are hard to predict for in-vessel **molten fuel-coolant interactions** (MFCI) and even unknown in case of steam explosions. The models are very coarse. A database for mild MFCI exists (e.g. FARO or KROTOS tests at JRC, Ispra [6]), but very few experimental data for hydrogen generation during steam explosions (e.g. ZREX droplet experiments [7]) are available.

SUMMARY AND CONCLUSION

As revealed from Table 1, the hydrogen generation can be predicted for a fairly wide range of early in-vessel phases during severe accidents. However, for the late in-vessel phase, there is still need for experiments with Zr as the hydrogen generating material under large-scale boundary conditions (e.g. QUENCH or PHEBUS-FP-experiments). Furthermore, it is necessary to develop or improve the theoretical models for thermal-

hydraulics and material interaction. Beside this, emphasis should be placed upon high burn-up fuel oxidation and the oxidation of both debris beds and Zr-U-O melts (during relocation and molten pool formation).

LITERATURE

[1] P. Royl, H. Rochholz, W. Breitung, J.R. Travis, G. Necker: Analysis of steam-hydrogen distribution with mitigation in large reactor containments. 15th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SmiRT-15), Seoul, Korea, August 23-24, 1999.

[2] J. H. S. Lee, M. Berman: Hydrogen Combustion and Its Application to Nuclear Safety. In: Advances in Nuclear Safety, Vol. 29, Academic Press, San Diego, USA, 1997.

[3] HDR Sicherheitsprogramm. Auswertung der experimentellen und analytischen Ergebnisse der HDR-Wasserstoffverteilungsversuche, Versuche: E11.0-6, Technischer Fachbericht PHDR 117-94, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1994.

[4] M. Steinbrück (Ed.): 5th International QUENCH Workshop, Compilation of Handouts, Institut für Materialforschung I, Nov. 1999.

[5] I. Shephard et al.: Investigation of Core Degradation (COBE), Final Report, Joint European Research Centre, Institute for Systems, Informatics and Safety, EUR 18982 EN, 1999.

[6] A. Annunziano: The Effect of H_2 Production on the Propagation of Energetic Fuel Coolant Interactions in UO_2/ZrO_2-Mixtures. Institute For Systems, Informatics and Safety, Technical Note No. I.96.108, Joint European Research Centre, Ispra, 1996.

[7] D. H. Cho, D. R. Armstrong, W. H. Gunther: Recent Progress in ANL Experiments on Interactions Between Zirconium-Containing Melt and Water (ZREX). CSARP Meeting, Bethesda, Maryland, USA, May 5-8, 1997.

Table 1

		In-Vessel Hydrogen Generation Phases							
		Cladding Oxidation		Steel Oxidation	Boron Carbide (B_4C) Oxidation	Reflood		Relocation, Debris Bed-, Molten Pool Formation	Molten Fuel Coolant Interaction in the Lower Head (MFCI)
		steam: fresh fuel / steam: irradiated fuel	air			Thermal Hydraulic	Material Behavior		
Models	Are the relevant H_2 generation processes understood?	yes / partly yes	open question	yes	< 1100 °C yes > 1100 °C no	partly yes	partly yes	large uncertainties	poorly understood (steam explosion: unknown)
Models	Which models are available?	diffusion models; parabolic correlations / the same as for fresh fuel	correlation	correlation	< 1100 °C: correlation	extended DBA models, SVECHA [1]	shattering models	a few specific models on debris bed oxidation	parametric model for core slump; user specified fragmentation models
Models	Are modifications necessary?	no / unknown	yes	no	yes	yes	yes	yes	yes
Models	Which models are implemented into computer codes?	parabolic correlations / the same as for fresh fuel	correlation	correlation	correlation	extended DBA models	shattering models	scaled down (by Zr in melt content) models	unknown
Models	How accurate are the models?	sufficient / the same as for fresh fuel	unknown	sufficient	insufficient	under improvement	insufficient	unknown	unknown
Experiments	Are experimental data available?	yes / yes	yes	yes, within DBA [2]	< 1100 °C, only powder, no pellets	yes, under DBA	yes (CORA, LOFT)	very few	several series for mild MFCI (e.g. FARO)
Experiments	Which experimental programs are currently performed?	no / TAGCIR; HYDRAZIR; CINOG; ANL-high burn-up; JAERI -high burnup	DRESSMAN, "FZK-IMF-Exp.", CODEX	no	MADRAGUE, QUENCH, PHEBUS-FP, AEKI	QUENCH (partially)	QUENCH	no	ZREX
Experiments	Limits of experimental data known? (e.g. temp. range)	steady-state conditions		no	1100 °C	DBA	DBA	unknown	triggered experiments with Zr containing melts; melt composition
Codes	Which code covers which phenomena?	all [3]		all, except of ASTEC V0	no code, except partially MELCOR	ASTEC within DBA, MAAP extended DBA models; ICARE within DBA; SCDAP: ext. DBA models		all	MAAP
Codes	Typical H_2 mass flow rates? (900MW, PWR, (LOOP))	0.5 kg/s / unknown		10-15% of total H2 prod. of TMI-2	unknown	5 - 10 kg/s		< 0.2 kg/s (SCDAP from debris oxidation)	without explosion: up to 40%; with explosion: up to 92% oxidation of melt [4]

[1] not for reactor applications till now
[2] Design Basis Accident (Temperatures < 1500 K)
[3] Codes under consideration: ASTEC V0, ICARE/CATHARE V1, MAAP-4; MELCOR 1.8.4, SCDAP/RELAP5
[4] for $Zr-ZrO_2$ melts

II. A Computationally Efficient Thermal Radiation Transport Model for the GASFLOW Code

(J. R. Travis, Engineering & Scientific Software, Inc.)

Abstract

A thermal radiation transport model is developed for the GASFLOW code. This methodology provides a compromise between computational accuracy and efficiency. For the one- and two-dimensional benchmark test problems, we demonstrate that the model is generally accurate within 20% error with most results accurate to less than 5% error. We gain computational efficiency such that when the radiation model is used there is less than 40% increase penalty in CPU time. For both high temperature superheated steam sources and hydrogen sources with combustion, it is shown that structural components are under increased thermal loads while the containment gas phase results in subsequently lower temperatures and pressures.

Zusammenfassung

Für den GASFLOW-Code wird ein Wärmestrahlungs-Transportmodell entwickelt. Dabei muß ein Kompromiß eingegangen werden zwischen rechnerischer Genauigkeit und Effizienz. Es wird gezeigt, daß das Modell für ein- und zweidimensionale Benchmark-Testrechnungen hinreichend genau und effizient ist.

I. INTRODUCTION

After the two-phase blowdown phase in a loss of coolant accident, it is possible that copious amounts of super heated steam (> 50,000 kg) be released into the containment. Much of this super heated steam is at temperatures greater than 800 K with peak values as high as 1500 K. Not only can this thermal source produce thermal loads to structural components by condensation and convection heat transfer, but additionally, by thermal radiation heat transfer. Another source of thermal radiation to structures can occur after the super heated steam release when core components may oxidize,

producing large amounts of hydrogen (> 600 kg), that will migrate over time to the break location and be injected into the containment atmosphere. If this hydrogen should ignite and combust as a propagating or diffusion flame, or a combination of these combustion modes, significant thermal radiation loads may also be imposed upon structural components. It is anticipated that while significant thermal loads will be placed on structural components, the actual containment gases will have decreased temperatures which will necessarily reduce containment pressure loads.

The GASFLOW[1] code is currently being developed to simulate these type of accident scenarios, but to date has only modeled the thermal radiation heat transfer between structural surfaces using simple engineering view-factor methods. The complicated geometries involved with containment designs and the difficulties of including participating media are both severe shortcomings with view-factor methods. It is essential to include participating media in any model because, this is in fact, the source of thermal radiation. It is highly desirable to also design a model which implicitly includes the coupling of all structural surfaces.

Essentially, the governing equations for time-dependent, multidimensional problems of radiating-gas flows are very difficult because they are a complicated, highly nonlinear, integrodifferential field equation set. However, an exact radiation-transport equation for time-dependent, multidimensional problems for a non-scattering, quasi-equilibrium, gray gas can be approximated by a set of differential equations by means of the "moment" or "differential" approximation method[2].

II. THEORETICAL MODEL

This method was first developed by astrophysicists for radiation-transport problems[3,4] for planar geometries. Later, it was studied in greater detail by nuclear physicists[5,6,7] in dealing with neutron-transport problems. In the absence of photon scattering and the assumption that the gas is in local thermodynamic equilibrium, the radiation-transport equation for a gray gas has been given by many researchers[8,9,10,11,12] as

$$\left(\frac{1}{c}\right)\left(\frac{\partial E(\mathbf{r},\Omega,t)}{\partial t}\right)+l_i\left(\frac{\partial E(\mathbf{r},\Omega,t)}{\partial x_i}\right)=-\alpha E(\mathbf{r},\Omega,t)+\frac{\alpha\sigma T^4}{\pi} \qquad (1)$$

where α is the absorption or extinction coefficient, c the speed of light, σ the Stefan-Boltzmann constant, T the temperature of the gas, $E(\mathbf{r},\Omega,t)$ the specific radiation intensity (which is a function of the position vector $\mathbf{r}$ and the directional vector Ω and the time t), and the l_i's are the direction cosines of the vector Ω with respect to the coordinate directions x_i.

The thermal radiation flux vector and the radiation intensity are related by the integral

$$q_i^{(r)}(\mathbf{r},t) = \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) l_i d\Omega \qquad (2)$$

As developed by Vincenti[2], we abandon any attempt to actually solve the above radiative transfer equation itself, but are content to satisfy only certain moments of the equation. To this end, we first introduce the moments of intensity as follows:

$$\left.\begin{aligned} E_0(\mathbf{r},t) &\equiv \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) d\Omega \\ E_{1x_i}(\mathbf{r},t) &\equiv \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) l_i d\Omega \\ E_{2x_ix_j}(\mathbf{r},t) &\equiv \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) l_i l_j d\Omega \\ &\vdots \\ E_{nx_ix_j}(\mathbf{r},t) &\equiv \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) l_i (l_j)^{n-1} d\Omega \quad for \quad n \geq 2 \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

The first three moments have physical significance. This can be seen by noting that the radiation energy density $U^{(r)}(\mathbf{r},t)$, radiation heat flux vector $q_i^{(r)}(\mathbf{r},t)$, and the radiation pressure tensor $p_{ij}^{(r)}$ are given by

$$U^{(r)}(\mathbf{r},t) = \left(\frac{1}{c}\right) \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) d\Omega \qquad (4a)$$

$$q_i^{(r)}(\mathbf{r},t) = \int_\Omega E(\mathbf{r},\Omega,t) l_i d\Omega \qquad (4b)$$

$$p_{ij}^{(r)}(\mathbf{r},t)=\left(\frac{1}{c}\right)\int_{\Omega}E(\mathbf{r},\Omega,t)l_i l_j d\Omega \tag{4c}$$

For the special case when the gas is in radiation equilibrium, Eqs. (4a) and (4c) yield the relation

$$p_{ij}^{(r)}(\mathbf{r},t)=\frac{U^{(r)}(\mathbf{r},t)}{3}\delta_{ij} \tag{5}$$

where δ_{ij} is the Kronecker delta. It follows from Eqs. (3) and (4) that

$$U^{(r)}(\mathbf{r},t)=\left(\frac{E_0(\mathbf{r},t)}{c}\right) \tag{6a}$$

$$q_i^{(r)}(\mathbf{r},t)=E_{1x_i}(\mathbf{r},t) \tag{6b}$$

$$p_{ij}^{(r)}(\mathbf{r},t)=\frac{E_{2x_i x_j}(\mathbf{r},t)}{c} \tag{6c}$$

Therefore, the first three moments are proportional to the radiation energy density, radiation flux vector, and radiation pressure tensor, respectively. Integrating Eq. (1) (with $\partial E / c\partial t$ neglected for the moment) over the complete range of solid angle and noting that T is independent of Ω, we obtain

$$\frac{\partial E_{1x_j}}{\partial x_j}=-\alpha E_0+4\alpha\sigma T^4 \tag{7a}$$

Similarly, multiplying Eq. (1) by various powers of the direction cosines l_i (i=1,2,3) and integrating, one also obtains

$$\frac{\partial E_{2x_i x_j}}{\partial x_j}=-\alpha E_{1x_i} \qquad (i=1,2,3) \tag{7b}$$

The infinite set of moment equations (7) and the exact transport equation (1) are completely equivalent. We can, however, use a finite number of these equations to approximate the exact equation. In this case, the number of unknowns are usually more than the number of equations. In order to obtain a determinate set of equations for the n^{th} approximation, we have to express the n^{th} moment in terms of lower moments. This can be done by following a procedure similar to that of the spherical-harmonic method Grad[13] used in the study of the kinetic theory of rarefied gas dynamics.

Let the radiation intensity be expanded in a series in terms of normalized spherical harmonics:

$$E(\mathbf{r},\Omega)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}A_l^m(\mathbf{r})Y_l^m(\Omega) \tag{8}$$

where A_l^m's are functions to be determined and $Y_l^m(\Omega)$'s are the normalized spherical harmonics, each of which being related to the associated Legendre function $P_l^m(\cos\theta)$ by

$$Y_l^m(\Omega)=\left[\frac{(2\cdot l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right] e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta) \tag{9}$$

The n^{th} approximation follows when we terminate this series after the term with $l=2n-1$. It is shown in neutron-transport theory[5,6,7] that the first approximation is sufficiently accurate for many problems. For our purpose, therefore, we shall limit ourselves for the present to the first approximation. To this end, we let $A_l^m=0$, for $l\geq 2$. If we substitute the truncated series into the first three moments of the intensity and use the orthogonal properties of spherical harmonics, it can be shown that

$$E_0(\mathbf{r})=2(\pi)^{1/2}A_0^0(\mathbf{r}) \tag{10a}$$

$$E_{2x_ix_j}(\mathbf{r})=\frac{2}{3}(\pi)^{1/2}A_0^0(\mathbf{r})\delta_{ij} \tag{10b}$$

It follows that

$$E_{2x_ix_j}(\mathbf{r}) = [E_0(\mathbf{r})/3]\delta_{ij} \tag{11}$$

In view of Eqs. (6) and (11), the radiation pressure tensor is

$$p_{ij}^{(r)}(\mathbf{r}) = [U^{(r)}(\mathbf{r})/3]\delta_{ij} \tag{12}$$

Upon comparing Eq. (12) with Eq. (5), it follows that the first approximation in effect assumes that the quantities $p_{ij}^{(r)}$ and $U^{(r)}(\mathbf{r})$ are related in such a way as if the gas were in local radiation equilibrium. Making use of relations (6b) and (11) in Eqs. (7a) and (7b), we can now replace the exact radiation transport equation by the following equations in the first approximation:

$$\frac{\partial q_j}{\partial x_j} = -\alpha E_0 + 4\alpha\sigma T^4 \tag{13a}$$

$$\frac{\partial E_0}{\partial x_i} = -3\alpha q_i \qquad (i = 1,2,3) \tag{13b}$$

If the radiation intensity E_0 is eliminated from these equations, we obtain the following approximate time-independent radiation transport equation in terms of the radiation energy flux vector q_i

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{\alpha}\frac{\partial q_j}{\partial x_j}\right) - 3\alpha q_i - 16\sigma T^3\frac{\partial T}{\partial x_i} = 0 \qquad (i = 1,2,3) \tag{14}$$

It is interesting to note[11] that Eq. (14) reproduces the well-known optically-thick gas (when $\alpha >> 1$, due first to Rosseland[14] and reported in all radiation heat transfer books) as well as the optically-thin (when $\alpha << 1$) approximation. For these reasons, the moment method maybe a useful approximation to the exact radiation transport equation for all values of optical thickness.

Now eliminating E_0 from Eqs. (13) by using Eq. (6a) plus the Stefan-Boltzmann constraint, $a \cdot c = 4\sigma$ (which relates the radiation constant a to the speed of light c and the Stefan-Boltzmann constant σ), we obtain the moment approximation equations in terms of the radiation energy density $U^{(r)}$ and the radiation flux vector q_j

$$0 = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right) \tag{15a}$$

and

$$q_i = -\frac{c\lambda}{3}\frac{\partial U^{(r)}}{\partial x_i} \tag{15b}$$

where the absorption coefficient α is related to the photon "mean free path", λ, by $\lambda = 1/\alpha$.

Some authors[15] argue that the time-dependent term, $\partial E / c\partial t$, in Eq. (1) is small and can be neglected, however, we take the opportunity at this point to add it back to Eq. (15a) giving

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial U^{(r)}}{\partial t} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} &= \frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right) \\ q_i &= -\frac{c\lambda}{3}\frac{\partial U^{(r)}}{\partial x_i} \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

which is similar to the thermal radiation model Bird, etal.[16] present.

Finally, the right hand side of first Eq. (16), but with opposite sign, appears on the right hand side of the GASFLOW internal energy transport equation

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho I) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} I) = -p\nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q} + Q - \frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right. \tag{17}$$

to provide the proper coupling between the fluid and radiation transport equations.

What remains to complete Equation (16) is a boundary condition and the appropriate identification of the photon mean free path λ. Vincenti and Kruger[2] present the consistent boundary condition for a solid planar wall coincident with the x_2,x_3-plane and bounding a semi-infinite expanse of gas lying in the x_1-direction. They assume that each point on the wall radiates as a black body with a temperature $T_W(x_2,x_3,t)$, which is a known function of position and time, to obtain the following relation:

$$\sigma T_w^4(x_2,x_3,t) = \frac{1}{4}\left[c \cdot U^{(r)}(0,x_2,x_3,t) + 2 \cdot q_1(0,x_2,x_3,t)\right. \qquad (18)$$

or, in terms of the thermal radiation wall flux

$$q_1(0,x_2,x_3,t) = \frac{c}{2}\left[aT_w^4(x_2,x_3,t) - U^{(r)}(0,x_2,x_3,t)\right.$$

Modest[17] derives the same consistent boundary condition except for the concept of a "gray surface", which emits and reflects radiation diffusely as

$$q_1(0,x_2,x_3,t) = \left(\frac{\varepsilon}{2-\varepsilon}\right)\left(\frac{c}{2}\right)\left[aT_w^4(x_2,x_3,t) - U^{(r)}(0,x_2,x_3,t)\right. \qquad (19)$$

where ε is the local surface emissivity.

Since our applications involve reactor containment safety issues, which primarily concerns N_2, O_2, H_2, H_2O, we must determine absorption data for only H_2O as the other components are transparent to thermal radiation. To this means, we make use of the model of Cess and Lian[18] and provide no further discussion concerning this topic.

III. COMPUTATIONAL MODEL

It is convenient to recast the relevant terms of the internal energy differential equation and thermal radiation energy density equation into the integral equivalent equations to be consistent with the current GASFLOW-II equation set, i.e., Eq. (17) becomes

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho I dV = -\int_V \frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right)dV \qquad (20a)$$

and Eq. (16) becomes

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V U^{(r)} dV = -\oint_S \left(\mathbf{q}^{(r)} \cdot \mathbf{A}\right)dS + \int_V \frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right)dV \qquad (20b)$$

In order to solve the above two coupled equations, we cast them, respectively, in implicit finite volume form:

$$(\rho VI)^{n+1} - (\rho VI)^n = -V^n \frac{c \cdot \delta t}{\lambda}\left[a\left(T^{n+1}\right)^4 - \left(U^{(r)}\right)^{n+1}\right. \qquad (21)$$

and

$$\left(U^{(r)}V\right)^{n+1} - \left(U^{(r)}V\right)^n + \delta t \sum_f \left(\mathbf{q}^{(r)} \cdot \mathbf{A}\right)_f^{n+1} \Delta S_f =$$

$$V^n \frac{c \cdot \delta t}{\lambda}\left[a\left(T^{n+1}\right)^4 - \left(U^{(r)}\right)^{n+1}\right. \qquad (22)$$

on a GASFLOW computational control volume shown in Figure 1. Following a similar development as was used to develop the pressure equation for GASFLOW[1], we write a set of implicit equations involving only time advanced values of $U^{(r)}$ in cell ijk and neighboring cells plus source terms involving other quantities evaluated at the beginning of the computational cycle.

Since the material mass remains constant during this fractional time-step, and with the following approximations

$$c_v\left(T^n\right) \cong \frac{\left(I^{n+1} - I^n\right)}{\left(T^{n+1} - T^n\right)} \tag{23}$$

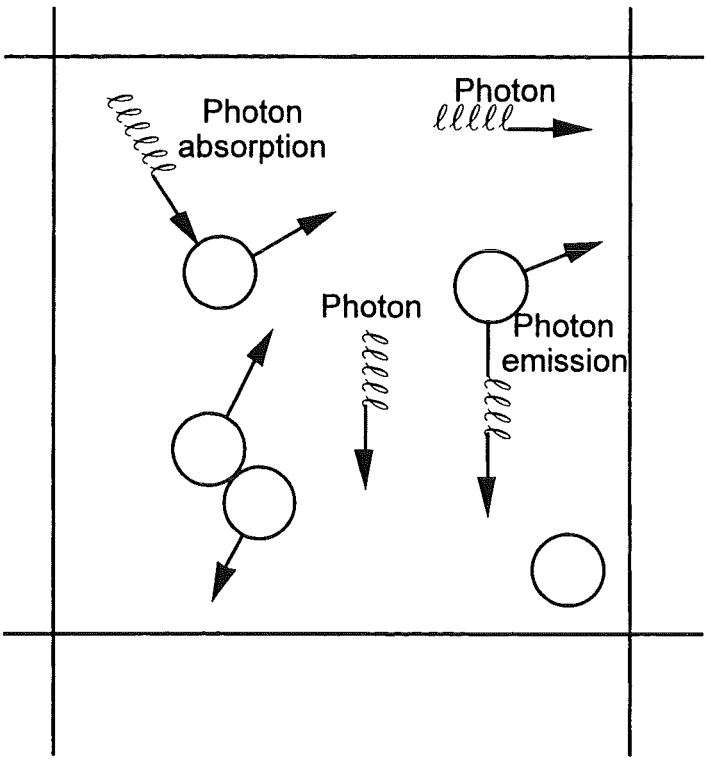
and using a binomial expansion for $\left(T^{n+1}\right)^4$

$$\left(T^{n+1}\right)^4 = \left(T^n + \Delta T\right)^4 = \left(T^n\right)^4 + 4\left(T^n\right)^3 \Delta T + 6\left(T^n\right)^2 \Delta T^2 + \ldots$$

$$= \left(T^n\right)^4 + 4\left(T^n\right)^3 \left(T^{n+1} - T^n\right) + 6\left(T^n\right)^2 \left(T^{n+1} - T^n\right)^2 + \ldots$$

or

$$\left(T^{n+1}\right)^4 \cong \left(T^n\right)^4 + 4\left(T^n\right)^3 \left(T^{n+1} - T^n\right. \tag{24}$$



GASFLOW Computational Cell ijk

Figure 1. GASFLOW computational control volume over which energy balances are made; circles represent material molecules.

Substituting Eqs. (23) and (24) into (21) yields

$$(\rho V)^n c_v(T^n)(T^{n+1} - T^n) =$$

$$-V^n \frac{c \cdot \delta t}{\lambda} \left[4a(T^n)^3 T^{n+1} - 3a(T^n)^4 - (U^{(r)})^{n+1} \right. \tag{25}$$

or

$$T^{n+1} - T^n = \frac{\Delta}{(1+\Delta')} \left[(U^{(r)})^{n+1} - a(T^n)^4 \right. \tag{26}$$

where

$$\Delta = \frac{c \cdot \delta t}{\rho c_v(T^n)\lambda}$$

and

$$\Delta' = \Delta 4a(T^n)^3$$

Combining Eqs. (24) and (26), we obtain an approximation expression for $a(T^{n+1})^4$, given by

$$a(T^{n+1})^4 \cong a(T^n)^4 + \frac{\Delta'}{(1+\Delta')} \left[(U^{(r)})^{n+1} - a(T^n)^4 \right. \tag{27}$$

Using Eq. (27) to rewrite the right hand side of Eq. (22) yields

$$(U^{(r)}V)^{n+1} - (U^{(r)}V)^n + \delta t \sum_f (\mathbf{q}^{(r)} \cdot \mathbf{A})_f^{n+1} \Delta S_f =$$

$$V^n \frac{c \cdot \delta t}{\lambda(1+\Delta')} \left[a(T^n)^4 - (U^{(r)})^{n+1} \right. \tag{28}$$

We now have a set of implicit equations involving only time advanced values of $U^{(r)}$ in cell ijk and neighboring cells plus source terms involving other quantities evaluated at the beginning of the computational cycle. Remember that in the radiation energy flux expression

$$\delta t \sum_f \left(\mathbf{q}^{(r)} \cdot \mathbf{A}\right)_f^{n+1} \Delta S_f \tag{29}$$

where $\mathbf{A}$ is the fractional area vector in the very same sense as GASFLOW[1], and we make use of the Cartesian geometry "news-tb" convention, that is, north, east, west, south, top, and bottom description of cells faces as well as cell neighbors (see Table below). Expanding Eq. (29) for the "north face" yields

$$\left(\mathbf{q}^{(r)} \cdot \mathbf{A}\right)_{fn}^{n+1} \Delta S_{fn} = -\left\{\frac{\left[\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1} - \left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]}{\delta y^+} A_{fn}\right\}\left(f\frac{c\lambda}{3}\right)_{fn}^n \Delta S_{fn} =$$

$$-\Lambda_{fn}^n \left[\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1} - \left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right] = -\Lambda_{fn}^n \left[\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1} - \left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right. \tag{30}$$

where the flux limiting function, f , is given by

$$f = \frac{1}{1 + g\left[1 + 3 \cdot \exp\left(-\frac{3}{2}g\right)\right]}$$

where

$$g = \frac{1}{3}\frac{\lambda}{U^{(r)}}\left|\nabla U^{(r)}\right|$$

is evaluated at the beginning of cycle values, and therefore;

$$\Lambda_{fn}^n = \frac{A_{fn}}{\delta y^+}\left(f\frac{c\lambda}{3}\right)_{fn}^n \Delta S_{fn} = \frac{A_{fn}}{\delta y^+}\left(f\frac{c\lambda}{3}\right)_{fn}^n (\delta x \cdot \delta z)$$

Radiant fluxes for the other cell faces are computed in a similar manner. The purpose of this flux limiter is to provide for normal diffusion in optically thick regions and limited "free streaming" in optically thin regions.

GASFLOW-II Computational Cell Description

Location	Indices	Abbreviation	Distance from cell center	Area of cell face S_f
center	i,j,k	c		
north face	i,j+1/2,k	fn	$dy^+/2=$ $(y_{j+1}-y_j)/2$	$(dx^++dx^-)x$ $(dz^++dz^-)/4$
east face	i+1/2,j,k	fe	$dx^+/2=$ $(x_{i+1}-x_i)/2$	$(dy^++dy^-)x$ $(dz^++dz^-)/4$
west face	i-1/2,j,k	fw	$dx^-/2=$ $(x_i-x_{i-1})/2$	$(dy^++dy^-)x$ $(dz^++dz^-)/4$
south face	i,j-1/2,k	fs	$dy^-/2=$ $(y_j-y_{j-1})/2$	$(dx^++dx^-)x$ $(dz^++dz^-)/4$
top face	i,j,k+1/2	ft	$dz^+/2=$ $(z_{k+1}-z_k)/2$	$(dx^++dx^-)x$ $(dy^++dy^-)/4$
bottom face	i,j,k-1/2	fb	$dz^-/2=$ $(z_k-z_{k-1})/2$	$(dx^++dx^-)x$ $(dy^++dy^-)/4$
north neighbor	i,j+1,k	n	dy^+	
east neighbor	i+1,j,k	e	dx^+	
west neighbor	i-1,j,k	w	dx^-	
south neighbor	i,j-1,k	s	dy^-	
top neighbor	i,j,k+1	t	dz^+	
bottom neighbor	i,j,k-1	b	dz^-	

Eq. (28) can now be rewritten in the form

$$V_c\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n}\right]+\delta t\begin{Bmatrix}\Lambda_{fn}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Lambda_{fs}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_s^{n+1}\right]+\\ \Lambda_{fe}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_e^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Lambda_{fw}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_w^{n+1}\right]+\\ \Lambda_{ft}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_t^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Lambda_{fb}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_b^{n+1}\right]\end{Bmatrix}=$$

$$V_c\frac{c\cdot\delta t}{\lambda(1+\Delta')}\left[a\left(T_c^{n}\right)^4-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right. \tag{31}$$

We can consolidate terms to obtain

$$\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\left\{V_c\left[1+\frac{c\cdot\delta t}{\lambda(1+\Delta')}\right]+\delta t\left(\Lambda_{fn}^{n}+\Lambda_{fe}^{n}+\Lambda_{fw}^{n}+\Lambda_{fs}^{n}+\Lambda_{ft}^{n}+\Lambda_{fb}^{n}\right)\right\}-$$

$$\delta t\begin{bmatrix}\Lambda_{fn}^{n}\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1}+\Lambda_{fe}^{n}\left(U^{(r)}\right)_e^{n+1}+\Lambda_{fw}^{n}\left(U^{(r)}\right)_w^{n+1}+\\ \Lambda_{fs}^{n}\left(U^{(r)}\right)_s^{n+1}+\Lambda_{ft}^{n}\left(U^{(r)}\right)_t^{n+1}+\Lambda_{fb}^{n}\left(U^{(r)}\right)_b^{n+1}\end{bmatrix}=$$

$$V_c\left[\frac{c\cdot\delta t}{\lambda(1+\Delta')}a\left(T_c^{n}\right)^4+\left(U^{(r)}\right)_c^{n}\right] \tag{32}$$

We now have a matrix equation set to solve for the updated thermal radiation field energy density $\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}$.

When the boundary conditions, Eq. (19), are applied to all cells bounded by an obstacle or wall, a more general expression can be derived as

$$V_c\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n}\right]-\delta t\begin{Bmatrix}+\Lambda_{fn}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Omega_{fn}^{n}\left[a\cdot T_{wn}^{4}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]\\ -\Lambda_{fs}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_s^{n+1}\right]-\Omega_{fs}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-a\cdot T_{ws}^{4}\right]\\ +\Lambda_{fe}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_e^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Omega_{fe}^{n}\left[a\cdot T_{we}^{4}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]\\ -\Lambda_{fw}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_w^{n+1}\right]-\Omega_{fw}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-a\cdot T_{ww}^{4}\right]\\ +\Lambda_{ft}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_t^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]+\Omega_{ft}^{n}\left[a\cdot T_{wt}^{4}-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right]\\ -\Lambda_{fb}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-\left(U^{(r)}\right)_b^{n+1}\right]-\Omega_{fb}^{n}\left[\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}-a\cdot T_{wb}^{4}\right]\end{Bmatrix}=$$

$$V_c\frac{c\cdot\delta t}{\lambda(1+\Delta')}\left[a\left(T_c^{n}\right)^4-\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\right. \qquad (33)$$

where

$\Lambda_f^n = 0$ and $\Omega_f^n = \left(\frac{\varepsilon_f}{2-\varepsilon_f}\right)\left(\frac{c}{2}\right)A_f\Delta S_f$ for all cell faces bounded by walls or obstacles, and

$\Lambda_f^n = \frac{A_f}{\delta l_f}\left(f\frac{c\lambda}{3}\right)_f^n\Delta S_f$ and $\Omega_f^n = 0$ for open faces. This is summarized in the following table:

TABLE describing coefficients at computational control volume surfaces

Computational cells with open faces	Computational cells with closed or bounde faces	Computational cells located on inflow and outflow boundaries
$\Lambda_f^n = \frac{A_f}{\delta l_f}\left(f\frac{c\lambda}{3}\right)_f^n\Delta S_f$	$\Lambda_f^n = 0$	$\Lambda_f^n = 0$
$\Omega_f^n = 0$	$\Omega_f^n = \left(\frac{\varepsilon_f}{2-\varepsilon_f}\right)\left(\frac{c}{2}\right)A_f\Delta S_f$	$\Omega_f^n = 0$

Again, after consolidating terms

$$\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\left\{V_c\left[1+\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}\right]+\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n+\Lambda_{fe}^n+\Lambda_{fw}^n+\Lambda_{fs}^n+\Lambda_{fl}^n+\Lambda_{fb}^n+\\ \Omega_{fn}^n+\Omega_{fe}^n+\Omega_{fw}^n+\Omega_{fs}^n+\Omega_{fl}^n+\Omega_{fb}^n\end{array}\right]\right\}-$$

$$\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1}+\Lambda_{fe}^n\left(U^{(r)}\right)_e^{n+1}+\Lambda_{fw}^n\left(U^{(r)}\right)_w^{n+1}+\\ \Lambda_{fs}^n\left(U^{(r)}\right)_s^{n+1}+\Lambda_{fl}^n\left(U^{(r)}\right)_l^{n+1}+\Lambda_{fb}^n\left(U^{(r)}\right)_b^{n+1}\end{array}\right]=$$

$$V_c\left[\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}a\left(T_c^n\right)^4+\left(U^{(r)}\right)_c^n\right]+a\cdot\delta t\left[\begin{array}{l}\Omega_{fn}^n\cdot T_{wn}^4+\Omega_{fe}^n\cdot T_{we}^4+\\ \Omega_{fw}^n\cdot T_{ww}^4+\Omega_{fs}^n\cdot T_{ws}^4+\\ \Omega_{fl}^n\cdot T_{wl}^4+\Omega_{fb}^n\cdot T_{wb}^4\end{array}\right] \qquad (34)$$

The situation is complicated further in GASFLOW because of the possibility to have distributed or internal heat sinks. Fortunately, it only requires adding one addition term to both the left and right sides. We further define

$\Omega_{\sin k}^n$ = sink surface area time surface emissivity when sinks are located with computational cell ijk, and

$\Omega_{\sin k}^n$ = 0 when cell ijk is void of any sinks. The final equation, extending Eq. (34) is then

$$\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}\left\{V_c\left[1+\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}\right]+\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n+\Lambda_{fe}^n+\Lambda_{fw}^n+\Lambda_{fs}^n+\Lambda_{fl}^n+\Lambda_{fb}^n+\\ \Omega_{fn}^n+\Omega_{fe}^n+\Omega_{fw}^n+\Omega_{fs}^n+\Omega_{fl}^n+\Omega_{fb}^n+\Omega_{\sin k}^n\end{array}\right]\right\}-$$

$$\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n\left(U^{(r)}\right)_n^{n+1}+\Lambda_{fe}^n\left(U^{(r)}\right)_e^{n+1}+\Lambda_{fw}^n\left(U^{(r)}\right)_w^{n+1}+\\ \Lambda_{fs}^n\left(U^{(r)}\right)_s^{n+1}+\Lambda_{fl}^n\left(U^{(r)}\right)_l^{n+1}+\Lambda_{fb}^n\left(U^{(r)}\right)_b^{n+1}\end{array}\right]=$$

$$V_c\left[\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}a\left(T_c^n\right)^4+\left(U^{(r)}\right)_c^n\right]+a\cdot\delta t\left[\begin{array}{l}\Omega_{fn}^n\cdot T_{wn}^4+\Omega_{fe}^n\cdot T_{we}^4+\\ \Omega_{fw}^n\cdot T_{ww}^4+\Omega_{fs}^n\cdot T_{ws}^4+\\ \Omega_{fl}^n\cdot T_{wl}^4+\Omega_{fb}^n\cdot T_{wb}^4+\Omega_{\sin k}^n\cdot T_{\sin k}^4\end{array}\right] \qquad (35)$$

To incorporate an iterative solution method such as the conjugate residual technique, we assume that the α^{th} step in the iteration will have the α^{th} approximation to $\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}$, $\left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha}$. We then wish to obtain an improved estimate, $\left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha+1}$, where

$$\left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha+1} = \left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha} + \delta\left(U^{(r)}\right) \tag{36}$$

Inserting this expression into Eq. (35), we obtain

$$\left(\delta U^{(r)}\right)_c^{\alpha+1}\left\{V_c\left[1+\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}\right]+\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n+\Lambda_{fe}^n+\Lambda_{fw}^n+\Lambda_{fs}^n+\Lambda_{fl}^n+\Lambda_{fb}^n+\\ \Omega_{fn}^n+\Omega_{fe}^n+\Omega_{fw}^n+\Omega_{fs}^n+\Omega_{fl}^n+\Omega_{fb}^n+\Omega_{\sin k}^n\end{array}\right]\right\}-$$

$$\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n\left(U^{(r)}\right)_n^{\alpha+1}+\Lambda_{fe}^n\left(U^{(r)}\right)_e^{\alpha+1}+\Lambda_{fw}^n\left(U^{(r)}\right)_w^{\alpha+1}+\\ \Lambda_{fs}^n\left(U^{(r)}\right)_s^{\alpha+1}+\Lambda_{fl}^n\left(U^{(r)}\right)_l^{\alpha+1}+\Lambda_{fb}^n\left(U^{(r)}\right)_b^{\alpha+1}\end{array}\right]=$$

$$V_c\left[\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}a\left(T_c^n\right)^4+\left(U^{(r)}\right)_c^n\right]+a\cdot\delta t\left[\begin{array}{l}\Omega_{fn}^n\cdot T_{wn}^4+\Omega_{fe}^n\cdot T_{we}^4+\\ \Omega_{fw}^n\cdot T_{ww}^4+\Omega_{fs}^n\cdot T_{ws}^4+\\ \Omega_{fl}^n\cdot T_{wl}^4+\Omega_{fb}^n\cdot T_{wb}^4+\Omega_{\sin k}^n\cdot T_{\sin k}^4\end{array}\right]-$$

$$\left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha}\left\{V_c\left[1+\frac{c\cdot\delta t}{\lambda\left(1+\Delta'\right)}\right]+\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n+\Lambda_{fe}^n+\Lambda_{fw}^n+\Lambda_{fs}^n+\Lambda_{fl}^n+\Lambda_{fb}^n+\\ \Omega_{fn}^n+\Omega_{fe}^n+\Omega_{fw}^n+\Omega_{fs}^n+\Omega_{fl}^n+\Omega_{fb}^n+\Omega_{\sin k}^n\end{array}\right]\right\}-$$

$$\delta t\left[\begin{array}{l}\Lambda_{fn}^n\left(U^{(r)}\right)_n^{\alpha}+\Lambda_{fe}^n\left(U^{(r)}\right)_e^{\alpha}+\Lambda_{fw}^n\left(U^{(r)}\right)_w^{\alpha}+\\ \Lambda_{fs}^n\left(U^{(r)}\right)_s^{\alpha}+\Lambda_{fl}^n\left(U^{(r)}\right)_l^{\alpha}+\Lambda_{fb}^n\left(U^{(r)}\right)_b^{\alpha}\end{array}\right] \tag{37}$$

This correction equation must be solved by iteration until

$$\frac{\left|\delta U^{(r)}\right|}{\left(U^{(r)}\right)_c^{\alpha}} < \varepsilon^{(r)} \tag{38}$$

After solving for thermal radiation energy density, $\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1}$, we can compute the thermal radiation source term

$$\frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right) \tag{39}$$

after determining $\left(T^4\right)_c^{n+1}$ from evaluating either Eq. (26)

$$T^{n+1} = T^n + \frac{\Delta}{(1+\Delta')}\left[\left(U^{(r)}\right)^{n+1} - a\left(T^n\right)^4\right. \tag{26}$$

or Eq. (27)

$$a\left(T^{n+1}\right)^4 \cong a\left(T^n\right)^4 + \frac{\Delta'}{(1+\Delta')}\left[\left(U^{(r)}\right)^{n+1} - a\left(T^n\right)^4\right. \tag{27}$$

It is now straight forward to compute the source term due to thermal radiation transport in the material phase internal energy equation (21), which gives

$$\frac{c}{\lambda}\left(aT^4 - U^{(r)}\right) = \frac{c}{\lambda}a\left(T^4\right)_c^{n+1} - \frac{c}{\lambda}\left(U^{(r)}\right)_c^{n+1} = \left[\frac{c}{(1+\Delta')\lambda}\right]\left[a\left(T^n\right)^4 - \left(U^{(r)}\right)^{n+1}\right.$$

IV. COMPUTATIONAL RESULTS

We demonstrate the utility of the moment method with several sample problems and a prototypical containment simulation to show thermal radiation effects on structural components.

IV-A. One-Dimensional Radiant Heat Transfer in a Plane Medium

Very precise solutions[19] have been obtained for radiant heat transfer between two isothermal, diffuse, flat plates, at temperatures T_h and T_c, that enclose a gray absorbing-emitting medium with constant absorption coefficients.

We present the results to this problem in Figures 2 and 3, where the quotient of the distance between the parallel plates, L, and the photon mean free path, λ, form the nondimensional optical thickness parameter, ξ_L. Figure 2 shows the normalized surface heat flux between the hot and cold surfaces for three different solutions: (a) The benchmark solution is the solid line which is a rigorous solution to the radiation-transport Equation (1), (b) the exact solution to the differential or moment Equation (16) method is the dashed line, and (c) the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

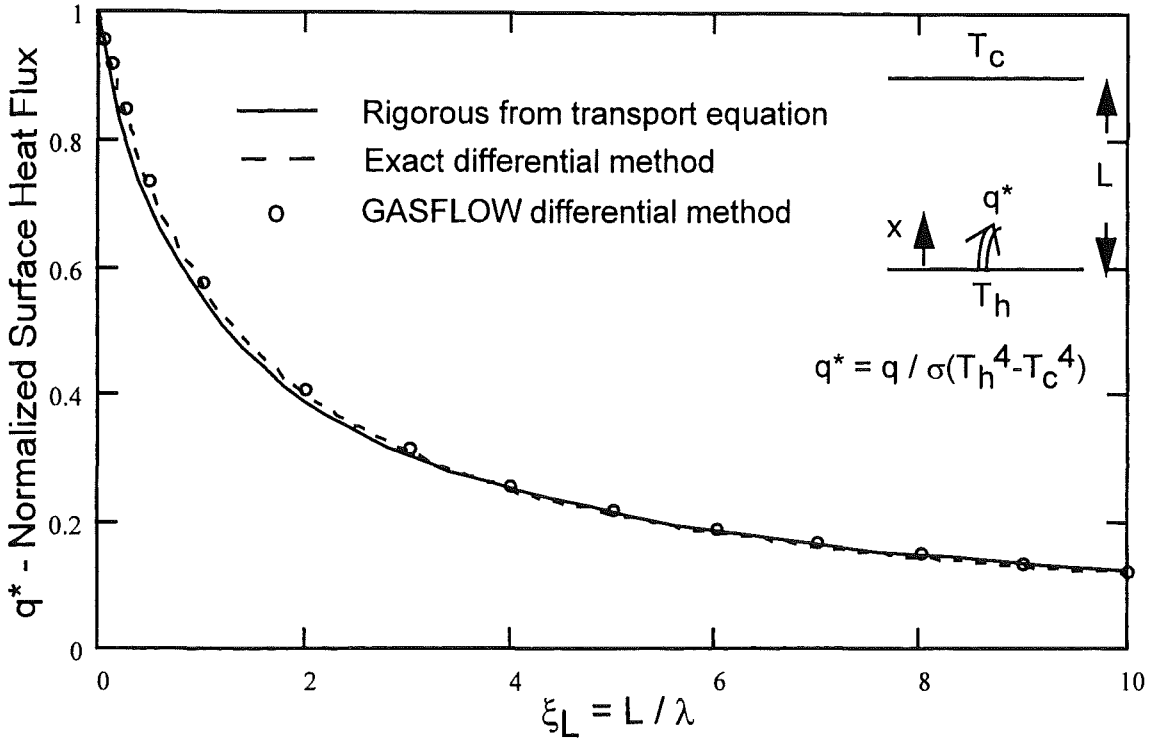


Figure 2. The benchmark solution of normalized surface heat flux for the one-dimensional radiant heat transfer in an adsorbing-emitting plane medium is shown by the solid line, which is a rigorous solution to the radiation-transport Equation (1), the exact solution to the differential or moment Equation (16) method is the dashed line, and the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

The maximum error between the rigorous solution to the radiation-transport Equation (1) and the GASFLOW results over this range of optical thicknesses is less than 3%. In the absence of diffusion heat transfer processes, the solution to the radiation heat transfer Equation (1) for this problem exhibits temperature discontinuities between the wall and gas temperatures, the so-called Deissler jump boundary condition[20]. Figure 3 shows the same solutions as Fig. 2 for the nondimensional temperature jump for the hot surface, the top results, and the cold surface, the lowest results. Again the GASFLOW results and the radiation-transport Equation (1) are in excellent agreement. These results for one-dimensional radiation heat transfer problems give us encouragement that the differential method will provide adequate accuracy for multi-dimensional analyses as well.

IV-B. Two-Dimensional Radiant Heat Transfer in Rectangular Enclosures

We will now apply GASFLOW to a more complex class of problems that involve two-dimensional radiative heat transfer in rectangular enclosures with isothermal, diffusely reflection, gray walls. The enclosed medium is also assumed to be gray.

Problem 1: Black Enclosure with Emitting Medium

The first benchmark problem is the prediction of surface heat transfer in a square enclosure (L_X = L_Y = L) with cold walls (T_C = 0 K), which contains a gas at uniform temperature, T_g = 2000 K. The local heat flux calculated to fall on the lower wall is plotted in Figure 4 for the cases of strongly emitting medium ($\xi_L = L/\lambda = 10$), medium emitting medium ($\xi_L = L/\lambda = 1$), and a weakly emitting medium ($\xi_L = L/\lambda = 0.1$). The "exact" solution was found by Shah[21] and presented in context with this problem by Fiveland[22]. The maximum error between the exact solution of the radiation heat transfer transport Equation (1) and the GASFLOW differential approximation Equation (16) is roughly 20%.

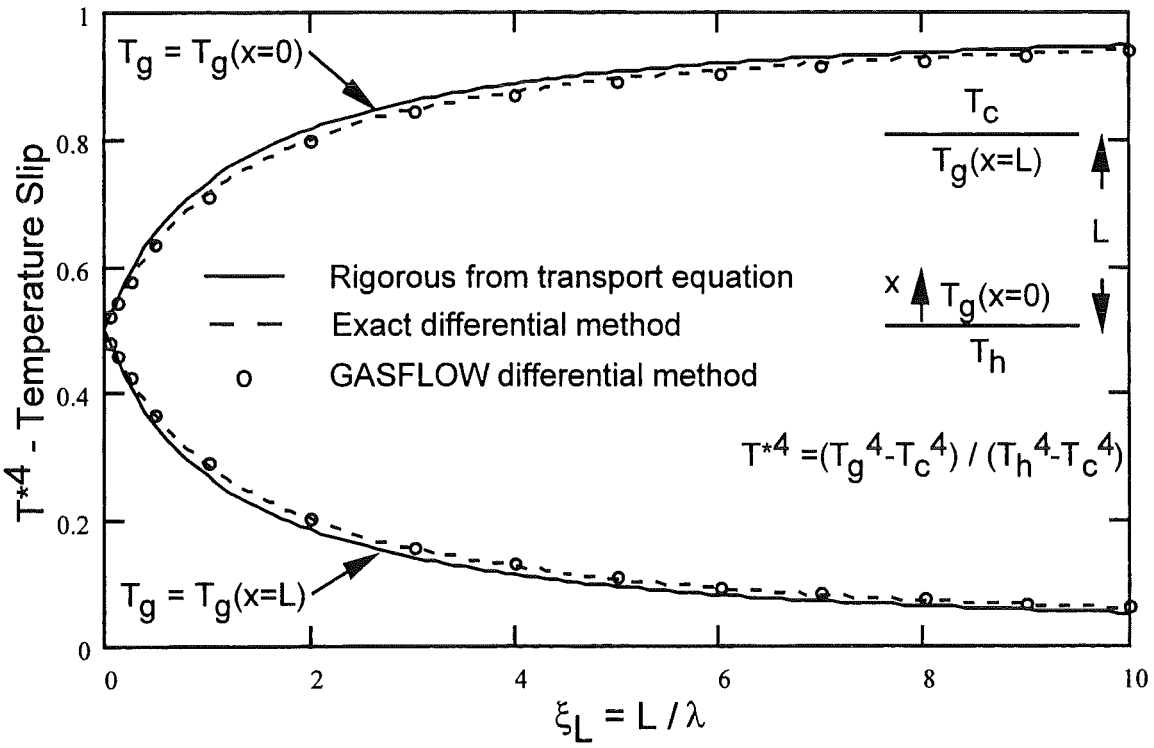


Figure 3. The benchmark solution of normalized surface jump condition for the one-dimensional radiant heat transfer in an absorbing-emitting plane medium is shown by the solid line, which is a rigorous solution to the radiation-transport Equation (1), the

exact solution to the differential or moment Equation (16) method is the dashed line, and the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

Problem 2: Radiation Heat Transfer in an Enclosure with One Hot Wall

The second two-dimensional problem involves radiative exchange in a square enclosure (L_X = L_Y = L) with three cold walls (T_C = 0 K) left, top, and right, and the bottom wall set to a high temperature T_h = 2000 K. The medium absorbs and emits isotropically with a nondimensional optical thickness parameter of $\xi_L = L / \lambda = 1$. The objective is to predict the heat flux that leaves the bottom surface as well as the temperature of the medium itself. Rigorous solutions to this problem have been reported by Crosbie and Schrenker[23] for a range of cavity aspect ratios and absorption coefficients. The rigorous solution of the radiation heat transfer Equation (1) for the nondimensional surface heat flux from the hot surface and the nondimensional temperature distribution along a vertical line in the center of the square enclosure are plotted as solid lines in Figures 5 and 6, respectively. The GASFLOW results are then displayed as open circles in both Figures. The maximum error for the heat flux is about 20% while the temperature distribution alone the medium centerline is more accurate.

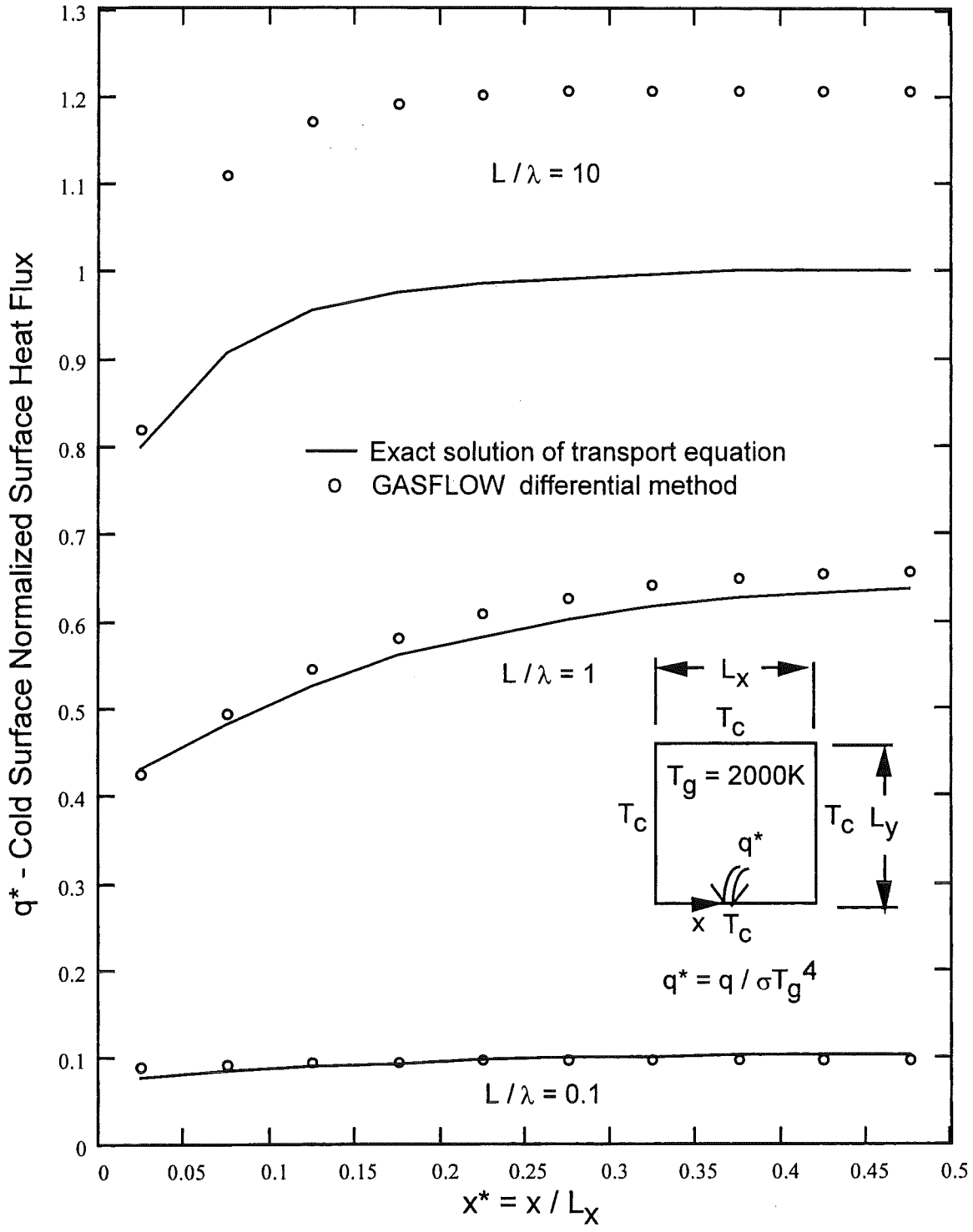


Figure 4. The exact solution of the cold surface normalized surface heat flux for the two-dimensional radiative heat transfer in an emitting medium at uniform constant 2000 K (for three cases $\xi_L = L/\lambda = 0.1, 1 and 10$) is shown by the solid lines and the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

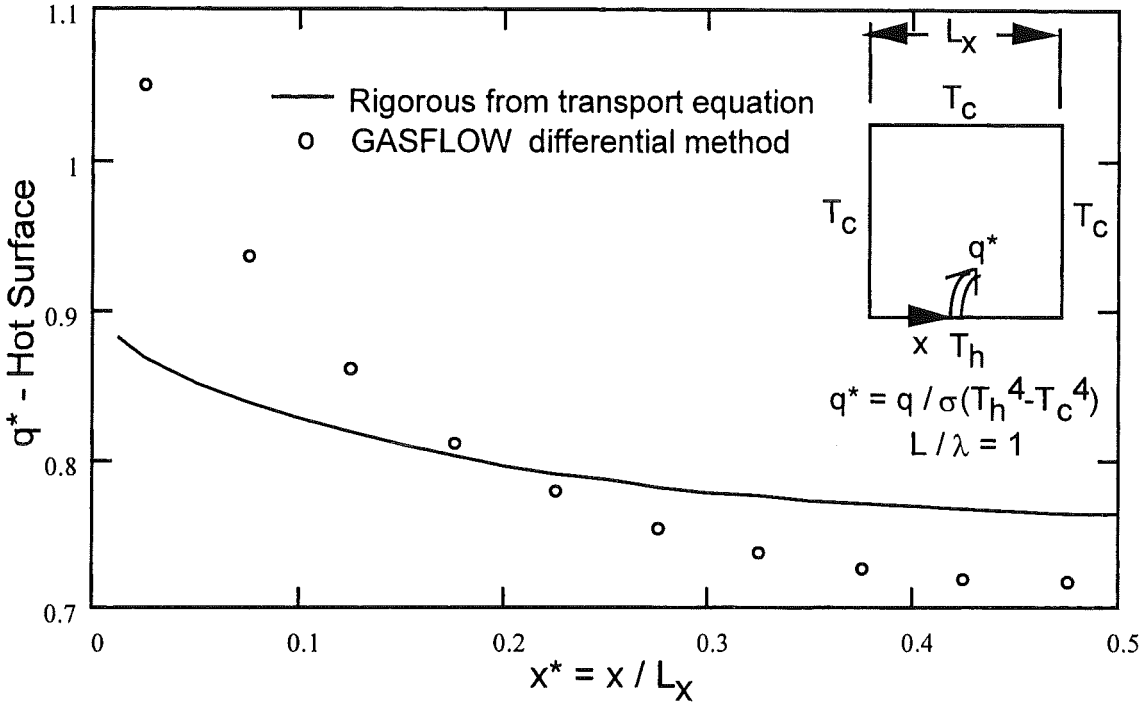


Figure 5. The rigorous solution of the hot surface normalized surface heat flux for the two-dimensional radiative heat transfer in an adsorbing-emitting medium ($\xi_L = L / \lambda = 1$) at uniform constant hot wall temperature, T_h = 2000 K, and uniform constant cold wall temperature, T_c = 0 K, is shown by the solid lines and the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

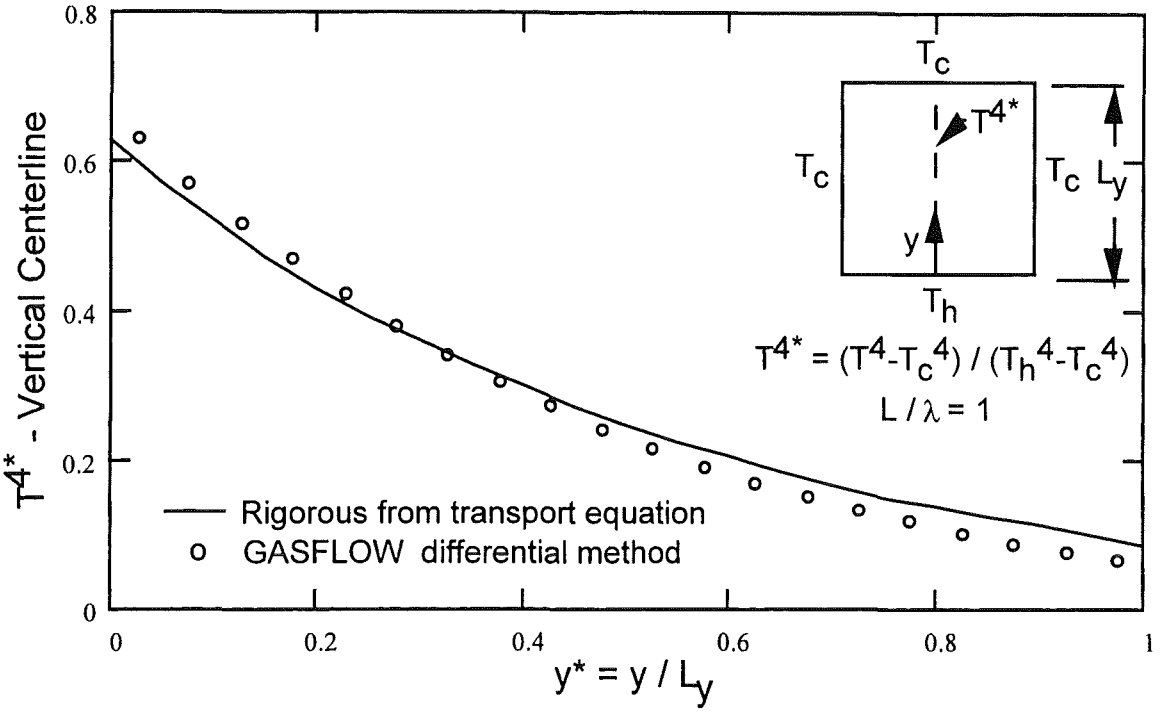


Figure 6. The rigorous solution of the nondimensional centerline medium centerline temperature distribution for the two-dimensional radiative heat transfer in an adsorbing-emitting medium ($\xi_L = L / \lambda = 1$) at uniform constant hot wall temperature, T_h = 2000 K, and uniform constant cold wall temperature, T_c = 0 K, is shown by the solid lines and the GASFLOW solution of the differential or moment Equation (16) method are the open circles.

IV-C. Three-Dimensional Radiant Heat Transfer in Spherically Shaped Enclosures

We will now apply GASFLOW to a more complex class of problems that involves three-dimensional radiative heat transfer in spherical enclosures with isothermal, diffusely reflection, gray walls. The enclosed medium is also assumed to be gray. In these problems we develop a uniform Cartesian computational mesh including boundary cells that's 32^3 = 32,768 finite control volumes, each being a cube 2m on a side. Within this computational block, we define two concentric spheres as shown in Figure 7.

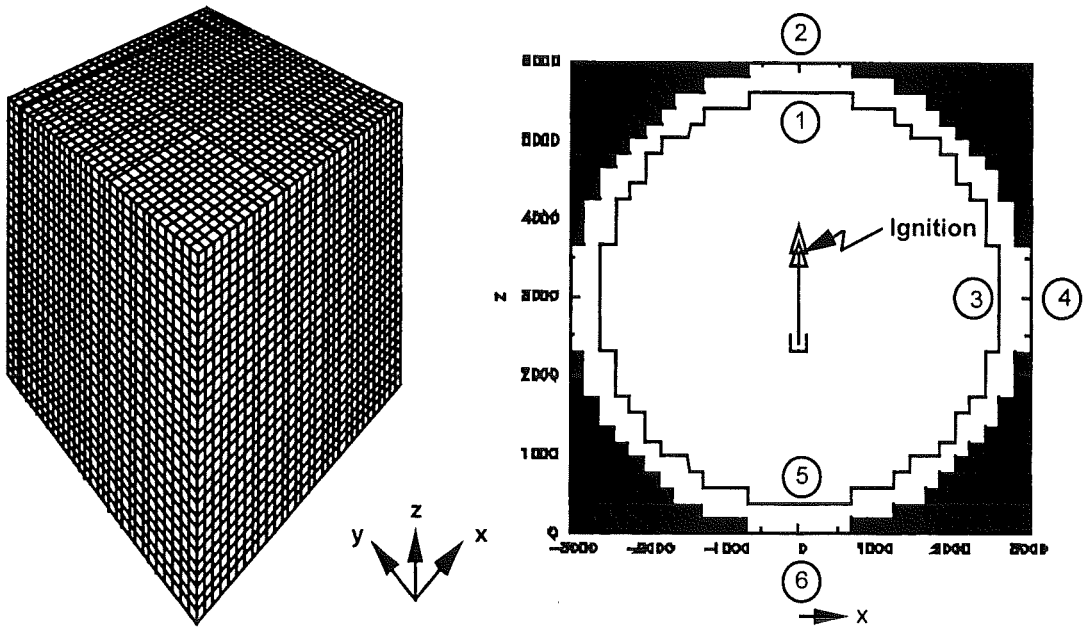


Figure 7. GASFLOW computational volume for the investigation of radiation heat transfer effects with (1) a super heated steam release and (2) a pure hydrogen release with ignition.

The inner sphere is defined as a steel sphere 3cm thick 52m in diameter while the outer sphere is concrete 60m in diameter. This configuration provides a 2m annular gap between the two spheres which is typical of modern German pressurized water reactors. Note that just below the equator of the inner sphere, at vertical location 24m, there is a single cell which we designate as a source cell. From this source cell, we examine two scenarios: (1) A super heated steam injection and (2) A pure hydrogen injection with ignition. Both sources are injected into air at 1 atmosphere and 300 K. We further investigate these two scenarios with simulations without and with activation of the GASFLOW radiation transport model.

Problem 1: Superheated Steam Source Scenario

The superheated steam release is calculated for 3600 s as entering the inner sphere volume with a pressure of 1 atmosphere and temperature of 1500 K with a velocity of 10 m/s, which means a mass flow rate of 5.48 kg/s.

In Figures 8-10, we see some of the GASFLOW results of two calculations: The first one is without using the radiation model and the second is with the radiation model.

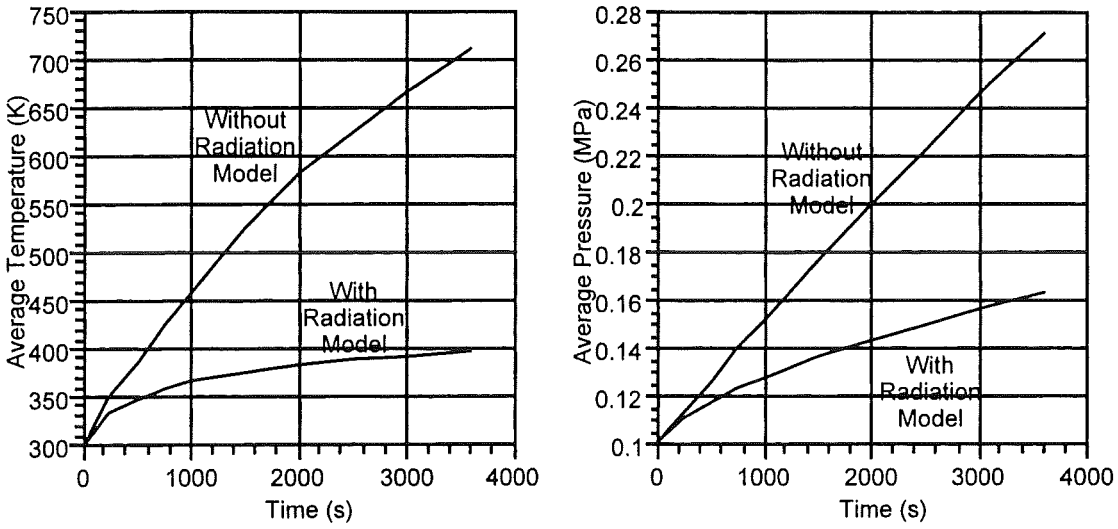


Figure 8. GASFLOW calculated average temperature and pressure as a function of time for the super heated steam injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

The trends are clear:

1. The average gas temperature and pressure are significantly higher (see Fig. 8) when the radiation model is not used. It can be reasoned that less energy is contained in the gas and therefore more energy is deposited into the available structures.

2. Figure 9 depicts the extent that the structures are thermally loaded when the radiation model is used. In fact the amount of energy stored in the concrete shell is 3 orders of magnitude larger when the radiation model is used than not used at the end of the simulation.

3. The surface temperature of the steel shell is much hotter as shown in Fig. 10 when the radiation model is used. We have plotted surface temperatures at the north pole (position 1) and equator (position 3) as shown in Fig. 7.

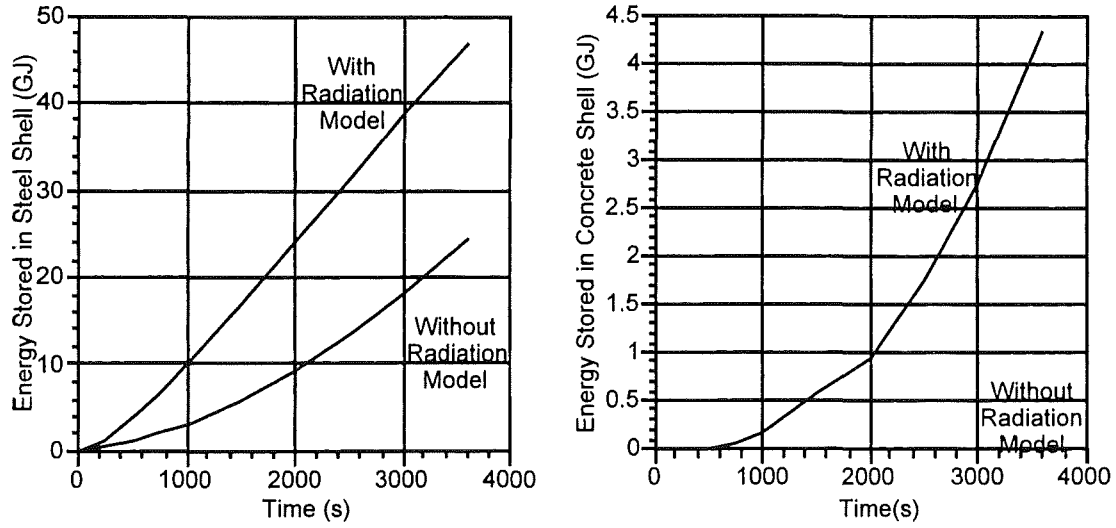


Figure 9. GASFLOW calculated energy stored as a function of time in the steel shell and concrete shell for the super heated steam injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

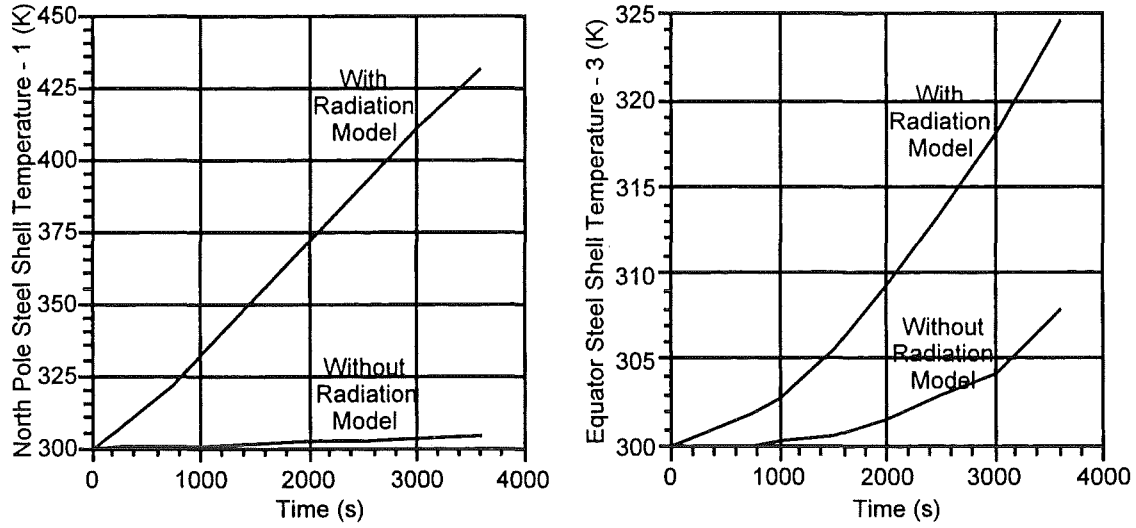


Figure 10. GASFLOW calculated inner steel shell temperatures as a function of time at the north pole and equator for the super heated steam injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

Problem 2: Pure Hydrogen Source Scenario

The pure hydrogen release is calculated for 500 s as entering the inner sphere volume with a pressure of 1 atmosphere and temperature of 500 K with a velocity of 5 m/s, which means a mass flow rate of 0.92 kg/s. A continuos ignitor is located above the injection source and the equator at the 36m level. A detached diffusion flame is initially established for both cases, however, for the case without the radiation model, the diffusion propagates downward and attaches to the source at about 160 s while for the case with the radiation model the attachment occurs at roughly 210 s. The flame temperature for the radiation case is considerable cooler than without radiation case, 2100 K and 2700 K, respectively. The cooler flame is expected for the radiation case and this effect delays the attachment of the diffusion flame to the source.

In Figures 11-13, we see some of the GASFLOW results of two calculations: The first one is without using the radiation model and the second is with the radiation model. The trends are clearly the same as in Problem 1 with the superheated steam release only more dramatic. For example, in Figure 12, the amount of energy stored in the concrete shell results is 6 orders of magnitude difference between the radiation and without radiation cases for this shorter problem time case.

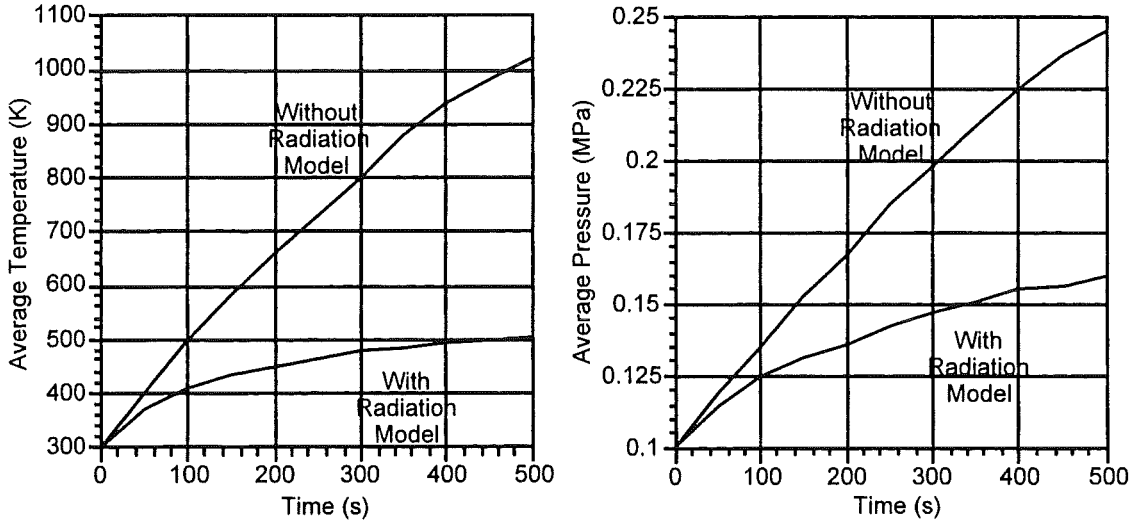


Figure 11. GASFLOW calculated average temperature and pressure for the pure hydrogen injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

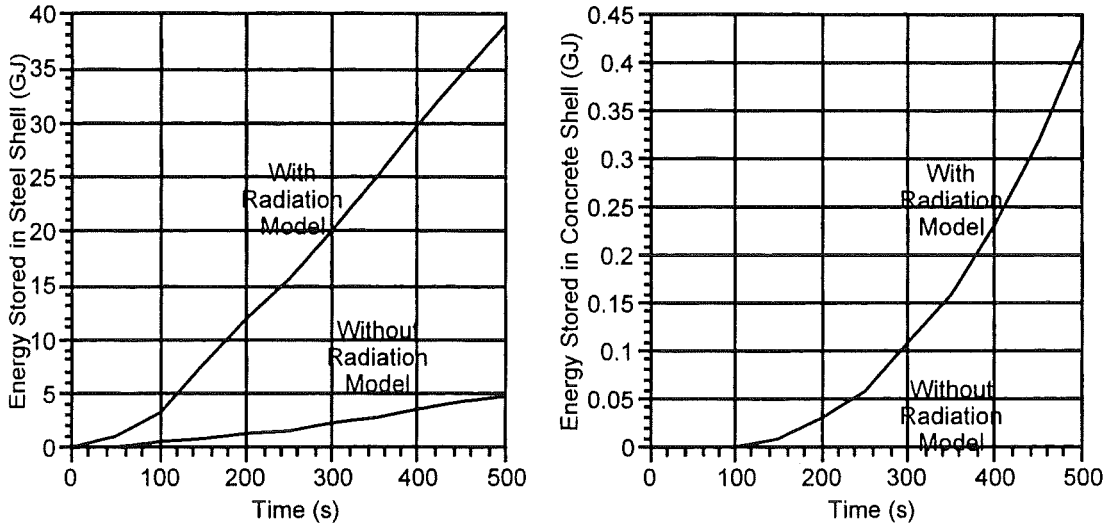


Figure 12. GASFLOW calculated energy stored as a function of time in the steel shell and concrete shell for the pure hydrogen injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

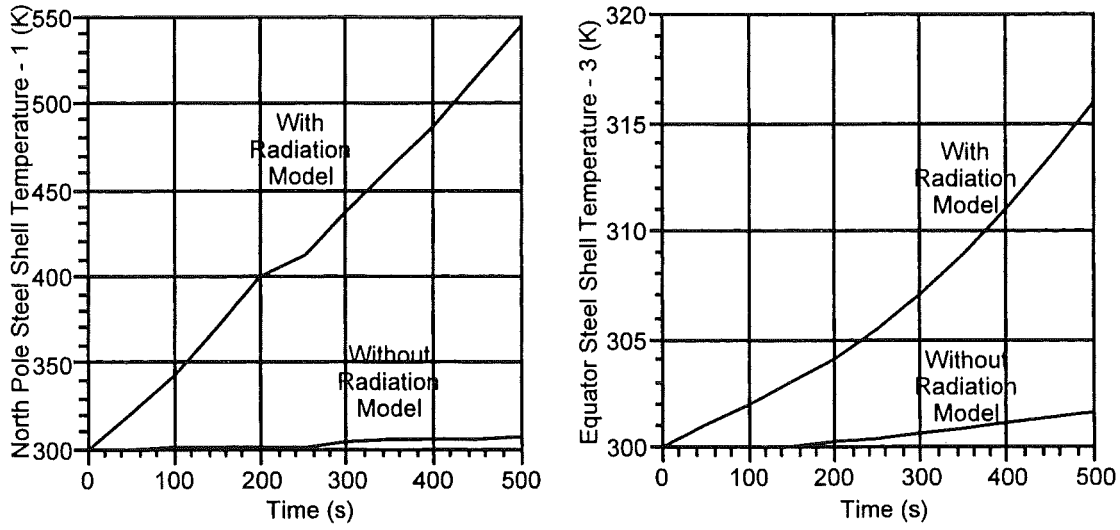


Figure 13. GASFLOW calculated inner steel shell temperatures as a function of time at the north pole and equator for the pure hydrogen injection problem comparing results with and without utilizing the thermal radiation heat transfer model.

V. CONCLUSIONS

We have developed a computationally efficient thermal radiation transport model for the GASFLOW code. The goal was to trade off some accuracy in the calculation of the radiation field, yet to be as accurate as other models in GASFLOW; for example, the convective heat transfer coefficients, in favor of a fast running model. To that extent, we have accomplished that goal as demonstrated with a number of test problems, yet only paying a penalty of less than 40% computer time when the radiation model is used.

It is expected that the radiation model would decrease containment pressures and temperatures by transferring more energy to the structures. This is in fact the case as the structures are thermally loaded from the containment hot gases.

REFERENCES

1. Travis, J.R., "GASFLOW: A Computational Fluid Dynamics Code for Gases, Aerosols, and Combustion," LANL report LA-13357-M and FZK report FZKA-5994, October 1998.
2. Vincenti, W.G. and Kruger, C.H., **Introduction to Physical Gas Dynamics**, Krieger Publishing, New York, 1975.
3. Eddington, A., **The Internal Constitution of the Stars**, Cambridge University Press, London, 1926.
4. Krook, M., "On the Solution of Equations of Transfer," Astrophys. J., **122**, 488-497 (1955).
5. Davison, B. **Neutron Transport Theory,** Oxford University Press, London, 1956.
6. Weinberg, A.M. and Wigner, E.P., **The Physical Theory of Neutron Chain Reactors**, University of Chicago press, Chicago, 1958.
7. Meghreblian, R.V. and Holmes, D. K., **Reactor Analysis**, Mcgraw-Hill, New York, 1960.
8. Chandrasekhar, S., **Radiative Transfer**, Dover Publications, New York, 1960.
9. Love, T.J., **Radiative Heat Transfer**, Merrill Publishing, Columbus, OH, 1968.

10. Özisik, M.N., **Radiative Transfer and Interaction with Conduction and Convection**, Wiley-Interscience Publishing, 1973.
11. Sparrow, E.M. and Cess, R.D., **Radiation Heat Transfer**, Hemisphere Publishing, Washington, 1978.
12. Siegel, R. and Howell, J.R., **Thermal Radiation Heat Transfer**, Hemisphere Publishing, Washington, 1992 .
13. Grad, H., "On the Kinetic Theory of Rarefied Gases," Comm. Pure Appl. Math **2**, 331-407 (1949)
14. Rosseland, S., **Theoretical Astrophysics**, Oxford University Press, London, 1936.
15. Lanzenberger, K., "Thermal radiation in Multiphase Flow," Siemens AG internal report, January 1998.
16. Bird, R.B., Stewart, W.E., and Lightfoot, E.N., **Transport Phenomena**, Wiley & Sons, New York, 1960.
17. Modest, M.F., **Radiative Heat Transfer**, McGraw-Hill, New York, 1993.
18. Cess, R.D. and Lian, M.S., "A Simple Parameterization for Water Vapor Emissivity," Trans. ASME Journal of Heat Transfer, **98**, No. 4, 676-678, (1976).
19. Heaslet, M.A. and Warming, R.F., "Radiative Transport and Wall Temperature Slip in an Absorbing Planar Medium,' Int. J. Heat & Mass Transfer, **8**, 979-994, (1965)
20. Deissler, D.G., "Diffusion Approximation for Thermal Radiation in Gases with Jump Boundary Condition," J. Heat Transfer, **86C**, 240-246, (1964).
21. Shah, N., "New Method of Computation of Radiation Heat Transfer in Combustion Chambers," Ph.D. dissertation, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science and Technology, University of London, 1979.
22. Fiveland, W.A., "Discrete-Ordinates Solutions of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures," J. Heat Transfer, **106**, 699-706, (1984).
23. Crosbie, A.L. and Schrenker, R.G., "Radiation Transfer in a Two-Dimensional Rectangular Medium Exposed to Diffuse Radiation," J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **31**, 339-372, (1984).

III. Wasserstoffverhalten und Gegenmaßnahmen

(P. Royl, IRS)

Zusammenfassung

Das Computerprogramm GASFLOW 2.1 wurde als integriertes Analysewerkzeug zur Beschreibung der Verteilung von Wasserdampf/Wasserstoffgemischen in LWR Containments bereitgestellt. Zusammenfassend für das Berichtsjahr wird hier über die weiteren Modellentwicklungen, Modellvalidierungen und Anwendungsrechnungen für auslegungsüberschreitende Unfälle in deutschen DWR Anlagen und im EPR berichtet.

1. Modellentwicklungen GASFLOW 2.1

Dynamisches Film Modell

Ein dynamisches Filmmodell wurde mit GASFLOW gekoppelt und anhand der Biblis Analysen getestet. Es beschreibt das Herabfließen des Kondensats aus GASFLOW auf der Innenseite einer Stahlkugelschale bis zur Ansammlung eines Sumpfes am Boden. Der Absetzvorgang wird in Kugelkoordinaten beschrieben. Das Modell interpoliert die Kondensation aus den an kartesischen Maschenpunkten in GASFLOW für die Kugelschale berechneten Kondensationsraten, berechnet den Enthalpie- und Massentransport des Kondensatfilms und macht anschließend eine Rücktransformation der Filmtemperatur und Strukturtemperatur in das kartesische Maschennetz von GASFLOW. Anwendungsrechnungen zeigen, daß der abfließende Film die Kondensatenthalpie auf der Stahlschale besser verteilt und unten erhöhte Wandtemperaturen beim Blowdown erzeugt, die die Kondensationsraten deutlich verringern und zu erhöhten Containmentdrücken führen. Mit abnehmender Dampfeinspeisung nach dem Blowdown trocknet die Stahlschale rasch durch den kontinuierlich abfließenden Film aus. Die Filmverdampfung bei abnehmenden Druck oder bei Einspeisung heißer Gase, die mit dem ursprünglichen statischen Filmmodell in GASFLOW beschrieben wird und die Stahlschale kontinuierlich weiter kühlt, findet dann nicht mehr statt. Der Dampfgehalt ebenso der Druck bleibt deshalb in der Endphase bei der Einspeisung von überhitztem Gas niedriger, was zu einem leichten Anstieg des Wasserstoffgehalts führt. Die

Unterschiede treten vor allem während des Blowdowns auf, sind aber in der Endphase bei der Einspeisung von überhitztem Dampf und Wasserstoff nicht sehr groß.

Überprüfung des Verdampfungs- und Kondensationsmodells in GASFLOW

Das Verdampfungs- und Kondensationsmodell in GASFLOW wurde anhand von Veröffentlichungen aus der Literatur überprüft. Das GASFLOW Modell basiert auf der Analogie zwischen Wärme- und Stoffübergang (Reynolds-Analogie) und bestimmt die Kondensations- und Verdampfungsraten abhängig von der Differenz zwischen Dampfdichte im benachbarten Fluidnode und der Sättigungsdampfdichte für die Temperatur der zugehörigen Strukturoberfläche. Das GASFLOW Modell erreicht mit vergleichbaren Parametern etwa die halben Kondensationsraten wie das sog. Soo Modell aus der Literatur, das auf der gleichen Analogie aufbaut. Beim sog. Collier Modell wird die Kondensationsrate aus der Differenz der Dampfpartialdrücke im Fluid Node und dem Sättigungsdruck für die Oberflächentemperatur bestimmt. Die Kondensationsraten des Soo Modells und die des Kondensationsmodells von GASFLOW sind gut vergleichbar. Viel wichtiger für die Kondensationsraten sind die lokalen Geschwindigkeiten in Wandnähe, die sich in der Feldcode Beschreibung von GASFLOW nicht genau genug aufschlüsseln lassen. Hier müssen bessere Wandfunktionen in den Code implementiert werden auch in Zusammenhang mit den Turbulenzmodellen.

Sigma Kriterium

Das GASFLOW Programm wurde für die Auswertung eines weiteren experimentell abgeleiteten Sensitivitätsparameters für das Verbrennungspotential von Wasserstoff-Dampf- Luftmischungen erweitert. Der sog. Sigma Wert ist das Verhältnis des spezifischen Gasvolumens vor und nach einer unterstellten vollständigen adiabaten Wasserstoffverbrennung bei konstantem Druck, das sich ausgehend von der Temperatur einer brennbaren Gasmischung mit der chemischen Energie einer Fluidzelle bzw. einer zusammenhängenden Wolke durch Änderung der Gaszusammensetzung bei der Verbrennung ergibt. Wasserstoff-Luft-Dampf Gemische expandieren immer trotz abnehmenden Molzahlen bei der adiabaten Verbrennung und haben einen Sigma Wert über eins. Der Sigma Wert einer Mischung wird mit einem temperaturabhängigen kritischen Sigma Wert (bei Raumtemperatur liegt er bei 3.75) verglichen, oberhalb dem

experimentell eine turbulente Flammenexpansion beobachtet wird. Der Sigma Index ist das Verhältnis von Sigma zum experimentell abgeleiteten kritischen Sigma. Neben der Kennzahl für das Detonationspotential einer bestimmten Wolke im Raum (D/7σ-Kriterium) ist der Sigma Index eine zweite experimentell begründete Kennzahl für die Sensitivität von Gasmischungen bei der Verbrennung. GASFLOW wurde erweitert und erlaubt jetzt eine raumweise Auswertung des Sigma Index zusammen mit dem Detonationsindex. Die Indizes können in bestimmten physikalischen Räumen oder innerhalb des ganzen Rechengebiets für verschiedene Wasserstoffwolken ausgewertet werden, innerhalb denen die Wasserstoffkonzentration oberhalb eines vorgegebenen Grenzwerts liegt. Sie werden zur Beurteilung des Verbrennungspotentials einer Mischung zusätzlich zu den seit langem verwendeten Zündgrenzen aus dem Shapiro Diagramm herangezogen. Auf ihrer Grundlage sollen energetische Verbrennungslasten auch bei zündfähigen Gemischen ohne detaillierte Verbrennungsanalysen allein auf Grundlage der Verteilungsanalysen in GASFLOW ausgeschlossen werden. Die Kriterien werden aber auch durch Vergleich mit detaillierten Verbrennungsrechnungen exemplarisch für den Anwendungsfall abgesichert.

Strahlungstransport

Ein Modell zum Strahlungstransport wurde in GASFLOW 2 implementiert. Zusammen mit dem konvektiven Wärmetransport simuliert dieses Modell einen Photonentransport, für den eine eigene Transportgleichung zusätzlich gelöst wird in ähnlicher Weise wie beim Neutronentransport mit Quellen und Senken aber ohne Streuterm. Das Modell kommt ohne View Faktoren aus, die in einem zuvor schon implementierten einfacheren Modell zum Strahlungstransport zwischen Strukturen noch verwendet wurden. Der Vektor des Photonenflusses in Richtung der Koordinatenachse an einem Aufpunkt **r** (der sog. Strahlungswärmefluß) wird aus einem Integral der raumwinkelabhängigen Photonendichte (Strahlungsintensität) und dem Produkt mit dem Richtungscosinus zur Koordinatenachse für jede der drei Koordinatenachsen gebildet. Die winkelabhängige Strahlungsintensität wird dabei durch ihre drei ersten Momente angenähert, die winkelintegrierte sog. totale Strahlungsintensität, den Strahlungswärmefluß und den Tensor des Strahlungsdrucks, und in einer P1 Näherung berechnet. Daraus ergeben sich drei Differentialgleichungen in jedem Node zur Bestimmung des Strahlungswärmeflusses für die 6 Oberflächen jeder Zelle. In jeder Zelle sind jeweils nur 3 Flüsse zu bestimmen,

die fehlenden 3 sind identisch mit denen der benachbarten Zellen und werden von diesen übernommen. Die Bestimmung des Strahlungswärmeflusses berücksichtigt die Absorption und die Emission in jeder Zelle, die Reflektion wird vernachlässigt. Der Strahlungswärmefluß in die Struktur ergibt sich aus einer Bilanz des Strahlungswärmeflusses auf der Wandseite der Zelle unter der Annahme, daß die Struktur als grauer Körper entsprechend ihrer Temperatur abstrahlt. Er wird ohne Viewfaktoren aus der Strahlungsintensität in der Fluidzelle und den Strahlungswärmeflüssen der benachbarten Zelle bilanziert und zusammen mit dem konvektiven Wärmeübergang in der Energiebilanz für die Struktur berücksichtigt.

Mit dem Strahlungstransportmodell von GASFLOW wurden verschiedene analytische Testprobleme nachgerechnet. Qualitativ ergab sich dabei eine akzeptable Übereinstimmung (mit Fehlern von ca. 20%). Die allgemeine Berücksichtigung des Strahlungstransports zusammen mit der 3D Fluidmechanik in komplexen Containmentgeometrien erhöht den Rechenaufwand in GASFLOW nur um ca. 25% auch in komplexen Geometrien. Sie erweitert trotz der damit zusammenhängenden Vereinfachungen den Anwendungsbereich von GASFLOW und wird zur Zeit noch weiter verbessert.

2. GASFLOW Validierungsrechnungen für Phebus FPT0 und Phebus Thermohydraulik Tests

Mit dem verbesserten Kondensationsmodell wurden das Phebus Experiment FPT0 und die Phebus Thermohydraulik Tests neu gerechnet. Dabei wurde erneut die Lücken bei der Simulation der Turbulenz in GASFLOW deutlich, auf die schon früher hingewiesen wurden. Die Nachrechnung mit einem verbesserten k-Epsilon Modell führte wieder zu extrem kleinen Zeitschritten trotz Verwendung neuer Wandfunktionen in GASFLOW. Die Anwendung des k-Omega Turbulenzmodells, das in Los Alamos entwickelt wurde, brachte ebenfalls keine Verbesserung. Neu bei den Analysen mit Turbulenz war aber ein wesentlich verändertes Strömungsbild. Der Strahl aus der zentral gelegenen Quelle steigt nicht mehr wie bei Simulation von laminarer Strömung zwischen den Kondensatoren bis zum Tankdeckel hoch und fließt dann entlang der Kondensatoren wieder nach unten. Mit der GASFLOW Modellierung der Turbulenz wird der Quellstrahl vor Eintritt in den Kernbereich zwischen den Kondensatoren umgelenkt, im unteren Bereich des Tanks entsteht eine Konvektionsschleife, eine weitere Schleife bildet sich außen,

die das Quellgas nach oben bringt, das dann entlang der Kondensatoren bei der Dampfkondensation wieder absinkt. Erstaunlich, aber mit dem Strömungsbild konsistent war, daß sich dabei die Kondensation mit Erhöhung des Turbulenzgrads verringerte und höhere Drücke berechnet wurden. Diese Tendenz steht im Widerspruch zu den Testdaten. Das GASFLOW Turbulenzmodell wird daher jetzt noch einmal auch im Hinblick auf die Wandfunktionen gründlich überarbeitet.

3. GASFLOW Anwendung

Dokumentation der GASFLOW Analysen zum Surge Line LOCA in Biblis A

Die GASFLOW Analysen zum Surge Line Loca in Biblis A wurden in einem ausführlichen Bericht dokumentiert und mit Analysen für eine Konvoi Anlage verglichen, bei denen der gleiche Quellterm verwendet wurde. Im offeneren Biblis A Containment ergibt sich ein höherer Dampfanteil und Druck als in der Konvoi Anlage. Die Atmosphäre wird im Unterschied zur Konvoi Anlage voll inertisiert. Die für Biblis analysierten NIS Rekombinatoren starten etwas langsamer wegen ihrer höheren Wärmekapazität, erreichen am Ende aber vergleichbare Abbauraten wie die Siemens-Rekombinatoren. Der Quellstrahl dringt auch bei den GASFLOW Analysen für Biblis bis tief in den Dombereich ein und kann auch mit den detaillierten RALOC und Wavco Lumped Parameter Analysen nicht abgebildet werden. Die Vermischungsmechanismen in GASFLOW und die berechnete Sekundärströmung bei der Dampfkondensation, die den temporär stratifizierten Wasserstoff vom Dom nach unten bringt, sind in den Ergebnissen der LP Modelle nicht erkennbar. Für das vorgegebene Anordnungskonzept der Rekombinatoren in Biblis A berechnet GASFLOW an einigen Stellen thermische Belastungen der Containmentstrukturen mit Abgasen der Rekombinatoren, die auch in der Anlage zu einigen Veränderungen im Anordnungskonzept der Rekombinatoren geführt haben. Insgesamt weisen die GASFLOW Analysen auch für Biblis nach, daß der Einbau der Rekombinatoren eine sicherheitsgerichtete Maßnahme ist, die bei dem untersuchten Szenario das entstehen zündfähiger Gemische verhindert.

Analyse LOCA mit kleinem Leck in GKN-2

Entsprechend einer Empfehlung der RSK vom Dezember 1998 wurde komplementär zum großen Bruch in der Druckausgleichsleitung (Surge Line Unfall) auch ein Szenario mit kleinem Leck für die Konvoi Anlage GKN-2 mit GASFLOW analysiert. Die Quelle für diese Untersuchungen wurde von der GRS mit Melcor berechnet und in GASFLOW und bei der Parallelrechnung mit dem Lumped Parameter Programm RALOC konsistent verwendet. Die ursprünglichen Befürchtungen, daß es beim kleinen Leck zum Verlust einer ausreichenden Dampfinertisierung durch die vergleichsweise langsame Dampfeinspeisung kommen würde, hat sich nicht bestätigt. Die Analysen zeigen, daß es in den Anlagenräumen während der langsamen Wasserstoff/Dampf Einspeisung zu länger anstehenden zündfähigen Gemischen kommt, daß sensitive Gemische mit Potenzial zur Flammenbeschleunigung durch den Restdampfgehalt dank der eingebauten Rekombinatoren aber zuverlässig ausgeschlossen werden können. Erstmals wurde bei diesen Analysen auch der eingangs erwähnte Sigma Parameter zur Flammenbeschleunigung raumweise ausgewertet und zum Nachweis herangezogen. Untersucht wurde die In-Vessel Phase von einem Szenario mit sekundärseitigem Abfahren der Dampferzeuger und dadurch zusätzlich verringerter Dampfeinspeisung. Die betrachtete Problemzeit war mit 30000s länger als alle zuvor mit GASFLOW analysierten Szenarien. Die Konvektion zwischen den Anlagen- und Betriebsräumen ist beim kleinen Leck stärker behindert, da nur wenige Berstfolien in den Dampferzeugertürmen aufgehen. Wahrscheinlicher ist jedoch eine frühzeitige Zündung in den Anlagenräumen, die zwar kaum Belastungspotential hat, aber die intakten Berstfolien und damit die Konvektionspfade zwischen Anlagen- und Betriebsräumen weitgehend öffnen wird. Bei den GASFLOW Analysen ebenso wie bei den parallelen RALOC Simulationen bringt die Konvektion genügend Luft über die quellfernen Dampferzeugertürme in die Anlagenräume (s. Abb. 1). Die Dampfeinspeisung in der Blowdown Phase führt daher in beiden Programmen nicht zu einer Dampfinertisierung der Anlagenräume, die in einer älteren Wavco Analyse für eine ähnliche Anlage auftraten.

GASFLOW 2 Simulationen für den EPR in Zusammenarbeit mit Siemens

Zusammen mit unseren Siemens Partnern wurden sechs Szenarien der Dampf/ Wasserstofffreisetzung für den EPR Analysiert. Das zugrundeliegende GASFLOW

Geometriemodell für den EPR wurde für Zylinderkoordinaten mit 139.000 Zellen von Siemens entwickelt. Die Quellterme wurden von Siemens nach Vorgaben der Framatome auf der Grundlage von Maap4 Analysen definiert. Die folgenden Szenarien wurden mit GASLFOW analysiert.

Zwei Szenarien mit Druckentlastung und trockener Wasserstofffreisetzung an vier Positionen durch den IRWST

1. Loss of Off Site Power mit Reflood (LOOP/R) und Druckentlastung durch den IRWST und 4 aktiven Zündern an den IRWST Ausgängen (Problemzeit 2000s)

2. Small Break Loca (SBLOCA/R 46 cm**2 Leck) mit Reflood und Druckentlastung durch den IRWST (mixed Release), aktiven Zündern an den IRWST Ausgängen und 47 über das Containment verteilten Siemens Rekombinatoren (27000 sec)

Ein Szenario mit einer Einspeiseposition durch das Leck im Pumpenraum und wenig Dampf ohne Druckentlastung

3. Small Break Loca (SBLOCA 20 cm**2 Leck) mit Rekombinatoren und mit schnellem sekundärseitigem Abfahren der Dampferzeuger ohne Einspeisung aus dem Druckhalter (6000 s mit Anfangsbedingungen aus WAVCO)

Drei Szenarien mit direkter Dampf/Wasserstoff Freisetzung bei der Druckentlastung in zwei gegenüberliegende Pumpenräume

4. Loss of off site power mit/ohne Reflood (LOOP und LOOP/R 7000s)

5. Small Break Loca (SBLOCA/D, 20 cm**2 Leck) mit verzögerter Druckentlastung nach der Wassereinspeisung aus den Druckhaltern (8500 s).

Bei der Freisetzung von weitgehend trockenem Wasserstoff aus dem IRWST werden die aktiven Zünder an den IRWST Ausgängen wirksam (Szenario 1 und 2). Die Verbrennung wurde sowohl mit GASFLOW wie mit einem detaillierteren Verbrennungs-

modell in einer feineren Nodalisierung mit Com3D Code untersucht und bleibt mit ihren Verbrennungslasten innerhalb der Auslegungsgrenzen.

Für die letzten vier Szenarien wurde das Sigma Kriterium für verschiedene Grenzkonzentrationen von Wasserstoffwolken raumweise ausgewertet. Dabei zeigte sich, daß die z.T. hohen Raten der Wasserstofffreisetzung bei alle Szenarien mit direkter Dampf/Wasserstoff Freisetzung in die Pumpenräume durch die dabei gleichzeitig auftretenden hohen Dampfanteile kein nennenswertes Verbrennungspotential haben.

Die Wasserstoffwolken wurden dynamisch für verschiedene Grenzkonzentrationen (4%, 8% und 16% H_2) ausgewertet. Daraus ergaben sich einige allgemeine Aussagen. Wie bei den früheren GASFLOW Analysen für Biblis und Konvoi kommt es während der H2 Freisetzung zur Ausbildung von Quellstrahlen, die sich bis oben in den Containment Dom hinein erstrecken. Vermischungen durch Wirbelbildung verteilen den Wasserstoff aus dem Quellstrahl rasch und lassen ihn zu einer stratifizierten Wolke im Dombereich beitragen. Durch Dampfkondensation kommt es zu einer Sekundärströmung, die den temporär stratifizierten Wasserstoff verteilt und in die unteren Containmentbereiche bringt. Die Prozesse sind im Betoncontainment und im Stahlcontainment sehr ähnlich. Aus dem Vergleich mit den Biblis und GKN Analysen ergeben sich zumindest bei den Unfällen mit großen Lecks keine prinzipiellen Unterschiede auch nicht bei den Zeitskalen. Nur bei den kleinen Lecks verhindern die weitgehend versperrten Berstscheiben in GKN-2 die direkte Strahlausbreitung in den Dom. Die H_2 Einspeiserate bestimmt die Strahlgröße und das Volumen der zündfähigen Wasserstoffwolke. Nur bei Einspeisung von trockenem Wasserstoff würde es zu einer sich kontinuierlich vergrößernden Wasserstoffwolke kommen. Bei niedrigen H_2-Einspeiseraten wirkt die atmosphärische Vermischung durch die Dampfkondensation schon frühzeitig und begrenzt die Größe der zündfähigen Wasserstoffwolke.

Für das Szenario 3 wird jetzt auch das neue Strahlungstransportmodell erstmals testweise eingesetzt und eine längere Sequenz aus Wasserstoff/Dampf-Freisetzung mit früher lokaler Zündung im Dom simuliert. Im Mittelpunkt des Interesses steht dabei die mögliche Strukturerwärmung und Flammenkühlung durch den Strahlungstranport, der bisher nicht berücksichtigt werden konnte.

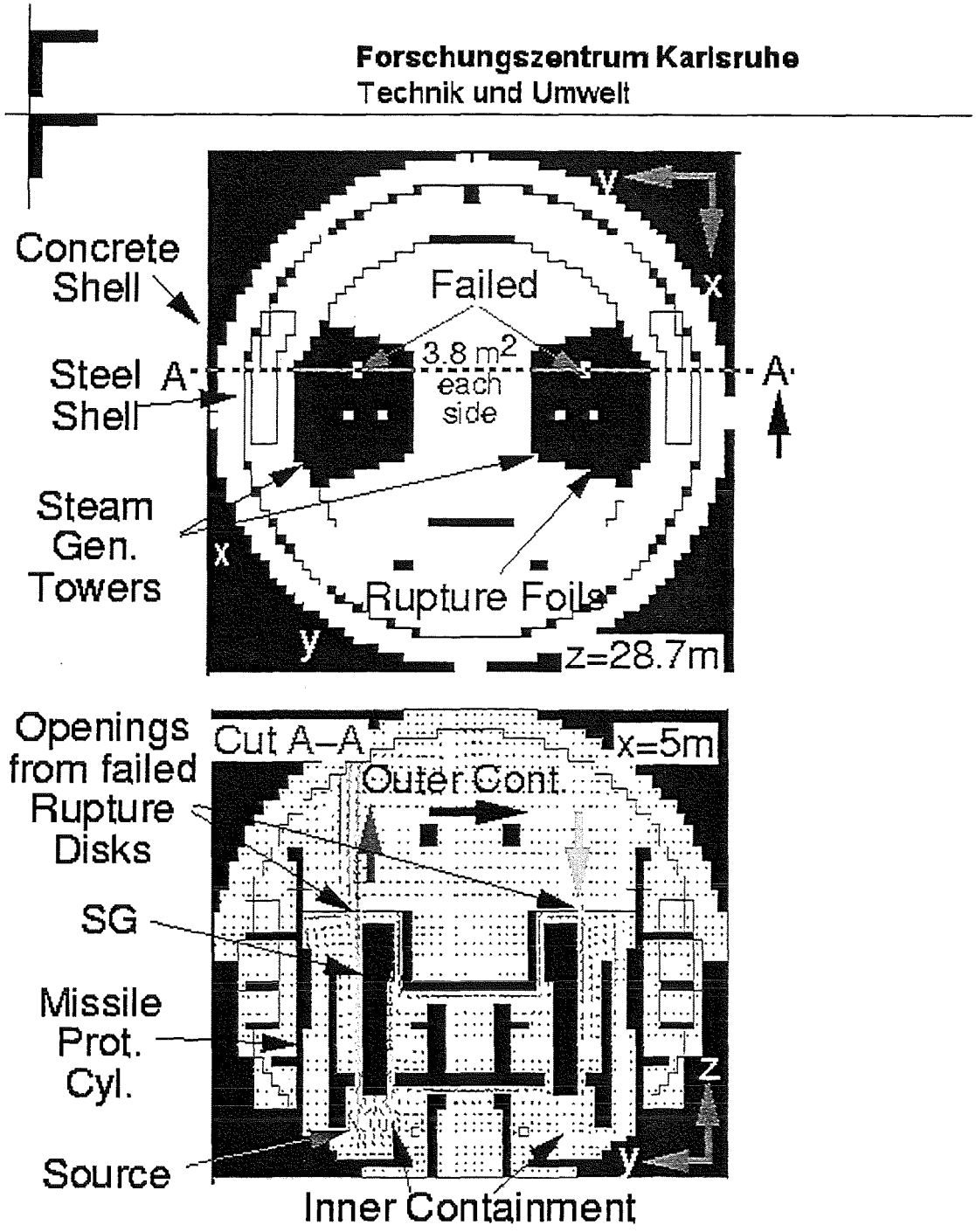


Abb. 1 Analyse LOCA GKN-2

IV. Measured Turbulence Data Compared to FLUTAN Calculations

(W. Baumann, IKET)

Abstract

For future efforts to validate the GASFLOW turbulence model, a series of experimental data from literature have been made available. The data include velocity profiles and turbulence intensities measured in a channel of parallel plates and in a circular pipe, both with air flowing at high Reynolds numbers under fully developed conditions. In a first step, the measured velocity distributions were analyzed using the FLUTAN code, and, based on measured wall friction velocities, compared to the universal velocity profile. The measured turbulence intensities, simply transformed into turbulent kinetic energy, were plotted against k-values resulting from FLUTAN calculations. As a conclusion, the study suggests that FLUTAN with its currently implemented k-ε-σ_t turbulence model has the capability of predicting analytical data which are close to the experiment.

Zusammenfassung

Für künftige Arbeiten zur Validierung des in GASFLOW implementierten Turbulenzmodells wurde eine Reihe experimenteller Daten verfügbar gemacht. Sie enthalten Geschwindigkeitsprofile und Turbulenzintensitäten, die bei voll ausgebildeter Luftströmung und hohen Reynoldszahlen in einem Plattenkanal und einem Kreisrohr gemessen worden waren. In einer ersten Stufe wurden die gemessenen Geschwindigkeitsverteilungen mit dem FLUTAN-Code analysiert und, basierend auf gemessenen Wandschubspannungsgeschwindigkeiten, mit dem universellen Geschwindigkeitsprofil verglichen. Die Turbulenz-Intensitäten wurden in turbulente kinetische Energie umgerechnet und den von FLUTAN berechneten k-Werten gegenübergestellt. Wie die Studie zeigt, liefert das in FLUTAN implementierte k-ε-σ_t Turbulenzmodell Ergebnisse, die vom Experiment nur geringfügig abweichen.

1. Introduction

In order to establish a data bank suitable for future work on validating the turbulence model of the GASFLOW code at high Reynolds numbers, experimental data by Comte-Bellot [1] and Laufer [2] have been evaluated and compared to results of FLUTAN calculations [3]. Both authors performed extensive measurements with air flow, Comte-Bellot using a channel of parallel plates, Laufer using a circular pipe. They both recorded velocity distributions and turbulence intensities for all 3 coordinates, covering the Reynolds numbers in the entire range from 41000 to 920000. This article gives only a brief report on the work performed. A complete and detailed set of the results has recently been published [4].

2. Experiments

2.1 Tests by Comte-Bellot

The plate channel has a rectangular cross-section of 0.18 m x 2.4 m and a total length of 12 m [1]. With the aspect ratio of the channel exceeding a value > 13, the center flow can be regarded 2-dimensional in a statistical sense. Atmospheric air serving as working fluid is purified by several dust filters installed at the inlet and then passed through a honeycomb in order to make the velocity profile uniform (Fig.1). As the circuit is open, the blower has not much impact on the flow temperature.

The investigations include measurements of mean velocities, turbulence intensities, Reynolds stresses, and energy spectra in various flow cross-sections of the channel. Relevant measurements had been taken at $x_1/D = 118$ which corresponds to a distance of 12 m from the inlet. In this position, according to the presented results, the flow can be considered fully developed. Three test series are contained. Their Reynolds numbers based on the hydraulic diameter definition are 228000, 480000, and 920000.

2.2 Tests by Laufer

The test rig is a circular duct [2], having a radius of 0,1234m and a total length of 12.50m. In order to minimize flow irregularities, the entering air flow was passed through several screens and a honeycomb, followed by an artificially roughened duct element (sand-roughness) to accelerate boundary layer growth (Fig.4). Comparing mean-velocity distributions measured at various axial positions, Laufer had found that, after an entrance length of 30 diameters (7.50m), the flow was fully developed turbulent.

Laufer's measurements cover widely the same parameters as investigated by Comte-Bellot, which are mean and statistical quantities, Reynolds stresses, energy spectra etc. His principal measurements were taken close to the duct exit, a position exceeding his value of entrance length by another 5m. Based on the commonly employed bulk flow velocity, the Reynolds numbers amount to 41000 and 435000 (Laufer used the maximum flow velocity instead).

3. Measurement Evaluation

As Comte-Bellot and Laufer published their data only in graphical form, all the data points were carefully read from the diagrams and plotted in the same scale for comparison. When the accuracy was checked, it turned out that the figures did virtually not differ from the originals. In order to represent the velocity profiles as $U^+(y^+)$ functions, the procedure was as follows: In case of the plate channel, the wall friction velocities u* and the kinematic viscosity of the air flow $\nu = 0.153\ m^2/s$ given by Comte-Bellot were employed. As Laufer did not specify any u* or ν data, the wall friction velocities were evaluated from his measured axial pressure drop distributions, while Comte-Bellot's kinematic viscosity was used again.

The turbulent kinetic energy k depending on the distance x_2 from the plate surface and on the pipe radius y, resp., was calculated from the velocity fluctuations U', V', and W' according to:

$$k = \frac{1}{2}(\overline{U'^2} + \overline{V'^2} + \overline{W'^2}) \qquad (1)$$

and assuming that the fluctuations in x-, y-, and z-direction refer to the same coordinate positions. As this, however, is not really true, neither for the plate channel nor for the circular duct, the fluctuation data had to be interpolated in both cases. In order to achieve an adequate representation of the k-distribution, 10 values of U', V', and W' were determined at equally-spaced coordinate positions perpendicular to the wall, and inputted into eq. (1).

4. FLUTAN Calculations

4.1 Cartesian Coordinates (Comte-Bellot)

The plate channel was modelled in half symmetry and 2 dimensions, as its narrow side could be ignored due to the large aspect ratio being 2.4m / 0.18m. Cartesian coordinates were used, having 120 equidistant meshes in axial direction and 25 expanding meshes perpendicular to the plate wall. The smallest mesh near the wall had a width of 0.8 mm in case of the two lower flow Reynolds numbers, and a width of 0.4 mm for the highest Reynolds number. These values of mesh width were chosen to have the near-wall cell centers fixed in the transition layer at roughly $y^+ \geq 20$. Boundary conditions were "no-slip" at the channel wall, and "free-slip" on the opposite side, effective as symmetry plane. At the inlet, a uniform velocity profile at environmental temperature was prescribed. The outlet was provided with a pressure boundary condition which could be applied because gravity, not playing any role in the horizontally arranged channel, was not taken into account.

To model flow turbulence, the standard-k-ε-model was used, with the hydraulic diameter being D_h = 0.36m for infinitely extended parallel plates. The inlet profile of k was specified by

$$K_{in} = TKIN \cdot U_m^2 \qquad (2)$$

Here, U_m is the inlet velocity, and TKIN was set to the default of 0.001.

The dissipation rate of the turbulent kinetic energy at the inlet was calculated according to

$$TDIN = c_\mu / (0.04\ D_h) \qquad (3)$$

With the standard value c_μ = 0.09, TDIN = 6.25 is obtained.

4.2 Cylinder Coordinates (Laufer)

The circular tube with its 12m length was modeled using 120 equidistant meshes in axial and 25 expanding meshes in radial direction. The smallest cell width at the tube wall was 2.5 mm in case of Re = 41000, and 0.3 mm for Re = 435000. The values were chosen to have the respective cell centers fixed in the transition layer at $y^+ \geq 20$.

The boundary conditions were "no-slip" at the wall, "free-slip" at the tube center line, a uniform velocity profile with environmental temperature at the inlet, and a pressure boundary condition at the outlet plane. Flow turbulence was considered using the

standard-k-ε-model, with the hydraulic diameter being D_h = 0.2469m. The inlet profiles of k and its dissipation rate were determined by eq. (2) and (3), resp.

4.3 Convergence

The calculations were carried out on the high-performance vector computer VPP300 under the conditions of 20°C isothermal temperature and an environmental pressure of 0.1 MPa. To solve the equations, the vectorized GAUSS routines were empoyed. Setting the timestep size to 0.01 s, the velocities were converged to 10^{-7}, dependent on the Reynolds number, after 1250 to 1600 timesteps in case of the plate channel, and after 1700 to 1750 timesteps in case of the circular duct. The CPU running time in all cases was below 2.5 min.

5. Results and Discussion

From the results obtained with FLUTAN, 3 quantities can be used to compare with the experimental data. These quantities are the velocity profile and the distribution of the turbulent kinetic energy transverse to the flow direction. Comparison is performed at the axial position x_1/D = 118 of the plate channel and at the outlet of the circular duct. The 3rd comparative quantity is the wall shear stress, evaluated from calculated pressure loss.

5.1 Velocity Profiles

From the calculated velocity profiles, here only one representative example for each coordinate system is compared to measurements, first linearly (Fig.2a, Fig.5a), then in a logarithmic scale (Fig.2b, Fig.5b). The linear plotted profiles are normalized by their maximum value which had been determined in the respective experiment. All points marked white originate from measurements taken all over the cross-section; all points marked black were taken in a near-wall area only, e.g. in a distance of 0.27cm from the plate channel surface, and in a distance of 0.5 cm from the circular duct wall. Both overall and near-wall measured data show a continuous course with a smooth transition, suggesting that no significant errors had affected the measurements. The profiles calculated with FLUTAN show only slight deviations from the experimental data. Close to the wall, they fall below, further away they exceed the measurements. The differences amount to not more than about 5%.

The plots in logarithmic scale (Figs.2b, 5b) are suitable to compare calculated and measured data with the so-called universal velocity profile [5]

$$U^+ = 2.5 \ln y^+ + 5.5 \qquad (4)$$

where $U^+ = U/u^*$, and $y^+ = u^* y/\nu$. Moreover, these figures give a better resolution of the data in the near-wall area. The values of the wall-friction velocity u^* to normalize Comte-Bellot's data were taken from his report [1]. As no corresponding values were published by Laufer, the wall friction velocities had to be calculated from given axial pressure distributions.

The logarithmic representation clearly shows the parabolic velocity profile of the viscous sublayer, extending from the wall up to the position $y^+ = 5$. Next to the viscous sublayer comes the transition layer within the limits of $5 < y^+ \leq 30$, followed by the inner flow region for $y^+ > 30$. As can be seen, the velocities recorded in the near-wall area (marked black) extend rather far into the inner flow region. There, all curves behave widely linear and fall close together, however, have slightly different slopes.

All profiles from FLUTAN calculations show a small sharp bend near the wall, which, with increasing flow velocity, is shiftet to higher y^+-values in the range of $30 \leq y^+ \leq 100$ (Figs.2b, 5b). This is caused by the fact that near the wall, i.e. in the viscous sublayer and in the transition region, the transport equations of k and ε are no more valid, and these parameters have to be determined by means of the law of the wall. As there are only 3 meshes existing in the region $y^+ < 200$, and the calculation is switched at about $y^+ = 40$ from momentum transport to the so-called wall functions, an effect of discontinuity emerges.

5.2 Turbulent Kinetic Energy k

Flow turbulence usually is caused by shear stresses imposed on the flow particles, e.g. by a solid wall or by superimposing a jet stream. Therefore, the kinetic energy of the turbulence is primarily not a function of the flow velocity, but of its gradient, which makes the turbulent kinetic energy k a more sensitive parameter than the flow velocity.

Comparing the k values from FLUTAN results with the experimental data from the plate channel or the circular duct, a rather good agreement in all velocity regimes is found (Figs. 3a-c, 6a,b). The measurements from the plate channel show a nearly linear decrease versus the channel symmetry plane, however gradually switching there to a flatter gradient. The FLUTAN results are curved in the same sense, but stay a little bit beneath almost over the entire coordinate length. Except for the channel center with the lowest k values, the deviations amount to about 10% (Figs. 3a,b). An exceptional good coincidence between experiment and calculation takes place at the highest Reynolds number (Fig. 3c). The deviations, except for the mid-channel, are really negligible.

The circular duct, for both the experiment and the FLUTAN calculation, shows a distribution of k which decreases versus the center line, however curved like a hanging rope (Figs. 6a,b). Next to the wall, FLUTAN results and measured data coincide widely, however differ to some extent in the mid-flow region where the FLUTAN data exceed the measurements by an average of about 20%.

5.3 Wall Friction Velocity u_F^* from FLUTAN Calculations

Besides the distributions of flow velocity and turbulent kinetic energy, FLUTAN also calculates the axial pressure loss ΔP between inlet and outlet of the test section. From this pressure loss, the friction coefficient λ and the wall friction velocity u_F^* can be determined. The pressure losses evaluated here were taken from the last third of the test section, corresponding to about 4.0 m of length. The air density was set to 1.189 kg/m^3, according to flow properties of 20°C and 0.1 Mpa.

The results of this evaluation are summarized in the following tables. They show that the values from FLUTAN calculations in general fall above the experimental data. The surplus amount attains between 12 and 21% in case of the plate channel (Comte-Bellot, u_{CB}^*), and between 5 and 8% in case of the circular duct (Laufer, u_L^*).

Re	ΔP (Pa)	U_m (m/s)	λ	u_F^* (m/s)	u_{CB}^* (m/s)
228 000	10.56	9.69	0.01700	0.4467	0.39
480 000	42.43	20.4	0.01544	0.896	0.80
920 000	144.15	39.1	0.01427	1.651	1.36

Wall friction velocities u_F^* from FLUTAN calculations
compared to measurements by Comte-Bellot [1]

Re	ΔP (Pa)	U_m (m/s)	λ	u_F^* (m/s)	u_L^* (m/s)
41 000	1.486	2.50	0.02469	0.1389	0.1283
435 000	99.11	26.5	0.01465	1.134	1.074

Wall friction velocities u_F^* from FLUTAN calculations
compared to measurements by Laufer [2]

6. Conclusions

In order to set up a collection of data suitable for future validation of the turbulence model of the GASFLOW code, experimental data from literature comprising distributions of flow velocity and turbulence intensity have been evaluated and compared to results of the FLUTAN code. The data had been measured in a plate channel and in a circular duct, resp., at varying high Reynolds numbers, and under fully developed flow conditions. The working fluid was air. As the investigations reveal, the velocity distributions calculated with FLUTAN compare fairly well with both the experimental data and the so-called universal velocity profile.

In a continued effort, the experimentally determined turbulence intensities were converted into values of turbulent kinetic energy and compared to corresponding FLUTAN results. Here, in spite of the multiply higher sensitivity of this parameter, the occurring deviations turn out relatively small for the plate channel, and even the larger deviations emerging in case of the circular duct can absolutely be accepted.

A third comparison was performed with respect to the wall friction velocities. Here, all numerically determined values fall a little bit above the measurements. The surplus amount attains between 12 and 21% in case of the plate channel, and between 5 and 8% in case of the circular duct.

Summarizing, a data collection containing distributions of turbulent flow velocity and turbulent kinetic energy has been composed as a starting point to validate the turbulence model of the GASFLOW code. The data are in good agreement with FLUTAN results.

Literatur

1. G.Comte-Bellot,
   Ecoulement Turbulent entre Deux Parois Parallèles, Publications Scientifiques et Techniques du Ministère de l'Air, Magasin de Vente: 2, Avenue de la Porte-D'Issy, Paris (15e), 1965.

2. J. Laufer,
   The structure of turbulence in fully developed pipe flow, NACA, TN 2954 (1953).

3. G. Willerding, W. Baumann,
   FLUTAN 2.0 Input Specifications, FZKA-Bericht Nr. 5712, Forschungszentrum Karlsruhe, Mai 1996.

4. W. Baumann, L. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach,
   Validierung des k-ε-σ_t Turbulenzmodells im 3D Thermohydraulik-Code FLUTAN 3.0 an Turbulenzmessdaten, FZKA-Bericht Nr. 6395, Forschungszentrum Karlsruhe, Dez. 1999.

5. J. Nikuradse,
   Gesetzmäßigkeiten der Strömung in glatten Rohren, VDI-Forschungsheft 356 (1932).

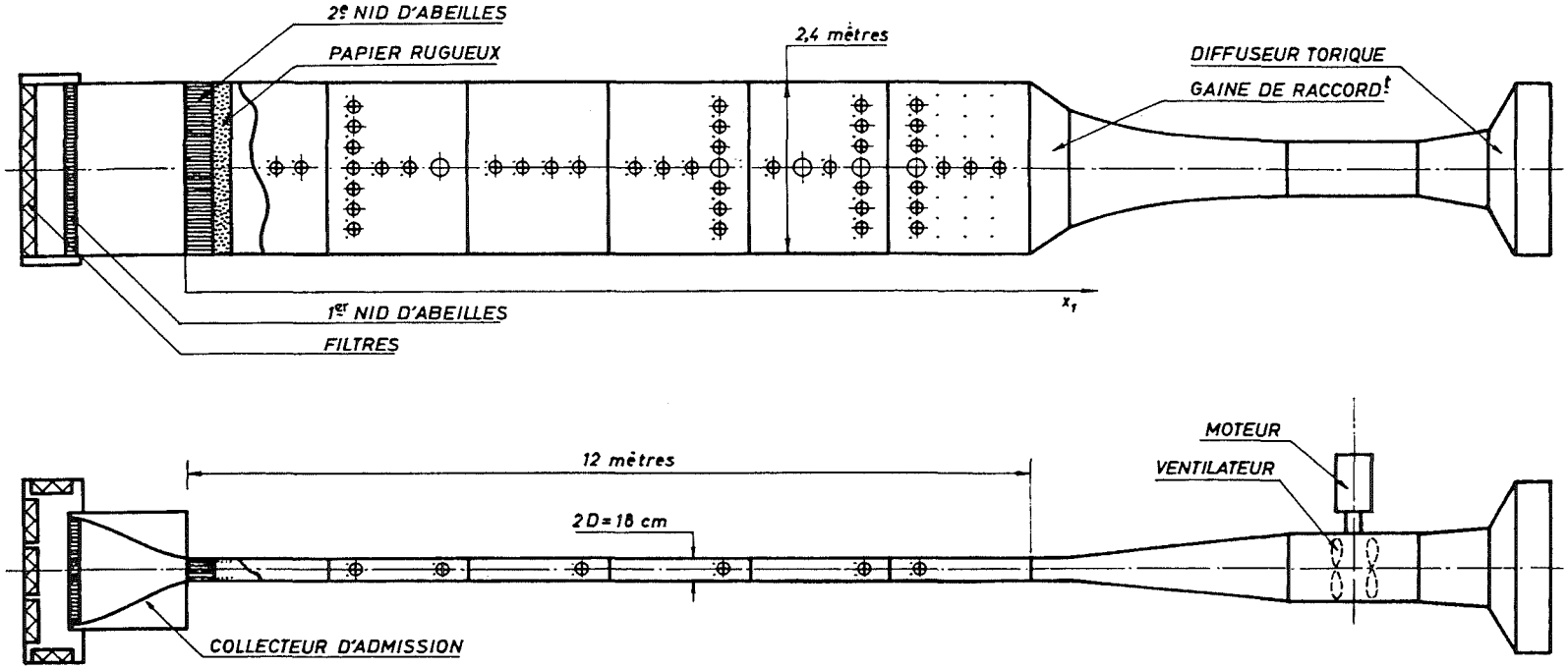


Fig. II-1 — Schéma de l'installation.

Emplacements de mesure : • : prise de pression statisque; ⊕ : appareils de traversée (Pitot ou anémomètre); o : appareils de traversée et appareils à corrélations.

Fig.1: Schematic of the Plate Channel Used by Comte-Bellot [1]

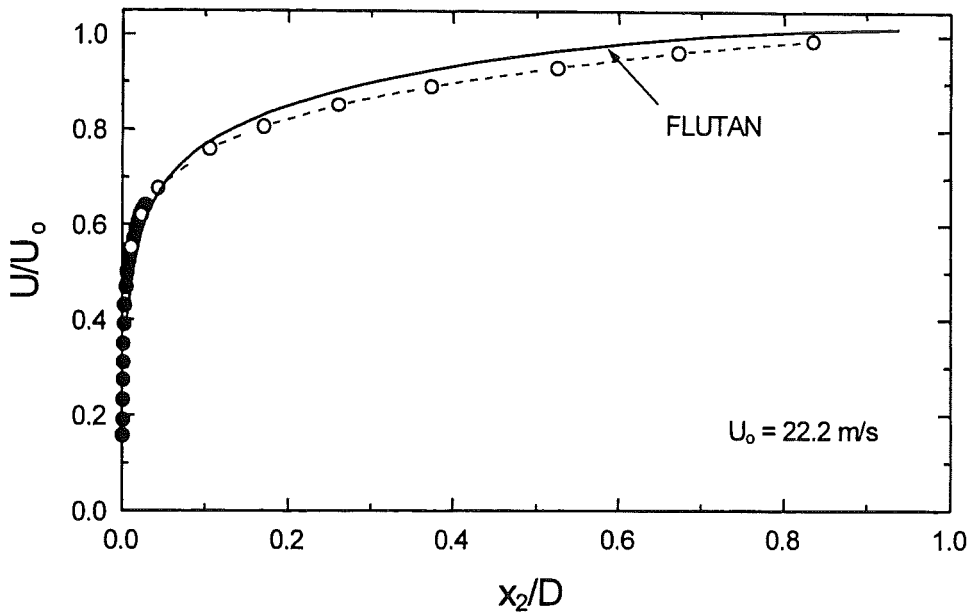


Fig. 2a): Axial Flow Velocity U/U_o for Re = 480 000, FLUTAN Results Compared to Measurements by Comte-Bellot [1], Linear Representation.

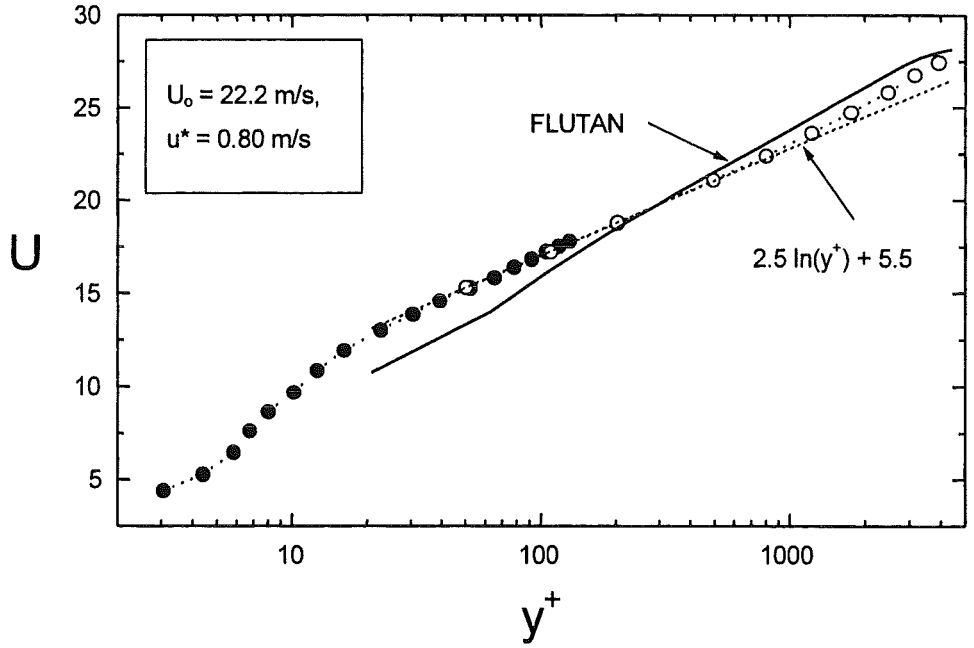


Fig. 2b): Axial Flow Velocity U^+ for Re = 480 000, FLUTAN Results Compared to the Universal Velocity Profile and to Measurements by Comte-Bellot [1].

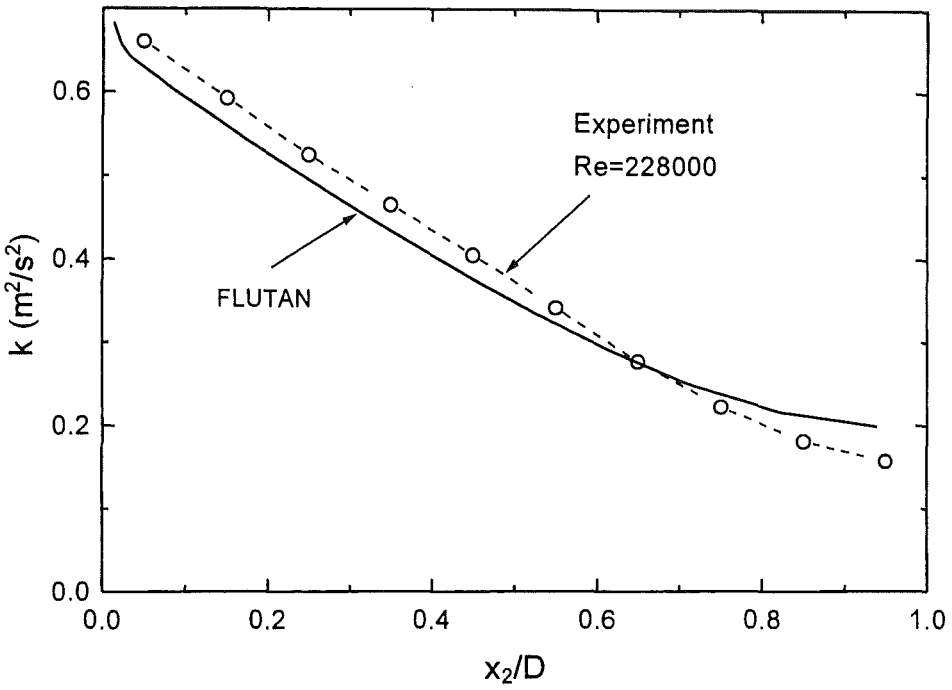


Fig.3a): Turbulent Kin. Energy k as a Function of the Distance from Wall x_2/D, FLUTAN Results for Re = 228 000 Compared to Measurements by Comte-Bellot [1].

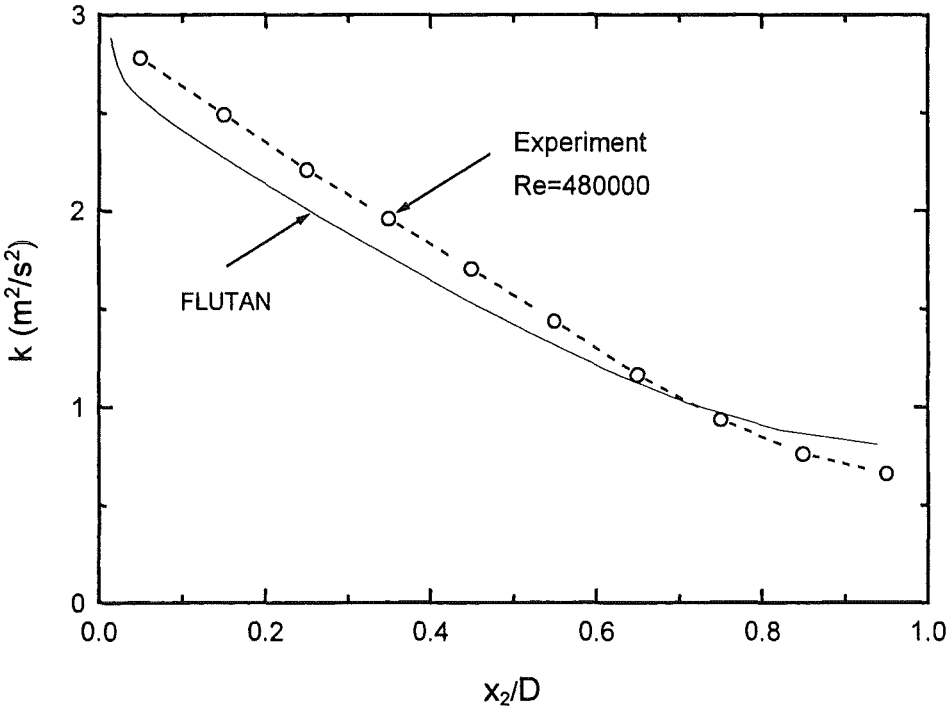


Fig.3b): Turbulent Kin. Energy k as a Function of the Distance from Wall x_2/D, FLUTAN Results for Re = 480 000 Compared to Measurements by Comte-Bellot [1].

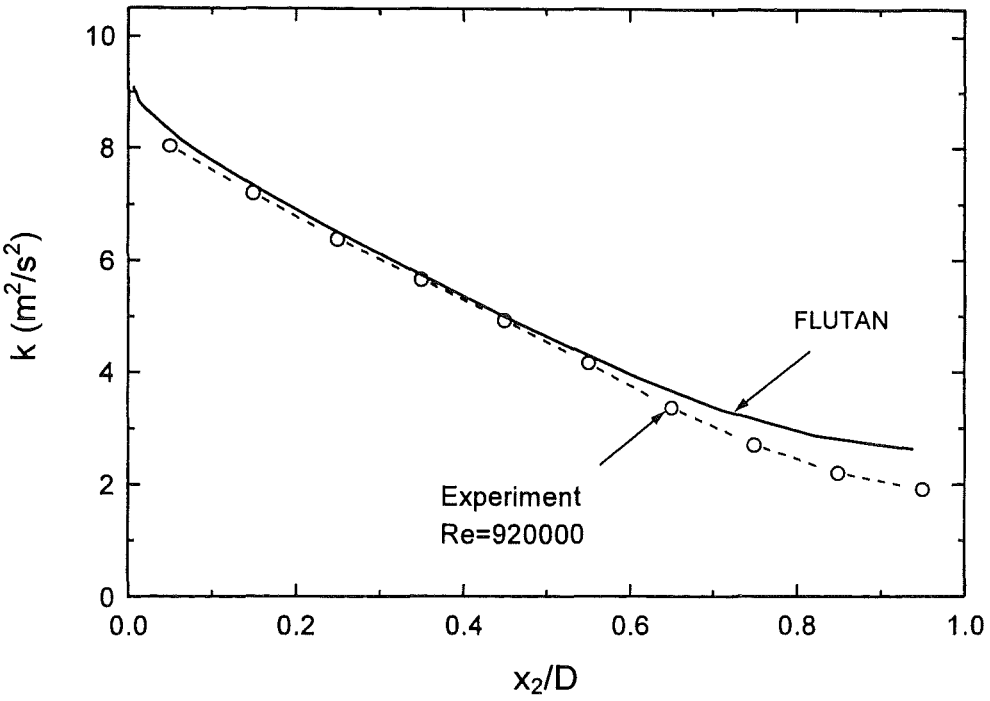


Fig.3c): Turbulent Kin. Energy k as a Function of the Distance from Wall x_2/D, FLUTAN Results for Re = 920 000 Compared to Measurements by Comte-Bellot [1].

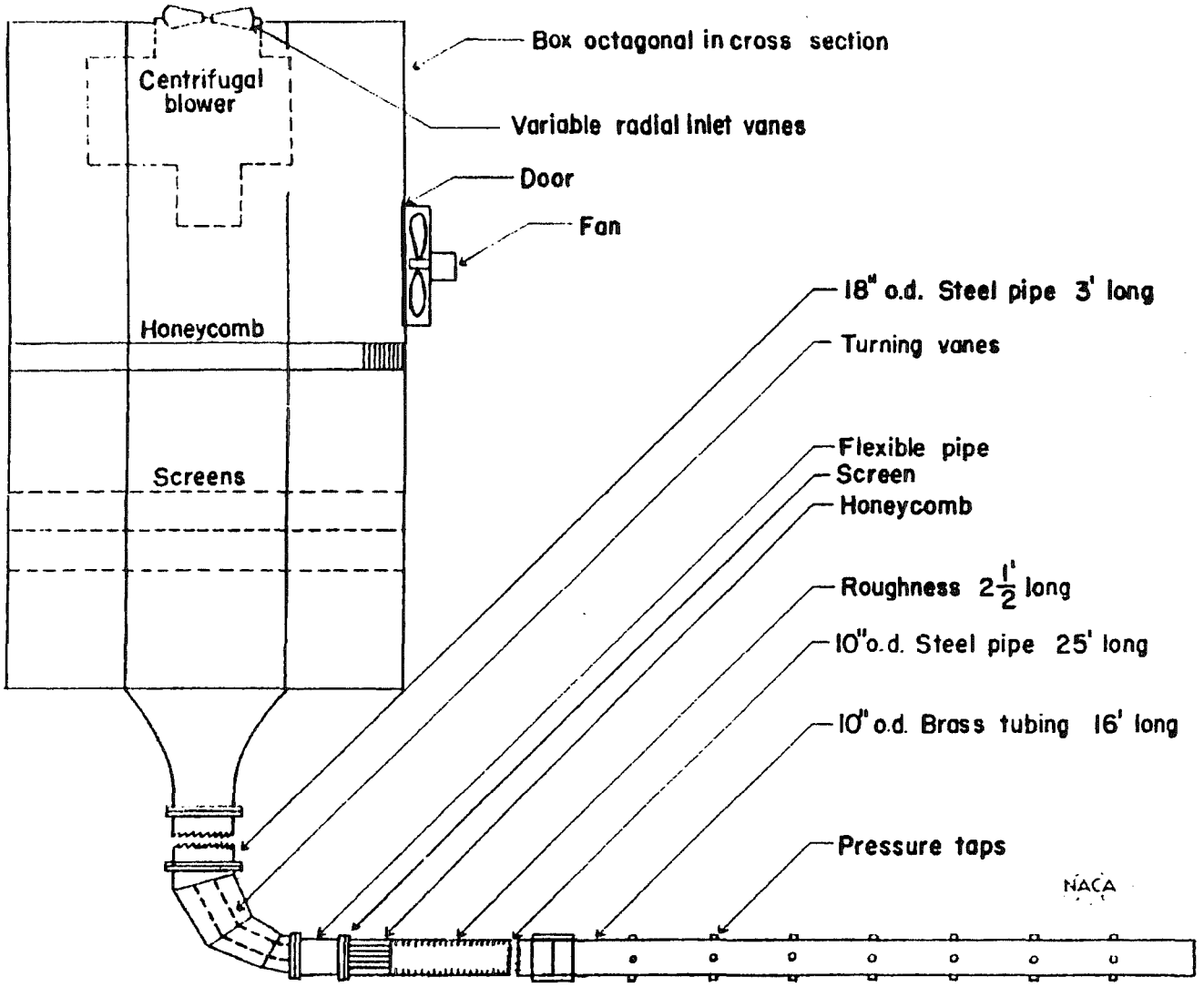


Fig. 4: Schematic of Laufer's Circular Pipe Test Rig [2].

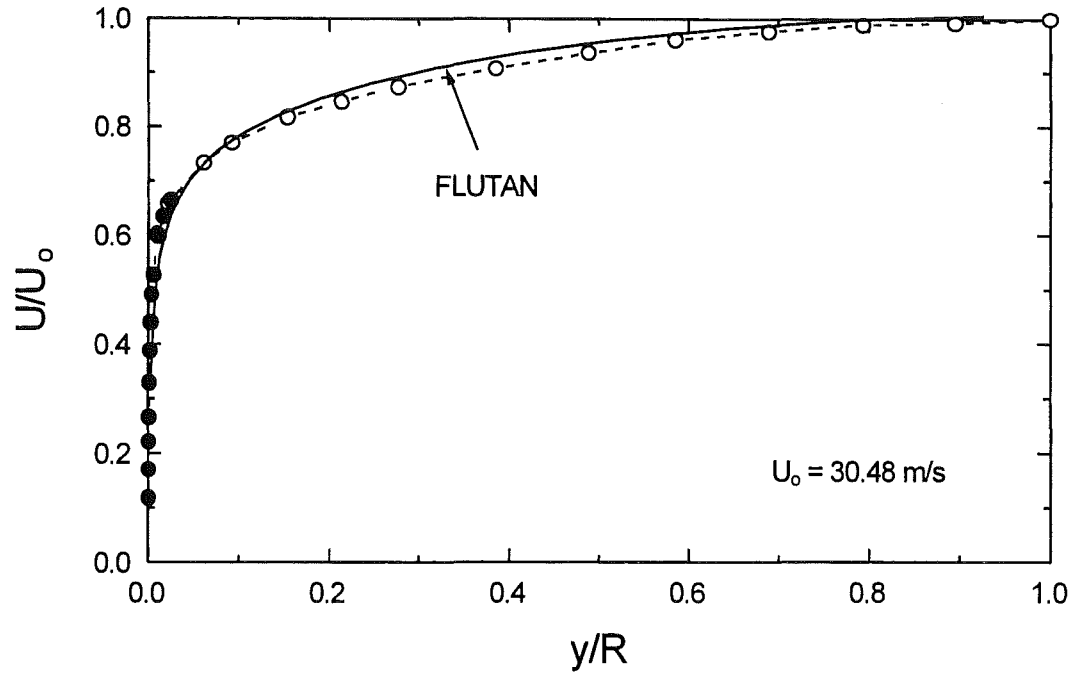


Fig. 5a): Axial Flow Velocity U/U_o for Re = 435 000, FLUTAN Results Compared to Measurements by Laufer [2], Linear Representation.

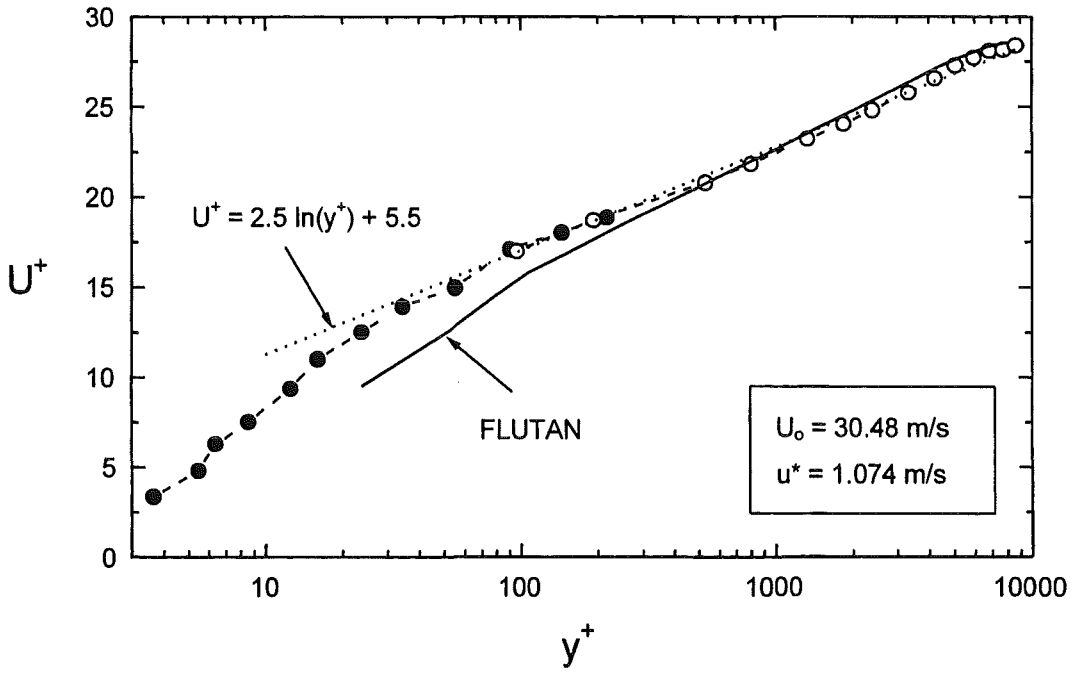


Fig. 5b): Axial Flow Velocity U^+ for Re = 435 000, FLUTAN Results Compared to the Universal Velocity Profile and to Measurements by Laufer [2].

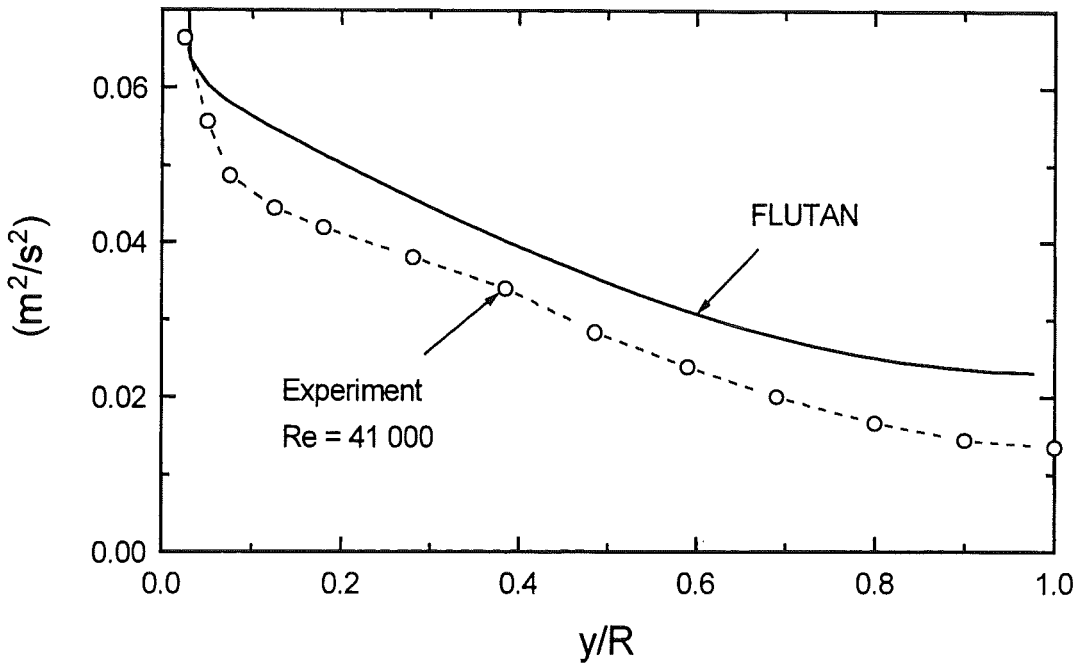


Fig. 6a): Turbulent Kin. Energy k as a Function of the Distance from Wall y/R, FLUTAN Results for Re = 41 000 Compared to Measurements by Laufer [2].

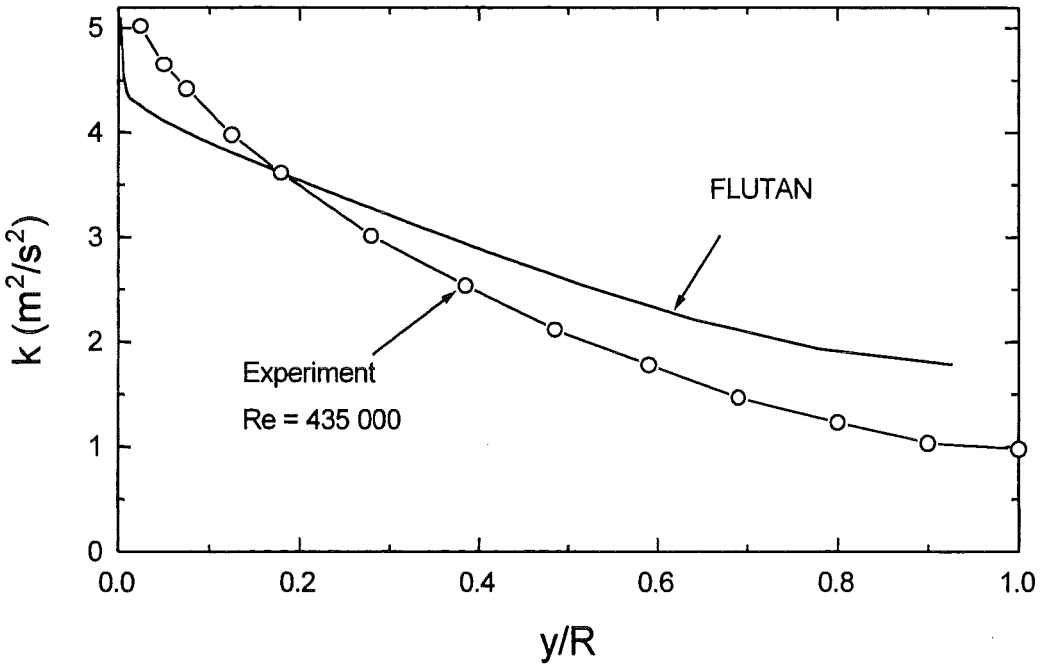


Fig. 6b): Turbulent Kin. Energy k as a Function of the Distance from Wall y/R, FLUTAN Results for Re = 435 000 Compared to Measurements by Laufer [2].

V. Numerical simulation of ignition processes in H_2-air-steam mixtures

(U. Bielert, IKET)

Abstract

Numerical simulations with a one dimensional instationary model using detailed chemical kinetics were performed for the ignition of hydrogen steam air mixtures. The influence of mixture composition and mixture initial temperature on the minimum ignition energy were studied. The numerical results were fitted with a local regression model. The regression model can be used to access the results of the numerical simulations in multidimensional distribution and combustion calculations.

Zusammenfassung

Es wurden numerische Simulationen zur Zündung von Wasserstoff-Luft-Dampf-Gemischen an einem eindimensionalen nicht-stationären Modell durchgeführt. Dabei wurde untersucht, welchen Einfluß die Zusammensetzung und die anfängliche Temperatur des Gemischs haben. Die numerischen Ergebnisse wurden in ein lokales Regressionsmodell eingebracht.

1 Introduction

In modeling a complete accident scenario on full scale, the release, distribution, ignition and subsequent combustion of hydrogen must be considered. These processes cover a wide range of time and length scales and thus require the use of simplified models. A summary of the combustion phenomena that must be considered is given in [1].
While the release is a localized process, the calculation of the distribution of the combustible mixture is a global problem which requires the consideration of the complete containment. In such a scenario the ignition process is a local event. The combustion process proceeds again on a global scale and thus also requires the consideration of the complete geometry. Thus it is evident that the different stages of the accident scenario must be described by different models that take into account only the dominant physical mechanisms during that stage.

The ignition process is quite sensitive to the local properties of the combustible mixture. Thus a detailed model of the ignition process is required which considers the detailed chemical kinetics of the the ignition process on a length scale relevant to the ignition process.

On global time and length scales the use of detailed chemical kinetics is prohibitive with todays computational facilities. However, it is possible to precompute important features of the ignition process and then use a table look up to utilize these data in the global calculations. These tabulated data are used to determine the beginning of the combustion process which then is modeled by a global scale turbulent combustion model.

In the present approach the instationary laminar flame propagation in a one dimensional geometry is investigated using a detailed chemical kinetics model for a hydrogen-steam-air system. This model was developed and implemented by Ulrich Maas and co-workers [2, 3] and is used here with the reaction mechanism of Maas and Warnatz [4].

In the model the initial development of a laminar flame is investigated. Effects of turbulence are completely neglected in the calculations. While turbulence has a significant influence on the flame propagation once a flame is established this is not true during the initial phase of the ignition process. At the beginning of the ignition process the flame kernel is much smaller than the turbulent structures in the full scale containment. Thus the flame starts as a laminar flame ball and is only later influenced by turbulence when it grows to a size comparable to the turbulent structures.

The consideration of a laminar flame for this initial phase is a conservative estimate as the presence of turbulence will increase the heat and species transport and the mixing of the heated gas at the ignition location with the surrounding gas. Thus the hot kernel will be cooled and the ignition suppressed by turbulence. Of course the role of turbulence changes once a flame is established. If the flame produces sufficient energy the flame cannot be quenched by turbulence but the reaction is enhanced by the increased mixing and the increase of flame surface area due to the turbulent motion.

2 Model of ignition process

The following calculations were performed with a program from Maas [5] for one dimensional instationary laminar flame propagation. This model combines the hydrodynamic equations for laminar flow with a detailed model of the chemical kinetics of the H_2-H_2O-air-system.

The following system of equations is solved by the numerical model (see also [2]):

$$\frac{\partial r}{\partial \psi} - \frac{1}{\rho r^{\alpha}} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho^2 \frac{\partial}{\partial \psi}\left(v r^{\alpha}\right) = 0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + r^{\alpha}\frac{\partial P}{\partial \psi} - \frac{4}{3} r^{\alpha}\frac{\partial}{\partial \psi}\left(\rho\mu\frac{\partial}{\partial \psi}\left(v r^{\alpha}\right)\right) + 2\alpha r^{\alpha}\frac{v}{r}\frac{\partial \mu}{\partial \psi} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{\rho C_p}\frac{\partial P}{\partial t} - \frac{1}{C_p}\frac{\partial}{\partial \psi}\left(\rho r^{2\alpha}\lambda\frac{\partial T}{\partial \psi}\right) + \frac{r^{\alpha}}{C_p}\sum_{i=1}^{n_s} j_i C_{pi}\frac{\partial T}{\partial \psi} + \frac{1}{\rho C_p}\sum \dot{\omega}_i h_i M_i - \frac{4\rho\mu}{3C_p}\left(\frac{\partial v r^{\alpha}}{\partial \psi}\right)^2 + \frac{2\alpha\mu}{C_p}\frac{\partial}{\partial \psi}\left(v r^{\alpha-1}\right) = q \tag{4}$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi}\left(\rho r^{\alpha} w_i V_i\right) - \frac{\dot{\omega}_i M_i}{\rho} = 0 \tag{5}$$

$$P - \frac{\rho R T}{\overline{M}} = 0 \tag{6}$$

where

t	time
α	geometry factor: (0 - infinite slab, 1 - infinite cylinder, 2 - sphere)
n_s	number of species
r	radius
P	pressure
T	temperature
ρ	density
v	velocity
w_i	mass fraction of species i
M_i	molar mass of species i
$\dot{\omega}_i$	mass scale rate of formation of species i
q	source term for deposition of energy
C_{pi}	constant pressure heat capacity of species i
C_p	constant pressure heat capacity of the mixture

h_i	specific enthalpy of species i
V_i	diffusion velocity of species i
λ	mixture thermal conductivity
μ	mixture viscosity

For the calculations spherical symmetry was assumed. The whole computational domain is initially filled with a homogenous gas at constant pressure and temperature. At the beginning of the calculation energy is deposited at the center of the sphere in a predefined volume. This energy source acts as the ignition source in the calculation. The source is defined by the radius of the heated kernel SW , the duration of the energy deposition ST and by the amount of energy added SE.

The initial distribution of the energy source term was chosen as

$$q = \frac{SE}{ST} \exp\left((-r/SW)^4\right) \qquad (7)$$

This ensures an almost constant temperature within the core region and a smooth transition of the temperature profile between the heated and unheated regions. The computational domain is chosen at least ten times larger than the core region to ensure a sufficient volume of undisturbed gas around the heated core.

The outer boundary of the computational domain is open. This means that the pressure is fixed at the initial value. As the combustion proceeds in the inner region of the computational domain the gas expands. This expansion is captured by a moving grid which moves with the gas. The system is adiabatic. No heat losses at the outer boundary are considered.

It is worth mentioning that this set of equations includes the full effects of heat conduction, mass diffusion and thermal diffusion.

The reaction mechanism for the H_2-steam-air system considers the following 9 species H_2O, H_2, O_2, H, O, OH, HO_2, H_2O_2 and N_2. N_2 is only used as an inert species in these calculations. This assumption is justified by that fact that the activation energy of reactions involving N_2 is quite high and that these reactions do not contribute significant to the overall heat of combustion.

The elementary reactions considered in the reaction mechanism are given in table 1.

The solution algorithm employs an adaptive grid which concentrates grid knots in regions of large gradients e.g. at the flame front. Details of the numerical model are given in [2].

The described numerical model is used to study the influence of the following parameters:

- mixture composition: y_{H2}, y_{H2O}
- initial pressure
- initial temperature
- ignition source: spacial distribution and size of source, duration of energy release, amount of energy released

3 Examples of calculation

Figures 1 to 3 show selected results of three example calculations with stoichiometric hydrogen air mixtures in spherical geometry. In all three calculations the same ignition source of 10mm radius is used. The amount of energy deposited in this volume was 1J in all three cases. The duration of the energy deposition was 10 μs. The only difference between the three calculations is the initial temperature of the mixture, all other parameters were kept constant.

The diagram at the top of each figure shows the development of temperature profiles with time. The second diagram shows profiles of the fuel concentration and the diagram at the bottom shows profiles of HO_2 as an example for an intermediate species. The profiles for a given instance in time are displayed as lines. The symbols indicate the location of the grid nodes in the numerical simulation.

In figure 1 the results for an initial temperature of T_0 = 400 K are shown. In this case the ignition energy is not sufficient to establish a propagating flame. The temperature diagram at the top shows that the core region is quickly heated to a temperature of approximately 750 K. After the ignition energy is completely released the heat is conducted away from the source location and results in an equalization of the temperature.

The concentration of H_2 increases in the hot core region and decreases at the boundary to the cold outer region. Not shown here are the concentration profiles of O_2 and N_2. These concentrations show the opposite behavior. The concentration decreases in the hot center and increases in the cold region. These are the effects of thermo diffusion which cause the light species to move to the hot region and the heavy species to move to the colder region. This effect is only observed in the non reacting case as the variations due to reaction are much larger than the concentration gradients produced by thermo diffusion.

As the last diagram of figure 1 shows there is no reaction in this case and no intermediate species are observed. This is also true for the other intermediate species not shown here.

Figure 2 gives the results for an initial temperature of T_0 = 425 K. The behavior of the temperature profiles is similar to the previous case. However, the mixture in the core region is now heated to approximately 970 K. The difference to the previous case is that now small concentrations of the intermediate species are observed. Thus some reactions do proceed. However, these reactions are not fast enough to establish a propagating flame. As the energy is conducted away from the core region the reactions die out and the intermediate species disappear.

Results for an initial temperature of T_0 = 450 K are given in figure 3. In this calculation a propagating flame is established. Note that the time and length scale for this calculation is different from the previous figures. In this case the mixture is heated to approximately 1030 K. The mixture stays at this temperature for a certain time and then after the ignition delay is over an additional temperature rise in the core region occurs. Starting from this core a flame begins to propagate. Thus the region of hot products behind the flame grows with time. The hydrogen is consumed at approximately the same location where the temperature jump is observed. The intermediate species show a peak at that location as should be expected. A constant concentration profile moving outward is established some time after ignition. During the ignition delay and some transition state the maximum concentration of HO_2 as shown in figure 3 is lower than the final value.

The species mass fractions of the other species are not shown here. For the ignition case a constant mass fraction of H_2O is observed behind the flame.

For the initial temperature T_0 = 450K considerable mass fractions of H and O are observed in the core region for a short time when the ignition occurs. The peak values are smaller than in the core region. Once a propagating flame is established stable mass fraction profiles move through the computational domain.

The mass fraction of OH in the core region increases to a constant value of approximately 0.02 when ignition occurs. The values in the flame are somewhat lower and a small minimum is observed for later times between the core region and the propagating flame.

Thus the results of these three examples can be summarized as follows. If the ignition energy deposited in the core region is not sufficient to ignite the mixture only a temperature peak and some small effects of thermo diffusion are observed. When the

initial temperature or the ignition energy is increased, first some small production of H_2O, HO_2 and H_2O_2 can be observed. In an intermediate region it is still possible that a propagating flame is not established. With the decay of the peak temperature due to heat conduction the mass fractions of these species disappear again. Only when the mixture is sufficiently heated a stable flame can be established. This flame propagates then outward from the core region and shows wide peaks in the mass fractions of H and O and narrow peaks of HO_2 and H_2O_2. Behind the flame an equilibrium composition of essentially H_2O, OH, H_2 and O_2 can be observed.

4 Influence of ignition source

In the previous section the behavior of the numerical model was discussed. Examples for a propagating flame and for an inert mixture were compared. In this section the influence of the parameters defining the ignition source are investigated.

The ignition source is always located at the center of the computational domain. The source is then described by three parameters:

- the size of the ignition source SW [mm]
- the duration of the energy release ST [sec]
- the amount of energy deposited SE [J]

The energy is distributed in the core region according to equation 7.

For the parameter variation presented in this section again a stoichiometric H_2-air mixture in a spherical system with open outer boundary is chosen. The initial conditions of the mixture are p=1.0 bar and T_0=300K.

The variations of the ignition source size and ignition duration result in qualitatively different behavior of the numerical solution as depicted in figure 4. This figure shows the resulting temperature distribution for three different sets of ignition parameters. The parameters are given in table 2.

Case 1 in figure 4 shows the temperature distribution for a relatively large ignition source. The results are similar to the results presented in the previous section for the propagating flame. The heating of the mixtures is fast and the mixture remains at a constant temperature during the ignition delay time. After the ignition delay time the mixture in the complete core region reacts at once causing the temperature to rise again. At the same time a flame begins to propagate from the core region into the unburned mixture.

In case 2 the size of the ignition source is reduced, but the energy is still deposited in a very short time period. The energy necessary to initiate a propagating flame is smaller than in the previous case. But in the smaller core region this energy causes a much larger temperature rise. As a result the temperature in the center is higher than the temperature of the combustion products. Starting from the initial core region and driven by strong temperature gradients the region of heated gas increases and a propagating flame is finally established after some ignition delay. As the size of the ignition source is further decreased the maximum temperature in the core region needed to ignite the mixture increases. Thus a minimum ignition source size is given by the validity of the model at higher temperatures. Especially the available thermodynamic data of the species considered has a limited temperature range.

The third case depicted in figure 4 shows the temperature distribution for an ignition process with a small source in which the energy is released over a longer period of time. Here a propagating flame is initiated before the complete ignition energy is released into the core region of the gas. As a result the temperature in the core region is still rising when the flame is already initiated. Thus a distinct temperature peak in the core region can be observed in the burned gas.

To study the influence of the ignition source parameters systematic parameter variations were performed. In this study the ignition energy SE to ignite the mixture was determined by trial and error for given values of SW and ST and for the given initial conditions. The source radius was varied between 10^{-5} m and 10^{-2} m, the ignition duration was varied between 10^{-6} sec and 10^{-3} sec.

Results of this parameter variation are given in figures 5 and 6. Source energies for which no ignition was observed are denoted by the grid, source energies for which ignition occurred are denoted by symbols. In the upper half of Figure 5 the source energy is plotted as function of ignition duration and source radius. The ignition energy increases with the size of the ignition source. For small sources the energy also increases with the duration of the energy release. For larger ignition sources the effect of the ignition duration is negligible.

The lower half of figure 5 shows the source power as function of ignition duration and source radius. The power was calculated by dividing the ignition energy by the ignition duration. The power is independent of the ignition duration for small ignition sources. For large sources the required power decreases with the ignition duration. The major

influence parameter is still the source size. The required power increases with ignition size.

Figure 6 shows similar plots of the power density (top) and energy density (bottom). This values were derived by dividing the ignition energy and the ignition power by the volume of the ignition source. The power density required to ignite the mixture decreases with source size. For large sources the power density also decreases with ignition duration. The energy density depicted in the lower half of figure 6 is for larger ignition sources almost constant over the range of ignition durations considered. For very small sources the energy density increases with ignition duration.

Lewis and von Elbe [6] give the minimum ignition energy of an stoichiometric hydrogen air mixture as $2 \cdot 10^{-5}$ J and the quenching distance for this mixture as $6 \cdot 10^{-4}$ m. Comparing these values with the data in figures 5 and 6 it can be observed that the minimum ignition energy agrees reasonably well with the calculated source energies for smaller ignition sources. The quenching distance terminates the region of source energies for which the influences of source size can be neglected. A more detailed analysis of the data from figures 5 and 6 reveals that below the quenching distance a constant ignition energy is required to ignite the mixture which corresponds to the minimum ignition energy experimentally observed. For ignition sources larger than the quenching distance the energy density is constant. In order to minimize the influences of the ignition parameters on the results presented in the following sections a source radius greater than the quenching distance and a sufficiently short ignition duration should be selected. Therefore a source size of 10mm and a ignition duration of 10 μs are chosen for the calculations in the next section.

5 Temperature dependence of ignition energy

When using the numerical model described in section 2 to determine the minimum ignition temperature, that is the temperature of a combustible mixture where no additional energy is required to initiate the combustion process, an additional problem arises. The resulting temperature depends on the duration of the time integration. When the numerical model is integrated over an extended period of time a lower temperature is necessary to observe auto ignition. In the calculations presented here the time integration of the chemical reactions was stopped after 1 sec. This value is thought to be a reasonable limit for ignition processes in large scale containment geometries.

In order to get a better access to the minimum ignition temperature the required ignition energy is calculated as a function of the initial temperature. With increasing initial temperature a smaller ignition energy is required to initiate a propagating flame. When the ignition energy is plotted as function of the initial temperature the minimum ignition temperature can be found in this plot as the intercept of the curve with the abscissa.

5.1 Example calculations at different initial temperatures

Before such calculations are performed for different mixtures it is useful to discuss the behavior of the numerical solution at different initial temperatures. Data of some calculations is summarized in table 3. Figure 7 shows the temperature distributions for three different initial temperatures. The ignition energy was in all three cases selected as the minimum value that resulted in ignition.

The top of this figure shows a calculation where the mixture has an initial temperature of T_0 = 500 K. As can be seen in table 3 the temperature in the core region rises to 956 K when an ignition energy of almost 1J is applied to the core of the gas mixture. In the first case given in the table, the temperature in the core rises to 956 K and then decays as the heat is conducted to the outer regions. No signs of reactions are observed during the integration time of 1 sec. Shown in figure 7 is the second case where ignition occurs. The ignition energy is increased by a rather small amount and the behavior of the system changes completely. Immediately after the ignition the temperature increases to 1013 K and after an ignition delay of approximately 0.3 msec a flame is initiated which propagates outward. The temperature in the burned gas behind the flame is well above 2500 K. This is qualitatively the same situation as depicted in figure 3.

The lower diagram in figure 7 shows the same mixture when the calculation is started at 980 K. This temperature is above the temperature reached in the core region in the previous case. In this case no ignition energy is added in the core region and thus the initial conditions are homogenous. The reaction proceeds as a homogenous reaction of the whole volume. The temperature remains almost constant during the ignition delay time and then a very fast temperature rise is observed when the mixture in the complete computational domain reacts at the same time.

The center diagram in figure 7 shows an intermediate situation. The initial temperature is 865 K. The ignition energy is 0.153 J. Table 3 shows for this case a temperature in

the core region after heating of 963 K. The diagram shows that in this case the temperature is not sufficient to initiate a flame directly as in the top diagram. Instead the energy is transferred from the core region into the surrounding volume and the temperature decays. At the end of the time integration at approximately 1 sec the mixture starts to react and the temperature rises again. The reaction proceeds first in the center region but the radial slope of the temperature distribution is relatively flat. The initial temperature was chosen to give an ignition delay of approximately 1 sec, the time arbitrarily selected as end of the time integration. Thus it is clear that the temperature and ignition energy determined also depend on this value.

From table 3 can be seen that the temperature after the heating period but prior to ignition is lowest for the mixture which is initially at a low temperature. A mixture initially at an elevated temperature must be heated to a higher temperature for ignition to occur. This behavior may be explained by the effects of thermo diffusion. In the situation where the mixture is initially at low temperatures the heating also causes steep temperature gradients, which in turn result in an additional transport of light species (e.g. H, O, OH) into the core region and of the heavy species (e.g. HO_2, H_2O_2) into the outer region as was shown in figures 1 to 3.

5.2 Procedure of determinating the minimum ignition energy for a given initial temperature

The minimum ignition energy is the lowest energy deposited in the core region for which ignition and a propagating flame is observed. In order to find this energy a parameter variation of the ignition energy must be performed.

The procedure to find the minimum ignition energy is automated in such a way that the numerical simulation program which was developed by Maas [3, 4] is not modified. This was done in order to minimize side effects in that code.

The input file to the numerical simulation is modified using shell scripts. Then the simulation program is called in a script which also analyzes the output of the simulation program. This script also prepares some output which is read by the controlling program to indicate the result of the last simulation run. The controlling program only needs the information whether the last calculation resulted in an ignition or not. Based on this information the ignition energy is decreased (when ignition was observed) or increased

(when no ignition was observed). The new value of the ignition energy is calculated using a simple bisection algorithm.

The main problem in this procedure is to find an automatic criterium to determine whether ignition has occurred or not. Here two different criteria were used.

One criterium is the maximum temperature reached in a calculation. As the temperature is printed by the simulation program, the output is checked for the maximum temperature reached in a time step. When a predefined temperature limit is reached it is assumed that ignition has occurred and the numerical simulation can be terminated before the complete time integration is finished. In order to get useful results the temperature limit must be carefully selected. The limit should be well above the temperature reached in the heating and well below the temperature reached in the burned gas behind the flame. For mixtures near the stoichiometric composition a value of 1500 K proved quite efficient, as the gas temperature behind the flame is higher than 2400 K and the temperature in the core region after heating is below 1000K. However, if the ignition energy is increased to very high values the core region is heated to temperatures above the temperature limit. To ensure that this is not interpreted as an ignition, results are rejected when the temperature limit is reached before the heating is completed.

Another problem arises when lean mixtures are investigated. For increasingly lean mixtures the adiabatic flame temperature and thus also the temperature in the burned gas decreases. When the temperature in the flame drops below the temperature limit, ignition can no longer be detected. In order to allow a margin between the temperature of the heated gas and the temperature of the reacted gas, the composition range of the mixture must be limited to sufficiently high H_2-concentrations.

For lean mixtures it was found to be more efficient to use the fuel concentration as a criterium for ignition. When the concentration of H_2 dropped below a threshold value, this was defined as ignition. For lean mixtures the threshold should be set to a small positive value to allow for numerical errors. However, this criterium does not work for rich mixtures as the fuel is not completely consumed and thus the threshold must be increased to a reasonable value which then of course depends on the initial composition. Another approach would be to choose the concentration of the oxidizer as limit. However, such calculations have not been performed yet.

5.3 Influence of parameters of numerical method

Before the results of the temperature variation can be discussed, first the convergence of the numerical solution must be verified. Figure 8 shows the ignition energy as a function of initial temperature for different parameter sets used in the calculations. The parameters of the calculations are given in table 4.

Case 1 in figure 8 is used as reference case. This curve is quite smooth for temperatures above 500K and gives a sharp drop at 870 K. In case 2 larger tolerances for the time integration where used. This curve differs significantly from the reference case and indicating that a solution with this error margins is not fully converged. Case 3 uses smaller tolerances than the reference case. The results are identical for temperatures above 550K. In the low temperature range the curve for case 3 is somewhat smoother than the reference case, but still shows some variations. Case 4 uses the same tolerances as the reference case, but employs a finer grid. In this case the high temperature region is identical to the reference case. In the low temperature region the curve is also quite smooth and passes through the range given by the oscillating curves of case 1 and 3. Additional calculations were performed with different time steps. But no significant differences to the reference case were observed for finer time steps.

As a result of these comparisons the tolerances and time step of the reference case were selected. A grid size of 50 cells was chosen for the remaining calculations.

As was previously mentioned two different criteria for ignition were used in the calculations. Figure 9 shows a comparison of these two criteria for a mixture with 10 % H_2 and 20 % H_2O (by volume). The two curves are identical. Only at 500 K a small difference between the two criteria is observed.

5.4 Minimum ignition energies as function of initial temperature

With the parameters selected in the previous sections systematic variations of the mixture composition were performed. The mixtures that where investigated are summarized in table 5. Examples of results are given in Figures 10 to 12.

Figures 10 and 11 give the resulting curves for fixed values of the hydrogen mole fraction. The same tendencies are observed for all mixtures. The minimum ignition energy decreases with increasing initial temperature. This decrease is of course due to

the decreasing temperature difference between initial temperature and ignition temperature. However, at a certain initial temperature the minimum ignition energy drops to zero indicating that the self ignition temperature has been reached.
For a given initial temperature the minimum ignition energy increases with steam content. Also the temperature were the ignition energy becomes zero increases with steam content. In the temperature range between 500 and 800 K the curves are generally quite smooth. Below 500 K some curves show some wiggles.
The data of the same calculations are plotted again in Figure 12. In this figure data for the same steam content are plotted together. The top of the figure shows the whole initial temperature range investigated, the bottom plot shows a close up of the high temperature region. For constant steam concentration the curves are almost identical. Only the lean mixtures show somewhat higher ignition energies in the low temperature range. The close up shows that the auto ignition temperature decreases with increasing hydrogen content. For the 20 % steam data the minimum auto ignition temperature is reached for 40 % hydrogen and then increases again.
From the results presented so far it seems reasonable to describe the temperature range between 300 and 800 K for a given steam concentration for all hydrogen concentrations by the same interpolating function. For higher temperatures the dependence on hydrogen concentration should also be included.

6 Utilization of results

In the previous sections results of the numerical simulation of instationary laminar flame propagation have been presented. To utilize these data in the context of large scale turbulent combustion simulations it is necessary to present the data in a format appropriate for easy retrieval. In these turbulent calculations criteria are needed whether a given mixture in a given thermodynamic state ignites and whether a given ignition energy is sufficient to initiate flame propagation.
Thus it is necessary to know the self ignition temperature and the ignition energy as function of mixture composition, pressure and temperature. In order to calculate these quantities for arbitrary values of the parameters the data from the laminar calculations must be approximated by an appropriate fitting function.
Here a local regression model is used which fits linear or quadratic functions to multivariate data. The method is based on a moving window in the parameter space.

The fitted regression model is stored in a k-d-tree structure which can be used to calculate an estimate of the ignition energy for a given parameter combination. The numerical method was developed by Cleveland, Grosse and Shyu [7] and is available as a package of Fortran and C Routines.
Advantages of this method are the possibility to calculate an error estimate for the approximated values, the possibility to select the amount of smoothness of the fitted function and that there is no need to select a functional dependence of the parameters.

6.1 Integration of the local regression model into the combustion model

The integration of the fitting method into the turbulent combustion model consists of two parts. In the first part the data from the laminar simulations is read, scaled and the local regression method is applied to calculate the model parameters which are represented as a k-d-tree and stored in a file for further use. The second part of the integration is a set of functions to retrieve data from the k-d-tree. Within the turbulent combustion simulation the data of the k-d-tree must be initialized. Then a function is used to retrieve the ignition energy for a given set of parameters.

6.2 Examples of fitting functions

The fitting procedure was performed for the data presented above. All data are for an initial pressure of 1.0 bar. Thus no pressure dependence is included in the fit. With the standard parameters of the fitting procedure the estimated error was 6 % and the equivalent number of parameters was 10.9.
The data from this fit was then used to calculate the ignition energies for various parameter combinations of hydrogen concentration, steam concentration and temperature. The results are presented in Figures 13 to 18.
Figure 13 shows the ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature of 300 K. The ignition energy increases towards the lean ignition limit and also increases with steam concentration. At an initial temperature of 800 K shown in Figure 14 the behavior is similar but the values of the ignition energy are lower. The increase at the lean limit is more pronounced especially for high steam contents. For constant steam concentration the ignition energy shows a local minimum at approximately 20 % hydrogen.

For an initial temperature of 900 K the corresponding data is plotted in Figure 15. Compared to the data at 800 K the distribution is smoother. At 1000 K initial temperature the ignition energy drops to zero for most mixtures as can be seen in Figure 16. Only for very lean mixtures and at high steam contents for very lean and very rich mixtures additional energy is needed to initiate the flame propagation.
Figures 13 to 18 show the ignition energy as function of temperature and hydrogen concentration for fixed values of the steam concentration. In these figures the fitted data is given as lines and the original data from the numerical simulations is shown by symbols. The fitted data describes the behavior of the ignition energy quite well for low temperatures. But the sharp drop which was observed in the ignition energies at high temperatures is not described very well by the fitted function. A variation of the controlling parameters of the local regression model did not improve the fit very much.
Thus additional modeling effort is required to describe the transition region adequately.

7 Summary

A one dimensional numerical simulation of instationary laminar flame propagation has been used to determine the minimum ignition energies required to ignite hydrogen-steam-air mixtures of given composition and thermodynamic state. The model was developed by Mass [3,4] for different geometries (e.g. plane, cylindrical and spherical) and boundary conditions (e.g. open and closed boundaries). Here the numerical model was used for a spherical symmetric case with an open outer boundary. This configuration is prototypical for the ignition at an arbitrary position inside of a large volume. The combustion in the numerical simulation was initiated by depositing a given amount of energy in a predescribed volume at the center of the sphere. The chemical kinetics of the hydrogen-steam-air system were taken into account by a detailed reaction mechanism considering 9 species and 34 reactions.
Systematic parameter variations were performed to determine the influences of

- ignition parameters: ignition energy, ignition source size, duration of energy release.
- parameters of the numerical model: time step and error limits
- mixture composition \item initial temperature of the mixture

To find the minimum ignition energy required for a given mixture and initial state, the laminar flame program was started with different ignition energies. A bisection method is

used to find the minimum energy where a propagating flame appears. In order to perform these calculations the original program of Maas was called by a set of shell scripts and wrapper programs. This approach warrants the integrity of the original program. Since the flame propagation program uses much more computation time than the surrounding software the low computational efficiency of the shell script approach could be neglected.

Calculations were performed over a wide range of hydrogen and steam concentrations. For each mixture the influence of the initial temperature was investigated. The general trends of the calculated data seems reasonable, but the flammability limits were not predicted correctly. Here further work is needed.

The ignition energy data from the laminar flame simulations was fitted by a local regression model. A set of C functions was written to evaluate the regression model for arbitrary mixtures and temperatures within the framework of multidimensional numerical simulations of turbulent combustion processes.

References

[1] D.W. Stamps and M. Berman. High-temperature hydrogen combustion in reactor safety applications. In Thermal reactor safety: Proceedings of the international ENS/ANS conference, Avignon, 1988.

[2] G. Goyal, J. Warnatz, and U. Maas. Numerical Studies of Hot Spot Ignition in H_2O_2 and CH_4-Air Mixtures. In 23rd Symposium (International) on Combustion, pages 1767 – 1773, 1990.

[3] G. Goyal, U. Maas, and J. Warnatz. Simulation of "Hot-Spot" Ignition in H_2O_2 and CH_4-Air Mixtures: A Parametric Study. In A.L. Kuhl, J.-C. Leyer, A.A. Borisov, and W.A. Sirignano, editors. Dynamics of Gaseous Combustion, volume 151 of Progress in Astronautics and Aeronautics, 1991.

[4] U. Maas and J. Warnatz. Detailed numerical simualtion of H_2O_2-ginition in two-dimensional geometries. In A.L. Kuhl, J.-C. Leyer, A.A. Borisov, and W.A. Sirignano, editors. Dynamics of Gaseous Combustion, volume 151 of Progress in Astronautics and Aeronautics, 1991.

[5] U. Maas and J. Warnatz. Detailed Numerical Modeling of H2O2 Ignition by Hot Spots. In Dynamics of Deflagration and Reactive Systems: Flames, volume 131 of Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, 1991.

[6] B. Lewis and G. von Elbe. Combustion, Flames and Explosions of Gases. Academic Press, third edition, 1987.

[7] W.S. Cleveland, E. Grosse, and M.-J. Shyu. A package of ca and fortran routines for fitting local regression models. Technical report, Manual for thesoftware package netlib/a/loess, available at ftp:/elib.zib.de/netlib/a/cloess.ps, 1992.

[8] M.G. Plys, R.D. Astleford, and M. Epstein. A flammability and combustion model for integrated accident analysis. In Thermal reactor safety: Proc. of the internat. ENS/ANS conf. , Avignon, 1988.

Table 1 Reaction Mechanism of H_2-O_2 system

		A [cm mol s]	T-Exp []	E [kJ/mol]
1	$O_2 + H \rightarrow OH + O$	2.00E+14	0.00	70.3
2	$OH + O \rightarrow O_2 + H$	1.49E+13	0.00	2.4
3	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	5.06E+04	2.67	26.3
4	$OH + H \rightarrow H_2 + O$	2.23E+04	2.67	18.4
5	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	1.00E+08	1.60	13.8
6	$H_2O + H \rightarrow H_2 + OH$	4.43E+08	1.60	77.0
7	$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	1.50E+09	1.14	0.4
8	$H_2O + O \rightarrow OH + OH$	1.51E+10	1.14	71.6
9	$H + H + M' \rightarrow H_2 + M'$	1.80E+18	-1.00	0.0
10	$H_2 + M' \rightarrow H + H + M'$	7.06E+18	-1.00	436.3
11	$H + OH + M' \rightarrow H_2O + M'$	2.20E+22	-2.00	0.0
12	$H_2O + M' \rightarrow H + OH + M'$	3.82E+23	-2.00	499.5
13	$O + O + M' \rightarrow O_2 + M'$	2.90E+17	-1.00	0.0
14	$O_2 + M' \rightarrow O + O + M'$	6.74E+18	-1.00	496.3
15	$H + O_2 + M' \rightarrow HO_2 + M'$	2.30E+18	-0.80	0.0
16	$HO_2 + M' \rightarrow H + O_2 + M'$	2.65E+18	-0.80	206.1
17	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	1.50E+14	0.00	4.2
18	$OH + OH \rightarrow HO_2 + H$	1.68E+13	0.00	158.5
19	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	2.50E+13	0.00	2.9
20	$H_2 + O_2 \rightarrow HO_2 + H$	8.51E+13	0.00	233.0
21	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	3.00E+13	0.00	7.2
22	$H_2O + O \rightarrow HO_2 + H$	3.37E+13	0.00	232.7
23	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	1.80E+13	0.00	-1.7
24	$OH + O_2 \rightarrow HO_2 + O$	2.70E+13	0.00	220.5
25	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	6.00E+13	0.00	0.0
26	$H_2O + O_2 \rightarrow HO_2 + OH$	9.05E+14	0.00	293.4
27	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	2.50E+11	0.00	-5.2
28	$OH + OH + M' \rightarrow H_2O_2 + M'$	3.25E+22	-2.00	0.0
29	$H_2O_2 + M' \rightarrow OH + OH + M'$	2.02E+24	-2.00	205.9
30	$H_2O_2 + H \rightarrow H_2 + HO_2$	1.70E+12	0.00	15.7
31	$H_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + H$	9.61E+11	0.00	91.7
32	$H_2O_2 + H \rightarrow H_2O + OH$	1.00E+13	0.00	15.0
33	$H_2O + OH \rightarrow H_2O_2 + H$	2.80E+12	0.00	308.6
34	$H_2O_2 + O \rightarrow OH + HO_2$	2.80E+13	0.00	26.8
35	$OH + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O$	6.98E+12	0.00	94.9
36	$H_2O_2 + OH \rightarrow H_2O + HO_2$	5.40E+12	0.00	4.2
37	$H_2O + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + OH$	1.35E+13	0.00	143.5

Table 2 Parameters of ignition sources in Figure 4

	SE [J]	SW [m]	ST [sec]	
case 1	1.8E-3	1.0E-3	1.0E-5	large, fast
case 2	8.0E-6	1.0E-4	1.0E-5	small, fast
case 3	9.0E-5	5.0E-5	1.0E-3	small, slow

Table 3 Parameters for numerical simulations

T_0 [K]	SE [J]	T_c [K]	Δt [sec]	Comment
500	0.957	956	-	no ignition
500	0.958	956	0.31E-3	ignition
800	0.274	972	-	no ignition
800	0.275	973	0.0185	ignition
860	0.168	968	-	no ignition
860	0.169	969	0.025	ignition
865	0.153	963	0.993	ignition
870	0.0	-	> 1	volume combustion
900	0.0	-	0.32	volume combustion
900	0.001	901	0.4	local ignition
900	0.01	906	0.34	
900	0.1	966	0.022	
900	0.18	1021	0.26E-3	
980	0.0	-	0.18E-2	

Table 4 Parameters of calculations shown in Figure 8

case	grid size	time step	rel. tolerance	abs. tolerance
1	25 cells	10E-7 sec	10E-3	10E-6
2	25 cells	10E-7 sec	10E-2	10E-5
3	25 cells	10E-7 sec	10E-4	10E-7
4	50 cells	10E-7 sec	10E-3	10E-6

Table 5 Initial conditions for calculations of minimum ignition energies}

p [bar]	y_{H2} [%]	y_{H2O} [%]
1.0	1	0, 20, 40
1.0	3	0, 20, 40
1.0	5	0, 20, 40
1.0	7	0, 20, 40
1.0	10	0, 20, 40
1.0	20	0, 20
1.0	30	0, 20
1.0	40	0, 20
1.0	50	0, 20

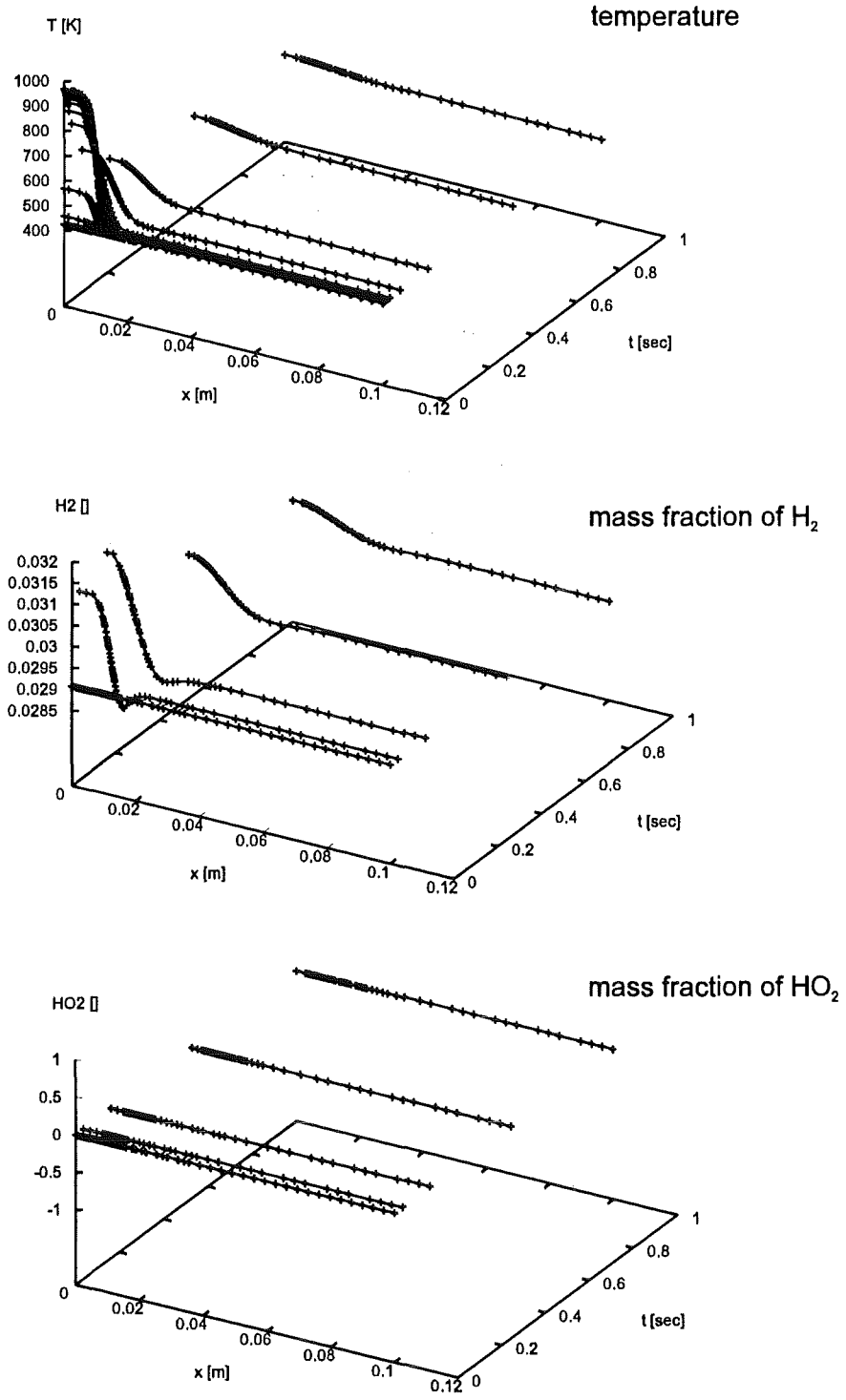
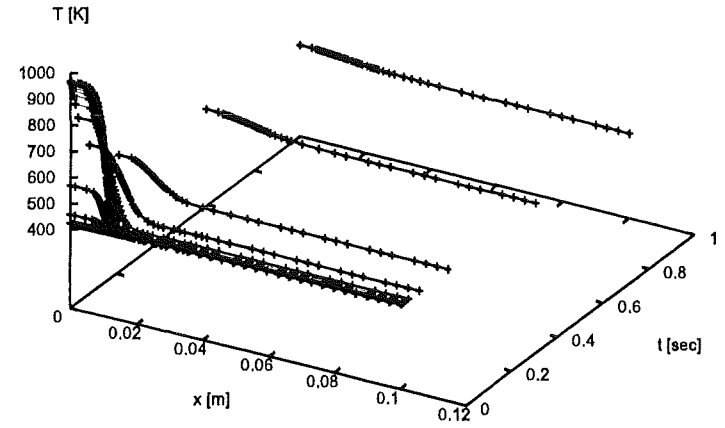
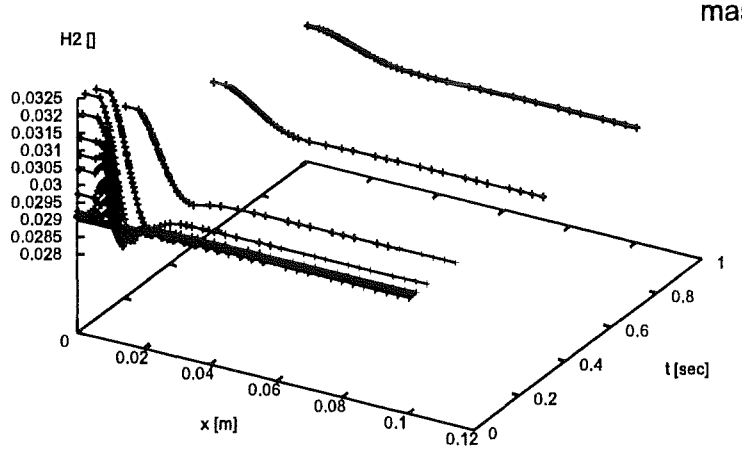


Fig.1: Stoichiometric H_2-air mixture at T_0 = 400 K

temperature



mass fraction of H_2



mass fraction of HO_2

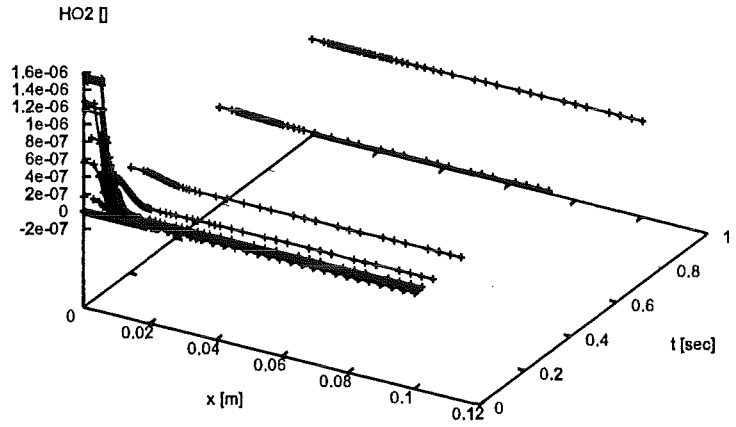
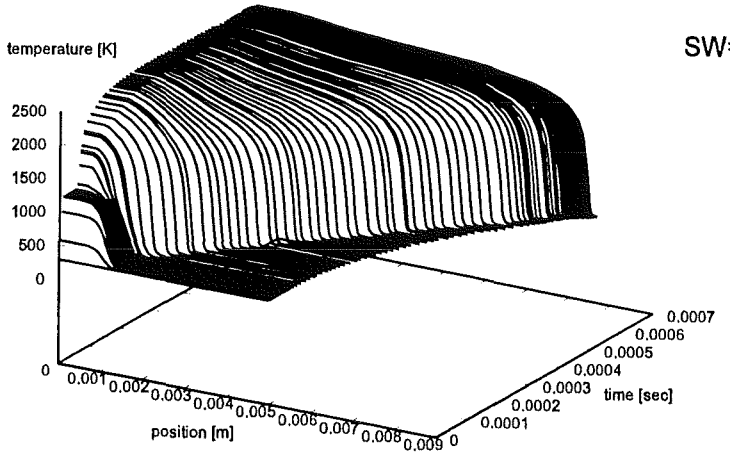
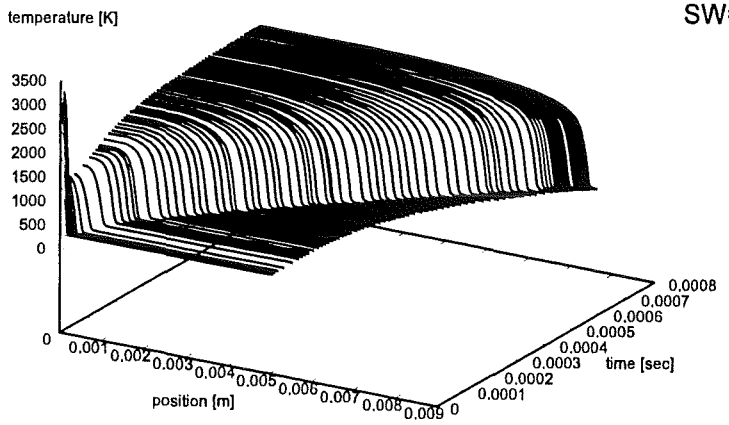


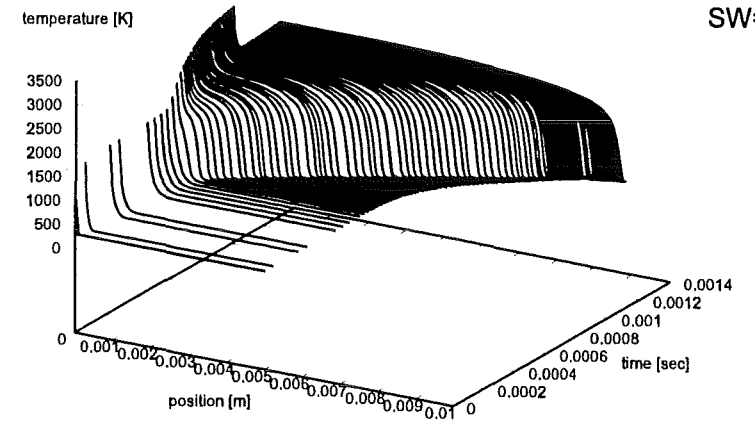
Fig.2: Stoichiometric H_2-air mixture at T_0=425 K



SW=1mm, ST=10µs



SW=0.1mm, ST=10µs



SW=0.05mm, ST=10µs

Fig.3: Stoichiometric H_2-air mixture at T_0 = 450 K

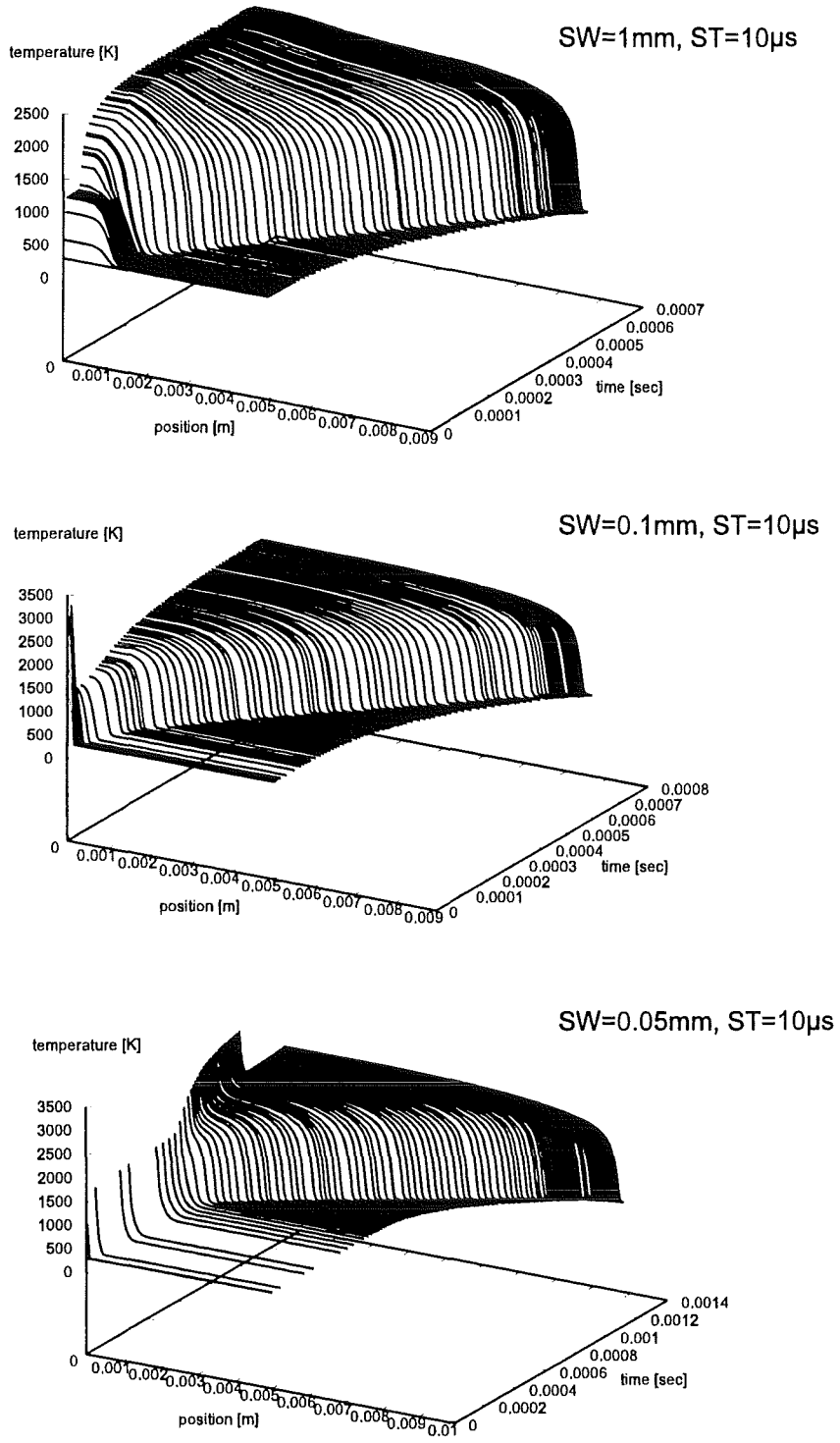


Fig.4: Ignition of stoichiometric H_2-air mixture, 300 K, 1 bar

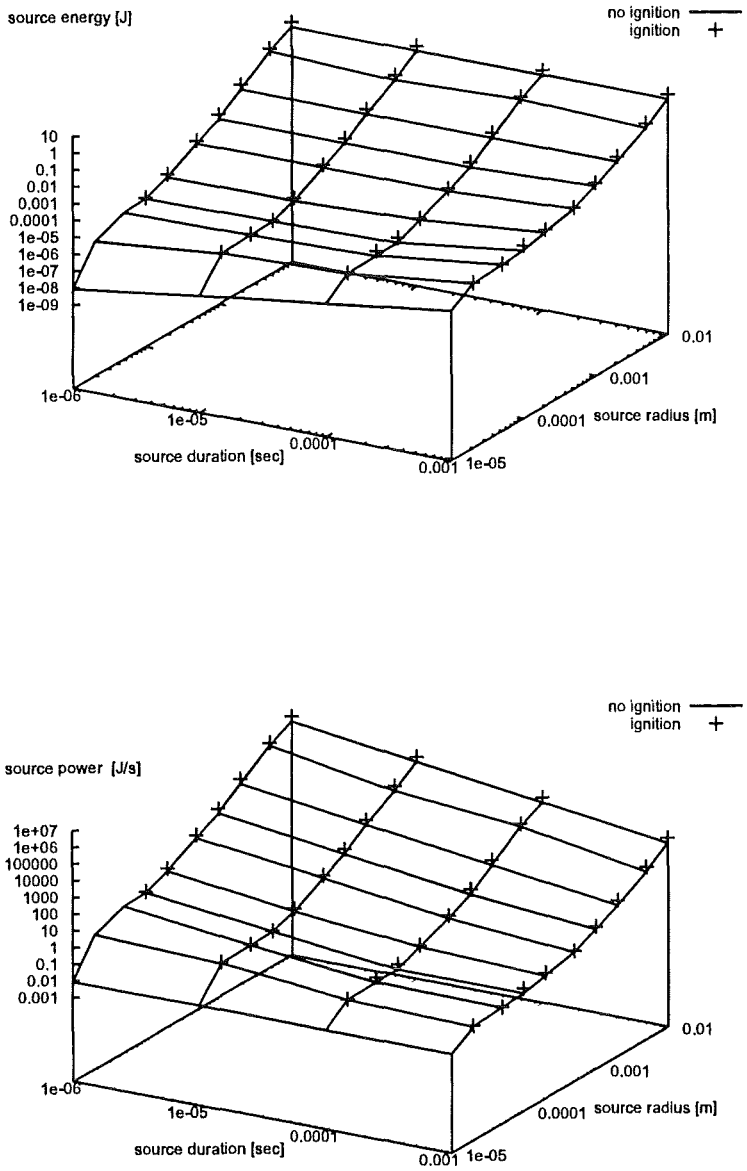


Fig. 5: Ignition of stoichiometric H_2-air mixture, 300 K, 1bar

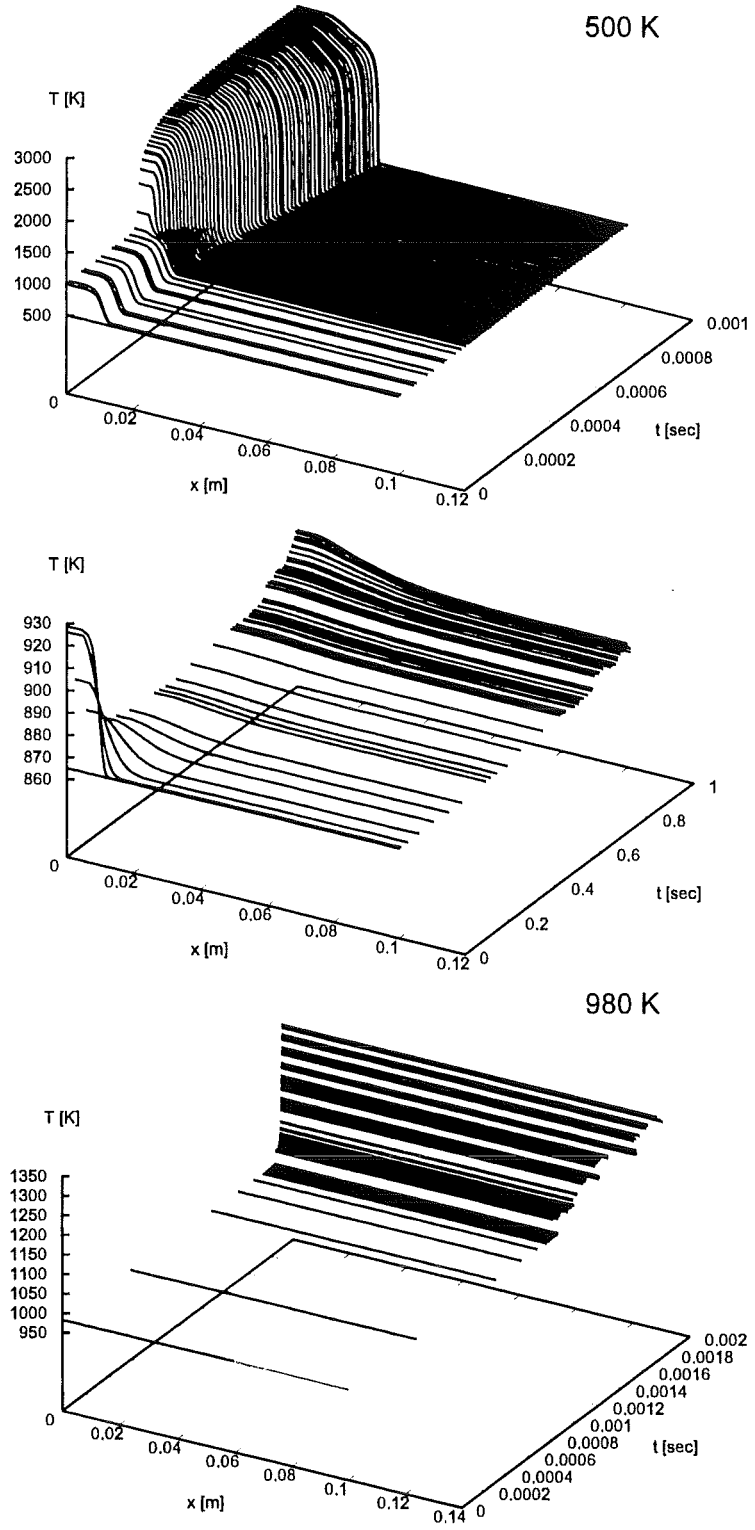


Fig. 6: Ignition of stoichiometric H_2-air mixture, 300 K, 1bar

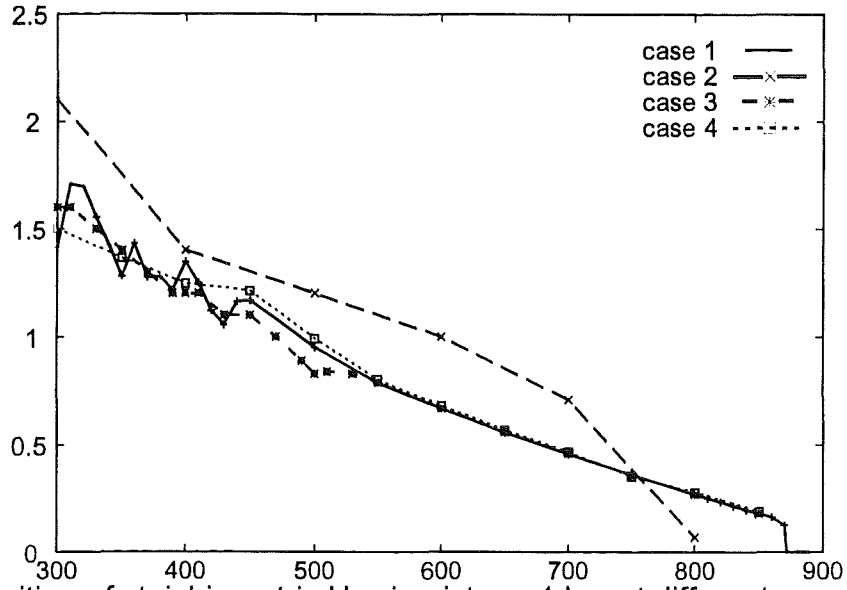


Fig. 7: Ignition of stoichiometric H_2-air mixture, 1 bar at different temperatures

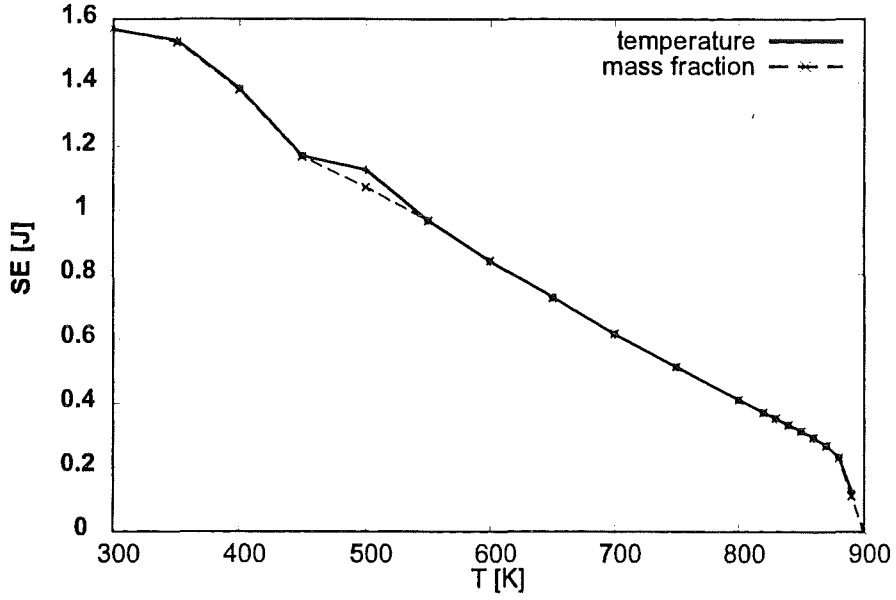


Fig. 8: Ignition energy as function of initial temperature for stoichiometric H_2-air mixture. Variation of model parameters. Parameters are listened in table 4.

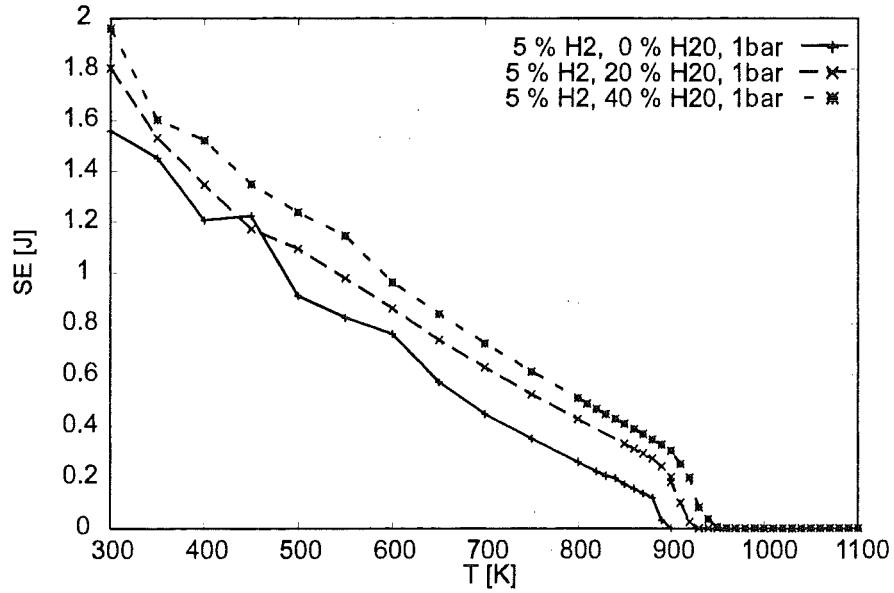


Fig. 9: Ignition energy as function of initial temperature for stoichiometric H_2-air mixture. Comparison of temperature criterion and fuel mass fraction criterion.

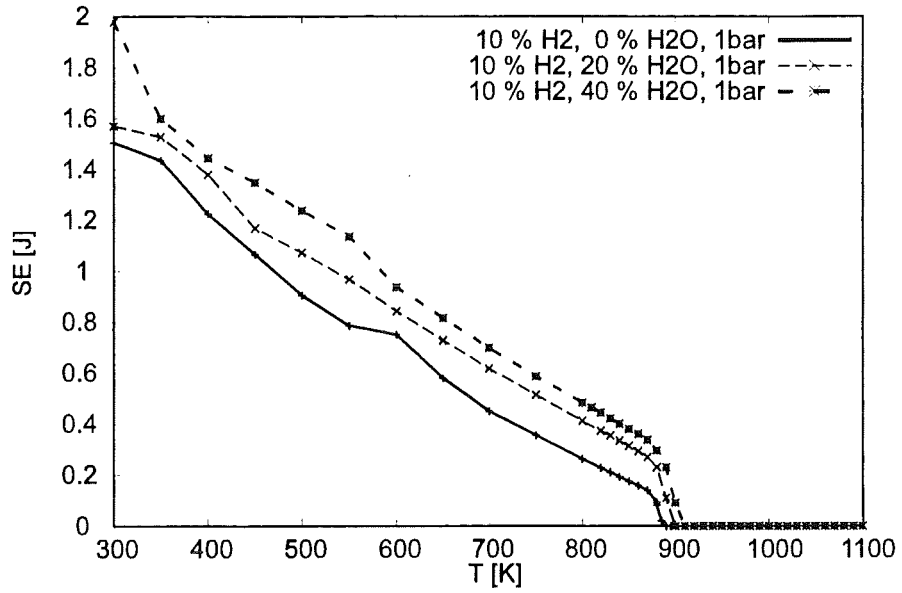
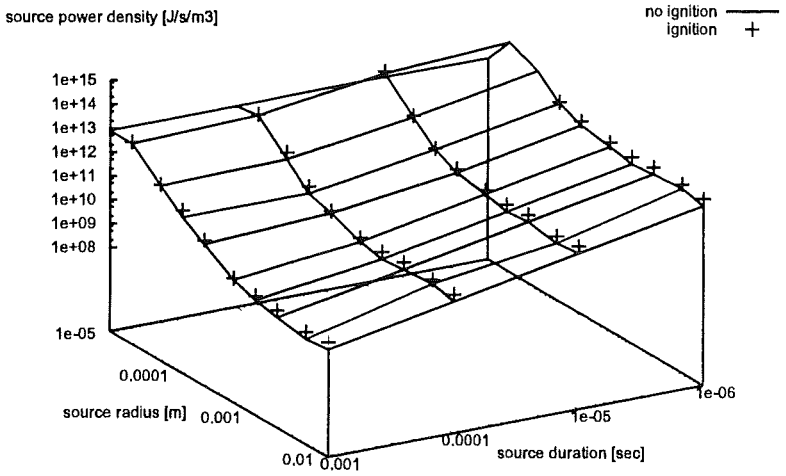


Fig. 10: Ignition energy as function of initial temperature. Variation of steam concentration for 5 % H_2



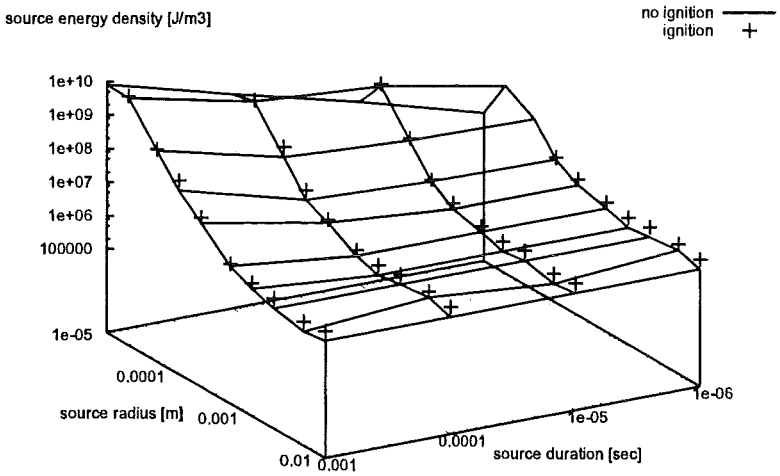
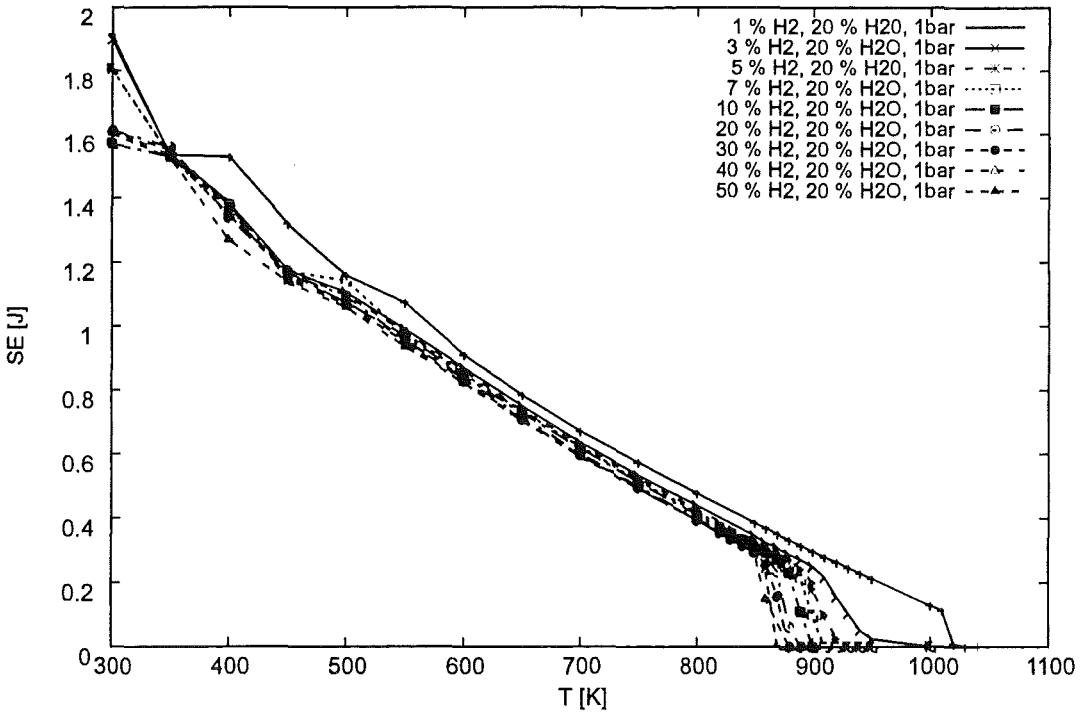


Fig. 11: Ignition energy as function of initial temperature. Variation of steam concentration for 10 % H_2



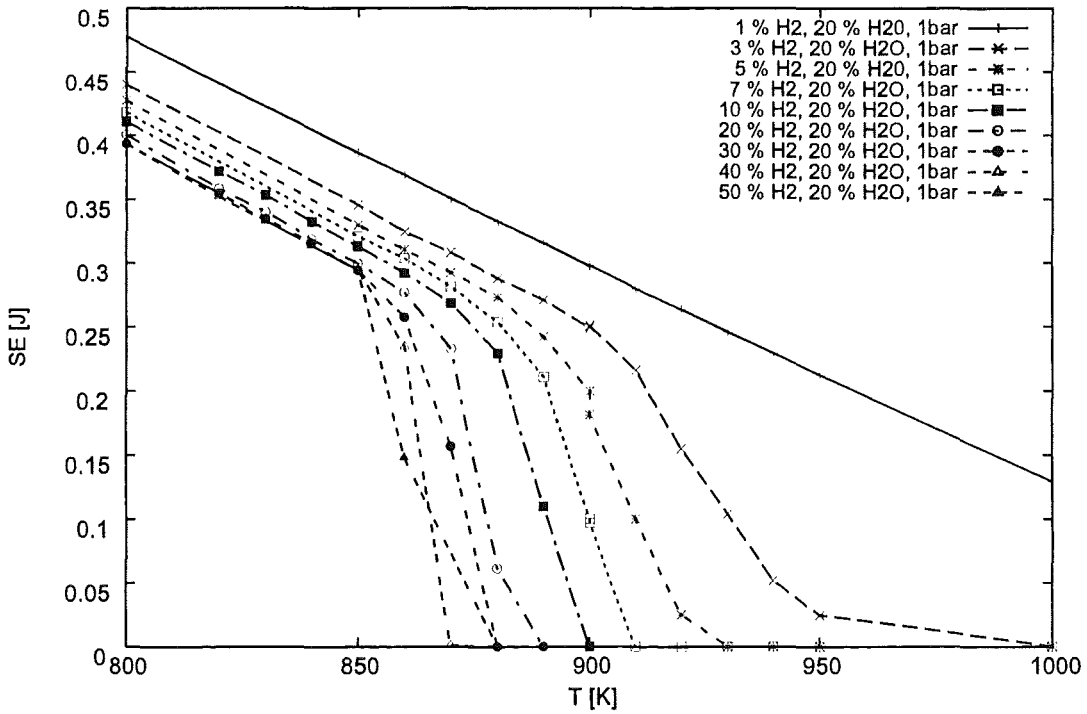


Fig. 12: Ignition energy as function of initial temperature. Variation of fuel concentration for 20% H_2O

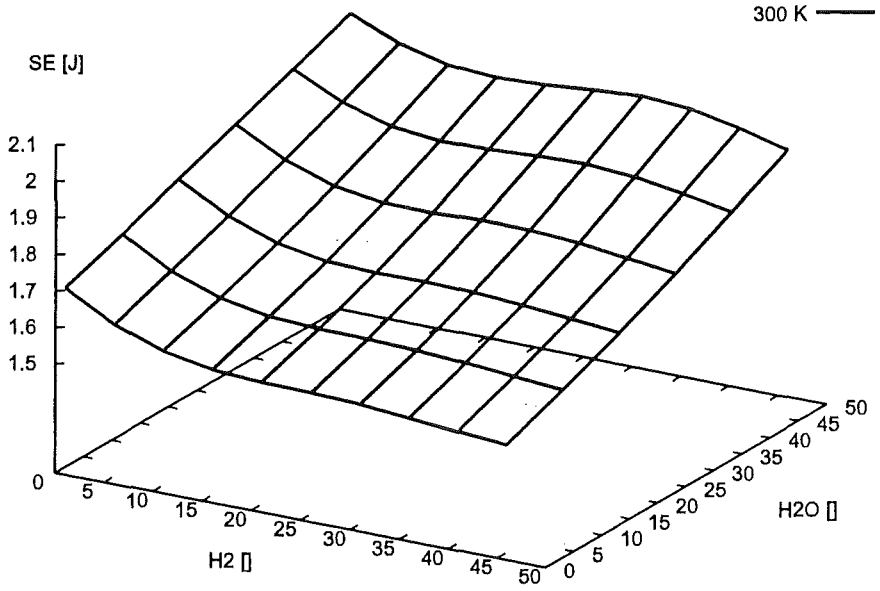


Fig. 13: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature of 300 K

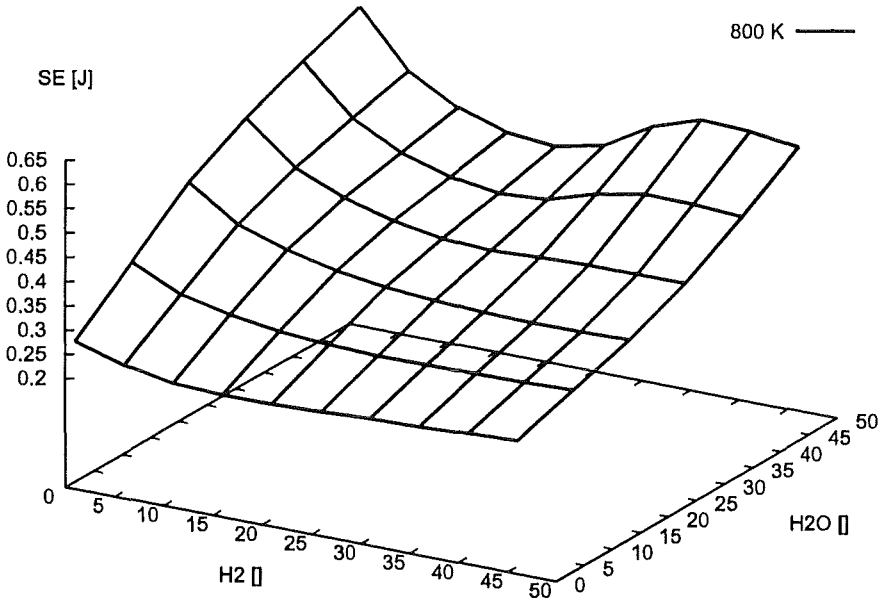


Fig. 14: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature of 800 K

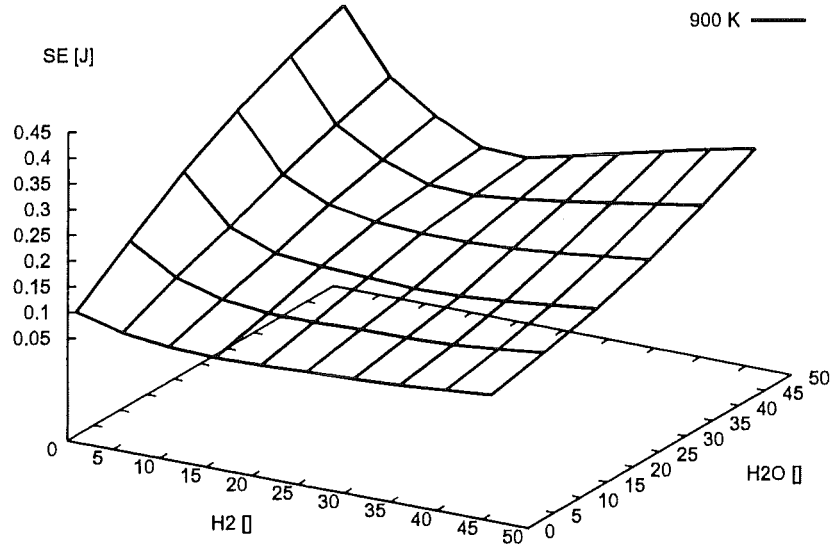


Fig. 15: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature of 900 K

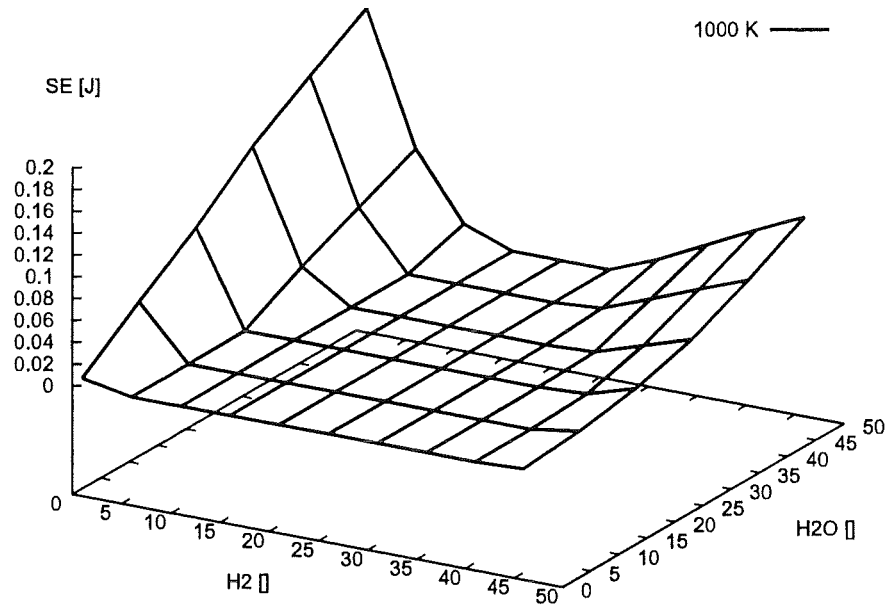


Fig. 16: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature of 1000 K

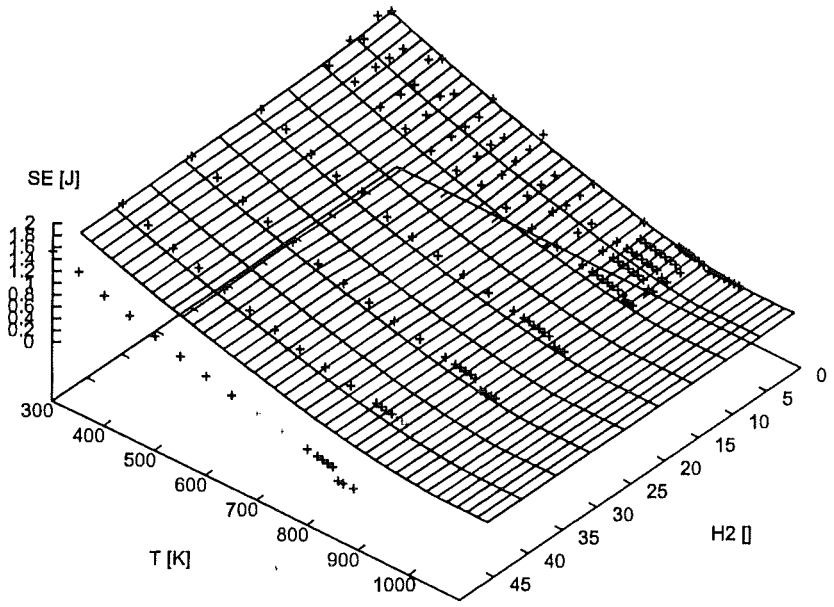


Fig. 17: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature for 0 % steam

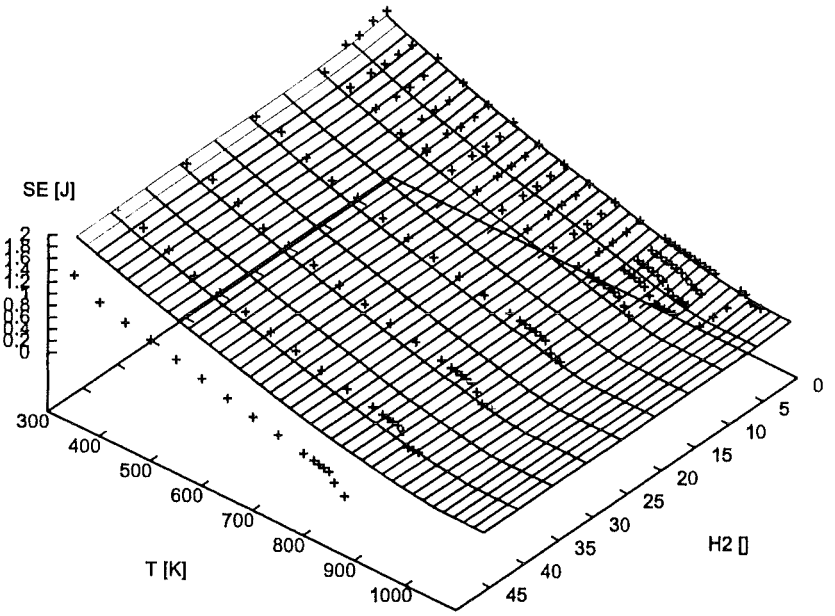


Fig. 18: Fitted values of ignition energy as function of mixture composition for an initial temperature for 20 % steam

VI. Numerische Simulation der turbulenten Verbrennung von vorgemischten Gasen in komplexen 3d-Geometrien

(A. Kotchourko, W. Breitung, IKET)

Abstract

COM3D is a three-dimensional code for turbulent reactive flow simulations in complex 3D-geometries. The Favre averaged Navier-Stokes equations are solved together with different models for turbulence and chemical kinetics. COM3D employs different flow solvers, among them a second order accurate TVD-type solver. Advanced numerical procedures are provided to facilitate the grid generation for complex 3D computational domains. COM3D was validated on experiments performed on different scales, with and without chemical reaction. Generally good agreement was observed for the important physical quantities. The code was used for combustion analysis of different application problems, ranging from small-scale single-vortex-flame interactions up to large reactor containment calculations.

1. Einleitung

Zum Abschluß des zweiten EVU-Siemens-Vertrages wird in diesem Beitrag die COM3D-Programmentwicklung, -verifikation und -anwendung in einem detaillierten Übersichtsbericht zusammengefaßt.

1.1 Problemstellung

Die realistische Berechnung von turbulenten reaktiven Strömungen für wissenschaftliche oder anwendungsbezogene Zwecke erfordert numerische Modelle, die in der Lage sind Strömung, Turbulenz, chemische Reaktion und die komplexe Wechselwirkung dieser Phänomene angemessen zu beschreiben.

Der an sich wünschenswerte Einsatz von theoretisch fortgeschrittenen Modellen, wie z.B. Large-Eddy-Simulation (LES) oder direkte numerische Simulation (DNS) erlaubt aber selbst mit heutigen Hochleistungsrechnern nur in Ausnahmefällen praktische Erkenntnisse. Der gängigste Ansatz beruht deshalb auf vereinfachten Turbulenzmodellen, sog. Reynolds-Spannungsmodellen, kombiniert mit reduzierten Chemiemodellen. Die prinzipiellen Beschränkungen solcher Modellansätze sind wohlbekannt,

aber derzeit besteht keine Alternative, insbesondere wenn es um die Simulation turbulenter Verbrennungen auf industriellem Massstab geht.

Am häufigsten werden heute sog. k-ε-Modelle für die Turbulenz und statistische Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF = probability density function) oder Eddy-Break-Up Modelle für die chemischen Reaktionsraten eingesetzt, obwohl es bisher keine generelle Studie über die Möglichkeiten und Grenzen solcher Ansätze gibt. Andererseits ist es für praktische Anwendungsrechnungen eine sinnvolle Strategie zunächst zugegebenermaßen vereinfachte, aber schnelle numerische Modelle einzusetzen, falls sie hinreichend genaue Ergebnisse liefern, und dort wo sie versagen, auf komplexere Theorien zurückzugreifen.

Die Zielsetzung der hier beschriebenen Arbeiten besteht deshalb darin, die turbulenten Verbrennungsprozesse von wasserstoffhaltigen Brenngasen in komplexen Geometrien in einem weiten Parameterbereich systematisch zu studieren, und zu untersuchen, inwieweit vereinfachte Modelle für die numerische Simulation geeignet sind.

1.2 Klassifikation turbulenter Verbrennungen

Turbulente Verbrennungsprozesse in vorgemischten Gasen werden in der neueren Literatur oft unterschieden nach der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u' und dem turbulenten Makrolängenmaß L_t der Strömung. Dieses sog. Borghi-Diagramm ist in Abb. 1 dargestellt.

Die Turbulenzgrößen u' und L_t werden auf die Geschwindigkeits- und Längenskala der laminaren Verbrennung bezogen, nämlich die laminare Flammengeschwindigkeit S_L und die laminare Flammendicke δ_L. Beide hängen nur von den Stoffeigenschaften des Gasgemisches ab, nicht von den Strömungszuständen. Der so definierte Parameterraum für turbulente vorgemischte Verbrennung wird durch drei dimensionslose Kennzahlen in fünf charakteristische Verbrennungsregimes unterteilt.

Wenn die turbulente Reynoldszahl $Re_t = u'L_t/\nu$ kleiner als 1 ist, liegt eine quasi-laminare Verbrennung vor (ν = Zähigkeit). Die übrigen Bereiche in Abb. 1 werden durch die turbulente Karlovitz-Zahl und Damköhler-Zahl definiert. Die Karlovitz-Zahl beschreibt das Verhältnis von laminarer Reaktionszeit (= δ_L/S_L) und turbulenter Transportzeit der kleinsten Wirbel (l_k/u'_k), der sog. Kolmogorov Wirbel:

$$Ka = \frac{\delta_L / S_L}{l_k / u'_k} \qquad (1)$$

Die turbulente Damköhler-Zahl beschreibt das Verhältnis der größten turbulenten Transportzeit (L_t/u') zur laminaren Reaktionszeit (δ_L/S_L):

$$Da = \frac{L_t / u'}{\delta_L / S_L} \qquad (2)$$

(Aus historischen Gründen sind die Kennzahlen in (1) und (2) leider invers definiert). Die Größe der turbulenten Wirbel in einem turbulenten Strömungsfeld reicht vom Makrolängenmaß L_t bis zum Mikrolängenmaß der kleinsten Wirbel, der sog. Kolmogorovlänge l_k.

Im Bereich 2 von Abb. 1 liegt die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit unter der laminaren Flammengeschwindigkeit. Es treten zwar leichtgewellte, aber in ihrer inneren Struktur noch laminare Flammen auf.

Im Bereich 3 sind die Turbulenzwirbel schon in der Lage, die Flammenfront lokal zu verzögern oder zu beschleunigen. Diese gefaltete Flammen haben auch noch einen lokal laminaren Aufbau, brennen aber in verschiedenen Bereichen wegen Krümmungs- und Dehnungseffekten mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten.

Im Bereich 4 können die kleinsten Wirbel in die Flammenfront eindringen und die dünne, laminare Struktur, die meist im Bereich 0.1 – 1 mm liegt, zu einer verdickten Flammenfront verändern. Im Unterschied zu den Bereichen 2 und 3, in denen die Brenngeschwindigkeit durch Auffalten und Vergrößern der laminaren Flammenoberfläche erhöht wird, geschieht dies im Bereich 4 vor allem durch die schnelleren, turbulenten Transportvorgänge innerhalb der Flammenzone. Mit steigendem u' können zunehmend größere Wirbel den Stoff- und Wärmetransport in der Flamme beschleunigen ($\tau_{turb} = L_t/u'$).

Längs der Linie Da = 1 läuft der turbulente Transport auf der gleichen Zeitskala ab wie die chemische Reaktion. Bei weiterer Beschleunigung des turbulenten Transports (Da < 1) wird reagiertes und unreagiertes Gas rasch vermischt, ehe es dann in einer relativ langsamen Reaktion ausbrennt. Die Brennrate wird jetzt durch die Reaktionskinetik bestimmt und nicht mehr durch Mischungsvorgänge zwischen verbranntem und unverbranntem Gas.

Ziel der hier beschriebenen Untersuchungen ist es einen möglichst weiten Parameterbereich im Borghi-Diagramm modellmäßig mit einem COM3D genannten Programm abzudecken.

2. Modelle des COM3D Programms

Im folgenden werden die Modellgleichungen des COM3D-Programms und die zur Lösung der Gleichungen eingesetzten numerischen Verfahren kurz beschrieben (Abb. 2).

2.1 Gasdynamik und Turbulenz

Das **gasdynamische Modell** umfaßt gemittelte Erhaltungsgleichungen für Gesamtmasse, Impuls, Energie und alle Speziesmassen. Die Zustandsvariablen sind über die Dichte gemittelte Werte (Favre-Mittelung), was eine wesentlich kompaktere Schreibweise als die einfache Zeitmittelung erlaubt. Alle Gleichungen sind skalar bis auf die Impulserhaltung. Die Gleichungen für Energie und Speziesmassen enthalten Terme für die chemische Reaktionsrate. Die Relationen sind in der verkürzenden Tensorform geschrieben: Index t = Zeitableitung, Index x_j = Summe der Ortsableitung nach x,y, und z. Der zweite Term der Gesamtmassenerhaltung bedeutet z.B.

$$(\rho u_j)_{x_j} \equiv \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \qquad (3)$$

In dieser Schreibweise entspricht ein Doppelindex (wie j, x_j) einer Summation über alle drei Raumrichtungen. Die linke Seite der Gleichungen enthält die zeitliche Änderung der jeweiligen Zustandsgröße und den konvektiven Transport. Auf der rechten Seite stehen diffusiver Transport sowie weitere Quellen und Senken, die sich aus Turbulenz und chemischer Reaktion ergeben. Die einzelnen Terme können hier aus Platzgründen nicht weiter erläutert werden. Eine einführende Darstellung ist bei Görner zu finden [1]. Strahlung wird wegen der hier interessierenden kurzen Zeitskalen und der geringen Emissivität von H_2-Luft-Verbrennungsprodukten vernachlässigt.

Das verwendete k-ε **Turbulenzmodell** zählt zu den 2-Gleichungsmodellen, bei denen die Turbulenz mit zwei richtungsunabhängigen (isotropen) Größen, der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε, beschrieben wird. Die beiden Transportgleichungen definieren eine charakteristische Turbulenzlänge ($k^{3/2}/\varepsilon$) und einen turbulenten Zeitmaßstab (k/ε). Das k-ε Modell enthält freie Parameter, die an

stationären, inkompressiblen Strömungen justiert wurden (Tab. 1) [2]. In den k-ε Gleichungen wird die Modellkonstante C_μ zur Berechnung der effektiven turbulenten Viskosität μ_{tur} benutzt.

Tabelle 1: Konstanten des Standard- und RNG-k-ε Turbulenzmodells

	C_μ	C_1	C_2	C_k	C_ε	β
Standard k-ε	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	
RNG k-ε	0.0845	1.42	1.68	0.719	0.719	0.012

Für stark anistrope Strömungsfelder sind mit k-ε Modellen eigentlich keine guten Turbulenzergebnisse zu erwarten. Das k-ε-Modell wird hier aber trotzdem eingesetzt, weil es geringen Rechenaufwand erfordert und weil auch das chemische Reaktionsmodell eine wesentliche Vereinfachung der real ablaufenden Prozesse darstellt.

Als Alternative zum Standard k-ε Modell wurde in COM3D auch das fortgeschrittenere RNG k-ε Modell implementiert (RNG = renormalization group theory). Bei diesem Ansatz ergeben sich die Modellkonstanten aus der Theorie und es kann auch auf kompressible Strömungen angewendet werden (Tab. 1).

2.2 Verbrennung

In der Erhaltungsgleichung für die Spezies α (Gl. 4) muß die gemittelte Reaktionsrate der Spezies $\tilde{\dot{\omega}}_\alpha$ modelliert werden. Dies stellt ein Grundproblem der turbulenten Verbrennungsmodellierung dar, weil eine enge Interaktion zwischen Strömung, Turbulenz und chemischer Reaktionskinetik besteht und eine Entkopplung nicht möglich ist. Diese Wechselwirkung und die starke Nichtlinearität chemischer Reaktionen bezüglich der Temperatur bewirken, dass die mittlere zeitliche Reaktionsrate in einem Fluidvolumen nicht aus den mittleren Zustandsgrößen in diesem Volumen berechnet werden kann:

$$\tilde{\dot{\omega}}(\alpha,T) \neq \dot{\omega}(\tilde{\alpha},\tilde{T}) \qquad (11)$$

Dieses sogenannte Schliessungsproblem der reaktiven Strömungssimulation führt dazu, dass die Zahl der Unbekannten größer ist als die Zahl der Gleichungen. Ein möglicher Ausweg besteht darin, den Reaktionsquellterm durch Einführung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu schließen (englisch: probability density function = PDF).

Wenn diese statistische Funktion F (T, f_i), die von der Temperatur T und den Massenbrüchen f_i abhängt ($i = 1 \ldots N$), bekannt ist, läßt sich die mittlere Reaktionsrate folgendermaßen ausdrücken:

$$\overline{\dot{\omega}}_\alpha = \int\int \ldots \int \dot{\omega}_\alpha (T, f_i) \cdot F(T, f_i)\, dT\, df_1 \cdot df_2 \ldots \cdot df_N \qquad (12)$$

Falls keine nennenswerten Energieverluste aus dem reagierenden Volumensegment auftreten, z.B. durch Abstrahlung oder Wärmeleitung an eine kalte Wand, kann die Temperatur T über die bekannte chemische Reaktion direkt aus den Massenbrüchen f_i bestimmt werden (fortgeschrittene Reaktion entspricht hoher Temperatur). Dann reduziert sich das Problem auf die Bestimmung der PDF für die Massenbrüche alleine. Diese adiabate Annahme kann in erster Nährung insbesondere für schwach strahlende H_2-Luft Flammen in großen Geometrien gemacht werden. Der erste Faktor in Gl. (12) beschreibt die exakte Reaktionsrate bei der vorgegebenen Temperatur und den bekannten Spezieskonzentrationen. Im einfachsten Fall einer bimolekularen Reaktion $A + B \rightarrow AB$ wäre sie z.B. gleich $\rho^2 \cdot K_0 \exp(-\Delta H / RT) \cdot f_A \cdot f_B$.

Es gibt zwei Möglichkeiten für die Bestimmung der PDF. Der theoretische eleganteste Weg ist die Lösung einer PDF-Transportgleichung, die sich aus den Erhaltungsgleichungen für die Spezies ableiten läßt. Dieser Weg erfordert aber sehr zeitaufwändige Monte-Carlo-Rechnungen.

Die zweite Möglichkeit besteht in empirischen Annahmen und in plausiblen Ableitungen aus dem bekannten Verhalten turbulenter Mischungs- und Reaktionsprozesse unter bestimmten Bedingungen, wie z.B. in einfachen Strömungsgeometrien. Auch dieser Weg über (halb)empirische Ansätze ist nicht einfach und mit Unsicherheiten in den abgeleiteten PDF's verbunden. Allerdings hat sich gezeigt, dass die wesentlichen Ergebnisse von turbulenten Verbrennungsimulationen nicht empfindlich von der Form der PDF abhängen.

Es stellt sich die Frage, welche Vorteile dieser statistische Ansatz denn überhaupt bietet. Der wesentliche Punkt liegt darin, dass sowohl in praktischen Anwendungsrechnungen als auch in Experimenten, meist nur zeitliche Mittelwerte wie z.B. Brennstoffverbrauch, Leistung oder Schadstoffbildung eines Verbrennungsprozesses interessieren bzw. gemessen werden. Die Details der turbulenz-induzierten Schwankungen dieser Größen in Raum und Zeit spielen meist keine wichtige Rolle. PDF-Ansätze sind also vorallem dann attraktiv, wenn es ausreicht, die auf vielen

verschiedenen Längen- und Zeitskalen zufällig und chaotisch ablaufenden Wechselwirkungsprozesse zwischen Strömung, Turbulenz und chemischer Reaktion durch ihre Statistik zu beschreiben.

Aus dem generellen PDF-Modell (Gl. 12) lassen sich einfache Spezialfälle ableiten. Wenn z.B. die Chemie sehr viel schneller abläuft als der Mischungsprozess, ist die Wahrscheinlichkeit Volumina mit teilweisem Ausbrand anzutreffen sehr klein. Ein Volumen enthält dann entweder unreagiertes ($f_B = 1$) oder voll durchreagiertes Gas ($f_B = 0$), wobei f_B den Massenbruch des Brennstoffs darstellen soll. In diesem Fall kann die PDF durch zwei Dirac δ-Funktionen dargestellt werden (Abb. 3) und Gl. 12 vereinfacht sich zu

$$\tilde{\dot{\omega}}_\alpha = -\frac{C_{EBU}}{\tau_{tur}} \cdot \tilde{f}_\alpha \left(1 - \frac{\tilde{f}_\alpha}{\tilde{f}_\alpha^0}\right) \qquad (13)$$

Dieser Ansatz für die Reaktionsrate wird als Eddy-Break-Up (EBU) Modell bezeichnet [2], das breite Anwendung in ingenieurmässigen Rechnungen gefunden hat. Demnach wird die Reaktionsrate bei gegebenem Massenbruch $\tilde{f}_\alpha$ von der turbulenten Zeitkonstanten τ_{tur} bestimmt, die sich nach dem k-ε Turbulenzmodell zu $\tau_{tur} = k/\varepsilon$ ergibt. In dieser Näherung hat die Chemie keinen Einfluß auf die Reaktionsgeschwindigkeit und Gl. 13 enthält demzufolge keine reaktionskinetischen Größen. Der langsamere Mischungsprozess, der im wesentlichen durch den Zerfall der Makrowirbel gesteuert wird, bestimmt die Reaktionsrate. Das rein mischungskontrollierte EBU-Modell verliert seine Gültigkeit, wenn turbulente und reaktionschemische Zeitskalen ähnlich werden, oder auch in der Nähe von Wänden wo $k \rightarrow 0$, und $\dot{\omega} \rightarrow$ streben. Die konstante C_{EBU} in Gl. 13 muß im allgemeinen aus Experimenten bestimmt werden. Für nichtreagierende Gaskomponenten α, wie z.B. Stickstoff oder Dampf, wird $C_{EBU} = 0$ gesetzt.

2.2.1 Erweitertes EBU-Modell

Erweiterungen des EBU-Modells wurden in [3] und [4] vorgeschlagen und begründet. Die Autoren zeigten, dass die mittlere Reaktionsrate merklich vom Verhältnis der turbulenten kinetischen Energie k zur laminaren Flammengeschwindigkeit S_L abhängt, wenn beide Größen die gleiche Größenordnung haben (wenn $k^{1/2} \approx S_L$ ist). Die modifizierte Formel für die mittlere Reaktionsrate lautet [4]:

$$\tilde{\dot{\omega}}_\alpha = -\frac{C'_{EBU}}{\tau_{tur}} \left(1 + \frac{4.4}{1 + 3.2 k^{1/2} / S_L}\right) \tilde{f}_\alpha \left(1 - \frac{\tilde{f}_\alpha}{\tilde{f}_\alpha^0}\right) \qquad (14)$$

Dieser Modellansatz berücksichtigt, dass bei langsamer turbulenter Durchmischung ein merklicher Beitrag zur Reaktionsrate durch die laminare Flammenfrontbewegung geleistet wird (erste Klammer in Gl. 14). Bei hochturbulenten Flammen ($k^{1/2} \gg S_L$) führt Gl. 14 auf das klassische EBU-Modell zurück. Gl. 14 stellt daher eine Erweiterung auf reaktive Strömungen mit geringeren Turbulenzintensitäten dar (Bereich 2 in Abb. 1). Dieser Ansatz wurde in COM3D implementiert und an verschiedenen Versuchen verifiziert.

2.2.2 Vorgegebenes β-PDF Modell

Um Bereiche im Borghi-Diagramm abzudecken, die dem einfachen und erweiterten EBU-Modell nicht zugänglich sind, wird derzeit ein PDF-Modell entwickelt, das einen vorgegebenen Funktionstyp, sogenannte β-Funktionen, benutzt, um PDF-Entwicklungen, die in Experimenten gemessen wurden, zu approximieren und mit wenigen Parametern auf anderen Strömungsfelder zu verallgemeinern. Es hat sich erwiesen, dass diese β-Funktionen von ihrer Form her sehr geeignet sind, die PDF's, die sich an verschiedenen Orten und zu verschiedenen Zeiten in reagierenden Strömungen ausbilden, zu simulieren.

Die Arbeiten im IKET beziehen sich zunächst auf ein β-PDF-Modell für zwei Komponenten. Dieses Modell erlaubt vom Ansatz her sowohl die Beschreibung von mischungs- als auch reaktionskontrollierten turbulenten Flammen und sollte daher einen weiten Bereich von leicht gewellten bis hochturbulenten Flammen abdecken (Bereich 2 – 5 im Borghi-Diagramm). Die analytischen Formeln für β-PDF's lauten:

$$F(f) = \frac{\Gamma(\beta_1+\beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} f^{\beta_1-1}(1-f)^{\beta_2-1}, \qquad (15)$$

wobei die Γ-Funktion definiert ist als

$$\Gamma(\beta) = \int_0^\infty x^{\beta-1} e^{-x}\, dx. \qquad (16)$$

Beispiele für β-Funktionen sind in Abb. 4 dargestellt. Für $\beta_1 = \beta_2 \to 0$ nähern sich die β-Funktionen den δ-Funktionen aus Abb. 3, was weitgehend entmischten Systemen entspricht. Für $\beta_1 = \beta_2 = 1$ ergibt sich eine statistische Gleichverteilung aller möglichen Reaktionsfortschritte (Anteil verbranntes Gas) und bei großen β_1, β_2-Werten erhält man eine Gaußverteilung. Mit $\beta_1 \neq \beta_2$ kann die Gaußverteilung nach links oder rechts verschoben werden.

Damit dieser funktionale Ansatz zu physikalisch relevanten Ergebnissen führt, müssen die zwei freien Parameter β_1 und β_2 mit Größen des Strömungsfeldes verknüpft werden. Man kann zeigen, das eine physikalische sinnvolle Modellierung mit β-Funktionen z.B. mit der folgenden Definition möglich ist:

$$\beta_\alpha = f_\alpha \left(\frac{f_\alpha(1-f_\alpha)}{\widetilde{f''^2_\alpha}} - 1 \right), \quad \alpha = 1,2 \qquad (17)$$

Gl. 17 verknüpft die mathematischen Parameter der β-Funktion β_1 und β_2 mit den Mittelwerten f_α und der Varianz $\widetilde{f''^2_\alpha}$ der Reaktionsfortschrittsvariablen f_1, bzw. f_2. Die Varianz in den Fortschrittsvariablen α ist ein Maß für die Turbulenzintensität in der Strömung. Hohe Turbulenz bewirkt gute Durchmischung und eine kleine Varianz bei den Reaktionszuständen, z.B. überall ähnlichen Brennstoffabbrand.
Weiterführende Theorien zeigen, daß auch die Varianz $\widetilde{f''^2_\alpha}$ einer allgemein gültigen Transportgleichung für skalare Größen in einem Strömungsfeld genügen muß:

$$(\bar{\rho}\widetilde{f''^2_\alpha})_t + (\bar{\rho}\tilde{u}_j\widetilde{f''^2_\alpha})_{x_j} = (\frac{\mu_{tur}}{C_{f''_\alpha}}\widetilde{f''^2_\alpha}_{x_j})_{x_j} + 2\frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}}(\widetilde{f}_{\alpha x_j})^2 - 2\frac{\epsilon}{k}\bar{\rho}\widetilde{f''^2_\alpha} + 2\bar{\rho}\widetilde{\dot{w}_\alpha f''_\alpha}. \qquad (18)$$

Die letzte Gleichung ergibt zusammen mit den oben beschriebenen Erhaltungs- und Modellgleichungen für Masse, Energie, Impuls, Turbulenz und chemische Reaktion ein geschlossenes Gleichungssystem, das numerisch gelöst werden kann.

2.3 Thermodynamik

Im COM3D-Programm wird die ideale Gasgleichung zusammen mit hochgenauen Fitfunktionen für die Wärmekapazitäten und Enthalpien der Spezies benutzt [5]. Derzeit sind vier Komponenten berücksichtigt: H_2, O_2, H_2O und N_2. Die thermodynamischen Daten wurden aus den JANAF-Tabellen entnommen.

2.4 Numerische Details und Zusatzprogramme

Die numerische Simulation turbulenter Strömungen stellt besonders hohe Anforderungen an den numerischen Löser, der den Kern des numerischen Programms darstellt, weil Geschwindigkeitsgradienten mit Turbulenz-erzeugung verbunden sind (1. Term S, rechte Seite von k und ε Gleichungen 7 und 8, Abb. 2). Der Löser darf deshalb einerseits keine nicht-physikalischen Oszillationen, d.h. Turbulenz einführen, und andererseits keine zu starke numerische Glättung der Geschwindigkeitsgradienten bewirken.

In der Entwicklungsphase des COM3D-Programms wurden deshalb verschiedene numerische Lösungsalgorithmen an typischen Testproblemen untersucht. Als am besten geeignet für turbulente Verbrennungen mit einem großen Bereich von unterschiedlichen Geschwindigkeiten, haben sich sog. TVD Verfahren erwiesen (Total Variation Diminishing). Sie besitzen ein hohes Auflösevermögen für Stoßfronten und Kontaktflächen (beides Dichtesprünge), sind effektiv zu implementieren, und können weitgehend vektorisiert werden. Neben dem TVD-Löser stehen auch weitere Lösungsverfahren im COM3D-Code zur Verfügung (Abb. 5). Alle Löser sind für kubischen Rechengitter geschrieben, weil diese kurze Rechenzeiten pro Zeitschritt ermöglichen und keine numerischen Anisotropien in die berechneten Strömungsfelder einbringen.

In komplexen 3D-Problemen ist die visuelle Eingabe und Ausgabe eine absolute Notwendigkeit. Es ist z.B. praktisch unmöglich die Geometrie und die Anfangsbedingungen für das Reaktorproblem in Abschnitt 5 mit ca. 2.000.000 Rechenzellen Punkt für Punkt einzugeben. Auch die Kontrolle, Interpretation und Repräsentation von 3D-Strömungsrechnungen erfordert eigene grafische Methoden. Da die offen oder kommerziell verfügbaren Grafiktools den speziellen COM3D-Anforderungen nur schlecht genügen, wurde ein Verbund von eigenen Grafikprogrammen entwickelt.

Das GIN-Programm gestattet dem Benutzer komplexe Geometrien (z.B. Abb. 17) durch Kombination von geometrischen Grundformen wie Platte, Quader, Kugel, Zylinder oder Ellipsoid in beliebiger Weise aufzubauen. Jeder so definierte Raumbereich kann als Festkörper oder Gasvolumen spezifiziert werden. Die Festkörper insgesamt definieren die geometrischen Randbedingungen für die Lösung der gasdynamischen Gleichungen in den Gasvolumina. Das GIN-Programm erzeugt entweder einen Binärfile oder einen File für die graphische Verarbeitung der geometrischen Daten mittels einer speziellen Geometriedarstellungssprache. Beide Files können vom COM3D Code interpretiert werden.

Die COM3D Ausgabe besteht aus einer Realzeit-Grafik und Dateien für Post-Processing (Abb. 5). Die On-line Darstellung erlaubt die ständige Kontrolle einer Simulationsrechnung was für Test- und Produktionsläufe sehr wichtig ist. Es wurde besonderer Wert darauf gelegt, dass die On-line Grafikfunktion die Programmausführung nicht merklich verlangsamt.

Dazu wurden ein Programmkomplex COM3D-G3_SERV3-G3 nach dem Client-Server-Prinzip entwickelt, wobei der Teil G3-SERV3 als Server auf Anfragen von den beiden anderen Teilen COM3D (für Ausführung) und G3 (für Graphik) wartet und reagiert.

Jeder Programmteil kann auf einem separaten Rechner innerhalb eines heterogenen Netzwerkes laufen, COM3D und G3-SERV3 z.B. auf einem Hochleistungsrechner und G3 auf einer lokalen Workstation. Dadurch belastet der Grafikprozess die Rechenausführung nur für die sehr kurze Zeit der Datenübertragung. Das Grafikmodul G3 erlaubt „on-line" Darstellung aller berechneten Variablenfelder wie Druck, Dichte, Geschwindigkeiten usw. in drei wählbaren Raumflächen (x-y, x-z, y-z) mittels einer Farbpalette. Die berechneten Daten können auch weiterverarbeitet werden, z.B. für ein numerisches Schlierenbild (grad ρ) wie in Abb. 15.

Für 3D-Post-Processing können die Ausgabedaten mit verfügbaren 3D-Visualisierungsprogrammen wie AVS oder Open DX weiterverarbeitet werden.

Die derzeitige COM3D-Vesion ist für den Einsatz auf massiv parallelen Rechnern vorgesehen und basiert auf MPI (Message Passing Interface) Routinen. Mit Hilfe von speziellen C++-Routinen wird eine blockweise Berechnung vorgenommen. KeLP-Module unterstützen die Datenzerlegung und Management der irregulären Kommunikation. Testläufe mit bis zu 60 Prozessoren auf einer SP2-Maschine ergaben eine fast lineare Skalierung. Für die hier interessierenden großen Zellenzahlen werden weniger als 10 % der Prozessorleistungen für Kommunikation verbraucht.

Alle Programmteile des COM3D-Systems sind in C oder C++ geschrieben, wobei der graphische Teil auf Standard X11-Bibliotheken zurückgreift, die auf fast allen UNIX-Rechnern zur Verfügung stehen. Bisher wurde die Parallelversion von COM3D auf den folgenden Maschinen und Betriebssystemen implementiert:

- IBM SP2, AIX 4.2
- VPP, Unix V4.1
- Intel Pentium, Linux und Free BSD.

Die Implementierung auf einer Cray T3E ist in Vorbereitung. Eine Vektorversion von COM3D wurde für das System Cray J90 Unicos 9.0 entwickelt und implementiert.

3. Versuche zur turbulenten Strömung und Verbrennung

Für die detaillierte Verifikation der numerischen und physikalischen Modelle des COM3D-Programms werden experimentelle Daten in einem möglichst weiten Bereich von Gemischzusammensetzungen, geometrischen Konfigurationen und Abmessungen benötigt. Um die verschiedenen Modelle möglichst unabhängig voneinander testen zu können, wurden transiente Strömungsversuche ohne und mit Verbrennung gemacht. Da die geometrische Skala einen wesentlichen Einfluß auf die Energetik von

Verbrennungsprozessen haben kann, wurden die Verbrennungsversuche auf mittlerer und großer Längenskala durchgeführt (12 m bzw. 60 m).

3.1 FZK 12 m-Rohr

Zwei verschiedene Experimentserien wurden in der Rohrversuchsanlage des FZK (Abb. 6) durchgeführt.

1. Experimente zur Turbulenzerzeugung und –dissipation in Luft in einer teilversperrten Geometrie, und
2. Experimente zur turbulenten Verbrennung von mageren H_2-Luft-Gemischen in teilversperrten Geometrien.

Ziel ist mit diesen Daten die Modellverifikation für Turbulenz und turbulente Verbrennung in zwei sequentielle Schritte zu trennen, nämlich zunächst Turbulenz allein und dann Turbulenz gekoppelt mit chemischer Reaktion zu untersuchen.

3.1.1 Transiente Turbulenzversuche

Zur Erzeugung von transienten Strömungsfeldern mit Turbulenz wurde das 12 m-Rohr als Stoßrohr betrieben, bestehend aus einem 3 m langen Hochdruckteil und einem 9 m langen Niederdruckteil (Abb. 7). Der Hochdruckteil wurde mit He gefüllt. Der Niederdruckteil enthielt Luft bei 1 bar und eine 6 m lange Hindernisstrecke aus 12 Ringen, die 30 % des Rohrquerschnitts versperrten. Nach Versagen der Berstmembrane, das in den gezeigten Versuch bei einem He-Fülldruck von etwa 5 bar auftritt, läuft eine Stoßwelle in die Hindernisstrecke und verliert dort Amplitude und Geschwindigkeit durch Turbulenzerzeugung und Reflektionen. Das transiente Strömungsfeld in diesem Versuch ähnelt den Strömungsverhältnissen, die sich vor einer schnellen turbulenten Flamme ausbilden. Die gemessenen Drucksignale entlang der Rohrwand (Abb. 7) können dann mit Simulationsrechnungen verglichen werden und erlauben eine separate Überprüfung der Turbulenzmodelle unter inerten Bedingungen, ohne Überlagerung durch einen Verbrennungsprozess.

3.1.2 Turbulente Verbrennung

Die Versuchsgeometrie für turbulente Verbrennungen ist in Abb. 8 schematisch dargestellt. Sie besteht aus dem beidseitig geschlossenen Versuchsrohr, das einen inneren Durchmesser von 35 cm hat, und einer eingebauten Hindernisstrecke aus ringförmigen Blenden. Die eingefüllte H_2-Luft-Mischung wird an einem Rohrende mit einer Glühkerze

gezündet. Von dort breitet sich zunächst eine langsame quasi-laminare Flamme aus, die aber durch Turbulenzentwicklung an den Hindernissen spontan auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigen kann. Die Versuchsinstrumentierung umfaßt Druckaufnehmer, Infrarot-Photodioden und Ionisationssonden.

Die beiden wesentlichen Versuchsparameter sind die Wasserstoffkonzentration (Chemie) und der Versperrungsgrad der Strömungshindernisse (Turbulenz). Der Versperrungsgrad BR (= blockage ratio) wird definiert als $BR = 1 - d^2/D^2$, wobei d der Öffnungsdurchmesser der Hindernisse ist und D der innere Rohrdurchmesser. Der Versperrungsgrad wurde durch Einsatz verschiedener Ringsätze geändert. Der Abstand zwischen zwei Hindernissen war in allen Versuchen 50 cm. Dieser Wert wurde ausgewählt, um den selbstverstärkenden Effekt der Turbulenzerzeugung möglichst effizient mit jedem Ring auszunutzen. Bei wesentlich größerem Abstand fällt die Flammengeschwindigkeit ab, ehe das nächste Hindernis erreicht ist, bei deutlich kleineren Werten brennt das Gas radial zwischen zwei Hindernissen zu langsam aus, im Vergleich zum unversperrten Kernbereich entlang der Rohrachse. Die Versuche wurden mit BR = 0,3, 0,6 0,75 und 0,90 sowie H_2-Konzentrationen zwischen 10 und 20 % durchgeführt.

Vor jedem Versuch wurde das Rohr auf einen Restdruck < 1 mbar evakuiert und dann mit einer H_2-Luft Mischung auf 1 bar aufgefüllt. (Einige Versuche wurden auch im Bereich 0,5 – 3 bar durchgeführt). Die gewünschte H_2-Konzentration wurde mit geeichten Massendurchflussmessern eingestellt. Nach dem Füllvorgang wurde die H_2-Konzentration im Rohr mit zwei anderen unabhängigen Methoden überprüft. Die Genauigkeit liegt bei $\pm$ 0.1 Vol.% H_2. Die H_2-Gehalte wurden so gewählt, daß das ganze theoretisch mögliche Verbrennungsspektrum von langsamen Deflagrationen bis zu Detonationsübergängen im Rohr beobachtet werden konnte. Beispiele zu Messergebnisse wurden schon früher dargestellt [6]. Ein neueres Ergebnis wird in Abb. 12 mit COM3D Rechnungen verglichen.

3.2 RUT-Anlage

Die Notwendigkeit für (teure) Großversuche beruht darauf, dass turbulente Verbrennungen mit zunehmender Dimension energetischer und unter größerer Lastentwicklung ablaufen. Die Ursache liegt in dem positiven Rückkopplungsmechanismus zwischen Turbulenzerzeugung und Verbrennungsrate. In einer größeren teilversperrten Geometrie besteht mehr Weg und Zeit für die turbulenzgetriebene Flammen-

beschleunigung, es werden dadurch bei hinreichender Gasreaktivität höhere Geschwindigkeiten und Drücke erreicht. Auch die Turbulenzintensität wächst mit der geometrischen Skala, weil die turbulente Reynoldszahl $Re_t = u'L_t/\nu$ mit dem turbulenten Makrolängenmass L_t zunimmt, das wiederum mit der charakteristischen Dimension der Strömungshindernisse wächst. Die physikalischen Modelle müssen deshalb auch an Großexperimenten verifiziert werden. Erst dann kann man von einem vorhersagefähigen Modell sprechen, das die erforderliche Skalierungsfähigkeit bis hin zu großen Reaktordimensionen (50 m) besitzt.

In der RUT-Anlage wurden verschiedene Versuchsserien in reaktortypischer Dimension durchgeführt. Die Anlage besteht aus drei parallelen Versuchskanälen, von denen der stärkste für H_2-Luft- und H_2-Luft-Dampf Experimente umgebaut wurde.

Abb. 9 zeigt eine Prinzipskizze der Versuchsanordnung. Der linke, 34 m lange Kanal war mit großen Beton-Hindernissen ausgestattet und über eine Öffnung mit einer großen Kavität verbunden (ca. 150 m^3 Volumen). Die Kavität und der rechte 2. Kanal enthielten keine Strömungshindernisse mehr. Das Gesamtvolumen betrug 480 m^3. Nach der Füllung wurde die homogene Gasmischung am linken Ende des 1. Kanals mit einem schwachen Funken gezündet. Im Auftrag von FZK wurden Vebrennungsversuche mit verschiedenen Versperrrungsgraden, verschiedenen H_2-Luft [7] und H_2-Luft-Dampf Gemischen [8, 9] durchgeführt. Der Ausgangsdruck betrug 1 bar und die Anfangstemperatur $\approx$ 10 °C bei H_2-Luft- und $\approx$ 100 °C bei H_2-Luft-Dampfversuchen.

Die RUT-Versuche, die für die Codevalidierung genauer ausgewertet wurden, sind in Tabelle 2 aufgeführt. Damit sind detaillierte experimentelle Daten zu allen hier interessierenden Verbrennungsformen auf großer Skala verfügbar. Die Versuche mit trockenen H_2-Luft Gemischen (RUT 13, 17, 21, 23) erlauben speziell den Einfluß der Hindernisgeometrie zu untersuchen (BR = 0 %,30 % und 60 %).

Die Versuchsserie mit H_2-Luft-Dampf Mischungen ermöglicht vor allem den Einfluß der erhöhten Temperatur und der verschiedenen H_2/Dampf-Gehalte über einen weiten Bereich mit den theoretischen Modellen zu vergleichen. Diese Versuche decken auch die verschiedenen Verbrennungsregimes ab. STM-2, -6, und -7 ergaben schnelle turbulente Flammen mit Maximalgeschwindigkeiten von 680 bis 830 m/s, während bei Versuch STM-9 nur maximal 250 m/s auftraten. Die RUT Experimente zeigten, dass im Vergleich zu den entsprechenden Versuchen auf mittlerer Skala eindeutig höhere Flammengeschwindigkeiten und größere dynamische Drucklasten auftreten.

Insgesamt haben die Testserien im FZK-Rohr (12 m Länge) und in der RUT-Anlage (60 m) eine neue, sehr ausführliche Datenbasis für die Verifikation von turbulenten Verbrennungsmodellen ergeben.

Tabelle 2 Parameter der großskaligen Verbrennungsversuche in der RUT-Anlage, die zur Verifikation von turbulenten Verbrennungsmodellen im Detail ausgewertet wurden.

Versuch	Mittlere H_2-Konz. (Vol.% trocken)	Versperrungs-grad	Mittlere Dampfkonz. (Vol.%)	Max. Flammenge-schwindigkeit (m/s)
RUT 13	11,0	0,3	-	210
RUT 17	11,0	0,3	-	440
RUT 21	12,5	0,6	-	650
RUT 23	11,2	0,6	-	340
STM 2	14,7	0,3	14,7	680
STM 7	17,5	0,3	25,7	830
STM 6	29,6	0,3	45,0	780
STM 9	10,1	0,3	6,6	250

4. Programmverifikation

Die verschiedenen physikalischen und numerischen Einzelmodelle des COM3D-Programms wurden schrittweise, möglichst weitgehend entkoppelt von anderen Teilmodellen, an bekannten numerischen und experimentellen Ergebnissen überprüft.

4.1 Gas- und Thermodynamik

Die verwendeten thermodynamischen Daten und numerischen Lösungsverfahren wurden anhand eines detailliert untersuchten Standardproblems getestet. Es handelt sich dabei um eine stationäre Überschallströmung (Mach 3), die in einem 2D-Kanal gegen eine Stufe strömt, wobei komplexe Strömungsmuster und bestimmte wohlbekannte Variablenwerte auftreten (Abb. 10). Die mit COM3D berechneten Werte für den Staudruck an der Stufe, für die Lage und Krümmung der linken Stoßfront, für die Lage des oberen Triplepunkts und der dort entspringenden Scherschicht, sowie das

berechnete Stoßwellensystem stromabwärts, stimmen gut mit den bekannten Literaturwerten überein.

Abb. 10 zeigt außerdem, dass das hier verwendete numerische Verfahren (TVD) auch bei relativ grober Gitterauflösung noch eine stabile und gut definierte Lösung für das Strömungsfeld liefert.

Als Test zur Thermodynamik der Verbrennung wurde eine vollständige adiabate Verbrennung bei konstantem Volumen mit COM3D berechnet und mit den Ergebnissen des Standardprogramms STANJAN [10] verglichen (siehe Tabelle 3). Der Testfall bezieht sich auf eine H_2-Luft-Mischung mit 15 Vol.% Wasserstoff. Tabelle 3 zeigt eine gute Übereinstimmung der berechneten Zustandsdaten. Die um 4 % geringere Temperatur von COM3D kann als Teilkompensation für die in COM3D vernachlässigten Wärmeverluste angesehen werden.

Tabelle 3 Vergleich der mit COM3D und STANJAN [10] berechneten Zustandsdaten bei adiabater, isochorer Verbrennung einer 15 Vol.% H_2-Luft-Mischung

	COM3D	**STANJAN**
Druck (Pa)	$5{,}42 \times 10^5$	$5{,}66 \times 10^5$
Temperatur (K)	1725	1799
Dichte (kg/m^3)	1,0144	1,0147

4.2 Turbulenz

Das unter 3.1.1 beschriebene Experiment zur transienten Turbulenzerzeugung in einer versperrten Geometrie wurde mit drei verschiedenen Ansätzen simuliert:

1. kein Turbulenzmodell, reine Euler-Gleichungen ohne molekulare Transporteffekte,
2. k-ε Turbulenzmodell, und
3. RNG k-ε Turbulenzmodell.

Für die Rechnungen wurde ein Gitter aus etwa 390.000 kubischen Rechenzellen mit 1 cm Kantenlänge benutzt.

Abb. 11 zeigt einen Vergleich zwischen derart berechneten und gemessenen Druckdaten. Ohne Turbulenzmodell ist keine befriedigende Übereinstimmung zu erreichen. Das RNG/k-ε-Modell liefert dagegen recht gute Ergebnisse. Die Rechnung mit dem Standard k-ε-Modell ergab nur geringe Unterschiede zum RNG-Modell und wurde

deshalb in Abb. 11 nicht zusätzlich dargestellt. Auch der Vergleich zwischen berechneten und gemessenen Ausbreitungsgeschwindigkeiten zeigte gute Übereinstimmung.

Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass beide Turbulenzmodelle für die Simulation der hier interessierenden schnellen transienten Gasströmungen in komplexen Geometrien eingesetzt werden können.

4.3 Turbulente Verbrennung

Das COM3D-Modell für turbulente Verbrennung wurde an den oben beschriebenen Versuchen auf mittlerer und großer Skala überprüft (FZK-Rohr und RUT-Anlage).

4.3.1 FZK-Rohrversuche

Das erweiterte EBU-Modell für die Reaktionsrate (Gl. 14) enthält die a priori nicht bekannte Konstante C'_{EBU}. Für eine Reihe von Rohrversuchen mit verschiedenen Versperrungsgraden und H_2-Konzentrationen wurde deshalb C'_{EBU} durch Testrechnungen so bestimmt, dass optimale Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten Drücken und Flammengeschwindigkeiten erreicht wurde (Tab. 4). Es ist bemerkenswert, dass alle Versuche durch sehr ähnliche C'_{EBU}-Werte gut reproduziert werden können (C'_{EBU} = 5 – 8). Das gilt sowohl für die anfängliche Beschleunigungsphase kurz nach der Zündung (0 – 0.01 s) als auch für Details der späteren Verbrennung, wie z.B. Geschwindigkeiten und Drücke der einlaufenden, reflektierten und transversal laufenden Welle [11]. Ein Beispiel für die gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung ist in Abb. 12 gegeben (15 Vol.% H_2 in Luft, 30 % Versperrungsgrad, C'_{EBU} = 6).

Das erweiterte EBU-Modell erlaubt Simulation von turbulenten H_2-Verbrennungen über einen weiten Bereich von maximalen Flammengeschwindigkeiten (200 – 1200 m/s), Versperrungsgraden (30 – 90 %) und H_2-Konzentrationen (11 – 20 Vol.%).

Tabelle 4 Werte für C'_{EBU} aus turbulenten Verbrennungsversuchen mit H_2-Luft Gemischen im FZK-12-m Rohr

Versperrungsgrad	Wasserstoffkonzentration (Vol.%)			
	20	15	12	11
0,30	6,0	6,0	4,9	5,5
0,45	6,0	6,0	5,0	5,5
0,60	6,0	6,0	keine Daten	keine Daten
0,90	keine Daten	8,0	7,0	7,0

Alle Versuche, instabil brennende Mischungen, wie z.B. 10 % H_2 mit 30 % BR zu simulieren, schlugen fehl. Diese energetisch relativ schwachen Gemische zeigen nach einer ersten Beschleunigungsphase lokale Löschvorgänge oder sogar globales, völliges Erlöschen der Verbrennung, wenn die Turbulenz hinreichend hohe Werte erreicht hat. Da das EBU-Modell keine Löschvorgänge berücksichtigt, kann dieses langsame, instabile Verbrennungsregime nicht mit diesem Ansatz abgedeckt werden.

Die beschriebenen Rechnungen für die Rohrversuche erlauben den Gültigkeitsbereich des erweiterten EBU-Modells im eingangs vorgestellten Borghi-Diagramm mit Hilfe von rechnerisch ermittelten turbulenten Reynoldszahlen ($Re_t = u'L_t/\nu$) und Damköhlerzahlen (τ_{tur}/τ_{chem}) abzuschätzen (Abb. 13). Es ergeben sich die Wertebereiche $10^2 < Re_t < 10^6$ und etwa $10^1 < Da < 10^3$, die in Abbildung 13 blau dargestellt sind. Dieser Parameterbereich deckt einen nennenswerten Teil der für verbrennungstechnische Anwendungen interessierenden Verbrennungsregimes mit gefalteten Flammen ab (rote Linien). Die vom erweiterten EBU-Modell nicht erfaßten Bereiche mit $Da < 10^1$ sollen mit dem oben beschriebenen PDF-Ansatz beschrieben werden, der derzeit entwickelt wird.

4.3.2 RUT-Anlage

Das erweiterte EBU-Modell mit den C'_{EBU} Werten aus Tabelle 3 wurde auf die Großversuche in der RUT-Anlage angewendet, um die geometrische Skalierfähigkeit des Modells zu testen.

Die Versuchsgeometrie wurde mit relativ großem Detaillierungsgrad abgebildet, unter Verwendung von kubischen Rechenzellen mit 12,5 cm Kantenlänge (insgesamt $\approx$ 1.100.000 Rechenzellen). Für die numerische Simulation wurden die leicht orts-abhängigen Versuchsdaten für Temperatur, Wasserstoff- und Dampfkonzentration auf ortsunabhängige Mittelwerte gesetzt.

Abb. 14 zeigt als Beispiel den Vergleich von Rechenergebnissen und Messdaten für Versuch STH-6 (45 % Dampf in stöchiometrischer H_2-Luft Mischung). Die Übereinstimmung ist sehr befriedigend, wenn man berücksichtigt, dass die Rechnung keine freien Parameter enthielt (C'_{EBU} entsprechend Tab. 2). Sowohl die anfangs langsame Deflagration über die ersten 20 bis 30 m, als auch die anschließende Flammenbeschleunigung und die damit verbundene Druckentwicklung werden gut wiedergegeben. (Für einige Positionen längs der Teststrecke liegen nur berechnete Daten vor.)
Durch die erfolgreichen RUT-Simulationen konnte der Gültigkeitbereich des erweiterten EBU-Modell gegenüber den Rohrversuchen um etwa eine Größenordnung erweitert werden (gestrichelt dargestellte Linien in Abb. 13).

4.4 Zusammenfassung

Alle physikalischen und numerischen Modelle des COM3D-Codes wurden an speziell ausgerichteten numerischen Testproblemen und an entsprechenden Experimenten überprüft. Ziel war eine systematische und möglichst entkoppelte Verifikation der einzelnen Teilmodelle für Gasdynamik, Thermodynamik, Turbulenz und turbulente Reaktionsrate. Der Gültigkeitsbereich des erweiterten EBU-Reaktionsmodells und die damit beschreibbaren turbulenten Verbrennungsregimes wurden bestimmt. Innerhalb dieser Grenzen stellt der COM3D-Code verifizierte Modelle zur Verfügung, die auch im Hinblick auf numerischen Aufwand und Präzision untereinander ausgewogen sind.

5. Programmanwendungen

Das breite Spektrum möglicher Anwendungen des COM3D-Programms wird im folgenden an drei Beispielen gezeigt. Sie betreffen eine Grundlagenuntersuchung, einen H_2-Mischungsprozess auf kleiner Skala und eine turbulente H_2-Verbrennung auf großer Reaktorskala.

5.1 Wechselwirkung zwischen Flamme und Turbulenz

Die grundlegende Frage bei der Simulation von turbulenten Verbrennungen betrifft die Mechanismen über die ein Turbulenzfeld mit der chemischen Reaktion in der Flammenzone wechselwirkt. Dazu wurden in Zusammenarbeit mit dem Kurchatov Institut Moskau Experimente mit einem Einzelwirbel gemacht [12] und mit COM3D simuliert (Abb. 15).

Die Abbildung zeigt ein numerischen Schlierenbild, d.h. den Gradienten der berechneten Dichte zu zwei verschiedenen Zeitpunkten. In dem Versuch brennt eine quasi-laminare, leicht gewellte H_2-Luft-Flamme von links nach rechts. Im rechten Kanal der Versuchsanordnung wird mit Hilfe einer Berstmembrane und einer Kreisblende, ein Einzelwirbel erzeugt, der sich auf die Flammenfront zubewegt. In Abb. 15a hat die dem Wirbel vorauslaufende Druckwelle die Flammenzone ohne wesentliche Effekte durchquert. Der Wirbel befindet sich zu dieser Zeit am Übergang vom rechten Kanal in die große Versuchskammer. In Abb. 15b hat der Wirbel die Flammenzone erreicht und eine drastische Verbreiterung der Flammenstruktur im oberen Teil bewirkt. Die im Experimente eingesetzten Photodioden zeigten Löschvorgänge an, deren Umfang und Dauer vor allem von der H_2-Konzentration der H_2-Luftmischung abhing. Außer diesen Löschphenomenen hat die Rechnung die wesentlichen experimentellen Ergebnisse reproduziert.

Da diese Turbulenz-Chemie-Wechselwirkungen von zentraler Bedeutung für viele wichtige Aspekte von Verbrennungsabläufen sind (Zündung, Beschleunigung, Löschung) sind weitergehende experimentelle Untersuchungen mit verbesserter 2-d Laserdiagnostik geplant. Nur ortsaufgelöste transiente Daten erlauben eine Weiterentwicklung der theoretischen Modelle.

5.2 Füllprozess bei einem H_2-Gasmotor

In einer zukünftigen Wasserstoffwirtschaft werden Wasserstoffverbrennungsmotoren aller Voraussicht nach eine wichtige Rolle im Transportsektor spielen, weil sie einfacher, billiger und weitaus leichter (pro kW) sind als Brennstoffzellenantriebe. Ein Nachteil von Wasserstoff-Luft-Gemischen besteht allerdings darin, dass sie zur Frühzündung neigen. Dies könnte man mit einer späten Hochdruckinjektion von reinem H_2 nahe am oberen Totpunkt des Kolbens umgehen, wenn in der kurzen zur Verfügung stehenden Zeit bis zur Zündung (einige ms) eine hinreichend homogene H_2-Luft-Mischung erreicht werden könnte.

Abb. 16 zeigt Ergebnisse einer Testrechnung mit COM3D zum Füllprozess in einem halbkugelförmigen Zylinderkopf. Aus einem Hochdruckreservoir strömt von rechts reiner Wasserstoff in den Zylinder. Das Druckverhältnis zwischen beiden Volumina war 10:1. Die berechnete H_2-Verteilung und die Strömungsverhältnisse sind in Abb. 16 etwa 0,5 ms nach Beginn der Injektion dargestellt. Die hohe Schallgeschwindigkeit von

Wasserstoff erlaubt hohe Einströmraten, allerdings wird der Mischungsprozess sehr stark von den geometrischen Randbedingungen beeinflußt. Die Gasverteilung und –vermischung kann z.B. durch geeignete Wahl von Lage und Form der Einströmöffnung, sowie Kolben- und Zylindergeometrie gesteuert und optimiert werden. Es ist geplant, solche Vermischungsvorgänge durch Freistrahlen in einem Gasmotorvolumen auch experimentell zu untersuchen und mit Hilfe von COM3D Analysen zu optimieren.

5.3 H_2-Verbrennung in einem Reaktorsicherheitsbehälter

Nach den schweren Reaktorunfällen in Harrisburg (TMI-2) und Tschernobyl wurden sowohl vom deutschen Gesetzgeber als auch von deutschen und französischen Genehmigungsgremien erhöhte Sicherheitsanforderungen für zukünftige Reaktoren gestellt. Die wesentliche neue Forderung ist, daß selbst im Falle von Kernschmelzunfällen die radiologischen Konsequenzen praktisch auf die Anlage selbst beschränkt bleiben müssen. Dieses erweiterte Sicherheitskonzept erfordert einen mechanistischen Nachweis der Containmentintegrität gegenüber allen physikalisch möglichen Wasserstoff-Verbrennungslasten. Zu diesem Zweck wurden dreidimensionale Simulationsrechnungen für ein zukünftiges Reaktordesign durchgeführt. Das Rechengitter umfaßte ca. 2.1 Millionen kartesische Rechenzellen von je $41\times41\times41$ cm^3 Volumen. Im folgenden werden beispielhaft Ergebnisse einer Rechnung erläutert, die im Rahmen von Designstudien zusammen mit Siemens-KWU durchgeführt wurden.

Die Anfangsverteilung von Wasserstoff und Dampf im Reaktorsicherheitsbehälter wurde aus Verteilungsrechnungen mit dem 3D-Fluiddynamikprogramm GASFLOW [13] übernommen. Die Zündung der turbulenten H_2-Luft-Dampf-Verbrennung erfolgte in dem Pumpenraum, in dem die höchsten H_2-Konzentrationen vorlagen, etwa auf halber Höhe im Containment. Die Rechnung mit der Parallelversion von COM3D benötigte ca. 30 h auf einer SP-2 unter Einsatz von 60 Prozessoren. Die folgenden Abbildungen sollen nur einen generellen Eindruck von den komplexen Abläufen und typischen Resultaten vermitteln. Die Geometrie des Sicherheitsbehälters ist in Form eines Glasmodells dargestellt, um Einblicke in innere Raumbereiche zu gestatten.

Abb. 17a bis d beziehen sich auf einen festen Zeitpunkt, 0.5 s nach Zündung der turbulenten Deflagration. Abb. 17a zeigt die Isofläche im Raum für 5 Vol.% Wasserstoff. Zu dieser Zeit ist der große zentrale Bereich im Containment bereits ausgebrannt. Die Isofläche für 1100°C (Abb. 17b) zeigt die momentane Position der Flamme, die sich in

den Dom des Containments und in einzelne Räume erstreckt. Die nach oben expandierende Flamme verdrängt Gas in die unteren Raumbereiche. In Abb. 17c ist die Fläche gezeigt, auf der das Gas mit 10 m/s nach unten strömt. Es fließt insbesondere über einen Ringspalt zwischen der äußeren Zylinderwand und einem Boden, der etwa auf halber Containmenthöhe liegt. Die komplexen Strömungsverhältnisse sind in Abb. 17d durch Stromlinien dargestellt. Lage und Größe von Einbauten, Wänden und offenen Strömungsquerschnitten haben einen großen Einfluß auf die Gasumverteilung während des Brandes, was wiederum auf den Verbrennungsablauf zurückwirkt.

Die letztlich interessierende Information sind die entstehenden Drucklasten auf die Wände des Sicherheitsbehälters. Abb. 18 zeigt diejenigen äußeren Wandbereiche, in denen irgendwann während des Verbrennungsvorgangs eine maximale Drucklast von 3 bar entstand. Für ca. 200 Punkte auf der gesamten äußeren Containmentfläche wurde in der COM3D-Rechnung auch die vollständige zeitabhängige Drucklast gespeichert. Dadurch sind die notwendigen Daten für eine Analyse des Strukturverhaltens der Containmentwand vorhanden (belastete Fläche, zeitlicher Druckverlauf). Die Auswirkungen von dynamischen Drucklasten auf die Auslenkung und Integrität von Strukturen sind komplex. Sie hängen i.A. von dem zeitlichen Verlauf der Drucklast und insbesondere vom Verhältnis der Lastdauer zur Responsezeit der Struktur ab [14].

6. Zusammenfassung und Ausblick

Am IKET wurde ein neues Rechenprogramm zur dreidimensionalen numerischen Simulation turbulenter Verbrennungen in vorgemischten Gasen und in komplexen Geometrien entwickelt. Die verwendeten Modelle für Gasdynamik, Turbulenz und chemische Reaktion wurden beschrieben. Für die Verifikation der physikalischen und numerischen Modelle sind geeignete experimentelle Daten erforderlich. Dementsprechende Versuche mit wasserstoffhaltigen Testgasen wurden auf mittlerer (12 m) und auf großer Skala (60 m) durchgeführt. Diese neuen Experimente decken einen weiten Bereich von Gemisch- und Turbulenzzuständen ab. Durch umfangreiche Verifikationsrechnungen konnte der Gültigkeitsbereich der COM3D-Modellierung im Borghi-Diagramm gezeigt werden. Die breiten Anwendungsmöglichkeiten des Programms wurden an drei Beispielen demonstriert: einer Grundlagenuntersuchung, einer kleinskaligen Motorsimulation und einer großskaligen Reaktorcontainmentanalyse.

Die Weiterentwicklung des COM3D-Programms ist aus verschiedenen Gründen notwendig. Zum einem ist eine Erweiterung der Reaktionsmodellierung auf bisher nicht abgedeckte Bereiche der vorgemischten Verbrennung erforderlich (Da « 10). Dazu sind derzeit neue multidimensionale β-PDF-Ansätze in der Entwicklung. Solche PDF-Methoden würden es auch erlauben die Verbrennung von nicht oder teilweise vorgemischten Systemen mit Konzentrationsgradienten, die ebenfalls von großer praktischer Bedeutung sind, numerisch zu simulieren. Zum anderen ist eine weitere Zunahme der Rechnerleistung zu erwarten, was eine Verbesserung der bisher eingesetzten isotropen 2-Gleichungsmodelle für die Turbulenz in naher Zukunft ermöglichen wird. Für die hier untersuchten stark instationären und anisotropen 3D-Strömungen sind Turbulenzmodelle vom LES-Typ (Large Eddy Simulation) grundsätzlich geeigneter. Hierbei werden die großen, nicht-isotropen Wirbel direkt numerisch simuliert und die Wirbel unterhalb einer bestimmten Größe über ein „Sub-grid"-Modell beschrieben. Je nach Problemgröße und verfügbarer Rechnerleistung kann die Lage des Filters angepaßt werden.

Die Verifikation solcher weiterführenden Turbulenz- und Reaktionsmodelle erfordert neue hochauflösende Experimente mit Laserdiagnostik, die lokale und 2D-Daten für Geschwindigkeiten, PDF's, Turbulenzintensitäten, Flammenfrontposition und Brennraten liefern. Der Aufbau von entsprechenden Experimenten mit Laserdiagnostik zur Verteilung und Verbrennung reaktiver Gemische ist derzeit in Vorbereitung.

7. Literatur

[1] K. Görner. Technische Verbrennungssysteme. Grundlagen, Modellbildung, Simulation, Springer Verlag (1991).

[2] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. Computer methods in Appl. Mech. and Eng., 3:269-289, 1974.

[3] H. Naji, R. Said, and R. Borghi. Towards a general turbulent combustion model for spark ignition engines. In Int. Congress and Explosion, number 890672 in SAE Technical Paper Series, pages 1-12, Detroit, Michigan, Feb. 27 – Mar.3 1989.

[4] R. Said and R. Borghi. A simulation with a cellular automation for turbulent combustion modeling. In 22nd Symp. (Int.) on Combust., pages 569-577, University of Washington-Seattle, USA, 1988.

[5] R. Redlinger. Approximations of enthalpy and specific heat for H_2, O_2, N_2, H_2O. Unpublished, 1996.

[6] W. Breitung, A. Kotchourko. Numerische Simulation von turbulenten Wasserstoff-Verbrennungen bei schweren Kernreaktorunfällen, Nachrichten – FZK, Jahrgang 28, Heft 2-3/96, S. 175-191.

[7] S.B. Dorofeev, V.P. Sidorov, A.E. Dvoinishnikov, A.V. Zhernov, S.M. Velmakin. Large scale hydrogen-air fast turbulent deflagration experiments in the RUT facility, Endbericht Kurchatov Institut an FZK (Febr. 1994).

[8] S.B. Dorofeev, V.O. Sidorov, A. Dvoinishnikov, A. Denkevits, A. Efimenko, and A. Lelyakin. Large scale hydrogen-air-steam DDT experiments in the RUT facility. Test series 1996. Report RRC KI 80-05/16, Russian Research Centre „Kurchatov Intitute" (March 1997).

[9] S.B. Dorofeev, V.P. Sidorov, W. Breitung, and A.S. Kotchourko. Large-scale combustion tests in the RUT facility: Experimental study, numerical simulations and analysis on turbulent deflagrations and DDT. Transactions of 14th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-14), Lyon, France (August 17-22, 1997), Vol. 10, p. 275-282.

[10] W.C. Reynolds. The element potential method for chemical equilibrium analysis: Implementation in the interactive program STANJAN version 3. Report, Dept. of Mechanical Engineering, Stanford University, Palo Alto, CA, USA, January 1986.

[11] A. Kotchourko, W. Breitung, A. Veser, and S.B. Dorofeev. Tube experiments and numerical simulation on turbulent hydrogen-air combustion. In Twenty First Symp. (Int.) on Shock Waves, p. 3220.1-3220.6, Great Keppel Island, Australia, 1997.

[12] I.D. Matuskov, M.S. Kuznetsov, V.I. Alekseev, S.B. Dorofeev, and A.S. Kotchourko. Experimental study on the flame-vortex interaction. Endbericht an FZK, Russian Research Centre „Kurchatov Institute", Nov. 1995.

[13] J.R. Travis, P. Royl, R. Redlinger, G. Necker, J.W. Spore, K.L. Lam, T.L. Wilson, B.D. Nichols, C. Müller. GASFLOW-II: A Threedimensional Finite Volume Fluid-Dynamics Code for Calculating the Transport, Mixing, and Combustion of Flammable Gases and Aerosols in Geometrically Complex Domains, Vol. I, Vol. II, Bericht FZKA-5994, LA-13357-M (1997).

[14] W. Breitung, R. Redlinger. A Model For Structural Response To Hydrogen Combustion Loads in Severe Accidents. Nuclear Technology, Vol 111 (Sept. 1995), p. 420-425.

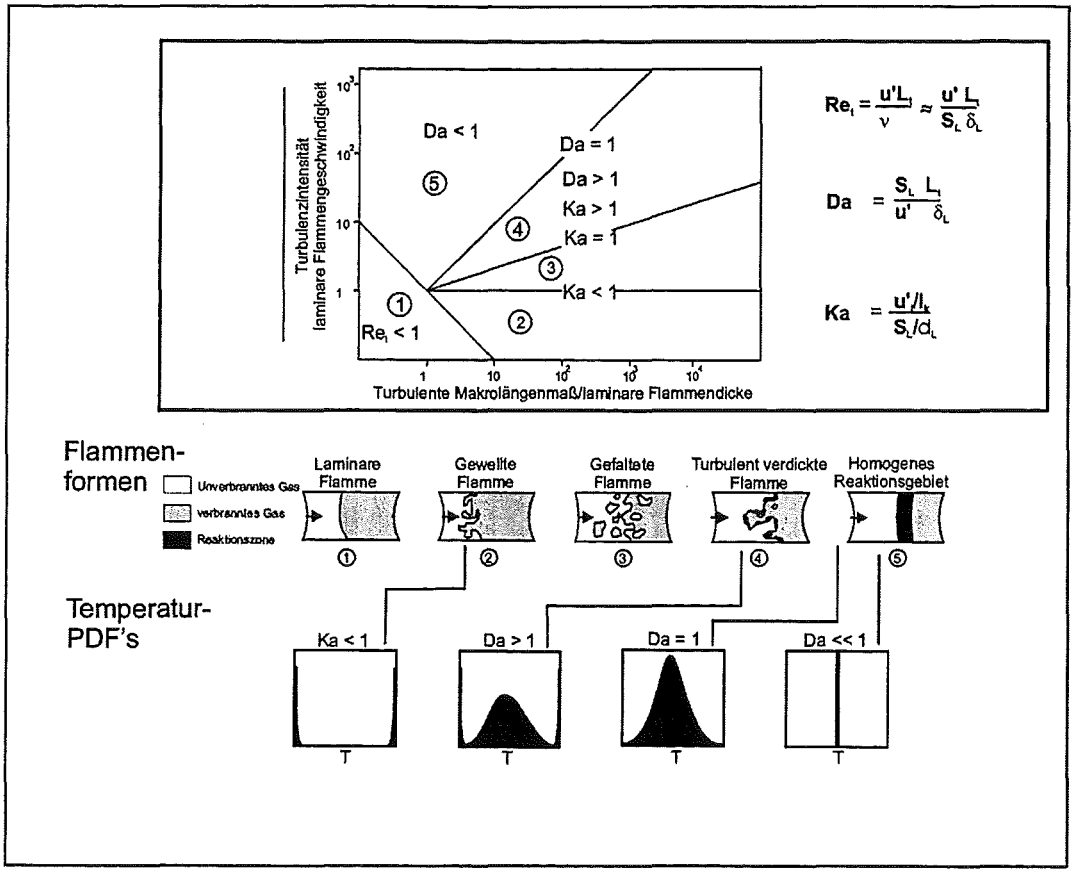


Abb. 1: Klassifikation turbulenter Verbrennungsformen mit Hilfe von dimensionslosen Kennzahlen: Re_t = turbulente Reynoldszahl, Ka = turbulente Karlovitzzahl, Da = turbulente Damköhlerzahl. Diese Kennzahlen vergleichen die charakteristischen Zeitskalen von laminarer Reaktionszeit, turbulenter Transportzeit der kleinsten und der größten Wirbel.

Gasdynamisches Modell

Erhaltung der Gesamtmasse

$$(\rho)_t + (\rho u_j)_{x_j} = 0,$$

Impulserhaltung

$$(\rho u_j)_t + (\rho u_i u_j)_{x_j} = \rho g_i - p_{x_i} + M_{ij,x_j}, \quad i = 1,2,3$$

Energieerhaltung

$$(\rho e)_t + ((\rho e + p)u_j)_{x_j} =$$

$$\rho g_j u_j + u_i M_{ij,x_j} + (\frac{\mu_{tur}}{C_h}(e - \frac{1}{2}u_i u_i + \frac{p}{\rho})_{x_j})_{x_j} + B + \rho\epsilon,$$

Massenerhaltung für Gasspezies α

$$(\rho f_\alpha)_t + (\rho f_\alpha u_j)_{x_j} = \tilde{\dot{w}}_\alpha + (\frac{\mu_{tur}}{C_{f_\alpha}} f_{\alpha,x_j})_{x_j},$$

$$mit\ e = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{f_\alpha}{\mu_\alpha}\left(h_\alpha + \Delta h_\alpha^0 - RT\right) + \frac{1}{2}u_j u_j,\ f_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho}.$$

Turbulenz-Modell

Turbulente kinetische Energie k

$$(\rho k)_t + (\rho k u_j)_{x_j} = S - \rho\epsilon + (\frac{\mu_{tur}}{C_k} k_{x_j})_{x_j},$$

Dissipationsrate ϵ

$$(\rho\epsilon)_t + (\rho\epsilon u_j)_{x_j} = \frac{\epsilon}{k}(C_1 S - C_2 \rho\epsilon) + (\frac{\mu_{tur}}{C_k}\epsilon_{x_j})_{x_j}.$$

$$M_{ij} = -\frac{2}{3}\delta_{ij}(\rho k + \mu_{tur} u_{r,x_r}) + \mu_{tur}(u_{i,x_j} + u_{j,x_i})$$

$$S = u_{i,x_j} M_{ij} - B;\quad B = \frac{\mu_{tur}}{C_\rho}\frac{1}{\rho^2}\rho_{x_r} p_{x_r}\quad \mu_{tur} = \mu + C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}.$$

Reaktionsmodell

$$\tilde{\dot{w}}_\alpha = \int\int \ldots \int \dot{w}_\alpha(f_1, f_2, \ldots, f_N) F(f_1, f_2, \ldots, f_N)\, df_1 df_2 \ldots df_N.$$

Abb. 2: Modellgleichungen des COM3D-Programms.

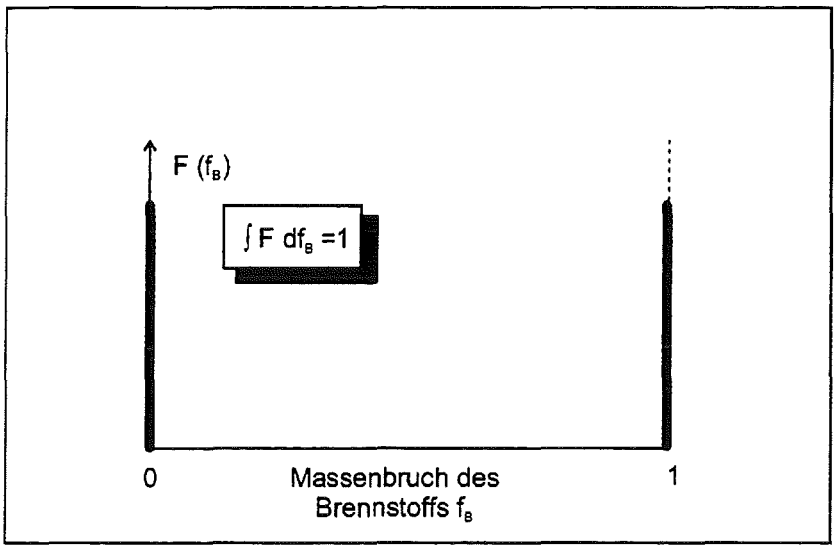


Abb. 3: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für Brennstoff im Grenzfall unendlich schneller Chemie.

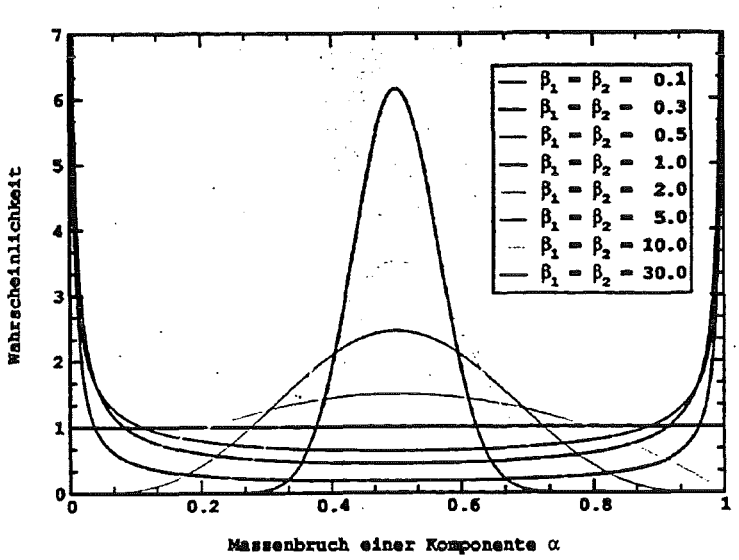


Abb. 4: Beispiele für b-Funktionen, die zur statistischen Beschreibung von Reaktionszuständen in PDF- Modellen eingesetzt werden (Gleichung 15).

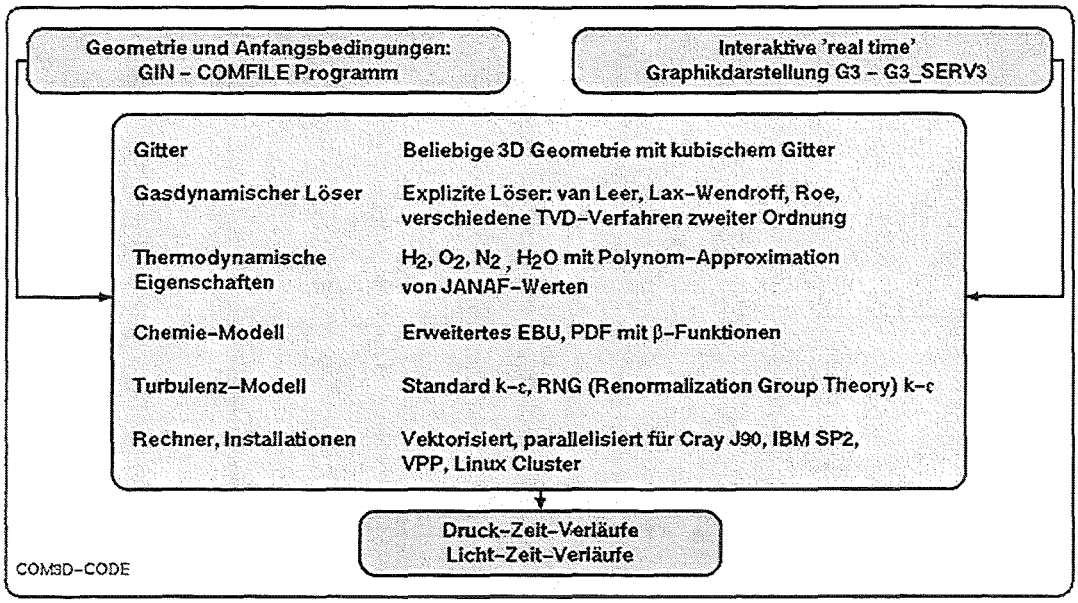


Abb. 5: Zusammenfassung der physikalischen, numerischen und grafischen Modelle des COM3D Programms.

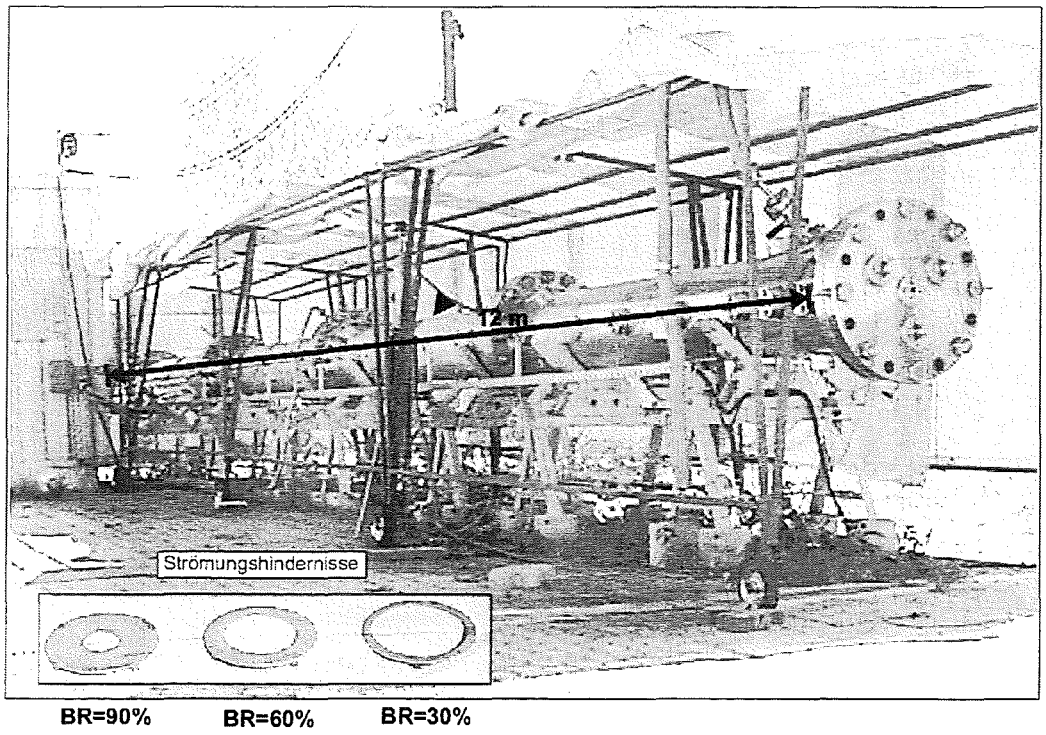


Abb. 6: FZK-Versuchsanlage zur Untersuchung von turbulenten Strömungs- und Verbrennungsprozessen. Zur Turbulenzerzeugung können ringförmige Strömungshindernisse mit unterschiedlichem Versperrungsgrad (BR = 30 ... 90 %) im Rohr eingebaut werden.

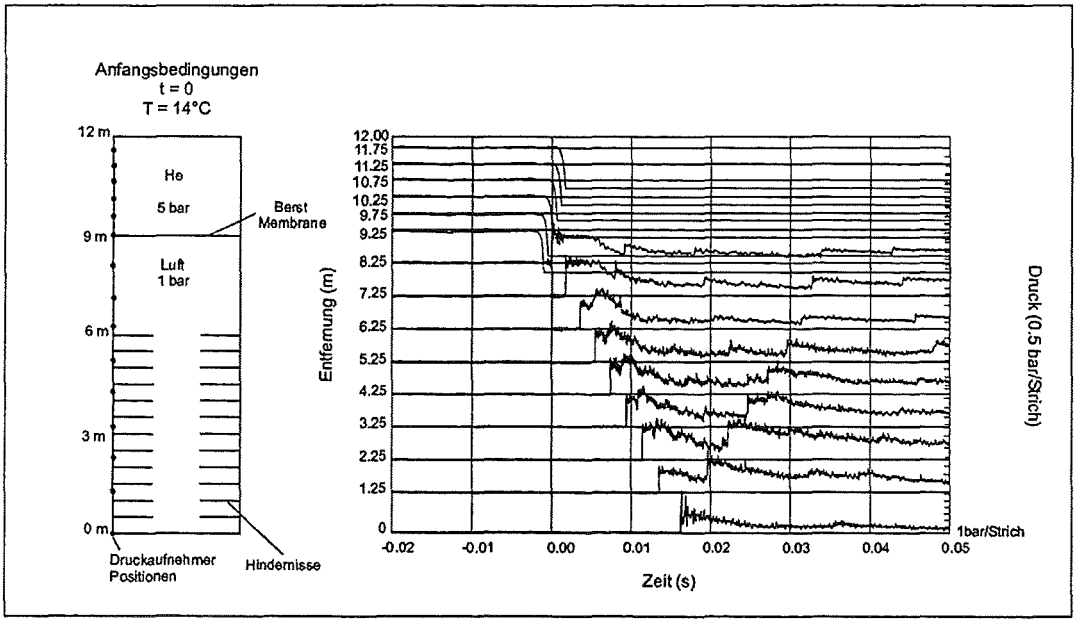


Abb. 7: Stoßrohrversuch zur Turbulenzerzeugung und –dissipation in einer teilweise versperrten Geometrie. Nach Versagen der Berstmembrane läuft eine Stoßwelle in die Hindernisstrecke aus ringförmigen Blenden. Die gemessenen Drucksignale enthalten Information über das entstehende Turbulenzfeld.

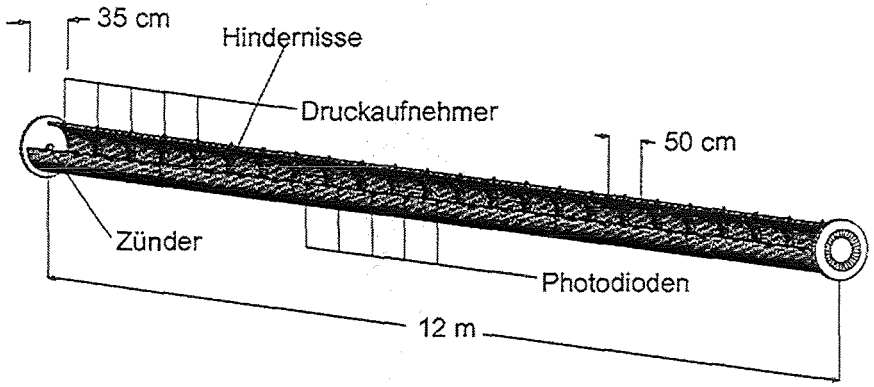


Abb. 8: Versuchsgeometrie und Instrumentierung zur Untersuchung von turbulenten H_2-Luft-Verbrennungen im FZK 12-m-Rohr.

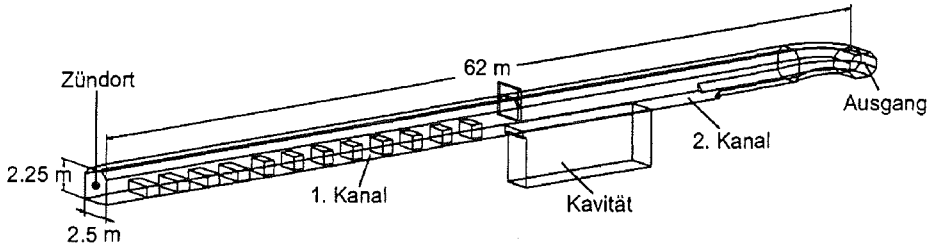


Abb. 9: Prinzipskizze der RUT-Anlage zur Durchführung von großskaligen Verbrennungsversuchen mit H_2-Luft und H_2-Luft-Dampf Gemischen. Gesamtlänge 62 m, Gesamtvolumen 480 m^3.

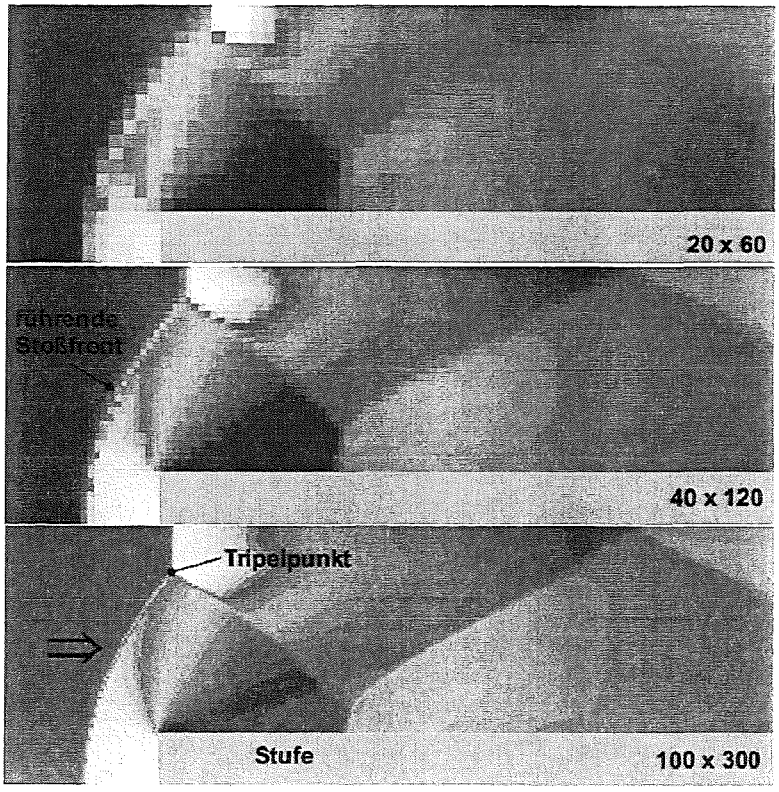


Abb. 10: Testproblem zur Verifikation von Fluiddynamik und Numerik des COM3D-Programms: Anströmung einer Stufe in einem 2-d Kanal mit Überschall von links nach rechts, Stickstoff bei Mach 3, 1 bar, 298 K, stationärer Zustand. Gitterdimensionen (von oben nach unten) 20 x 60, 40 x 120, bzw. 100 x 300 Zellen. Die COM3D Ergebnisse für das berechnete Strömungsfeld stimmen sehr gut mit der bekannten numerischen Lösung überein.

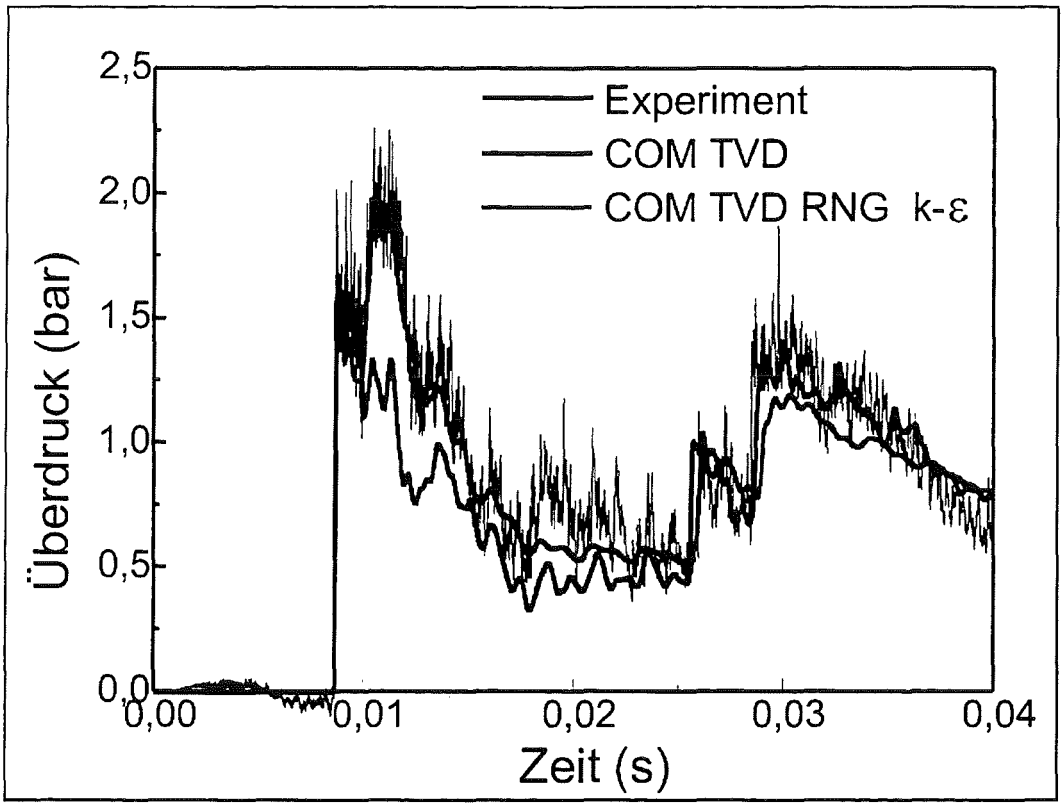


Abb. 11: COM3D-Simulation des Stoßrohrversuchs zur transienten Turbulenzerzeugung (Abb. 7) ohne Turbulenzmodell und mit RNG k-ε Modell. Mit RNG k-ε ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Druckdaten.

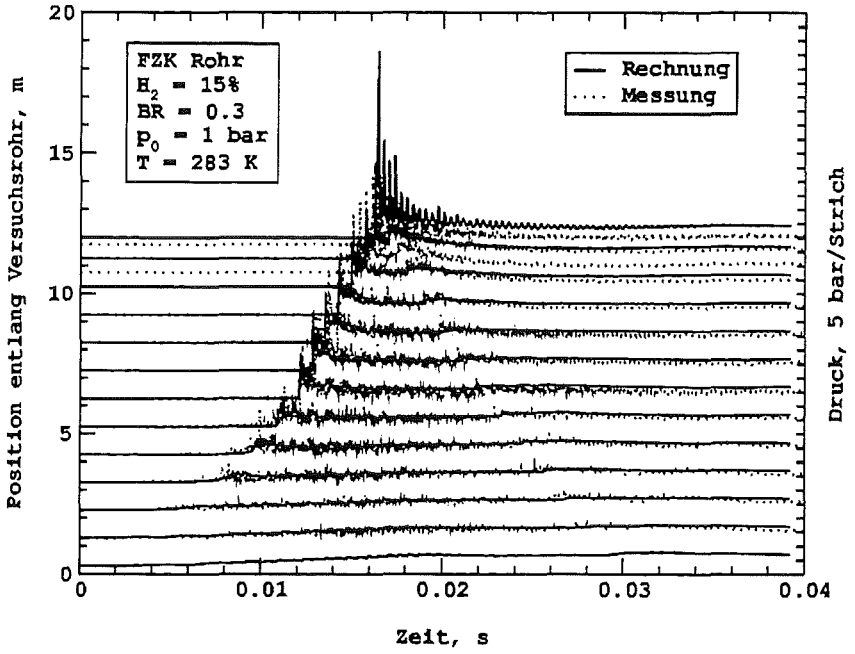


Abb. 12: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Druck- und Lichtsignalen für einen Versuch mit 15 % H_2 in Luft im FZK-Rohr, Hindernisse mit 30 % Versperrungsgrad. Die Druckdaten sind längs der Ordinate entsprechend der Sensorposition im Rohr (0 – 12 m) angeordnet. Man erkennt so die einlaufende Flammenfront (links) und die reflektierte Druckwelle (rechts), blau = Messung, rot = Rechnung, $C'_{EBU} = 6$.

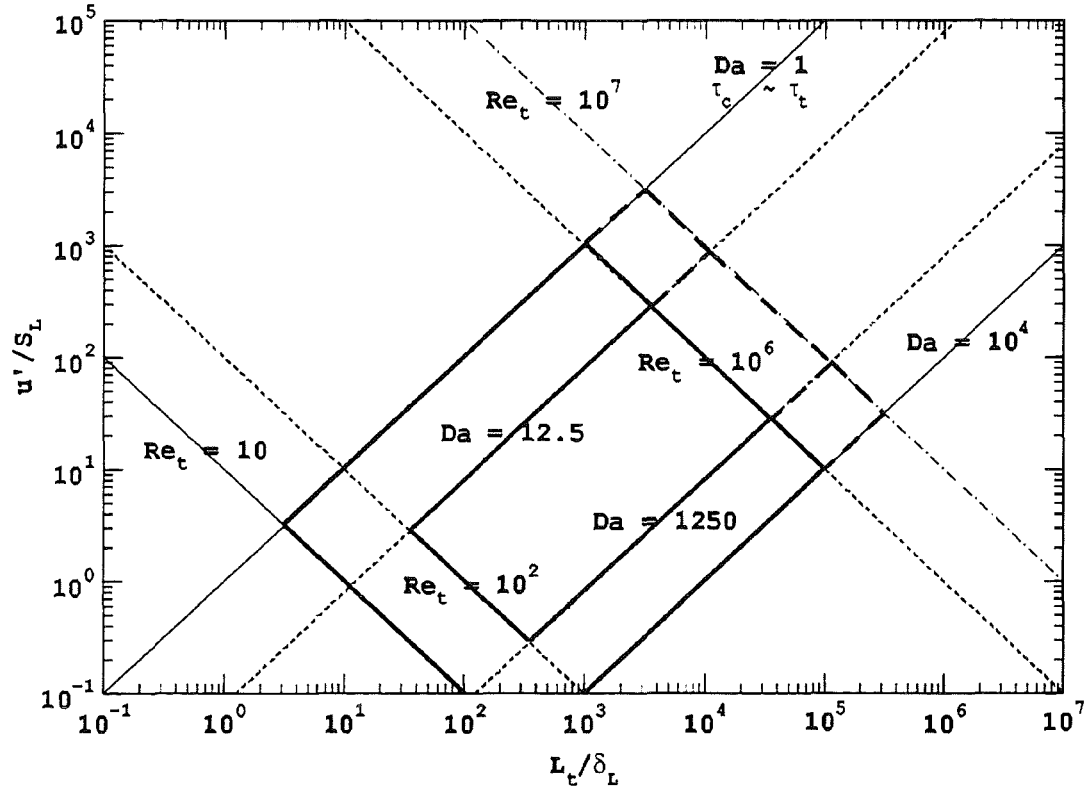


Abb. 13: Aus Verifikationsrechnungen mit COM3D abgeleiteter Gültigkeitsbereich des verwendeten erweiterten EBU-Reaktionsmodells (blau) und Bereich von generellem Interesse für Simulation von industriellen Vormischflammen (rot). Der Verifikations- und Anwendungsbereich für Reaktorsicherheitsanalysen ist gestrichelt dargestellt.

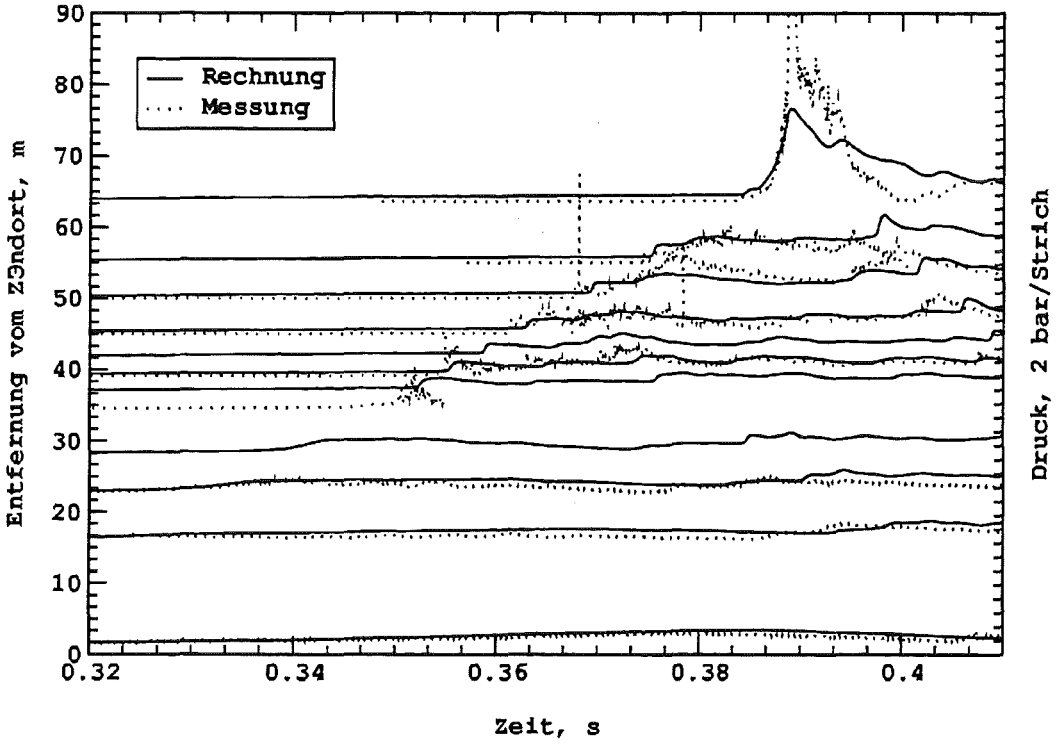


Abb. 14: COM3D-Simulation für Großversuch RUT-STH6 mit stöchiometrischem H_2-Luft + 45 % Dampf-Gemisch, p_0 = 1 bar, $T_0 \approx 100$ °C. Die Rechnung reproduziert die gemessene Flammenbeschleunigung und die entstehenden Drücke hinreichend genau. Das COM3D-Modell enthält keine freien Modellparameter mehr.

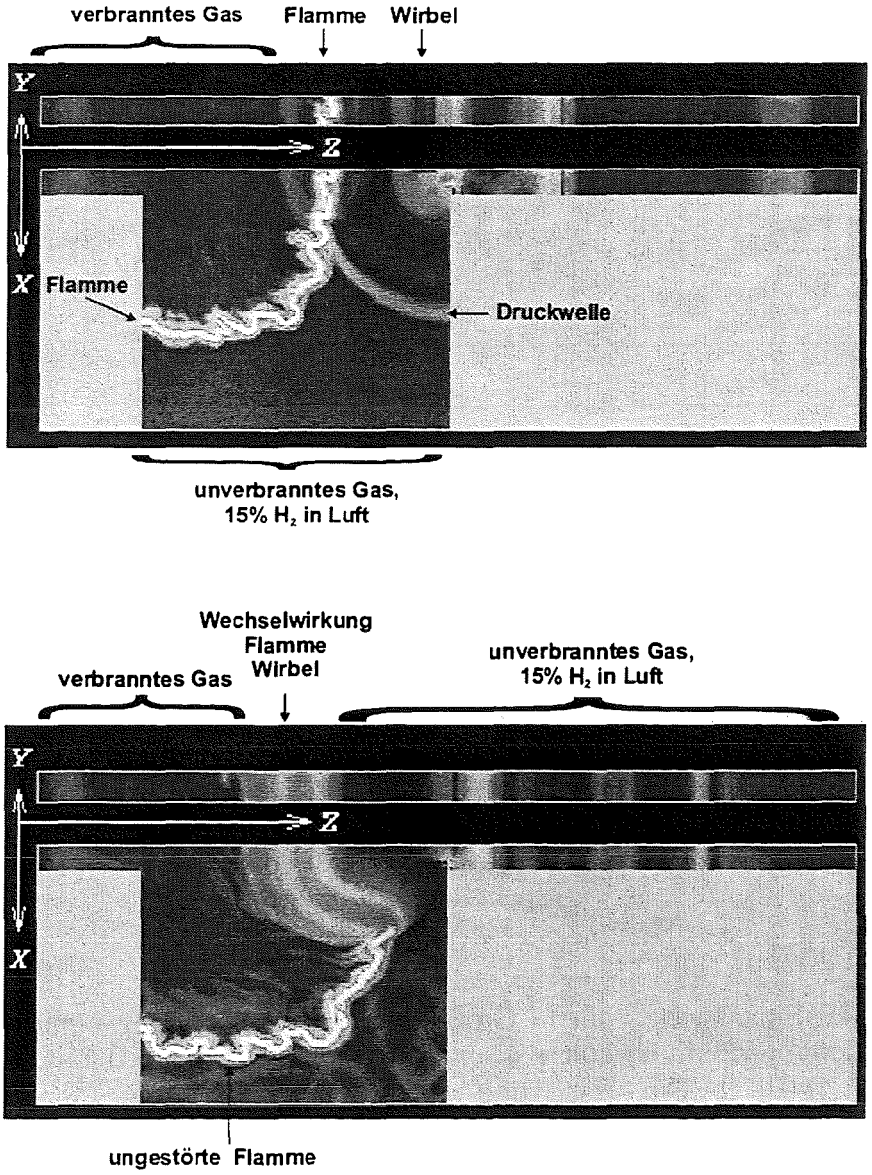


Abb. 15: COM3D Rechnung zur Wechselwirkung einer quasi-laminaren Flammenfront (von links) mit einem Einzelwirbel (von rechts). Dargestellt sind Gradienten der berechneten Gasdichten (numerisches Schlierenbild).
a) Vorauslaufende Druckwelle hat Flammenzone ohne wesentliche Effekte durchquert, nur Beugung an Flamme (Grenzfläche heiß/kalt).
b) Starke Verbreiterung der Flammenzone im oberen Teil wo der Wirbel die Flamme durchquert. COM3D-Ergebnisse decken sich weitgehend mit den experimentellen Daten.

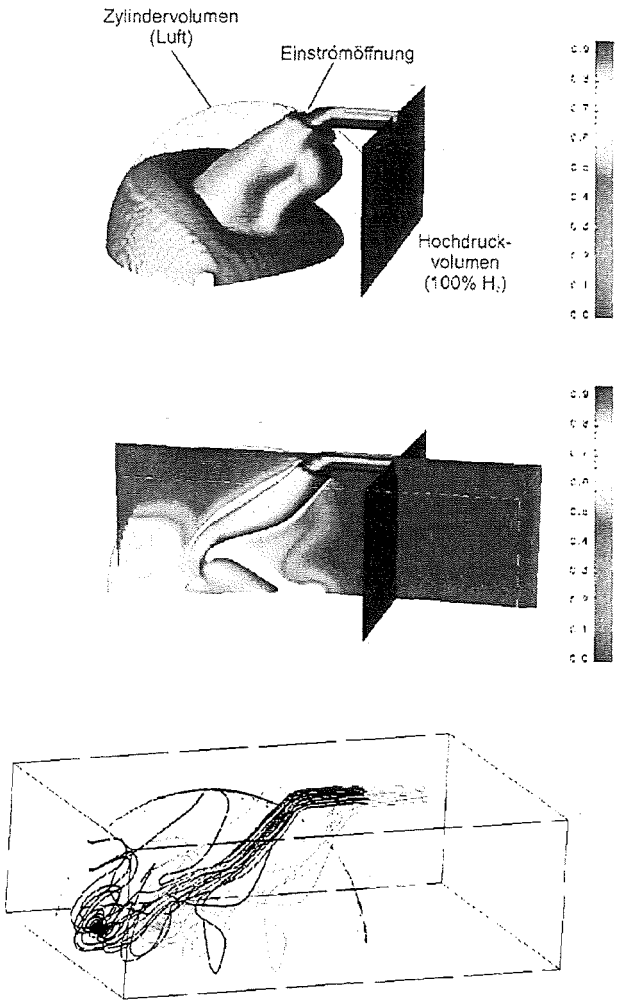


Abb. 16: COM3D-Analyse zum Füllprozess bei einem Wasserstoffgasmotor, Simulationsergebnisse 0,5 ms nach Beginn der H_2-Injektion von einem Hochdruckreservoir in den halbkugelförmigen Zylinderraum
a) Isofläche im Raum für 10 Vol.% H_2-Konzentration.
b) Isofläche im Raum für 70 Vol.% H_2, kombiniert mit der H_2-Konzentration in der zentralen vertikalen Schnittebene. Der Füllprozess ist sehr komplex und kann durch Geometrievariationen optimiert werden.
c) Darstellung des Strömungsfeldes in Form von Stromlinien, d.h. gedachten Verbindungen der lokalen Geschwindigkeitsvektoren. Farben entsprechen den lokalen Geschwindigkeitswerten (rot ≈ 1400 m/s).

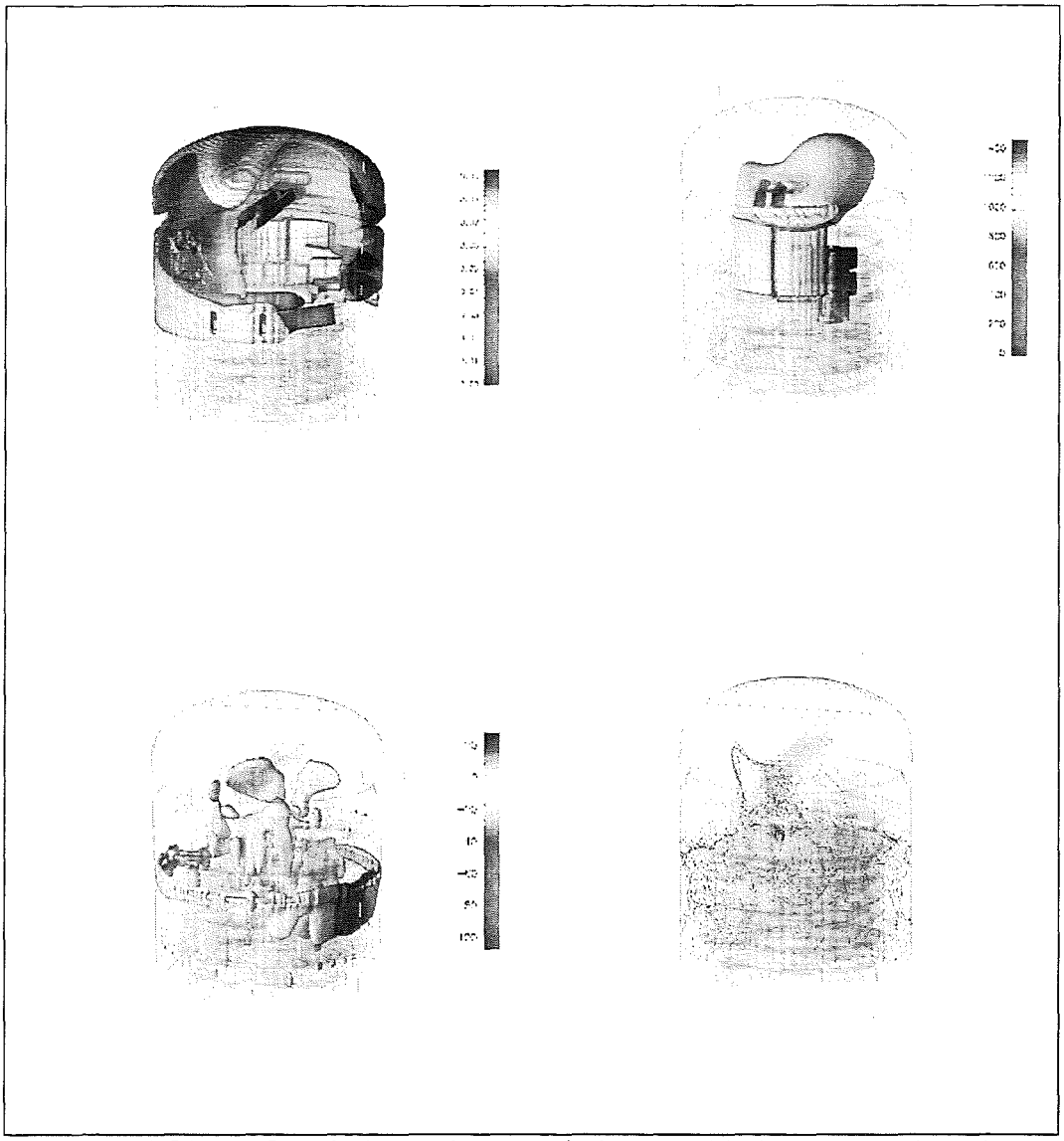


Abb. 17: COM3D-Simulation einer turbulenten Verbrennung in einem Reaktorcontainment, 3D-Darstellung verschiedener Felder, 0.5 s nach Zündung der H_2-Dampf-Luft Atmosphäre, „Glasmodell" der Containmentgeometrie mit durchsichtigen Wänden ca. 2.2 Millionen Rechenzellen.

a) Isofläche für 5 Vol.% H_2 im Raum, Ausbrand in Gebäudemitte.
b) Isofläche für 1100 °C, momentane Flammenposition.
c) Isofläche für 10 m/s Vertikalströmung, Expansion verbrannter Gase in untere Raumbereiche.
d) Beispiel für Stromlinien im Gebäude, blau = ca. 10 m/s, rot = ca. 40 m/s Gasgeschwindigkeit.

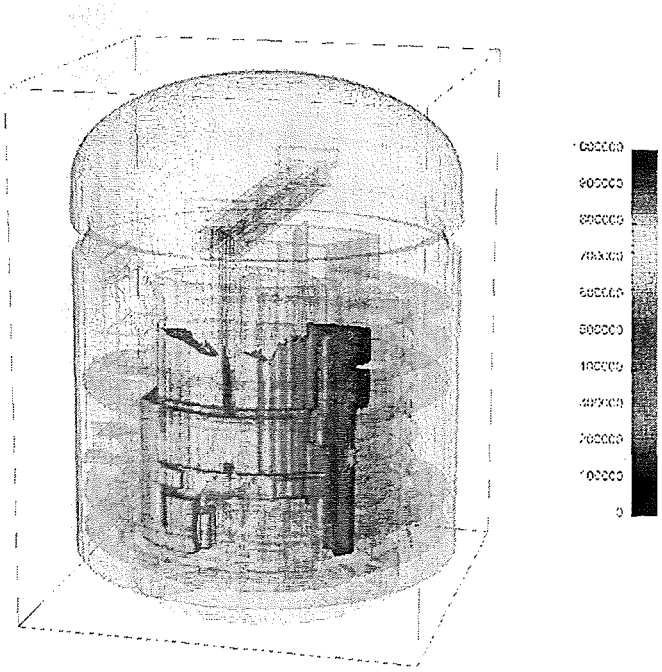


Abb. 18: Containmentwandbereich der während der simulierten turbulenten H2-Luft-Dampf-Verbrennung mit maximal 3 bar belastet wurde. Höhere Drücke traten nur auf inneren Wänden auf. Aus den berechneten dynamischen Drucklasten kann der Strukturresponse untersucht und die Integrität von Containment-wänden ermittelt werden.

VII. On the Hydrogen-Air Adiabatic Isochoric Complete Combustion Pressure

(B.F. Burgeth, IKET)

Abstract

A simple and fast method for calculating the AICC state (adiabatic Isochoric Complete Combustion) for the hydrogen-air reaction is presented. By comparison with more detailed algorithms it is shown that the proposed method produces satisfactory results, and is thus a viable alternative in situations where the use of detailed algorithms or of tables is too time-consuming.

Zusammenfassung

In diesem Beitrag wird eine einfache und schnelle Methode zur Berechnung der Zustandsdaten bei vollständiger adiabater, isochorer Verbrennung einer Wasserstoff-Luft-Mischung präsentiert. Im Vergleich mit detaillierten Algorithmen wird gezeigt, dass mit der vorgeschlagenen Methode zufriedenstellende Ergebnisse erzielt werden, so dass diese Methode eine gute, zeitsparende Alternative darstellt.

1. Introduction

The design of the EPR reactor requires an estimate of the pressure load, which might occur during accidents involving the combustion of hydrogen. A first assessment of this pressure load can be obtained by considering the AICC-pressure (an abbreviation for adiabatic, isochoric, complete combustion pressure). It can be used for comparison with GASFLOW data. Often the AICC-pressure resulting from hydrogen combustion is calculated with the help of programs such as STANJAN ([5]) or CHEMKIN ([4]). Depending on the requirements of the user, such as comparison with or completion of GASFLOW data ([3]), this might entail time-consuming and relatively expensive external data post-processing, while accurate run-time data processing seems to be even more difficult ([2]).

The purpose of this not is to make an assessment whether it is possible to find a more simple replacement algorithm for the STANJAN/CHEMKIN calculations. This non-iterative algorithm should be based on the simplified chemical reaction scheme involving only the four species H_2, O_2, N_2, H_2O in the basic reaction.

$$2H_2 + O_2 + N_2 \rightarrow 2H_2O + N_2.$$

As a numerical toolbox we use MAPLE V release 5.1 ([1]), a very useful program designed for symbolic as well as numeric computations.

2. Calculation of the Pressure Ratio

Let denote $(f_1, f_2, f_3, f_4) = \vec{f}$ the mass fractions of the species H2, O2, N2, H2O. A combustion can be represented as a transition from an initial state with mixture

$$\text{ini-mix } \vec{f}\,(0) \in [0, 1]^4$$

to a final state with mixture

$$\text{fin-mix } \vec{f}\,(\tau^*) \in [0, 1]^4,$$

where $\tau^* \in [0, 1]$ is a certain value of the progress variable $\tau \in [0, 1]$.

Suppose $n(\tau)$ stands for the overall amount of substance (at state τ). Then the pressure ratio is given by

$$\frac{p(\tau)}{p(0)} = \frac{T(\tau)}{T(0)} \cdot \frac{n(\tau)}{n(0)} \qquad (1)$$

and is usually calculated with STANJAN, CHEMKIN by means of an iterative procedure.

It should be noted that the phrase 'complete combustion' does not mean a 100 % combustion ($\tau = 1$) rather than a reaction up to equilibrium, described in our setting by $\tau^* \in [0, 1]$.

$$\vec{f}(0) \quad \rightarrow \quad \text{equilibrium } \vec{f}(\tau^*) \quad \rightarrow \quad \text{extreme-mix } \vec{f}(1)$$

Here the extreme-mix $\vec{f}(1)$ is characterized by $f_1(1) = 0$ or $f_2(1) = 0$ reflecting the fact that the reaction ends when running out of fuel or oxidizer. The equilibrium state τ^* is usually not known in advance and hence we will assume $\tau^* = 1$.

3. Outline of the substitute procedure

In the following subsections we will focus on each of the factors in eqn. (1). But for the sake of brevity we will only give an outline of the development of a substitute procedure without going into details.

3.1 The Quotient $\frac{T(1)}{T(0)}$

Starting point is the equation of conservation of energy:

$$\underbrace{e-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3} u_j u_j}_{=:\eta} = \underbrace{\sum_{\nu=1}^{4}\left(\int_0^T C_p^\nu(t)\,dt + \Delta h_\nu^0 - RT\right)\cdot\frac{f_\nu}{\mu_\nu}}_{=:Ener(T;\vec{f})}$$

where μ_i means the species' molar masses.

Given η, $\vec{f}$, the equation

$$\eta = Ener_{\vec{f}}(T)$$

has to be solved for T, yielding

$$T = Temp_{\vec{f}}(\eta).$$

The functions Ener and Temp are in some sense inverse to each other. The change in temperature is then obtained by

$$T(\tau) = Temp_{\vec{f}(r)}\left(Ener_{\vec{f}(0)}(T(0))\right).$$

The construction of the function Ener requires high accuracy approximations of heat capacities C_p^ν for $\nu = 1, \ldots, 4$:

$$C_p^v(T) \approx b_0 + b_1 T + \ldots + b_n T^n .$$

Each of the approximating high degree polynomials (n = 16) is a least square fit to JANAF data and covers the whole temperature range [100 K, 6000 K].

We display only one Example: the heat capacity of hydrogen.

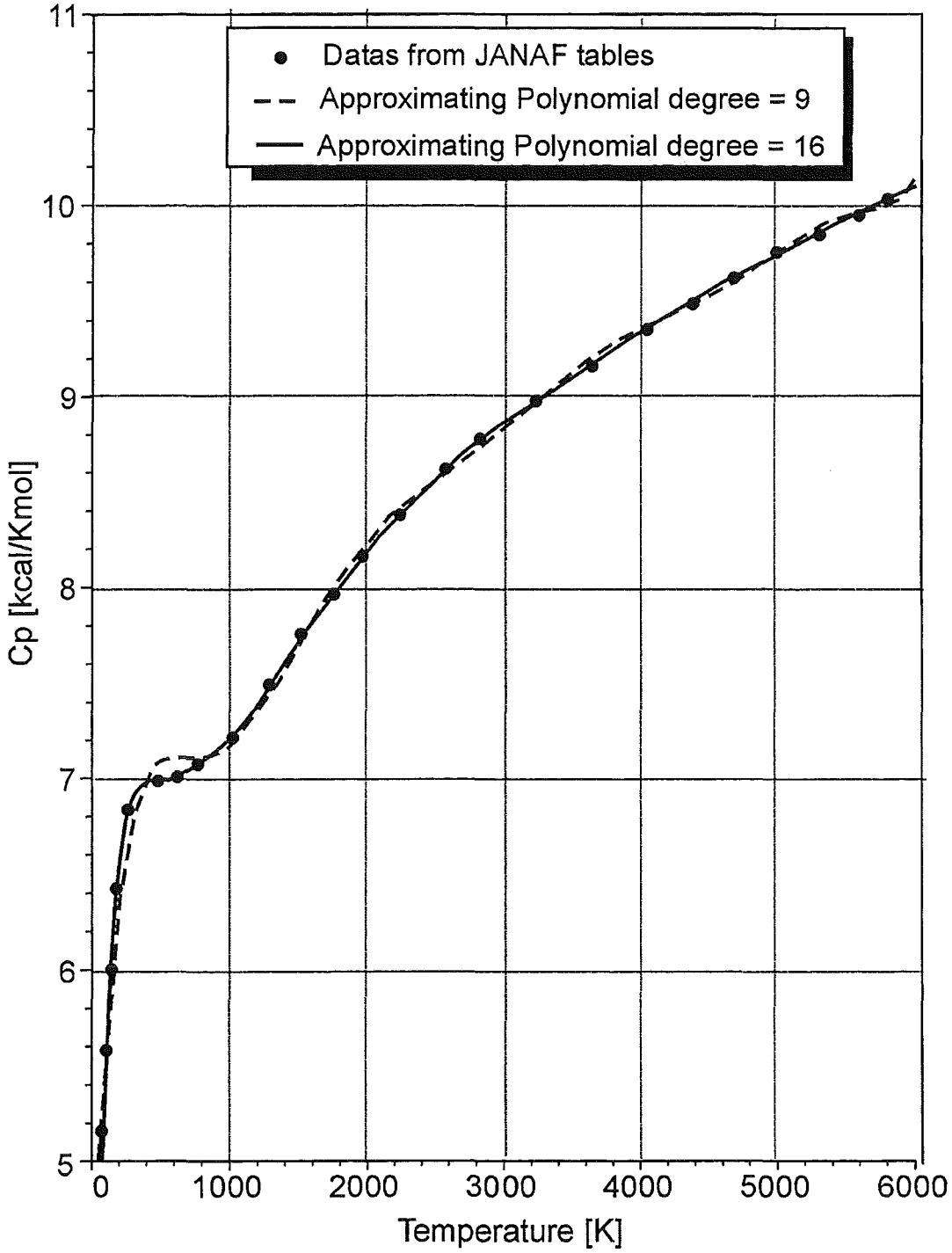


Figure 1: **Hydrogen**. The approximating polynomials of degree 9 and 16. Units of the x-axis and y-axis: K and kCal/K/mole, resp..

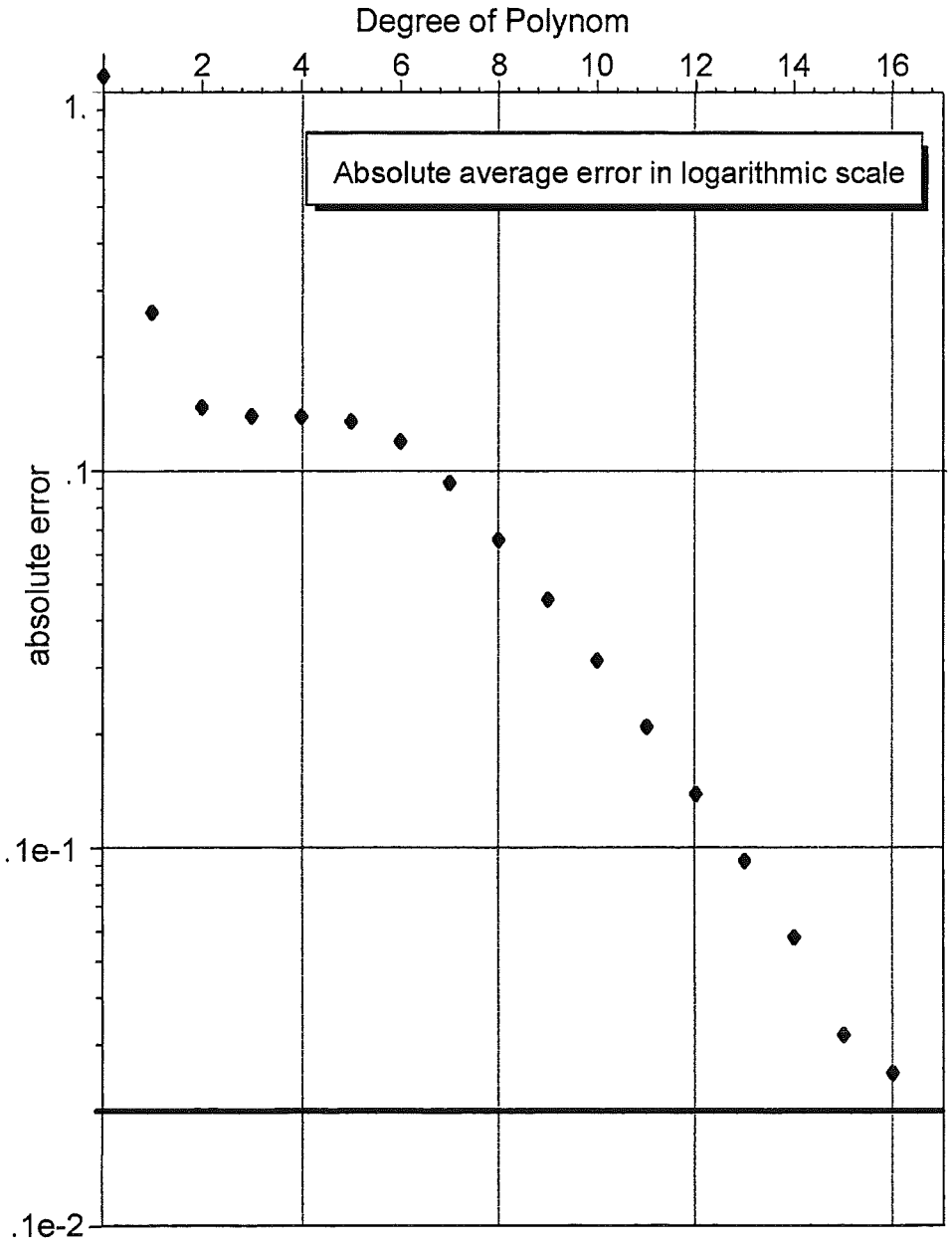


Figure 2: **Hydrogen**. The absolute average error as a function of the degree of the approximating polynomial. Units of the y-axis: kCal/K/mole. The line at the bottom indicates an error level of 0.002 in this unit.

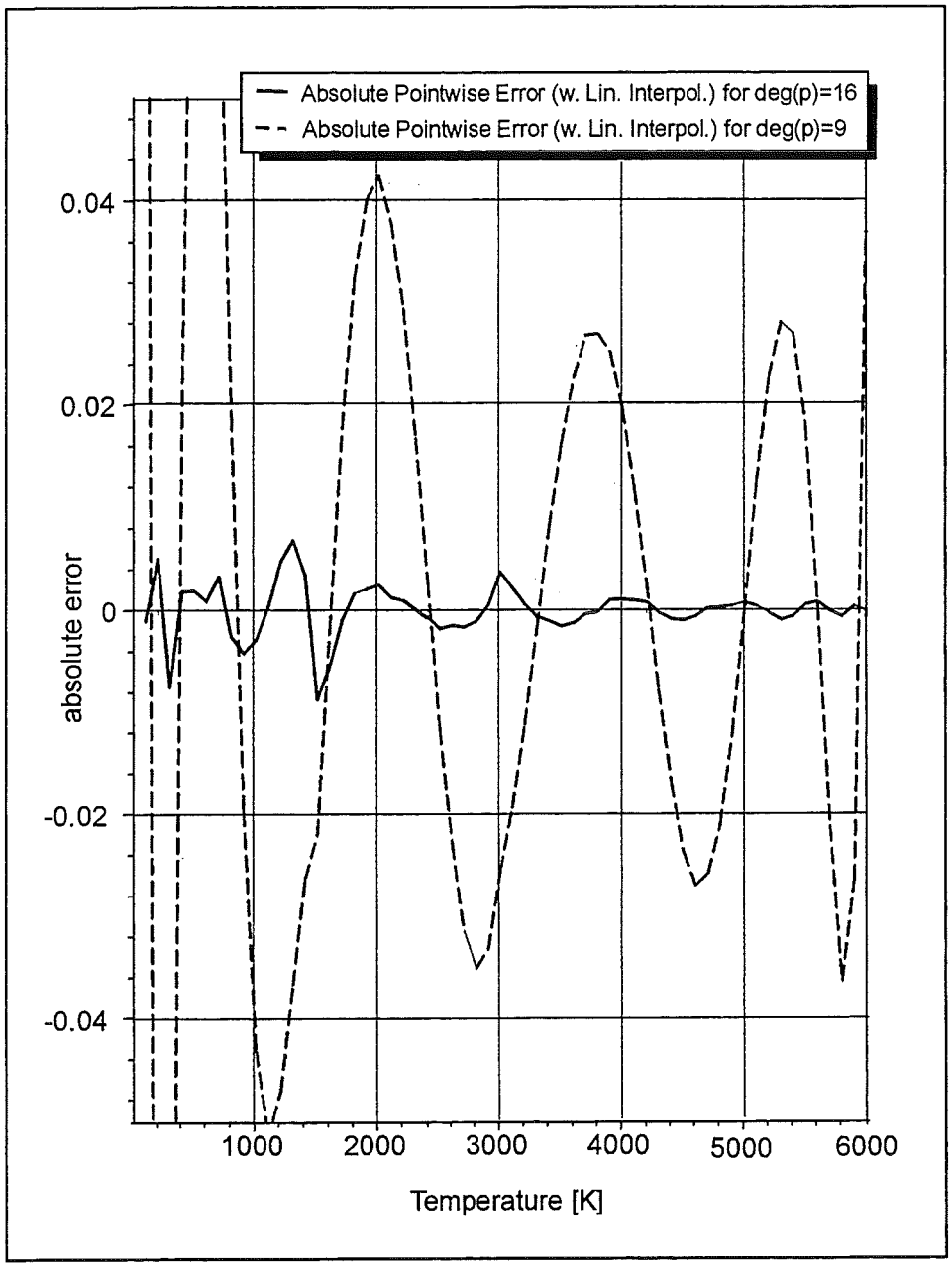


Figure 3: **Hydrogen**. The pointwise absolute error of the approximating polynomials of degree 9 and 16. Units of the x-axis and y-axis: K and kCal/K/mole, resp..

For the construction of the function $Temp_{\tilde{f}}(\eta)$ and approximation of Enthalpy by best Lagrange-Interpolation is needed:

$$\int_0^T C_p^{\nu}(t)\,dt \approx a_0 + a_1 T + a_2 T^2,$$

for $\nu = 1, \ldots, 4$ A further improvement in the accuracy of $Temp_{\tilde{f}}(\eta)$ can be achieved by applying an additional correction step, which essentially is one step of a Newton iteration and makes use of the previously mentioned high accuracy approximations of the C_p^{ν}-data.

3.2 The end Temperature T

The extreme Temperature (T(1)

A comparison between STANJAN Calculations and the extreme Temperature T(1) obtained by the replacement procedure can be seen in the next figure.

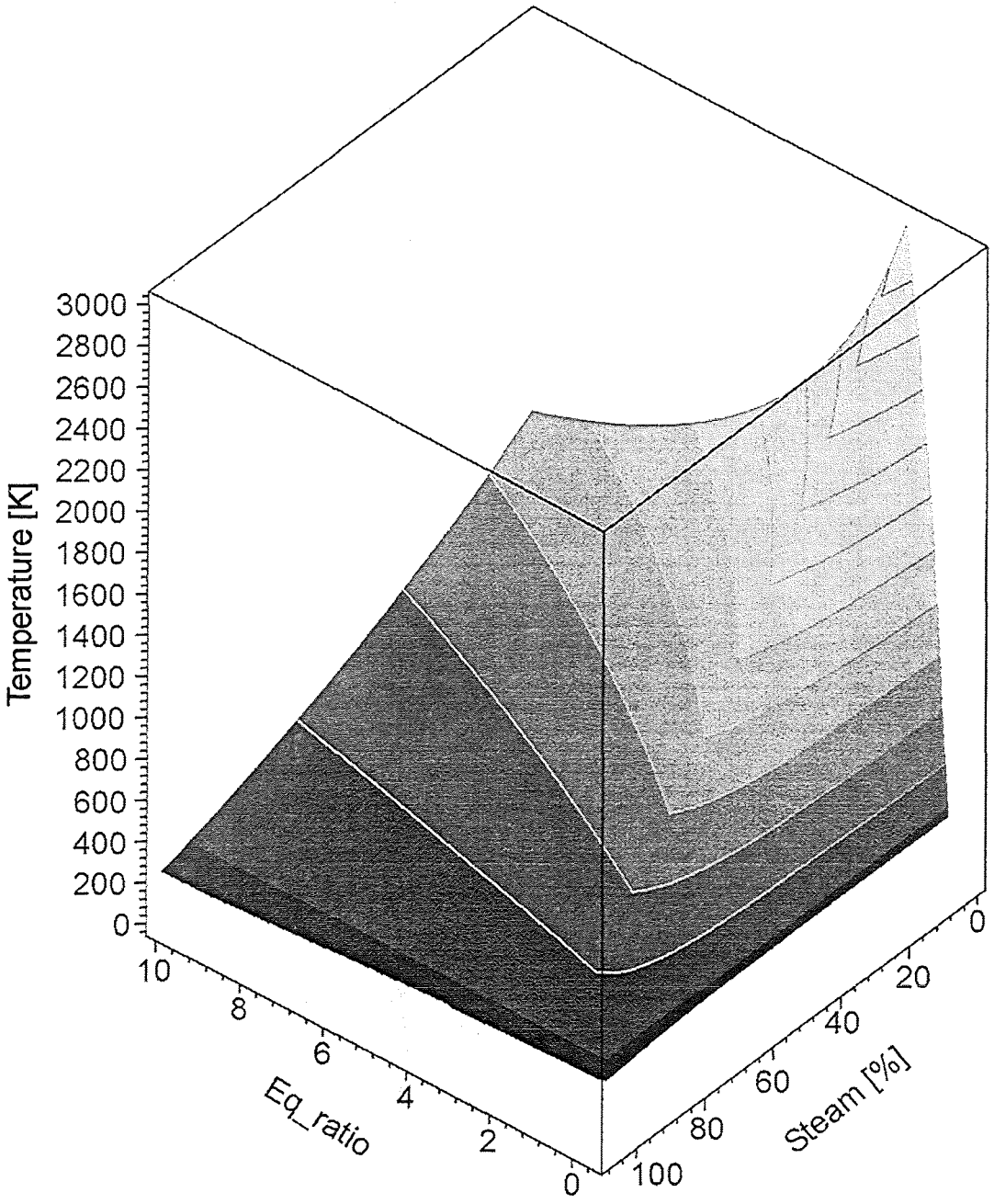


Figure 4: **The End Temperature T(1)**. The end temperature T(1) as a function of steam concentration and equivalence ratio at initial temperature T(0) = 298 K. Distance between adjacent levelsets: 250 K.

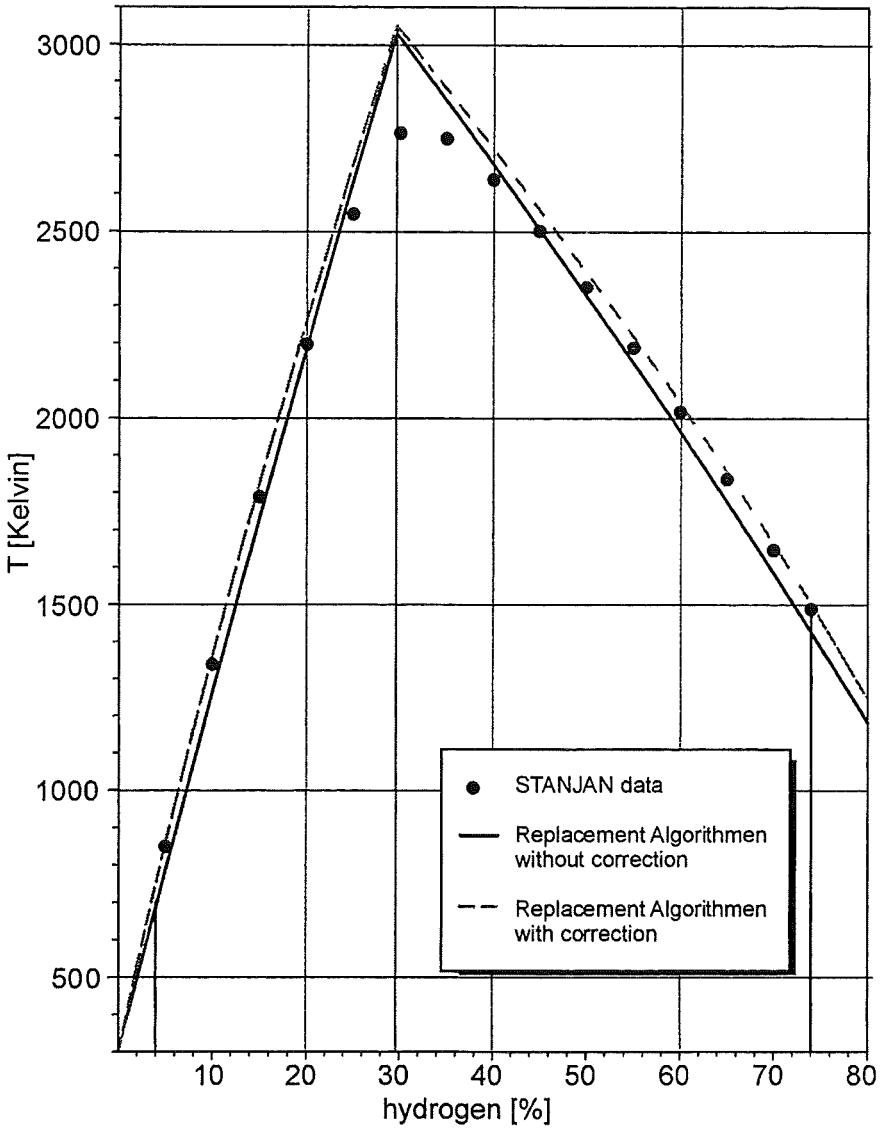


Figure 5: **The End Temperature T(1)**. The end temperature T(1) as a function of hydrogen concentration in a hydrogen-air-mixture at initial temperature T(0) = 298 K and no initial steam content. Comparison of STANJAN-values (circles) with the results of the replacement procedures based on quadratic (inner triangle) and corrected quadratic (outer triangle) approximations.

The discrepancy at high temperatures (> 2500 K) between STANJAN-values and the approximate temperature values is due to

1. non-equilibrium calculations, $\tau = \text{const} \approx 1$;
2. usage of non-iterative but approximative procedures.
3. the usage of simplified chemistry, 4 species instead of 9.

In order to adjust the approximate calculations to the STANJAN-data, a model the 'reaction degree' variable τ as a function of initial species' concentration, temperature T(0) (and possibly pressure p(0)) will have to be developed.

3.3 The Quotient $\frac{n(1)}{n(0)}$

There is a pressure reduction due to the change in the amount of substance during the reaction. This effect should not be neglected as can be seen from the picture below.

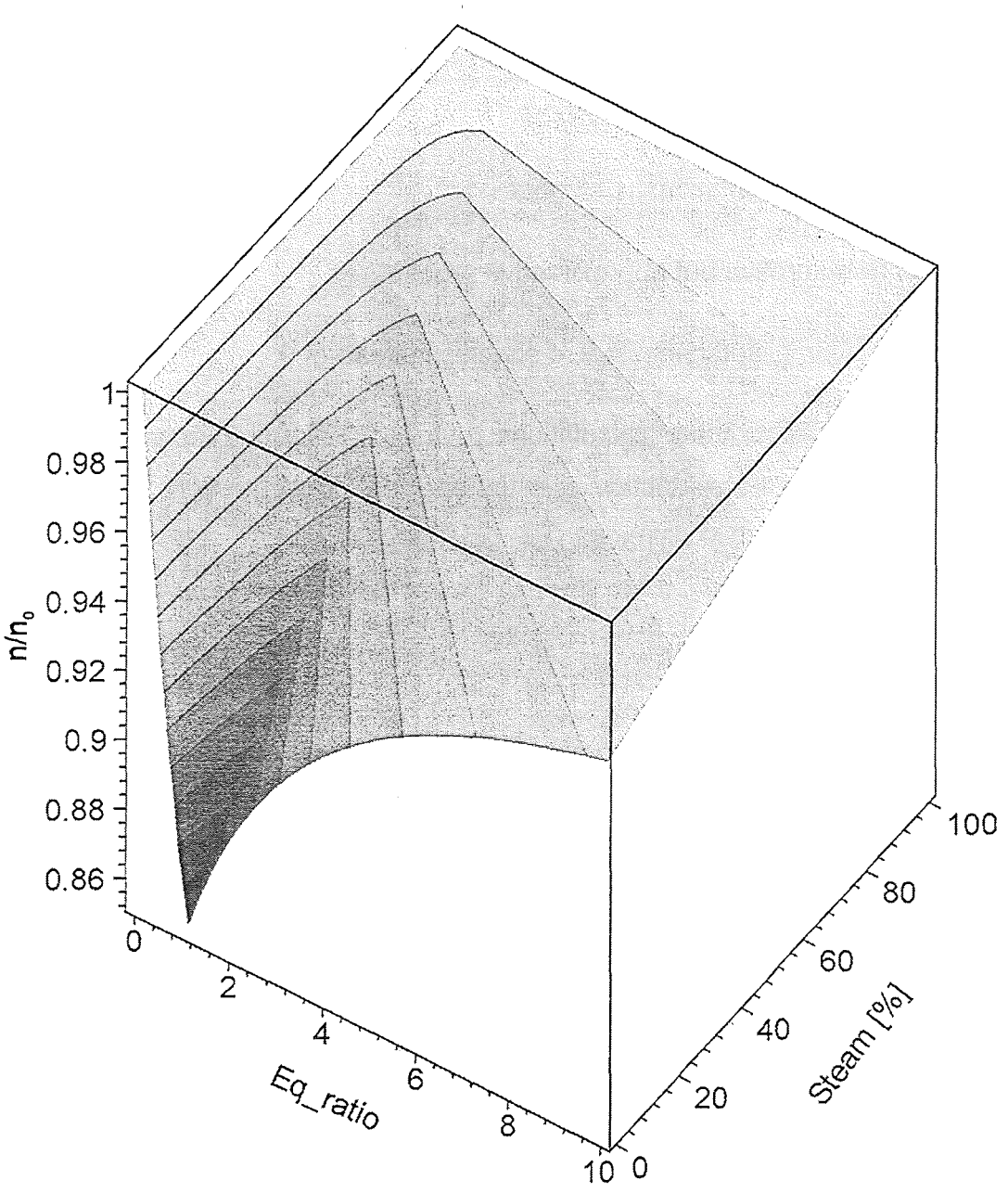


Figure 6: **Change in the amount of substance**. The quotient $\frac{n(1)}{n(0)}$ as a function of steam concentration and equivalent ratio. Distance between adjacent levelsets: 0.01.

3.4 The Pressure Quotient $\frac{p(1)}{p(0)}$

The subsequent two pictures display the final value of the quotient $\frac{p(1)}{p(0)}$ first as a function of steam concentration and equivalence ratio and second as a function of steam- and hydrogen concentration. The fact that the reaction stops if there is either no

fuel of no oxidizer left accounts for the appearance of an edge clearly visible in both figures.

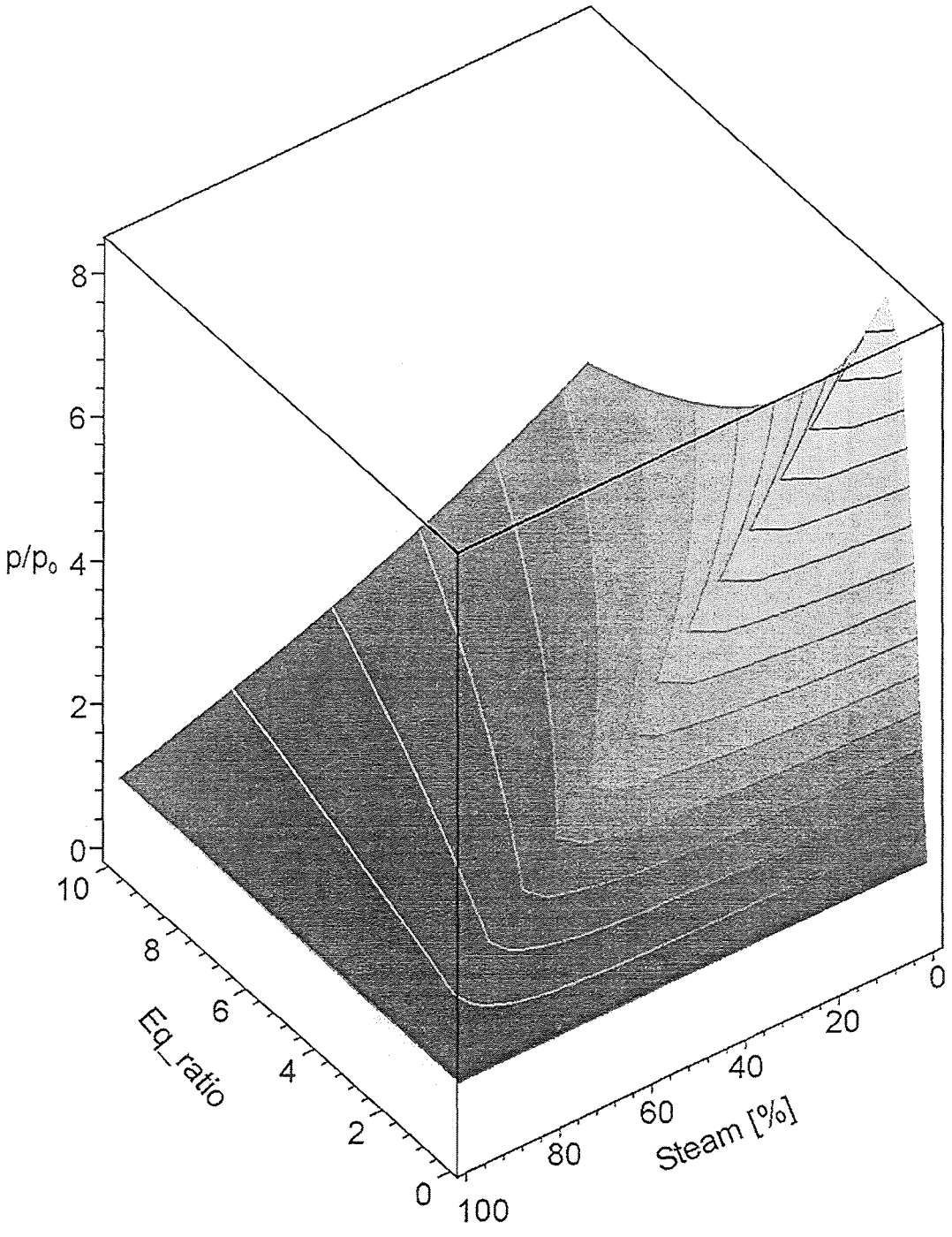


Figure 7: **Pressure change**. The quotient $\frac{p(1)}{p(0)}$ as a function of steam concentration and equivalence at initial temperature T(0) = 298 K. Distance between adjacent levelsets: 0.5.

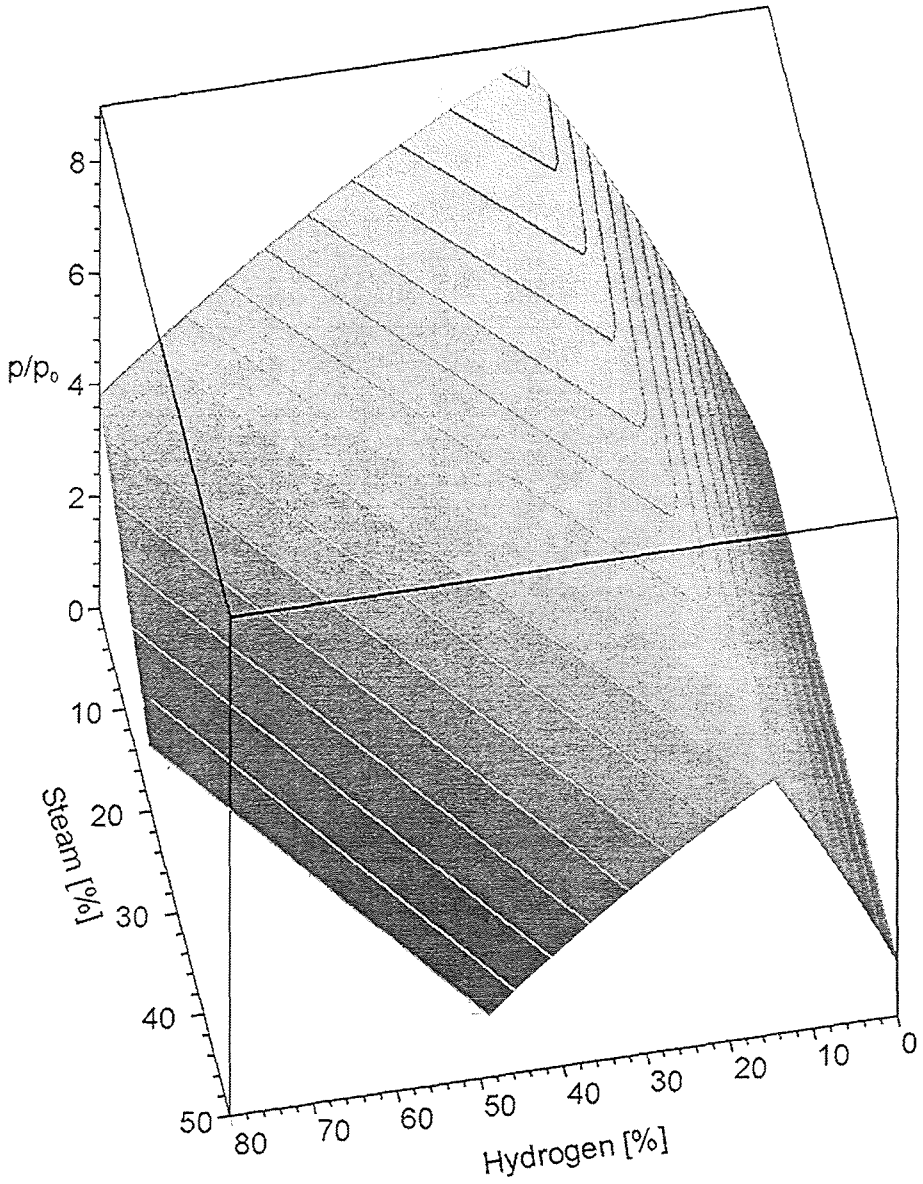


Figure 8: **Pressure change**. The quotient $\frac{p(1)}{p(0)}$ as a function of steam- and hydrogen concentration in a hydrogen-air-mixture at initial temperature T(0) = 298 K. Distance between adjacent levelsets: 0.5.

4. Open Questions/Future Research

In the calculation above so far the 'degree of reaction' τ is assumed to be constant ($\tau \approx 1$). But his quantity should reflect the equilibrium state of the combustion. It is in fact a complicated function of temperature and species' concentration (and initial pressure).

A fist adoption to STANJAN Calculations by choosing $\tau = 0.95$ yields a slight improvement in comparison with Figure 5.

STANJAN-values (circles) with the results of the replacement procedure based on corrected quadratic approximations with $\tau = 0.95$.

The a-priori knowledge of τ as a function of T(0) and species' concentration (and p(0) would give way to both the modeling of complete (= 'equilibrium') combustion and an improvement of STANJAN-calculations by offering the possibility to invoke experimental ignition- and extinction data.

5. Concluding Remarks

The iterative procedure to calculate 'equilibrium' combustion can be replaced by a calculation based on approximation with satisfactory results. This would allow the performance of AICC evaluations even when a iterative approach or an extensive use of tables is prohibited.

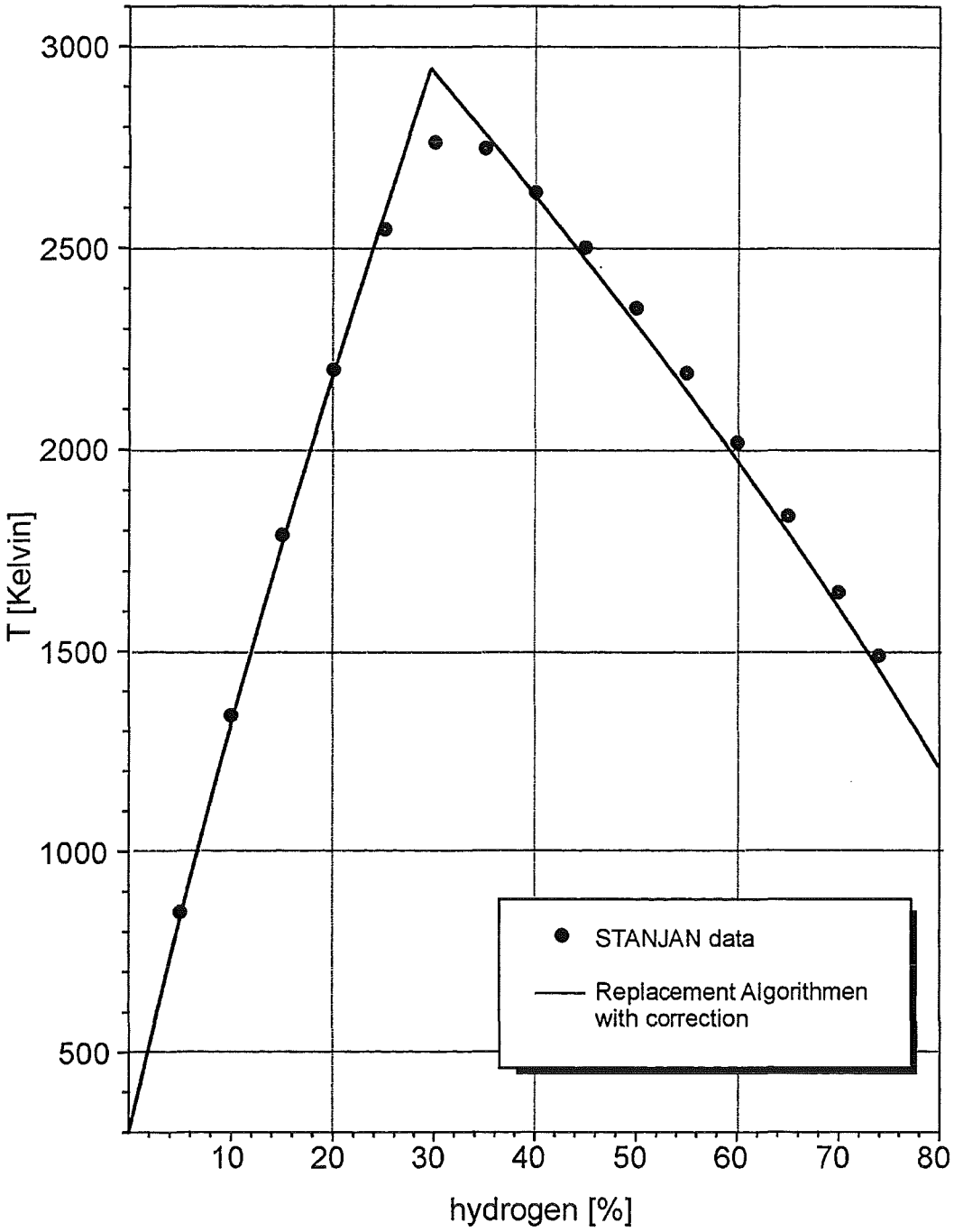


Figure 9: **The End Temperature T(0.95)**. The end temperature T(0.95) as a function of hydrogen concentration in a hydrogen-air-mixture at initial temperature T(=) = 298 K and no initial steam content. Comparison of

References

[1] MAPLE V Release 5.1 Waterloo Inc., Waterloo, 1998.

[2] G. Necker, A. Kotchourko, A. Veser, private communication, 1999.

[3] J.R. Travis et al. 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, user's manual. 2 (FZKA-5994), 1998.

[4] R.J. Kee et al., CHEMKIN-III: A Fortran Chemical Package for the Analysis of Gasphase Chemical and Plasma Kinetics. Sandia National Laboratories, Livermore, 1996.

[5] W.C. Reynolds, The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN Version 3. Dept. of Mechanical Engineering, Stanford University, Palo Alto, 1986.

32.21.02 Thermische Wechselwirkung von Kernschmelze und Kühlmittel

I. PREMIX und ECO, Experimente zur Schmelze/Wasser-Wechselwirkung

(H.-H.-Brüggemann, W. Cherdron, E. Jenes, A. Kaiser, I. Kornelson, N. Prothmann, D. Raupp, W. Schütz, H. Will, IRS)

Abstract

The PREMIX experimental programme was finished in 1999 by three tests, PM16, PM17, and PM18, in which compared to earlier tests, e.g. PM15, the influence of a larger melt mass in combination with longer pouring time and larger system pressure and of a larger degree of water subcooling on the mixing and quenching behaviour was investigated. The three experiments were performed in the frame of the EU-MFCI project within the Fourth Framework Programme. It was intended to carry out, at JRC Ispra (FARO/FAT facility) and FZK, at least two experiments each with different melt materials (corium/alumina), but all other initial test parameters as identical as possible.
Longer melt release as applied in PM16 has a strong effect on steam production and peak pressure.
An important result of the tests PM17 and PM18 with a larger water subcooling can be summarised as follows: The larger the subcooling, the smaller was the average steam volume fraction in the interaction zone. This implies that the mean distance of the melt to water, where the water included in the interaction zone as well as the bulk water are concerned, becomes smaller with increasing degree of subcooling, which in turn favours the occurrence of a steam explosion.
A preliminary comparison of essential PREMIX and FARO/FAT results is given.
The consistent continuation of the premixing phenomena investigation is the measurement of the conversion rate from thermal to mechanical energy in case of a steam explosion. For this purpose, the ECO facility has been erected. It has geometrical conditions similar to PREMIX, but will allow triggered and well-controlled steam explosions. The first ECO experiment is scheduled for early 2000.

Zusammenfassung

Das experimentelle PREMIX-Programm wurde 1999 mit den drei Versuchen PM16, PM17 und PM18 abgeschlossen. Hier wurde im Vergleich zu früheren Versuchen, z. B. PM15, der Einfluss einer größeren Schmelzemasse in Kombination mit längerem Schmelzeausfluß, erhöhtem Systemdruck sowie einer stärkeren Unterkühlung des Wassers auf das Vermischungs- und Quenchverhalten untersucht. Die drei Versuche wurden im Rahmen des EU-MFCI-Projektes innerhalb des 4. Rahmenprogramms durchgeführt. Hierbei sollten bei JRC Ispra (FARO/FAT-Anlage) und bei FZK mindestens zwei Versuche jeweils mit unterschiedlichen Schmelzematerialien (Corium/Aluminiumoxid), ansonsten aber möglichst gleichen Anfangsbedingungen durchgeführt werden.

Der längere Schmelzeausfluß hat, wie in PM16 gezeigt, einen starken Einfluss auf die Dampfproduktion und den Maximaldruck.

Ein wichtiges Ergebnis aus den Versuchen PM17 und PM18 mit stärkerer Unterkühlung kann wie folgt zusammengefasst werden: Je stärker die Unterkühlung, desto kleiner war die mittlere Volumenfraktion des Dampfes in der Wechselwirkungszone. Das bedeutet, dass der mittlere Abstand zwischen Schmelze und Wasser (letzteres sowohl in der Wechselwirkungszone als auch außerhalb im Pool) mit zunehmender Unterkühlung geringer wird, was wiederum das Auftreten einer Dampfexplosion begünstigt.

Ein vorläufiger Vergleich von wichtigen Ergebnissen aus PREMIX und FARO/FAT wird im vorliegenden Bericht ebenfalls geliefert.

Die folgerichtige Fortsetzung der Experimente zur Vorvermischung ist die Messung der Konversionsrate von thermischer zu mechanischer Energie im Falle einer Dampfexplosion. Dazu wurde der Versuchsstand ECO aufgebaut, der eine ähnliche Geometrie wie PREMIX hat und kontrollierte, getriggerte Dampfexplosionen erlaubt. Das erste ECO-Experiment ist für Anfang 2000 vorgesehen.

1. PREMIX

Introduction

Release of a hot melt into water may occur during a severe core-melt accident in a nuclear light-water reactor. In the course of the accident, the melt may drain down into the lower head of the reactor vessel which is filled with water. Quenching of the melt implies the possibility of a steam explosion, whose energetics mainly depends on the extent and characteristics of mixing.

At Forschungszentrum Karlsruhe, an experimental programme called PREMIX has been performed in which the mixing of a hot melt discharged into water was investigated on a small to medium scale. Safety directions as well as similarity considerations led us to choose alumina as a simulating material instead of corium. To date, 18 experiments, PM1 to PM18, have been performed under various starting conditions.

The results are firstly used to identify the phenomena that dominantly control the premixing. The information also helps in validating multi-phase computer codes presently under development, i.e. MC3D at CEA Grenoble and at FZK, MATTINA at FZK, IVA5 at SIEMENS, IKEJET at IKE Stuttgart, and COMETA at JRC.

In 1999, a documentation of PM12 – PM14 has been issued /1/ and a report has been given on the results of PM15 /2/. The present report gives important results of the last three experiments, PM16, PM17, and PM18, in which the influence of the system pressure and of water subcooling on the mixing and quenching behaviour was investigated.

The three experiments were performed in the frame of the EU-MFCI project within the Fourth Framework Programme. It was intended to carry out, at JRC Ispra (FARO/FAT) and FZK (PREMIX), at least two experiments each with different melt materials, but all other initial test parameter as identical as possible. By that it was hoped to attribute differences in the results directly to the different material properties.

Test Facility and Test Performance

The PREMIX test rig (Fig. 1) was housed in a 220 m^3 steel vessel which primarily served as a safety container. It could also be pressurised to allow experiments to be performed under elevated system pressures. The test rig consisted mainly of a vertical, largely cylindrical vessel, 4 m high and 0.7 m in diameter. The design pressure was 0.6

MPa. The bottom part of the vessel contained water, the melt source was installed on top. The test vessel was closed except for the four venting lines through which the steam formed during quenching escaped. The steam venting lines were closed in PM17 and PM18.

The melt was provided by a thermite reaction of powdered aluminium and iron oxide. The crucible was designed so that mostly alumina was released while the liquid iron was retained. Release of the melt occurred through a nozzle after the melting of a steel membrane. The water level was adjusted to obtain the desired pool depth.

The test facility was extensively instrumented with pressure transducers, level meters, thermocouples, and local void detectors. The instruments were distributed over the height as well as the azimuthal co-ordinate. Glass windows allowed video and high-speed filming.

Significant PREMIX test conditions are listed in Table 1. The conditions of PM16 were chosen to study the influence of a larger melt mass released in a longer time than before, on the one hand side, and to allow better comparison with the L-28 FARO test on the other (see Table II). The volumes of the melt masses, 60.4 kg in PM16 and 174 kg of corium in L-28, are approximately the same. The nozzle diameter (60 mm in former tests) was reduced to 50 mm to agree with that in L-28.

To achieve the same release time as in L-28 (about 6 s), nearly gravity conditions were required during melt release. In pursuing this goal, an operational monitoring system maintained the pressure difference between melt generator and interaction zone at a small level (0.005 - 0.01 MPa) by backfeeding gas to the crucible atmosphere from a reservoir. This procedure was applied in all three tests.

The conditions of PM17 were chosen to be as similar as possible to the FARO L-31 test. Attention was paid to the heat content above solidus, the system pressure, water subcooling, nozzle diameter, melt release pressure, and estimated speed of melt on contact with the water. The main feature of PM17 was the large degree of subcooling, 104 K, at a system pressure of 0.22 MPa. Closure of the venting pipes aimed at getting around difficulties in the numerical simulation of the steam flow through the pipes.

Test PM18 aimed at further investigating the influence of water subcooling by applying moderate subcooling (26 K compared to 104 K in PM17). The other test parameters agreed with those of PM17. The desired subcooling in PM18 was obtained by use of electrical heaters mounted at the bottom of the pool. The heating produced a radial

temperature gradient in the water (370 K in the centre and 362 K at the outside). The number of subcooling given in Table I is based on the temperature in the centre.

General Course of a Test and Evaluation of Data

By the penetration of the melt into the water, an interaction zone is formed which is composed of melt, steam, and water. The formation of steam, which goes along with a pressure rise, displaces the water which leads to an increase in the water level. The boundaries of the interaction zone expand in axial and radial directions. The steam that escapes from the interaction zone flows through the annular compartment and the venting lines (if open) into the container vessel. The melt stream, on its way down, fragments due to hydrodynamic interactions with the water and steam, respectively. Due to the long travel distance, the melt particles solidify or get at least a solid crust before they are collected at the fragment catcher.

Since the actual melt flow rate could not be measured, it was calculated using a small computer programme. The numerical model is based on a momentum equation that describes homogeneous flow of melt in a pipe. Input are the driving pressure difference and the melt mass from which follows the hydrostatic head. In the calculation, among other simplifications, constant flow cross section and loss coefficients are assumed. The melt starts to move down from the state of rest at the location of the membrane.

The axial and radial progressions of the interaction zone were evaluated on basis of film pictures as well as of void measurements. Lines drawn in the r-z diagrams given below, represent the outmost boundary of steam towards the bulk of water. Axial symmetry was assumed in the evaluation.

The evaluation of the most relevant data like the volume of the interaction zone and the distribution of the three components - melt, steam, and water particles - inside of it, all of them as functions of time, is outlined in the following. To facilitate the discussion of the results, two essential equations of the calculation are given below. The volume of evaporated water that has left the interaction zone is negligible; it has been omitted in the equations.

Volume of steam $\approx$ volume of level rise - volume of melt.

Volume of liquid $\approx$ volume of interaction zone - volume of steam - volume of melt.

The volumes of the interaction zone and the melt were calculated from the boundary lines mentioned above and from the calculated melt release, respectively. The actual water level is considered as the upper boundary of the interaction zone. The volume of the level rise is obtained from the measurement.

The jet break-up length (Table I) was obtained from the axial distance in the water up to which thermocouples were damaged by the melt. E.g., if all sensors positioned down to –915 mm were damaged, while those below that level were not affected, it is concluded that -865<L<-1065 mm (L being the distance from the initial water level).

Test Results

Test PM16

Figure 2 shows the time history of the pressure difference across the melt flow together with results of the small numerical programme: the melt speed, the mass released, and movement of melt surface in the generator. The pressure difference oscillated strongly. The reason was that unexpectedly steep pressure rises occurred in the interaction zone which could not be compensated fast enough by the monitoring system.

The oscillations in the pressure difference caused just such ones in the speed. The calculation gives conditions of almost and factual flow reversals at times 2.4 and 3.7 s. We presume that, at the second time, water penetrated into the crucible where it was evaporated. This event caused the pressure in the crucible to increase steeply and, by this, the melt release to continue. The probable end of melt release was around 5.0 s indicated by equalisation of the pressure inside and outside of the melt generator.

Comparison of characteristic data with those of PM15, whose results have been given in the last report /3/, seems reasonable. The major difference lies in the conditions of melt release. Melt release in PM15 occurred under constant crucible pressure; it was finished at about the time when a substantial portion of the melt had reached the fragment catcher. Melt release in PM16 was characterised by driving forces which were near gravity, a smaller nozzle diameter, and a melt mass that was two and a half times larger. Under these conditions, fragments began to settle at the fragment catcher long before melt release was over.

Pressure readings obtained in the water are given in Fig. 3, steam flow data in Fig. 4. The pressure increased in both tests as long as melt was delivered. This resulted in PM16 in a much higher peak value.

The pressure oscillations in PM16 can be assigned to those in the steam flow rate. The flow oscillations were caused by varying amounts of water slugs dragged with the steam. We believe that the water slugs temporarily blocked the entrance to the steam venting pipes.

The quenching rate can be taken as a means to compare heat transfer conditions of various experiments. It was calculated, in a first approximation, from the steam flow rate

using the evaporation enthalpy as a multiplying factor. The result, integrated over the time, is given in Fig. 4. The steam flow and with it the quenching rate reached a maximum at 6 seconds. This time is about the instant when the overwhelming part of the melt had arrived at the fragment catcher.

The energies transferred after 9 seconds are given, together with the melt masses, in the opposite small table. The energy in PM16 is higher by a factor of about 2.65 than that in PM15. This number agrees with the ratio of the melt masses in both experiments. Another quick information can be gained: The energy transferred till nine seconds corresponds to 20.3 % of the heat content of the melt above the saturation temperature at 0.5 MPa.

	PM16	PM15
Mass released, kg	60.4	23.1
Heat transferred after 9 s, MJ	53	20
Water dragged with the steam, kg	57	27

The increase in water level gives information about the growth rate of the interaction zone. The level data are compared in Fig. 5. Differently from previous tests performed with saturated water at environmental pressure conditions, the levels rose hesitantly (as did the pressure and steam generation data). This result seems to be due to the small actual subcooling of the water (Table II). Such a level behaviour was even more pronounced in the tests with larger subcooling (PM17 and PM18, see below). Essential level rise only started when melt material started to gather at the fragment catcher.

To give a quick answer for the hesitant level rises at the start of the tests, the integrated volume of the melt that entered into the water was estimated assuming constant release rate and a density of 3000 kg/m^3. The result has been entered in Fig. 5. Regarding the initial period of time, about 1-1.5 s, one finds that the interaction, in both tests, produced only small amounts of steam in the beginning. Results of a more elaborated method to calculate the fractions of melt, steam, and water in the interaction zone are given in the concluding report /4/. An example is presented in Fig. 6, which shows, besides absolute volumes, the composition of the interaction zone versus time. Starting at a low value, the steam fraction increased and caught up with the liquid fraction after 0.3 seconds.

A large fraction of fine particles (Fig. 7) was found in PM16. This may reflect the larger violence of the interaction observed in the films. About half the debris was found in PM16 as particles, the other as cake (the latter was not considered in the data of Fig. 7). No cake was formed in PM15.

The larger violence of the interaction can also be seen from the amount of water being dragged with the steam and partly being deposited in the water separators. This mass

of water amounts to 57 kg in PM16 while in PM15 only 27 kg were transported to that position. (Steam condensation in the water separators can be excluded, because all structures were heated prior to test above boiling temperature.)

As for the hydrogen production: No gas samples were drawn in PM16, neither prior to the test nor during the interaction, because no substantial amount of hydrogen had been found in the earlier tests.

Test PM17

The driving pressure and results of the small numerical program are given in Fig. 8. A melt mass of 16 kg was released in the calculation after about 1.7 seconds. At about that time, the pressure difference approached zero, by this indicating that melt release in the test came to an end.

The films show that part of the steam left the interaction zone, carrying melt and water particles with it. The steam occupied the freeboard volume (space between initial water level and nozzle exit) and penetrated also into the annular gas compartment. The interaction zone was open to the water surface at least as long as melt was delivered.

The pressure (Fig. 9) started to rise with some delay. The maximum increase, 0.06 MPa, was reached at 2.2 s, i.e. shortly after melt release had been finished. Later, during the decline, the pressure in the water shows superimposed oscillations. Pressures obtained in the gas space do not show these oscillations. I.e., the space above the water was decoupled from the source of oscillations. The source appeared to be some sort of subcooled boiling within the water. This finding was supported by information gained from films taken in PM18 (see below).

The growth of the interaction zone in PM17 (Fig. 10) was different from that in the preceding test with saturated water, PM16. Since in both tests the melt release rate was about the same, comparison is reasonable until the end of release in PM17 ($\approx$ 1,7 s). The diameter to length ratio of penetration was smaller in PM17 due to the subcooled water condition. Consequently, the level rise was much smaller in PM17.

Volumes resulting from the interaction and average volume fractions within the interaction zone in PM17 are discussed below together with results of PM18.

Post test examination gave the following results. The overwhelming part of the melt, 7.1 kg, was found as particles at the fragment catcher. Only small parts were found in the water separators (0.76 kg) and at the bottom of the facility (0.66 kg). A substantial portion of the melt (5.9 kg) had formed a solid cake at the fragment catcher. The cake

surface was covered with solid particles. The fragments were generally extremely brittle and broke to pieces during sampling. We therefore did without sieve analysis.

The analysis of gas probes drawn at various axial positions and different times showed only air. We conclude from this result that no hydrogen was produced neither by dissociation of steam nor by chemical reaction.

Test PM18

Figure 11 gives the driving pressure together with calculated results. One can see from the trace of the pressure difference that the GP12 pressure was increased three times until 1.4 s and the average driving pressure was 0.01 MPa. The calculation predicts release of 14.6 kg of mass after 1.4 seconds. This time agrees with the instant when pressure equilibrium occurred across the nozzle tube. The first maximum of the calculated speed, 2.9 m/s, agrees with the value obtained from film evaluation.

A noticeable result of PM18 is that the mass of melt released as well as the release time were smaller than in PM17 (see Table I). This result can be ascribed to (1) slightly different pressure conditions formed in the melt generator and (2) the faster pressure build-up due to interaction in PM18 (see below). Both conditions influenced the actual response of the monitoring system concerning frequency and rate of gas backfeeding. Eventually, the average driving pressure was somewhat larger and the release time was shorter in PM18 than in PM17.

The pressures measured in the water in PM18 and PM17 are compared in Fig. 12. As expected from the lower subcooling, the onset of the pressure rise was earlier and the peak pressure was higher in PM18. As in PM17, pressure oscillations occurred in PM18 where they started earlier.

In PM18, soon after the end of melt release, radial contractions of the interaction zone appeared which varied in size and axial height, while clouds of shining melt fragments came into zones of continuous water surrounding the core of the interaction zone (Fig. 13). In PM17, such information could not be gained since the steam/water interface of the interaction zone, probably because of a (still unknown) chemical reaction, became increasingly opaque from 2.5 s on. One could presume that the condition encountered in PM18 (i.e. melt fragments in continuous water) occurred in PM17 at a later time.

The volume of the interaction zone, MIAZ, grew much faster in PM18 than in PM17 (Fig. 14). More interesting information is obtained from the time functions of the average volume fractions (lower diagrams in Fig. 14). The most remarkable result is the large value of liquid volume fraction (around 0.8) in case of large subcooling (PM17)

remaining constant during the time considered. The result seems reasonable since the level rise in PM17 was smaller, in fact. Thereby, the volume fractions of melt and steam remained low.

In case of moderate subcooling (PM18), the liquid volume fraction also started at a large value. Between 0.1 and 0.4 s, the liquid and steam volume fractions came closer together. Later, using a corrected level function, the liquid fraction was calculated to be approx. 0.6, twice as high as the steam fraction. (The level data, which form the upper bound of the interaction zone in the calculation, had to be corrected towards larger values on basis of film evaluation).

The information gained from Fig. 14 and Fig. 6 (PM16, saturated water conditions) can be summarised as follows. The larger the subcooling, the smaller was the average steam volume fraction in the interaction zone, during the important period of melt penetration. In other words, while considering the definition given of the interaction zone, the mean distance of the melt to water included in the interaction zone and to the bulk water becomes smaller with increasing degree of subcooling.

After the test, 3.44 kg of loose particles were found at the bottom of the facility, 5.68 kg in form of a cake in the fragment catcher and 5.48 kg of loose particles on top of the cake. Sieve analysis of the fragments was performed separately for those particles found at the fragment catcher and the bottom of the facility. The result is shown in Fig. 15. The particles in PM18 were not as brittle as those in PM17. The photograph (Fig. 16) shows spherical as well as broken particles. We can not tell whether the breaks occurred during the test by quenching or the sieving process.

The amount of hydrogen generated during melt-water interaction was very small. The analysis of the samples partly resulted in no measurable hydrogen, partly in 0.2 to 0.3 % of hydrogen related to non-condensable gas. We estimated from the ratio of the pressures in the bottles during and after the experiment, that 50 % of the initial gas probe was steam.

Comparison of PREMIX and FARO/FAT test results

Experiments were performed in the frame of the EC-MFCI project mentioned in which the premixing of a hot melt in water was investigated at JRC Ispra (FARO/FAT) and FZK (PREMIX). It was intended to carry out at least two experiment with different melt materials, but all other initial test parameter as identical as possible. By that it was hoped to attribute differences in the results directly to the different materials. However, other differences could not be avoided, e.g. steam was released in PREMIX via venting

lines into a large compartment of about 220 m^3 (i.e. the safety container), while in FARO/FAT a closed gas compartment above the water was used. Consequently, in PREMIX system, the pressure increased only temporarily by the pressure drop across the venting tubes, whereas in FARO/FAT steam generation resulted in substantial increase of the system pressure.

Table II gives the most important features of the tests mentioned. With respect to system pressure and degree of subcooling, PM16 compares to FARO L-28 and PM17 to L-31.

In Fig. 17, the pressure obtained in L-28 FARO test /4/ is compared to the corresponding PM16 PREMIX test. The steam release into a much larger containment in PREMIX prevents a pressure rise as high as in FARO/FAT. In both experiments the pressure rise sustained as long as melt release was obtained.

A constant quenching rate of about 30 MW was stated in L-28, while in PM16 a stepwise increase to 10 MW was found. The difference might be due to the much higher melt temperature of 3052 K in FARO/FAT compared to 2600 K. Additionally, it might be of importance, that in FARO/FAT the water became more subcooled because of the essential pressure rise. In contrary to that, pressure rise in PREMIX is of minor magnitude, thus water sustained in approximate saturated condition.

Summary and Conclusions

The PREMIX test series has been performed to improve the understanding of the premixing phase during thermal interaction of a hot melt and water. Different parameters influencing the course of the mixing were varied in eighteen experiments: melt mass, degree of subcooling, system pressure, duration of melt release, and condition for steam release. The results of the last three tests of this series, PM16 to PM18, are described in the present report. In two of the tests, conditions were established similar to those in FARO/FAT experiments performed with corium, to allow for a comparison and to evaluate the influence of the different melt material on the mixing processes.

By video and high speed filming in combination with measurements of pressures, water level, temperatures, steam flow and void conditions, a large data base was generated to describe the development of the interaction and of related phenomena. This information is essential for validation of computer codes such as MC3D, MATTINA, IVA, IKEJET, and COMETA. These codes are needed to predict the course of severe reactor accidents and for the consequences arising.

In test PM16, with larger melt mass but similar rating as in PM15, steam production and pressure rise were larger. Long-term melt release obviously had a strong effect on the steam production. After the test, about one half of the melt was found as loose particles, the other as a cake.

During the two tests performed with larger subcooling, the melt started to penetrate into the water in a rather similar way. A narrow steam channel was formed, open to the surface as long as melt was delivered, through which steam escaped to the overlying freeboard volume. The development was later on determined by the degree of water subcooling which influenced the actual steam flow field. The pressure increase led to an increase in the actual steam/liquid interface temperature. By this, the effect of subcooling was enhanced.

In case of large subcooling (PM17), a large portion of the steam produced condensed in situ due to the larger temperature gradient across the liquid boundary layer, whereas a small fraction left the interaction zone upwards. Accordingly, the initial pressure increase was smaller in this test. The peak pressure was 0.06 MPa. The in-situ steam condensation is reflected in the large average volume fraction of liquid water (around 80 %) calculated inside the interaction zone.

In case of moderate subcooling (PM18), a larger portion of the steam moved up. Counter-current flow of steam and melt enhanced fragmentation at the circumference of the jet. This gave rise to larger radial extension of the interaction zone in the upper part. The peak pressure was 0.09 MPa. Pressure oscillations appearing in both tests after the end of melt release are attributed to a kind of subcooled boiling.

The information gained from the average volume fractions of the components within the interaction zone can be summarised as follows. The larger the subcooling, the smaller was the average steam volume fraction during the important period of melt penetration. In other words, the mean distance of the melt to water included in the interaction zone and to the bulk water becomes smaller with increasing degree of subcooling

It is further concluded from measurements that the core of the melt stream remained more or less compact up to a penetration length in the water of around one meter in both tests. A large portion of the melt reached the fragment catcher in a molten state where a solid cake was formed. The fragments were extremely brittle in case of larger subcooling.

Hydrogen generation was found to be of minor importance and never had an influence on pressure build-up.

To compare results of PREMIX and FARO/FAT tests and to localise differences resulting from the melt materials and their interaction with water, calculations are needed using the codes listed above. This is necessary because of the different venting and expansion conditions. Moreover, the contribution of hydrogen to the pressure rise has to be determined carefully since, unlike in PREMIX, a significant amount of hydrogen was found in FARO/FAT.

REFERENCES

/1/ Kaiser, A., Schütz, W., Will, H.
PREMIX Tests PM12, PM13 and PM14, Documentation and Evaluation of Experimental Data,
FZK-Bericht 6370, INV-MFCI (99) D050[1], Sept. 1999

/2/ Will, H., Kaiser, A., Schütz, W.
Influence of the System Pressure on the Mixing of a Hot Melt Released into Water, Jahrestagung Kerntechnik 1999, Proc. pp. 275-281,May 1999

/3/ Mühl, B. (Editor)
Untersuchungen zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen (Unfällen) in Leichtwasserreaktoren,
FZK, Interner Bericht PSF-Nr. 3318 (6. Fortschrittsbericht), März 1999

/4/ Will, H., Kaiser, A., Schütz, W.,
PREMIX, Second Test Series (PM12 – PM18), Final Report of Experimental Data and Evaluated Results
FZK-Bericht 6380, to be issued

/5/ Magallon, D., et al.
Molten Fuel Coolant Interaction (MFCI)
Proc. FISA-99 Symposium, EC, Jean Monnet Building, Luxembourg,
29.Nov. – 1.Dec. 1999

ACKNOWLEDGEMENT

This work is partly funded by the European Community (under contract FI4S-CT96-0037), SIEMENS and a consortium of German electricity utilities.

2. ECO

After completion of the PREMIX test series in summer 1999, the test facility was removed from the FAUNA safety vessel in order to install the new experimental facility named ECO.

The aim of the ECO experiments is to measure the conversion of thermal energy into mechanical energy in the case of a steam explosion under well defined conditions.

The new experimental facility is designed to act like a piston-cylinder-system. The thermite melt generator is connected to an outer cylinder and fixed in space. An inner, moveable cylinder which contains the water pool may be accelerated downward against a layer of crushing material. A sketch of the set-up has already been presented in the 1998 report. All parts are already manufactured and are equipped with the measurement techniques and different sensors.

A series of tests has been performed and completed by the end of 1999 to select the suitable explosive gas generator to trigger the steam explosion. From these tests, the pressure transient as well as the peak pressure were evaluated.

Two types of melt generators have been constructed for the first experiments: The generator Type 10 is designed for 17.5 kg thermite, which leads to 9.3 kg of aluminium oxide. The generator Type 20 leads to 18 kg aluminium oxide, using 34 kg of thermite. The outlet nozzles for the melt correspond to the nozzles used in the PREMIX experiments. The nozzle of the generator Type 10 has a diameter of 45 mm, resp. 60 mm at Type 20.

The outer cylinder of the system is designed to withstand an overpressure of more than 46 MPa. Under this condition it is impossible to install optical windows (like in PREMIX) for high-speed cameras in order to observe the mixing and the void. Therefore up to 120 void-probes will be installed to evaluate the premixing in the moment before the trigger is applied and the steam explosion occurs. High-speed cameras are used to record the motion of the cylinder and the deformation of the crushing material. These data, together with the pressure measurements inside the reaction chamber and further data e.g. from strain gauges will lead to a reliable calculation of the mechanical energy.

The first experiment is scheduled for beginning of 2000.

Table I: Actual test conditions

		PM15	PM16	PM17	PM18
Melt					
Mass released	kg	23.1	60.4	16	14.6
Temperature	K	2600	2600	2600	2600
Nozzle diam.	mm	60	48	48	48
Max. speed (calc.)	m/s	3.3	3.1	2.6	2.8
Approx. release time	s	1.4	5.0	1.75	1.5
Jet break-up length	mm	565-765	>1300	865-1065	865-1065
Water					
Temperature	K	416	419	292	370
Subcooling	K	8	5	104	26
System pressure	MPa	0.5	0.5	0.22	0.22

Table II: Most important conditions of PREMIX and FARO/FAT experiments

		PM16	L-28	PM17	L-31
Melt					
composition		≈ 90% Al_2O_3 10% iron	80% UO_2 20% ZrO_2	≈ 90% Al_2O_3 10% iron	80% UO_2 20% ZrO_2
mass	kg	60.4	174.9	16.0	92
temp.	K	2600	3052	2600	2990
volume	m^3	$21 \cdot 10^{-3}$	$\approx 19 \cdot 10^{-3}$	$5.7 \cdot 10^{-3}$	$\approx 10.2 \cdot 10^{-3}$
total enthalpy	MJ	258	247	68.4	≈ 125
enthalpy/volume	MJ/m^3	$12.3 \cdot 10^3$	$\approx 13 \cdot 10^3$	$11.9 \cdot 10^3$	$\approx 12.2 \cdot 10^3$
speed	m/s	2.4	2.34	2.6	≈ 2.2
nozzle orifice	mm	48	50	48	50
release time	s	5.0	5.25	1.75	2.52
Water					
mass	kg	512*	517	512*	480
temp.	K	419	424	293	291
subcooling	K	5	0	104	106
pool diam.	mm	692	710	692	710
depth	mm	1330	1440	1330	1450
Overlying gas					
pressure	MPa	0.5	0.5	0.22	0.22
volume	m^3	220+	3.528	220+	3.492

* above fragment catcher

\+ volume of safety container, steam expands via venting lines into this volume

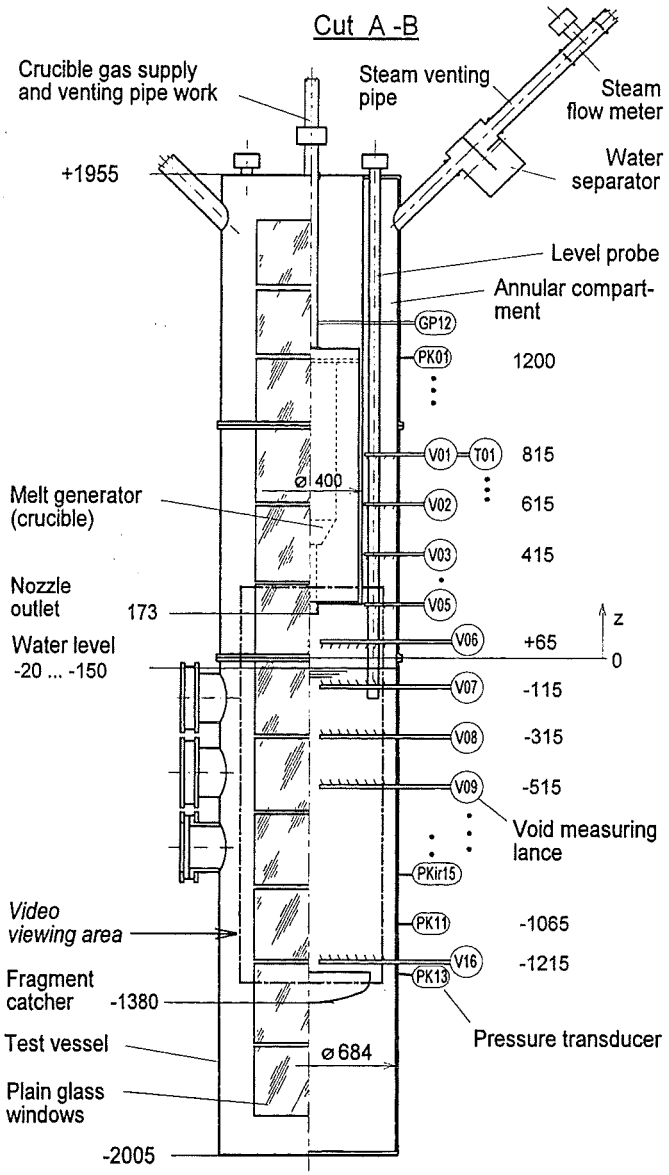


Fig.1: Test facility, schematically

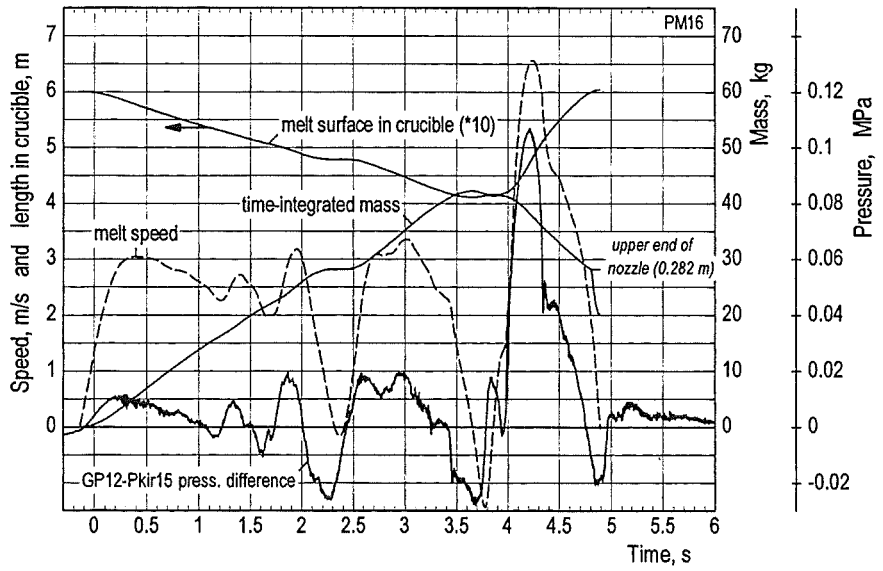


Fig. 2: Melt release calculated on basis of the driving pressure. The speed is related to the nozzle cross section.

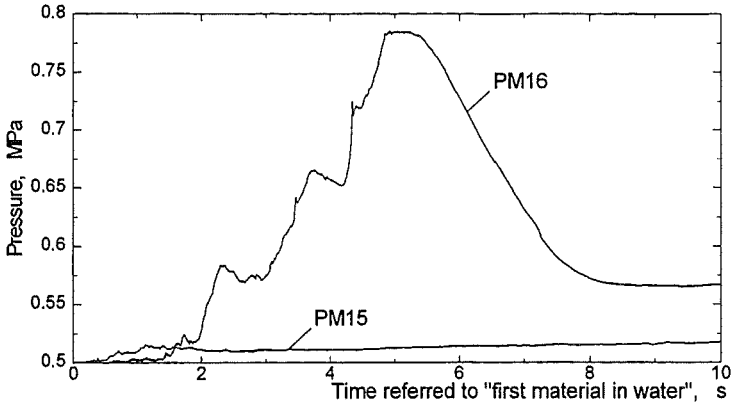


Fig. 3: Pressures measured in the water at –1065 mm height.

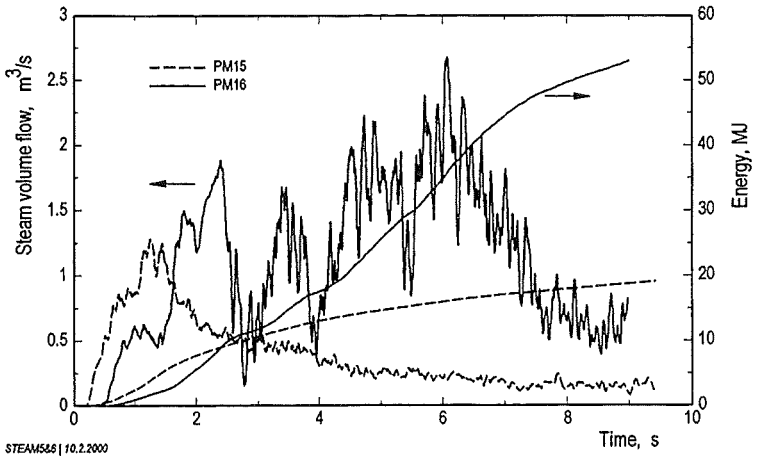
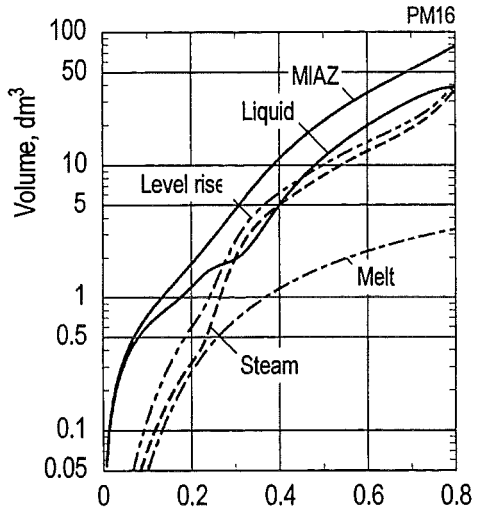
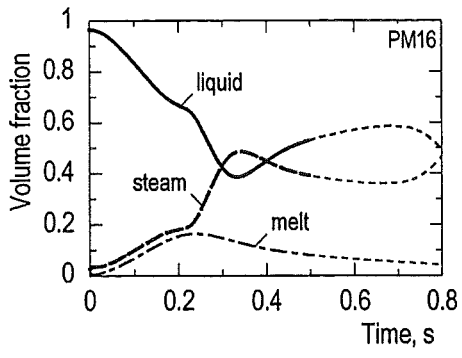


Fig. 4: Steam volume flow rates and the integrated quenching rates estimated from the steam flow rate.





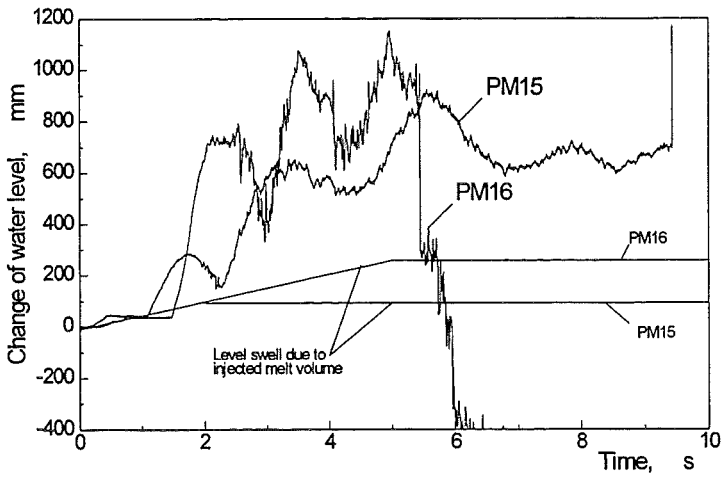


Fig. 5: Change of the water level.

Fig. 6: Volumes resulting from the interaction (MIAV=multiphase interaction zone; Level rise=volume due to level increase) and average volume fractions inside the interaction zone.

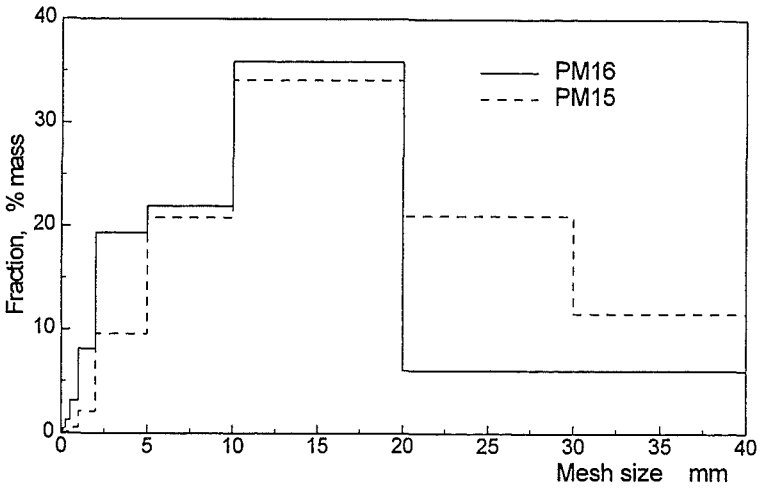


Fig. 7: Post test particle size distribution of the fragments.

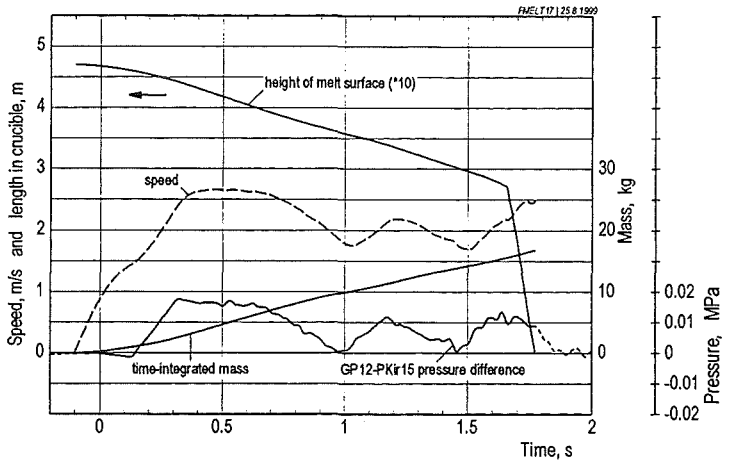


Fig. 8: Melt release data in PM17 calculated on the basis of the driving pressure.

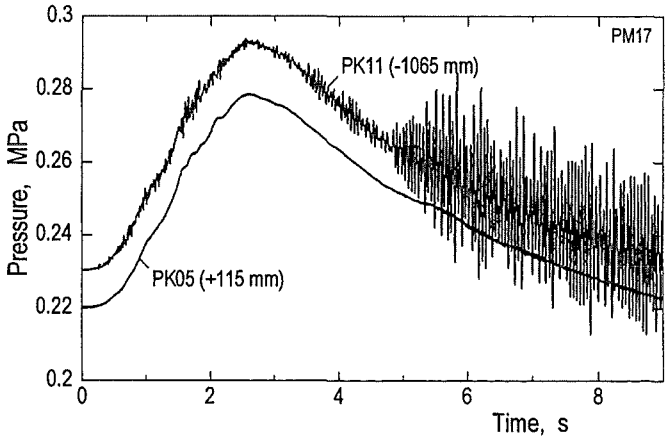


Fig. 9: Pressure obtained in the water (at –1065 mm) and in the gas compartment (+115 mm).

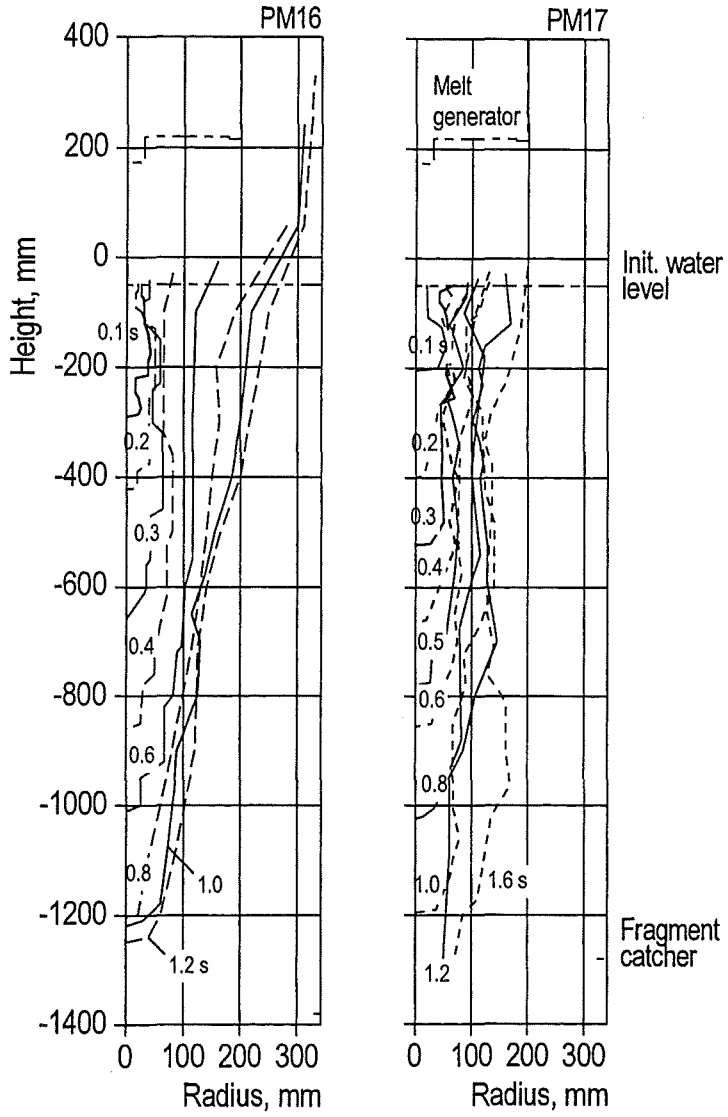


Fig. 10: Developments of the interaction zone derived on basis of first void signal responses and of high speed films.

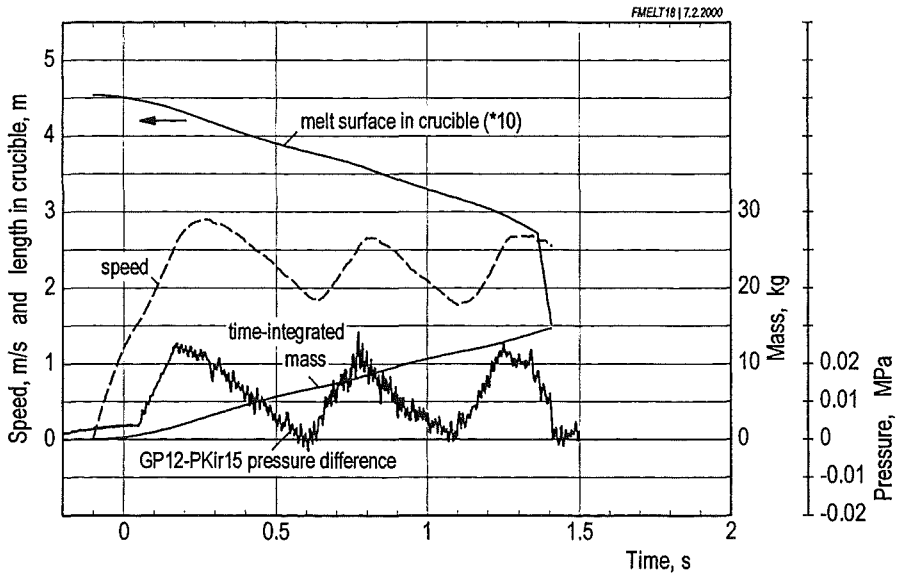


Fig. 11: Melt release data in PM18 calculated on the basis of the driving pressure.

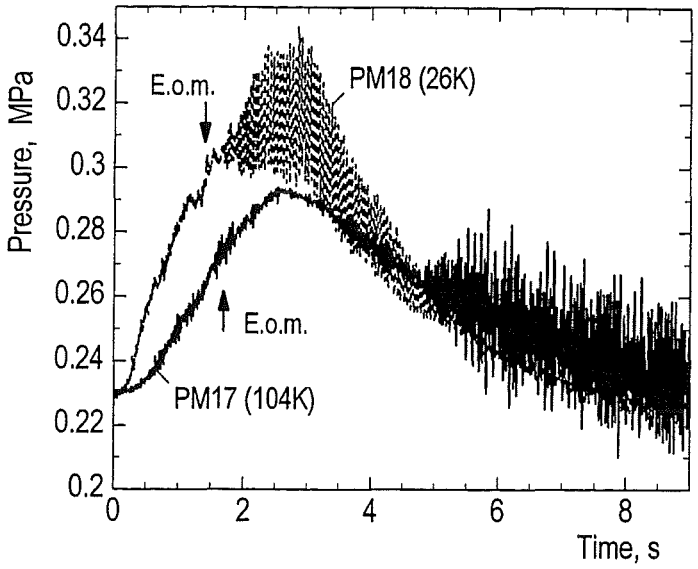


Fig. 12: Pressure readings obtained at –1065 mm height for two tests with different degrees of subcooling. E.o.m = end of melt release

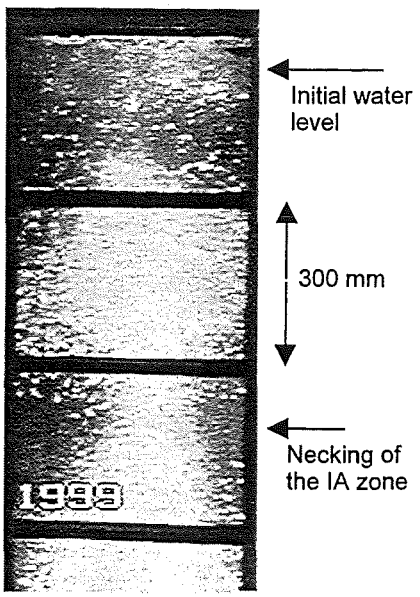


Fig. 13: Video frame (PM18) showing temporary contractions of the interaction zone (time = 1.9 s).

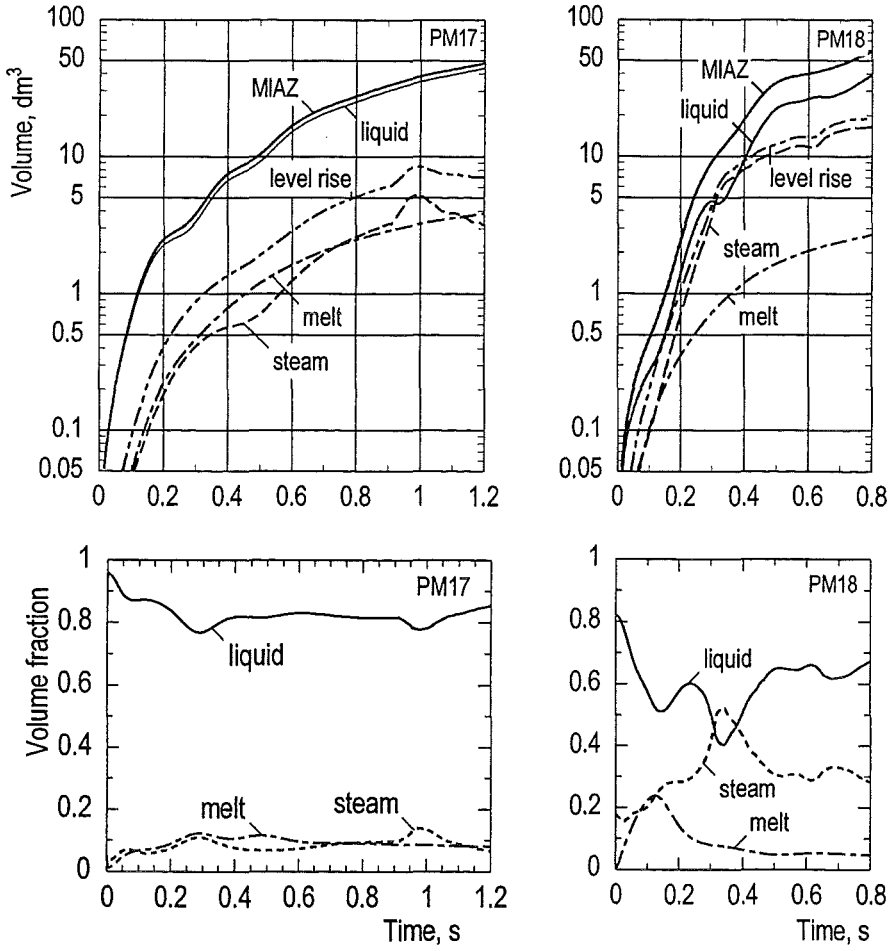


Fig. 14: Volumes resulting from the interaction (top) and derived average volume fractions

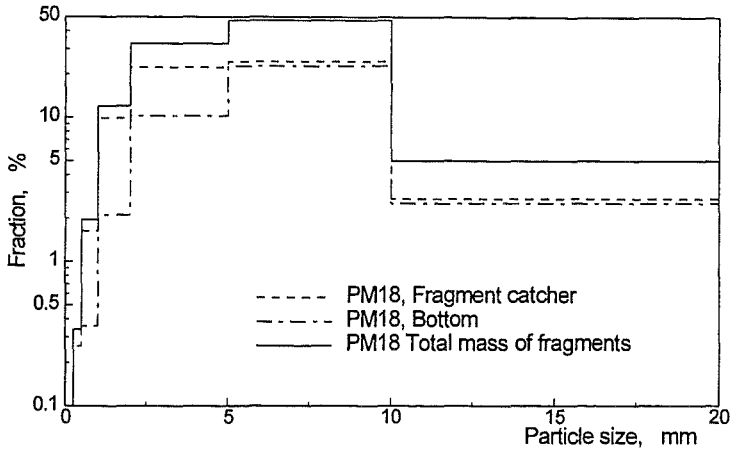


Fig. 15: Sieve analysis applied to loose particles.

Fig. 16: Particles sampled in PM18 at the fragment catcher, sieve fraction 5 – 10 mm.

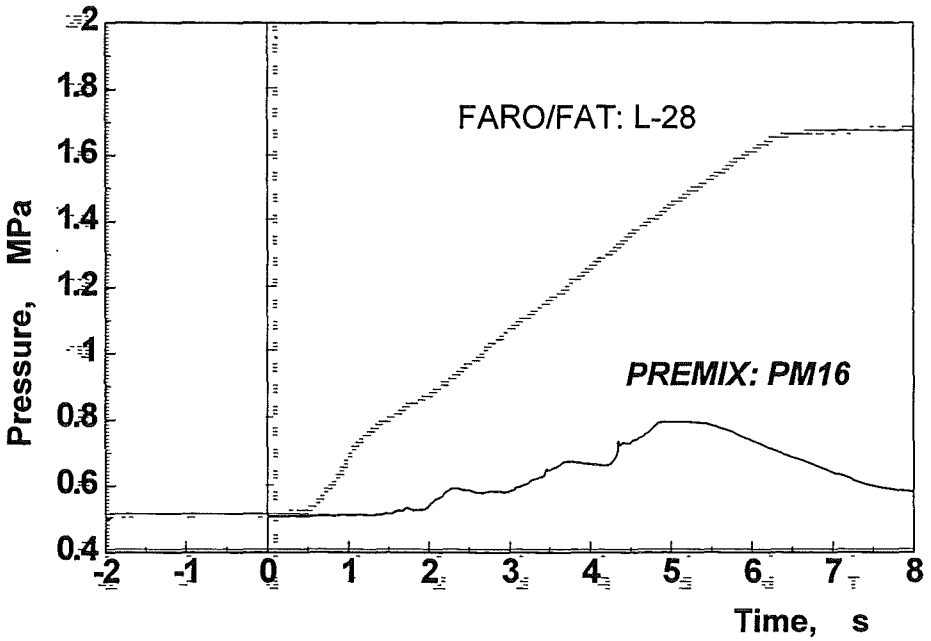


Fig. 17: Comparison of typical pressure readings of L-28 FARO/FAT and PM16 PREMIX tests

II. Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung

(H. Jacobs, P. Ruatto, B. Stehle, E. Stein, IKET; M. Böttcher, U. Imke, M. Lummer, D. Struwe, IRS)

Abstract

Work in 1999 concentrated on further development and validation of the multi-component multiphase codes MATTINA and MC3D on the basis of the experimental programmes QUEOS, PREMIX and FARO.

Zusammenfassung

Im Jahr 1999 konzentrierte sich die Arbeit auf weitere Entwicklung und Bestätigung der Mehrphasen-Mehrkomponenten-Rechenprogramme MATTINA und MC3D auf der Basis von Ergebnissen der experimentellen Programme QUEOS, PREMIX und FARO.

I. CODE DEVELOPMENT (MC3D)

In the beginning of the year a new reference version (MC3D 3.2) was released by CEA Grenoble. That version includes a lot of development work done at the Forschungszentrum Karlsruhe. In comparison to the old version considerable improvements were made in the modelling of physical processes. The calculation of the water-vapour interface area in the bubble-droplet transition flow regime was converted from a simple interpolation to a more physical area calculation based on the definition of coexisting regions of bubbly and droplet flow. Additional film boiling models are included and extended to account for the condensation at the vapour film surface. Added mass, lift force and turbulent dispersion can be used as options in the momentum balance equations. Progress was made in the numerics to simulate a compact melt jet with surface tracking using the volume of fluid method.

For a successful application of the new version to QUEOS and PREMIX experiments some adaptations and extensions were necessary to the model options which we implemented in the previous versions. The updates are related to the simulation of compact melt at the bottom by low surface area droplets, the fragmentation of melt droplets, the droplet-droplet heat transfer, the direct heat transfer from melt to bulk water in the case of strong sub-cooling, the inert gas simulation, the radiation heat transfer, the condensation heat transfer, the drag laws, and the handling of vanishing components. Some changes were made to the explosion application to make it more consistent with the premixing application and to improve the interface between premixing and explosion application.

II. CODE VALIDATION (MC3D)

The main challenge of simulating melt water interaction experiments like PREMIX and FARO is the modelling of melt jet break-up. A direct verification effort is not feasible due to the lack of precise experimental data on the type of melt release and on the dynamics of the process. PREMIX video films and destruction of thermocouples by hot melt give some indications about the break-up process. The final state of solidified debris was investigated carefully to get information about the total surface of solid particles. Together with other measured interaction parameters like pressurisation and steam flow some conclusions are drawn about jet break-up. As an example of the validation procedure of premixing calculations we describe the application of MC3D 3.2 (FZK) to the PREMIX 13 experiment [1]. Three different possibilities are available to model melt jet break-up within MC3D:

-The first one is to simulate a compact jet leaving the orifice and track the interface when the melt penetrates into the water. The melt stream is considered as a continuous separate phase relative to the melt droplets without inclusions of water and gas. This leads to some complications what concerns the physics such as the determination of transfer laws (fragmentation, heat, momentum) and numerical aspects. However, numerical diffusion is strongly reduced and a clear definition of the melt interface is given. For the present calculation transfer of the melt phase into droplets is controlled by a constant fragmentation rate. Droplets with a diameter of 0.4 cm are produced which do not further fragment.

-The second possibility is to use the same field for the compact jet and the melt droplets. The melt flow is regarded as compact as long as the melt volume fraction does not fall below 0.3. Outside the compact jet droplet flow is assumed and again for the present case 0.4 cm particles are taken. Creation of droplets is controlled by drag processes at the melt jet front initiated by the droplet flow regime and numerical diffusion.

-The third possibility takes into account experimental observations deduced from video films. The melt jet leaving the orifice becomes broader from the very beginning and very early during penetration into the water strong radial mixing takes place. Deviation from axis symmetric behaviour is observed. Combining all effects a smeared prefragmented melt droplet stream is simulated from the very beginning. In the present case the diameter of that droplet stream is doubled compared to the jet size and the droplets have an initial diameter of 2 cm. The hydrodynamic Pilch fragmentation law [2] for melt droplets gives a local time dependent reduction of the diameter due to interaction processes until a minimum of 0.4 cm is achieved.

All three cases describe some extreme behaviour, however, in reality a mixture of compact and smeared jet behaviour is expected.

Figure 1 shows measured and calculated vapour pressure curves during the first two seconds of the experiment PM13. Jet interface tracking overestimates pressurisation all the time. As in the case of using compact droplets, a relatively strong pressure peak occurs early, which was not measured. Creation of small droplets triggers an effective interaction when the melt front enters the water surface. The smeared flow of large particles gives nice behaviour at the beginning but overestimates the pressure in the late phase slightly. The general tendency apart from the first water contact can be represented by all three different simulations.

Table 1 shows some integral values compared to experimental results. Melt front velocity in the water and vapour production can be simulated satisfactorily by all three kinds of melt release simulations. Water loss, vented melt and total melt surface found in the experiment are in the order of magnitude of the simulation results.

	Average front velocity (m/s)	Vented vapour (kg)	Water loss (kg)	Vented melt (kg)	Total melt surface (m^2)
Experiment	1.4	4.0	210	4.0	10.8
Interface	1.6	4.5	140	3.0	10.9
Compact	1.2	3.8	200	2.2	11.1
Smeared	1.3	4.1	150	2.2	11.2

Table 1: Integral values of the PREMIX 13 simulation. Water loss, vented melt and total melt surface are measured after the experiment, simulation values are given 2 s into the transient.

We conclude that different kinds of modelling the water jet interaction influences mainly the first phase of water melt contact. Integral results and general pressurisation behaviour are driven essentially by the total surface of melt droplets which has to be reached at the end. The procedure to obtain that surface is not as important as one would suppose. This finding is very helpful for reactor applications, where jet simulation by interface tracking is difficult to realise due to limitations of computational resources.

With the standard drag formulation for liquid components in MC3D the momentum coupling for given volume fractions is independent on the diameter of droplets and bubbles. It is argued that the drag coefficient of the distorted particles depends only on shape. In most cases considered in FCI calculations bubbles and particles are under fragmentation due to the large velocities appearing during the interaction. We introduced a new option to use a constant drag coefficient proposed by Pilch and Erdman [3] for such configurations. Figure 2 shows the pressure curve calculated with this option for the PM13 experiment. Figure 3 shows the time dependent vapour production compared to the experimental values.

Further validation calculations were done for the experiments PM15, PM16, PM17, FARO L14 and L28. The most important parameters determining the quality of the

results are linked to the melt droplet fragmentation: initial and final droplet radius. For the investigation of the different physical models like heat transfer and drag without the influence of fragmentation several QUEOS experiments were recalculated including a 3D simulation of an experiment with three jets of zirconia spheres (Q61). The explosion application was used to do preliminary calculations for the energy conversion experiments (ECO, [4] pp. 170-1), which will start in 2000.

III. CODE VERIFICATION (MATTINA)

Checking, development and verification of MATTINA were continued by simulating experiments out of the QUEOS and PREMIX series performed at FZK. In doing so, the aim was to test and demonstrate the predictive capabilities of the code as far as possible, i.e. the simulations include the release of the spheres or melt, respectively, from the respective sources (sliding doors and melt generator) and the venting of the steam from the test vessels. The latter item is difficult to model with a prescribed pressure loss coefficient as such a coefficient would have to vary during the experiment. In the simulations with MATTINA, the vent lines are, therefore, modelled to some extent and their pressure losses are adjusted to the experimental situation by fitting limited permeabilities within the vent lines so that the apparent pressure loss coefficients observed in the experiments and in the simulations are similar. Of course, once such an adjustment is made it applies to all experiments performed under the same boundary conditions that influence steam venting. The work on both types of experiments is not yet finished, so only exemplary results are given here.

The purpose of all QUEOS simulations is to demonstrate that MATTINA is able to describe quite different experiments without variation of parameters besides an adjustment to the experimental initial and boundary conditions. Here, for the first time, experiments with zirconia spheres have been simulated, which have a lower density (6.1 g/cm^3) than the molybdenum spheres (9.7 g/cm^3) considered so far /5/. Therefore experiments Q54, Q55, Q57, Q58 and Q59 have been simulated, thus covering the possible combinations of open (Q54, Q59) and practically closed (Q55, Q57, Q58) test vessel and initially saturated (Q54, Q57) and slightly subcooled (Q55, Q58, Q59) water.

A special aim of these QUEOS simulations is to compare measured and calculated gas volume fractions within the premixture. The gas volume fractions are measured

at a water depth of 60 cm along two horizontal lines 50 mm apart. If y is a coordinate along the solid (non-transparent) vessel wall and its vertical center line is taken as zero, these two lines are at y = ± 25 mm. There are 25 void probes on each of these lines. For a simple qualitative measure, mean values were determined from 6 sensors in the center (3 on each side) and two such groups of 6 sensors at a distance of 15 cm from the center to the right and left, respectively. (More details may be found in the progress reports of 1997 and 1998, i.e. [6] and [4].) These values can be compared to similarly averaged results from the axially symmetric calculations. Such comparison can, of course, be successful only if the experiment as a whole is well represented by the calculation and especially the distribution of spheres is described about correctly at least up to the time when the spheres pass the void sensors. These conditions are largely met in the simulations that have been performed, although the example shown in Figure 4 seems to indicate that the spheres are slightly late in the simulation.

QUEOS 58 is an experiment in which the test vessel was nearly closed (only the small pressure relief valve above the sliding doors has remained open until about 1.5 sec). As already discussed in [4], this condition causes a relatively high pressure rise which induces an additional water subcooling of almost 20 K. Therefore voiding is essentially restricted to the centre (in the direct path of the sphere jet) and the period when the falling spheres pass the void sensors. But even there the 90 % limit is hardly exceeded. At the positions at 15 cm radius, the volume fractions of spheres remain lower and only very low gas volume fractions are observed. Qualitatively this result is well represented by the calculation. Quantitatively one mustn't expect too much from a simulation with assumed axial symmetry after the spheres have dropped 1.3 m through air and 0.6 m through water (the agreement in the falling flank of the big peak must be fortuitous). But at least until 0.85 sec the calculated values are of the same order of magnitude as the measured ones. After that, in the second period, most of the spheres have already settled on the bottom and some rising bubbles are indicated in the measurement. That these are missing in the calculation may be a consequence of artificially limiting the heat transfer between spheres and water in the bottom cells which serves to account in a rough way for the separation of the spheres from the water when they settle on the bottom, which is not described by the standard flow regimes (dispersed flow) of MATTINA. Without this limitation, the calculated gas volume fractions were close to 100 % in the later phase in all

simulations. With this ad-hoc model, the general trend of the second period was found in the calculations as well: the gas volume fractions are small when the actual subcooling is high (> 10 K) and they attain intermediate values (around 50 %) when the subcooling is small. In general, an underestimation of the gas volume fraction should be conservative as it favours mixing and wave propagation.

For a long time the simulation of PREMIX experiments [1] which involve the transient breakup of a melt jet and further fragmentation of melt drops has proven to be a difficult task for MATTINA. Much improvement has been obtained by

a) improving melt fragmentation by reducing the surface tension of the melt by a factor 2 and
b) closely simulating the initial and boundary conditions of the experiment, especially the spray of melt drops that practically always precedes the melt jet.

The usefulness of reducing the melt surface tension had already been demonstrated with MC3D (see above). It lies in the same line as using a reduced critical Weber number which has been done in some other codes. But reducing the melt surface tension has the advantage that it applies to the melt only (not the water) and that it can be made material dependent (if necessary). Also, the actual values are not too well known for the complex oxide mixtures we are concerned with.

The initial shower of melt droplets shapes the water surface in such a way that steam from the mixing zone around the melt jet can escape into the annular space around the melt generator in PREMIX (to which the vent lines are connected like the cold legs to the downcomer in the reactor situation) without blockage by water that rises by 0.2 m and contacts the lower face of the melt generator. Such a blockage would lead (leads in simulations) to compact water being pushed into the annular space and further blocking the steam flow. In the simulations, this situation is aggravated by the assumed axial symmetry which means that a blockage that occurs affects all vent lines at the same time. In the experiment, blockages are actually observed at later times, but they never affect more than 2 of the 4 vent lines at a given time. Similar to the situation observed with MC3D, it doesn't seem to be too important whether the melt jet is modelled as an initially compact jet or as a stream of large drops with a cross section three times that of the compact jet. So far only PREMIX 13 has been simulated. An example (obtained with a compact jet) is shown in Figure 5.

REFERENCES

[1] A. Kaiser, W. Schütz, H. Will, PREMIX Tests PM12, PM13 and PM14 Documentation of Experimental Results, FZK Bericht 6370, 1999.

[2] M. Pilch, Acceleration induced fragmentation of liquid drops. Ph. D. Thesis, University of Virginia, 1981.

[3] M. Pilch, C. A. Erdman, Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop, Int. J. Multiphase Flow , Vol. 13 , No. 6, pp 741-757,1987.

[4] Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe report FZKA 6300 (September 1999)

[5] L. Meyer, G. Schumacher, H. Jacobs, K. Thurnay, "Investigation of the premixing phase of a steam explosion with hot spheres, Nuclear Technology **123** (1998) 142-155

[6] Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1997, Forschungszentrum Karlsruhe report FZKA 6126 (September 1998)

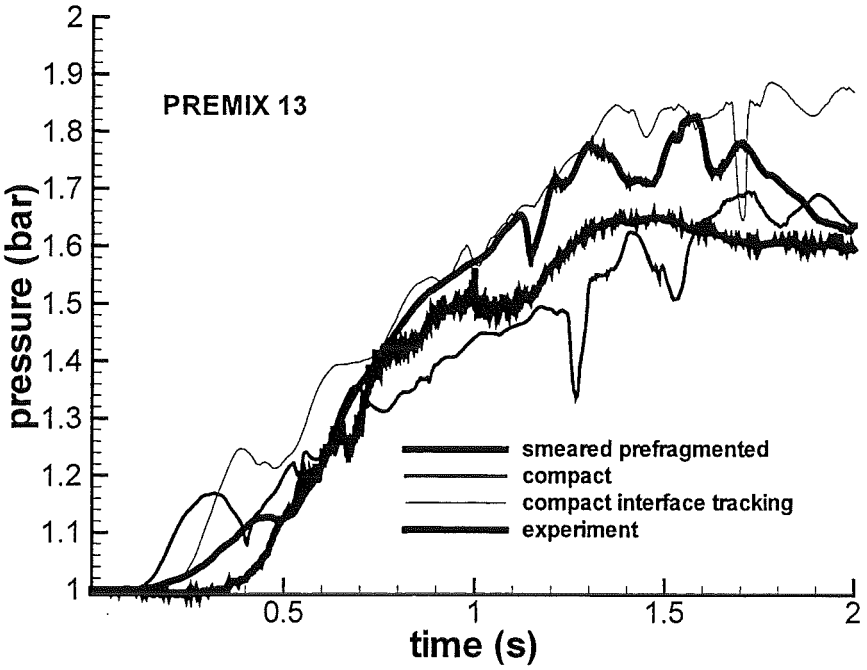


Figure 1: Pressure in the vapour space of PREMIX 13.

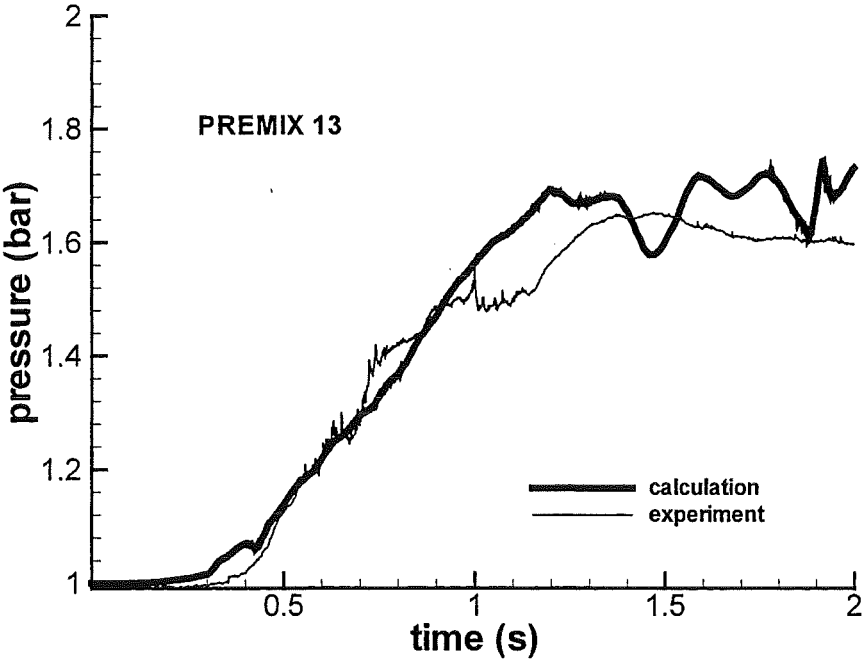


Figure 2: Pressure in the vapour space of Premix 13 using the new drag option.

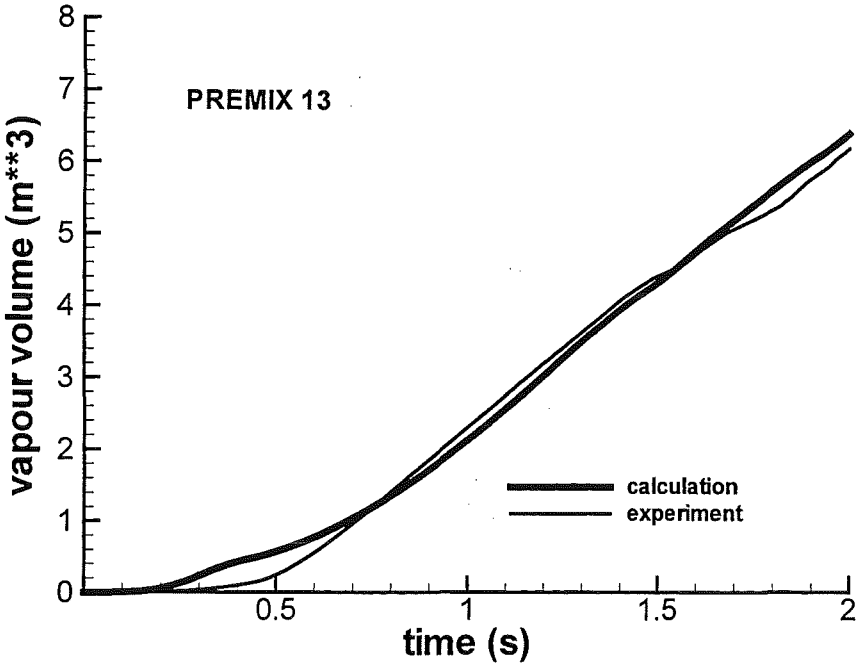


Figure 3: Vapour production in Premix 13 using the new drag option.

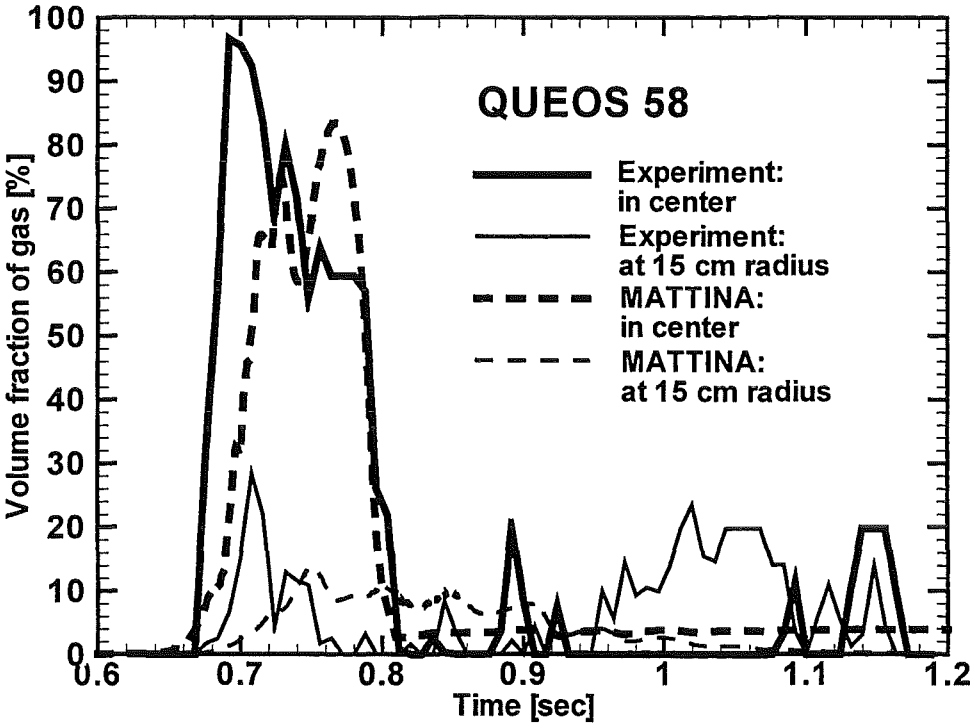


Figure 4: Comparison of measured and calculated gas volume fractions.

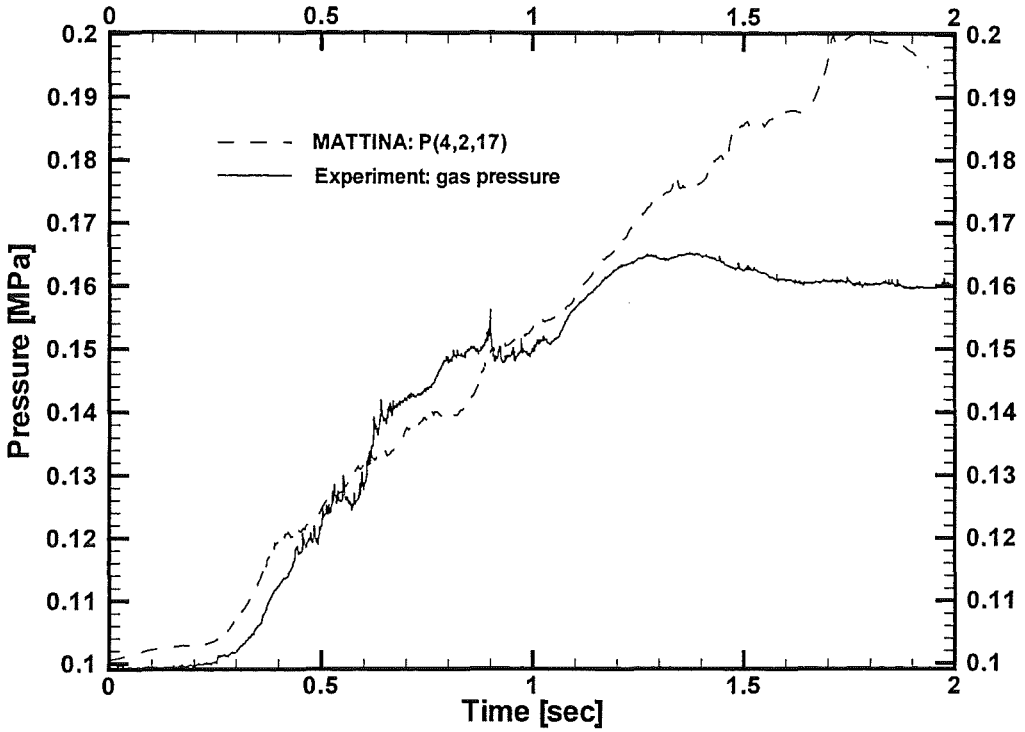


Figure 5: Comparison of measured and calculated pressure in the gas space for PREMIX 13.

32.21.03 Versagen des Reaktordruckbehälters und Dispersion der Kernschmelze

I. On material modelling, identification of material parameters and application to two benchmark exercises

(H. Lämmer, E.Diegele, IMF II)

Abstract

The thermoviscoplastic model of finite deformation thermoviscoplasticity, presented in 1997, and the identification of material parameters as given in 1998 was applied to two benchmark exercises within the REVISA (Reactor Vessel Integrity in Severe Accidents) project in 1999. Starting from a simplified version of the theory which only includes the kinematic hardening assumption new sets of parameters were identified for 16MND5 reactor pressure vessel steel from simple tensile and creep tests. The model implemented in the ABAQUS finite element code was applied to two exercises. The first was a benchmark exercise which follows the loading conditions of the RUPTURE experiment #15 as performed at CEA. The numerical analysis was compared to the experimental data. The second example was a scenario of small hot spot and external cooling by radiation.

Zusammenfassung

Das im vorletzten Bericht vorgestellte Modell der finiten Thermoviskoplastizität mit Schädigung und das im vergangenen Jahr beschriebene Verfahren zur Bestimmung von Materialparametern wurden im Berichtszeitraum 1999 im Rahmen des EU-Projekts REVISA (Reactor Vessel Integrity in Severe Accidents) auf zwei Benchmarktests angewendet. Ausgehend von einer vereinfachten Version des Modells wurden anhand von einfachen Zug- und Kriechversuchen neue Parametersätze für den Reaktordruckbehälterstahl 16MND5 bestimmt. Das in den Finite-Elemente-Code ABAQUS implementierte Modell wurde auf zwei verschiedene Benchmarktests angewendet, die im vorliegenden Beitrag detailliert beschrieben werden.

1 Introduction

In order to properly describe the failure of the reactor pressure vessel (RPV) lower heat after severe melt accidents a coupled finite deformation thermoviscoplastic model with damage was developed [1] and implemented in the ABAQUS [2] finite element code.

Contrary to conventional approaches, a coupled model should be capable to

- properly cumulate the strains and the damage at various temperature and loading conditions
- properly redistribute stresses from heavily damaged zones towards less damaged zones
- properly describe thermo(visco)plastic instability as well as creep and ductile rupture.

The development of a coupled damage thermoviscoplasticity models was the aim of task 2 in the framework of the REVISA project. The FZK model is based on the theory of dual variables and includes nonlinear isotopic and kinematic hardening. It also takes into account static recovery. The material model is shortly reviewed in Chapter 2.

The model is applied to two exercises:

The first is a benchmark exercise [3] ,[4], [5] which follows the loading conditions of the RUPTURE experiment #15 as performed at CEA. The definition of the problem and results are presented in chapter 3. The numerical analysis is compared to the experimental data.

The second example is a scenario of small hot spot and external cooling by radiation [6]. Details of the scenario, the analysis and their results are presented in chapter 4.

2 Material Model

2.1 Constitutive equations and implementation in Finite Element Code

The constitutive equations adopted in the present work describe finite deformation thermoviscoplasticity with nonlinear kinematic hardening and static recovery. They represent a special case of the constitutive model described in the former reports, as the damage part is neglected. The complete model is given in Table II, the notations and conventions are summarized in Table I. It should be noted that the model is formulated to describe thermomechanically coupled problems and that is has been proven to satisfy the second law of thermodynamics for every admissible process.

The FZK model has been incorporated as a user supplied subroutine into the ABAQUS finite element code. The integration algorithm used is based on a triple operator split into an thermoelastic part, an inelastic part including damage and a part describing static recovery. The solutions of the thermoelastic part have to be considered as initial values for the inelastic part, whereas the solutions of the inelastic part serve as initial values for the recovery part. The constitutive equations are integrated by means of stable implicit Euler method. The structure of the differential equations allows to reduce the number of equations to be solved by means of Newton's method from 15 to 2 in operator 2 (inelastic part) and from 7 to 2 in operator 3 (recovery part).

2.2 Identification procedure for FZK model

FZK uses the neural network program SNNS (Version 4.1) [7] for parameter identification. This program was written by the Institute for Parallel and Distributed High Performance Systems (IPVR) of the University of Stuttgart. It is distributed as 'Free Software' in a licensing agreement similar in some aspect to the GNU General Public License.

The identified parameters are given in Table III. In Figures 1 and 2 the parameters are plotted versus temperature. However, in Figure 2 the quantities log ($\dot{p}$/c) and F,

instead of p and η, are plotted versus temperature. Contrary to p and η, these quantities show a monotonous evolution with respect to the temperature and can be used for interpolation. A comparison of the tensile and creep tests for temperatures from 500°C up to 1000°C with the simulated tensile and creep tests on the basis of the identified parameters are shown in Figures 3 and 4.
From the time-strain responses (creep case), only the parameters describing static recovery could be determined with sufficient accuracy. It was not possible to identify the viscosity parameters in a satisfactory way, neither from the tensile nor from the creep case.

3 Contribution to the REVISA Benchmark

3.1 Definition and Finite Element Analysis

The benchmark exercise 3 within REVISA is correlated to the experiment number 15 within the RUPTURE program of CEA. This series was designed to study the failure of steel tubes under high internal pressure and axial temperature gradients. Failure may occur due to plastic instability (under increasing pressure) or due to high creep (under constant pressure). Experiment #15 is a creep test with a maximum temperature of about 1100°C and high temperature measurements as far as possible. The test were performed in an inert atmosphere (argon gas). The material is 16MND5 real pressure vessel steel.

The benchmark calculation at FZK was performed with the ABAQUS finite element code.

3.1.1 Geometry and FE Mesh

According to the benchmark specification [8] the external diameter of the cylinder is 95 mm with a circular machined notch. It is 270 mm high and the thickness is equal to 5 mm. The external circular notch is machined in the middle of the tube. The notch

radius is equal to 3 mm. The cylinder is cap ended with flat rigid plates. The finite element mesh is shown in Figure 3.1.The mesh consists of 297 8-node elements. Axisymmetric conditions and mid-plane symmetry were considered.
The cap end effect was modelled by an equivalent pressure.

3.1.2 Heat Transfer Analysis

In order to obtain the desired temperature distribution along the tube, a transient heat transfer analysis was conducted, where the temperature distribution according to the benchmark specifications (see Figure 3.2) was given as boundary conditions at the inner and outer surface of the tube.
For a mass density of ρ=7.851 10 $^{-3}$kg/m^{-3}, a of conductivity K=40 W/(m K), and a specific heat of c = 540 J/(kg K) steady state conditions were reached after a few seconds. As a consequence, an almost constant temperature distribution through the thickness resulted.

3.1.2 Stress Analysis

The prescribed loading history is shown in Figure 3.3. First, the temperature was increased linearly from room temperature 20°C to the target value 1093.5°C with a constant temperature rate of 100°C /min. After 30 minutes the pressure was increased within 10 minutes up to 0.8 MPa. These steady state loading conditions were held until 5 hours were reached.

Elements with reduced integration (CAX8R elements) were used for the stress analysis. The geometrically nonlinear static analysis is based on the temperature dependent Young's moduli and thermal expansion coefficients given in the benchmark specifications, and on the material parameters as given in Table III of this report. The volume change of the material between 723°C and 830°C was taken into account. For temperatures less than 500°C the material parameters for 500°C were assigned.

3.2 Results

The results of the finite element calculation are illustrated in Figures 3.4 - 3.12. In Figure 3.4 a comparison between calculated and experimental diametrical evolution is shown. Until the end of the pressure increase a very good agreement can be observed. After that point the calculated diametrical evolution differs strongly from the experimentally observed. This can be due to the fact that damage was neglected in the calculation. Comparing calculation and experiment for the elongation of the half cylinder, shown in Figure 3.5, the difference is not so significant.

Figures 3.6 and 3.7 present the radial, axial and circumferential stress components in the central elements on the internal and external side of the tube. Figure 3.8 shows the von Mises stress in the central elements on the internal and external side of the tube, whereas Figure 3.9 shows the triaxiality factor, which is defined as the ratio of the hydrostatic stress versus the von Mises equivalent stress, in the central element on the external side. In Figure 3.10 the von Mises norm of the inelastic strain in the central elements on the internal and external side of the tube is plotted versus time. Figure 3.11 shows the von Mises stress on the axial internal and external line of the tube at experimental failure time (2.19). The distorted mesh at the experimental failure time (2.19 h) is shown in Figure 3.12.

4 Small Break LOCA with Hot Spot and external cooling by radiation

4.1 Finite Element Analysis

4.1.1 Loading conditions

A brief summary of the loading conditions of this exercise, which is scenario 6.2 in REVISA. Thermal load results from molten corium. The time dependent temperature field were calculated by NRG Petten were taken similar to several thermal analysis performed within the REVISA project. The thermal calculation start with beginning of

the debris with the inner surface of the bottom of the RPV. 1480 seconds later core slump 4 occurs followed by core slump 5 at 4000 seconds and core slump 6 is assumed to be at 6016 seconds from the beginning of the calculation.

4.1.2 Geometry and FE Mesh

The finite element mesh of the RPV lower head given by NRG is shown in Figure 4.1. The mesh consists of 1558 4-node axisymmetric bilinear elements.

4.1.3 Stress Analysis

In the subsequent stress analysis the temperature distributions calculated by NRG were used. Starting from an initial temperature of 425 K, the temperature profiles at 1480, 2000, 3000, 4000, 5000, 6016, 6500, 7000, 7250, 7500, 7750, 8000, 8250, 8500, 8750, 9000, 9250, 9500, 9750 and 10000 seconds were prescribed. Figure 4.2 shows the temperature distribution along the inside and the outside of the lower head at 6016, 8000, 9000 and 10000 seconds. Figure 4.3 (top) shows the temperature gradient along cross section 5, which is located at the interface between slump IV and V, at these times. In Figure 4.3 (bottom) the temperature at the inside and outside of cross section 5 is plotted versus time. Figure 4.4 shows the temperature distribution in the lower head after 10000 seconds.

The pressure in the RPV during the complete analysis was assumed to be 0.5 MPa. The loading by the corium was modelled as an equivalent internal pressure. Further, the dead weight of the lower head as density of ρ=7.851 10 $^{-3}$ kg/m^{-3} was taken into account.

Axisymmetric 4-node bilinear elements (CAX4) were used for the stress analysis. The geometrically nonlinear static analysis is based on the temperature dependent Young's moduli and thermal expansion coefficients given in [6] and on the material parameters as given in Table III of this report. For temperatures lower than 500°C the parameters for 500°C were assigned.

4.2 Results

Two calculations with different material parameters for temperatures above 1300°C were performed. In calculation 1 the parameters for 1300°C were assigned to temperatures above 1300°C. In calculation 2 the load-carrying capacity of the vessel was set to zero for temperatures above the melting infinitely small overstress was assumed.

Both analyses were stopped after 20000 seconds. For example after 10.000 seconds the second assumption leads to higher maximum straining (25 % compared to 18 %) and less stress at the hot spot. However, in general both calculations lead to similar results and conclusions. Hence within this report only results on the first model are shown in Figures 4.5 - 4.8. A more detailed report (with all results) will be released at the end of the shared cost action REVISA (which will be middle of the year 2000).

Figure 4.5 shows the von Mises stress and the equivalent plastic strain along cross section 5 at 6016, 8000, 9000 and 10000 seconds. The equivalent plastic strain is defined as the von Mises norm of the inelastic strain tensor. In Figure 4.6 the von Mises stress and the equivalent plastic strain at the inside and the outside of cross section 5 is plotted versus time. Figure 4.7 shows the radial and the axial displacement at the outside of cross section 5 versus time. Figure 4.8 shows the distribution of the equivalent plastic strain on the deformed mesh after 10000 and 20000 seconds.

After 10000 seconds no obvious localisation of inelastic deformation was obtained in the hottest region of the RPV lower head. The maximum equivalent inelastic strain attained 20 % at an integration point at the inner vessel wall near cross section 4. After 20000 seconds a slight localisation of inelastic deformation was obtained in the hottest region of the RPV lower head. The maximum equivalent inelastic strain was 39 % at an integration point at the outer vessel wall near cross section 5.

4.3 Conclusions

As the model was applied to this exercise without the damage part of the constitutive equations (due to lack of experiments for parameter identification an verification) no direct evidence for mechanical failure is found. Generally from the analysis, we can state that plastic collapse will occur before creep failure. The time of failure will be about 9000 seconds because at that time the RPV is molten about 40 % of the wall thickness from the inner surface. Again, this is not directly found from the mechanical calculation, which gives no warning at that time.

References

[1] LÄMMER, H.: *Thermoplastizität und Thermoviscoplastizität mit Schädigung bei kleinen und grossen Deformationen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), (1997).

[2] HIBBIT, KARLSSON & SORENSEN: *Abaqus User's Manual, Version 5.6.*

[3] CHAMPAIN, E. and SAINTE CATHERINE, C.: *Specification of the REVISA interpretation benchmark based on Ruptther creep test at 1000° with variable pressure (Task3).* CEA Saclay, Report SEMT/LISN/RT/98-029/A, (1998).

[4] LE BER, L.: *Specification of the REVISA interpretation benchmark based on Ruptther creep test #15.* CEA Saclay, Report SEMT/LISN/RT/99-039/A, (1999).

[5] SAINTE CATHERINE, C.: *Tensile and Creep Tests Material Characterisation of Pressure Vessel Steel (16MND5) at High Temperatures (20 up to 1300°C).* CEA Saclay, Technical report SEMT/LISN/RT/98-009/A, (1998).

[6] FOKKENS, J.H: *REVISA Task 4 'Small Break LOCA with Hot Spot' severe accident scenario*, NRDG21227/99.23439 PPT/JF/MH, (1999).

[7] University of Stuttgart, Institut for Parallel and Distriuted High Performance Systems (IPVR): *SNNS Stuttgart Neural Network Simulator*, User Manual, Version 4.1, Report No.6/95.

[8] MONGABUE, P.H. and DESMET, M.: *RUPTURE test #15 – Rupture test at 1100°C and 8 bars* . CEA Saclay, Report SEMT/LISN/RT/99-055/A, (1999).

Table I: Notation

Vectors and second-order tensors are written in boldface letters, fourth order tensors are written in calligraphic letters.

1	second-order identity tensor
$tr\mathbf{A}$	trace of a second-order tensor A
$\mathbf{A}^D$	deviatoric part of A
$\mathbf{A}^T$	transpose of A
$\mathbf{A}^{-1}$	inverse of A
$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}=tr(\mathbf{A}\mathbf{B}^T)$	inner product of A and B
$\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}}$	Euclidian norm of A
$\dot{\mathbf{A}}$	material time derivative of A
$(\,)'$	temperature derivative of $(\,)$
$\langle\,\rangle$	McAuley brackets, $\langle X\rangle = X$ for $X \geq 0$, $\langle X\rangle = 0$ else

In order to properly describe the failure of the reactor pressure vessel (RPV) lower heat after severe melt accidents afinite deformation thermoviscoplstic model with damage was developed and implemented in the ABAQUS finite element code.

Table II : Finite deformation damage thermoplasticity and -viscoplasticity laws.

Thermohypoelasticity law:

$$\left(\frac{\mathbf{S}}{1-\mathrm{d}}\right)^{\nabla} = \mathcal{C}\,[\mathbf{D}-\overset{\triangle}{\mathbf{A}}_p-\overset{\triangle}{\mathbf{A}}_t]$$

$$\overset{\triangle}{\mathbf{A}}_t = (\alpha'\,\Delta\theta_r+\alpha)\,\dot{\theta}\,\mathbf{1}$$

Yield function:

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

Flow rule:

$$\overset{\triangle}{\mathbf{A}}_p = \sqrt{\frac{3}{2}}\,\dot{s}\,\mathbf{N} \quad , \quad \mathbf{N} = \frac{(\mathbf{S}-\mathbf{Z})^{D}}{\left\|(\mathbf{S}-\mathbf{Z})^{D}\right\|}$$

Thermoviscoplasticity (TVP)

$$\dot{s} = \frac{\langle \mathrm{F}\rangle^{m}}{\eta}$$

Thermoplasticity (TP)

$$\dot{\mathrm{F}} = 0 \;\Rightarrow\; \dot{s} \;\text{ für }\; \mathrm{F}=0 \;\&\; \dot{\mathrm{F}}\Big|_{\mathrm{F}_p=konst.} \geq 0$$

$$\dot{s} = 0 \quad \text{sonst}$$

Hardening rules:

$$\left(\frac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}\right)^{\cdot} - \dot{h} = \begin{cases} \phi\left(\gamma-\beta\left(\dfrac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}-h\right)\right)\dot{s} + \dfrac{\gamma'}{\gamma}\,\dot{\theta}\left(\dfrac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}-h\right) & \text{for TP} \\ \phi\left(\gamma-\beta\left(\dfrac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}-h\right)\right)\dot{s} + \dfrac{\gamma'}{\gamma}\,\dot{\theta}\left(\dfrac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}-h\right) - \pi\left(\dfrac{\mathrm{k}}{1-\mathrm{d}}-h\right)^{\omega} & \text{for TVP} \end{cases}$$

$$\left(\frac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right)^{\nabla} = \begin{cases} \left(\sqrt{\dfrac{3}{2}}\,c\mathbf{N} - b\left(\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right)\right)\dot{s} + \dfrac{c'}{c}\,\dot{\theta}\left(\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right) & \text{for TP} \\ \left(\sqrt{\dfrac{3}{2}}\,c\mathbf{N} - b\left(\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right)\right)\dot{s} + \dfrac{c'}{c}\,\dot{\theta}\left(\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right) - \mathrm{p}\left\|\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right\|^{w-1}\left(\dfrac{\mathbf{Z}}{1-\mathrm{d}}\right) & \text{for TVP} \end{cases}$$

Damage law:

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

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

Table III: *Identified parameters (FZK model).*

θ [°C]	K_0 [Mpa]	c [Mpa]	c/b [Mpa]	log(p/c) [Mpa^{-w}/s]	w [-]	F [Mpa]	m [-]
500	298.15	7272.3	93.95	-10.416	2.028	43.00	1.2
600	63.74	21338.1	49.81	-8.965	1.850	174.14	3.6
700	15.70	15006.9	35.81	-7.226	1.678	72.31	2.6
800	11.40	681.9	18.03	-6.924	1.341	42.28	2.0
900	9.77	241.4	13.45	-6.610	1.012	23.62	1.0
1000	5.00	136.3	14.03	-6.444	0.965	21.40	1.0
1100	1.67	130.2	8.80	-6.576	1.474	13.52	1.0
1200	0.81	70.9	7.01	-6.584	2.870	6.24	1.0
1300	0.30	70.1	3.16	-5.396	1.495	3.129	1.0

Appendix: Figures

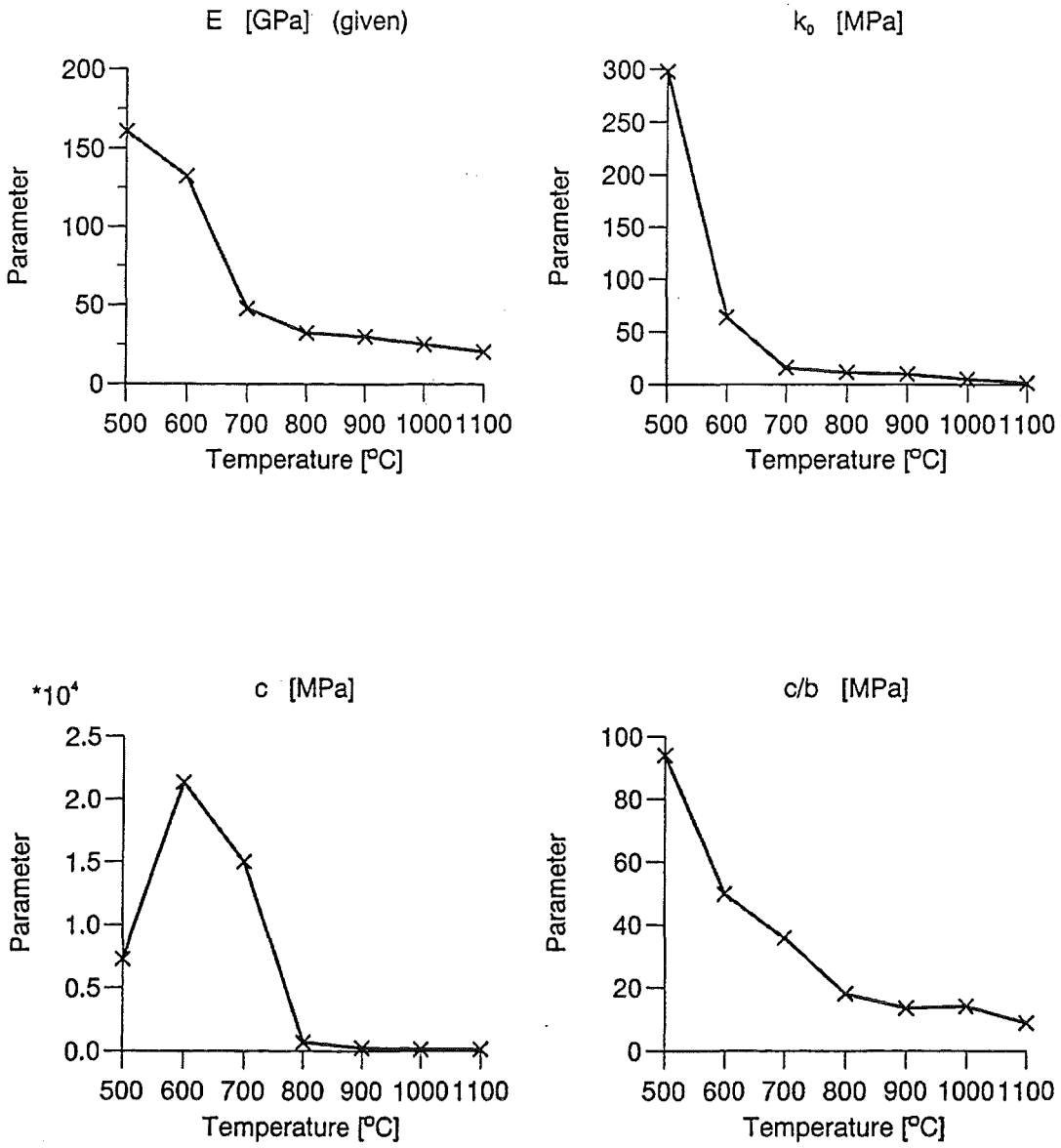


Fig. 1: Young's modulus and identified parameters k_0, c, c/b.

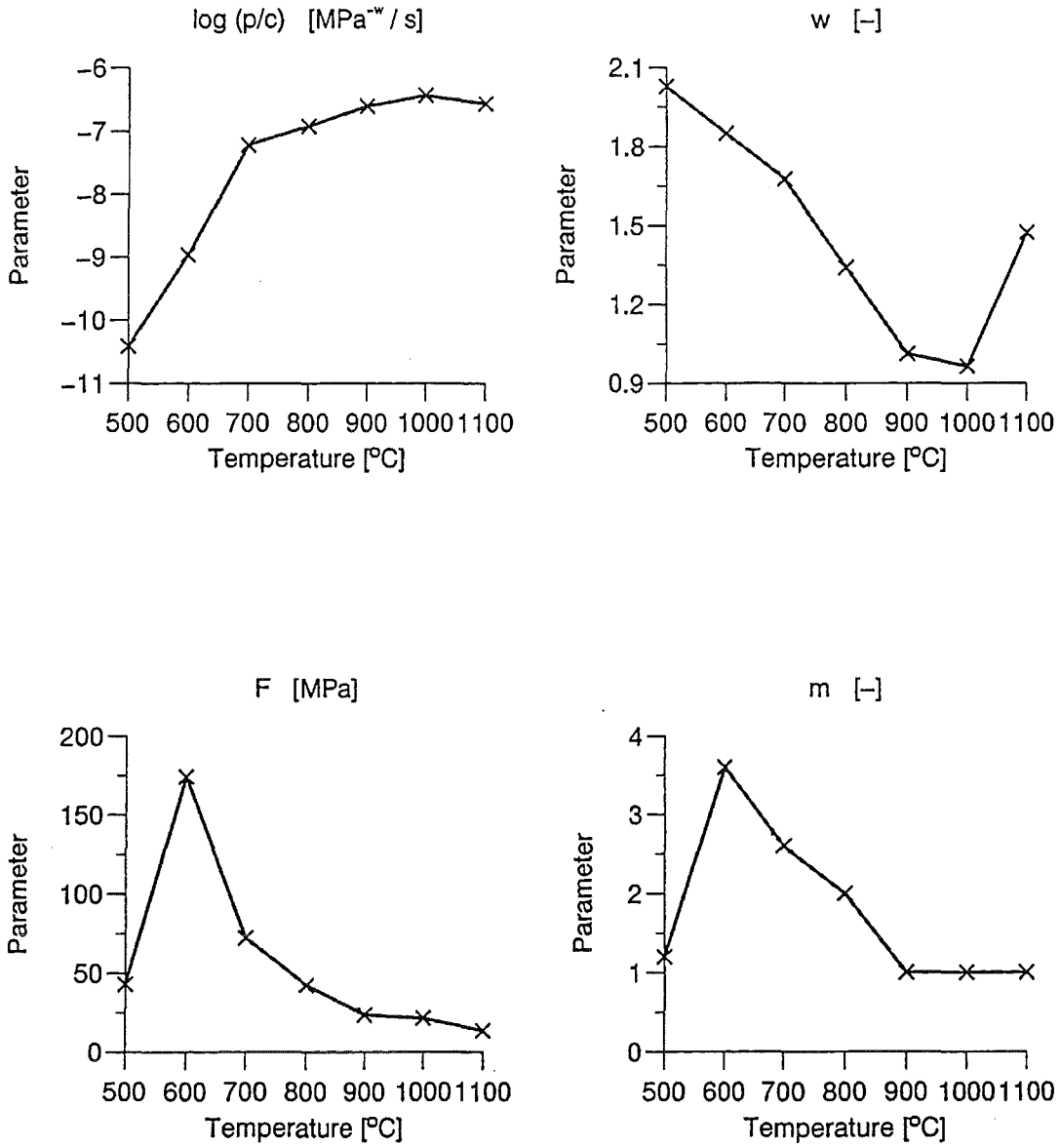


Fig. 2: Identified parameters log (p/c), w, F, m.

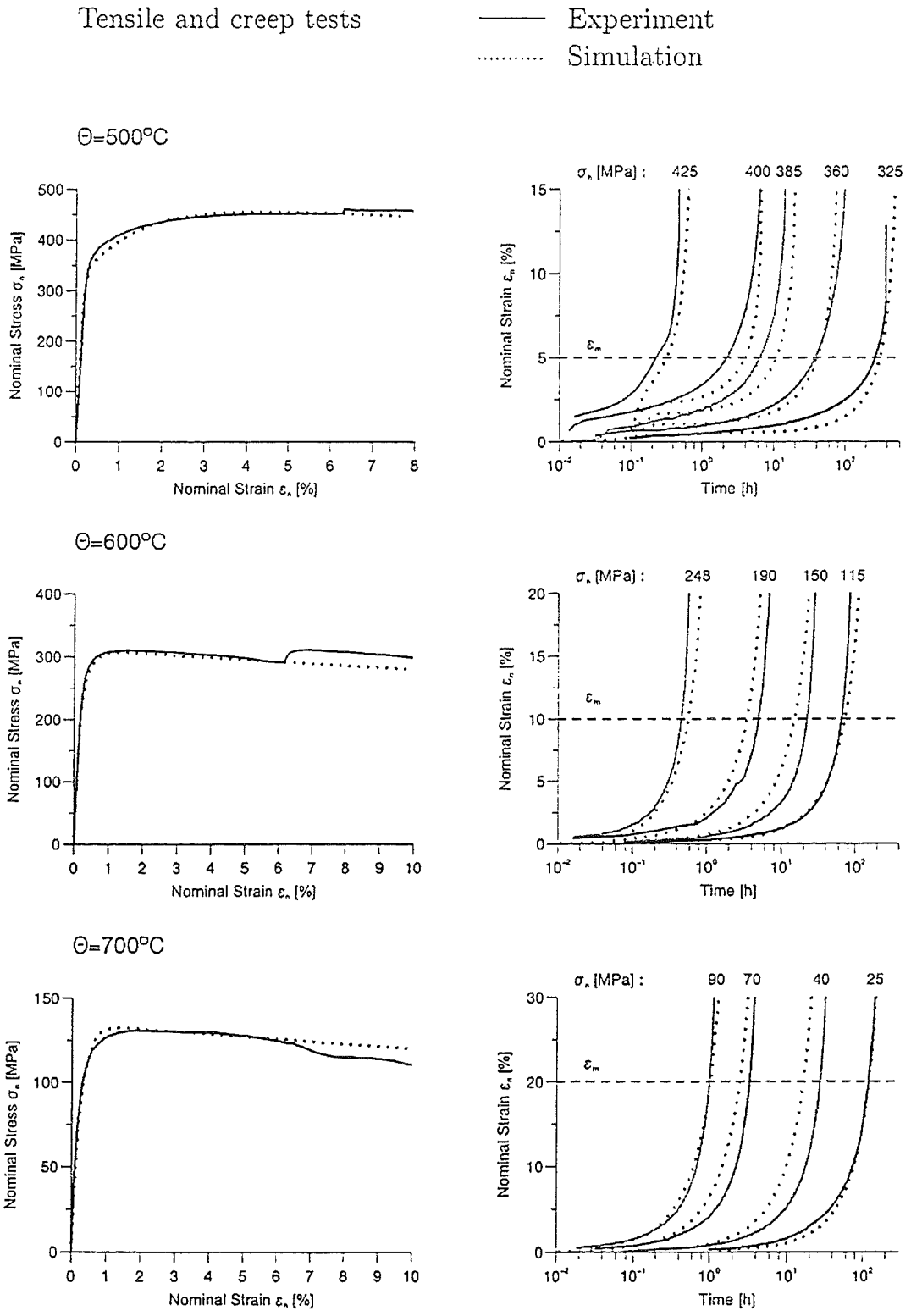


Fig. 3: Experimental and simulated tensile and creep curves for 500 °C, 600 °C and 700 °C.

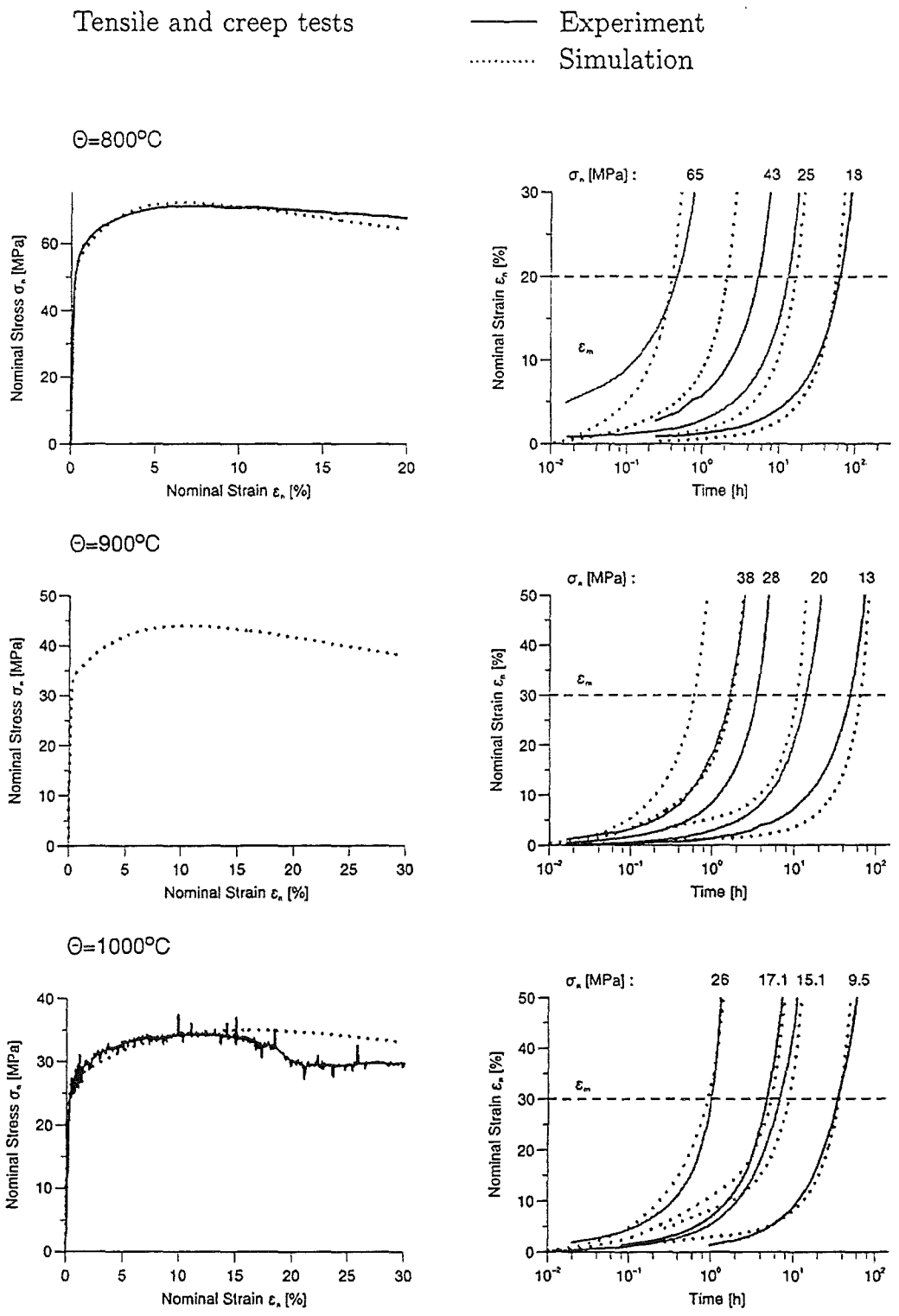


Fig. 4: Experimental and simulated tensile and creep curves for 800 °C, 900 °C and 1000 °C.

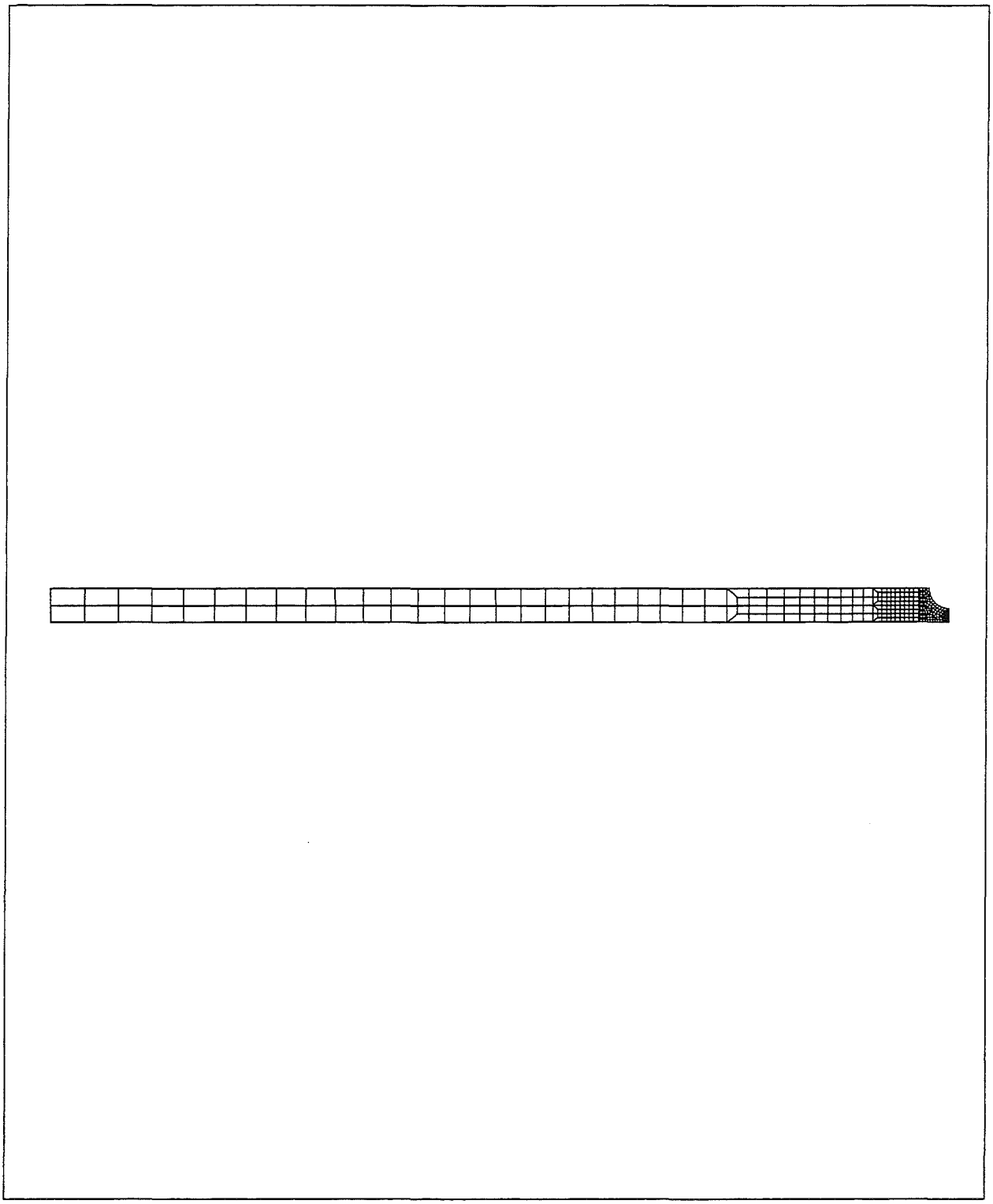


Fig.. 3.1: Finite element mesh used for the benchmark analysis.

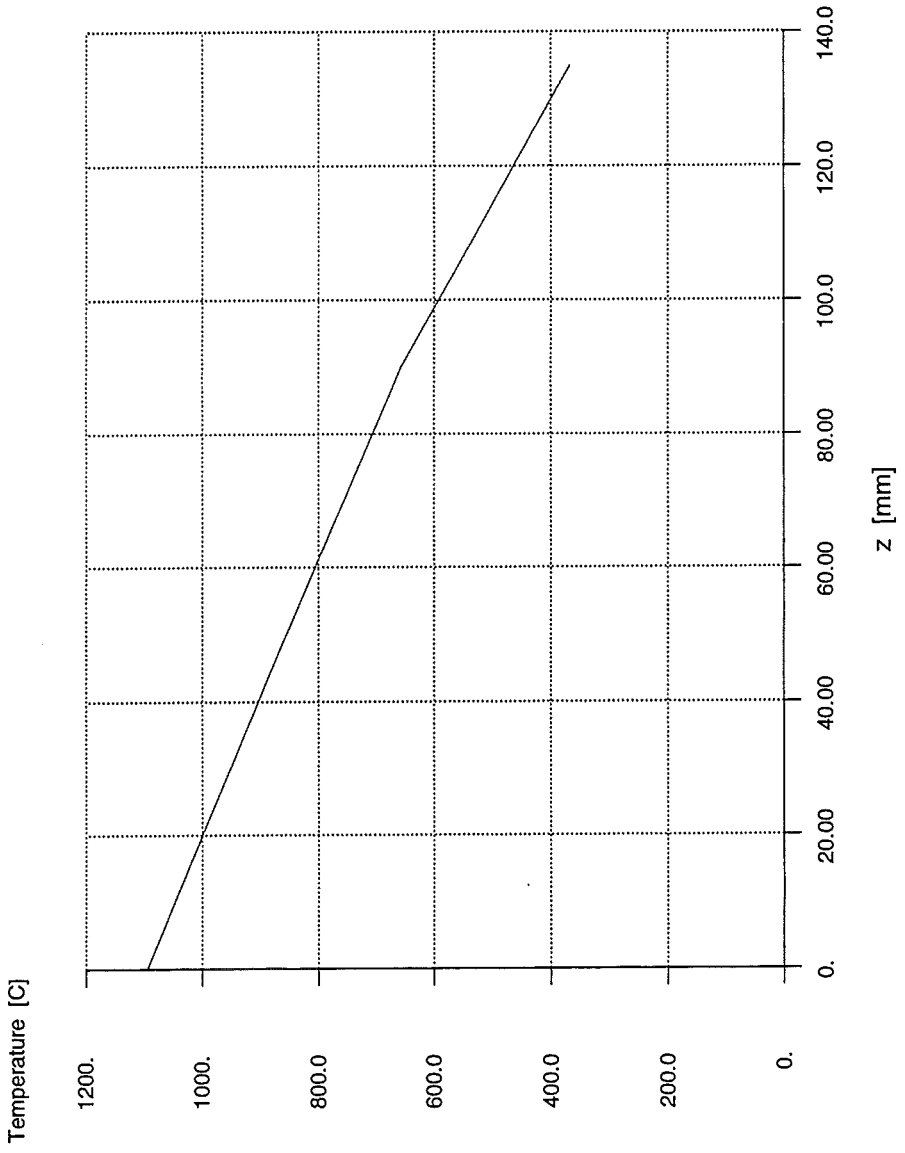


Fig. 3.2: Temperature distribution in axial direction after 644 seconds.

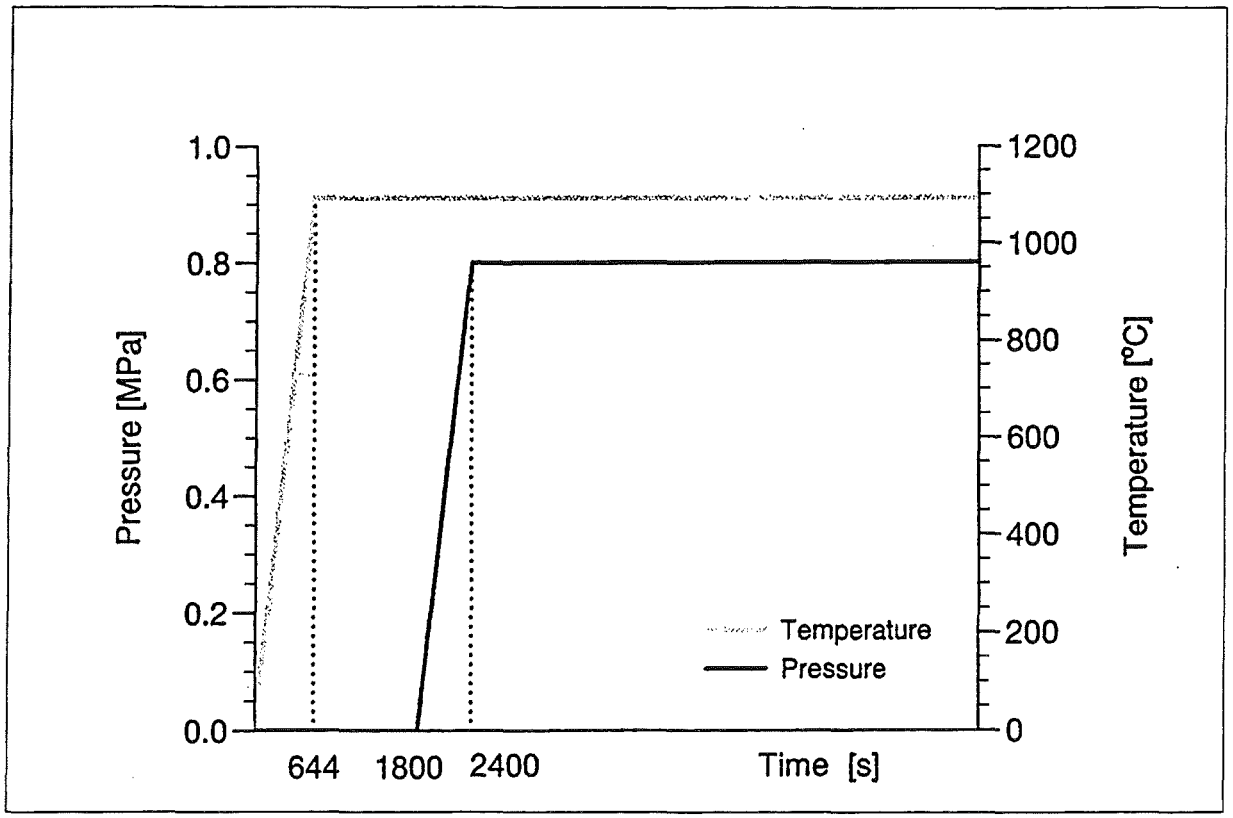


Fig. 3.3: Schematic representation of the loading history.

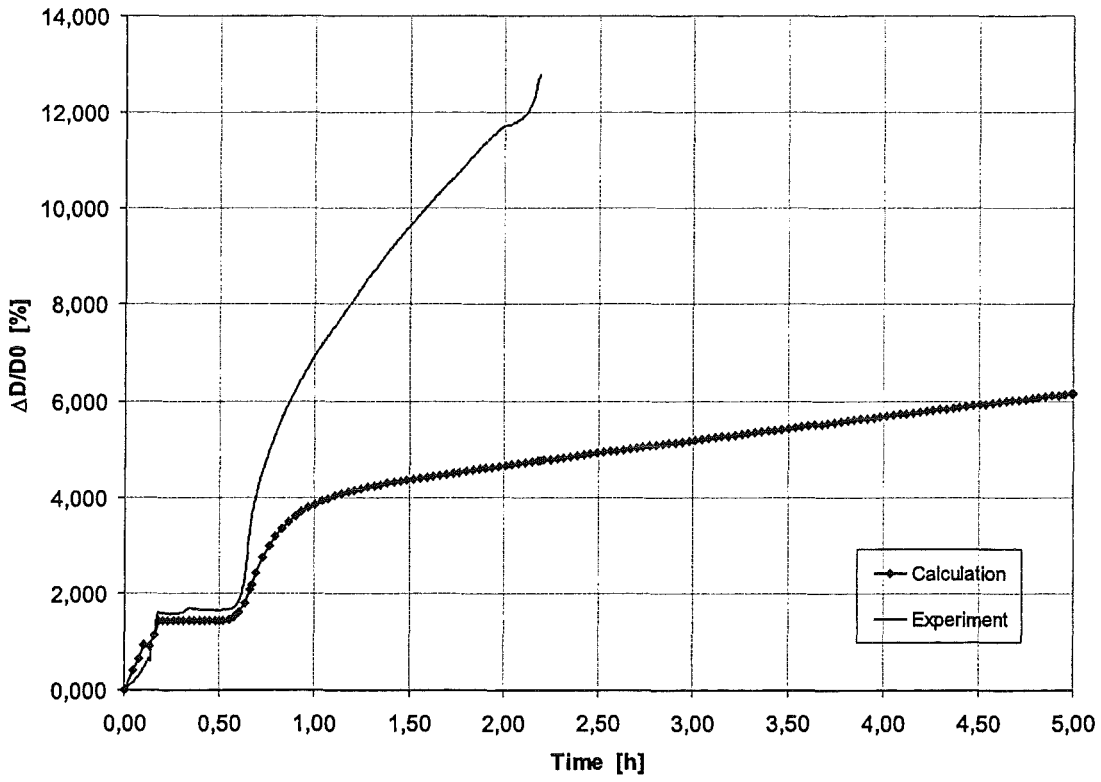


Fig. 3.4: Diametrical displacements in time.

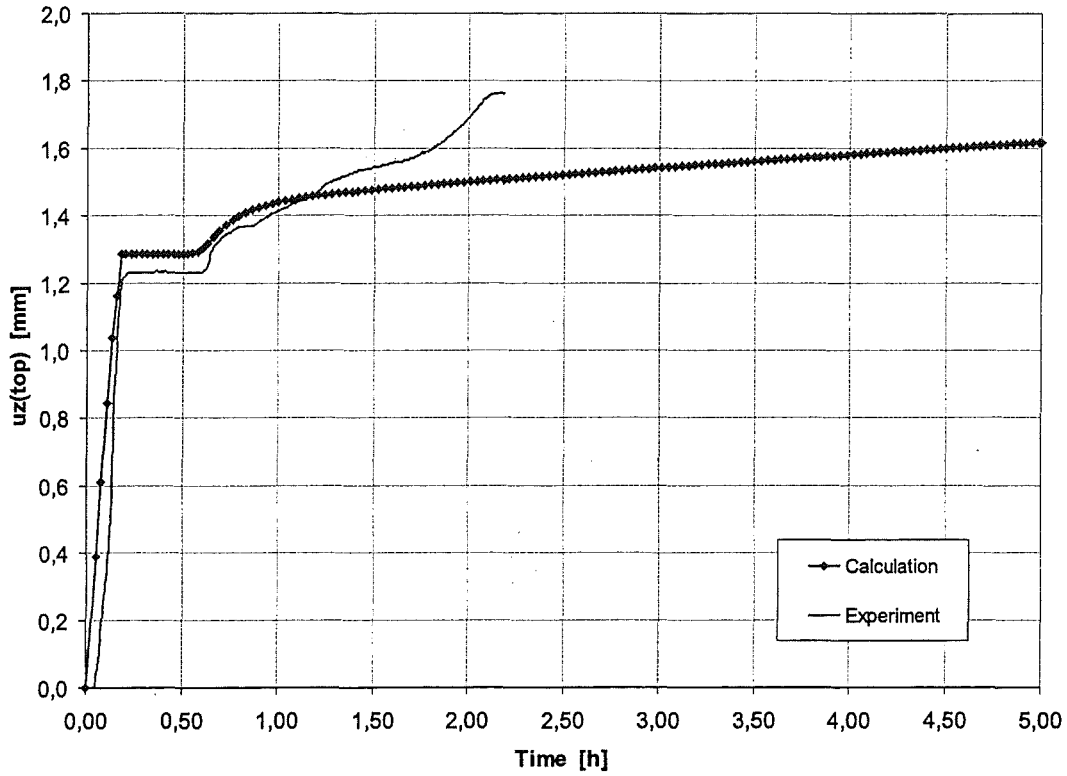


Fig. 3.5 Elongation of the half cylinder versus time.

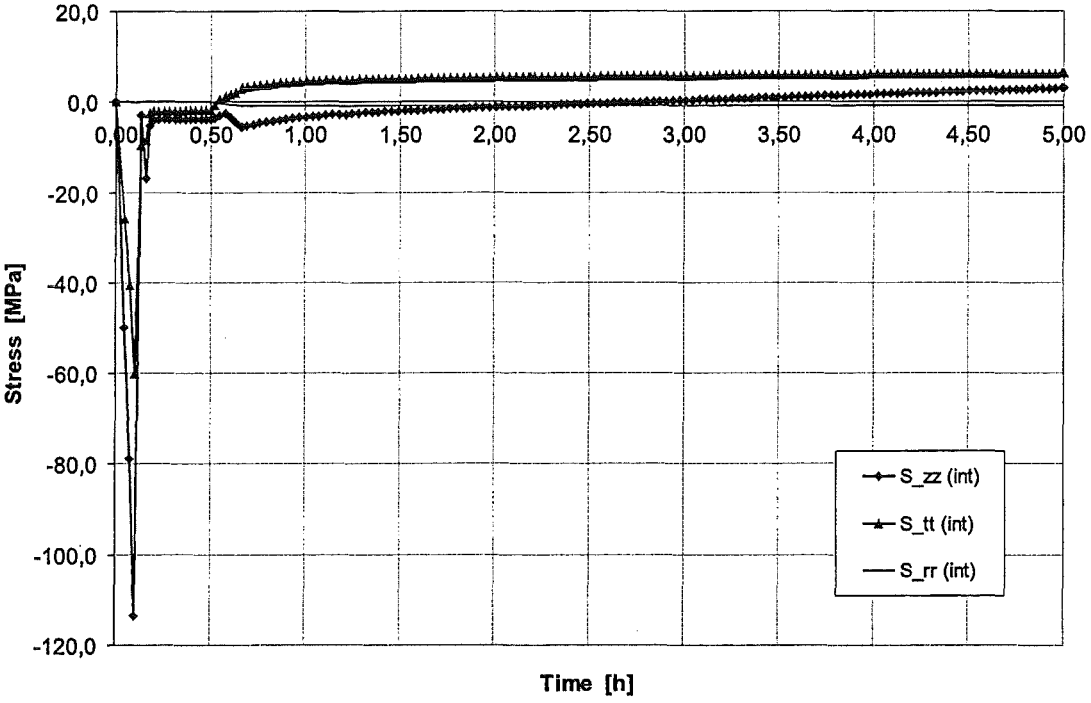


Fig. 3.6: Radial, axial and hoop stress components in the central element on the internal side versus time.

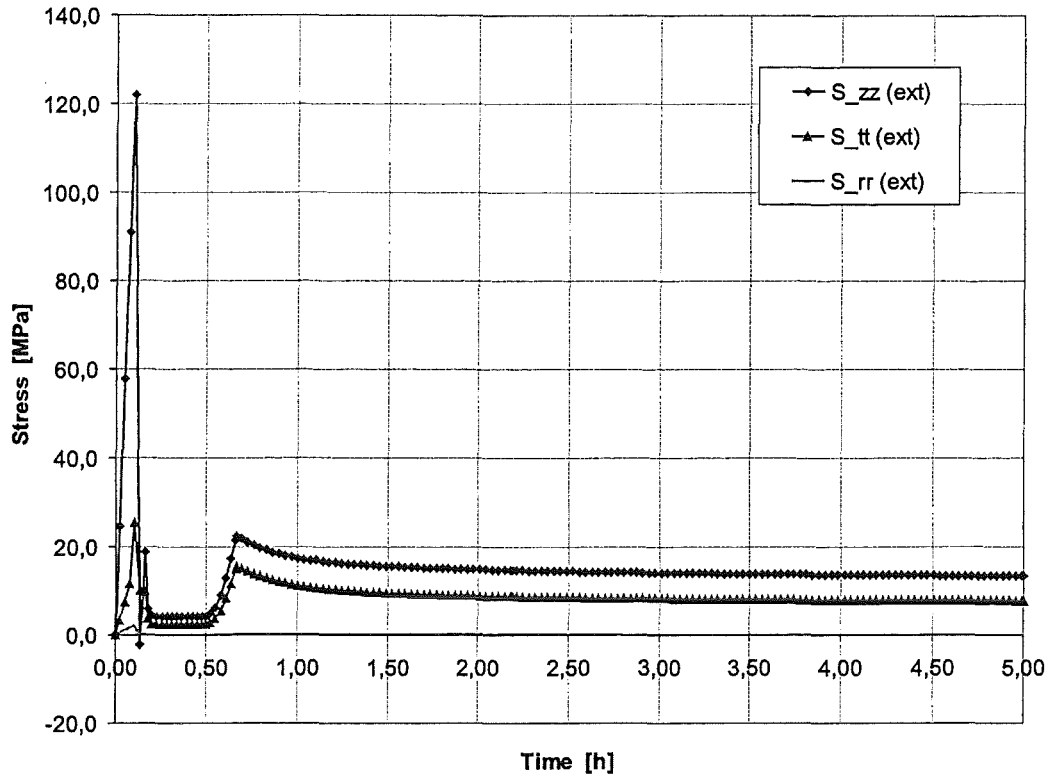


Fig. 3.7: Radial, axial and hoop stress components in the central element on the external side versus time.

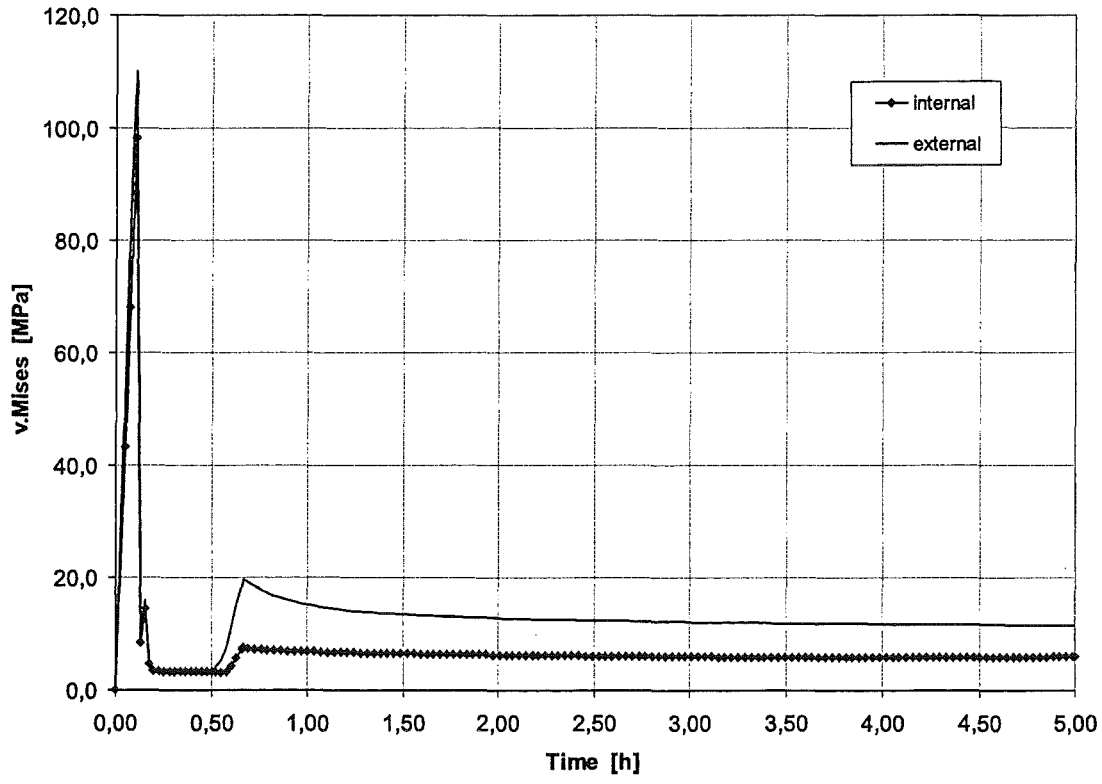


Fig 3.8: Von Mises stress in the central element on the inner and external side versus time.

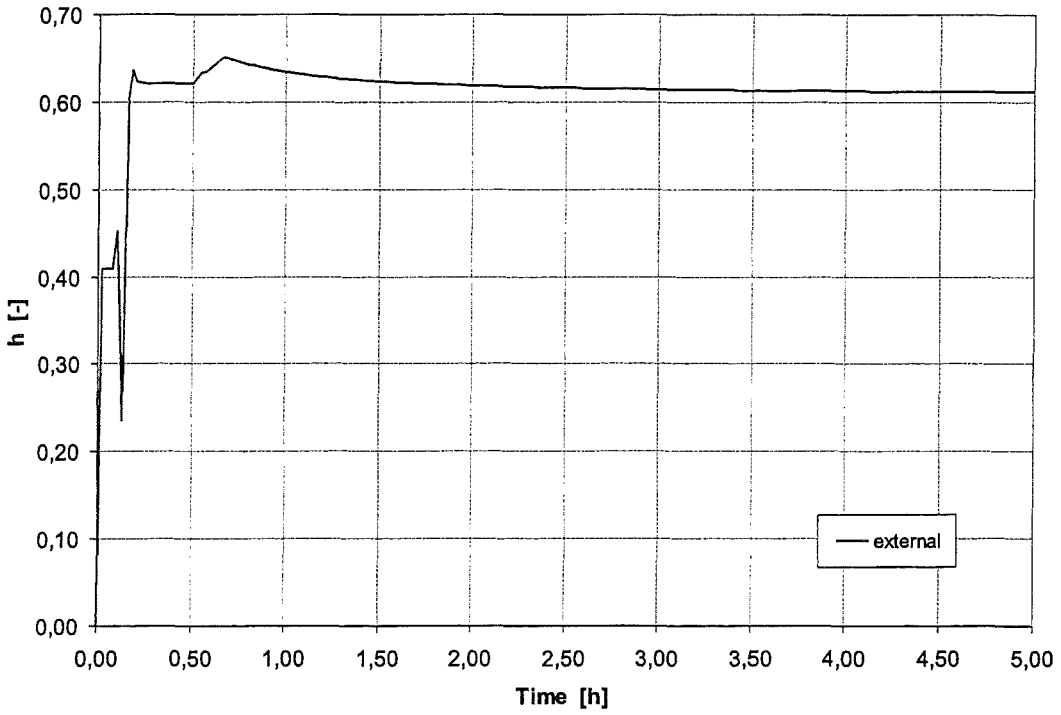


Fig. 3.9 Triaxiality factor in the central element of the external side versus time.

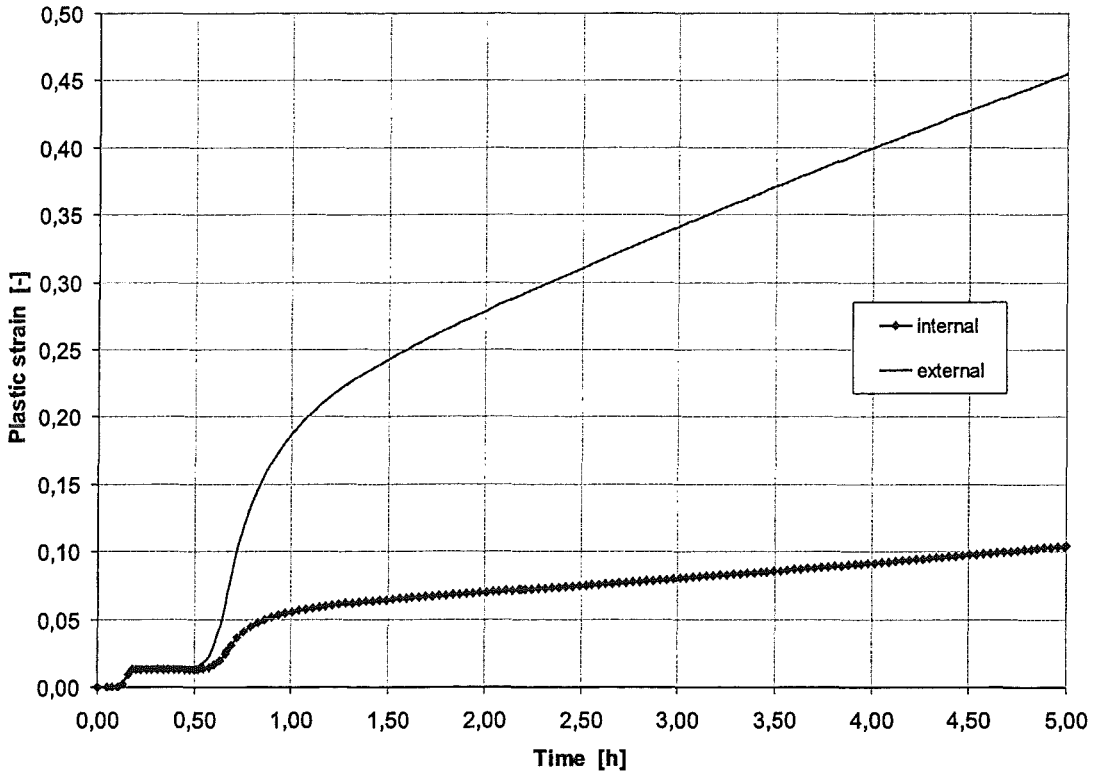
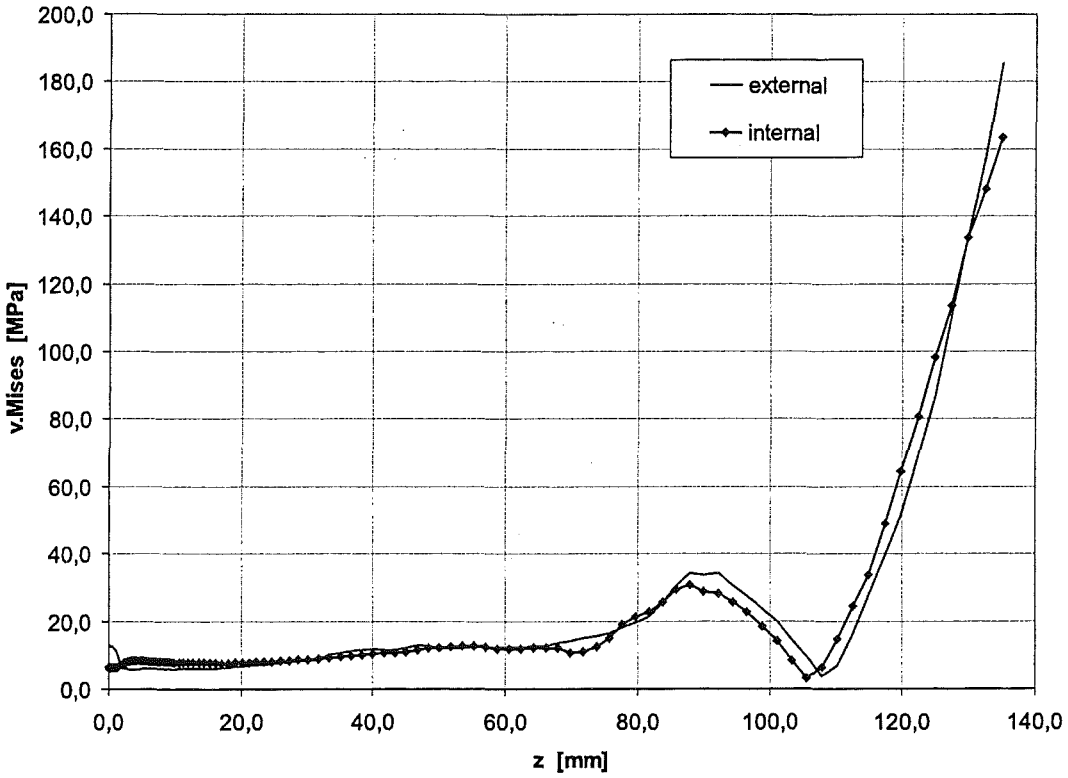


Fig. 3.10 Inelastic equivalent strain in the central element on the internal and external side versus time.



3.11. Von Mises stress on the axial internal and external line of the tube at the (experimental) time of failure.

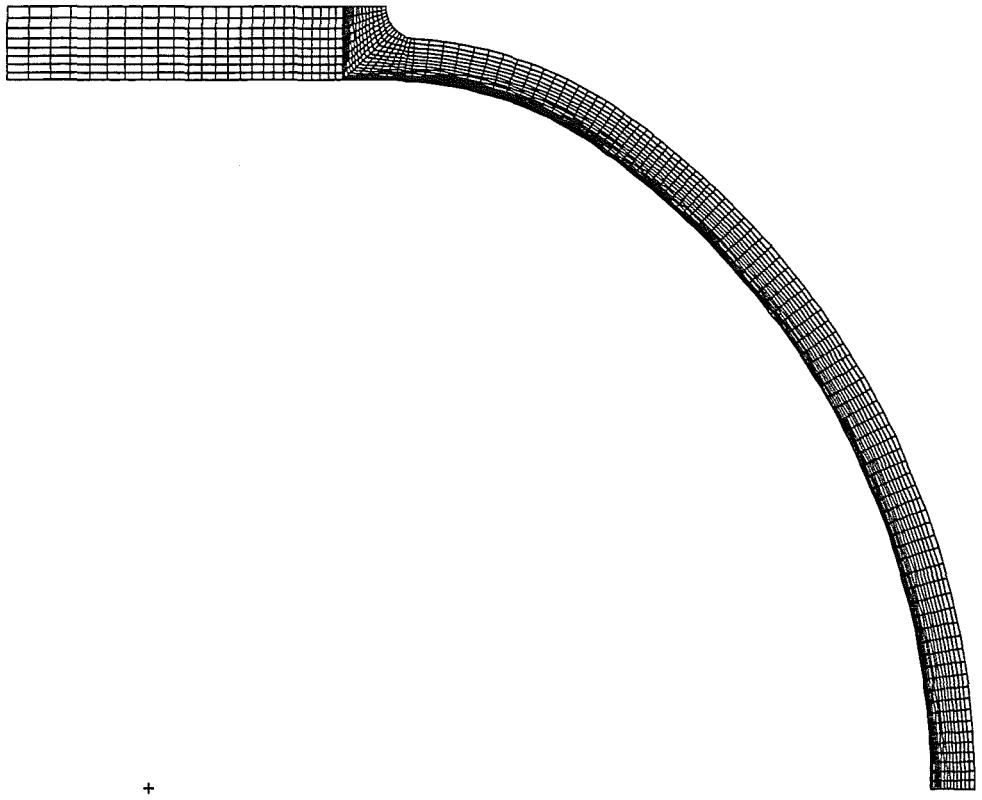


Fig. 4.1: Finite element mesh used for small break LOCA.

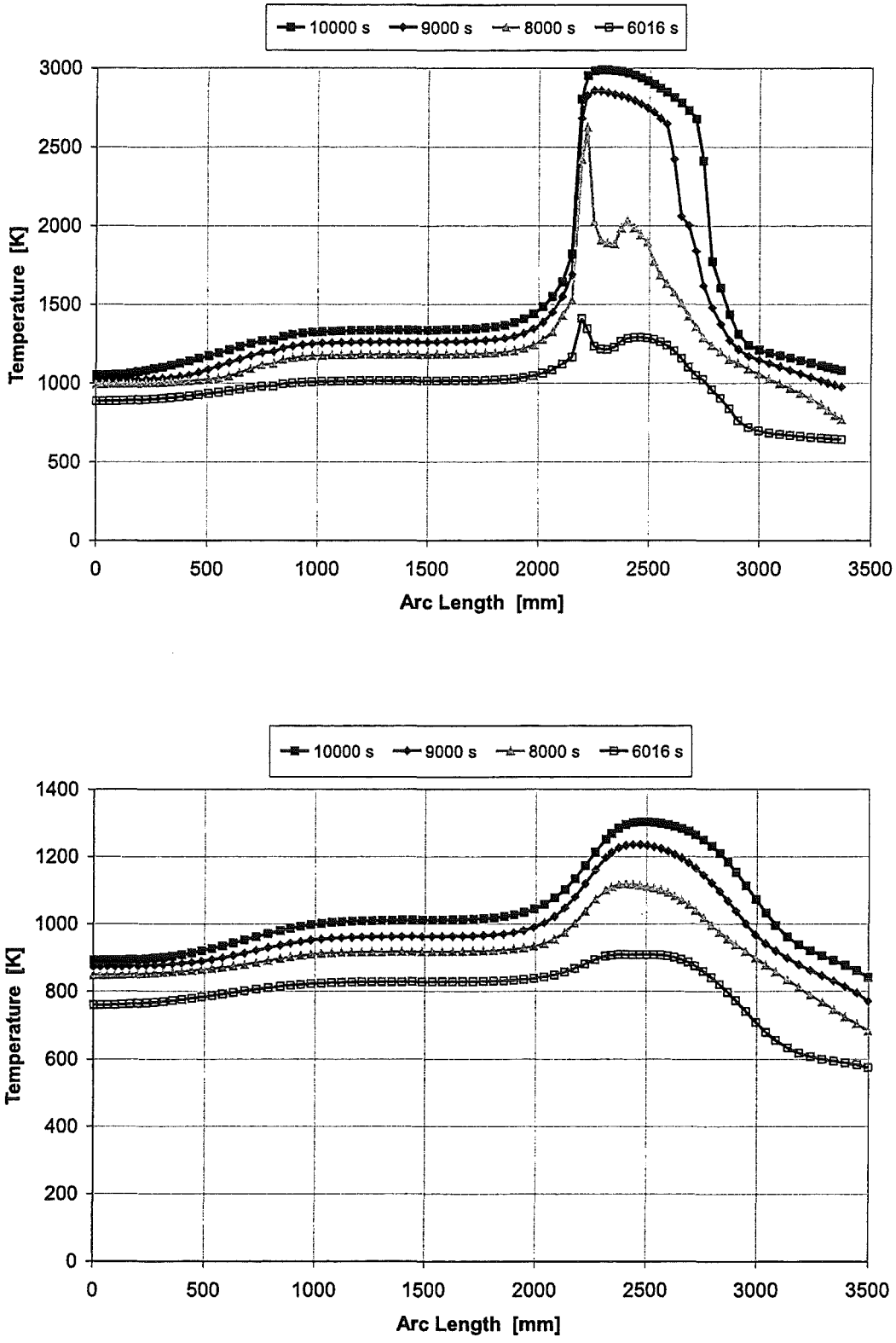
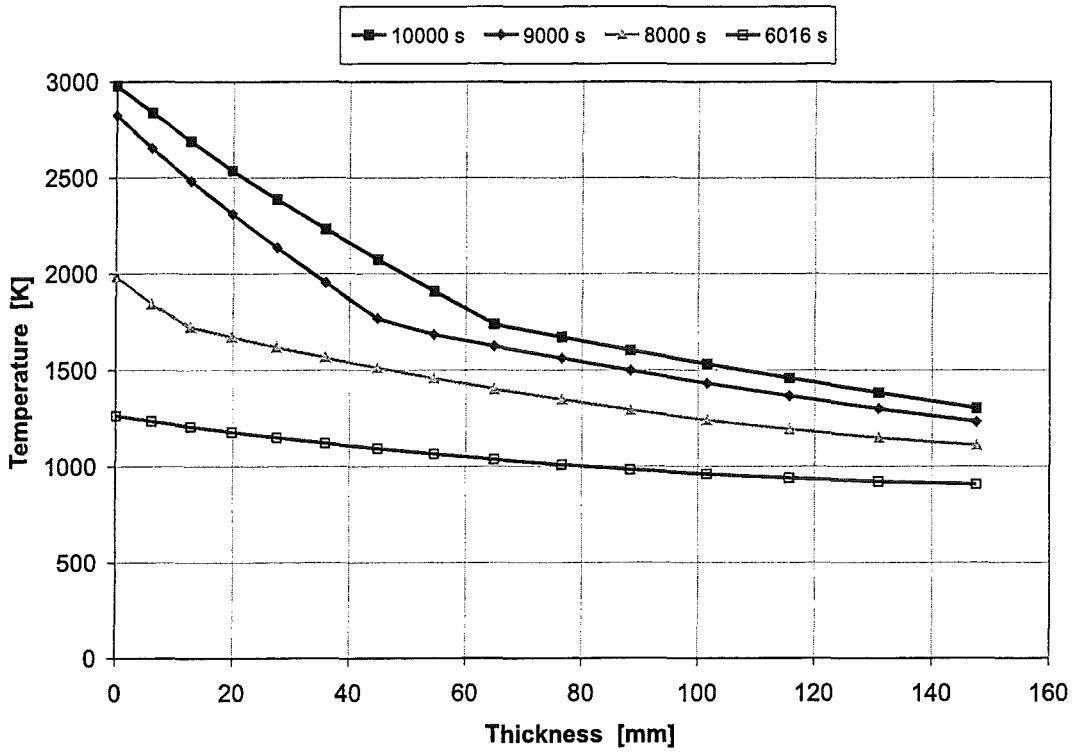


Fig. 4.2: Temperature along the inside (top) and the outside (bottom) of the lower head at various times.



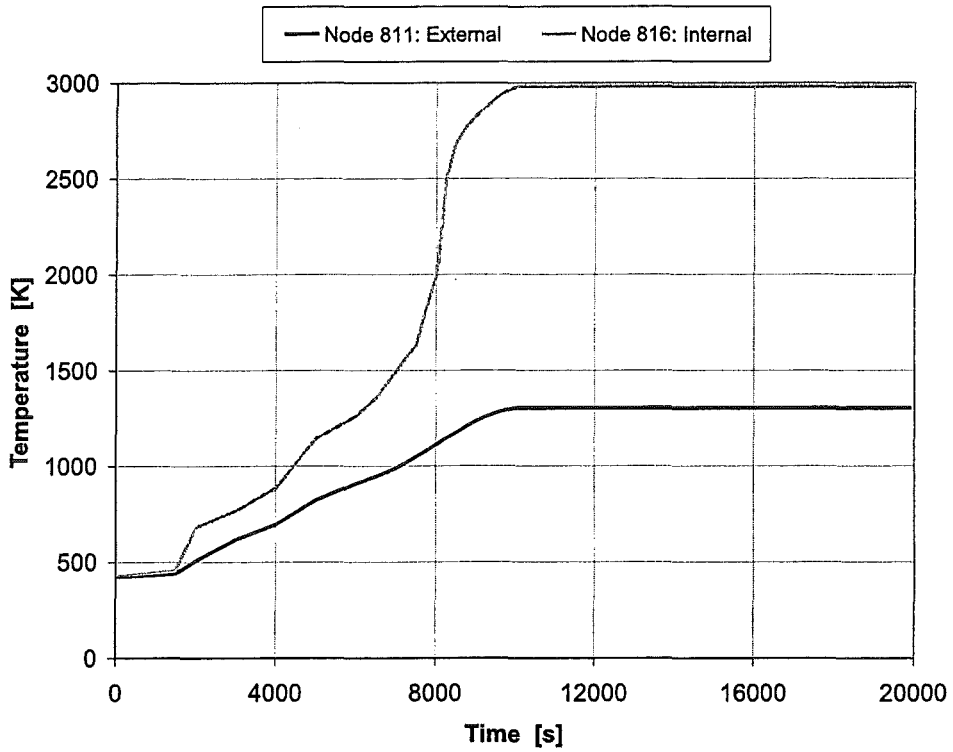


Fig. 4.3: Temperature along the cross section 5 (top) at various times. Temperature at the inside and outside of cross section 5 (bottom).

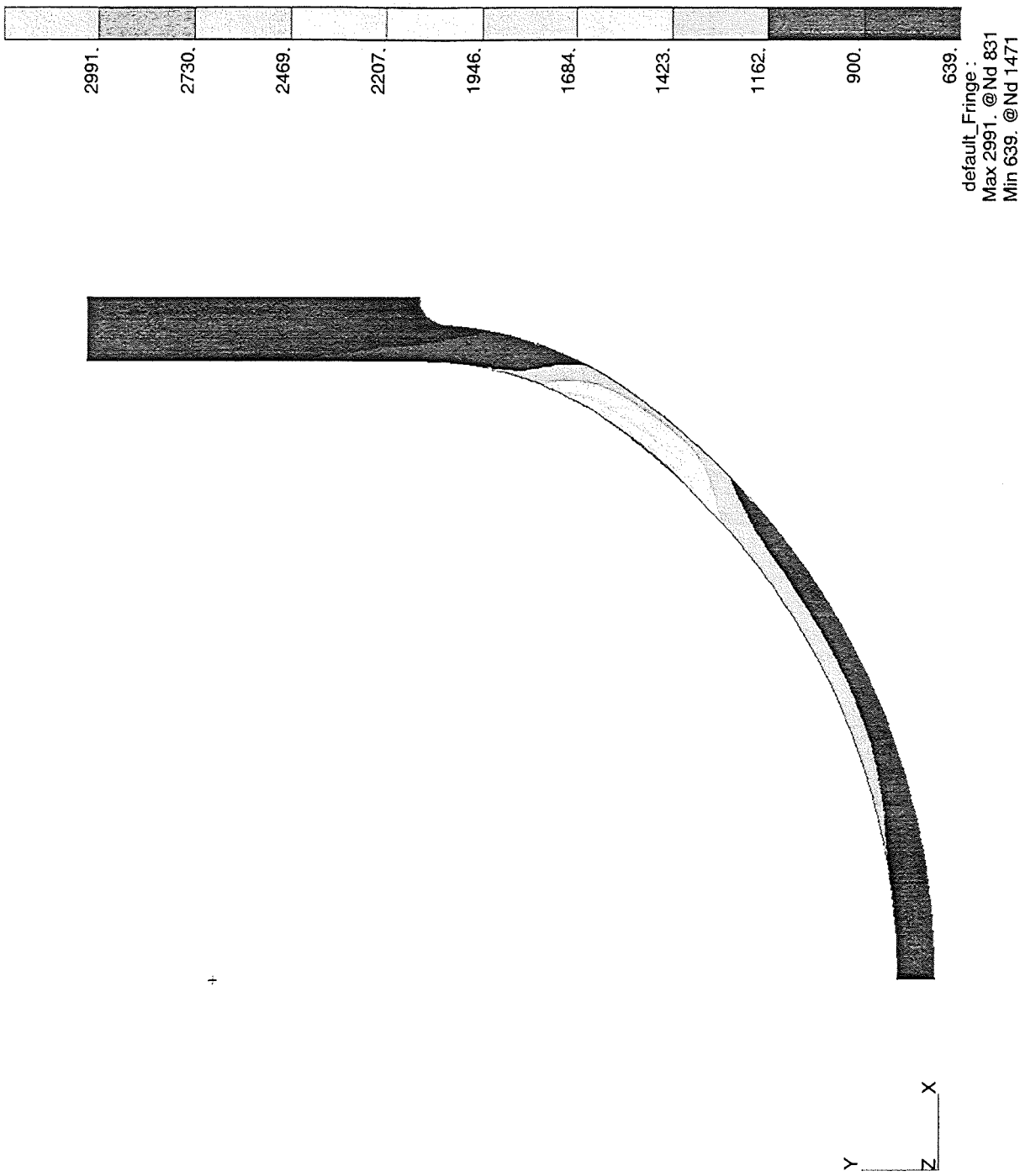


Fig. 4.4: Temperature distribution in the lower head after 10000 seonds.

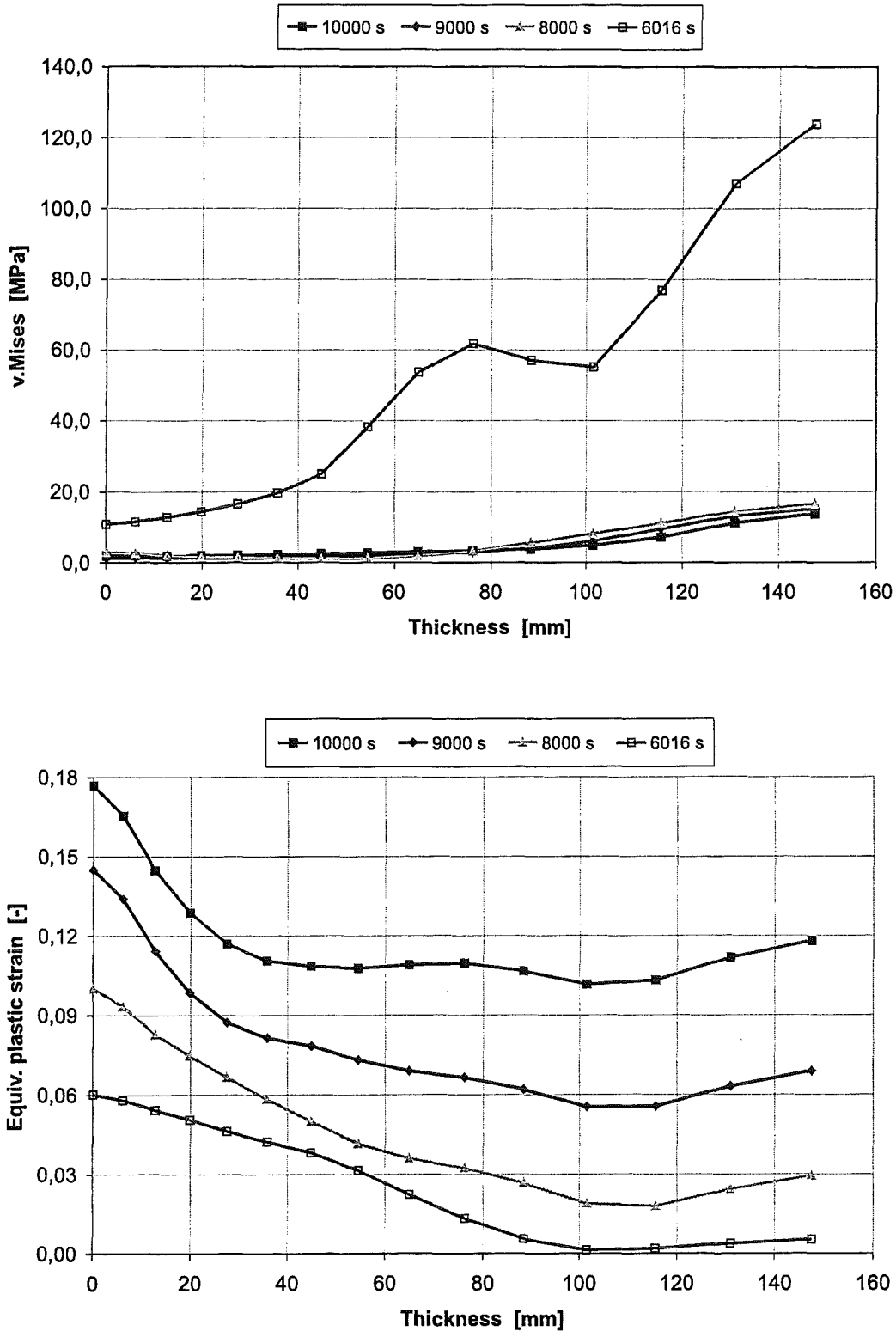


Fig. 4.5: Von Mises equivalent stress (top) and plastic strain (bottom) along cross section 5 at various times.

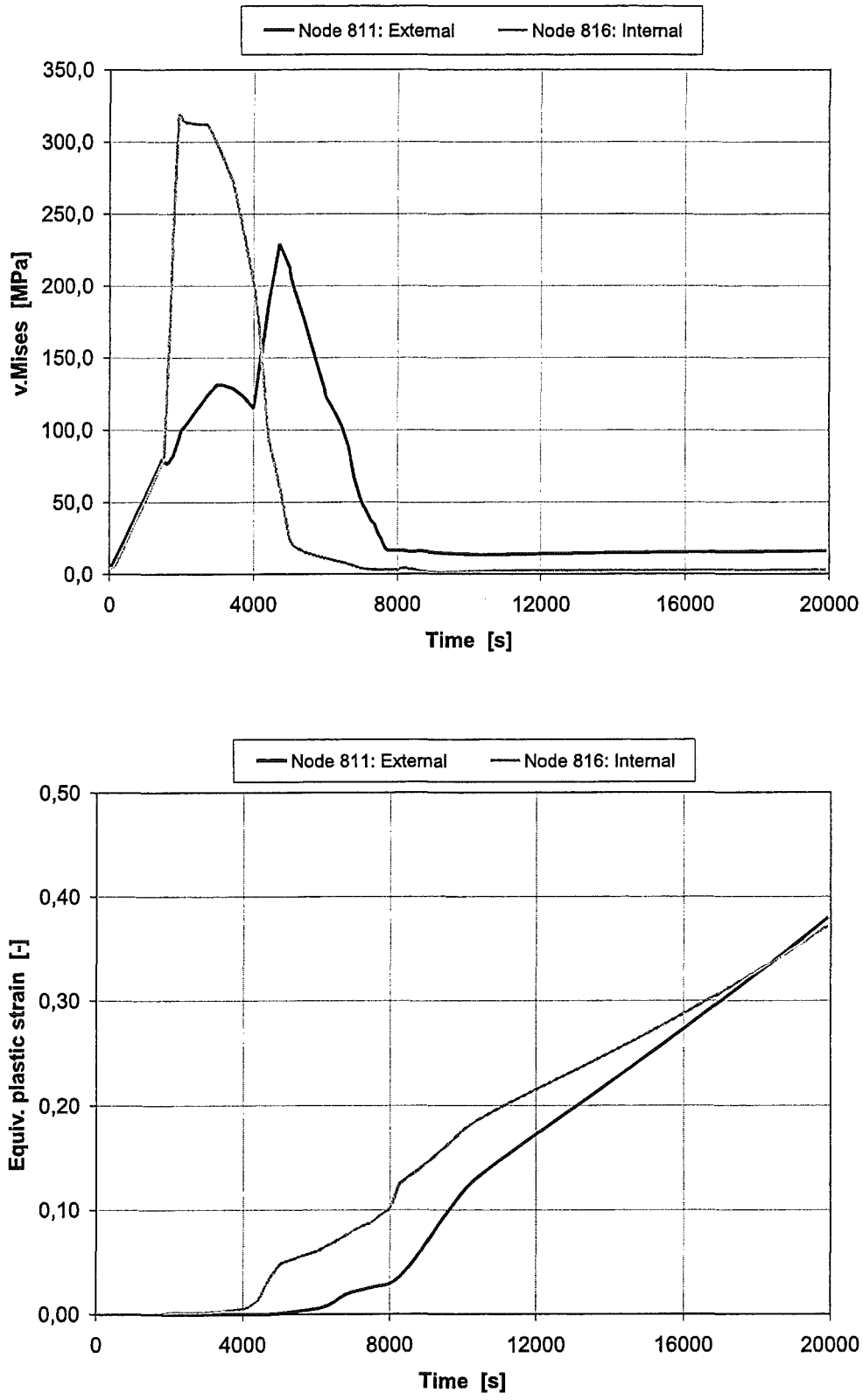


Fig. 4.6: Von Mises equivalent stress (top) and plastic strain (bottom) versus time at the inside and outside of section 5.

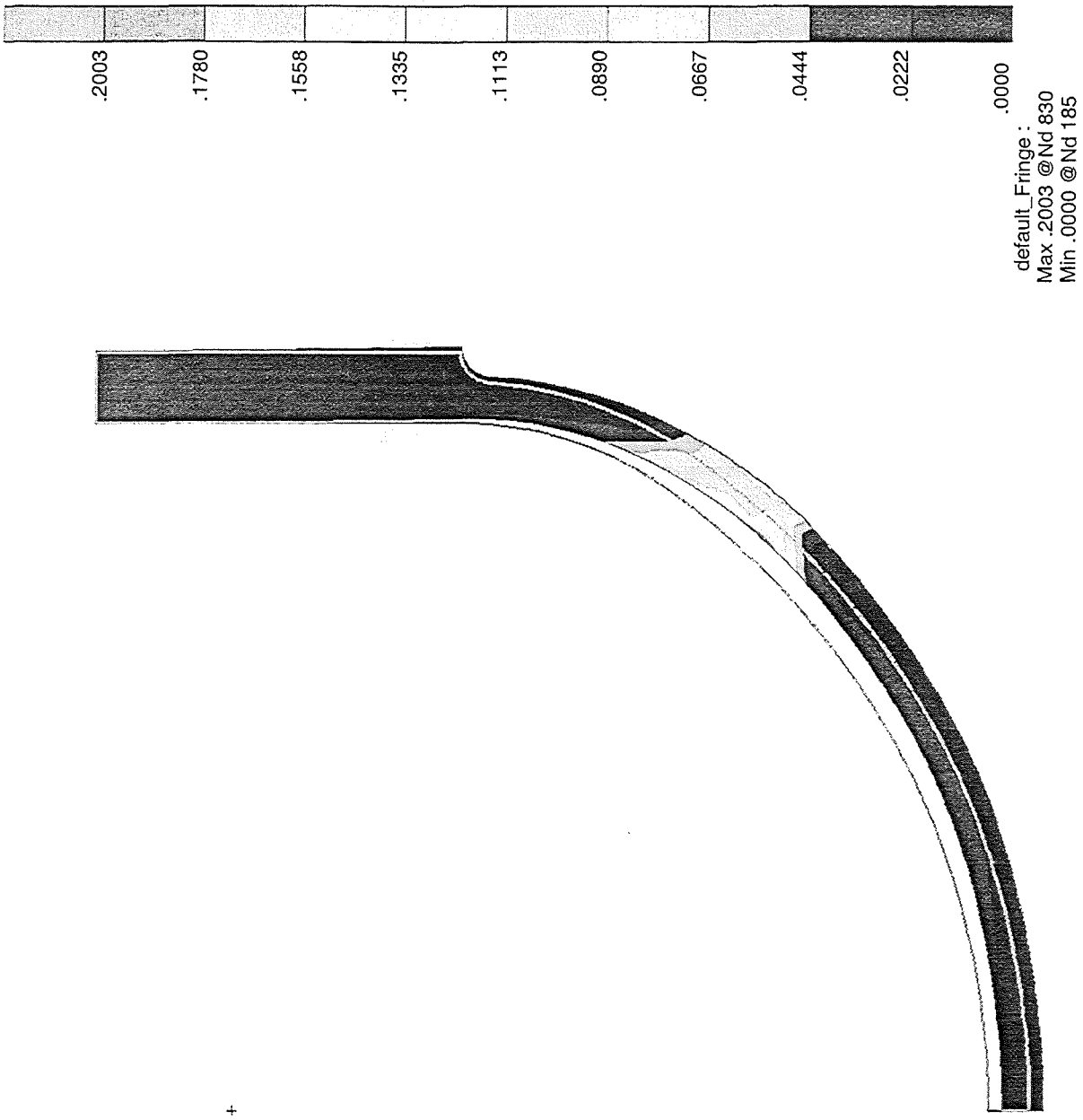


Fig. 4.7: Axial and radial displacements at the hot spot versus time.

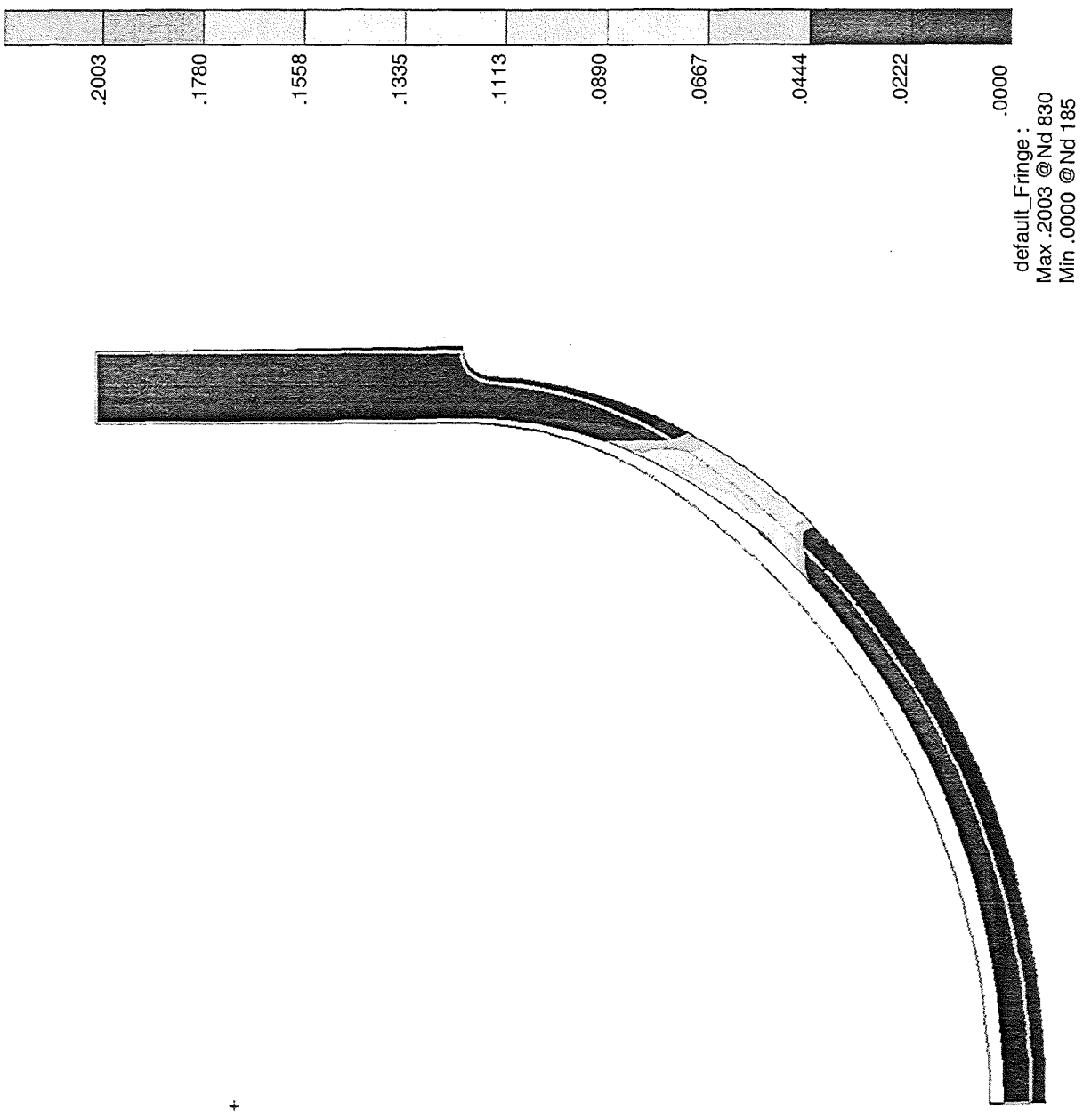


Fig. 4.8 Equivalent plastic strain after 10000 seconds.

II. Experimente zur Dispersion von Corium

(M. Gargallo, M. Greulich, M. Kirstahler, L. Meyer, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner, IKET)

Abstract

Experiments are being performed in a scaled annular cavity design, typical for the European Pressurized Reactor (EPR), to investigate melt dispersal from the reactor cavity when the reactor pressure vessel lower head fails at low system pressure of less than 20 bar. In the first part of the experimental program the fluid dynamics of the dispersion process has been studied using model fluids, water or bismuth alloy instead of corium, and nitrogen or helium instead of steam. The effects of different breach sizes, - central holes in the lower head in this study, and different failure pressures on the dispersion have been studied systematically. For central holes in the lower head, the dispersed liquid fractions can be correlated by a Kutateladze number based on the velocity in the annular space of the cavity.

Zusammenfassung

Das Versagen des RDB unter vollem Systemdruck wird durch systemtechnische Maßnahmen verhindert. Ein Versagen bei einem zu unterstellenden Druck von 10 bis 20 bar kann u.U. noch zu starker Dispersion und Umverteilung der Schmelze in die Reaktorräume und den Dom und damit zur direkten Aufheizung der Containmentatmosphäre führen. Auch müsste das für das Konzept der Kernschmelzekühleinrichtung berücksichtigt werden. Das Zusammenwirken der hierbei auftretenden Materialtransportprozesse sowie der thermischen und chemischen (Wasserstofferzeugung und –verbrennung) Wechselwirkungen ist komplex und kann derzeit mit Computercodes noch nicht oder nur bedingt berechnet werden. Notwendig sind daher Einsichten und Daten aus experimentellen Untersuchungen, insbesondere auch integrale Experimente, deren Ergebnisse mit Modellen und Coderechnungen auf die große EPR-Anlage übertragen werden können. Das Hauptziel der Untersuchungen ist die Bestimmung eines maximal

zulässigen Druckes zum Zeitpunkt des RDB-Versagens, bei dem keine relevante Dispersion der Schmelze auftritt, im Zusammenspiel mit einer für dieses Ziel evtl. zu optimierenden Grubengeometrie.

Im Versuchsstand DISCO-C, der die EPR-Reaktorgrube und die anschließenden Räume im Maßstab 1:18 modelliert, wurde die erste Versuchsreihe mit kalten Modellfluiden in einer Basisgrubengeometrie ohne Lüftungskanäle durchgeführt. Als Versagensart wurden nur zentrale Löcher verschiedener Größe in der RDB-Kalotte untersucht. Diese Versuchsreihe diente zur Analyse der fluiddynamischen Ähnlichkeitsgesetze, um die Übertragbarkeit dieser und anderer Modellexperimente auf den Reaktorfall vornehmen zu können. Die Dispersionsraten der hier untersuchten Fälle konnten mit der Kutateladzezahl, gebildet mit der maximal im RDB-Ringraum auftretenden Gasgeschwindigkeit, korreliert werden.

1. INTRODUCTION

Recently two experiments were performed at the Sandia National Laboratories (SNL) in cooperation with Forschungszentrum Karlsruhe (FZK), Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire (IPSN) and the U.S. Nuclear Regulatory Commission (NRC) [1]. These tests were performed with thermite melt, steam and a prototypic atmosphere in the containment in a scale 1:10. For the first time, a test with a large break at low pressure was conducted. The initial pressure in the RPV-model was 11 and 15 bars, and the breach was a hole at the center of the lower head with a scaled diameter of 100 cm and 40 cm, respectively. The main results were: 78% of melt mass were ejected out of the cavity with the large hole and 21% with the small hole; the maximum pressures in the model containment were 6 bar and 4 bar, respectively.

At FZK the test facility DISCO-C has been built for performing dispersion experiments with cold simulant materials in an EPR-typical geometry in a scale 1:18. Subsequently, selected experiments in a DISCO-H facility in the same scale will be performed with thermite melt, steam and a prototypic atmosphere in the containment. The ultimate objective of the experiments is to find an upper bound of RCS pressures resulting in a minimum of melt dispersed out of the cavity in an optimized cavity geometry.

2. THE TEST FACILITY DISCO-C

A scheme of the pressure vessel and cavity model is shown in figure 1. There are only two potential flow paths out of the test cavity. A path straight up into the refueling canal is expected not to exist in the final EPR design. The main flow path is the free flow area around the 8 main coolant lines into the pump and steam generator rooms with a total flow area of about 10 m^2. However, there is a flow constriction below the nozzles at the RPV support structure with an minimum flow area of only 6 m^2 in the present design. The other way out of the reactor pit will be through four ventilation openings in the lower part of the cavity (total flow area 1.5 m^2) leading to the spreading compartment via an annular channel around the pit, and a connecting channel (not shown in Fig. 1). This second path was closed in the first experimental series presented here. The pump and steam generator rooms are open to the dome in the prototype and open to the atmosphere in the experiment, only covered by filters for the extraction of fog or droplets. The compartments are volumetrically scaled and contain some baffles (pump room 0.131 m^3, steam generator room 0.3 m^3).

The total volume of the pressure vessel is 0.08538 m^3 (scaled 498 m^3), simulating the volume of both the RPV and part of the RCS. A disk holding 8 pipes (44 mm I.D., 250 mm length) separates the two partial volumes in a ratio 60:40 (RCS:RPV). The fluids employed are water (ρ = 1000 kgm^{-3}, σ = 0.072 N/m) or a bismuth alloy (Bi-Pb-Sn-In-alloy, MCP-58®, ρ = 9230 kgm^{-3}, T_{melt} = 60°C, σ = 0.35 N/m), similar to Wood's metal) instead of corium, and nitrogen or helium instead of steam. The RPV lower head can hold 3.4×10^{-3} m^3 of liquid (liquid height in the hemisphere is 96 mm). This corresponds to 20 m^3 or 160 t of corium. The holes in all tests, except for test R-01, were at the center of the hemisphere. They were closed by a rupture disk, that had an opening diameter larger than the hole diameter. The pressure vessel was filled with gas to a pressure slightly lower than the failure pressure of the rupture disk. A small auxiliary pressure vessel, filled to a somewhat higher pressure was connected to the main pressure vessel. By opening a valve in the line connecting the two vessels electro-pneumatically the pressure in the main vessel increased up to the failing pressure of the rupture disk and the blow down started. A break wire at the rupture disk gave the signal for closing the valve again and for the time mark t = 0.

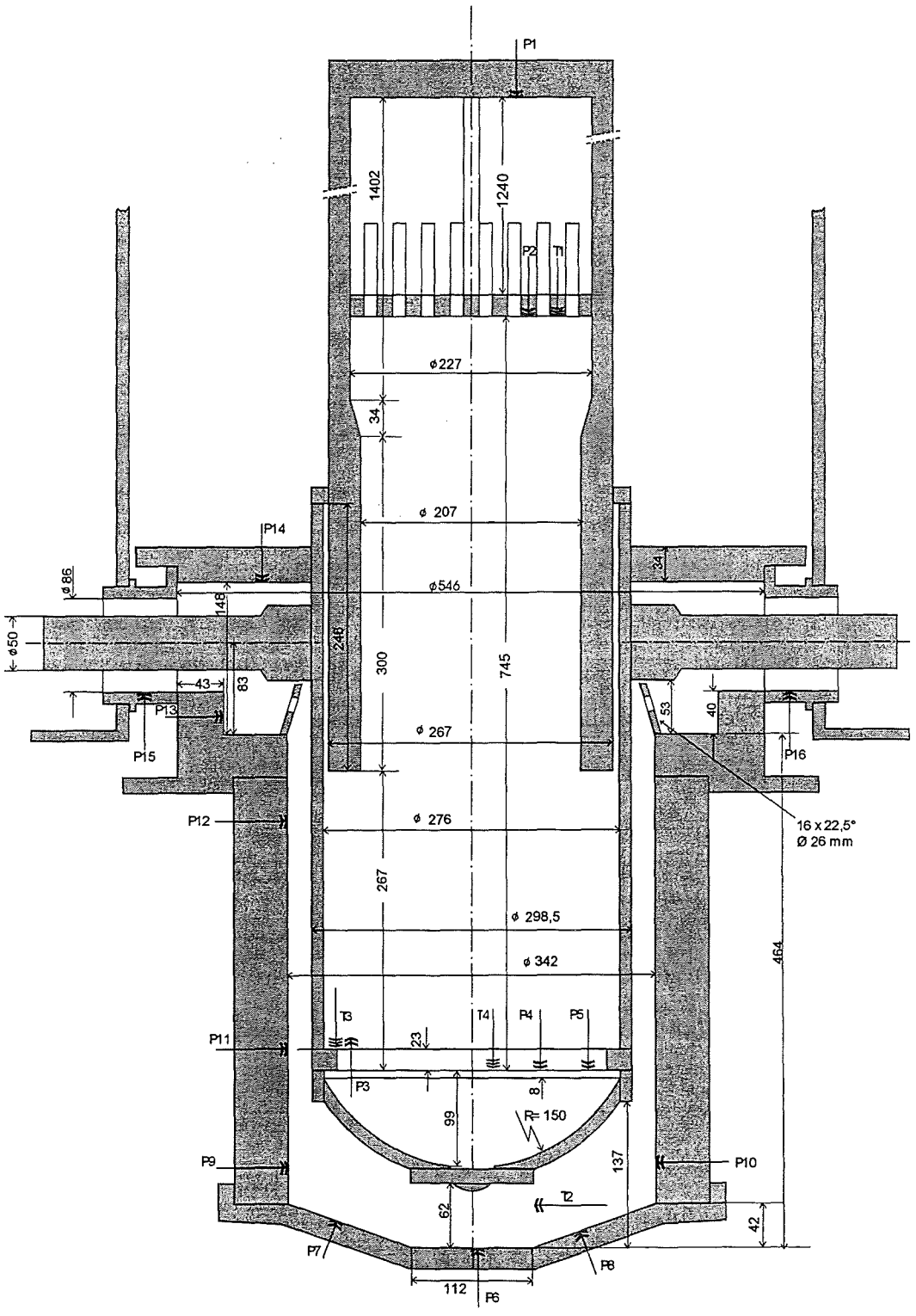


Fig. 1. The configuration of the pressure vessel with a rupture disk at the lower head (dimension in mm).

3. EXPERIMENTAL RESULTS

3.1 Dispersal rates

The initial conditions of the experiments are given in table 1 together with the liquid fractions found in the compartments and the cavity after the tests. If liquid reaches the RPV support girder, approximately 0.8×10^{-3} m^3 are deposited there; 0.6×10^{-3} m^3 are kept behind a conical ring (s. Fig.1), that prevents the liquid to flow back into the lower pit. The rest stays on the horizontal surfaces in this area. Fig.2 shows the data as function of the initial pressure. For comparison, data are shown from experiments performed at Brookhaven National Laboratory (BNL) for a Westinghouse cavity design (Surry) with a large instrument tunnel [2]. These data seem to change more sharply at a threshold from low to high dispersal rates than in our case. However, for larger holes (>50 mm, >0.90 m scaled) there must be a sharp drop at very low pressure differences (0.1 – 0.2 MPa). The effect of a different driving gas (He versus N_2) is similar as found before, e.g. at BNL. The higher sound velocity of helium leads to a faster blow down, but the lower density (app. $^1/_7$ of N_2) causes less entrainment, with the net result of a lower dispersal.

One special test was run with a horizontal break at the side of the lower head (R-01). The slot was app. 40 mm × 12.5 mm, having a 25-mm-hole equivalent flow area. The lower and the upper edge of the slot were 55 mm and 64 mm above the bottom of the lower head, respectively. The liquid volume used was only 1.8 10^{-3} m^3, and the liquid surface was at 67 mm above the bottom. In this test very little liquid was dispersed into the compartments. The small mass that was dispersed was found in the compartments on the opposite side of the break. A considerable amount of liquid remained in the lower head of the RPV. The liquid level of this rest water was at 39 mm above the bottom, or 16 mm below the lower edge of the opening. A comparison test (D-17) with the same amount of liquid but a center hole of 25 mm diameter gave similar results as the test with the large liquid mass (D-07). The somewhat smaller mass fraction in the compartments (0.4073 versus 0.5177) is due to the much larger (relative) mass fraction at the RPV support in D-17, but with almost identical absolute masses at the support in both tests.

Table 1 Parameters and dispersed liquid fractions in DISCO-C experiments

Test	Gas	Liquid water/ metal 10^{-3} m^3	Hole Dia. (mm)	Burst Press. abs. (MPa)	Blow through t_b (s)	Liquid fraction found in: Compa rt-ments f_d	Cavity bottom	RPV support	Cavity total f_c	RPV
D-12	N_2	3.4 w	18	0.270	-	0.000	0.950	0.050	1.000	0
D-11	N_2	3.4 w	15	0.643	0.688	0.161	0.583	0.256	0.839	0
D-10	N_2	3.4 w	15	1.141	0.419	0.382	0.387	0.231	0.618	0
D-15	N_2	3.4 w	25	0.348	0.359	0.193	0.537	0.270	0.807	0
D-07	N_2	3.4 w	25	0.620	0.106	0.518	0.224	0.258	0.482	0
D-04	N_2	3.4 w	25	1.190	0.047	0.698	0.056	0.245	0.302	0
D-13	N_2	3.4 w	50	0.353	0.032	0.551	0.212	0.237	0.449	0
D-06	N_2	3.4 w	50	0.619	0.024	0.669	0.061	0.270	0.331	0
D-05	N_2	3.4 w	50	1.200	0.018	0.759	0.012	0.229	0.241	0
D-18	N_2	3.4 w	50	0.605	0.025	0.684	0.139	0.177*	0.316	0
D-14	N_2	3.4 w	100	0.351	0.012	0.580	0.136	0.284	0.420	0
D-08	N_2	3.4 w	100	0.613	0.013	0.717	0.052	0.231	0.283	0
D-09	N_2	3.4 w	100	1.137	-	0.741	0.021	0.239	0.259	0
H-02	He	3.4 w	25	0.388	0.335	0.123	0.621	0.256	0.877	0
H-01	He	3.4 w	25	0.641	0.104	0.350	0.399	0.252	0.651	0
H-03	He	3.4 w	25	1.156	0.065	0.616	0.123	0.261	0.384	0
H-04	He	3.4 w	50	0.621	0.025	0.469	0.378	0.153*	0.531	0
H-05	He	3.4 w	15	0.637	0.076	0.087	0.781	0.132*	0.913	0
H-06	He	3.4 w	100	0.620	0.	0.525	0.298	0.177*	0.475	0
R-01	N_2	1.8 w	25#	0.611	-	0.029	0.423	0.185	0.608	0.363
D-17	N_2	1.8 w	25	0.612	0.033	0.407	0.123	0.470	0.593	0
M-02	N_2	3.0 m	25	0.595	0.790	0.060	0.862	0.077*	0.940	0.001
M-01	N_2	3.1 m	25	1.045	0.515	0.358	0.428	0.215	0.643	0
M-03	N_2	3.0 m	50	0.582	0.090	0.379	0.495	0.125*	0.620	0.001
M-04	N_2	3.0 m	50	1.000	0.053	0.730	0.159	0.109*	0.268	0.001

*Space behind conical ring at the support girder was filled with 0.6×10^{-3} m^3 silicon rubber up to the lower edge of the holes, so all liquid could flow back into the lower cavity, except a thin film and the frozen material at the walls.

horizontal rip, 40 × 12.5 mm

Water (ρ = 1000 kgm^{-3}, σ = 0.072 N/m)

Metal, bismuth alloy (Bi-Pb-Sn-In-alloy, MCP-58®, ρ = 9230 kgm^{-3}, T_{melt} = 60°C, σ = 0.35 N/m)

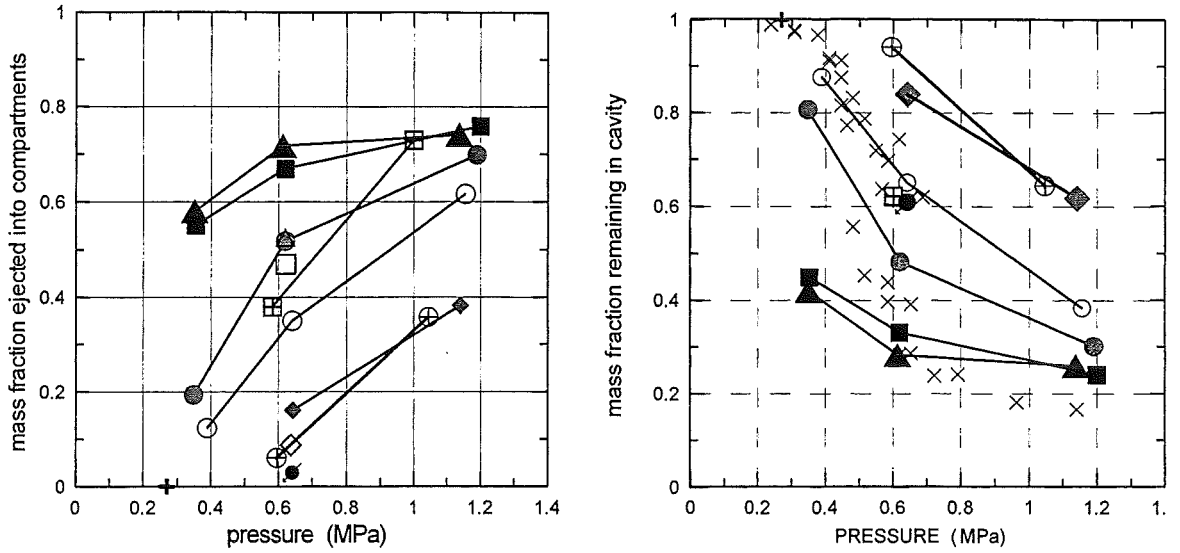
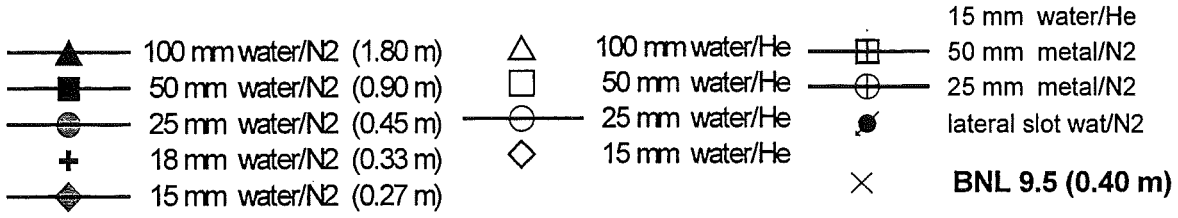


Fig. 2 Liquid mass fractions as function of the failure pressure of the rupture disk



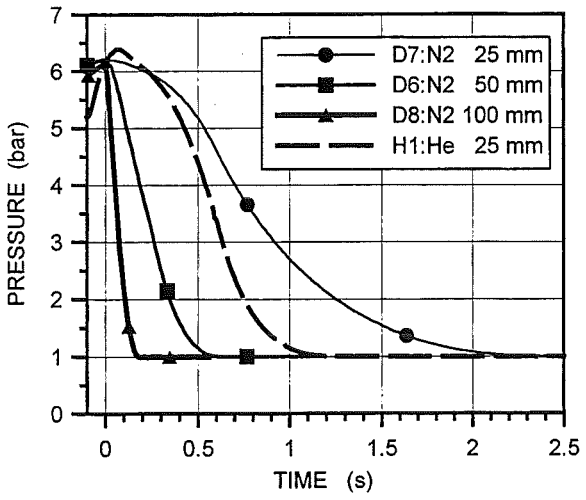


Fig. 3 Pressure histories for different hole sizes

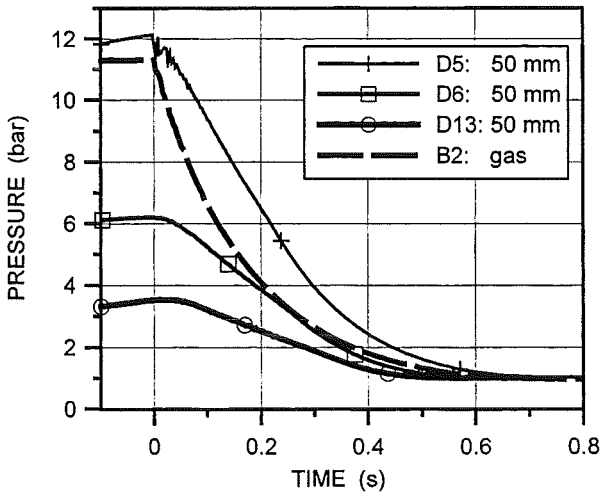


Fig. 4 Pressure histories for different initial pressures

3.2 Blow down histories

The duration of the blow down process is inversely proportional to the flow area of the hole (Fig.3). According to scaling laws it is also proportional to the length scale, so the blow down times for the reactor would be between 3 s and 120 s with hole sizes between 1.8 m and 0.27 m diameter. However, with steam and thermal effects these times would be different. Scaling laws predict a blow down time dependency on the initial pressure as $t \sim \ln (p_0/p)$ [3]. The experiments show that the pressure effect is smaller than that. The reason is the presence of the liquid. A pure gas blow down has an entirely different trend with a steeper gradient in the beginning (Fig. 4).

Fig.5.a shows the pressure in the RPV together with the pressure (P6) measured on the cavity floor directly below the hole. The rupture disk opens at t=0 s, but the pressure still increases because the valve between the auxiliary pressure vessel and the main vessel closes not before t=0.07 s. Up to app. t=0.4 s the pressure falls only slightly. The pressure signal from P6 is identical to the RPV pressure signal up to t_b=0.362 s. This indicates that there is a single-phase liquid flow with the velocity of $u_L = (2\ \Delta p/\rho_L)^{1/2}$. At t_b=0.362 s a blow-through occurs and there is a two-phase flow up to app. t=0.78 s. From that point on there is a single-phase gas flow, probably with very small droplets, and again the pressure signal P6 gives the total pressure with $p_{dyn}=\rho_G/2\ u_G^2$. Similar signals could be observed in all tests, but in most cases the

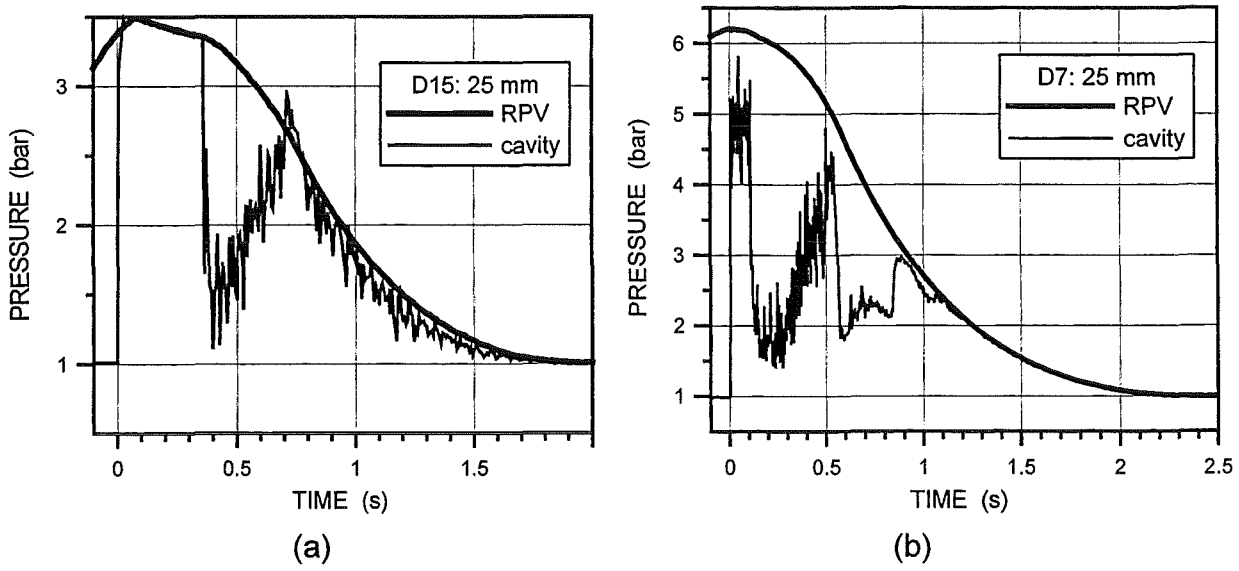


Fig.5 RPV static pressure and total pressure on the cavity floor below the hole

dynamic pressure in the initial liquid flow phase did not reach quite the RPV pressure (Fig.5.b); probably because of the fragmentation of the jet. The blow through times t_b are listed in table 1. The effect of the blow through and the two-phase outflow on the dispersal of the melt has been studied analytically [4,5] and is being studied further experimentally.

3.3 Analysis of the results

With the information of the pressure and the temperature in the RPV and in the cavity, and the flow cross section of the annular space around the RPV, a mean gas velocity in the annulus, u_G, can be determined. Fig.6 shows the RPV pressure and the static pressure in the cavity. Because of the choked flow at the reduced flow area below the nozzles we see a pressure peak in the cavity in experiments with large holes. This sets an upper limit to the velocities in the annulus. Fig.7 shows some typical velocity histories which were determined assuming that the whole annular cross section is available for the gas flow. Of course, this is not the case, because the liquid fills up part of the cross section. Also the velocity distribution will not be uniform. Thus, these velocities represent a lower bound. Local velocity measurements are going to be done, in order to determine the upper limit of the velocities in the annulus.

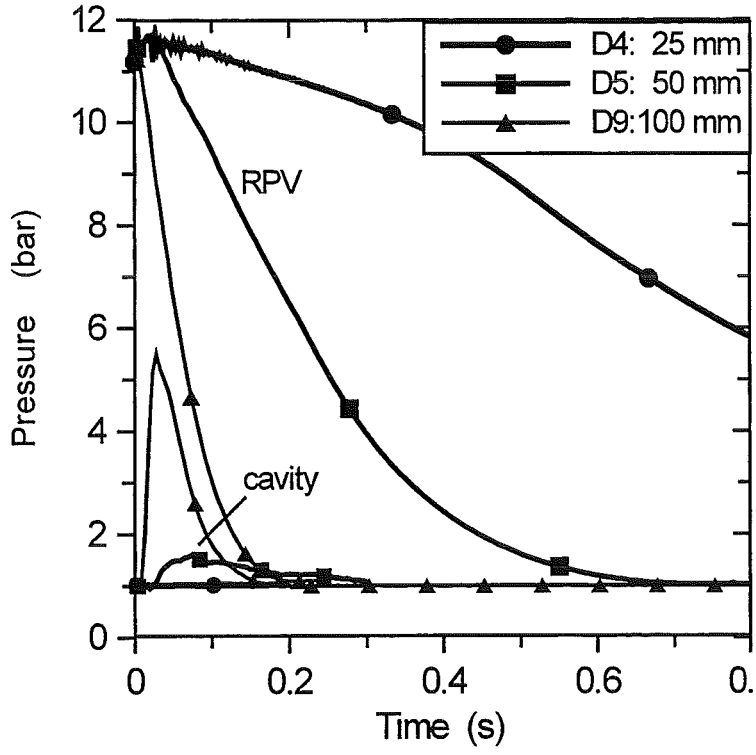


Fig.6 Pressure in the RPV and cavity

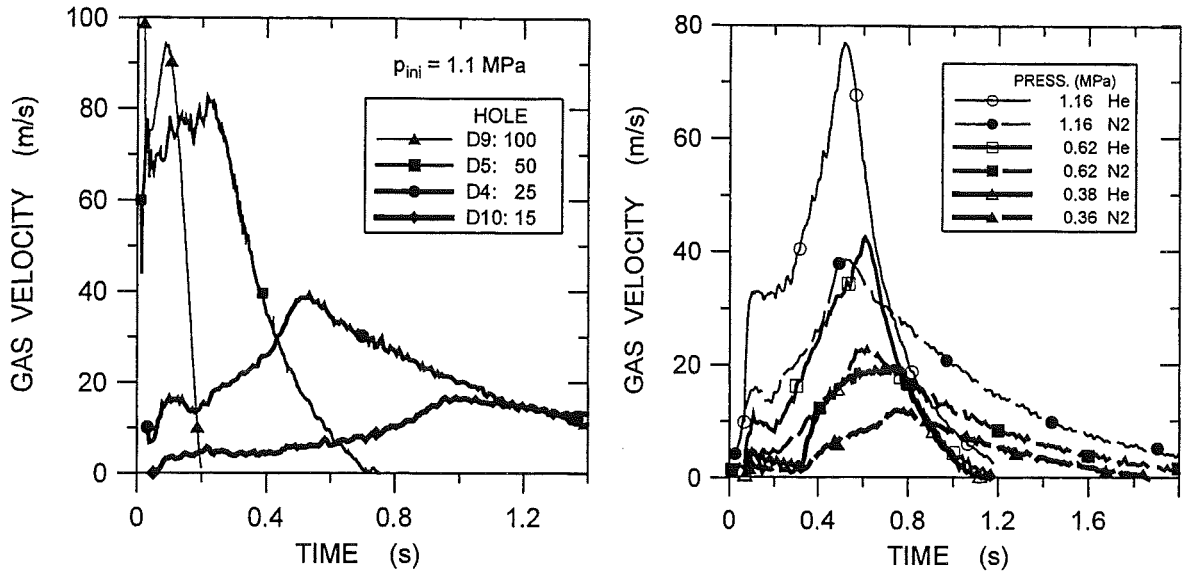


Fig.7 Gas velocities in the annular space in the cavity; (a) at the same initial pressure with different hole sizes, (b) with an identical hole size of 25 mm, with different pressures and gases.

In Fig.8 we see a coarse correlation between the dispersed fraction and the maximum gas velocity in the annulus, u_G, relatively independent of the hole size. Considering the above mentioned uncertainties in the determination of the velocity, it is surprising to find such a simple relation. The tests with helium and the tests with Wood's metal lie outside this band. There is no single correlation between the exit velocity of the liquid and the dispersed fraction. However, the nitrogen and helium tests collapse on

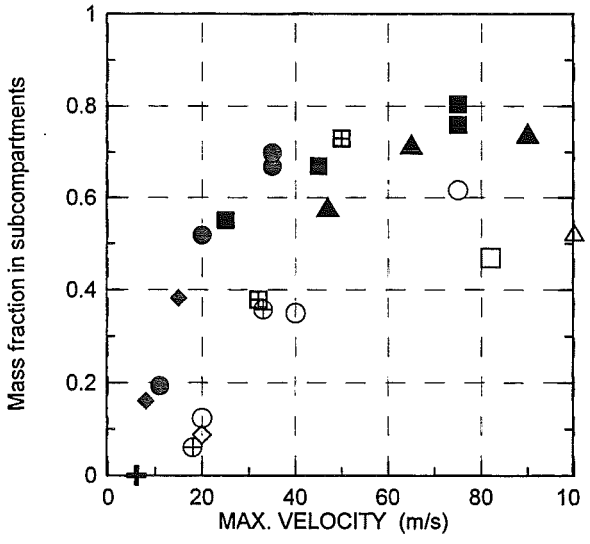


Fig. 8 Dispersed fraction f_d versus the maximum gas velocity in the annular space

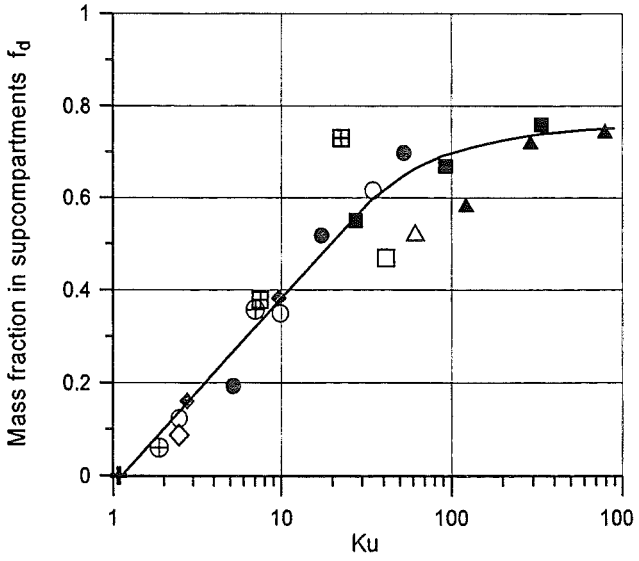


Fig. 9 Dispersed fraction f_d versus the Kutateladze-number (symbols see Fig. 2)

one curve, if they are correlated by $\rho_G u_G^2$, and also the liquid metal tests can be joined into one curve if the dispersed mass fractions are correlated by the Kutateladze number, $Ku = \rho_G u_G^2/(\rho_L g \sigma)^{1/2}$ (Fig.9). If the threshold for droplet levitation up the annulus was applied according to the Kutateladze criterion $Ku > 14$, the velocity limit for N_2/water would be 18 m/s, and for both, He/water and N_2/Wood's metal systems it would be 47 m/s. The results, however, show no sharp threshold and dispersal occurs also at lower velocities. The above correlation should not be overrated. It is a preliminary result and does not reflect the complexity of the blow down and dispersion processes. Taking the maximum gas velocity as a correlation parameter does not seem to take account of the several stages of the blow out, the single-liquid stage, the two-phase stage and the single gas phase.

In the experiment the parameter $\rho_G u_G^2$ is smaller for helium than for nitrogen, which makes the f_d-data collapse on one line for both driving gases. If we assume sound velocity at the hole, $\rho_G u_G^2$ becomes proportional to κp_0. This expression is larger for helium (κ=1.667) than for nitrogen (κ=1.4). Obviously, the velocity in the experiment is smaller than theoretically possible, and more so for helium than for nitrogen. The ratio of the experimental velocities for helium and nitrogen is about 2, while the ratio of the sound velocities is 3. The reason for that difference must be the presence of the liquid phase as noted above (Fig.4).

If the gas velocity in the annulus were the governing parameter for melt dispersal, a reduction of this velocity could reduce the dispersion. Before a conclusion can be drawn for the optimum cavity design, more and special experiments are necessary, especially with lateral rips in the lower head.

4. CONCLUSIONS

A first series of 24 experiments has been performed in the DISCO-C facility with a 1:18-scale model of an EPR-typical reactor pit with simulant materials. Hole diameters between 15 mm and 100 mm (0.27 m and 1.80 m scaled) and initial pressures between 0.35 and 1.16 MPa were employed. With large holes and 1 MPa initial pressure, practically all liquid (water) was ejected out of the lower pit, however, approximately 25 % was caught in the space at the RPV support. The results of all experiments with central holes in the lower head, regarding the dispersed fractions, with material

combinations nitrogen/water, helium/water and nitrogen/Wood's metal, can be correlated as a function of the Kutateladze number, $Ku = {}_G u_G^2 / ({}_L g\sigma)^{1/2}$, with u_G, the maximum gas velocity in the annular space around the RPV. The threshold pressure for dispersion is less pronounced in the annular cavity geometry than in cavities with a chute. The experiment with a lateral rip in the lower head showed much smaller dispersal rates than with central holes. More experiments with such a geometry will be performed.

REFERENCES

1. Blanchat, T.K., M.M. Pilch, R.Y. Lee, L. Meyer, and M. Petit, Direct Containment Heating Experiments at Lower Reactor Coolant System Pressure in the Surtsey Test Facility, NUREG/CR-5746, SAND99-1634, Sandia National Laboratories, Albuquerque, N.M. 1999.
2. Tutu, N.K., Ginsberg, C., A letter report on the results of melt dispersal experiments with the Surry and Zion cavity models, Brookhaven National Laboratory, Upton , New York, transmitted to the USNRC, Oct. 1990.
3. Jacobs, G., L. Meyer, Planned melt dispersal experiments in a scaled cavity, SMiRT 14 Post-Conference Seminar on Containment of Nuclear Reactors, CEA Sacley, France, August 25-26. 1997.
4. Meyer, L., G. Jacobs, D. Wilhelm, M. Gargallo, T. K. Blanchat, Experiments on Corium Dispersion after Lower Head Failure at Moderate Pressure, SMiRT 14, Post Conf. Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Seoul, Korea, August 23-24. 1999.
5. D. Wilhelm, Transient Code Models for low Pressure Corium Dispersion, Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability of the Nuclear Energy Agency, Karlsruhe, 16-18 November 1999. (s. also next article)

III. Rechnungen zur Dispersion der Kernschmelze

(D. Wilhelm, IKET)

Zusammenfassung

Zur Berechnung der Dispersion der Kernschmelze wurden Rechenmodelle entwickelt, die in den zweidimensionalen Mehrphasencode AFDM eingeführt wurden. Die Modelle beschreiben den Auf- und Abbau von Flüssigkeitsfilmen an den Wänden außerhalb des Reaktordruckbehälters, den Wärmeübergang vom heißen Film an die Betonwände, die Oxidation der Kernschmelze, die Wasserstofferzeugung und den Druckaufbau durch Wasserstoffverbrennung im Reaktordom.

Die Vorgänge beim Ausströmen von Corium aus dem Druckbehälter werden durch Standardmodelle des Codes beschrieben, sie sind aber von der Wahl der Maschen des Codes abhängig. Bei der Untersuchung dieser Parameter wurde festgestellt, daß der Zeitpunkt, bei dem der Coriumausfluß zweiphasig wird, einen Einfluß auf die Dispersionsraten hat. Für die Entrainment- und Depositionsparameter des Flüssigkeitsfilms wurde ein Parametersatz gefunden, mit dem die Ergebnisse der Wasser- und Thermitexperimente gut wiedergegeben werden können.

INTRODUCTION

If molten corium collected on the lower head of the reactor pressure vessel (RPV) causes the vessel to fail while there is still overpressure left in the reactor coolant system, the melt may be ejected in such a way that parts of it travel up in direction of the dome of the reactor containment. The melt flows through the breach, it is dispersed, a part of it may collect as a film on the adjacent walls, and parts of the film may be re-entrained into the main stream. The gas-vapor mixture blowing out of the breach oxidizes the metal components of corium. The reaction is exothermal and produces hydrogen which may burn downstream when mixing with oxygen of the containment atmosphere.

The experimental data are abundant enough to start testing theoretical models which are needed to assess conditions on prototypic scale. Besides the generally

used lumped parameter models, see (Washington, 1995), the present method takes advantages of the proven technology of a multiphase code and adds specific dispersion models to it. The two theoretical approaches are used in parallel and offer to mutually influence each other. While the lumped parameter approach is justified by the lack of rigorously mechanistic models, a multiphase code has the advantage to resolve the geometry in greater detail. For example, local velocities may have a substantial influence on how the corium is being dispersed which demands for a model that resolves major flow paths. As the code geometry approaches that of the experiment, code results can be compared to local measurements and physical details can be obtained in order to understand relationships. The code has therefore been run in parallel to the analysis of experimental results. With a detailed enough geometry, a scale-up to prototypic conditions may ultimately be possible.

THE TRANSIENT FLUID DYNAMICS CODE

The multiphase code chosen is AFDM (Advanced Fluid Dynamics Model, (Bohl, 1992)) which has two dimensions and three velocity fields. This allows to track water, molten corium, and a gas-vapor mixture. The code describes a multitude of energy fields and has a transient model of interfacial areas between all energy fields. The numerical solution method with its predictor-corrector method allows to add explicit models.

The AFDM cells are defined in order to model transient fluid flow on a few seconds time scale. The explicit dispersion models are superposed to the r-z-geometry of the Eulerian cell set of AFDM. There is no intention to resolve the velocity and mass concentration profiles expected in the given geometry. This would require cells of only millimeter size, and lead to inoperable cell numbers. Instead, there are only several hundred AFDM cells. This number is subject to change, especially because it governs numerical diffusion and smearing of distinct interfaces. However, it is large enough to model the main features of the given geometry which is expected to play a major role in the dispersion process.

THE DISPERSION MODELS

By using predefined volumes consisting of clusters of Eulerian cells of AFDM, any lumped parameter model can be imported from system codes. While AFDM

distinguishes only melt, water, steam, melt vapor, and noncondensable gas, the volumes of clusters need two different kinds of melt, oxide and metal, and three different kinds of noncondensable gas, nitrogen, oxygen, and hydrogen. These new components are only recognized by the added models. AFDM receives information about the mixture of these gases and the exothermic heat. Table I shows the components of both codes sections

Table I

AFDM standard code	Velocity field	Added model
structure	-	-
melt	1	Oxide melt
Melt particles	1	Metal melt
water	2	-
Melt vapor	3	Steam
Steam	3	Nitrogen
Noncondensable gas	3	Oxygen
	3	Hydrogen

There are two model sections added, the first is for the chemical reactions, and the second for the hydrodynamics in the vicinity of liquid corium films at the walls outside of the reactor pressure vessel (RPV).

For the first model section, substantial work has already been performed to describe the oxidization of melt and the combustion of hydrogen (Washington, 1995). There are two volumes of cell clusters which allow to use correlations of the two-volume equilibrium model (Pilch, 1994).

For the first model section, the volume is limited to the cavity, directly adjacent to the RPV, and the flow paths to the reactor dome. In this volume, most of the oxidization of metallic corium takes place. The second is the volume where the generated hydrogen may burn if the combustion conditions are met. The corium oxidization is supposed to be diffusion limited. This allows to introduce the necessary rate of oxidization for calculating the transient heat generation of AFDM. The

combustion is supposed to be advection limited, i.e. it depends on the mass flow of hydrogen entering the oxygen-rich region of the containment.

While oxidization and combustion are important to assess system pressures and long term behavior for the SNL/Sup experiments, dispersion rates were found to be hardly affected by combustion and little affected by oxidization (see later) in the present geometry. This permits to concentrate on one subject each. At present, work has concentrated on entrapment and entrainment models. For prototypic conditions, however, it is important to take into account all processes to study their influence.

For the second model section, the volume of cell clusters is reserved to describe the formation of liquid films at the cavity walls and the entrainment of droplets out of the liquid film. This volume is a part of the cavity volume. A liquid film is defined at sections of the horizontal and vertical cavity wall. The film is supposed to have a negligible velocity. All three velocity fields of the code are already occupied, and a moving film would need a flow-regime dependent subdivision of given computational cells which are limited to use only cell-averaged values. The entrainment model is based on a modified Whalley-Hewitt correlation which depends, among others, on the liquid film thickness which happens to be an explicit value of the present model (Hewitt, 1979).

For the entrapment of droplets on the walls, a simple model of mass transfer rate is used which is proportional to the liquid droplet flow perpendicular to the wall. The entrapment rate is indirectly proportional to the Kutateladse number which was found to correlate with the fraction of liquid mass ejected out of the cavity if the velocity in the Kutateladse number is the maximum value of the upward annular gas-vapor flow in the cavity (Meyer, 1999).

The flow is highly transient, and the dimensions of the cavity are such that flow profiles cannot develop because of the abrupt changes of flow directions. Therefore, the steady state entrainment formula may not be fully valid. This shows the need for adjusting multipliers to the entrainment and entrapment equations. Once these multipliers have been selected, they must be kept constant for all experiments to be calculated. Local and transient measurements of flow and film parameters are

difficult which limits the assessment of possible alternatives to standard entrainment models.

THE INFLUENCE OF GAS BLOWTHROUGH

Liquid corium is discharged through the breach in the RPV which is, for the present analysis, located at the bottom center. The flow regimes that govern this discharge may have a substantial influence on the way the liquid is subsequently being dispersed. As discussed in (Pilch, 1992), the discharge starts single phase, but may switch to two phase later. During the single phase discharge, the driving RPV gas pressure drives a solid liquid jet out of the hole into the cavity where it is subjected to break-up processes. Parts of the jet form a spray of droplets. Since the distance between the hole and the cavity bottom is small, the jet impacts on the bottom wall and is further dispersed. At a given time of discharge, the pool depth in the RPV becomes small enough to allow the high pressure gas to open a central voided channel in the jet. This may lead to higher escape rates of gas out of the RPV. The liquid is no longer pushed outside, but may also be entrained at the gas-liquid interface. However, the available liquid may not be entrained totally or may be ejected at a smaller rate so that RPV pressures come close to those in the cavity prior to total RPV voiding. This may influence the liquid dispersion from the cavity to the adjacent plena.

The gas blowthrough occurs when the ratio of remaining pool depth to the diameter of the hole falls below a threshold value. For the DISCO experiment D06, the critical pool height calculated with an analytical formula (Pilch, 1992) is large suggesting that gas blowthrough occurs early during the transient. However, measurements indicate a later gas blowthrough Experimental evidence for later gas blowthrough is coming from the pressure transducer P6 mounted flush with the cavity bottom directly below the discharge hole. Fig. 1 shows the experimental readings of the RPV pressure P1 and the cavity bottom transducer P6. The transducer P6 shows a sharp increase from 1 bar to exactly the RPV pressure shortly after hole opening. After 26 ms, the pressure falls sharply when the jet changes from single phase to two phase. Given the time for the jet to traverse the 62 mm from the hole to the cavity bottom at 32 m/s, the jet at the hole stops being single phase at 24 ms.

Dispersion rates proved to be sensitive upon the time at which the jet became two phase. As already explained, an early switch to two phase favors less dispersion of water out of the cavity. The only way to change gas blowthrough inception with an invariable grid was to specify different initial pool heights and diameters. The total initial pool mass stays always at 3.4 kg. Large pools are shallow and favor early gas blowthrough. For the given coarse cells, Fig. 2 shows the liquid water volume fractions in the discharge hole over time. The hole opens at 0.05 s, see vertical line. The liquid volume fraction stays at 1.0 for the time the jet remains single phase. Upon gas blowthrough, the liquid volume fraction decreases rapidly. The time of blowthrough is specified by extrapolating the maximum downward slope up to a volume fraction of 1. The figure shows that the increase in pool height postpones the time of blowthrough.

Measuring the water mass dispersed out of the cavity, the dispersion increases with pool height. This increase is at least equally important as that obtained by changing entrapment and entrainment parameters of the specific melt dispersion models. Table II collects the results of the experiment and compares them to those of five code runs.

Table II blowthrough and dispersion results

CASE	pool height (mm)	time of gas blowthrough (ms)	dispersed water (kg)	dispersed water fraction
experiment	***95***	***24***	***3.19***	***0.94***
1	84	13	2.50	0.73
2	89	14	2.89	0.85
0	**107**	**18**	**3.12**	**0.92**
3	133	35	3.33	0.97
4	223	50	3.39	0.98

Table II shows that Case 0 which has the blowthrough time closest to that of the experiment produces also the best dispersion rates. The results show that prototypic conditions for corium discharge can only be met if the fluid flow inside the RPV is being modeled correctly.

THE INFLUENCE OF ENTRAPMEMT AND ENTRAINMENT PARAMETERS

If the pressure in the RPV is high and the breach is large enough, the dispersion of the liquid is so violent that the liquid may be ejected out of the cavity. On its way out, it may come into contact with the walls and form temporary films. Any liquid film which forms may be subjected to entrapment and entrainment at the same time. If the local mass transfer rates of both processes is equal, the local width of the film does not change. Fig. 3 shows the development of the water film for DISCO D06 and D11. Both experiments have an initial RPV pressure of about 6 bar. D06 has a hole of 0.05 m diameter, D11 of 0.015 m. For the large hole, the film develops quickly to 4 mm when entrainment starts to decrease it. Pressures are equilibrated between the RPV and the cavity after 0.5 s, but entrainment stops already at 0.3 s, so that the residual film thickness is about 0.5 mm. For the smaller hole (experiment D11), the transient is slower, and the film builds up to about 5 mm, with entrainment processes going on beyond 1 s.

For the SANDIA experiments, the exothermic hydrogen production in the cavity increases the local pressures. This has a small influence on the dispersion because the driving pressure difference between the RPV and the cavity decreases. Fig. 4 shows a comparison between code and experimental pressures, and the production of hydrogen up to 0.88 kg which is very close to the value assessed for later times of the experiment.

For the same experiments, the film may lose heat to the concrete wall. Because of the short duration of the transient, the heat loss is small and the bulk film stays liquid. However, for prototypic conditions, the freezing of parts of the film may play a role. A transient heat conduction model has been added to the code to assess film temperatures. Fig. 5 shows the temperatures for a computational cell midway up the annular gap between the RPV and the concrete. The film temperature rises to that of the entrapped droplets, then falls during the end of the entrainment phase. After 0.7 s, the main blowdown is over and the liquid film temperature is solely influenced by the heat transfer to the wall.

The objective of the dispersion model was to select equations with a single set of parameters which matches all experimental results, independent of the material combination used. The first difficulty is to find the proper values for the surface

tensions, given the possibly large influence of surfactants, especially for the thermite experiments where a chemical reaction occurs where films are being formed. The surface tension has also an influence on the transient calculation of the liquid droplet size which is governed by a standard code model using a Weber-criterion. Droplet formation may be influenced by additional physical phenomena like fragmentation upon impact and jet disintegration which are presently not represented.

The second difficulty lies in the proper selection of the multipliers of the entrainment and entrapment correlations. An empirical approach for finding the proper parameters has been followed. Code results point towards a certain consistency of the present model equations when comparing dispersion rates with those of the experiments.

Fig. 6 shows the comparison of measured and calculated dispersion fractions. The fraction is defined by the ratio of the liquid mass collected downstream of the cavity exit to the total initial mass. The cavity exit is at the upper end of the vertical annulus. Any liquid beyond the RPV pipe support structures is supposed to be dispersed. The figure collects data of the DISCO experiments and the two SANDIA (SNL) thermite tests. The DISCO experiments were run with water as corium simulant, and nitrogen as vapor simulant. Additional DISCO experiments with helium instead of nitrogen and wood's metal instead of water are also shown here (dashed curve in Fig. 6) although they would require different multipliers on the entrapment correlation to yield satisfactory results. At this stage of the analysis, the question whether only the entrapment rate is responsible for the lack of consistency of the dashed curve cannot be answered. It is quite possible that the processes of jet breakup are not sufficiently well represented by the standard droplet breakup model of the AFDM code and that a model for the movement of liquid films on the cavity walls is needed.

Summing up the experience with the present dispersion models, a set of equations and initial conditions has been found which gives reasonable results for water and thermite experiments. Several phenomena have been identified to influence dispersion rates. These are the processes leading to a disintegration of the liquid jet leaving the RPV, the formation of liquid films at the cavity wall and the entrainment of liquid from the film into the gas flow, the levitation of droplets and the

movement of the film under the forces exerted by the gas flow. For the thermite experiments, the oxidization of the metal component by steam plays an additional role because the pressures in the cavity are increased.

REFERENCES

Meyer L., 1999, Experiments to Investigate the Low Pressure Corium Dispersion in EPR Geometry, Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability of the Nuclear Energy Agency, Karlsruhe, 16-18 Nov. 1999, (see also previous chapter)

Washington K.E., Williams D.C., 1995, Direct Containment Heating Models in the CONTAIN Code, Sandia National Laboratory report SAND94-1073, August 1995

Bohl W.R., Wilhelm D., 1992, The Advanced Fluid Dynamics Model Program: Scope and Accomplishment, *Nuclear Technology*, **99**, 309-317

Pilch M.M., 1994, A Two-Cell Equilibrium Model for Predicting DCH, Appendix E of Pilch M.M., Yan H., Theofanous T.G., The Probability of Containment Failure in ZION, Sandia National Laboratory report NUREG/CR-6075, SAND93-1535, July 1994

Hewitt G.F., 1979, Liquid mass transfer in annular two phase flow, in F. Durst et.al. (Ed.), *Two-phase momentum, heat, and mass transfer in chemical, process, and engineering systems*, Vol.1, Washington 1979, p.273

Williams D.C., Griffith R.O., 1996, Assessment of Cavity Dispersal Correlations for Possible Implementation in the CONTAIN Code, Sandia National Laboratory report SAND94-0015, February 1996

Pilch M.M., Griffith G.O., 1992, Gas Blowthrough and Flow Quality Correlations for Use in the Analysis of High Pressure Melt Ejection Events, Sandia report, SAND91-2322, June 1992

FIGURES

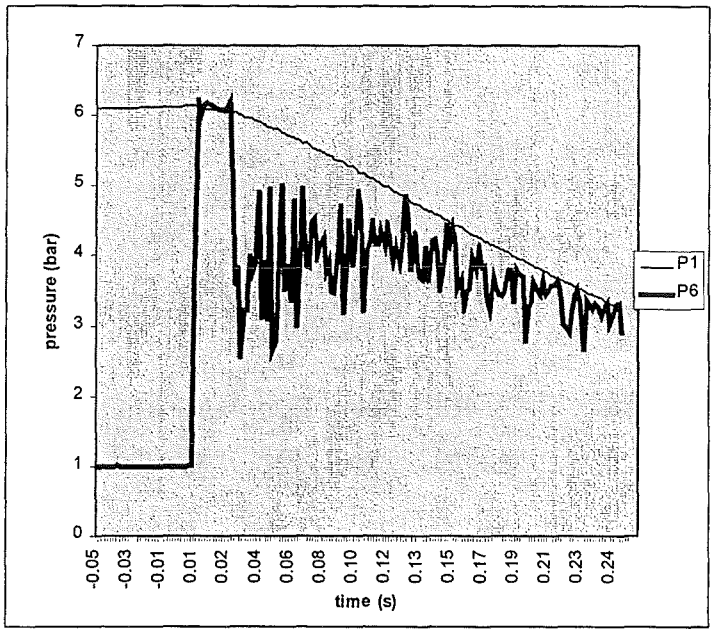


Fig.1 measured pressures of DISCO D06

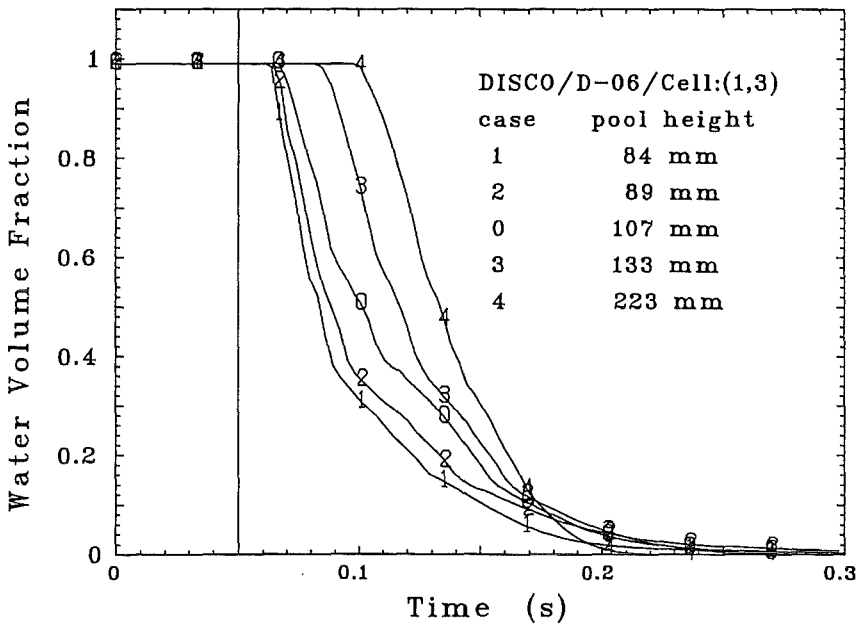


Fig. 2 code water volume fractions for different initial pool heights

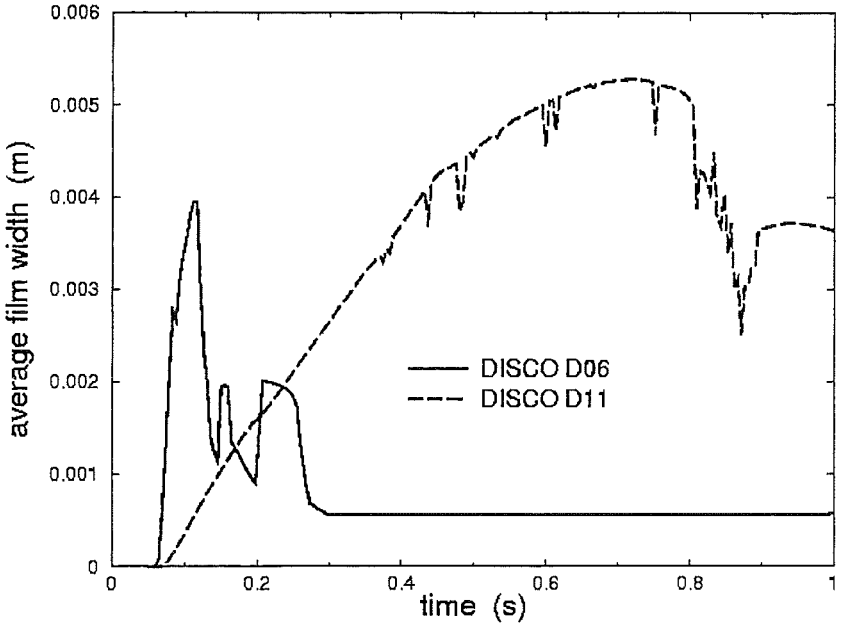


Fig. 3 Average liquid film thickness for two DISCO water experiments

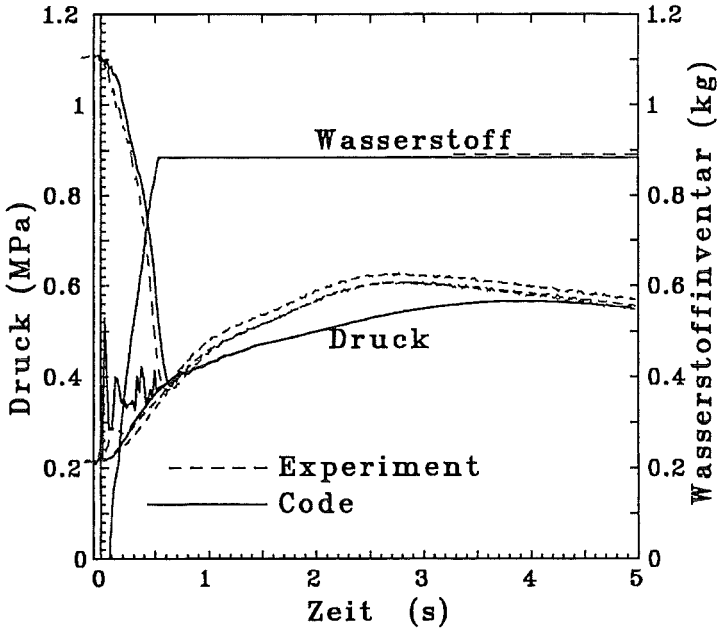


Fig. 4 Pressures and hydrogen inventory for the SNL/Sup-1 experiment

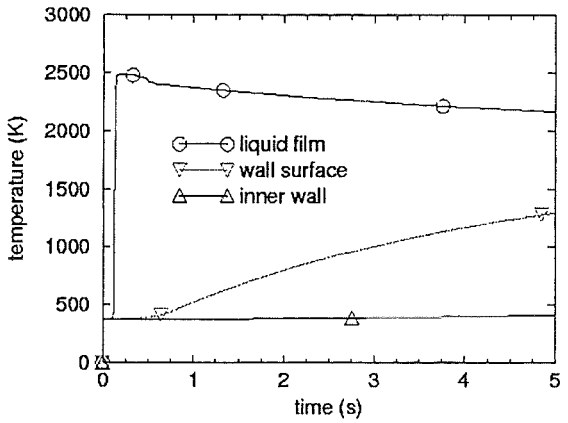


Fig. 5 Film and concrete temperatures for the SNL/Sup-1 experiment

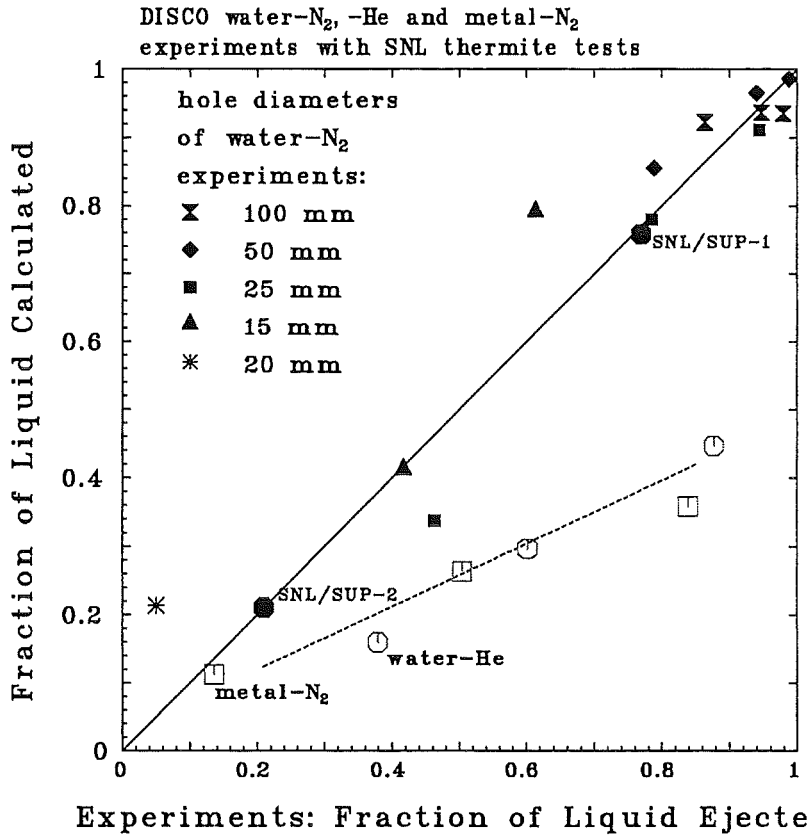


Fig. 6 Comparison between measured and calculated dispersion fractions

IV. Nachrechnungen der SNL-Experimente Sup1 und Sup2 mit CONTAIN 2.0

(G. Jacobs, R. Nöbel, T. Wendlandt, IKET)

Abstract

Post-test calculations using the CONTAIN code were performed for the SNL melt dispersal/DCH tests SUP-1 and SUP-2, resulting in a workable input model for future applications to high-temperature melt dispersal experiments as well as for prototypes with tight annular reactor cavity geometries.

Zusammenfassung

Die Schmelzedispersionsexperimente SUP1 und SUP2 bei SNL wurden mit dem Containment-Code CONTAIN nachgerechnet. Als Ergebnis ist ein tragfähiges Eingabemodell entstanden, welches als Basis für künftige Anwendungen auf heiße Dispersionsexperimente als auch auf Prototypen mit engen, ringförmigen Reaktorgruben dienen kann.

EINLEITUNG

Die Schmelzedispersionsexperimente SUP1 und SUP2, die bei SNL unter Beteiligung von FZK in 1998 durchgeführt worden sind [1], wurden mit dem Containment-Code CONTAIN 2.0 von SNL [2] in neuester, FZK zur Verfügung stehender Version (c11ag), nachgerechnet.

Ziel der Arbeiten war und ist es - die Arbeiten laufen noch - ein validiertes Eingabemodell für heiße Schmelzen zu entwickeln, das möglichst wenige Ergebnisdaten aus den Experimenten enthält und daher als Basis für zukünftige Voraus- und Nachrechnungen der DISCO-H-Versuche sowie für prototypische Anwendungen dienen kann.

EINGABEMODELL

Die Tabelle in Abbildung 3 aus dem Code Handbuch [2] gibt einen Überblick über die in Frage stehenden Modelle. Die zuletzt in den Code eingebrachten RPV- und Cavity- Modelle sind für uns von besonderem Interesse, weil sie die Dispersionsvorgänge beschreiben sollen. Leider wurden gerade diese Modelle, da sie relativ neu sind, noch nicht vollständig validiert, geschweige denn mit validierten Anwendungsvorschriften versehen, wie sie für die älteren DCH-Modelle von den Code-Entwicklern aufgestellt wurden. Deshalb hat die Anwendung dieser Modelle zur Zeit noch einen exploratorischen Charakter. Dementsprechend vorsichtig vortastend gestaltete sich die Erstellung des Eingabemodells für SUP-1 und SUP-2. Ausgangspunkt waren zwei Eingabedecks für die früheren DCH-Experimente SNL/IET-3 und -9 in Zion- bzw. Surry-Geometrie von K. Washington, D. Williams und R. Griffith (SNL).

Die Nodalisierung für SUP-1 und SUP-2 wurde so einfach wie möglich gehalten: 5 Zellen entsprechend den Hauptkomponenten der Surtsey-Anlage mit 6 Strömungspfaden (vgl. Abbildungen 1 und 2). Auf eine Unterteilung des Basements wurde verzichtet, weil nur vergleichsweise wenig Schmelze dorthin gelangt. Alle Einbauten (Behälter, Betonteile) wurden als Wärmestrukturen modelliert; ihr Einfuß auf die schnell ablaufenden Vorgänge ist jedoch eher gering. Es wurden 5 Tropfengrößenklassen und 5 Tropfengenerationen definiert, so daß mit dem nicht luftgetragenen Debris 26 Tropfenfelder mit jeweils eigenen Eigenschaften rechnerisch verfolgt wurden. Die Stoffwerte für die verwendete Thermitschmelze wurden von SNL übernommen, ebenso die empfohlenen Parameterwerte für den Wärmeübergang, die Reaktionschemie und die Wasserstoffverbrennung gemäß der DCH-Eingabevorschrift von den Code-Entwicklern. Die Anfangs- und Randbedingungen sowie wichtige Ergebnisdaten der beiden Versuche sind in Tabelle 2 zusammengestellt.

Es wurden etliche Rechnungen mit CONTAIN durchgeführt, um die Wirkung der wichtigsten Modellparameter herauszufinden. Das schrittweise Annähern an das angestrebte Eingabemodell erfolgte gemäß Tabelle 1. Wie aus der Tabelle zu ersehen ist, haben wir uns auf die Cavity-Modelle konzentriert, weil sie für die Schmelzedispersion besonders wichtig sind. Wir haben ferner darauf geachtet, daß

die beiden Eingaben für SUP-1 und SUP-2 sich nicht zu sehr auseinander entwickeln, also möglichst identisch bleiben.

Hinsichtlich der Entrainment Modelle in CONTAIN, die nebenbei bemerkt alle auf Experimenten mit kalten, nichtreaktiven Ersatzschmelzen basieren, ist es wichtig zu wissen, daß bei vorgegebenem Anteil dispergierter Schmelze als Zahl oder Funktion der Anfangsbedingungen und Stoffwerte in Gestalt einer Korrelation (Levy oder Tutu-Ginsberg) vom Code erzwungen wird, daß das Integral der vom Anwender gewählten Entrainmentrate (Whalley-Hewitt, Levy und Tutu) über die Blowdown-Zeit gerade den vorgegebenen Anteil der dispergierten Schmelze ergibt. Das bedeutet, daß keine Rückkopplung zwischen der Berechnung der Entrainmentrate und den transienten Bedingungen in der Cavity besteht. In diesem Fall berechnet CONTAIN die Entrainmentrate in einer Nebenrechnung voraus. In der transienten Rechnung wird dann jedem Zeitschritt diese "geschätzte" Entrainmentrate verwendet.

Ganz unterschiedlich dazu verläuft die Rechnung dann, wenn der dispergierte Schmelzeanteil nicht vorgegeben wird. Dann besteht eine dynamische Rückkopplung zwischen Entrainment und den transienten Bedingungen in der Cavity, z. B. Gasdichte und -geschwindigkeit. Diese Option wird nur im Fall 6 (siehe Tabelle 1) angesprochen, der deswegen auch der entscheidende Schritt der ganzen Prozedur ist.

Die verwendete Tutu-Ginsberg-Korrelation für den Anteil dispergierter Schmelze, die vor allem gedacht ist für die direkte Übertragung der experimentellen Ergebnisse auf den prototypischen Fall [5], wurde an die SNL/CE Experimente einschließlich SUP-1 und SUP-2 angepaßt. Die 13 Korrelationsparameter wurden mithilfe unseres PARTU-Programms gefunden. Hierbei wurde allerdings davon abgesehen, daß zwischen den Versuchsparametern der CE- und CES-Versuche einerseits und denen der SUP-Versuche andererseits einige Unterschiede bestehen hinsichtlich der Cavity-Geometrie, des freien Kesselvolumens, der Art der Schmelzebeschickung sowie der Schmelzemenge (vgl. Tab. 2). Deshalb wundert es nicht, wenn der mittlere Fehler der Anpassung mit 0.242 relativ groß ausfällt (siehe Abbildung 4).

ERGEBNISSE

Die in den Abbildungen 5 bis 14 gezeigten CONTAIN-Ergebnisse, teilweise im Vergleich mit den experimentellen Daten, geben den Stand der Bemühungen wieder, ein einigermaßen zufriedenstellendes Eingabemodell zu erzeugen. Auf die Justierung der weit über 100 zu spezifizierenden Modellparameter können wir hier nicht eingehen. Dies würde zunächst eine Erläuterung der betreffenden Modelle voraussetzen, was im Rahmen einer ausführlichen Darstellung geschehen wird, die in Vorbereitung ist [3]. Anzufügen wäre hier noch, daß nicht ehrgeizig versucht wurde, in Fällen, wo es möglich gewesen wäre, durch eine aufwendige Feinjustierung Rechnung und Daten zur Deckung zu bringen, wenn es zugleich an anderer Stelle der Transiente unüberbrückbare Diskrepanzen gab.

Die vorgestellten Plots gehören zum Fall 6, also zum entscheidenden Schritt bei der Annäherung an das Eingabemodell. Um dorthin zu kommen, waren etliche CONTAIN-Rechnungen notwendig. Der letzte Schritt gelang nur durch drastische Reduzierung der Zeitschrittweite während der Entrainment-Phase (Max. Δt=0.5 ms). Wie eingangs erwähnt, sind die Arbeiten noch im Gange, die dargestellten Ergebnisse haben daher nur vorläufigen Charakter.

Die Abbildungen 5,6,10 und 11 zeigen die Druckverläufe in den einzelnen Bereichen für beide Versuche im Vergleich mit den experimentell gemessenen. Mit den sehr einfachen Modellen in CONTAIN von M. Pilch für den Gasdurchbruch und die zweiphasige Ausströmung unter kritischen Bedingungen ist es kaum möglich, den Druckabfall im Primärsystem und den Druckaufbau stromabwärts in zeitliche Übereinstimmung mit dem Experiment zu bringen, wie die Abbildungen bezeugen. Bei den vorliegenden geometrischen Verhältnissen im Schmelzetiegel muß es in der Rechnung zunächst zu einer einphasigen Schmelzeausströmung kommen. Im Experiment. SUP-1 liegt dagegen praktisch von Beginn an eine zweiphasige Ausströmung vor. Im Experiment SUP-2 haben wir ca. 1 s lang einphasige Ausströmung, die in der Rechnung nur durch eine massive Reduzierung des Tiegeldurchmessers zu erreichen ist, was aufgrund des Modells eine Verlängerung der einphasigen Phase zur Folge hat. Ebenso mußten ganz verschiedenen Entladungskoeffizienten (discharge coefficients) für die Gasausströmung genommen werden,

um den Druckabfall in die Nähe der Daten zu bringen (SUP-1: 0.6, SUP-2: 0.2). Der Druckaufbau in der Cavity hängt entscheidend vom Tropfenspektrum und dem Wärmeübergang von den Tropfen an das Gas und die Umgebung sowie von der Wasserstoffverbrennung in den Nachbarräumen ab. An den Druckverläufen in der Cavity und im Dom (Abbildungen 6 und 11) ist zu erkennen, daß hier die Einflußparameter noch nicht zufriedenstellend eingestellt werden konnten.

Die Abbildungen 7 und 12 zeigen die Verteilung der Schmelze in den verschiedenen Räumen, sowohl den luftgetragenen Anteil als auch den auf oder an Strukturen deponierten (trapped) Anteil. In einer zusätzlichen Legende sind die experimentellen Daten eingetragen. Beim Vergleich der Rechnung mit dem Experiment ist zu beachten, daß infolge Erodierung von Strukturmaterial durch die ca. 2500 K heiße Schmelze die Masse des im Experiment am Ende eingesammelten Debris deutlich größer als die ursprünglich eingesetzte Thermitmasse von 62 kg ist. Desweiteren ergab sich ein unverhältnismäßig großer Faktor (1.9×10^3) an der Entrainmentrate, der um Größenordnungen größer ist als die Werte, die D. Williams und R. Griffith [4] beispielsweise für die Zion und Surry Cavity-Geometrie gefunden haben. Die Schmelzeverteilung in den Räumen ist tendenziell richtig. Gemeinsam ist beiden Fällen, daß im Basement zuviel Schmelze ankommt bzw. liegenbleibt, obwohl zwecks Verringerung an den Parametern der Strömungspfade und dem Schlupf zwischen Debris und Gas von der Cavity ins Basement und hinaus in den Kessel so heftig gedreht wurde, daß die Parameter nicht mehr im Einklang mit den geometrischen Gegebenheiten und den üblichen Werten der Strömungskoeffizienten standen.

Die Gastemperaturen sind in den Abbildungen 8 und 13 dargestellt. Liegen die gemessenen und gerechneten Temperaturen im Akkumulator noch ganz gut beieinander, so sind die Abweichungen im Dom und dem Basement zu Beginn der Transiente erheblich. Am Ende der Rechnung (5 s) kommen die gerechneten und gemessenen Werte im Dom, wenngleich auch aus verschiedenen Richtungen, wieder zusammen. Die gerechneten Temperaturen im Basement liegen viel zu hoch. Dies ist sicher eine Folge des ebenfalls zu hohen Schmelzeanteils im Basement.

Die Gasgeschwindigkeiten, gezeigt in den Abbildungen 9 und 14, spiegeln die unterschiedlichen, transienten Verläufe der beiden Experimente wider. SUP-1 ist extrem transient mit maximalen Gasgeschwindigkeiten (gerechnet) von bis zu 175 m/s. SUP- 2 verläuft dagegen viel ruhiger mit Gasgeschwindigkeiten von 30 m/s. Experimentell gemessene Gasgeschwindigkeiten stehen zum Vergleich leider nicht zur Verfügung. Es lassen sich aus den Kurven 2 (break) Blowdown-Intervalle ablesen, die in etwa mit den experimentell bestimmten übereinstimmen (SUP-1: 0.4 s gegen 0.6 s, SUP-2: 2.0 gegen 2.2 s). Die steilen Gradienten zum Zeitpunkt des Gas-Blowthrough und die Oszillationen am Ende der Blowdown-Phase waren die Ursache für die oben angedeuteten Konvergenzprobleme des impliziten Lösers von CONTAIN gewesen.

SCHLUSSFOLGERUNG

Die kurz vorgestellten CONTAIN-Ergebnisse repräsentieren einen langen Weg mit 'trial and error' zu einem Eingabemodel für die SNL-Versuche SUP-1 und SUP-2, das als Basis für zukünftige Analysen von heißen Dispersionsexperimenten (DISCO-H) in engen, ringförmigen Cavity-Geometrien (EPR) dienen kann. Der SUP-2 Test läßt sich etwas besser rechnerisch simulieren als SUP-1, weil er weniger transient abläuft als der erste Test. Nicht unerwähnt bleiben soll, daß der Anwender durch die Analyse und Interpretation der Experimente mithilfe des Werkzeugs CONTAIN gelernt hat, die komplexen chemischen, thermischen und mechanischen Prozesse bei der Schmelzedispersion besser zu verstehen, was für spätere prototypische Anwendungen von Nutzen sein wird.

REFERENZEN

[1] Blanchat,T.K., M.M. Pilch et al., July 1999, "Direct Containment Heating Experiments at Low Reactor Coolant System Pressure in the Surtsey Test Facility, "NUREG/ CR-5746, SAND99-1634, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

[2] Murata, K.K., D.C. Williams et al., 1997, "Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Containment Analysis, "NUREG/CR-4XXX, SAND97- XXXX, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

[3] Jacobs, G. 2000, "Analyse der SNL DCH-Experimente SUP-1 und SUP-2 mit CONTAIN," FZKA xxxx. (in Vorbereitung), Forschungszentrum Karlsruhe.

[4] Williams, D.C., R.O. Griffith, Feb. 1996, "Assessment of Cavity Dispersal Correlations for Possible Implementation in the CONTAIN Code," SAND94-0015, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

[5] Jacobs,G. et al., Sept. 1998, "Scaling Analysis for DISCO," PSF Jahresbericht 1997, FZKA6126, Forschungszentrum Karlsruhe.

Table 1: Entwicklung des Eingabemodells für SUP

Fall bzw. Schritt	Eingabe-Charakterisierung
1a	Vorgabe des Tropfenspektrums. Vorgabe des Anteils der dispergierten Schmelze aus Exp.. Vorgabe des Entrainment-Intervalls aus Exp.. Whalley-Hewitt Modell für Entrainmentrate (Modifikation von Williams und Griffith).
1b	Wie Fall 1a, nur Tutu Modell anstelle von Whalley-Hewitt Modell.
2	Wie Fall 1a, nur Aufruf des Weber Modells mit Default-Werten anstelle der Vorgabe des Tropfenspektrums.
3	Wie Fall 2, nur ohne Vorgabe des Entrainment-Intervalls.
4a	Wie Fall 3, nur Levy Modell für Entrainmentrate anstelle von Tutu Modell
4b	Wie Fall 4a, nur zusätzlich Levy Modell für Entrainmentanteil anstelle der Vorgabe Anteils der dispergierten Schmelze aus Exp..
5	Wie Fall 4b, nur Tutu-Ginsberg Modell für Anteil der dispergierten Schmelze und Tutu Modell für Entrainmentrate anstelle von Levy Modellen.
6	Wie Fall 5, nur ohne Vorgabe des Anteils der dispergierten Schmelze, also auch ohne Tutu-Ginsberg Modell.

Table 2: SNL/SUP-1, SUP-2 und CE-3 Daten

PARAMETER		SUP-1	SUP-2	CE-3
Pressure	MPa	1.10	1.50	8.0
Hole size	cm	10	4	4
Melt mass[a]	kg	62	62	33
Driving gas		steam	steam	steam
Containment volume	m3	92	92	50
Cavity free volume	m3	0.2459	0.2459	0.2169
RCS volume	m3	0.3	0.3	0.2544
Thermite reaction		in crucible	in crucible	on cavity floor
RESULTS				
Cavity dispersal fraction	%	78	21	64
Blowdown time	s	0.6	2.2	1.7
Entrainment interval	s	0.5	2.3	0.1
Max. pressure in containment	MPa	0.6	0.41	0.49
Particle size SMMD	mm	(3.4)[b]	1.54	0.27

a. Al2O3/Fe thermite melt
b. Amalgamation of smaller particles

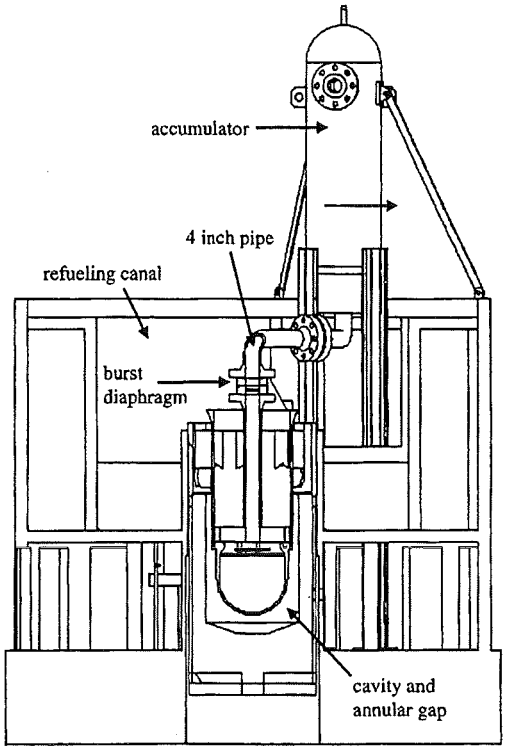


Abb. 1: Surtsey Einbauten für SUP Experiment

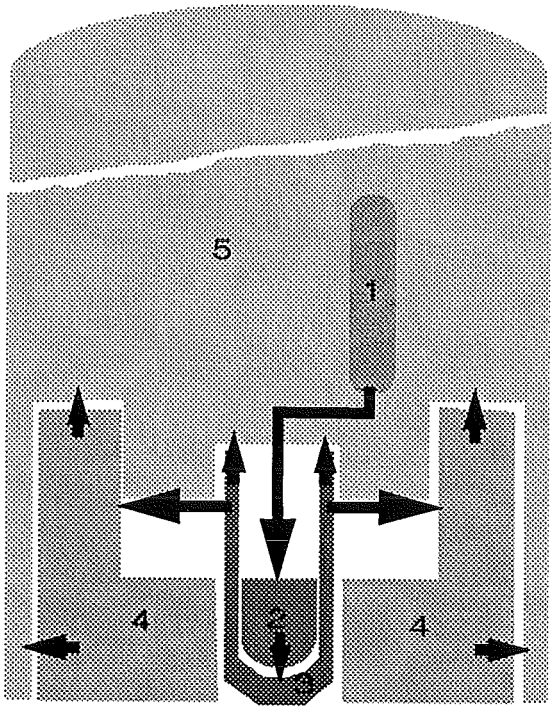


Abb. 2: SNL/SUP1/2-Nodalisierung für CONTAIN

DCH Process	Without Using the RPV and Cavity Model		With the RPV and Cavity Models
	Representation in CONTAIN	Brief Model Description or Basis for User Input	
Corium ejection from RPV	User Input	User-specified source tables introduce debris into trapped field*	Gluck Correlation
Gas blowdown from RPV	Internally calculated	RPV modeled as a cell connected to cavity with user-specified hole size A(t)	A(t) calculated using Pilch-Gluck Correlation [Pil92b]
Cavity dispersal fraction	User input	Integral of cavity entrainment rate	Various correlations
Cavity entrainment rate	User input	Externally calculated to set the mass per unit time of the source	Various correlations
Particle size	User input	Each field is given a mean particle diameter	Weber breakup model
Particle transport	Internally calculated	Two-phase flow with a parametric slip treatment	-
Trapping on structures	Internally calculated	Time of flight based on flow rate & Kutateladze criteria for first two impacts; gravitational fall time thereafter	-
Chemical reactions	Internally calculated	Gas-side & drop-side transport limitations; Zr, Fe, Cr, Al metals; oxygen and steam oxidants; Fe/H_2O equilibrium	-
Hydrogen burning	Internally calculated	HECTR 1.8 correlations, continuous burning, and H_2 bulk spontaneous recombination at high T and debris concentrations	-
Convective heat transfer	Internally calculated	Forced convection: N_{Nu} correlation for spheres	-
Radiation heat transfer	Internally calculated	Debris/gas and debris/wall gray body law with user-specified emissivity	-

* Standard procedures of Reference Wil97; other procedures are possible

Abb. 3: Überblick über die in CONTAIN vorhandenen Modelle zur Dispersion

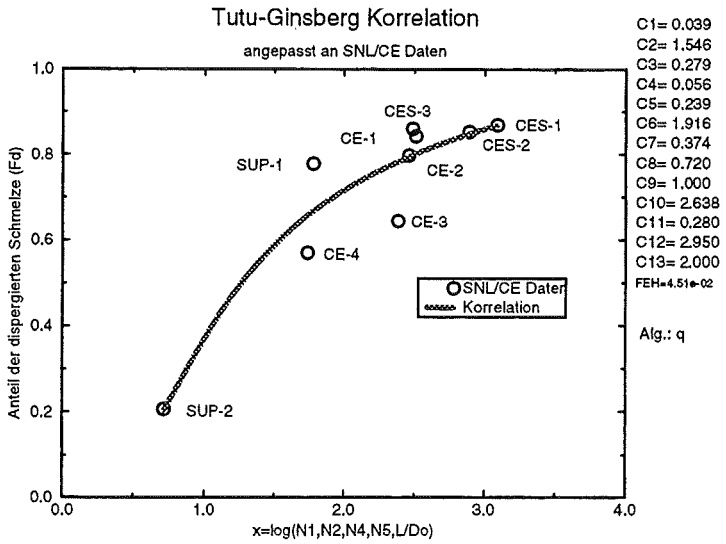


Abb. 4: An SNL/CE Daten angepaßte Tutu-Ginsberg Korrelation

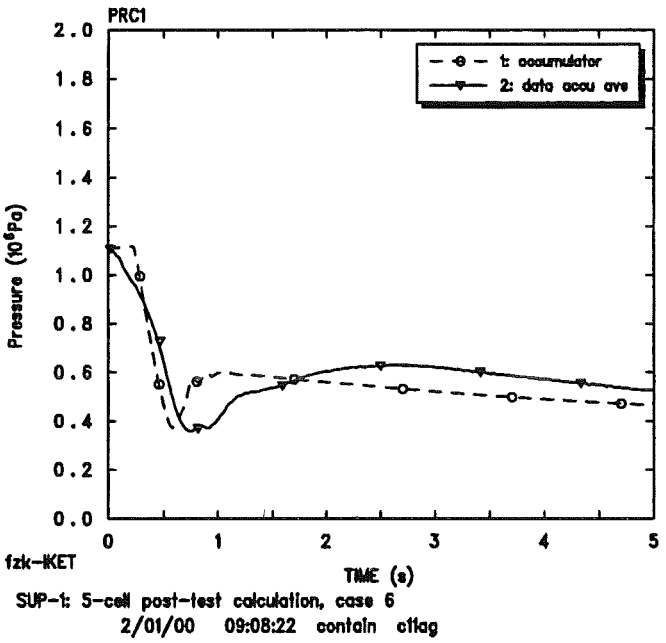


Abb. 5: SNL/SUP-1, Druckabfall im Akkumulator (Blowdown)

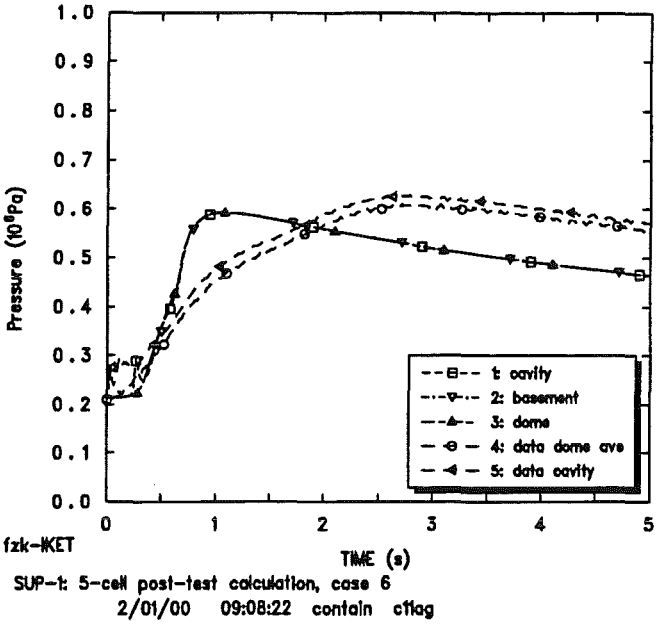


Abb. 6: SNL/SUP-1, Druckaufbau in der Kavität und im Kessel

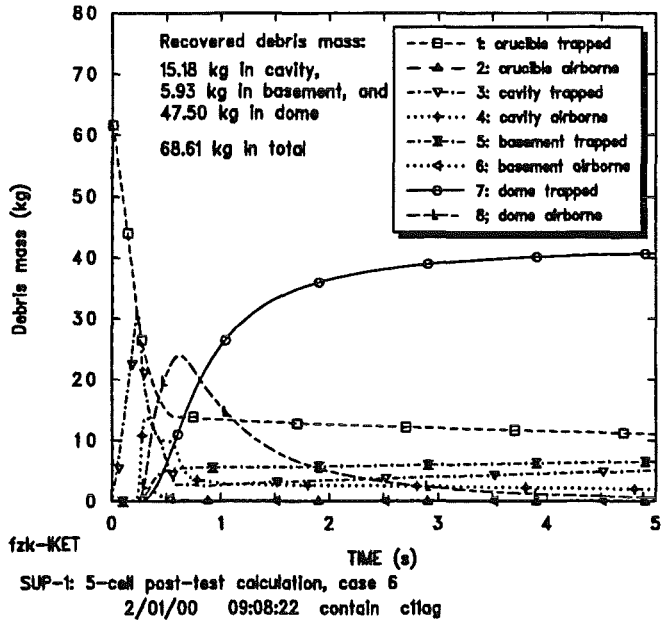


Abb. 7: SNL/SUP-1, Verteilung der dispergierten Schmelze

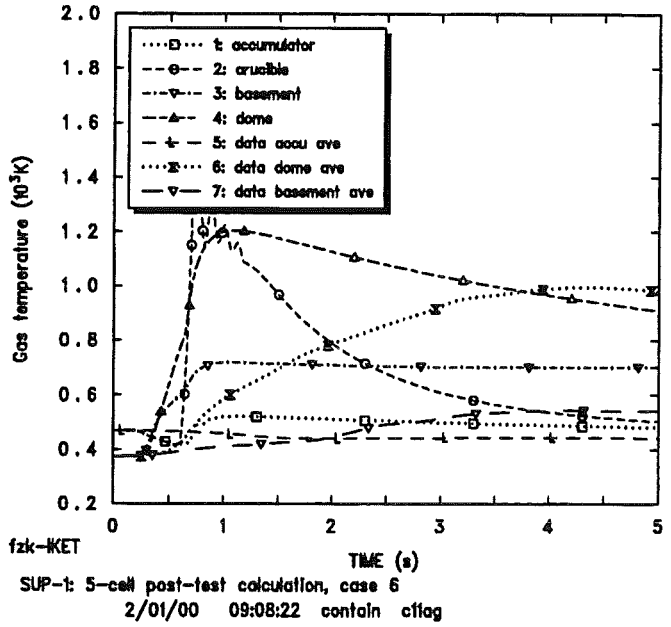


Abb. 8: SNL/SUP-1, Gastemperaturen

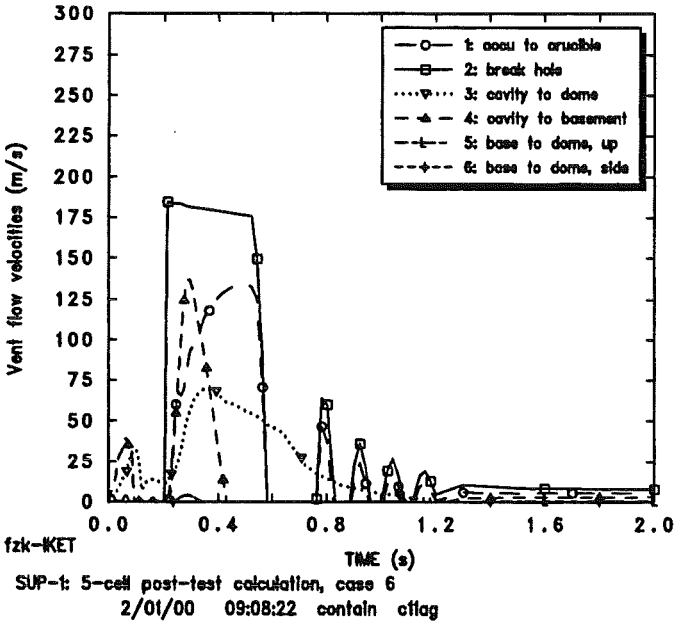


Abb. 9: SNL/SUP-1, Gasgeschwindigkeiten

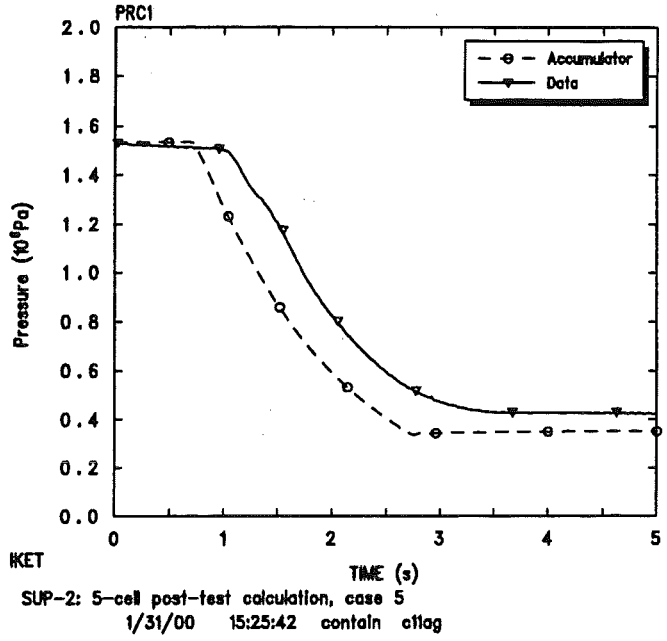


Abb. 10: SNL/SUP-2, Druckabfall im Akkumulator (Blowdown)

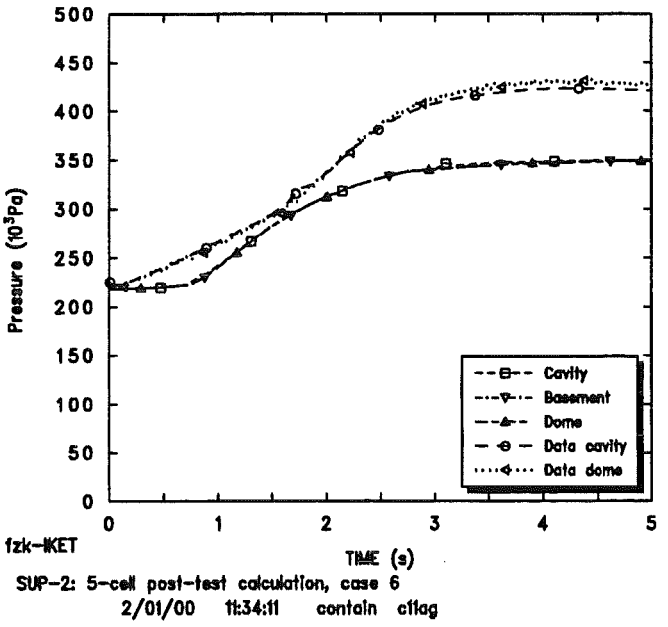


Abb. 11: SNL/SUP-2, Druckaufbau in der Kavität und im Kessel

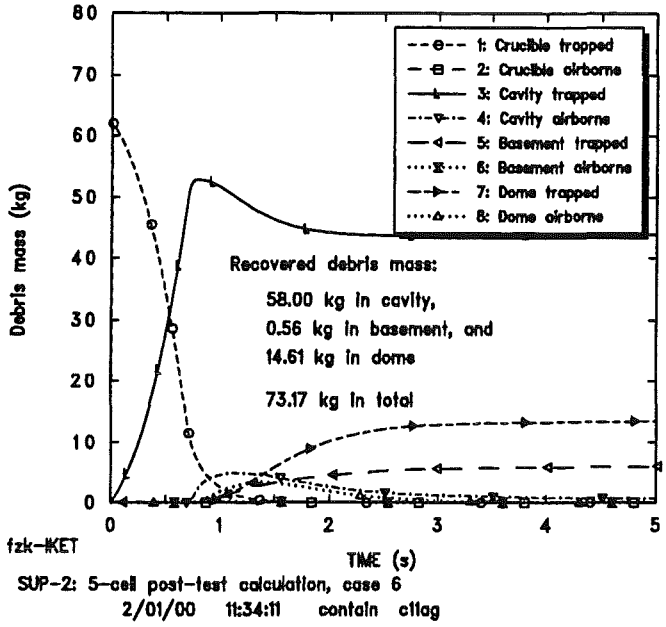


Abb. 12: SNL/SUP-2, Verteilung der dispergierten Schmelze

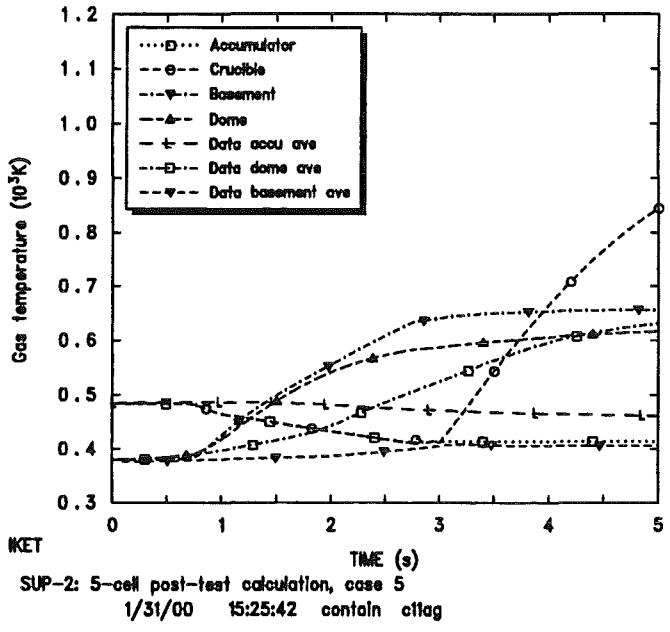


Abb. 13: SNL/SUP-2, Gastemperaturen

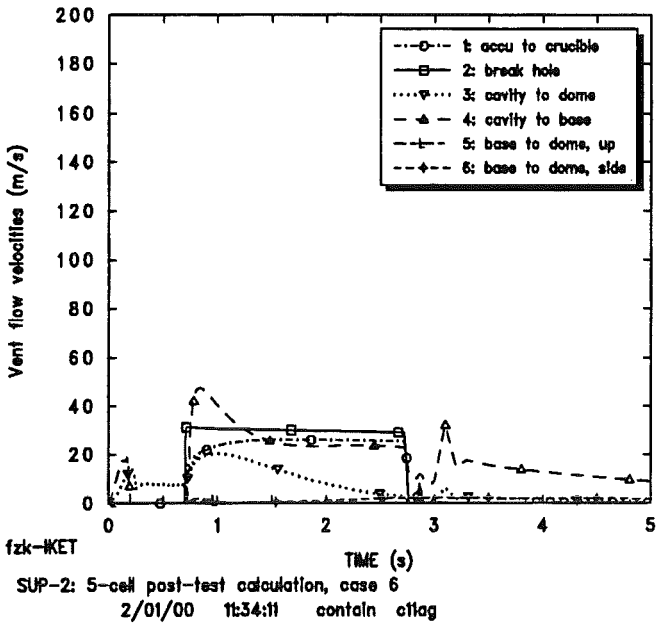


Abb. 14: SNL/SUP-2, Gasgeschwindigkeiten

32.21.04 Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung

I. COMET-Konzept

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

Zusammenfassung

Zur Kühlung der Schmelze nach dem modifizierten CometPC-Konzept wird das Kühlwasser aus einer porösen Betonschicht von unten in die Schmelze eingeführt. In zwei Großexperimenten mit nachbeheizten Schmelzen hat sich die poröse Betonschicht als sehr stabil erwiesen, die das Vordringen der Schmelze sicher stoppt, ohne selbst angegriffen zu werden. Die Kühlwassermenge, die in die Schmelze eintritt, ist geringer als zunächst erwartet, da Reste von Opferbeton die Porösschicht teilweise abdecken. Durch Erhöhung der Porosität und Verwendung einer keramischen Zwischenschicht wurde eine Kühlrate erzielt, die dem 2- bis 3-fachen der Nachwärmeleistung entspricht. Die Erstarrung der Schmelze erfolgt damit langsamer als nach dem ursprünglich entwickelten COMET-Konzept. Dies ist ein Vorteil in Hinblick auf verminderte Dampfeinströmung und Druckanstieg im Sicherheitsbehälter. Weitere Experimente sollen dieses Kühlkonzept optimieren.

In einer weiteren transienten Versuchsserie konnte gezeigt werden, dass auch für dieses modifizierte Konzept sekundäre, aus dem RDB nachfließende Schmelzen beherrscht werden. In dem zugrunde gelegten Szenario fließt Restschmelze aus dem RDB als zweite Schmelze über die bereits ausgebreitete und gekühlte Schmelze auf. Die beiden durchgeführten Experimente zeigen, dass die Schmelze sicher gekühlt wird. Die zweite Schmelze dringt nicht in erstarrte Bereiche der ersten Schmelze ein und setzt damit keine Abströmkanäle des Kühlwassers zu. Auch die zweite Schmelze erstarrt porös mit großen Hohlräumen, weshalb sie gut kühlbar ist und der Wasserzutritt nicht behindert wird.

1 Einführung

Beim COMET-Konzept erfolgt die Kühlung der Kernschmelze durch passiven Zutritt des Kühlwassers von unten in die Schmelze, nachdem diese zunächst eine Opferschicht erodiert und damit die Wege für den Wasserzutritt 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.

Im bisher untersuchten Kühlkonzept erfolgt der Zutritt des Kühlwassers über diskrete Kühlkanäle, die als Plastikröhrchen in einem quadratischen Raster mit 80 mm Kantenlänge angeordnet sind. Die experimentellen Untersuchungen hierzu wurden 1998 erfolgreich abgeschlossen und in einem Bericht im Hinblick auf den Einsatz des Kühlkonzepts in einem großen Reaktor bewertet [1]. Die wesentlichen Ergebnisse wurden auch international dargestellt [3, 4].

Einem Vorschlag von Siemens folgend wird nun eine Variante dieses Kühlkonzepts entwickelt, bezeichnet mit CometPC (= Comet Porous Concrete), bei dem das Feld der vorbereiteten Kühlkanäle durch eine wasserführende, poröse Schicht ersetzt wird. Transiente Experimente, die im Jahre 1998 durchgeführt und berichtet wurden [2], haben zur Entwicklung einer porösen Schicht aus Beton geführt, durch die das Wasser in die Schmelze eintreten kann. Durch Wahl der geeigneten Sieblinie des Betonzuschlags kann die Porosität in weiten Grenzen gewählt werden. Entsprechend Abbildung 1 wird die Porösschicht aus 2 Lagen aufgebaut: Durch die grobporöse Schicht mit entsprechend niedrigem Strömungswiderstand erfolgt die gleichmäßige Verteilung des Wassers unter der gesamten Fläche. Die feinporöse Schicht besitzt einen vergleichsweise hohen Strömungswiderstand, der so gewählt wird, daß er den Zutritt des Wassers in die Schmelze in geeigneter Weise begrenzt. Damit kann also die einströmende Kühlwassermenge in gewissen Grenzen gewählt werden. Als günstig im Hinblick auf das Erreichen gleicher Kühlungsbedingungen wie beim ursprünglichen Kühlkonzept wurde zunächst eine Auslegung der Durchlässig-

Durchlässigkeit der Porösschicht entsprechend 1 – 2 l Wasser / m² s angesehen, wobei der treibende Überdruck des Wassers 0,1 bar beträgt [5]. Mit dieser Auslegung erfolgten im Jahre 1999 zwei Großexperimente mit simulierten, nachbeheizten Kernschmelzen mit Anfangstemperaturen von 1900°C.

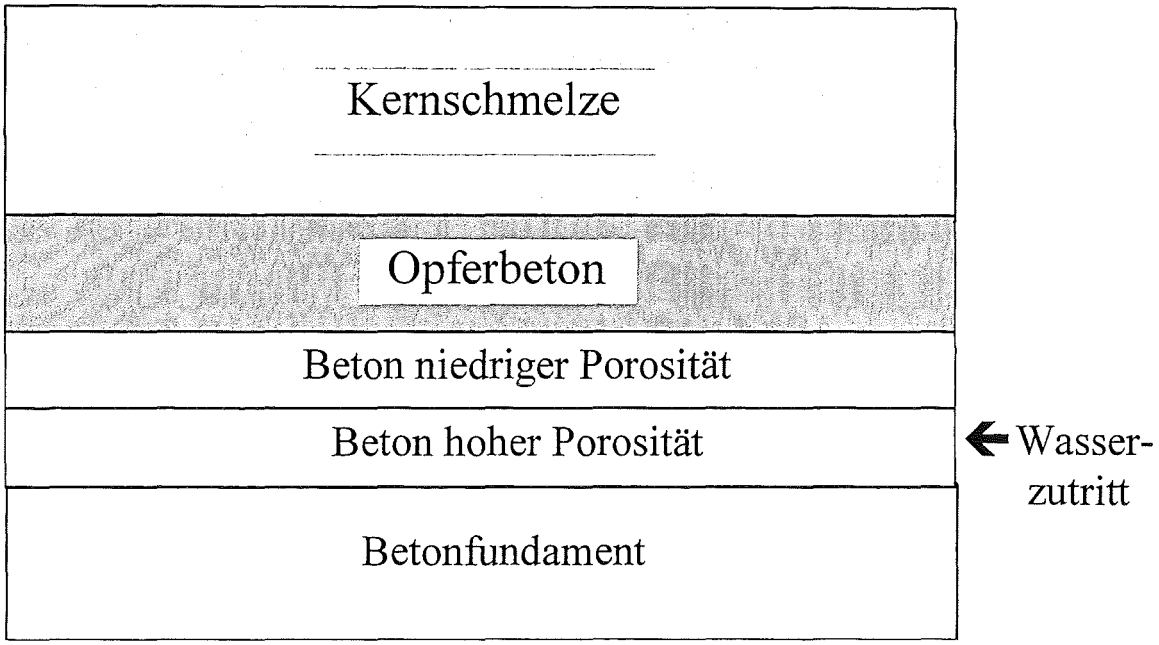


Abb. 1: Prinzip des CometPC - Kühlkonzepts zum Kühlwasserzutritt durch eine poröse Betonschicht

2 CometPC-Experimente mit Nachwärmesimulation

Die Experimente zur Schmelzekühlung nach dem CometPC-Konzept bei gleichzeitiger Simulation der Nachwärme verwenden die gleiche Versuchseinrichtung wie frühere COMET-H Experimente. Der Kühleinsatz wurde entsprechend den aktuellen Anforderungen angefertigt und über der Induktionsspule eingebaut (Abbildung 2). Er ist in Abbildung 3 mit den Instrumentierungsebenen A - E vergrößert dargestellt.

Im ersten Experiment dieser Art, **CometPC-H 1**, ist der Kühleinsatz in folgender Weise aufgebaut. Auf einer ebenen Betonschale aus Normalbeton ist eine grobporöse Betonschicht von 5 cm Höhe aufgebracht, um die ausreichende

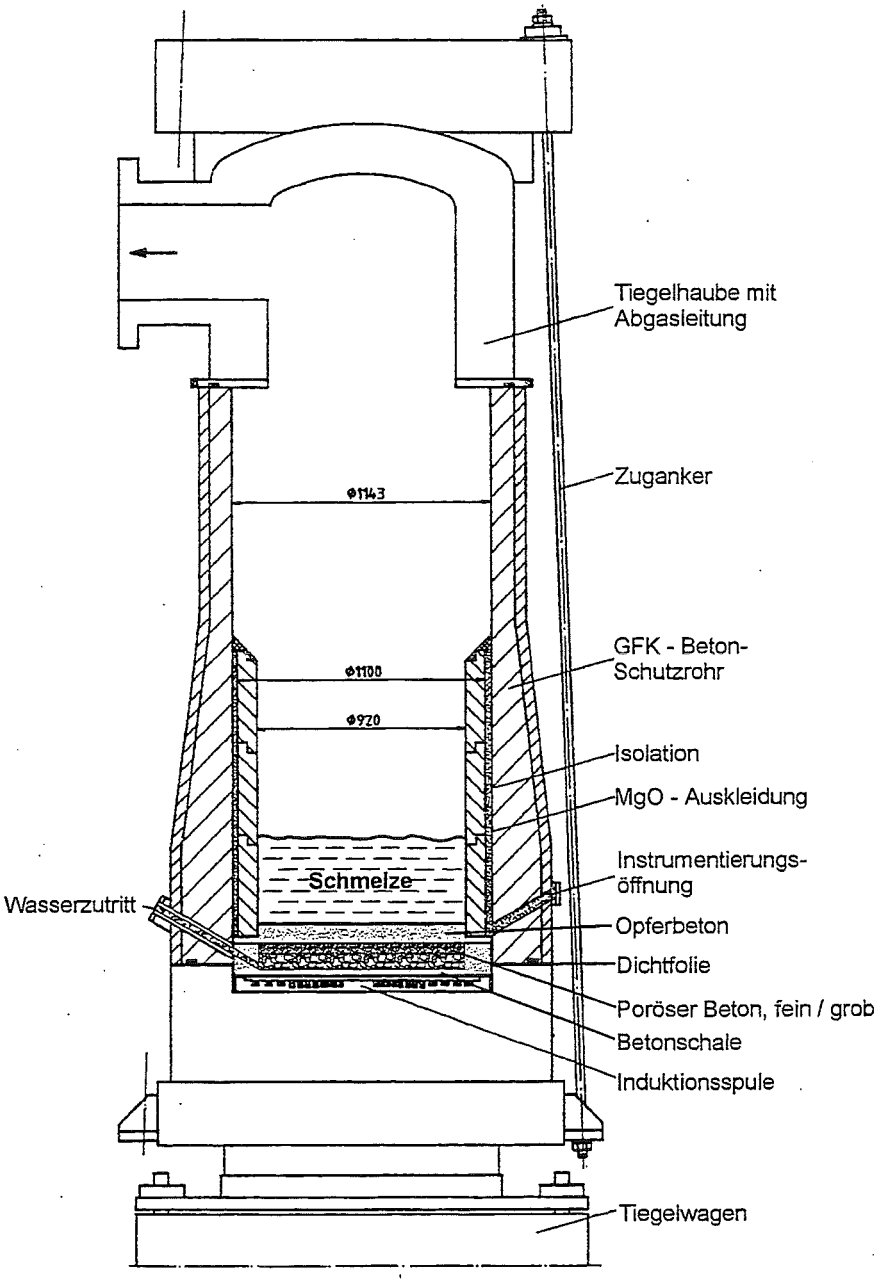


Abb 2: Aufbau des Versuchstiegels mit Kühleinsatz und induktiver Heizung der Schmelze

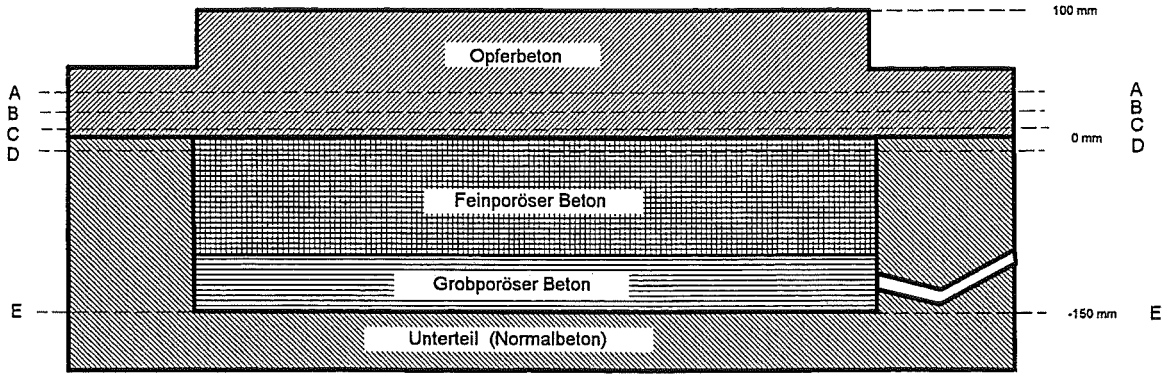


Abb. 3: Schematischer Aufbau des CometPC Kühleinsatzes

eine feinporöse Betonschicht von 10 cm Höhe, die mit ihrer geringen Porosität den Einstrom des Wassers in die Schmelze begrenzt. Darüber liegt die Opferschicht aus Borosilkatbeton von 10 cm Höhe, auf die die Schmelze aufgegossen wird. Der freie Durchmesser der Kühlfläche, der von der Schmelze bedeckt wird, ist 920 mm. Radial wird die Schmelze durch keramische Ringe aus Magnesiumoxid gehalten, die auf den Rand des Kühleinsatzes aufgesetzt werden. Bei völlig freier Oberfläche der Porösschicht, das heißt unter der Voraussetzung, daß die Betonopferschicht vollständig abgeschmolzen wird und die Schmelze selbst keinen wesentlichen Druckverlust für das einströmende Kühlwasser darstellt, würde sich auf Grund der Durchlässigkeit der feinporösen Schicht ein maximaler Kühlwasserstrom von 1,3 l/s ergeben. Dabei beträgt der Überdruck des Kühlwassers gegenüber dem statischen Druck der Schmelze 0,1 bar, ein Wert, wie er im EPR durch die Lage des IRWST typisch ist. Die Druckfestigkeit des Porösbetons wurde zu 15 N/mm^2 gemessen und ist damit etwa halb so hoch wie von Normalbeton. Diese Festigkeit ist ausreichend, um auch größere mechanische Lasten, zum Beispiel aus eventuellen stärkeren Wechselwirkungen von Schmelze und Kühlwasser, abzutragen.

Zur Herstellung der Betonopferschicht wurde diese direkt auf die poröse Betonschicht aufgegossen. Daher besteht eine relativ feste mechanische Verbindung von beiden Schichten, während in früheren transienten Experimenten die Schichten getrennt gefertigt und nur gegeneinander gedrückt wurden.

Die simulierte Kernschmelze mit einer Gesamtmasse von 600 kg wird aus einer Thermitreaktion mit einer Anfangstemperatur von 1900°C erzeugt und auf die Opferschicht aufgegossen. Sie hat eine anfängliche Höhe (ohne Gasanteil) von 24 cm. Der Metallanteil von 7 cm Höhe beträgt 50 Gew.-% und besteht aus Eisen mit 15 % Nickel. Die Oxidschmelze von 17 cm Höhe enthält eine Mischung von Al_2O_3 mit 44 Gew.-% CaO.

Die induktive Beheizung der Schmelze erfolgt kontinuierlich mit einer in der Schmelze eingekoppelten Leistung von etwa 300 kW. Dies entspricht dem anfänglichen hohen Nachwärmeniveau von 450 kW je Quadratmeter Kühlfläche, das im Reaktor zu erwarten ist, und stellt damit bezüglich der Wärmefreisetzung die obere Belastung dar. Da der geometrische Aufbau des Experiments einem Ausschnitt aus der größe-

ren Kühleinrichtung im Reaktor entspricht, aber ansonsten die gleichen Materialien und Geometrie wie im Realfall aufweist, können die experimentellen Ergebnisse weitgehend direkt auf den Reaktorfall übertragen werden.

Das Experiment beginnt mit dem Einguß der extern erzeugten Schmelze mit einer Temperatur von 1910°C. Die induktive Beheizung der Schmelze erfolgt mit der geplanten Nettoleistung von etwa 300 kW über den Zeitraum bis 5803 s (1 h 37 min), zu dem die Heizung abgeschaltet wird. Den Leistungsverlauf zeigt Abbildung 4.

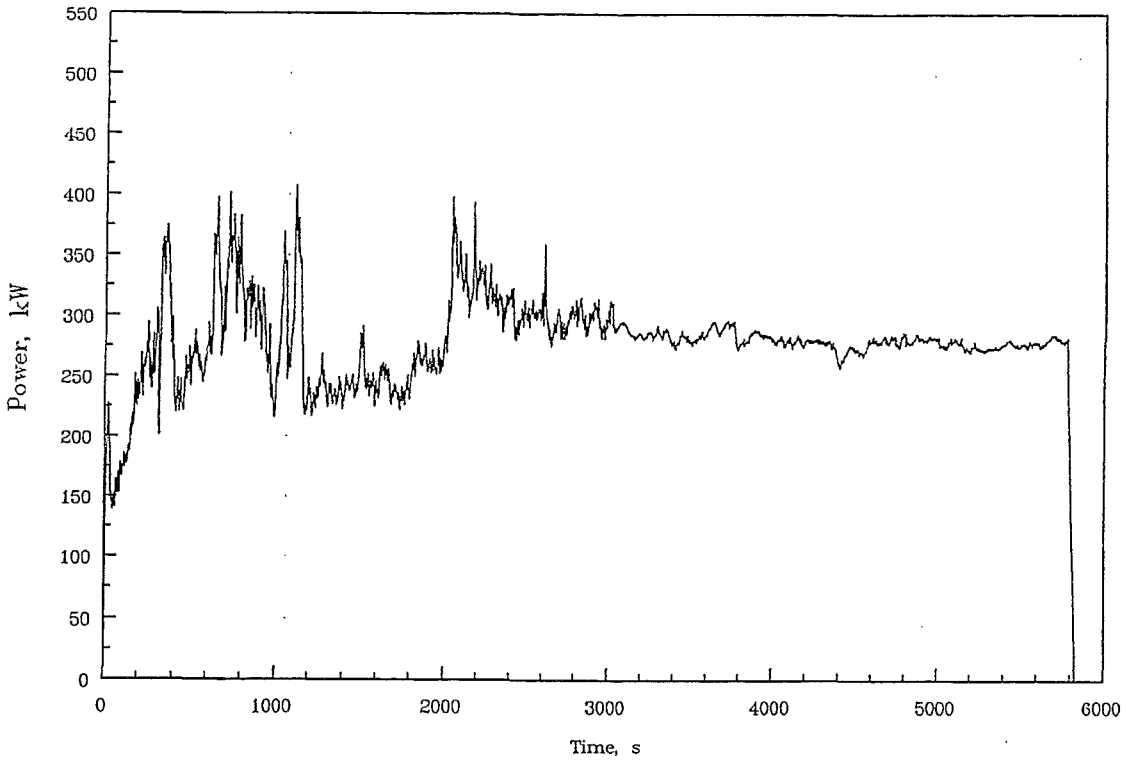


Abb. 4: Simulierte Nachwärme im Kühlungsexperiment CometPC-H 1

Die Schmelze erodiert zunächst unter trockenen Bedingungen, das heißt vor Zutritt des Kühlwassers, die Schicht des Opferbetons. Während dieser Phase entstehen wie gewohnt Wasserstoff aus der Betonzersetzung sowie Aerosole aus flüchtigen Bestandteilen des Betons, die in der Abgasleitung analysiert werden. In diesem Experiment ist allerdings die Erosion der Opferschicht über die Fläche nicht gleichmäßig, sondern einzelne Bereiche der Schmelze dringen deutlich schneller nach unten vor. Dieser Effekt wird durch die Art der Beheizung dadurch verstärkt wird, daß die Teile der Schmelze, die sich dichter an der unten liegenden Induktionsspule befinden, auch eine höhere Beheizung erhalten. Daher erreichen Teile der Schmelze be-

reits nach 840 s die poröse Betonschicht, und damit beginnt das passive Einströmen von Wasser in die zu diesem Zeitpunkt noch deutlich überhitzte, dünnflüssige Schmelze. Der Wassereinstrom ist in Abbildung 5 dargestellt. Die Einströmrate ist jedoch mit 0,08 bis 0,1 l/s im mehr als den Faktor 10 niedriger als erwartet. Der geringe Wasserzutritt vor 840 s beruht auf einer schwachen Leckage, die durch Spannungsrisse in der Betonschale zurückzuführen sind, die aber den Versuchsablauf nicht beeinflußt haben.

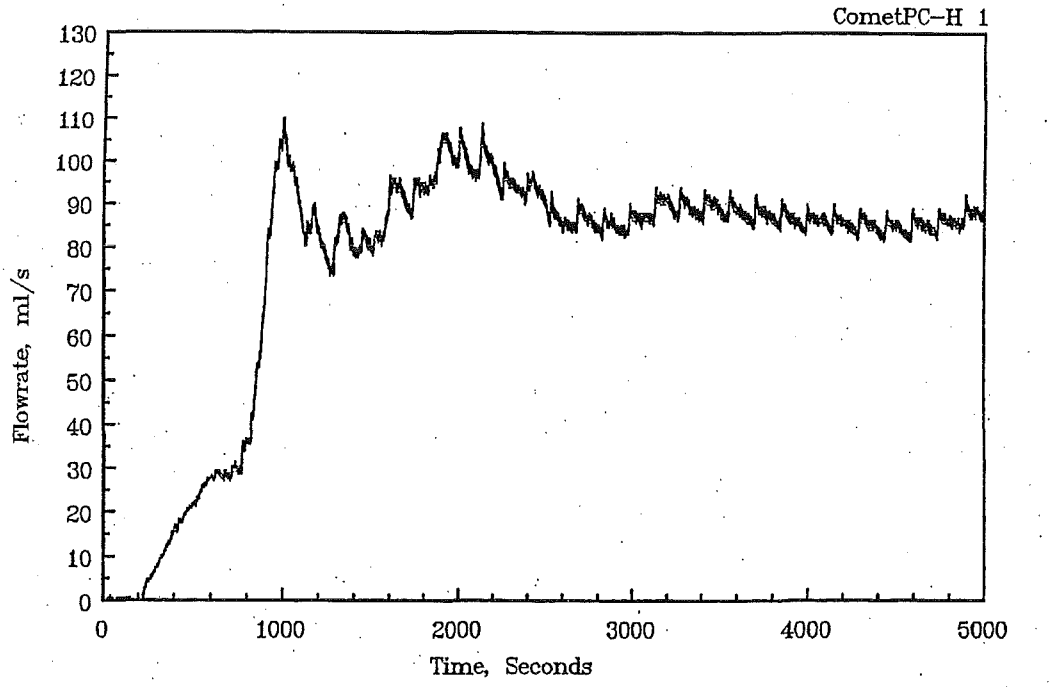


Abb. 5: Einströmrate des Kühlwassers in CometPC-H 1

Wegen des geringen Kühlwasserstroms kühlt die Schmelze nur langsam ab, und Durchströmung und Bewegung der Schmelze durch den zusätzlichen Gasstrom steigen nur wenig an. Daher kann auch die Erosion des Opferbetons durch die Schmelze dort weitergehen, wo die Schmelze die poröse Betonschicht noch nicht erreicht hat. Jedoch führt die weitere Erosion nicht zu einer zusätzlichen Erhöhung des Kühlwasserstroms.

Der Ort, wo das Wasser in die Schmelze übertritt, liegt, nach den Zentren der Gasfreisetzung zu schließen, überwiegend im S und NNO der Kühlfläche, wo sich während des weiteren Versuchs Vulkane ausbilden. Auch die Thermoelementmessungen in der Betonopferschicht bestätigen, daß in diesen Bereichen die Opferschicht zuerst abgetragen war. Durch die (schwache) Kühlung nimmt die Temperatur der

Schmelze auch weiterhin nur langsam ab, so daß sich die Kühlung erst vergleichsweise spät bemerkbar macht: Nach 1080 s ist die Zähigkeit des Oxids deutlich erhöht; nach 1185 s bildet sich auf der Schmelze eine dünne, schwimmende und rissige Kruste aus, in der stets Öffnungen für die Gasabströmung erhalten bleiben. Die Menge des einströmenden Kühlwassers erhöht sich jedoch nicht, obwohl man davon ausgehen kann, daß die Betonopferschicht, dort wo sie noch in höherer Schicht vorhanden ist, weiter erodiert wird.

Abbildung 6 zeigt, daß die simulierter Nachwärmeleistung in der Schmelze und die durch Verdampfung des Kühlwassers entzogene Leistung nahezu gleich sind. Berücksichtigt man die Wärme, die die Schmelze an den seitlichen Tiegel abgibt, sowie die thermische Strahlung von der Schmelzenoberfläche, so folgt, daß die Schmelze langsam abkühlt.

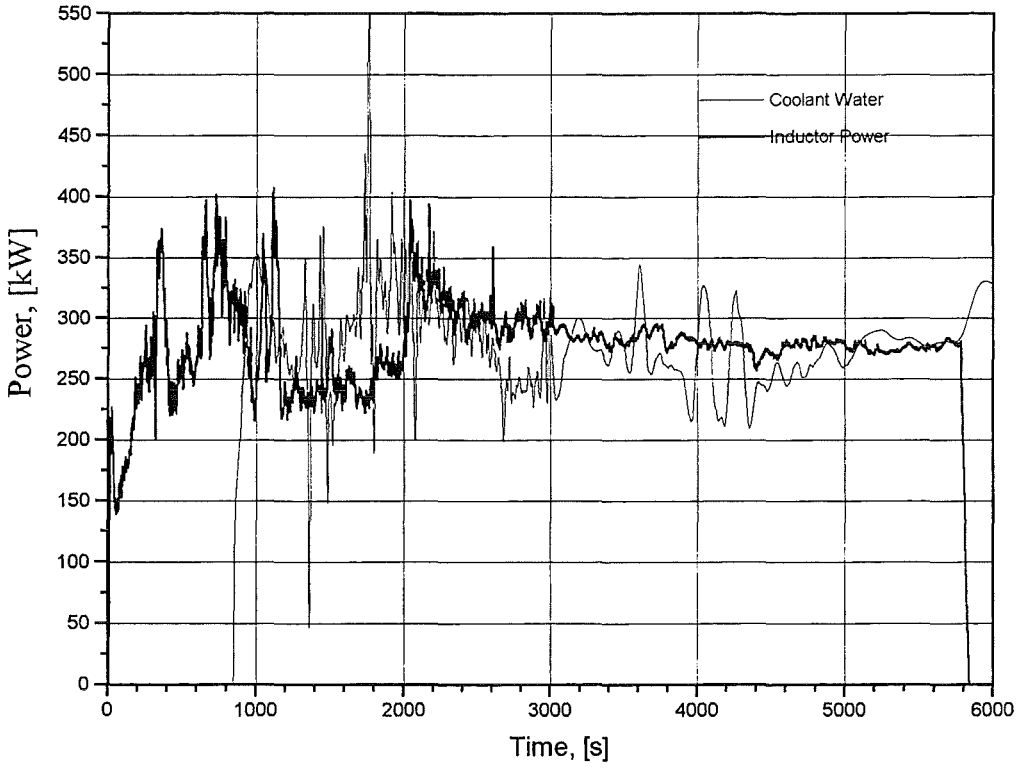


Abb. 6: Vergleich von simulierter Nachwärmeleistung und durch verdampfendes Kühlwasser abgeführter Leistung in CometPC-H 1

Das Vordringen der Schmelze ist durch die poröse Betonschicht gestoppt. Diese poröse Betonschicht bleibt nach den Messungen der Thermolemente über den ge-

samten Versuchszeitraum stabil und durch das Kühlwasser gut gekühlt. Die Schmelze erstarrt jedoch nur langsam und durch fortschreitende Krustenbildung: Von unten her durch die Wasserkühlung, von oben her auch durch Strahlungsverluste in den oberen Versuchstiegel. Die Schmelze bleibt aber im zentralen Bereich zunächst noch flüssig.

Auch bei weiterer Ausbildung und Stabilisierung von Oberflächenkrusten blieben stets einige Öffnungen in der Kruste erhalten, durch die der entstehende Dampf abströmt. Ab 1900 s wird durch diese Öffnungen über längere Zeiträume auch Schmelze versprüht, meist in Form von Tropfen mit Durchmessern von wenigen Millimetern. Zum Teil tritt auch die Schmelze, transportiert durch die Dampfströmung, über den Rand der Öffnung in der Kruste aus, so daß sich Vulkankegel aufbauen. Dies gilt für Bereiche im S und NNO der Kühlfläche, wo sich ein bzw. zwei Vulkankegel bilden. Die Aktivitäten der Vulkane ändern sich während des Experiments in der Weise, daß sich die Aktivitäten zeitweise von einem auf einen anderen Vulkan verlagern. Die Ursache für diese Verlagerung wie auch für die teilweise schwankende Intensität des Austrags sind jedoch nicht erkennbar. In dieser Phase wird weiterhin Wasserstoff im Abgas detektiert, was auf noch flüssige Metallschmelze hinweist, die mit dem Kühlwasser bzw. dem Dampf reagiert.

Ab etwa 4000 s wird eine kleine Wasserpfütze auf der Kruste der Schmelze beobachtet, die durch von unten eindringendes, nicht verdampftes Flutwasser gebildet wird. Die Wasserbedeckung steigt jedoch nur sehr langsam an und beträgt zum Zeitpunkt der Induktorabschaltung (Ende der Nachwärmesimulation) etwa 1/5 der Krustenoberfläche. Dies heißt auch, daß die Wasserzufuhr zum späten Zeitpunkt etwas höher ist als zur Abfuhr der Nachwärme verbraucht wird.

Ab etwa 5400 s ist das Versprühen von Schmelze beendet. Der Kühlwasserzutritt beträgt nahezu unverändert 0,095 l/s. Ein geringer H_2-Anteil im Abgas deutet weiterhin auf noch vorhandenes, flüssiges Eisen hin. Dieser Zustand bleibt praktisch unverändert, bis bei 5803 s die Nachwärmesimulation automatisch unterbrochen wird. Grund hierfür ist ein auf einen kleinen Bereich begrenztes, seitliche Aufschmelzen von Opferbeton unterhalb des Schutzrohres aus MgO, aber oberhalb der porösen, wasserführenden Schicht, das ein Sicherheitssignal auslöst. In diesem Be-

reich war gegen langzeitigen Angriff von Schmelze keine besondere Vorkehrung getroffen worden, was jedoch leicht möglich ist, indem zum Beispiel die Schicht des porösen Betons seitlich hochgezogen wird.

Die Kühlung durch Wasserzutritt von unten erfolgt weiterhin, wird aber dann, zur Verhinderung eventuellen unkontrollierten Schmelzeangriffs, durch Besprühen von oben mit Hilfe einer von der Betriebsmannschaft aktivierten Wasserkühlung unterstützt. Die Schmelze erstarrt damit problemlos und ohne die Versuchsanlage zu gefährden. Die Wassereinspeisung von unten steigt, vermutlich als Folge der Volumenkontraktion der Schmelze während der weiteren Abkühlung, geringfügig auf 0,12 bis 0,14 l/s an.

Charakteristisch und unerwartet für dieses Experiment im Vergleich zu anderen Experimenten dieser Art ist der geringe Kühlwasserstrom, der sich trotz weiterer Erosion der Opferschicht nicht vergrößert. Dies wird sicher zum Teil durch die hier aufgetretene, lokal sehr ungleichmäßige Erosion der Opferschicht verursacht. Dies zeigt Abbildung 7, die das Vordringen der Schmelze in der Opferschicht an charakteristischen Stellen der Kühlfläche über der Zeit darstellt. Anfangs dringt, wie zu erwarten, die Schmelze wegen der hohen Anfangstemperatur sehr schnell vor, mit einer Erosionsrate von etwa 0,15 mm/s. Mit Abnahme der Übertemperatur der Schmelze sollte auch eine Abnahme der schnellen Erosion erfolgen. Dieses zeigen jedoch nur einige der gemessenen Erosionskurven in Abb. 7 nach etwa 40 mm Erosion der Opferschicht.

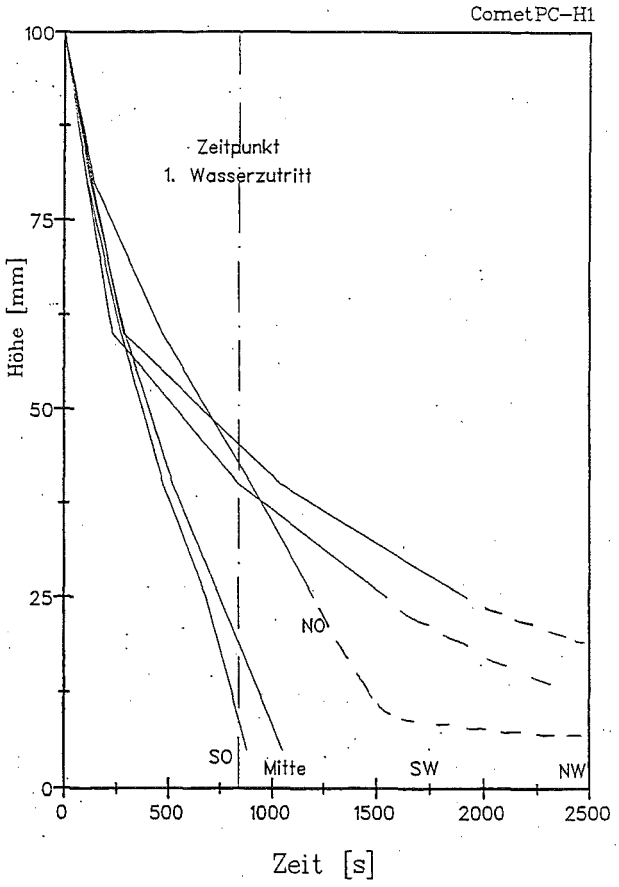


Abb. 7: Erosion der Opferschicht an verschieden Stellen der Kühlfläche

An anderen Stellen, so in der Mitte und im Südost-Sektor der Kühlfläche, bleibt jedoch die hohe Erosionsgeschwindigkeit erhalten und führt damit schließlich zu nur lokalem Wasserzutritt, während weite Bereiche der Kühlfläche noch eine mehrere cm hohe Überdeckung mit Opferbeton besitzen. Auch die Nachuntersuchung des Kühlsystems bestätigt, daß wesentliche Bereiche der Kühlfläche noch mit einer im allgemeinen 1-2 cm hohen Restschicht des Opferbetons bedeckt sind und die poröse wasserführende Schicht nur zum geringen Teil freigeschmolzen wurde. Trotz seiner geringen Menge reicht jedoch der Wasserzutritt aus, um die Schmelze in dieser Situation zu stabilisieren, da der abwärtsgerichtete Wärmestrom aus der Schmelze durch das Kühlwasser sicher abgeführt wurde. Wäre dies nicht der Fall, so würde sich durch weiteres Aufschmelzen der Opferschicht der Kühlwasserstrom vergrößern. Damit erklärt sich, daß sich in diesem Experiment, wie dies Abb. 6 zeigt, Nachwärmeleistung und Kühlleistung praktisch kompensieren.

Für die sichere Funktion der Kühleinrichtung ist die Stabilität der wasserführenden, insgesamt 15 cm hohen, porösen Betonschicht wichtig. Die Nachuntersuchungen zeigen, daß diese Schicht in keiner Weise von der heißen Schmelze angegriffen wurde, trotz der langen Beheizung der Schmelze über 1,6 Stunden und ihrer nur langsamen Abkühlung. Der Grund hierfür liegt in dem den Porösbeton füllenden Wasser, das den Beton wirksam kühlt und damit thermisch und mechanisch widerstandsfähig macht. Dies zeigen die Temperaturmessungen in der Porösschicht, die beispielhaft für den südwestlichen Sektor der Kühlfläche in Abbildung 8 dargestellt sind, gemessen in den Ebenen - 5 mm, - 20 mm und - 50 mm unter der Trennfläche Opferbeton zu Porösbeton.

Die Maximaltemperaturen in der Porösschicht betragen in der Phase des ersten Kontakts der heißen Schmelze nach 800 s kurzzeitig bis zu 150 °C in der obersten Zone bei - 5 mm (lokales Sieden) und 35 °C bei - 50 mm. Die Temperaturen fallen auch in der obersten Zone langzeitig unter die Siedetemperatur. Diese Temperaturmessungen zeigen die sehr hohe Rückhaltefähigkeit der Porösschicht: Selbst bei einem unterstellten – hier nicht aufgetretenen – lokalem Angriff der oberen Porösschicht würde genügend gut gekühlter Porösbeton in der 15 cm dicken Schicht verbleiben, um die Schmelze sicher zu stabilisieren.

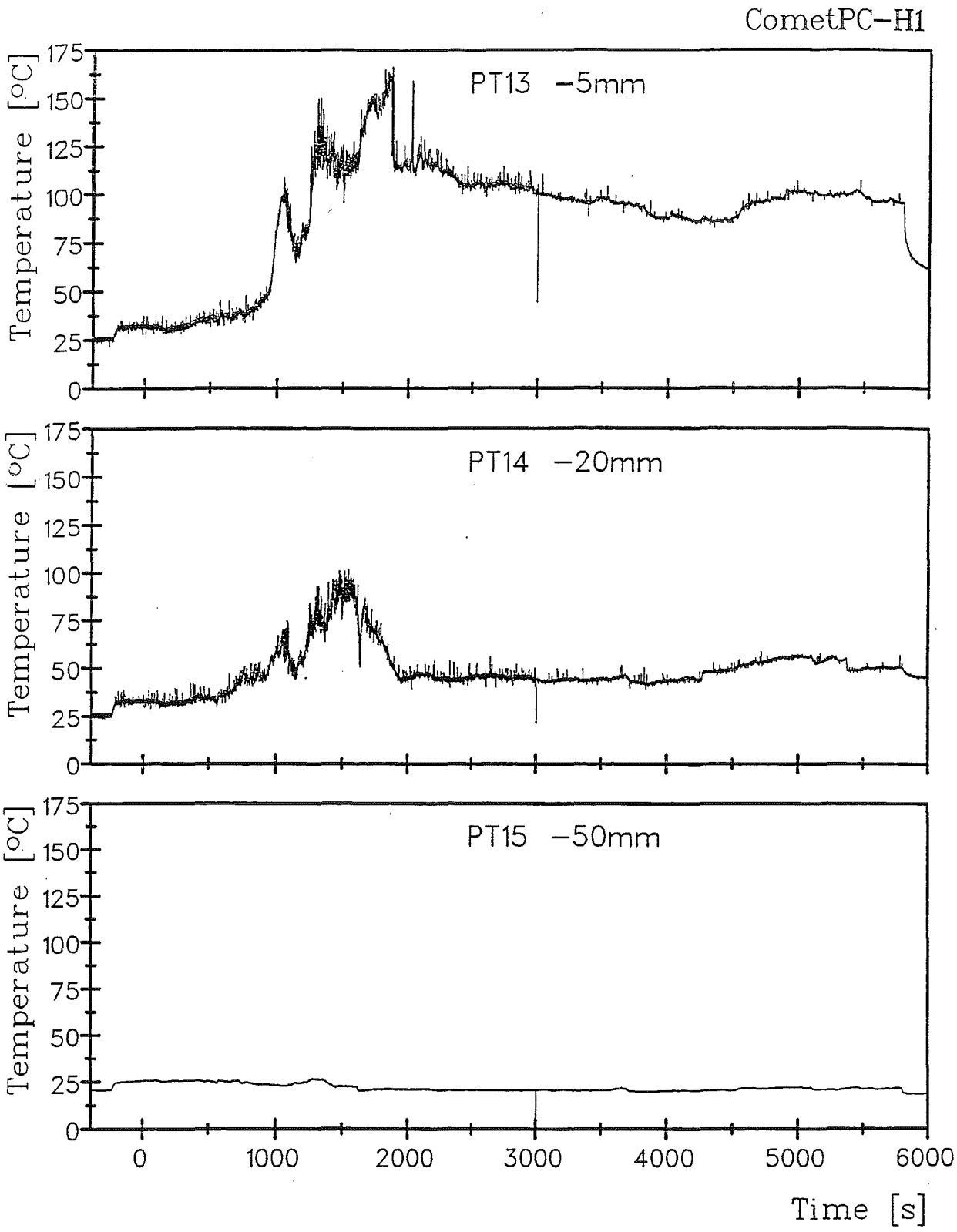


Abb. 8: Temperaturen in der wasserführenden Porösschicht in CometPC-H 1, südwestlicher Sektor

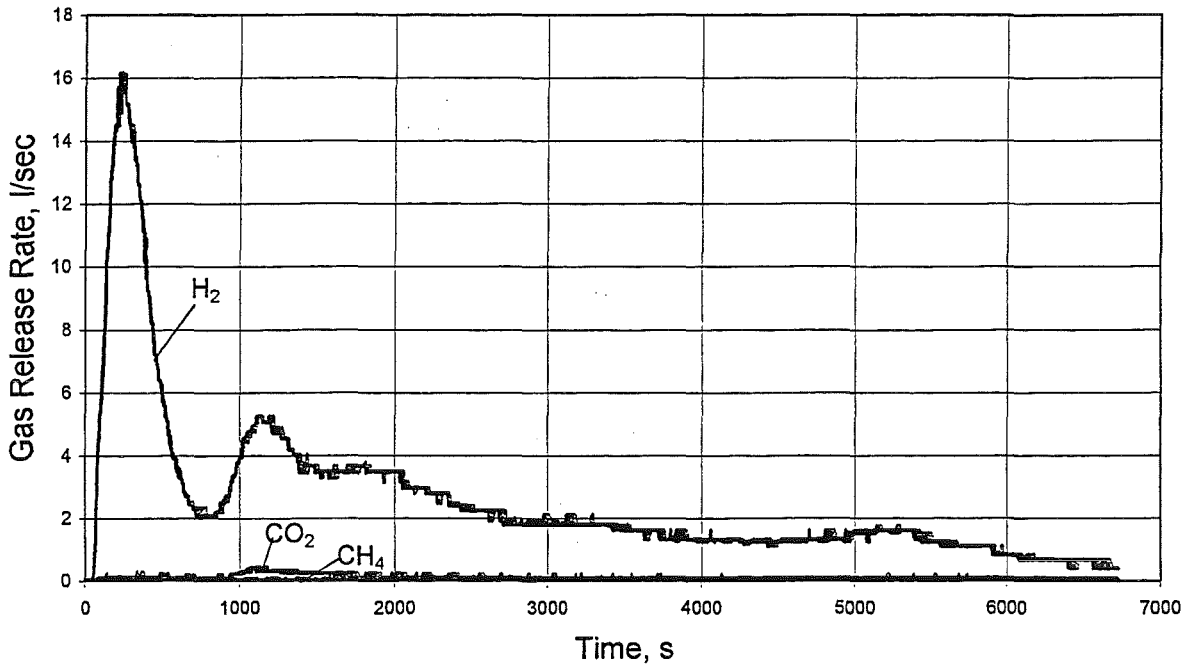


Abb. 9: Freisetzung brennbarer Gase in CometPC-H 1

Die gemessenen Freisetzungsraten der brennbaren Gase zeigt Abbildung 9. Für die Freisetzung ist Wasserstoff wichtig, das durch die Reaktion des freigesetzten Wasserdampfs mit dem Metallanteil der Kernschmelze entsteht, wogegen CO, CO_2 und CH_4 keine Rolle spielen. Der erste Wasserstoffpeak wird durch die trockene Betonerosion bestimmt. Sein Abfall entspricht der Abnahme der mittleren Erosionsrate der Betonopferschicht. Mit Beginn des Kühlwasserzutritts steigt dann die Wasserstoffbildung wegen der Erhöhung der Dampfströmung durch die Schmelze leicht an. Der nachfolgende Abfall der H_2 – Freisetzung wird durch die fortschreitende Erstarrung der Metallphase bestimmt. Auch zum Zeitpunkt der Abschaltung der Nachwärmesimulation bei 5000 s ist jedoch die Wasserstoffrate noch nicht vollständig abgeklungen, was auf noch vorhanden heiße Metallbereiche hinweist.

Zur Charakterisierung der erstarrten Schmelze zeigt Abbildung 10 die Skizze des Querschnitts in Richtung Nord-Süd mit den während der Kühlung entstanden Vulkankegeln. Über der Metallschmelze erkennt man die Oxidschmelze mit den durch die Vulkaneruptionen gebildeten Hohlräumen. Durch diese Eruptionen wurde im wesentlichen nur Oxidschmelze ausgetragen. Im Vergleich zu früheren Experimenten

weist die hier erstarrte Schmelze nur einen relativ geringen Porenanteil auf, da die Dampfdurchströmung wegen der geringen Kühlwassermenge gering war. Skizziert ist auch rechts im Tiegelschnitt der Bereich, in dem der seitliche Durchtritt der Schmelze zwischen MgO-Keramikring und Porösschicht erfolgte. Wie bereits erwähnt, kann Schmelzedurchtritt im Anwendungsfall durch Hochziehen des Randes der Porösschicht ausgeschlossen werden.

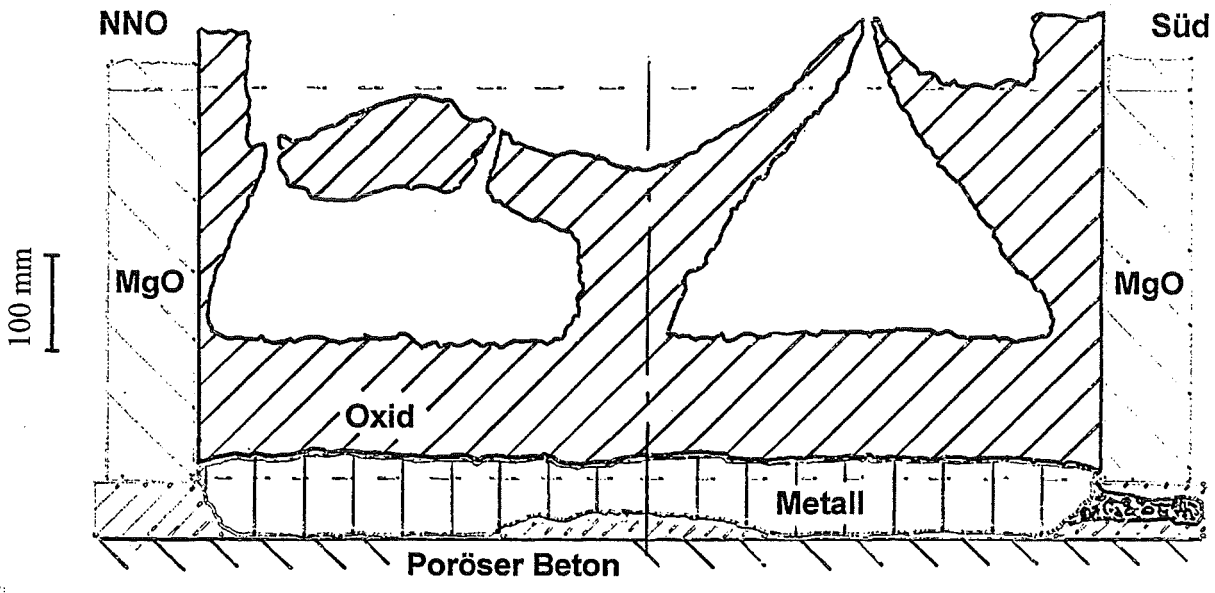


Abb. 10: Schnitt durch die erstarrte Schmelze (Süd – Tiegelmitte – NNO)

Die Folgerungen aus diesem ersten Experiment mit Nachbeheizung lassen sich damit wie folgt zusammenfassen:

- Das Vordringen der Schmelze nach unten wurde durch die poröse Betonschicht sicher gestoppt. Die Porösschicht wurde über Zeitraum von 1,6 h nicht angegriffen und hat damit ihre sehr gute Stabilität bewiesen.
- Die Schmelze wurde durch passive Flutung von unten gekühlt. Der Kühlwasserstrom war jedoch geringer als erwarte und reichte nicht aus, um die Schmelze während der Versuchszeit vollständig erstarren zu lassen. Der Kühlwasserzutritt von 0,08 – 0,1 l/s kompensiert etwa die Nachwärme und führt zur Bildung von Krusten oben und unten mit Zonen noch flüssiger Schmelze im

Zentralbereich. Die Schmelzenoberfläche war zu Ende des Versuchs erst teilweise geflutet.

Ein wesentlicher Grund für den geringen Kühlwasserstrom sind verbliebene Reste von Opferbeton auf der porösen Schicht, die wegen stabiler Konfiguration nicht weiter aufschmelzen. Um eine Erhöhung des Kühlwasserstroms zu erreichen, erscheinen daher zwei Maßnahmen als sinnvoll:

1. größere Durchlässigkeit der wasserführende Porösschicht
2. schwächerer mechanischer Verbund zwischen poröser Schicht und Opferschicht

Die zweite Maßnahme kann erfolgen durch Einfügen einer Schicht von Keramikplatten, die nur punktweise auf der Porösschicht aufgeklebt werden und danach mit der Betonopferschicht übergossen werden. Die mit dem Opferbeton gefüllten Fugen zwischen den Platten sorgen dann für einen ausreichenden Verbund zwischen Porösschicht und Opferschicht. Bei Aufschmelzen der Opferschicht gibt dann jeweils die durch Schmelzen oder Bruch versagende Keramikplatte die entsprechende Austrittsfläche des Porösbetons frei, ohne daß Restbeton haften bleibt. Dieser Aufbau wurde zunächst in nicht nachbeheizten Experimenten erfolgreich erprobt.

Entsprechend den positiven Ergebnissen dieser Voruntersuchungen erfolgt der Aufbau des nächsten Experiments **CometPC-H 2** mit Nachheizung, wie in Abbildung 11 dargestellt, mit einer Zwischenschicht handelsüblicher Fliesen. Zusätzlich wurde die

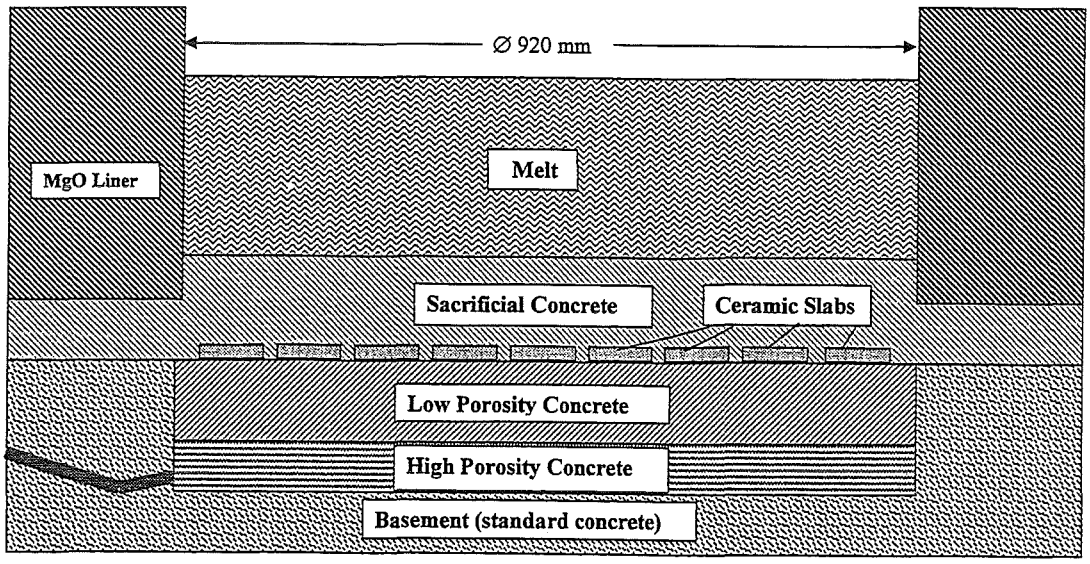


Abb 11: Schematischer Aufbau des Kühleinsatzes in CometPC-H 2

Porosität der feinporösen Betonschicht so erhöht, daß die doppelte Flutrate gegenüber dem Vorläuferexperiment möglich ist. Die sonstigen Versuchsbedingungen sind ungeändert.

Die Schmelze wurde zum Zeitpunkt 0 Sekunden mit 2000°C auf die Kühleinrichtung aufgegossen und zunächst wie geplant mit etwa 300 kW simulierter Nachwärme beheizt. Auch in diesem Experiment tritt wiederum eine stark inhomogene Erosion der Opferschicht auf, so daß der Beginn des Kühlwasserzutritts ähnlich wie in CometPC-H 1, schon nach 870 s, aber sehr lokal, erfolgte. Den Verlauf des Kühlwassereinstroms zeigt Abbildung 12, den Vergleich von simulierter Nachwärmeleistung und dem mit dem Dampf abgeführten Wärmestrom zeigt Abbildung 13.

Der Wasserzutritt steigt zunächst auf 230 ml/s und ist damit doppelt so hoch wie zur Abfuhr der Nachwärmeleistung erforderlich. Vermutlich infolge weiterer Erosion der Opferschicht steigt bei 1600 s der Kühlwasserzustrom auf 300 bis 320 ml/s. Im Laufe des Experiments fällt jedoch später der Kühlwasserstrom deutlich ab, steigt aber danach wieder auf etwa 200 ml/s. Die im Abgasstrom gemessene Kühlleistung in Abb. 13 zeigt, daß die Kühlung der Schmelze ab 900 s sehr wirksam ist. Daher beginnt ab 1100 s die Oberfläche der Schmelze zu erstarren. Bei 1160 s gelangt das erste, von unten durchtretende Wasser auf die Oberfläche der Schmelze. Bei 1325 s ist die Schmelzenoberfläche zu etwa 4/5 erstarrt. In dem noch offenen Bereich entwickelt sich ein Vulkan, aus dem Dampf oxidische Schmelze versprüht. Durch den fortwährenden Kühlwasserstrom erhöht sich die Wasserüberdeckung der Schmelze: Bei 1750 s ist die Schmelze mit Ausnahme der Vulkanöffnung überdeckt, nach 2000 s ist auch die Vulkan erloschen und die Oberfläche vollständig von stark siedendem Wasser überdeckt.

Schwankungen der Leistung werden jedoch auch zum Zeitpunkt 2200s noch beobachtet und lassen im Zusammenhang mit Temperaturmessungen darauf schließen, daß die Schmelze noch in kleineren, inneren Bereichen flüssig ist. Darauf weisen auch die Wasserstoffraten in Abbildung 14 nach 2000 s hin, deren weiter abfallende Tendenz aber die fortschreitende Erstarrung anzeigt. Ansonsten entspricht die Wasserstofffreisetzung weitgehend dem vorhergehenden Experiment CometPC-H 1. Leider fällt jedoch zum Zeitpunkt 3120 s die induktive Beheizung der Schmelze aus rein

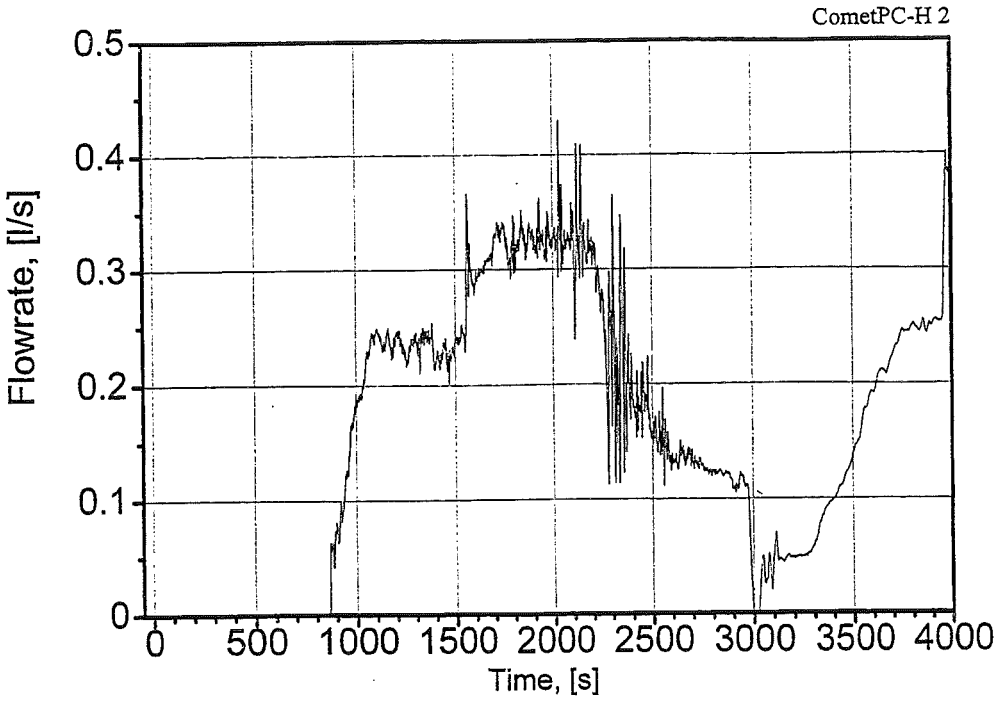


Abb 12: Passiver Kühlwasserzutritt während Experiment CometPC-H 2

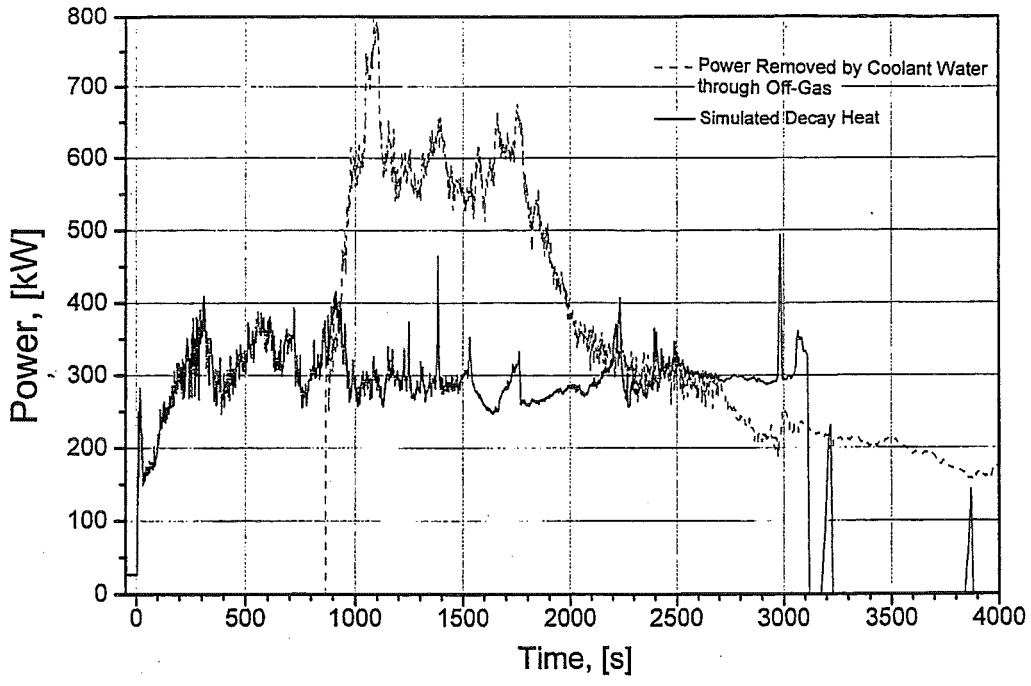


Abb 13: Vergleich von simulierter Nachwärmeleistung und dem durch Dampf abgeführten Wärmestrom in CometPC-H 2

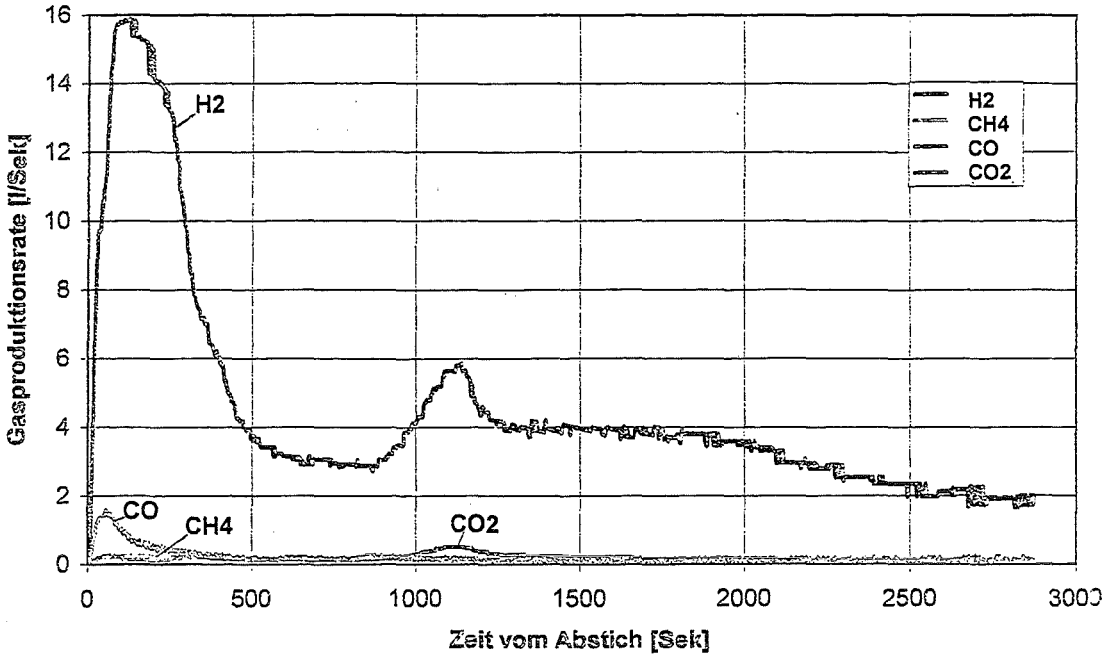


Abb 14: Freisetzung brennbare Gase während Betonerosion und Kühlung in Experiment CometPC-H 2

anlagentechnischen Gründen aus. Ursache hierfür ist eine Überhitzung der Jochbleche, die das Induktionsfeld führen. Dies führt zum elektrischen Kurzschluß und damit zum Abschalten der Induktionsspule, steht aber in keinerlei Zusammenhang mit dem Verhalten der Schmelze. Die Schmelze kühlt darauf hin vollständig aus. Auch wenn die Nachwärmesimulation hätte fortgesetzt werden können, wäre die Schmelze langsam weiter und vermutlich auch vollständig erstarrt.

Die Temperaturmessungen in der wasserführenden Porösschicht zeigen einen ähnlichen Verlauf wie im vorhergehenden Experiment. Sie bleiben selbst in der schmelzenahen Schicht unter 100°C; nur sehr kurzzeitig wird an wenigen Stellen 100°C überschritten. Tiefer liegende Bereiche der Porösschicht verblieben auf der Temperatur des zuströmenden Kühlwassers. Dies erklärt die sehr gute Stabilität der Porösschicht, die auch in diesem Experiment von der Schmelze nicht angegriffen wurde. Abbildung 16 zeigt einen Schnitt durch die linke Hälfte dieser Schicht nach entfernen der erstarrten Schmelze. Man erkennt auf der Oberseite zum Teil noch intakte Keramikplatten, die teilweise noch mit einer dünnen Restschicht des ursprünglich

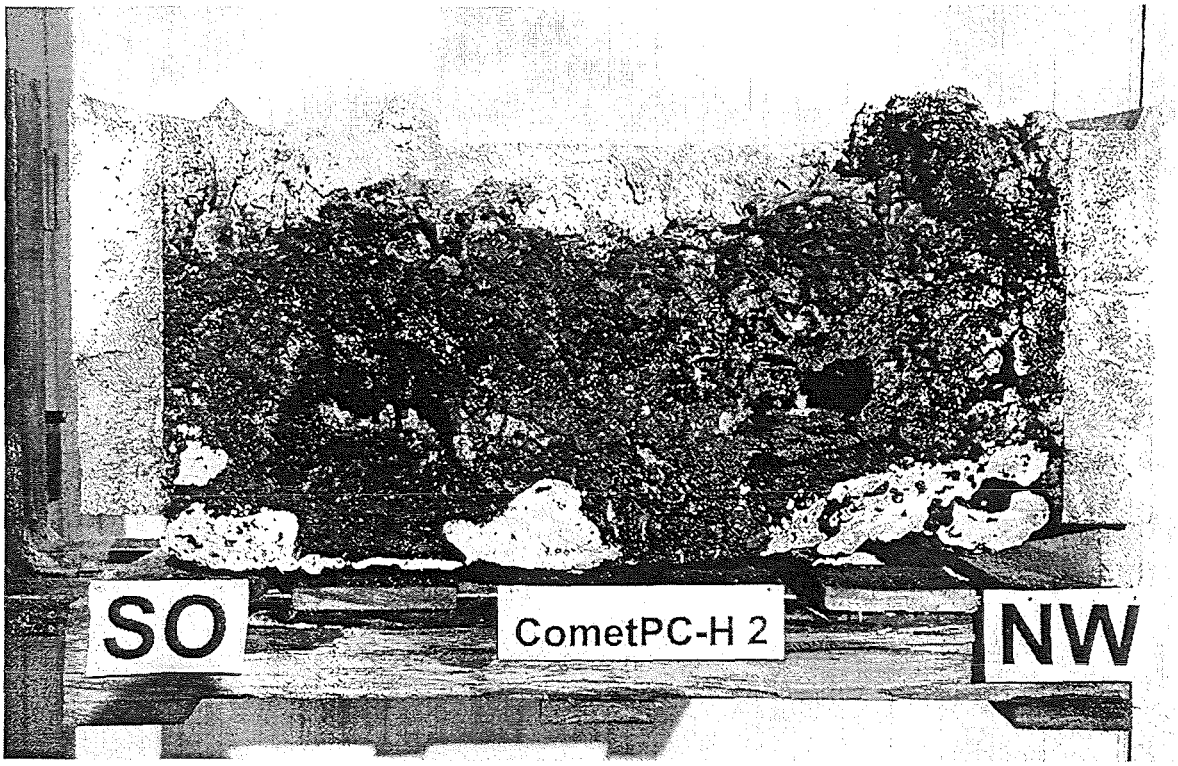


Abb. 15: Schnitt durch porös erstarrte Schmelze aus CometPC-H 2 mit Metallanteil (unten) und darüber geschichteter Oxidschmelze

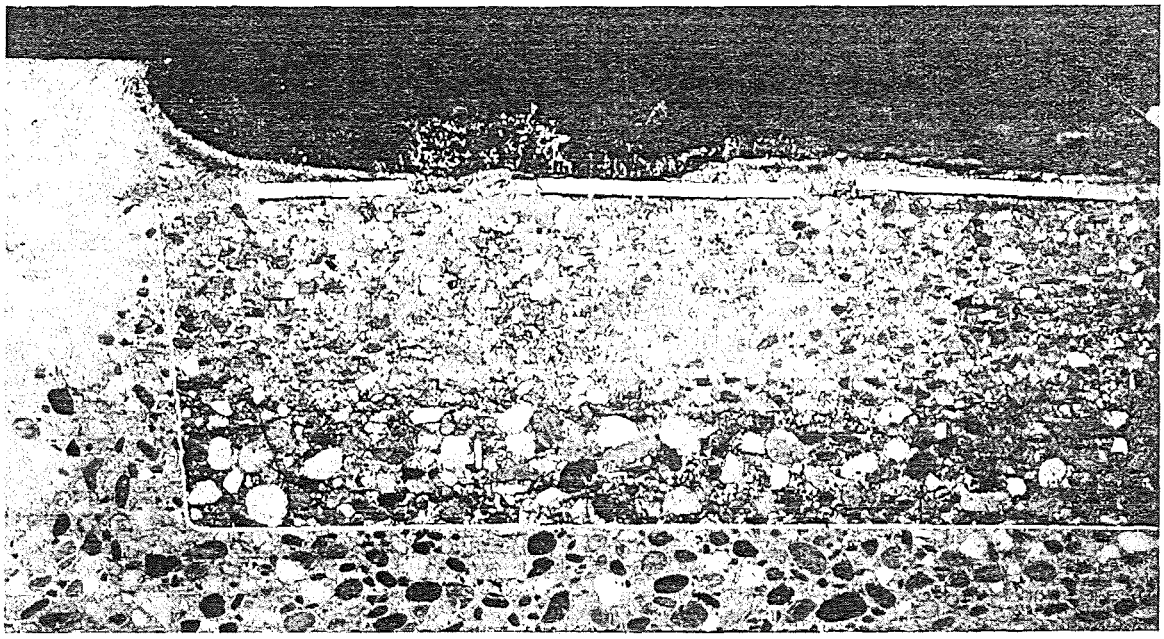


Abb. 16: Schnitt durch Kühleinsatz (linke Hälfte) von CometPC-H 2 nach Abnehmen der erstarrten Schmelze. Unterhalb der teilweise erhaltenen Keramikplatten ist die poröse, wasserführende Betonschicht vollständig intakt

10 cm hohen Opferbetons bedeckt sind. Feinporöse und grobporöse Betonschicht sind nicht von der Schmelze angegriffen und in ihrer vollen Höhe erhalten.

Abbildung 15 zeigt den Schnitt durch die erstarrte Schmelze nach Abheben von der Kühlvorrichtung. Seitlich ist der geschnittene Keramikring zu sehen. Die hellen, unten liegenden Bereiche sind erstarrtes Metall, darüber liegt das erstarrte Oxid. Beide Bereiche haben eine ausreichende Porosität, um den notwendigen Kühlwasserstrom durchtreten zu lassen.

Mit den für dieses Experiment vorgenommenen Änderungen ist also die angestrebte Verbesserung der Kühlung eingetreten. Damit kann der Entwicklungsstand des CometPC – Kühlkonzepts wie folgt bewertet werden:

- Der wasserführenden Porösbeton hat eine sehr hohe Stabilität. Er wird mechanischer oder thermisch durch die Schmelze nicht angegriffen, da er stets kalt bleibt.
- Die Schmelze wird zuverlässig gestoppt. Hierzu reicht eine Flutrate des Kühlwassers entsprechend dem 1- bis 2-fachen des Nachwärmeniveaus. Eine ausreichende Flutrate und fortschreitende Erstarrung der Schmelze stellen sich bei entsprechender Porosität der wasserführenden Betonschicht ein.
- Bei stark ungleichmäßigem Angriff der Opferschicht können "Inseln" von Opferbeton erhalten bleiben und die gleichmäßige Kühlung und Erstarrung erschweren. In diesem Fall wird Schmelze zwischen Krusten am Boden und überfluteter Oberfläche stabil eingeschlossen und erstarrt verzögert.
- Gegenüber dem ursprünglichen COMET Konzept ist der Kühlwasserzutritt in die Schmelze geringer. Daher erfolgen Abkühlung und Erstarrung der Schmelze über einen längeren Zeitraum, wodurch der Druckanstieg im Sicherheitsbehälter vermindert wird. Die verzögerte Kühlung wird erkauft durch längerfristig flüssige Zonen der Schmelze bei gleichzeitig stabilem Einschluß.
- Die Kühlwasserrate ist durch die Durchlässigkeit der Porösschicht beeinflußbar und erwies sich mit dem 2- bis 3-fachen des Nachwärmeniveaus als günstig. Sie wird nach unten begrenzt durch die Notwendigkeit des Aufbaus einer porösen, im wesentlichen wasserdurchlässigen Schmelzeschicht.

Zielsetzung weiterer Experimente ist die Bestimmung und Einhaltung einer unter diesen Aspekten optimalen Flutrate.

Aus Sicht der Anwendung hat das Kühlkonzept die folgenden Vorteile:

- niedrige Kosten
- hohe Stabilität gegen Schmelzeangriff
- verzögerte Dampffreisetzung

3 Untersuchungen zur Verbesserung des Wasserzutritts

Das CometPC-H 1 Experiment zeigte eine unbefriedigend kleine Wasserzutrittsrate, weil nur sehr kleine Flächen der wasserführenden, porösen Schicht vollständig freigeschmolzen werden und damit den Wasserzutritt freigeben. Eine geringe Wassermenge ist aber ausreichend, die weitere Erosion in anderen Bereichen der Opferschicht deutlich zu verlangsamen bzw. zu stoppen, da zu diesem Zeitpunkt die Schmelze nur noch eine geringe Überhitzung aufweist. Weitere Flächen werden dann nicht mehr freigeschmolzen, eventuell kann aber angeschmolzener Opferbeton die poröse Oberfläche zusetzen.

Es ist deshalb notwendig, dass größere Flächen der feinporösen Schicht freigegeben werden. Deshalb soll zwischen der wasserführenden, feinporösen Schicht und dem Opferbeton eine Schicht aus Keramikplatten eingefügt werden. Zwischen den einzelnen Platten werden Fugen von 1 cm eingehalten, um eine kraftschlüssige Verbindung zwischen feinporöser Schicht und Opferbeton zu erreichen. Die Keramikplatten selber werden auf der porösen Schicht nur punktweise aufgeklebt. Nachdem die Schmelze den Opferbeton bis zu den Platten erodiert hat, werden die Platten durch die hohe Temperatur der Schmelze erodiert oder zerspringen, weil über der Höhe der Platte ein Temperaturgradient von >1000 °C besteht. Durch das Zerspringen der Platten wird die darunter liegende poröse Schicht damit spontan und großflächig freigegeben. Ob diese Überlegungen tragfähig sind und zu einer Verbesserung des Öffnungsverhaltens führen, wurde durch eine Versuchsserie mit 5 transienten Experimenten gezeigt werden. Dabei werden unterschiedliche Materialien für die Keramikfliesen untersucht, siehe Tabelle 1.

Tab.1: Versuchsmatrix der CometPC-B Versuche

Versuch	Versuchsparameter
CometPC-T B0	Ohne Wasserzutritt zur Bestimmung der maximalen Erosionstiefe
CometPC-T B1	Referenzaufbau entsprechend CometPC-H 1, direkter Verbund zwischen Opferbeton und poröser Schicht
CometPC-T B2	Keramikplatte aus Marmor als Zwischenschicht
CometPC-T B3	Keramikplatte, hochgebrannt, geschlossenporig, sog. Feinsteinzeug als Zwischenschicht
CometPC-T B4	Keramikplatte, nicht hochgebrannt, offenporig, sog. Steingutfliese als Zwischenschicht

Die Versuchstiegel (siehe Abb. 17) bestehen aus 2 zusammengesetzten Betonrohren mit einem Innendurchmesser von 30 cm. Der untere Teil ist am Boden mit einer Betonschicht von 8 cm Schichthöhe verschlossen.

In dem ersten Experiment, das nur dazu dient, die maximale Erosionstiefe in diesem Versuchsaufbau zu bestimmen, wird darauf direkt die Opferbetonschicht von 8 cm Höhe aufgebracht.

In den anderen Experimenten wird zunächst ein grob poröser Beton aufgebracht mit einer Schichthöhe von 5 cm und darüber ein feinporöser Beton mit einer Schichthöhe von 10 cm. In die untere Betonschicht wird eine Wasserzuführungsleitung eingebracht, die mit der porösen Betonschicht verbunden ist. Auf den porösen Beton wird dann zunächst die Schicht aus Keramikplatten aufgebracht und anschließend die Betonopferschicht, so dass sich für Opferbeton mit Keramikplatten eine Gesamtschichthöhe von 25 mm er-

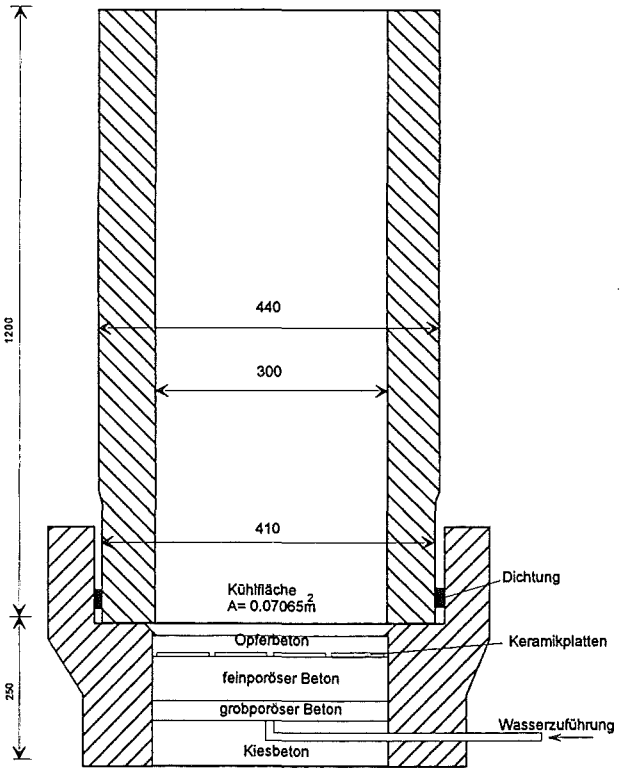


Abb.17 Versuchstiegel CometPC-T B2-4

gibt.

Um die Versuche so einfach wie möglich zu gestalten, wurde auf eine aufwendige Instrumentierung verzichtet. In dem ersten CometPC-T B0 ist der Versuchstiegel mit 6 Thermoelementen in der Mitte bestückt, um die Erosionstiefe über der Zeit zu bestimmen. In den Versuchen CometPC-T B1-4 wurde nur die jeweilige Wasserzutrittsrate gemessen. In allen Versuchen dienten verschiedene Kamerapositionen der Videobeobachtung.

Die eingesetzte Schmelzenmasse wurde in Anlehnung an frühere Experimente so festgelegt, dass die kollabierte Schmelzenhöhe gleich bleibt. Daraus ergibt sich eine Gesamtschmelzenmasse von 78 kg mit 32 kg Eisen und 46 kg Oxid. Der Wasservordruck gegenüber der Schmelze an der Kontaktfläche zwischen dem porösen Beton und der Opferschicht beträgt 0.1 bar, wie in früheren Experimenten. Vor Versuchsbeginn wurde die Porösschicht mit ca. 1,5 l Wasser geflutet. Damit ist die Wasserschicht ca. 5 cm hoch, d.h. die grobporöse Schicht war gerade wassergefüllt. 60 s nach Zündung wurde der Wasserzutritt dann freigegeben. Damit ist sichergestellt, dass trotz des einfachen Versuchsaufbaus Wasser nicht vorzeitig am Tiegelrand in die Schmelze fließen kann.

Das erste Experiment CometPCB-T 0 zur Bestimmung der Erosionstiefe bei diesem Versuchsaufbau ergab eine maximale Erosion von etwa 30 mm. Dabei nimmt aber die Erosionsgeschwindigkeit stark ab. Sie beträgt für die ersten 15 mm ca. 0.27 mm/s, und sinkt dann auf <0.1 mm/s ab, wie sich aus dem Versagen der eingebauten NiCr/Ni-Thermoelemente ergibt. Deshalb wurde für die weiteren Experimente die gesamte Opferschichthöhe, einschließlich der Fliesen, auf 25 mm festgelegt.

Experiment CometPC-T B1:

Dieser Versuch diente als Referenzversuch, um in dieser Geometrie die Bedingungen des letzten Experimentes CometPC-H1 nachzubilden. Deshalb wurde hier der gleiche Aufbau verwen-

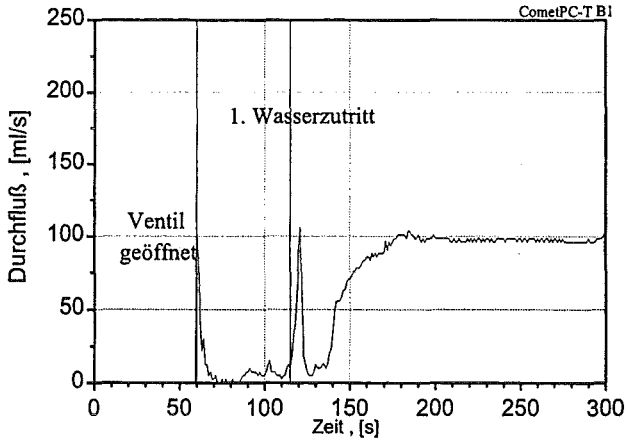


Abb. 18: Wasserzutrittsrate CometPC-T B1

det: Die Opferschicht von 25 mm Höhe wird direkt auf den porösen Beton aufgebracht, ohne Keramikfliesen als Zwischenschicht zu verwenden.

Der Versuchsablauf zeigt folgendes Bild: Der Wasserzutritt setzt 115 s nach Zündung der Schmelze ein, zunächst steigt er dann auf ca. 100 ml/s, danach fällt die Rate beinahe auf null zurück. Nach 140 s steigt der Wert wieder langsam auf ca. 100 ml/s an. Diese Zutrittsrate bleibt dann konstant und sinkt später wieder durch den steigenden Wasserstand im Tiegel, siehe Abb. 18. Die optische Bewertung der Wasserzutrittsebene nach Abnahme des Regulus zeigt ein mit dem letzten CometPC-H1 Experiment übereinstimmendes Bild: Die Oberfläche der feinporösen Schicht wird nicht vollkommen freigeschmolzen, Restse der Opferschicht sind erkennbar. Dieses Experiment zeigt damit ein sehr ähnliches Verhalten wie das CometPC-H Experiment.

Experiment CometPC-T B2:

Das erste Experiment mit Keramikfliesen CometPC-T B 2 besitzt eine Zwischenschicht aus Marmorplatten mit einer Höhe von 7.5 mm. Marmor wurde gewählt wegen seines kristallinen Aufbaus und weil seine chemische Zersetzung zu einer erhöhten Gasfreisetzung führt und damit der Wasserzutritt in eine stärker gasgerührte Schmelze einsetzt. Der 1. Wasserzutritt wird nach 90 s beobachtet, siehe Abb. 19. Die Wasserzutrittsrate steigt sehr schnell auf ca. 200 ml/s, nach weiteren 60 s steigt die Zutrittsrate auf ihren maximalen Endwert von ca. 240 ml/s. Diese Zutrittsrate bleibt dann konstant und sinkt später durch den steigenden Wasserstand im Tiegel wieder leicht ab. Die Nachuntersuchungen ergeben folgendes Bild: Die Marmorfliesen sind z.T. zersprungen und leicht abgehoben, obwohl die Fugen zwischen den Fliesen intakt geblieben sind. Die Fliesen sind etwa 2 mm erodiert. Unterhalb der gesprungenen Fliesen ist die feinporöse Schicht deutlich zu erkennen. Durch den thermischen Angriff sind die Marmorfliesen weich und brüchig geworden. Die feinporöse Schicht zeigt keinerlei thermische Angriffsspuren.

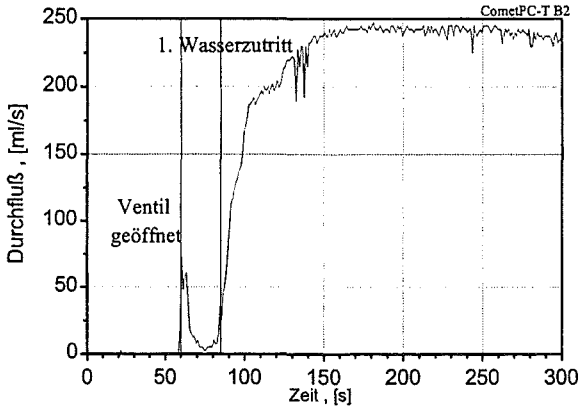


Abb. 19: Wasserzutrittsrate in CometPC-B2

Experiment CometPC-T B 3:

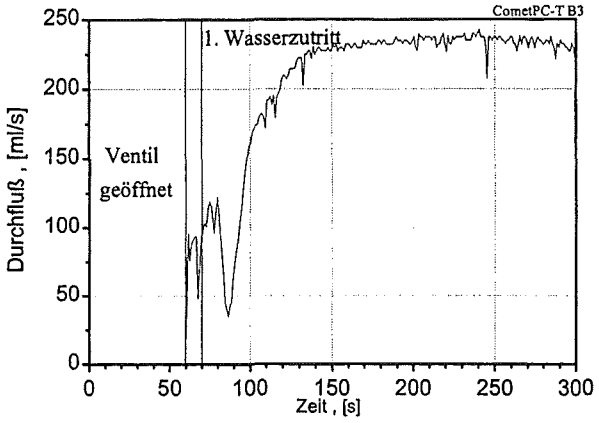


Abb. 20: Wasserzutrittsrate in CometPC-B3

In diesem Versuch wird eine hochgebrannte Keramikfliese (Steinzeug) als Zwischenschicht eingesetzt. Diese Fliesen sind geschlossenporig und nehmen kein Wasser auf. Die Schichtdicke der Fliese ist ca. 6.5 mm. Der Wasserzutritt setzt ca. 70 s nach Zündung ein, siehe Abb. 20. Er steigt auf ca. 120 ml/s und fällt dann wieder auf ca. 50 ml/s ab. Nach 90 s steigt er dann langsam auf den Maximalwert von ca. 240 ml/s (bis 130 s) an. Nach der Abnahme des Schmelzenregulus zeigt sich folgendes Bild: Die feinporöse Schicht ist in großen Teilen sichtbar, z.T. sind aber auch zersprungene Fliesen noch zu sehen. Der Wasserzutritt wird aber auch durch diesen Restanteil an Fliesen nicht behindert. Die feinporöse Schicht zeigt keinerlei Angriffsspuren durch die Schmelze.

Experiment CometPC-T B 4:

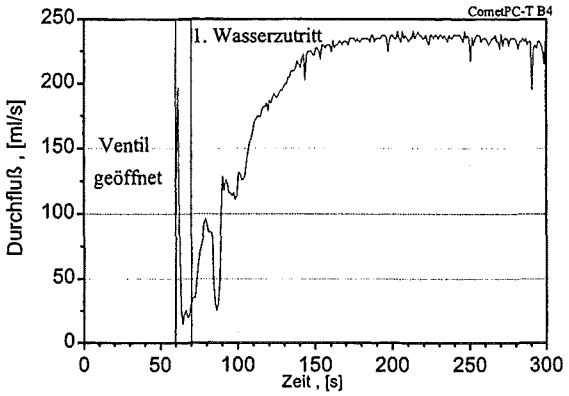


Abb. 21: Wasserzutrittsrate CometPC-B4

Dieser Versuch wurde mit einer nicht hochgebrannten Keramikfliese durchgeführt. Diese Fliesen sind offenporig und können auch Wasser aufnehmen. Sie werden als Steingutfliese bezeichnet. Die Fliese hat eine Dicke von ca. 5 mm. Der Wasserzutritt setzt ca. 70 s nach Zündung ein, siehe Abb. 21. Er steigt auf ca. 100 ml/s und fällt dann wieder ab. Nach 90 s steigt er wieder kontinuierlich an bis auf den Maximalwert von ca. 240 ml/s. Nach der Abnahme des Schmelzenregulus zeigt sich das gleiche Bild wie in den anderen Versuchen mit Keramikzwischenschicht. Die Keramikplatten sind gesprungen und leicht erodiert. Darunter liegt die feinporöse Schicht, die keinerlei Angriffsspuren durch die Schmelze aufweist.

Alle Versuche mit eingebauten Keramikfliesen (B2-B4) zeigen somit deutlich größere Wasserzutrittsraten als der Referenzversuch B1 (Verbund Opferbeton mit feinporöser Schicht). Unter dem Aspekt maximale Wasserzutrittsrate läßt sich kein Unterschied zwischen den verschiedenartigen Fliesen feststellen. Sämtliche untersuchten Fliesen versagen durch die heiße Schmelze so großflächig, dass sich kein zusätzlicher Druckverlust ergibt gegenüber der feinporösen, wasserführenden Schicht. Die Keramikplatten werden dabei von der Schmelze nicht vollständig erodiert, sondern versagen thermisch und brechen auf. Der Einbau von Keramikplatten hat die Wasserzutrittsrate durch das großflächige Öffnungsverhalten deutlich erhöht. Es findet auch kein Verkleben der feinporösen Oberfläche durch angeschmolzenen Beton statt. Damit konnte der gewünschte Effekt auf die Wasserzutrittsrate in diesen transienten Experimenten eindeutig nachgewiesen werden. Für die weiteren CometPC-H Versuche werden die einfachsten Keramikplattten (Steingutfliese) ausgewählt und als Zwischenschicht zwischen den porösen Beton und die Betonopferschicht eingesetzt.

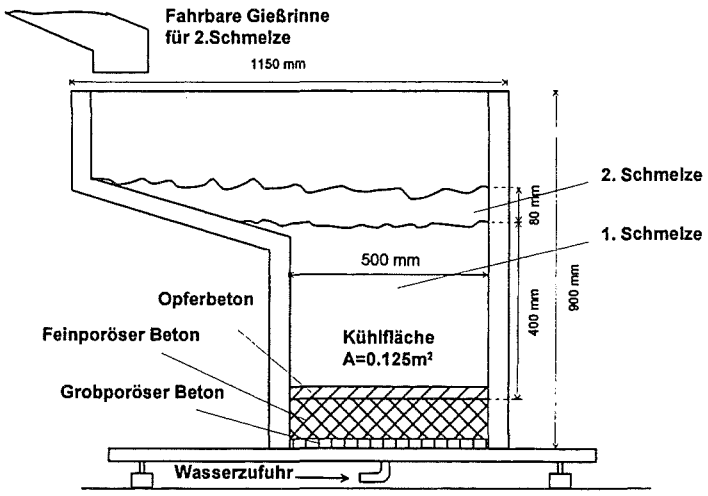
4 Kühlbarkeit nachfließender Schmelzen

In transienten Experimenten und in Experimenten mit Nachbeheizung der Schmelze wird die Funktion der Schmelzekühlung bei der modifizierten Kernfängerkonstruktion CometPC für den Anwendungsfall untersucht. In einer weiteren transienten Versuchsserie soll nun geprüft werden, ob auch für dieses Konzept sekundäre, aus dem RDB nachfließende Schmelzen beherrscht werden. Für das frühere COMET Konzept konnte das bereits gezeigt werden [6].
Folgendes Szenario wird zu Grunde gelegt:
Der überwiegende Teil der Kernschmelze ist nach Erosion der Betonopferschicht durch die einsetzende Kühlung erstarrt und liegt als poröse, gekühlte Schicht auf der CometPC Kühleinrichtung auf. Es wird unterstellt, dass sich anschließend noch Restschmelze im RDB ausbildet und als sekundäre Schmelze auf die erste Schmelze aufließt.

Die folgenden, kritischen Fragestellungen aus diesem Szenario sollen in der dargestellten Versuchsserie beantwortet werden:

1. Verschließt die 2. Schmelze bereits vorhandene Abströmkanäle und verhindert damit einen weiteren Kühlwasserdurchtritt?
2. Wird die zweite Schmelze ebenfalls ausreichend fragmentiert und somit in eine kühlbare Konfiguration überführt?
3. Können durch den Kontakt der Schmelze mit Kühlwasser Dampfexplosionen entstehen?

Abb. 22 zeigt den Aufbau des Versuchstiegels. Es wurde ein mehrfach verwendbarer Stahltiegel eingesetzt, der mit einer 5 cm starken Keramikauskleidung versehen ist. Am Boden des Versuchstiegels befindet sich der Kühleinsatz mit 50 cm Länge und 25 cm Breite. Der Kühleinsatz weist den üblichen dreischichtigen Aufbau auf. Über die Zuführungsleitung, die mit einem Wasservorratsbehälter verbunden ist, strömt das Wasser zunächst in die unten liegende, grobporöse Schicht, die die gute Querverteilung des Kühlmittels gewährleistet. Durch die darüber liegende, feinporöse Schicht wird der Durchfluß auf den gewünschten Wert begrenzt. Nach oben schließt sich die 30 mm hohe Opferbetonschicht an. Wie in den bisherigen Versuchen werden Thermitschmelzen mit einem 26 %igen CaO Anteil eingesetzt, um die Erstarrungstemperatur der Oxidschmelze zu erniedrigen. Die erste Schmelze wird direkt in dem Versuchsbehälter gezündet, die zweite, auffließende Schmelze wird in einem Reaktionstiegel separat zu einem späteren Zeitpunkt gezündet. Nur der Oxidanteil der zweiten Schmelze wird für das Experiment genutzt und über eine Gießrinne in den Versuchsbehälter eingegossen. Der Metallanteil fließt in eine Auffangwanne ab. Die Anfangstemperaturen dieser Schmelzen liegen typischerweise bei ca. 1950°C.



Versuchsaufbau für Experimente CometPC-T 2.x

Abb. 22: Experimenteller Aufbau der CometPC-T 2.x Versuche

Da für den sicheren Ablauf des Experimentes die Beobachtung sehr wichtig ist, werden 4 Videokameras von unterschiedlichen Standorten eingesetzt. Es werden die

Aufsicht auf die Schmelze und verschiedene seitliche Positionen gewählt. Des weiteren werden das zutretende Wasservolumen und das Gewicht des Tiegels über der Zeit gemessen. Die Erosion der Betonopferschicht durch die erste Schmelze wird durch Thermoelemente, die in der Betonschicht eingesetzt sind, bestimmt. Weitere Thermoelemente registrieren die Temperaturen in der porösen Betonschicht, um beobachten zu können, ob die Schmelze weiter in diese Schicht vordringen kann, oder durch das anstehende Wasser sicher gestoppt wird. Die Temperatur der zweiten Schmelze wird mittels W/Re-Thermoelementen bestimmt. In dem ersten Versuch wurde dazu nur die Metalltemperatur gemessen, in dem zweiten Experiment wurde auch die Oxidtemperatur in der Gießrinne gemessen. NiCr/Ni-Thermoelemente wurden außen an dem Versuchstiegel befestigt, um die Erwärmung der Außenwand zu messen und damit die Wärmeströme in die Seite.

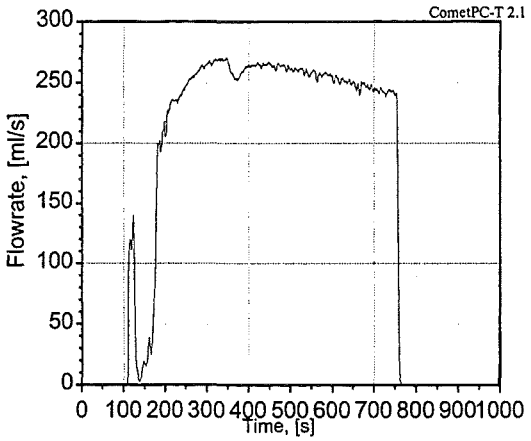


Abb. 23: Wasserzutrittsrate CometPC-T2.1

Versuch CometPC-T 2.1

Etwa 20 s nach Zündung setzt die trockene Betonerosion ein. Nach ca. 110 s ist der Beton erodiert und der Wasserzutritt beginnt. In diesem Experiment setzt der Wasserzutritt zunächst nur langsam ein, erst nach ca. 200 s erreicht die Wasserzutrittsrate Werte über 200 ml/s, s. Abb. 23. Das Wasser wird zunächst vollständig verdampft und verursacht dadurch eine heftige Schmelzbadbewegung, siehe Abb. 24. Nach 225 s ist die Schmelze erstarrt und das Fluten der Schmelze beginnt. Mit Erstarrung der Schmelze wird die Kraftmessung sehr ruhig. Nach 280 s wird die zweite Schmelze in dem Reaktionstiegel gezündet, und das Oxid nach 335 s eingegossen. Sofort mit dem Auflaufen der

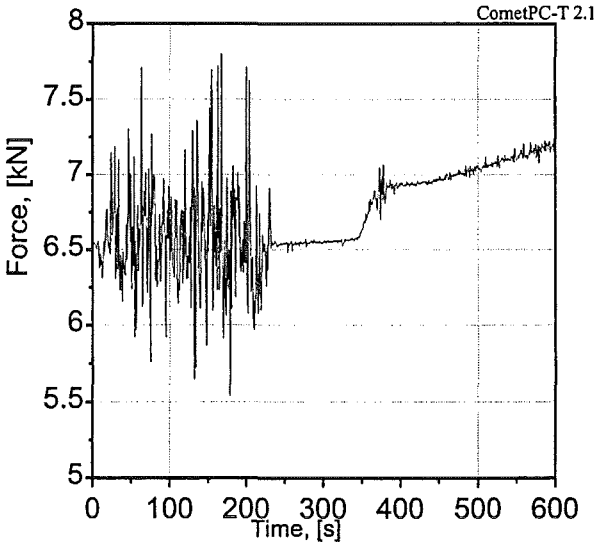


Abb. 24: Gewichtsmessung des Tiegels CometPC-T2.1

zweiten Schmelze auf die erste Schmelze und damit dem Beginn des Wasserkontaktes setzt ein Sprühregen von einem Teil der Schmelze ein. Es ereignen sich keinerlei energetische Wechselwirkungen mit dem Wasser. Die Wasserzutrittsrate geht zunächst ganz leicht zurück auf ca. 250 ml/s, steigt aber wieder auf den Maximalwert von 270 ml/s an. Es werden insgesamt ca. 40 kg Oxid auf die erste Schmelze aufgegossen.

Während des gesamten Experimentes bleibt die wasserführende, poröse Betonschicht kalt. Die in Abb. 25 dargestellten Temperaturen wurden direkt an der Grenze zu dem Opferbeton gemessen. Auch während der Phase, in der die flüssige Metallschmelze den Opferbeton erodiert hat und damit direkt auf dem porösen Beton aufliegt, ist die Kühlung so effektiv, daß 100 °C nicht überschritten werden. Auch der Tiegelschnitt nach dem Experiment zeigt, dass die Schmelze nicht in die poröse Schicht eingedrungen ist, sondern die Metallschicht auf der wasserführenden Schicht aufliegt. Sie stellt damit eine stabile Barriere dar. Des weiteren zeigt der Tiegelschnitt, dass die 2. Schmelze nicht in Hohlräume der ersten Schmelze eingedrungen ist, sondern über die erstarrte Oberfläche der ersten Oxidschmelze fließt. Auch die zweite Schmelze erstarrt porös mit großen Hohlräumen.

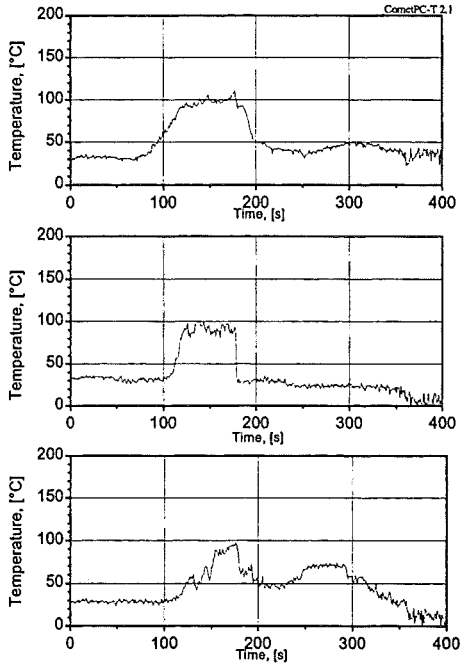


Abb. 25: Temperaturen in der porösen Schicht, CometPC-T 2.1

Versuch CometPC-T 2.2

Prinzipiell wurde der Versuchsaufbau gegenüber dem vorhergehenden Experiment nicht verändert. Aufgrund der Ergebnisse aus der Versuchsreihe CometPC-B wurde jedoch auch in diesem Experiment eine Zwischenschicht aus keramischen Fliesen auf den porösen Beton aufgebracht. Die Gesamthöhe der Opferschicht von 30 mm wurde beibehalten und ergibt sich aus Opferbeton von 25 mm Höhe und Fliesen von 5 mm Höhe. Die Schmelzenmassen der ersten und zweiten Schmelze wurden etwas verändert. Beide Massen betragen 120 kg, um eine größere Oxidmasse von ca 50 kg auf die erste Schmelze aufgiessen zu können. Als weitere Änderung wurde der

Mörtelanteil in der porösen Schicht von 30 % auf 28 % reduziert, um die Porosität und damit die Wasserzutrittsrate leicht zu erhöhen.

80 s nach Zündung ist die Opferbetonschicht erodiert und der Wasserzutritt setzt ein. Zunächst ist die Wasserzutrittsrate klein, siehe Abb. 26, nach 115 s ereignet sich eine schwache Wechselwirkung der Schmelze mit dem Wasser, bei der etwa 30 kg Schmelze fragmentiert und aus dem Behälter ausgetragen werden. Danach steigt die Wasserzutrittsrate sehr schnell auf einen Wert über 200 ml/s. Bis etwa 160 s nach Zündung verdampft das zutretende Wasser vollständig, anschließend wird der Versuchsbehälter langsam geflutet. Um wie in dem ersten Experiment den Wasserstand bei Aufgießen der zweiten Schmelze unterhalb der Oberfläche der ersten Schmelze zu halten, wird bei ca. 180 s die zweite Schmelze in dem Reaktionstiegel gezündet. 240 s nach Zündung der ersten Schmelze beginnt der Einguß der zweiten, oxidischen Schmelze. Insgesamt wurden etwa 35 kg Oxidschmelze eingegossen. Aufgrund der Erosion der Austrittsdüse des Reaktionstiegels strömte mehr Schmelze in die Auffangwanne als beabsichtigt, wodurch die eingegossene Schmelzenmasse kleiner war. Dennoch konnte das Versuchsziel erreicht werden. Die Schmelze breitet sich über einen Zeitraum von ca. 5 s über die erste erstarrte Schmelze aus. Mit dem Eingießen setzt sofort ein Sprühregen von Schmelze ein, der die Oxidschmelze fragmentiert, es ereignen sich dabei aber keine Wechselwirkungen. Der Wasserzutritt geht über einen kurzen Zeitraum auf 200 ml/s zurück, steigt dann aber wieder auf den Maximalwert von ca. 220 ml/s an. Die Abströmung in der Schmelze wird also nicht behindert. Die gemessenen Abstichtemperatu-

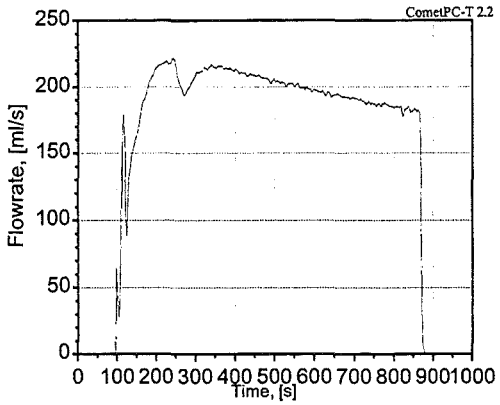


Abb. 26: Wasserzutrittsrate CometPC-T2.2

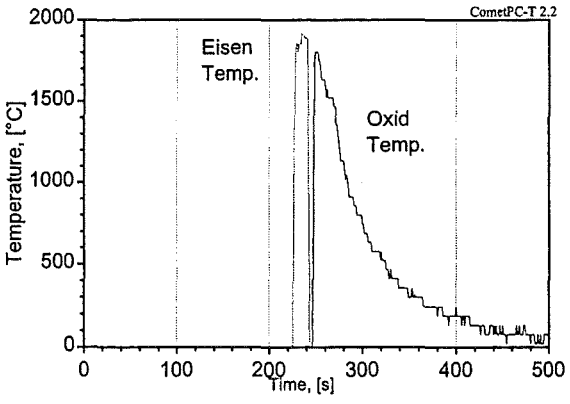


Abb. 27 : Abstichtemperaturen der 2. Schmelze CometPC-T 2.2

ren der zweiten Schmelze zeigen eine gute Übereinstimmung. Die Temperatur der Metallschmelze beträgt ca. 1950 °C und der Oxidschmelze ca. 1850 °C, s. Abb. 27.

Der Tiegelschnitt zeigt, dass die zweite Schmelze über offene Hohlräume der ersten Schmelze fließt und diese nicht zusetzt, s. Abb. 28. Durch die einsetzende Dampf- und Wasserabströmung bleiben die Strömungswege zu jeder Zeit frei, und auch die zweite Schmelze erstarrt mit großen, offenen Hohlräumen. Des weiteren ist aus dem Tiegelschnitt sehr gut zu ersehen, wie sich offene Kanäle in der ersten Schmelze bei dem Wasserzutritt gebildet haben und damit auch Tropfen von Metallschmelze in die Oxidschmelze eingetragen werden. Dieser Mechanismus ist in diesem Experiment ausgeprägter als in dem ersten Experiment ohne die Zwischenschicht aus keramischen Fliesen. Damit werden auch hier die Ergebnisse aus den transienten Voruntersuchungen bestätigt. Die Fliesen werden in die Oxidschmelze eingetragen und aufgelöst. Die Kühlung durch den Wasserzutritt ist aber so effektiv, dass sie z. T. in der Oxidschmelze noch als erstarrte, weiße Bereiche zu erkennen sind, s. Abb. 28.

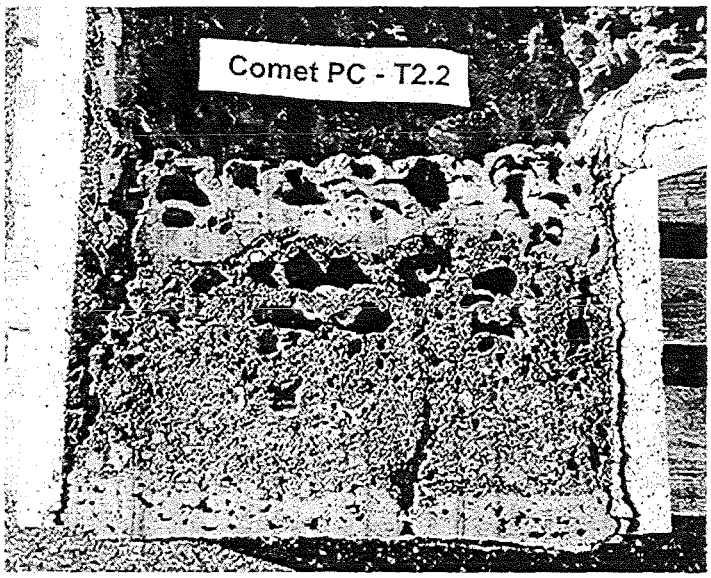


Abb. 28: Tiegelschnitt CometPC-T 2.2

In beiden Experimenten konnten die Schmelzen sicher gekühlt werden. Die Porosität in der ersten Schmelze beträgt für den Metallanteil ca. 10% und für das Oxid etwa 30%. Bei dem Auflaufen der zweiten Schmelze auf die erstarrte erste Schmelze werden ca. 50% als Schmelzensprühregen ausgetragen und erstarren fragmentiert. Die andere Hälfte kann sich über einen Zeitraum von ca. 5 s auf der ersten Schmelze ausbreiten und erstarrt mit großen Hohlräumen. Dabei dringt die zweite Schmelze nicht in Bereiche der ersten Schmelze ein. Abströmkanäle werden durch dieses Aufließen der Schmelze nicht zugesetzt, die Wasserzutrittsrate sinkt zwar anfänglich geringfügig ab, erreicht dann aber wieder den Maximalwert. Es werden keine Wech-

selwirkungen beobachtet. Die Wasserzutrittsrate ist in beiden Experimenten etwa gleich und beträgt bei einem Vordruck von 0.1 bar ca. 1.8 l/m^2s.

Literatur

1 H. Alsmeyer, W. Tromm, The COMET Concept for Cooling Core Melts: Evaluation of the Experimental Studies and Use in the EPR, FZKA 6186, EXV-CSC(99)-D038, Oct. 1999

2 H. Alsmeyer, T. Cron, 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, Ausbreitung und Kühlung von Kernschmelzen: COMET-Konzept, in "Untersuchungen zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen in Leichtwasserreaktoren", 6. Fortschrittsbericht, interner Bericht PSF-Nr. 3318, März 1999, S. 350-373

3 H. Alsmeyer, G. Albrecht, G. Fieg, U. Stegmaier, H. Werle, Simulationstests mit Eisen- und Hochtemperaturschmelzen (Projekte KAJET, KAPOOL, KATS, COMET) in "Maßnahmen zur Beherrschung von Kernschmelze im Sicherheitsbehälter", Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, in press

4 H. Alsmeyer, C. Adelhelm, H. Benz, T. Cron, G. Dillmann, F. Ferderer, W. Tromm, S. Schmidt-Stiefel, H. Schneider, G. Schumacher and T. Wenz, Corium Cooling by Bottom Flooding : Results of the COMET Investigations, OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Karlsruhe Germany, 15 – 18 Nov. 1999

5 H. Alsmeyer, T. Cron, F. Ferderer, W. Tromm, H. Schneider and T. Wenz, CometPC : First Results for a Simplified Cooling Concept Based on Porous Concrete, OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Karlsruhe Germany, 15 –18 Nov. 1999

6 H. Alsmeyer, et al.: Thermischer Angriff durch Kernschmelzen und deren langfristige Kühlung, COMET Konzept, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1997, FZKA 6126, September 1998, S. 229-255

II. Investigations for the EPR-Concept – KAPOOL and KATS Experiments

(G. Engel, B. Eppinger, G. Fieg, S. Schmidt-Stiefel, IKET; C. Messainguiral, N. Prothmann, D. Raupp, W. Schütz, IRS; U. Stegmaier, IMF I; H. Massier, IHM; G. Stern, A. Veser, Fa. Pro-Science)

Abstact

The objective of the KAPOOL and KATS experiments is to investigate basic phenomena in connection with the EPR melt spreading and cooling concept. High-temperature Al_2O_3- and Fe-melts produced by the thermite reaction are used to simulate the oxidic and metallic components of the core melt. Two KAPOOL tests have been performed to study the interaction of the oxidic melt with the release gate which is situated between the cavity and the spreading compartment. These tests have been analyzed with the HEATING-5 code and compared with the experimental results.

With test KATS-17 (spreading onto dry concrete for the oxide melt, spreading onto concrete with 1 mm water level for the metallic melt) the series of two-dimensional spreading experiments has been finished. KATS-15 (2-dim spreading on dry ceramics) has been analyzed with the code CORFLOW.

Zusammenfassung

In den KAPOOL- und KATS-Experimenten werden grundlegende Phänomene des EPR-Konzepts zur Ausbreitung und Kühlung der Kernschmelze untersucht. Die oxidische und metallische Komponente der Kernschmelze werden dabei durch mittels der Thermit-Reaktion erzeugte Al_2O_3- und Fe-Schmelzen simuliert. In zwei KAPOOL-Tests wurde die Wechselwirkung der oxidischen Schmelze mit dem Schmelztor untersucht, das den Ausbreitungsraum von der Kaverne trennt. Diese Experimente wurden mit Hilfe des HEATING-5 Codes analysiert und mit den experimentellen Resultaten verglichen.

Mit KATS-17 (2-dim Ausbreitung der Oxidschmelze auf trockenen Beton, 2-dim Ausbreitung der metallischen Schmelze auf Beton mit einer 1 mm Wasserschicht) wurde die Serie der zwei-dimensionalen Ausbreitungsexperimente abgeschlossen. KATS-15 (2-dim Ausbreitung auf einer trockenen Keramikfläche) wurde mit Hilfe des CORFLOW-Codes analysiert.

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 – 3]. 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 on all sides with a sacrificial concrete of relatively low water content, consisting mainly of Fe_2O_3 and SiO_2. 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 eroded concrete partly 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. This may result in a flipover of the two phases, if gas driven convection allows separation.

The bottom of the cavity consists of a thick (~ 50 cm) layer of sacrificial concrete resting on a 40 mm thick steel plate ("gate"). After meltthrough of the gate, the melt is released on the spreading area (~ 170 m^2). After spreading, the melt is flooded with water from top to extract the stored and the decay heat.

It is important for this concept that the melt spreads pretty homogeneously over the spreading area. To achieve this, it is favorable if the melt is released in a short time (i.e. a fast opening of the gate over a large area) and the melt viscosity is low.

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, succeeding phenomena, i.e. spreading and flooding of the melt have also been investigated [4, 5] (and previous progress reports).

The main goal of the KATS tests [4, 6, 7] (and previous progress reports) is to provide a broad experimental basis of spreading data of oxidic and metallic melts for code verification, especially CORFLOW [8]. In some tests, in addition, flooding of the spread melt has also been studied.

2. KAPOOL EXPERIMENTS

The exothermic thermite reaction $8Al+3Fe_3O_4 \rightarrow 4Al_2O_3+9Fe$ is producing an iron and an alumina melt, each with ~ 50 wt% and with temperatures up to 2400 °C. Thermite charges of 300 kg are ignited in a separate reaction vessel. The goal of the two tests KAPOOL-11 and –12 was to study the interaction of the oxidic phase of the melt with a steel plate simulating the gate at the bottom of the KAPOOL containers.
The KAPOOL containers were designed to keep about 150 kg of oxidic melt. The side walls of the containers consisted of melt-resistant porous Al_2O_3 (Fig. 1). The thickness of the steel plates at the bottom were 25 mm in KAPOOL-11 and 15 mm in KAPOOL-12. The bottom of the steel plate in KAPOOL-12 has additionally been thermally insulated. The steel plates were instrumented with NiCr-Ni thermocouples to determine transient temperatures. Both the reaction crucible and the KAPOOL-containers were equipped with weighing cells to check the amount of the oxide melts. About 30 s after ignition the melt components were separated inside the reaction crucible, after release through the nozzle 150 kg of iron melt and about 25 kg oxidic melt were dumped before the jet of pure oxidic melt was directed into the KAPOOL container. The amount of melt was recorded with the weighing cells. The temperature of the oxide melt was determined in ~ 30 s intervals by dip-in W/Re-thermocouples and the transient temperatures in the steel plate was recorded with transient recorders.
The test parameters and results of these two KAPOOL experiments are summarized in Table 1.

KAPOOL-11

The composition of the thermite powder is shown in Table II. GEMINI calculations [9] performed with the composition of the resulting oxidic melt give a liquidus temperature of 1925±25 ^{0}C. 43 s after ignition of the thermite in the crucible oxidic melt started to pour into the KAPOOL container, about 15 s later 120 kg of oxide melt were gathered, Fig. 2. The distortions of the KAPOOL container mass recordings are due to the insertion of W-Re-thermocouples into the melt pool, the loss of about 20 kg during the test was also due to the vigorous movement of the pool during insertion of the thermocouples. The temperature of the oxide melt pool was initially 1980 °C in the beginning and dropped to about 1900 ^{0}C at 150 s, near the liquidus temperature,

Fig. 3. The temperature recordings of the NiCr-Ni thermocouples in the center of the 25 mm steel plate at three different vertical positions (1 mm from the top contact surface, in the midplane at 12.5 mm, and 1 mm above the bottom surface) are shown in Fig. 4. Within 100 s after first contact of the oxidic melt with the steel plate a maximum temperature of about 600 ^{0}C has been recorded at the top thermocouple. Due to the fact that the outer region of the 200 * 200 mm steel plate has been covered by a ceramic plate (to prevent erosion around the plate), the lateral temperature distribution was not homogeneous. At a radius of 65 mm off the center in the south-west the temperature distribution at the same vertical positions inside the plate as in Fig. 4 are shown in Fig. 5. There the maximum temperature 100 s after first contact was only 400 ^{0}C.

The initial contact temperature between the oxide melt (1980 ^{0}C) and the steel plate (initially at 20 ^{0}C) is 750 ^{0}C, much lower than the solidus temperature of the melt. A solid oxide crust is formed from the very beginning. The thermal contact between the crust and the plate may not be tight, so thermal resistances must be assumed in modelling the problem.

A 1-dim analysis with the HEATING-5 [10] code has been performed to compare with the experimental data at the center of the steel plate. At the top of the oxide pool radiation with an emissivity of = 0.9 has been modelled and the downward radiation from the bottom of the steel plate with =0.35. Several assumption at the contact surface between steel plate and oxide have been done: an ideal one without any thermal resistivity and the formation of a gap in between. Solidification of the melt is modelled in HEATING-5. A comparison with experimental data is done with the top thermocouple readings at the center of the plate, Fig. 6. Under the assumption of a zero thermal resistivity between the crust and the plate the temperature rises very fast to a value of more than 1000 ^{0}C after 100 s. Assuming a gap of 0.5 mm between crust and plate, the resulting temperature transient shows a much lower rise than the experimental one. The influence of the gap size is negligible, it has been varied between 0.5 and 3 mm. The calculation showed the formation of a crust, with increasing thickness at the beginning, later in time decreasing to a certain amount, but not fully vanishing. Post experiment examination of the solidified oxide is underway.

The comparison between calculation and experiment implies the formation of gaps between crust and plate, not allover the surface but only to a certain amount. This fact is consistent with the findings in other similar experiments.

KAPOOL-12

Compared to KAPOOL-11, several experimental parameters have been changed to conduct KAPOOL-12. First of all, the composition of the oxidic melt was changed to obtain a melt with a larger interval between solidus and liquidus temperatures. The 300 kg of thermite powder have been mixed with 90 kg of CaO. By adding calcia to the thermite the melt temperature was reduced substantially compared to the test KAPOOL-11. The liquidus and solidus temperatures of the melt are 1500 °C and 1395 °C resp. according to GEMINI calculations [11] and Data of the Slag Atlas [12].
The thickness of the cylindrical steel plate at the bottom of the KAPOOL-12 container was 15 mm and was tapered off to 3 mm outside where it was covered by a ceramic insulation, Fig. 1. This prevented larger lateral heat losses. In addition, the bottom of the steel plate has been thermally insulated. As in KAPOOL-11 the steel plate has been instrumented with NiCr-Ni thermocouples at five lateral and three vertical positions with NiCr-Ni thermocouples.
130 kg of oxidic melt have been gathered in the container at an initial temperature of 1890 °C, Figs. 2 and 3. Due to strong interaction of the melt with the first W-Re-thermocouple about 40 kg of melt have been ejected out of the container. The experimental procedure was as in KAPOOL-11: The melt temperature was recorded with W-Re- and the temperature transients in the steel plate with the NiCr-Ni-thermocouples. The melt pool temperature fell from initially 1890 °C to 1600 °C within 100 s.
The temperature recordings of the NiCr-Ni thermocouples in the center of the steel plate at three different vertical positions (0 mm from the top contact surface, in the midplane at 7.5 mm, and 0 mm above the bottom surface) are shown in Fig. 4. 100 s after first contact of the oxidic melt with the steel plate a temperature of about 600 °C has been recorded at the top thermocouple. After 600 s the temperature has reached a maximum of about 930 °C.
As in KAPOOL-11, the initial contact temperature between oxide melt and the steel plate is below the solidus temperature of the melt, so a solid oxide crust is formed from the very beginning.

A 1-dim analysis with the HEATING-5 code has been performed for KAPOOL-12 to compare with the experimental data at the center of the steel plate. Again, two different assumption at the contact surface between steel plate and oxide have been done: an ideal one without any thermal resistivity and the formation of a gap in between. A comparison with experimental data is done with the top thermocouple readings at the center of the plate, Fig. 6. Under the assumption of a zero thermal resistivity between the crust and the plate the temperature rises very fast to a value of about 1200 °C after 100 s. Assuming a gap of 0.5 mm between crust and plate, the resulting temperature transient shows a much lower rise than the experimental one. As in KAPOOL-11 the calculation shows a crust growth, later in time the crust has been fully remolten.

The heating-up rate of the steel gate in connection with an oxidic melt may be reduced due to imperfect thermal contact between melt and plate. This reduced heat transfer leads to a more homogeneous heating-up of the gate which, in turn, can be advantageous for an admittedly later, yet more effective large area opening. Furthermore, a reduced heat transfer from the melt to the steel gate is of advantage, if the concrete erosion front is not homogeneous over the gate area.

Analysis of KAPOOL-9

A model is described that satisfactorily reflects the temperature measurements obtained on the well instrumented KAPOOL-9 experiment. An attempt to solve the coupled energy and momentum equation showed that such a full model could probably give correctly the temperature increase rates if the flow characteristics could be known. This should be fitted later on so that the calculated temperature evolution satisfies the measurements. Consequently a full model should have to be run several times in order to select the correct flow characteristics. This was not possible because of the extreme large computing time required by such a model that furthermore needs to solve a melting process. Because of this such a satisfying way of solving the physics of the problem could not be selected and is not applicable for a reactor case. The experiment can be modeled with the energy equation only, where the melt progression into the steel plate can be modeled twofold:

- through removing the molten steel, allowing the hot melt to be in contact with a lower steel plate layer (ablation model)
- through a heat source progression into the steel plate

It was not possible to satisfactory represent the ablation process with the software package we used (FIDAP, though the package allows the simulation of a great variety of configurations), so we chose the second alternative.

We found that the intrusion of the hot melt into the steel plate has to be supposed to begin before the steel plate layer temperature is in the solidus-liquidus range. Allowing the progression to begin when surface temperature is as low as 1000 to 1300 K gives temperature evolution in the steel plate that compares well with the experimental data. This result is to be connected with the mechanical resistance of the steel that drastically decreases in the range 1000-1150K, and with the strong convective movement in the hot melt at least as long as the concrete is in its erosion process (accompanied by an intensive gas release).

For a reactor calculation the plate thickness and the steel material properties should be adapted but the main hypothesis of the model can be kept. In any case it would be interesting to compare the results obtained here on KAPOOL-9, to the ones that an ablation model would give.

3. KATS Experiments

Description of tests performed

Iron and oxide (alumina) melts are generated by a thermite reaction. Generally about 320 kg of thermite powder with an addition of 20 kg quartz sand are ignited in a reaction crucible. After the reaction is completed, the heavier iron melt (~150 kg) is released first through a swivelling pipe into a container from where it flows over a dam onto a 2-dim spreading area. The pipe is then swivelled to direct the lighter oxide melt to a second container and a separate spreading area. With this experimental set-up, the volumetric flow rate for spreading of both melts is limited by the nozzle diameter of the crucible outlet and is in the range between 1 and 2 l/s.

Thermocouples of the types W/Re and NiCr/Ni are installed at several locations on the spreading surfaces. The first is to measure the melt bulk temperature, the latter is to record the arrival time of the spreading front. Several video cameras are installed

to record the spreading process, and an infrared camera measures transient surface temperatures of the spreading oxide melts.

The special characteristics of the EPR oxide melt (admixture of eroded sacrificial concrete) are simulated by adding ~8 wt% SiO_2 to the alumina melt, resulting in a solidus temperature of ~1600°C and a liquidus temperature of ~1925°C. The temperatures of the oxide melt at the onset of spreading were between 1950°C and 2030°C in the tests discussed here. Iron temperatures were in the range of 2150 – 2200°C which is ~600 K above solidification temperature.

With KATS-17 the last test of a series of 2-dim spreading experiments has been performed. The pouring rate was experimentally determined from the weight of the reaction crucible, which is measured by force sensors.

The oxide melt spread onto a dry concrete surface, the iron melt spread onto a concrete surface with a layer of about 1 mm of water at ambient temperature (20 °C).

The spreading result of the 2-dim oxide melt experiment is shown together in Fig. 7. For a better comparison, all 2-dim KATS spreading tests performed so far are shown in these figures.

In KATS-17 the oxide melt spread homogeneously and steadily over an area of ~ 3 m^2 with an average height of 35 mm. There have been vigorous movements of the spreading melt due to gas production from the concrete erosion. The iron melt spread without any energetic melt/water interactions.

In all tests performed so far (1- and 2-dim) the spreading of oxide melts onto inert ceramic as the substrate was better than spreading onto concrete. Spreading on concrete can, at the moment, not be described by CORFLOW, but this would be very important because of its relevance for the EPR.

REFERENCES

[1] H. Alsmeyer et al., "Studies on the Core Melt Retention Concepts for the EPR", Proc. SFEN/KTG Conf. on the EPR Project, Strasbourg, November 1995, p. 204.

[2] H. Alsmeyer et al., "Ex-Vessel Melt Behaviour in the EPR", Proc. SFEN/KTG Conf. on the EPR Project, Cologne, October 1997, p. 161.

[3] M. Fischer, Siemens/KWU, private communication.

[4] H. Alsmeyer et al., "Beherrschung und Kühlung von Kernschmelzen außerhalb des Druckbehälters", FZK Nachrichten 4/97, p. 327.

[5] F. Fellmoser, G. Fieg, H. Massier, H. Werle, "Simulation Experiments on the Corium Melt Behaviour in the EPR Reactor Cavity: KAPOOL-Tests", Annual Meeting on Nuclear Technology, Munich, May 1998.

[6] F. Fellmoser et al., "Simulation Experiments on the Spreading Behaviour of Corium Melts", Annual Meeting on Nuclear Technology, Munich, May 1998.

[7] P. Ehrhard et al., "Spreading of the Core Melt in the Spreading Area of the EPR", ICONE-6, May 1998.

[8] R. Wittmaack, "Numerische Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche und diskreten Phasenübergängen", FZKA 6129 (1998).

[9] S. Schmidt-Stiefel, 1999, private communication.

[10] B. Eppinger, S. Schmidt-Stiefel, 1999, priv. communication

[11] W. Tromm, 1999, priv. communication

[12] Slag Atlas, Edited by the Verein Deutscher Eisenhüttenleute, Verlag Stahleisen m.b.H., Düsseldorf, 1981

Table I Test Parameters for KAPOOL-11 and KAPOOL-12

	KAPOOL-11	KAPOOL-12
Mass of oxide melt (kg)	120	130
Initial temperature (^{0}C)	1980	1890
Thickness of steel gate (mm)	25	15
Size of steel gate	200 mm * 200 mm	200 mm diameter

Table II Thermite Composition and Properties

	KAPOOL-11	KAPOOL-12
Thermite mass (kg)	300	300
CaO additive (kg)	0	90
Oxide mass in container (kg)	120	130
Liquidus temperature (°C)	1925	1500
Solidus temperature (°C)	1575	1395

*) Composition of thermite powder: 25.8 wt% Al, 51.6 wt% Fe, 1.45 wt% Si, 0.8 wt% Cu, 0.35 wt%Mn,19.2 wt% O

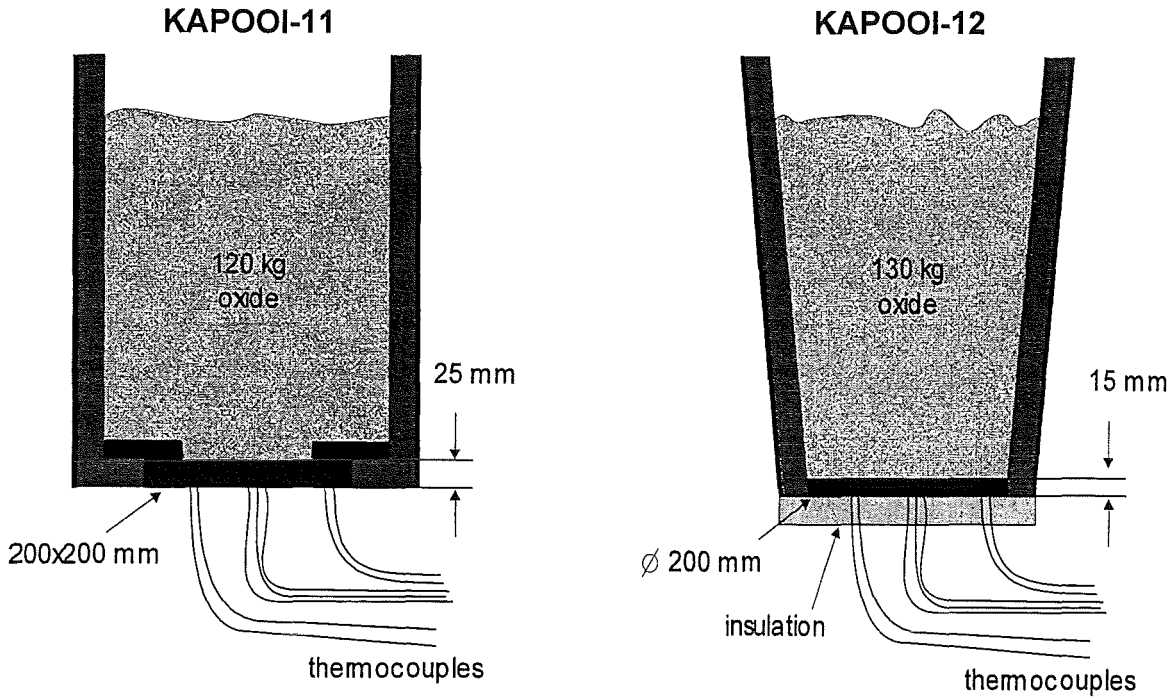


Fig.1: Setup of the KAPOOL-11 and KAPOOL-12 container for gate ablation tests

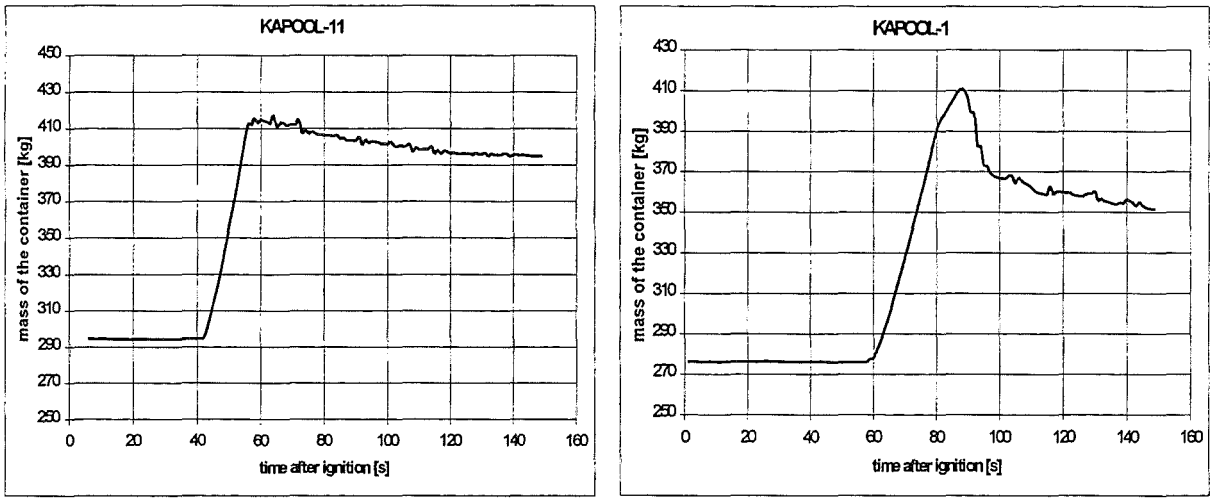


Fig. 2: Masses of the container recorded with weighing cells

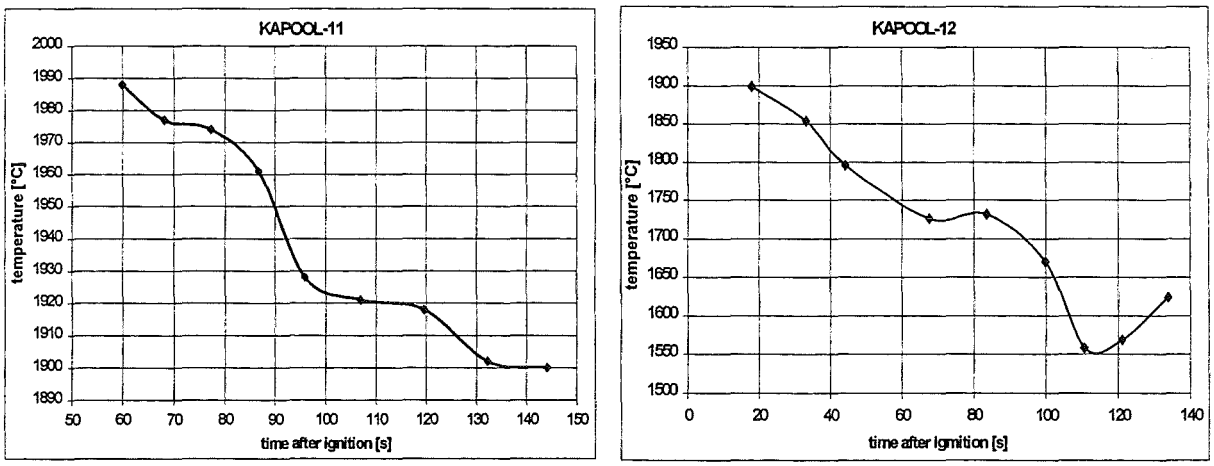


Fig. 3: Temperatures of the oxidic melt recorded with W-Re-thermocouples

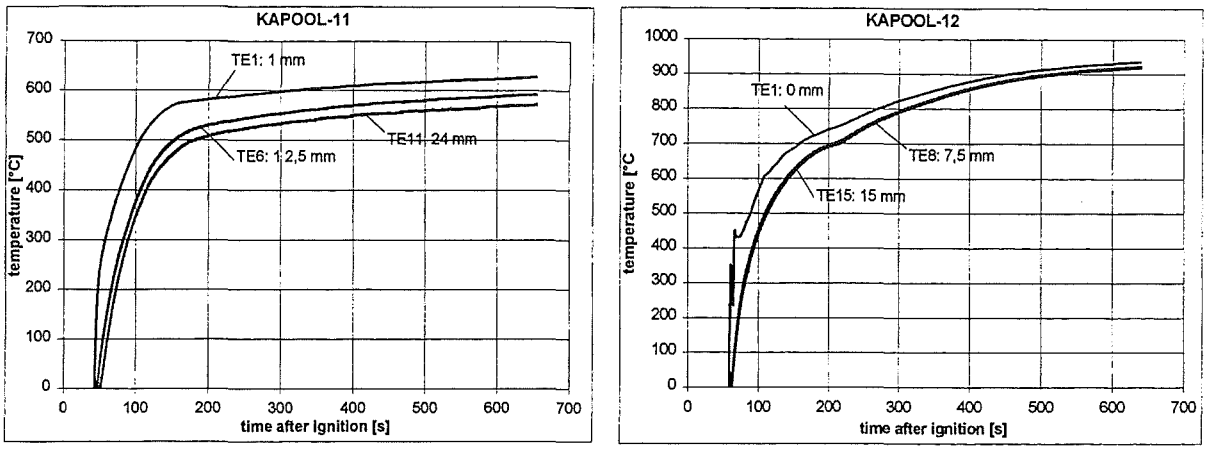


Fig. 4: Transient temperatures at different vertical positions in the center of the steel plate

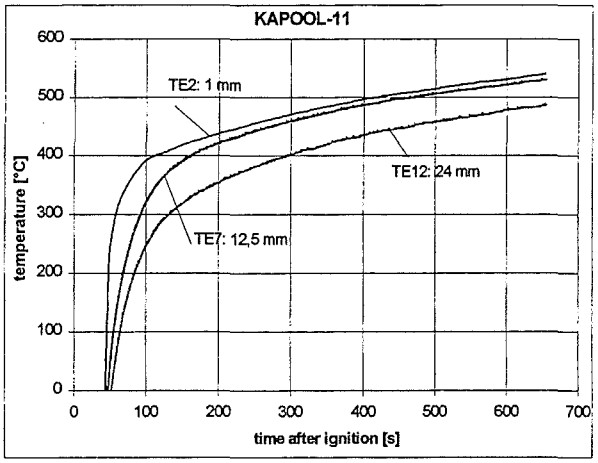


Fig. 5: Transient temperatures at different vertical positions in the south-west of the steel plate

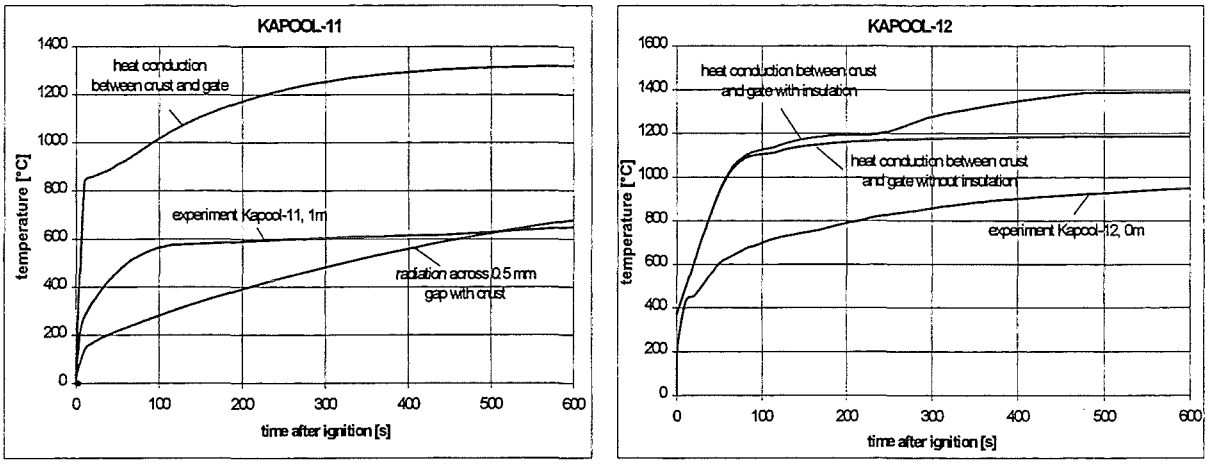


Fig 6: Comparison of the transient temperature in the steel gate in the experiments with Heating5 – calculations

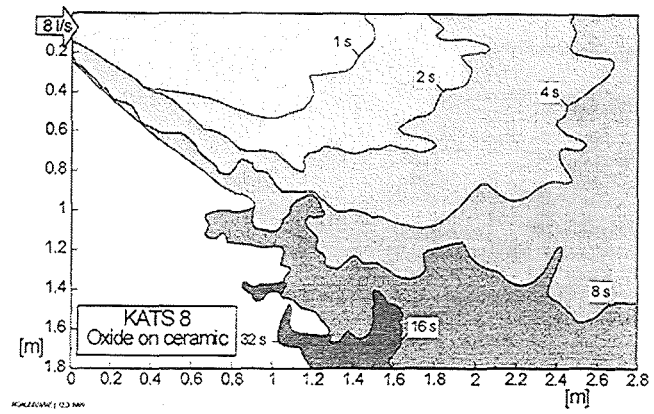
Fig. 7 KATS two-dimensional spreading of oxide melt

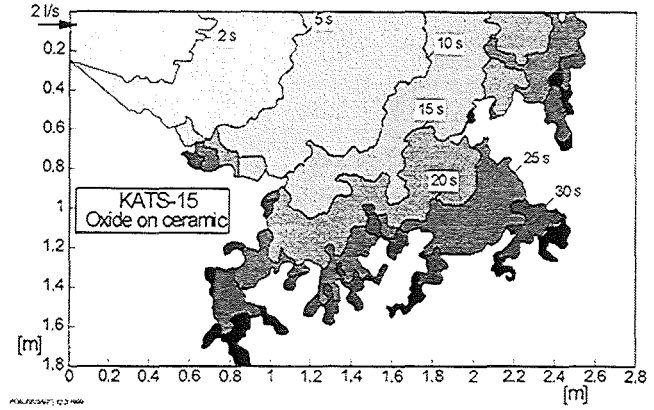
KATS-8	3.9 m²
158 kg	
2100°C	
7.5 – 0 l/s in 16 s	
Ceramic	

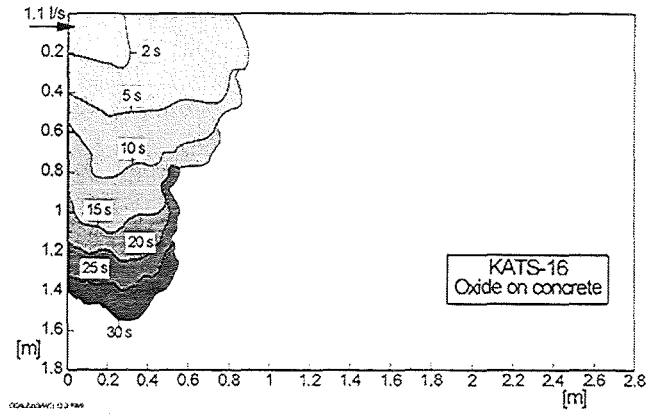
KATS-15	2.5 m²
144 kg	
2030°C	
~2 l/s in 26 s	
Ceramic	

KATS-16	1 m²
129 kg	
1950°C	
~1.4 l/s in 31 s	
Concrete	

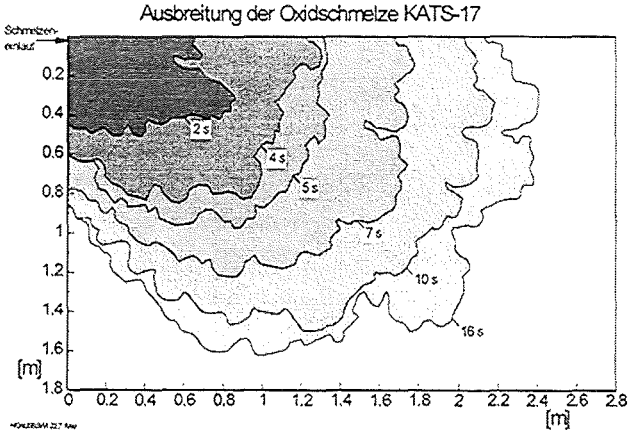
KATS-17	~ 3m²
121 kg	
2150°C	
~3 l/s in 15 s	
Concrete	







Ausbreitung der Oxidschmelze KATS-17



III. Untersuchungen zum EPR-Konzept — KAJET-Versuche

(G. Albrecht, H. Brüggemann, E. Jenes, D. Raupp, W. Schütz, IRS)

Abstract

During a hypothetical core melt accident, the bottom of the reactor pressure vessel (RPV) may be attacked and penetrated by the melt. In case of a localised failure of the RPV, the melt expulsion into the reactor cavity may be as a compact jet for a short period, followed by a dispersed release after gas break-through. The KAJET experiments are related to the short initial phase of a compact jet. The main objective of the experiments is to establish a compact jet under driving pressures up to 2 MPa and to study its interaction with different, substratum materials. The molten corium is simulated by an alumina-iron thermite melt. The gas break-through is avoided by sharply reducing the driving pressure.

In the reporting period, two KAJET experiments (KJ02, KJ03) were performed. In KJ02, about 20 kg each of iron and alumina melt were released through a zirconia nozzle under a driving pressure of up to 0.3 MPa on two separate sample plates of ordinary concrete. Corresponding parameters for KJ03 are 50 kg, 0.5 MPa and (unintendedly) only one plate. Average concrete erosion rates under these conditions were determined.

In co-operation with Ruhr-Universität Bochum, a theoretical interpretation of the experiments is under way as well as the preparation of a scenario analysis. Before discussing the behaviour of a melt jet and its interaction with substratum materials, the starting and boundary conditions at the RPV-breach are important. The time-dependent variables breach diameter, jet velocity and melt volumetric flow were calculated by employing available models. The results were validated by those from SNL experiments. A sensitivity study was carried out for realistic accident scenarios in the Zion nuclear power plant. In this case, the duration of a compact jet until gas break-through occurs is of the order of a few seconds.

Zusammenfassung

Im Verlauf eines hypothetischen Kernschmelzeunfalls kann die Bodenkalotte des Reaktordruckbehälters (RDB) durch die Schmelze angegriffen und in ungünstigen Fällen auch durchschmolzen werden. Bei örtlicher thermischer Ungleichverteilung in der Wärmeübertragung von der Schmelze in das RDB-Wandmaterial ist ein lokales, punktuelles Versagen möglich. Das KAJET-Programm bezieht sich auf die (kurze) Anfangsphase des Schmelzeaustrags, während der möglicherweise ein druckgetriebener kompakter Strahl auftritt. Im Berichtszeitraum wurden zwei KAJET-Erosionsversuche durchgeführt (KJ02, KJ03). In Zusammenarbeit mit der Ruhr-Universtität Bochum werden die Experimente theoretisch interpretiert und die zugrundeliegenden Szenarien analysiert.

1. Einleitung

Im Verlauf eines hypothetischen Kernschmelzeunfalls kann die Bodenkalotte des Reaktordruckbehälters (RDB) durch die Schmelze angegriffen und in ungünstigen Fällen auch durchschmolzen werden. Bei örtlicher thermischer Ungleichverteilung in der Wärmeübertragung von der Schmelze in das RDB-Wandmaterial ist ein lokales, punktuelles Versagen möglich. Abhängig vom Unfallablauf kann zu diesem Zeitpunkt das Primärsystem unter Überdruck stehen, so dass der Schmelzeausstoß durch die RDB-Öffnung in die Reaktorgrube zunächst in Form eines kompakten Strahles erfolgt. Diese anfängliche Phase wird aber nur von sehr kurzer Dauer sein, da sich zum einen die Versagensstelle durch Wechselwirkung mit der Schmelze aufweitet und zum anderen beim Unterschreiten einer kritischen Schmelzepoolhöhe im RDB ein Durchbruch des treibenden Gases einsetzt. Dieser Durchbruch beendet die Phase des kompakten Strahls und führt zu einem dispergierenden Strahl. Die Wechselwirkung des kompakten Strahls mit Auskleidematerialien der Reaktorgrube bewirkt Erosionsprozesse, deren quantitative Erfassung notwendig erscheint. Demgegenüber sind die Auswirkungen des dispergierenden Strahls eher geringfügig.

Das KAJET-Programm bezieht sich auf die (kurze) Anfangsphase des Schmelzeaustrags, während der möglicherweise ein druckgetriebener kompakter Strahl auftritt.

Bei den Experimenten wird ein Schmelzestrahl mit treibendem Druck bis zu 2 MPa erzeugt und – neben der Charakterisierung des Strahls – die Wechselwirkung mit unterschiedlichen Auskleide- und Opfermaterialien untersucht. Die Kernschmelze wird simuliert durch eine Thermitschmelze aus Eisen und Aluminiumoxid. Der Einfluss der metallischen und der oxidischen Phase kann getrennt untersucht werden. Der Gasdurchbruch wird künstlich vermieden durch rasche Reduktion des Treibdrucks am Ende des Schmelzeaustrags. In den vorausgegangenen Versuchen zur Untersuchung des Strahlverhaltens (VJ01-VJ07 und KJ01) wurde die für die anschließenden Erosionsversuche zu verwendende Düsengeometrie bestimmt (Zirkonoxid, Austrittsdurchmesser 12 mm, Düsenwinkel 90 °, Auslaufstreckenlänge 25 mm).

Mit dieser Geometrie konnten von 0-1,5 MPa sowohl mit der Eisenschmelze als auch der oxidischen Schmelze kompakte Strahle erzeugt werden. Im Berichtszeitraum wurden zwei Erosionsversuche durchgeführt (KJ02, KJ03). Als Probenmaterial wurde hierbei zunächst normaler Konstruktionsbeton verwendet. Die eingesetzten Schmelzemassen betrugen bis zu 56 kg Metall bzw. Oxid, der Treibdruck war maximal 0,5 MPa.

In Zusammenarbeit mit der Ruhr-Universität Bochum werden die Experimente theoretisch interpretiert, die zugrundeliegenden Szenarien analysiert und die Extrapolation auf Reaktorbedingungen vorbereitet. Dazu soll auch ein Rechencode auf der Basis vorhandener Modelle erstellt werden. Für realistische Szenarien, bezogen auf die US-amerikanische Zion-Anlage, welche von vornherein Durchführungen im Bodenbereich aufweist, wurde bereits eine Sensitivitätsstudie /1/ durchgeführt, aus der sich Aussagen über die Aufweitung der Bruchstelle und über die Zeitdauer des kompakten Strahls bis zum Gasdurchbruch ableiten lassen. Danach liegt die Dauer des kompakten Strahls im Bereich weniger Sekunden.

2. Erosionsversuche

Die Versuchsbedingungen sind in Tabelle 1 aufgelistet. Bild 1 dient zur Erklärung des Versuchsablaufes. Durch eine Thermitreaktion im Schmelzengenerator entstehen zwei Schmelzephasen, Fe und Al_2O_3. Wegen der höheren Dichte sammelt sich die Eisenschmelze im unteren Teil des Generators an, die oxidische Schmelze sammelt sich über dem Eisen, dadurch ist die Austrittsreihenfolge physikalisch vorgegeben. Unter

dem Generator ist eine drehbare Probentrommel angebracht, auf der zwei Betonproben rechtwinklig zueinander angeordnet sind. Die Schmelze tritt unter Druck aus, trifft nach 270 mm Fallstrecke auf den ersten Probekörper und erodiert diesen. Kurz vor dem berechneten Austrittsende der Eisenphase, wird die Probentrommel um 90° gedreht und somit die zweite Probe in den Strahlbereich gefahren. In der Zwischenzeit hat der Austritt der oxidischen Schmelze begonnen, die nun die zweite Probe beaufschlagt.

Beide Probekörper sind mit Thermoelementen instrumentiert, um eine zeitliche Zuordnung der Erosion zu ermöglichen. In beiden Versuchen wurden 100 mm dicke Probekörper aus Standardbeton eingesetzt. Zement (PZ CEM I 32,5), Kies (Korngrößen 0/32) und Wasser wurden im Massenverhältnis 1 : 5,5 : 0,4 gemischt. Jede Probe war mit 25 Thermoelementen (NiCr-Ni) instrumentiert, die in fünf horizontal angeordneten Gruppen im Abstand von 5-25 mm (KJ02) bzw. 5-60 mm (KJ03) unter der Auftreffoberfläche angeordnet waren. Jeweils vier TE-Gruppen waren im Abstand von 15 mm konzentrisch um eine Gruppe im Zentrum angeordnet, dem wahrscheinlichen Auftreffpunkt des Schmelzestrahls (siehe auch Skizze im Diagramm, Bild 5). Für die Aufzeichnung des Strahlaustritts und des Auftreffverhaltens wurde eine CCD-Kamera im Versuchsbehälter installiert, die jedoch gleich bei Versuchsbeginn durch auftreffende Schmelze zerstört wurde.

3. Ergebnisse

Bild 2 zeigt die Schnitte durch die Probekörper nach dem Versuch KJ02. Auf der Schnittfläche sind drei Thermoelementgruppen sichtbar. Da der metallische Schmelzestrahl nicht genau in der Mitte der Probe auftraf, liegt der zylindrische Erosionskanal ca. 15 mm außerhalb des Zentrums. Die Erosionstiefe beträgt 25 mm, der Durchmesser 55 mm. Der Schnitt in der vom Oxid erodierten Probe zeigt nicht die maximale Erosionstiefe von 15 mm. Der Erosionsdurchmesser (70 mm) ist größer, die Erosionstiefe (15 mm) geringer als beim Eisen. Das erodierte Volumen war mit 40 ml (Eisen) und 45 ml (Oxid) in beiden Fällen nahezu gleich, siehe auch Tabelle 1. Alle Flächen, die mit der Schmelze in Berührung kamen, hatten eine ca. 1 mm dicke oxidische Kruste. Beim Versuch KJ03 versagte die Probendreheinrichtung, wodurch beide Schmelzenkomponenten die erste Probe beaufschlagten. Der Schnitt in Bild 3 zeigt den

zylindrischen Erosionskanal mit 90 mm Durchmesser und 85 mm Tiefe. Vergleicht man die erodierten Volumina in Tabelle 1, so ist im Vergleich zu KJ02 eine viermal größere Erosion zu erkennen. Gründe hierfür sind zum einen die größere Schmelzenmenge, die Beaufschlagung durch beide Schmelzen und der größere treibende Druck. Bild 4 zeigt die Temperaturen, die nahe dem Erosionszentrum gemessen wurden. Die ansteigenden Temperaturen zeigen die Annäherung der Schmelze an das Thermoelement, der steile Anstieg den Kontakt mit der Schmelze. Der Moment der Zerstörung der Thermoelemente ist verwendet worden, um die tatsächliche Tiefe der Erosion als Funktion der Zeit darzustellen (Bild 5). Die in KJ02 und KJ03 ermittelten maximalen vertikalen Erosionsraten sind beim Eisen (11 und 15 mm/s) größer als beim Oxid (7,5 und 4,2 mm/s). Bei diesem Resultat muss die unterschiedliche Schmelzentemperatur und die niedrigere Druckanstiegsrate zu Beginn von KJ03 berücksichtigt werden. Die geringere Schmelzentemperatur bei KJ03 wird auf die Menge der erschmolzenen Tiegelauskleidung zurückgeführt. Dies wurde in reaktionskinetischen Berechnungen bestätigt.

4. Theoretische Begleitung

In Zusammenarbeit mit der Ruhr-Universität Bochum werden die Experimente modelltheoretisch interpretiert. Dies schließt auch eine Erfassung der Unfallszenarien ein sowie Untersuchungen zur Übertragbarkeit auf Reaktorbedingungen. Die Arbeiten im Berichtszeitraum bezogen sich hauptsächlich auf die Randbedingungen beim Strahlausstoß aus Druckbehältern /1/.

Für die Betrachtung des Strahlverhaltens und der Wechselwirkung des Schmelzestrahls mit den Strukturen der Reaktorgrube ist die Kenntnis der Anfangs- und Randbedingungen am Strahlaustritt von Bedeutung. Zur Berechnung der zeitabhängigen Größen Bruchstellendurchmesser, Strahlgeschwindigkeit und Schmelzevolumenstrom wurden in der Literatur verfügbare Modellansätze verwendet. Rechenergebnisse wurden anhand von Messungen zu den am Sandia National Laboratory (USA) durchgeführten Experimenten HIPS-2C, DCH-1 und IET-3 mit Geometrie des Druckwasserreaktors Zion validiert.

Weiterhin wurde eine Sensitivitätsanalyse, bei der pro Berechnung jeweils ein Einflussparameter verändert wurde, für realistische Unfallszenarien mit Bezug auf die bereits in den vorgenannten Experimenten betrachtete amerikanische Anlage Zion durchgeführt. Der Enddurchmesser der RDB-Bruchstelle ist dabei durchaus abhängig von der Variation einzelner Parameter, wobei hier jedoch kein signifikant herausragender Einfluss einzelner Größen hervorzuheben ist.

Die Zeit bis zum Erreichen der kritischen Schmelzepoolhöhe, d. h. des Gasdurchbruches und dem Ende des kompakten Strahles, wurde unter Variation des anfänglichen Treibdruckes näherungsweise berechnet. Es ergaben sich Werte von etwa 1 s bei 8 MPa und 6,8 s bei 0,4 MPa.

Bezüglich der Erosion des Bodenmaterials durch den Strahl wurde die Erstellung eines Computercodes begonnen /2/.

Referenzen

/1/ T. Büscher, Ch. Kortz, M. K. Koch, H. Unger. Randbedingungen zum Strahlausstoß aus Druckbehältern. 3. Fachbericht zum Projekt RUB-E-I-248. Lehrstuhl für Nukleare und Neue Energiesysteme, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 1999.

/2/ M. K. Koch. Persönliche Information. Lehrstuhl für Nukleare und Neue Energiesysteme, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 1999.

	KJ02 Eisen / Oxid	KJ03 Eisen / Oxid
Eingesetzte Schmelzenmasse (kg)	18,8 / 21,2	52,7 / 59,3
Austrittsdurchmesser (mm)	12	12
Austrittsdauer (s)	3,6 / 6,3	6 / 7
Temperatur des Schmelzestrahls (°C)[1)]	2100	1850
Max. treibender Druck (MPa)	0,3	0,5
Strahlgeschwindigkeit (errechnet) (m/s)	7,7 / 11,5	8,8 / 14,1
Horizontale Ausbreitung der Erosion (mm x mm)	65 x 50 / 55 x 70	90 x 90
Erosionstiefe (mm)	25 / 15	85
Erodiertes Volumen (ml)	45 / 40	350
Mittlere vertikale Erosionsrate (mm/s)	8,9 / 4,5	8,3

[1)] Mit Pyrometer gemessen

Tabelle 1. Bedingungen und Ergebnisse der Versuche KJ02 und KJ03

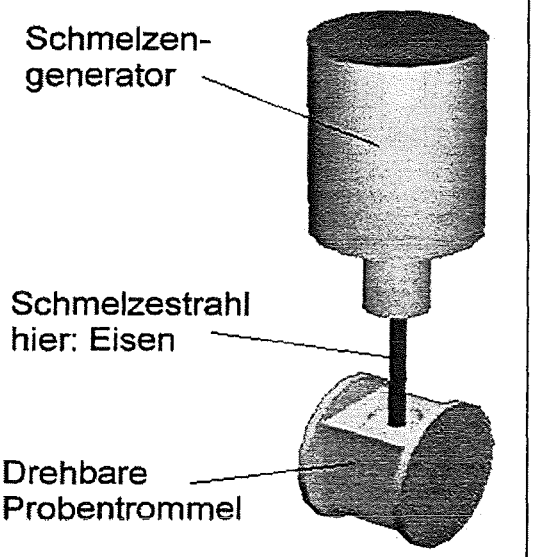
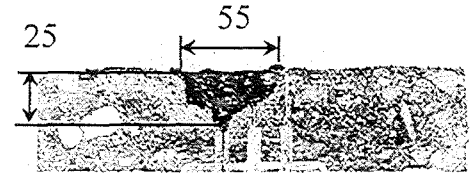
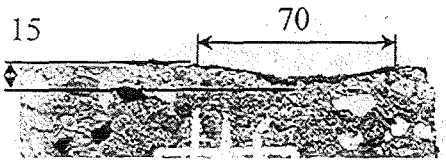


Bild 1. Schema der Versuchsanlage



(a) Eisen



(b) Oxid

Bild 2. KJ02, Schnitte durch die Probekörper

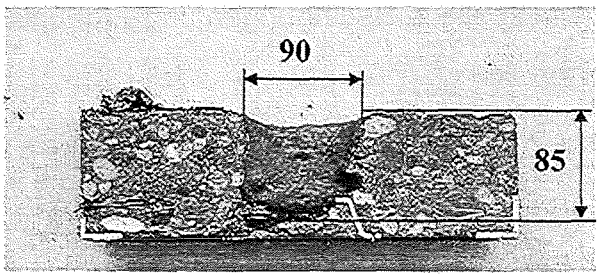


Bild 3. KJ02, Schnitt durch den Probekörper. Erosion durch Eisen- und Oxidstrahl auf einen Probekörper

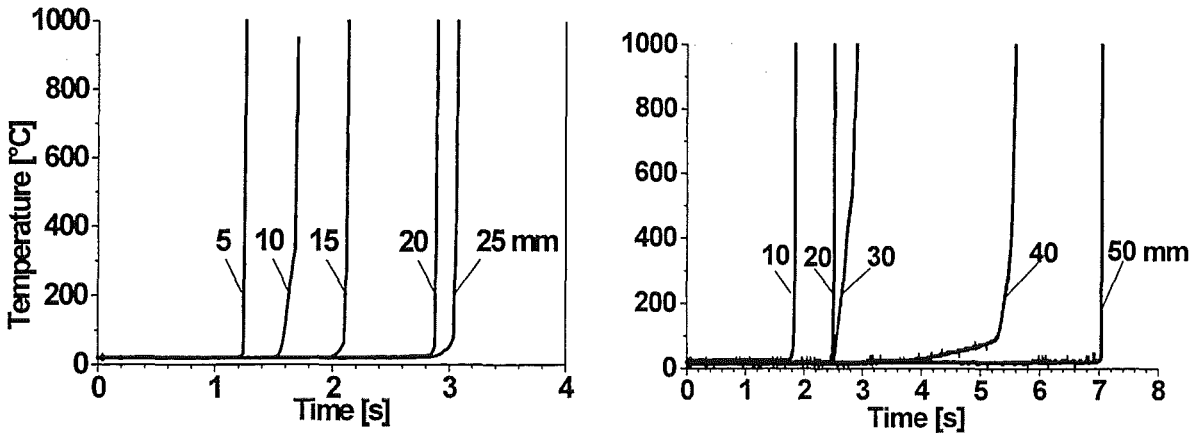


Bild 4. Signale der Thermoelemente in der Nähe der max. Erosion. Parameter ist der Abstand unter der Auftreffoberfläche

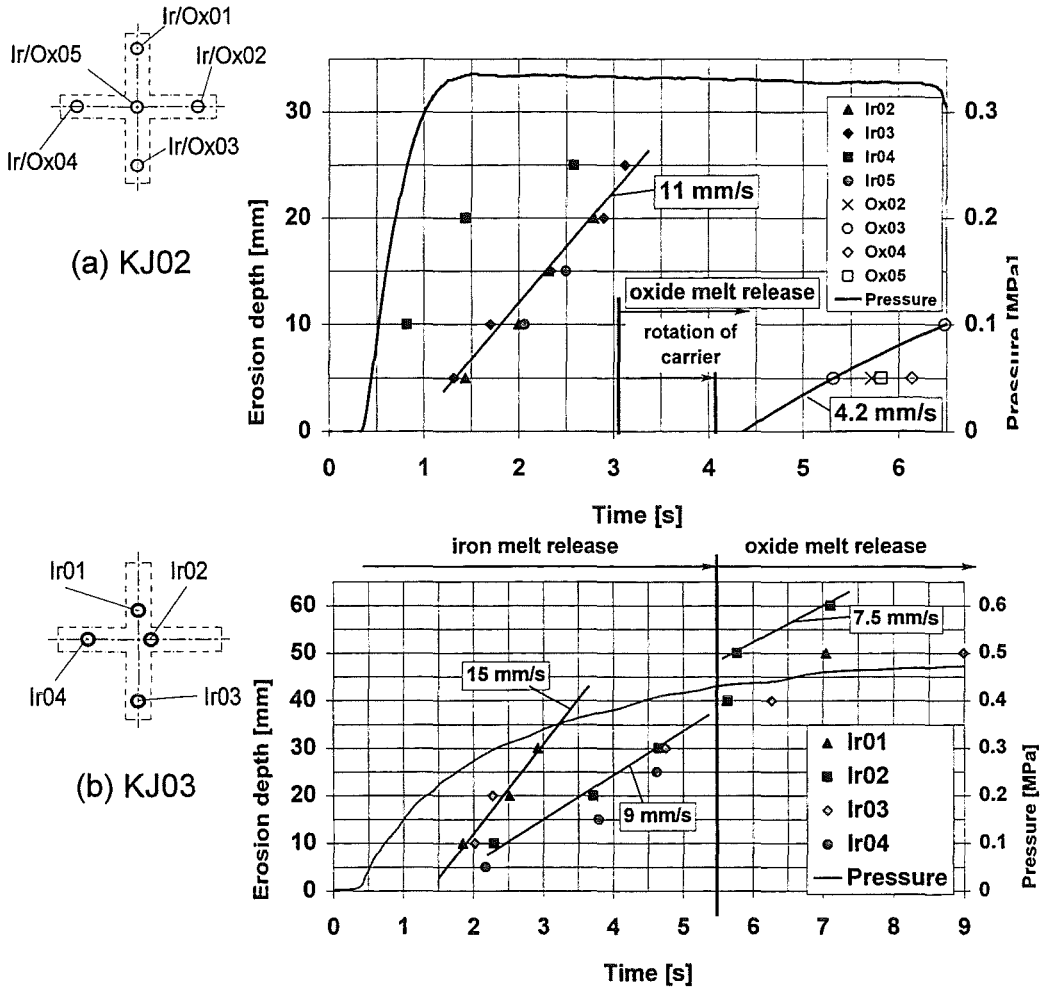


Bild 5. Aus den Thermoelementsignalen ermittelte Erosionsraten

IV. Nachrechnung des KATS15-Experiments mit CORFLOW

(A. Veser, Fa. Pro-Science, J.J. Foit, IKET)

1. Einleitung

Das Konzept des EPR (European Pressurized Water Reactor) basiert auf einer ausreichend homogenen Ausbreitung der Kernschmelze, um deren Kühlung durch ein passiv ausgelöstes Fluten mit Wasser zu gewährleisten. Die Bedingungen, unter denen eine solche Ausbreitung zu erwarten ist, sind Gegenstand theoretischer als auch experimenteller Untersuchungen. In einer Serie von Experimenten wurde die Ausbreitung von Schmelzen mit hoher Temperatur auf ebenen Flächen untersucht. Dabei wurde als Simulationsmaterial eine Thermitschmelze aus Aluminiumoxid und Eisen verwendet. Die oxidischen und metallischen Komponenten werden dabei getrennt und auf verschiedene Ausbreitungsflächen geleitet.
Das CORFLOW- Rechenprogramm [1] behandelt dreidimensionale Strömungen mit einer freien Oberfläche. Der Einfluß der Kühlung auf die Ausbreitung wird durch eine temperaturabhängige Viskosität beschrieben. Der Anstieg der Viskosität in der thermischen Grenzschicht, die sich in der Schmelze ausbildet, kann zum Anhalten der Ausbreitungsfront führen. Zahlreiche Verbesserungen, die in CORFLOW durchgeführt wurden, ermöglichen eine Analyse der 3-dim KATS-Experimente. Ergebnisse der Nachrechnungen des KATS15 Experiments werden im folgenden Abschnitt dargestellt.

2. Analyse des KATS15-Experimentes

Im KATS15–Experiment [2] wurden 144 kg oxidischer Schmelze, deren Zusammensetzung aus 85 Gew.% Al_2O_3, 10 Gew.% SiO_2 und 5 Gew.% FeO bestand, auf einer Fläche mit einer Länge von 2.80 m und einer Breite von 1.80 m ausgebreitet. Die Ausbreitung der überhitzten Schmelze, deren Anfangstemperatur 2303K betrug, wurde 26 s lang durch einen konstanten Volumenstrom von 1.9×10^{-3} m^3/s getrieben. Das Ende des komplexen Frontfortschritts wurde nach 42 s beobachtet.
Abb.1 zeigt einen vereinfachten geometrischen Aufbau des Experiments mit einer Diskretisierung, die für die CORFLOW-Simulation verwendet wurde. Die Höhenverteilung der Schmelze nach dem Stillstand der Front, der in der Simulation nach

36 s erfolgte, ist in Abb.2 dargestellt. CORFLOW liefert eine gleichmäßige Dicke der Schmelze von 2,5 cm, die lediglich in den Randzonen etwas abfällt. Im Experiment hingegen beobachtet man eine inhomogene Verteilung der Schmelze. Im mittleren Bereich entstand eine Insel mit einer Dicke von mehr als 4 cm. Zum Rand hin, der eine starke Zerklüftung aufweist, fällt die Dicke unter 2 cm ab.

In Abb.3 sind die zeitlichen Verläufe der Schmelzefront abgebildet. Im Experiment verteilte sich die Schmelze in einem Gebiet mit einem Öffnungswinkel von 45°. In der Simulation jedoch bedeckte die Schmelze einen Bereich, der einen Winkel von 90° besitzt. Eine sinnvolle Größe, die bei der unterschiedlichen Form der Ausbreitungsfronten im Experiment und in der CORFLOW-Simulation verglichen werden kann, ist die von der Schmelze bedeckte Fläche (Abb.4), die in der Rechnung etwas überschätzt wird. Die bedeckten Flächen, die sich aus Lösungen für eine isotherme Ausbreitung in einem Kreisausschnitt mit einem Winkel von 45° bzw. 90° ergeben [3], sind ebenfalls in Abb.4 dargestellt. Eine Validierung von CORFLOW anhand dieser Lösungen wird durchgeführt.

Literatur

[1] Wittmaack, R.: Nuclear Technology 119, 158 (1997)

[2] Fieg et al.: private Mitteilung

[3] Foit, J.J; Tromm, W.: Analysis of FARO Spreading Eexperiments, 7. Fortschrittsbericht

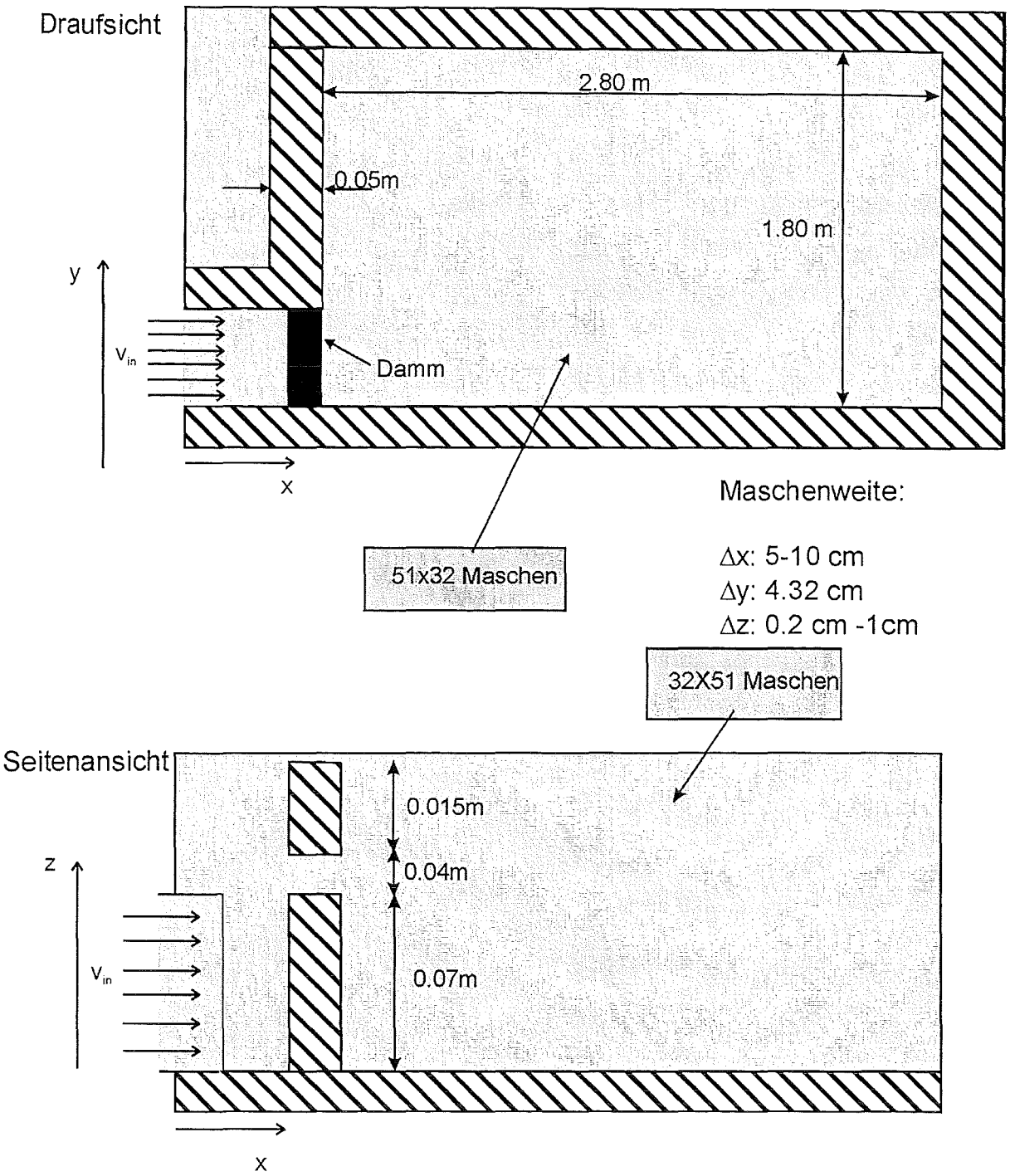
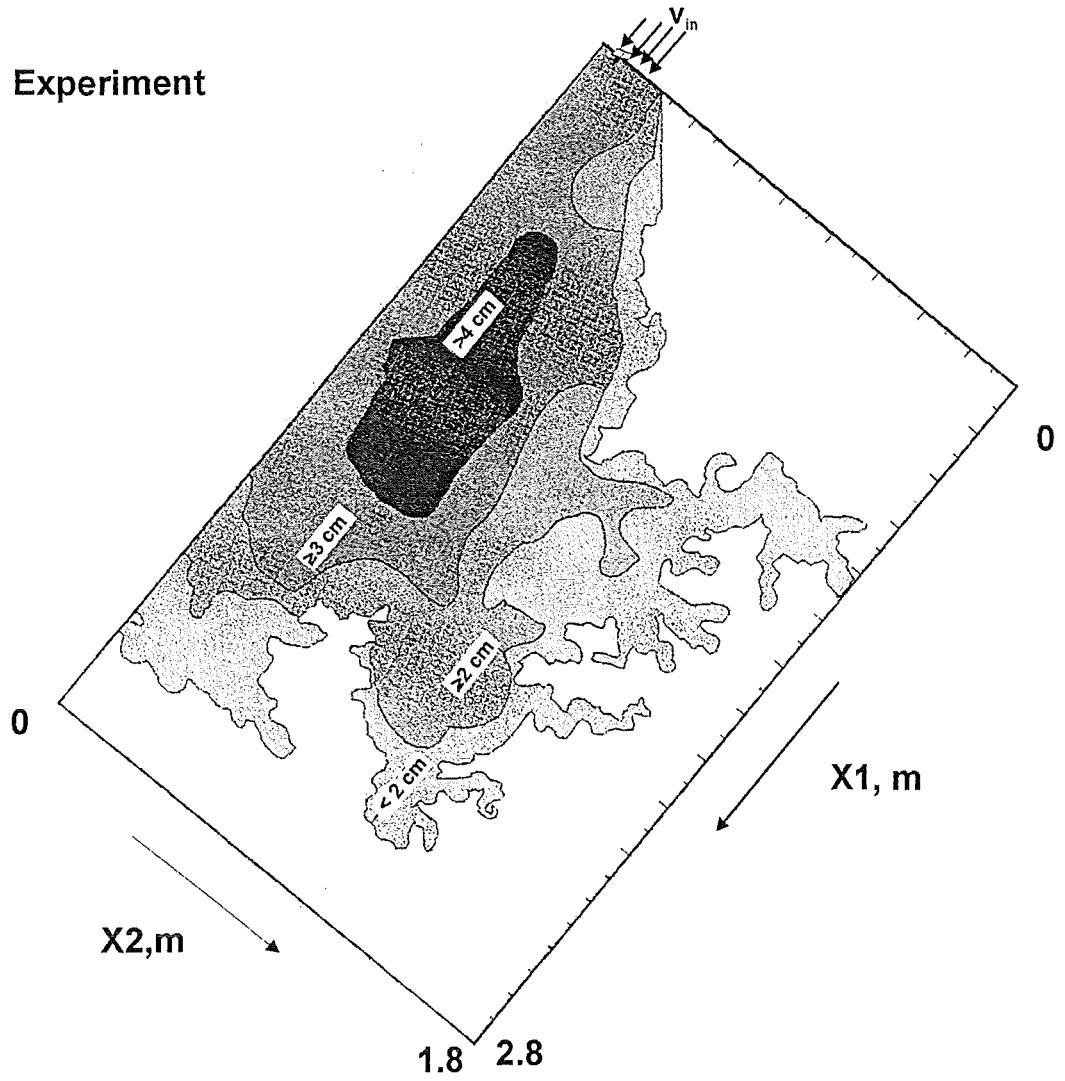


Abb.1: Kats15-Geometrie



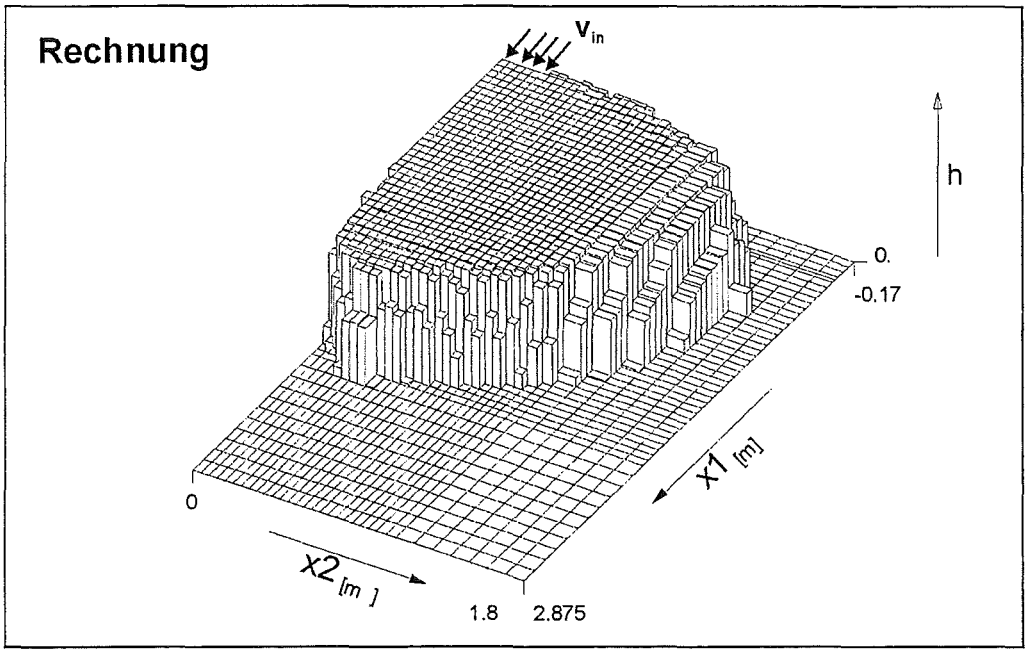


Abb.2: Höhenverteilung der Oxidschmelze am Ende der Ausbreitung

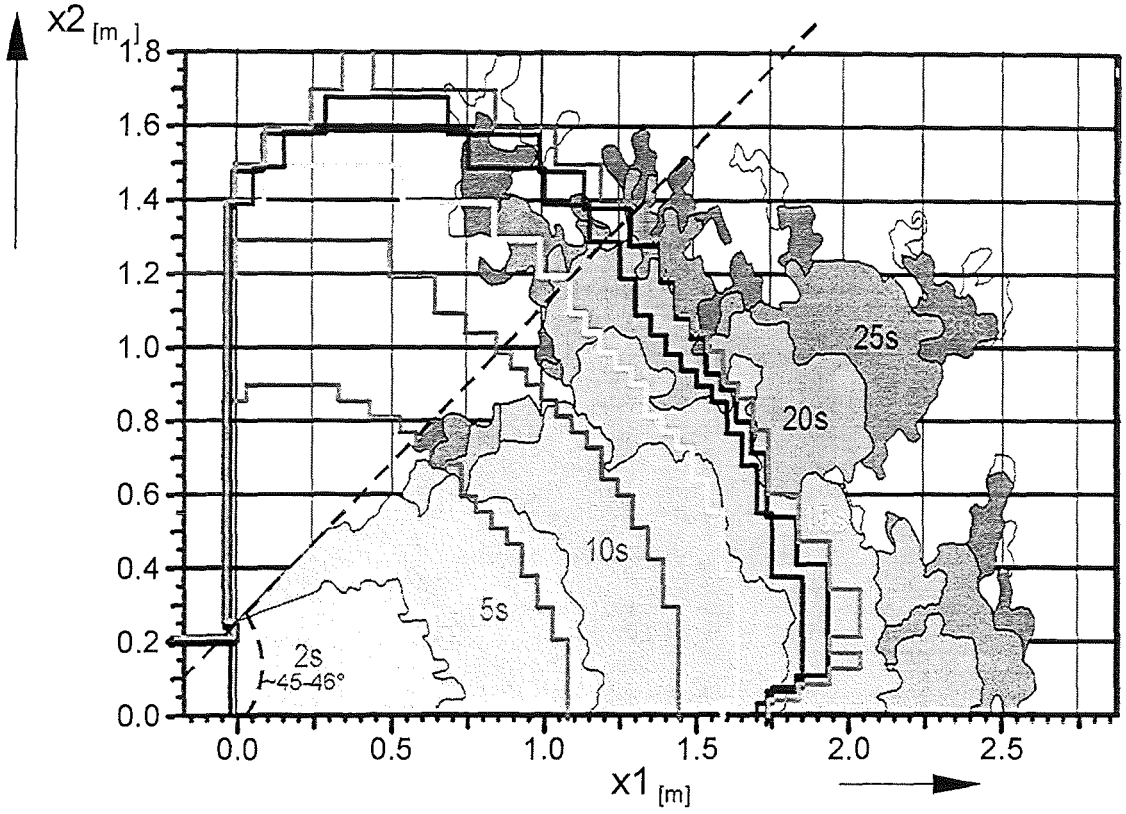


Abb.3: Entwicklung der Front im Experiment und Simulation

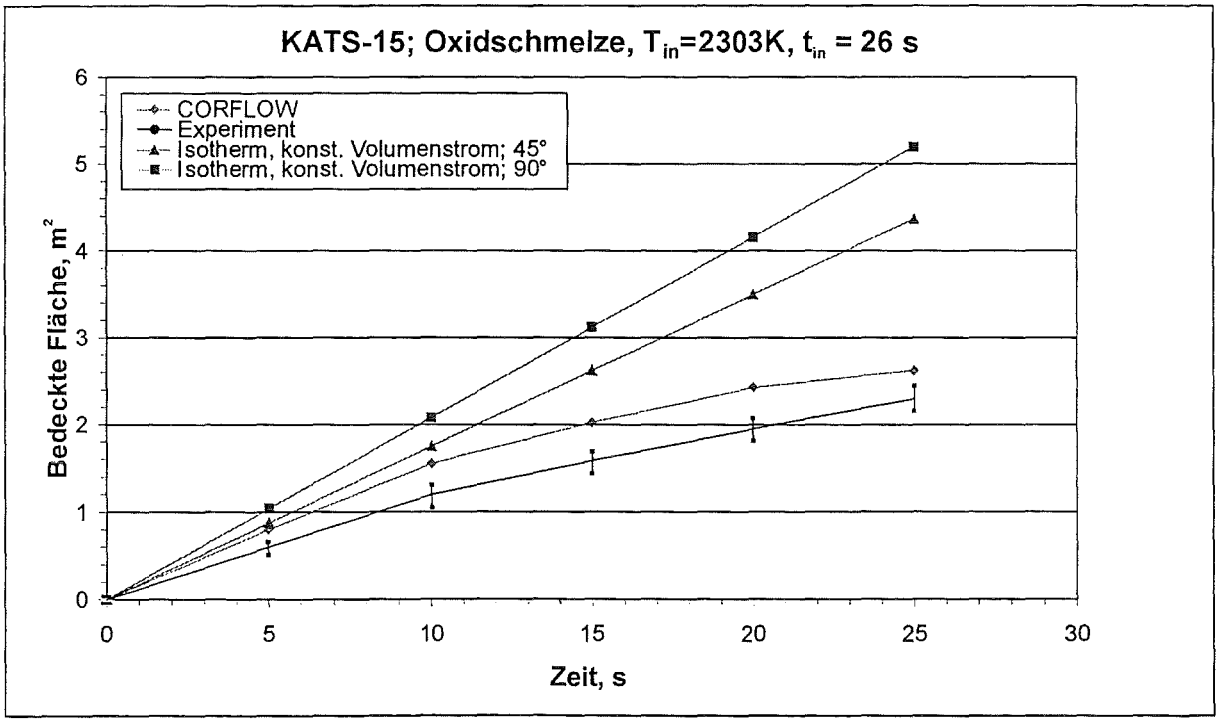


Abb.4 : Die von der Schmelze bedeckte Fläche als Funktion der Zeit

V. Analysis of FARO Spreading Experiments

(J.J. Foit, W. Tromm, IKET)

Zusammenfassung

Zwei Ausbreitungsexperimente mit einer UO_2/ZrO_2 Schmelze in einem Verhältnis von 80/20 Gew.% wurden in der FARO-Anlage durchgeführt. 100 kg Schmelze mit einer hohen Anfangstemperatur wurden mit einem konstanten Volumenstrom von 2 l/s auf eine Stahlplatte, die die Form eines Kreisausschnittes mit einem Winkel von 17° hatte, geleitet. Beim zweiten Experiment befand sich eine 10 mm dicke Wasserschicht auf der Ausbreitungsebene.

Lösungen, die eine isotherme Ausbreitung in einem Sektor beschreiben, werden verwendet, um das Experiment zu analysieren und die Diskrepanzen zwischen den Rechenergebnissen von CORFLOW und THEMA und den experimentellen Befunden zu erklären. Die beobachtete Ausbreitung kann nur dann erklärt werden, wenn angenommen wird, daß die Anfangstemperatur der Schmelze unter der Liquidustemperatur liegt und ungefähr 120 K niedriger ist als die mit Hilfe von UTS-Sensoren ermittelte.

Abstract

Two spreading experiments were performed at the FARO facility with prototypical core melts of a UO_2/ZrO_2 weight percentage of 80/20. The objective was to obtain data on the spreading at flow rates of about 2 l/s of more than 100 kg prototypic high temperature oxide melt on a dry and wet stainless steel plate. For the second spreading test a shallow water layer of 10 mm was added on the substrate.

Solutions for an isothermal spreading with a constant volume flux boundary condition in a sector with an angle φ are used to analyse the FARO L-32S experiment and to identify the source of discrepancies between the code results (THEMA, CORFLOW) and the experimental findings. The observed spreading behaviour of both FARO experiments can only be explained if an initial melt temperature below the liquidus temperature, i. e. about 120K lower than the temperature measured by the UTS sensors is assumed.

1. Introduction

In the FARO furnace the melt is generated by direct heating of a compacted granulate between two electrodes. The solidus-liquidus temperature range of the used melt was calculated by GEMINI2. The temperature range is 50 K. In Figure 1 the solid fraction between the immobilisation temperature (defined as the temperature at which the melt is unmoveable) and the liquidus temperature is given with the related viscosity calculated by the Stedman correlation /1/. Table 1 shows the melt properties at liquidus temperature.

property	symbol	value
Initial temperature (measured by UTS)	T_i	3000 K
Liquidus temperature	T_L	2907 K
Solidus temperature	T_S	2860 K
Density	ρ	8.0 10^3 kg/m^3
Surface tension	σ	0.5 N/m
Heat conductivity	λ	3 W/mK
Heat capacity	c_p	0.5 kJ/kgK
Dynamic viscosity	μ	0.005 Pas
Initial channel width	wi	0.15 m
channel width at 0.8 m	$w_{0.8}$	0.39 m

Table 1: Melt properties of the FARO melt at liquidus temperature for L-32S test

2. FARO L-32S experiment

The spreading plate of stainless steel located in a vessel is shown in Figure 2. It consists of the collecting device, in which the melt was poured from the release vessel by gravity, and the spreading area forming a circular sector of 17°. A barrier of 4 cm in height divided the collecting device from the spreading area. The principal quantities measured during the corium spreading were melt mass and temperature as well as substrate and ambient temperatures. 6 video cameras and one infrared camera filmed the test.

In the following, the main experimental results are reported. 128 kg melt was released to the test section. Initially, some melt splashes started to spread over the bar-

rier, i.e. location 0 cm at the spreading compartment. At 0.7 s this first melt had flown 25 cm on the spreading plate. But this melt spread was only a first streamlet of a small melt amount. At 2 s a second broad melt flow started. At 4 s the melt had spread to a distance of 50 cm on the plate. Then, the melt stopped due to crust formation. For the right part of the melt, this was the final spreading position. At 4.5 s and a distance of 40 cm from the barrier, i.e. 10 cm behind the leading edge, the crusts started to break up at the left side, which led to a third spreading. This inhomogeneous spreading stopped at 75 cm at time 5.9 s. The crust broke up again at the right side of the left part of the melt and led to a more homogeneous melt front at 7.5 s with a distance of 70 cm. At 13.5 s two small melt tongues started to spread very slowly up to 82 cm at about 28.5 s. Not taking into account the first melt splash, the first spreading process at 2 s had a velocity of 25 cm/s. The second current at 4.5 s resulted in the same spreading velocity of 25 cm/s. The melt flowed up to 75 cm which was practically the final spreading stage. The overall spreading velocity could be determined to about 13 cm/s.

During melt spreading the water layer started to evaporate at the leading edge of the melt, and accordingly, the melt formed at the front small pillows. But the most part of the water was pushed forward and could flow over a dam at 1800 mm on the spreading plate. No melt water interactions were observed. Post test examinations showed that 100 kg melt solidified on the spreading plate and 28 kg in the collecting device. The flow from the release vessel to the test section was observed to be nearly constant 18.3 kg/s or 2.3 l/s.

The temperatures in the release vessel and the collecting device were measured by UTS sensors (Figure 3). The average measured temperatures were 3030 K in the release vessel and 3000 K in the collecting device, respectively. The melt was therefore about 90 K superheated at onset of spreading. A few seconds later, the temperature measured by the infrared camera on the surface of the melt was about 2850 K and crust formation started. The temperatures of the substrate surface did not exceed 1200 K. At about 150–200 s water started to flow backwards due to plate distortion, which was confirmed by displacement transducers. Some temperatures measured plane at the surface remained on 373 K for more than 100 s. These thermocouples were located close to the final spreading length, where water still could

flow to. The maximum height of 14.5 cm (including the barrier) of the solidified melt was achieved at the inlet. The height at the final spreading length was in between 1 and 3 cm. The post test analysis showed that small caverns had been formed between the melt and the substrate close to the final spreading length. But no influence of the small water layer on this behaviour could be detected, because also in the dry spreading test small gaps were observed.

3. Theoretical considerations

The performed numerical simulations of the FARO experiments led to pronounced discrepancies between theory and experimental results. These discrepancies may be due to experimental inaccuracy as well as to poor models in the codes and to a not sufficiently qualified data base of material properties.

The following analysis of the FARO experiments will be used to identify the source of discrepancies between the THEMA /2/ and CORFLOW /3/ code results and the experimental findings. This consideration is based on the fact that the spreading will be nearly isothermal during the first period of the melt release if the initial melt temperature is well above the immobilisation temperature. The transition time at which the inertial and viscous forces are equal is given by /4/

$$t_{tr;\varphi} = (2\pi/\varphi)^{1/2}\left(3^{1/2}/\pi^2\zeta_{v,2\pi}^4\right)\left[\dot{V}/g\,\nu(T_{in})\right]^{1/2}, \zeta_{v,2\pi} \approx 0.7\,, \qquad (1)$$

where $\dot{V}$ is the volume flux, φ the angle of the sector, g the gravity constant and $\nu(T_{in})$ the kinematic viscosity at the initial melt temperature. Eq. (1) yields $t_{tr} = 54\,s$ for the initial data of the experiment under consideration, i. e. the inertial forces govern the spreading and, consequently, the motion does not depend on viscosity. The front progression is described as

$$r_{f;\varphi} = \left(4g\dot{V}/\varphi\right)^{1/4}(t+t_0)^{3/4} - r_0\,, \qquad (2)$$

where $t_0 = r_0^{4/3}\left(4g\dot{V}/\varphi\right)^{-1/3}$ is the time at which the front reaches the dam at r_0. Fig. 4 shows a good agreement of the CORFLOW results for the initial temperature of 3000 K with the theoretical predictions (Eq. 2). Obviously, a variation of the melt viscosity

in the temperature range between the solidus and liquidus temperature, i. e. a use of different correlations for the viscosity will not change the result of the code simulation. For the given superheat and the given flow rates, the heat losses due to radiation have no influence on the melt front progression calculated by CORFLOW. The first stop of the melt front observed in the experiment after only 2 s of motion indicates that the melt temperature cannot be much higher than the immobilisation temperature and, consequently, the viscosity of the melt must be rather high. From this observation one can try to estimate the viscosity from the front progression of the gravity-viscous current:

$$r_{f;\varphi} = (\varphi / 2\pi)^{-3/8} \zeta_{\nu,2\pi} \left(\dot{V}^3 g / 3\nu\right)^{1/8} (t + t_0)^{1/2} - r_0 \qquad (3)$$

with the initial condition

$$r_{f;2\pi}\big|_{t=0} = 0 .$$

The time at which the front reaches the dam at r_0 is

$$t_0 = (\varphi / 2\pi)^{3/4} r_0^2 \zeta_{\nu,2\pi}^{-2} \left(g\dot{V}^3 / 3\nu\right)^{-1/4} .$$

Using the experimental data for the melt front position at 2 s one obtains $\nu = 8 \cdot 10^{-4} \frac{m^2}{s}$ or $\mu = 6.7\, Pa \cdot s$. In this case the transition time is $t_{tr,\varphi} - t_0 = 0.6 s$ and therefore the spreading is dominated by viscous forces. The front progression (Eq. 3) is also given in Fig. 4. Similar results are obtained for the former test FARO L-26S. Assuming that the GEMINI 2 results are correct, the temperature at which the melt reaches the estimated viscosity is about 2877 K if the Stedman correlation

$$\nu(T) = \nu(T_{liq}) \left(1 + 0.75 \frac{f_{sol}(T)}{f_{max} - f_{sol}(T)} \right)^2 \qquad (4)$$

is used where f_{sol} is the solid mass fraction and $f_{max} = 0.55$. Because of the heat losses due to radiation, the melt temperature must be higher than 2877 K, estimated under isothermal conditions. CORFLOW calculations with an initial temperature of 2881 K (Fig. 4) show a good agreement with the observed melt front progression in the experiment up to the first stop. In CORFLOW, the melt front stops if almost all nodes at the free boundary reach the temperature at which the value of the viscosity

becomes large and if the floating crust is connected to the basement at the melt front. For temperatures close to the immobilisation temperature, the CORFLOW results are very sensitive to a variation of the initial melt temperature. A temperature of 2881 K corresponds to a melt viscosity of 0.1 Pas (Fig.1) and is about 120 K lower than the average value given by the UTS. The uncertainty on the UTS measurements is normally about ±60 K.

In the opposite case, i. e. if the measured initial melt temperatures are correct then these temperatures must be close to a immobilisation temperature in order to obtain the spreading behaviour observed in both FARO experiments. The thin water layer on the substrate cannot have a strong influence on the spreading process due to the thin thermal boundary layer resulting from the high Peclet-number ($>10^4$) of the melt. Consequently, the bulk temperature of the melt remains close to the initial temperature. On the other hand, questions came up whether the radiation heat losses from the upper surface would not lead to an early stop of the melt front and can give an explanation for the observed melt behaviour. This assumption could be disproved. Calculations with CORFLOW with the given initial temperature of 3000 K show that even if the energy loss from the upper surface in the first 2 seconds is artificially increased by a factor 4, the melt front position at 2 s is reduced by about 10 cm only.

Conclusions

Two FARO spreading tests were performed in the 4th framework programme. The objective was to get information on the spreading behaviour of a high temperature prototypic corium melt and to investigate the spreading on a substrate covered with a shallow water layer. In the first experiment, a steel plate was used as a substrate for the spread melt, in the second experiment, a shallow water layer was added on this steel substrate. This was a first of a kind experiment, where the release of a prototypic corium melt on a substrate covered with water was investigated. In both experiments, melt masses of about 150 kg were used to investigate spreading processes with flow rates of about 2 l/s. The data obtained complement those obtained with simulant materials and lower temperatures in other EU laboratories

During the whole spreading process, several times crust break up and new formation of crusts could be observed. The whole spreading time lasted about the same time as the melt release. The average spreading velocity of the leading edge was about 0.1 m/s. Small tongues were formed at the leading edge in the final spreading stage. The formation of small caverns below the spread melt could be observed after solidification. Especially with the addition of a small water layer, the spreading was observed to be inhomogeneous in lateral direction. But no melt water interactions occurred. Only the formation of small pillows at the leading edge was observed. Over all the influence of this water layer was small. In both experiments the temperatures measured in the steel plate below the surface did not exceed 1400 K.

If the initial melt temperatures of test L-26S and L-32S are above liquidus temperature then the inertial forces will govern the spreading and, consequently, the motion will not depend on viscosity. Using the measured initial data of the experiments, the CORFLOW results are in good agreement with the theoretical prediction for this gravity-inertia current, but overpredict the observed melt front progression. The front progression in both experiments indicate that the viscosity of the melt must be rather high. Due to the fact that the bulk temperature of oxidic melts remain close to the initial temperature during this short term spreading process, the observed spreading behaviour of both experiments can only be explained if the initial melt temperature is below the liquidus temperature. With this assumption, the observed spreading behaviour of these corium melts is in good agreement with the spreading behaviour of other oxidic melts and can be calculated by CORFLOW.

References

/1/ Stedman, S.J. et. al: J. Material Sci. 25, 1833, 1990.

/2/ Spindler, B., Veteau, J.M., et al.: Assessment of THEMA Code against spreading experiments, OECD workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Karlsruhe, 1999.

/3/ Wittmaack, R.: Nuclear Technology 119, 158, 1997.

/4/ Foit, J. J.: To be published, 1999

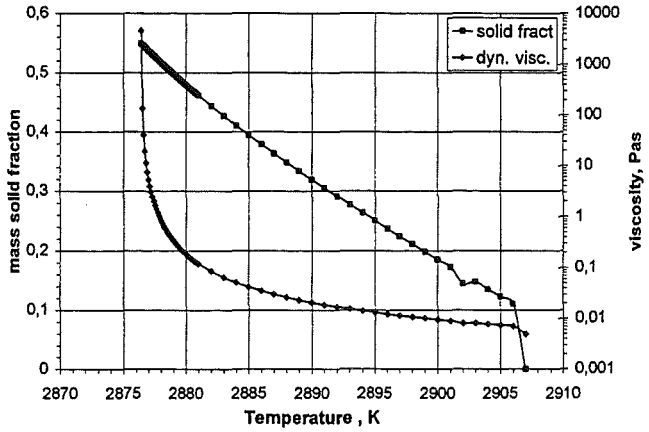


Figure 1: Mass fraction and dynamic viscosity

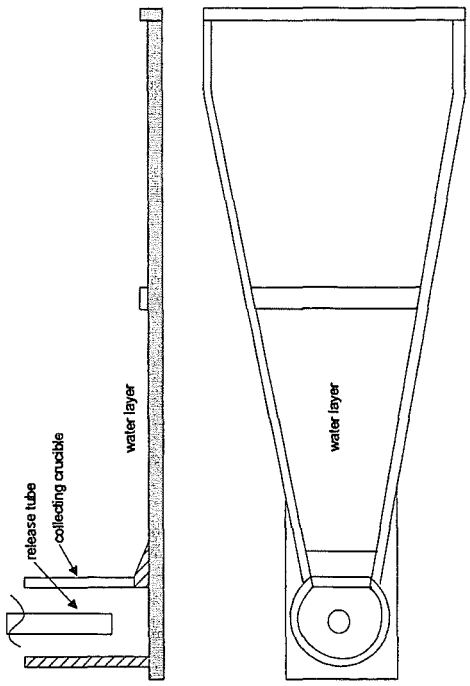


Figure 2: Test section of FARO L-32S

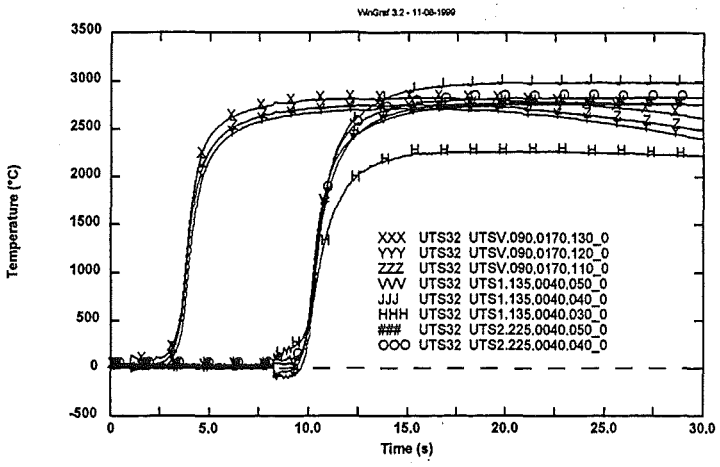


Figure 3: UTS-temperatures in the collecting device

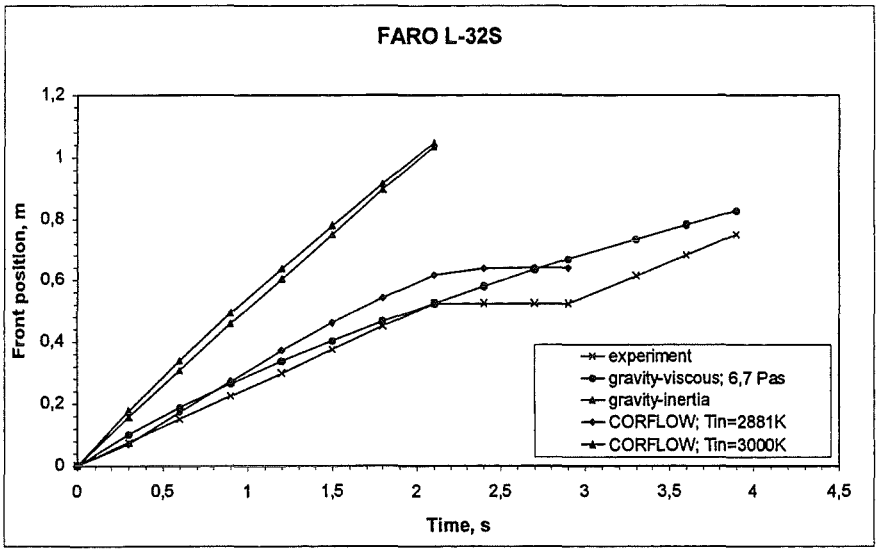


Fig. 4: FARO L-32S melt front progression

VI. Viscosity and characterisation of samples of the KATS and Premix experiments

(B. Schulz, P. Severloh, IMF I)

Abstract

On four samples (KATS 12/14 and Premix 01/03) the viscosity was determined up to 2000°C with a rotation viscosimeter. The results are compared to earlier measurements[1] on samples of similar composition.

Original powders from the KATS- and Premix-experiments were used and characterised especially with view to the phases present (metallography, X-ray). The same was performed on the regulus.

After the measurements highest cooling rates were chosen to get information from the microstructure of the regulus which allow conclusions with view to the state of the melts.

Especially in the KATS-samples, where a suspersion of solid Alumina particles in molten Spinel is possible, quantitative metallography was performed to get information on concentration gradients.

Zusammenfassung

Die Viskosität von je zwei Proben aus den KATS- und Premix-Experimenten wurde experimentell bis zu 2000°C bestimmt. Benutzt wurde ein Rotationsviskosimeter[2]. Die Ergebnisse wurden mit denen aus früheren Messungen verglichen [3]. Die Originalpulver und der Regulus aus den Viskositätsmessungen wurden untersucht und mit Hilfe von Metallographie und Röntgenfeinstrukturuntersuchungen charakterisiert, insbesondere in Hinblick auf die Phasenzusammensetzung. Das Meßsystem gestattet höchste Abkühlungsgeschwindigkeiten, um über das Gefüge des Regulus Rückschlüsse auf den Zustand der Schmelzen vornehmen zu können.

---

[1] (B. Dingwell, University of Bayreuth in order of Forschungszentrum Karlsruhe)
[2] Theta Industries N.Y., USA

Spezielles Augenmerk wurde auf Phasenkonzentrationsgradienten gelegt. Es kann, insbesondere für die KATS Proben, nicht ausgeschlossen werden, dass bei 2000°C Suspensionen aus festen Partikeln (Al_2O_3) in einer Spinel Schmelze vorliegen.

Introduction

To describe numerically the spreading behaviour of high temperature melts, the viscosity η is one of the important properties. Furthermore its temperature dependence is the most sensitive of all thermophysical properties in liquid state. The temperature region discussed here (around 2000°C) means for temperature measurements in any case an uncertainty of $\pm$ 20°C at least.

A complication is so far existent as all methods for determining viscosity are comparative i.e. a calibration of the measuring systems with a standard reference material of known viscosity is essential where the viscosity must be in the same range than that of the interesting liquid.

Characterisation of starting materials

Powders were used, which were produced in the KATS and Premix-experiments. Basis of both kinds of powder is the thermite reaction. The molten materials are solidified in air and contain quartz (KATS) and quenched in Water without quartz (Premix). First the powders were chemically analysed with respect to metallic elements. Using the Gemini code the powder composition taken as oxides was calculated [1,2]. Phase analysis was performed with X-rays and metallography and energy dispersive electron microprobe analysis (Edx). The results are summarised in Table 1.

Table 1: Result of characterisation of the Premix and KATS powers

Powder	Oxide comp. Gemini Gew. %	X-ray analysis phases	Metalography + Edx
Premix 01*	81.3 – 83.0 Al_2O_3 12.4 – 10.6 FeO 5.65 MgO 0.65 MnO	Spinel near to Mg-Spinel	dominant Al-Fe-Mg-O Al/Si/Ca/Na/Fe/Mg-O small amounts of FeO
Premix 03*	79.7 Al_2O_3 20.4 FeO 9.2 MgO, 0.7 MnO	Spinel near to Mg spinel indication of mixed crystal	dominant Al-Fe-Mg-O Al/Si/Ca/Na/Fe/Mg-O small amounts of FeO
KATS 12	79 Al_2O_3, 7.4 FeO 8.6 SiO_2, 5.0 MgO small amounts of Mn, K, Ca, Cr	Corundum; Spinel (Mg-Fe Spinel)	Corundum Al_2O_3 Al/Mg/Cr/Fe-O rest phase Si/Al/Mg/Mn/Ca/Cr-O
KATS 14	81.6 Al_2O_3, 10.8 FeO 1.9 SiO_2, 0.1 MgO small amounts of Mn, K, Ca, Cr	Corundum Hercynite (Fe-Spinel)	Corundum Al_2O_3 Al/Fe/MgO rest phase Si/Fe/Al/Ca/Mn/K/Na-O

*small amounts of metallic Fe

Furthermore the melting of the Premix-samples was observed with the high temperature DTA (Differential thermal analysis) (By courtesy of the MPI in Stuttgart). Both powders undergo a sudden (congruent?) melting Premix 01 at 1965°C and Premix 03 at 1940°C.

Therefore it is expected for the Premix-samples beyond melting a relative low viscosity (< 100 mPas). Whereas in the KATS samples it cannot be excluded a dispersion of Al_2O_3 in a Spinel melt at temperatures below 2000°C. This can result in the Bingham type of viscosity i.e. a dependency of η on the shear rate during measurement.

Summarising the results from characterisation it comes out:

Premix:

Mixed crystals of $FeAl_2O_4$ and $MgAl_2O_4$, where iron-oxide begins to precipitate.

A rest phase contains all minor components

KATS 12:

Al_2O_3 as separate phase mixed crystals $FeAl_2O_4$ and $MgAl_2O_4$ partially enriched with Mn and Cr, rest phase with minor elements

KATS 14:

Al_2O_3 as separate phase $FeIAl_2O_4$ partially enriched with Mn + rest phase with minor elements.

Viscosity measuring system, crucible material and measuring conditions

The viscosity η is defined by:

$$\tau_{xy}=\eta\frac{dv}{dz}$$

τ_{xy} – shear stress in the x-y-plane, dv/dz-first deriviation of the shear rate in z-direction.

Some time earlier than this work, the viscosity of the Premix and of "KATS" 12 and 14 powders were measured [3]. The KATS-sample didn't consist of original material but of mixtures of the pure oxides, the content of which was calculated with the Gemini code. The main information from the measurements were:

viscosity Premix estimated to ~ 4mPas

viscosity "KATS" < 100 Pas, non Newtonian up to 2000°C, rotation visosimeter, materials Iridium, atmosphere air, where high heat capacity means low coolingrate.

Very low cooling rate and predominant eutectic in the regulus microstructure of "KATS" samples, on this background the following decisions were made:

To use a normal rotor-baker system for KATS, and a double gap baker-system for Premix-material.

The viscosimeter is from Brookfield, to optimise the geometry of the rotor-baker-system and to calibrate the final certified reference liquids from Cannon (S6, N 15000) were used.

The geometry of the double gap-baker system for low viscosity (Premix) was far away from its Taylor frequency. The whole viscosimeter-system is lowered by a fine thread into a tube furnace (Fig. 1) and can be evacuated to 10^{-1} mbar. The rotor is lowered into the baker with starting measuring conditions.

Temperature was measured with pyrometer (working at 1 µm wavelength, emissivity 0.89) and with W/Re-Thermocouples shielded with HfO_2 situated directly on the baker. The temperature difference in the range 1900 until 2000°C is 20 – 22°C for

both kinds of measurements. As sample temperature the record of the thermocouple was taken.

With view to high mechanical stability at ~ 2000°C, (low mass and low heat capacity of the system) TZM (Ti-Zr-Mo 99.5 alloy) was chosen for baker and rotor systems from which follows a working in slight reducing atmosphere (100 mbar, He + ~ 10 % H_2). During the measurements each sample undergoes high evaporation, resulting in deposits and chemical reaction via the vapour phase. Elements in the resulting products were Si, Fe, Mn, Cr, Ca.

Results of the viscosity measurements. The results are given in Fig. 2a, b for KATS 12 and Fig. 3a, b for KATS 14 in comparison with the results from [3]. The Premix sample showed a behaviour completely different to the observations in [3]. At 1980°C the rotor could be moved into the sample about 10 mm, the torque increased very rapid at a rotor speed of 0.1 rpm, increasing the temperature to 2000°C the melt remains very viscous with an estimated viscosity of 1000 mPas.

Post melting characterisation

The investigation method was metallography and energy dispersive electron microprobe analysis.

Premix

The regulus contains two oxidic phases and is homogeneously crystallised from the surface to the bottom. As shown in table 1 the dominant phase is the mixed crystal of Al-Mg-Fe-Spinel, where the Fe-concentration is remarkably reduced compared to the original powder (s. a. evaporation). The minor oxidic phase consist as for the powder (table 1) of the Al-Fe-Mg + impurities -O.

KATS 12:present phases

Al_2O_3 and Al-Mg-Mn-Si-Ca-O

KATS 14: present phases

Al_2O_3 + rest phase as in KATS 12 enriched with Fe.

The presence of Alumina in KATS lead to quantitative metallography; to get an imagination of the total vol % concentration of Alumina and a concentration gradient due to gravity in the remaining melt. The cooling rate after measurement was 100°C/min, 2000°C to 1400°C. A frozen condition can be expected which comes near to the condition of the melt.

The investigation was very difficult. The optical contrast of the both oxidic phase was high enough for differentiation by the human eye but not high enough for quantitative measurements. So the contrast was increased artificially and the volume content measured.

We got near the surface of the melt 45 vol % Al_2O_3 in KATS 12, near the bottom of the melt 51 vol % Al_2O_3.

These figures are only indications for a vol- concentration gradient and coincides with optical impression.

Interpretation and conclusions

First one should mention the lack of knowledge of the materials which are to treat. There is no phase diagram of the basic system Fe-Al-Mg-O, which according to X-ray analysis (table 1) can be reduced to solutions of $MgAl_2O_4$ – $FeAl_2O_4$ with increasing homogeneity range regarding the Fe-, Mg-Al and O_2-content with temperature. Thus the observations in [3] and the DTA-results of Premix are doubtful with respect to a real melting point. For all samples there should exist a liquidus- and solidus temperature, with the existence of a suspension between them. Additionally in the KATS samples solid Al_2O_3 is precipitated, showing for KATS a near pure Fe-Spinel. This behaviour is time dependent during the experiments, leading perhaps to a time-dependent viscosity. An indication is shown in Fig. 2 a where at 5 rpm and 1946°C the viscosity on heating up and down differ by a factor of 2.5. Furthermore the given temperatures are temperatures of three different Labs. This may partially explain the different results for viscosity of the KATS-samples. The non-Newtonian behaviour of KATS-material is to be expected [4]. Suspensions behave in this manner.

For the Premix-material the results cannot be explained by errors or uncertainties of measurement, they differ by a factor of 250. It might be that in the Theta lab the temperatures are measured too high, so that the results reflect a high mechanical deformation near, but below the solidus temperature, taken as an apparent viscosity.

It is recommended to calculate in the respective codes with separate values of the viscosity. Experimentally it should be undertaken to determine the viscosity of the pure $MgAl_2O_4$ and $FeAl_2O_4$ to clear up the range of the viscosity for Premix and KATS-samples.

References

[1] M. Steinbrück: IRS-Notiz, FZK Nr. K 1238/94 (1994) und 1302 / 96 (1996)

[2] U. Stegmaier: IRS Notiz, FZK Nr. 1433/99 (1998)

[3] D. B. Dingwell: Bayrisches Geo-Institut der Universtiät Bayreuth; Abschlussbericht über Viskositätsmessungen an Premix- und Kats-Proben 1998.

[4] W. D. Sältzer, B. Schulz: Viscosity of suspensions in Proc of the 4th Riso International Symposium on Metallurgy and material Sciences 5 – 9 Sept. 1983.

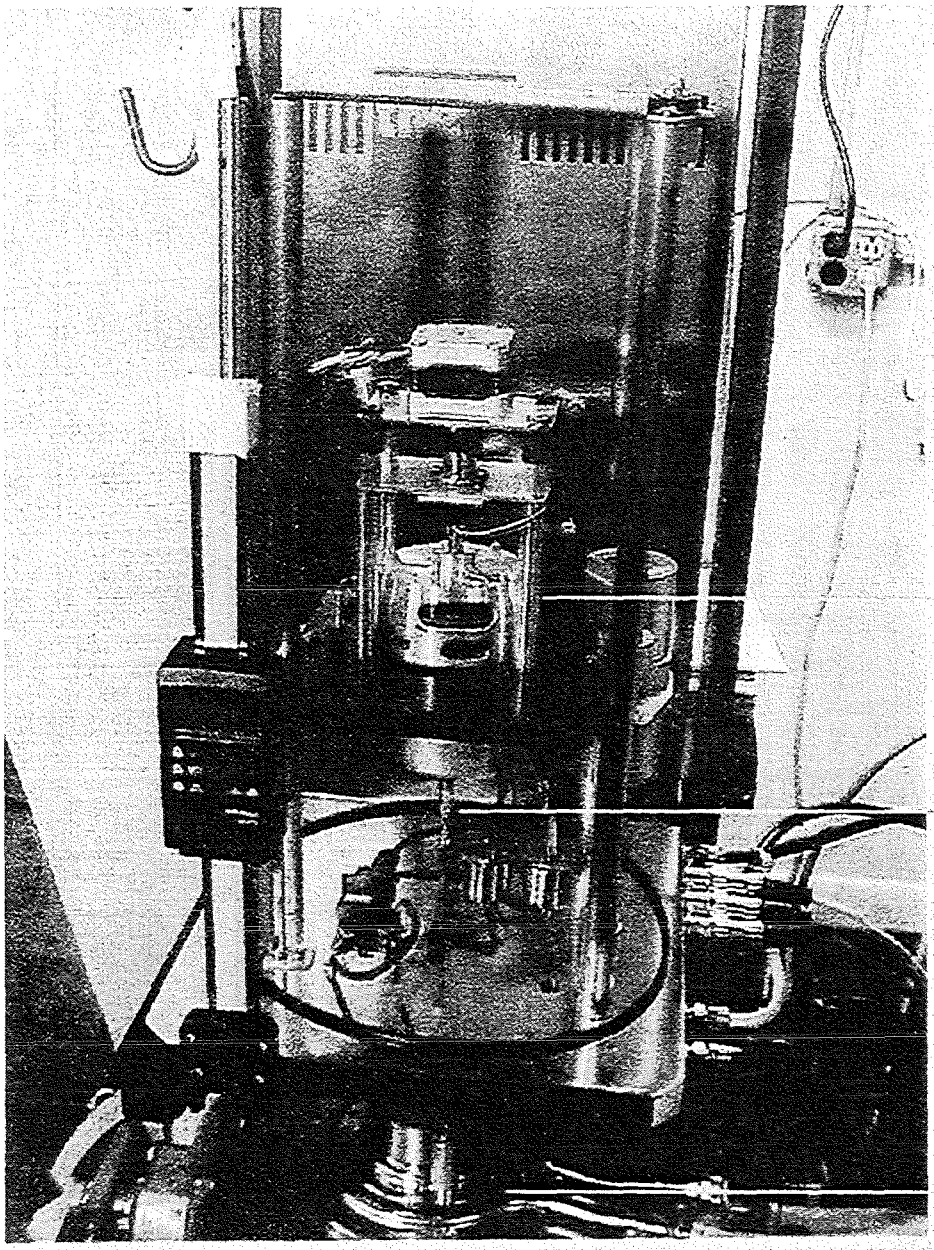


Fig. 1: View on the viscometer equipment

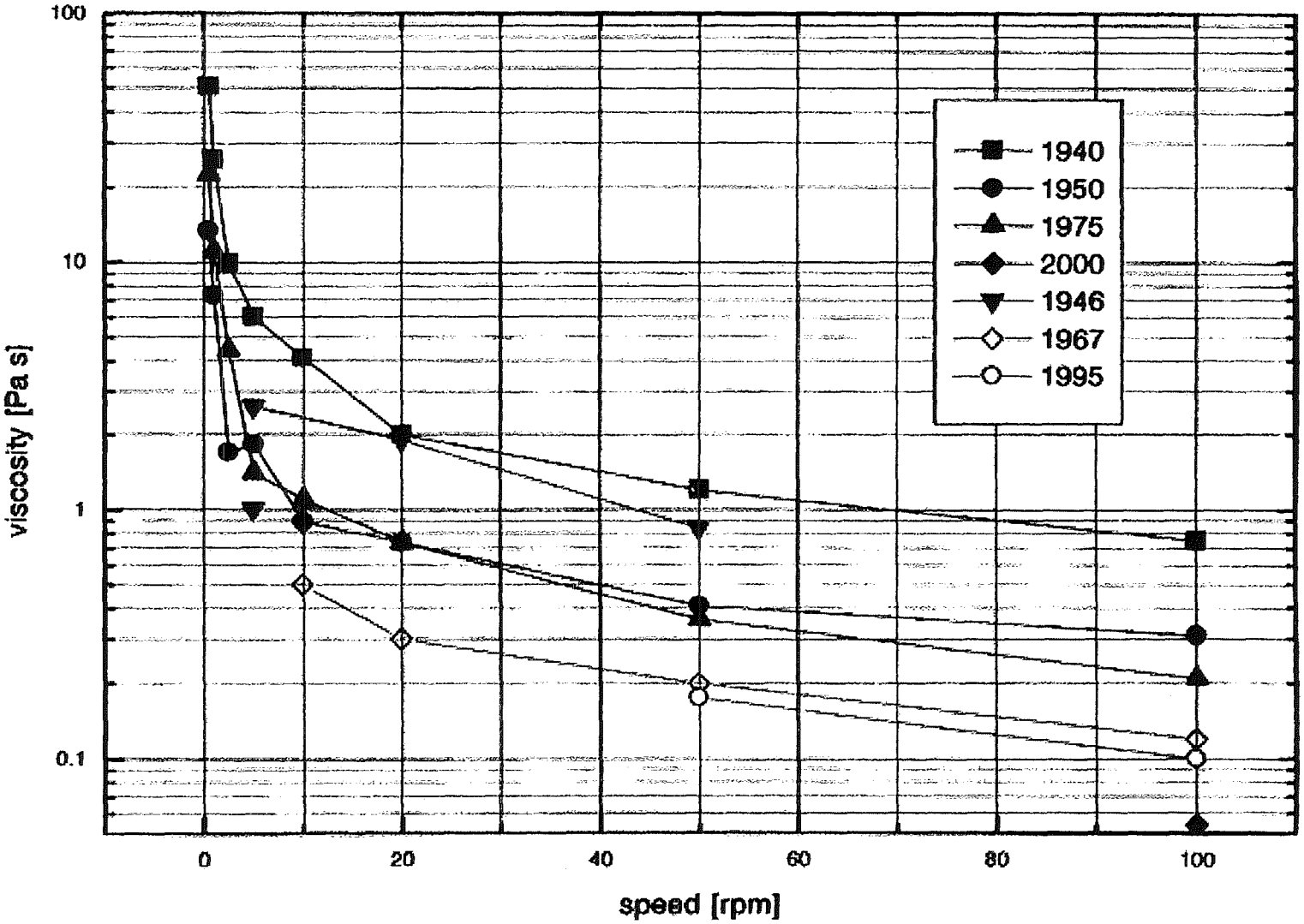


Fig. 2a: Viscosity vs rotation
Speed of KATS 12, black [3], red-this work

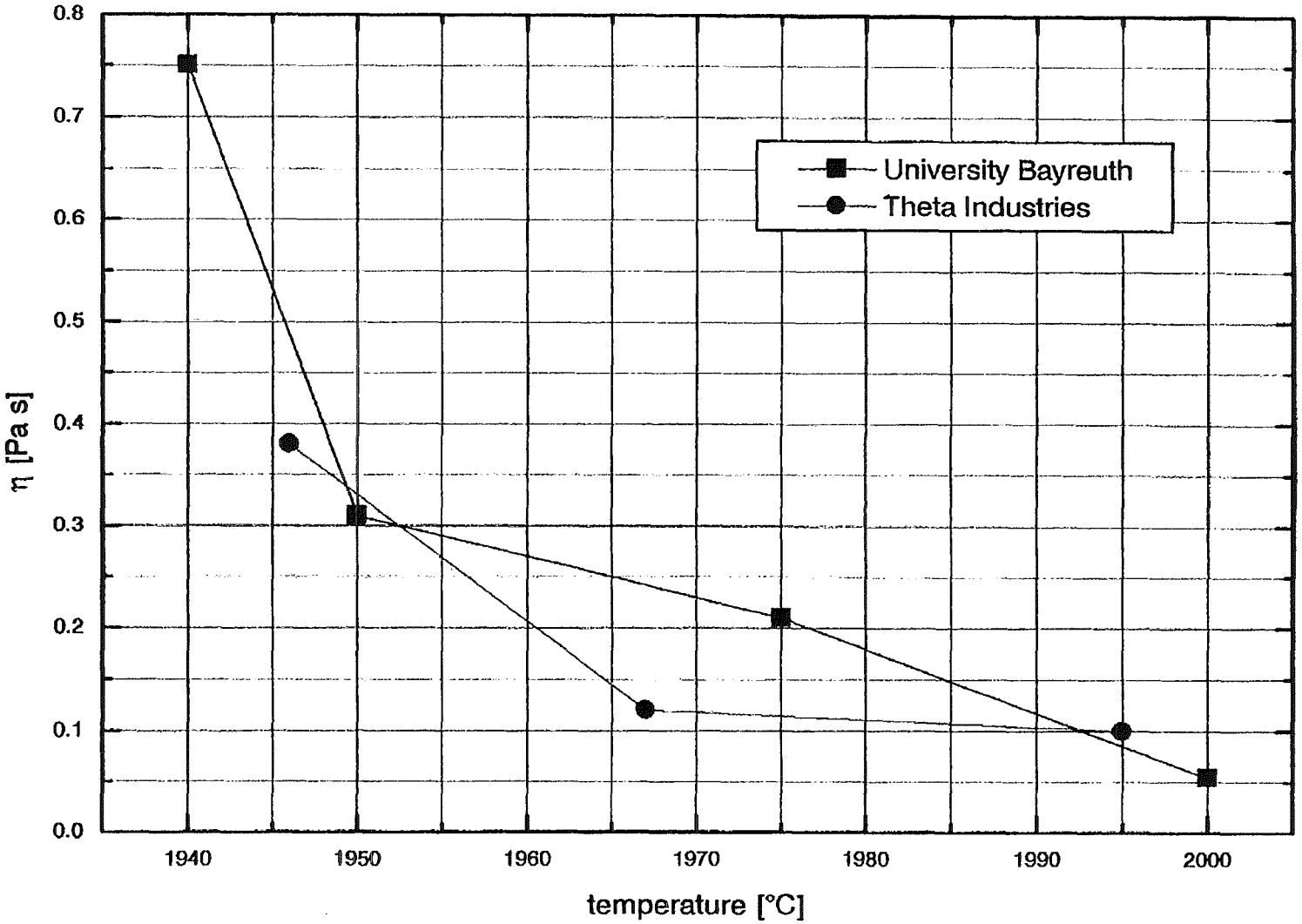


Fig. 2b: Viscosity vs. temperature at rotation speed 100 rpm: black - [3], red - this work (value at 1946°C extrapolated from Fig. 1a)

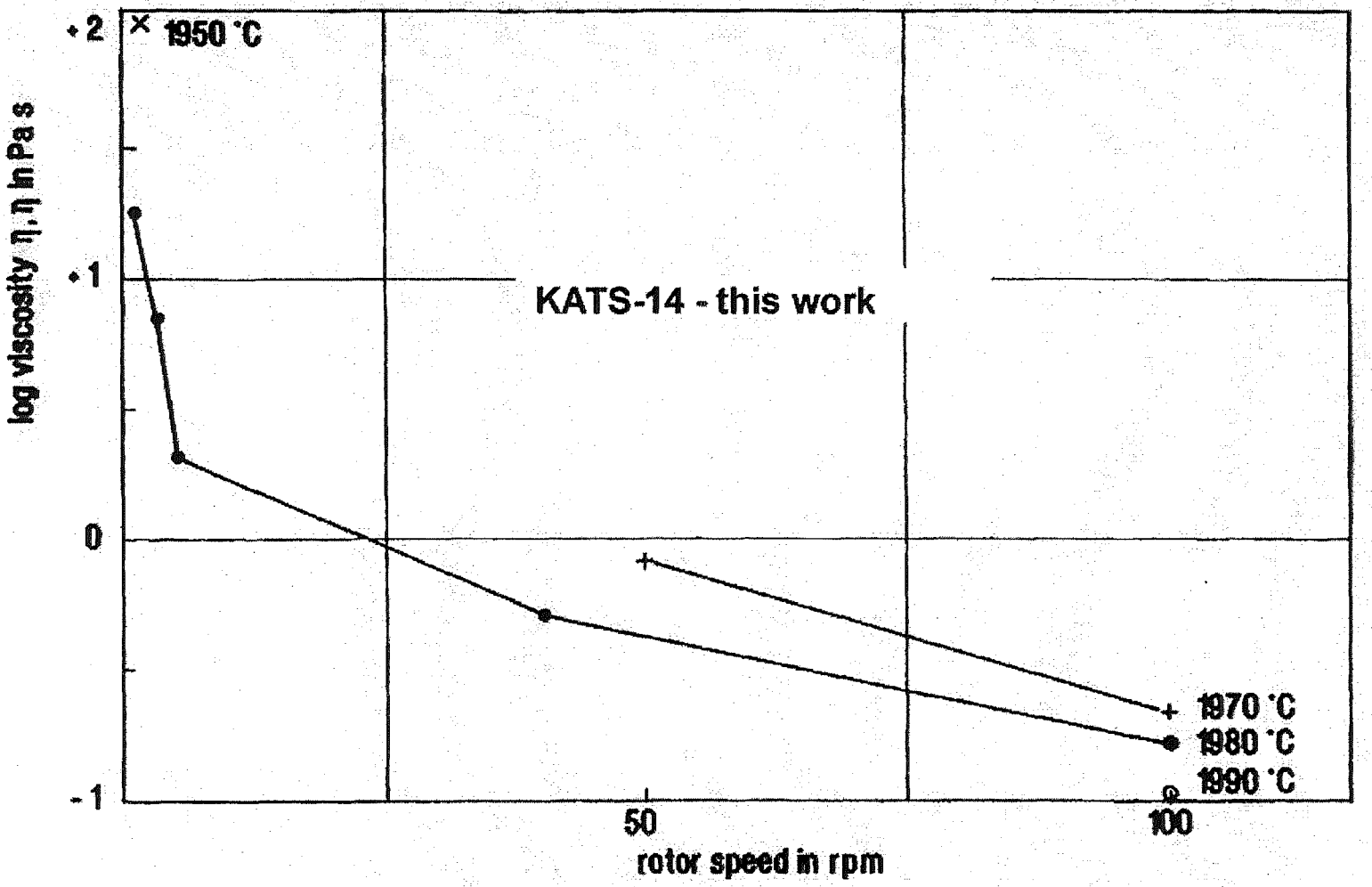


Fig. 3a: Viscosity of KATS - 14

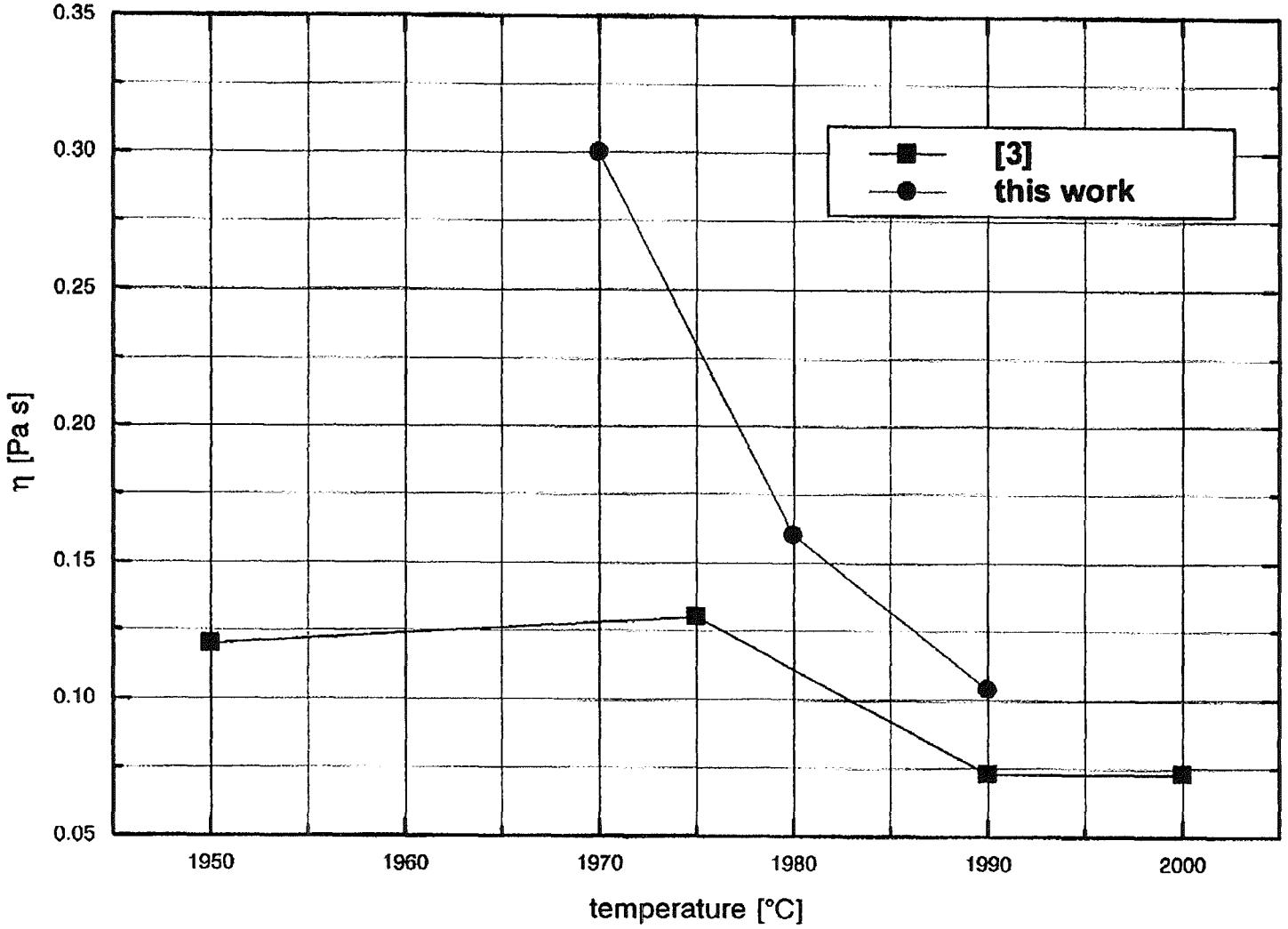


Fig. 3b: KATS 14 viscosity vs. temperature at rotation speed 100 rpm

32.21.05 Langfristige Containmentkühlung

I. Two-dimensional Geysering

(G. Janssens-Maenhout, H. Umekawa, M. Daubner, U. Müller, T. Schulenberg, IKET)

1 Abstract

An experimental study on the propagation of evaporation waves in adiabatic flashing of water has been performed in a vertical glass channel with a width of 950 mm and a height of 7250 mm. Moreover flashing at zero mass flux as inlet condition, so-called geysering, has been focussed on. Both experiments with flashing at low mass flux, low subcooling and low wall heat flux as well as experiments with geysering for different inital levels of the stagnant water are performed. Due to the two-dimensionality of the test facility the instability phenomenon shows an evaporation wave sidely expanding upwards. No propagation of the evaporation wave in the direction opposite of the gravity has been observed. Due to the large recirculation both the frequency and the amplitude of the total differential pressure signal over the two-dimensional riser enhance with increasing wall heat flux. The period of the total differential pressure over the two-dimensional riser is in the case of low wall heat fluxes inversely proportional with the energy discharged in one period and becomes only in the case of high wall heat fluxes asymptotically proportional with the wall heat flux.

2 Introduction

Major classical types of boiling flow instabilities or flashing have been treated by [Yadigaroglu, 1981a]: (1) the Ledinegg Instabilities and related Pressure Drop Oscillations, and (2) the Density Wave Oscillations. [Van der Hagen et al., 1997] refers to these types as Type I Instability respectively Type II Instability. The Type I instabilities exhibit a particular S-shaped steady state pressure-drop flow-rate characteristic of the system. [Ledinegg, 1938] showed that operation in the negative-slope part of the characteristic is unstable and may lead to flow excursion. If delayed feedbacks between the inertia of the flow and compressibility of the two-phase mixture exist, this may lead

to flow oscillations. The Type II instabilities are established in boiling channels with an oscillatory subcooled inlet flow. [Yadigaroglu and Bergles, 1972] show that inlet flow oscillations create enthalpy perturbations at the point where the flow reaches saturation. Changes in flow and length of the single-phase region create an oscillatory single-phase pressure-drop perturbation. Enthalpy perturbations in the two-phase region, appearing as quality and void fraction perturbations travel with the flow along the heated channel. [Fukuda and Kobori, 1978] made a detailed classification of various types Density Wave Oscillations. [Lahey and Yadigaroglu, 1982] examined the relationship between Ledinegg and Density Wave stability criteria. They showed that to determine whether a system is stable regarding excursive instabilities, one only needs to examine the zero frequency limit of the linear model used for the analysis of Density Wave Oscillations.

As limiting case of these boiling flow instabilities or flashing this paper considers geysering, a flashing phenomenon of steam production in stagnant water with an incubation, an expulsion and a refill period. This cycle varies in period from minutes to hours, depending on the size of the energy reservoir. The frequency of the oscillation is in the case of Type I instabilities controlled by the time constant associated with the compressible volume, whereas in the case of Type II instabilities it is controlled by the transit time through the heated channel. The periods of Type I instabilities are generally longer than the periods of Type II instabilities.

These instability phenomena have been mainly investigated in one-dimensional, vertical channels with a heated section and a riser section. However, real geysering in for instance geothermal power sites or cryogenic pipelines requires more information than from one-dimensional models. In a test facility with a L-shaped slab geometry, consisting in a horizontal heated section of 4.5m length and a vertical chimney of 5.5m height, described by [Janssens-Maenhout et al., 1999] geysering has been investigated in two dimensions.

3 Experimental Setup

3.1 Test Facility

The experimental test facility is shown schematically in figure 1 and consists of a L-shaped slab geometry with a length $l = 4.50m$, height $h = 5.5m$ and depth $d = 0.12m$. The width of the horizontal respectively the vertical section are $w_l = 0.9m$ and $w_h = 0.95m$. Two operation modes, mixed convection and natural circulation, are possible. In the mixed convection operation mode subcooled water is pumped into the horizontal lower duct and heated up by the hot bottom plate. Low heat fluxes at the bottom boundary and low mass fluxes, including zero mass flux at the inlet are envisaged.

In the horizontal lower duct temperature profiles have been measured by 5×18 and 1×6 $Ni-CrNi$–thermocouples. In the vertical riser 3 differential pressure cells measure the integral pressure difference over the total riser, and over the first and second half part of the riser. Additionally 3×6 and 2×4 thermocouples as well as 2 fibre optical probes are inserted in the riser. At the

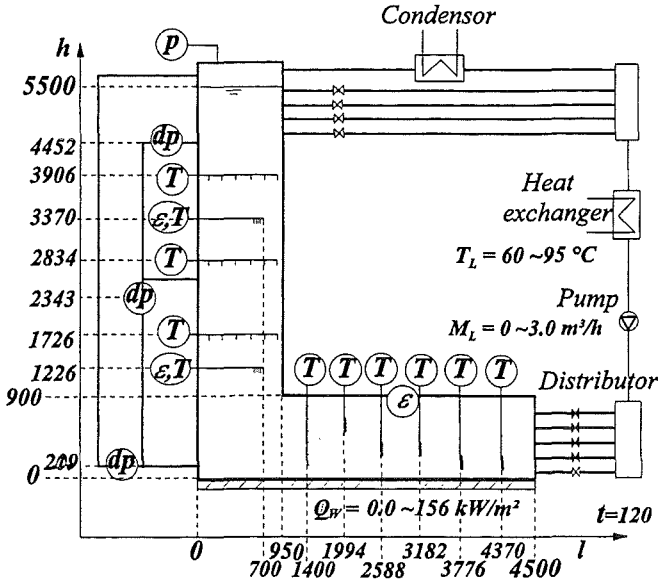


Figure 1: Sketch of the Test Facility SUCOT.

top of the riser also the pressure in the vapor space is recorded. The measurement techniques are described in [Knebel and Janssens-Maenhout, 1998].

3.2 Operation Parameters

The boundary conditions, depending on the wall heat flux $\dot{Q}_W$, liquid mass flow rate $\dot{M}_L$ and subcooling T_{Sub} are specified by the Phase change number or Zuber number

$$N_{PCh} = Zu = \frac{(\rho_L - \rho_G)\,\dot{Q}_W}{\rho_G\,\dot{M}_L\,\Delta h_{LG}} \tag{1}$$

and the Subcooling number

$$N_{Sub} = \frac{(\rho_L - \rho_G)\;c_p\,(T_{Sat} - T_{Lin})}{\rho_G h_{LG}} \tag{2}$$

as derived by [Ishii and Zuber, 1970] from the drift-flux model, considering the three mixture conservation equations. The more detailed two-fluid model with 6 equations still suffer from incomplete closure relationships, modelling phase interaction. Moreover scaling with 1 common time scale is not any more possible with the two-fluid model. Additionally to N_{PCh} and N_{Sub} the classical single-phase flow dimensionless numbers are given in table 1.

An overview of all working points ran in different tests is given in the operational diagram of N_{Sub} versus N_{PCh} in figure 2. This operational diagram represents which mixture quality was reached in the test facility and therefore correlates with the two-phase flow pattern. As transitions of flow pattern induce instabilities from [Yadigaroglu, 1981b], the diagram especially indicates the stable and unstable flow regimes. During the operation of the test facility regimes with quiescent subcooled boiling as well as regimes of geysering are observed.

Rayleigh Number	$Ra = \frac{\beta_L g \Delta T_{LSub} w^3}{\kappa_L \nu_L}$
Prandtl Number	$\mathrm{Pr} = \frac{\nu_L}{\kappa_L}$
Aspect Ratio	$N_R = \frac{w_h}{h}$
Phase Change Number	$N_{PCh} = \frac{\Delta\rho \dot{Q}_W}{\rho_G \dot{M}_L \Delta h_{LG}}$
Subcooling Number	$N_{Sub} = \frac{\Delta\rho c_p \Delta T_{LSub}}{\rho_G \Delta h_{LG}}$

Table 1: Dimensionless Numbers for the two-phase mixture.

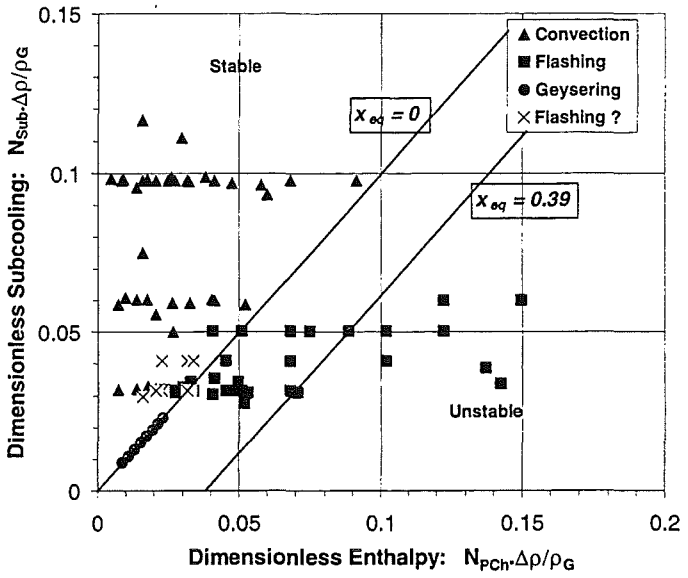


Figure 2: Operation diagram

4 Model

Although lumped parameter models cannot consider the wave propagation phenomena correctly and are therefore not appropriate to treat the propagation of enthalpy and void fraction perturbations through the riser, simple analytical models as proposed by [Ishii and Zuber, 1970] or [Ozawa et al., 1979] are adequate to describe qualitatively the instabilities observed. Recently [Hahne and Barthau, 2000] described their experimental investigations on flashing processes also with a lumped parameter mixture model. Moreover they insisted on using a more uniform terminology and preferred to describe the flashing phenomenon in a vertical channel one-dimensionally by an "evaporation wave", moving downwards, followed by reflux from above. Since the test facility of figure 1 shows a two-dimensional vertical riser section no evaporation wave, moving downwards is formed. A vapor plume formed at the side walls and upwards expanding towards the center of the channel has been observed.

Generally several stability boundaries exist, each mode corresponding to a different range of oscillation periods. Higher-mode oscillations are likely to appear at high inlet subcooling and at

low flow rate and power input, when the transit time in the channel becomes very long. For higher-mode oscillations the period becomes a simple fraction of the transit time in the channel. The effect of the pressure level, inlet subcooling and inlet (single-phase) throttling are stabilizing. On the contrary the effect of flow resistances near the exit (two-phase) of the channel is strongly destabilizing. The effect of gravity becomes important at low quality and low mass flux, according to [Achard et al., 1985]. The gravity effect is stabilizing for upward flow and destabilizing for downward flow, whereas the frictional pressure drop in both saturated and subcooled flow may be destabilizing.

Quantitatively the following stability criterion first proposed by [Ishii, 1976] and then modified by [Saha and Zuber, 1974] is given:

$$x_{eq}\frac{\Delta\rho}{\rho_G} = N_{PCh} - N_{Sub} = \frac{k_i + \frac{4\, f_{2Ph}\, l}{w} + k_e}{1 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{4\, f_{2Ph}\, l}{w} + k_e\right)} \quad , \tag{3}$$

where k_i and k_e are the loss coefficients for the inlet and exit local pressure drops, f_{2Ph} the Fanning friction factor in the two-phase region, l the length and w the hydraulic diameter of the heated channel. This criterion approximates for the case of BWR boiling channels with high subcooling a constant-quality line:

$$x_{eq} = 0.39 \tag{4}$$

In the case of low subcooling and low heat flux the criterion for Ledinegg instability is

$$x_{eq} = 0 \tag{5}$$

Although in the parametric study of [Ishii, 1976] good agreement with experimental results is obtained, the stability criterion 3 still needs further corrections. Effects due to large mixing regions have to be taken into account in the case of low and zero mass flux in wide (two-dimensional) channels.

5 Results of the Measurements

5.1 Flashing Frequency as Function of the Wall Heat Flux

Different flashing or geysering periods are observed in the transient behavior of the differential pressure, temperature and void fraction at certain positions in the riser. The temperature indicated a strong mixing of the two-phase flow. The pressure yielded a periodicity of the instability phenomenon. Since the Fourier Transform of the pressure signal was not adequate to analyze the periodicity, a discrimination procedure with an exceed of $2mbar$ was used. The number of pressure peaks during $1h$ as function of the energy input for the flashing $\dot{Q}_W - \dot{M}_L\, c_{pL}\, (102°C - T_{Lin}(°C))$ is represented in figure 3. Generally the flashing period decreases with increasing dimensional flashing energy, as results from figure 4.

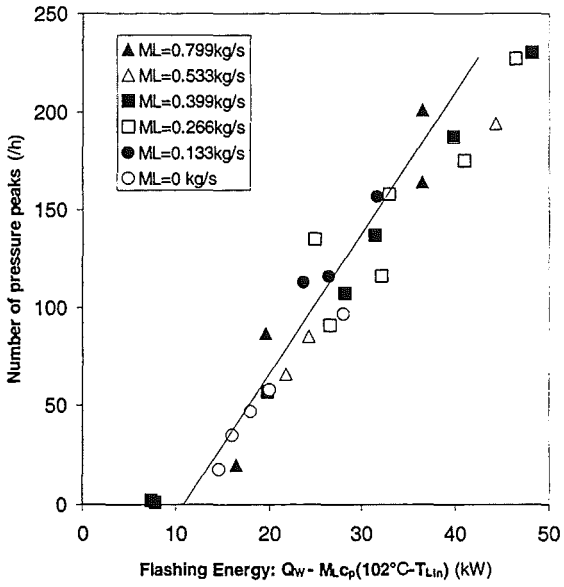


Figure 3: Number of pressure peaks as function of the flashing energy.

The cumulative time distribution of the pressure signal in the vapor room allowed to filter the pressure peaks due to flashing from the noise in the boiling two-phase mixture. Figure 5 shows the strength of the flashing $\frac{1}{N}\sum_{N}(\Delta P_{vapor} - \Delta P_{threshold})$ as function of the energy input for the flashing $\dot{Q}_W - \dot{M}_L\ c_{pL}\,(102 - T_{Lin}(°C))$. With increasing flashing energy the strength of the

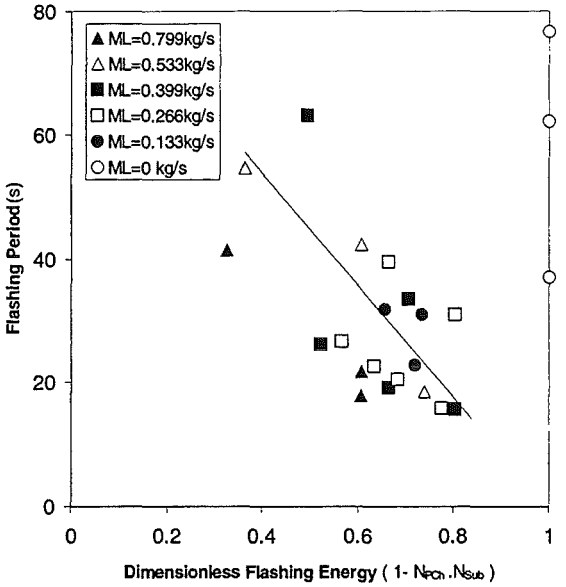


Figure 4: Flashing period over the non-dimensionalised flashing energy.

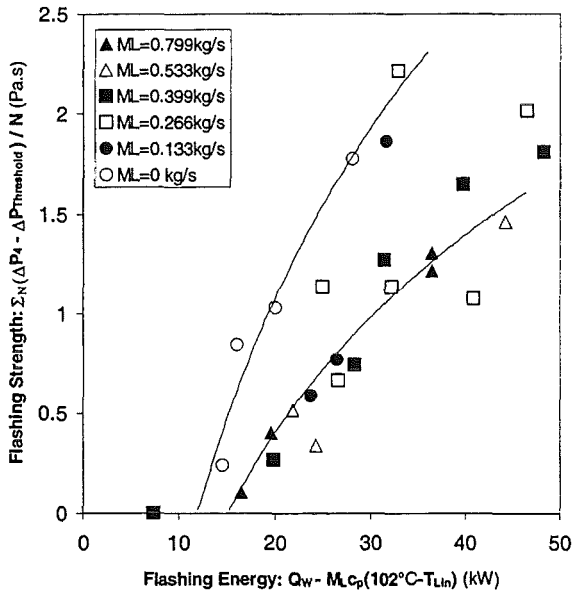


Figure 5: Flashing strength over flashing energy.

5.2 Flashing Frequency as Function of the Initial Water Level

Additionally experiments at zero mass flux have been performed for different initial water levels z, changing the original level z_0 from $5.5m$ in steps of $0.5m$ towards $2.5m$. At lower water level or hydrostatic head boiling at the heated bottom plate occurs at lower temperature and the horizontal section accumulates a large amount of vapor. The flashing frequency enhances with decreasing water level z. Figure 6 shows the number of pressure peaks during $1h$ as function of the water level. Due to the change in the volume of the vapor space, the discrimination procedure used a scaled step of $2mbar \cdot z/z_0$ instead of the constant $2mbar$ step. Additional influence of the condensor ability has been neglected. Below $3.5m$ the strong increase in flashing frequency indicates a transition to another instability mode of the geysering. Moreover the temperature signal in the cases of $3.5m$ to $5.5m$ water level differs completely from the temperature recorded in the cases of $3.0m$ to $2.0m$ water level. The more regular temperature behavior in the cases of $3.0m$ to $2.0m$ water level indicates the boiling of the horizontal section whereas the irregular temperature behavior in the other cases are due to the strong mixing after the expulsion period during the void entrainment period.

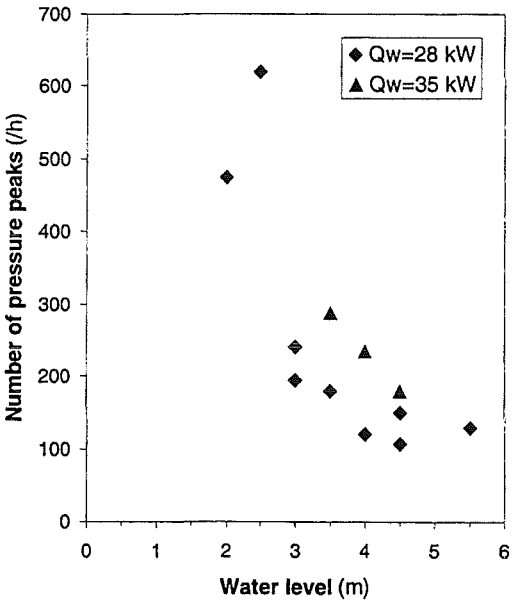


Figure 6: Number of pressure peaks as function of the initial water level.

6 Conclusion and Perspective

A geyser in a two-dimensional riser shows no evaporation wave moving downwards followed by reflux from above but a vapor plume extending sidely and upwards followed by recirculation on the sides. The total differential pressure signal over the two-dimensional riser indicates that both the flashing frequency as well as the strength of the flashing enhance with increasing wall heat flux. The strength of the flashing first increases with increasing wall heat flux but then tends to approach an asymptotic value.

References

[Achard et al., 1985] Achard, J.-L., Drew, D., and Lahey, J. R. (1985). The analysis of nonlinear density-wave oscillations in boiling channels. *J. Fluid Mechanics*, 155:213–232.

[Fukuda and Kobori, 1978] Fukuda, K. and Kobori, T. (1978). Two-phase flow instability in parallel channels. *Proc. 6th Int. Heat Transfer Conf.*, FB(17).

[Hahne and Barthau, 2000] Hahne, E. and Barthau, G. (2000). Evaporation waves in flashing processes. *Int. J. of Multiphase Flow*, 26:531–547.

[Ishii, 1976] Ishii, M. (1976). Study of flow instabilities in two-phase mixtures. Technical Report ANL-76-23, Argonne Nat. Lab.

[Ishii and Zuber, 1970] Ishii, M. and Zuber, N. (1970). Thermally induced flow instabilities in two-phase mixtures. *Proc. of 4th Int. Heat Transfer Conf., Paris*, pages B–5.11.

[Janssens-Maenhout et al., 1999] Janssens-Maenhout, G., Daubner, M., Knebel, J., and Müller, U. (1999). Boiling driven mixed convection in a l-shaped slab geometry. *Proc. EUROTHERM 63*, pages 189–198.

[Knebel and Janssens-Maenhout, 1998] Knebel, J. and Janssens-Maenhout, G. (1998). Boiling induced mixed convection in cooling loops. *Proc. of 36th Eur. Two-Phase Flow Group Meeting, Portoroz.*

[Lahey and Yadigaroglu, 1982] Lahey, R. J. and Yadigaroglu, G. (1982). On the relationship between ledinegg and density wave instability analysis. *Trans. ANS*, 41:689–691.

[Ledinegg, 1938] Ledinegg, M. (1938). Instability of flow during natural and forced circulation. *Die Wärme*, 61(8):891–898.

[Ozawa et al., 1979] Ozawa, M., Nakanishi, S., and Ishigai, S. (1979). Flow instabilities in boiling channels, part 1: Pressure drop oscillations. *Bull Jap. Soc. Mech. Eng.*, 22(170):1113–1118.

[Saha and Zuber, 1974] Saha, P. and Zuber, N. (1974). Point of net vapor generation and vapor void fraction in subcooled boiling. *Proc. of 5th Int. Heat Transfer Conf., Tokyo*, 4:175–179.

[Van der Hagen et al., 1997] Van der Hagen, T., Stekelenburg, A., and Van Bragt, D. (1997). Reactor experiments on type-i and type-II BWR stability. *Proc. NURETH 8*, 1:397–400.

[Yadigaroglu, 1981a] Yadigaroglu, G. (1981a). Regime transitions in boiling heat transfer. *Thermohydraulics of Two-Phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering*, pages 307–351.

[Yadigaroglu, 1981b] Yadigaroglu, G. (1981b). Two-phase flow instabilities and propagation phenomena. *Thermohydraulics of Two-Phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering*, pages 353–403.

[Yadigaroglu and Bergles, 1972] Yadigaroglu, G. and Bergles, A. (1972). Fundamental and higher-mode density wave oscillations in two-phase flow. *Int. J. Heat Transfer, Trans. ASME*, 94:189–195.

II. Rechenprogramm FLUTAN für thermo- und fluiddynamische Anwendungen

(L.N. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach, IRS)

Abstract

The numerical simulation of an experiment in the SUCOS-3D facility with the computer code FLUTAN is the topic of this report. The numerical investigations are related to the single phase natural convection in the optional sump cooling concept of the EPR. Calculations of SUCOS-3D show a stable natural convection flow which is settled by the position of the vertical coolers. This flow is similar to the measured one in SUCOS-2D experiment. Analysis of the measured values of temperature shows that a different behavior of natural convection takes place in SUCOS-3D. Despite of a detailed description of the geometry including the modeling of the temperature probe support structure and of the boundary condition of the vertical coolers, the principal reasons which are responsible for the different behavior of the natural convection in the SUCOS-3D experiment were not found. Examination of the SUCOS-Experiments shows that inconsistencies appear between the experimental results of SUCOS-2D and -3D. These inconsistencies, which are not present in the calculations, were discussed with the experimenters. Despite of this difference between calculation and SUCOS-3D experiment, which is presumably based on a lack of detailed information on the real geometrical and thermal boundary conditions, the previous successful simulation of SUCOS-2D with the identification of 3d effects shows that the computer code FLUTAN is suited to detailed investigations of this kind of complex experiments.

Zusammenfassung

Im Rahmen der numerischen Untersuchungen der einphasigen Naturkonvektion im optionalen Sumpfkühlkonzept des EPR wird im Bericht die numerische Simulation eines Experiments in der Testanlage SUCOS-3D mit dem Rechenprogramm FLUTAN vorgestellt. Die Nachrechnungen von SUCOS-3D mit FLUTAN zeigen eine stabile Strömung der Naturkonvektion mit einem Drehsinn, der von der Position der vertikalen Kühler vorgegeben wird. Diese Strömung entspricht der in SUCOS-2D gemessenen

Strömung. Eine Analyse der Messdaten der Temperatur zeigt, dass im Experiment SUCOS-3D eine abgeschwächte Naturkonvektion stattfand. Trotz einer detaillierten Beschreibung der Geometrie bis zur Modellierung von zwei Temperaturmesslanzen und der thermischen Randbedingungen der vertikalen Kühler ist es nicht gelungen, die das Experiment beherrschenden Gründe für die abgeschwächte Naturkonvektion zu finden. Eine detaillierte Betrachtung der SUCOS-Experimente zeigt, dass Inkonsistenzen zwischen den experimentellen Ergebnissen von SUCOS-2D und -3D auftreten. Diese Inkonsistenzen, die nicht in den Rechnungen vorhanden sind, wurden mit den Experimentatoren diskutiert. Trotz der Abweichung zwischen Rechnung und SUCOS-3D Experiment, die vermutlich auf mangelnde Informationen über die tatsächlichen geometrischen und thermischen Randbedingungen basieren, zeigt die erfolgreiche Simulation von SUCOS-2D mit der Feststellung von dreidimensionalen Effekten, und diesem Beitrag zur Interpretation von SUCOS-3D, dass das Rechenprogramm FLUTAN für detaillierte Untersuchungen derart komplexer Experimente geeignet ist.

1. Einleitung

Für die Sumpfkühlung des EPR wurden ursprünglich zwei Konzepte untersucht, das des Firmenkonsortiums, und ein optionales Konzept von Siemens. Letzteres sollte von FZK sowohl numerisch als auch experimentell untersucht werden. Das Langzeitverhalten der einphasigen Nachwärmeabfuhr wurde numerisch mit dem Rechenprogramm FLUTAN analysiert [1,2,3]. Das zugehörige experimentelle SUCOS-Programm wurde im IKET an der zweidimensionalen skalierten Testanlage SUCOS-2D und an der dreidimensionalen skalierten Testanlage SUCOS-3D durchgeführt [4]. Der erste Schritt der numerischen Analyse war die Nachrechnung und Interpretation der zweidimensionalen Modellversuche SUCOS-2D [5]. Aufbauend auf den Erfahrungen aus diesen numerischen Analysen konzentrierten sich im Berichtszeitraum die Anwendungsrechnungen auf die Nachrechnung und Interpretation der dreidimensionalen Modellversuche SUCOS-3D [6]. Mit den numerischen Analysen soll geklärt werden, ob FLUTAN ein geeignetes Werkzeug für derartige Untersuchungen ist, und welcher Detaillierungsgrad notwendig ist, um numerisch die gewonnenen Erfahrungen und Ergebnisse auf den EPR-Sumpf zu übertragen.

2. SUCOS-3D Nachrechnung

2.1 Abbildung der Geometrie und Randbedingungen

SUCOS-3D stellt im Maßstab 1:20 eine mögliche Geometrie des Sumpfes des EPR dar (siehe Abbildung 1). Gegenüber dem zweidimensionalen Experiment, in dem die Details eines vertikalen Schnittes durch diesen Sumpf in Form eines Scheibenmodells dargestellt werden, wird hier auch der komplex geformte Grundriss realistisch abgebildet.

Unter Ausnutzung der Symmetrie der Anlage wurde eine Hälfte der Testanlage SUCOS-3D simuliert, die nach der Erfahrung mit der Analyse von SUCOS-2D bis ins Detail mit allen Strukturen, wie der Heizplatte, den Kühlerzuleitungen und inaktiven aufrecht stehenden Kühlern, modelliert werden musste. Das dreidimensionale Gitter besteht aus 691.000 Maschen für den Fluidbereich und 99.500 Oberflächenelementen. Für die Berechnung des Wärmeaustauschs in Strukturen werden zusätzlich 58.000 Maschen verwendet. Nahe der Kühler ist eine feine Auflösung der Grenzschichten des Geschwindigkeitsfeldes und des Temperaturfeldes notwendig. Die thermischen Randbedingungen für die Simulation von SUCOS-3D wurden mit Hilfe der Erfahrungen aus der numerischen Interpretation von SUCOS-2D entwickelt. Danach wurden zunächst die Oberflächentemperatur der Kühler entsprechend den Kühlwassertemperaturen im Experiment vorgegeben. Es wurde ein Experiment ausgewählt, das bezüglich der thermischen Randbedingungen vergleichbar mit dem zuvor untersuchten 2D Experiment ist. Die horizontalen und äußeren (rechten) vertikalen Kühler sind in Betrieb, während alle aufrechten und die inneren (linken) vertikalen Kühler nicht aktiv sind. Dabei war die gemessene Sumpftemperatur 32.6 ^{0}C.

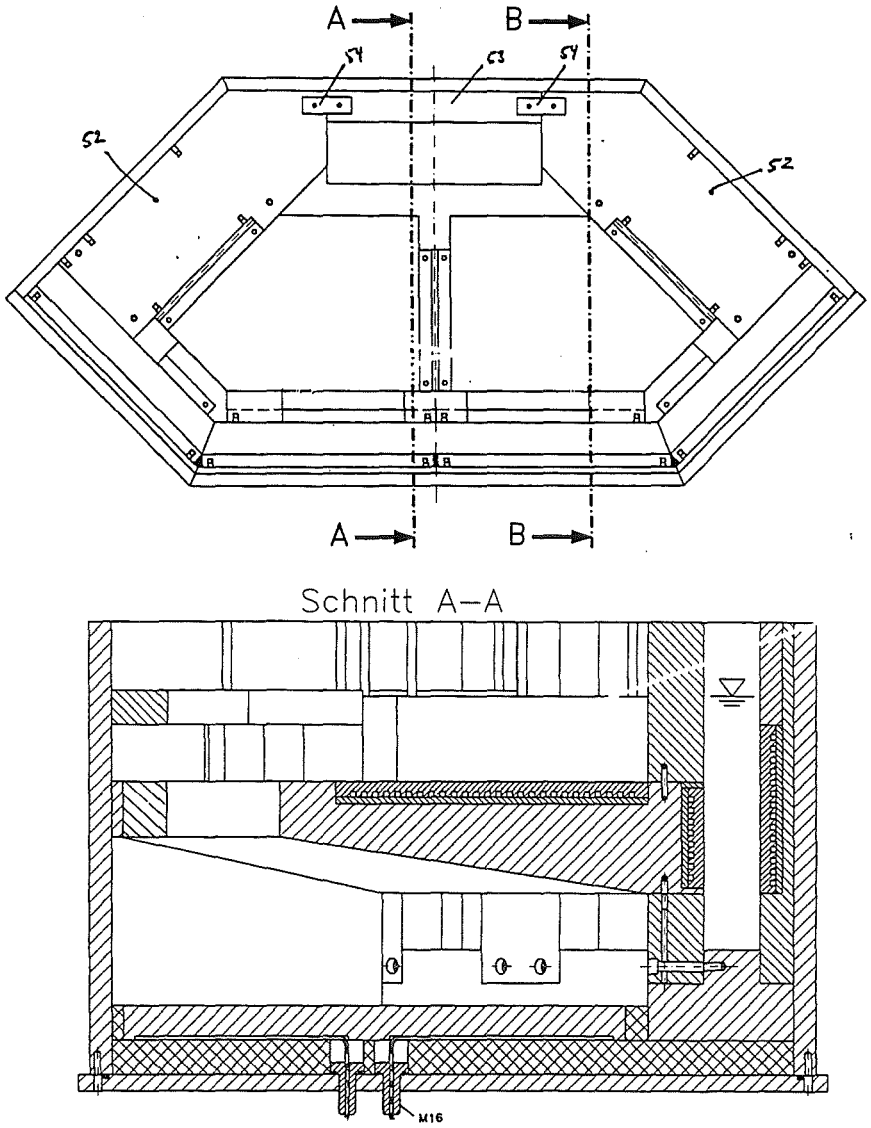


Abbildung 1: Testanlage SUCOS-3D, Draufsicht und Schnitt A-A.

2.2 Ergebnisse

Die Rechnung wurde auf einer CRAY J-916 mit einem Hauptspeicherbedarf von 2,7 Gbyte durchgeführt. Die transiente Phase der Nachrechnung von SUCOS-3D, die einer quasi-stationären Rechnung von 4 Stunden Realzeit folgt, zeigt nach 227 s Realzeit im zeitlichen Mittel der instationären Strömung keine signifikante Änderung zur stationären Rechnung. In der Abbildung 2 wird das berechnete momentane Temperaturfeld auf den Strukturoberflächen dargestellt. Das stark zeitabhängige Temperaturfeld auf der Heizplatte (rechts) erweist sich als sehr strähnig, das auf dem rechten und horizontalen Kühler ist dagegen sehr homogen. Aus diesem Bild kann man auch die Komplexität der simulierten Geometrie erkennen.

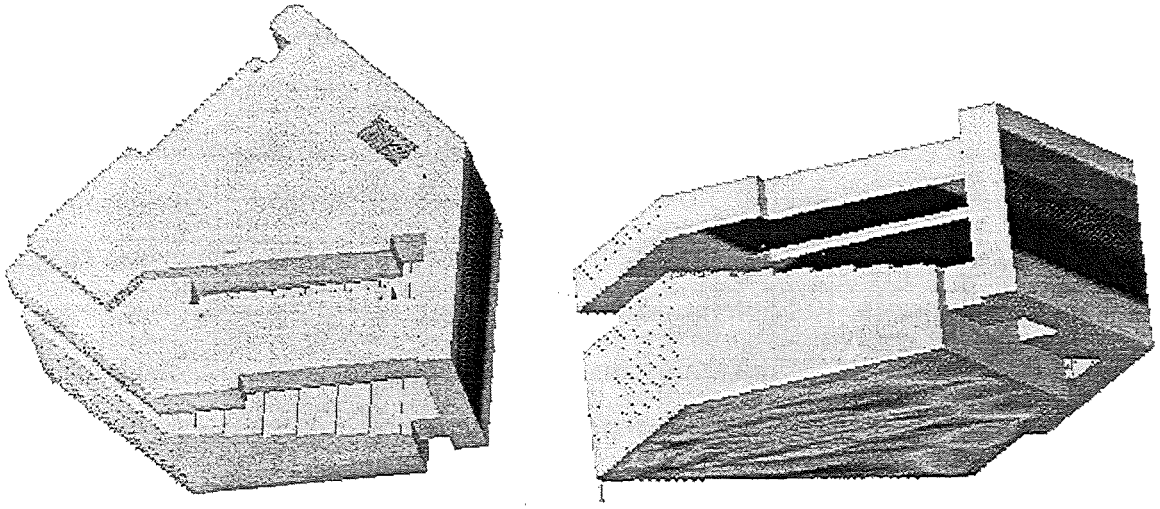


Abbildung 2: Berechnetes Temperaturfeld auf den den Fluidbereich einschließenden Strukturoberflächen von SUCOS-3D; Blick von schräg oben (links); Blick von schräg unten (rechts).

Die berechnete Sumpf-Temperatur beträgt 29.2 ^{0}C, siehe Abbildung 3. Trotz detaillierter Abbildung der geometrischen und thermischen Eigenschaften des Experimentes SUCOS-3D zeigt die berechnete Sumpf-Temperatur gegenüber der gemessenen (32.6 ^{0}C) eine auf die Kühlwassereintrittstemperatur bezogene Abweichung $(T_{s,rech}-T_{s,exp}) / (T_{s,exp}-20)$ um circa 30%.

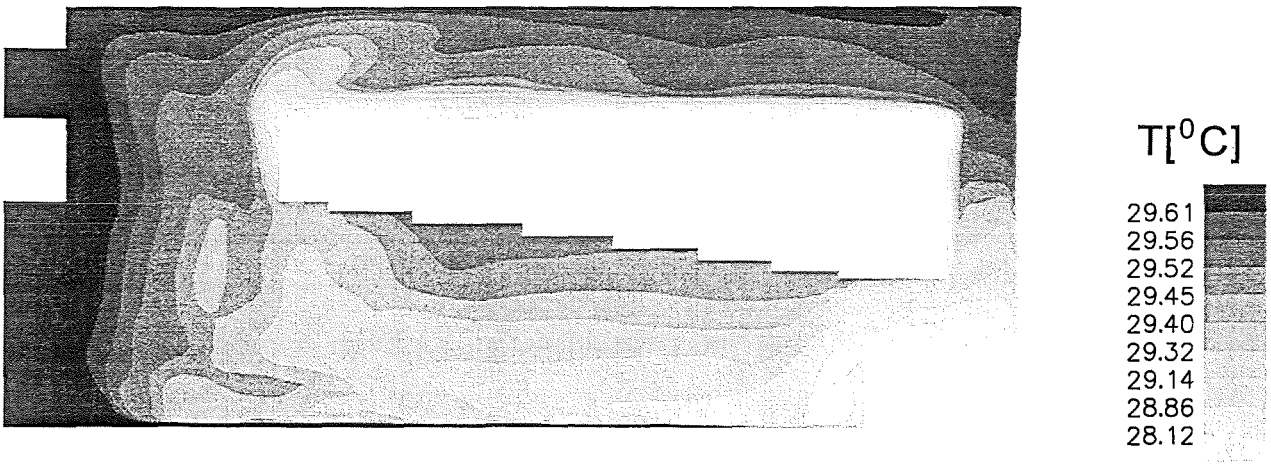


Abbildung 3: Isolinien der Temperatur, Rechnung, über 120 s gemittelte Werte. Vertikaler Schnitt etwa durch die Mitte des Rechengebietes.

Eine Analyse der Skalierung der thermischen Eigenschaften von SUCOS-2D und SUCOS-3D zeigt Inkonsistenzen bei den gemessenen Sumpf-Temperaturen. Beim

Vergleich der Geometrien beider Anlagen fällt auf, dass zwar die Heizerflächen um den Faktor 4 und die Flächen der horizontalen Kühler um den Faktor 4.2 skaliert sind, dass aber die Flächen der vertikal rechten Kühler um den Faktor 6.8 skaliert sind. Bei SUCOS-2D wurde eine Sumpf-Temperatur von 30.1 ^{0} C im Experiment ohne Versperrung des Kamins und mit den horizontalen und rechten vertikalen Kühlern in Betrieb gemessen. Da in SUCO-3D die vertikalen Kühler eine um 70% über die Skalierung hinausgehende größere Kühlfläche aufweisen, sollte in SUCOS-3D eine deutliche Abnahme der Sumpf-Temperatur auftreten. Diese Abnahme kann geschwächt werden, weil die im Experiment SUCOS-2D dreidimensionalen Effekte durch die Anschlussröhren der Kühler, die die Sumpf-Temperatur reduzieren, in SUCOS-3D vernachlässigt werden können. Diese erwartete Abnahme der Sumpf-Temperatur in SUCOS-3D wird in der Rechnung auch tatsächlich simuliert. Dagegen wird eine deutliche höhere Temperatur in SUCOS-3D gemessen.

Tabelle 1: Kühlerleistung Q pro Fläche A und Temperaturanstieg T_s des Sumpfes aus dem Experiment und aus der Rechnung

$Q / [A (T_s - 20)]$	Experiment T_s=32.6 ^{0}C	Rechnung T_s=29.4 ^{0}C
Horizontale Kühler	148 W/m^{2}K	138 W/m^{2}K
Vertikale Kühler	229 W/m^{2}K	413 W/m^{2}K

In der Tabelle 1 sind die Kühlerleistung pro Fläche und Temperaturanstieg vom Experiment und von der FLUTAN-Rechnung dargestellt. Im Experiment ist die Leistung der vertikalen Kühler trotz der überskalierten Kühlfläche sehr niedrig. In der Rechnung wird danach die Kühlerleistung der vertikalen Kühler deutlich überschätzt. Darin liegt der wesentliche Grund für die Abweichung in der Sumpftemperatur zwischen Experiment und Rechnung. Warum allerdings der vertikale Kühler im Experiment so wenig Wärme abführt, ist damit noch nicht geklärt.

Das berechnete Geschwindigkeitsfeld zeigt ein ähnliches Strömungsverhalten wie die zweidimensionalen Nachrechnungen von SUCOS-2D, siehe Abbildung 4. Eine stabile Naturkonvektion wird simuliert, deren Strömungsrichtung durch die vertikalen Kühler bestimmt wird. Das beheizte Fluid strömt durch den Kamin (links) nach oben und wird gekühlt durch die horizontalen und vertikalen Kühler (rechts). Ein kalter Rückstrom fließt

auch von den horizontalen Kühlern durch den Kamin hinab. Da im Experiment nur Temperaturmessungen durchgeführt wurden, kann der Strömungsverlauf im Experiment nur nach einer Interpretation der gemessenen Temperaturen und einem Vergleich mit den gemessenen Temperaturen in SUCOS-2D rekonstruiert werden.

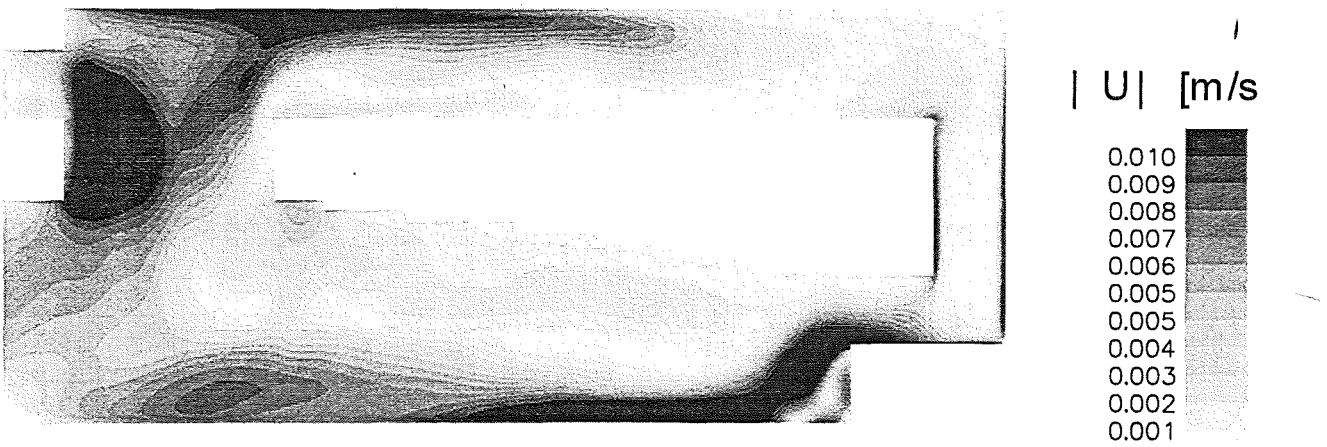


Abbildung 4: Isolinien der Geschwindigkeitsbeträge, Rechnung, über 120 s gemittelte Werte. Lage des vertikalen Schnittes wie in Abb. 3.

Abbildung 5 zeigt die Traversen der gemessenen Temperaturen für das Experiment SUCOS-2D, bei dem die Strömung der Naturkonvektion als heißer Pfad durch den Kamin aufsteigt und im vertikalen Seitenbereich abgekühlt wird. Die Temperaturen sind demzufolge oben im Plenum höher als unten im Poolbereich. Außerdem ist die Temperatur über der Stufe (gekühltes Fluid vom vertikalen Kühler) folglich niedriger als im Pool.

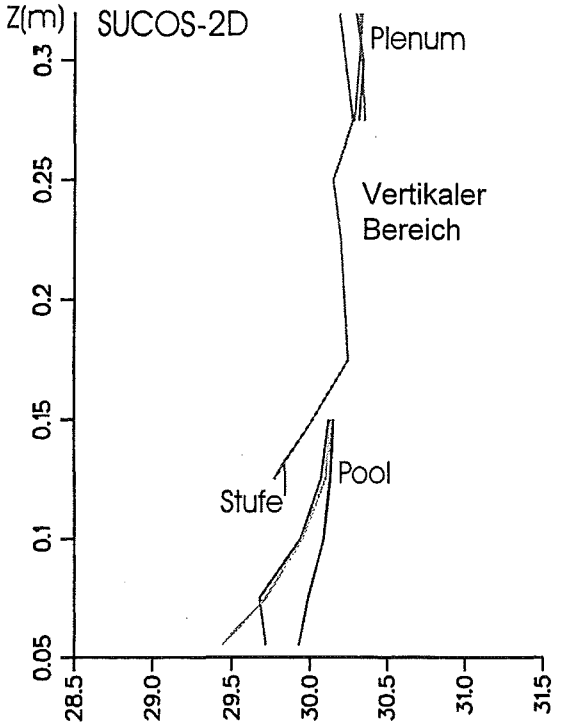


Abbildung 5: Gemessene Temperaturen in SUCOS-2D.

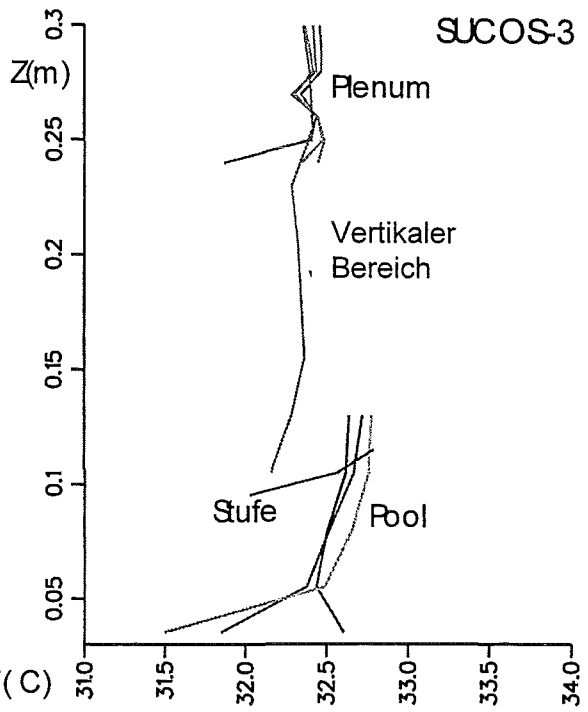


Abbildung 6: Gemessene Temperaturen in SUCOS-3D

In SUCOS-3D wurden Temperaturen gemessen, die an 2 parallel verlaufenden Traversen mit unterschiedlichen Messpositionen 100 mm rechts und links von der Symmetrieebene angeordnet waren. Somit entsprechen die Messpositionen in x- und z-Richtung etwa denen von SUCOS-2D. Die Traversen der gemessenen Temperaturen sind in Abbildung 6 dargestellt. Die höchsten Temperaturen wurden unter dem schrägen Dach mit einem Temperaturanstieg längs der Dachneigung gemessen. Der Hauptstrom im Plenum weist niedrigere Temperaturen als der Pool auf. Dieses bedeutet, dass der heißeste Strömungspfad im Poolbereich unter der Dachneigung bis hin zur Stufe verlief, wo dieses Phänomen durch die hohe Temperatur der obersten Messstelle der axialen Traverse auf der Stufe verdeutlicht wird. Während in SUCOS-3D hier die höchsten Temperaturen erfasst wurden, entsprach in SUCOS-2D die Temperatur auf der Stufe dem abgekühlten Fluid aus dem vertikalen Seitenbereich.

Diese Analyse ergibt, dass sich im SUCOS-3D-Experiment ein anderes Strömungsverhalten einstellte als in SUCOS-2D, obwohl beide Experimente ähnlich skalierte Testanlagen des Reaktorsumpfes sind und deshalb ähnliches Strömungsverhalten haben sollten.

Die Nachrechnung von SUCOS-3D zeigt demnach nicht nur eine quantitative, sondern auch eine qualitative Abweichung zum Experiment:

1. Es wird eine niedrigere Sumpf-Temperatur berechnet, und
2. es wird eine stabile Naturkonvektion wie bei dem Experiment SUCOS-2D berechnet, während im Experiment SUCOS-3D ein unterschiedliches Strömungsverhalten der Naturkonvektion aus den Messungen abgeleitet werden kann.

2.3 Weitere Numerische Untersuchungen zur Experimnet-Interpretation

Um die phänomenologischen Gründe für die Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment zu analysieren, wurden weitere Rechnungen durchgeführt, die besonders durch die Erfahrungen aus den Nachrechnungen von SUCOS-2D geprägt sind. Eine erste Untersuchung war die zusätzliche Modellierung der Temperaturmesslanzen, die sich im Kamin des Experimentes befanden, und die über thermische Ausgleichsvorgänge einen deutlichen Einfluss auf die Strömung haben können. Der Grund dieser Untersuchung ist die Tatsache, dass die Naturkonvektion in großen Behältern auf thermische Störungen empfindlich reagiert und dass die in Rohren gebündelten Thermoelemente durch den Kamin geführt wurden. Die Strömung durch den Kamin ist wegen der gegenläufigen kalten Rückströmung sehr komplex und wurde beim Experiment durch die Temperaturmesslanze, deren Positionen während der Messung variierten, gestört. In der ersten Nachrechnung wurden die Temperaturmesslanze nicht simuliert. Bei der folgenden Untersuchung wurden zwei Messlanzen als thermische Störung in dem Kamin angeordnet und als zwei Vierkantstrukturen von 4 mm x 8 mm aus Stahl modelliert, deren Wärmeleitung und Wärmekapazität durch das Strukturmodell berücksichtigt werden. In dieser Untersuchung wurde auch die thermische Behandlung der beheizten Kupferplatte besser an die Konstruktion angepasst. Dazu wurden die einzelnen Platten mit einem Spalt thermisch voneinander getrennt. Außerdem lag im Experiment die Heizwendel in Nuten im Kupfer; entsprechend wurde für die numerische Untersuchung die Materialstärke der Heizplatte um die Nuttiefe reduziert (von 30 auf 26 mm). Diese Untersuchung zeigt eine deutliche Temperaturerhöhung unter dem schrägen Dach (31.1 ^{0}C). Dennoch ergibt sich keine Auswirkung auf die Orientierung der stabilen Strömung der Naturkonvektion, die wie in der ersten Rechnung simuliert wird,

und auf die Wärmeabfuhr der vertikalen rechten Kühler, die auch hier wesentlich zu groß bleibt.

In den bisherigen Rechnungen von SUCOS-3D werden die Leistungen der vertikalen Kühler deutlich überschätzt. Dabei wurden die vertikalen Kühler mit einer vom Experiment vorgegebenen Temperaturverteilung simuliert. Eine andere Möglichkeit zur Simulation der thermischen Randbedingungen der vertikalen Kühler ist die Vorgabe der Wärmestromdichte aus dem Experiment. In einer weiteren Untersuchung wurde daher eine Wärmestromdichte von –2830 W/cm^2 mit konstanter Verteilung als thermische Randbedingung für die vertikal rechten Kühler vorgegeben. Dieses entspricht 160 W je Kühler. Die Modellierung der Temperaturmesslanze und der dünnen Heizplatte bleibt bestehen. Ziel dieser Untersuchung ist es, die möglichen Auswirkungen der geänderten Kühlleistung bei einem direkten Vergleich der gemessenen und berechneten Temperaturverläufe erkennen zu können.

Die quasi stationäre Rechnung weist nach 5046 s nahezu thermisches Gleichgewicht bei einer Sumpf-Temperatur von nun 32.8 ^{0}C auf, siehe Abbildung 7. Die gute Übereinstimmung mit dem Experiment bestätigt, dass im Experiment tatsächlich die vorgegebene Kühlleistung vorlag. Dies bedeutet, dass die vertikalen Kühler nur 50% der Kühlleistung erbrachte, die nach der Erfahrung mit SUCOS-2D zu erwarten war.

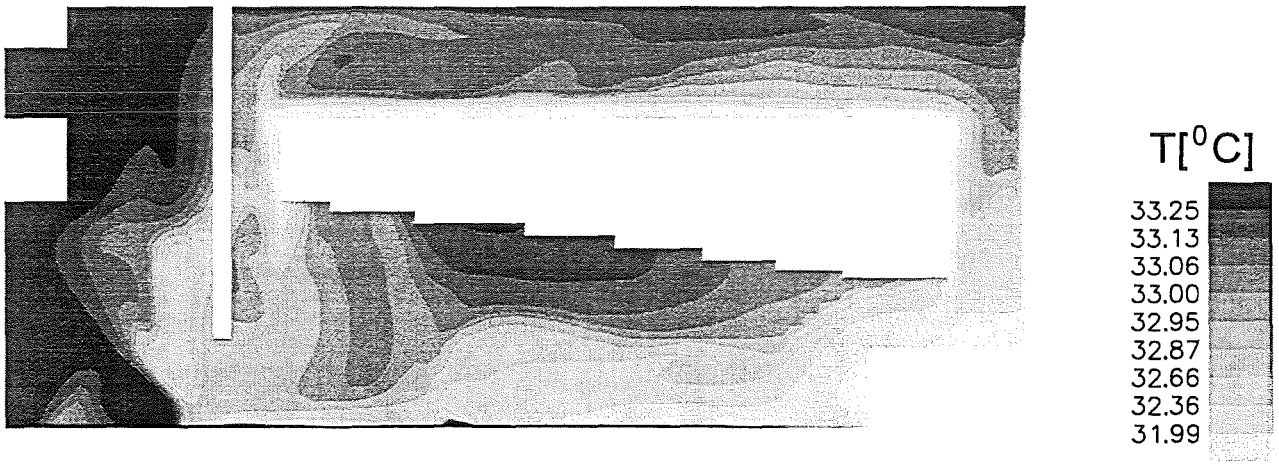


Abbildung 7: Isolinien der Temperatur, Rechnung mit Temperaturmeßlanze und vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler, über 120 s gemittelte Werte.

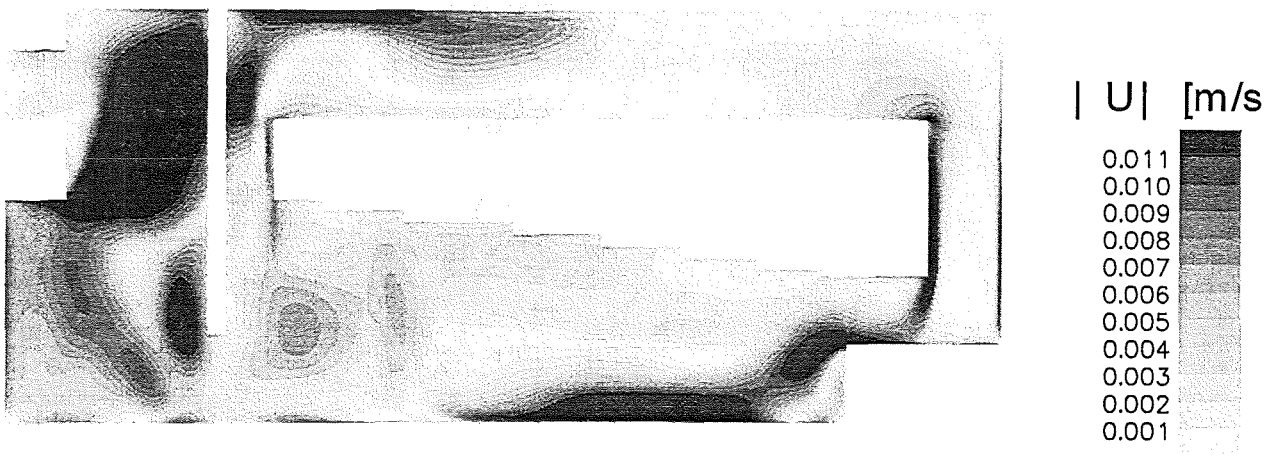


Abbildung 8: Isolinien der Geschwindigkeitsbeträge, Rechnung mit Temperaturmeßlanze und vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler, über 120 s gemittelte Werte.

Trotz der guten Überstimmung bei der Sumpf-Temperatur wird auch bei dieser Rechnung eine stabile Naturkonvektion simuliert, deren Strömungsrichtung durch die vertikalen Kühler bestimmt wird, siehe Abbildung 8. Es wird also auch bei dieser Simulation ein anderes Strömungsverhalten als im Experiment berechnet.

Eine detaillierte Analyse der Unterschiede des Strömungsverhaltens in der Rechnung und im Experiment wird mit Hilfe von Traversen der Temperaturen durchgeführt. In der Abbildung 9 werden die vertikalen Profile der berechneten und gemessenen Temperaturen dargestellt. Die vertikale Traverse befindet sich im vertikalen Seitenbereich 5 mm vor dem inaktiven linken Kühler. Aus dem berechneten Temperaturprofil kann der folgende Strömungsverlauf entnommen werden: die Abnahme der Temperatur in der Höhe von 0.22 m signalisiert, dass kaltes Fluid von den horizontalen Kühlern im vertikalen Seitenbereich in der Simulation herunterströmt. In den gemessenen Profilen (mit minimalen und maximalen Messwerten) ist ein Rauschen oder eine Streuung des Signals, wie es auf der Stufe als Folge des kalten Fluids vom vertikalen rechten Kühler auftritt, oben im Bereich des horizontalen Kühlers nicht erkennbar. Fürs Experiment gilt daher das überraschende Ergebnis, dass im Bereich der Thermoelemente keine nennenswerte kalte Strömung vom horizontalen Kühler in den vertikalen Seitenbereich erfolgte. Die Rechnung hingegen zeigt, dass das kalte Fluid gleichmäßig verteilt vom horizontalen Kühler in den vertikalen Kanal strömt.

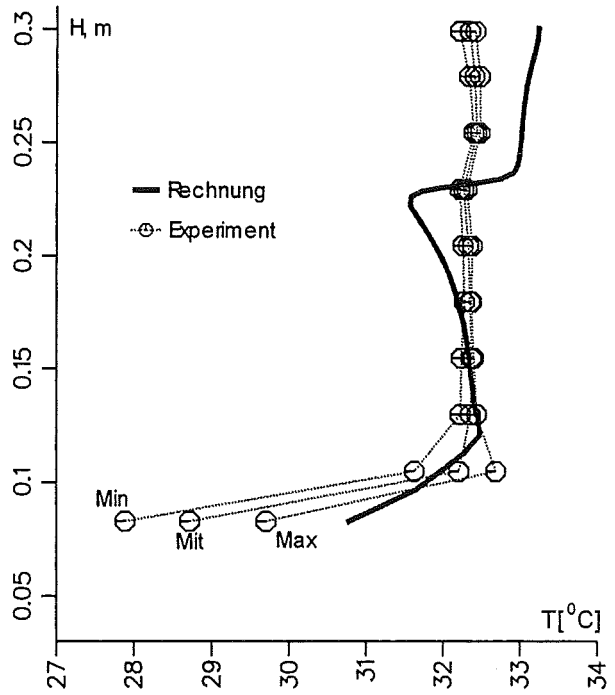


Abbildung 9: Verteilung der Temperatur entlang der Traverse im vertikalen Seitenbereich 5 mm vor dem inaktiven linken Kühler. Vergleich zwischen Messwerten (minimalen, zeitlich gemittelten und maximalen) und über 120 s gemittelte Werte aus der Rechnung mit Temperaturmesslanze und vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler.

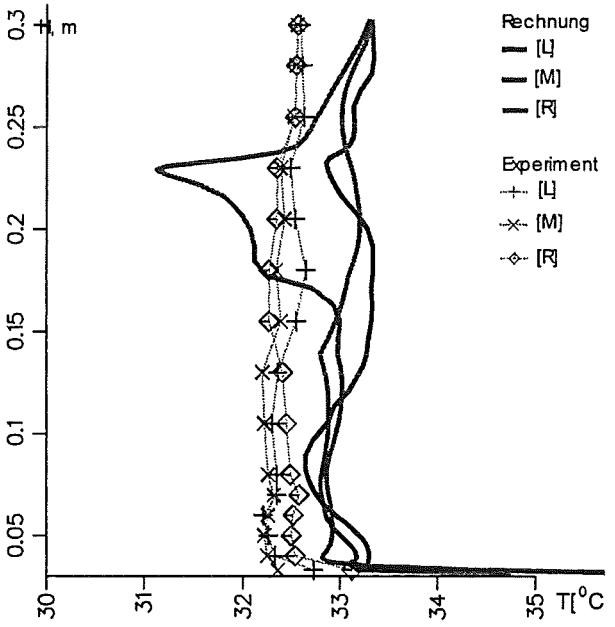


Abbildung 10: Verteilung der Temperatur auf der Traverse im Kamin mittig [M] und je 5 mm von den linken [L] und rechten [R] Kaminwänden. Vergleich zwischen Messwerten und berechneten Werten aus der Rechnung mit vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler, mit Temperaturmesslanze, über 120 s gemittelte Werte.

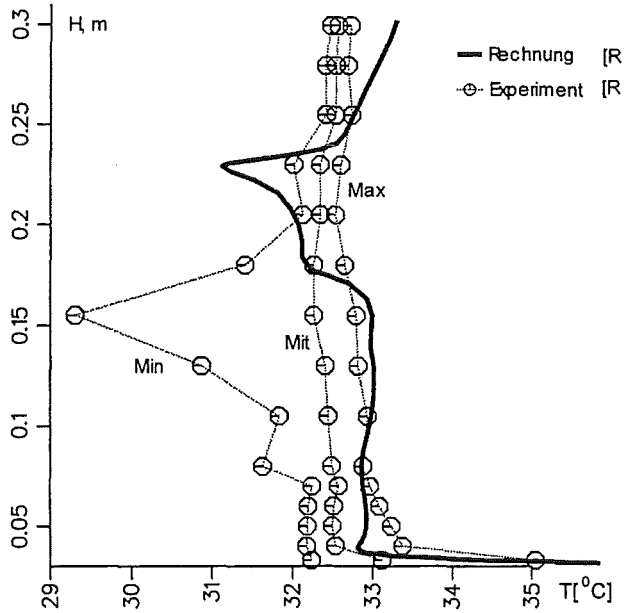


Abbildung 11: Verteilung der Temperatur auf der Traverse 5 mm von den rechten [R] Kaminwänden. Vergleich zwischen Messwerten (minimalen, zeitlich gemittelten und maximalen) und über 120 s gemittelten Werten aus der Rechnung mit vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler, mit Temperaturmesslanze.

In der Abbildung 10 werden drei gemessene und berechnete axiale Temperaturprofile im Kamin, mittig [M] und je 5 mm von den linken [L] und rechten [R] Kaminwänden entfernt, dargestellt. Die berechnete rechte Temperaturtraverse [R] zeigt durch eine drastische Abnahme der Temperatur auf der Höhe des horizontalen Kühlers, dass kaltes Fluid vom horizontalen Kühler zurückströmt, so, wie dies auch in Experiment und Nachrechnung von SUCOS-2D beobachtet wurde. Die Traverse der gemessenen Temperatur weist dagegen eine kontinuierliche Ortsverteilung auf. In Abbildung 11 wird nur die Verteilung der berechneten Temperatur auf der Traverse [R] mit den zeitlich gemittelten, den minimalen und den maximalen Messwerten verglichen. Es ist eine deutliche Schwankung an der Traverse der minimalen Messwerte zu erkennen. Das ist ein Signal für kalte Strömungsballen, die nur vom horizontalen Kühler getropft kommen konnten. Aber die Position der gemessenen kalten Tropfen ist nicht auf der Höhe der horizontalen Wärmetauscher, sondern unter dem Kamin. Sie weicht damit von der erwarteten berechneten Position der kalten Rückströmung im oberen Kaminbereich ab. Die Rechnung simuliert eine gleichmäßig verteilte Rückströmung vom horizontalen Kühler zum Kamin. Im Experiment weisen die Messdaten auf das Fehlen eines nennenswerten Rückstroms vom großen horizontalen Kühler hin. Unter dem Kamin strömt aber kaltes Fluid, das dann wohl vom kleinen horizontalen Kühler kommt. Dies bedeutet, dass im

Experiment nicht die erwartete Strömung im Bereich der Thermoelemente, über dem horizontalen großen Kühler und im horizontalen Seitenbereich auftrat, sondern ein erhöhter Strömungseinfluss auf dem kleinen überdachten horizontalen Kühler stattfand, (siehe Abbildung 12). Diese Interpretation wird durch die Leistungsbilanzen der horizontalen Kühler unterstützt (siehe Tabelle 2). Während die Leistung der großen und kleinen Kühler in der Rechnung proportional zur Kühlfläche sind, führen die kleinen Kühler im Experiment fast ebensoviel Wärme ab wie die großen Kühler. Dabei beträgt die Fläche der kleinen Kühler nur 43% der von den großen Kühlern.

Ein naheliegender Erklärungsversuch für die erhöhte Rückströmung von kaltem Fluid aus dem Bereich des kleinen horizontalen Kühlers in den Kamin im Experiment konzentriert sich auf eine mögliche geringe Neigung dieses Kühlers entgegen der erwarteten Strömungsrichtung. In der Tat zeigen zusätzliche numerische Studien mit dem zweidimensionalen Modell, dass schon eine Neigung von nur einem Prozent eine um 70% verstärkte Rückströmung auslöst und dabei den Wärmeübergang auf dem horizontalen Kühler um 55% vergrößert [7].

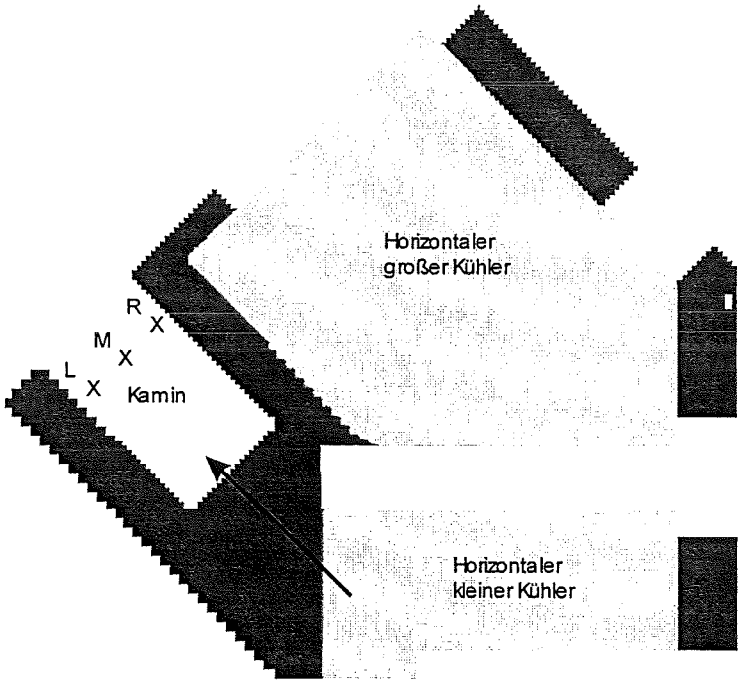


Abbildung 12: Anordnung der horizontalen Kühler in der Simulation von SUCOS-3D. Der Pfeil bezeichnet die erhöhte Rückströmung auf dem kleinen horizontalen Kühler. [L],[M], [R] kennzeichnet die Position der Temperaturprofile aus Abb. 10 und 11.

Tabelle 2: Kühlerleistungen aus dem Experiment und aus der Rechnung mit Temperaturmesslanze und vorgegebenen Wärmeflüssen als Randbedingung für die vertikalen Kühler.

Kühlerleistung	Experiment T_s=32.6 °C	Rechnung T_s=32.8 °C
Horizontaler kleiner Kühler	118.2 W	98 W
Horizontaler großer Kühler	130.2 W	191 W
Vertikaler rechter Kühler A	159.6 W	159.6 W
Vertikaler rechter Kühler B	160.9 W	160.9 W

3. Schlussfolgerungen

Die Nachrechnungen von SUCOS-3D mit dem Rechenprogramm FLUTAN zeigen trotz einer detaillierten Beschreibung der Geometrie bis hin zur Modellierung von zwei Temperaturmesslanzen die folgenden Abweichungen vom Experiment:

1. Werden die thermischen Randbedingungen für die Kühler entsprechend den Kühlwassertemperaturen aus dem Experiment spezifiziert, so wird eine zu niedrige Sumpftemperatur berechnet. Die Modellierung der Temperaturmesslanze als thermische Störung bringt zwar eine Zunahme der berechneten Sumpftemperatur, aber nicht genug, um eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten zu erreichen.
2. Werden die thermischen Randbedingungen für die vertikalen Kühler entsprechend den Wärmeströmen aus dem Experiment vorgegeben, so stellt sich zwar eine gute Übereinstimmung der berechneten Pooltemperatur mit der gemessenen ein, aber die Unterschiede zwischen den berechneten und gemessenen vertikalen Temperaturprofilen weisen auf wesentliche Unterschiede in den Strömungswegen hin. Es wird eine stabile Strömung der Naturkonvektion mit einem Drehsinn, der von der Position der vertikalen Kühler vorgegeben wird, berechnet. Diese Strömung entspricht der in SUCOS-2D gemessenen Strömung. Eine Analyse der Messdaten der Temperatur zeigt, dass im Experiment dort eine abgeschwächte Strömung stattfand.

Aus einer Analyse der Bilanz der Kühlerleistungen geht hervor, dass in der Rechnung die Leistung der vertikalen rechten Kühler im Vergleich mit dem Experiment drastisch

überschätzt wird. In dieser Rechnung wurden die vertikalen Kühler durch aus dem Experiment vorgegebene Oberflächentemperaturen simuliert. Eine weitere Untersuchung wurde mit einer Rechnung durchgeführt, in der die thermischen Randbedingungen der vertikalen Kühler mit aus dem Experiment vorgegebenen Wärmeströmen simuliert wurden. Obwohl die neue Rechnung eine gute Übereinstimmung der Sumpf-Temperatur erreicht, wird die stabile Strömung der Naturkonvektion wie in der vorherigen Rechnung simuliert. Mit einer weiteren Analyse aus dem Vergleich zwischen der neuen Rechnung und dem Experiment wurde auch ein unterschiedliches Strömungsverhalten auf dem horizontalen Kühlern festgestellt. Die in SUCOS-3D registrierten Temperaturen können auch in dieser Rechnung nicht nachvollzogen werden.

Eine Betrachtung der SUCOS-Experimente zeigt, dass Inkonsistenzen zwischen den experimentellen Ergebnisse von SUCOS-2D und SUCOS-3D auftreten. Diese Inkonsistenzen, die nicht in den Rechnungen vorhanden sind, wurden mit den Experimentatoren diskutiert:

- Trotz einer Überskalierung der Kühlflache der vertikalen rechten Kühler wird im SUCOS-3D Experiment eine deutliche höhere Sumpf-Temperatur gemessen als die in SUCOS-2D. Die gemessene Sumpf-Temperatur in SUCOS-3D sollte niedriger sein als die in SUCOS-2D, wie in den Rechnungen.
- In SUCOS-3D stellte sich ein anderes Strömungsverhalten ein als in SUCOS-2D, obwohl beide Experimente ähnlich skalierte Testanlagen des Reaktorsumpfes sind und deshalb ähnliches Strömungsverhalten haben sollten. Die Rechnungen simulieren dagegen ähnliches Strömungsverhalten der Naturkonvektion.

Nachdem die Experimente bei Durchführung dieser Rechnungen bereits demontiert waren, lassen sich diese Widersprüche vermutlich nicht mehr klären. Insbesondere lässt sich auch nicht mehr feststellen, ob die hier postulierte und numerisch verifizierte Schräglage des kleinen horizontalen Kühlers, die die Phänomene erklären könnte, tatsächlich existierte.

Die wichtigste Aussage zu den mit FLUTAN durchgeführten numerischen Analysen von SUCOS Experimenten ist, dass die Naturkonvektion durch lokale thermische Störungen, wie die Anschlussrohre der Kühler in SUCOS-2D oder die Temperaturmesslanzen in SUCOS-3D, stark beeinflusst wird, da die sonst stabilisierenden Druckverluste hier nicht

relevant sind. In der Tat mussten diese Störungen mitmodelliert werden, um eine realistische Simulation der experimentell festgestellten Naturkonvektionsmuster und Wärmeübertragungsdaten zu erzielen. Wenn aber die Experimente gemäß dieser Simulationsergebnisse sehr empfindlich auf experimentspezifische Eigenheiten reagieren, dann wird die Übertragbarkeit der experimentellen Ergebnisse aus SUCOS-2D und -3D auf die Bedingungen des Reaktorsumpfes nur grob durch Skalierungsbetrachtungen möglich sein; quantitativ wird sie nur über ein validiertes Rechenprogramm und erfahrene Programmbenutzer zulässig sein.

Trotz der Abweichung zwischen Rechnung und SUCOS-3D Experiment, die vermutlich auf mangelnden Informationen über die tatsächlichen geometrischen und thermischen Randbedingungen basieren, zeigt die erfolgreiche Simulation von SUCOS-2D mit der Feststellung von dreidimensionalen Effekten, und diesem Beitrag zur Interpretation von SUCOS-3D, dass das Rechenprogramm FLUTAN für detaillierte Untersuchungen derart komplexer Experimente geeignet ist.

Das Vorhaben wird mit einer entsprechenden Dokumentation dieser Analysen abgeschlossen.

Literatur

1 G. Willerding, W. Baumann,
FLUTAN 2.0 - Input Specifications
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5712, Mai 1996

2 G. Grötzbach, L. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen,
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 491 – 506

3 L. Carteciano, M. Wörner, G. Grötzbach,
Erweiterte Turbulenzmodelle für technische Anwendung von FLUTAN auf Naturkonvektion,
Jahrestagung Kerntechnik 99, Karlsruhe, 18-20 Mai,1999, pp. 129-134

4 J.U. Knebel,
SUCO-Programm
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung Jahresbericht 1995
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA-5780, August 1996

5 L. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach,
Theoretical Interpretation of the Single Phase Sump Cooling Experiments SUCOS with the FLUTAN Code,
Ninth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH), San Francisco October 3-8, 1999, CD-Rom Log 107

6 G. Grötzbach, L. Carteciano, B. Dorr,
Analyse der einphasigen Langzeitkühlung des Sumpfes mit dem Rechenprogramm FLUTAN,
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 309 – 316

7 L. Carteciano, B. Dorr, G. Grötzbach,
Numerical Investigation of the Single Phase Natural Convection in Sump Cooling Experiments with the FLUTAN Code.
The Tenth Int. Conf. On Emerging Nuclear Energy Systems (ICENES 2000), Petten, The Netherlands, 24.-28. Sept. 2000

III. Passive Containment Cooling (PASCO Programme)

(X. Cheng, H.J. Neitzel, He. Schmidt, J.U. Knebel, IKET)

Abstract

In addition to the sump cooling concept explained in detail in the preceding chapter, the Forschungszentrum Karlsruhe and the Universität Karlsruhe have proposed a composite containment concept, which copes with severe accidents in a completely passive way. 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 programme.

The main objectives of the separate-effects programme PASCO (acronym for *Passive Containment Cooling*) are to investigate the physical phenomena involved in natural air convection and thermal radiation, to study methods to enhance the heat transfer by channel inserts and water films, to develop models and heat transfer correlations for design of passive containment cooling systems and to provide data base for validation of computer codes.

Zusammenfassung

Neben der Möglichkeit der Sumpfkühlung, die ausführlich im Abschnitt 7.1 dargestellt wird, wurde von FZK und der Universität Karlsruhe ein weiteres Konzept vorgeschlagen, bei dem nach schweren Unfällen die Containmentkühlung völlig passiv vonstatten geht. Charakteristisch für dieses Konzept ist die Tatsache, dass die Nachwärmeabfuhr vom Containment durch Naturkonvektion plus Wärmestrahlung erfolgt. Dieses Konzept wird im Rahmen des PASCO-Programms untersucht.

Im Berichtszeitraum wurden weitere Versuche in der PASCO-Anlage durchgeführt. Das PASCO-Konzept hat sich als vielversprechend erwiesen.

1. Introduction

The PASCO programme consists of model experiments performed in the PASCO test facility, that are backed up by numerical calculations. 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 Experimental results

The PASCO test facility, as shown in figure 1, has been built at 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.

In the period of this report experiments have been continued with channel inserts. The channel inserts are ribs of various heights (*25*, *50*, *100 mm*). The intervals between two channel inserts are from *0.5 m* to *2 m*. The ribs are arranged horizontally. The effect of different test parameters, i.e. rib height, interval and gap size, on the improvement of the heat removal was investigated. Figure 2 shows the geometric arrangement and geometric parameters of the channel inserts.

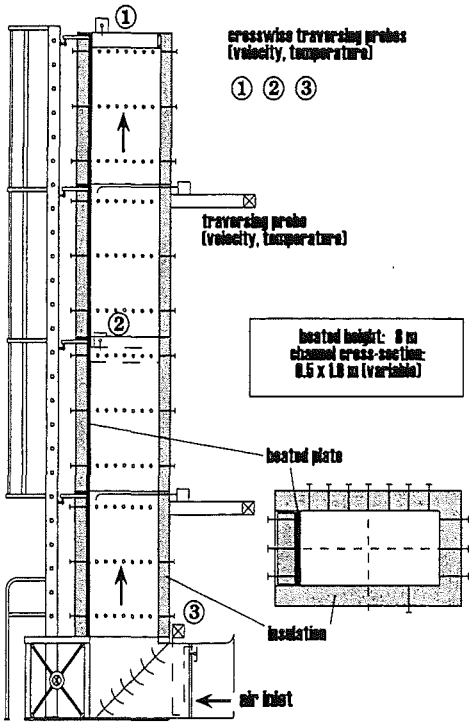


Figure 1: PASCO test facility.

For evaluating the effect of channel inserts on heat removal, a heat removal enhancement factor is defined as follows:

$$\Delta Q = \frac{Q_i - Q_0}{Q_0} \qquad (1)$$

Herein Q_i and Q_0 stand for heat power transferred with and without channel inserts, respectively, whereas other test conditions are identical.

Figure 3 shows the effect of the gap size δ on the heat transfer improvement. The ribs are horizontally oriented and the interval between neighbouring ribs is *1 m*. The maximum heat transfer enhancement has been achieved at a gap size of *15 mm* for the rib height of *100 mm* and at a gap size of about *10 mm* for the rib height of *25 mm*.

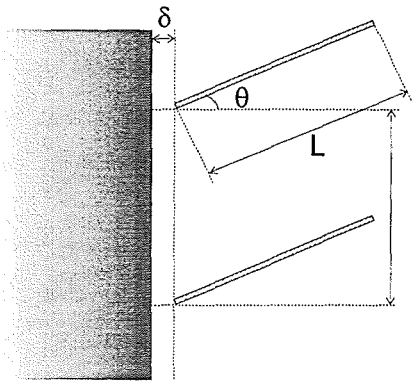


Figure 2: Geometries of channel inserts.

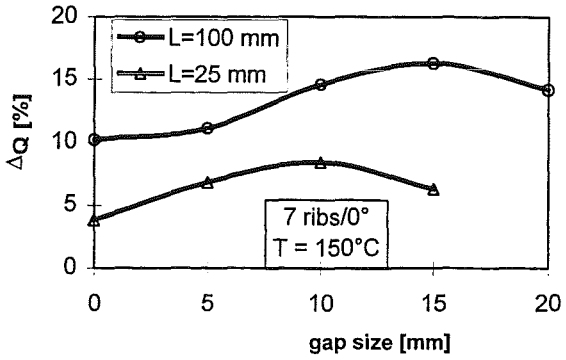


Figure 3: Effect of gap size.

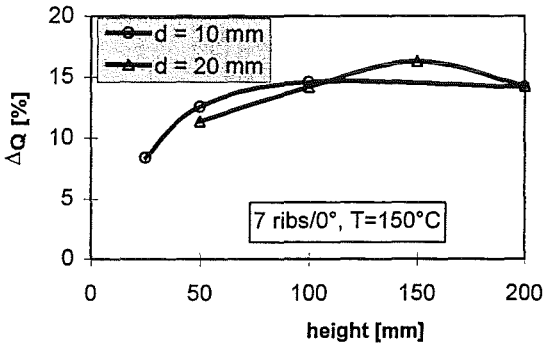


Figure 4: Effect of rib height.

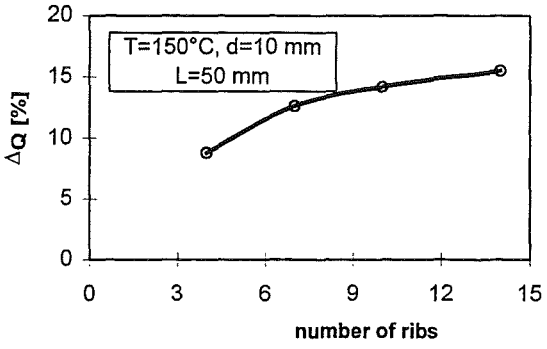


Figure 5: Effect of ribs interval.

Figure 4 shows the effect of the rib height on the heat removal improvement. For horizontal arrangement with an interval of *1 m* and a gap size of *20 mm*, heat removal enhancement at a rib height of *150 mm* is more significant than at a height of *100 mm* or *200 mm*. This confirms the results of previous tests [1]. For a small gap size (*10 mm*) the optimum rib height is about *100 mm*.

Figure 5 shows the effect of the rib interval or the rib number on the heat transfer improvement. It is seen that for the condition considered a short interval leads to a stronger enhancement of heat removal.

During the report period efforts have also been made to evaluate the applicability of the PASCO results to containment conditions. It is well known that for naturally induced turbulent flow the so-called ‚buoyancy parameter' is one of the most important parameters affecting the heat transfer, which is defined as [2]:

$$Bo = 8 \cdot 10^4 \frac{Gr}{Re^{3.426} \cdot Pr^{0.8}} \qquad (2)$$

Figure 6 presents the experimental data showing the effect of the buoyancy parameter on the Nusselt number ratio which is defined as the real Nusselt number to the equivalent Nusselt number under forced convection condition with the same Reynolds number. It is seen that at low buoyancy number the Nusselt number ratio is smaller than unit. This indicates a heat transfer reduction, whereas at high buoyancy number a heat transfer enhancement is obtained. These test data agree well with the results obtained also in other test channel geometries [3]. The range of the buoyancy parameter realized in the present study covers the condition of a reactor containment, where the buoyancy parameters ranges from *0.3* to *300*. It is, therefore, expected that the present results can be well applied to containment condition.

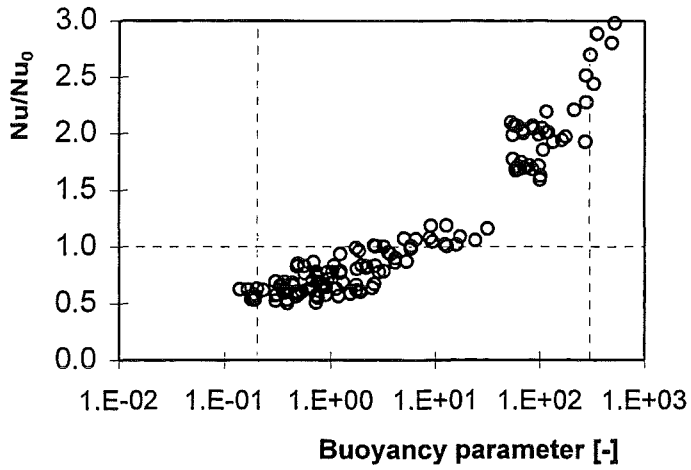


Figure 6: heat transfer of naturally induced turbulent flow.

Furthermore, preliminary tests have been conducted with water film evaporation. The water flow rate is low (*< 10 g/s*), to avoid ‚flooding' at the bottom of the test channel. A non-uniform distribution of water film was obtained. Only a small portion (about *10%* to *20%*) of the wall surface was wetted. This leads to an extremely non-uniform distribution of the heated wall temperature. It was found that modification of the test facility is necessary for further tests with water film evaporation.

3. Summary

Since the beginning of the PASCO project experimental and numerical investigations have been performed to determine the coolability limit and to study the flow and heat transfer behaviour in a passive containment cooling system. The main results are summarized as follows:

- The passive containment cooling system with natural air convection coupled with thermal radiation is a promising concept. With high emissivity of the walls the decay heat of a 1300 MWe pressurized water reactor can be removed by natural air convection in a passive way with maximum steel containment temperatures not exceeding 150 °C.
- The tests performed have generated a broad and detailed data base for the validation and improvement of different computer codes and for the development of physical models.
- The presence of an air filter at the test channel outlet cross-section leads to a strong reduction in the air mass flow rate, whereas only a slight reduction in the heat power removed is observed.
- The introduction of channel inserts improves the total heat removal. The effect of the geometry of the channel inserts on the heat transfer has been studied. A heat transfer improvement up to about 20% can be achieved.
- The preliminary tests with water film evaporation indicates a strongly non-uniform distribution of water film on the heated wall. The present PASCO test facility needs to be modified for further experiments, if they are required.

Next experiments are directed in studying the heat transfer improvement by water film evaporation. This work is done in cooperation with international partners.

References

[1] X. Cheng et al., *DABASCO Projekt: Yearly progress report'98*, CONT-DABASCO(99)-P001, January 1999

[2] M.A. Cotton, J.D. Jackson, *Vertical Tube Air Flow in the Turbulent Mixed Convection Regime Calculated Using a Low-Reynolds-Number k-ε Model*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.33, No.2, pp.275-286, 1990

[3] J.D. Jackson, J.K. Li, P. An, *NICE Project: Final report,* CONT-DABASCO(99)-P008, December 1999

32.21.06 Dynamische Beanspruchung von Reaktordruckbehälter und Containmentstrukturen

Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter
(B. Dolensky, B. Göller, G. Hailfinger, O. Jonatzke, J. Jordan, I. Kornelson, R. Krieg, K.H. Lang, T. Malmberg, G. Messemer, E. Stratmanns, G. Vorberg, IRS)

Zusammenfassung

Im Berichtszeitraum wurden die BERDA-Versuche zum Corium-Slug-Aufprall auf den Reaktordruckbehälterdeckel weitgehend abgeschlossen (BERDA I-Programm). Außerdem wurden die früher schon überprüften Transformationsgesetze zur Übertragung der Versuchsergebnisse auf den Reaktormaßstab durch sogenannte Klein-BERDA-Versuche nochmals bestätigt. Die kinetische Energie, mit der Corium auf den Reaktordruckbehälterdeckel aufprallen darf, ohne dass Deckelversagen zu befürchten ist, kann jetzt sehr zuverlässig angegeben werden. Die vorausberechnete mechanische Energie, die in die Core-Trageplatte eingespeist werden darf, bedarf dagegen noch der experimentellen Überprüfung (BERDA II-Programm).

Probleme, die bei theoretischen Modelle zum Flüssigkeits-Festkörper-Aufprall aufgetreten waren, wurden genauer untersucht. Es bestätigte sich, dass derartige Modelle nur mit erheblichen Einschränkungen angewandt werden können.

I. BERDA-VERSUCHE IM MASSSTAB 1:10

In früheren Versuchen waren sowohl obere Einbauten aus Stahl als auch obere Einbauten aus Rotguss verwendet worden. Die Festigkeit von Rotguss beträgt nur etwa 40 % der Festigkeit von Stahl, und die Duktilität von Rotguss ist wesentlich geringer als diejenige von Stahl. Die sehr starke Reduktion der Beanspruchung des Reaktordruckbehälterdeckels und der Deckelschrauben war jedoch bei all diesen Versuchen etwa ähnlich. Daraus folgt, dass sowohl eine erhöhte Unfalltemperatur, die bei den Einbauten eine Festigkeitsreduktion auf 40 % bewirkt, als auch die zu erwartende Strahlenversprödung für die Integrität des Reaktordruckbehälterdeckels unerheblich sind.

Im Berichtszeitraum sollte durch einen ergänzenden Versuch, Test 21, ermittelt werden, ob eine noch weitere Absenkung der Festigkeit der Steuerstabführungsrohre ebenfalls tolerierbar ist (Die oberen Einbauten bestehen im Wesentlichen aus dem oberen Rost und den Steuerstabführungsrohren; letztere werden bei einem Unfall besonders schnell erwärmt). Aus diesem Grunde wurden der Rost wie schon zuvor aus Rotguss, die Steuerstabführungsrohre aber aus dem noch wesentlich weicheren Blei gefertigt (Festigkeit von Blei weniger als 10 % der Festigkeit von Stahl). Ein Detail der Versuchsergebnisse ist in Abb. 1 wiedergegeben. Es zeigte sich, dass jetzt der die Last mindernde Einfluss der Einbauten auf den Deckel geringer ist als bei den härteren Rohren aus Rotguss. Der mindernde Einfluss war noch etwa so stark wie bei einer anderen früheren Versuchsserie, bei der nur der obere Rost simuliert wurde.

Die im letzten Berichtszeitraum angegebenen zulässigen Energien E_{slug} für den aufprallenden Kernschmelzen-Slug und die zulässigen Energie-Einleitungen E_{plate} in den unteren Rost wurden durch dieses Ergebnis erhärtet und präzisiert. Nach Umrechnung auf den Reaktormaßstab ergibt sich

bei weggeschmolzenen oberen Einbauten
E_{slug} = 0.1 GJ, E_{plate} = 0.15 GJ;

bei noch vorhandenem oberen Rost
mit mindestens 40 % Restfestigkeit
E_{slug} = 0.4 GJ, E_{plate} = 1.0 GJ;

bei noch vorhandenen kompletten oberen
Einbauten mit mindestens 40 % Restfestigkeit
E_{slug} = 0.8 GJ, E_{plate} = 2.0 GJ.

Es sei betont, dass die angegebenen Zahlen unter recht konservativen Annahmen erhalten wurden:

Das Corium breitet sich über der gesamten Kerntragplatte gleichmäßig aus.

Das Corium wird als weitgehend kompakter Slug nach oben beschleunigt.

Es werden nur sehr mäßige Deckelverformungen zugelassen.

Es wird nicht beachtet, dass auch ein mäßiges Versagen des Deckels das Containment noch nicht gefährden würde.

Nach Beendigung des Tests 21 wurde die BERDA-Versuchseinrichtung umgebaut; Bezeichnung der neuen Einrichtung: IVAN (Impakt-Versuchsanlage). Sie wird

zunächst für die experimentelle Überprüfung der zulässigen Energie-Einleitungen E_{plate} und später für das EU-Projekt LISSAC eingesetzt werden.

II. KLEIN-BERDA VERSUCHE IM MASSSTAB 1:50

Mit Hilfe der FLIPPER Versuche waren früher die aus der Ähnlichkeitstheorie hergeleiteten Transformationsregeln für geometrisch ähnliche Fluid-Struktur-Impaktvorgänge überprüft worden. Diese Regeln werden zur Übertragung der BERDA-Versuchsergebnisse auf den Reaktormaßstab eingesetzt. Um die Gültigkeit dieser Regeln zusätzlich zu untermauern, wurden jetzt Klein-BERDA-Versuche im Maßstab 1:50 durchgeführt. In der vorhandenen dynamischen Testeinrichtung VERDY wurden dazu drei im Maßstab 1:50 verkleinerte BERDA-Deckel getestet. Sowohl die Geometrie der sonstigen relevanten Bauteile, wie z.B. Deckel, Tiegel und Deckeleinspannung, als auch die freie Weglänge des Slugs waren ähnlich wie bei den BERDA-Versuchen im Maßstab 1:10. Der Einfachheit halber wurden wie in den BERDA Tests 01 und 02 Bleikugelschüttungen als Impaktkörper eingesetzt. Auch hier wurden entsprechend verkleinerte Bleikugeln verwendet.

Es wurden insgesamt drei Klein-BERDA Versuche, nämlich Test S1, S2 und S3 durchgeführt. Ein kleiner Versuchsdeckel ist in Abb. 2 zu sehen. Die Ergebnisse wurden mit Hilfe der Transformationsregeln von dem Klein-BERDA Maßstab 1:50 auf den BERDA Maßstab 1:10 übertragen und in Abb. 3 mit den Ergebnissen der BERDA Tests 01 und 02 verglichen. Bei perfekten Transformationsregeln und perfekter Versuchsdurchführung müssten die aus den Versuchen 1:50 und 1:10 gewonnenen Kennlinien übereinstimmen. Aus Abb. 3 geht hervor, dass dies in guter Näherung zutrifft. Damit wird die Gültigkeit der früher hergeleiteten und überprüften Transformationsgesetze zusätzlich für die bei uns relevanten geometrischen Konfigurationen untermauert.

III. RECHENMODELLE

Zur Berechnung des Kernschmelzen-Aufpralls ohne Beachtung der Einbauten war früher der Code PLEXUS eingesetzt worden. Da in diesem Code die Flüssigkeit durch eine große Zahl einzelner Partikel dargestellt wird, können die Dispersionsvorgänge während des Aufpralls im Prinzip beschrieben werden. Für die Anfangsphase des Aufpralls konnten auch klassische Kontinuums-Modelle eingesetzt werden. Vergleichende Rechnungen mit PLEXUS und Kontinuums-Modellen für diese Anfangsphase ergaben jedoch erhebliche Diskrepanzen. Die Richtungen der abprallenden Flüssigkeit waren verschieden.

Um das wirkliche Verhalten der Flüssigkeit zu ermitteln, wurden die Experimente FLIP durchgeführt. Durch besondere Maßnahmen war es möglich, die Randbedingungen sehr genau zu kontrollieren und den Einfluss der umgebenden Luft zu eliminieren. Aus versuchstechnischen Gründen wurde der Aufprall "invertiert": der Flüssigkeitspfropfen war anfangs in Ruhe und das Hindernis prallte auf diesen auf. Die Versuche wurden mit einer Hochgeschwindigkeitskamera mit 3600 Bildern pro Sekunde gefilmt. Abbildung 4 zeigt eine Hochgeschwindigkeitsaufnahme 7 ms nach dem Zusammenprall zwischen Flüssigkeitspfropfen und Hindernis bei einer Geschwindigkeit von 5 m/s.

Ein Vergleich mit den entsprechenden Rechnungen ergab, dass die von PLEXUS berechnete Richtung der abprallenden Flüssigkeit falsch ist. Abbildung 5 zeigt die berechnete Position und Form des Wasserpfropfens 2.8 ms nach dem Aufprall und die Kontur aus der entsprechenden Hochgeschwindigkeitsaufnahme. In den Rechnungen erhält die Flüssigkeit im Wesentlichen nur eine horizontale Geschwindigkeit in der Aufprallrichtung; diese Geschwindigkeit ist außerdem größer als die Geschwindigkeit des aufprallenden Körpers, so dass zwischen beiden ein Spalt entsteht. Dagegen werden die Ausweichvorgänge der Flüssigkeit nach oben, d.h. senkrecht zur Aufprallrichtung, in der Rechnung deutlich unterschätzt.

Dieser Fehler und die früher schon festgestellte mangelnde Konvergenz von PLEXUS-Ergebnissen bei zunehmender Partikelzahl legen eine Zurückhaltung bei der Nutzung von PLEXUS nahe. Es war deswegen richtig, die Untersuchung des Kernschmelzen-Aufpralls primär auf Modellexperimente abzustützen, deren Ergebnisse direkt mit Hilfe der Ähnlichkeitstheorie auf Reaktorverhältnisse übertragen werden können.

Die FLIP-Experimente ermöglichten darüber hinaus, den Einfluss der vor dem Aufprall zu verdrängenden Luft zwischen den beiden Kontaktflächen zu untersuchen. Bei den gerade besprochenen Experimenten war keine Luft vorhanden. Aus den Experimenten mit Luftpolster zwischen den Kontaktflächen ergab sich eine Reduktion der in der Flüssigkeit gemessenen Druckpeaks auf die Hälfte, während beim Zerspritzen der Flüssigkeit selbst keine nennenswerten Änderungen beobachtet werden konnten.

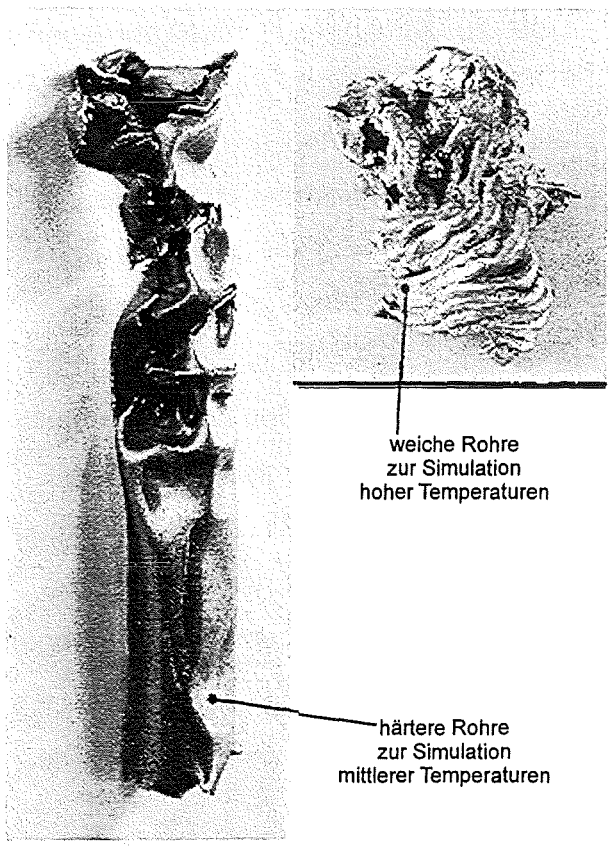


Abb. 1: Vergleich der während eines BERDA Tests verformten Steuerstab-führungsrohre aus Rotguss (härtere Rohre) und Blei (weiche Rohre)

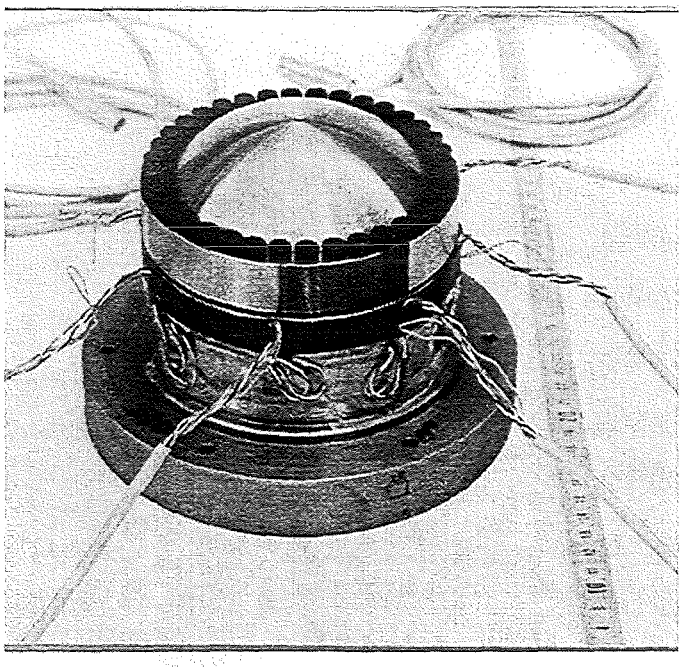


Abb. 2: Deckel eines BERDA-Klein-Versuchs vor dem Test an den Kraftmess-zylinder angeschraubt.

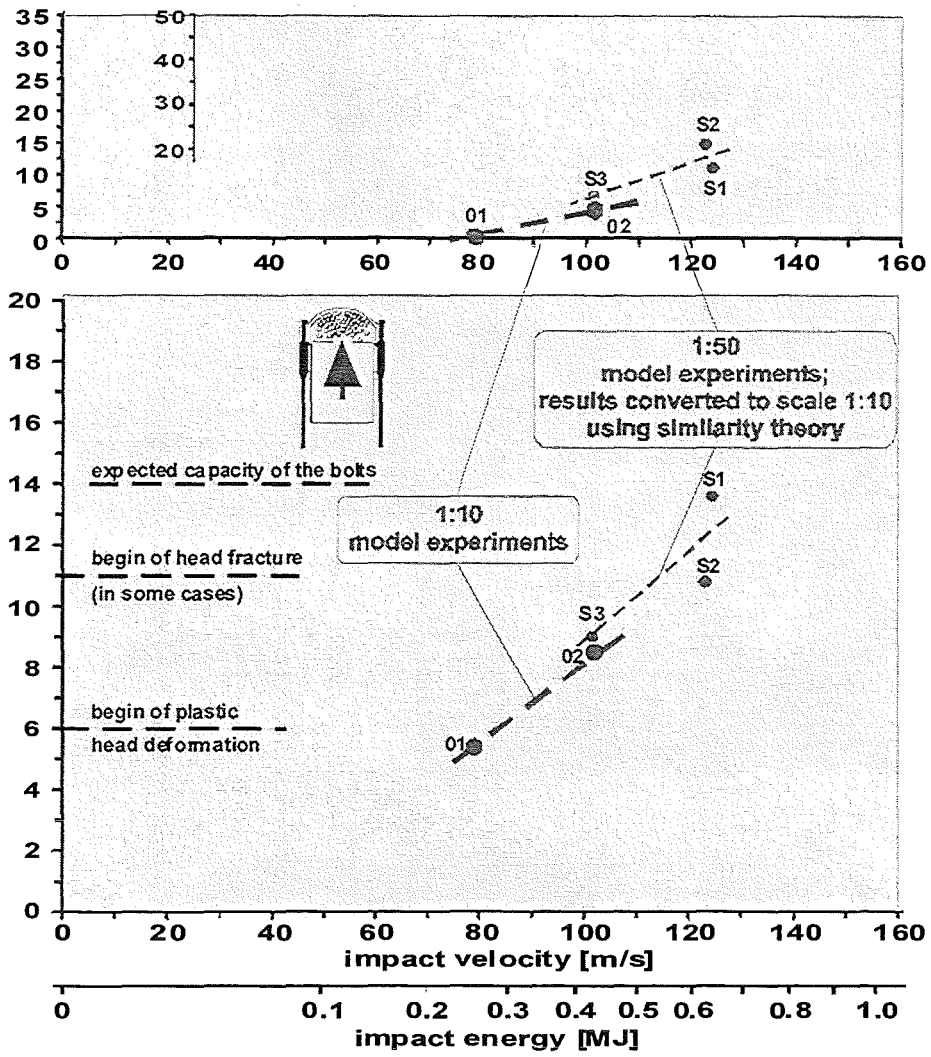


Abb. 3: Vergleich von Ergebnissen aus den BERDA-Versuchen im Maßstab 1:10 und aus den Klein-BERDA-Versuchen im Maßstab 1:50

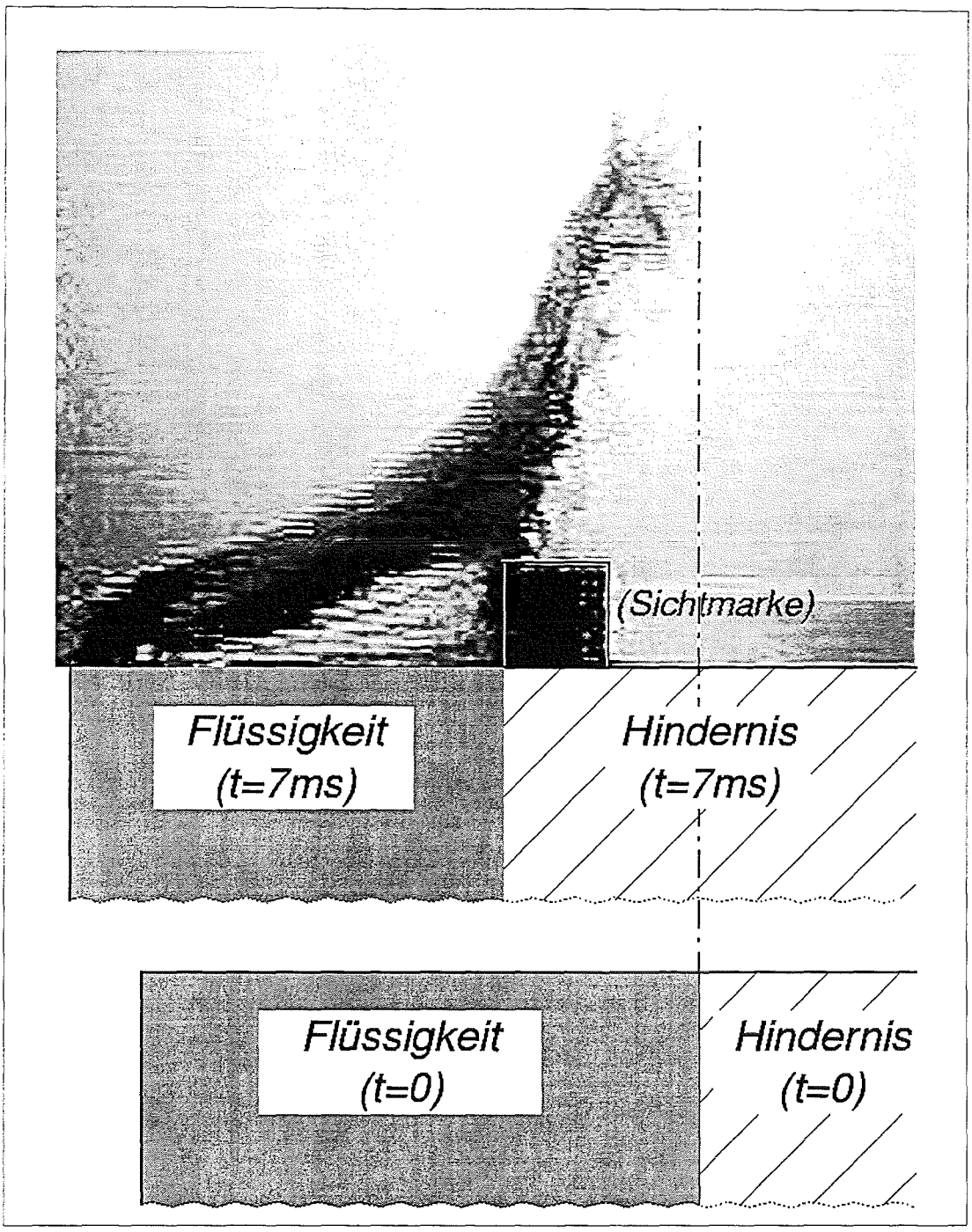


Abb. 4: Experiment FLIP zur genaueren Untersuchung des Flüssigkeitsaufpralls

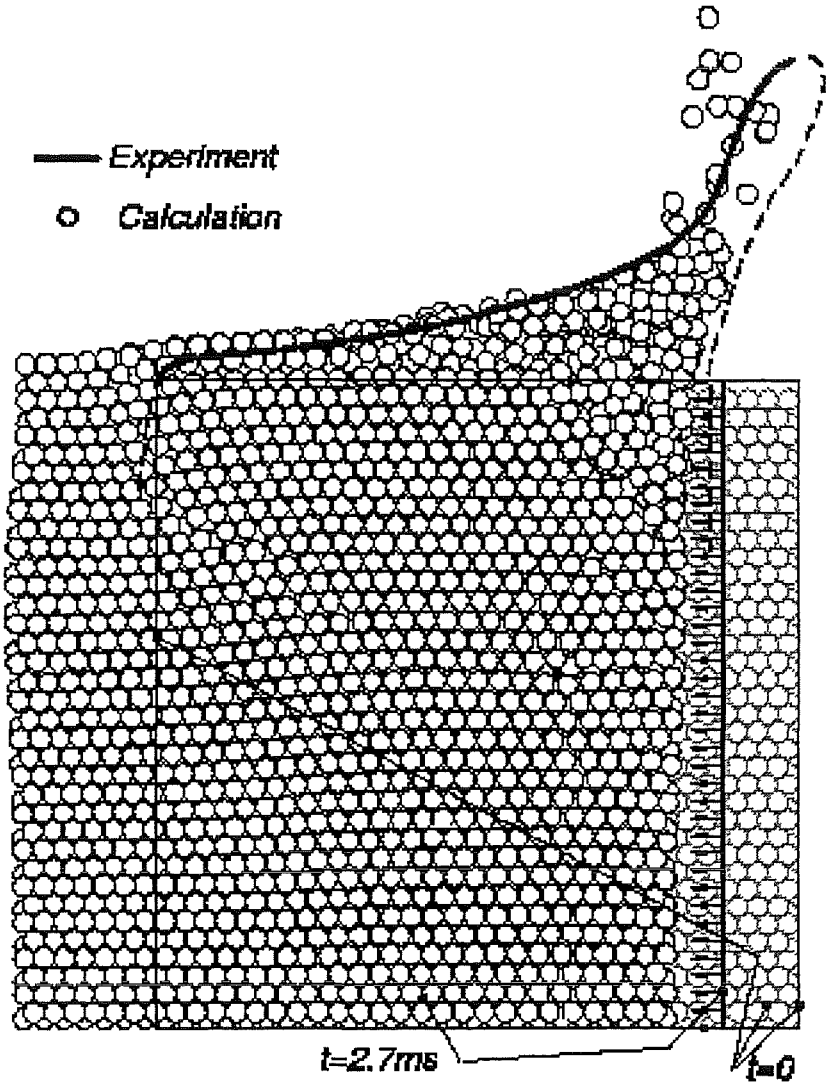


Abb. 5: Vergleich zwischen berechneter und gemessener Form des Wasserpfropfens 2.7 ms nach dem Aufprall

32.21.07 Analysen zum Containmentverhalten

I. Analyses of Severe Accidents for the EPR using MELCOR

(P. Schmuck , IKET)

Abstract

The MELCOR code developed at SNL was used to study the progression of severe accidents in the EPR. The version 1.8.4 released in 1998 has new modeling features which have to be assessed in the frame of the international MCAP working group. In this contribution selected results are shown for a low pressure accident scenario which demonstrate that the new features developed for version 1.8.4 allow to represent more realistically (a) the meltdown of heat structures and the transport of the molten material to the reactor cavity, (b) the breach of the pressure vessel by lower head creep rupture failure and (c) the generation of the internal radioactive source terms in the reactor primary system and in the containment. In these studies we are concentrating on the events in the containment and are covering for the first time 12 hours of accident time in the MELCOR results shown.

Zusammenfassung

Mit dem MELCOR Code wird das Fortschreiten von schweren Unfällen im EPR untersucht. Mit der neuesten Version 1.8.4 aus dem Jahr 1998 wurden bei FZK bestimmte Unfallszenarien nachgerechnet. In diesem Beitrag werden ausgewählte Ergebnisse präsentiert, aus denen hervorgeht, dass mit der Version 1.8.4 verschiedene Phänomene realistischer dargestellt werden können. Zum ersten mal decken die MELCOR-Ergebnisse eine Zeitspanne von 12 Stunden nach dem Eintritt des Unfalls ab.

INTRODUCTION

At FZK investigations with MELCOR concentrated on accident sequence studies for the European Pressurized Water Reactor (EPR). The MELCOR code developed at SANDIA National Laboratories is a very flexible and versatile computer tool to perform such system studies. Last year we reported on comparisons of results obtained with the versions 1.8.3 and 1.8.4, respectively, for EPR in-vessel studies. Using the new version 1.8.4 we study in this contribution the accident behavior in the EPR vessel and in the containment during a LBLOCA for an extended time period of 12 hours after the initiation of the accident by a large break in the hot leg of size 962 cm^2.

No prefabricated modeling for the EPR subsystems of the primary and of the secondary circuits and of the reactor containment components is available in MELCOR. This characteristic is in contrast to other accident codes, like e.g. MAAP, where generally possibilities are provided by the code to model directly components of the reactor system, e.g. the pressurizer, the steam generators, the containment components, etc. Therefore, using MELCOR, the EPR system has to be modeled and represented on a very detailed level by the MELCOR input data themselves. A systematic modeling of the essential EPR components in MELCOR needs about 7000 input records (comments not included), which should still be refined more for special investigations.

The general applicability of the MELCOR code to severe accidents in PWRs has been demonstrated by many investigations (see Ref. 1, where a long list of assessment reports is given). However, the assessment is an ongoing effort because each version of MELCOR provides new models and revised coding which has to be validated. FZK takes part in this effort cooperating with the international MCAP (**M**ELCOR **C**ode **A**ssessment **P**rogram) group, see Ref. 2. Version 1.8.4 of MELCOR is characterized by improvements to model the core degradation process more realistically by using the information which comes from the PHEBUS FP experiments. Therefore in this new version improved models for core heatup, core uncovery, core degradation and meltdown have been implemented. Also, melting of heat structures is represented and the radionuclide (RN) package of MELCOR has improved the hygroscopic aerosol modeling.

In the following we will concentrate on demonstration of some MELCOR features relevant for the late phases of an accident, when most of the interesting processes influencing the radioactive source term happen in the containment. Some characteristic results of the FZK work will be shown here but because the results come from first calculations, they are preliminary and have to be assessed in more detail.

SETUP OF MELCOR INPUT DATA FOR THE EPR

The MELCOR investigations explained here are performed for the basic design data of the EPR as provided by Siemens in Ref. 3. In order to avoid repetitions in this communication we will assume that the reader is familiar with our earlier report on MELCOR studies at FZK, Ref. 4. In this reference an overview on the modeling of the whole EPR system was provided. The validation of the input data was done at FZK by checking the operational behavior of various technical components of the reactor system in steady and transient states. This includes heat transfer in the core, the functioning of the primary circuit, the performance of the main primary system pumps and the heat transfer from the primary to the secondary circuits in the steam generators. The thermal hydraulics of the various subsystems was checked always in detail before an accident sequence calculation was started.

The EPR containment system, as used in the MELCOR code for accident simulations, is shown in Fig. 1, where the control volumes (nodes), the flow paths linking the control volumes and the heat structures are displayed. These structures are relevant both for their heat capacities and their surface areas. The phenomena of vapors condensing on surfaces of all inclinations and of aerosol gravity settling on horizontal surfaces are important especially in the containment.

The primary system (see Ref. 4) and the containment are modeled in detail, while only those parts of the secondary system, which are important for accident simulations, are represented.

The EPR containment nodalization, as shown in Fig. 1, consists of 8 control volumes of different sizes characterized in the following table:

Table 1 : Nodalization of the EPR containment system

Node description	CV number	Volume [m^3]	Initial Temp.[°C]
Reactor pit	800	80	42
Spreading comp.	805	495	42
IRWST(incl. pool)	850	3047	42
Equipment rooms	810	13975	42
Cont. annular part	820	15151	30
Cont. dome	830	57209	30
Cont. Shield buildg.	880	19816	30
Reactor annular building	890	44400	30

In addition there is the large control volume CV 900 representing the environment which is connected by a flow path to the reactor annular building CV 890.

The compact MELCOR representation of the containment, as shown in Fig. 1, does not allow to display in detail the important internals of the containment: namely the reactor pressure vessel including the core , the primary circuit components (hot and cold legs) and the steam generators, which are all located inside of the containment. A two cavity MELCOR model was developed for these calculations with CV 800 as the reactor pit (cavity 1), directly below the pressure vessel, and with CV 805 as the EPR spreading compartment (cavity 2). After breach of the lower head of the pressure vessel, the molten core materials are first transported to cavity 1. The hot materials interact thermally and chemically with the materials of the cavity bottom and side walls and eventually melt through the path to the second cavity, which represents a core catching and cooling device. Under normal operation there are small natural leaks from the containment to the environment. These small leaks are modeled in the studies presented here. In the time frame of 12 hours considered here the material losses will be very small due to the small leak sizes. Consequently

we are more interested here in the physical processes in the inner compartments (CV 800 to CV 850) of the containment where the materials are mainly distributed.

In a later phase of these studies we will try to calculate realistic estimations of the releases to the environment. Then more detailed representations of filters, sprays and similar engineered safety features in the containment will be considered.

DISCUSSION OF SPECIFIC RESULTS

As mentioned above, the LBLOCA sequence considered is used to illustrate some important capabilities of MELCOR.

In order to study severe accidents leading to core melt-down we assume that the active emergency core cooling systems (medium head safety injection and low head safety injection systems of the EPR) do not operate. This is quite unprobable, but the assumption is made to investigate the consequences of failures of the injection systems and to assess the design margins of the EPR.

During the LBLOCA sequence considered here flow paths between the primary system and the containment are opened (the break of the surge line connecting the hot leg with the pressurizer and the breach of the lower head of the pressure vessel). The containment may fail in a late phase of the accident by overpressurization of the containment. However, in the calculations presented here the pressure in the containment remains always below the design pressure of 6.5 bar during the first 12 hours of the accident evolution. An additional conservative assumption used is that the flow path between the IRWST and the spreading room will not be opened. So the hot debris will not be flooded and therefore the cooling of the debris is caused only by conditions at the boundaries and the flowing steam.

Some significant first results over the extended time period of 12 hours are shown in the following which refer to

- the early in-vessel phase up to core-melt down;
- the late in-vessel phase up to breach of the vessel by high temperature creep rupture failure;

- the early ex-vessel phase, when the hot core debris relocates to the reactor pit and interacts with the concrete of the bottom; the aerosols generated are transferred to the compartments of the containment;
- the late ex-vessel phase when the debris is transported to the spreading room and interacts with the concrete of the floor and of the walls; the aerosols in the containment settle and are deposited on heat structure and pool surfaces.

The LBLOCA sequence is initiated by a break of the surge line at time t = 0 , with a break size of 962 cm^2. Automatic reactor scram is actuated by the primary system pressure which decreases rapidly during the first seconds after the break occurrence. Only decay heat is responsible for heating up the core materials later. The hot coolant of the primary circuits is blown out through the large break in the surge line to the containment, and in a short time period core uncovery starts. The water (vapor and liquid) ejected to the containment influences the accident evolution significantly in the containment compartments. The hydro-accumulators come into play after about 75 seconds, when the primary system pressure decreases below 45 bar. For a while they can replace the coolant lost with water stored in the accumulator tanks, but after 110 seconds they are empty and the final core uncovery and heatup process starts. When the fuel temperature becomes larger than 2000 K, fission products (FP) in the fuel are released to the gap (located between fuel and cladding). Volatile elements are released first (e.g. Xe, Cs) and only at higher temperatures the refractory elements (e.g. Ba, Sr, Ru) will follow. When the fuel can fails (at cladding temperature 1173 K), the FP are transported from the gap into the primary circuit, to the large break of the hot leg and finally into the containment. Core materials will melt also at high temperatures, starting with the EPR control rod materials (Ag, In, Cd) at about 1075 K. At still higher temperatures, the clad materials (Zr, ZrO_2) melt down together with the fuel during a few thousand seconds. The relocating core debris settles first on the core support plate which is a heavy steel structure. After failure of this plate, the hot debris falls down into the lower plenum and accumulates on the lower head (LH). The times when structural failures occur - as calculated by MELCOR - are important for damage progression during the accident and are given in Table 2.

Table 2 : Comparison of times for in-vessel and ex-vessel structure failures (in seconds) during the LBLOCA sequence in the EPR for two lower head failure modes

Thermal/mechanical failure of structures	**MELCOR 1.8.4 LH penetration model (temperature criteria)**	**MELCOR 1.8.4 LH creep rupture model (plastic deform. criteria)**
Core support plate first/last failing ring	3479/3481 sec	4165/8919 sec
Pressure vessel	3589 sec	10195 sec
Reactor pit (cavity)	NA	13795 sec

The lower head penetration model had always to be used earlier up to MELCOR version 1.8.3, because the code had no other possibilities to model the lower head without penetrations .(Penetrations of the LH are characteristic for US reactor designs). This model uses only the temperature in the LH as failure criteria. But as many European LWRs have no penetrations, new models have been suggested by the MCAP group and developed by SNL. These new models are more versatile and include also a creep rupture failure model of the LH. This model has an experimental basis also for the LH without penetrations, Ref. 5, and is able to represent therefore more realistically the rupture of the LH. It is used in the studies presented here.
The application of these new concepts to the LBLOCA sequence leads to a much extended time frame before vessel failure and leads to results comparable to MAAP calculations for the EPR by Framatome, Ref. 6. Therefore, much more melting of steel is observed in the neighborhood of the core (core top plate, heavy reflector). Table 2 exhibits the failure times for the core support plate. The difference in these time values indicate the changes in the heat transfer of the support plate between the two failure modes of the LH.

After failure of the core support plate more than 1000 seconds are needed with the new LH creep rupture model to reach the failure conditions of the LH (with the LH penetration model it was about 100 seconds only). From this time onward the hot core debris will relocate to the reactor pit and interact with the concrete of the cavity floor. Because the cases with LH penetration model were discussed already in Ref. 4

we concentrate ourselves in the following on the base case related to the new creep rupture failure model.

Some interesting results illustrating the release and transport of radionuclides for the base case are presented in Fig. 2 to Fig. 7 and explained below.

Fig. 2 shows the temperature of the core debris relocated to the lower plenum. During core melt-down a molten pool is generated above the support plate at the begin of the late in-vessel phase. Directly above the core plate a crust is formed which impedes the relocation of hot core material to the lower plenum between about 4200 and 9000 seconds. The steep temperature rise after failure of the molten pool crust and all rings of the core plate at approximately 9000 seconds indicates that the hot material from the molten pool from the core region has reached the lower plenum. The temperature rises above 3000 K at about 10000 seconds heating also rapidly the LH to high temperatures. Finally, the large amount of debris (about 220 tons) in the lower plenum cause the breach of the RPV by large plastic deformations of the LH at 10195 seconds. After failure of the RPV the debris mass relocates first to cavity 1 (CV 800) and later - after melting through the doors - to the spreading room (CV 805). The relocation from the lower plenum to cavity 1 happens instantaneously after the vessel is breached. This is certainly a quite simple picture that has to be refined. The moving debris masses are shown in Fig. 3. The debris leaving the RPV has a mass about 220 tons (i.e. all the materials in the lower plenum). This mass is increased by mixing in interacting concrete, first in cavity 1 and later in cavity 2. In addition, chemical reactions in cavity 1 and cavity 2 lead to gas generation (CO mainly) and also hydrogen generation (facilitated by the large Zr and stainless steel masses transported to the cavities).

Fig. 4 gives an overview of the total mass of materials released from core components and transported to various parts of the primary system and the containment during the accident. About 10% of the materials remain in the reactor vessel, 90% are transported to the containment during the early ex-vessel phase. As can be seen from Fig. 4, a large amount of materials is deposited on the heat structure surfaces. There is a very large difference between the radioactive and the total amount of materials demonstrating that the radioactive materials constitute only a small fraction of all materials released. A strong variation of the values of

suspended and deposited materials, respectively, at about 42000 seconds indicates that the materials suspended in the atmosphere and pools will be deposited on heat structure surfaces during a very short time. The causes for this behavior will be explained below.

Fig. 5 shows the amount of radioactive materials transported to all compartments of the containment. The FP release from the fuel is calculated by the CORSOR Booth model for high burnup fuel. To illustrate this feature in more detail we show in Fig. 5 the release of the volatile class 1 (noble gases like Xe, Kr) and class 2 (alkali metals like Cs, Li) radionuclides and the release of the non-volatile class 8 (tetravalent elements like Ce) and class 10 (uranium) radionuclides to the containment.
The release of all fission products and actinides is almost finished when the vessel is failing because of the very high temperatures (3000 to 4000 K) the debris reaches in the core region. The noble gases and other volatile materials are released during the time up to 5000 seconds. FP release and transport to the containment starts about 1400 seconds when the fuel cladding starts to fail. As can be seen from the lower part of Fig. 5 the non-volatile materials (e.g. Ce and U) start only to be released after about 5000 sec when debris temperatures get very high. So, as might be expected, there is a large difference in the times when the various radionuclide classes in MELCOR are released and transported to the containment during the in-vessle phase.

In order to understand the transport and deposition processes during the 12 hours considered in the calculations, it should be pointed out that the radionuclide inventory remains practically constant in the containment after the strong increase during the first 11000 seconds. Therefore, all time evolutions of radionuclides in the contaiment compartments shown in the next figures represent a redistribution of materials in the containment, not a loss to the outside. Fig. 6 and Fig.7 display the development of aerosols in the gas phase and in the pool surfaces in some important compartments of the containment, including the large dome region (CV 830). It can be observed that the mass of the aerosols in the containment atmosphere increases very strongly after the reactor vessel is broken and reaches a maximum. After that we see a decrease for a long time, the mass being very low already at 20000 seconds by the well known aerosol depletion mechanisms, which act quite effectively in our calculation. We can explain also the strong and rapid changes of aerosol mass as seen in Fig. 4 and Fig.

7 at about 42000 seconds. The development of the water level in the dome, exhibited in Fig. 7, gives the key for an explanation. At the time of 42000 seconds the liquid water (mainly water films on the walls) dispappears totally from the dome region and therefore the aerosols suspended in the water have either to settle on the surfaces of the now dry heat structures or they get suspended in the atmosphere. Both effects are modeled in the calculations as can be seen in Fig.4 and Fig. 7.

CONCLUSIONS AND FUTURE WORK

There are a lot of interesting new features in MELCOR 1.8.4 which allow a more accurate and realistic simulation of accidents. Below we list those which were used in our work described above.

- Representation of core melt-down and collapse: As oxidized fuel rods collapse now at the approximate temperature of the UO_2/ZRO_2 eutectic temperature, the core is much hotter at the time when loosing integrity (use of PHEBUS information)
- Models for melting the large steel structures surrounding the core:
  the heavy reflector and the top plate in the direct neighborhood of the core, a high amount of molten steel
- Simulation of blockages of the settling core debris:
  pressure correlations according to flow through porous media are used, so the debris bed is modeled more realistically
- Failure of the pressure vessel LH by creep rupture at high temperatures
- Aerosol behavior in the containment: Hygroscopic models enhance the aerosol growth rate (as water vapor condenses or evaporates on the aerosol surfaces). Aerosol size is the key for quick gravitational settling on the horizontal surfaces of the containment compartments

Some important consequences of these new features were detected in our calculations and are collected in the following.

- Molten pool formation in the lower part of the core by crust formation above the core support plate
- Hot debris material relocates from the molten pool to the lower plenum very coherently, during a short time after crust failure. At this point of time all rings of the support plate have already failed by their high temperature
- The creep rupture failure mode of the LH implies a quite late RPV failure (supported by experiments, Ref. 5)..
- Transport of large amounts of molten steel and Zr to the cavities after the very late vessel failure
- Consequently, considerable ex-vessel hydrogen generation by oxidation processes in the cavities
- Interconnected thermohydraulics of water, steam and aerosols in the compartments of the containment

The results presented here come from a first series of MELCOR calculations for the EPR over an extended time period (25000 to 44000 seconds). Many features of our results (the molten pool, the LH failure model, the aerosol behavior, the hydrogen production in the cavities) have still to be checked in more detail in order to qualify better the use of MELCOR for reactor applications. Therefore additional calculations to assess the MELCOR results will be done in the near future. The accurate determination of external radiological source terms (to the environment) will be also an important goal of the work planned for the future.

Using the CONTAIN code similar EPR containment studies have been performed, see Ref. 7, where the internal source terms had to be provided by other codes (MELCOR, CHEMSAGE). The results of these studies must be compared in detail to understand the differences and similarities in the outcome. And it is hoped that we can corroborate our conclusions also from the results and the understanding provided by other codes, e.g. from state-of the-art codes like FIPLOC developed at GRS and like ASTEC developed by EU cooperation.

REFERENCES

1. B. Boyack et al., MELCOR Peer Review, Report LA-12240, March 1992
2. P. Schmuck, Analysis of Severe Accident Sequences for an Innovative PWR of the 1500 Mwe Class, 1998 Annual MCAP Meeting, Bethesda, MD, May 1998
3. H. Plank/Siemens: Letter to H. Plitz. PSF, dated 6.12.96
4. P. Schmuck , B. Toth, Analyses of Severe Accidents for the EPR using MELCOR, FZKA 6300, Sept.1999, p. 369
5. T.Y. Chu et al., Lower Head Failure Experiments and Analyses, NUREG/CR-5582, February 1999
6. H. Plank/Siemens: MAAP calculation results for EPR by Framatome, dated 25.2.97
7. R. Frutos et al., Fission Product Dispersion from the Primary System to the Environment in a Major Accident in the EPR, FZK Nachrichten 29 (4/97), p. 5

EPR Containment

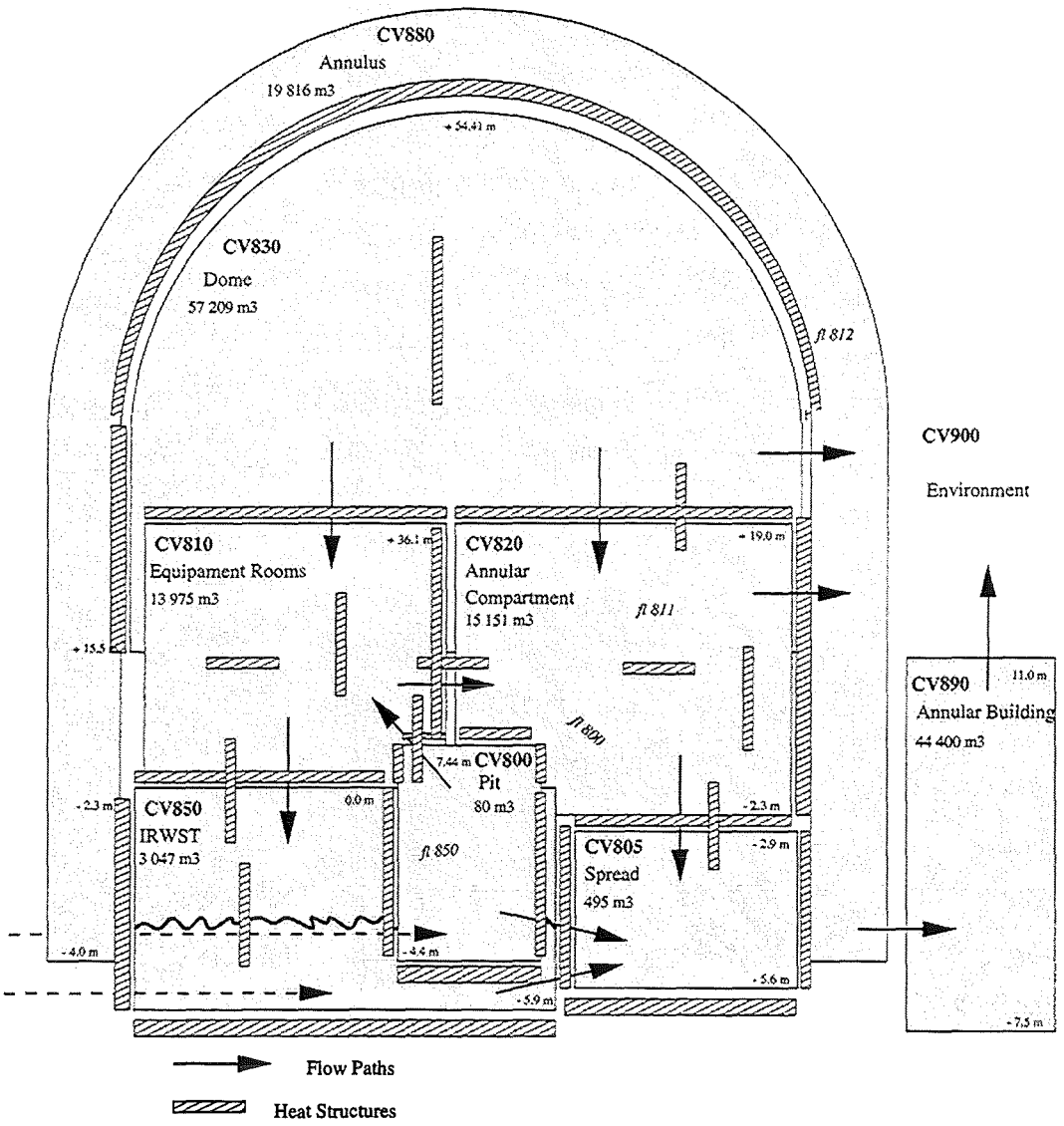


FIG. 1: Nodalization of the EPR containment

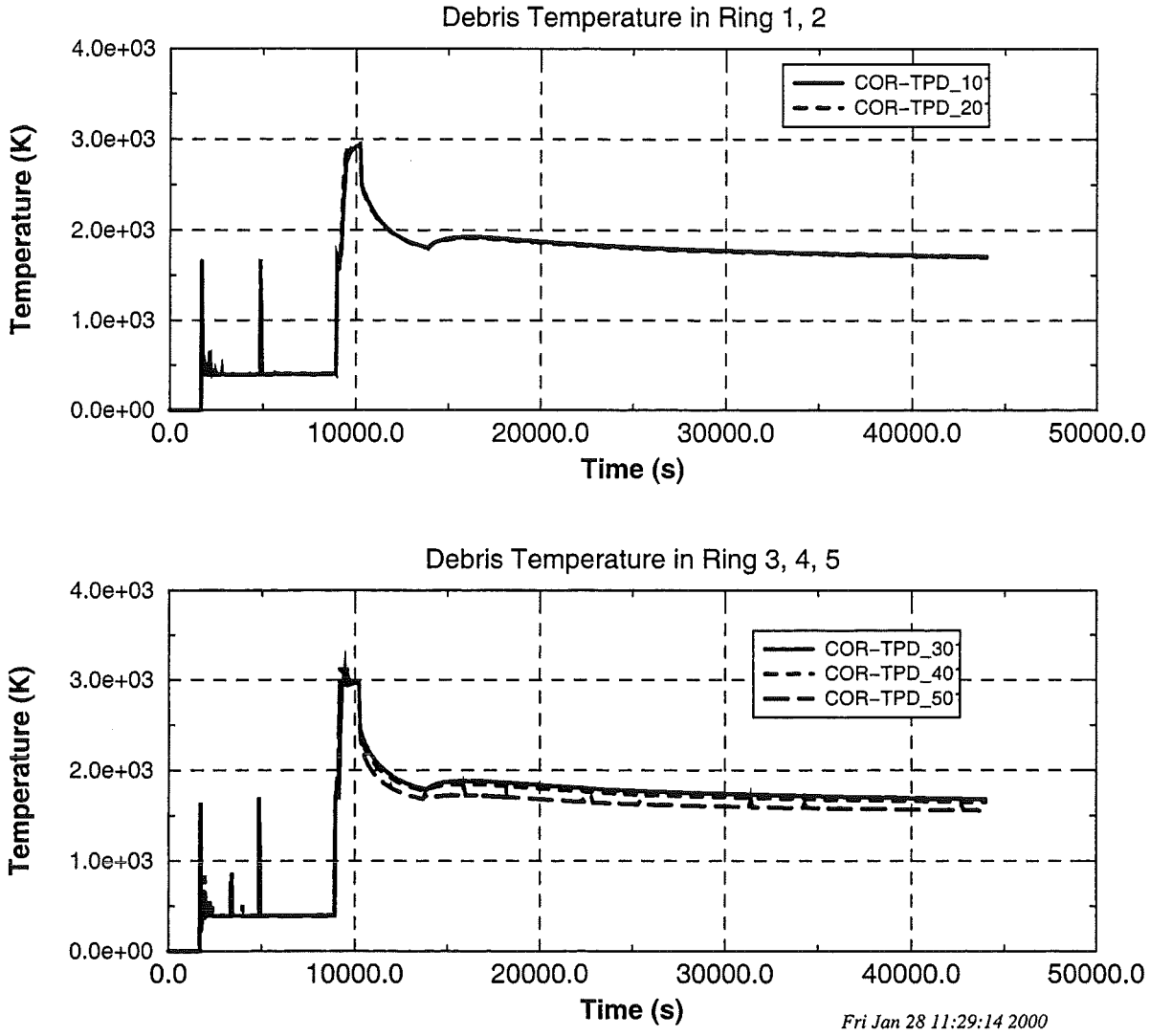


FIG. 2: EPR LBLOCA

Temperature of the debris in the five rings of the lower plenum

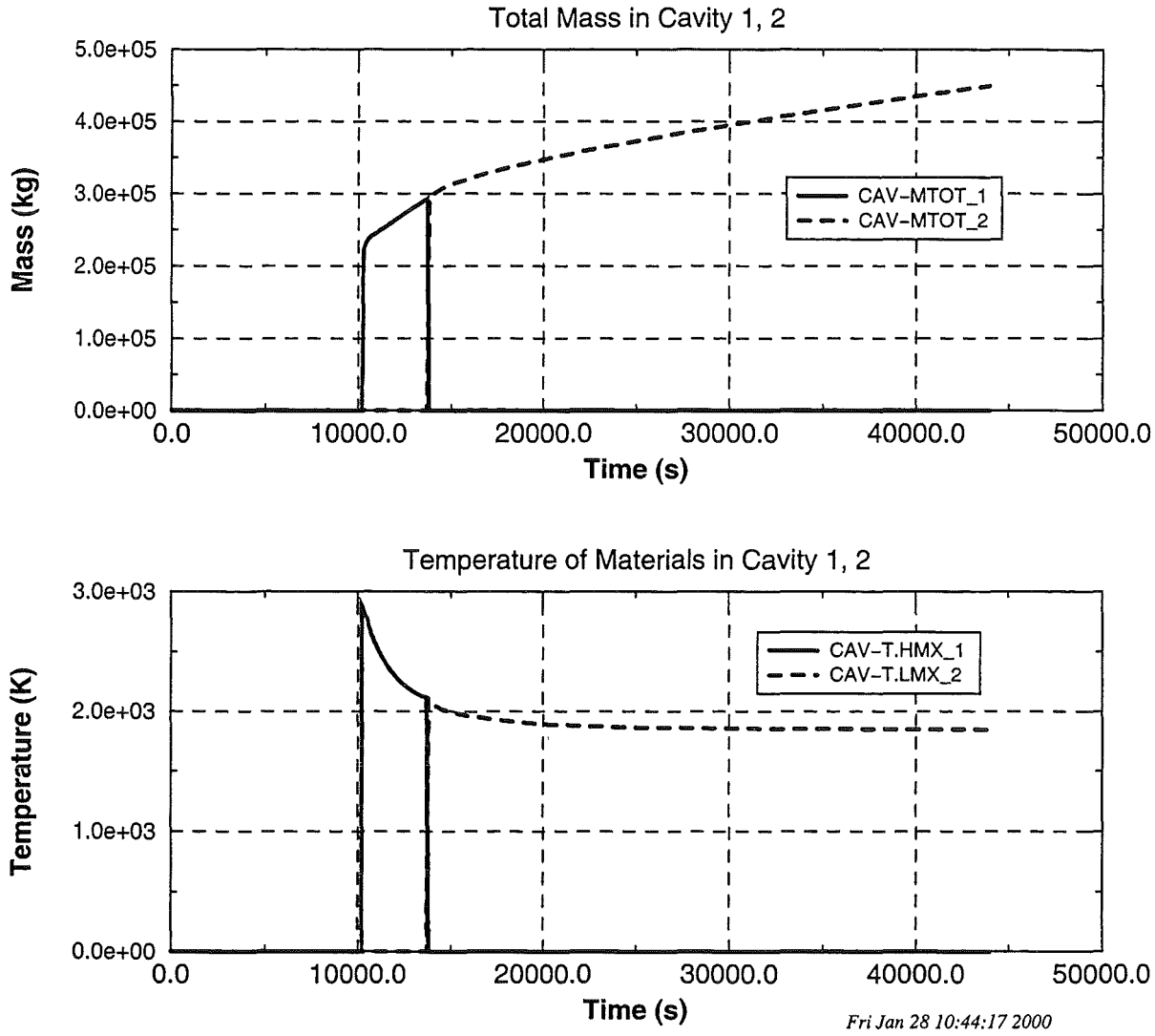


FIG. 3: EPR LBLOCA

Mass of core debris in cavity 1 and cavity 2

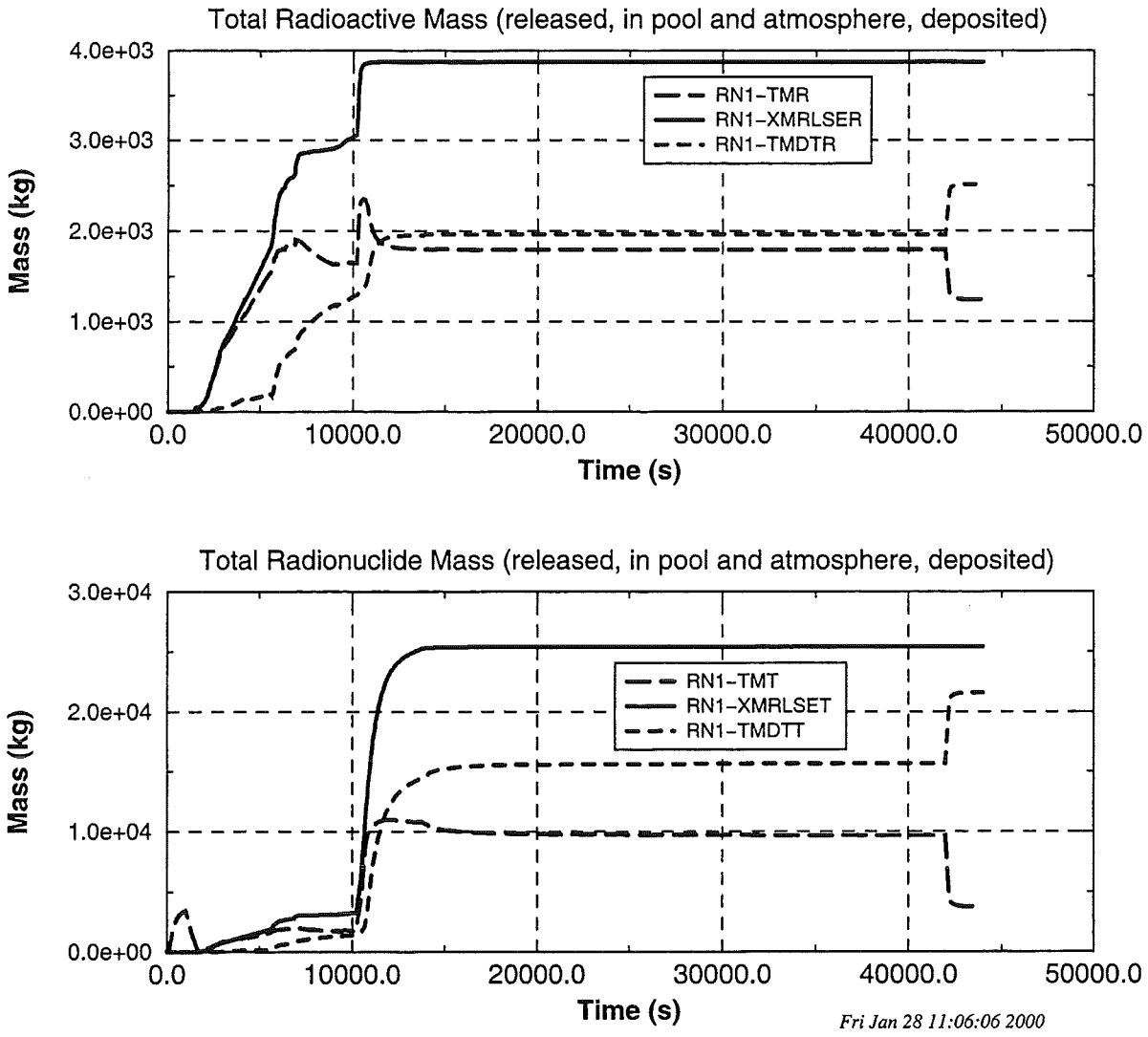


FIG. 4: EPR LBLOCA

Total masses released from core components (XMRLSET), **suspended in atmosphere and pool regions** (TMT), **and deposited on all heat structures** (TMDTT)

Top: **Total mass of radioactive core materials**
Bottom: **Total mass of core materials (radioactive and non-radioactive)**

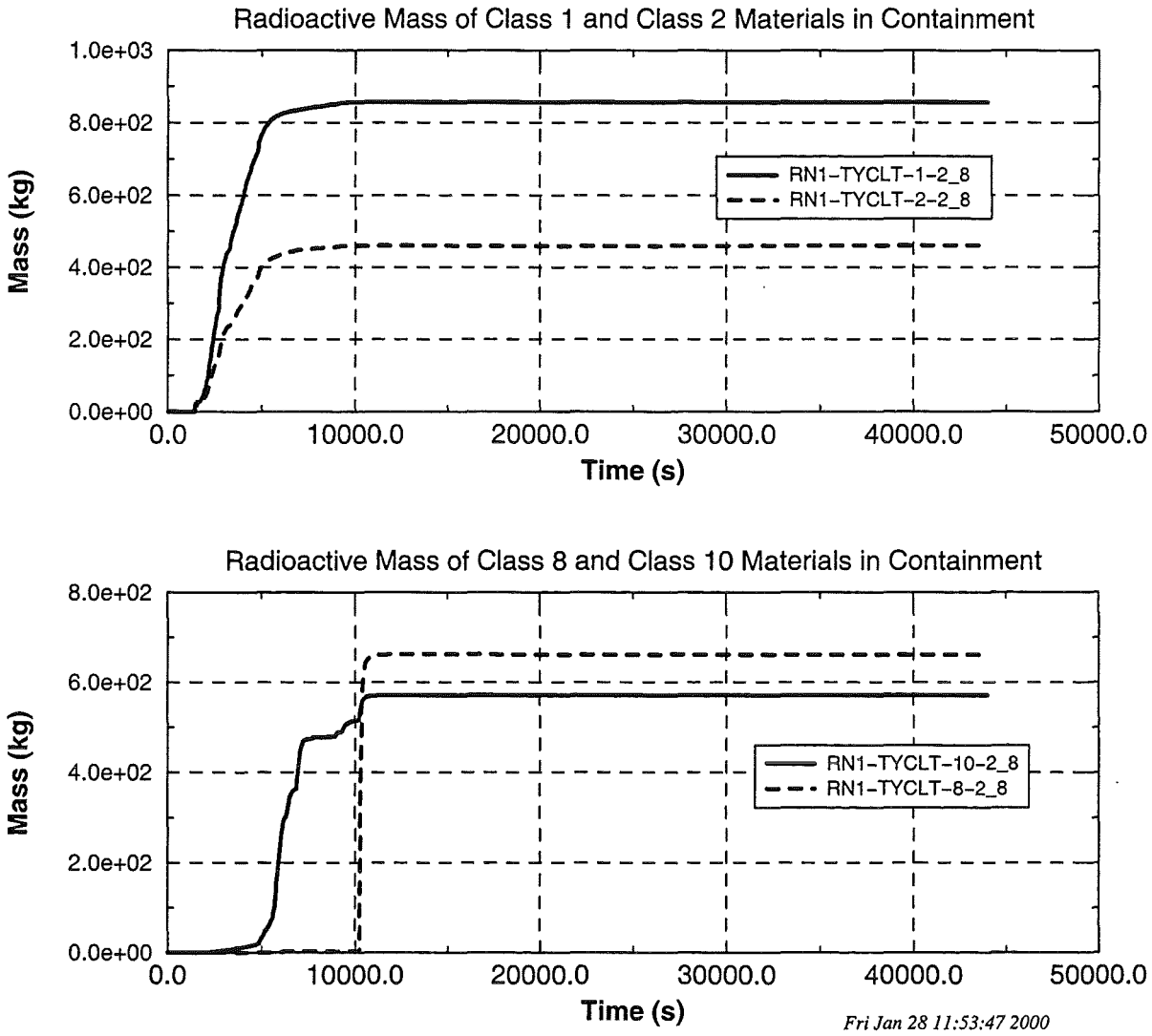


FIG. 5: EPR LBLOCA

Total mass of radioactive materials in the containment

Top : Volatile materials (noble gases, class 1, and alkali metals, class 2)

Bottom: Non volatile materials (tetravalent, class 8, and uranium, class 10)

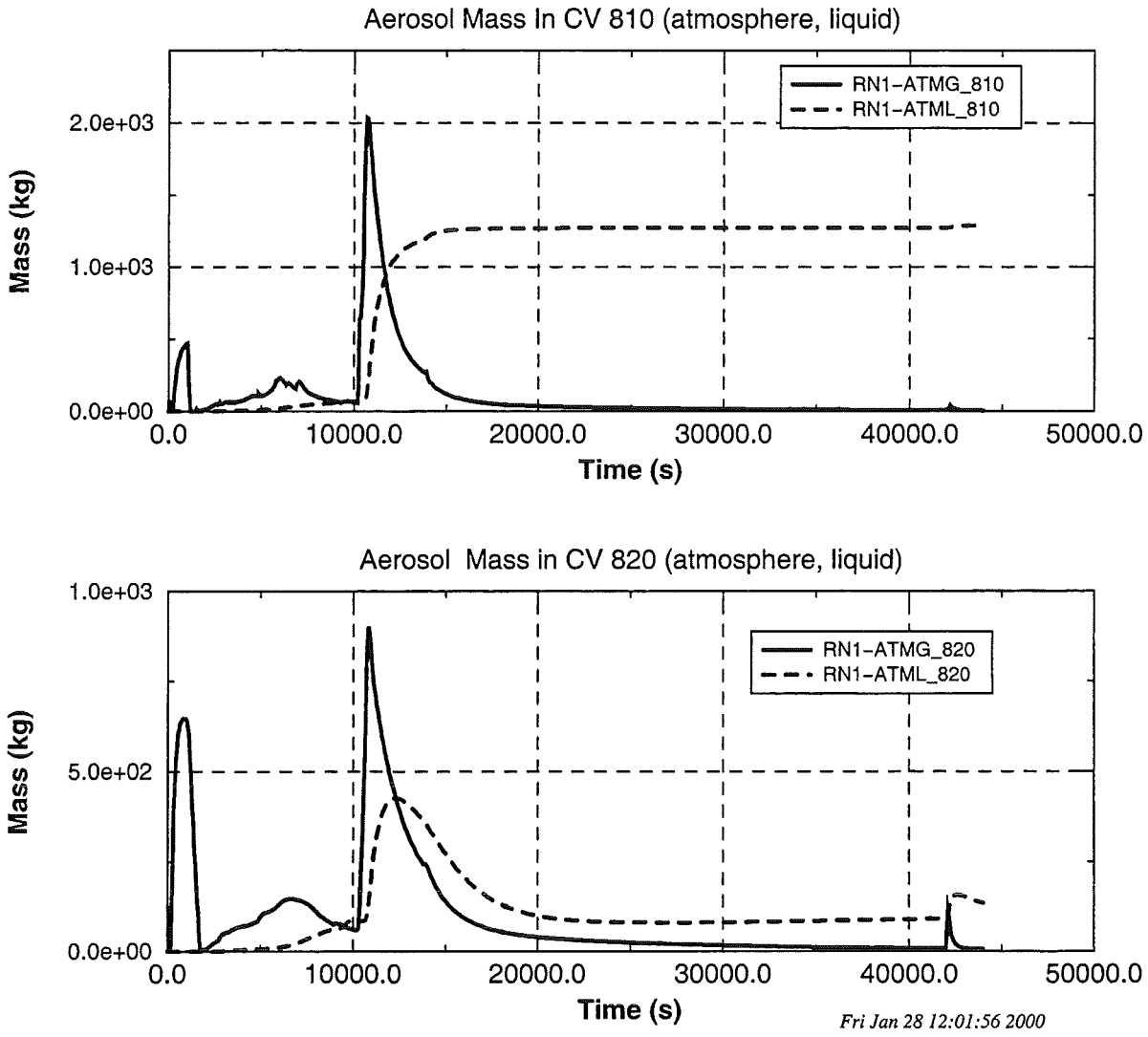


FIG. 6: EPR LBLOCA

Aerosol mass development in containment compartments
ATMG = total mass of aerosol in gas phase,
ATML = total mass of aerosol in liquid phase (=pool surfaces)

Top: Aerosols in compartment CV 810
Bottom: Aerosols in compartment CV 820

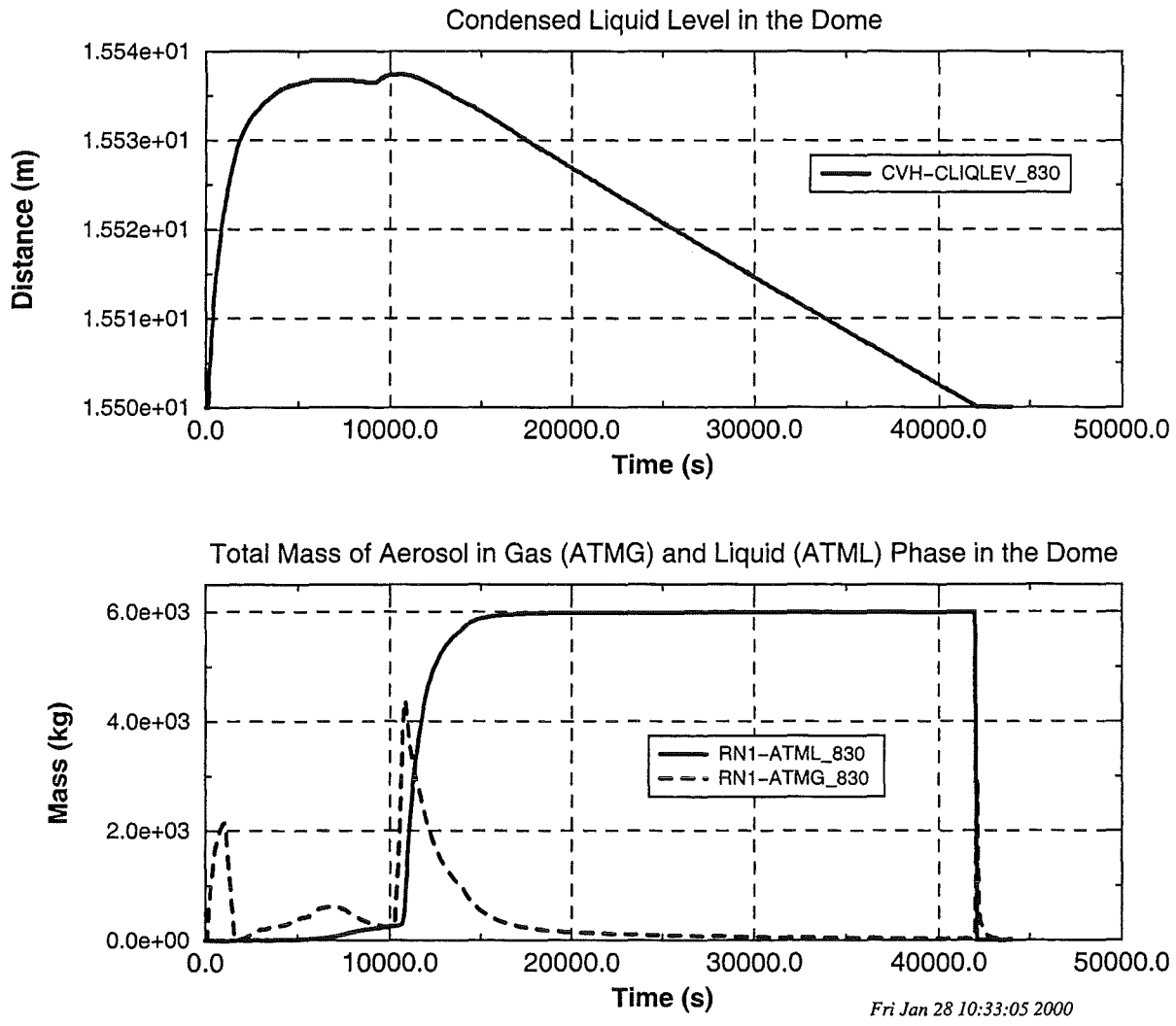


FIG. 7: EPR LBLOCA

Top: **Condensed liquid water level in the dome region (CV 830)**

Bottom: **Aerosol mass development in the dome region (CV 830)**

II. Parameterstudien für einen EPR-ähnlichen PWR

(G. Henneges, IKET)

Zusammenfassung

In den letzten Jahren wurden in Zusammenarbeit mit Siemens/KWU Untersuchungen zu hypothetischen Störfällen am EPR mit verschiedenen Rechenprogrammen durchgeführt. Siemens verwendet meist MAAP-Daten in Kombination mit FIPLOC, FZK verwendet die Codes MELCOR und CONTAIN. Da sich die Auslegungsdaten für den EPR mehrfach änderten, sich die meisten Rechnungen aber der Vergleichbarkeit wegen auf ähnliche Geometriemodelle und Eingabedaten abstützten, war es nötig Parameterstudien zum EPR durchzuführen. Dieser Bericht faßt einige der Ergebnisse zusammen.

Studien

Das in /1/ beschriebene Geometrie- und Rechenmodell für einen LBLOCA Störfall wurde leicht modifiziert (keine Leckage aus dem Ringspalt) und für die hier beschriebenen Parameteruntersuchungen verwendet. Untersucht wurde der Einfluß von

- 20% Volumenerhöhung der Zelle 5 (Kuppelraum)
- 20% Volumenreduktion der Zelle 5

- 20% Reaktorleistungserhöhung
- 20% Reaktorleistungserniedrigung

- Inbetriebnahme eines Spraysystems nach 12h ($p > 5.1b$)
- Inbetriebnahme eines Spraysystems kurz nach SP-Freisetzung ($T > 414K$)

- Inanspruchnahme einer "Gracetime" für 5h

auf die wichtigsten physikalische Größen im Reaktorgebäude und auf den radioaktiven Quellterm an die Umgebung für die 16 wichtigsten Spaltprodukte in den ersten 12h nach Unfallbeginn. Dies waren u.a.

- Gas- und Sumpftemperatur in den Zellen 1 bis 5
- Druck in Zelle 5
- Luftgetragene Aerosolmassen in Zelle 5
- Relative Änderung der Quellterms an die Umgebung

- Außerdem wurde untersucht, wie sich der Zerfall von Jodisotopen in Edelgase auf den Quellterm auswirkt.

Verwendet wurde die Rechenprogramme CONTAIN 2.0 /2/, und die Postprozessoren DRUCON und XMGR. Im Rahmen dieser Studie wurden die MELCOR-Rechnungen, die die thermohydraulischen und Aerosolquellen aus dem Primärkreis liefern, nicht modifiziert und wiederholt. Es wurde vielmehr davon ausgegangen, daß sich die Parametermodifikationen in erster Näherung nur auf die Verhältnisse im Reaktorgebäude auswirken werden. Dies ist allerdings nur bedingt richtig, wenn die Reaktorleistung verändert wird. Dennoch geben diese Studien einen guten Überblick auf die zu erwartenden Einflüsse.

Im folgenden werden einige der Ergebnisse diskutiert.

1.) Volumenänderung der Zelle 5 (plus/minus 20%)

Abb. 1 zeigt den Einfluß auf den *Druck* im Reaktorgebäude. Die durchgezogene Linie (Mi7) ist der Referenzfall. Wie zu erwarten, steigt bei Reduktion des Volumens (0.8*V5) der Druck etwas an. Das entgegengesetzte Verhalten bei Volumenvergrößerung (1.2*V5) ist der Abb. 1 ebenfalls zu entnehmen. Zu beachten ist, daß beide Kurven nicht symmetrisch zur Referenz liegen.
Die *Temperaturen* (Abb. 2) in den Zellen 1 bis 5 hängen viel stärker von den Volumenänderungen ab. V+ zeigt die Werte bei Volumenerhöhung und V- bei Verminderung an. Im IRWST (Zelle 2) wirkt sich die V+ in einer deutlicheren Temperaturab-

senkung, als bei V- aus. Interessant ist die berechnete Temperaturerhöhung in Zelle 4 bei V+, während für V- in dieser Zelle erst nach ca. 8h eine Erhöhung bestimmt wird.

Abb. 3 zeigt beispielhaft das Absetzverhalten luftgetragener Cs-Aerosole in Zelle 5. Man erkennt, daß dieses durch eine Volumenvergrößerung anfänglich (bis ca. 4h) kaum geändert wird, während die Volumenreduktion sich sehr wohl schon in der frühen Phase mit schnellerem Absetzen der Aerosole (dies liegt an der höheren Wahrscheinlichkeit für Koagulation) auswirkt.

Wie sich die Volumenvergrößerung auf den radioaktiven Quellterm an die Umgebung auswirkt, zeigt die Abb. 4. Dargestellt ist die relative Änderung der Gesamtaktivitäten für die 16 wichtigsten Spaltproduktisotope. In den ersten 2 Stunden werden wegen der absolut 20% höheren Leckage in den Ringspalt bei gleicher Absaugung von 500m3/h auch mehr Edelgase an die Umgebung abgegeben. Der gleiche Effekt plus die niedrigere Koagulationswahrscheinlichkeit für die anderen luftgetragenen Spaltprodukte bewirkt eine etwas höhere und länger dauernde Abgabe an die Umwelt.

Wie sich die Volumenverminderung auf den radioaktiven Quellterm auswirkt, zeigt die Abb. 5. Dargestellt sind wiederum die wichtigsten Isotope. In den hier betrachteten 12 Stunden werden wegen der absolut 20% niedrigeren Leckage in den Ringspalt weniger Edelgase an die Umgebung abgegeben. Der gleiche Effekt plus die höhere Koagulationswahrscheinlichkeit für die restlichen Spaltprodukte bewirkt eine ca. 10%ige Reduktion des Quellterms.

2.) Änderung der Nachzerfallsleistung (plus/minus 20%)

Abb. 6 zeigt den Einfluß auf den *Druck* im Reaktorgebäude. Die durchgezogene Linie (Mi7) ist wieder der Referenzfall. Wie zu erwarten, fällt bei Reduktion der NZL (0.8*P) der Druck deutlich ab. Das entgegengesetzte Verhalten bei NZL-Vergrößerung (1.2*P) ist der Abbildung ebenfalls zu entnehmen. Diese wirkt sich allerdings anfänglich nicht so stark aus. In den ersten Stunden sind beide Kurven asymmetrisch zur Referenz.

Die *Temperaturen* (Abb. 7) in der Zelle 5 zeigen ein dazu passendes Verhalten. Aus Abb. 8 lassen sich die Temperaturen im Schmelzeausbreitungsraum (Zelle 1) und im

IRWST (Zelle 2) ablesen. Durch den 20% höheren Leistungseintrag in Zelle 1 verdampft nach ca. 3h das gesamte Sumpfwasser, was zu einer 50 Grad höheren Atmosphärentemperatur führt. Dies allerdings ist eine Folge des hier gewählten CONTAIN-Modells. (Der IRWST speist in diesem Modell die Zelle 1 mit Wasser erst dann, wenn der Wasserstand 4.4m überschreitet - die sogenannte overflow-option. In einem modifizierten Modell, das die Verbindung der beiden Zellen z.B. durch ein kommunizierendes System beschreibt, würde es nicht zum Verdampfen des gesamten Wassers kommen können, da dann sehr viel mehr Wasser über der Schmelze stehen würde). Eine Reduktion der NZL um 20% ergibt dagegen eine ca. 10 Grad niedrigere Temperatur. Im IRWST wirkt sich die NZL-Erhöhung in den ersten 8h kaum aus, eine NZL-Reduktion führt viel schneller zu einer Temperaturabsenkung.
Abb. 9 zeigt das Absetzverhalten luftgetragener Aerosole in Zelle 5. Man erkennt, daß dieses durch eine NZL-Vergrößerung kaum geändert wird, während die NZL-Verkleinerung sich deutlicher auswirkt.
Wie sich die NZL-Vergrößerung auf den radioaktiven Quellterm an die Umgebung auswirkt, zeigt die Abb. 10. Dargestellt ist wieder die relative Änderung der Gesamtaktivitäten für die 16 wichtigsten Spaltproduktisotope. Für die Edelgase ergibt sich kein Einfluß. Für die anderen Spaltprodukte wird eine kleine Reduktion des Quellterms berechnet.
Wie sich die NZL-Verminderung auf den radioaktiven Quellterm auswirkt, zeigt die Abb. 11. Auch hier wird für die Edelgase keine Änderung gefunden. Für die anderen Spaltprodukte wird eine kleine Erhöhung des Quellterms ermittelt.

3.) Änderungen durch Einschalten eines Spraysystems

Für den EPR ist nach spätestens 12h das Einschalten eines bisher noch nicht genau festgelegten Spraysystems vorgesehen. Für CONTAIN wurde ein Spraysystem modelliert, welches auf folgende Weise arbeitete: Sumpfwasser wird über einen Wärmetauscher (HEX) um 50 Grad abgekühlt. Die Einspeiserate wurde variiert (83.3kg/s und 150kg/s), sowie der Aktivierungszeitpunkt (ca. 12h bzw. 2h nach Unfallbeginn). Das Spraysystem ist an der Decke der Reaktorkuppel angebracht, die Tröpfchenfallhöhe beträgt 60m, die Tröpfchengröße wurde zwischen 1mm und 5 mm variiert.

Man kann den Abbildungen 12 bis 15 entnehmen, daß das Einschalten eines Spraysystems einen großen Einfluß auf die wichtigsten physikalischen Größen hat:

- Starke Reduktion der Gas- und Sumpftemperaturen in den Zellen 1 bis 5
- Starke Reduktion des Drucks in allen Zellen
- Starke Reduktion luftgetragener Aerosolmassen im Reaktorgebäude und dadurch starke Reduktion des Quellterms an die Umgebung

Wie sich ein früh wirkendes Spraysystem auf den radioaktiven Quellterm an die Umgebung auswirkt, zeigt die Abb. 15. Dargestellt ist wieder die relative Änderung der Gesamtaktivitäten für die 16 wichtigsten Spaltproduktisotope. Für die Edelgase ergibt sich eine Reduktion von fast 10%, die allerdings noch nicht verstanden ist. Für die anderen Spaltprodukte wird der radioaktive Quellterm schon nach wenigen Stunden auf die Hälfte reduziert.
Die Wirksamkeit des Spraysystems ist um so größer, je früher es eingeschaltet wird, je höher die Wasserdurchsatzrate ist und je mehr das Spraywasser abgekühlt wurde.

4.) Änderungen durch Inanspruchnahme von 5h 'Gracetime'

Für die bisher beschriebenen Parameterstudien wurde immer angenommen, daß die Ringspaltabsaugung mit 500m3/h aktiv ist und die luftgetragenen Spaltprodukte über Filter an die Umgebung kontinuierlich abgegeben werden. In dem hier untersuchten 'Gracetime'-Szenario wird angenommen, daß die RS-Absaugung erst eingeschaltet wird, wenn der Unterdruck dort sich dem Druck im inneren Containment angeglichen hat. Dies ist nach ca. 5h der Fall. Während dieser Zeit können sich Spaltprodukte auf den Strukturen absetzen bzw. weiter zerfallen. Dies führt zu einer deutlichen Reduktion des Quellterms an die Umgebung, wie Abb. 16 zu entnehmen ist. Hieraus läßt sich ableiten, daß es Sinn macht, die RS-Absaugung erst nach Druckausgleich mit dem inneren Containment anzuschalten.

5.) Einfluß der Zerfallsreaktion von Jodisotopen nach Xenonisotopen

In den bisher diskutierten Quelltermstudien wurden die radioaktiven Spaltprodukte aus Gründen der Vergleichbarkeit mit anderen Rechnungen in CONTAIN als stabil angenommen (sehr große Halbwertszeit für alle 16 betrachteten Isotope). Der Zerfall einzelner Isotope wurde in der weiteren Analyse auf Grund von KORIGEN-Rechnungen berücksichtigt. Dies ist in erster Näherung eine konservative Annahme.
In dem hier untersuchten Fall wurde der Zerfall der Nuklide I135 in Xe135 und I133 in Xe133 untersucht und der Einfluß dieser Reaktionen auf den Quellterm bestimmt. Dies ist wichtig, da die Jodisotope mit Filtern zu 99% zurückgehalten werden, die Edelgasisotope aber nicht. Außerdem können sich die Jodisotope an Aerosolen niederschlagen und auf Strukturen absetzen - Edelgase bleiben luftgetragen.

I135 bzw. I133 zerfallen in Xe135m und Xe135 bzw. in Xe133m und Xe133, die jeweils weiter in Cs135 und Cs133 zerfallen. Die Zerfallsketten entsprechend der CONTAIN-Datenbank sind in Abb. 17 dargestellt. Die Massen für die Jod- und Xenonisotope sind in Abb. 18 für die ersten 12h dargestellt.
In der Tabelle sind die Ergebnisse der Auswertung zusammengefasst. Angegeben sind die Isotopenmassen in kg im Ringspalt der Referenzrechnung. Die durch die Berücksichtigung des Zerfalls zusätzlich erzeugten Xenon-massen nach 1h bzw. 10h sind eingetragen. Die letzte Spalte gibt den relativen Effekt bezogen auf die Referenzrechnung.

Zusammenfassung

Die Untersuchungen zum Einfluß verschiedener Parameter auf Druck, Temperatur, Masse luftgetragene Aerosole und den radioaktiven Quellterm an die Umgebung für ein EPR-ähnliches Reaktorgebäude zeigen, welche Parameter sensitiv auf Änderungen sind.
Der Quellterm wird deutlich reduziert, wenn in den ersten 5 Stunden keine Luft aus dem Ringspalt abgesaugt wird bzw. wenn es gelingt, ein Spraysystem (je früher desto besser) in Betrieb zu nehmen.

Daß einige Jodisotope zu Edelgasisotopen zerfallen, aber in den CONTAIN-Rechnungen nicht modelliert wurden, hat einen vergleichsweise geringen Einfluß auf den Quellterm.

Literatur

/1/ R. Frutos, R.G. Gido, G. Henneges, P. Schmuck
Spaltproduktausbreitung vom Primärsystem an die Umgebung bei einem schweren Störfall im EPR, FZKA 6126, 1998

/2/ K.K.Murata et al.,
Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Containment Analysis to be published

Jod- und Xenonisotopenmassen im Ringspalt (kg) für den Referenzfall

	1h		10h		
	CONTAIN-Rechnung	Durch Zerfall zusätzlich erzeugt	CONTAIN-Rechnung	Durch Zerfall zusätzlich erzeugt	*Effekt (10h)*
I135→Xe135m	2.4E-9	2.5E-10	5.0E-7	1.1E-7	*22.0%*
→Xe135 (A)	1.8E-7	9.9E-11	1.7E-4	2.9E-6	*1.7%*
I135→Xe135 (B)	1.8E-7	1.8E-09	1.7E-4	1.5E-5	*8.8%*
I133→Xe133m	9.1E-8	6.4E-11	6.8E-5	5.2E-7	*0.8%*
→Xe133 (A)	7.3E-7	1.1E-13	5.6E-3	3.2E-8	*0.0%*
I133→Xe133 (B)	7.3E-7	2.2E-09	5.6E-3	1.8E-5	*0.3%*

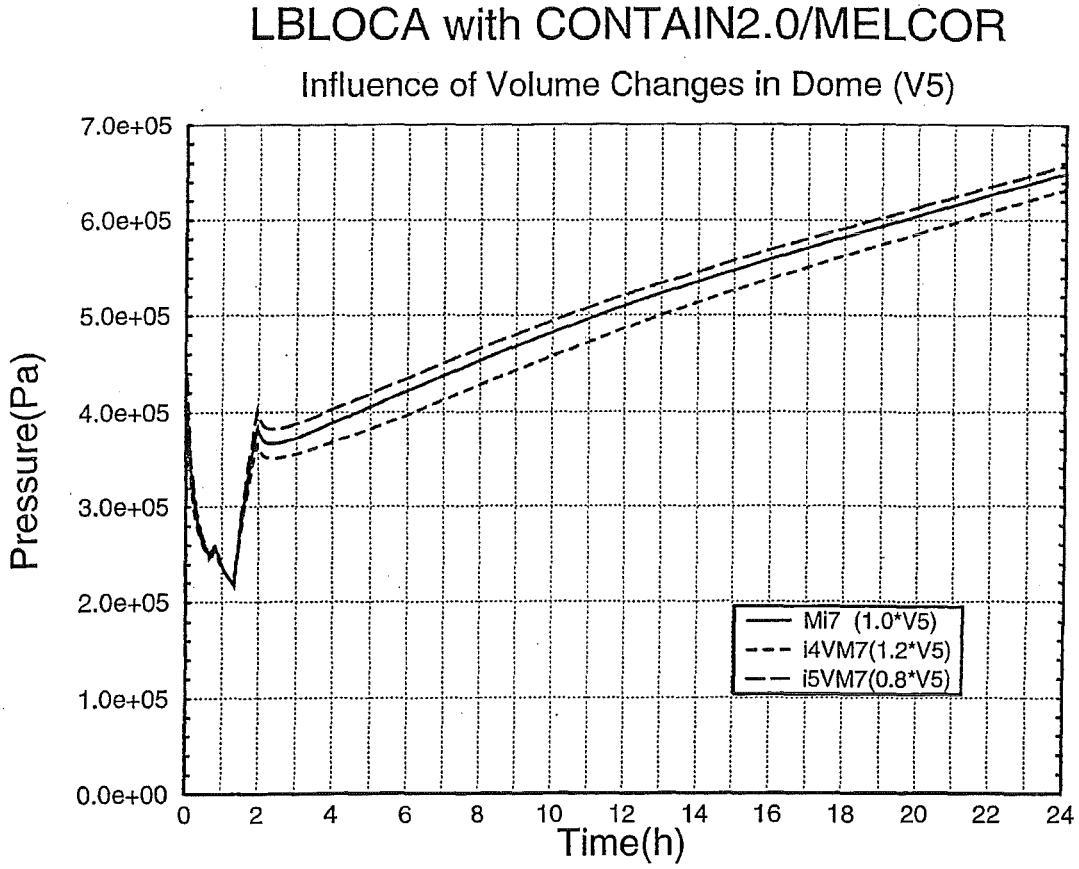


Abb. 1 Druck in Abhängigkeit vom Volumen V5

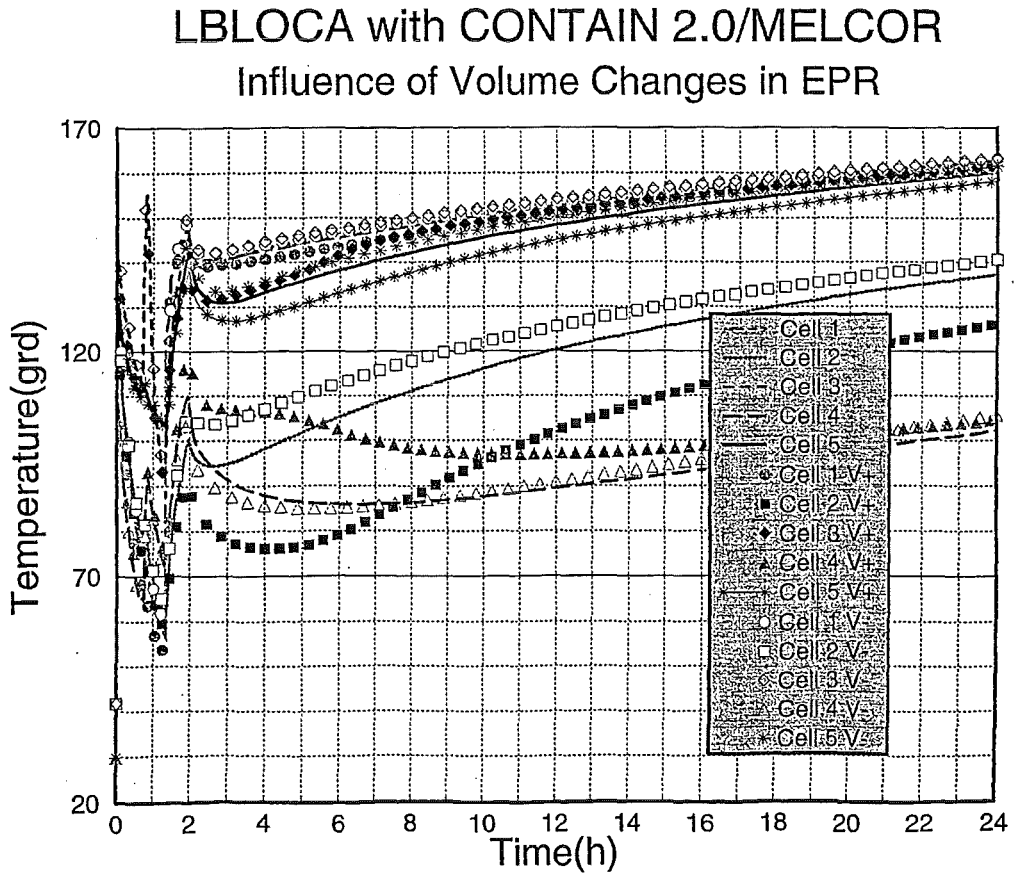


Abb. 2 Zelltemperaturen in Abhängigkeit vom Volumen V5

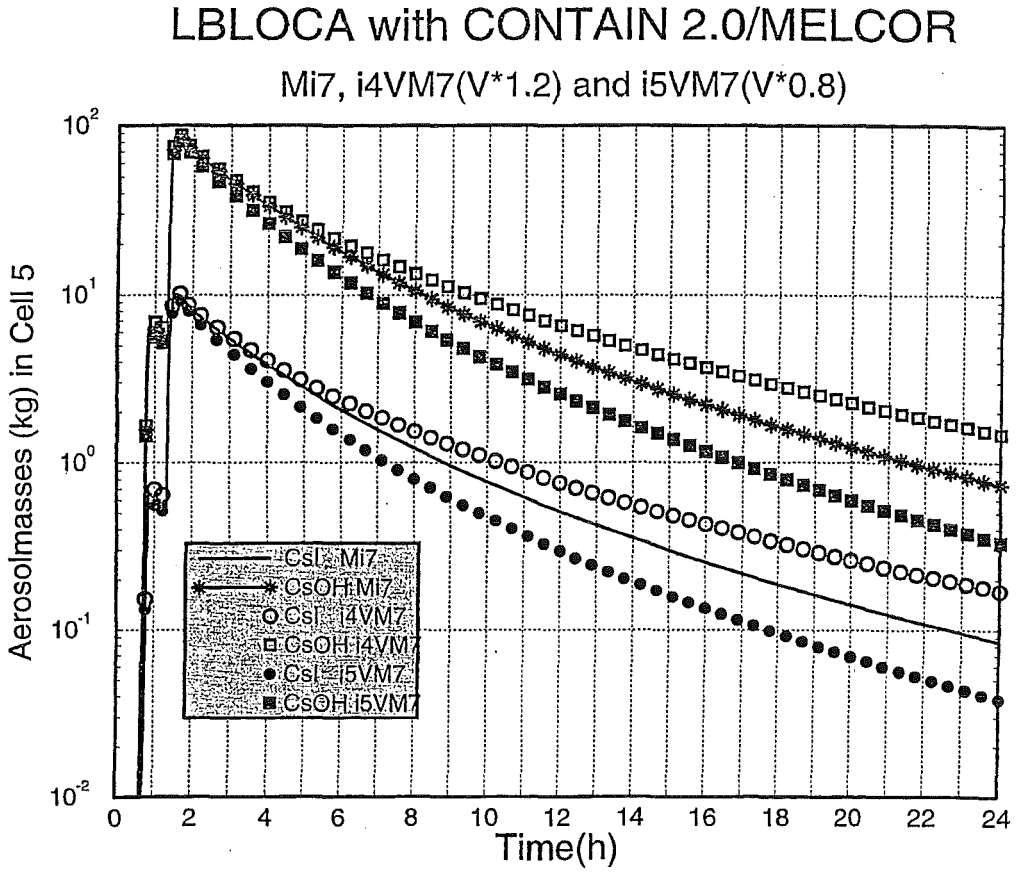


Abb. 3 Luftgetragene Aerosolmassen in Abhängigkeit von V5

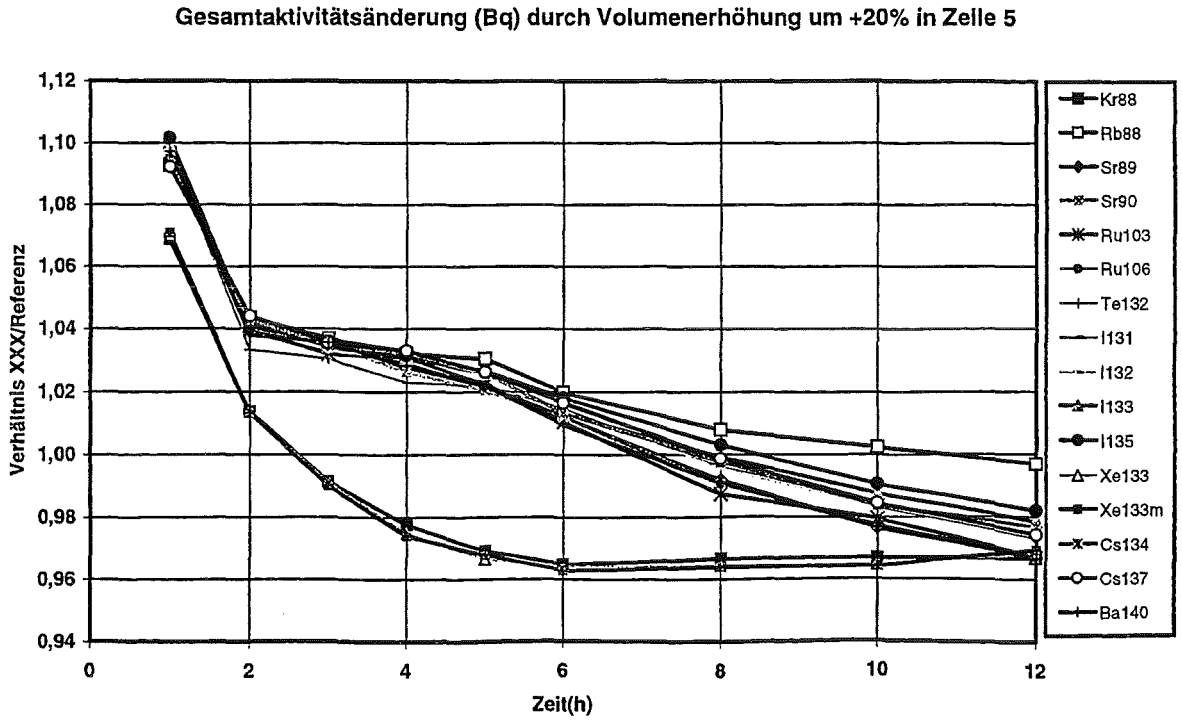


Abb. 4 Relativer Einfluß auf den Quellterm (1.2*V5)

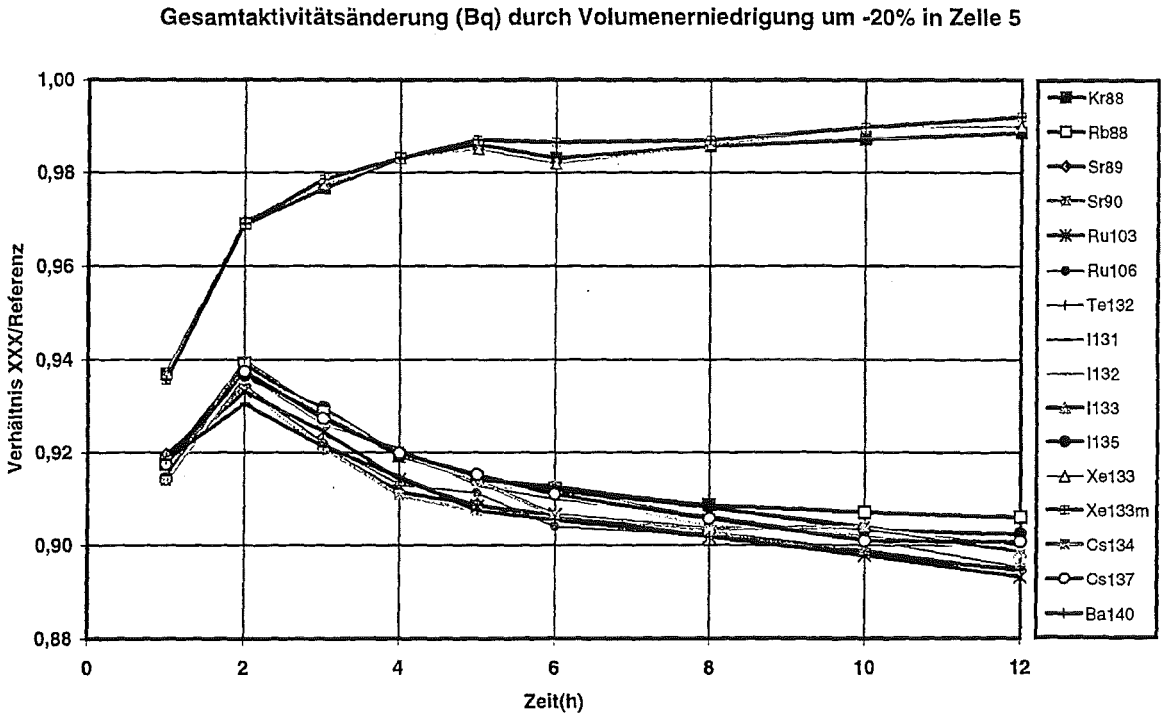


Abb. 5 Relativer Einfluß auf den Quellterm (0.8*V5)

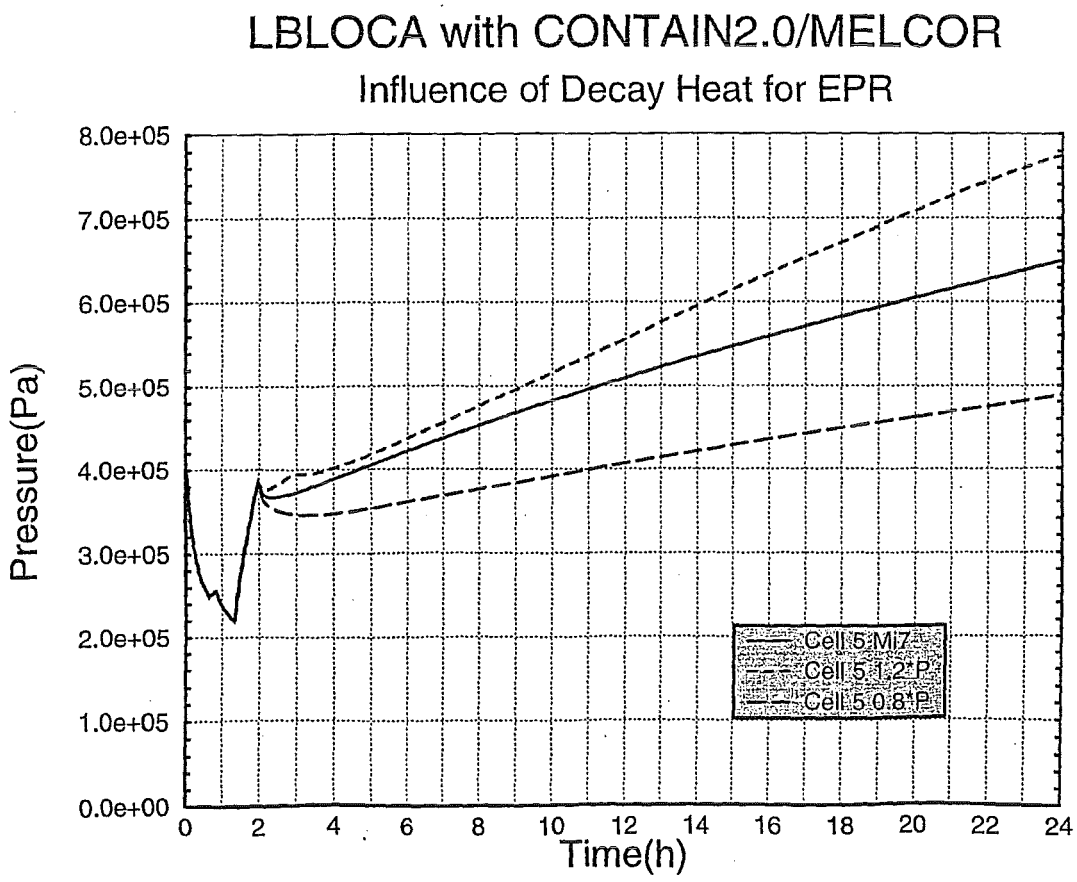


Abb. 6 Druck in Abhängigkeit von der Reaktorleistung (NZL)

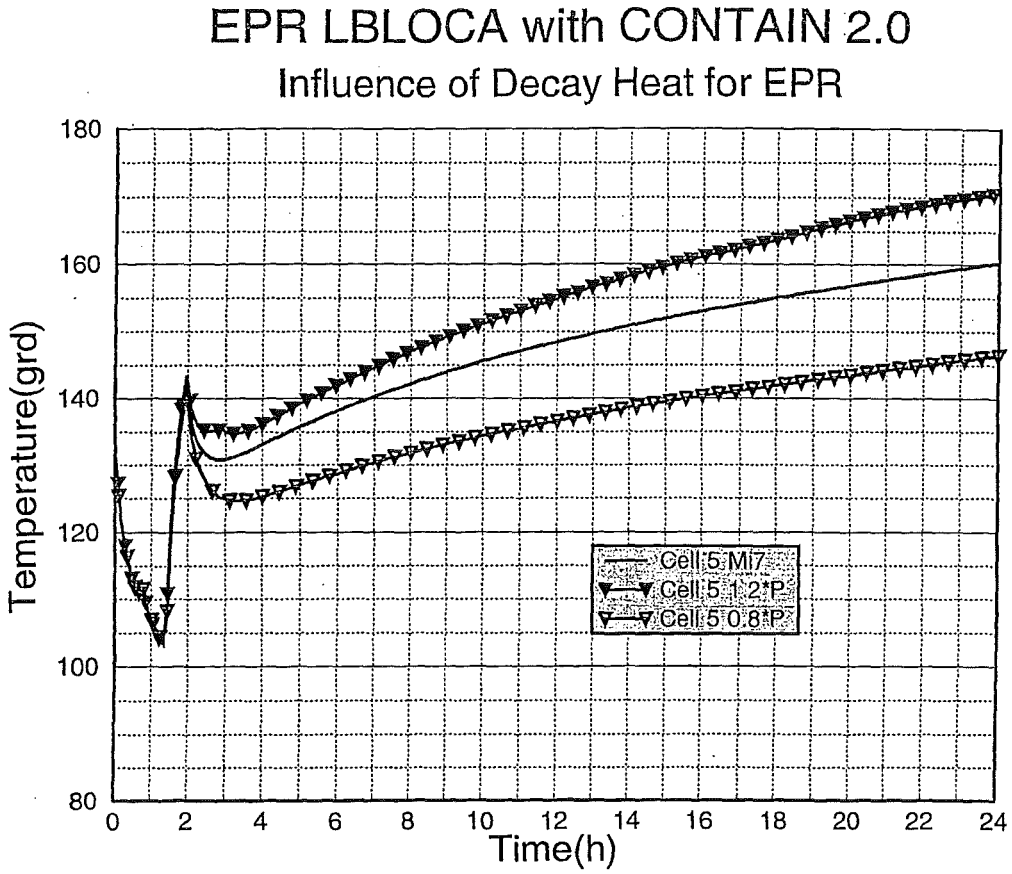


Abb. 7 Zelltemperaturen in Abhängigkeit von NZL

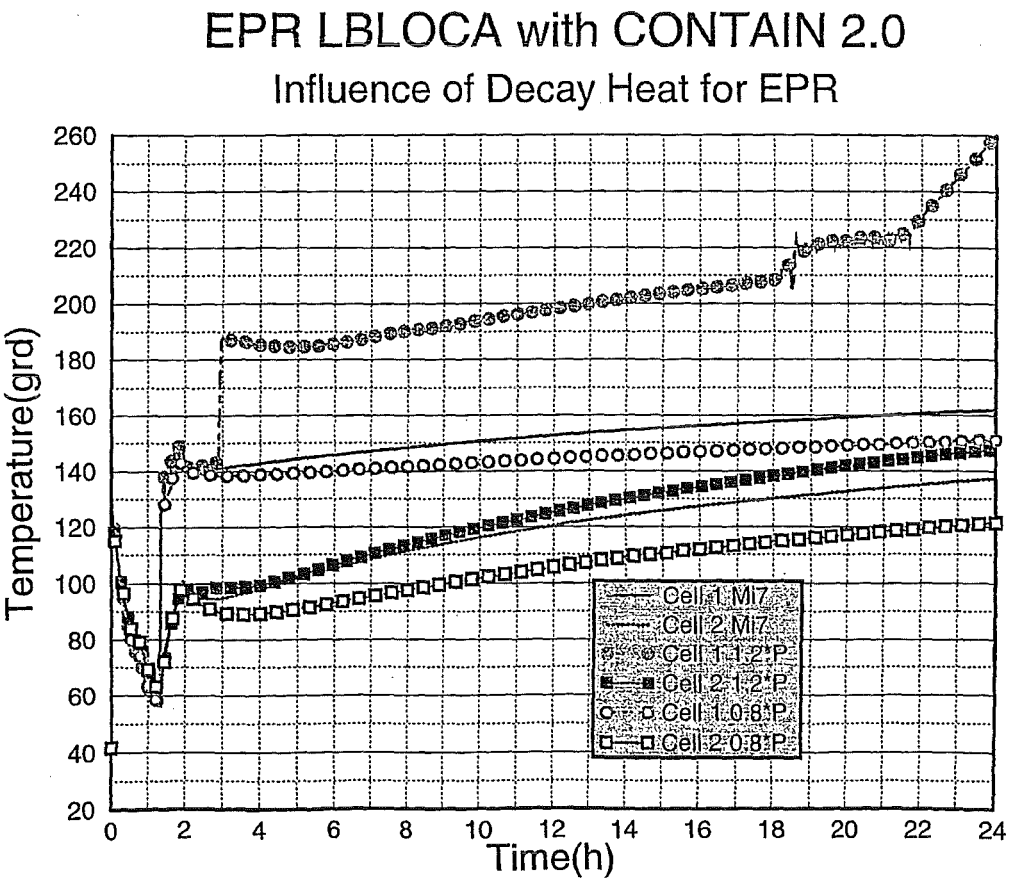


Abb. 8 Temperaturen in Zellen 1 und 2 in Abhängigkeit von NZL

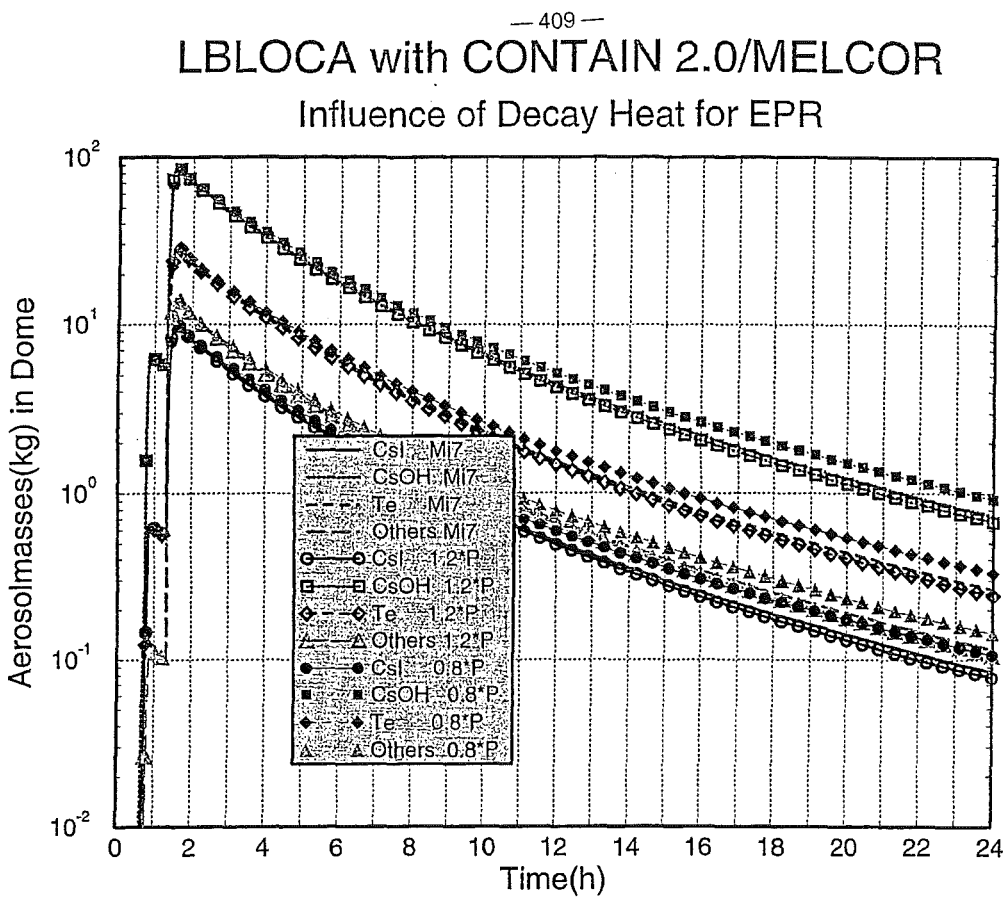


Abb. 9 Luftgetragene Aerosolmassen in Abhängigkeit von NZL

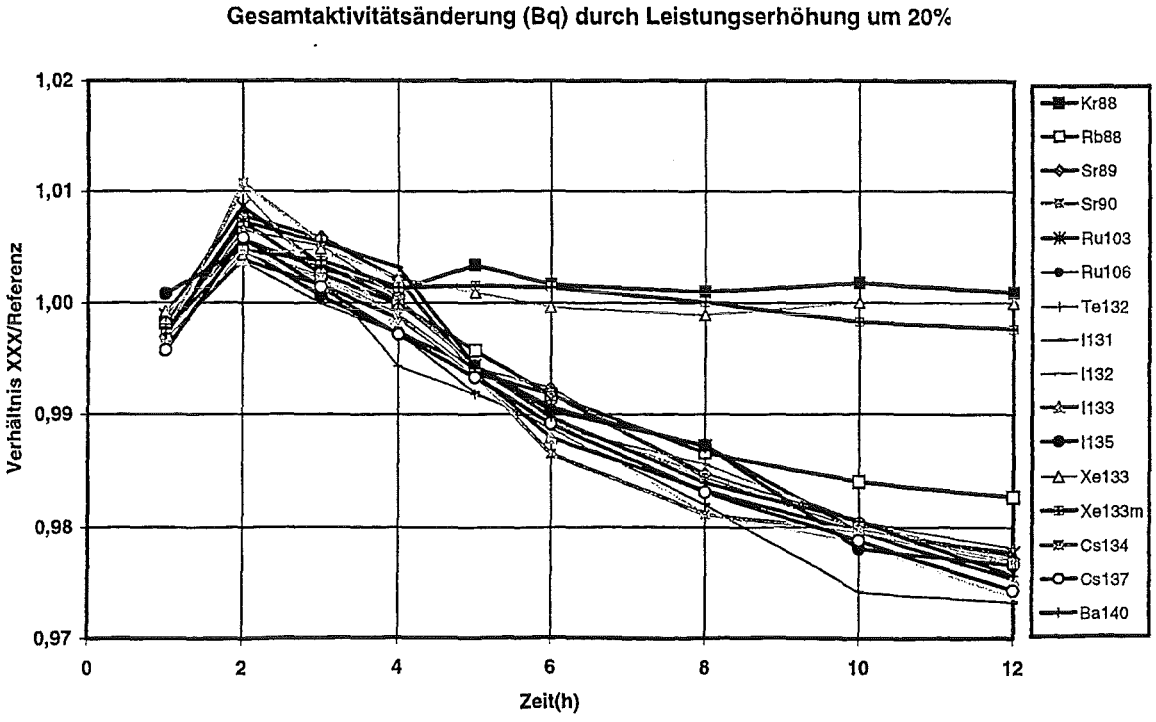


Abb. 10 Relativer Einfluß auf den Quellterm (1.2*NZL)

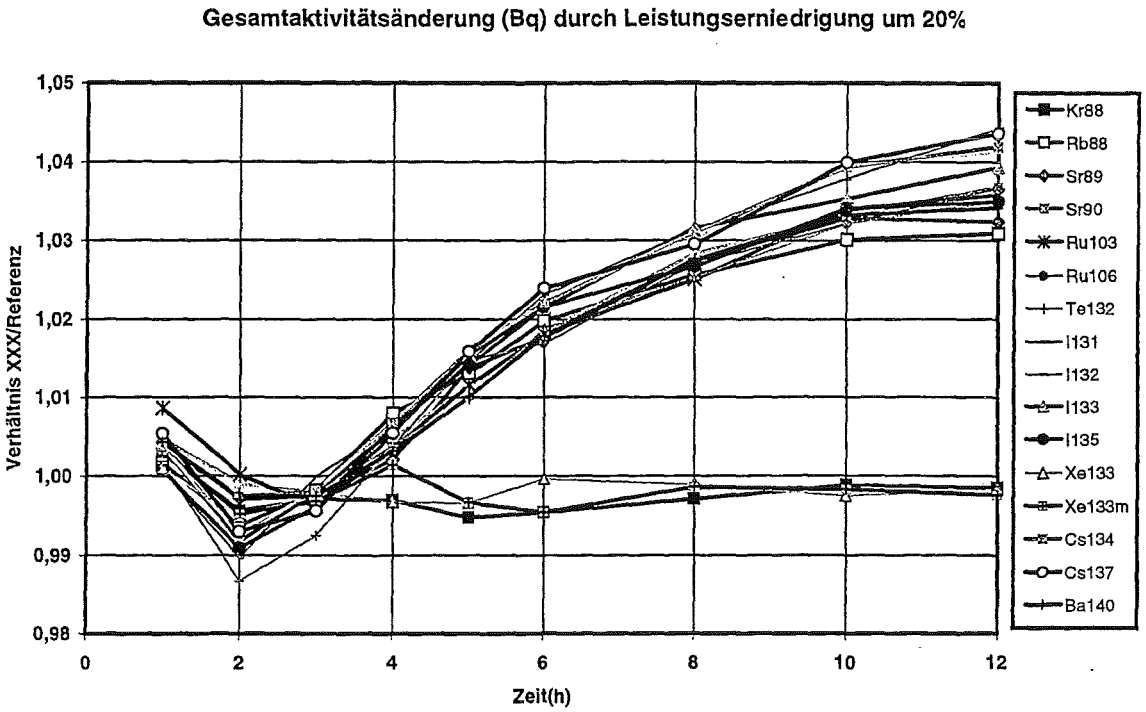


Abb. 11 Relativer Einfluß auf den Quellterm (0.8*NZL)

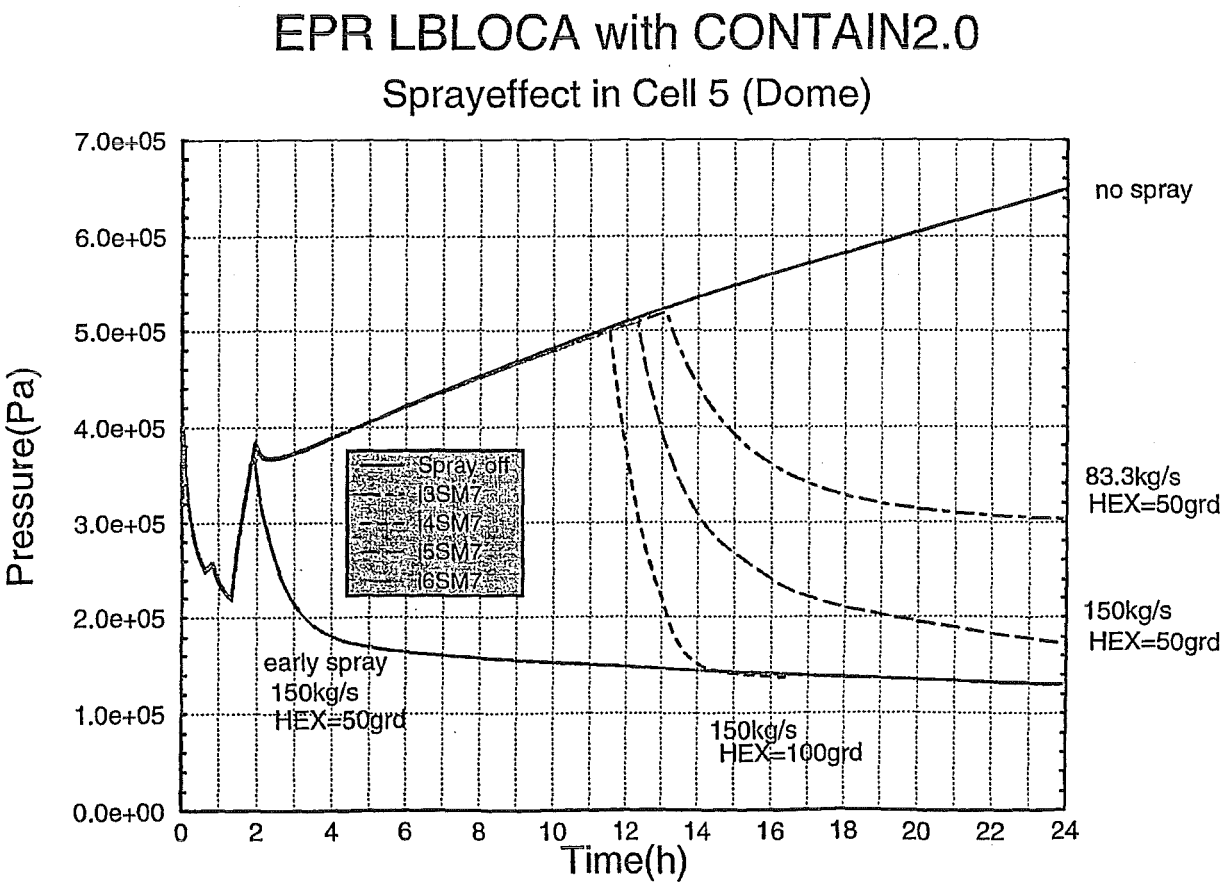


Abb. 12 Einfluß der Spraysystemparameter auf den Druck

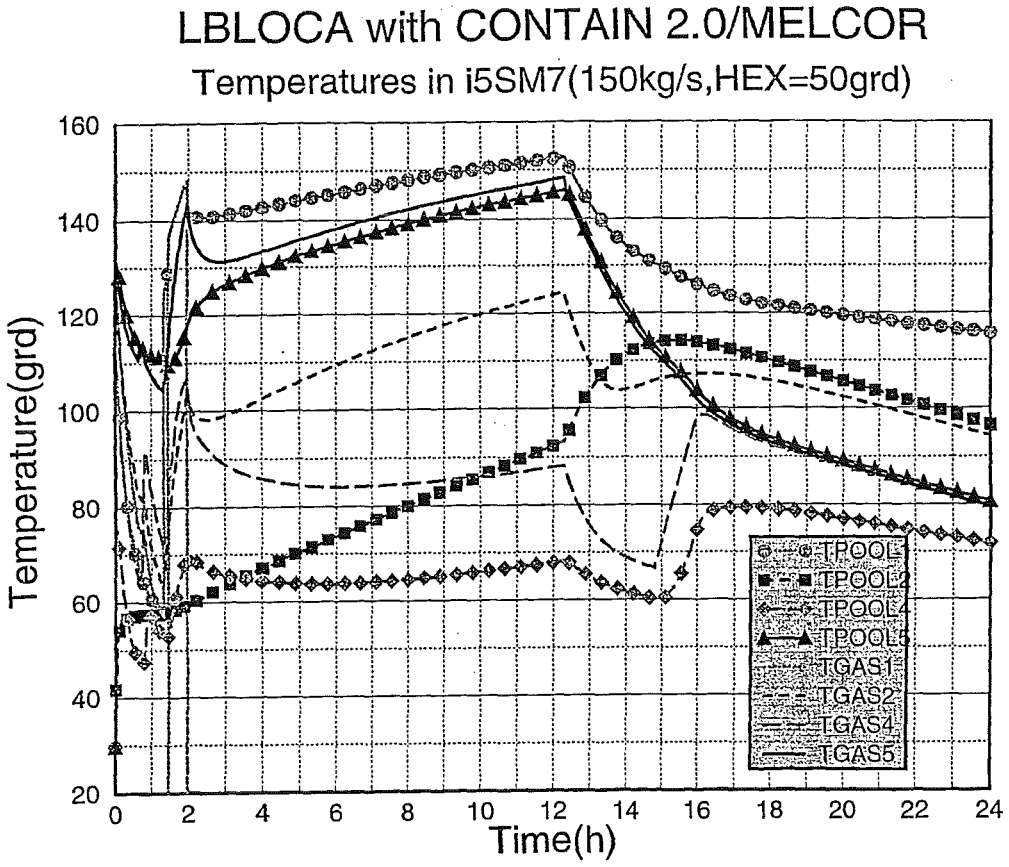


Abb. 13 Einfluß der Spraysystemparameter auf Temperaturen

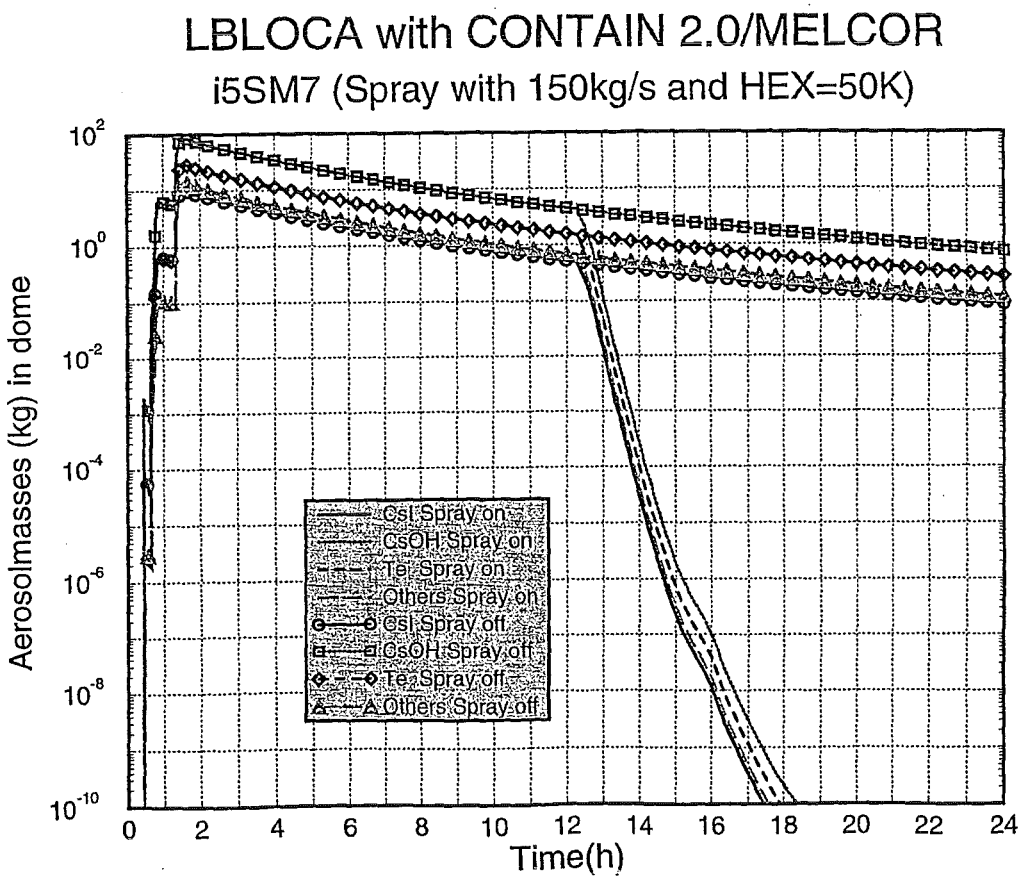


Abb. 14 Einfluß des Spraysystems auf das Aerosolverhalten

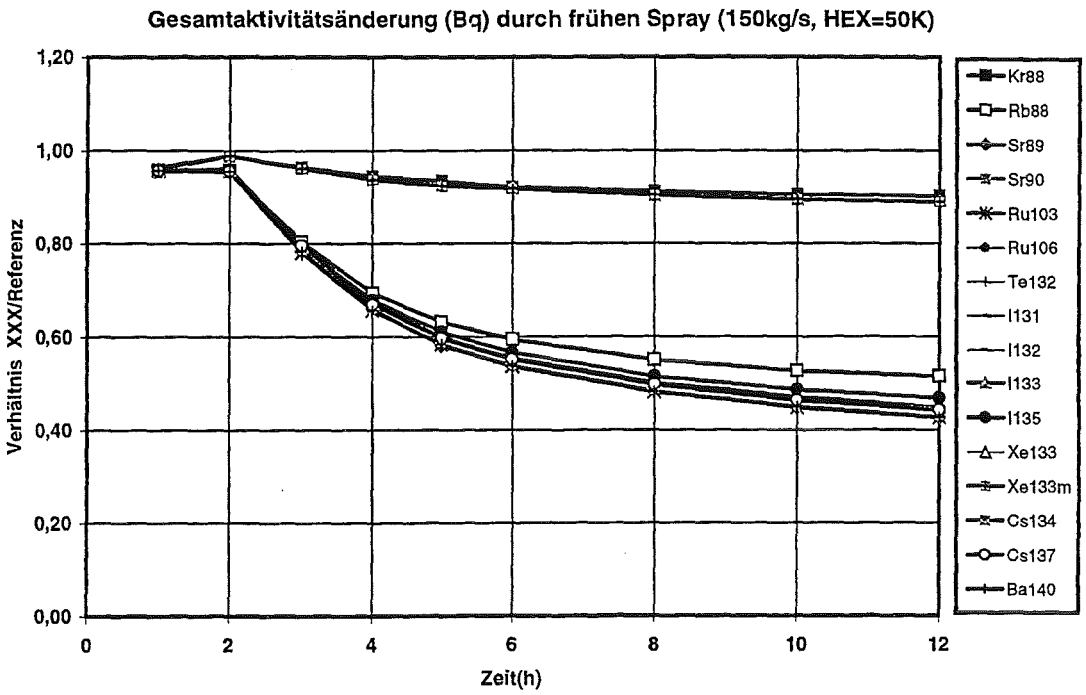


Abb. 15 Relativer Einfluß auf den Quellterm durch frühen Spray

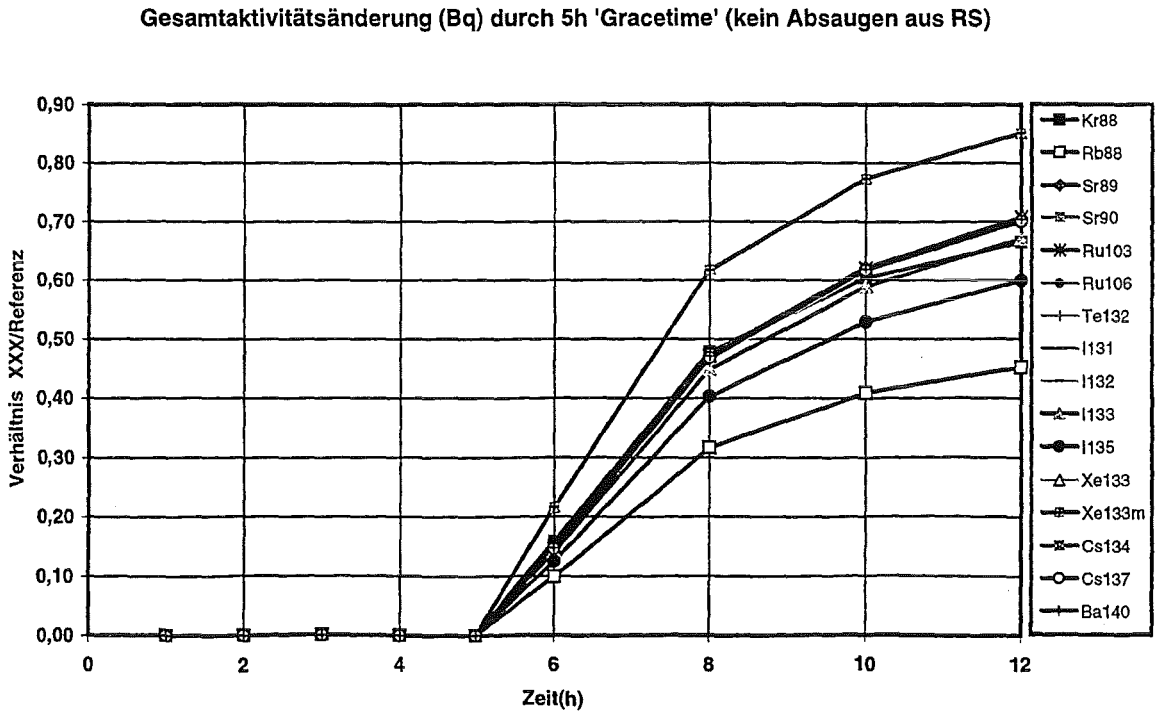


Abb. 16 Relativer Einfluß auf den Quellterm durch 'Gracetime'

Abb. 17: Zerfallspfade von I133 und I135 zu Xe133 bzw. Xe135

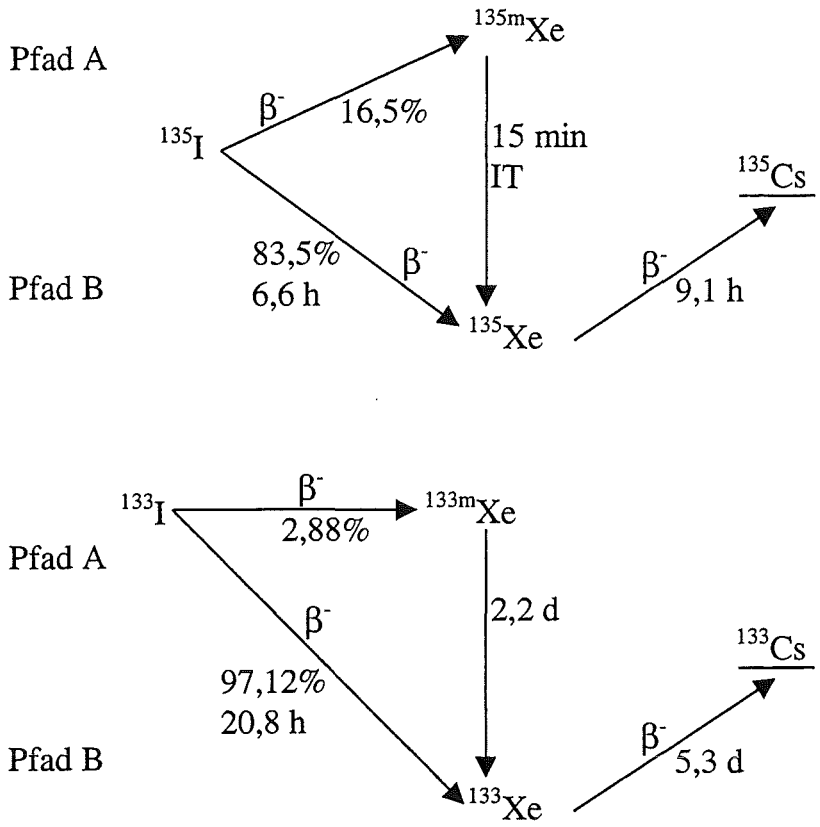
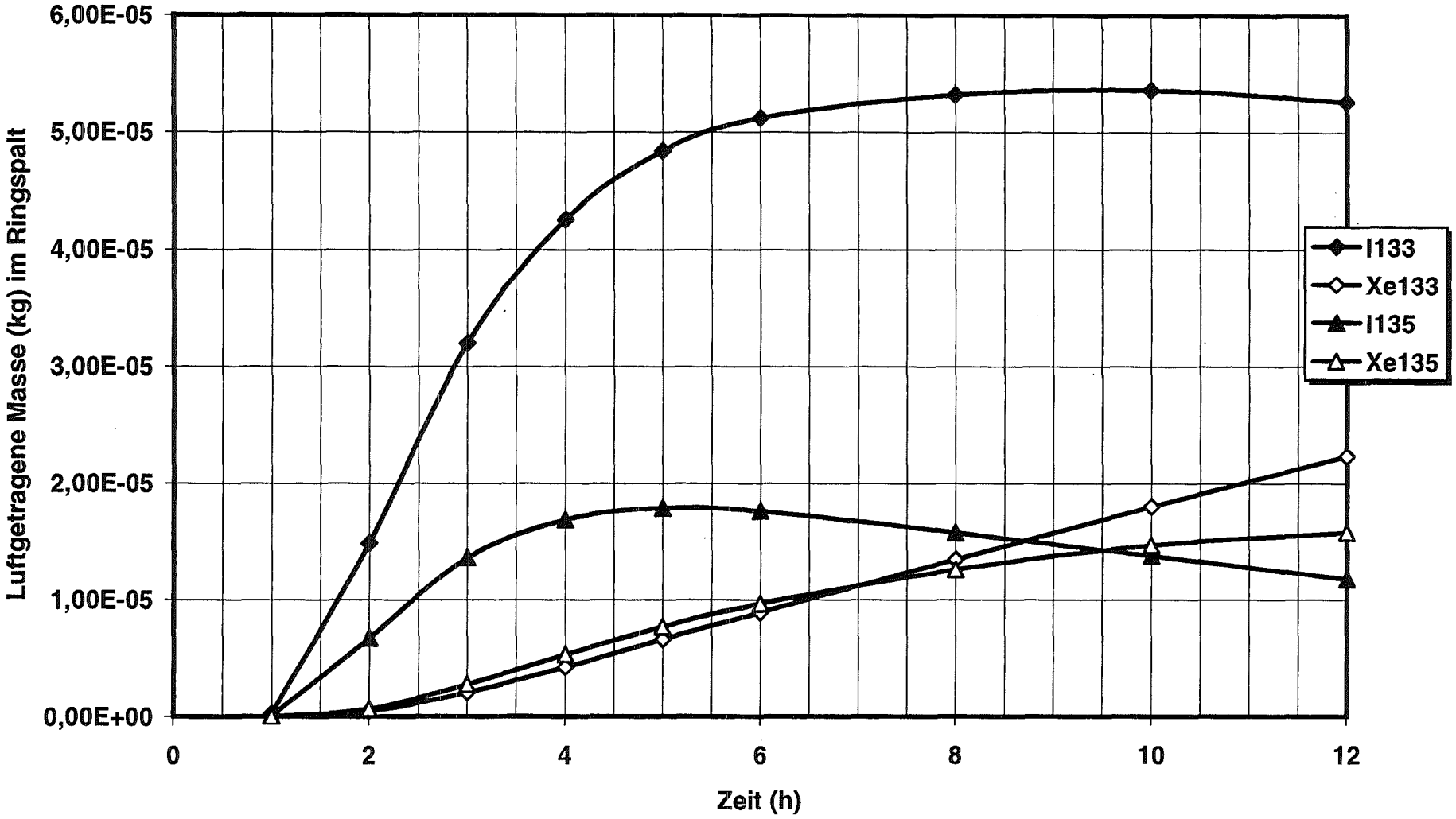


Abb. 18: Jodzerfall und Xenonaufbau



32.21.08 Untersuchungen zur Kernzerstörung

I. QUENCH Programme

(P. Hofmann, M. Steinbrück, L. Steinbock, J. Stuckert, IMF I; W. Leiling, A. Miassoedov, L. Schmidt, L. Sepold, D. Piel, IMF III)

Abstract

New results of the separate-effect tests on hydrogen absorption by Zircaloy and experiments on ZrO_2 shell failure are described. Description of the test conduct and main results obtained in the bundle experiments QUENCH-03 and QUENCH-04 is given.

Zusammenfassung

Es werden neue Ergebnisse von Einzeleffektuntersuchungen zur Wasserstoffabsorption von Zircaloy und Experimenten zum "ZrO_2-Versagenskriterium" beschrieben. Darüber hinaus werden die Versuchsparameter und die wichtigsten Ergebnisse der Bündelexperimente QUENCH-03 und QUENCH-04 vorgestellt.

1.1 HYDROGEN ABSORPTION BY ZIRCALOY

In the frame of the QUENCH programme the physico-chemical behavior of Zircaloy fuel rod cladding during quenching of an overheated reactor core is investigated. Besides the oxidation of Zircaloy by steam the interaction of hydrogen produced by this reaction with the remaining Zircaloy metal is of interest. It is well known that zirconium can dissolve large amounts of hydrogen. This reaction may have important consequences on the course of events during and after reflood of an overheated core. So, Zircaloy may act as a sink or source of hydrogen, depending on temperature and partial pressure. In this way, the hydrogen solubility of the cladding material can alter the hydrogen source term.

During the last three years extensive experimental studies on the hydrogen absorption behavior of zirconium alloys have been conducted under various boundary conditions (see 5^{th} and 6^{th} Progress Report). During the reporting period the experiments have been extended to "wet" atmospheres. The data are used by IBRAE to validate the hydrogen absorption module in the SVECHA/Q code package.

The tests are conducted in the QUENCH rig with 10 cm long cladding tube segments closed on both sides. Two test series have been performed at 1100 °C: The first under pure steam flow with varying times of oxidation, the second with 20 min oxidation and variable hydrogen/steam compositions as main parameter. The hydrogen content of the specimens was analyzed by post-test high-temperature extraction under flowing argon by means of a mass spectrometer.

Figure 1.1 shows that with increasing time and therefore increasing oxide scale thickness the concentration of the absorbed hydrogen first increases up to above 20 at-% and then decreases at longer oxidation times than about 60 min. This behavior was qualitatively predicted by the SVECHA model.

The data of the second test series at constant temperature (1100 °C) and time (20 min) under variable hydrogen/steam mixtures show a strong scattering as can be seen from figure 1.2. Nevertheless, there is a clear tendency of increasing hydrogen absorption with increasing hydrogen partial pressure in the gas mixture.

The tests on hydrogen absorption under various conditions will be continued in order to provide an extensive data base for model development.

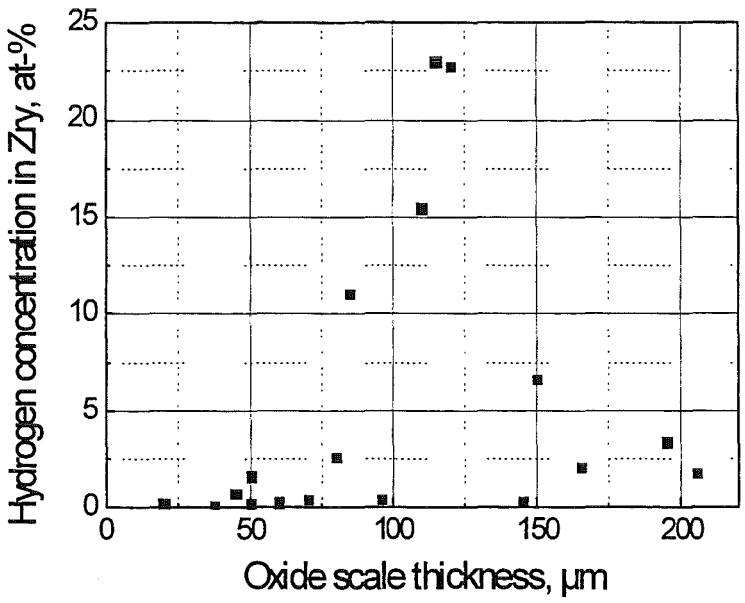


Fig. 1.1: Hydrogen concentration in Zry-4 vs. oxide scale thickness in steam oxidation tests at 1100 °C.

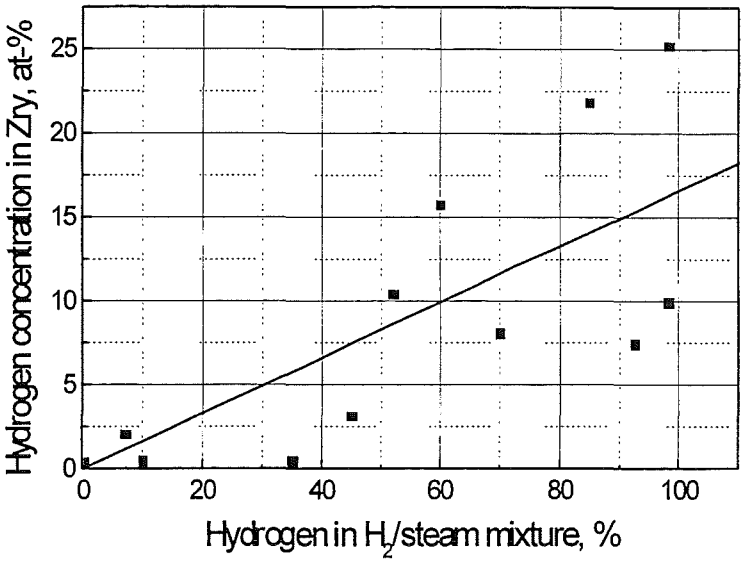


Fig. 1.2: Hydrogen concentration in Zry-4 vs. hydrogen partial pressure in hydrogen/steam oxidation tests at 1100 °C.

1.2 ZrO_2 SHELL FAILURE TESTS

When the melting temperature of the unoxidized Zircaloy is reached (2033 K), the failure of the cladding and the mechanisms of chemical interaction, which take place between the metallic melts and the solid UO_2 pellet and ZrO_2 layer on the external cladding surface, have great relevance to core degradation, giving the possibility for low-temperature (U,Zr,O) mixture relocation and giving rise to an increased release of fission products from the liquefied fuel. If a sufficiently thick oxide layer has formed on the outside surface of the cladding tube, the relocation of any molten Zircaloy will be prevented, or limited inside the gap between cladding and fuel pellets, because of a "crucible" effect due to the high melting point of ZrO_2. The oxide layer will remain in place until its melting point is reached, or until it is dissolved by molten Zircaloy, or until it fails mechanically. Depending on the mode of failure and the melting capability of the solid rod by the liquid mixture, the molten material may relocate as rivulets (heat transfer process).

Analyses of the results of the integral tests on the severe accident behavior of the fuel bundles under the loss of coolant conditions show that the oxide scale failure strongly influences the accident progression. The cladding failure usually occurs after the burst or local melting of the cladding which lead to the internal overpressure disappearance and the onset of the inner cladding surface oxidation. Under the further temperature escalation the metal phases of Zircaloy melt and the oxide scale prevents the molten Zircaloy from

relocation. After the oxide scale failure an intensive oxidation of the melt occurs at a high temperature region of a bundle and a blockage forms at lower and colder parts of the bundle. These can lead to the further sharp temperature increase due to reduction of the bypass flow and heat release due to the melt oxidation.

The oxide scale failure at high temperatures occurs as a wall breach formation and is termed "flowering" due to increase of a distance between breach edges which allows melt relocation.

Knowledge of cladding failure mechanisms above the Zircaloy melting temperature is currently lacking. Only simple parametric models using user-defined parameters are available in the code systems. In the assumption currently made, the ZrO_2 layer fails when a certain temperature limit is exceeded (typically 2300 — 2500 K) and the ZrO_2 layer is less than a limiting thickness (the oxide shell is assumed not to break if typically 60 % of the original wall has been completely oxidized); the uncertainty in the break temperature is more significant. The large scatter in the cladding failure parameters used in the code applications is evidence for the lack of understanding in this area, and for the need to develop physically-based models. The development of such models requires an experimental data base.

The objective of the present investigation is to provide such a data base, to study and clarify the possible reasons and criteria of the oxide scale failure at high temperatures.

Experimental procedure

Different experimental approaches have been applied to obtain the required data, however, only the experiments in the small-scale QUENCH test apparatus have been successful [1]. The design of the test section for ZrO_2 shell-failure-criteria experiments and specimen are presented in Fig. 2.1. The tube specimen of a length of 50 mm, filled with ZrO_2 pellets, is suspended inside a quartz tube which is surrounded by an induction heating coil. The specimens were inductively heated up to 1400 °C in an argon-oxygen mixture and were held at this temperature from 2 to 9 minutes. Then the specimens were further inductively heated up with heating rate from 2 to 10 K/s (Fig. 2.2) up to the onset of cladding failure and release of the molten material. After the detection of the molten material on the outer specimen surface the power supply was shut down and the specimens cooled down. The cladding surface temperature is measured by a pyrometer in the center of the specimen in all tests, in some tests a centerline thermocouple was used additionally.

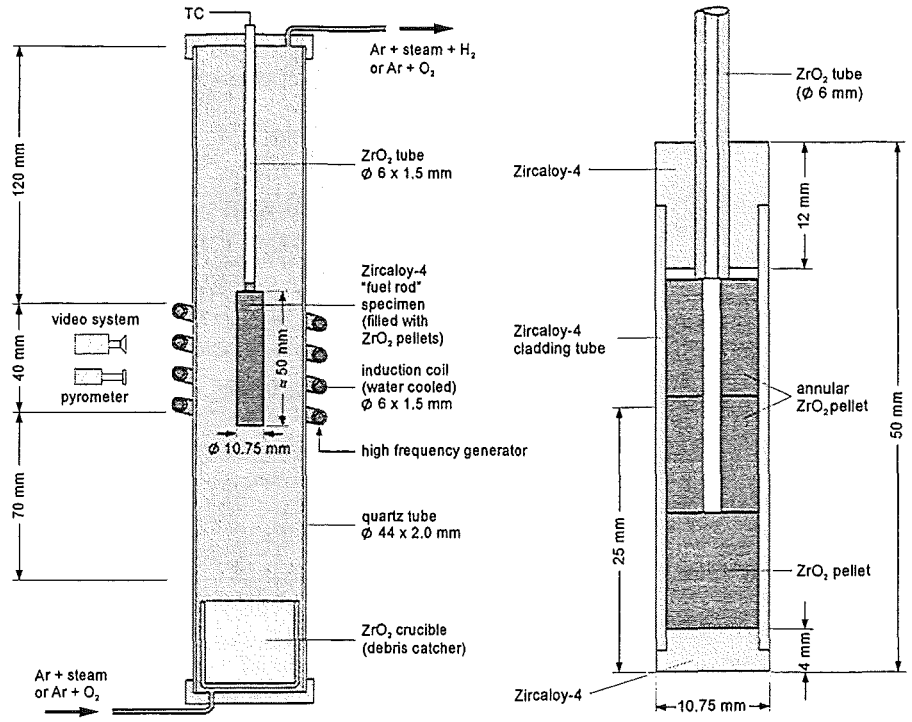


Fig. 2.1: Test section design and specimen for ZrO_2 shell-failure-criteria experiments.

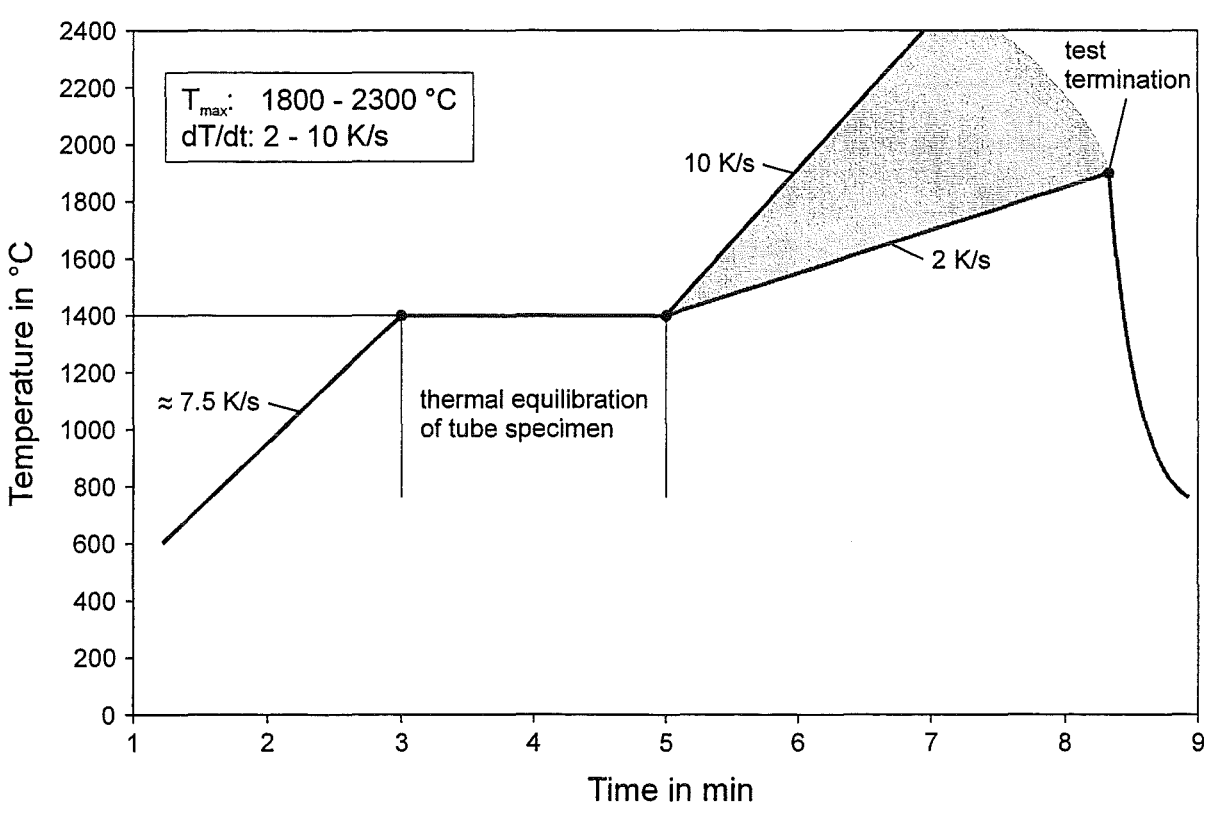


Fig. 2.2: Test conduct of the ZrO_2 shell-failure-criteria experiments.

Experimental observations and their interpretation

The essential results of the FZKA experiments with a time of pre-oxidation of 2 min at 1400 °C and different heating rates are presented in Table 2.1.

Table 2.1: ZrO_2 shell failure-criteria experiments with 50 mm long Zry-4 tube specimens filled with ZrO_2 pellets. The failure positions are marked bold; t_p - time of pre-oxidation at 1400 °C; ΔT - heat-up rate starting from 1400 °C; ΔZrO_2 - oxide layer thickness (μm) at the given elevation h (mm); H - failure position (h and H measured from the bottom of the rod).

Test ID	t_p, min	ΔT, K/s	Temperature at onset of failure		Oxide layer thickness					
			Pyrometer	TC W/Re	h	ΔZrO_2	h	ΔZrO_2	h	ΔZrO_2
19SK	2	4	1950	—	**16.5**	**345**	25	300	35	180
20SK	2	8	2010	—	13	175	**26**	**110**	35	85
21SK	2	8	1980	—	13	180	**24**	**125**	**35**	**90**
22SK	2	2	2010	—	**9.5**	**455**	25	compl.	35	530
23SK	2	3	1800	—	13	270	**25**	**390**	35	230
24SK	2	3	2170	—	**10**	**435**	25	compl.	35	compl.
25SK	2	6	1860	—	13	215	**25**	**200**	35	120
26SK	2	2	1930	—	—					
27SK	2	5	2000	—	13	435	**25**	**380**	**30**	**425**
28SK	2	10	1960	—	12.5	150	**24**	**140**	32	110
29SK	2	5	2020	—	—	—	—	—	—	—
30SK	2	4	2130	2000	17	625	25	510	36	370
31SK	2	6	1930	1859	—					
32SK	2	8	2030	1820	12	210	**25**	**170**	35	120
33SK	2	5	2100	1990	10	345	**24**	**340**	34	320
34SK	2	6	1975	1815	14	250	**26**	**210**	35	140
35SK	2	4	2130	1870	12	580	25	510	**31.5**	**395**
36SK	2	4	2100	2185	13	560	25	550	**31**	**425**
37SK	2	8	1970	1855	—					
38SK	2	6	1880	2010	13	230	25	230	**33**	**175**
39SK	2	4	2130	2180	14	570	26	530	**31.5**	**425**
40SK	2	2	2020	>2300	14	compl.	25	compl.	36	compl.

The results of the experiments show a clear correlation between the heat-up rate and the oxide shell failure temperature. No failure occurs if a heat-up rate is less than 3 K/s – the cladding completely oxidizes before reaching the melting point of the Zircaloy (Fig. 2.3). The cladding failure temperature continuously decreases with increasing heat-up rate and after reaching a certain limit (app. 6 K/s) remains constant (Fig. 2.4).

After the tests the tube specimen was cut at the location where cladding failure occurred and metallographically prepared to determine the thickness of the remaining Zircaloy layer (see examples in Figures 2.5 – 2.8). The oxide layer thickness was measured in the different azimuth and, in a few cases axial locations. The oxide layer thickness at onset of failure decrease with increasing heat-up rate starting from 450 µm at 4 K/s and reaching 100 µm at 8 K/s and more.

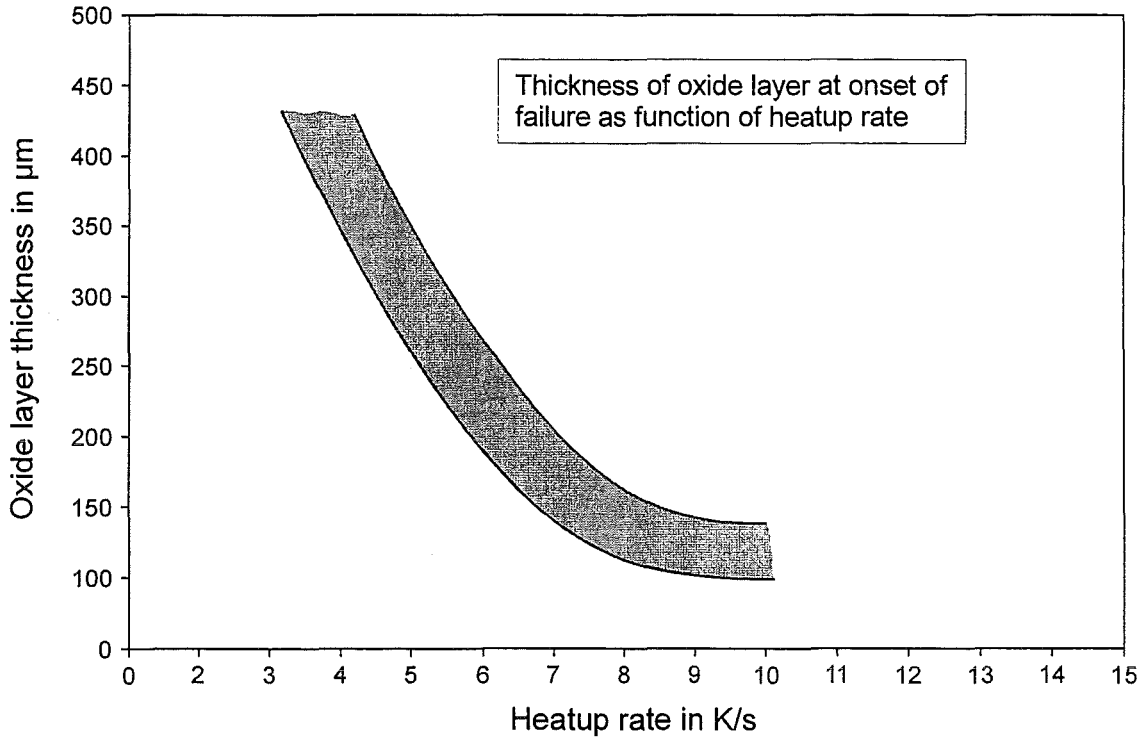


Fig. 2.3: Dependence of the oxide layer thickness from the heatup rate in ZrO_2 shell-failure-criteria experiments.

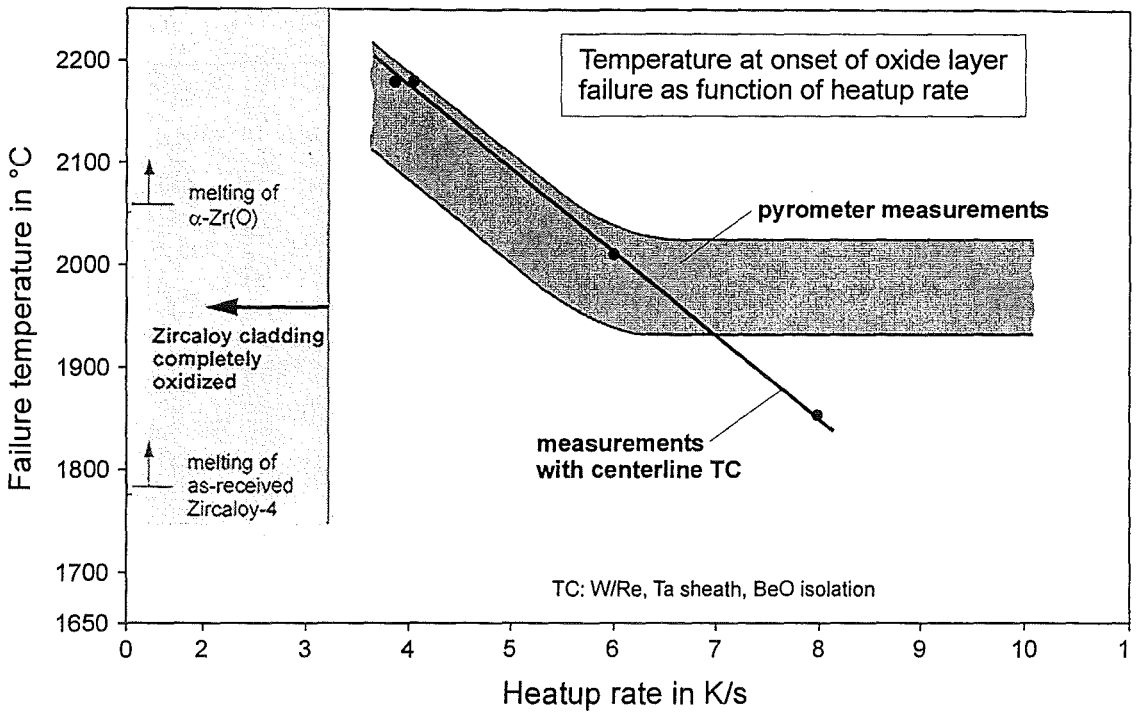


Fig. 2.4: Dependence of the failure temperature in ZrO_2 shell-failure-criteria experiments.

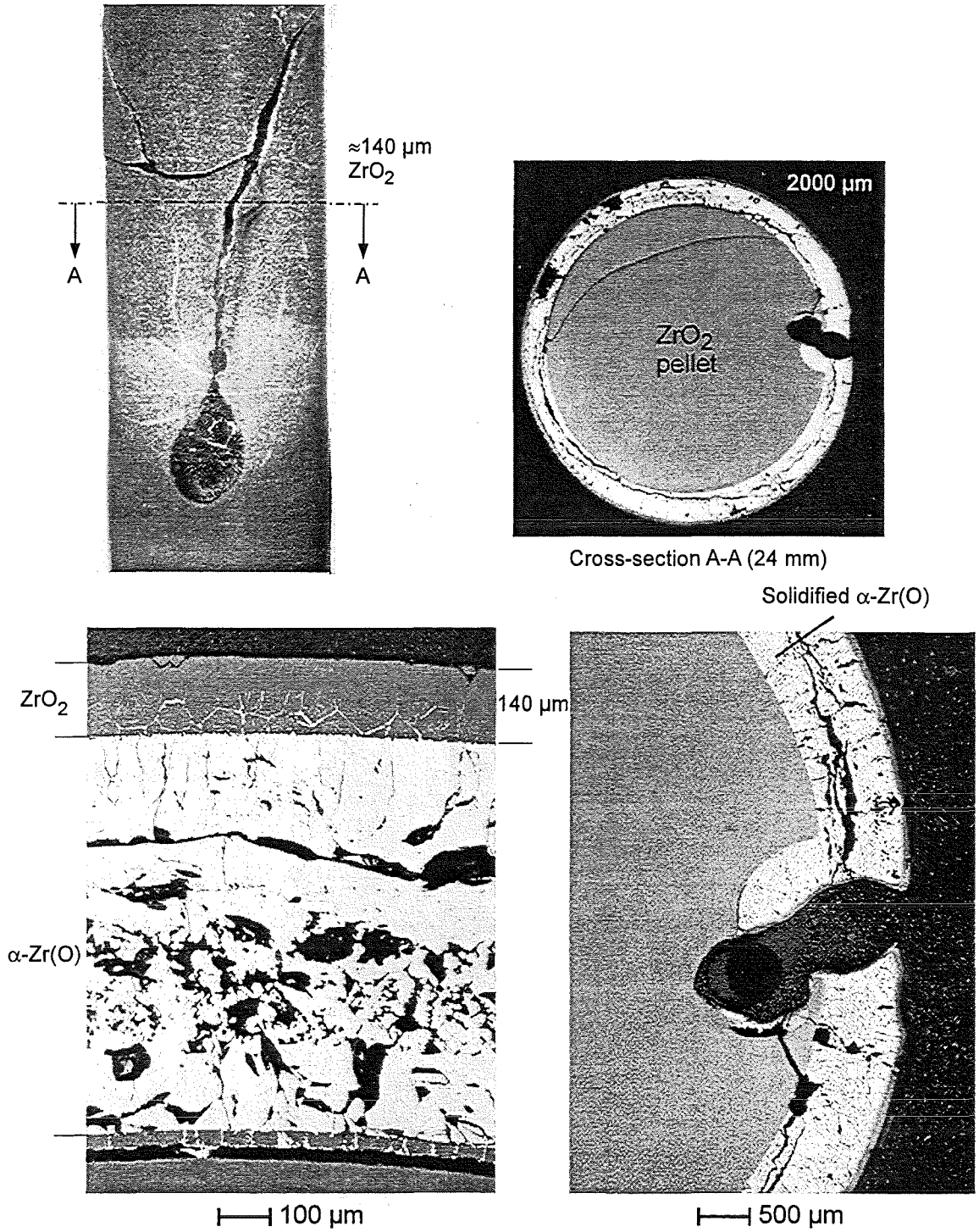


Fig. 2.5: Test 28SK, Two minutes pre-oxidation at 1400 °C, 10 K/s heat-up rate, melt-through at 1960 °C (pyrometer). Two upper pictures: outer surface and cross-section of the specimen. Two lower pictures: structure of the layers and breach formed in the oxide layer.

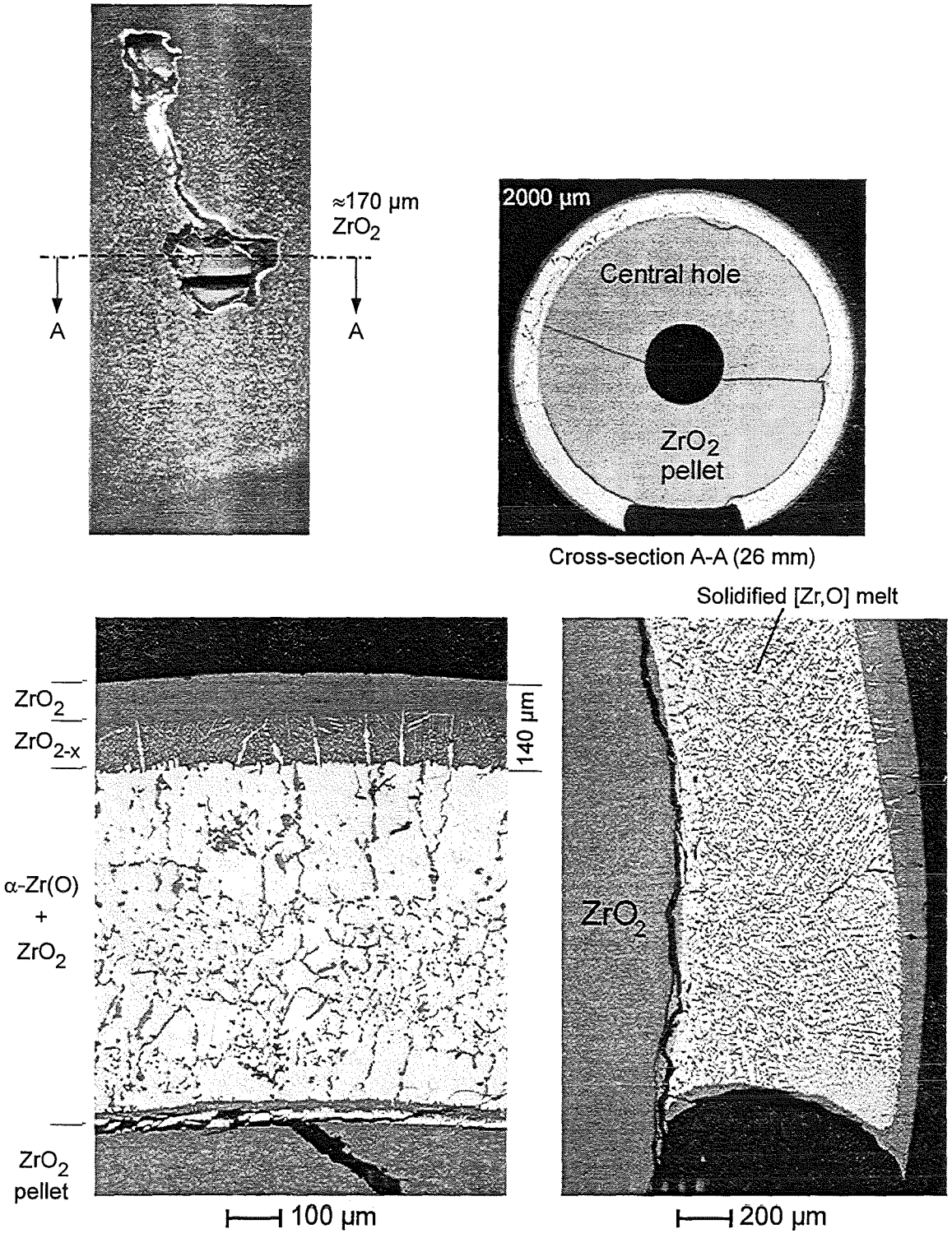


Fig. 2.6: Test 32SK, Two minutes pre-oxidation at 1400 °C, 8 K/s heat-up rate, melt-through at 2030 °C (pyrometer). Two upper pictures: outer surface and cross-section of the specimen. Two lower pictures: structure of the layers and breach formed in the oxide layer.

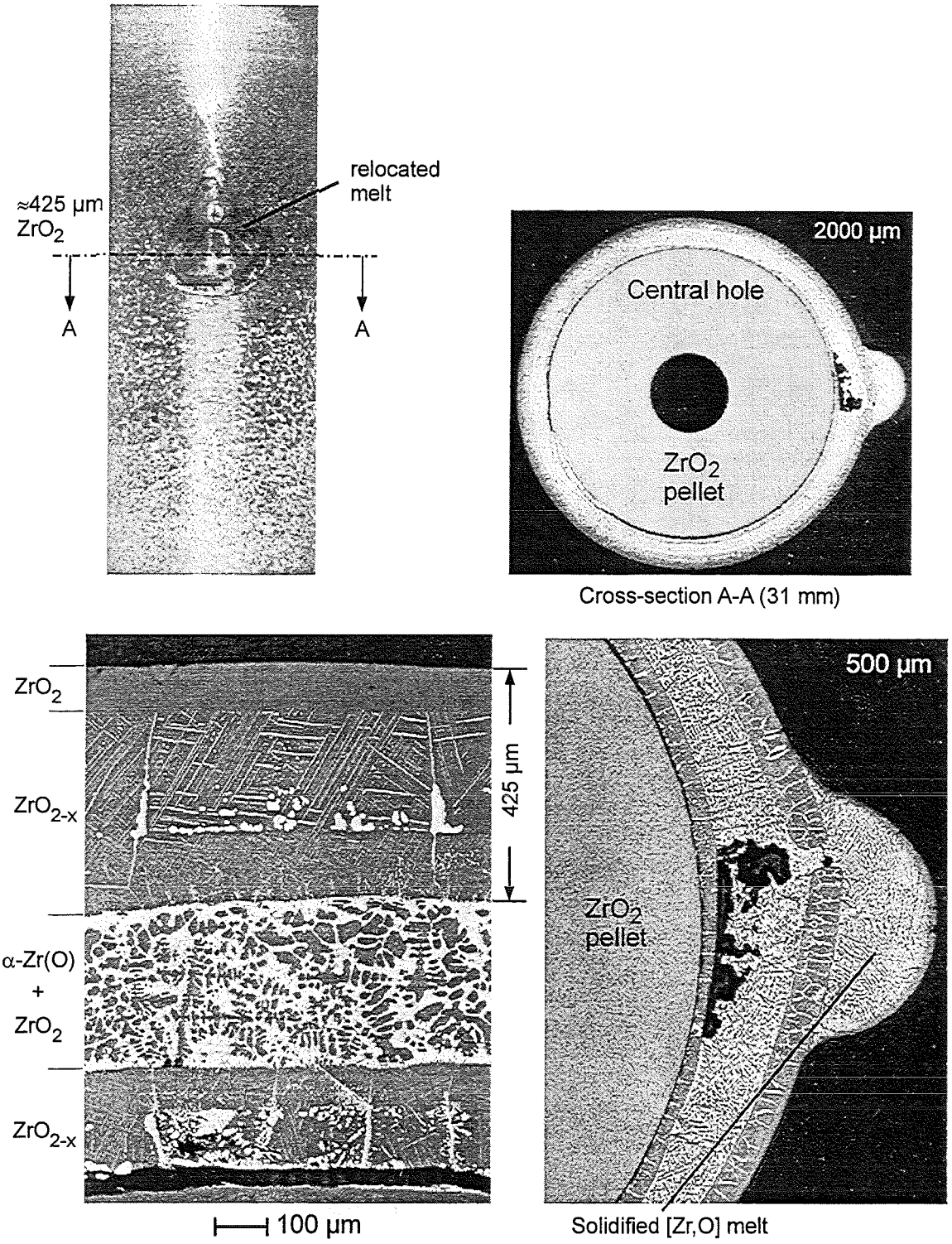


Fig. 2.7: Test 36SK, Two minutes pre-oxidation at 1400 °C, 4 K/s heat-up rate, melt-through at 2100 °C (pyrometer)/2185 °C (centerline TC). Two upper pictures: outer surface and cross-section of the specimen. Two lower pictures: structure of the layers and breach formed in the oxide layer.

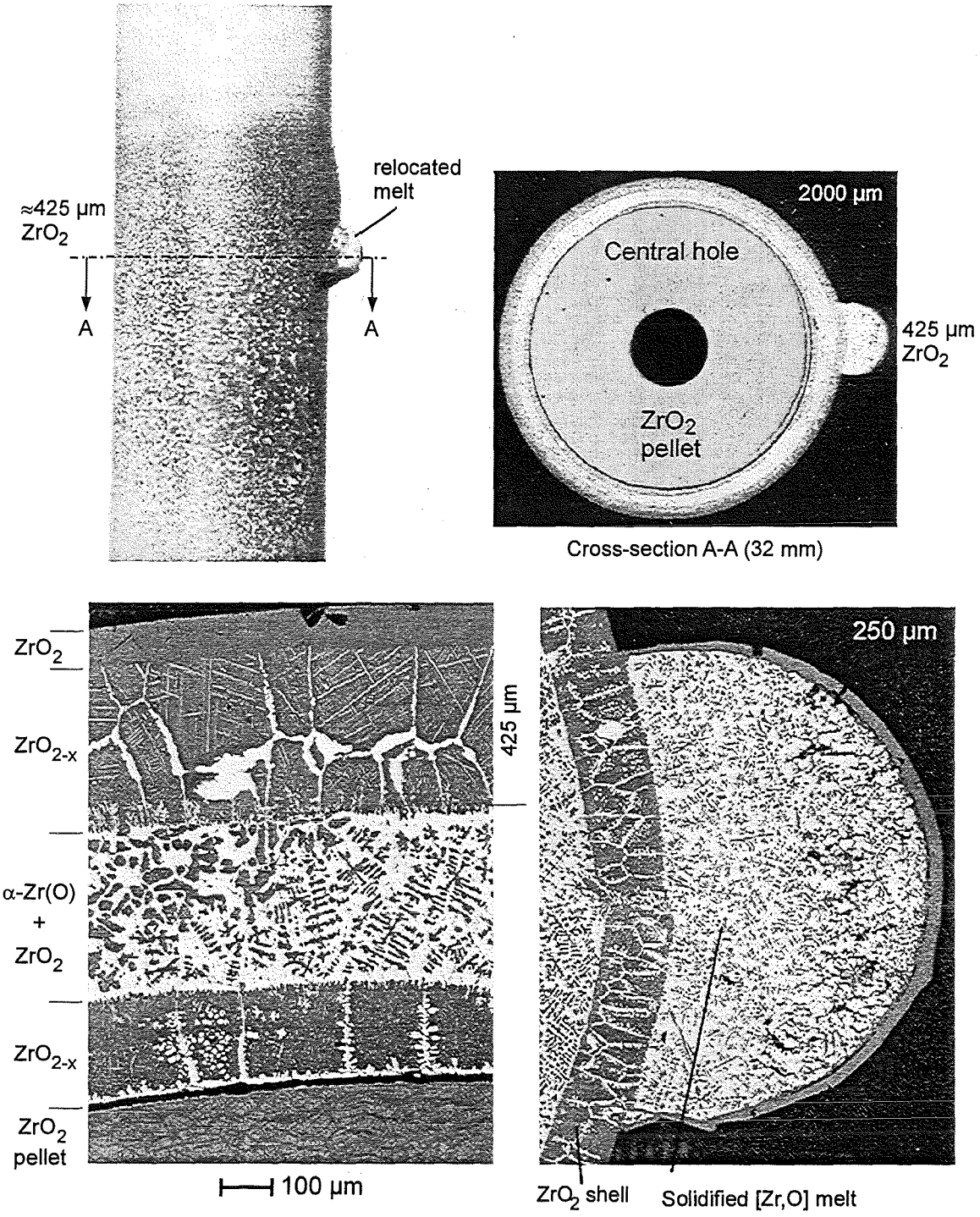


Fig. 2.8: Test 39SK, Two minutes pre-oxidation at 1400 °C, 4 K/s heat-up rate, melt-through at 2130 °C (pyrometer)/2180 °C (centerline TC). Two upper pictures: outer surface and cross-section of the specimen. Two lower pictures: structure of the layers and breach formed in the oxide layer.

1.3 BUNDLE QUENCH TESTS

Cooling of an uncovered, overheated PWR (Pressurized Water Reactor) core by water is the main accident management measure for terminating a severe accident transient. But, before the water succeeds in cooling the fuel elements, the injected water can, under certain circumstances, trigger an enhanced oxidation of the Zircaloy cladding that causes a rapid increase in temperature and hydrogen generation. This phenomenon was observed in out-of-pile tests such as CORA and in-pile experiments such as LOFT-LP-FP2. The reasons for this enhanced oxidation are not yet fully understood but it is believed that the cracking of oxide layers due to the thermal shock and subsequent exposure of fresh Zircaloy to steam as observed in the single rod tests are significant factors. Neither the CORA tests, nor the LOFT test nor the single rod tests created adequate experimental bases for understanding the quenching process or constructing computer models that could be used to understand how quenching would affect a real reactor core. In previous experiments the enhanced oxidation was unexpected so the instrumentation was not optimized, and too less experiments have been performed to cover an adequate range of quenching conditions.

Because of the importance of understanding the in-vessel hydrogen source term that results during quenching the QUENCH programme was initiated at Forschungszentrum Karlsruhe. The main part of the QUENCH programme are the experiments in the 21 rod QUENCH facility. Experimental data mainly come from extensive temperature measurements and hydrogen generation measurements with two independent systems during the test and from post-test examination of a large number of bundle cuts, performed after the tests. In the following a short description of the QUENCH facility as well as experimental and analytical results of the two recently performed experiments are given.

QUENCH Test Facility

The main component of the large-scale QUENCH test facility is the test section with the test bundle. The superheated steam from the steam generator and superheater together with argon as a carrier gas enter the test bundle at the bottom. The argon, the steam not consumed by oxidation reactions within the test section, and the hydrogen produced in the zirconium-steam reaction flow from the bundle outlet at the top through a water-cooled off-gas pipe to the condenser where the steam is separated from the non-condensable argon

and hydrogen gases. The quench water enters the test section through a separate line at the bottom.

The test bundle is made up of 21 fuel rod simulators approximately 2.5 m long. Twenty fuel rod simulators are heated over a length of 1024 mm, the central fuel rod simulator is unheated. Heating is electric by 6-mm diameter tungsten heaters installed in the rod center and surrounded by annular ZrO_2 pellets and the Zircaloy cladding. The rods are filled with Ar-5%Kr at a pressure of ≈2.2 bars. The krypton additive allows test rod failure to be detected by mass spectrometry. The test bundle is surrounded by a shroud of Zircaloy with a 37 mm thick ZrO_2 fiber insulation and an inner and outer cooling jacket of stainless steel. The test bundle is equipped with thermocouples attached to the cladding at different elevations between -250 mm and 1350 mm and in four different orientations. The thermocouples of the shroud are mounted in four different orientations with elevations of the shroud thermocouples ranging between -250 mm and 1250 mm. The hydrogen is analyzed by two different instruments: (1) a mass spectrometer located behind the test section, (2) a "Caldos" hydrogen detection system located downstream the condenser.

A detailed description of the QUENCH facility is given in [2] and [3].

Test QUENCH-03

The objective of the third bundle quench experiment QUENCH-03 was to investigate the physico-chemical behavior of PWR fuel rods with little pre-oxidation. The bundle configuration was the same as in tests QUENCH-01 [3] and QUENCH-02 [4].

The bundle was heated by a series of stepwise increases of electrical power from room temperature to approximately 900 K in an atmosphere of flowing argon (3 g/s) and steam (3 g/s).

The bundle was stabilized at this temperature for 8000 s with an electric power of 3.75 kW. During this time the various sub-systems were checked. Then the bundle was ramped with 0.43 W/s per rod, giving an average temperature increase of ≈0.4 K/s (900–1400 K) and later of ≈1.0 K/s (1400–1870 K). It was planned to initiate the flooding of the bundle at the time when the temperature excursion was recognizable. According to former experience and pre-test calculations this was expected to happen at the hottest spot, i. e. at 950 mm level. In fact the temperature excursion started at lower temperature at the

elevation 750 mm at about 1400 K and was not observed during the test (Figure 3.1). Therefore the reflood was initiated when the peak rod temperatures had already reached ≈2400 K. The steam flow was stopped, the argon inlet was switched from the bundle foot to the bundle head. So, provision of the carrier gas for hydrogen measurement systems was maintained without disturbing the flow in the bundle. The reflood water was injected at the high rate of 90 g/s for 25 s to fill the lower plenum, afterwards the water injection rate was reduced to 40 g/s. The temperature of the water at the lower plenum was near the saturation level. Two and a half minutes after flooding had been initiated, when the bundle had become half full (temperature drop at 550 mm elevation), the bundle electrical power was reduced to 4 kW within 15 s. Reflood of the main test sections was completed in 904 s, after which the experiment was terminated by shutting off the electrical power (Figures 3.2 and 3.3).

Smooth, regular cooling led to quenching of the rods below 650 mm, Figure 3.4. Strong temperature excursion, accompanied by enhanced hydrogen production during the reflood phase was observed at 750 mm and above, leading to a maximum hydrogen concentration of 53 % in the off-gas. The maximum hydrogen production rate was 3.6 g/s, Figure 3.5. The total hydrogen release measured is 123 g with most of it associated with the reflood phase. This value is comparable to that observed in previous tests under similar conditions. The maximum hydrogen production rate is, however, about three times the highest value observed in CORA experiments.

The post-test analysis of the test bundle shows significant oxidation and fragmentation of the Zircaloy cladding from 700 mm elevation upwards. Between the 500 and 750 mm level melt from the upper zone relocated on the shroud outer surface. Between the 700 and 860 mm elevation the shroud forms a bubble containing molten material, Figures 3.6 and 3.7. Embrittlement of the shroud and rod cladding material is similar to that in the QUENCH-02 test (Figure 3.8).

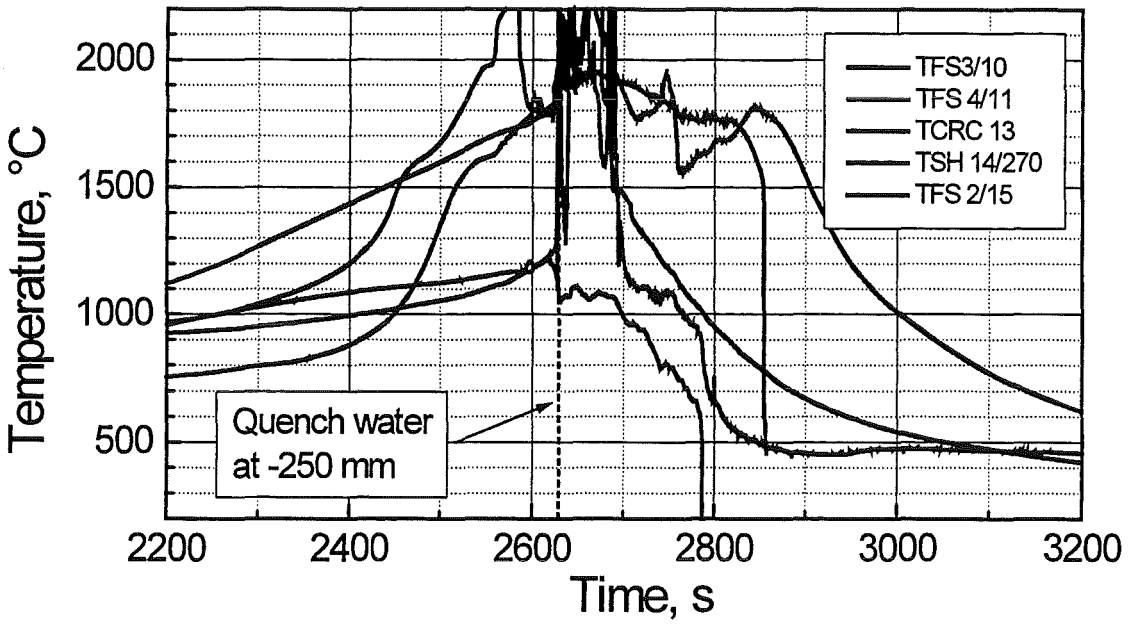


Fig. 3.1: Test QUENCH-03: Start of the temperature excursion at the elevation 750 mm (TFS 4/11).

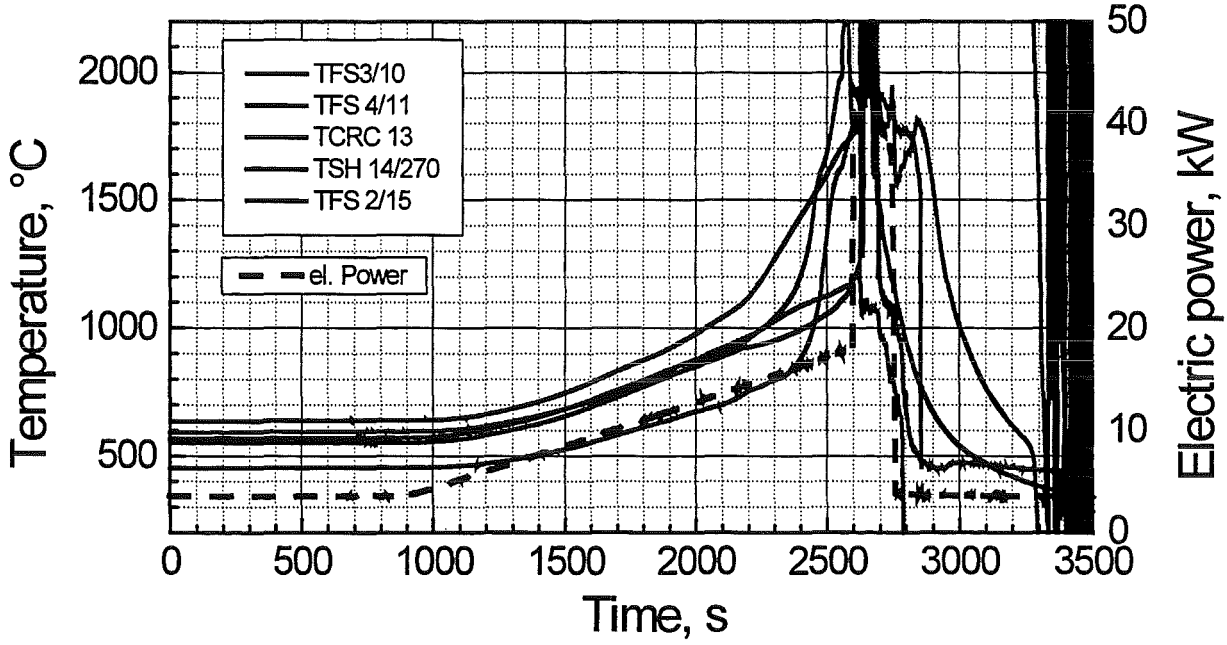


Fig. 3.2: Test QUENCH-03: Electrical power input (dashed line) and readings of selected thermocouples.

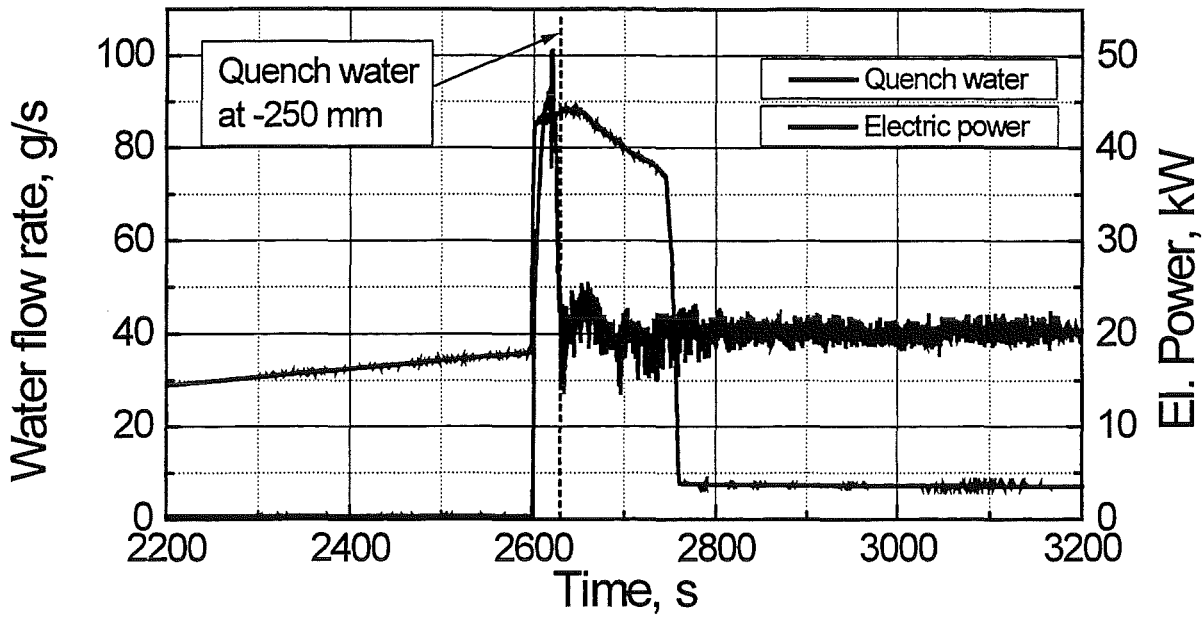


Fig. 3.3: Test QUENCH-03: Electrical power input and quench water flow rate during the quench phase.

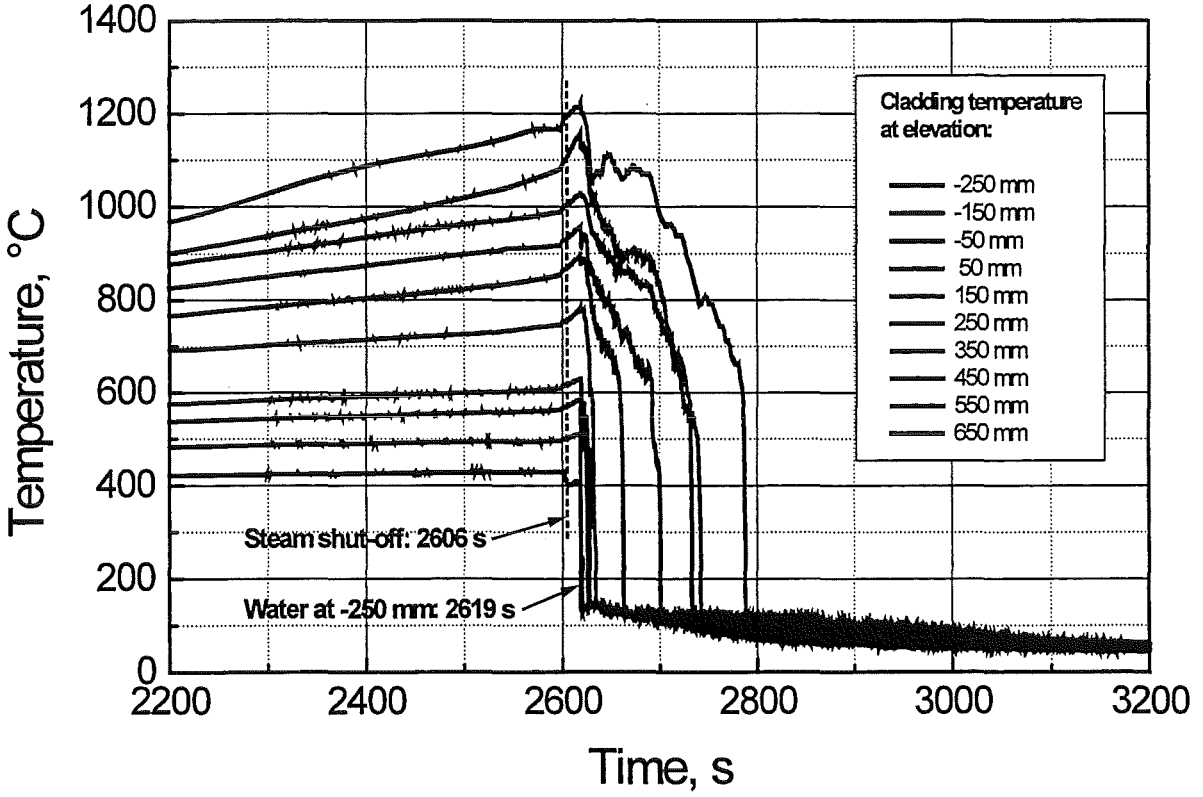


Fig. 3.4: Test QUENCH-03: Cooling of the rods below 650 mm elevation.

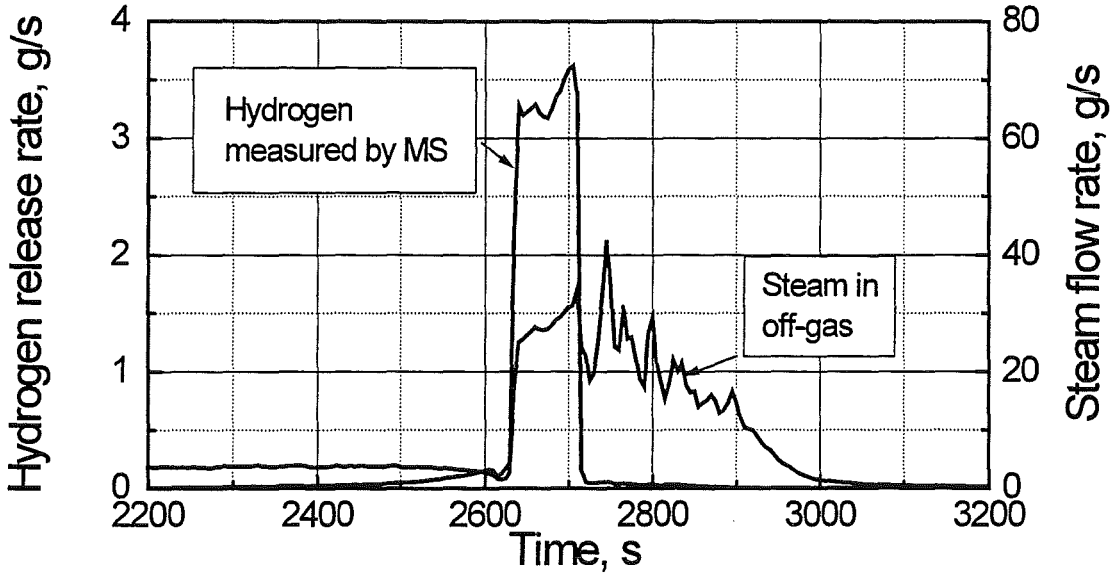


Fig. 3.5: Test QUENCH-03: Hydrogen and steam generation rates measured by mass spectrometer.

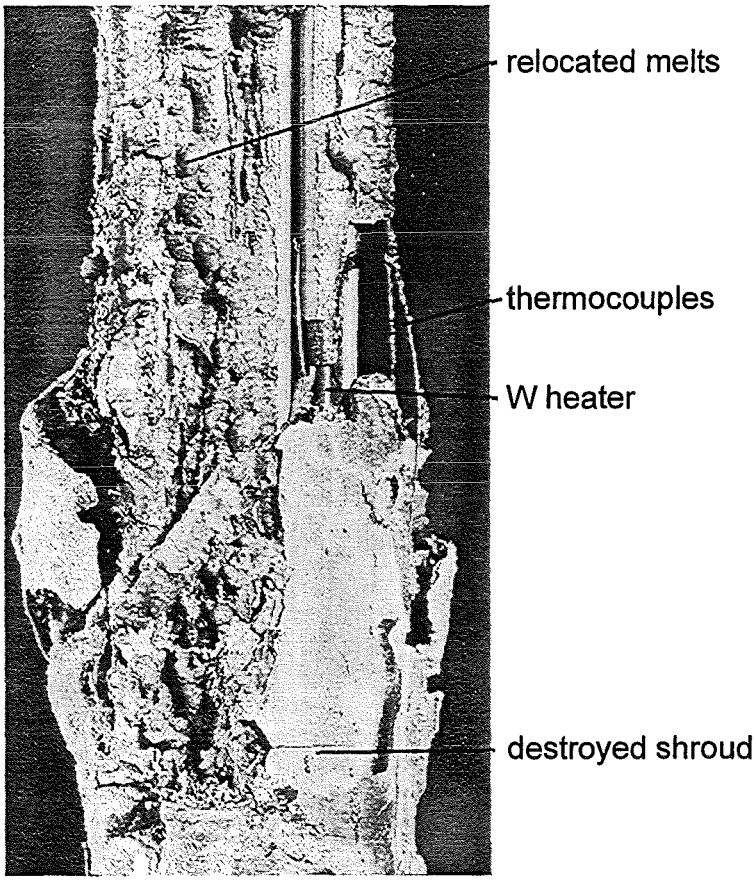


Fig. 3.6: Post-test appearance of the bundle QUENCH-03. Bubble-like shroud and melt formation between 720 and 930 mm elevation.

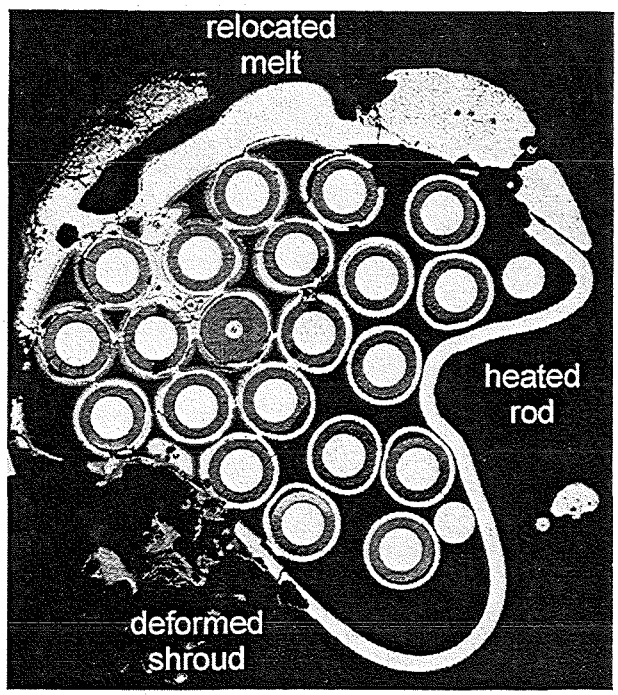


Fig. 3.7: Test bundle QUENCH-03 cross-section of the elevation 750 mm. Formation of bundle blockages due to relocation of molten materials.

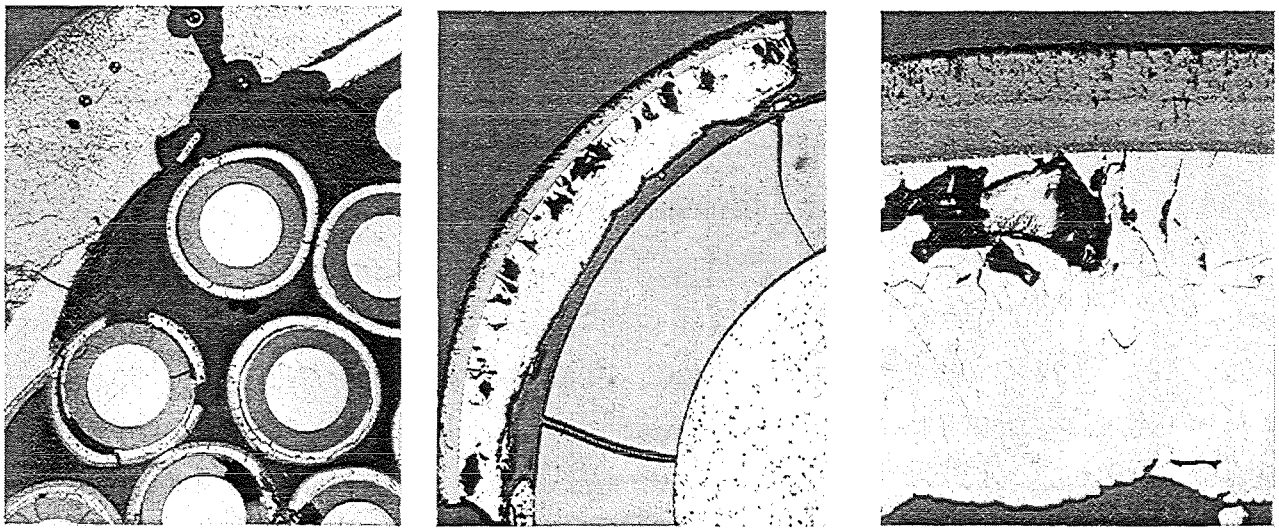


Fig. 3.8: QUENCH-03: Cross-section at elevation 750 mm.

Test QUENCH-04

QUENCH-04 was the first bundle experiment in the QUENCH programme in which the bundle was cooled from high temperatures by steam, rather than being quenched by water.

As in the previous QUENCH experiments, the bundle was heated by a series of stepwise increases of electrical power from room temperature to ≈900 K in an atmosphere of

flowing argon (3 g/s) and steam (3 g/s) and was stabilized at this temperature for about two hours.

At the end of the stabilization period the bundle was ramped at 0.31 W/s per rod giving an average temperature increase of about 0.35 K/s between 900 K and 1400 K. An oxidation excursion started at 750 mm level when the temperature there reached 1560 K. At a maximum rod temperature of 1780 K, a corner rod was withdrawn, as in QUENCH-01, to check the amount of oxidation at that time. The pre-planned steam cooling sequence was initiated when three rod thermocouples had exceeded 1870 K, Figure 3.9. Steam at ≈570 K was injected at the bottom of the test section at a rate of 50 g/s, and 25 s later the electrical power was reduced to 4 kW within 15 s, to simulate decay heat level, Figure 3.10. Cooling of the test section to below 670 K was completed about 210 s later; the steam and electrical power were then shut off, terminating the experiment. During the cooling phase it was continued to inject argon into the lower plenum at 3 g/s to continue to provide carrier gas for the hydrogen detection systems.

The steam injection led to immediate cooling of the rods at all levels, with the shroud following about 5 s later, Figures 3.11 and 3.12. The peak rod temperature recorded at 950 mm elevation was ≈2150 K. At 850 mm level the rate of temperature increase slowed on steam injection, but accelerated again with the peak temperature reaching 2340 K about 10 s later, then rapid cooling commenced, Figure 3.13. At these times krypton was detected in the off-gas, indicating cladding breach of at least one rod. About 15 s later, with rod temperatures from 750 mm to 950 mm being in the range 920–1370 K, reheating by about 50 K was observed, this stopped 10 s later when the electrical power was reduced; smooth cooling then resumed. A short 15 s pause in the cooling, but without reheating, was observed about 90 s later, with temperatures in the range 670-1070 K.

The total hydrogen production was determined to be 12 g, with reasonable agreement between the Caldos and mass spectrometer values (peak rate 0.27 g/s measured by mass spectrometer), Figure 3.14. Less than 1 g is associated with the cooldown phase. This is consistent with the lack of large-scale temperature excursion observed here, and with the limited cladding oxidation (less than 200 μm, Figure 3.15) estimated at the time of cooling. The appearance of the QUENCH-04 bundle shows practically no signs of melting. Only at the 950 mm elevation a localized melt formation in the shroud is observed, Figure 3.16. The post-test examinations of the test bundle are currently underway.

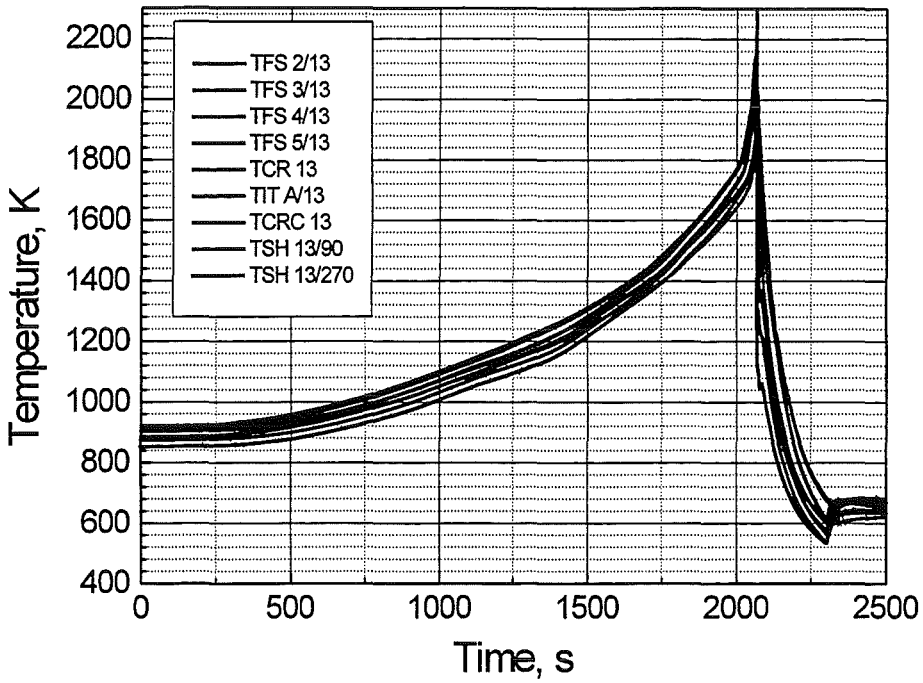


Fig. 3.9: Test QUENCH-04: Temperature history of cladding and shroud at elevation 950 mm.

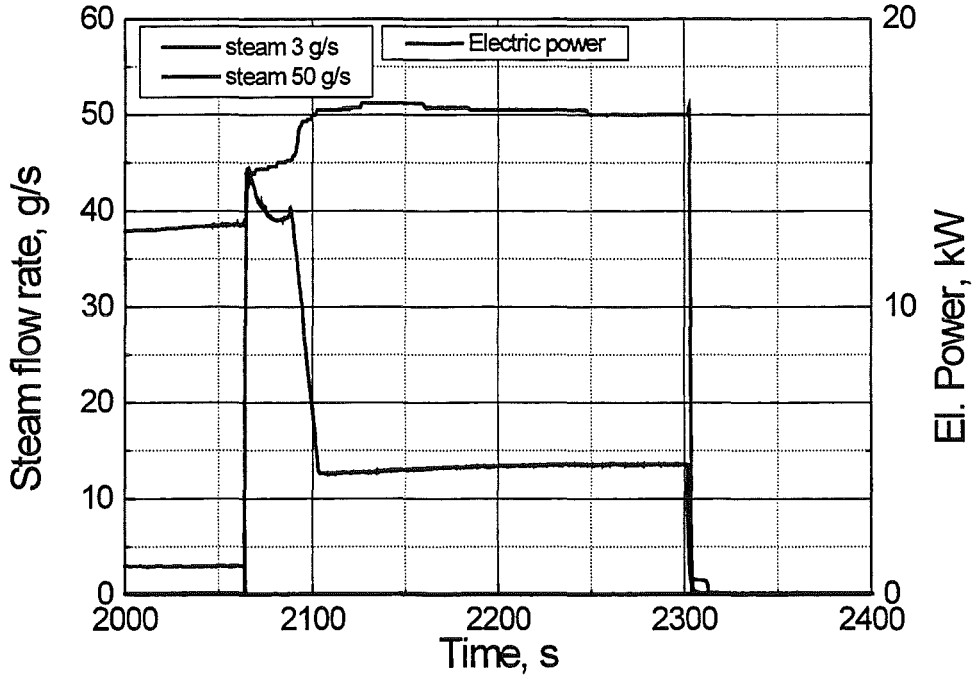


Fig. 3.10: Test QUENCH-04: Electrical power input and steam flow rate during cool-down phase.

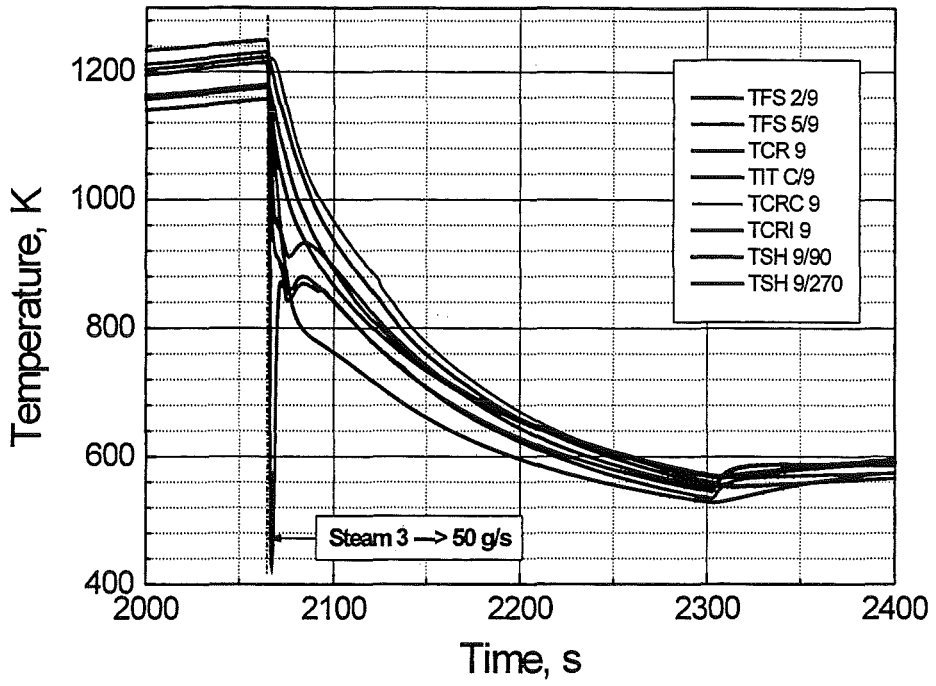


Fig. 3.11: Test QUENCH-04: Cladding and shroud temperatures at 550 mm elevation during cool-down phase.

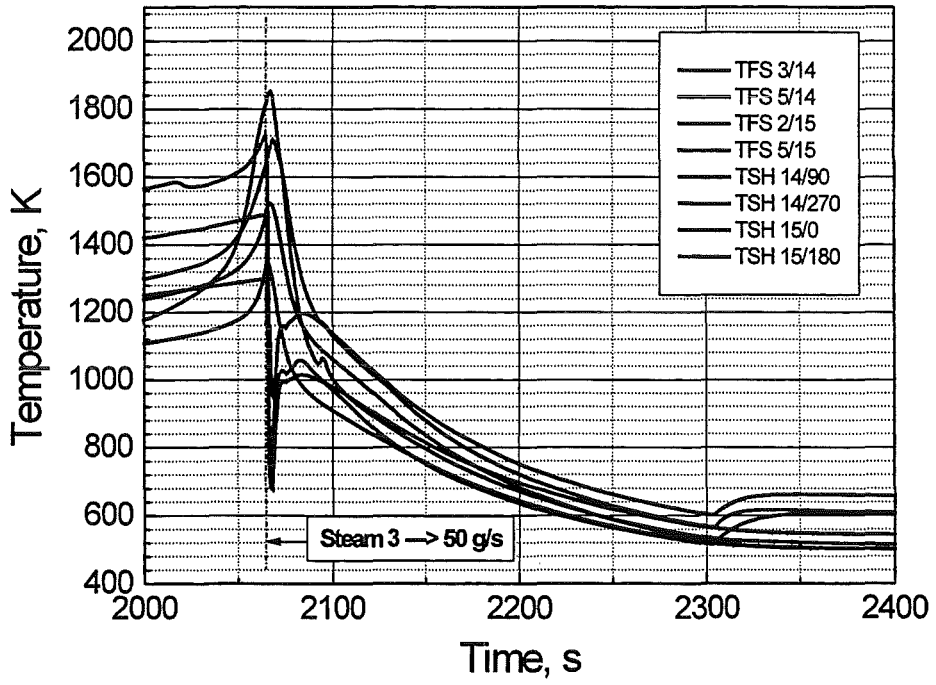


Fig. 3.12: Test QUENCH-04: Cladding and shroud temperatures at 1050 and 1150 mm elevation during cool-down phase.

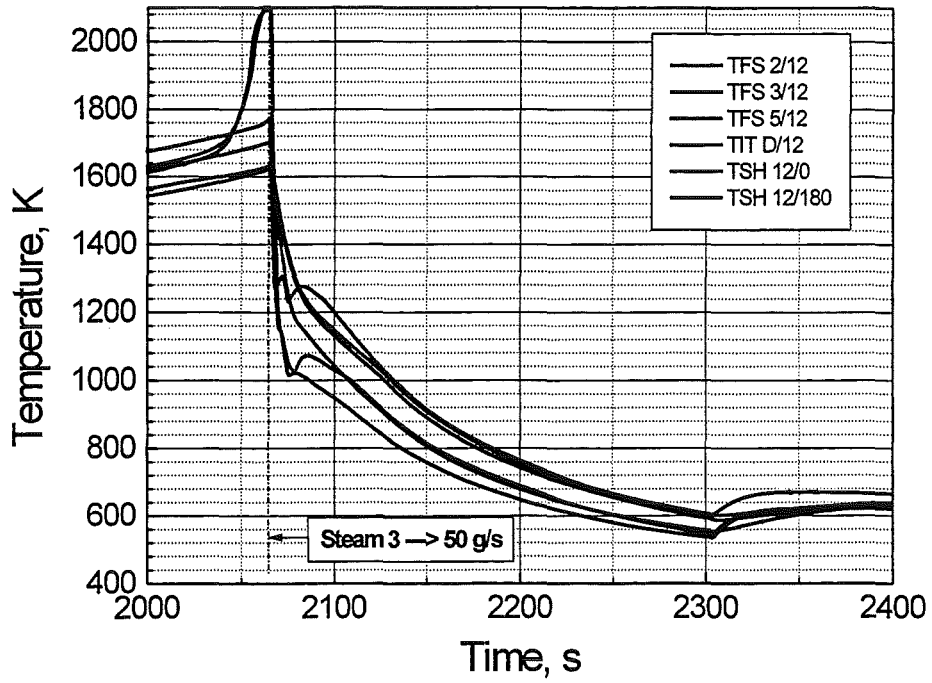


Fig. 3.13: Test QUENCH-04: Cladding and shroud temperatures at 850 mm elevation during cool-down phase.

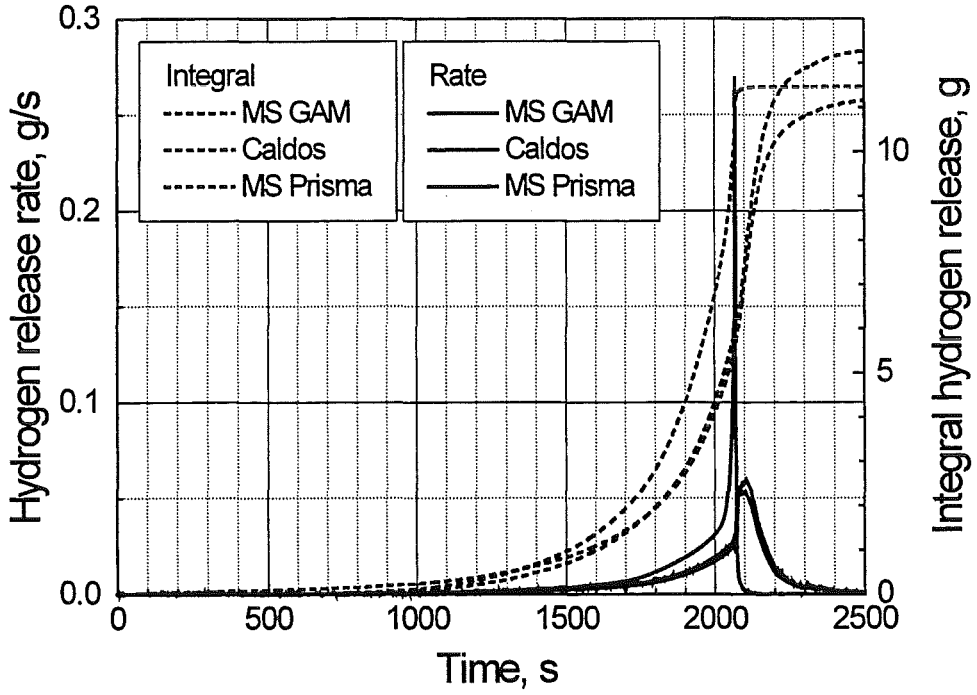


Fig. 3.14: Test QUENCH-04: Hydrogen generation rate and total amount measured by two mass spectrometers and "Caldos" device.

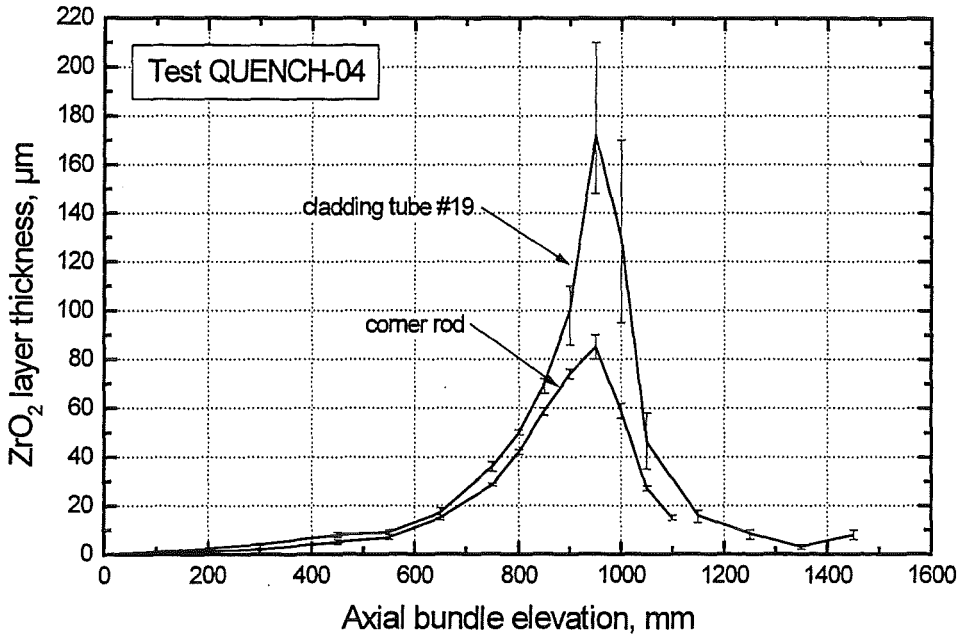


Fig. 3.15: Test QUENCH-04: Axial distribution of the oxide layer thickness measured before temperature excursion (corner rod) and after the test (cladding tube).

Fig. 3.16: Post test appearance of the QUENCH-04 bundle.
Formation of the localized molten zone

Analytical Support

For both tests pre-test calculations were done with SCDAP/RELAP5 to determine important parameters which must be known in advance to properly run the test [5]. After the tests post-test calculations were performed with the correct initial and boundary conditions, but no further changes to check the modeling and to better understand the tests were undertaken.

Temperature histories and hydrogen production are in good agreement with experimental data up to the begin of temperature excursion. The temperature excursion is calculated to occur somewhat later than in the experiment and to begin at the upper end of the heated zone (950 mm elevation), i. e. at the position of the highest temperature. The physical and chemical processes, leading to this unexpected behavior in the experiment, are not yet sufficiently well understood.

CONCLUSIONS FROM EXPERIMENTAL PROGRAMME

Hydrogen absorption by Zircaloy

- The experimental studies on the hydrogen absorption behavior of zirconium alloys have been extended to "wet" atmospheres. The data are used by IBRAE to validate the hydrogen absorption module in the SVECHA/Q code package.
- Analysis of the data obtained shows that with increasing time and therefore increasing oxide scale thickness the concentration of the absorbed hydrogen first increases up to above 20 at-% and then decreases at longer oxidation times than about 60 min. This behavior was qualitatively predicted by the SVECHA model.

ZrO_2 shell failure experiments

- The experiments in the small-scale QUENCH test apparatus were performed to provide a data base for the development of physically-based models for prediction of the ZrO_2 shell failure at high temperatures.
- The results of the experiments show a clear correlation between the heat-up rate and the oxide shell failure temperature. No failure occurs if a heat-up rate is less than 3 K/s – the cladding completely oxidizes before reaching the melting point of the Zircaloy. The cladding failure temperature continuously decreases with increasing heat-up rate and after reaching a certain limit (app. 6 K/s) remains constant.

- The oxide layer thickness at onset of failure decrease with increasing heat-up rate starting from 450 µm at 4 K/s and reaching 100 µm at 8 K/s and more.

The major results of the QUENCH-03 and QUENCH-04 experiments

Test QUENCH-03:

- QUENCH-03 test was performed without pre-oxidation before heatup of the bundle (≈0.4 - 0.6 K/s) until temperature excursion occurred.
- The test experienced a temperature excursion, starting at about 1400 K, with heating rates around 20 K/s; the excursion started prior to flooding. The maximum temperature was ≈2500 K.
- An amount of 123 g of hydrogen was generated during the transient plus flooding phase in test QUENCH-03. The maximum H_2 production rate was 3.6 g/s.
- Parts of the test bundle were molten and the relocated materials had formed localized blockage zones in the coolant channels.

Test QUENCH-04:

- QUENCH-04 test was the first test to investigate the behavior of LWR fuel rods on cooling with steam from the bottom instead of quenching with water.
- The test was performed without pre-oxidation before heatup of the bundle (about 0.45 K/s) until the temperature excursion started at 750 mm when the temperature there reached 1560 K.
- The steam injection of 50 g/s, initiated shortly after the temperature excursion, led to an immediate cooling of the rods at all axial elevations within one second.
- The total hydrogen production resulted in around 12 g, about 11 g of it being produced before cool-down. The maximum hydrogen release rate was 0.27g/s.

References

[1] HOFMANN, P.; STUCKERT, J.; MIASSOEDOV, A.; VESHCHUNOV, M.S.; BERDYSHEV, A.V.; BOLDYREV, A.V.
ZrO_2 dissolution by molten zircaloy and cladding oxide shell failure. New experimental results and modelling.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6383 (Dezember 99)

[2] HOFMANN, P.; HOMANN, C.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Results of the QUENCH commissioning tests.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6099 (August 98)

[3] HOFMANN, P.; HERING, W.; HOMANN, C.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
QUENCH-01. Experimental and calculational results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6100 (November 98)

[4] SHEPHERD, I. et al.; Investigation of Core Degradation (COBE), Final Report, INV-COBE(99)-P10, EUR 18982 EN, 1999.

[5] HOMANN, C.; HERING. W.
Analytical Activities for the QUENCH Facility Using the Mechanistic Code System SCDAP/RELAP5; Jahrestagung Kerntechnik, May 1999, Karlsruhe.

II. Recalculation of the temperature transient in QUENCH-03 with the code CALUMO

(H. Steiner, M. Heck, IMF III)

Abstract

The code CALUMO has been developed as a tool for the analysis of temperature transients in FZK quench tests. This code is based on lumped parameter equations for the enthalpy of the fuel rods, the shroud, and the coolant. The code calculates also the evolution of oxide scales and establishes the mass balance on the consumed steam flow, the absorbed oxygen and the produced hydrogen. Scoping calculations for QUENCH-03 provided very encouraging results.

Zusammenfassung

Der Code CALUMO wurde entwickelt, um Temperaturtransienten in FZK-Abschreckversuchen zu analysieren. Er basiert auf der Anwendung von Bilanzgleichungen für die Enthalpie der Brennstäbe, des Shrouds und des Kühlmittels. Es wird aber auch die Bildung der Oxidschichten auf den beteiligten Materialien berechnet. Ebenso wird eine Massenbilanz zwischen verbrauchtem Wasserdampf, aufgenommenem Sauerstoff und der Wasserstoffproduktion durchgeführt. Erste Rechnungen für QUENCH-03 brachten sehr ermutigende Ergebnisse.

I. Introduction

Temperature escalations are important phenomena in QUENCH tests as they lead to enhanced oxidation and hydrogen production and eventually to severe degradation in fuel rod bundles and maybe even blockage formation. Also, the state of the bundle at the end of the transient phase is seen to be very important for the events during the proper quench phase. Thus, the occurrence of unexpected temperature escalations in some QUENCH tests of the CORA program [1] was a strong motive for the initiation of a new out-of-pile QUENCH test program at FZK with small bundles of electrically heated fuel rod simulators [2]. With five tests having been done in the meantime, an investigation of the outcome of these tests with regard to temperature escalation mechanisms might be helpful. Work has been started with a recalculation of the temperature escalation in the QUENCH-03 test with the help of the computer code CALUMO.

II. Motivation for the development of bundle code CALUMO

There are two elements from the experimental side which might help us to gain an understanding on what is happy during a quench test, namely the results of the test instrumentation like thermocouple readings and the outcome of post test examinations (PTE). PTE may provide us valuable hints on the mechanisms which were at work during a quench test. But, of course, they give us only a picture of the end of life state and the link to the bundle behavior at earlier times might not always be established in a clear-cut way.

Thus, it is indispensable to gain a quantitative understanding of the results of the test instrumentation, especially of the thermocouple readings. In order to achieve this, appropriate bundle codes have to be used.

Although there are at least half a dozen computer codes active in the light water reactor safety business, it was felt that a simple fast running bundle code might be of value on its own right. With such a code is would be much easier to test different oxide correlations and mechanisms.

A study of thermocouple readings of FZK quench tests reveals that in most cases the radial temperature profiles in the test bundles are rather flat. Thus, effects of thermal conductivity are not very important. Of course, there are exceptions from this rule, especially when severe azimuthal temperature gradients arise. But in these cases existing computer codes have also big problems to deal with such situations. When effects of thermal conductivity are not very important one can operate with lumped parameter models, that means balance equations. In this way modeling of bundle behavior simplifies considerably.

This idea was closely followed in developing the code CALUMO (calculation of temperature escalations in quench tests with the help of lumped parameter models). The calculation of the temperature evolution is based on three balance equations for the fuel rod simulators, the shroud, and the Ar/steam fluid:

i) for the fuel rod simulators

$$(c_p^{cl} \cdot m^{cl} + c_p^{ox} \cdot m^{ox} + c_p^{el} \cdot m^{el}) \frac{dT^{rod}}{dt} = w^{el} + w_{cl}^{ox} - w_{rod}^{rad} - w_{cl}^{cool} + w_{rod}^{ax} \qquad (1)$$

ii) for the shroud

$$c_p^{sh} \cdot m^{sh} \frac{dT^{sh}}{dt} = w_{sh}^{ox} + w_{sh}^{rad} + w_{sh}^{ax} - w_{sh}^{cool} - w_{sh}^{loss} \qquad (2)$$

iii) for the coolant

$$(\dot{m}_{Ar}\, c_p^{Ar} + \dot{m}_{st}\, c_p^{st}) \frac{dT^{cool}}{dz} = w_{cl}^{cool} + w_{sh}^{cool} \qquad (3)$$

c_p = heat capacity
t = time
T = temperature
w = linear power or heat flux
z = axial position

Superscripts and subscripts

cl	=	cladding	el	=	electric
ox	=	oxide	rad	=	radiation
sh	=	shroud	cool	=	coolant
Ar	=	Ar	st	=	steam
ax	=	axial			

Thus, the following mechanisms are taken into account:

1. Release of electrical power in the fuel rod simulators
2. Radiative heat exchange between fuel rod simulators and the shroud
3. Convective heat exchange between the fuel rod simulators and the shroud on one hand and the coolant on the other hand
4. Release of heat due to oxidation of the fuel rod simulators and the shroud
5. Heat conduction through the ZrO_2 fiber insulation or Ar gap
6. Axial heat conduction in the fuel rod simulators and the shroud

III. Results of scoping calculations for QUENCH-03

The code CALUMO was developed for the analysis of temperature escalations. Thus, the calculation starts at the end of the steady-state period of QUENCH-03. Therefore, t = 0 in the code corresponds to an experiment time of 900 s in [2] and the calculation ends just before the injection of the quench water, as there are at the time being no capabilities to treat the quench phase in the code.

The heated length of 1024 mm in subdivided into 20 axial segments, with the respective axial node point lying just in the middle of each axial segment. Thus, the respec-

tive node points are not directly at the locations of the thermocouples but in general some few millimeters off.

The strongest impact on the temperatures in the bundle comes from the choice of the oxidation correlations. In a first round of calculations we have taken for temperatures below 1783 K the correlations of Leistikow [3] and Veshunow [4] and for temperatures above 1783 K the correlations of Prater/Courtright [5]. This is our base case. But there is also the possibility in the code to use other oxidation correlations.

Fig. 1 shows a comparison of calculated temperature evolutions with thermocouple readings at three axial locations for the fuel rods and the shroud. The measured temperature evolutions are rather well matched by the calculation with the exception of a temperature escalation on the inner fuel rods at 750 mm, starting at about 1500 S into the transient, presumably caused by a geometrical effect [6].

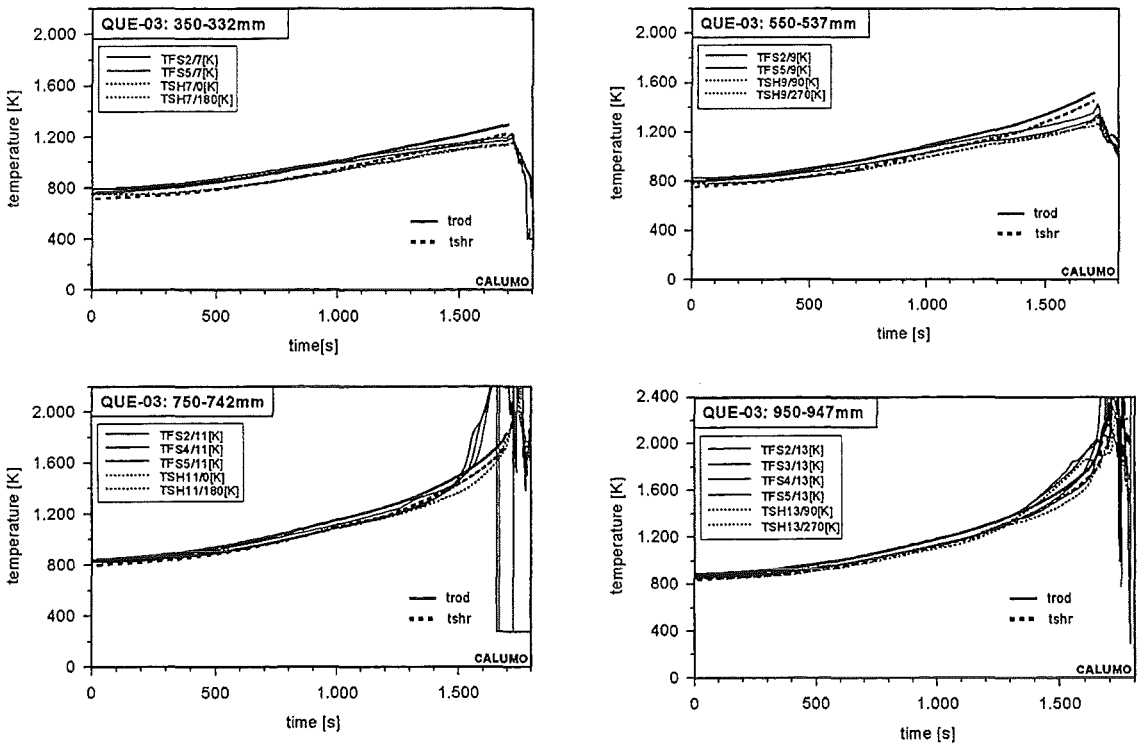


Fig. 1 Evolutions of rod and shroud temperatures at four axial positions

In Fig. 2 axial distributions of the oxide scale thickness on the inner (doxz) and outer fuel rods (doxaz) and on the shroud (doxshz) are to be seen, and in Fig. 3 the steam flow rate at different times into the transient. In the upper part of the bundle the steam flow rate is already reduced strongly in the late phase of the transient due to the high oxidation rates. At about 1700 s into the transient steam starvation conditions are

reached in the upper part of the bundle. Also, the claddings of the inner fuel rods are fully oxidized.

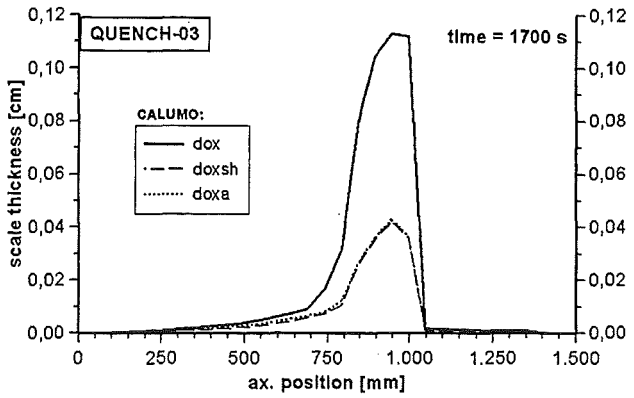


Fig. 2 Axial distributions of the oxide scales thickness at the end of the transient phase

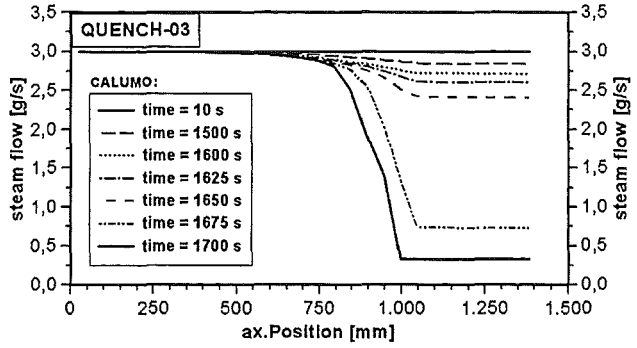


Fig. 3 Axial distributions of steam flow rate at different times into the transient

Fig. 4 shows the time evolution of the hydrogen production rate and the overall produced hydrogen. At 1700 s into the transient the calculated value is about 23 g. This is rather near to the experimental value measured by the mass spectrometer (about 25 g).

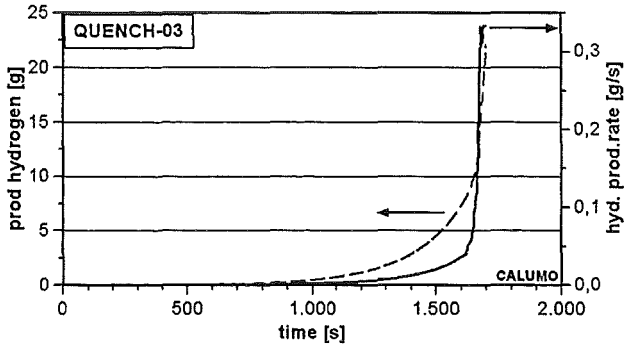


Fig. 4 Evolution of hydrogen production rate and overall produced hydrogen during the transient phase

IV. Conclusion

The calculations with the CALUMO code for the temperature transient of QUENCH-03 provided very encouraging results. We hope that this code becomes a valuable tool for the analysis of quench tests. Of course, one test does not suffice to validate a code. Thus, work has started for QUENCH-04, a test even more suited for a validation of the code, as its capabilities are sufficient to recalculate the whole test.

References

[1] S. Hagen; et al.:
Essential results of the CORA program, Third Intern. QUENCH Workshop, FZK, Dec. 1997

[2] P. Hofmann, et al.
Experimental and Calculational Results of the Experiments QUENCH-02 and QUENCH-03, FZKA 6295 (2000)

[3] S. Leistikow, et al.:
Kinetik und Morphologie der isothermen Dampf-Oxidation von Zircaloy 4 bei 700-1300 °C, KfK 2587 (1978)

[4] P. Hofmann, et al.:
Physico-Chemical Bahaviour of Zircaloy Fuel rod Cladding Tubes During LWR Severe Accident Reflood, FZKA 5846 (1997)

[5] J.T. Prater, E.L. Courtright:
Zircaloy-4 Oxidation at 1300 to 2400 °C, NUREG/CR-4889 (1987)

[6] H. Steiner, M. Heck:
Auslösungsmechanismen für Temperatureskalationen, Beitrag zum 7. Fortschrittsbereicht FZK/Siemens, März 2000

III. Severe Accident Investigations

(W. Hering, Ch. Homann, W. Sengpiel, D. Struwe, IRS; Ch. Messainguiral, CEA)

Abstract

At the Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) the Institute for Reactor Safety (IRS) performs accident analyses for the European Pressurised Water Reactor (EPR) by plant calculations with SCDAP/RELAP5 and RELAP5.

S/R5mod3.2 calculations have been performed for loss-of-offsite power (LOOP), surge line rupture (SL), and 46 cm² small break loss of coolant accident (SBLOCA). LOOP reflood calculations were repeated for comparison with MAAP and S/R5 mod 3.1.irs. EPR input decks have been revised and upgraded by Siemens/KWU improvements. Model improvements for S/R5 covering clad failure and fragmentation based on FZK experiments are under test. LOWCOR2 calculations are ongoing. The validation of PSI reflood model including improved FZK-Chen correlation in RELAP5 mod 3.2.2γ against integral experiments is finished mostly.

The support of the QUENCH programme covering pre- and post test calculations for QUENCH-03 and –04 effectively enhances understanding of the experiment and separation of physical and facility based effects.

Zusammenfassung

Im Institut für Reaktorsicherheit (IRS) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) werden Unfallanalysen für den EPR mit SCDAP/RELAP5 und RELAP5 durchgeführt.

Unfallanalysen wurden mit S/R5 für die Szenarien: Ausfall der Wechselstromnetze (LOOP), Abriss der Druckhalterleitung (SL) und kleines Leck (46cm² SBLOCA) durchgeführt. Rechnungen zum Wiederfluten der Kernes wurden mit den MAAP Randbedingungen wiederholt, als Vergleich zu den alten S/R5 mod3.1 Rechnungen und zu MAAP Ergebnissen. Das EPR Input Deck wurde um Siemens/KWU Verbesserungen erweitert. Modellerweiterungen in S/R5 zur Beschreibung von Hüllrohrversagen und –fragmentieren, basierend auf FZK Experimenten, sind im Test. Die Validierung des PSI Flutmodells mit der verbesserten FZK-Chen Korrelation anhand von Integraltest ist weitgehend abgeschlossen.

Zur Unterstützung der QUENCH Versuche wurden mit Vorausrechnungen und Versuchsanalyse für QUENCH-03 und QUENCH-04 durchgeführt. Die Analysen verbessern das Verständnis der Experiments und die Separation von Anlagen- und physikalischen Effekten.

1.1 Accident analyses with SCDAP/RELAP5

At Institut für Reaktorsicherheit (IRS) accident analyses were performed with SCDAP/RELAP5 mod 3.2 /1/ which includes PSI-reflood model and improved FZK-Chen-correlation /5/. A short overview of the scenarios investigated, loss-of-offsite power (LOOP, Section 1.1.1.1), surge line rupture (SL, Section 1.1.2), and 46 cm² small break loss of coolant accident (SBLOCA, Section 1.1.3) will be given. Also LOOP reflood calculations (Section 1.1.1.2) were repeated for comparison with MAAP, MELCOR and S/R5 mod3.1.irs /4/.

For the calculation presented here, ring to ring radiation heat exchange in the core was removed, because of an error reported by ISSC /2/ in the radiation absorption module. Due to averaging over all fluid temperatures of one level in the radiation enclosure a virtual fluid temperature is calculated for radiation absorption. This leads to an increased energy deposition in the fluid so that the fluid temperature increases. As a consequence, the convective heat loss of the rods is reduced in the upper part of the core so that core outlet temperature and temperatures of upper plenum structures became overestimated.

Even simulating ring to ring radiation based on reduced ring to ring view factors leads to a more pronounced lateral core melt spreading, which may explain the calculated heavy reflector failure at rather high core levels reported before (Section 1.3). On the other hand, sudden temperature increase in one ring e. g. caused by clad oxidation or melt relocation remains localised in the ring. As a direct consequence the hydrogen production rate is lowered. A detailed comparison is under way but a realistic modelling of in-core radiation exchange requires experimental data which are not yet available.

1.1.1 Results of LOOP Calculations

The LOOP base case calculation was used to study the influence of delayed reflood initiation in the temperature interval between 1700 K and 2800 K prior to formation of a molten pool. After this time window late phase core melt phase starts.

1.1.1.1 Base case

As a consequence of the five radiation enclosures in the core, axial melt relocation is more pronounce as radial core damage progression as can be seen in Figure 1. Within app. 50 min the lower crust of the in-core molten pool spreads out axially from app. 3.0 m to 0.9 m. It's outermost boundary extends to the outer ring finally contacting the HR at an elevation of 1.2 m. In Figure 1 the position of the lower crust is indicated for the five core rings. The molten pool starts in the centre ring of the 10th axial zone with a mass of app. 7.0 Mg composed of UO_2 and ZrO_2. At that time the mass of partially liquefied debris amounts to 19 Mg, located in the vicinity of the molten pool. This amount will be reduced as the molten pool grows, spreading first radially into the second ring and then downwards 3 zones (app. 1.0 m). The next stage of axial relocation is initiated 7 min later when the pool covers all the inner three rings filling partially one axial zone (0.3 m). This is an unstable situation because the convective cooling of the lower crust in the inner two rings is rather low due to stagnant fluid. The procedure is repeated for each axial relocation until the molten pool contacts the radial boundary of the core at app. 303 min.

As indicated in Figure 2 the damaged fuel rods were molten above the molten pool and added to the molten pool inventory. Only the uppermost zone remains, based on the assumption that the claddings were backed together with structure material of the upper core plate, similar to findings of Phebus FPT0 test. However, taking into account results of Phebus FPT1 which are representative for medium burn-up conditions, this may be false for higher high burn-up situations because the pellets may mostly be disintegrated. S/R5 mod 3.2 only takes into account liquid relocation after the melting of the fuel rods; neither the influence of the burn-up on the pellet behaviour nor solid particle relocation is considered.

As a consequence the inventory of the uppermost zones has to be added to the molten pool inventory. The same holds for the intact fuel rod columns in the fifths ring shown in Figure 2. In other codes such as MELCOR the whole fuel stack above a molten zone collapses. However, this is the other extreme, adding too much mass to the molten pool by one event. In reality the fuel stacks will be destabilised and relocate more smoothly if support is ceasing.

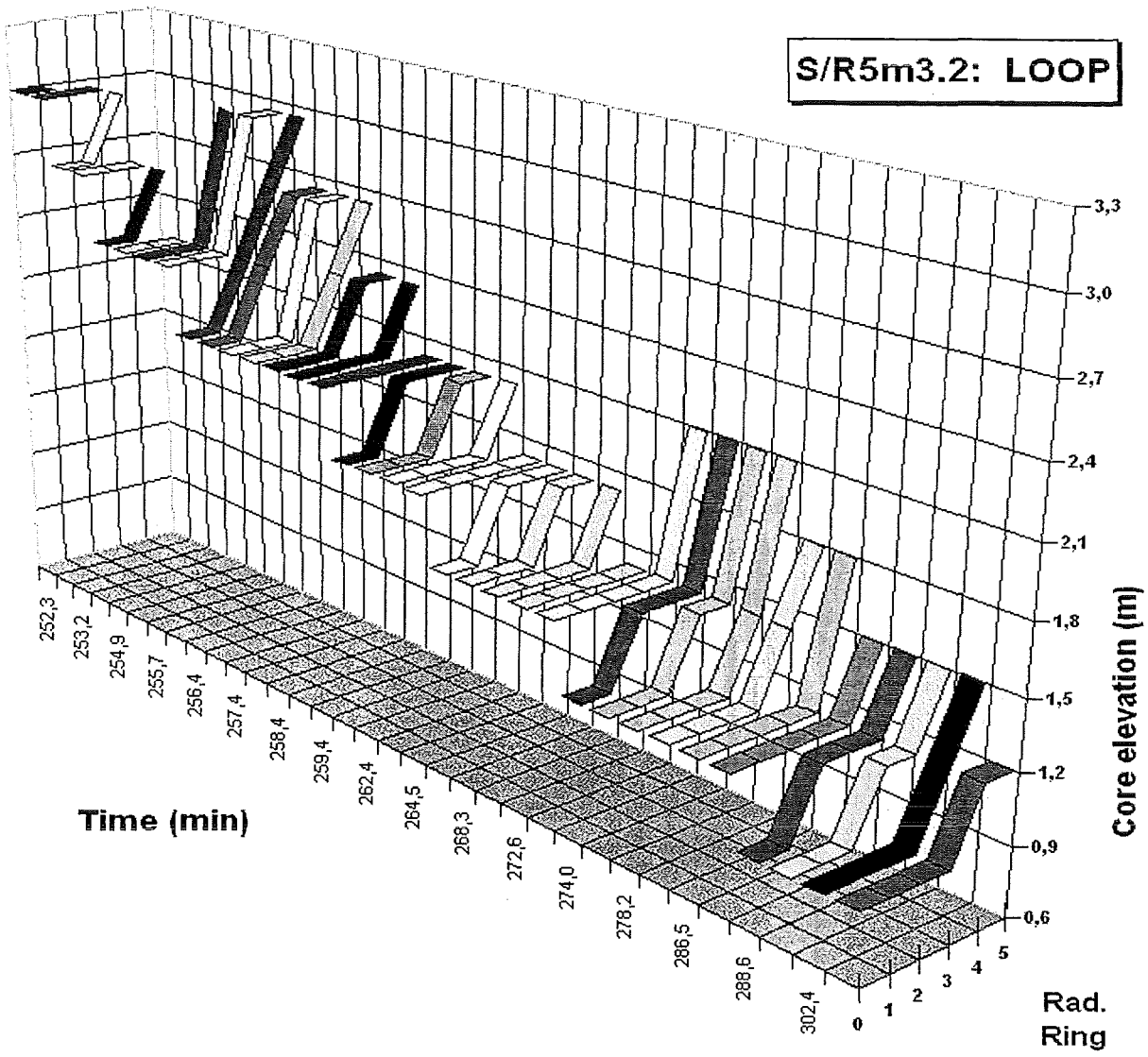


Figure 1 Axial and radial position of the lower crust of the in-core molten pool in the during LOOP base case for times at which relocation events were calculated in the time interval between 252 min and 304 min. The crust is situated on top of porous debris one zone below.

In this calculation the interaction model between melt and heavy reflector was deactivated because numerical instabilities occurred when the steel was brought to temperatures of the molten pool crust. In this sense the in-built interaction model has to be improved – or the LOWCOR2 stand-alone program has to be implemented to get more reliable information about the time and position of heavy reflector penetration. In this calculation the melt relocation into the lower plenum was limited by user input parameters (time interval, maximum mass,...).

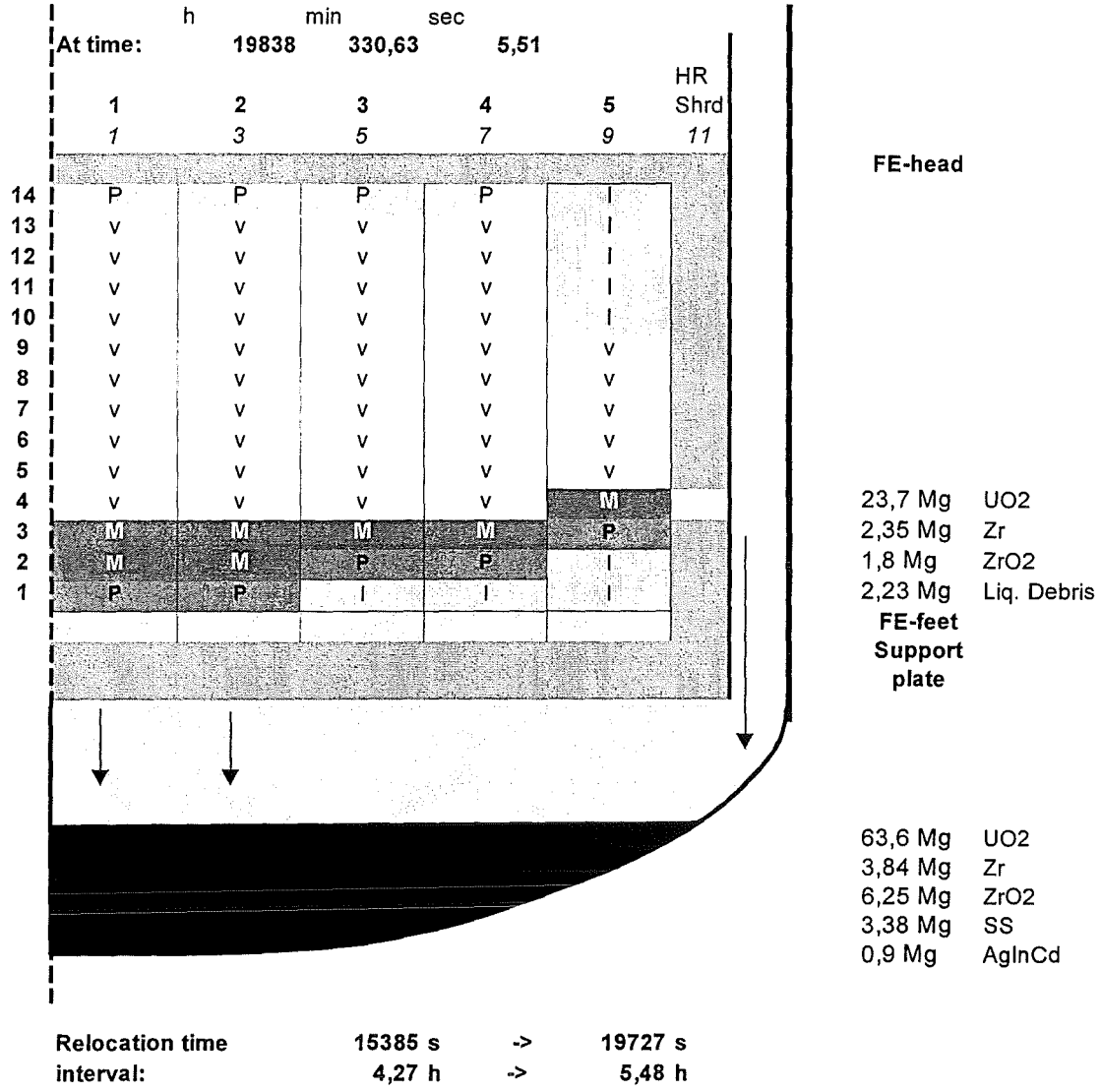


Figure 2 Final state of LOOP base calculation including melt slumping into lower plenum assuming failure of core enclosure. No interaction with the water is considered.

1.1.1.2 Reflood case

In Figure 3 a summary of results for various reflood calculations is given for total hydrogen mass (top) and hydrogen source term (bottom). In this study the boundary conditions used for MAAP analyses were considered. In the scenarios "MHSI" a complete activation of all medium head safety injection (MHSI) pumps was assumed and for scenario "LHSI" all low head safety injection (LHSI) pumps, respectively. The local shattering model was used, however, improved as described in Section 1.2.4. All calculations were performed successfully, except for reflood cases "T=2800K, MHSI + LHSI". In both scenarios numerical problems associated with very high surface temperatures and formation of local debris hinders a complete calculation ending with saturation temperatures.

Except for the reflood cases initiated T=2800 K, to total hydrogen mass do not exceed the result of the base case calculation (Figure 3 top). However, at that time numerical instabilities of the code prevent complete calculation. Generally, for MHSI scenarios hydrogen production rate is about two to four times higher than the base case (Figure 3 bottom). In case of the LHSI scenarios transient oxidation starts with a peak value caused by fast reflood and levels down caused by ceasing of LHSI pumps as observed earlier /4/. Except for the shattering option, reflood rate dominated by pump injection rate and reflood initiation temperature.

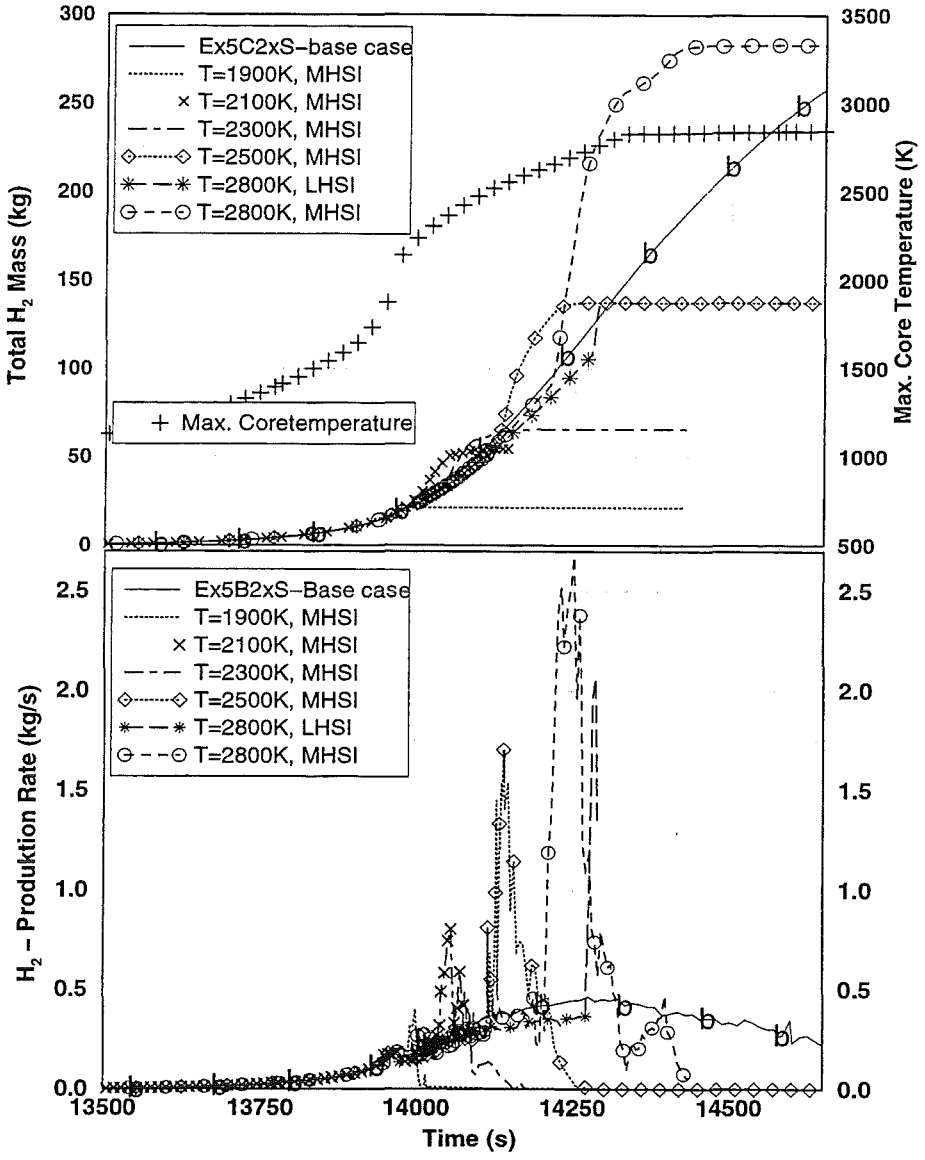


Figure 3 Predicted hydrogen source term for various reflood initiation times starting from maximum core temperature (+++, right scale) between 1900 K and 2800 K, top: accumulated hydrogen rate compared with that of the base case (-b-), and bottom: hydrogen production rate compared to that of the base case (-b-).

Compared to former study /4/ in which large parts of the core were heated-up by the oxidation, only the centre part of the core complies with the "shattering" conditions. Since the basic phenomena has not yet been pinpointed by the QUENCH programme, this has to be assumed as the lowest possible hydrogen production during reflood. The other extreme is the not-physical global shattering option, which removes all protective oxide scales in the whole core leading to maximum possible hydrogen (such a model is used in the MAAP reflood calculations).

A detailed analysis is underway, however, a sophisticated simulation of the basic process leading to extended oxidation during reflood is still outstanding due to lacking experimental evidence.

1.1.2 Surge line rupture scenario

In this scenario a complete rupture of the surge line is assumed: The surge line with a cross section of 951 cm^2 is the largest pipe connected to the main coolant circuit. Therefore, this scenario (large break LOCA) leads to large water losses during blowdown and after refill. As a consequence only limited water is available in the core heat-up phase, so that the oxidation is limited by the availability of steam produced by evaporation. Under such conditions S/R5 mod 3.1 had numerical problems which hinders a complete calculation of this scenario.

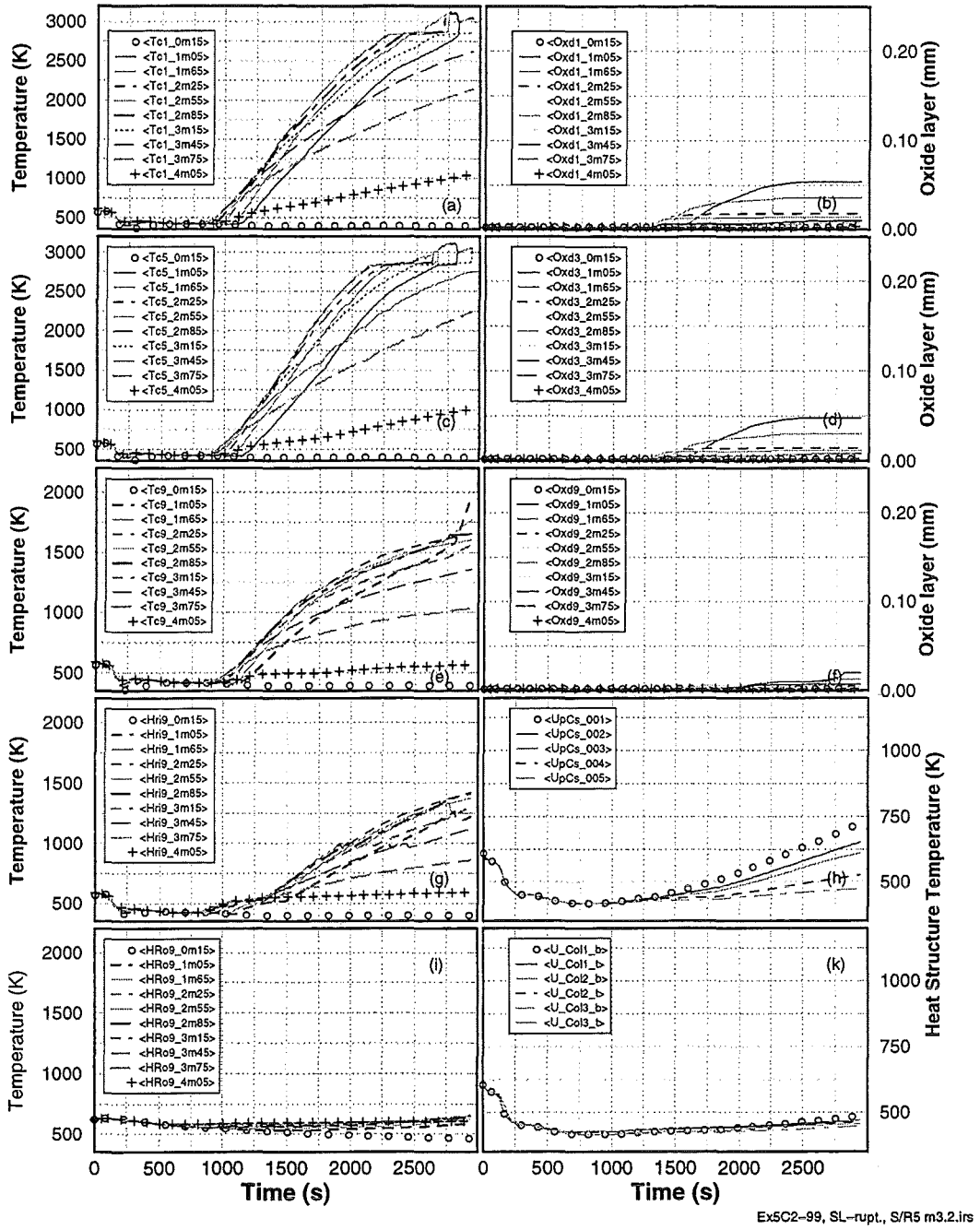


Figure 4 „Dry" surge line rupture scenario: core temperatures (left column) and oxide scales (right column) for the inner ring (a, b), the centre ring (c, d) and the outermost ring (e, f), heavy reflector inner surface (g), and outer surface (i) temperatures and upper core structure (h) and control rod guide tube temperatures.

The steam limitation leads to very low oxide scales which are not protective and thus more metallic melt than in all other scenarios relocates. As a consequence the released hydrogen mass is less than 100 kg. In this scenario the modelling of the outflow conditions may influence the amount of water remaining in the core prior to heat-up phase. The calculations were stopped due to numerical problems when the molten pool contacts the heavy reflector (Section 1.1.3).

1.1.3 Small break LOCA, 46 cm²

This scenario was selected for code comparison between MAAP 4.02 used at Framatome, MELCOR 1.8.3 used at Siemens/KWU and SCDAP/RELAP5 used at FZK/IRS. The input deck used includes several Siemens/KWU modifications e.g. a new pressurizer model.

The SBLOCA scenario assumes that only one X-diesel engine remains active maintaining one steam generator secondary side at saturation temperature. Therefore, the single loop behaves quit different from the lumped loop (3 loops), as described in /11/. The main reason for the time differences are the calculation of the momentum and thus the heat exchange in the single loop hot leg during reflood-condensor mode refilling the core for a long time period. The actual calculations with S/R5 mod 3.2 show less momentum exchange than expected, so that the time delay is increased compared to S/R mod3.1.irs. The influence of the modelling on the time delay will be investigated further on in cooperation with Siemens/KWU.

Temperature evolution

Figure 5 a brief overview about the temperatures in the reactor pressure vessel is given starting with core heat-up phase at app. 22500s (app. after 6 h). Due to the deactivated radial radiative heat transfer calculation a time delay of app. 20 min exists between first escalation in the central channel (Figure 5 a) and in the outermost channel (Figure 5 c).

The inner HR surface (Figure 5 e) as well as the centre temperature (Figure 5 g) show a sudden unrealistic temperature increase at 1.05 m elevation. Within one time step the HR temperatures jump from below 750 K to more than 2700 K. One possible cause this unphysical behaviour may be that the late phase shroud model was not tested for such massive structures like the HR. This code error (NaN) could not be solved at FZK/IRS and was sent to INEEL, a correction is under discussion for the next S/R version.

Upper plenum internals

In Figure 5 b the upper dome wall as well as the upper support plate show rather low temperatures of app 500 K. In the upper plenum, the upper and middle section of the control rod support tubes (Figure 5 d) are heated up to app. 800 K, the lower section (Figure 5 f) to 900 K. The inner five rings of the upper core plate (Figure 5 h) fail due to melting, the molten steel relocates into the core. For the lower core plate there is no in-

teraction model with molten materials and thus is calculated to remain at saturation temperature.

Molten pool data

At 488 min, molten pool situated in the lower third of the core (lower crust at 1.3 m) with a molten pool temperature of 2938 K. The mass of 56.7 Mg is composed of 47 Mg UO_2 plus 9 Mg ZrO_2 plus 400 kg Zircaloy. The lower crust of the molten pool is supported by porous debris. In partially liquefied debris, the solid part mainly consists of fuel rods stubs with rather stable ZrO_2 scales. The liquid U-Zr-O mixtures sum up to app. 4 Mg.

Melt slumped into lower plenum

With S/R5 mod 3.2 the Couple model was used to calculate the behaviour in the lower plenum. The Couple input deck for the EPR was derived from a stand alone version developed at IKET. However, this 2-D FEM code is still under development, so that the results have to be considered carefully.

At 29253.6 s (= 487 min) the code calculates "partial pool relocations following top/bottom crucible failures" leading to a small slumping process into the lower plenum. The mass is composed of 370 kg UO_2 , 67 kg ZrO_2 , and 7 kg Zr.

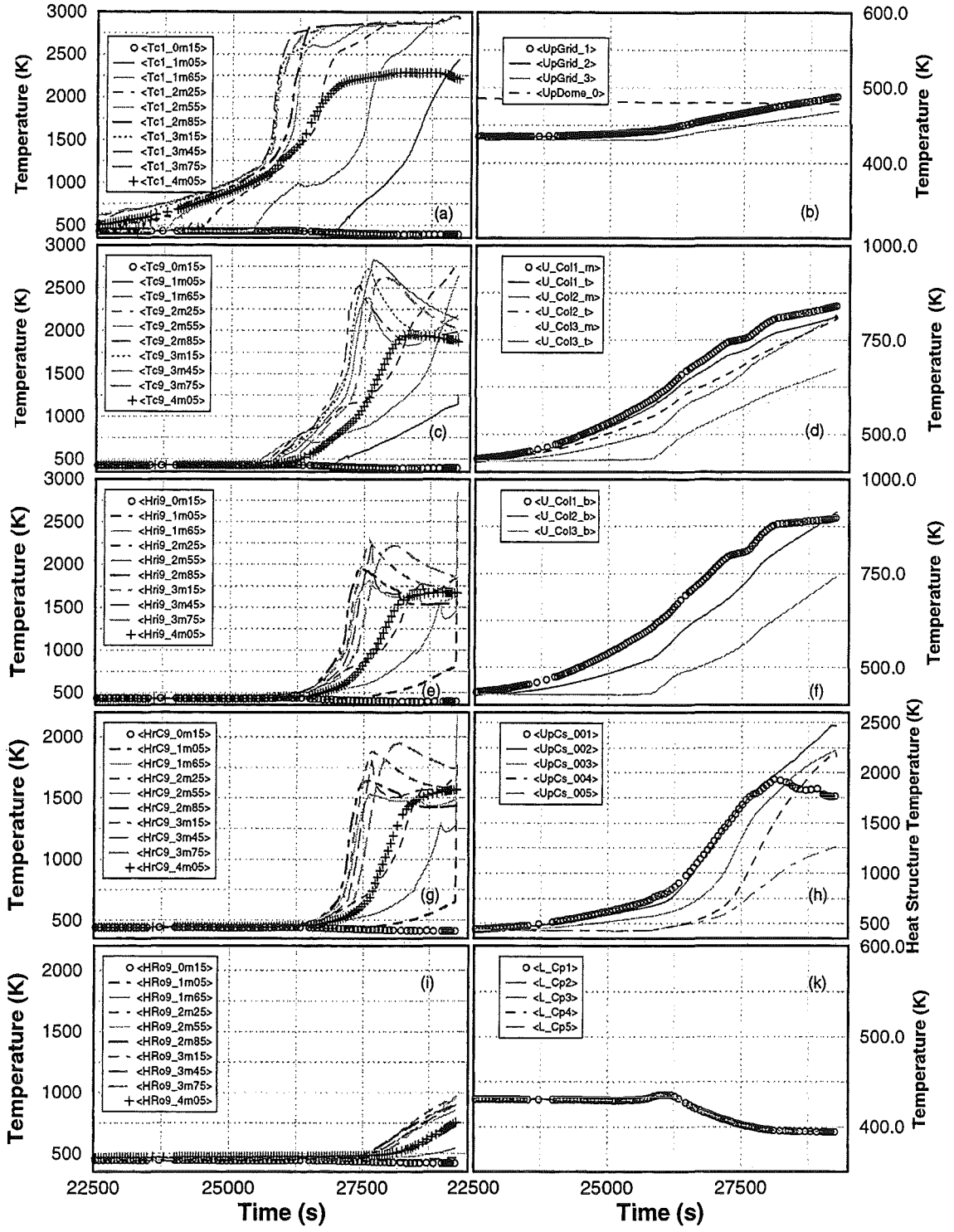


Figure 5 Calculated temperatures for the SBLOCA scenario: fuel rod cladding: centre ring (a) and outermost ring (c), heavy reflector: at inner surface (e), in the centre (g) and at the outer surfaces (i), upper core support plate (b), support columns top and middle zone (d), bottom zone (f), upper core plate (h), and lower core plate (k).Code validation and improvement

1.2 Code validation and improvement

1.2.1 Validation of heat transfer correlation in RELAP5 mod3.2.2γ

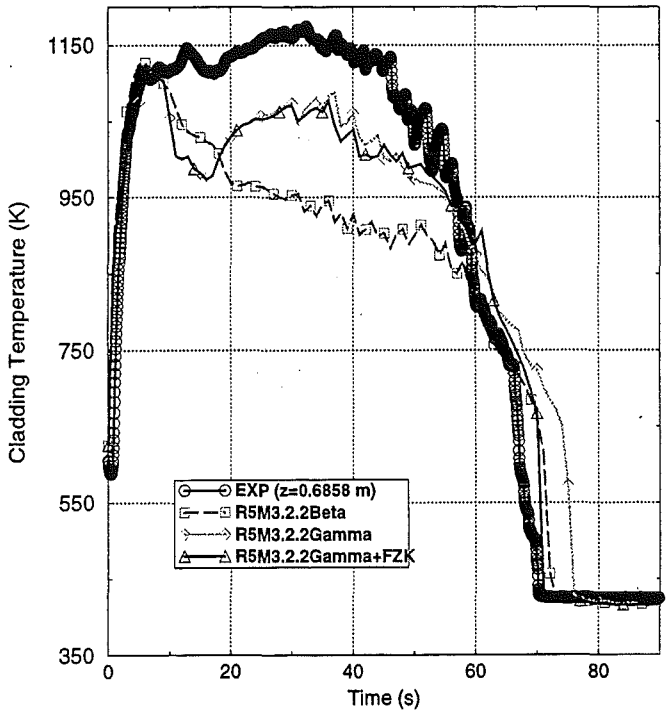


Figure 6 Measured and calculated cladding temperatures for the LOFT-LP-LB-1 reflood test in the central bundle at 0.78m elevation.

As part of the Code Assessment and Maintenance Programs (CAMP) of the US Nuclear Regulatory Commission (USNRC) FZK/IRS performs code validation focussed on reflood modelling The actual code version of RELAP5 mod3.2.2γ includes several corrections of the PSI-reflood implementation (Figure 6) compared to the earlier version RELAP5 mod 3.2.2β (dashed line). Calculations of the LOFT LP-LB-1 reflood experiment (Figure 6, circle) show reasonable predictions of the measured data. However, the pre- dictions of the measured quench temperatures were still too low and significantly delayed compared to the measured date (Figure 6, dash-dotted line). The implementation of the improved semi-mechanistic Chen correlation model (ZCTB) instead of the Weissmann correlation improves the results so that both quench temperature and quench time are predicted successfully (Figure 6 black solid line) /18/.

1.2.2 SCDAP/RELAP5 Code validation PHEBUS FPT1

The validation of S/R5 is ongoing using Phebus FPT0 and FPT1 tests with respect to early core melt phase phenomena. The activities are documented in detail in Section 32.21.10 together with results of ICARE2 calculations. Here only a comparison between measured and calculated hydrogen production mass is emphasised. While S/R5 mod 3.1 underpredicts the measured data due to errors found at FZK, S/R5 mod 3.2 slightly overpredicts the hydrogen mass as can be seen in Figure 7. Besides to wrong oxidation limitation criteria, there may be other reasons which could not be localised exactly. The error correction is foreseen in co-operation with INEEL. The overall tendency, however, agrees reasonably with the measurement.

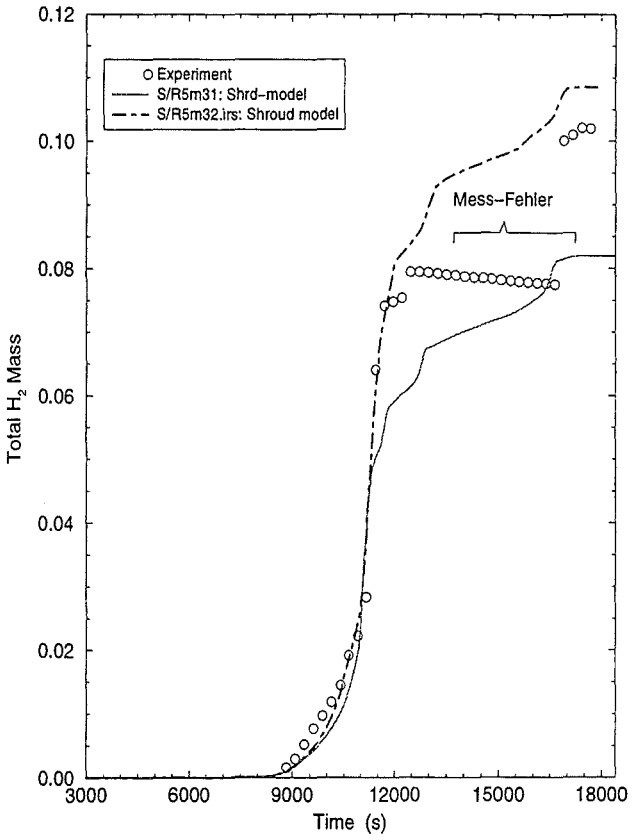


Figure 7 Comparison of calculated and measured hydrogen mass for the Phebus FPT1 experiment.

1.2.3 Dynamic oxide layer failure model for SCDAP/RELAP5

In all severe fuel damage code systems (MELCOR, S/R5, MAAP, ICARE2, etc.) the failure criteria are user dependent, composed of a temperature limit and a oxide layer thickness, which represents the stabilising effect of thick oxide scales. At FZK/IMF several tests with various

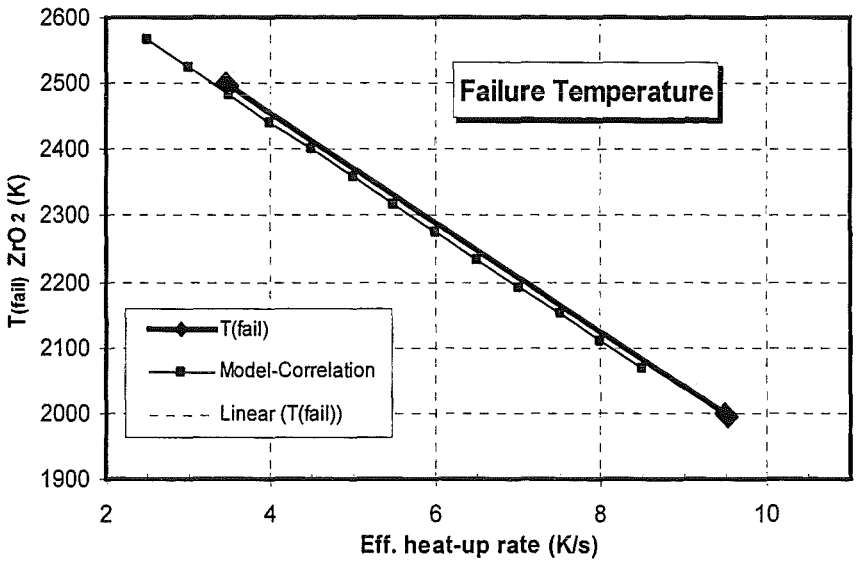


Figure 8 First order approximation of the clad failure dependency on the heat-up rate.

heat-up rates were performed leading to the relation shown in Figure 8. The model has been implemented in S/R mod 3.2 and is under validation test using CORA experiments.

Actually the main problem hindering correlation usage is the memory effect which requires an integration of the heat-up rates between 1500K and the failure temperature. This requires a lager modification of the code as estimated initially.

1.2.4 Improvement of the local shattering model

In S/R5 mod 3.2 the original local shattering model was removed and replaced by the global shattering model which removes by user interaction all protective oxide layers in the core. Thus maximum hydrogen and minimum metallic melt are calculated. For best estimate plant analyses and experimental support this is not feasible. On the other hand, the basic process of transient hydrogen release under reflood condition is not found so far. Actually it is the only knowledge that oxide scales loose their stability if they become thicker than 200 µm leading to cracking and sometimes spalling. Therefore, a lowest limit for oxide scales was set to 100 µm so that shattering was calculated in QUENCH reflood tests.

Besides, the following conditions must be fulfilled during reflood:

1. $dT/dt < -5K/s$ for several time steps, and
2. $\delta(\beta\text{-Zr}) < 200$ µm, and
3. $1150\ K < T_{clad} < 1560\ K$)

Since it is not clear whether or not other mechanisms besides cladding fragmentation contribute to observed hydrogen release, a sounder model is not feasible. If the QUENCH programme cannot answer this question, a more conservative approach may be required.

1.3 Heavy reflector melt down analyses

The program LOWCOR2 is developed to simulate the 2D-thermal behaviour and failure of in-vessel components like reflector, core barrel and core support structures as the lower core support plate. Degradation of these structures is affected by thermal loading due to radiation, direct contact to hot materials, and/or due to ablation caused by momentum transfer of moving melts. In a first step, heat transfer from degrading fuel rods and from debris regions to cylindrical structures like the EPR heavy reflector and core barrel and heat conduction up to local melt down of these structures have been investi-

gated. The physical background of the LOWCOR2 model, the actual capabilities and future features as a S/R5 mod3.2-irs module are described in /11/.

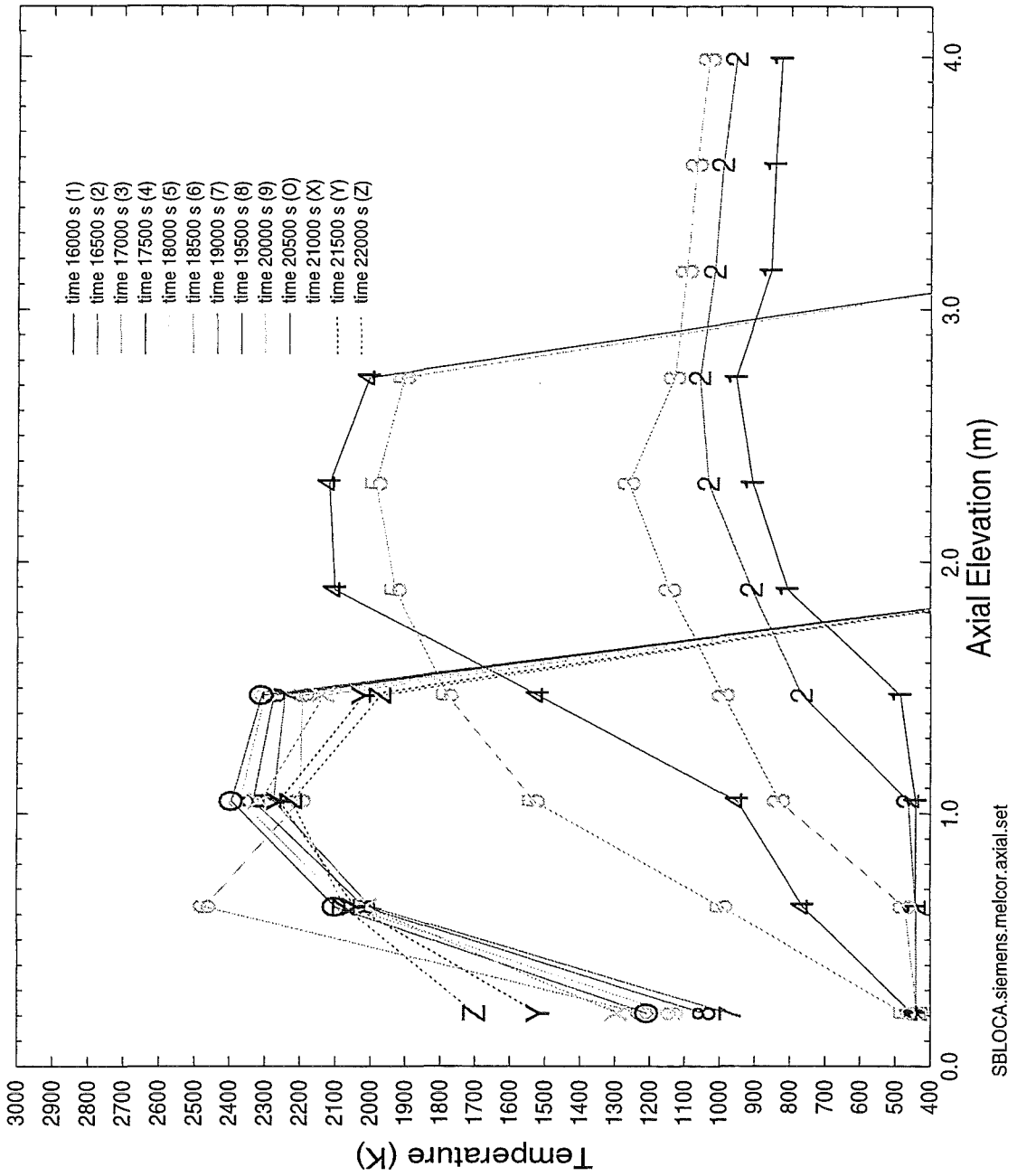


Figure 9 Evolution of surface temperatures in the outer core region adjacent to the heavy reflector derived from MELCOR 1.8.3 calculations as inner boundary conditions for LOWCOR2 calculation.

As a stand-alone code, LOWCOR2 is intended to validate simplified models for melt down of structures in reactor accident system codes, and is actually used to supply best-estimate data for melt release into the lower plenum.

The boundary temperatures for present analyses were derived from accident analyses for the SBLOCA scenario "3" leak (46 cm²)" (Section 1.1.3) performed with MELCOR mod. 1.8.3 by SIEMENS-KWU. LOWCOR2 calculates local temperatures evolution and melting in simplified cylindrical geometry of the heavy reflector (HR) including the core barrel (CB). Also the melt down process of the inner edges of the heavy reflector at the axial position of the highest thermal loading is considered.

1.3.1 Axial position of HR melting

HR and CB are modelled as a hollow cylinder (Figure 10), with inner and outer radii of 1.912 m and 2.145 m, respectively. The computational region indicated by the dashed lines is subdivided into 11 radial and 60 axial meshes.

To derive the heat source for the inner side of the heavy reflector the outermost fuel elements or debris temperatures were taken from MELCOR /17/. The 10 axial temperatures (each zone is 0.42 m long, Figure 10) are coupled to inner HR surface by quasi 2-d radiation as indicated in Figure 10.

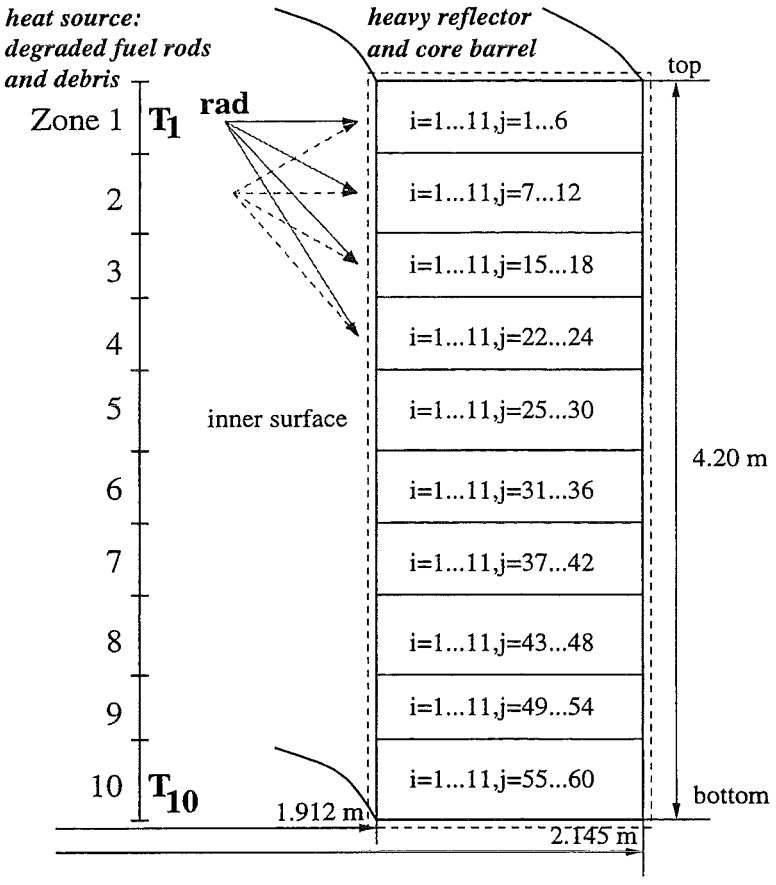


Figure 10 Configuration of the HR modelled in LOWCOR2 calculations.

At the outer side of the HR radiation across the downcomer to the reactor pressure vessel (RPV) wall (T_{RPV} = 450 K = const) is calculated. Likewise, for the upper boundary axial heat transfer by radiation is assumed with fixed sink temperatures (T_{up} = 1000 K), at lower end a fixed sink temperature of T_{low} = 450 K, respectively. Surface emissivities of 0.4 for the inner side and 0.3 for the rest have been used.

Figure 11 shows the temperature distribution in the heavy reflector at 19000 s as well as the damage progression at 19000 s, 21000 s and 22000 s in terms of the temperature based damage indicator ICOND. ICOND = 1: $T_{heavy\ ref.} < T_{solidus}$; ICOND = 2: $T_{solidus} \leq T_{heavy\ ref.} < T_{liquidus}$; ICOND = 3: $T_{heavy\ ref.} = T_{liquidus}$. Under the assumptions made above, the calculated evolution of the melting process triggers failure of the HR within about 3000 s after onset of local melting at an elevation of about 1 m (Figure 11).

1.3.2 Lateral onset of HR melting

In order to study the evolution of the melting process at the inner edges of the heavy reflector, a characteristic element as indicated in Figure 12 (right) has been selected for the calculation at an elevation of 1.05 m exposed to thermal loads as given by the MELCOR results presented above. The lengths of the inner edges have been assumed to be 220 mm in the calculations (Figure 12 right). The internal cooling bores of the HR (Figure 12 left) have been taken into account as 16 separate meshes representing heat sinks with constant temperatures of 500 K (assuming convective heat transfer to steam flow at their boundaries). Right side of Figure 12 shows that the edges of the inner heavy reflector structure are totally molten up to about 19500 s, i.e. within less than 1000 s after begin of melting (cf. Figure 11).

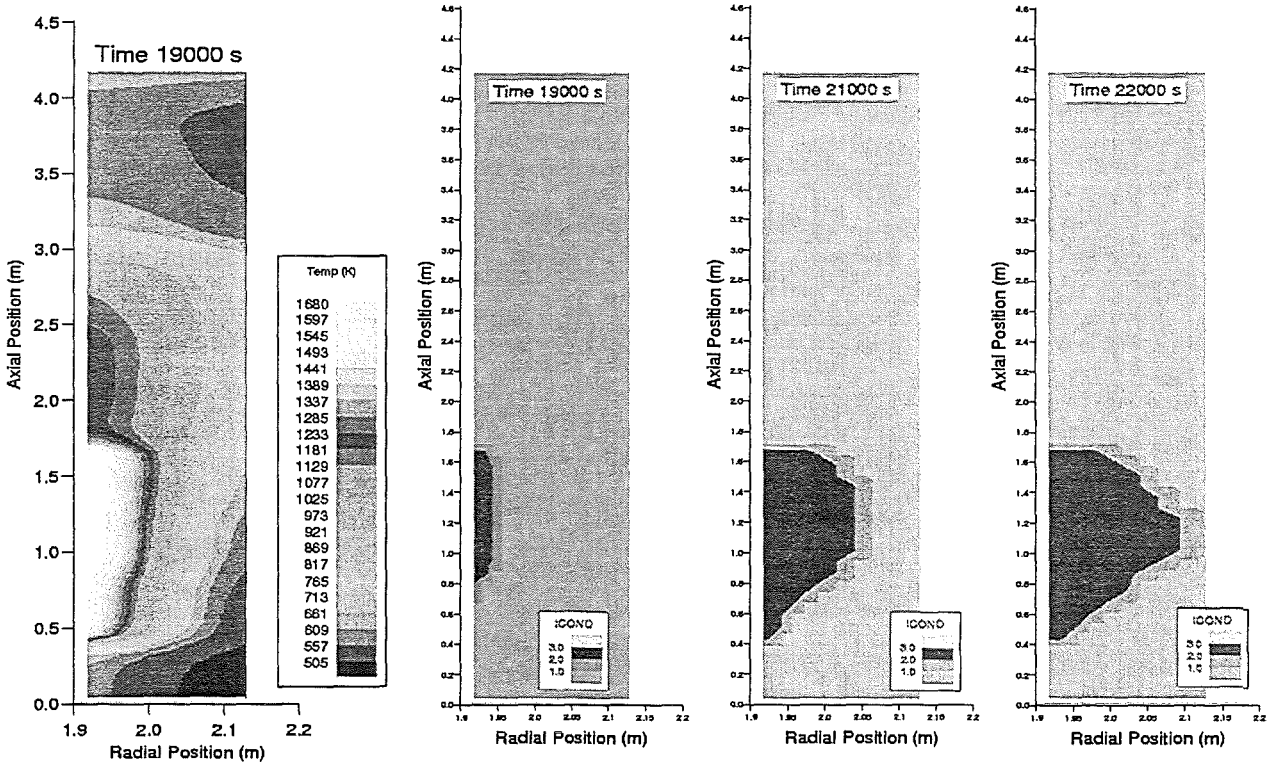


Figure 11 Results of LOWCOR2 calculations, left: axial/radial temperature profile in the HR, right: state of damage progression at 19000s, 21000s and 22000s. Definition of ICOND see text.

Similarly 46 cm^2 SBLOCA accident sequence has been discussed in /11/ on the base of boundary conditions for LOWCOR2 analyses made available by calculations with SCDAP/RELAP5 mod 3.2. The LOWCOR2 results reflecting the melt through of the heavy reflector are significantly different from those presented above: The damage progression is concentrated on the upper part of the heavy reflector with an axial extension more pronounced than that resulting from MELCOR boundary conditions. Begin of melting is about 4500 s earlier but the times for melt through of the heavy reflector are comparable. The time difference of begin of melting is mainly due to different thermohydraulic models for countercurrent flow of steam and condensation in steam generator tubes and hot leg as well as their influence on the core boil-off process. The reason for the differences in the axial position of HR perforation is discussed in Section 1.1.3.

The continuing development of LOWCOR2 covers:

- consideration of thermo-mechanical interaction between liquefied and moving as well as resolidified material and structural surfaces,
- extension of the geometry to boundary structures of arbitrary shape,
- extension to grid type slender plate structures by combining individual plate-like structures thermally coupled to each other,
- internal heat source (γ-heating).

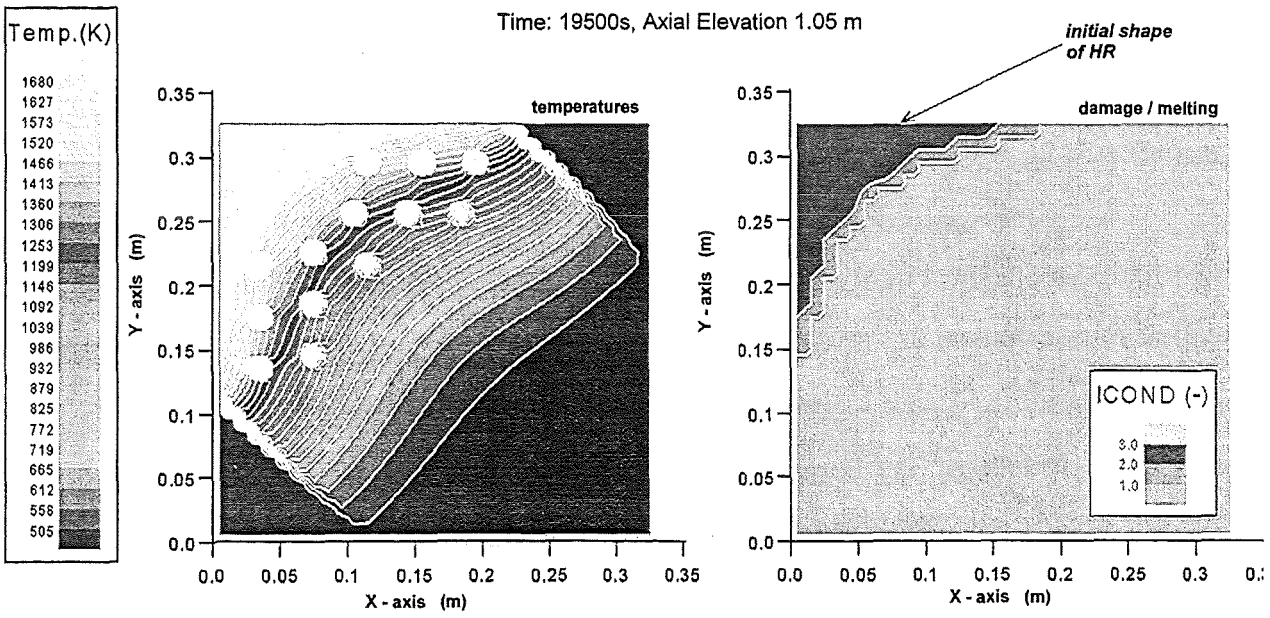


Figure 12 Conditions in the HR at 19500 s in 1.05 m elevation: left: temperature field and right: melting state. Initial shape partially rounded to a cylindrical one.

1.4 Support of QUENCH experiments

The QUENCH programme at FZK/IMF aims at investigating the physico-chemical processes during quenching of overheated rod bundles with water or fast cool-down with steam. At IRS these experiments are supported by analyses before and after the tests, mostly with S/R5 mod3.2.

1.4.1 Reflood phase

With this programme version the quench phase can be described much better than with the old one, S/R5 mod 3.1 (Figure 13 top), serious programming errors being removed. This progress holds for both, the standard heat transfer correlation package from INEEL (Figure 13 centre) as for a special package, developed at PSI in Switzerland (Figure 13 bottom).

Since most thermocouples are mounted on the outside clad surface (sketch in Figure 13 bottom), they have little contact area with the fuel rod cladding, but a large surface to the fluid and so cool down much faster during such fast transients than the rods. A better agreement can be obtained for thermocouples mounted at the inner surface of the cladding.

1.4.2 QUENCH-03

Pre-Test Calculations

In a similar manner as for the previous experiments pre-test calculations have been made for test QUENCH-03, applying a steeper power transient than for QUENCH-02. In comparison to the test conduct for QUENCH-02 the time to perform the transient and hence time for operator intervention to initiate quenching becomes sensibly shorter, once elevated temperatures are reached.

It was planned to increase electrical power in the beginning of the quench phase to compensate the additional heat losses due to the rather cold steam which is produced when the water comes into contact with the hot structures in the inlet pipe and the lower plenum of the test section.

Since it is not possible to treat water quenching adequately with S/R5 mod 3.1, used for these pre-test calculations, an approximate solution was found, based on steam production as measured with the mass spectrometer in the test QUENCH-01.

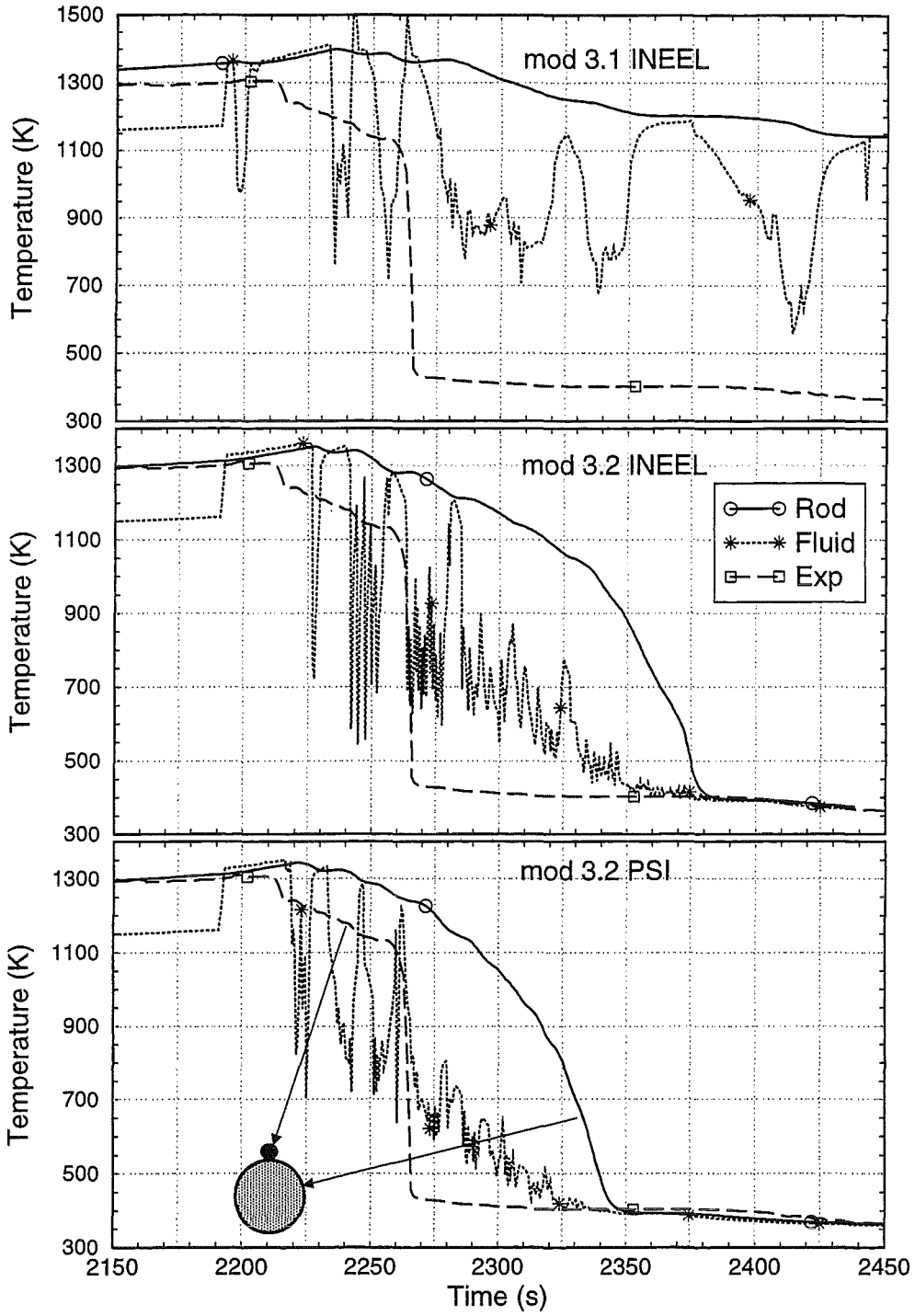


Figure 13 Comparison of measured and calculated temperatures of the central rod and the fluid for the QUENCH-02 test: top: S/R5 mod 3.1 with FZK- Chen correlation, centre: original S/R5 mod 3.2 with INEEL reflood model, and bottom: S/R5 mod 3.2 with PSI and FZK- Chen correlation.

The test conduct was defined on the basis of the pre-test calculations and the test conduct of test QUENCH-02. As for test QUENCH-02 a constant value for electrical power was applied from quench initiation to the time when temperature is seen to drop at the axial level of 550 mm. In contrast to test QUENCH-02 it was much higher, the value of 44

kW being deduced from the pre-test calculations. During test the calculated hydrogen production was to be used as a criterion for quench initiation, but since escalation began in a zone which was not used for control during the test, it proved to be difficult to interpret the data during the test.

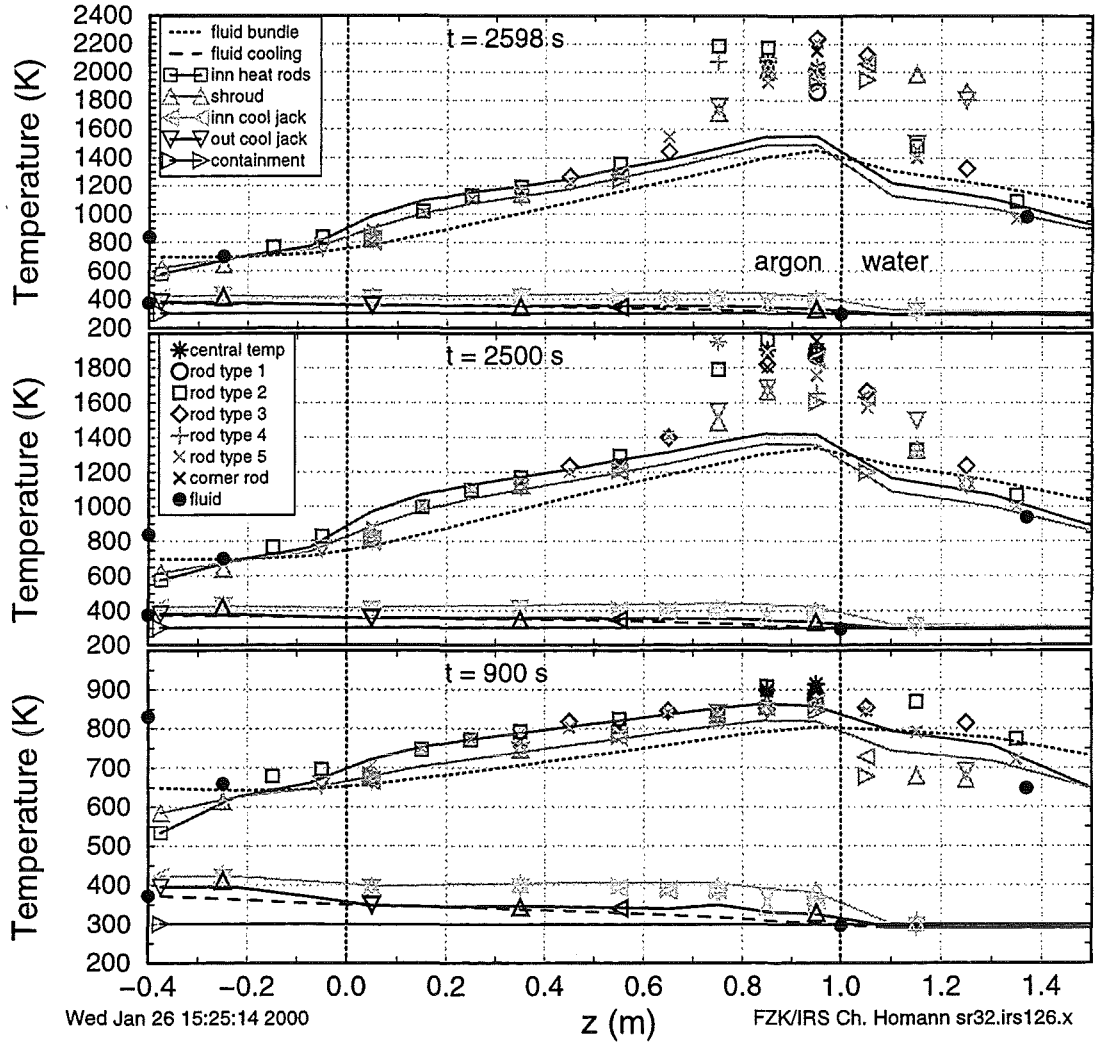


Figure 14 Comparison of measured and calculated axial temperature profiles for QUENCH-03 for three times into the transient.

Post-Test Calculations

Results of post-test calculations are given in Figure 14. In contrast to experimental finding temperature escalation is calculated to begin at the end of the heated zone, i. e. at 950 mm instead of level 11 (750 mm), and calculated temperature escalation at the end of the heated zone begins about 200 s later than detected at level 11. Since local input of electrical energy increases with temperature, calculated temperature profiles begin to deviate from experimental values in the whole bundle after onset of escalation. In the lower part this leads to a reduced temperature increase. A calculated temperature escalation in the shroud seems to begin shortly before quench initiation.

The begin of temperature escalation at another level than at the end of the heated zone and temperature escalation in the shroud are not understood up to now, and two ideas are tested actually. The first one is that some of the hydrogen, produced during oxidation, may be absorbed in the structures. This is an exothermic process, increasing temperature and oxidation rates locally. It might trigger escalation in the shroud in the upper electrode region. Another idea is that in this region - and perhaps elsewhere - some of the oxide layer might ablate (break-away oxide), such enhancing oxidation. However, these ideas still need further examination, and in the actual state of the understanding major programme development work does not seem to be promising and should be postponed. For reason mentioned above calculations for the quench phase are not presented for QUENCH-03.

1.4.3 QUENCH-04

The pre-test calculations concentrated on the time of steam cool-down initiation and electrical power input during the cool-down phase. The results were taken as a basis for the test conduct.

The post-test calculations show a similar behaviour for the transient phase as those for QUENCH-03. The cool-down phase can be calculated without difficulties (Figure 15). Differences between calculated and measured temperatures in the cool-down phase are due to both experimental and calculational reasons. Since the temperature escalations cannot be modelled appropriately, the calculated temperatures differ from measured ones at the begin of the cool-down phase. Because of the mounting of most of the thermocouples at the outer clad surface they cool down quicker than the rods as mentioned above for water quenching.

The analyses are ongoing focussed on identification of sensitive experimental parameters such as resistance of sliding contacts, shroud heat transfer values, heat transfer coefficients in the gap.

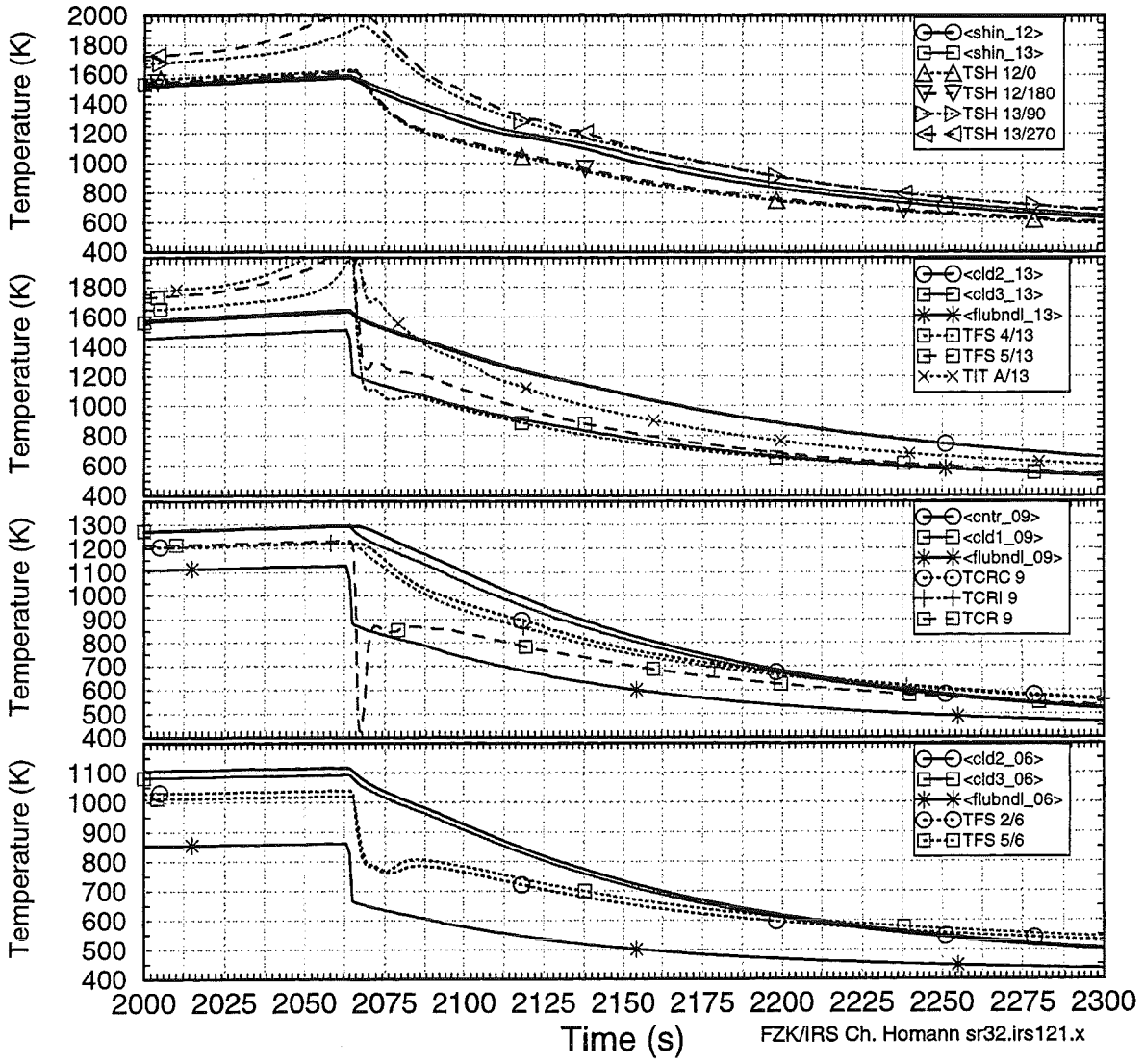


Figure 15 Comparison of measured and calculated temperature developments at various axial levels for QUENCH-04.

1.5 Literature

/1/ The SCDAP/RELAP5 Development Team: SCDAP/RELAP5/MOD 3.2 Code Manual, NUREG/CR-6150, INEL-96/0422, Idaho Fall, Idaho, USA,1997.

/2/ Allison Ch., ISSC, private communication, 1999.

/3/ Gonzales R., Chatelard D., Jacq F., ICARE2 Version 2 Mod 1, Description of physical models, Note Technique DRS/SEMAR 92/43, 1996.

/4/ Hering W., Reflood Calculations for the Projected European Pressurized Water Reactor Using SCDAP/RELAP5 mod3.1, FZKA Report 6299; December 1999.

/5/ Elias E., Sanchez V.H., Hering V.; Development and validation of a transition boiling model for RELAP5/MOD3 reflood simulations, NEDEA 183 177-332 (1998).

/6/ Sanchez-Espinoza V. H., Elias E., Homann Ch., Hering W., Struwe D., Development and validation of a transition boiling model for the RELAP5/MOD3 reflood simulation, FZKA-5954, September 1997.

/7/ Hagen S., Hofmann P., Noack V., Sepold L., Schanz G., Schumacher G., Large Bundle PWR test CORA-7: test Results, FZKA 6030, April 1998.

/8/ Van der Hardt P., Jones A.V., Lecomte C., Tattegrain A.:"Nuclear Safety Research: The Phebus Severe Accident Experimental Program", Nuclear Safety 35(2),1994.

/9/ Smit S.O., Sengpiel W.: Investigation of the Phebus FPT1 Bundle Degradation Experiment with SCDAP/RELAP5, FZKA 6294, published 2000.

/10/ Hering, W.: Improvement of the SCDAP/RELAP5 Simulator Model with respect to the FZK QUENCH Facility, FZKA Report 5437, published 2000.

/11/ Hering W., Messainguiral Ch., Sengpiel W.: Investigation of the Meltdown Behaviour of Massive Radial Core Enclosures during LWR Accidents, FZKA-Report 6315, published 2000.

/12/ Haste T.J. et al.: Design Studies for FZK Degraded Core Bundle Quench Experiments, Report AEAT-1360, May 1997.

/13/ Struwe D., Jacobs H., Imke U., Krieg R., Hering W., Böttcher M., Lummer M., Malmberg T., Messemer G., Schmuck Ph., Göller B., Vorberg G.: Consequence Evaluation of In-vessel Fuel Coolant Interactions in the European Pressurized Water Reactor, FZKA Report 6316, July 1999.

/14/ Hiles R. P. et al.: Scaling Studies and Support of FZK Bundle Quench Experiments, Report AEAT –4484 Issue 1, November 1998.

/15/ Hering W., Homann Ch., Sanchez V.H., Accident mitigation analyses for the EPR using SCDAP/RELAP5, Jahrestagung Kerntechnik, 18.-20.5.1999, S.267-270.

/16/ Homann Ch., Hering W., Analytical Activities for the QUENCH Facility Using the Mechanistic Code System SCDAP/RELAP5, Jahrestagung Kerntechnik, 18.-20.5.1999, S.263-266.

/17/ Kronenberg J., private communication, 1999.

/18/ Sanchez V.H., "Validation of the Reflood Model Implemented in the Code RELAP5/MOD3.2.2γ the Integral Test LOFT-LP-LB-1, FZKA Report 6426, 2000.

IV. Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 in Luft

(W. Krauss, G. Schanz, IMF III)

Abstract

The experimental separate effect investigation programme on Zircaloy-4/air oxidation was pursued and expanded to isothermal specimen exposure and the comparison of the oxidation between the atmospheres Ar/O_2 and air. In close connection with the EC project OPSA, which is meanwhile terminated, the investigation concerned specimen exposure in a thermobalance to flowing atmospheres, namely dry Ar/O_2 of composition 80/20 or synthetic air, respectively. As test parameters the linear heat-up rate was varied in the range 5 to 40 K/min and the ramp or holding temperature between 800 and 1500 °C. Mass increase and reaction rate were continuously recorded or evaluated in temperature/time dependence. The oxide scale growth was found to be accompanied by colour changes, crack formation and spalling of layers, as well as by dimensional substrate growth, which are the reasons for the observed kinetic results. The microstructural investigation confirms nitrogen to be essentially responsible for the morphological and mechanical phenomena.

Presently, the programme is being expanded to investigations and accompanying analytical work with respect to actually interesting and more realistic accidental conditions (steam pre-oxidation, steam/air atmosphere mixtures, oxidation of B_4C and B_4C/ss /zircaloy with respect to methane production, etc.) in order to contribute to the completion of the basic information, required in international cooperation programmes.

Zusammenfassung

Das experimentelle Programm zur Einzeleffekt-Untersuchung der Zircaloy-4/Luft Oxidation wurde weitergeführt und auf isotherme Versuchsführung und Vergleiche zwischen der Oxidation in den Atmosphären Ar/O_2 und Luft ausgeweitet. Begleitend zum in der Zwischenzeit abgeschlossenen EU-Projekt OPSA wurden in Erweiterung früherer Untersuchungen kurze Zircaloy-4 Rohrabschnitte und Stababschnitte in Thermowaage-Tests strömender, trockener Ar/O_2 Atmosphäre der Zusammensetzung 80/20 oder synthetischer Luft ausgesetzt. Als Versuchsparameter wurden die lineare Aufheizrate im Bereich 5-40 K/min und die Rampen- bzw. Haltetemperatur

zwischen 800 und 1500 °C variiert. Die Massenzunahme und die Reaktionsrate wurden kontinuierlich registriert und in Temperatur/Zeitabhängigkeit ausgewertet. Das Oxidwachstum wird begleitet von Farbänderungen und dem Aufreißen und Abplatzen der Schicht, sowie von Dimensionsänderungen des Substrats, mit ursächlichen Auswirkungen auf die kinetischen Ergebnisse. Die metallographische Untersuchung bestätigt, dass Stickstoff die morphologischen und mechanischen Phänomene maßgeblich hervorruft.

Das Programm wird gegenwärtig auf Untersuchungen und begleitende analytische Arbeiten hinsichtlich aktuell interessanter und realitätsnäherer Störfall-Bedingungen (Dampf-Voroxidation, Dampf/Luft-Mischatmosphären, Oxidation von B_4C und B_4C / Cr-Ni-Stahl / Zircaloy hinsichtlich der Produktion von Methan etc.) erweitert, um die in internationaler Kooperation benötigte Basisinformation zu vervollständigen.

1. Zielsetzung

Im Rahmen des EU-Projektes OPSA wurden denkbare Szenarien für den Einbruch von Luft („Air Ingress") in einen Reaktorkern unter Störfallbedingungen betrachtet. Als Folge wären gravierende Auswirkungen auf den Wasserstoff-Quellterm, sowie die Spaltprodukt- und die Brennstoff-Chemie zu erwarten. Angesichts der noch bruchstückhaften Information über die Mechanismen und die Kinetik der Luftoxidation des Hüllmaterials ist die Beurteilung solcher Szenarien hinsichtlich Relevanz und Risiko kaum möglich.

Aus eigenen, früher mit anderer Zielsetzung durchgeführten Studien, sowie aus grundlegenden Literaturarbeiten ist bekannt, dass die Hochtemperatur-Oxidation von Zirkonium und seinen Legierungen an Luft vom Verhalten in Dampf dramatisch abweichen kann. Insbesondere die neben der Sauerstoffoxidation ablaufende Reaktion mit Stickstoff, führt zum Wachstum morphologisch veränderter und mechanisch geschädigter Reaktionsschichten anstelle von schützenden Oxidschichten, und deshalb zu komplexeren reaktionskinetischen Randbedingungen[1-3]. Es ist somit nicht zulässig, generell ein Reaktionsverhalten zu unterstellen, das ähnlich zur Dampfoxidation ist. Darüber hinaus tritt bei der Luftoxidation im Vergleich zur Dampfoxidation eine wesentlich höhere spezifische Energiefreisetzung auf.

Über grundlegende Einzeleffekt-Untersuchungen zur Zircaloy-4/Luft-Oxidation wird im folgenden berichtet. Diese finden zunächst unter idealisierten und sauber definierten Bedingungen an kleinen metallischen (also nicht voroxidierten) Zircaloy-4 Proben statt. Als Versuchsproben wurden Rohrabschnitte und Stababschnitte eingesetzt. Nur durch Einsatz von massiven Stababschnitten läßt sich bei höheren Temperaturen, bei denen hohe Reaktionsraten zum schnellen Konsum der Rohrproben führen, eine ausreichend breite Zeitbasis für die Auswertung isothermer Versuche erzielen. Der Übergang auf realitätsnähere Versuchsbedingungen, vor allem mit Dampf-Voroxidation und Oxidation in Dampf/Luft-Gemischen ist der als nächster erforderliche Schritt. Insbesondere für eine weitergehende Auswertung und die Bewertung der Störfallrelevanz der Ergebnisse ist außerdem eine begleitende Modellierung der beobachteten Reaktionsmechanismen notwendig.

2. Versuchsausführung

Die Untersuchung des Reaktionsverhaltens von Zircaloy-4 in Luft wurde mit Einzeleffekttests unter transienten und isothermen Temperaturbedingungen fortgeführt. Die Parameter der Testserien waren die Steilheit der zeitlich linearen Temperaturrampen (5-40 K/min) und die End- bzw. Haltetemperaturen (800-1500°C). Der Abkühlprozess erfolgte im Ofen unter Ausnutzung des natürlichen Abkühlverhaltens der Testanlage mit Kühlraten bis zu 50 K/min.

Zur Gewährleistung von reinen und reproduzierbaren Oberflächen wurden die Zircaloy-4 Hüllrohrabschnitte und Stababschnitte von 4 mm Länge in einer Ätzlösung aus HNO_3 und HF gebeizt, sorgfältig gespült und in deionisiertem Wasser gekocht. Die Experimente wurden in strömender, trockener, synthetischer Luft oder einer Ar/O_2-Gasmischung in einer Thermowaage ausgeführt. Die Ar/O_2 Atmosphäre der Zusammensetzung 80/20 wurde aus anlagentechnischen Gründen, wie Kondensationsproblemen, anstelle von Dampf gewählt. Aus früheren Arbeiten ist bekannt, dass die Reaktionskinetik von Zircaloy in Dampf und Ar/O_2 sehr ähnlich ist. Der Vorteil dieser Experimente in einem Waagesystem liegt bei der simultanen und kontinuierlichen Aufzeichnung von Probentemperatur, Massenzunahme, Reaktionsraten und der Trennbarkeit von transienter und isothermer Versuchsphase. Durch eine geeignete Probenmontage können sogar eventuell stattfindende Fragmentierungsprozesse registriert werden.

3. Ergebnisse

3.1. Niedrige Reaktionstemperatur (< ca. 1100 °C)

Morphologie, mechanisches Verhalten

Das makroskopische Aussehen von nicht voroxidierten Zry-4 Proben (Rohr oder Stab), die nur kurze Zeit bei niedriger Temperatur der Luftatmosphäre ausgesetzt waren, unterscheidet sich nur wenig von demjenigen der in Dampf oder Ar/O_2 Atmosphäre oxidierten Proben. Sie weisen ebenfalls eine glatte Oberfläche mit schwarzer Färbung auf. Dieses Verhalten wurde im vorhergehenden Jahresbericht ausführlich dargestellt.

Nach längeren Reaktionszeiten oder gleichbedeutend für dickere Oxidschichten, wie sie unter isothermen Versuchsbedingungen vorliegen, treten dramatische Unterschiede zwischen der Oxidation in Ar/O_2 Atmosphäre und in Luft auf. Bei der Reaktion in Luft bilden sich bräunlich gefärbte, sehr rauhe und schollenförmig aufgerissene Oxidschichten. In Abb. 1 sind die makroskopischen Bilder von Ringproben gegenübergestellt, die unter gleichen Bedingungen in Ar/O_2 bzw. in Luft reagiert haben. Auffallend ist auch die deutliche Vergrößerung des Probendurchmessers der in Luft oxidierten Ringprobe. Sie beträgt etwa 50 % bezogen auf den Ausgangsdurchmesser. Die Probe zeigt in diesem Temperaturbereich superplastisches Fließen. Dieses trägt zusätzlich noch zu den beobachteten höheren Reaktionsraten bei. Durch den Einsatz von Massivproben kann die mechanisch bedingte Vergrößerung der Reaktionsoberfläche verringert oder ausgeschlossen werden. Diese Massivproben bieten, wie erwähnt, den Vorteil, dass bei höheren Temperaturen noch ausreichend Zeit zur Ausführung von isothermen Versuchen zur Verfügung steht. Bei 900 °C werden auf Massivproben in Luft ebenfalls bräunliche Oxidschichten gebildet, jedoch ohne grobe Schollenbildung (Abb. 1).

Die mikrostrukturelle Untersuchung zeigt, dass bei der Reaktion in Ar/O_2 Atmosphäre schützende, defektfreie Oxidschichten gebildet werden, wie in Abb. 2 zu sehen ist. Bei den gewählten Versuchsbedingungen hat die Oxidschicht etwa die halbe Dicke der α-Zr(O) – Schicht. Dagegen zeigt die Oxidschicht bei Bildung in Luft deutliche radiale Risse, die teilweise bis zur metallischen Matrix reichen, und dem Breakaway ähnliche Strukturen. Daneben ist der Einfluß der auftretenden Fließvorgänge sichtbar. In der Reaktionszone zwischen Matrix und Oxid sind weiße Partikel aus

ZrN-Phase erkennbar. Die α-Zr(O) – Schicht ist hier dünner als bei der Oxidation in Ar/O_2.

Reaktionskinetik

Bei den Reaktionsversuchen in der Thermowaage wurden simultan die Massenzunahme und die Reaktionstemperatur als Funktion der Reaktionszeit aufgezeichnet. Aus diesen Daten wurden Reaktionsraten berechnet.

Während des Aufheizvorganges steigt die Reaktionsrate mit zunehmender Temperatur erwartungsgemäß stark an. Beim schnellen Aufheizen (20 K/min) bis zur isothermen Haltetemperatur treten keine sichtbaren Unterschiede in der Reaktionsrate zwischen den im Überschuß angebotenen Reaktionsgasen Ar/O_2 oder Luft auf. Diese Feststellung steht im Einklang mit dem makroskopischen Probenaussehen, sofern nur dünne Schichten vorliegen. In der Isothermphase treten jedoch drastische Unterschiede auf, wie in Abb. 3 dargestellt. In Ar/O_2 fällt die Reaktionsrate mit zunehmender Reaktionszeit und zunehmender Schichtdicke, wie für schützende Oxidschichten erwartet, ab. Dagegen steigt sie bei Luftoxidation über die gesamte Versuchsdauer an. Dies weist deutlich auf Defektbildung in den wachsenden Schichten und den Verlust der zunächst passivierenden Schichtwirkung hin. Weiterhin wird diese Reaktionsbeschleunigung durch die Zunahme der Reaktionsoberfläche, bedingt durch plastisches Fließen und Rißbildung, noch verstärkt.

3.2. Höhere Reaktionstemperatur (> ca. 1100 °C)

Morphologie, mechanisches Verhalten

Das makroskopische Aussehen von Zircaloy-4 Proben (Stababschnitte), die isotherm bei Temperaturen oberhalb von 1100 °C in Luft reagiert haben unterscheidet sich von demjenigen der bei tieferen Temperaturen reagierten Proben. In Abb. 4 sind Proben wiedergegeben, die zwischen 1000 und 1300 °C oxidiert wurden. Bei 1000 °C tritt sehr grobe Schollenbildung und ein tonnenförmiges Aufreißen der Oxidschicht auf. Dagegen weisen bei 1300 °C reagierte Proben eine weiße, feinkörnige Oberfläche auf und haben nahezu keine makroskopisch sichtbaren Risse in der Oxidschicht. Dies deutet auf eine geringere Defektbildung bei höherer Temperatur hin. Makroskopisch ist auch an der Massenzunahme ein eindeutiger Unterschied zwischen den Reaktionen bei tiefer und hoher Temperatur sichtbar. Bei

gleicher Reaktionskinetik würde bei höherer Temperatur nämlich eine wesentlich größere O_2-Aufnahme als die gemessene erwartet werden.

Reaktionskinetik

Die im Temperaturbereich bis 1500 °C unter isothermen Versuchsbedingungen ausgeführten Thermowaageversuche in Luft zeigen, dass die Reaktionsraten nicht ständig weiter ansteigen, wie es aus den Versuchen bei tiefer Temperatur (900 °C) zu erwarten wäre. In Abb. 5 ist das Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 in Luft bei 1200 °C dargestellt. Während der transienten Aufheizphase steigt die Reaktionsrate zuerst sehr schnell an, oberhalb von ca. 1100 °C jedoch weniger schnell. Nach Erreichen der isothermen Haltetemperatur fällt die Reaktionsrate wieder. Das Verhalten ist ähnlich der Oxidation in Ar/O_2, jedoch auf höherem Niveau. Der Kurvenverlauf zeigt an, dass die gebildeten Oxidschichten wieder eine nachweisbare Schutzwirkung ausüben, weil mit zunehmender Umsetzung bei hohen Temperaturen offenbar weniger Defekte in die Oxidschichten eingebaut werden oder vorhandene Defekte ausheilen.

Der Kurvenverlauf der Reaktionsrate zeigt während der Probenabkühlung bei ca. 700 °C eine erneute Zunahme der Umsetzungsrate. Diese ist auf die Freilegung frischer Oberflächen durch Rißbildung beim Abkühlen zurückzuführen.

Mikrostruktur

Mikrostrukturelle Untersuchungen wurden an allen in Luft und Ar/O_2 reagierten Zircaloy-4 Rohr- und Stababschnitten durchgeführt. Sämtliche in Luft reagierte Proben zeigen ein vielfältiges, aber konsistentes Verhalten. Bei längeren Reaktionszeiten wächst eine häufig gleichmäßig dicke Reaktionsschicht, die Defekte in lateraler Richtung aufweist. Die Bildung radialer Risse wird durch plastisches Fließen bei Rohrproben unterstützt. Dicke Schichten können sich bei entsprechender Stärke von der metallischen Probenmatrix ablösen. Im höheren Temperaturbereich treten noch komplexere Verhältnisse auf. Diese sind auf Selbstheilungs-Effekte während des weiteren Schichtwachstums zurückzuführen.

4. Folgerungen

Die Untersuchung hat durch den Vergleich der Oxidation in Argon-Sauerstoff bzw. Luft die Bedeutung des Stickstoffs als zusätzlicher Reaktionspartner und Verursacher mikrostruktureller und letztlich mechanischer Defekte und beschleunigter Kinetik eindeutig nachgewiesen. Die Versuche an Massivproben bei höchsten Temperaturen haben ergeben, dass Selbstheilungstendenzen der mechanischen Schädigung effektiv entgegenwirken und sie sogar überkompensieren können. Beide Verhaltensweisen tragen zu der ermittelten komplexen Kinetik des Zircaloy-4 an Luft bei. Deshalb steht neben der geplanten Ausweitung des Programms auf realitätsnähere Bedingungen die kinetische Auswertung auch mit analytischen Methoden als weitere anspruchsvolle Aufgabe an.

Im Rahmen des OPSA-Projektes wurden prinzipiell mögliche Szenarien für den Lufteinbruch („Air Ingress") in einen Reaktorkern im Verlauf schwerer Störfalle betrachtet, Einzelstab- und Kleinbündel-Experimente durchgeführt und diese auf der Basis konventioneller parabolischer Korrelationen der Oxidationskinetik von Zircaloy-4 analysiert. Es wurde bestätigt, dass als Folge solcher Szenarien gravierende Auswirkungen auf den Wasserstoff-Quellterm, sowie Einflüsse auf die Spaltprodukt- und die Brennstoff-Chemie zu erwarten wären. In den Abschlußbericht zu dem inzwischen beendeten Projekt sind die separat und komplementär durchgeführten eigenen Einzeleffekt-Untersuchungen eingebracht und zur Beurteilung des momentanen Wissensstandes und der weiteren notwendigen Aufgaben genutzt worden. (Eine Freigabe dieses Berichts als Veröffentlichung wird wahrscheinlich erfolgen.)

Von analytischer Seite wird die Relevanz solcher Szenarien nach wie vor kontrovers diskutiert bzw. in Frage gestellt, jedoch ist eine seriöse Beurteilung angesichts der bisher nur bruchstückhaft vorhandenen Information über die Randbedingungen für einen Lufteinbruch und die physikalisch-chemischen Abläufe bei der Oxidation in Luft und deren Konsequenzen für den Unfallfortgang, sowie des Bedarfs an detaillierten analytischen Arbeiten noch nicht möglich. Zweifellos stellt das Integralverhalten der Reaktoranlage das entscheidende Kriterium dar. Bekanntlich müssen sich jedoch Reaktorrechnungen sowohl auf ausreichend detaillierte Module als auch auf eine hinreichende Materialdatenbasis abstützen können, um zuverlässige, und ins-

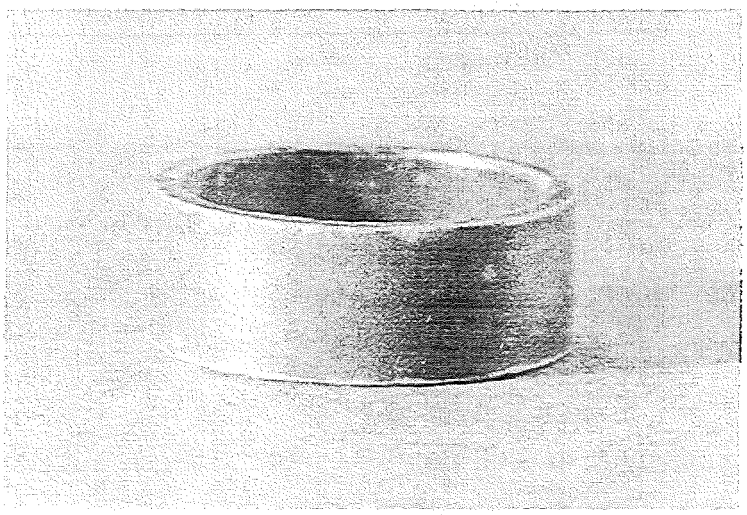
besondere extrapolierbare Ergebnisse erzielen zu können. Im Idealfall sollten weitere Arbeiten zum Thema Luftoxidation abgestimmt erfolgen.

5. Literatur

[1] W. Krauss, G. Schanz
Zircaloy/air oxidation kinetics: current experiments towards future demands.
4th International QUENCH Workshop, Karlsruhe, Oct. 6-8, 1998

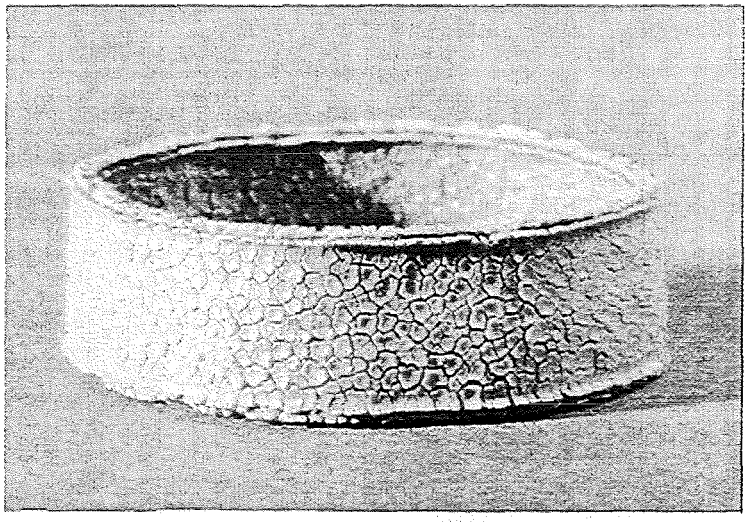
[2] W. Krauss, G. Schanz
„Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 in Luft". In: B. Mühl (Hrsg.), Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998; FZKA 6300, Sept.1999, 32.21.08 IV, S. 460-474.

[3] W. Krauss
„Comparative studies on the Zry-4/air and Zry-4/O_2 reaction behaviour towards air ingress scenarios". 5th International QUENCH Workshop, Oct 19-21, 1999; Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht, Nov. 1999.



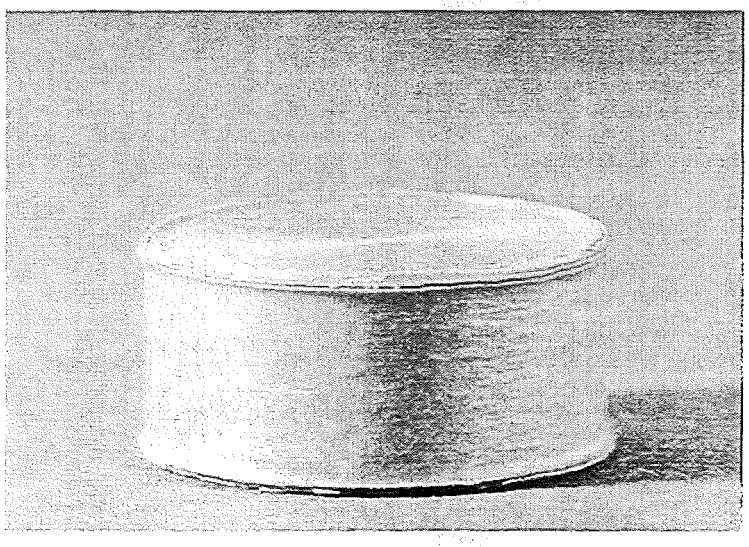
Oxidation eines Hüllrohrabschnittes in strömender Ar/O_2 Atmosphäre

Überwiegend liegt noch schwarzes, schützendes Oxid vor



Oxidation eines Hüllrohrabschnittes in strömender Luft

Reaktion bewirkt Bildung einer schollenförmig aufgerissenen Oxidschicht unter gleichzeitig auftretender Durchmesservergrößerung

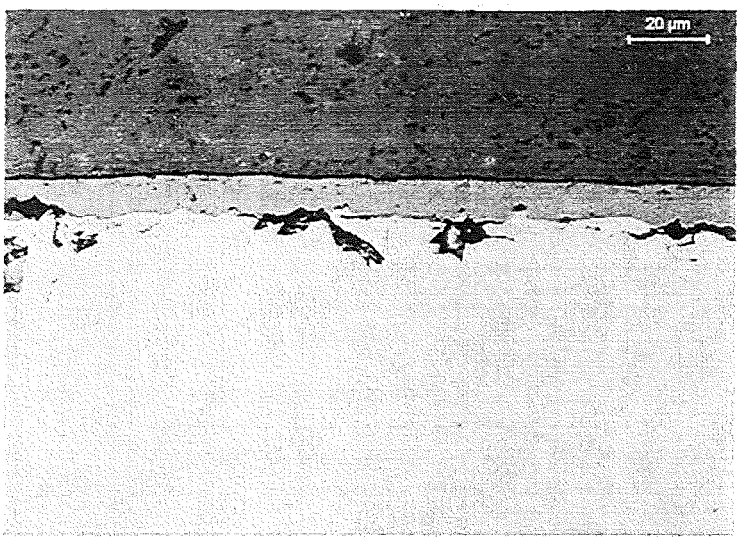


Oxidation eines Stababschnittes in strömender Luft

Reaktion bewirkt Bildung einer braunen, defektreichen Oxidschicht, jedoch ohne große Schollenbildung infolge fehlender Durchmesservergrößerung

Abb.1: Makroskopische Darstellung von Zircaloy-4 Proben nach isothermer Oxidation in Ar/O_2 Atmosphäre bzw. in Luft unter identischen Bedingungen

Heizrate:	20 K/min
Reaktionszeit	120 min
Reaktionstemperatur	900 °C



Oxidation in strömender Ar/O_2 Atmosphäre

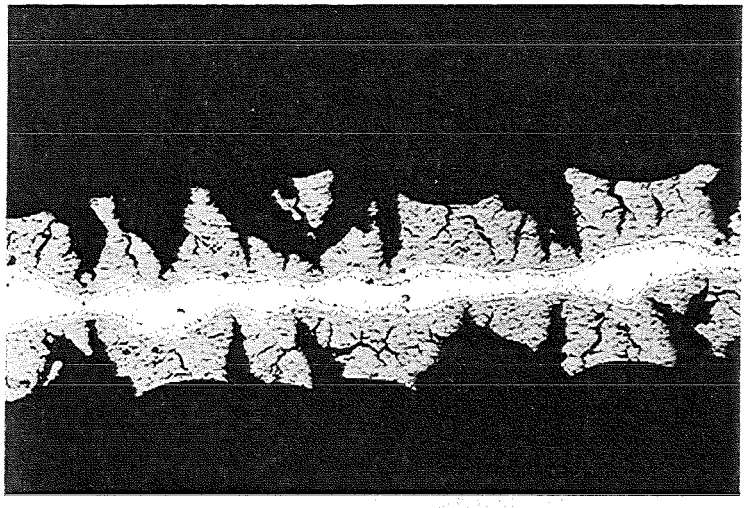
Einbettmaterial

Oxidschicht

Matrix

Oxidschichtdicke ca. 10 µm

Vergrößerung 500 x



Oxidation in strömender Luft

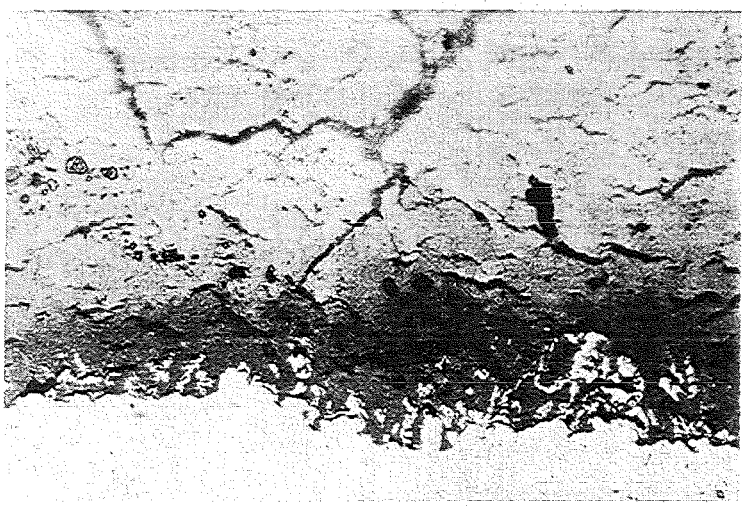
Einbettmaterial

Oxidschicht

Matrix

Oxidschichtdicke ca 250 µm unter plastischem Fließen

Übersichtsaufnahme
Vergrößerung 50 x



Oxidation in strömender Luft

Detailaufnahme
Vergrößerung 500 x

Oxidschicht

ZrN Partikel

Matrix

Abb. 2: Mikroskopische Querschliffdarstellung von Zircaloy-4 Hüllrohrabschnitten in Ar/O_2 bzw. in Luft

Heizrate.	20 K/min
Reaktionszeit.	120 min
Reaktionstemperatur	900 °C

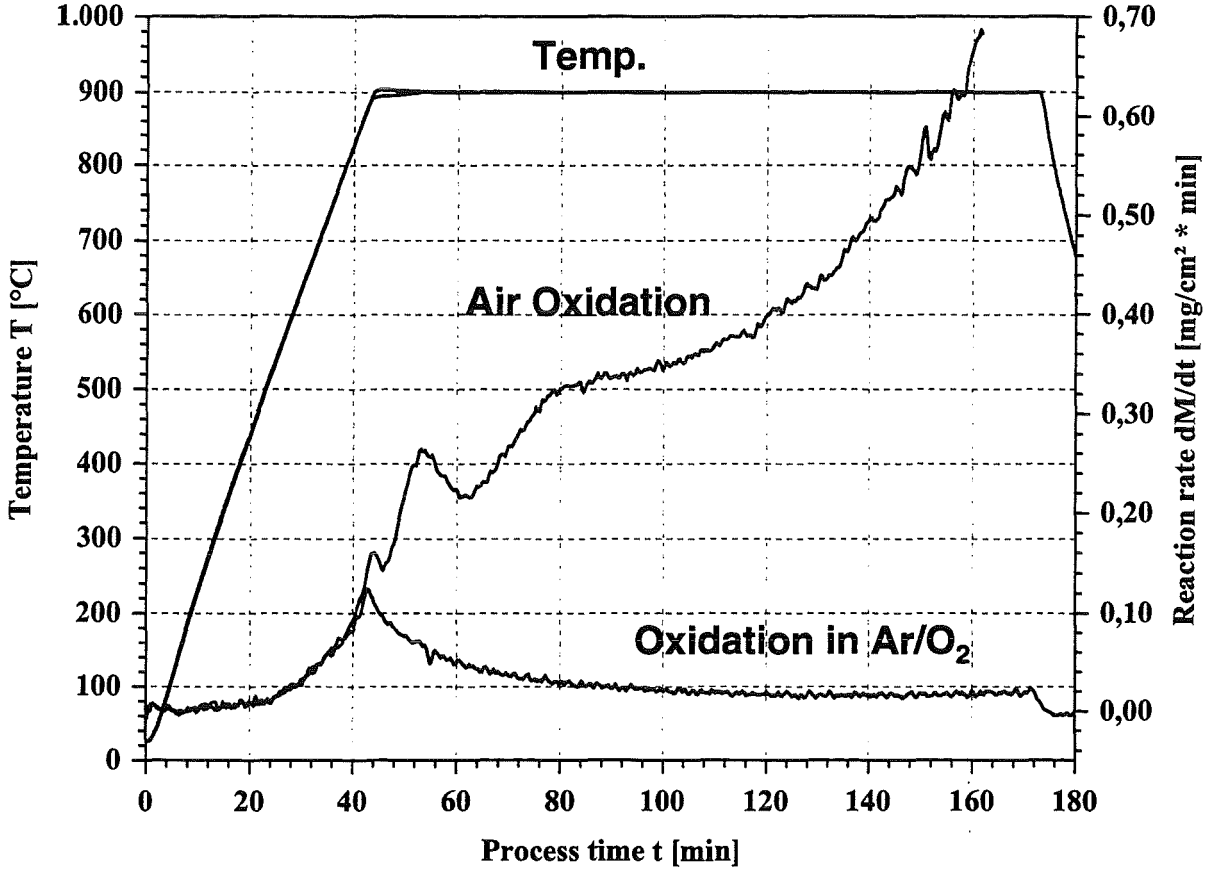
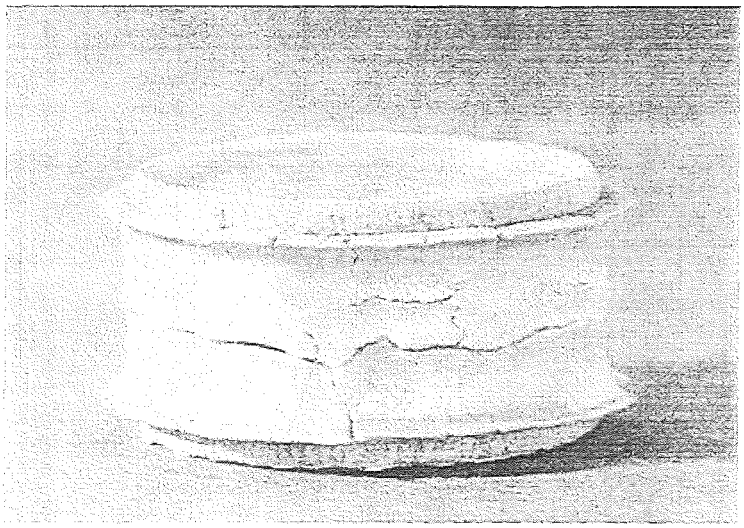


Abb. 3: Vergleich der Reaktionskinetik von Zircaloy-4 Hüllrohrabschnitten bei Reaktion in Luft bzw. in Ar/O_2 Atmosphäre unter isothermen Bedingungen

Heizrate:	20 K/min
Reaktionszeit	120 min
Reaktionstemperatur	900 °C

Allgemeine Charakteristik der Reaktionskinetik nach Erreichen der isothermen Bedingung in:

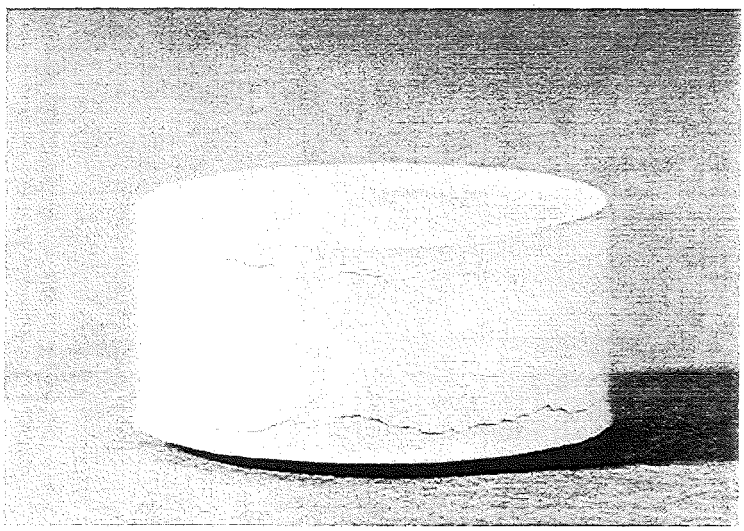
Ar/O_2	Abnahme der Reaktionsrate durch Ausbildung schützender Oxidschichten
Luft	Zunahme der Reaktionsrate mit wachsender Umsatzmenge



Reaktionstemperatur 1000 °C

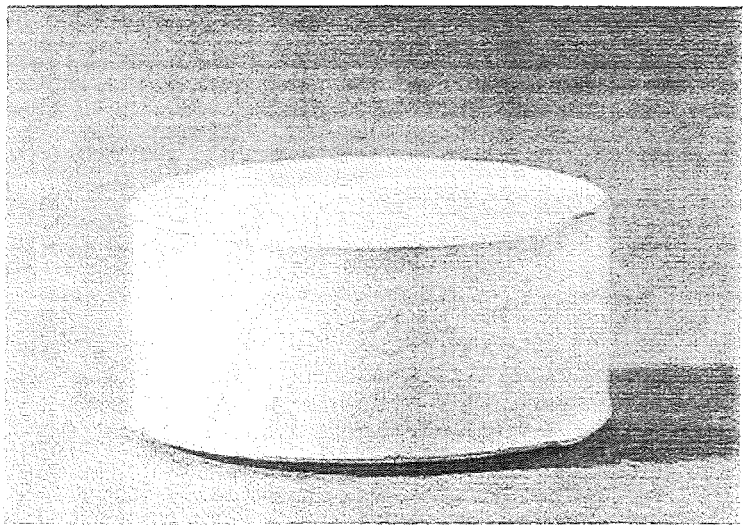
Sehr grobe Schollenbildung
und tonnenförmiges Aufreißen
der Oxidschicht

O_2 Aufnahme 37 mg/cm²



Reaktionstemperatur 1200 °C

O_2 Aufnahme 66 mg/cm²



Reaktionstemperatur 1300 °C

Kaum noch makroskopisch
sichtbare Rißbildung

O_2 Aufnahme 78 mg/cm²

Abb. 4: Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 Stababschnitten in Luft unter isothermen Reaktionsbedingungen in Abhängigkeit von der Reaktionstemperatur

Heizrate: 20 K/min
Reaktionszeit: 60 min

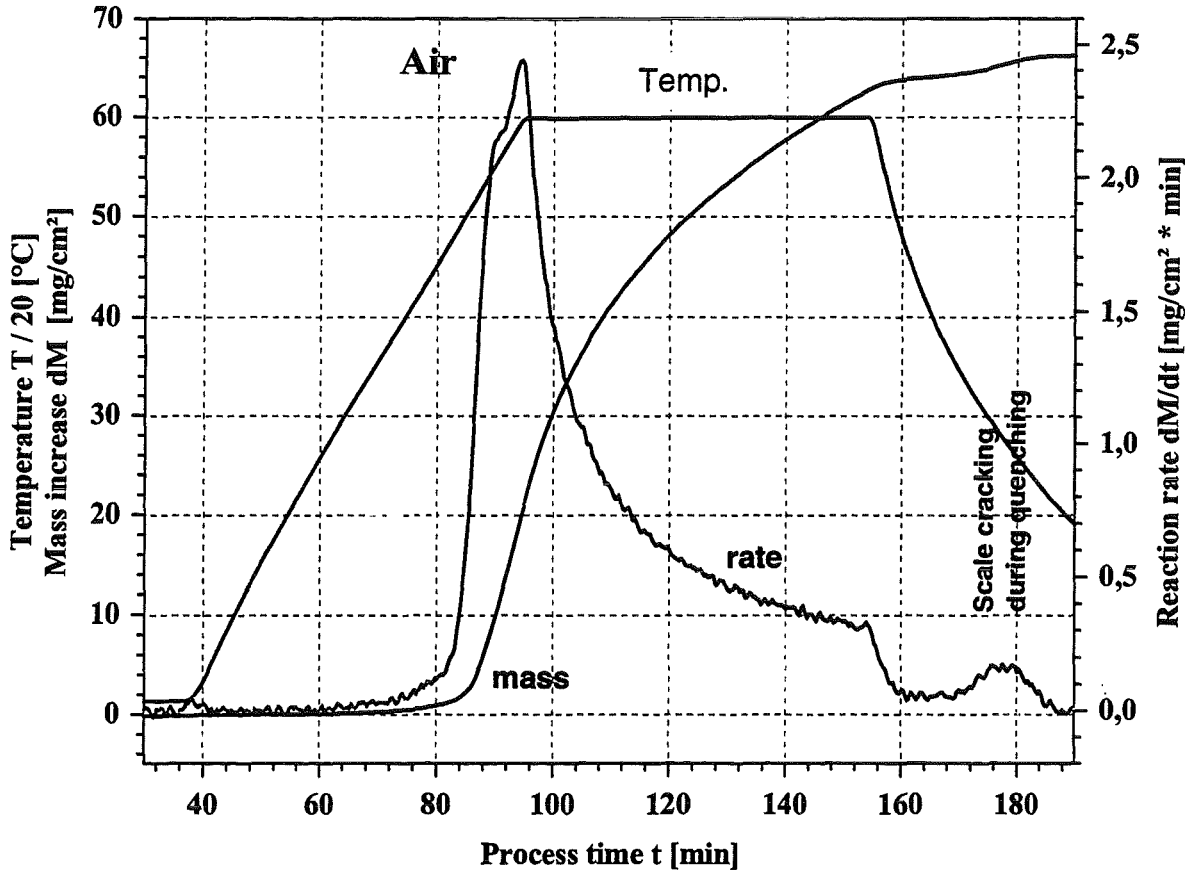


Abb. 5: Reaktionskinetik eines Zircaloy-4 Stababschnittes unter isothermen Reaktionsbedingungen bei 1200 °C in strömender Luft

Heizrate	20 K/min
Reaktionszeit	60 min

32.21.09 Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen

(G. Benz*, J. Ehrhardt, F. Fischer, Ch. Haller*, I. Hasemann, E. Hesselschwerdt, C. Landman, A. Lorenz, J. Päsler-Sauer, M. Rafat*, W. Raskob*, T. Schichtel*, A. Steidlinger*, IKET)

Abstract

The uncertainty and sensitivity analyses with the program system COSYMA for assessing the radiological consequences of nuclear accidents, performed since 1997 in close co-operation with the University of Delft, NL, and the NRPB, UK, have been terminated and fully documented.

Work on the real-time on-line decision support system RODOS for off-site emergency management after nuclear accidents has concentrated on the preparation of the operational version PV 4.0; it will be released by mid 2000. It has been developed and and customised to the various regions of Europe in close co-operation with some 40 contract partners in East and West Europe. The operational use of the RODOS system at a central place in Germany and in emergency centres of other West and East European countries is in progress.

Zusammenfassung

Die seit 1997 in Zusammenarbeit mit der Universität Delft, NL, und dem NRPB, UK, durchgeführten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Programmsystem COSYMA zur probabilistischen Abschätzung der radiologischen Konsequenzen kerntechnischer Unfälle wurden abgeschlossen und dokumentiert.

Die Arbeiten zum Echtzeit- und On-line-Entscheidungshilfesystems RODOS für den Notfallschutz nach kerntechnischen Unfällen konzentrierten sich auf die Fertigstellung der operationellen Version PV 4.0, die voraussichtlich Mitte 2000 vorliegen wird. Sie wurde in Zusammenarbeit mit etwa 40 Vertragspartnern in Ost- und Westeuropa entwickelt und zur Anwendung in den verschiedenen Regionen Europas angepaßt. Der operationelle Betrieb des RODOS Systems an zentraler Stelle in der Bundesrepublik Deutschland und in Notfallschutzzentralen anderer ost- und westeuropäischer Länder wird im Rahmen bestehender Verträge vorbereitet.

---

* Fa. D.T.I., Dr. Trippe Ingenieurgesellschaft m.b.H., Karlsruhe

1 Probabilistische Abschätzungen von Unfallfolgen

Im Rahmen des Vertrages FI4P-CT95-0006 mit der Europäischen Kommission (Europäischen Kommission) wurden in Abstimmung mit der Universität Delft (NL) und dem NRPB (UK) seit 1997 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Programmsystem COSYMA durchgeführt. Die Unsicherheitsanalysen erfolgten in mehreren Stufen: zunächst wurden vier Programmteile separat untersucht. Aufgrund der Analyse der Einzelergebnisse der Module „Atmosphärische Ausbreitung und Ablagerung", „Verhalten von Radionukliden in Nahrungsketten", „Berechnung von Strahlendosen durch interne und externe Exposition" und „Berechnung gesundheitlicher Schäden (deterministisch und stochastisch)" wurden von den insgesamt 376 Modellparametern diejenigen Parameter ausgewählt, die wesentlich zu den Unsicherheiten in den Rechenergebnissen beitragen.

Bei den in 1999 durchgeführten Unsicherheitsanalysen mit dem gesamten Programmpaket COSYMA wurden 186 Parameter berücksichtigt. Jede Unsicherheitsanalyse bestand aus Unfallfolgenabschätzungen mit 144 Wetterabläufen für jeden der 300 Sätze von Parameterwerten, die aus den Unsicherheitsverteilungen der Modellparameter durch Latin Hypercube Sampling ermittelt wurden. Sämtliche Analysen wurden für drei typische Quellterme durchgeführt. Die Anzahl der ausgewerteten Zwischen- und Endergebnisse schwankt je nach Teilmodul und Quellterm und liegt maximal bei etwa 100.

Die Abb. 1 zeigt exemplarisch für die von Evakuierung betroffenen Flächen (Quellterm CB2) die typische Ergebnisdarstellung in Form von 5%- und 95%- Fraktilwerten der komplementären kumulativen Häufigkeitsverteilungen (CCFD). Zusätzlich sind die Referenz-Kurve (mit den Default-Modellparameterwerten) und die über die Unsicherheitsverteilungen gemittelte CCFD eingetragen.

Die Ergebnisse aller Teilmodule und der Gesamtanalyse wurden in sechs EUR-Berichten dokumentiert und während eines Workshops in Alphen (NL) im Sommer 1999 präsentiert.

2 Rechnergestützte Entscheidungshilfeinstrumentarien für den Notfallschutz

2.1 Entwicklungsarbeiten

Mit Unterstützung der Europäischen Kommission (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 Europäischen Kommission seit Anfang 1996 etwa 40 Vertragspartner in der EU, den mittel- und osteuropäischen Staaten und den GUS Republiken involviert. Die von der Abteilung „Unfallfolgen" des IKET koordinierten drei RODOS Verträge mit der Europäischen Kommission wurden abgeschlossen; die Ergebnisse des RODOS Projekts wurden auf einem einwöchigen Workshop im September 1999 international vorgestellt und sind in einem Abschlussbericht /10/ sowie einer Vielzahl von technischen Berichten (auf 2 CDs) dokumentiert.

Basierend auf bereits geschlossenen bzw. bevorstehenden Zusammenarbeitsvereinbarungen zwischen LLNL (ARAC), JAERI (SPEEDI) und dem RODOS Consortium werden Software - Tools entwickelt, die den schnellen Austausch von meteorologischen und radiologischen Informationen im Fall eines kerntechnischen Unfalls in Europa, USA und Asien via Internet erlauben.

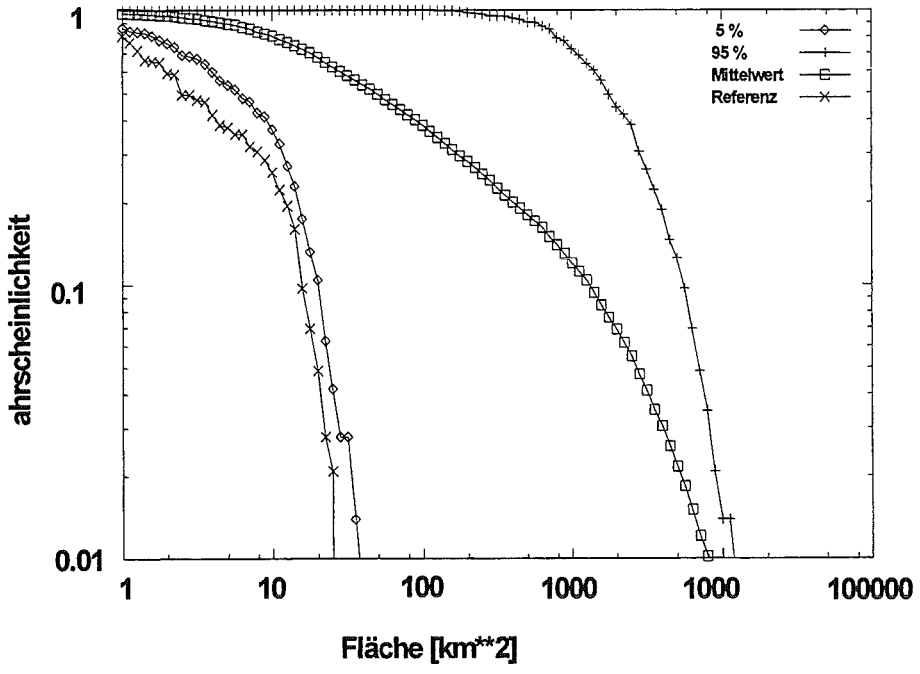


Abb.1 CCFDs der von Evakuierung betroffenen Flächen

2.1.1 Modellverbesserungen

Die RODOS Pilotversionen PV 3.1.3 und PV 3.1.4 wurden in 1999 fertiggestellt, die Version 4.0 als Endversion aller RODOS Aktivitäten im 4. Rahmenprogramm der Europäischen Kommission wird bis Mitte 2000 vorliegen. Die neuen Versionen sind zum operationellen Einsatz in europäischen Notfallschutzzentralen geeignet. Sie enthalten Verbesserungen und Erweiterungen des Betriebsabwicklungssystems (Benutzerschnittstelle, Dateninitialisierung, Integrations- und Graphiktools, Real-time Datenbank, Programmdatenbank und Software) und der Anwendungssoftware (Komplettierung und Integration der Modellkette für die atmosphärische Ausbreitung im Nah- und Fernbereich, der radioökologischen und Dosismodelle für terrestrische und hydrologische Expositionspfade, der Simulationsmodelle für Katastrophenschutz- und Strahlenschutzvorsorgemaßnahmen sowie der Modelle zur Abschätzung von gesundheitlichen und monetären Konsequenzen). Ein wesentlicher Teil der Arbeiten bezog sich auf den Einbau der Anwendungssoftware der Vertragspartner und die entsprechenden Modifikationen der Benutzeroberfläche.

Insbesondere wurde system- und modellseitig der Automatikbetrieb des RODOS Systems im Notfallbetrieb im Hinblick auf die aktuelle Unfallsituation differenziert: durch Realisierung des Zeitrafferablaufs von zyklischen Modellketten ist es möglich, nachträglich Freisetzungen in der Vergangenheit zu starten bzw. zu korrigieren und mit der Istzeit zu synchronisieren.

Ein wesentlicher Teil der Arbeiten bezog sich auf die Einführung eines neuen Rechengitters, in dem die Größe der Gitterzellen mit wachsender Entfernung ansteigt. Im Automatikbetrieb überdeckt es gegenüber dem äquidistanten Gitter einen um den Faktor vier größeren Entfernungsbereich von 160 km X 160 km um den im Zentrum befindlichen Unfallort. Die Realisierung des neuen Gitters in allen RODOS Modulen wird mit der Version 4.0 Mitte 2000 abgeschlossen.

Der meteorologische Präprozessor wurde für die Verarbeitung von meteorologischen Daten mehrerer Messstationen erweitert. Zusätzlich wurden im Maßnahmensimulationsmodul die Eingreifkriterien für Katastrophenschutzmaßnahmen entsprechend den neuen „Radiologischen Grundlagen“ eingebaut.

2.1.2 Qualitätssicherung und Testprozeduren

Die Qualitätssicherung der Anwendungssoftware, insbesondere der meteorologischen Modellkette für den Nahbereich, stellt wegen der Komplexität der Einzelmodule und ihrer Interaktionen sowie der Vielzahl beteiligter externer Institutionen besondere Anforderungen. Zu diesem Zweck wurde eine spezielle Protokollsoftware geschrieben, die die Kenngrößen des meteorologischen Präprozessors in allen Betriebsweisen aufzeichnet und die Berechnungen des Ausbreitungsmodells in kondensierter Form speichert. Die Überprüfung des gesamten Programmablaufs anhand der so protokollierten Kenngrößen erleichtert die Fehlersuche durch die verantwortlichen Entwickler. Des Weiteren wurde ein Dokument erstellt, das die Behandlung von Ausnahmezuständen einheitlich für alle RODOS Anwendungsprogramme regelt. Die ergriffenen Maßnahmen zur Qualitätssicherung wurden in einem Bericht beschrieben.

Das Testkonzept und die Testprozeduren zur Überprüfung der vollen Funktionalität des RODOS Systems bei Installationen in Notfallschutzzentralen wurden erstellt und erfolgreich angewandt.

2.1.3 Benutzerkategorien

Beim zukünftigen operationellen Betrieb des RODOS Systems werden drei Benutzer-Kategorien A bis C unterschieden. Sie werden im folgenden kurz beschrieben. Die schematische Darstellung der möglichen Interaktionen zwischen zentral installierten RODOS Systemen (RODOS Zentralen) und Benutzern zeigt Abb.2.

Kategorie A

Die Benutzer der Kategorie A greifen direkt auf das RODOS System über X-Terminals (Klienten) zu, die über ISDN mit der RODOS Zentrale verbunden sind. Über die Terminals sind alle RODOS Funktionalitäten auf- bzw. abrufbar. Hierzu gehören insbesondere Starten, Betreiben und Beenden von RODOS - Sitzungen im Normalbetrieb, bei Notfällen und bei Katastrophenschutz- bzw. Strahlenschutzvorsorgeübungen.

Dem Benutzer wird die Möglichkeit geboten, selbst einlaufende Informationen, wie z.B. Daten zur Radionuklidfreisetzung oder Entscheidungen über Maßnahmen, in das RODOS System einzugeben und - parallel zum Automatikbetrieb von RODOS - Rechenläufe zu speziellen Fragestellungen durchzuführen. Die interaktive Kommunikation erfolgt über die RODOS Benutzeroberfläche, die auf Wunsch an die vom Benutzer gewünschten Funktionalitäten angepaßt werden kann. Umfang und Art der Ergebnisdarstellung in graphischer oder alphanumerischer Form wird vom Benutzer festgelegt.

Kategorie B

Standardmäßig erfolgt die Kommunikation zwischen Benutzern der Kategorie B und dem RODOS System über den File -Transfer von Aufträgen und Ergebnissen. Basierend auf den WWW Software-Techniken wird hierzu eine spezielle Benutzeroberfläche (Bedienmasken) unter Benutzung von HTML und Java entwickelt, eine Prototypversion liegt bereits vor. In der RODOS Zentrale wird ein WWW Server implementiert, der Benutzer benötigt einen Rechner mit WWW Browser und graphikfähigem Terminal, die über ein Weitverkehrsnetz mit der RODOS Zentrale verbunden sind.

Die Zugriffsart der Kategorie B erlaubt den Abruf von graphischen und alphanumerischen Standardinformationen in vorbereiteter und mit dem Benutzer abgestimmter Form. Das vereinbarte Ergebnisspektrum (Standardinformationen) wird vom System automatisch zur Verfügung gestellt. Es kann vom Benutzer nach Bedarf abgerufen werden.

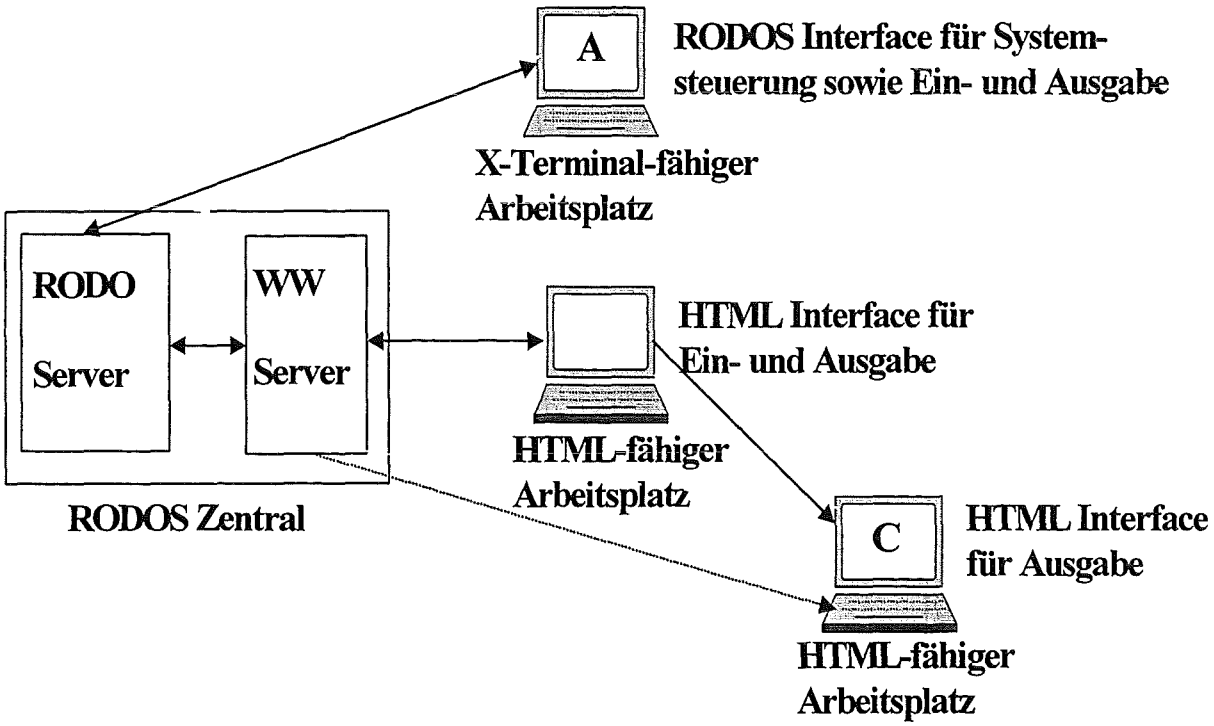


Abb. 2 Vernetzung zwischen RODOS Zentrale und Benutzern der Kategorien A, B, C

Ergänzend zur beschriebenen Standardform des Informationsaustauschs zwischen RODOS Zentrale und Benutzer besteht die Möglichkeit, Aufträge und Ergebnisse über E-mail oder telefonisch zu übermitteln. Auf die gleiche Weise werden Eingangsparameter und Ergebnisse von Übungsszenarien übertragen.

Der Betrieb von RODOS, insbesondere das Starten, Betreiben und Beenden von RODOS - Sitzungen im Normalbetrieb, bei Notfällen und bei Katastrophenschutz- bzw. Strahlenschutzvorsorgeübungen, wird in der RODOS Zentrale kontrolliert. Ebenso werden alle zum Betrieb des RODOS Systems in der aktuellen Situation notwendigen Daten vom Benutzer oder von ihm beauftragten Institutionen an die RODOS Zentrale übermittelt und dort eingespeist. Ein direkter Zugriff des Benutzers im Dialogbetrieb zum RODOS System besteht nicht.

Kategorie C

Benutzer ohne direkte (Kategorie A) oder indirekte (Kategorie B) Zugriffsmöglichkeiten auf das RODOS System können unter den genannten hardware- und softwaretechnischen Voraussetzungen - ähnlich der B-Benutzer - bereitgestellte Ergebnisse (Standardinformationen) in Form von HTML- Ergebnisfenstern abrufen. Allerdings bedarf es hierzu der Freigabe dieser Ergebnisse durch den jeweils federführenden Benutzer. Benutzer der Kategorie C werden von den zugriffsberechtigten Benutzern der Bundesländer und des Bundes festgelegt.

Trainingskurse

Der gemeinsam von von EdF(F), IPSN (F) und ECN (NL) entwickelte Trainingskurs für Fachberater Strahlenschutz „Computer-Based Training Course on Decision Support for Off-Site Emergency Management in the Later Phases of a Nuclear Accident" wurde in der Zeit vom 12. Bis 16. April 1999 im FTU durchgeführt. Das IKET war intensiv an der Ausarbeitung und Durchführung des praktischen Kursteils beteiligt, der etwa die Hälfte der Kurszeit einnahm und bei dem das ROSOS System zur Ermittlung der radiologischen Lage eingesetzt wurde.

2.2 Installation von RODOS zum operationellen Betrieb in Notfallschutzzentralen

Installation von RODOS in der Bundesrepublik Deutschland

Im Rahmen des BMU - Vorhabens St.Sch. 4168 wird das RODOS System in den Jahren 1998 bis 2000 zum operationellen Betrieb durch den Bund und die Länder an zentraler Stelle vorbereitet. In der projektbegleitenden „Arbeitsgruppe RODOS/RESY", bestehend

aus Vertretern des Bundes, der Länder und des IKET, wurde das Gesamtkonzept der Nutzung von RODOS zwischen allen Beteiligten abgestimmt. Insgesamt werden 10 Nutzer (die Einsatzzentralen von 7 Bundesländern, des BMU und des BfS sowie der DWD) auf das System zugreifen. Mit der Installation der Hardware und Software zum Testbetrieb im IKET wurde begonnen. Zusätzliche Anforderungen an die Benutzeroberfläche und die Funktionalität von RODOS wurden bzw. werden derzeit in Form von ergänzenden Software - Entwicklungen oder - Modifikationen realisiert.

Installation von RODOS in europäischen Ländern

Die Ausschreibung zur Installation von RODOS in Polen und der Slowakischen Republik wurde in Zusammenarbeit mit EVM durchgeführt und ausgewertet. Inzwischen sind die Hardware- und Softwarekomponenten in den genannten Ländern installiert und das RODOS System durch IKET installiert. Die Netzwerkanbindung erfolgt Anfang 2000, die Übergabe ist für Ende Mai 2000 geplant. Die Ausschreibungen und Vertragsverhandlungen zur Installation von RODOS in der Ukraine und in Ungarn wurden vom IKET unterstützt; mit Vertragsbeginn ist Anfang 2000 zu rechnen.

3 Referenzen

Raskob, W.
Present Status of UFOTRI for Assessing the Off-Site Consequences of Accidentally Released Tritium
PRITT-99, International Workshop, Sarov, Russland, 17. - 21.5.99

Goossens, L.H.J.; Wakeford, R.; Little, M.; Muirhead, C.; Hasemann, I.; Jones, J.A.
Probabilistic Accident Consequence Uncertainty Analysis of the Late Health Effects Module in the COSYMA Package
Beitrag in Radiation Protection Dosimetry
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), 21. - 24.6.99, Avifauna, Niederlande

Ehrhardt, J.; Jones, A.; Goossens, L.
Probabilistic Accident Consequence Uncertainty Analysis of the Whole Program Package COSYMA
Beitrag in Radiation Protection Dosimetry
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), 21. - 24.6.99, Avifauna, Niederlande

Päsler-Sauer, J.; Jones, A.
Probabilistic Accident Consequence Uncertainty Analysis of the Atmospheric Dispersion and Deposition Module in the COSYMA Package
Beitrag in Radiation Protection Dosimetry
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), 21. - 24.6.99, Avifauna, Niederlande

Fischer, F.; Hasemann, I.; Jones, J.A.
Techniques Applied in the COSYMA Accident Consequence Uncertainty Analyses
Beitrag in Radiation Protection Dosimetry
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), 21. - 24.6.99, Avifauna, Niederlande

Raskob, W.
Are the Present Maximum Permissible Activity Concentration Levels in Feed- and Food-stuffs Appropriate for the Tritium
FZK- interner Bericht

Ehrhardt, J.; Rafat, M.; Schüle, O.
Konzept zur Errichtung und den Betrieb des RODOS Systems an zentraler Stelle (RODOS Zentrale)
FZK-interner Bericht

Ehrhardt, J.; Weis, A.
RODOS: Decision Support System for Off-Site Nuclear Emergency Management in Europe - Final report of the RODOS project (1996 – 1999)
EUR-Bericht 19144

32.21.10 Beteiligung am PHEBUS-Projekt

Theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse

(W. Sengpiel, W.Hering, IRS)

Abstract

After the completion of the bundle degradation experiments PHEBUS FPT0 and FPT1 performed by IPSN/Cadarache in international cooperation which have been subject of detailed analyses by FZK/IRS for code validation in the frame of PWR core meltdown studies, pre-test calculations for the experiment PHEBUS FPT4 have been done with the code ICARE2. FPT4 has been performed in July 1999 to investigate the transition from porous debris to the formation of a molten pool and its spread through the debris bed.

First results of pre-test calculations are shown in terms of temperature and molten mass evolution. These results are preliminary because of significant differences between the power history pre-defined in the test protocol (and considered for the pre-test calculations) and that actually operated in the test. However, these results indicate that the calculations with ICARE2 meet the test goals in a very satisfactory way. Updating of input data according to the actual experimental conditions for the ongoing test analyses with ICARE2 is finished and new calculations are underway.

1. Einleitung

Die Experimente im Rahmen des PHEBUS FP – Programmes, das in internationaler Zusammenarbeit unter Leitung von IPSN in Cadarache durchgeführt wird /1/, liefern neben umfangreichen Daten zum Spaltproduktverhalten in Primärsystem und Containment in der späten Phase eines Kernschmelzunfalles eines LWR auch wichtige experimentelle Informationen über thermo-mechanische und physiko-chemische Prozesse des Brennstabversagens und der Marterialumverteilungen im Reaktorcore. Letztere Aspekte werden im Rahmen von Experimentanalysen am IRS verfolgt, um die Erkenntnisse aus den PHEBUS-Experimenten auf den Reaktorfall zu übertragen und die für Reaktorunfallanalysen eingesetzten Rechenprogramme SCDAP/RELAP5 und ICARE2 zu validieren (s. 32.21.08 Untersuchungen zur Kernzerstörung/ Analysen zum Ablauf kernzerstörender Unfälle).

Drei von sechs geplanten Experimenten sind bereits durchgeführt worden, über die Analysen zu FPT0 und FPT1 ist berichtet worden /2/, /3/. Das Experiment FPT4 fand im Juli 1999 statt und unterschied sich von den beiden vorangegangenen Bündelexperimenten dadurch, dass – ausgehend von einem Schüttbett aus UO_2- und ZRO_2-Partikeln – der Übergang vom porösen Schüttbett zum Schmelzepool untersucht worden ist. Für die Rechnungen zu FPT4 ist das Rechenprogramm ICARE2 eingesetzt worden. Über erste vorläufige Ergebnisse, die im Rahmen von Vorausrechnungen erzielt worden sind, wird im folgenden berichtet. Die Erstellung des Eingabedatensatzes stützte sich ab auf bei FZK/IRS verfügbare Berichte von IPSN über Experiment-Vorausrechnungen sowie auf das FPT4-Testprotokoll; diese Dokumente sind nur sehr eingeschränkt verfügbar und werden deshalb hier nicht genauer gekennzeichnet.

2. Rechnungen zum Experiment PHEBUS FPT4

Das Schüttbett befindet sich in einem zylindrischen Behälter aus Zry mit einem Innen-Durchmesser von 68 mm und einer Höhe von 360 mm. Das Schüttbett ist unterteilt in ein passives Bett aus abgereicherten UO_2-Partikeln (0 bis 120 mm) und ein aktives Bett aus Partikeln von abgebranntem UO_2 (33 GWd/tU) und ZrO_2 (120 bis 360 mm). Die Partikelgrößen liegen zwischen 2 und 5 mm. Umgeben ist dieser Testbehälter von einem wärmeisolierendem Shroud aus verschiedenen Keramikmaterialien. Die Abb. 1 zeigt schematisch die geometrische Anordnung und die Materialverteilung, wie sie im Eingabedatensatz definiert sind.

Der Verlauf der Schüttbetttemperaturen wird durch nukleare Leistung sowie die vom Schüttbettboden zugeführten Dampf- und Wasserstoffmassenströme bestimmt. In Abb. 2 sind die zeitlichen Verläufe von Leistung sowie Massenströmen angegeben wie in den Experiment-Vorausanalysen bestimmt und im Testprotokoll vor dem Versuch festgelegt; der davon abweichende tatsächliche Leistungsverlauf während des Versuches ist zusätzlich in Abb. 2 gezeigt.

In Abb. 3 sind Temperaturverläufe der Vorausanalysen mit den während des Experiments gemessen Temperaturen an axialen Positionen 50mm, 153 mm, 193 mm und

322 mm verglichen. Deutlich zu erkennen ist, dass die Temperaturen im unteren Schüttbettbereich (50 mm und 153 mm) in den Rechnungen unterschätzt werden und dass der abweichende Leistungsverlauf im Experiment (s. Abb. 2) von ca. 12000 s an generell zu höheren Temperaturen führt und zur Beendigung des Experiments früher als vorgesehen bei 15525 s nach Versuchsbeginn.

Abb. 4 zeigt in Form von Bereichen gleicher Volumenanteile fester und schmelzflüssiger Massen die Entwicklung und Ausbreitung des Schmelzepools wie in den Vorausanalysen ermittelt. Lokales Schmelzen mit Verlagerung und Schmelzepoolbildung beginnt bei 15500 s (s. berechnete Temperaturen in Abb. 3) und führt bei 18000 s zu einer schmelzflüssigen Masse von ca. 2.5 kg wie im Experiment vorgesehen.

Rechnungen mit ICARE2 für FPT4, die die aktuellen Versuchsbedingungen berücksichtigen, sind in Vorbereitung. Der Vergleich von experimentellen Daten mit den Rechenergebnissen dient der Validierung der Modelle, die den Übergang vom porösen Schüttbett zum Schmelzepool und die Ausbreitung des Schmelzepools beschreiben: *Wärmetransport im Schüttbett (Leitung, Strahlung, Konvektion), Liquidus-/ Solidstemperaturen des Systems (U,Zr)O_2, Schmelzebewegung durch poröse Strukturen, Wärmeübergang Schmelzepool-Shroud.*

3. Literatur

[1] M. Schwarz, G. Hache, P. von der Hardt, "PHEBUS FP: a severe accident research programme for current and advanced light water reactors", Nucl.Eng.Design 187(1), 1999, pp. 47-69

[2] S.-O. Smit, W. Sengpiel, W. Hering, "Investigation of the Phebus FPT0 bundle degradation with SCDAP/RELAP5", FZK 6083, April 1998

[3] S.-O. Smit, "Investigation of the Phebus FPT1 bundle degradation experiment with SCDAP/RELAP5", FZKA 6294, to be published in June 2000

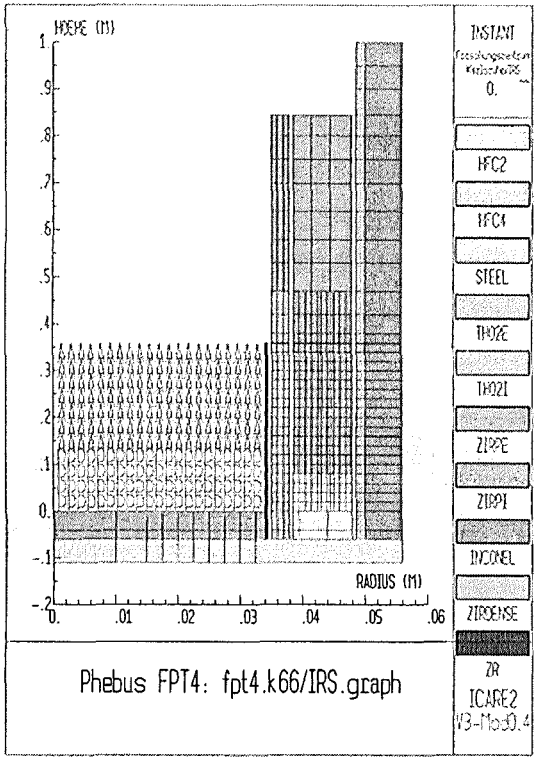


Abb.1: Schema der Nodalisierung und der Materialverteilungen für die Experimentanalysen des Versuchs PHEBUS FPT4 mit ICARE2 (A, P aktive bzw. passive Schüttbettbereiche)

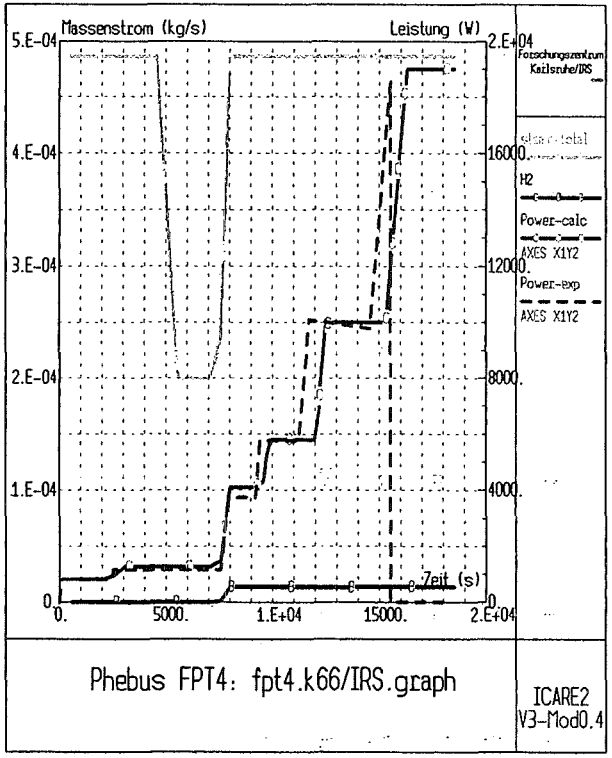


Abb. 2: Nominelle und aktuelle zeitliche Verläufe der Leistung im FPT4-Schüttbett und –Schmelzepool sowie Dampf- und H_2-Massenströme am Testbetteintritt

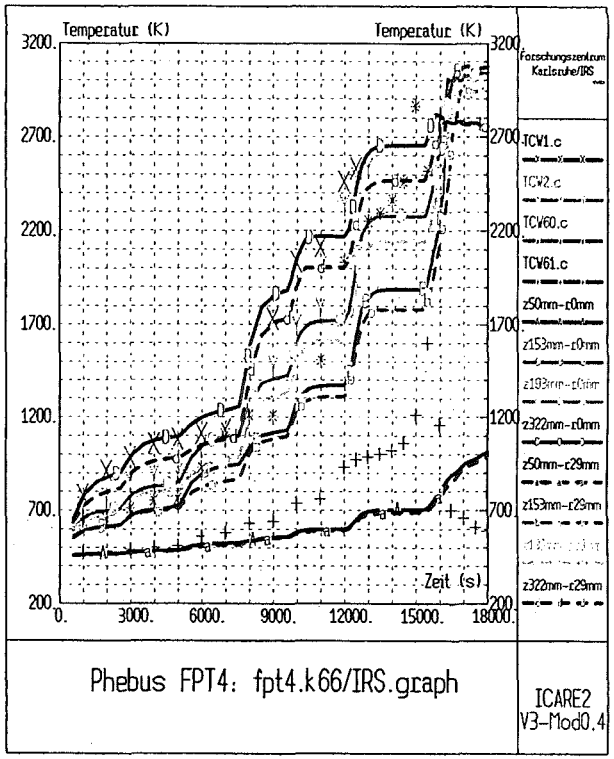
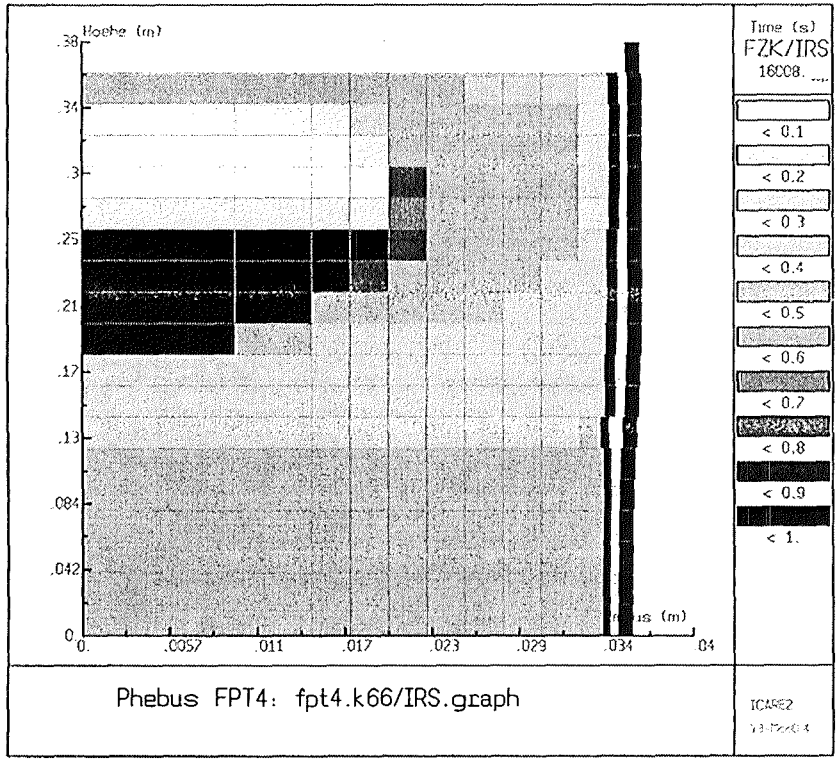
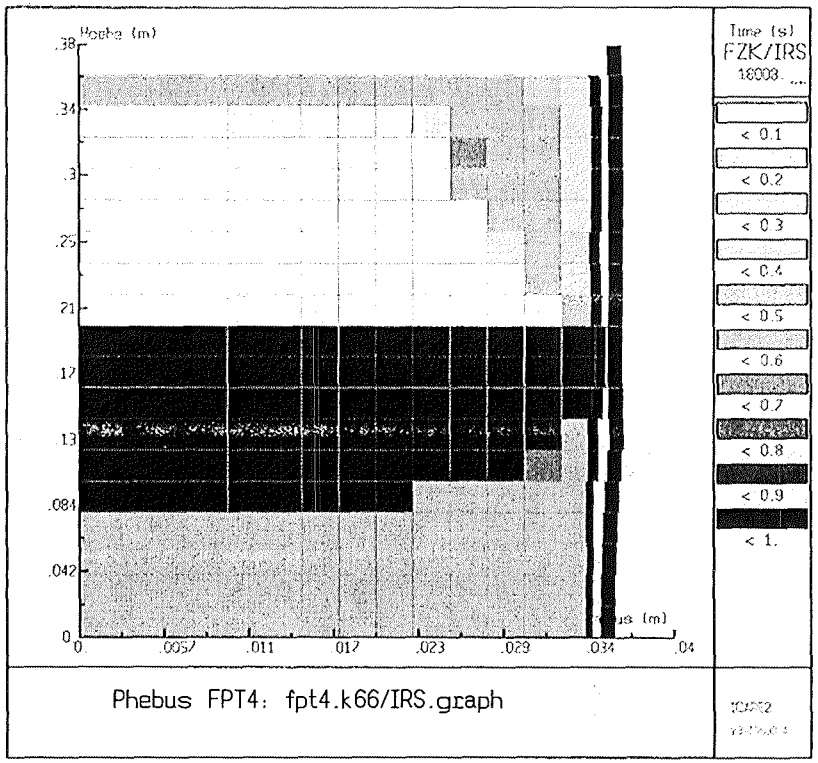


Abb. 3: Entwicklung der Temperaturen im FPT4-Testbett: Vergleich der Ergebnisse von Vorausrechnungen mit experimentellen Daten (TCW) an den axialen Positionen 50 mm, (passiver Schüttbettbereich) , 153 mm, 193 mm und 322 mm bei r=0 und r=29 mm



(a)



(b)

Abb. 4: Schema der berechneten Schmelzepoolentwicklung (a: 16008 s, b: 18008 s) mittels der räumlichen Verteilung der volumetrischen Anteile fester und flüssiger Massen (1: Porosität 0, 0: Porosität 1)

32.21.11 Untersuchungen zur Reaktor- und Anlagendynamik

I. Investigations on Reactor and Plant Dynamics

(D. C. Cacuci, M. Ionescu-Bujor, W. Hering, V. H. Sanchez, IRS)

Abstract

At the Institute for Reactor Safety (IRS) of the Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) the thermohydraulic code system RELAP5 has been extended to allow sensitivity studies for large and rather complex systems. The Adjoint Sensitivity Analysis Procedure (ASAP) was implemented and tested successfully in the single- and two-phase regime. The OECD Main Steam Line Break (MSLB) Benchmark was finished successfully in close co-operation with Siemens/Power division. A feasibility study was performed to extend the one-dimensional thermohydraulics in RELAP5 by a 3-D model to simulate mixture phenomena in large cavities.

Zusammenfassung

Am Institut für Reaktorsicherheit (IRS) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) wurde das Thermohydraulikprogramm RELAP5 erweitert, um Sensitivitätsanalysen für umfangreiche und komplexe Systeme durchführen zu können. Hierzu wurde die Adjoint Sensitivity Analysis Procedure (ASAP) in RELAP5 eingebaut und im ein- und zweiphasigen Bereich erfolgreich getestet. Die Teilnahme am OECD „Main Steam Line Break" (MSLB) Benchmark wurde in Kooperation mit Siemens, Bereich Energieerzeugung, mit dem gekoppelten Programmpaket RELAP/PANBOX/COBRA erfolgreich abgeschlossen. Ferner wurde eine Studie über die Erweiterbarkeit der eindimensionalen RELAP5 Thermohydraulik um ein 3D-Modell zur Beschreibung von Mischungsvorgängen in großen Hohlräumen erstellt.

1.1 Status of Implementation of Adjoint Sensitivity Method into RELAP5

As is well known, the RELAP5/MOD3.2 code simulates the thermal-hydraulic characteristics of Light Water Reactors (LWR's) by using a two-fluid model together with conservation equations for boron concentration and non-condensable gases. A significant advancement in the numerical simulation and analysis of light-water reactor

(LWR) plant transients has been achieved through the coupling of the RELAP5/MOD3.2 code to the PANBOX code (which solves the diffusion-theory-based neutron kinetics equations in three-, one-, or zero-dimensions) and to the COBRA code (which computes the flow enthalpy in the sub-channels of rod bundles for boiling and non-boiling conditions by including the effects of cross-flow mixing).

The implementation of efficient methods to analyse the sensitivity of results (responses) calculated with the RELAP/PANBOX/COBRA (R/P/C) code system to the numerous uncertain experimental parameters that are employed in this code would represent a major development towards a detailed and comprehensive analysis of plant transients and postulated accident scenarios. The objective of local sensitivity analysis is to derive the sensitivities of important results (customarily called responses) calculated by the code to all parameters in the respective code. Once they are available, the sensitivities are used to analyse the behaviour of the respective response when the parameters are varied locally around their base-case values, to rank the parameters according to their importance in contributing to the response, and to calculate the uncertainties in the response caused by uncertainties in the parameters.

RELAP5/MOD3.2 solves the so-called "Numerically Convenient Set of Differential Equations" (REL/CDE), which are obtained from the basic differential equations that underlie the non-homogeneous, non-equilibrium, one-dimensional two-fluid model. The REL/CDE are discretized using a complex staggered-mesh in the spatial direction, using RELAP5 "volumes" and "junctions", and either a one-step ("nearly-implicit") or a two-step ("semi-implicit") discretization procedure in time, which yields a set of nonlinear algebraic equations. The *Adjoint Sensitivity Analysis Procedure (ASAP) for nonlinear systems* has been applied to both the Differential REL/CDE and the Discretized REL/CDE /1/, /2/. The motivation for using the Discretized REL/CDE comes from the very complex geometry modelled by the RELAP5 code, which requires a correspondingly complex discretization procedure. The implementation of the ASAP leads to the derivation of (i) the Differential Adjoint Sensitivity Model (ASM-REL/TF), which comprises nine coupled differential equations that are *linear in the adjoint function,* and (ii) the Discrete ASM-REL/TF, which comprises thirteen coupled sets of *linear algebraic equations*.

The following fundamental characteristics of the ASAP are highlighted during its implementation in RELAP5/MOD3.2:

(a) the adjoint functions are independent of parameter variations;

(b) the adjoint functions must be calculated anew for every response;

(c) the ASM-REL/TF is linear in the adjoint function and may be solved by methods that are, in principle, independent of those used to solve the original, nonlinear equations; and

(d) the adjoint functions depend (nonlinearly, in general) on the base-case solution, which must therefore be available prior to solving the ASM-REL/TF.

In view of the numerous parameters in RELAP5/MOD3.2, it is important to note that the *ASAP is the only practical way to perform a complete and systematic sensitivity analysis* of reactor plant transients calculated with this code.

The fundamentally important aspect of *consistency between the differential and the corresponding discretized equations used for sensitivity analysis* has also been highlighted. The indispensable a priori assumption must be that the original systems of differential equations (in this case, the REL/CDE) is discretized consistently (in RELAP5/MOD3.2); otherwise, the base-case solution could not be calculated correctly. Starting from this indispensable assumption, it is noted that the following consistency correspondences must be assured: (i) the Discretized Forward Sensitivity Model (FSM) must be consistent with the Differential FSM, if the FSAP is used; (ii) the Discretized Adjoint Sensitivity Model (ASM) must be consistent with the Differential ASM, if the ASAP is used; and (iii) the Discretized (representation of the) Response Sensitivity must be consistent with the Integral (representation of the) Response Sensitivity both for the FSAP and for the ASAP, in which the Integral and the Discretized Response Sensitivity are represented in terms of adjoint functions.

Table 1.1 "Two-Loops With Pumps" – liquid-phase: influence of perturbations in the initial pressure in volume 301 (adjacent to the pump) on the pressure in same volume.

Perturbation	Transient Duration / No. of time steps	Nominal Value (N/m^2)	P_{pred}-P^o	P_{recal}-P^o
1% of the initial pressure	0.05 sec. / 5 t.s.	1.56259E+7	7391.4	7400
	0.2 sec. / 20 t.s.	1.56259E+7	7391.5	7400
	0.5. sec. / 52 t.s.	1.56263E+7	7391.5	7300
	5. sec. / 144 t.s.	1.56549E+7	7392.0	7400
	20. sec. / 294 t.s.	1.73607E+7	7440.8	7500
5% of the initial pressure	0.05 sec. / 5 t.s.	1.56259E+7	36957	36600
	0.2 sec. / 20 t.s.	1.56259E+7	36958	36600
	0.5. sec. / 52 t.s.	1.56263E+7	36958	36600
	5. sec. / 144 t.s.	1.56549E+7	36960	36600
	20. sec. / 294 t.s.	1.73607E+7	37204	36900
10% of the initial pressure	0.05 sec. / 5 t.s.	1.56259E+7	73914	72400
	0.2 sec. / 20 t.s.	1.56259E+7	73915	72500
	0.5. sec. / 52 t.s.	1.56263E+7	73915	72400
	5. sec. / 144 t.s.	1.56549E+7	73920	72300
	20. sec. / 294 t.s.	1.73607E+7	74408	73000

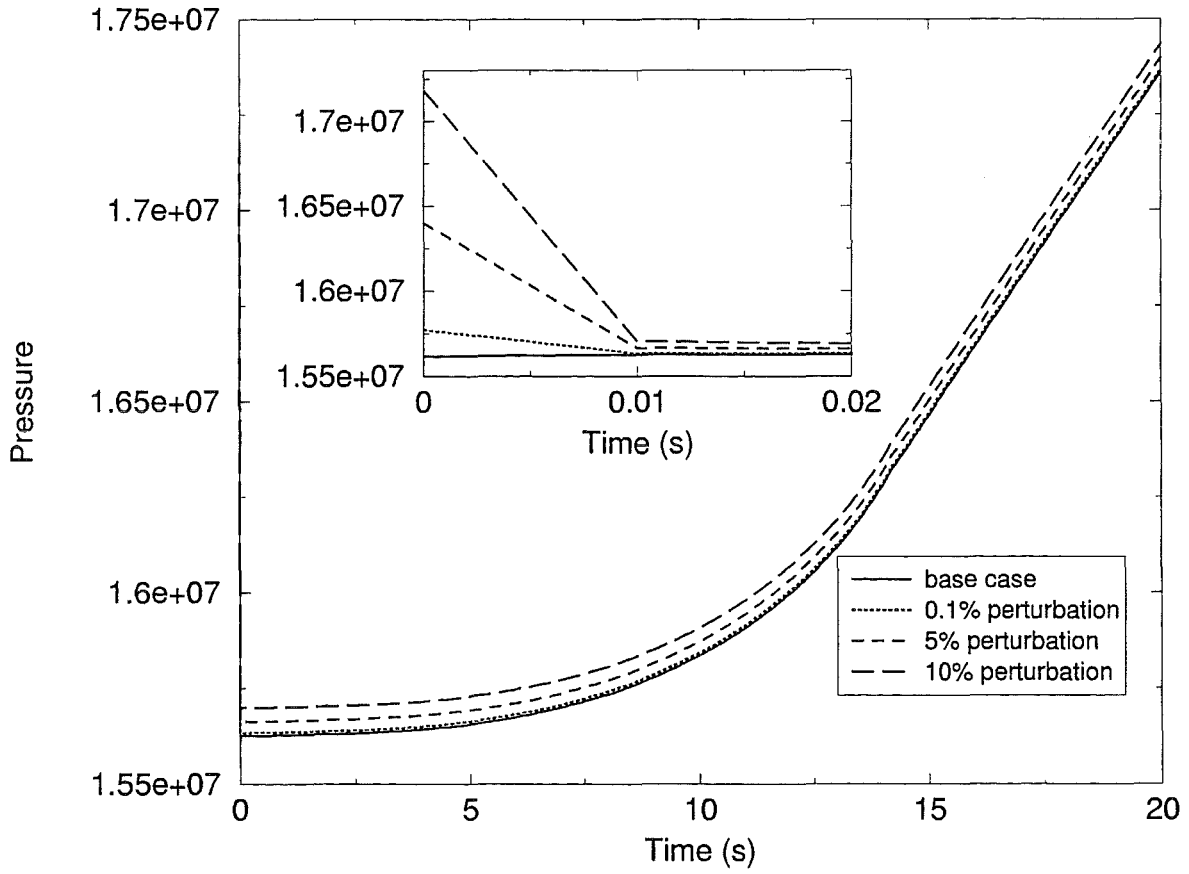


Figure 1.1 "Two-Loops With Pumps" – liquid-phase: influence of perturbations in the initial pressure in volume 301 (adjacent to the pump) on the pressure in same volume.

Typical results that illustrate the verification of the numerical solution of the ASM-REL/TF have also been obtained. Actually verification has been performed for several sample problems that involve, respectively: (i) the liquid-phase only, (ii) the gas-phase only, and (iii) two-phase flow.

The "Two-Loops with Pumps" and the "Edwards Pipe" sample problems supplied with RELAP5/MOD3.2 have been used for this purpose. Illustrative results are presented in the Figure 1.1 and Table 1.1 for the "Two Loops with Pumps" Problem, which depict the influence of perturbations in the initial pressure in the volume adjacent to the pump on the pressure in the same volume at subsequent time steps.

1.2 Status of participation in OECD Main Steam Line Break (MSLB) with the Code System RELAP5/PANBOX

The main objective of the OECD/NEA MSLB-Benchmark is to evaluate the prediction capability of advanced code systems in cases with both strong interaction between the neutron kinetic (NK) and thermal hydraulic (TH) and significant spatial power distortion /1/.

The postulated MSLB-transient of the two-loop PWR TMI-1 plant was chosen as the reference scenario for the code-to-code-comparison. Each loop consists of a "Once-Through" steam generator (SG) and two steam lines, which are connected to each other by a cross-connection line.

It is assumed that a double-ended break of one main steam line (MSL) occurs when the reactor is operated at the End-of-Cycle (EOC) with nominal power of 2773 MW_e. Additional assumptions were made according to the US-licensing criteria leading to a maximization of the heat transfer over the broken SG from the primary to the secondary circuit. The assumption that the stuck-rod remains outside the core when SCRAM is activated additionally increase the strong non-symmetrical power distribution within the core.

After MSL break opening the very high heat removal rate by the affected SG leads to a lower core entrance temperature and hence to a higher water density compared to the other half of the core corresponding to the intact SG. Due to the negative moderator and doppler reactivity coefficients a large amount of positive reactivity is being added to the

core after SCRAM. To realistically evaluate such asymmetrical thermal behavior of the core with strong power distortion a multi-dimensional core analysis is imperative.

In the frame of the OECD MSLB-Benchmark following phases were defined:

(1) TMI-1 plant simulation using best-estimate codes like RETRAN, CATHARE, ATHLET, RELAP5, etc. with the point kinetics (PK) option;

(2) 3D core simulation by given initial and boundary conditions at the core inlet and outlet with codes like QUABOX-CUBBOX, SIMTRAN, PANBOX, DYN3D, PARCS, etc.

(3) 3D plant simulation using coupled code systems like RELAP5/PANBOX, ATHLET/ QUABOX-CUBBOX, ATHLET/DYN3D, RELAP5/PARCS, etc.

FZK/IRS is participating in cooperation with SIEMENS/KWU on the MSLB-Benchmark with the codes RELAP5/3.2 (1), PANBOX (2) and the coupled version PANBOX/RELAP5 (3) /2/.

The phase 1 and 2 are already completed and the final reports will be published next by the OECD/NEA. Based on the developed input decks for phase 1 and 2 a full plant model for TMI-1 was elaborated to analyze the phase 3 /3/. In this model the core TH is represented by 19 parallel coolant channels, 9 channels each core half (intact/broken) and one coarse channel. In PANBOX (NK part) each fuel assembly is represented separately and mapped to the TH-channels.

To fully test the 3D-NK and 1D-TH coupling two cases were defined for phase 3: (1)best-estimate case (BE) corresponds to present regulatory licensing practice and (2) return-to-power case (RP) where the stuck-rod/scram worth was reduced up to 57/67 % to make a return to power after SCRAM more likely within investigated transient time of 100 s.

Both cases were calculated with the RELAP5 /PANBOX code system using the same plant nodalization as for phase 1 (PK). A comparison of the results obtained for the phase 1 and phase 3 given in the Figure 1 and 2 shows the following: (1) a very small return to power and no re-criticality (-1.33$ sub-critical) are predicted for the BE-calculation; (2) a pronounced return to power and re-criticality at about 61 s in the transient is predicted for the RP-calculation. This is only possible due to artificial reduction of stuck-rod/scram worth. In Figure 1 and 2 reactor power and total reactivity predicted by RELAP5 with the PK-option are included, too. In this case the largest return

to power is predicted since the reactivity feedback mechanisms are over-estimated by the PK-approach, e.g. due to the use of fixed relative axial power profiles during the whole transient progression.

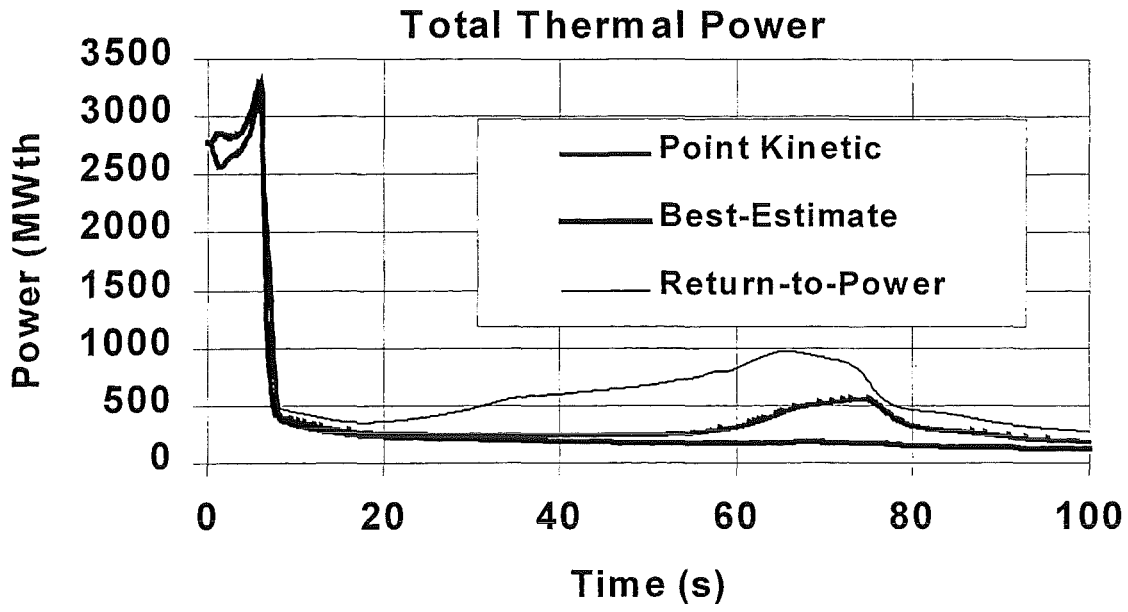


Figure 1.2 Comparison of total thermal power predicted with the point kinetics and 3D-kinetics approach (phase 1 and phase 3)

At the end it can be concluded that the best-estimate code system RELAP5/PANBOX2 is able to simulate transients with strong TH-NK interactions and considerable asymmetric spatial core power distribution. It was demonstrated that the use of 3D-kinetics instead of the PK-approach is beneficial because it allows a more reliably assessment of safety margins and the prediction of local hot spots. Also the need for combined TH-NK calculations becomes obvious.

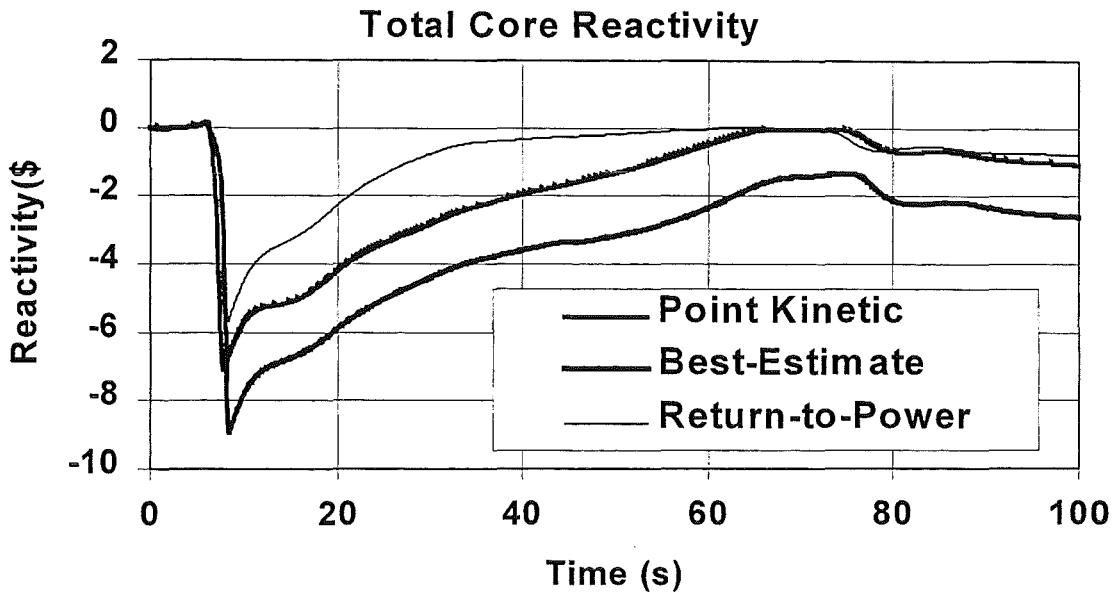


Figure 1.3 Comparison of total reactivity predicted with the point kinetics and 3D-kinetics approach (phase 1 and phase 3)

1.3 Code merging options for RELAP5

In the RELAP5 code the thermohydraulic models are only one dimensional, associated with pipe flow. In case of multidimensional flows occurring in large cavities, plena or in the core, one dimensional solutions can give no information on fluid mixture conditions. Even the so-called cross-flow option in RELAP5 is not sufficient. Also the COBRA module of the R/C/P code system (section 1.2) is not applicable of larger volumes because the direction of flow is predetermined.

Therefore, a survey study was performed /6/ to identify coupling issues of RELAP and to look for 1D-3D code systems already performed. Moreover, the possibility of a parallel operation was taken into account especially for long and complex problems as well as merging of the ASAP (section 1.1). The main result of this study is that for convergence and stability reasons the pressure equation has to be solved by one (TH) code alone. Also parallel operation between TH and 3D-NK is feasible if only source/sink terms have to be exchanged. Actually PANBOX has been tested as a parallel version /7/ so that this approach seems to be realisable with sufficient manpower.

1.4 Literature

/1/ Cacuci, D.G., Ionescu-Bujor, M., Finnemann, H., Depisch, F., Adjoint Sensitivity Analysis of Coupled Thermal-Hydraulics/Neutron Kinetics Codes: The RELAP5/PANBOX/COBRA System, M&C'99, Int. Conf. On Math. And Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, September 27-30, 1999, Vol. 1, p 503-512, Senda Editorial, Madrid, Spain, 1999.

/2/ Ionescu-Bujor, M., Cacuci, D.G., Adjoint Sensitivity Analysis of the Two-Fluid Model in RELAP5/MOD3.2, Invited Paper, M&C'99, Int. Conf. On Math. And Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, September 27-30, 1999, Vol. 1, p 745-754, Senda Editorial, Madrid, Spain, 1999.

/3/ K. N. Ivanov, T. M. Beam and A. Baratta; Pressurized Water Reactor main Steam Line Break (MSLB) Benchmark. Volume 1: Final Specifications. NEA/NSC/DOC(99)8. April 1999.

/4/ C. J. Jackson, H. Finnemann, Verification of the Coupled RELAP5/PANBOX2 System with the NEACRP LWR Core Transient Benchmark. International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses. Pp.297-306. Portland Oregon. April 30-May 4. 1995.

/5/ V. Sánchez, Ch. Homann, R. Böer, FZK/Siemens Investigations on MSLB-Phase 3 with the "Best-Estimate" Code System RELAP5/PANBOX . 16 Spring 2000 CAMP-Meeting. 17-19 April 2000. Sixily, Italy.

/6/ W. Hering, B. Dorr, L. Carteciano, Coupling RELAP5 with 3-D Thermohydraulic Codes, Internal Report.

/7/ Finnemann H., Scheichl R.: Efficiency Enhancements of Coupled RELAP5/PANBOX Calculations Using Adaptive Methods. Transactions of the American Nuclear Society for the Annual Meeting, Boston, June 1999.

II. Implementation of a concentration equation for the turbulent transport of Boron in FLUTAN

(L. N. Carteciano, IRS)

In preparation of the development and application of a coupled neutron kinetics and thermal and fluid dynamics code system for the analysis of the dynamical behaviour of nuclear power plants, FLUTAN [1,2] was chosen as one of the possible three-dimensional dynamic thermal-hydraulics codes which could be coupled to the RELAP5 or PANBOX2/RELAP5-code system [3]. One of the application fields of interest are investigations of Boron dilution transients. Therefore, a concentration equation for the turbulent transport of Boron was recently implemented in the CFD code FLUTAN.

The statistically-averaged transport equation for any species of small concentrations can be written using the tensor notation as:

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i}}_{Conv.} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_m \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \right)}_{Diff.Lam.} \underbrace{- \frac{\partial \overline{U_i' C'}}{\partial x_i}}_{Turb.} \underbrace{- kC + q}_{Source\ /\ Sink}$$

Where C [ppm] is the concentration, D_m [m^2s^{-1}] the molecular diffusivity coefficient, kC and q respectively the dependent and the independent source/sink terms (k [s^{-1}] is a coefficient). By deriving the time averaged equation, it was assumed that the source/sink term $-k_nC^n$, representing a chemical reaction of nth order, is of the first order. In case of higher order, further unknown correlations are introduced in the equation. kC can also represent the decay of a radioactive element.

The statistically averaged conservation equation still contains an unknown correlation: $\overline{U_i' C'}$, the cross-correlation between concentration and velocity fluctuations representing the turbulent transport of the concentration. In order to close the equation, this correlation has to be replaced by adequate turbulence models.

The FLUTAN Code contains a number of different turbulence models like a mixing length model, a k-equation model, and a standard k-ε model. The most reliable turbulent heat

flux modelling is given by the Turbulence Model for Buoyant Flows (TMBF) which is a combination of a first-order 2-equation model for the turbulent transport of momentum and of a second-order 5-equation model for the turbulent transport of heat [4]. The TMBF represents a compromise between the classical k-ε-σ_t model and the Reynolds stress model, but it is clearly an improvement of the k-ε-σ_t model for turbulent flows in which the turbulent transport of heat is complex, such as in buoyant flows, and in which the Reynolds analogy is not valid.

In principal, a similarly detailed turbulence model could also be implemented for the turbulent species concentration transport, but this would require four to five additional transport equations: three for the three concentration fluxes, one for the square of the concentration fluctuation, and probably one for its dissipation. Because of lack of experience with analyses of turbulent species transport it was not possible to specify in advance detailed criteria for the turbulence model to be chosen. To avoid further on excessive additional CPU-times and to keep the number of additional adaptable coefficients small, the simple and widely used Reynolds analogy is used in a first step, that means, a turbulent Schmidt number concept is implemented. This is basing on the eddy diffusivity concept. The eddy diffusivity D_t [m^2s^{-1}] is introduced in terms representing the turbulent transport of the concentration by a mean gradient approach:

$$-\overline{U_i' C'} = D_t \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i}.$$

The distribution of the turbulent diffusivity, which is assumed to be isotropic, is calculated using a relationship similar to the Kolmogorov one for the eddy viscosity in the standard k-ε model:

$$D_t = \frac{1}{\sigma_c} \frac{k^2}{\varepsilon}.$$

Here, σ_c is the turbulent Schmidt number. Now, the equation of Boron concentration can be re-written using this turbulence model as:

$$\underbrace{\frac{\partial \overline{C}}{\partial t}}_{} + \underbrace{\overline{U}_i \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i}}_{Conv.} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_m + D_t \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \right)}_{Diff.Lam.+Turb.} \underbrace{- kC + q}_{Source / Sink}$$

The equation is discretised in a structured grid using a first order time discretisation, central finite differences for the diffusive terms, and by using three different options for the discretisation method of the convective terms: first order Upwind and second order Upwind (LECUSSO and QUICK). The discretised form of this equation was implemented in FLUTAN together with the required material property data for Boron.

In order to test the implementation in FLUTAN, an isothermal flow in a T-junction was simulated in which 50 ppm of Boron were added at the axis of the inlet. The concentration fields for a laminar case (left) and for a turbulent case (right) are shown in Figure 1. For both cases the calculated concentration of Boron is symmetrically distributed in the T-junction. By analysis of these concentration fields it can be deduced that the decrease of the concentration along the horizontal axis in the flow direction is of course stronger in the calculation with turbulence model than in the laminar one. This can be explained by the additive turbulence diffusion which is introduced in the equation when the turbulence model is used. The results show qualitatively the successful implementation of the transport equation of a species in FLUTAN. A quantitative validation has later to be performed by careful benchmark exercises. This newly added feature in FLUTAN is not restricted to Boron dilution investigations, it can be used also for the transport of any other substances with small concentrations.

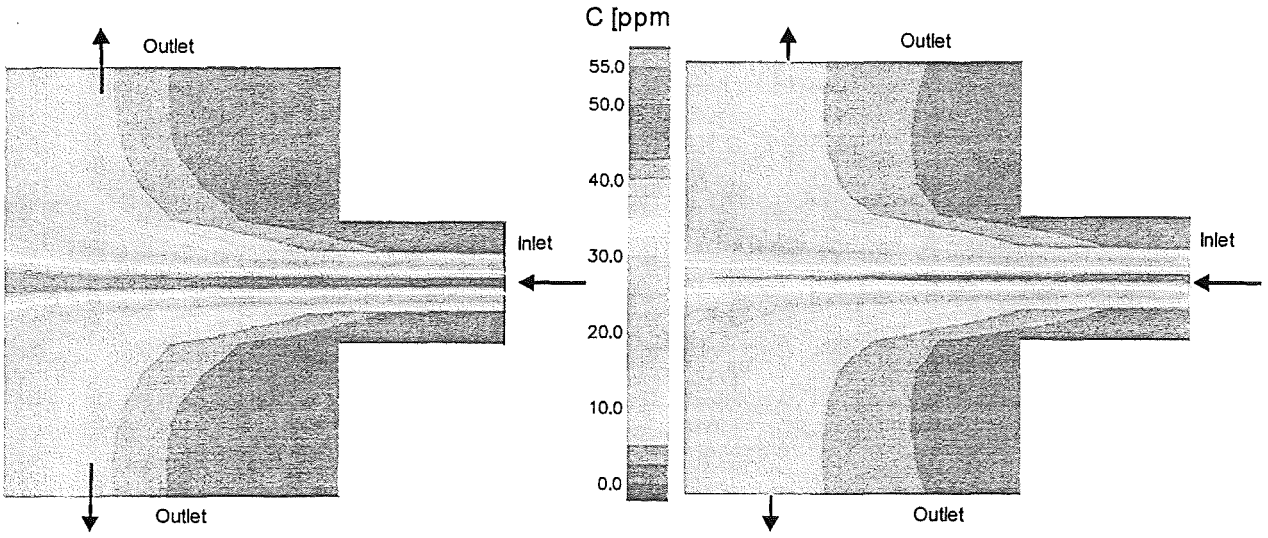


Fig. 1: Field of concentration in a T-junction flow. Laminar flow (left), turbulent flow (right).

Literatur

1 G. Willerding, W. Baumann,
FLUTAN 2.0 - Input Specifications
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5712, Mai 1996

2 G. Grötzbach, L. N. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen,
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 491 - 506

3 E. Arronskaia, L. Carteciano, R. Dagan, B. Dorr, G. Grötzbach, W. Pfrang, M. Schikorr, P. Schmidt, D. Struwe, W. Zimmerer,
Auslegungsorientierte Analysen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 688 - 690

4 Carteciano L.N., Weinberg D., Müller U.,
Development and Analysis of a turbulence Model for Buoyant Flows.
Proc. of the 4th World Conf. on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Bruxelles, Belgium, June 2-6, 1997. Vol. 3, S. 1339-46. Pisa Edition ETS.

32.22 INNOVATIVE SYSTEME

32.22.02 Passive Nachwärmeabfuhr

Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen für ingenieurtechnische Anwendungen

(G. Grötzbach, M. Wörner, IRS; M. Alef, HIK; W. Baumann, IKET)

Dieses Vorhaben diente dazu, Rechenprogramme für thermo- und fluiddynamische Analysen von Aufgaben der Nachwärmeabfuhr in innovativen Reaktorsystemen bereitzustellen. Es umfasste die Weiterentwicklung des Rechenprogramms FLUTAN für einphasige Naturkonvektion, die direkte numerische Simulation von Turbulenz mit TURBIT zur Verbesserung von Turbulenzmodellen, die Entwicklung neuer Methoden zur Beschreibung turbulenter Zweiphasenströmung in technischen Apparaturen, und die Durchführung von entsprechenden Experimenten zur Zweiphasenströmung. Das Vorhaben wurde am Ende dieses Breichtszeitraumes abgeschlossen.

Das Rechenprogramm FLUTAN wurde so weiterentwickelt, daß es für die Analyse der Nachwärmeabfuhr aus dem wassergekühlten Sumpf und von der gas- und strahlungsgekühlten Containmentschale in neu konzipierten Reaktorsystemen eingesetzt werden kann, siehe 32.21.05. Der erreichte Stand wurde dokumentiert [1, 2, 3]. Ein neuer Anwendungsbereich betrifft den dreidimensionalen Transport von Bor in Leichtwasserreaktoren, siehe 32.21.11, und die Analyse der Kühlungsmöglichkeiten in Tanks von beschleunigergetriebenen unterkritischen Anordnungen, siehe 32.23.05 und 32.23.06. Die dafür jeweils notwendige Weiterentwicklung wird unter diesen neuen Vorhaben weitergeführt. Sie betrifft besonders die Entwicklung von physikalischen Modellen zur Naturkonvektion in schweren Flüssigmetallen und die Entwicklung neuer Diskretisierungsverfahren zur Verbesserung der Effizienz des Programms.

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 wird mit Hilfe der Simulati-

onsergebnisse der Anwendungsbereich von Turbulenzmodellen auf Naturkonvektion in verschiedenen Fluiden überprüft und methodisch erweitert. Der erreichte Stand wurde dokumentiert [1, 4, 5]. Sofern Simulationen für die Entwicklung von Turbulenzmodellen für die konvektive Wärmeübertragung in schweren Flüssigmetallen notwendig werden, wird zukünftig über diese Simulationsergebnisse unter 32.23.06 berichtet.

Die Arbeiten zur Entwicklung neuer numerischer Methoden und physikalischer Modelle zur detaillierten Beschreibung instationärer dreidimensionaler turbulenter Zweiphasenströmung unter Einschluß der Topologie der Phasengrenzen wurden unter 32.22.03 fortgeführt. Der erreichte Stand wurde dokumentiert, siehe dort. Über die für die Übertragung dieser weiterentwickelten Methode in das Rechenprogramm CFX notwendigen Schritte wird zukünftig unter 32.21.11 berichtet. Die zugehörigen experimentellen Arbeiten in den Wasserkreisläufen TWOFLEX 1 und TWOFLEX 2 [6] wurden bereits seit Beginn dieses Berichtszeitraumes letzterem Vorhaben zugeordnet.

Literatur

1 L. N., Carteciano, M., Wörner, G., Grötzbach,
Erweiterte Turbulenzmodelle für technische Anwendungen von FLUTAN auf Naturkonvektion.
Jahrestagung Kerntechnik 1999, Karlsruhe, 18. - 20.5.1999, Kerntechnische Gesellschaft e.V., INFORUM Bonn 1999, S. 129 - 133

2 G. Grötzbach, L. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 491 - 506

3 W., Baumann, L.N., Carteciano, B., Dorr, G., Grötzbach,
Validierung des k-ε-σt- Turbulenzmodells im 3D Thermohydraulik-Code FLUTAN 3.0 an Turbulenzmessdaten.
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6395 (Dezember 1999)

4 M., Wörner, Q.-Y., Ye, G., Grötzbach,
Consistent modelling of fluctuating temperature-gradient-velocity-gradient correlations for natural convection.
in: "Engineering Turbulence Modelling and Experiments 4", Eds.: W. Rodi, D. Laurence, Elsevier Science B. V., 1999, pp. 165-174

5 G., Grötzbach, M., Wörner,
Direct numerical and large eddy simulations in nuclear applications.
Int. J. Heat and Fluid Flow (20) 1999, pp. 222 - 240

6 J. Aberle, W. Cherdron, G. Grötzbach, V. Heinzel, P. Philipp, H. Sauter, W. Sengpiel, M. Simon, I. Tiseanu,
Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 507 - 516

32.22.03 Entwicklung von Methoden zur Grobstruktursimulation turbulenter Zweiphasenströmungen

I. Theoretische Untersuchungen

(M. Wörner, D.G. Cacuci, B. Ghidersa, G. Grötzbach, S. Mitran, A. Müller, A. Oberhof, W. Sabisch, IRS; T. Dunker, HIK)

Zusammenfassung

Für die Direkte Numerische Simulation (DNS) von Zweiphasenströmungen wurde das Rechenprogramm TURBIT-VoF entwickelt, das auf modernen numerischen Verfahren basiert und zur Beschreibung der Dynamik der Phasengrenzfläche die Volume-of-Fluid-Methode verwendet. Die Anwendungsrechnungen für Einzelblasen unterschiedlicher Form und Aufstiegsverhaltens und für einen Schwarm von fünf Blasen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen und demonstrieren die Leistungsfähigkeit von Methode und Rechenprogramm. Die Ergebnisse solcher DNS-Rechnungen werden zukünftig in die Entwicklung von Feinstrukturmodellen einfließen, wie sie für die Grobstruktursimulation benötigt werden. Basierend auf theoretischen Untersuchungen wurden erste Ansätze für ein Feinstrukturmodell vorgeschlagen. Die Realisierung der allgemeinen Grobstruktursimulationsmethode erfolgt im Programmpaket CFX. Numerische Studien für das Testproblem einer schwingenden Manometersäule zeigen, dass eine Erweiterung von CFX um die in TURBIT-VoF realisierte Methode zur Beschreibung der Phasengrenzflächendynamik notwendig ist, da die standardmäßig in CFX dafür verfügbaren numerischen Verfahren zu ungenau sind.

1. Einleitung

Ziel dieses Vorhabens ist die Bereitstellung von numerischen Methoden und physikalischen Modellen, mit denen lokale Vorgänge in turbulenter Zweiphasenströmung unter Einbeziehung der Information über die zeitliche Entwicklung der Phasengrenze detailliert simuliert werden können. Die Arbeiten bauen zunächst auf grundlegenden Untersuchungen zu turbulenten Blasenströmungen auf. Die Ergebnisse und Erfahrungen werden verwendet, um die Methode und physikalischen Modelle mittelfristig in

anwendungsorientierten Rechenprogrammen für allgemeine Zweiphasenströmungen verfügbar zu machen.

Die neue Methode für die numerische Berechnung von Zweiphasenströmung stellt eine Erweiterung des von einphasigen Strömungen her bekannten Konzeptes der Grobstruktursimulation dar. Für den durch das Rechengitter aufgelösten Anteil erfolgt sowohl eine lokale, momentane Beschreibung der Turbulenz als auch eine detaillierte Beschreibung der Dynamik der Phasengrenzfläche mit der Volume-of-Fluid-Methode. Die Methodenentwicklung, über deren erste Schritte bereits in [1] berichtet wurde, konzentriert sich in einem ersten Schritt auf den Grenzfall eines sehr feinen Rechengitters, bei dem sowohl die kleinsten Wirbel als auch die kleinsten Blasen aufgelöst werden („DNS-RBS" = direct numerical simulation - resolved bubble simulation).

2. Rechenprogramm TURBIT-VoF

Die DNS-RBS Methode wurde im Rechenprogramm TURBIT-VoF realisiert [2]. Dabei wurde für die Rekonstruktion der Phasengrenzfläche aus der räumlichen Verteilung der diskreten Werte des Flüssigkeitsanteils in den Maschen der EPIRA-Algorithmus [2,3] entwickelt, der eine beliebig orientierte ebene Grenzfläche stets exakt rekonstruiert. Die Lösungsstrategie für die Kontinuitäts- und Impulsgleichung für inkompressible Phasen basiert auf einer Projektionsmethode. Die resultierende Poisson-Gleichung für den Druck wird mit dem auf einem CG-Verfahren basierenden Gleichungslöserpaket LINSOL der Universität Karlsruhe gelöst. Hochauflösende numerische Verfahren (3. Ordnung Runge-Kutta-Verfahren für die Zeitintegration, 3. Ordnung W-ENO Schema für die konvektiven Terme) erlauben die Anwendung auf turbulente Strömung. Die Oberflächenspannung wird mit einem erweiterten CSF-Modell beschrieben [2,4].

Die Verifizierung von TURBIT-VoF erfolgte anhand verschiedener Testprobleme für ein- und zweiphasige Strömungen [2]. So wurde gezeigt, dass für eine Blase im hydrostatischen Gleichgewicht die Druckerhöhung aufgrund der Oberflächenspannung korrekt berechnet wird. Allerdings tritt auch in TURBIT-VoF das aus der Literatur bekannte Problem der sogenannten künstlichen Strömungen auf. Dies bedeutet, dass in der Nähe der Grenzfläche einer eigentlich statischen Blase künstliche Strömungen von allerdings

kleiner Größenordnung vorhanden sind. Zur weiteren Verifizierung wurde die durch viskose Reibung gedämpfte Schwingung einer Kapillarwelle nachgerechnet. Die Ergebnisse von TURBIT-VoF zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung für die Auslenkung der Phasengrenzfläche zwischen zwei nicht mischbaren Fluiden gleicher Eigenschaften, auch für den Fall, dass die Anfangsamplitude mit nur einer Maschenweite aufgelöst wird, siehe Abb. 1. Zur Verifizierung für Strömungen mit Phasen unterschiedlicher Dichte wurde zunächst eine Schwerewelle nachgerechnet. Auch hier zeigen die Ergebnisse von TURBIT-VoF eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Als weiteres Testproblem wurde die Rayleigh-Taylor-Instabilität am Beispiel der Verformung einer anfänglich sinusförmigen Grenzfläche zwischen zwei geschichteten Fluiden unterschiedlicher Dichte berechnet, wobei sich das schwerere Fluid anfangs über dem leichteren befindet. Die zwei- und dreidimensional durchgeführten Rechnungen zeigen das typische Aufrollen der Grenzfläche und die Ausbildung einer Ablöseblase, siehe Abb. 2 für den 3D-Fall. Auch hier wird eine gute Übereinstimmung mit experimentellen und numerischen Ergebnissen aus der Literatur erzielt.

3. Rechnungen für Blasen

Die Rechnungen für Blasen [2,5,6] erfolgen für einen Plattenkanal mit periodischen Randbedingungen in Aufstiegsrichtung und in Spannweitenrichtung, siehe Abb. 3. Dies entspricht einem Feld von Blasen mit regelmäßigem Abstand. Es wurden Simulationen für vier verschiedene Kombinationen der relevanten dimensionslosen Parameter Morton-Zahl *M* und Eötvös-Zahl *Eo* durchgeführt (siehe Tabelle 1), mit

$$M = g\mu_l^4 \frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_l^2 \sigma^3} \quad , \quad Eo = \frac{g d^2 (\rho_l - \rho_g)}{\sigma}$$

(*d* = äquivalenter Blasendurchmesser, *g* = Schwerebeschleunigung, = dynamische Viskosität, = Dichte, = Oberflächenspannung; Index *l* = flüssige, Index *g* = gasförmige Phase). Zur anschaulichen Einordnung der Kennzahlen dient Abb. 4, in der die Parameter der Simulationen durch die Zahlen ① bis ④ gekennzeichnet sind. Die sich in den Simulationen ergebenden unterschiedlichen Blasenformen (sphärisch ④, ellipsoid ①, kappenförmig ②) und das Nachlaufverhalten stimmen sehr gut mit experimentellen Befunden überein. Erstmals wurde eine Simulation für eine forminstabile, oszillierende („wobbling" ③) Blase durchgeführt, die auf einer Spiralbahn aufsteigt. Die Abb. 5

verdeutlicht den turbulenten Charakter der Strömung, der durch den Aufstieg der Blase selbst verursacht wird.

Anhand einer Simulation mit fünf ellipsoiden Blasen im Rechengebiet (Gasgehalt 4%) wurde deren Wechselwirkung untersucht (siehe Abb. 6). Es wird eine Wanderung der Blasen von der Kanalmitte zur Wand aufgrund der „Lift"-Kraft beobachtet. Diese folgt aus der Relativbewegung der Blasen im Schergeschwindigkeitsfeld der Flüssigkeit, das sich aufgrund der Verdrängungswirkung der Blasen und viskoser Kräfte im Kanal ausbildet. Die zu den Wänden gerichtete „Lift"-Kraft wurde auch in den TWOFLEX Experimenten für eine aufwärts gerichtete Blasenströmung im vertikalen Rohr beobachtet [7]. Sie äußert sich dort in einem erhöhten Gasgehalt nahe der Wand. In gängigen Rechenprogrammen, die auf dem Zwei-Fluid-Modell basieren, ist die Modellierung der „Lift"-Kraft von großer Bedeutung. In der Direkten Numerischen Simulation dagegen entfällt die Notwendigkeit einer Modellierung, denn die „Lift"-Kraft ergibt sich direkt als Folge der detailliert berechneten Geschwindigkeits- und Druckverteilung um die Blase.

Die Ergebnisse belegen die Leistungsfähigkeit der Methode und ihr Potenzial zur Erweiterung des physikalischen Verständnisses. Darüber hinaus liegt der besondere Wert der DNS in der Bereitstellung einer konsistenten Datenbasis mit hoher räumlich-zeitlicher Auflösung, die für zukünftige Entwicklungen verbesserter Modelle und deren Umsetzung in technisch anwendbare Rechenprogramme dienen kann.

4. Entwicklung von Feinstrukturmodellen

Für die neue Methode der Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen ergibt sich ein Bedarf an neuen lokalen physikalischen Modellen. Die für die Entwicklung solcher Modelle notwendigen Daten sollen nicht nur aus den DNS-Rechnungen, sondern auch aus Experimenten gewonnen werden (siehe unten). Von einem Gastwissenschaftler der Universität Bukarest wurden während des Aufenthaltes am IRS aus theoretischen Untersuchungen physikalische Modelle für die Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen entwickelt [8]. Zur Modellierung der Effekte durch ungenügende räumliche Auflösung der Grenzschicht an der Phasengrenzfläche wurden zwei verschiedene Ansätze verfolgt. Zum einen wurde das auf der analytischen Lösung für die Umströmung

von rotationssymmetrischen Blasen bereits zuvor entwickelte Programm AXIBUBBLE weiter verbessert und spezielle Analysemöglichkeiten, wie sie für die Modellentwicklung benötigt werden, bereitgestellt. Zum anderen wurde basierend auf einer Helmholtz-Zerlegung des Geschwindigkeitsfeldes ein Modell vorgeschlagen, das direkt auf dem in der Simulation berechneten lokalen, momentanen Geschwindigkeitsfeld um die Blase aufbaut. Als zweites Schließungsproblem wurde mit Hilfe der Renormalisierungsgruppenanalyse ein Feinstrukturmodell für die nicht aufgelösten turbulenten Fluktuationen vorgeschlagen.

5. Genauigkeitsuntersuchungen für den technischen Basis-Code CFX 4.2

Die Methodenentwicklung zur Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen erfolgt vorwiegend im grundlagenorientierten Rechenprogramm TURBIT-VoF, das in seiner Anwendung auf einfache Geometrien beschränkt ist. Um die Methode für allgemeine technische Zweiphasenströmungen verfügbar zu machen, soll sie in der Umgebung des kommerziellen Programmsystems CFX realisiert werden. Da CFX eine Vielzahl von numerischen Optionen bietet, müssen diese im Hinblick auf Genauigkeit und benötigte Rechenzeit bewertet werden. Mit der in einem U-Rohr schwingenden Wassersäule wurde ein einfaches physikalisches Problem ausgewählt, für das eine exakte analytische Lösung bekannt ist, und so eine zuverlässige Bewertung der Genauigkeit von CFX erlaubt [10]. Die Programmversion CFX-4.1 verlangte bei Verwendung des homogenen Strömungsmodells für die Volumenfraktionsgleichung die Verwendung des UPWIND Diskretisierungsschemas, das nur von erster Ordnung genau ist. Mit der Version CFX 4.2 wurde diese Beschränkung aufgehoben, so dass nun auch für die Volumenfraktionsgleichung die Verwendung eines Diskretisierungsschemas höherer Ordnung möglich ist. Es wurden daher ergänzend zu früheren Untersuchungen weitere numerische Studien mit verschiedenen Diskretisierungsschemata höherer Ordnung durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass die unphysikalische Verschmierung der Phasengrenze bei Verwendung eines Verfahrens höherer Ordnung für die Volumenfraktionsgleichung sich etwa über 10 Zellen erstreckt, während sie beim UPWIND-Verfahren etwa 20 Zellen erfasst. Eine scharfe, d.h. nur über 2-3 Zellen verschmierte Phasengrenzfläche lässt sich aber auch in CFX 4.2 nur durch Anwendung des sogenannten „Surface Sharpening Algorithmus" sicherstellen. Dieser bringt aber den Nachteil mit sich, dass sich die Schwingungsdauer im

Vergleich zur analytischen Lösung deutlich verschlechtert. Damit lassen sich auch in CFX 4.2 lokale, momentane Phasengrenzflächenprobleme nicht mit einer Genauigkeit numerisch beschreiben, wie sie für eine Grobstruktursimulation notwendig ist. Dies macht daher die Implementierung des neu entwickelten und in TURBIT-VoF realisierten EPIRA-Algorithmus in CFX über benutzereigene Subroutinen notwendig.

Literatur

1 G. Grötzbach, L. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 491 - 506

2 W. Sabisch,
Dreidimensionale numerische Simulation der Dynamik von aufsteigenden Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid-Methode.
Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6478, Mai 2000.

3 W. Sabisch, M. Wörner, G. Grötzbach, D.G. Cacuci,
An Improved Volume of Fluid Method for Numerical Simulation of Clusters of Bubbles.
Proc. 9th Workshop on Two-phase Flow Predictions, 13.-16. April 1999, Halle, Deutschland.

4 W. Sabisch, M. Wörner, G. Grötzbach, D. G. Cacuci,
Methode und erste Ergebnisse zur Direkten Numerischen Simulation von Blasen mit TURBIT-VOF.
Tagung des Fachausschusses „Mehrphasenströmungen" der Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC), Bad Kissingen, 1.-3. März 1999.

5 W. Sabisch, M. Wörner, G. Grötzbach, D. G. Cacuci,
Dreidimensionale Numerische Simulation von Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid-Methode.
Tagung des Fachausschusses „Computational Fluid Dynamics" der Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC), Bamberg, 28.2.-1.3. 2000.

6 W. Sabisch, M. Wörner, G. Grötzbach, D. G. Cacuci,
Three-dimensional numerical simulation of bubbles by a volume-of-fluid method.
GAMM Jahrestagung, Göttingen, 3.-7.4. 2000.

7 W. Sengpiel, M. Samstag, V. Heinzel, M. Simon,
Messungen der Eigenschaften von kontinuierlicher und disperser Phase in Luft-Wasser-Blasenströmungen.
3rd Workshop „ Messtechnik für stationäre und transiente Mehrphasenströmungen", Forschungszentrum Rossendorf, Dresden 14. Oktober 99

8 S.M. Mitran,
Closure Models for the Computation of Dilute Bubbly Flows.
Wissenschaftliche Berichte FZKA 6357, April 2000.

9 R. Clift, J.R. Grace, M.E. Weber,
Bubbles, Drops, and Particles.
Academic Press, New York, 1978.

10 G. Grötzbach, M. Wörner, A. Blahak, L. Carteciano, B. Dorr, W. Olbrich, W. Sabisch, Q. Ye, Alef, St. Genz, G. Janßen, M. Linder, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1997, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6126, September 1998, pp. 486 - 504

Fall	*Eo*	Log *M*	Gitter	Gebiet	d / L_z	Anf.-W.	Form
1BLc	0,2	-10,6	64*64*64	1x1x1	1 / 4	1Bla	Sphärisch
1Bla	3,07	-5,51	64*64*64	1x1x1	1 / 4	*U=0*	Ellipsoid
1Blaa	3,07	-5,51	64*64*128	1x1x2	1 / 8	*U=0*	Ellipsoid
1Blab	3,07	-5,51	128*64*64	2x1x1	1 / 4	*U=0*	Ellipsoid
1Blac	3,07	-5,51	128*128*128	1x1x1	1 / 4	*U=0*	Ellipsoid
5Bla	3,07	-5,51	64*64*64	1x1x1	1 / 4	*U=0*	Ellipsoid
1BLb	243	2,42	64*64*64	1x1x1	1 / 4	1Bla	Ellips.-Kappe
1BLd	3,07	-9,6	64*64*64	1x1x1	1 / 4	1Bla	„Wobbling“

Tabelle 1: Übersicht der durchgeführten Simulationen für Blasen.

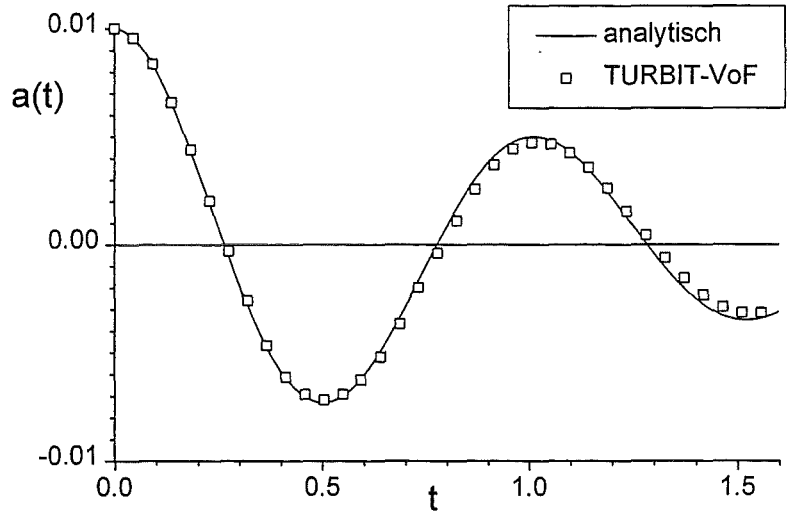


Abb. 1: Zeitliche Entwicklung der Amplitude a(t) einer durch viskose Reibung gedämpften Kapillarwelle. Vergleich der Ergebnisse von TURBIT-VoF (Symbole) mit der analytischen Lösung (Linie). Das Gitter umfasst 80x80 Maschen. Die Amplitude der Anfangsauslenkung entspricht genau einer Maschenweite Δx.

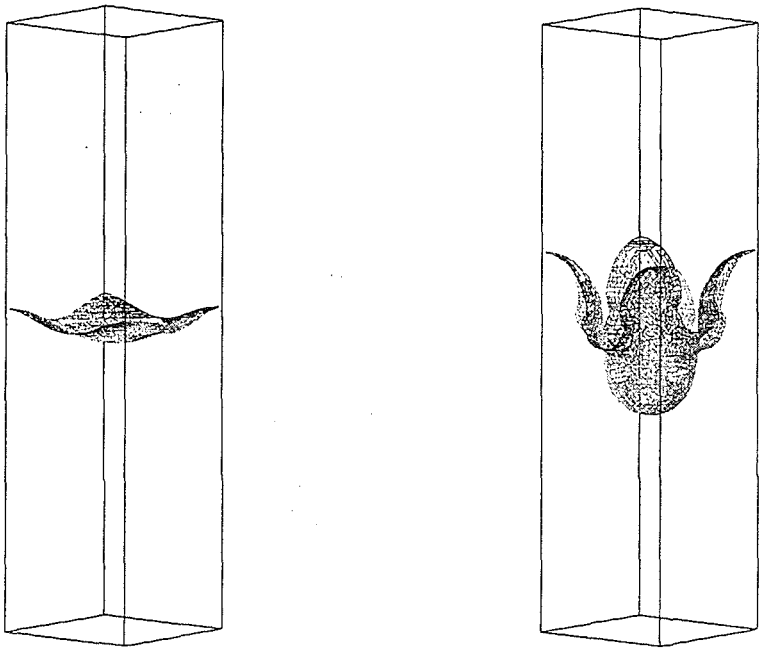


Abb. 2: Rayleigh-Taylor-Instabilität (Gitter 32x32x128): Visualisierung der Phasengrenzfläche zwischen dem schweren Fluid oben und dem leichteren unten für t=0 (links) und für t=0,45 (rechts).

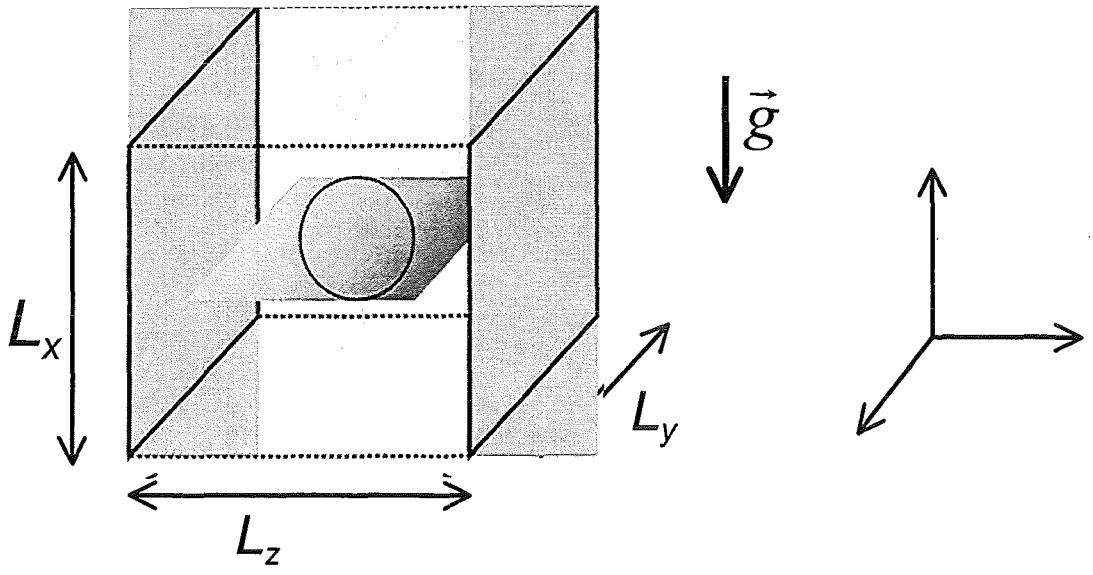


Abb. 3: Rechengebiet für die numerischen Simulationen von Blasen. In x- und y-Richtung liegen periodische Randbedingungen vor. Als Anfangswerte wird entweder eine sphärische Blase in ruhendem Fluid vorgegeben, oder aber die momentane Fluidverteilung und das Geschwindigkeitsfeld einer vorangehenden Simulation (vergleiche Tabelle 1).

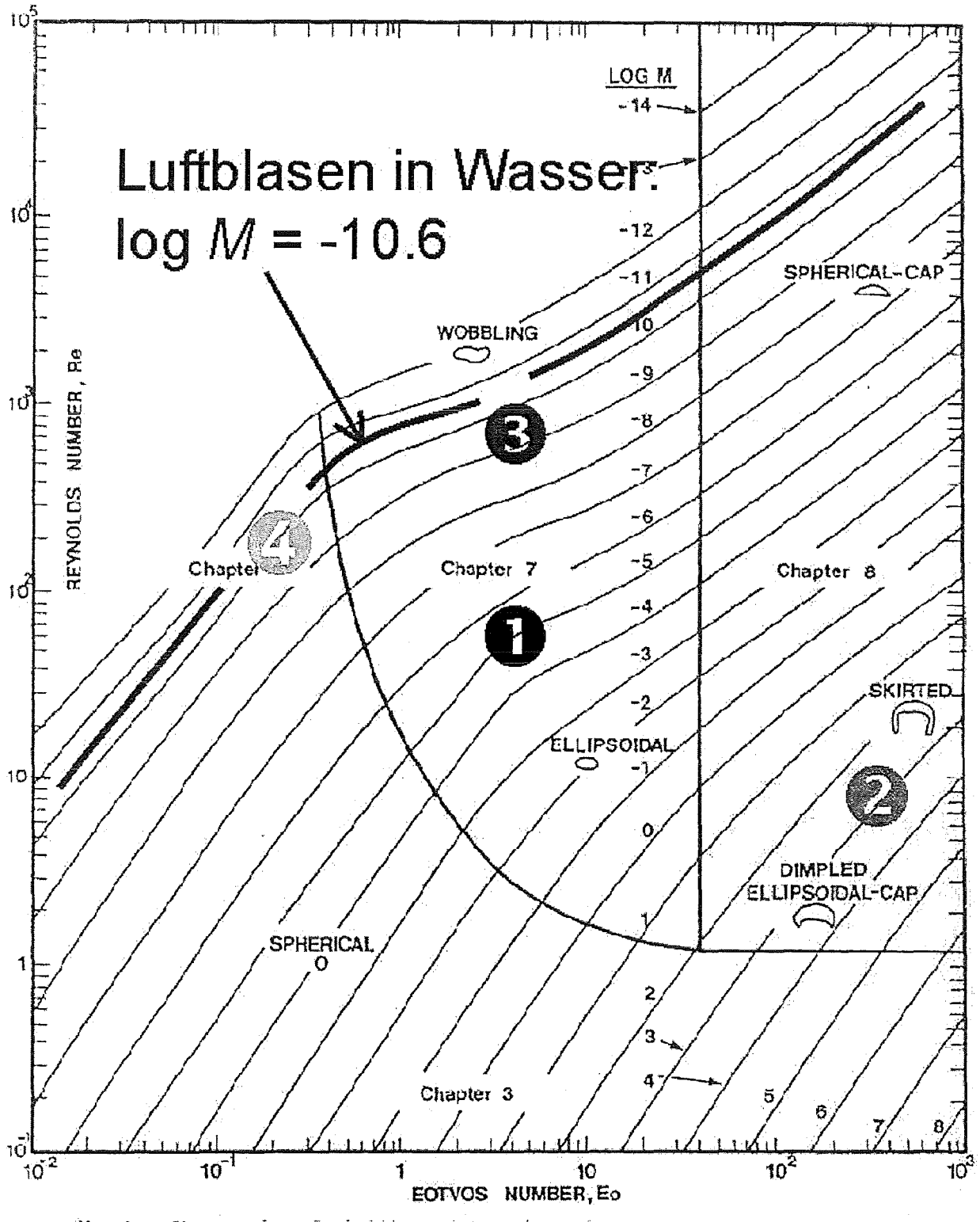


Abb. 4: Parameterkombinationen von Morton- und Eötvös-Zahl, für die numerische Simulationen mit TURBIT-VoF durchgeführt wurden (Diagramm nach Clift, Grace und Weber [9]). Die Definition der Blasen-Reynoldszahl ist $Re = \rho_T d / \mu$, wobei U_T die terminale Aufstiegsgeschwindigkeit der Blase ist.

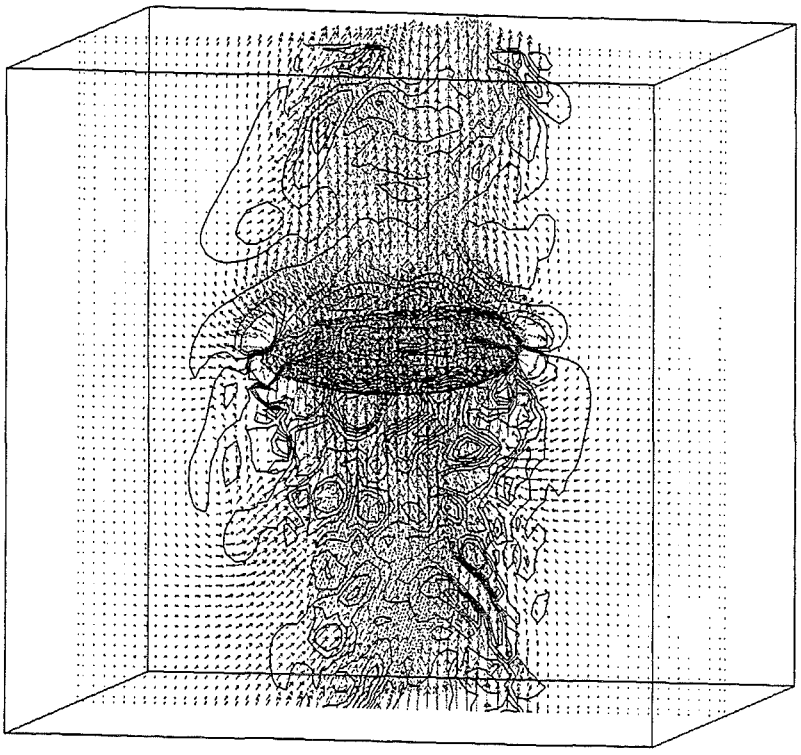


Abb. 5 Forminstabile Blase, Parameterkombination ③: Visualisierung der momentanen Phasengrenzfläche, der Geschwindigkeit in einer Schnittebene (Vektoren) und der entsprechenden Wirbelstärkekomponente (Höhenlinien).

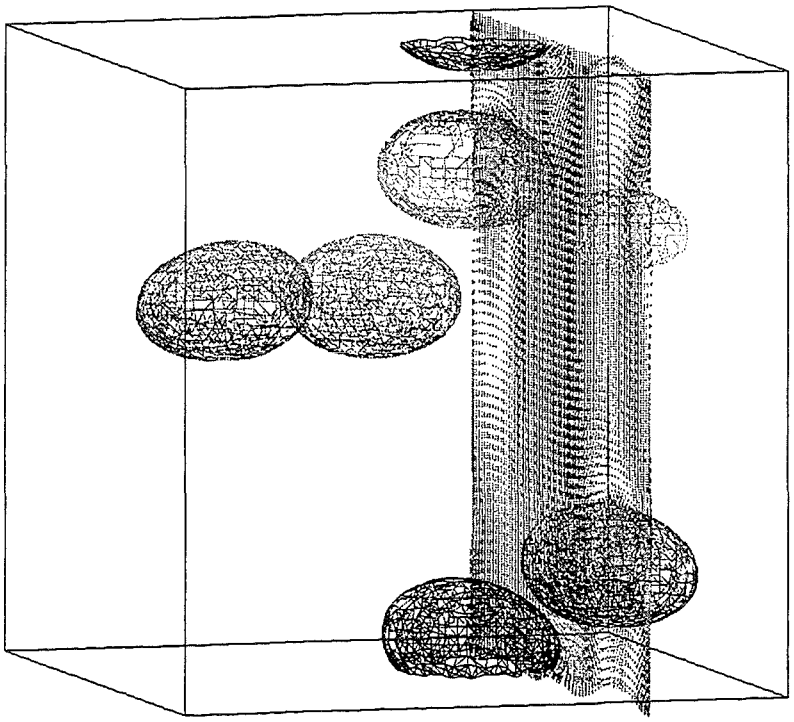


Abb. 6: Visualisierung der momentanen Phasengrenzfläche und der Geschwindigkeit in einer Schnittebene (Vektoren) für einen Schwarm von fünf ellipsoiden Blasen; Parameterkombination ①. An den oberen/unteren und vorderen/hinteren Rändern liegen periodische Randbedingungen vor.

II. Experimentelle Untersuchungen zum Strömungsumfeld aufsteigender Gasblasen in ruhendem Fluid und dessen Wechselwirkung mit dem Aufstiegsverhalten der Blasen

(G. Grötzbach, V. Heinzel, A. Jianu, P. Philipp, H. Sauter, W. Sengpiel, M. Simon, IRS)

Zusammenfassung

Es wird über Beobachtungen an aufsteigenden Blasen im System Wasser-Luft berichtet, die im Bereich von Potentialströmung (0,56 mm ∅) bis zum asymmetrischen Blasennachlauf (1,2 mm ∅) unternommen worden sind. Schwerpunkte der Beobachtungen waren das Aufstiegsverhalten einerseits sowie die Visualisierung der Umströmung der Blase andererseits. Zudem wurden verschiedene Mess- und Visualisierungsmethoden bezüglich Ihrer Eignung und des Fehlerverhaltens bei Einzelblasenanalysen untersucht.

Einleitung

Zur Validierung von Modellen zur Simulation von Zwei-Phasen-Strömungen werden unterschiedliche experimentelle Daten herangezogen, die sich in ihrem Detaillierungsgrad [1] unterscheiden. Bei Beobachtungen von Blasen, die in einem ruhenden Fluid aufsteigen, können dies z.B. einmal die „terminale" Aufstiegsgeschwindigkeit oder zum andern quantitative Angaben zum Strömungsfeld um die Blase sein. Neben den Stoffeigenschaften der Fluidpaarung geht das Blasenvolumen ein. Es besteht weiterhin der Zusammenhang zwischen Blasenbewegung, Blasenumströmung und Blasenform.

„Terminale" Aufstiegsgeschwindigkeit von Luftblasen in ruhendem Wasser

Mit der bereits im vorjährigen Bericht [2] beschriebenen Miniflex Anordnung, eine transparente Küvette mit dem Querschnitt 30x100 mm^2 und der Höhe 100 mm so wie einem Blasengenerator, wird das Verhalten von aufsteigenden Blasen in dem Stoffpaar Luft/Wasser aufgezeichnet. Der Blasengenerator gestattet die Einspeisung von Blasen, einstellbar mit einem Durchmesser von 0,2 bis 5 mm, und einer Folge von Blasen im zeitlichen Abstand von einigen Sekunden bis zu weniger als einer Sekunde. Bei den früheren Messungen der terminalen Aufstiegsgeschwindigkeit von

kleinen Blasen, $D_{Bl} < 0{,}8$ mm, in Abhängigkeit des Blasendurchmessers zeigten sich Streuungen, die nicht geklärt werden konnten. Auch die Angaben hierzu in der Literatur weisen Streubreiten auf. Die Stoffwerte des in den Experimenten verwendeten Wassers, sie wurden jeweils vor und nach den Messungen bestimmt, lieferten ebenfalls keine Erklärung.

Es wurde eine Messreihe durchgeführt, um die Streubreite und Verteilung der Aufstiegsgeschwindigkeiten aufzuzeigen, aber auch um die Ursachen hierfür zu finden. An die Küvette wurde dazu in vertikaler Richtung eine Kette von 16 Photodioden in einem Abstand von jeweils einem Millimeter installiert. Eine Lichtquelle auf der gegenüberliegenden Seite der Küvette sendete ein paralleles Licht auf die Dioden, die beim Passieren der Blasen deren Schatten registrieren. Die Dioden waren mit einer Maske mit 0,2 mm breiten Ausschnitten überdeckt. Durch die mit mikrotechnischen Verfahren angefertigte Maske ist die Toleranz von Position und Breite der Maskenschlitze vernachlässigbar. Die Messungen wurde auf kleine Blasen begrenzt, für die ein zeitlich konstanter und geradliniger Aufstieg zu erwarten war. Mit dem Blasengenerator konnte die Aufstiegsbahn der Blasen lokal gut eingerichtet werden. Die Kette der 16 Dioden erlaubte es, die zeitliche Konstanz der Blasengeschwindigkeit beim Passieren der Diodenstrecke festzustellen. Zusätzlich wurde dies zusammen mit der Geradlinigkeit der Aufstiegsbahn an Hand von Videoaufnahmen mit einer Mehrblitztechnik überprüft. Es genügte danach, die Aufstiegsgeschwindigkeit mit den Signalen der unteren und oberen Diode zu bestimmen. Die Aufzeichnung der Diodensignale mit einem Digitaloszilloskop gestattete eine automatische Verarbeitung zu einer Ausgabe eines Histogramms der Blasengeschwindigkeiten über eine Messperiode. Die Blasenfolge innerhalb einer Messperiode wurde so eingestellt, dass keine Rückwirkung der jeweils zuvor aufgestiegenen Blasen bestand. Entsprechende Untersuchungen werden im Anschluss beschrieben. Der Blasendurchmesser wurde jeweils zu Beginn und am Ende einer Messreihe mittels einer Makrooptik vermessen. Damit können auch die kleinen Blasen bildfüllend aufgenommen werden. Der Messfehler ist damit auf weniger als 2 % des Durchmessers eingeschränkt.

Die Verteilung der Aufstiegsgeschwindigkeiten in Abbildung 1 folgt aus Messungen über mehrere Stunden und ca. 1000 Blasen. Innerhalb der Messzeit traten Streubreiten im Bereich 1 % vom Messwert auf. Andere Verteilungen wiesen deutlich größere Breiten auf. Die Ursachen waren vielfältig und resultieren im wesentlichen

aus Schwingungsanregungen der Messküvette mit Blasengenerator so wie aus Luftdruckschwankungen von außerhalb und innerhalb des Gebäudes. Weiterhin veränderten sich die Oberflächeneigenschaften am Ablösepunkt der Blasen am Generator über längere Standzeiten. Dies ließe sich jedoch durch eine geeignete Standzeit oder an Hand der Verteilungskurve um mehrere Verteilungsmaxima eingrenzen. Die Reduktion der zuvor genannten Einflüsse legte einen Neuaufbau des Experimentes auf einer geeigneten schwingungsgedämpften Unterlage in einem Raum mit stabilem Luftdruck nahe.

Unter Berücksichtigung der genannten Toleranzen ergaben die Messungen die terminale Aufstiegsgeschwindigkeiten in Abbildung 2 für das Stoffpaar Wasser/Luft bei 20 °C. Das Wasser (Deionat) hatte dabei eine Oberflächenspannung von 69,7 mN/m. Bei dem verwendeten Maßstab liegen die Toleranzen im Bereich der aufgetragenen Symbole.

Einfluss der Blasenfolgefrequenz

Numerische Simulationsrechnungen des Blasenaufstiegs können periodische Randbedingungen verwenden [3]. Dies gilt für die Geometrie als auch für die Blasenfolge. Damit werden Blasen in einer Folge berechnet, so dass sie sich so zu sagen im Nachlauf der vorgehenden Blase bewegen. Es galt daher, den Einfluss des zeitlichen Abstandes in einer Blasenfolge bzw. die Auswirkung des Nachlaufes einer vorausgehenden Blase auf die Aufstiegsgeschwindigkeit und –bahn zu erfassen.

Abbildung 3 zeigt die Aufstiegsgeschwindigkeiten von Blasen mit einem Durchmesser von 0,76 mm. Bei Blasenfolgen bis zu einem zeitlichen Abstand von Blase zu Blase von etwa 3 Sekunden wird die Blasenaufstiegsgeschwindigkeit erhöht. Darüber hinaus lassen sich Rückwirkungen nicht mehr von der Streubreite der Geschwindigkeitsmessungen unterscheiden. (Man beachte den Maßstab. Die Streubreite liegt in dem zuvor beschriebenen Bereich.) Literaturangaben zu Aufstiegsgeschwindigkeiten enthalten keine Hinweise zur Blasenfolge, so dass unterschiedliche Messergebnisse auch hiermit begründet werden können. Die Bedeutung des Nachlaufes veranlasste schließlich weitere Experimente vorzubereiten, um mit einer Heißfilmsonde die Dauer der Nachlaufströmung hinter aufsteigenden Blasen zu bestimmen.

Strömungsfeld um die aufsteigende Blase

Die Abbildungen 4 und 5 sind im Rahmen von kursorisch durchgeführten Untersuchungen zur Eignung von verschiedenen Visualisierungsverfahren entstanden. Die folgende Zusammenstellung gibt einen Überblick über die bisher gesammelten Ergebnisse. Die Verfahren erlauben zunächst keine quantitativen Angaben über das Strömungsfeld um die Blasen, hierzu ist eine Bildverarbeitung erforderlich.

Für den Experimentator wird schnell deutlich, dass nur die Kombination verschiedener Erfassungs- und Messmethoden zu einer umfassenden Beschreibung des Strömungsfeldes um eine aufsteigende Blase führen kann. Somit ist es zweckmäßig, das Strömungsumfeld nach charakteristischen Merkmalen sowie nach der Zugänglichkeit durch verschiedene Messmethoden zu differenzieren:

- Die Verdrängungsströmung (Potentialströmung) stellt bei kleinen Blasen den einzigen Beitrag. Sie ist mit Partikeltracern nachweisbar und somit mit PIV (Particle Image Velocimetry) zu vermessen, allerdings nicht ohne Störung des Systems und nicht ohne Messfehler. Dies gilt auch – in geringerem Masse – für die Laser-Doppler-Anemometrie.

- Ab einer Größe (bei Wasser/Luft-Blasen) von 0,56 mm ∅ beginnt die Strömung auf der Blasenunterseite abzureißen. Innerhalb des Abrissgebietes entwickelt sich ein torusartiges in sich geschlossenes Strömungsgebiet, das mit wachsender Blasengröße zunimmt. Vor der Blase bleibt ein Geschwindigkeitsfeld etwa der Potentialströmung entsprechend erhalten. Die Umströmung der Blase kann daher in einen Vorlauf und Nachlauf unterteilt werden [4]. Letzter besteht dann aus einem inneren Nachlauf, dem Torusbereich und einem äußeren, ähnlich der Struktur der Potentialströmung. Der Nachlauf ist mit Schlierenabbildungsmethoden zu visualisieren und im Erscheinungsbild zu vermessen. Er ist fest an die Blase gekoppelt; seine Länge erreicht etwa das Doppelte von deren Durchmesser. Der innere Nachlauf ist zunächst symmetrisch und wird erst mit wachsender Blasengröße unsymmetrisch. Ist der Nachlauf nach Abschluss der Blasenentstehung einmal voll ausgebildet, tauscht er nur sehr geringe Massen mit seiner Umgebung aus.

- Bei wachsendem Blasendurchmesser treten Ablösungen des Nachlaufs oder Teilen davon auf. Die Ablösungen sind selten, werden aber häufiger mit dem Übergang vom symmetrischen zu asymmetrischen inneren Nachlauf. Sie sind verantwortlich für die Abweichungen der Aufstiegsrichtung von der Geraden und den Änderungen der Momentangeschwindigkeit [5], tragen aber auch zum Massenaustausch im Fluid bei. Sie können spontan aus dem Aufstieg entstehen oder selbst durch kleine Störungen getriggert werden.

- Das Strömungsfeld der Ablösung verlässt die Blase und wird nahezu ortsfest. Es überdauert etwas über hundert Millisekunden. Es ist mit vielen Visualisierungsmethoden mehr oder weniger gut sichtbar zu machen, wird aber auch dadurch oft provoziert. Zu nennen sind Tracer wie Partikel, Gasbläschen, Farb- und Dichtestreifen oder Schichtungen.

Anemometriemethoden

- Der von der Blase unabhängig von Ablösungen hinterlassene Strömungskanal ("äußerer Nachlauf") klingt nach Exponentialgesetzen mit Halbwertszeiten im Sekundenbereich ab (siehe oben). Sie ist verantwortlich für das Verhalten nachfolgender Blasen am gleichen Entstehungsort, die sie bei kurzen Abständen zu tanzenden Bewegungen veranlasst und selbst bei längeren Abständen noch beschleunigt. Der äußere Nachlauf ist der Messung mit einem Hitzdrahtanemometer zumindest teilweise zugänglich [6] und fällt im Visualisierungsbild durch das Verdrängen und Vermischen von Tracerspuren auf.

- Zur Messung der Strömung in Blasennähe ist der Einsatz eines Laser-Doppler-Anemometers (LDA) denkbar. Hierzu konnte eine Gastwissenschaftlerin erste Versuche unternehmen. Zunächst sollte der gelegentlich geäußerten Vermutung nachgegangen werden, die Reflexionen der Blasen würden den in Rückwärtsstreuung angeordneten Detektor für einige Zeit blenden. Da das zweidimensionale LDA vier Teilstrahlen projiziert, die sich nur am Messort kreuzen, wurde in Vorwärtsrichtung auf der Gegenseite des Messgefäßes eine 4-Photodiodenanordnung auf jeden Teilstrahl ausgerichtet. Eine logische Verknüpfung der Signale mit Ausgabe "low" bei Abschattung aller vier Teilstrahlen bedeutete mit hoher Wahrscheinlichkeit einen Blasendurchgang. Hiermit wurde

zunächst das Digitaloszilloskop getriggert, das beide LDA-Rohsignale gemeinsam mit den Diodensignalen aufzeichnete (siehe Abb. 6).

Späterhin wurde damit auch eine Zeitmaske in die LDA-Datenverarbeitung eingebracht, so dass Partikel-Streulichtsignale zeitlich dem nun als Blasenstreulichtsignal gekennzeichnetem Signal zugeordnet werden konnten.

Mit dieser Arbeit wurde zur LDA gezeigt [7]:

- Es wird kein Detektor geblendet und es gibt keine Totzeiten.
- Blasensignalidentifizierung ist möglich.
- Das LDA liefert glaubhaft die Blasengeschwindigkeit; damit kann – mit zusätzlicher Auswertung – auch die Blasengröße bestimmt werden.
- Partikelsignale im Blasenumfeld können örtlich der Blase zugeordnet werden, jedoch muss hier noch Automatisierungsaufwand in der Auswertung unternommen werden. Zur Interpretierbarkeit der Messergebnisse liegen damit noch keine Aussagen vor.
- Das Volumen, das für die LDA-Analyse ausgewertet wird, erfasst etwa einen rotationssymmetrischen Bereich von 0,4mm X 0,8 mm.

Ein verwandtes Messverfahren zum LDA ist das PIV (Particle Image Velocimetry). Damit wird ein ganzes Strömungsfeld simultan und instantan vermessen. Im Rahmen von einigen Demonstrationsveranstaltungen, darunter auch mehrtätig an der eigenen Apparatur, und durch Literaturauswertung wurde festgestellt:

- Die Verdrängungsströmung oberhalb der Blase wird sehr gut, seitlich davon gut erkannt.
- Der Blasenort ist gut identifizierbar.
- Der innere Nachlauf ist weitgehend unsichtbar. Hierzu muss es gelingen, Partikel in den inneren Nachlauf einzubringen. Wegen der begrenzten Auflösung müssen innerer und äußerer Nachlauf getrennt betrachtet werden.

- Die blaseninduzierte Kanalströmung wird im Umriss sichtbar, aber in der Struktur nicht aufgelöst

- Eine Detailinterpretation ohne zusätzliche Information gestaltet sich schwierig [8].

Aus dieser Aufstellung kann abgeleitet werden:

- Alle zur Verfügung stehenden Messmethoden sind mehr oder weniger invasiv, so dass sie selbst das Geschehen mit beeinflussen.

- Keine Methode kann für sich alleine alle Bereiche des Strömungsfeldes um aufsteigende Blasen erfassen.

- Eine Vielzahl von bisher nicht genannten Einflüsse sind in der Lage, unvermutet Störungen einzubringen, so dass eine methodische Diversität auch in der Versuchsanlage und -auswertung angezeigt ist.

Ausblick

Durch die bisher eher kursorisch unternommenen Untersuchungen zur Eignung der einzelnen Maßverfahren konnte eine Reihe dieser Einflüsse identifiziert und isoliert bzw. neutralisiert werden. Die jetzt entwickelte Versuchstechnik gestattet es, den in räumlicher wie zeitlicher Dimension unterschiedlichen Verhaltensweisen der Blasenumströmung auch simultan nachzugehen und die jeweiligen Beobachtungen phasengetreu zusammenzuführen.

So können Schlierenaufnahmen sowohl gleichen wie verschiedenen Abbildungsmaßstabes synchron unter 90° erfolgen, mit der Frame Straddeling Methode auch in wesentlich kürzerer Zeitfolge als 20 ms. An einer Kopplung von Partikel- und Schlierenvisualisierung wird gearbeitet. Dies soll, neben einer Datensicherstellung, der systematischen Erfassung der Übergänge im Umströmungsverhalten bei zunehmender Blasengrösse dienen, wie sie als zusätzliches Kriterium zur Modellvalidierung benötigt wird.

Literatur

[1] W. Sengpiel, M. Samstag, V. Heinzel, M. Simon,

Messungen der Eigenschaften von kontinuierlicher und disperser Phase in Luft-Wasser-Blasenströmungen

3rd Workshop "Messtechnik für stationäre und transiente Mehrphasenströmungen",

Forschungszentrum Rossendorf, Dresden 14. Oktober 99

[2] J. Aberle, W. Cherdron, G. Grötzbach, V. Heinzel, P. Philipp, H. Sauter, W. Sengpiel, M. Simon, I. Tiseanu,

Experimentelle Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen.

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 507 – 516

[3] W. Sabisch, M. Wörner, G. Grötzbach, D.G. Cacuci,

Dreidimensionale Numerische Simulation von Einzelblasen und Blasenschwärmen mit einer Volume-of-Fluid-Methode

Tagung des Fachausschusses "Computational Fluid Dynamics" der Gesellschaft für Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC), Bamberg, 28.2. – 1.3.2000.

[4] A.J. van Bekkum

Theoretical and Experimental Investigation of the Liquid Flow Around a Gas Bubble
Proefschrift Technische Hogeschool Delft, 1985

[5] Ch. Brücker

Structure and Dynamics of the Wake of Bubbles and its Relevance for Bubble Interaction

Phys. of Fluid, Vol. II, Nr. 7, July 1999

[6] V. Heinzel, H. Sauter, W. Sengpiel

Studie zum Signalverhalten einer Heißfilmsonde bei Gegenwart von kleinen Blasen in einem Fluid, unveröffentlicht

[7] A.V. Jianu, V. Heinzel, W. Cherdron

Investigation of Flow Behavior in the Near Vicinity of a Gas Bubble by Laser-Doppler-Anemometry

7th Int. Conf., Nov. 1999, Transylvania, Univ. of Brasev

[8] H. Monji, T. Takamatsu, T. Kurihara und G. Matsui

Instantaneous and Local Turbulence Structure Around a Rising Bubble by PIV Measurement. Twophase Flow Modelling and Experimentation 1999

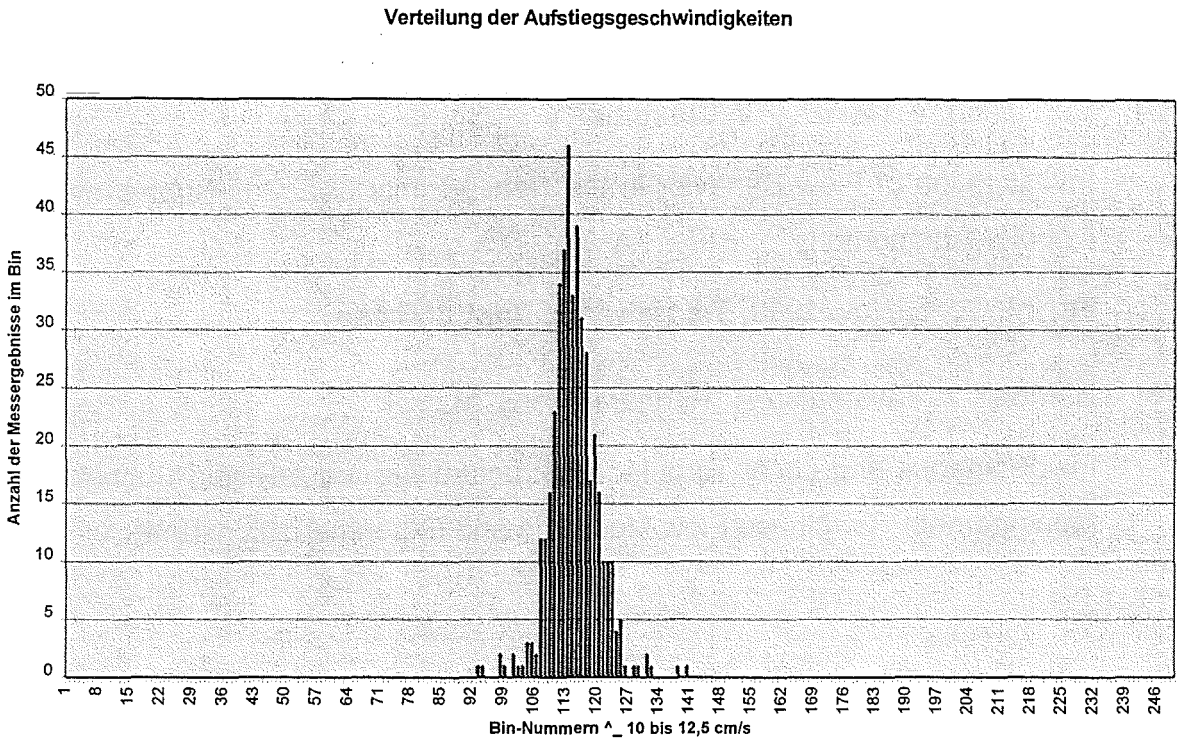


Abbildung 1: Histogramm der Blasenaufstiegsgeschwindigkeiten von ca. 1000 Blasen mit einem Durchmesser von 0,6 mm bzw. einer Messperiode über 5 Stunden. 1 Bin entspricht 0,01 m/s oder 0,1 % des Messwertes.

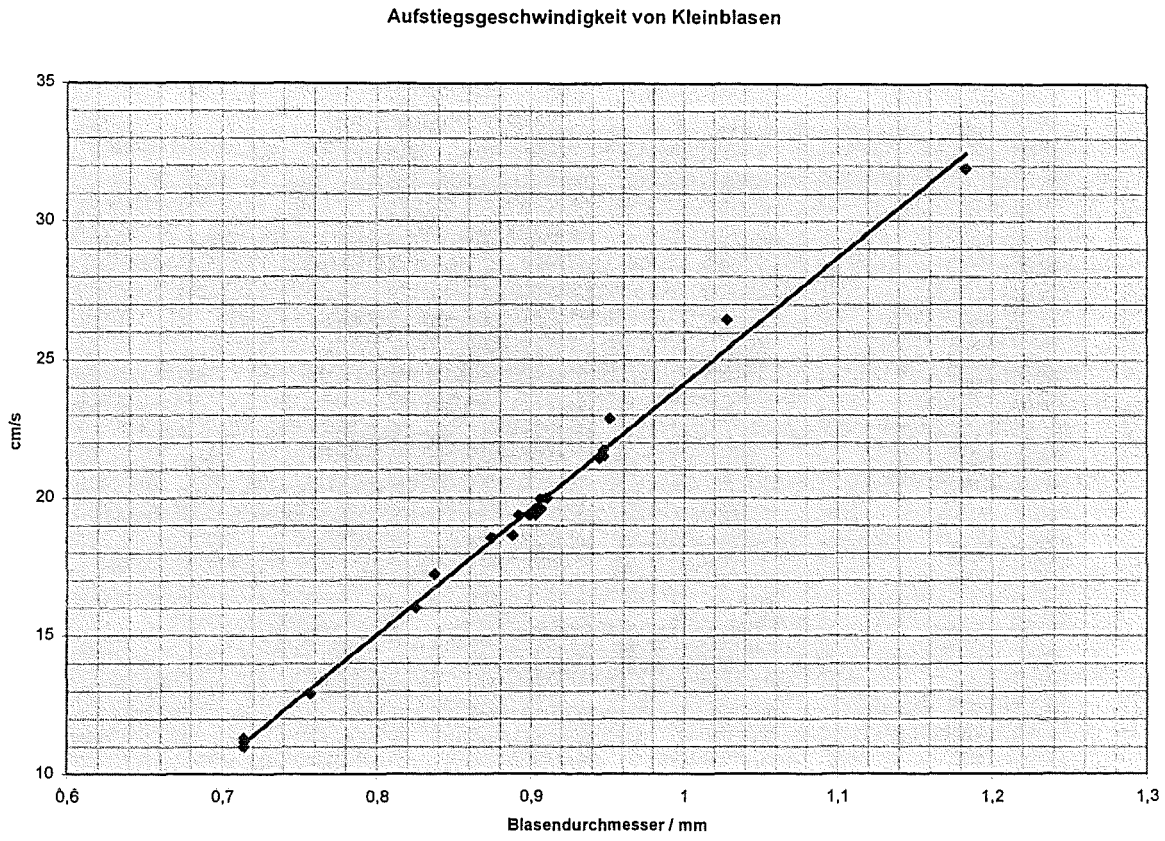


Abbildung 2: Miniflex-Messungen der Terminalen Aufstiegsgeschwindigkeiten von Luftblasen in ruhendem Wasser, mit Ausgleichsgraden (Linearität angenommen).

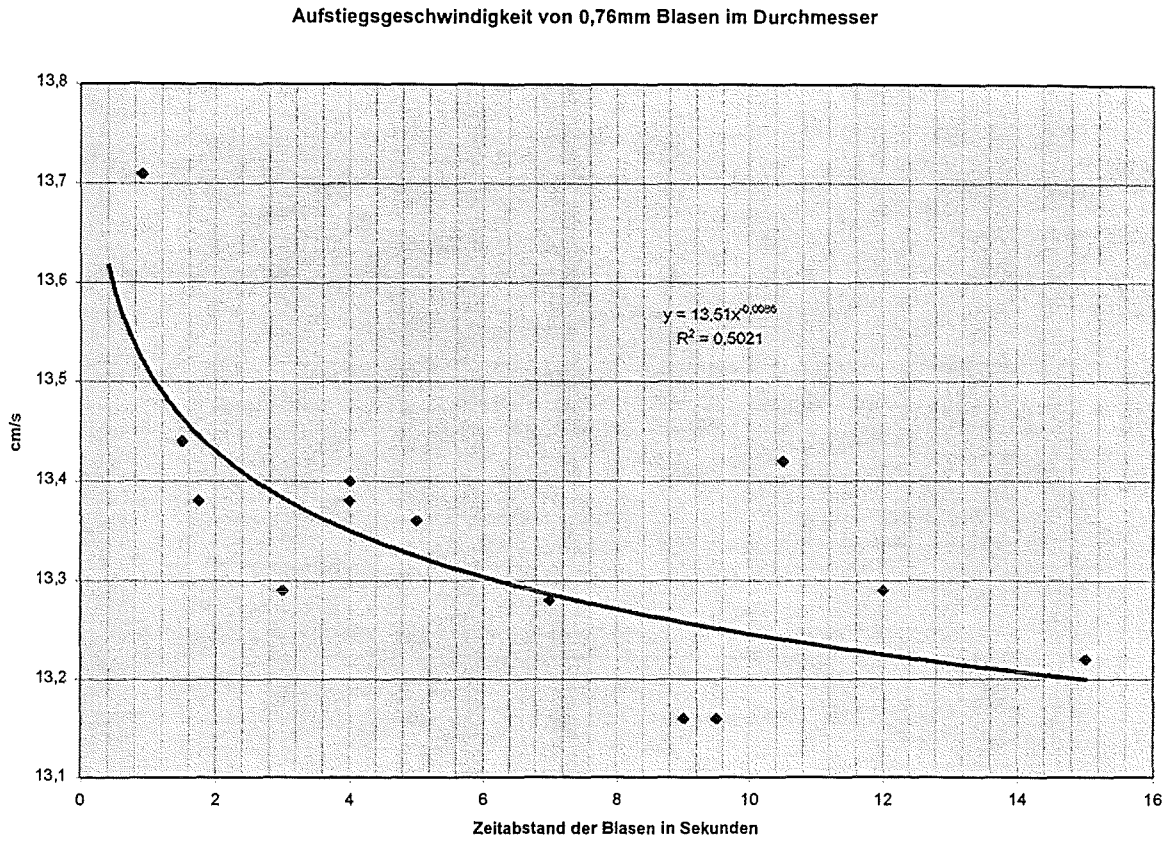


Abbildung 3: Aufstiegsgeschwindigkeit von Luftblasen in ruhendem Wasser als Funktion des zeitlichen Abstandes der aufsteigenden Blasen, mit Trendkurve (Potenzfunktion angenommen).

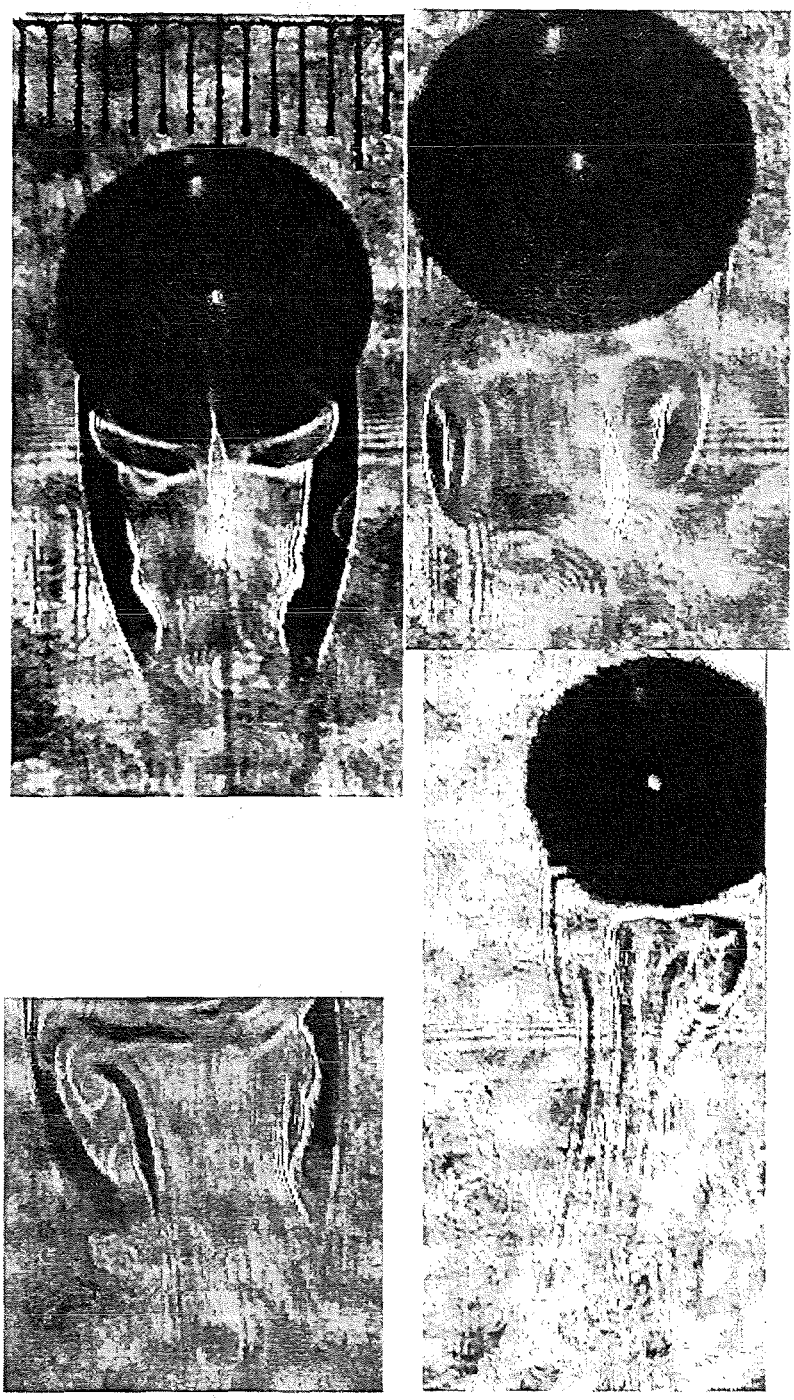
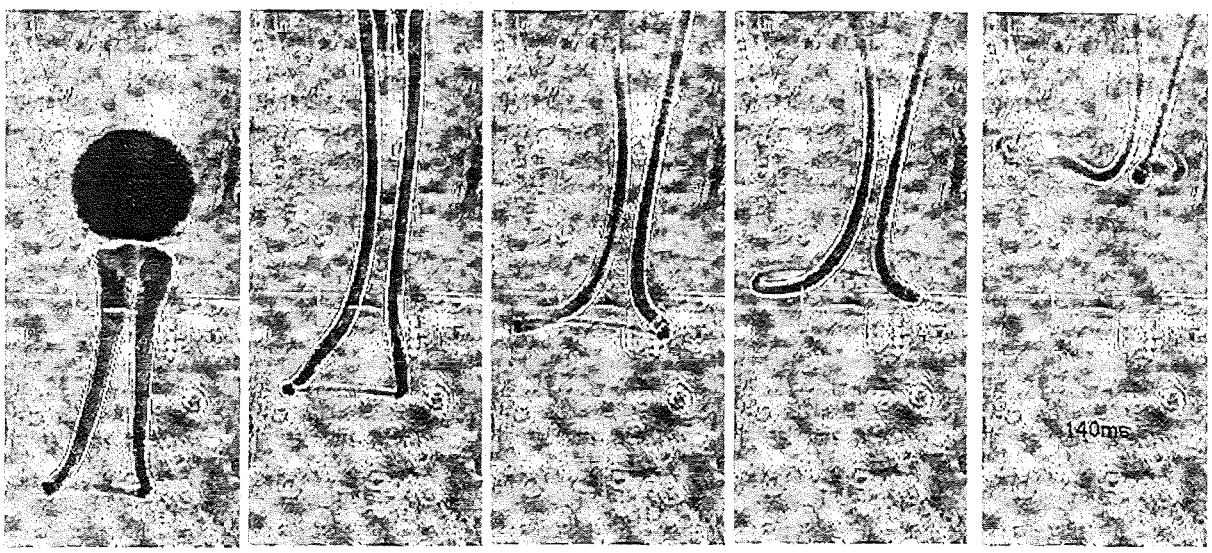


Abbildung 4: Schlierenbilder von Blasen mit einem nahezu symmetrischen inneren Nachlauf; der äußere Nachlauf ist ebenfalls zu erkennen. Die Schlieren entstehen durch eine erhöhte Salzkonzentration in der unteren Zone um den Blasengenerator der Miniflex-Küvette. Der Aufnahmeort befindet sich in einem Abstand von etwa 30 Blasendurchmessern über der Salzvorlage.



t = 0 20 ms 40 ms 60 ms 140 ms

Abbildung 5: Schlierenbild des Nachlaufes nach dessen Ablösung von der Blase, nahezu ortsfest in der Küvette. Schlierenartefakte von der Gefäßwand als Marker für ortrichtige Bildmontage.

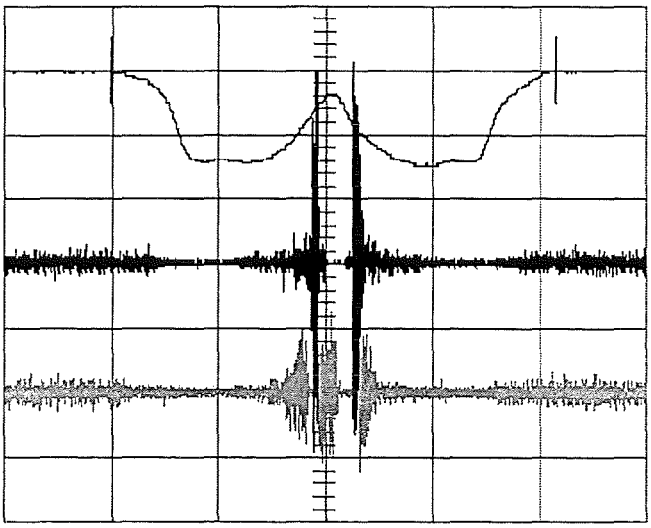


Abbildung 6: Zeitsignale eines zweidimensionalen LDA in Rückstreuanordnung beim Blasendurchgang. Die obere Kurve wertet die vier durchgehenden Laserstrahlen zur Detektion von Blasen aus; sie sind im Mittenbereich transparent. Die mittlere Kurve zeigt das Duo-Burstsignal für die Vertikalgeschwindigkeit, die untere das Burst-Trippel für die Horizontalgeschwindigkeit. Die hohe Symmetrie der Zeitsignale zeigt den recht exakt mittigen Durchgang der Blase durch das Messvolumen an.

32.22.04 Strukturelle Integrität

I. Untersuchungen an Strukturmaterialien der Kerntechnik

(M. Schirra, A. Falkenstein, R. Hübner, E. Materna-Morris, B. Bennek-Kammerichs, K. Ehrlich, IMF I)

Abstract

"Structural integrity" comprises several research activities: The examination of creep and creep rupture behaviour of the austenitic steel 316 L(N)-DIN 1.4919 on low stress levels at 550 and 600°C; Investigations on swelling, irradiation creep and related microstructural changes in several austenitic alloys under high-fluence irradiations (PFR-experiment) and the fracture analysis of ferritic and austenitic reactor steels under variable deformation rates and for different sample geometries are further topics of experimental investigations.

Zusammenfassung

In diesem Vorhaben sind mehrere Aktivitäten des IMF I zusammengefasst. Untersuchungen zum Kriech- und Zeitstandfestigkeitsverhalten werden am Werkstoff 316 L(N)-DIN 1.4919 bei 550 und 600°C im anwendungsrelevanten Spannungsbereich unterhalb der 0,2%-Streckgrenze durchgeführt. Im Bestrahlungsprojekt PFR-M2 sind Untersuchungen zum Schwell- und Kriechverhalten und zur mikrostrukturellen Entwicklung unter Bestrahlung an verschiedenen Stählen abgeschlossen und dokumentiert worden. Das Bruchverhalten zweier LWR-Reaktorstähle wird für unterschiedliche Probengeometrien und stark variierende Verformungsgeschwindigkeiten studiert.

1. Langzeitkriechversuche am Strukturwerkstoff 316 L(N)

1.1 Einleitung

Der in der Reaktortechnik häufig eingesetzte austenitische 17/12/2-CrNiMo-Stahl 316 L(N)-DIN 1.4909 wurde auch für das im europäischen Rahmen geplante Brüterprojekt (EFR) als Anlagenstrukturwerkstoff gewählt. Das Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten dieses Stahltyps ist im üblichen Spannungs- und Temperaturbereich experimentell gut untersucht, u.a. durch eigene Arbeiten an 3 Chargen im T-Bereich

500-750°C und für Standzeiten bis 80 000 h [1-3]. Im auslegungsrelevanten niedrigen Spannungsbereich bei 550 und 600°C ist dagegen ein völliger Mangel an Daten festzustellen, die z.B. eine Aussage zur Spannungsabhängigkeit der minimalen Kriechgeschwindigkeit oder der technisch wichtigen Zeit-Dehngrenzen erlauben würden. Dies hat nicht nur zeitliche, sondern vor allem technische Gründe. In diesem σ/T-Bereich sind die zu erwartenden Kriechraten bzw. Dehnbeträge so gering, daß sie sich im konventionellen Zeitstandversuch messtechnisch kaum erfassen lassen.

Die Bestimmung von Kriechdaten für die Aufstellung zuverlässiger konstitutiver Gleichungen zum Werkstoffverhalten wurde für absolut notwendig erachtet, und das FZK/IMF I erklärte sich bereit, spezielle Langzeitkriechversuche bei 550 und 600°C durchzuführen. Der vorliegende Beitrag gibt einen Zwischenbericht über die seit 1991 laufenden Versuche. die rd. 70 000 h erreicht haben.

1.2 Versuchsdurchführung

Als Versuchsprobe wurde eine ∅ 8 mm-Gewindekopfprobe mit 200 mm Meßlänge gewählt, die die Genauigkeit bei der Erfassung des Kriechverlaufes gegenüber einer Normalprobe deutlich erhöht. Die Prüftemperatur wird mit 3 Pt/Rh-Pt-Thermoelementen erfaßt und über 3 PID-Regler auf ± 2°C konstant gehalten. Zur Erfassung der Kriechdehnung ist beidseitig an der Probe ein induktiver Wegaufnehmer angebracht, der mit einem ε-t-Schreiber den Kriechverlauf kontinuierlich registriert. Die Auflösung liegt bei ≤ 0,001 mm (1:1250). Die Belastung erfolgt über einen Hebelarm mittels Gewichtplatten.

Bei 550°C wurden 7 Versuche im Spannungsbereich 250-100 MPa und bei 600°C im Bereich 170-60 MPa 6 Versuche angesetzt, die den Anschluß bzw. eine Überlappung zum schon früher realisierten Versuchsprogramm an diesem Stahl bilden [3].

1.3 Stand der Untersuchungen

Aus den kontinuierlich registrierten Kriechkurven wurde die Kriechrate in 1000 bzw. 5000 und 10 000 h Intervallen bestimmt. Dabei zeigt sich, dass gerade bei den jeweils niedrigsten Spannungen die minimale Kriechgeschwindigkeit noch nicht sicher erreicht ist, wie in einem Zwischenbericht [4] deutlich dargelegt wird. Überträgt man die sicher bestimmten bzw. abgeschätzten Werte für die minimale Kriechgeschwindigkeit als Funktion von σ (Bild 1a) so erkennt man, daß im Vergleich zum

oberen Spannungsbereich (schraffiert) jeweils im unteren Spannungsbereich der beiden Prüftemperaturen eine deutlich geänderte Spannungsabhängigkeit von $\dot{\varepsilon}_{p\,min}$ vorliegt, d.h. es treten deutlich höhere Kriechraten auf als man aus dem bisher experimentell abgedeckten Spannungsbereich extrapoliert hätte. Auffallend und eine plausible Erklärung liefernd ist die Tatsache, dass alle bisher realisierten Versuche bei 550 und 600°C in einem Spannungsbereich liegen, bei denen bei Versuchsbeginn auf Grund der niedrigen Warmstreckgrenze plastische Anfangsdehnungen ≥ 5% auftreten, deren Beträge schematisch links als sich öffnende Schere in Bild 1a dargestellt sind. Das bedeutet, daß das Kriechverhalten bei Spannungen < 150 MPa sich tatsächlich auf den spezifizierten lösungsgeglühten Zustand bezieht, wohingegen bei Spannungen > 150 MPa das Material im Zustand lösungsgeglüht + verformt (bis 30% bei 400 MPa) vorliegt. Aus dieser geänderten Spannungsabhängigkeit von $\dot{\varepsilon}_{p\,min}$ resultiert dann auch ein deutlich kleinerer Spannungsexponent n (nach Norton), der statt bei ≥ 10 bei ≈ 6,8 liegt und dem Wert der 700°-Versuche entspricht, die mit Spannungen $\leq R_{p0,2}$ gefahren wurden.

Überträgt man die im Bild 1a dargestellten Daten für die minimale Kriechgeschwindigkeit in das Bild der CEA-Auswertung mit den europäischen Daten [1] in Bild 1b, so ist klar erkennbar, dass lediglich die IMF-Versuche der Phase I+II an der CRM-Charge (also mit gleichem Material) eine klare und experimentell fundierte Aussage über die Spannungsabhängigkeit der minimalen Kriechgeschwindigkeit über 6 Dekaden erlauben, die durch die Einzelwerte (x) der CEA-Chargen tendenziell gestützt wird.

Auch die technologisch wichtigen Zeit-Dehngrenzwerte (ε_f) zeigen jeweils im oberen und unteren Spannungsbereich deutlich veränderte Abhängigkeiten. Für eine belastbare Aussage sind allerdings noch wesentlich längere Versuchszeiten erforderlich, weil bei den jeweils niedrigsten Spannungen erst eine Dehnung von 0,1% erreicht ist. Ein Vorteil der langen Probe mit 200 mm Meßlänge ist, daß die üblicherweise auftretenden stärkeren Streuungen bei den Werten sich in den Bereich $\varepsilon_{f0,01\text{-}0,05\%}$ verschieben und man ab ≈ 0,1% ein stabiles, spannungskonformes Kriechen beobachtet.

Für eine endgültige Festlegung der im Bild 1a noch mit Toleranzbalken versehenen Werte und Bestimmung weiterer Zeit-Dehngrenzwerte sollten die laufenden Versuche bis deutlich über 70 000 h hinaus ausgedehnt werden.

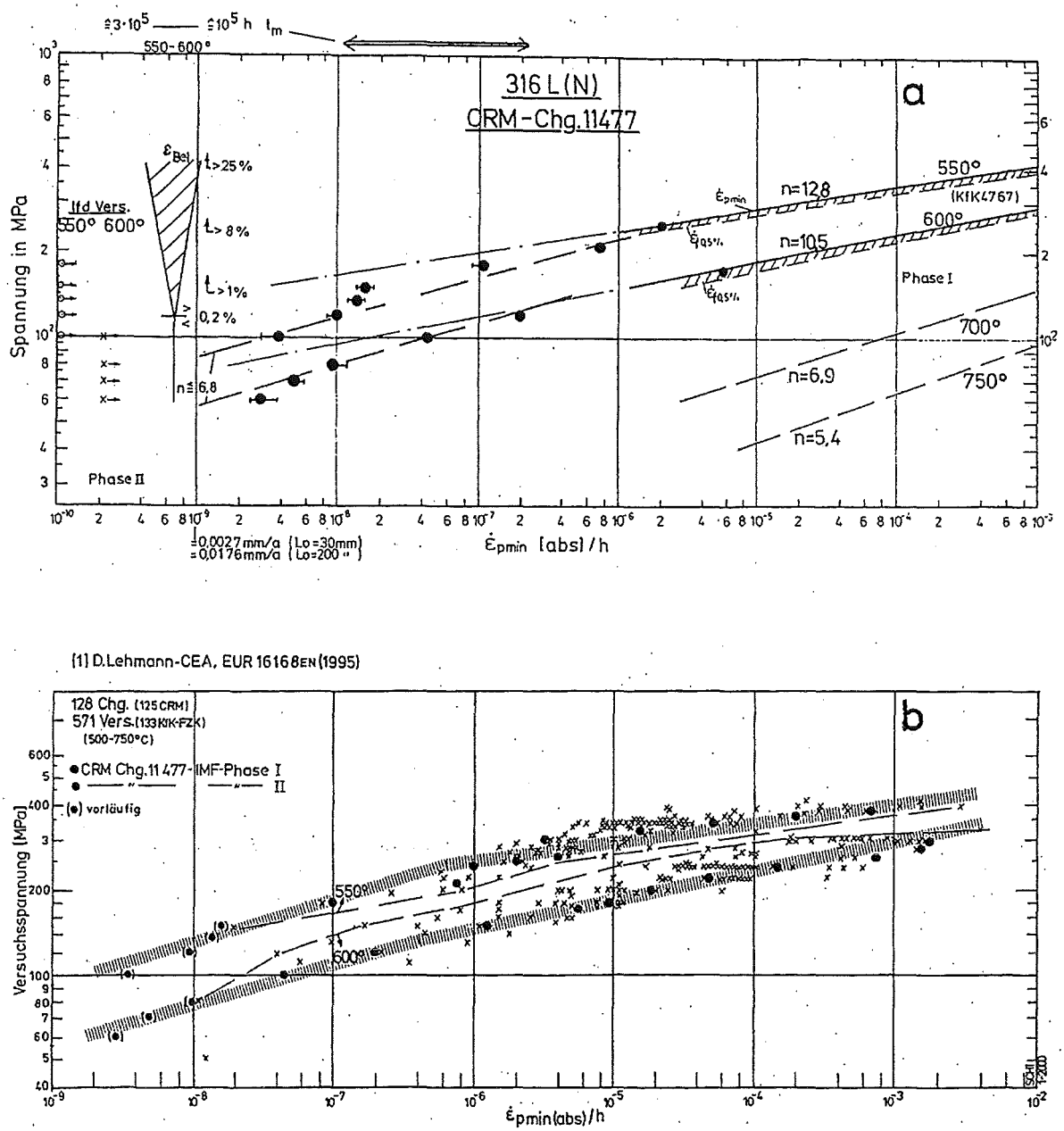


Abb. 1: Minimale Kriechgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Versuchsspannung

Literatur

[1] D. Lehmann; Evaluation of the stress to rupture and creep properties of type 316 L(N) steel for design use. Final report. EUR 16168 EN, 1995

[2] M. Schirra; Das Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten des SNR-300-Strukturwerkstoffes X6CrNi 1811 (1.4948) KfK-Bericht 4273, Februar 1988

[3] M. Schirra, S. Heger; Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten am EFR-Strukturwerkstoff 316 L(N), DIN 1.4909, KfK-Bericht 4767, September 1990. Untersuchungen zum Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten am austenitischen Stahl AISI 316 NET, KfK-Bericht 4861, August 1991

[4] M. Schirra, A. Falkenstein, S. Heger; Stand der Langzeitkriechversuche am Strukturwerkstoff 316 L(N) im niedrigen Spannungsbereich bei 550 und 600°C. Interner Bericht 32.22.04, PSF-Nr. 3336, Januar 2000

2. Untersuchungen zum Schwellen und bestrahlungsinduzierten Kriechen austenitischer Stähle, Bestrahlungsprojekt PFR-M2

2.1 Einleitung

Das Bestrahlungsexperiment PFR-M2 wurde vor geraumer Zeit konzipiert und durchgeführt, um die Bestrahlungsphänomene Schwellen und bestrahlungsinduziertes Kriechen für verschiedene Werkstoffgruppen unter hoher Neutronenbelastung zu studieren und gegebenenfalls eine Optimierung durch Variation von Haupt- und sogenannter minorer Legierungselemente zu erreichen. Neue Aktualität gewinnen solche Untersuchungen bei der Suche nach bestrahlungsbeständigen Strukturmaterialien für beschleunigergetriebene Anordnungen (Rubbia-Konzept) bzw. fortgeschrittene Leichtwasserreaktoren (HP-LWR) mit erhöhten Wirkungsgraden und überkritischen Dampfparametern. Aus diesen Gründen wurden die mikrostrukturellen Nachuntersuchungen an hochbestrahlten Druckkapseln aus austenitischen Stählen vorrangig durchgeführt, analysiert und abschließend dokumentiert [1-3].

2.2 Zusammenfassende Ergebnisse

Das Schwellverhalten der austenitischen Legierungen Fe-15Cr-15Ni-Ti (DIN 1.4970) wird wesentlich von dem Gehalt an Silizium, Titan und dem Grad der Stabilisierung (Ti/C-Relation) bestimmt. Erhöhung des Si-Gehaltes und Reduktion der Ti-Konzentration führen beide zu einer Verlängerung der Inkubationsdosis, bei der Schwellen einsetzt und zu einer verringerten Schwellrate. Die elektronenmikroskopischen Untersuchungen bestätigen die bereits früher gemachte Aussage, dass Si als schnell diffundierendes Element schwellreduzierend wirkt, solange es in Lösung bleibt. Je nach Ausscheidungstyp (kohärente γ'-Phase oder inkohärente G-

Phase), der im übrigen vom Ti-Gehalt abhängig ist, kann Si auch gebunden in einer Sekundärphase das Schwellverhalten beeinflussen Abb. 2.1 zeigt die Entwicklung diverser Ausscheidungen im Werkstoff 1.4970 (K-Charge). In dieser Legierung führt die Bildung der inkohärenten G-Phase an Poren zu verstärktem Schwellen. Dieses Ergebnis ist im übrigen ziemlich identisch mit früheren Daten, bei denen die Wirkung der Neutronenbestrahlung durch Beschuss mit Ni-Ionen simuliert wurde.

Das bestrahlungsinduzierte Kriechen dieser Legierungen besteht aus einem schwellungsabhängigen Teil, dem SIPA-Kriechen und einem schwellabhängigen Teil, dem sogenannten I-Kriechen. Die Ergebnisse dieser Hochdosisbestrahlung fügen sich dabei nahtlos an früher gefundene Korrelationen an.

Eine interessante und technisch bedeutsame Beobachtung betrifft das Festigkeitsverhalten nach Bestrahlung. Während bei austenitischen Stählen unterhalb 550°C generell eine Festigkeitssteigerung nach Bestrahlung beobachtet wird (dokumentiert in den Ergebnissen zweier niedrigschwellender Fe-15Cr-15Ni-Legierungen), tritt für die am stärksten schwellende Legierung (B-Charge mit ca. 3% Volumenschwellen) im Ringzugversuch eine deutliche Festigkeitsreduktion unterhalb 500°C auf, die möglicherweise durch eine innere Kerbwirkung der Poren verursacht wird (Abb. 2.2).

In einer hochnickel- und chromhaltigen austenitischen Legierung vom Typ Fe-35Ni-18Cr (DIN 1.4864) tritt mit zunehmender Neutronendosis eine Sättigung des Schwellens und Kriechens auf. Durch eine eingehende Analyse der mikrostrukturellen Entwicklung unter Bestrahlung sollte die Ursache für diese außergewöhnliche Beobachtung ergründet werden. Durch Bestrahlung wird eine hohe Versetzungsdichte sowie die Bildung feinverteilter γ'- und $M_{23}C_6$-Ausscheidungen beobachtet, die jedoch im Bereich der beobachteten Sättigung des Schwellens keine signifikante Änderung erfahren. In dieser Legierung besteht zusätzlich die Tendenz zur Entmischung in Ni-reiche bzw. Fe/Cr-angereicherte Zonen. Eine zwingende, eindeutige Erklärung für das beobachtete Verhalten läßt sich jedoch nicht aus diesen mikrostrukturellen Befunden ableiten.

2.3 Bewertung und Ausblick

Die erzielten Ergebnisse zum Schwellverhalten und bestrahlungsinduzierten Kriechen in austenitischen Stählen zeigen die Möglichkeiten zur weiteren Optimierung dieser Werkstoffgruppe auf. Dies könnte für die Entwicklung eines Konzeptes für Hüll- und Strukturmaterialien in einem "High Performance Light Water

Reactor - HP/LWR" bedeutsam sein, weil dort hochwarmfeste Stähle eine Alternative darstellen (Teilnahme an einem EU-Programm).

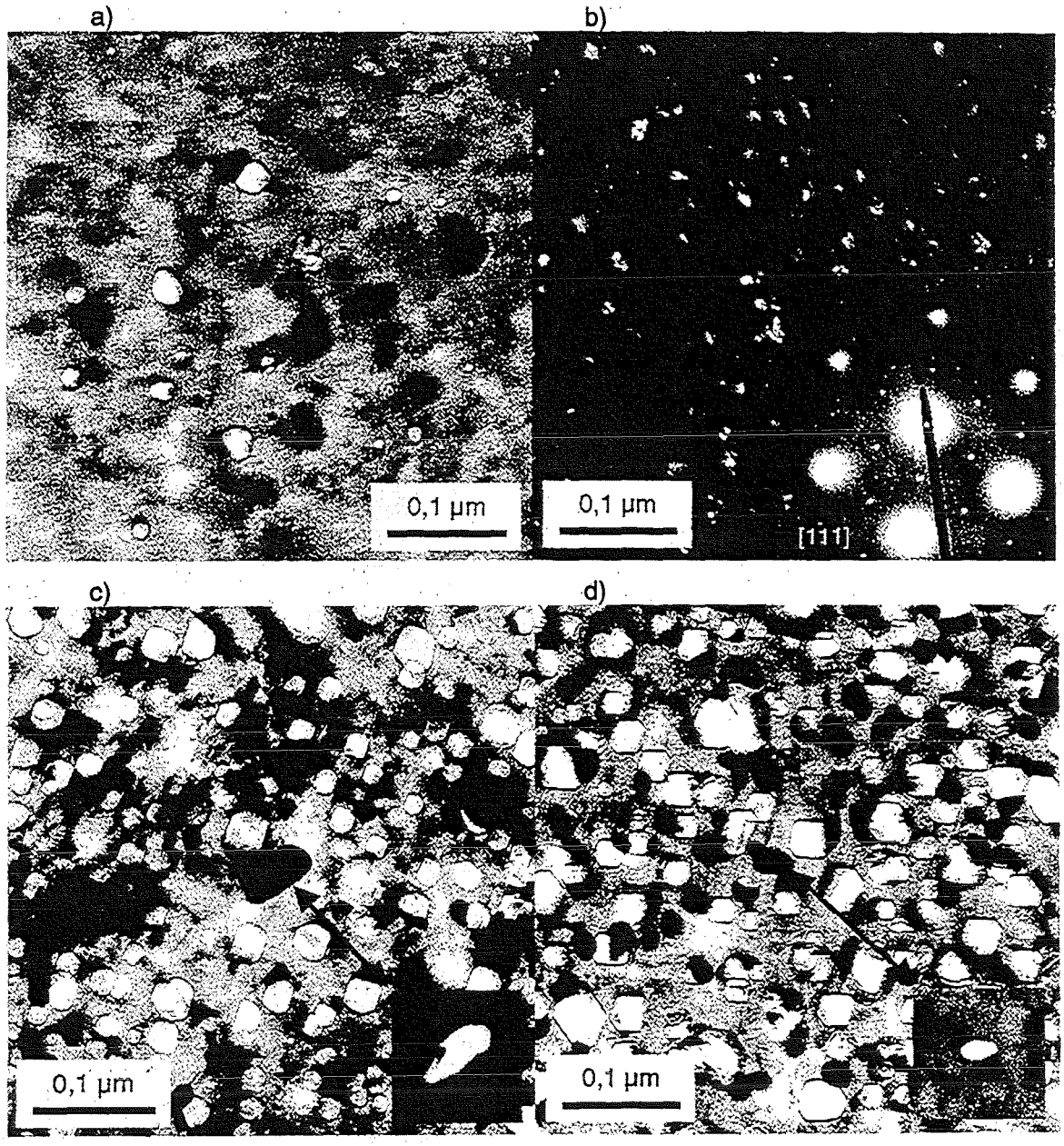


Abb 2.1:

Entwicklung der Ausscheidungen der K-Charge mit zunehmender Dosis bei 420°C
a) 36 dpa_{NRT}, Poren mit $M_{23}C6$-Ausscheidungen, b) 36 dpa_{NRT}, γ-Ausscheidungen in der Dunkelfeldabbildung, c) 106 dpa_{NRT}, Poren mit $M_{23}C_6$-Ausscheidungen, d) 106 dpa_{NRT}, Poren mit G-Phase Ausscheidungen

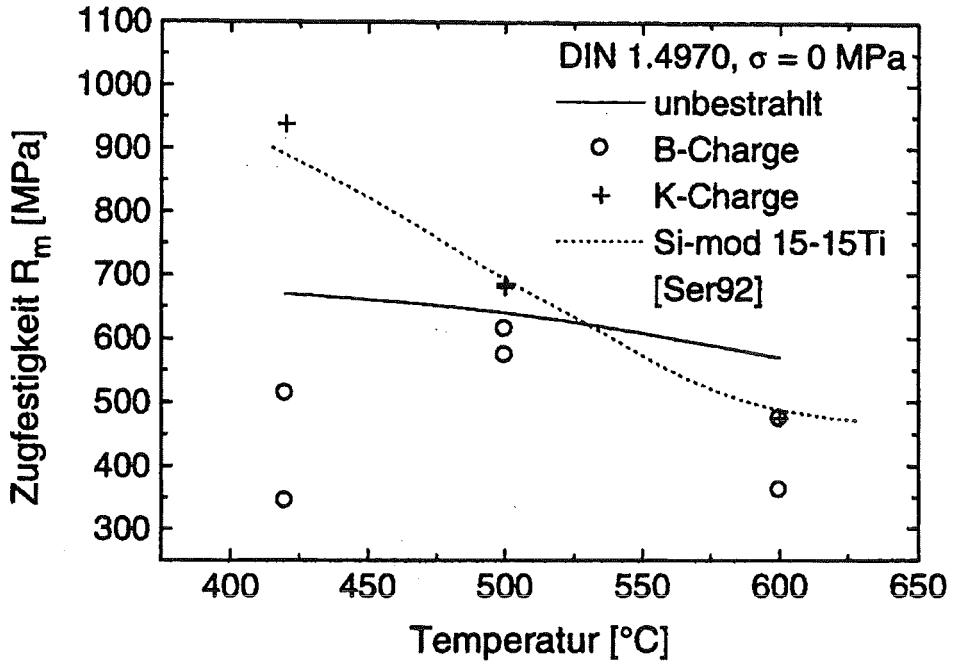


Abb. 2.2: Temperaturabhängigkeit der im Ringzugversuch bestimmten Zugfestigkeit R_m (Bestrahlungstemperatur = Prüftemperatur) an Varianten der austenitischen Legierung Fe-15Cr-15Ni-Ti (W.Nr. 1.4970)

Literatur

[1] R. Hübner; Das Bestrahlungsverhalten des austenitischen Stahls DIN 1.4970. FZKA-Bericht 6372, im Druck

[2] R. Hübner; Untersuchungen zur sättigung des Volumenschwellens im austenitischen Stahl DIN 1.4864 während Neutronenbestrahlung. FZKA-Bericht 6377, September 1999

[3] R. Hübner und K. Ehrlich; Influence of Minor Alloying Elements and Stress on Microstructural Evolution and Void Swelling of Austenitic Steels under Neutron Irradiation. ASTM-STP 1366 (2000) 778-791

3. Fraktographische Untersuchungen an geprüften Zugproben aus ferritischen und austenitischen LWR-Stählen

3.1. Einleitung

Im Rahmen des EU-Projektes REVISA (Reactor Vessel Integrity in Severe Accidents), Nuclear Fission Safety Programme Projekt FI4S-CT96-0024, wurde ein Un-

terprogramm „Size Effects“ formuliert. Ein Teilaspekt zu diesem Thema liegt darin, daß bei der Reduktion der Probendurchmesser von geometrisch ähnlichen Zugproben höhere Festigkeiten gemessen wurden. Dieser sogenannte „Größeneffekt“ von Versuchsproben im Zugversuch sollte untersucht und bezüglich des Materialverhaltens weitestgehend quantifiziert werden. Zusätzlich sollte auch der Einfluss der Verformungsgeschwindigkeit, auf die Festigkeitsdaten und das Bruchverhalten überprüft werden. Die Federführung für diese Aufgabe liegt beim IRS; die fraktographischen Untersuchungen wurden im IMF I durchgeführt.

3.2. Ergebnisse

Für die experimentellen Arbeiten standen zwei Materialien zur Verfügung: Ein austenitischer Stahl X6CrNiNb18 10 und der ferritisch-bainitische Druckbehälterstahl 20MnMoNi5 5. Von beiden Stählen lagen Rundzugproben mit zwei verschiedenen Messlängendurchmessern vor; 3 und 30 mm. Diese Proben wurden bei Raumtemperatur mit verschiedenen Dehngeschwindigkeiten, vom quasistatischen bis zum dynamischen Zugversuch (10^{-3}, 10^{-1}, 10 und 200 s^{-1}) geprüft. Das Interesse galt zunächst dem Einfluss der Versuchsgeschwindigkeit auf das Bruchverhalten. Ein weiterer Versuchsparameter war der unterschiedliche Messlängendurchmesser der Zugproben. Es wurde eine Auswahl aus der vorliegenden Versuchsserie getroffen. Die Proben wurden metallographisch im Mitte-Längsschliff durch die Bruchzone und im unverformten Probenkopf sowie die Struktur der Brüche im Rasterelektronenmikroskop untersucht.

Das Gefüge des Stahl X6CrNiNb18 10 zeigte die typische austenitische Kornstruktur mit Zwillingsbildung (Bild 3.1). Die Korngröße variierte im Durchmesser zwischen 30 und 100 µm und man konnte die Probenentnahme aus dem 70 mm dicken Plattenmaterial nachvollziehen, dahingehend, dass die grobe Korngröße aus der Plattenmitte und das feine Korn aus den oberflächennahen Bereichen stammte. Im Grundmaterial waren Einschlüsse aus MnS und Zeilenstrukturen aus Ferrit erkennbar.

Alle geprüften Zugproben hatten duktile Brüche. In der Probenserie mit 3 mm-Messlängendurchmesser und unterschiedlichen Dehngeschwindigkeiten änderte sich das Bruchaussehen so, daß bei langsamer Testgeschwindigkeit ($\dot{\varepsilon} = 10^{-3}$ s^{-1}) der typische Gleitbruch mit Teller-Tassen-Formation entstand, dagegen nahm bei hoher Dehngeschwindigkeit ($\dot{\varepsilon} = 200$ s^{-1}) der Anteil an Scherbruch stark zu. Bei diesen hohen Verformungsgeschwindigkeiten beeinflussten die Materialeinschlüsse wesent-

Ich stärker das Bruchgeschehen; sie waren die Initiatoren für die Scherbildung an den Probenaußenflächen.

Im mittleren Bruchbereich, im „Tassenboden", war eine deutliche Zunahme der Wabendurchmesser mit höherer Dehngeschwindigkeit, von anfangs $\varnothing$ = 2 µm auf $\varnothing$ = 20 µm, bei $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}\ s^{-1}$ zu beobachten. Die Durchmesser der Waben wurden als kreisäquivalente mittlere Durchmesser angegeben. Mit Zunahme der Verformungsgeschwindigkeit war auch, verbunden mit einer Reduktion der Materialzähigkeit, eine Verminderung der Wabentiefe zu beobachten.

Beim Vergleich der kleinen und großen Probengeometrien mit gleichen Dehngeschwindigkeiten war in den Wabendurchmessern kein nennenswerter Unterschied zu sehen. Die makroskopische Bruchstruktur der 30 mm-Durchmesser-Proben zeigte bei langsamer und schneller Dehnung die gleiche Teller-Tassen-Formation.

Der Stahl 20MnMoNi5 5 hatte ein feines bainitisches Gefüge mit M_3C-Ausscheidungen [1]. Die starken Seigerungen, als dunkle Streifen im Material erkennbar, entstanden durch die starke Vergröberung der Ausscheidungen (Bild 3.2). Die Brüche der 3 mm-Proben waren auch alle duktiler Natur. Es konnten nur geringe Reduktionen in der Brucheinschnürung bei hohen Dehngeschwindigkeiten festgestellt werden. Die Wabendurchmesser in der Bruchmikrostruktur zeigten eine unwesentliche Zunahme. Bei den 30 mm-Proben wirkte sich allerdings die Zeiligkeit des Materials aus. Die Proben, die bei langsamen, quasistatischen Dehngeschwindigkeiten ($\dot{\varepsilon} = 10^{-3}\ s^{-1}$) getestet wurden, zeigten Fräserbrüche; ein typisches Zeichen für Materialseigerungen (Bild 3.3). Die radialen Risse bildeten sich während der langsamen Verformung aus. Im Mittelängsschliff konnte im gesamten Bereich der Einschnürung die Rissbildung in den Seigerungen beobachtet werden. Bei hoher Dehngeschwindigkeit lag wieder ein Teller-Tassen-Bruch vor (Bild 3.4).

Bei den bisherigen Untersuchungen zum Einfluss der Probengröße muss beachtet werden, dass mehrere Parameter sich auf das Bruchgeschehen auswirken, wie z.B. der Einfluss der unterschiedlichen Korngröße, die Art und Häufigkeit von Einschlüssen und Seigerungen. Als wesentliches Ergebnis konnte bei den untersuchten Proben des Stahls X6CrNiNb18 10 festgestellt werden, dass besonders bei den kleinen Probendurchmessern, bei hohen Dehngeschwindigkeiten gegenüber den quasistatischen Versuchen eine deutliche Reduktion der Brucheinschnürung vorlag

(Tabelle 1). Dieser Verlust an Duktilität wurde auch in der Ausbildung der Wabenstrukturen erkennbar.

Beim Stahl 20MnMoNi5 5 spielte die langsame Verformung bei niedriger Dehngeschwindigkeit eine wesentliche Rolle, wobei sich, bedingt durch die Materialseigerungen, Fräserbrüche bei den großen Probendurchmessern ausbildeten. Hier konnte als "Size effect" bei den Kleinproben und niedriger Dehngeschwindigkeit dagegen der Teller-Tassen-Bruch beobachtet werden.

Tabelle 1: Zusammenfassende Testergebnisse

Werkstoff X6CrNiNb 18 10 (1.4550)

Sample ∅ [mm]	**3** **H1A05, H1A06, H1A07**	**30** **H3A01, H3A02, H3A03**
Strain rate [sec^{-1}]	**10^{-3}**	**10^{-3}**
Fracture	Cup and Cone	Cup and Cone
R_m [MPa]	614, 612, 615	579, 578, 580
Z [%]	84, 84, 84	77, 75, 77

Sample ∅ [mm]	**3** **H1A18, H1A19, H1A20**	**30** **H3A09, H3A11, H3A12**
Strain rate [sec^{-1}]	**200**	**150**
Fracture	Shear fracture	Cup and Cone
R_m [MPa]	636, 642, 647	625, 624, 644
Z [%]	74, 74, 73	71, 72, 73

Werkstoff 20 MnMoNi 5 5 (1.6310)

Sample ∅ [mm]	**3** **H1012, H1013**	**30** **H3018, H3027, H3030**
Strain rate [sec^{-1}]	**2×10^{-3}**	**10^{-3}**
Fracture	Cup and Cone	Milling Cutter Type Fracture
R_m [MPa]	665, 662	602, 609, 599
Z [%]	78, 78	71, 67,68

Sample ∅ [mm]	**3** **H1002, H1003, H1004**	**30** **H3001, H3002, H3003**
Strain rate [sec^{-1}]	**200**	**150**
Fracture	Cup and Cone	Cup and Cone
R_m [MPa]	757, 724, 755	672, 659, 680
Z [%]	73, 71, 70	71, 73, 73

3.3 Zusammenfassung und Ausblick

Mit der fraktographischen Untersuchung von zwei wichtigen Reaktorstählen (X6CrNiNb18 10 und 20MnMoNi5 5) nach quasistatischen und dynamischen Zugversuchen mit sehr unterschiedlichen Verformungsgeschwindigkeiten ($\dot{\varepsilon} = 10^{-3}$ s^{-1} bis 200^{-1}) wurde begonnen. Unter allen Bedingungen wurden duktile Gleitbrüche beobachtet; im einzelnen konnten aber Teller-, Tassen-, Scher- und Fräserbruchanteile unterschieden werden. Im dynamischen Test tritt eine deutliche Vergröberung der Wabenstruktur auf sowie auch die Tendenz zur Reduktion der Brucheinschnürung Z, was durch die Verminderung der Gleitfähigkeit des Materials erklärt werden kann.

X6CrNiNb18 10

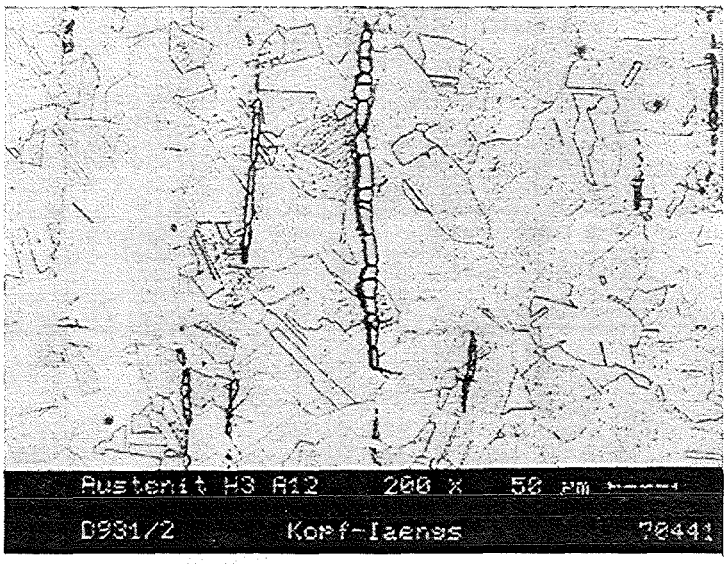


Abb. 3.1: Stahl X6CrNiNb 18 10: Austenitisches Gefüge mit Ferritzeilen

20MnMoNi5 5

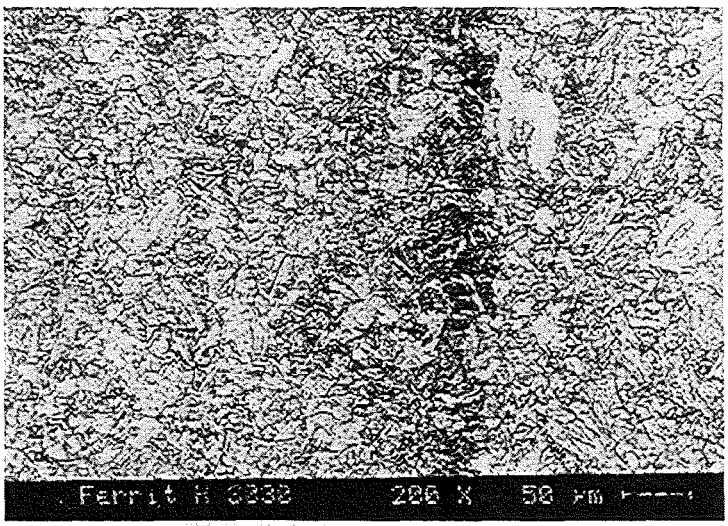


Abb. 3.2:Stahl 20MnMoNi 5 5: Ferritisch-bainitisches Gefüge mit dunklen Seigerungszonen

Abb. 3.3: Stahl 20 MnMoNi5 5, H3030,
Ø 30 mm, $\varepsilon = 10^{-3}\ s^{-1}$:Fräserbruch

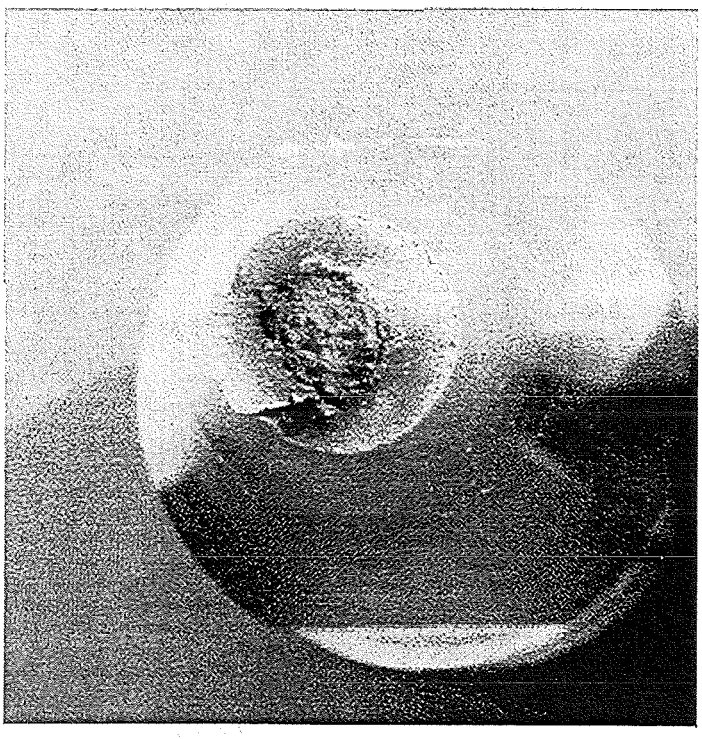


Abb. 3.4: Stahl 20MnMoNi5 5, H3001
Ø 30 mm, $\varepsilon = 150\ s^{-1}$:Teller-Tassen-Bruch

Literatur

[1] H.-J. Wieland; Mechanische Prüfungen und elektronenmikroskopische Untersuchungen des Einflusses der Neutronenbestrahlung auf die Versprödung von Stählen in verschiedenen Gefügezuständen. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1986.

II. Untersuchung des Größeneinflusses auf das Verformungs- und Versagensverhalten von gelochten Flachzugproben im Rahmen des LISSAC-Programms

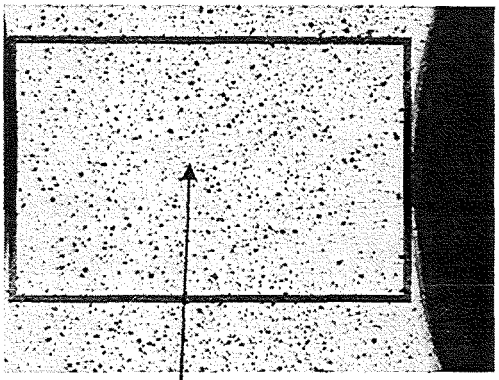
(J. Aktaa, M. Klotz, M. Pfeifenroth, R. Schmitt, H. Schneider, IMF II)

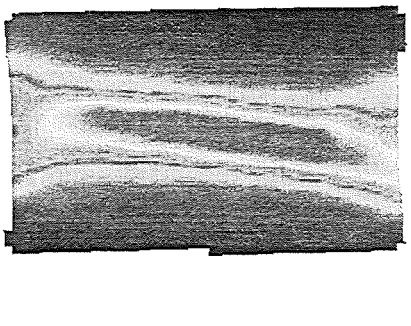
Die experimentelle Verformungs- und Versagensanalyse ist für die konstruktive Bauteilauslegung sowie für die Verifikation von FE-Berechnungen von erheblicher Bedeutung. Im Rahmen des EU-Projektes LISSAC (**Li**mit **S**train for **S**evere **A**ccident **C**onditions) werden gelochte Flachzugproben in verschiedenen Maßstäben in einer servohydraulischen Prüfmaschine belastet und die inhomogenen Verformungszustände während des Versuchs mit einem optischen Meßsystem erfasst. Das System arbeitet nach dem Prinzip des Objektrasterverfahrens, bei dem ein auf der Probenoberfläche künstlich aufgebrachtes Fleckenmuster mit einer hochauflösenden Kamera aufgezeichnet wird. Aus den Abstandsänderungen benachbarter Punkte können dann die entsprechenden Dehnungen berechnet werden. Mit dem Einsatz einer zweiten Kamera ist es sogar möglich, dreidimensionale Verschiebungsfelder zu bestimmen.
Die Messapparatur wurde an einer hydraulischen Prüfmaschine angebracht und in Vorversuchen an Proben unterschiedlicher Geometrien kalibriert und getestet.

Die nachfolgende Abbildung zeigt zwei verschiedene Verformungszustände einer Flachprobe sowie die zugehörigen berechneten Dehnungsfelder.

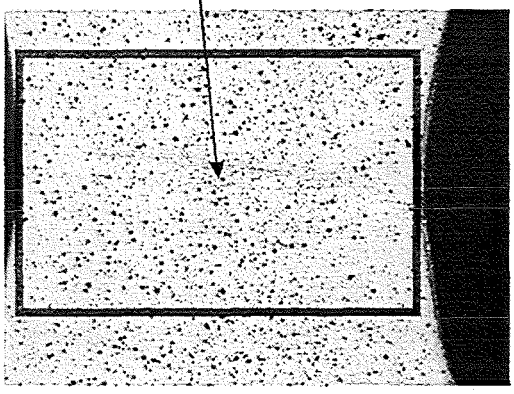
Livebilder

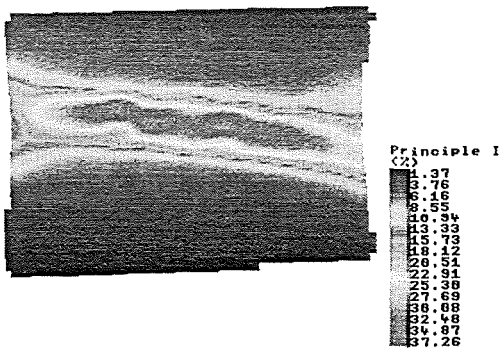
Dehnungsverteilung

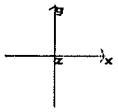




Rißausbildung







32.22.06 Untersuchungen zum Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme

(W. Pfrang, D. Struwe, W. Zimmerer, IRS)

Diese Arbeiten umfassen den Beitrag des Forschungszentrums Karlsruhe zum CABRI-FAST und zum CABRI-RAFT Programm, die in internationaler Zusammenarbeit mit dem französischen IPSN und dem japanischen JNC durchgeführt werden. Ziel dieser Programme ist es, das transiente Verhalten von Kernen mit innovativen Brennstabkonzepten zu untersuchen und ihre Versagensschwellen zu ermitteln. Von besonderem Interesse ist es hier, theoretische Modelle zu entwickeln, mit denen im Falle von Brennstoffschmelzen die überlagerten Phänomene der Brennstoffbewegung innerhalb des Brennstabes vor Brennstabbelastung beschrieben werden können. Um diese Zielsetzung zu erfüllen, wurde das im Programm SAS4A enthaltene Brennstabmodell DEFORM-4C erweitert und an den von der IPSN entwickelten Programmmodul EJECT gekoppelt. Mit der gekoppelten Programmversion wurden Experimente nachgerechnet und die Modellparameter an den experimentellen Befunden kalibriert. Auf dieser Grundlage sind die den Modellen zu Grunde liegenden Annahmen noch einmal zu überprüfen beziehungsweise zu erweitern.

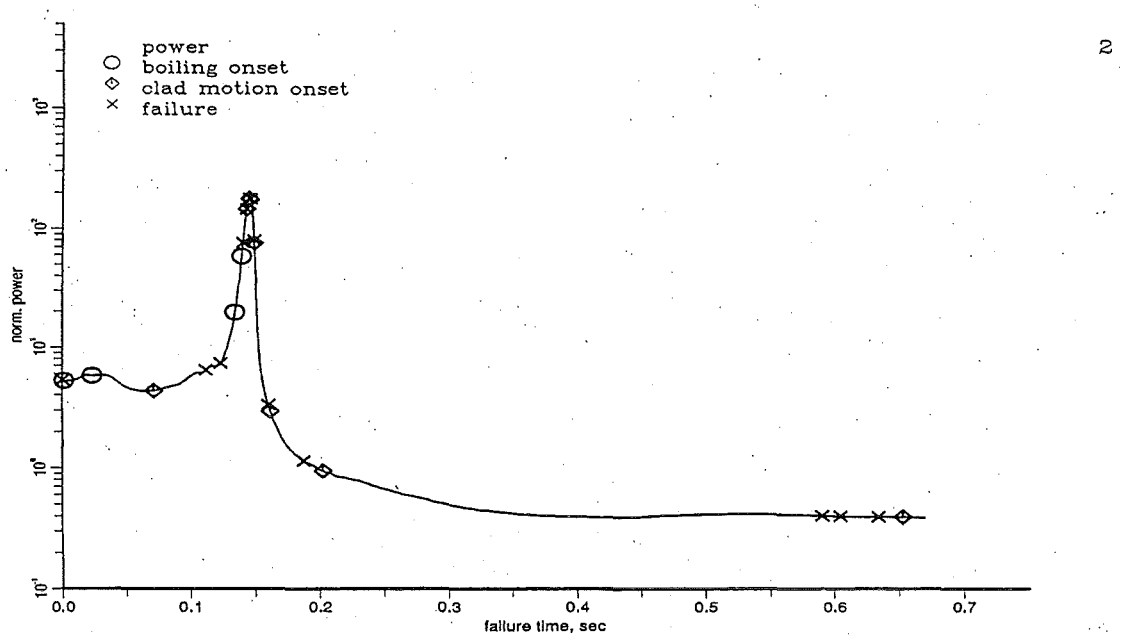


Fig. 1 Transient variation of the normalised power during the failure time of a ULOF-accident in the CAPRA 4/94 core design up to first reactor shut-down

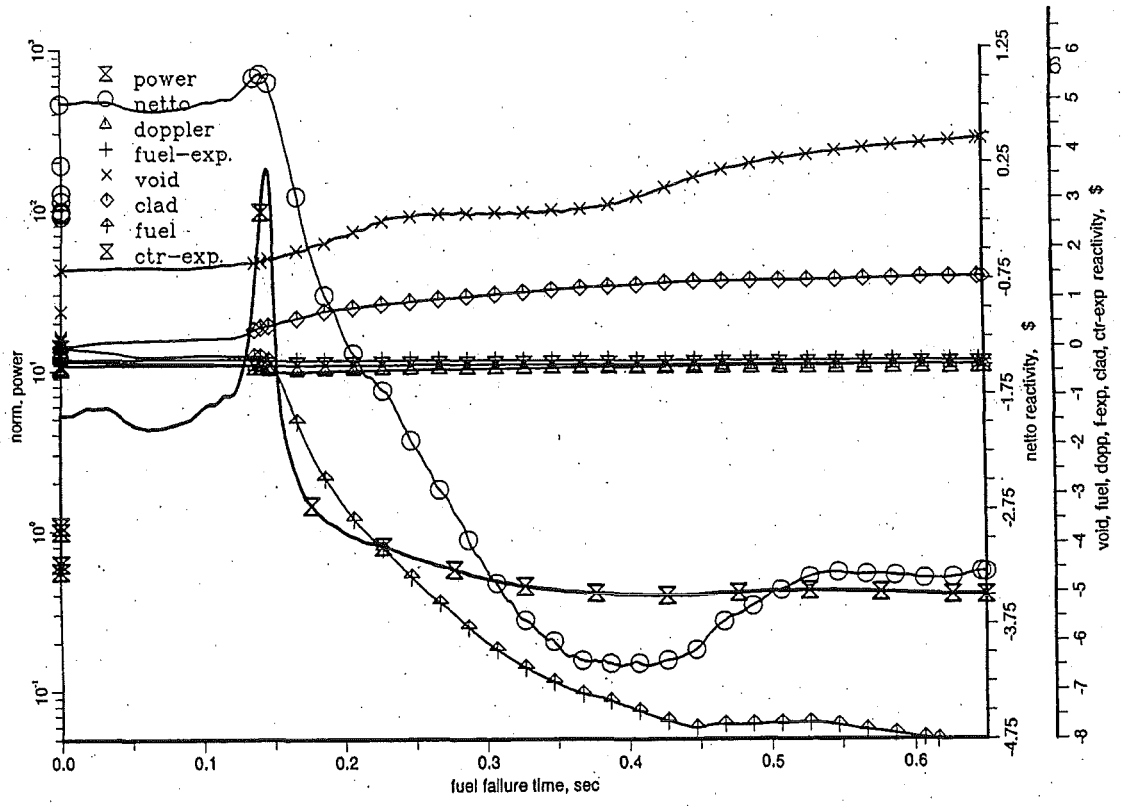


Fig. 2 Transient variation of characteristic core state variables during the failure time of a ULOF-accident in the CAPRA 4/94 core design up to first reactor shut-down

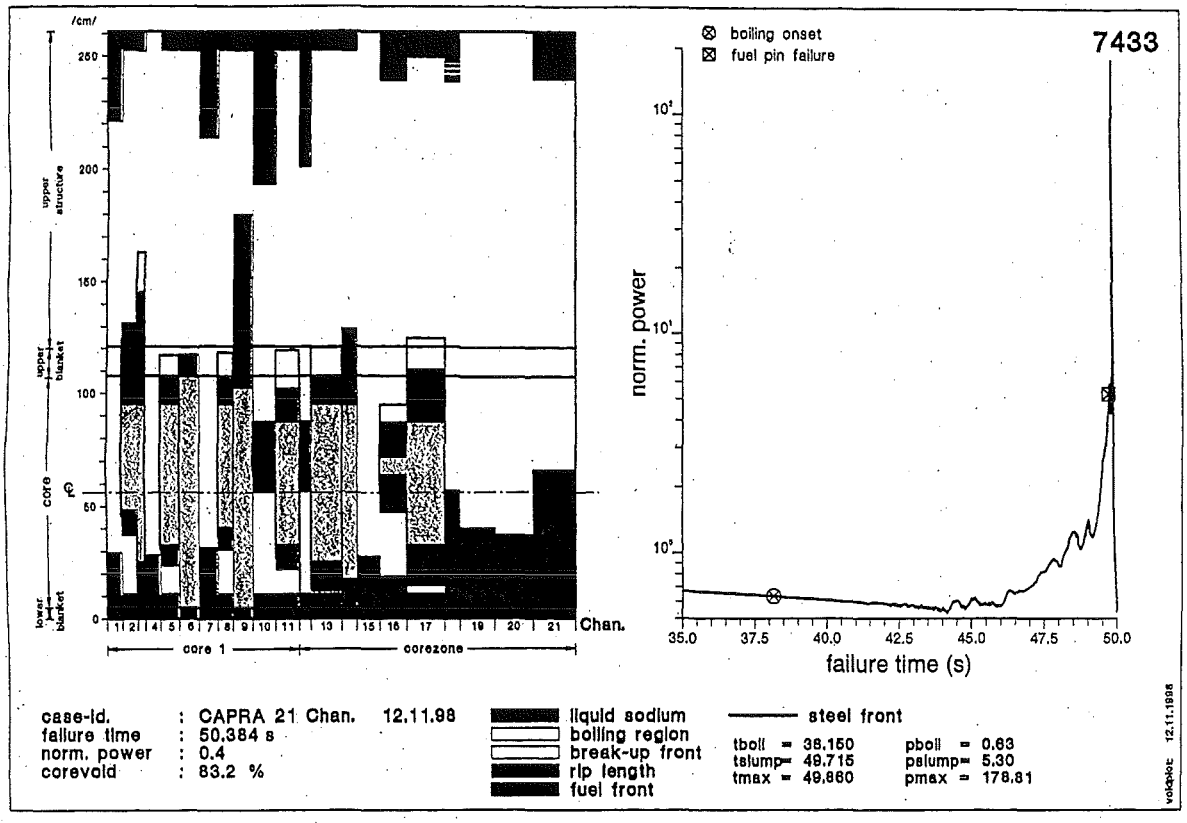


Fig. 3 Core state at the end of the initiation phase calculation of a ULOF-accident in the CAPRA 4/94 core design

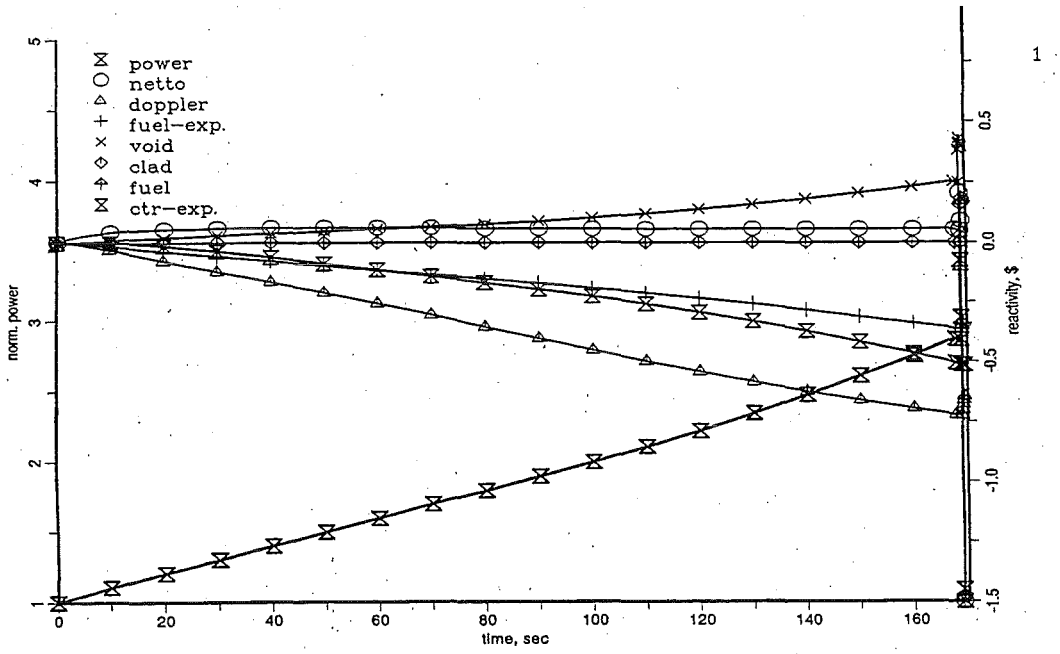


Fig. 4 Transient variation of characteristic core state variables during the initiation phase of a slow UTOP-accident in the CAPRA 4/94 core design

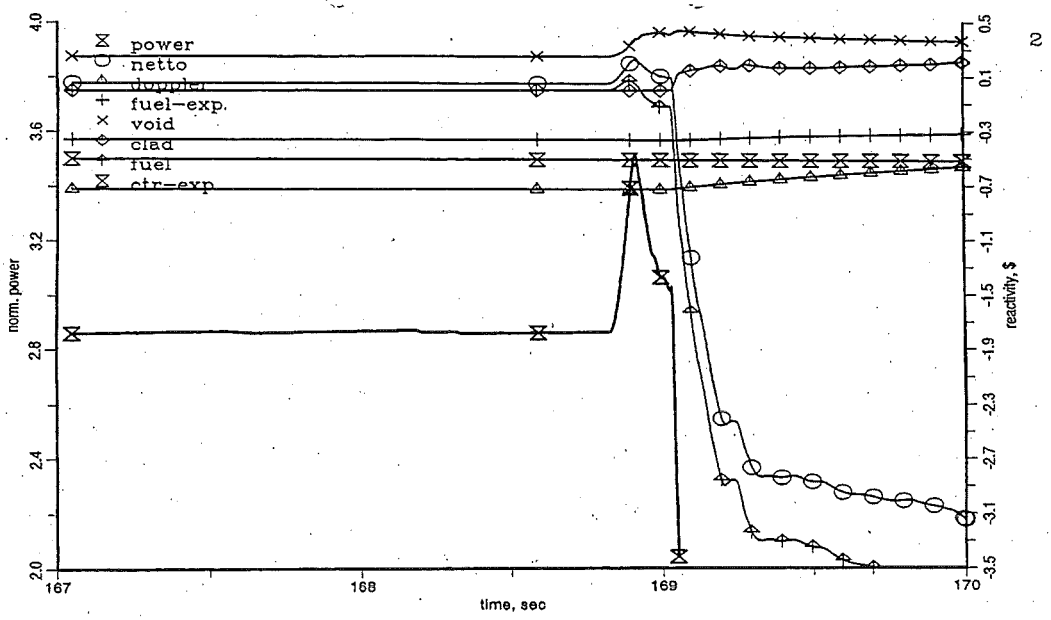


Fig. 5 Transient variation of characteristic core state variables during the post-failure phase of a slow UTOP-transient in the CAPRA 4/94 core design

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 (Resuspension) schwerflüchtiger Substanzen aus Wasservorlagen, z. B. dem Sumpfwasser oder dem gefluteten Core Catcher, kann als Langzeitbeitrag zum radiologischen Quellterm nach einem Unfall mit Kernzerstörung eine wichtige Rolle spielen. Im Rahmen des KAREX-Programms werden Laborversuche, Versuche im technischen Maßstab und modelltheoretische Entwicklungen zu dieser Thematik durchgeführt. Die beim Aufplatzen von Gas- oder Dampfblasen an der Wasseroberfläche zu beobachtende Tröpfchenbildung ist hierbei von besonderer Bedeutung.

Im Berichtszeitraum wurde vorwiegend die Resuspension bei Siedebedingungen untersucht. Mit Laborversuchen konnte gezeigt werden, dass sich beim Sieden eine stabile Strömungswalze einstellt und der größte Teil der Resuspension im Bereich der Abwärtsströmung erfolgt. Nach Separation von Dampf und Tröpfchen konnte ebenfalls gezeigt werden, dass die Materialfreisetzung in hohem Maße an die Tröpfchenfreisetzung gekoppelt ist. Bei den Versuchen im technischen Maßstab wurden zunächst die Siedevorgänge im Behälter untersucht und danach mit unterschiedlichen Metallpulvern erste Experimente zur Bestimmung von Resuspensionsfaktoren durchgeführt. Parameter waren die Heizleistung und die Absaughöhe über der Wasseroberfläche.

Zur Berechnung der Tropfenfreisetzung und der damit gekoppelten Radionuklidfreisetzung ist an der Ruhr-Universität Bochum der Rechencode SUSANA entwickelt worden. Es ist vorgesehen, den Code als Modul im MELCOR einzubauen.

1. Überblick

Bei der Betrachtung radiologischer Quellterme nach einem schweren Störfall 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 (Resuspension) von bereits abgeschiedenem Material. Die Resuspension

umfasst sowohl partikelförmiges Material aus trockenen Ablagerungen als auch partikelförmiges und lösliches Material aus Ablagerungen in Wasser, z. B. dem Sumpfwasser, dem IRWST oder dem gefluteten Core Catcher nach der Schmelzeausbreitung.

Im KAREX-Programm werden Experimente zur Resuspension schwerflüchtiger, partikelförmiger und auch löslicher Substanzen aus Wasservorlagen durchgeführt. Gas- und Dampfblasen spielen dabei eine besondere Rolle, insbesondere die beim Aufplatzen zu beobachtende Tropfenbildung. Bei geringen Gas- oder Dampfvolumenströmen beruht die Tropfenbildung und –freisetzung auf dem Zerplatzen einzelner Blasen an der Flüssigkeitsoberfläche (Filmtropfen, Jettropfen). Bei hohen Volumenströmen beruht die Freisetzung dagegen auf dem Zerfall instabiler Flüssigkeitsbereiche an der Oberfläche infolge des Impulsaustausches zwischen Gas und Flüssigkeit. In allen Fällen können die Tröpfchen als Träger des beigemischten partikelförmigen bzw. löslichen Materials dienen.

Das KAREX-Programm des IRS besteht aus Laborversuchen und Versuchen im technischen Maßstab. Begleitende modelltheoretische Arbeiten werden vorwiegend an der Ruhr-Universität Bochum durchgeführt.

Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt der Arbeiten bei der Untersuchung von Resuspensionsprozessen aus Wasservorlagen im Bereich des Siedepunktes, d. h. bei relativ hohen Gasvolumenströmen.

2. Laborversuche

Für die Laborversuche steht u. a. ein zylindrisches Gefäß mit 14 cm Durchmesser und 37 cm Höhe zur Verfügung. Es besitzt eine 1,2 kW-Bodenheizplatte, deren Heizleistung zur Simulation der Nachzerfallsleistung geeignet ist. Die freigesetzten Mengen (Dampf, Tröpfchen, beigemischte Substanzen) werden über einen Trichter aus dem Gasraum über der Wasseroberfläche abgezogen. Ein nachgeschalteter Impaktor erlaubt eine näherungsweise Separation von Tröpfchen und Dampf. Das resuspendierte Material wird normalerweise durch chemische Analysen quantitativ bestimmt. Das Verhältnis aus freigesetzter Konzentration und Poolkonzentration (oder aus eingewogener Menge berechneter Konzentration) wird als Resuspensionsfaktor RF bezeichnet. Beim Sieden stellt sich normalerweise eine stabile Strömungswalze ein, wie in Abb. 1 dargestellt. Aufwärtsströmung und Abwärtsströmung sind hier durch Pfeile angedeutet.

Um ein Höhenprofil der in den Gasraum freigesetzten Mengen bestimmen zu können, wurde im Gasraum oberhalb des Pools eine 9 cm breite durchsichtige Scheibe senkrecht zur Oberfläche installiert. Diese Scheibe ist, wie in Abb. 1 gezeigt, in 9 Zonen eingeteilt und ermöglicht so auch eine radiale Ortsauflösung. Im Berichtszeitraum wurden mit dieser Anordnung einige Versuchsreihen durchgeführt. Beigemischtes Material war partikelförmiges $SrZrO_3$, das für die spätere optische Auswertung besonders vorteilhaft ist. Es ergab sich das zunächst unerwartete Resultat, dass der Materialaustrag überwiegend im Bereich der Abwärtsströmung stattfindet. So sind, wie aus Abb. 1 ersichtlich, die aufgesammelten Mengen in den Zonen 1, 2, 3 deutlich höher als in den Zonen 7, 8, 9. Dieser Effekt ist dadurch erklärbar, dass für die Freisetzung in hohem Maße die Jettropfen aus dem Aufplatzen kleiner Blasen (Durchmesser im Millimeterbereich) verantwortlich sind. Diese kleinen Blasen findet man vorwiegend in der Abwärtsströmung, während die Aufwärtsströmung durch hohe Gasvolumenanteile geprägt ist.

In Abb. 2 und Abb. 3 ist die optisch ermittelte Flächenbelegung der Scheibe bei zwei unterschiedlichen Heizleistungen (500 W, 715 W) für die neun Zonen dargestellt. Dazu wurden die Zonen in „Messzellen" von 15 mm Höhe (bei 10 mm Zonenbreite) unterteilt. Ein Messwert von 10 Prozent bedeutet beispielsweise, dass 10 Prozent der Messzellenfläche mit (angetrocknetem) Material belegt war. Die wesentlich größere Flächenbelegung der Zonen im Bereich der Abwärtsströmung sind unmittelbar ersichtlich. Bezüglich der Höhenverteilung findet man freigesetztes Material bis zu 160 mm bei 500 W (Abb. 2) und – interessanterweise – nur bis zu 120 mm bei der höheren Heizleistung 715 W (Abb. 3).

Integrale Rückhaltefaktoren wurden bei kleinen Heizleistungen und Pooltemperaturen knapp unterhalb des Siedepunktes (86 – 98 °C) gemessen. In diesem Bereich sind kleine Blasen und die daraus resultierenden Jettropfen besonders effektiv. Für den Austrag von Zn-Partikeln ergab sich mit der eingangs beschriebenen Messtechnik der Wert $RF = 2 \cdot 10^{-3}$.

Zur Detektion der Resuspension gelöster Substanzen, z. B. CsI, ist eine Aufkonzentrierung der Tropfenmasse und der Dampfmasse notwendig. Nach vorangegangener Separation über eine Impaktorstufe konnten beide Massen getrennt behandelt werden. So ergab sich für Cs bei 98 °C Pooltemperatur $RF = 4{,}2 \cdot 10^{-2}$ für die Tropfenmasse und $RF < 5 \cdot 10^{-5}$ für die Dampfmasse. Nennenswerte Mengen werden offensichtlich nur über Tropfenaustrag freigesetzt.

3. Versuche im technischen Maßstab

Für die Versuche im technischen Maßstab wurde Ende 1998 ein neuer Versuchsstand in Betrieb genommen, dessen Herzstück ein zylindrischer Behälter mit 0,6 m Durchmesser, 1,1 m Höhe und einer am Boden installierten 50 kW-Heizplatte ist. Im Berichtszeitraum wurden zunächst mehrere Experimente bei unterschiedlichen Heizleistungen zur Erfassung der Siedevorgänge im Behälter durchgeführt. Normalerweise stellt sich eine relativ stabile Strömungswalze ein, die in periodischen Abständen von kurzzeitigen, heftigen Aufwallungen im Bereich der Aufwärtsströmung unterbrochen wird. Diese Zeitabstände sind abhängig von der Heizleistung und verkürzen sich z. B. von 20 s bei 15 kW auf 12 s bei 30 kW.

Anschließend wurden Resuspensionsversuche mit verschiedenen Substanzen (unlösliche Metallpulver) durchgeführt. Ähnlich wie bei den Laborversuchen wurden die freigesetzten Mengen über einen Trichter aus einer definierten Höhe über der Pooloberfläche abgezogen. In Abhängigkeit der Substanz, der Höhe und der Heizleistung wurden Resuspensionsfaktoren zwischen $9 \cdot 10^{-1}$ und $3{,}7 \cdot 10^{-4}$ gemessen (siehe Tabelle 1). Es gibt allerdings noch nicht genügend Experimente, um eine Systematik aufstellen zu können.

Die RF beziehen sich auf die zugegebene Menge der jeweiligen Substanz, da die Poolkonzentration starken Schwankungen unterliegt. So wurden Konzentrationsunterschiede von Faktoren 36 bis 73 bei Partikeln zwischen aufsteigender Strömung mit hohem Gasvolumenanteil und fallender Strömung festgestellt (die höhere Konzentration ist im Bereich der Abwärtsströmung). Dies bedarf noch eingehenderer Untersuchungen.

Für gelöstes CsI wurden RF von $4{,}4 \cdot 10^{-3}$ bei 16,6 kW/m^2 Heizleistung und $2{,}23 \cdot 10^{-4}$ bei 74,6 kW/m^2 in einer Höhe von 10 cm, bezogen auf Tropfen- und Dampfmasse, gemessen.

4. Modelltheoretische Arbeiten

Zur Bestimmung des Radionuklidquellterms bei schweren Störfällen werden an der Ruhr-Universität Bochum Modelle zur Beschreibung des Beitrags der Resuspension aus siedenden Wasservorlagen entwickelt. In Abhängigkeit vom Dampfvolumenstrom werden dabei unterschiedliche Strömungsformen unterschieden. Bei geringen Dampfvolumenströmen beruht die Tropfenfreisetzung auf dem Zerplatzen einzelner Blasen an der Flüssigkeitsoberfläche. Es entstehen dabei sowohl Tropfen durch die Auflösung der Blasenlamelle (Filmtropfenbildung) als auch durch den Zerfall von Flüssigkeitsjets (Jettropfenbildung), die durch die Rückströmung der Flüssigkeit in den nach dem

Blasenzerplatzen ggf. zurückbleibenden Blasenkrater entstehen. Bei hohen Dampfvolumenströmen, bei denen unterschiedlich große Gasbereiche unstetig und ungeordnet in der Flüssigkeit aufsteigen, beruht die Freisetzung dagegen auf einem Zerfall instabiler Flüssigkeitsbereiche an der Oberfläche infolge des Impulsaustausches zwischen Gas und Flüssigkeit. Zur Berechnung der Tropfenfreisetzung und der damit gekoppelten Radionuklidfreisetzung durch diese drei Mechanismen ist das Programmmodul SUSANA (SUmp water resuspension Source term ANAlysis) erstellt worden. Dieser Code ermöglicht die Bestimmung des Quelltermbeitrags der Radionuklidfreisetzung aus Sümpfen, der insbesondere für geplante Core Catcher-Konzepte von Interesse ist. Die in /1/ dokumentierte und ausführlich erläuterte Programmversion SUSANA.MOD1 stellt dabei einen eigenständigen Code dar, dessen Ein- bzw. Ausgabe von Daten über Dateien erfolgt. Es ist vorgesehen, den Code als Modul in MELCOR einzubauen.

Literatur

/1/ A. Voßnacke, M. K. Koch, H. Unger
Dokumentation des Resuspensionscodes SUSANA
Fachbericht RUB-I-247, Nov. 1999

Material	Cu		Zn		Fe	Cr
Partikelgröße	< 50 µm	mittl. ∅ 2 µm	mittl. ∅ 7,5 µm	mittl. ∅ 3 µm	mittl. ∅ 10 µm	38-45 µm
Absaughöhe über Oberfläche (mm)	30	100	30	100	100	30
RF bei 4,4 kW Heizleistung entspr. 18,25 kW/m²	2,1 E-3		1,8 E-2			(3,8 E-4) Nähe NG
RF bei 18 kW Heizleistung entspr. 74,6 kW/m²		1,1 E-2		9,0 E-1	3,8 E-2	

Tabelle 1. Resuspensionsfaktoren RF aus KAREX-Versuchen im technischen Maßstab mit verschiedenen Metallpulvern.

- RF ist das Verhältnis aus freigesetzter Konzentration und Poolkonzentration, hier wurde die Poolkonzentration aus den eingewogenen Massen berechnet.
- Poolhöhe ca. 0,7 m
- NG = Nachweisgrenze

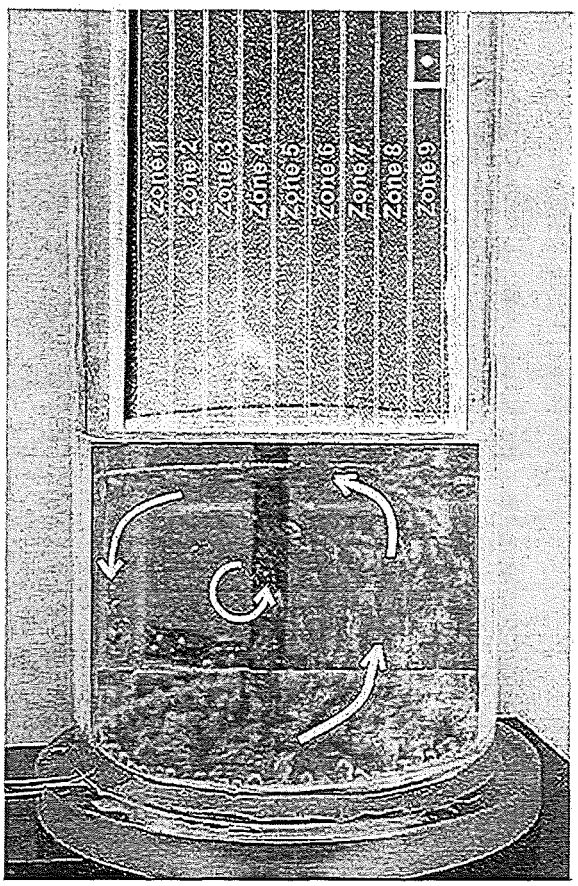


Abb. 1. Versuchsaufbau Laborversuche bestehend aus Plexiglaszylinder innerer Durchmesser 140 mm, Höhe 370 mm, Heizplatte mit Durchmesser 130 mm mit regelbarer Heizleistung bis max. 1,2 kW entspr. 95 kW / m²

Das Bild zeigt die typische Versuchsanordnung bei den Höhenprofilmessungen mit 2 l Wasser entspr. 130 mm Höhe. Darüber ist eine 90 mm breite und 200 mm hohe Plexiglasscheibe in Strömungsrichtung aufgehängt. Zur Messung der Flächenbelegung wurde die Scheibe in 9 Zonen von jeweils 10 mm Breite und 15 mm Höhe eingeteilt, im Bild oben rechts dargestellt. Die Messpunkte beziehen sich auf den geometrischen Mittelpunkt der Messfläche. Im Bild rechts ist mit Pfeilen die aufsteigende Strömung mit hohem Gasvolumenanteil angedeutet, in der Mitte Wirbelbildung mit Anreicherung der kleinen Blasen und des Materials.

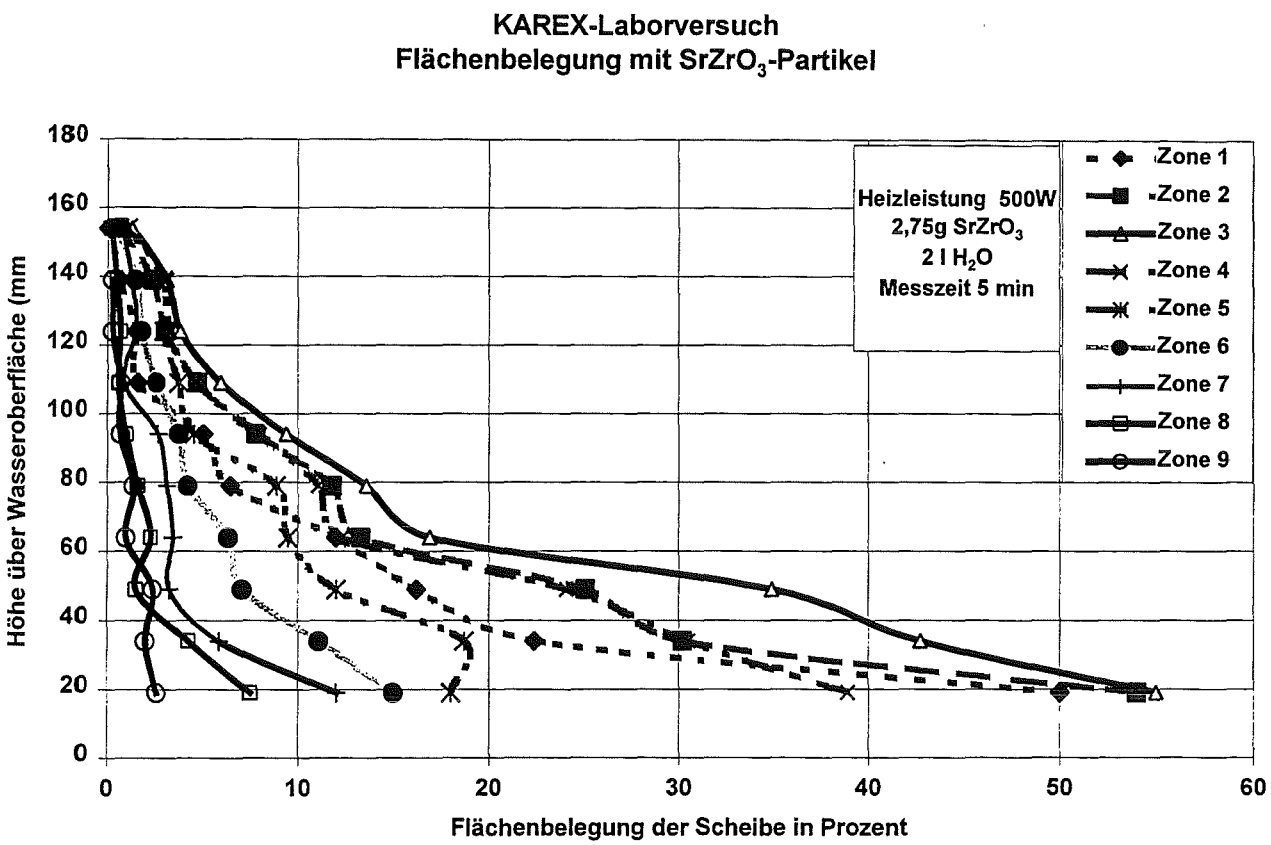


Abb. 2. Beidseitig ermittelte Flächenbelegung bei 500 W Heizleistung

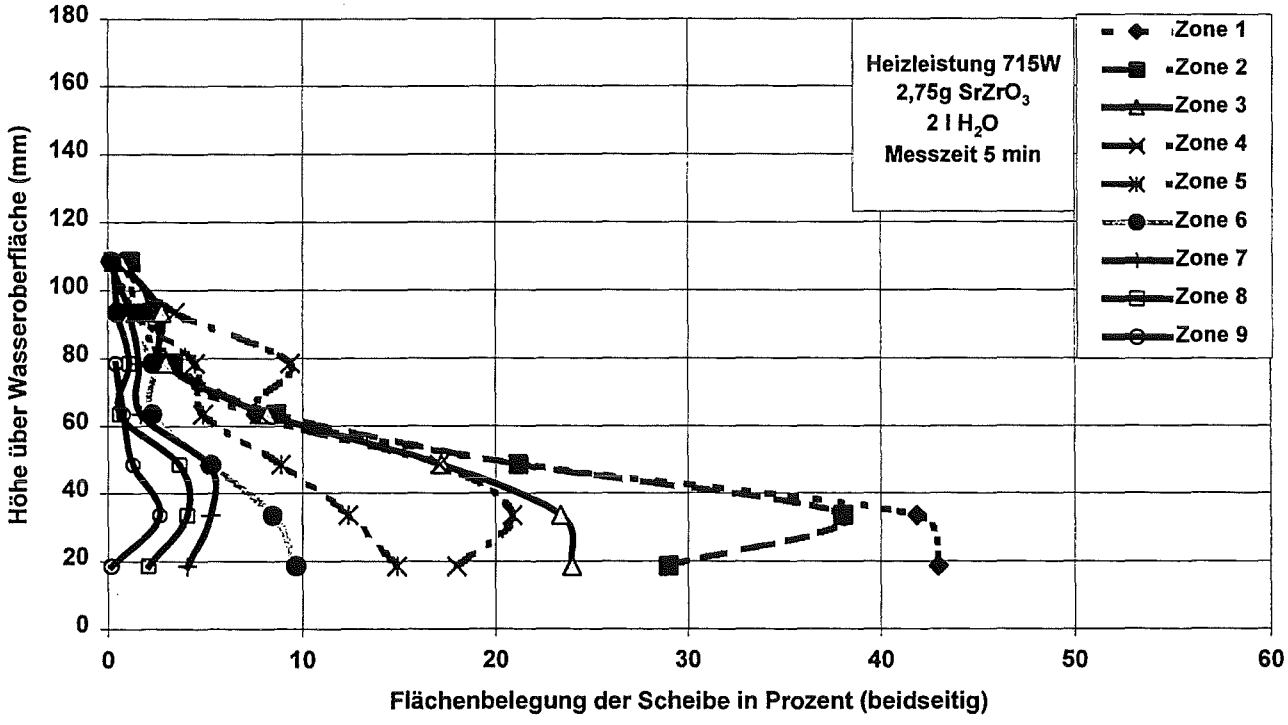


Abb. 3. Beidseitig ermittelte Flächenbelegung bei 715 W Heizleistung

32.22.08 Oberflächenvergütung mit gepulsten Elektronen- und Ionenstrahlen

I. Behandlung von MCrAlY-Schutzschichten

(R. Huber, G. Müller, G. Schumacher, D. Strauß, F. Zimmermann, IHM)

Abstract

The surface of MCrAlY coatings deposited on Inconel were treated by the pulsed electron beam of the GESA installation to improve the oxidation resistance and also the bond strength of thermal barrier coatings (TBC) deposited on the surface. Typical coatings employed for gas turbine blades are employed. The influence of electrons reflected from the surface had to be considered for the calculation of the energy deposition into the material. Due to the magnetic field in the GESA installation these electrons influence the beam current and the energy distribution inside the target.
The treated MCrAlY surface shows a much better oxidation resistance because the fine grained structure of the surface layer effects the formation a stable α-Al_2O_3 scale already in the first stage. The scale grows slowly. Thus, an early spallation is prevented. This results also in a higher life time of the TBC deposited. The TBC is still stable after 5000 h oxidation at 950 °C on air, but spalls at another untreated specimen already after 3000 h. Cyclic experiments between 950 °C and room temperature show great differences. The untreated specimen spalled after 300 cycles while the treated specimen was still intact after 3000 cycles.

Zusammenfassung

Die Oberfläche von MCrAlY-Schutzschichten auf Inconel, die dem Oxidationsschutz von Gasturbinenschaufeln dienen, wird mit dem gepulsten Elektronenstrahl der GESA Anlage behandelt, um den Oxidationsschutz und die Haftfestigkeit von aufgebrachten Wärmedämmschichten zu verbessern. Bei der Berechnung des Energieeintrags in die Oberfläche muß der Einfluß der von der Oberfläche zurückgestreuten Elektronen berücksichtigt werden, da diese Rückstreuelektronen im Magnetfeld der GESA-Anlage sowohl den Strahlstrom als auch das Energieabsorptionsprofil im Werkstück verändern. Die bearbeiteten MCrAlY-Oberflächen zeigen eine wesentlich

verbesserte Oxidationsbeständigkeit, da durch die sehr feinkörnige Struktur der Oberfläche schon im Anfangsstadium der Oxidation eine dichte stabile α-Al_2O_3 Deckschicht entsteht. Diese Oxidschicht wächst nur langsam wodurch ein frühes Abplatzen verhindert wird. Das bewirkt auch eine höhere Standzeit von aufgebrachten Wärmedämmschichten, die bei 950 °C nach 5000 Stunden an Luft noch stabil sind, während an einer anderen unbehandelten Probe nach 3000 h schon Abplatzungen auftraten. In zyklischen Experimenten zwischen 950 °C und Raumtemperatur gab es deutliche Unterschiede. Die unbehandelte Probe zeigte Abplatzungen nach 300 Zyklen, während die behandelte nach 3000 Zyklen noch stabil war.

1. Einleitung

Das Bestreben der Kraftwerksindustrie, den Wirkungsgrad von Kraftwerken zu steigern erfordert auf dem Materialsektor die Entwicklung von Turbinenschaufeln, die bei Temperaturen bis in Nähe von 1000 °C eingesetzt werden können. Da Materialien wie Inconel bei diesen Temperaturen zwar noch eine ausreichende Festigkeit jedoch keine Oxidationsbeständigkeit besitzen, werden sie mit einer Oxidationsschutzschicht versehen. Diese Schutzschicht besteht aus ca. 200 µm dickem MCrAlY, einer Nickel- oder Kobaltbasislegierung mit Chrom und Aluminium [1]. Die Schutzwirkung besteht in der Bildung einer Aluminiumoxidhaut an der Oberfläche, welche die Diffusion von Sauerstoff nach innen und die von Metallionen nach außen so stark verringert, daß lange Standzeiten erwartet werden können. Eine hervorragende Eigenschaft des MCrAlY ist, daß Defekte in der Schutzschicht durch das Al in der Legierung ausgeheilt werden. Auf der anderen Seite eignet sich MCrAlY auch, wegen der Oxidschichtbildung, als Haftvermittler für oxidkeramische Wärmedämmschichten (WDS). Mit einer WDS auf der Turbinenschaufel können deutlich höhere Gastemperaturen zugelassen werden, ohne das Schaufelmaterial stärker zu belasten.
Die MCrAlY – Schichten werden durch Plasmaspritzen auf die Schaufel aufgetragen. Beim Spritzprozeß und dem nachfolgenden Glühen der Schutzschicht bleibt genügend Zeit für die Ausbildung der Gleichgewichtsphasen im MCrAlY. Je nach Zusammensetzung entstehen zwei oder mehr Phasen. Eine zweiphasige Ni-32Co-24Cr-8Al-0,6Y – Legierung (Angaben in Gew%) besteht aus einer β-NiAl Phase mit ca. 17 % Al und einer γ-Ni Phase, die neben Co und Cr nur 3 % Al enthält [2]. Die β-NiAl

Phase ist der Speicher für die Bildung der Aluminiumoxidhaut. Der Vergrößerung des Al-Speichers durch Einlegieren von mehr Al sind wegen der Versprödung des Materials Grenzen gesetzt. Immerhin sind heute auch Legierungen mit 12 Gew% Al im Einsatz.

Die Arbeiten, die zur Verbesserung der Eigenschaften der Schutzschichten führen sollen, setzen an zwei Stellen an, einmal an der Veränderung der Struktur der Oberflächenschicht von einigen 10 µm Dicke, zum anderen an der Morphologie der Oberfläche. Es wurde erwartet, daß eine glatte Oberflächenschicht mit amorphem bis nanokristallinem Gefüge eine bessere Wachstumsgrundlage für die zu erwartende Aluminium-Oxidschicht bildet und im Falle von Wärmedämmschichten auch für eine gute Anbindung der Säulenkristalle dieser zusätzlichen Schicht führen würde. Das Werkzeug, mit dem diese Veränderungen erreicht werden können, ist die gepulste Elektronenstrahlanlage GESA. Mit einem Puls von 10 – 40 µs Dauer kann eine Fläche von bis zu 10 cm Durchmesser umgeschmolzen und umstrukturiert werden. Die Tiefe der Schmelzschicht beträgt dabei bis zu einigen 10 µm. Die Energieabsorption der Elektronen bei der Wechselwirkung mit der Materialoberfläche ist von großer Bedeutung für den Umschmelzprozeß. Während die Energiedepositionsprofile für Elektronen in Materialien gut bekannt sind und sich in guter Näherung analytisch berechnen lassen [3], ändert sich die Situation dramatisch bei Anwesenheit starker Magnetfelder, die üblicherweise, wie im Fall der GESA-Anlage, zum Transport und Fokussierung intensiver Elektronenstrahlen eingesetzt werden, weil ein Teil der Elektronen vom Werkstück reflektiert wird und diese aufgrund des Magnetfeldes den Elektronenstrahl nicht verlassen können. Diese Elektronen werden im Diodenraum durch das elektrische Feld gebremst und erneut in Richtung Target beschleunigt, so daß sich das Energiespektrum des Elektronenstrahls verändert.

Neben der Änderung der Energieabsorption beeinflußt das Vorhandensein der reflektierten Elektronen auch die Stromdichte die von Vakuumkathoden im Fall einer raumladungsbegrenzten Emission geliefert werden kann [4]. Durch das Eindringen von rückgestreuten Elektronen in den Beschleunigungsspalt kann die Raumladungsdichte derart verändert werden, daß das elektrische Feld erniedrigt wird und dadurch die Entladestromdichte abnimmt.

2. Einfluß der GESA – Behandlung auf die Struktur und Oberflächenmorphologie

Durch den Einsatz der GESA werden die Defizite in der Struktur und in der Morphologie der Oberfläche behoben. Der Elektronenpuls der GESA schmilzt in 10 - 40 µs eine Oberflächenschicht von 5 - 40 µm Tiefe in einem Bereich von 10 cm Durchmesser auf. Da die Oberflächenrauhigkeiten im Bereich der maximalen Schmelztiefen liegen, können 2 - 3 Pulse für die gleiche Stelle erforderlich sein wenn vorher nicht mechanisch geglättet wurde. Das Ergebnis ist dann eine sehr glatte Oberfläche. Abb. 1 zeigt einen Blick auf eine Oberfläche links vor der Umschmelzung mit GESA, rechts danach. Das GESA-Glätten hat gegenüber mechanischen Verfahren den Vorteil, daß innerhalb der Schmelztiefe alle Poren beseitigt sind, die vor allem entlang der Schmelztropfen aus dem Spritzvorgang bis in große Tiefen hinein reichen.
Da die Umschmelzung mit GESA in 10 - 40 µs beendet ist und das Material unter der Schmelze in dieser Zeit kaum erwärmt wird, kühlt die dünne Schmelzschicht vor allem durch Wärmeleitung so schnell ab, daß diese in einem metastabilen Zustand erstarrt. In diesem Zustand hat die Ausscheidung der β - Phase gerade erst begonnen. Die Phasenstrukturen liegen im nanokristallinen Bereich. Das macht der Querschnitt durch eine Probe von NiCoCrAlY in Abb. 2 deutlich. In der Schmelzschicht sind keine Strukturen zu erkennen, jedoch im ursprünglichen Schichtteil, wo die relativ grobe Phasenstruktur von geätztem β - NiAl und nicht angegriffenem γ - Ni deutlich sichtbar ist.

3. Einfluß der GESA Behandlung auf das Oxidationsverhalten

Die feinkörnigen γ - Ni Stengelkristalle mit $\leq$ 1µm Durchmesser, die beim Erstarren nach der Umschmelzung mit GESA entstehen, sind ideal für den Transport des Aluminiums zur Oberfläche. An Luft bei 950°C bildet sich schnell eine dichte Al_2O_3 - Schicht unter der nur noch langsames Wachstum möglich ist [2]. Die Wachstumsgeschwindigkeit ist kontrolliert durch die Sauerstoffdiffusion und damit ein Indikator für die Güte der Oxidschicht. Einen großen Einfluß hat auch die Oberflächenmorphologie. Wie aus Abb. 3 zu sehen ist, wächst nach 1400 h bei 950°C auf der glatten Oberfläche der erstarrten Schmelze eine dünne gleichmäßige Oxidschicht mit geringem Al-Verbrauch. Deutlich mehr Al wird auf einer mechanisch polierten Oberfläche für die Oxidbildung verbraucht, Abb. 4. Die tiefe Einlassung der Oxidschicht (am

rechten Rand), die als Oxidwurzel bezeichnet wird, stammt von einer offenen Pore. Die Unterschiede im Al-Verbrauch erkennt man auch an der Ausbreitung der β - NiAl verarmten Zone (d.h. Aluminium verarmt), die bei der polierten Probe das dreifache beträgt. Es ergibt sich, daß auf der umgeschmolzenen Oberfläche die Oxidhaut langsamer wächst und damit stabiler ist als auf der polierten. Langsames Wachstum ist eine Voraussetzung für eine lange Lebensdauer der Oxidschicht, da sie mit zunehmender Dicke leichter abplatzt [5]. Aus dem MCrAlY nachgeliefertes Al heilt solche Defekte zwar aus, der Prozeß führt jedoch zu einer schnelleren Verarmung an Al und damit zu geringeren Standzeiten der Schicht. Das Abplatzen der Oxidschicht hat für eine aufgebrachte WDS viel schwerwiegendere Folgen. Die WDS löst sich mit der Oxidschicht ab. Eine Überhitzung der Schaufel ist die Folge.

Vergleicht man die Oberflächen der sich bildenden Aluminiumoxidschichten (TGO) nach 200 h Oxidation auf zuvor mit GESA behandelten und nur polierten Schutzschichten (Abb. 5 und Abb. 6), so sieht man, daß nach der GESA-Behandlung phasenreines α - Al_2O_3 wächst, während das TGO der unbehandelten Oberflächen von filigranen γ - bzw. Θ - Al_2O_3 Phasen durchsetzt ist. Die stabile hexagonale Struktur des α-Al_2O_3 in Abb. 5 ist eine dichte Oxidationsbarriere und sichere Unterlage für die WDS, die auf lange Zeit keinen Veränderungen unterworfen sein wird. Von den instabilen γ- bzw. Θ- Modifikationen in Abb.6 ist bekannt, daß sie leicht abplatzen.

4. Einfluß der GESA Behandlung auf die Haftfestigkeit von Wärmedämmschichten

Die Oberfläche der mit GESA behandelten Proben hat eine Rauhigkeit von $R_A < 1,5$ µm und ist damit gut geeignet für das Aufbringen einer WDS. Damit kann der Prozeßschritt der mechanischen Glättung entfallen. Die WDS wird mit einem PVD (physical vapor deposition) Verfahren unter oxidierender Atmosphäre aufgebracht. Dabei entsteht auf dem MCrAlY eine dünne Oxidschicht, auf der die WDS im Verbund aufwächst.

Der die Lebensdauer begrenzende Faktor für die WDS ist die abnehmende Haftung auf der stetig wachsenden Oxidschicht zwischen WDS und MCrAlY. Der Querschnitt durch eine Probe, die vor der Abscheidung der WDS lediglich mechanisch geglättet wurde, nach 5000 h Oxidation bei 950 °C ist in Abb. 7 gezeigt. Hier traten schon

nach 3000 h erste Abplatzungen auf. Ursache dafür ist das Entstehen von Oxidwurzeln, die deutlich sichtbar eine poröse Struktur haben. Die mit GESA behandelten Proben weisen keine dieser schädlichen Oxidwurzeln auf. Die dünne regelmäßige Oxidschicht zwischen MCrAlY und WDS ergibt längere Standzeiten unter oxidierender Atmosphäre. Die Probe in Abb. 8 wurde unter den gleichen Bedingungen getestet wie die lediglich geglättete Probe in Fig. 7.
Zyklische Oxidationsexperimente in FZ Jülich zeigen deutlich die Vorteile der GESA Behandlung für die Haftfestigkeit der WDS. Die mechanisch geglätteten Proben platzen schon nach 150 Zyklen zwischen 950 °C und Raumtemperatur unter oxidierender Atmosphäre ab, während die WDS auf den mit GESA behandelten Proben nach 1500 Zyklen noch intakt war.

5. Energieabsorption der Strahlelektronen in Werkstoffen bei Vorhandensein externer Magnetfelder

Für die Beschreibung des Umschmelzvorgangs ist die genaue Kenntnis der Energieabsorption erforderlich. Für den Transport des Elektronenstrahls im Vakuum ist ein externes Magnetfeld notwendig. Es konnte gezeigt werden, daß bei Anwesenheit eines Magnetfeldes durch den Einfluß der vom Werkstoff rückgestreuten Elektronen, nicht nur die vom Werkstoff absorbierte Energiemenge (Stromdichte, Abb. 9), sondern auch die Verteilung dieser Energiemenge im Werkstoff (Depositionsprofil, Abb. 10a-d), von der Ordnungszahl des Targetwerkstoffs abhängt. Durch die mehrmalige Reflexion der Rückstreuelektronen zwischen Target und dem elektrischen Feld des Beschleunigers, transformiert der ursprünglich monoenergetische Elektronenstrahl in einen polyenergetischen Strahl. Wegen der Energieabhängigkeit der Reichweite der Elektronen ändert damit sich auch das Depositionsprofil im Werkstoff. Mit steigender Ordnungszahl wird ein immer größer werdender Anteil der Energie in den oberflächennahen Bereich deponiert , Abb. 10a-d. Ein derartiges Energiedepositionsprofil führt zu einer höheren Verdampfungsrate an der Oberfläche, zu einem starken Temperaturgradienten in der Schmelzschicht und zu einer Reduzierung der Schmelztiefe. Experimentelle Untersuchungen an dünnen Al-Folien, mit und ohne externem Magnetfeld, bestätigen die Änderung des Depositionsprofils.

Literatur

[1] N. Czech, W. Esser, F. Schmitz, Siemens Power J. 4/94, 22

[2] S. Schiller, U. Heisig, S. Panzer, Elektronenstrahltechnologie (Wiss. Verlags-GmbH, Stuttgart, 1977)

[3] N. R. Pereira, J. Appl. Phys. 54 (11), Nov., 1983

[4] D. Strauss, Dissertation, FZKA 6371, (in Vorbereitung)

[5] W. J. Quadakkers, K. Schmitz, H. Grübner, E. Wallura, Mat. at High Temp., 10(1) 1992, 23

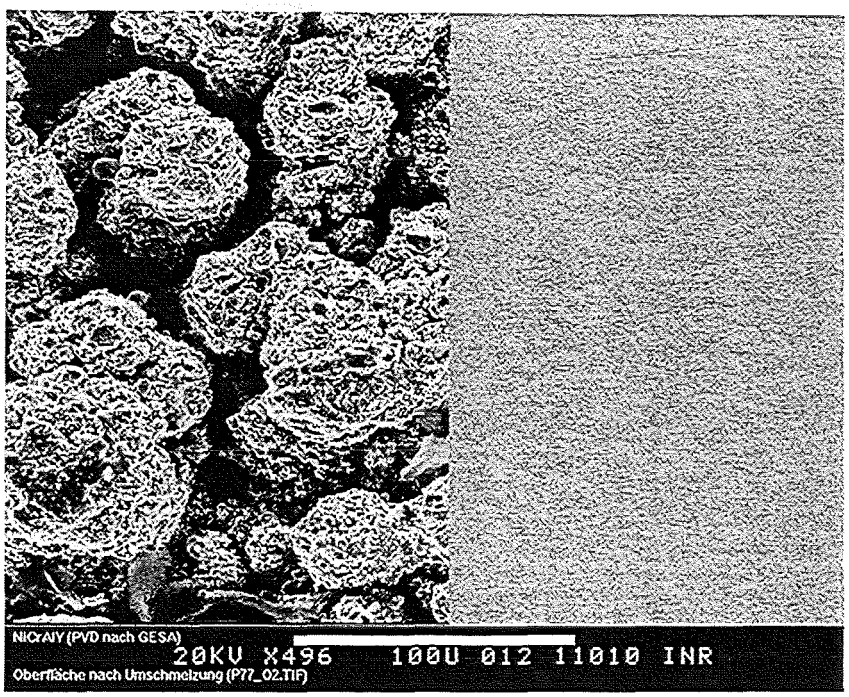


Abb. 1: Oberfläche einer MCrAlY - Schutzschicht nach Aufbringen mit Niedrigdruck - Plasmaspritzen (LPPS) (links) und nach Glättung durch Elektronenpulsbehandlung mit GESA (rechts).

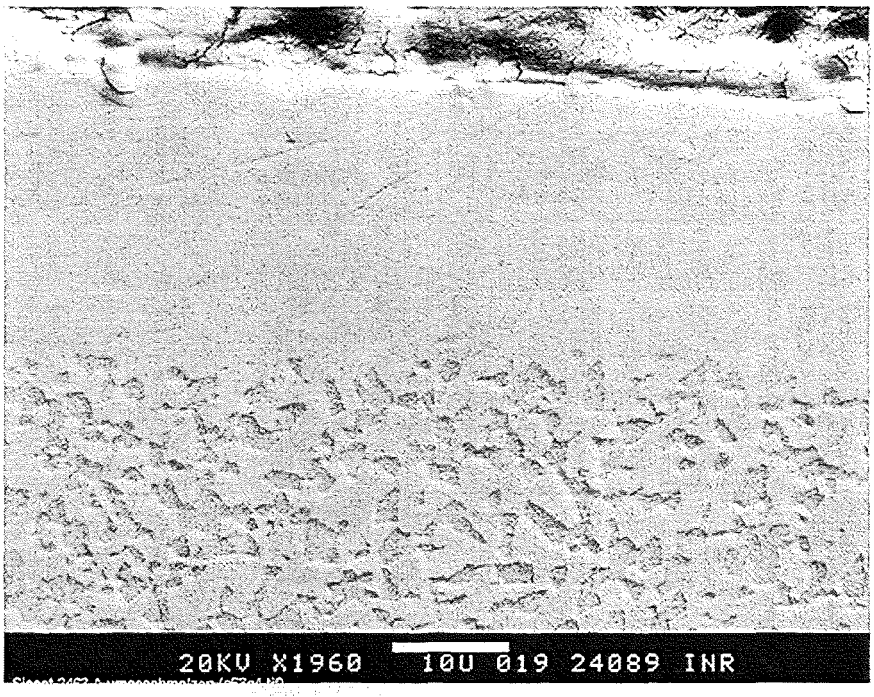


Abb. 2: Querschliff einer umgeschmolzenen MCrAlY - Legierung. Die ursprüngliche zweiphasige Struktur (unten) ist in eine homogene sehr feinkörnige Schmelzschicht umgewandelt worden (oben).

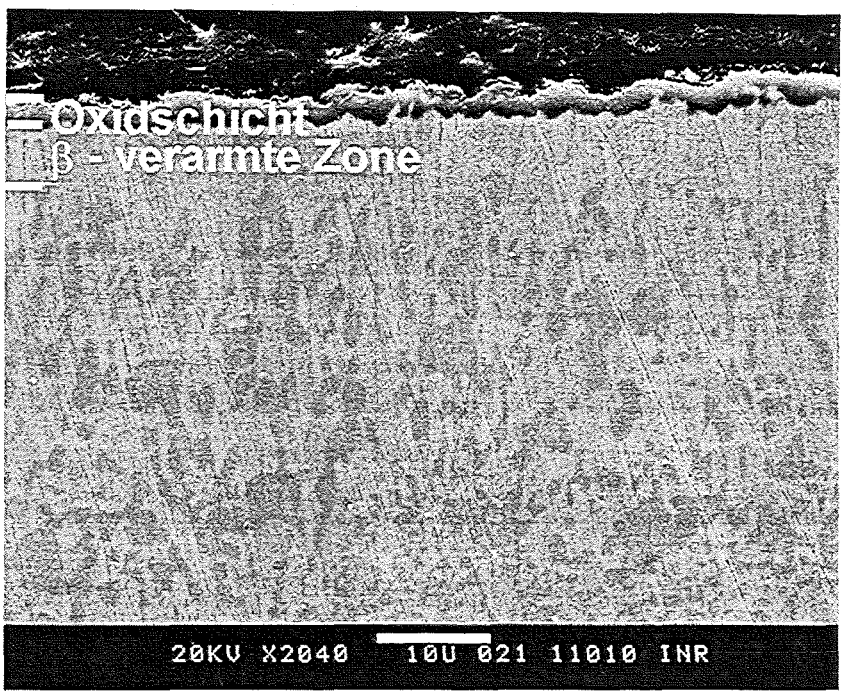


Abb. 3: Querschliff einer mit GESA behandelten Probe nach 1400 h Oxidation bei 950 °C. Unter der dünnen α-Al_2O_3-Oxidschicht an der Oberfläche befindet sich die β-NiAl- verarmte Zone, die nur noch wenig .Aluminium enthält.

Abb. 4: Querschliff einer polierten, nicht mit GESA behandelten Probe nach 1400 h Oxidation bei 950 °C. Schwachstellen in der Oxidschicht führen lokal zu verstärkter Oxidation (Oxidwurzeln), die mit einer erhöhten Aluminiumverarmung verbunden ist.

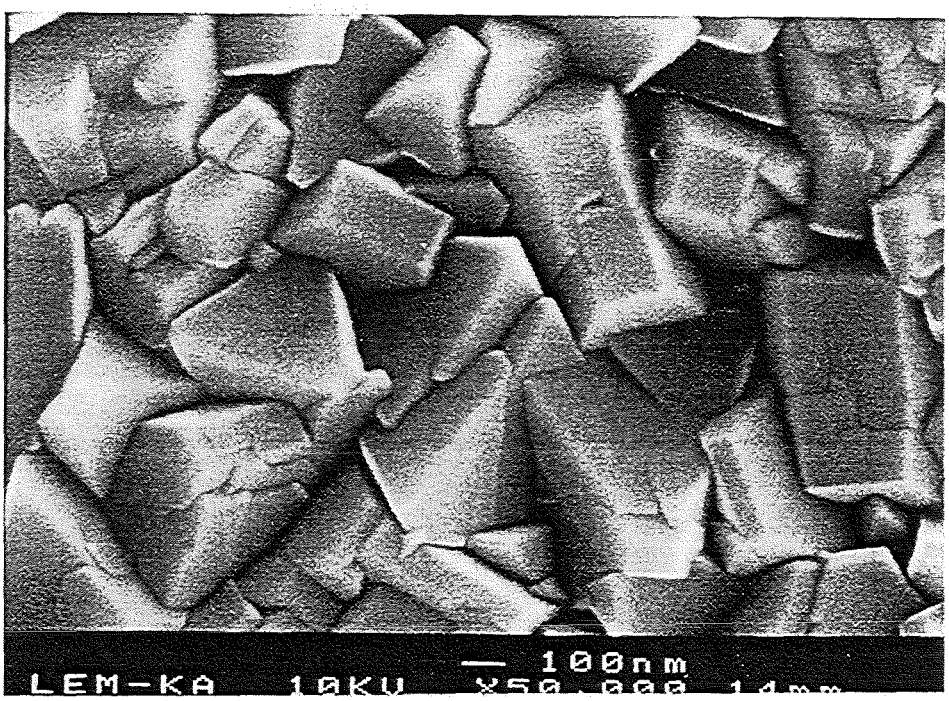


Abb. 5: Oxidschicht auf einer mit GESA umgeschmolzenen MCrAlY-Oberfläche nach 200 h Oxidation bei 950 °C. Die sehr dichte α-Al_2O_3-Struktur schützt wirksam das darunterliegende Metall vor Sauerstoffangriff.

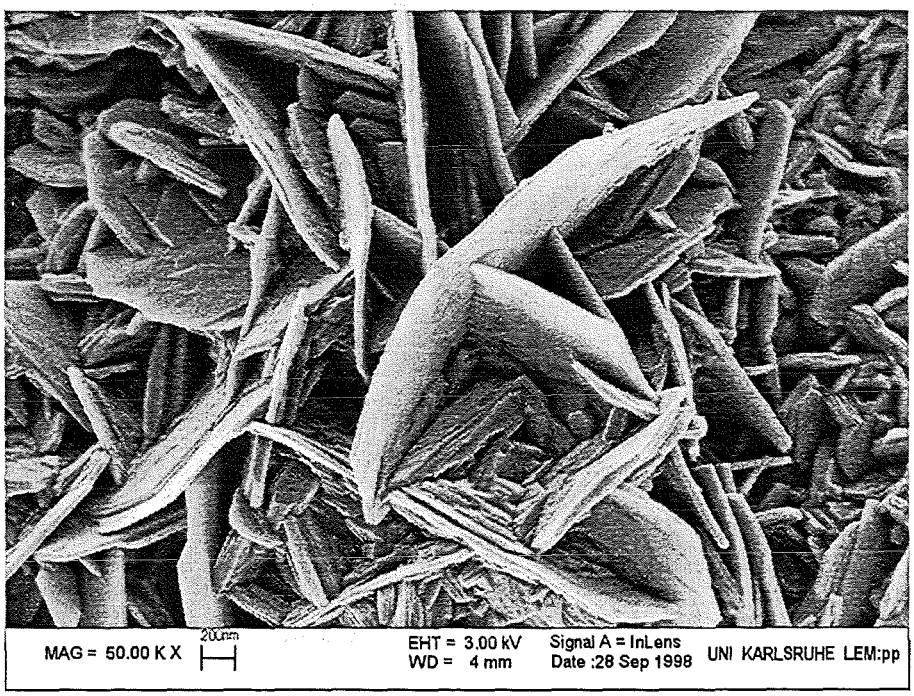


Abb. 6: Oxidschicht auf einer polierten MCrAlY-Oberfläche nach 200 h Oxidation bei 950 °C. Die grobe plättchenförmige Struktur entsteht durch Wachstum von Θ-Al_2O_3, sie bietet nur wenig Schutz vor angreifendem Sauerstoff und neigt zu Abplatzungen.

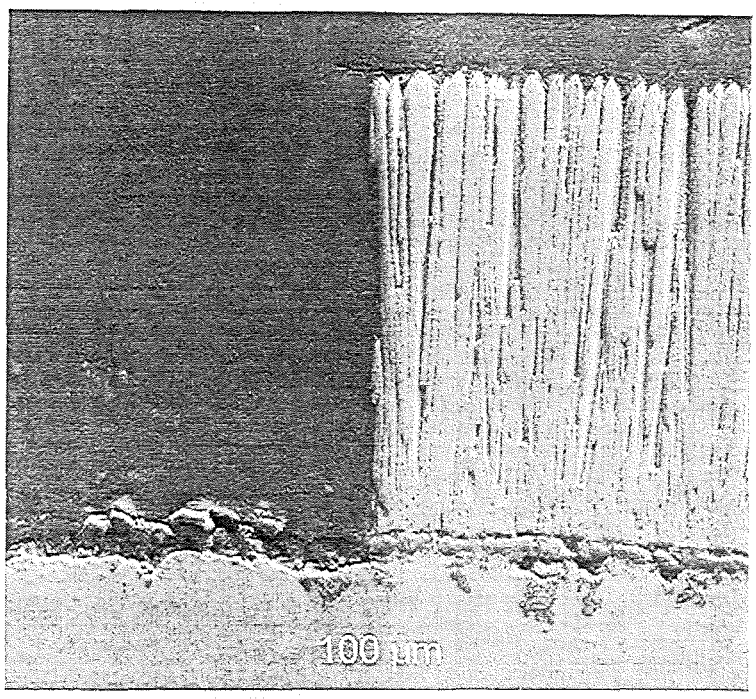


Abb. 7: Partielle Abplatzungen der WDS auf einer mechanisch geglätteten MCrAlY Schicht nach 5000 h bei 950 °C an Luft. Die Al_2O_3-Haftvermittlerschicht ist dick und ungleichmäßig über den Oxidwurzeln.

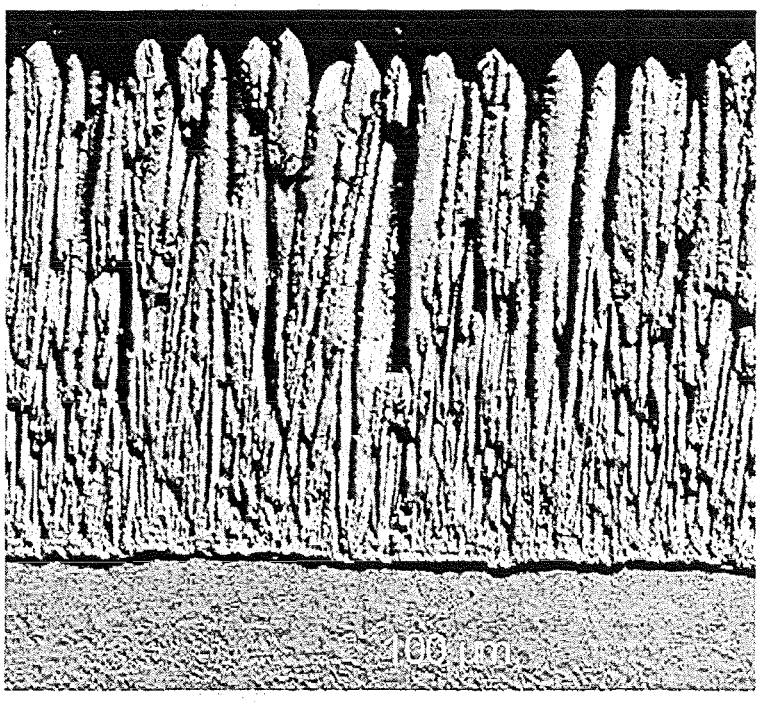


Abb. 8: Gute Haftung der WDS auf dem GESA behandelten MCrAlY nach 5000 h bei 950 °C an Luft. Die Al_2O_3-Haftvermittlerschicht ist dünn und gleichmäßig.

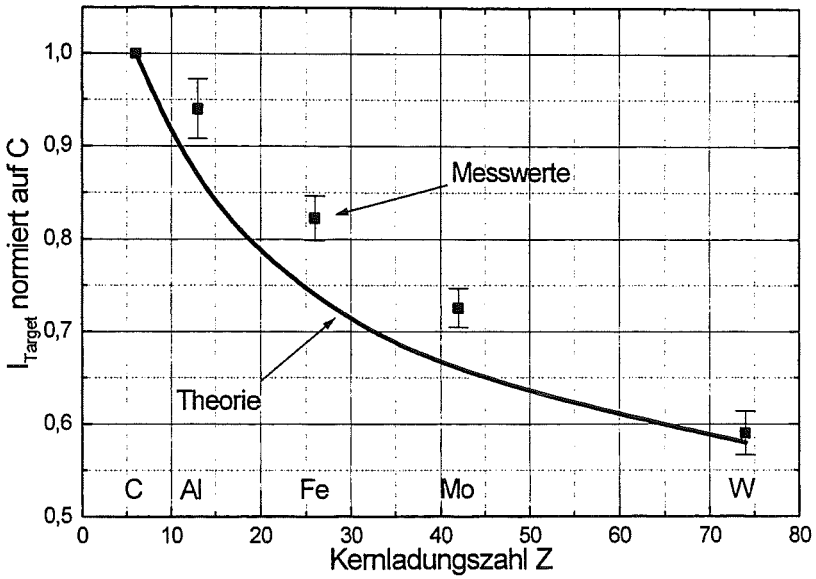


Abb. 9: Relative Stromdichte am Target als Funktion der Ordnungszahl (normiert auf die Stromdichte von C)

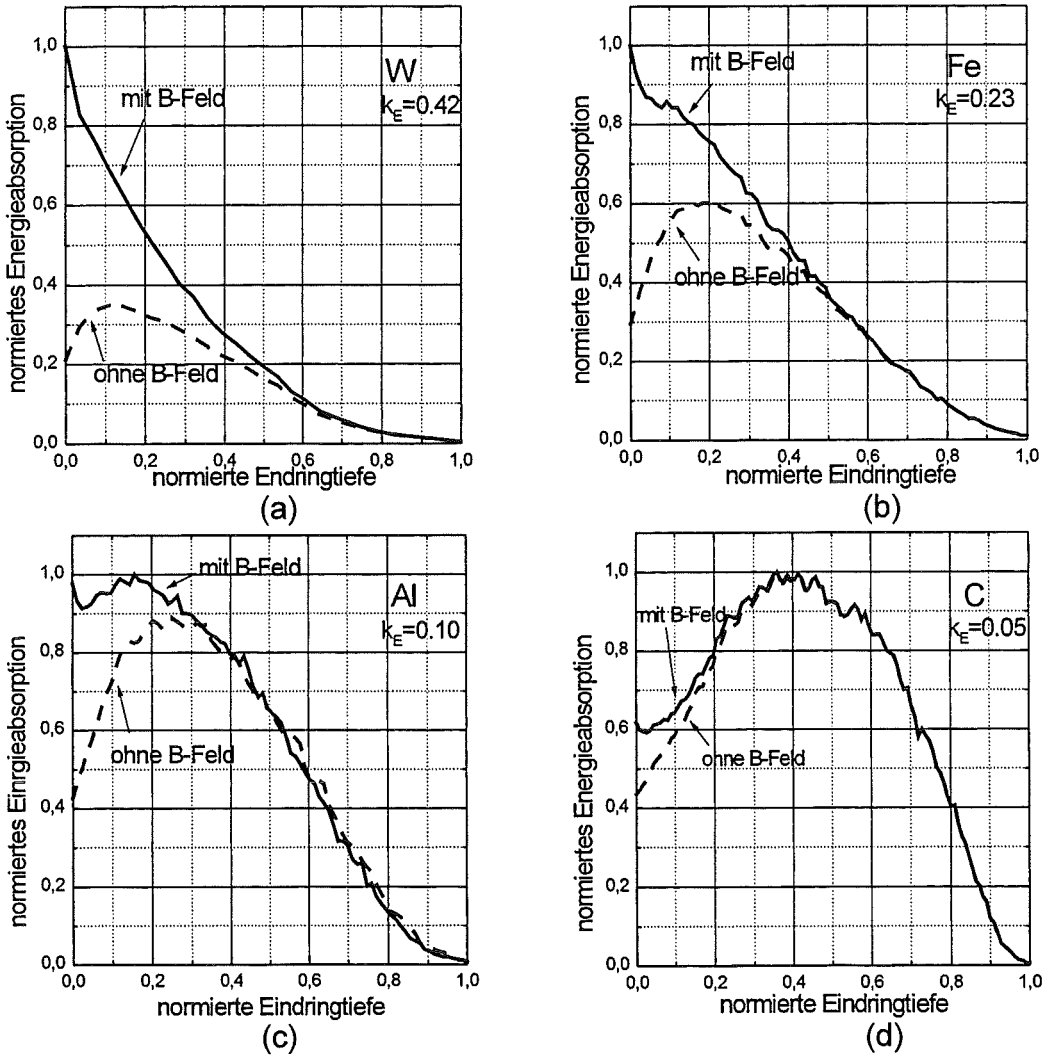


Abb. 10: Energiedepositionsprofile für verschiedene Materialien normiert auf den jeweiligen Maximalwert der deponierten Energie und bezüglich der maximalen Eindringtiefe.

II. Mikromechanische Modellierung von Wärmedämmschichten

(J. Aktaa, K. Sfar, IMF II)

Im Rahmen der mikromechanischen Modellierung von Wärmedämmschichten wurde zunächst die Untersuchung von 2-Schichtsystemen durchgeführt. Der Schichtverbund besteht aus der Oxidschicht und aus der Haftvermittlerschicht. Die Grenzfläche zwischen diesen beiden Schichten ist kritisch, da die meisten experimentellen Beobachtungen gezeigt haben, daß das Versagen durch Abplatzen dort stattgefunden hat.

Mit Hilfe der FE-Methode wurden die Eigenspannungsfelder bestimmt, die sich aus den thermischen und oxidativen Belastungen ergeben. Die Ermittlung der Eigenspannungen ist notwendig bei der Untersuchung des Schichtversagens durch Rißausbreitung. Es können somit die kritischen Bedingungen des Abplatzens und der Delamination aufgestellt werden. Die Rauheit der Grenzfläche, die Oxidation der Haftvermittlerschicht und Volumenzunahme der Oxidschicht wurden bei der FE-Modellierung berücksichtigt. Der Eigenspannungsabbau in der Haftvermittlerschicht infolge des Kriechens bei hohen Temperaturen wurde durch Angabe eines Gesetzes für sekundäres Kriechen ebenfalls simuliert.

Die Grundkenntnisse für die Bestimmung des Versagensverhaltens der Wärmedämmschichten wurden ermittelt. Der nächste Schritt besteht darin, die Modellierung des gesamten Verbundsystems und die Modellierung von Rissen durchzuführen.

32.23 STUDIEN ZUR AKTINIDENUMWANDLUNG

32.23.01 Neutronenphysikalische Untersuchungen zur Transmutation von Aktiniden und Spaltprodukten

Updating of an 11-Groups Nuclear Cross Section Set for Transmutation Applications

(E. Kiefhaber, IKET)

Abstract

An existing 11-groups library for SIMMER calculations was supplemented by additional elements and isotopes (44 in total) in order provide the capability to use SIMMER also for analyses of fission reactors dedicated to the transmutation of selected minor actinides and fission products. Furthermore, the package should also allow scoping analyses related to safety aspects of repositories containing irradiated fuel (for direct deposition) or radioactive nuclear waste. The files ISOTXS and BRKOXS were prepared by using modern evaluated nuclear data libraries like JEF2.2, ENDF/B-VI-5, and JENDL3.2. As processing code the well known NJOY97 package was used. The updated libraries provide a suitable basis for broadening significantly the range of applicability of SIMMER for new designs of power plants, e.g. also accelerator driven systems (ADSs) with special targets, hit by the proton beam, as well as non-convential coolants (Pb or Pb-Bi) or fuels (e.g. with nitride, where ^{15}N replaces the more abundant ^{14}N).

I. Introduction

Since some years, a special version of a group cross section set with a fairly coarse 11 groups structure has been used for LMFR-(Liquid Metal cooled Fast Reactor) safety analyses. It was originally deduced essentially from the 26 groups KFKINR1 set /1/ by some type of group condensation using as a weighting function for collapsing a neutron spectrum representative for the SNR-300, the German prototype of an LMFR which never achieved criticality and could not start operation due to political reasons. As the original 26 groups set, the 11 groups set, sometimes

labelled SIMMER set because, according to its main purpose, it was intended for and dedicated to nuclear safety analyses of hypothetical LMFR accidents. Corresponding to the inherent 26 groups and 11 groups structures, these cross section sets are most suitable for investigations related to fission reactors with fast neutron spectra. They are usually not very appropriate for studies of configurations with epithermal or thermal neutron spectra.

In the past, LMFRs with sodium coolant and mixed oxide (UO_2-PuO_2) fuel were the main subject of interest. For that reason Na, O, SS (stainless steel) and the U-, Pu-isotopes were the most important constituents of the 11 groups set. Recently, the main goal of fast reactor physics and engineering shifted from breeding to burning plutonium (see e.g. /2/, /3/, /4/). Thus, in addition to plutonium the so-called minor actinides (MAs) became more important for transmutation or incineration studies. Moreover, accelerator driven systems (ADSs) with other coolants (e.g. Pb or Pb-Bi, - a eutectic with ~ 44% Pb and ~56% Bi, see e.g. /5/ - instead of Na) were considered to become an attractive option. Furthermore, the idea of diminishing the Pu-production by using the Th-^{233}U fuel cycle instead of the ^{238}U-Pu cycle (see /2/, /3/, /4/) showed that the U-Pu isotopes were no longer sufficient for performing safety analyses for various types of transmutation scenarios. When dealing with U-free fuel such as PuN even the use of ^{15}N, i.e. the less abundant stable nitrogen isotope, was envisaged to avoid activation of the more abundant (>99.6%) nitrogen isotope ^{14}N (see /6/, /7/, /8/).

The above arguments have been relevant when in a first step a preliminary version of an extended 11 groups neutron group cross section set was prepared in 1998. Meanwhile additional arguments motivated a repetition and amendment of the past effort: the main point was the long term isotopic composition of the heavy metal content embedded in a repository and the main constituents of an envisaged repository for nuclear waste. Furthermore, an updated version of NJOY /9/, NJOY97 became available and also an updated version of ENDF/B-VI /10/, endfb65, could be used.

Taken together, all these aspects inevitably called for an updating of the 11 groups SIMMER set for satisfying the needs of providing an extended cross section library

appropriate for performing adequate safety analyses for a broader class of critical and subcritical fast reactor configurations which may at least also be of limited applicability for safety analyses of possible repositories. Hence the 11 groups set was updated by supplementing new elements and isotopes. Due to the known poor quality of the previous data for ^{240}Pu, new data for this isotope, labelled PU240E, were incorporated in the amended version of the 11 groups set.

In the following, the main features of the updating will be described but it will be tacitly assumed that the reader will already be familiar with most of the peculiarities of the ISOTXS- and BRKOXS-files /11/ and, in particular, with the treatment of resonance shielding, i.e. the Bondarenko concept /12/ for determining effective self-shielded group cross sections for compositions, i.e. mixtures of materials.

II. Energy group structure and weighting function

As already mentioned, the 11 groups structure is basically adapted to multiplying media with a dominating fast neutron spectrum where epithermal and thermal neutrons are considered to be less significant or unimportant. The group structure is shown in Table I.

The energy dependent weighting function used in NJOY /9/ as smooth numerical weighting function with the physical meaning of a collision density, C(E), was originally attributed to the collision density representative for the SNR-300 core region.

According to the chosen group structure and weighting function, the generated set of group constants is mainly suited for studies dealing with systems containing fissionable material and having a fast neutron spectrum. Obviously this set is not very appropriate for systems having softer neutron spectra. Due to the upper energy boundary of 10.5 MeV and the lacking of some reaction types, e.g. $\sigma(n,3n)$, this set is also not fully adequate for investigations related to accelerator driven systems because in those systems the spallation-produced neutrons forming the external source have energies exceeding significantly the 10.5 MeV limit. But for many overview- and sensitivity-studies this set can still be very valuable because the approximation of simulating an external source in the first (uppermost) energy group

is usually a fairly reasonable approximation. As already mentioned, the produced data set may allow to obtain first crude guesses when investigating in a fairly rough manner safety aspects related to future repositories of nuclear wastes.

III. Nuclear Data from Evaluated Nuclear Data Files

Three aspects were important for the way of producing the 11 groups data:

(A1) The 26 groups data available on the corresponding group sets generated in the past at FZK were incomplete and considered to be at least partially obsolete.

(A2) The 11 groups set was expected to be used mainly or exclusively in the framework of safety analyses of hypothetical accidents (e.g. efforts related to SIMMER- (see e.g. /13/, /14/, /15/) and/or EAC-studies (see e.g. /16/, /17 /, /18/). For these purposes the group cross sections have to be supplied in the form of ISOTXS- and BRKOXS-files. The additional data to be incorporated in the 11 groups ISOTXS- and BRKOXS-files were directly produced by NJOY from available evaluated nuclear data libraries. Instead of modifying the f-factors determined by NJOY, as has been done in the past, it was decided to limit the range of the tabulated σ_0-valued if necessary.

(A3) An unadjusted nuclear data basis had to be used because the most recent adjusted library ERALIB, produced mainly for fast reactor applications, and forming a common group cross section basis for the joint work on CAPRA type fast transmutation reactors was not yet available when starting the present work in 1998.

Origin of the evaluated nuclear data

In general, nuclear data were taken from JEF2.2 (/19/). However, in several exceptional cases, ENDF/B-VI (/10/) was chosen, when this choice was considered to be more suitable (or when the element or isotope was missing on JEF 2.2). It was not always clear whether the deficiency observed when using JEF2.2 data did really justify switching to ENDF/B-VI; such doubts could e.g. arise when the JEF-data were

lacking of unresolved resonance parameters but the ENDF/B-evaluation used instead, was not as recent as the JEF-evaluation. But a full assessment of the quality of the used evaluated nuclear data was beyond the scope of this work.

One particular aspect is worthwhile to be mentioned explicitly: for ^{240}Pu it was known that the 11 groups data (and those of the KFKINR1 26 groups set from which the 11 groups set was deduced) were fairly obsolete and needed to be replaced. Following the recommendation given in a recent publication by Bouland et al. /22/, the ENDF/B-VI data were considered to be preferable as compared to the JEF2.2 data.

IV. NJOY97; remarks concerning its shortcomings and comments regarding own revisions and improvements.

Some of the shortcomings are described in the manual /9/ or indicated in comment cards in the source deck of the code, e.g. the deficiencies existing in the energy region of unresolved resonances are explicitly stated in /9/:

"Although UNRESR neglects the effects of overlap between resonances in the same spin sequence and the effects of interference in the elastic and total cross sections, it still gives reasonable results for the background cross section values needed for most practical problems. ... Ultimately, UNRESR should be replaced by UXSR when that approach is fully developed and tested." (taken from /9/, issued in October 1994).

"As shown in the theory section, resonance overlap effects are developed as a series in $1/\sigma_0$, and the series is truncated after only one step of recursion. This means that the overlap correction should be most accurate for large σ_0. and gradually get worse as σ_0 decreases. Experience shows that the correction can actually get large enough to produce negative cross sections for small σ_0."

Another shortcoming is related to calculating multilevel Breit-Wigner cross sections and to calculating R-matrix (Reich-Moore) cross sections. Comments cards show that Doppler broadening of resonances is not allowed or not provided. In /9/ p. III-11 this shortcoming is mentioned explicitly: "The current version of RECONR includes

Doppler-broading for single-level Breit-Wigner and Adler-Adler representations only." This restriction may be a severe handicap for the application of the results to the analysis of severe or hypothetical accidents, where fuel melting may occur and temperatures exceeding e.g. 3000 K may have to be taken into account during an energetic transient leading to fuel vaporization.

In addition to these documented shortcomings, other deficiencies were less obvious but caused considerable problems in production runs for the generation of group cross sections described in this report. In general, it was disturbing and inconvenient that in the protocol no hint to such deficiencies was given so that it was rather difficult for a non-expert in that field to identify the origin of rather unusual or erroneous results.

A comparable deficit is the occurrence of **negative** self-shielded scalar cross sections, weighting fluxes or resonance self-shielding factors without any notification of the user. Furthermore, the lowest value of resonance self-shielding factor (f-factor) was restricted to the default value of 0.01 which is not always justified and not adequate for high concentrations of the relevant isotope.

V. Deviations from Standard Tabulated Background Cross Sections (σ_0) for Resonance Self-Shielding Factors (f-factors)

In accordance with the original basis of the 11 groups cross section set, the f-factors were calculated for the 7 standard tabulated σ_0-values: 10^{10} (replacing infinity), 10^5, 10^4, 10^3, 10^2, 10^1, $1 \cdot 10^{-3}$. In /9/ pp. V-13 it is mentioned that "choosing lower limit for σ_0 is a more difficult problem" (as compared to the selection of the σ_0 grid values, which should include the inflection point). Unfortunately, the description given in /9/ p. V-13 is not valid in all cases although it applies in the majority of the cases: "The $\sigma_x(\sigma_0)$ curves start out decreasing from the infinite dilution value as $1/\sigma_0$ as σ_0 decreases from infinity ($1 \cdot 10^{10}$ in the code). The curve eventually goes through an inflection point at some characteristic value of σ_0, becomes concave upward, and approaches a limiting value at small σ_0 that is smaller than the infinite-dilution value."

Table 1 shows those materials where it was mandatory to restrict the σ_0-range. In practice these limitations will presumably have no severe consequences for the range of applicability of the generated set of group constants. However, in extraordinary cases it could be useful to know, that -for fairly high concentrations of those materials- the user has to rely on the adequacy of extrapolation rules incorporated e.g. in codes like TRANSX-CTR /25/ or TRANSX 2 /26/.

Table 1 Materials with Modified σ_0-Grid

Material	Number of σ_0-grid points	Lowest or two lowest σ_0-values
^{107}Ag	7	10., 6.
^{109}Ag	7	10., 6.
^{241}Am	7	80., 40.
^{242m}Am	7	63., 40.
Eu	7	67., 45.
^{151}Eu	5	100.
^{153}Eu	5	100.
^{238}Np	5	100.
^{231}Pa	7	63., 40.
^{233}Pa	7	63., 40.
^{238}Pu	7	10., 5.
^{233}U	7	45., 20.

It is hoped that in all other cases the f-factors remain within a reasonable range and that interpolation of the generated data will result in acceptable values of effective, resonance self-shielded group cross sections.

VI. Conclusion

The existing SIMMER set of 11 groups constants was supplemented by 44 new isotopes/elements. Its main field of application should be restricted to safety analyses of critical and/or source driven fission reactor systems with predominantly fast neutron spectra. According to the main interest and goal currently attributed to fast reactors it is reasonably well suited to investigations related to transmutation of

transactinides of the U-Pu fuel cycle but allows also preliminary studies for the ^{232}Th-^{233}U fuel cycle. Pb and Bi were incorporated in the group set in order to allow investigations for liquid metal coolants different from Na. Furthermore, for assessing the potential benefit of nitride fuels, e.g. PuN as a U-free fuel with high Pu incineration rate, the less abundant isotope ^{15}N was included together with the much more abundant ^{14}N. Being aware that long-lived fission products are also considered in some transmutation scenarios (in addition to the incineration of minor actinides (MAs)), two typical isotopes, namely ^{99}Tc and ^{129}I, were also supplied for facilitating studies concerning the influence of these nuclear waste materials on safety aspects of reactors with a fast neutron spectrum aiming at the destruction of long lived dangerous fission products. In order to enable a preliminary assessment of potential hazards attributed to the long term disposal of nuclear waste in a repository some constituents (e.g. Cl, P) of possibly envisaged repositories as well as some rare minor actinides (especially Am- and Cm-isotopes) and nuclear decay products (^{229}Th) were supplemented. According to the direct disposal option of spent fuel, Zr was also added to take into account the possible storage of spent LWR subassemblies having Zircaloy as a cladding material of the fuel pins. For the same reason Ag, Cd, In, ^{113}In, ^{115}In, Eu, ^{151}Eu, ^{153}Eu, and Hf were included which are actual or potential neutron absorber materials in LWRs or other types of reactors. For sake of clarity it should be mentioned that the origin of the nuclear data for In and its stable isotopes, ^{113}In and ^{115}In, is different: ENDF/B-VI for the element and JENDL32 for the isotopes; however, both evaluations date back to about the same time (~1990). For Cd the JENDL evaluation was chosen because it is more recent than that in ENDF/B.

Gd as well as Pd were not included because no evaluated nuclear data are found for these absorber elements and the number of stable isotopes was considered too large for the present application of this group set. For the same reason the isotopes of Cd were omitted from the data set. For Ag, In, and Eu the two stable isotopes were included together with the element so that the different isotopic concentration in irradiated absorber material could be taken into account if needed for certain studies. Tungsten, W, may be chosen as a structural materials for future ADS-components.

Acknowledgement

The author gratefully acknowledges the appreciable support and advice by C. Broeders and I. Broeders in running NJOY and the benefit resulting from their large experience in nuclear data evaluation and group constants generation. The computer program LINX /27/ for combining two ISOTXS-files (or two BRKOXS-files) was transfered from the NEA-DB to the FZK-installation by C. Broeders. It was adapted to the IBM environment by G. Buckel, who also carefully executed the supplementation task of adding the newly produced ISOTXS- and BRKOXS-files to the already existing data sets and of converting the binary files to ASCII-files by applying BINX /27/.

References

/1/ E. Kiefhaber: The KFKINR-Set of Group Constants; Nuclear Data Basis and First Results of its Application to the Recalculation of Fast Zero-Power Reactors; KfK-Report 1572, 1972.

/2/ C.D. Bowman, E.D. Arthur, P.W. Lisowski, G.P. Lawrence, R.J. Jensen, J.L. Anderson, B. Blind, M. Cappiello, J.W. Davidson, T.R. England, L.N. Engel, R.C. Haight, H.G. Hughes III, J.R. Ireland, R.A. Krakowski, R.J. LaBauve, B.C. Letellier, R.T. Perry, G.J. Russell, K.P. Staudhammer, G. Versamis, W.B. Wilson: Nuclear Energy Generation and Waste Transmutation Using an Accelerator-Driven Intense Thermal Neutron Source; LA-UR-91-91-2601 (1991), see also: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A320 (1992) 336-367.

/3/ C. Rubbia, J.A. Rubio, S. Buono, F. Carminati, N. Fiétier, J. Galvez, C. Gelès, Y. Kadi, R. Klapisch, P. Mandrillon, J.P. Revol, Ch. Roche: Conceptual Design of a Fast Neutron Operated High Power Energy Amplifier; CERN/AT/95-44 (ET), September 1995.

/4/ C. Rubbia, S. Buono, E. Gonzalez, Y. Kadi, J.A. Rubio: A Realistic Plutonium Elimination Scheme with Fast Energy Amplifiers and Thorium-Plutonium Fuel; CERN/AT/95-53 (ET), December 1995.

/5/ B.F. Gromov, Yu.S. Belomitcev, E.I. Yefimov, M.P. Leonchuk, P.N. Martinov, Yu.I. Orlov, D.V. Pankratov, Yu.G. Pashkin, G.I. Toshinsky, V.V. Chekunov, B.A. Shmatko, V.S. Stepanov: Use of lead-bismuth coolant in nuclear reactors and accelerator - driven systems; Nuclear Engineering and Design 173 (1997) 207-217.

/6/ A. Languille: Potential of Nitrides in the CAPRA Project; CEA Internat. CAPRA Seminar, Karlsruhe 21-22 Sept. 1994.

/7/ K. Takahashi: Cost Estimate for Production of Highly Enriched Nitrogen-15; CEA Internat. CAPRA Seminar, Karlsruhe 21-22 Sept. 1994.

/8/ V.I. Matveev, S.B. Bobrov, V.A. Eliseev: The Concept of BN-1600 Reactor Core with the Zero Sodium Void Reactivity Effect and Minimum Burn-Up Reactivity Margin; Int. Conf. Fast Reactors and Related Fuel Cycles, Kyoto, Japan, Vol. II, 16-3, Oct. 28 - Nov. 1, 1991.

/9/ R.E. MacFarlane, D.W. Muir: The NJOY Nuclear Data Processing System - Version 91; LA-12740-M, LANL, Los Alamos, New Mexico 87545, October 1994.

/10/ ENDF/B-VI: The US Evaluated Nuclear Data File, version 6.

/11/ R. Douglas O'Dell: Standard Interface Files and Procedures for Reactor Physics Codes, Version IV; LA-6941-MS, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 87545, Sept. 1977.

/12/ I.I. Bondarenko, Ed.: Group Constants for Reactor Calculation; Consultants Bureau, New York, 1964.

/13/ W. Maschek, D. Thiem: Energetic potentials of core disruptive accidents in fast reactors with transmutation/burning capabilities; Proc. Int. Top. Meeting on Advanced Reactors Safety, Pittsburgh, Pa., April 17-21, 1994, Vol.2, pp. 1046, La Grange Park Ill.: ANS, 1994.

/14/ W. Maschek, D. Thiem: Recriticalities and their energetics in a minor actinide burning LMR core; Proc. Int. Top. Meeting on Sodium-Cooled Fast Reactor Safety, Obninsk, GUS, Oct. 3-7, 1994, Vol. 1 pp. 1/90, Obninsk: State Scientific Center of Russian Federation, 1994.

/15/ D. Struwe, W. Maschek: Analyse kernzerstörender Unfälle in schnellen Reaktoren, in: Sammlung der Vorträge zum Statusbericht des Projektes Nukleare Sicherheitsforschung (PSF) vom 23. März 1994 im Kernforschungszentrum Karlsruhe; R. Hüper (Ed.) KfK 5326, pp. 75, 1994.

/16/ H.U. Wider: Severe Accident Studies in Fast Accelerator-Driven Systems; Proc. 2nd Int. Conf. on Accelerator-Driven Transmutation Technologies and Applications, June 3-7, 1996, Kalmar, Sweden.

/17/ H.U. Wider: The European Accident Code-2: Overview and Status; Proc. Int. Fast Reactor Safety Meeting, Aug. 12-16, 1990, Snowbird, Utah, USA.

/18/ H. Rief, J. Magill and H. Wider: Accelerator Driven Systems - Some Safety and Fuel Cycle Considerations; Nato Advanced Research Workshop on Advanced Nuclear Systems Consuming Excess Plutonium, 13-16 Oct. 1996, Moscow, Russia.

/19/ JEF-2.2: The Joint European File, NEADB, Paris.

/20/ Tsuneo Nakagawa, Keiichi Shibata, Satoshi Chiba, Tokio Fukahori, Yutaka Nakajima, Yasuyuki Kikuchi, Toshihiko Kawano, Yukinori Kanda, Takaaki Ohsawa, Hiroyuki Matsunobu, Masayoshi Kawai, Atsushi Zukeran, Takashi Watanabe, Sin-iti Igarasi, Kazuaki Kosako and Tetsuo Asami: Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-2: JENDL-3.2, J. Nucl. Sci. Technol., 32, 1259, (Dec. 1995)

/21/ Keiichi Shibata and Tsutomu Narita (Eds.): Descriptive Data of JENDL-3.2, JAERI-Data Code 98-006 (1998)

/22/ O. Bouland, H. Derrien, and N.M. Larson and L.C. Leal.: R-Matrix Analysis of 240Pu Neutron Cross Sections in the Thermal to 5700-eV Energy Range; Nucl. Sci. Eng. 127, 105 (1997).

/23/ B. Krieg, I. Broeders: Die KfK-Version of the Neutron and Photon Cross Section Generation Code NJOY; Implementation, Testing, and Modifications of the Code, Kernforschungszentrum Karlsruhe, private communication, Aug.1987

/24/ F.H. Fröhner: Self-shielding factors greater than unity in narrow-resonance approximation, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Private communication, March 1978

/25/ R.E. MacFarlane, "TRANSX-CTR: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes for Fusion Systems Analysis", Los Alamos National Laboratory report LA-9863-MS (February 1984)

/26/ R.E. MacFarlane, "TRANSX-3: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes", Los Alamos National Laboratory report LA-12312-MS (July 1992)

/27/ R.E. MacFarlane and R.B. Kidman, "LINX and BINX: CCCC Utility Codes for the MINX Multigroup Processing Code", Los Alamos Scientific Laboratory report LA-6219-MS (Febr. 1976)

32.23.02 Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen

(A. Geist, M. Weigl, U. Müllich, K. Gompper, INE)

Zusammenfassung

Die Trennung dreiwertiger Aktiniden von den Spaltlanthaniden lässt sich mit nichtdispersiver Extraktion in Hohlfasermodulen mit geeigneten Komplexbildnern durchführen. Erste experimentelle Ergebnisse sind vielversprechend.

Weiterhin werden Untersuchungen zur Kinetik der Extraktion von dreiwertigen Aktiniden und Spaltlanthaniden im Rahmen des DIAMEX-Prozesses vorgestellt.

Einleitung

Das Vorhaben wird im Rahmen des EU-Programms *Safety of Nuclear Reactors. A.2. Fuel Cycle Concepts (Partitioning and Transmutation)* bearbeitet (Projekt *Partitioning: New Solvent Extraction Processes for Minor Actinides*, genehmigt für drei Jahre). Das Projekt befasst sich mit der Ausarbeitung eines Prozesses zur Abtrennung von Minoren Aktiniden aus dem hochaktiven Flüssigabfall der Wiederaufarbeitung von Kernbrennstoffen. Dabei werden zunächst die dreiwertigen minoren Aktiniden zusammen mit den Spaltlanthaniden direkt aus dem PUREX-Raffinat extrahiert (DIAMEX-Prozess). Anschließend werden die dreiwertigen minoren Aktiniden von den Spaltlanthaniden getrennt. Die in der so gewonnenen Aktinidenfraktion enthaltenen Radionuklide können dann – ggf. nach weiterer Auftrennung – zu kurzlebigen Nukliden transmutiert werden.

Gemäß der Arbeitsaufteilung innerhalb des EU-Programms liegt der Schwerpunkt unserer Arbeit an dem Vorhaben in der Untersuchung des Einsatzes von Hohlfasermodulen als neuartige Extraktionsapparate.

Aktiniden-Lanthaniden-Trennung im Hohlfasermodul

Es ist seit einiger Zeit bekannt [1], dass sogenannte Hohlfasermodule (HFM) vorteilhaft als Extraktionsapparate in der chemischen Flüssig-Flüssig-Extraktion eingesetzt werden können. In einem HFM ist die Phasengrenze durch entsprechende Benetzungs- und Druckverhältnisse in den Poren einer Membran immobilisiert. Auf

diese Weise werden die für klassische Extraktoren geltenden hydrodynamischen Beschränkungen (Flutung, Feinsttropfenaustrag etc.) vermieden.

Es wurde begonnen, den Einsatz von HFM für die Trennung dreiwertiger Aktiniden von den Spaltlanthaniden zu untersuchen. Die dabei verwendeten HFM bestehen aus ca. 10000 Hohlfasern mit einem Innendurchmesser von 240 µm, einer Wandstärke von 30 µm und einer mittleren Porengröße von 0,02 µm. Die Porosität beträgt ca. 40%. Die aktive Länge der Module beträgt 0,15 m.

Es wurden erste Versuche zur Aktiniden-Lanthaniden-Trennung durchgeführt. Dabei wurden die Spaltlanthaniden (La(III) – Gd(III) und Y(III)) in Konzentrationen, wie sie in etwa dem DIAMEX-Raffinat entsprechen, und Am(III) als Tracer eingesetzt. Die wässrige Phase wurde im einmaligen Durchflussbetrieb im Gegenstrom mit entsprechenden organischen Phasen (ebenfalls im einmaligen Durchfluss) kontaktiert. Diese enthielten selektive Extraktionsmittel.

In einem ersten Versuch wurde 2,6-Di-(5,6-dipropyl-1,2,4-triazin-3-yl)pyridin (n-Pr-BTP) als Extraktionsmittel eingesetzt. Diese am INE entwickelte und patentierte Verbindung [2,3,4] zeichnet sich durch einen außergewöhnlich hohen Trennfaktor aus, was sich im Ergebnis des Extraktionsversuchs widerspiegelt (Abbildung 1):

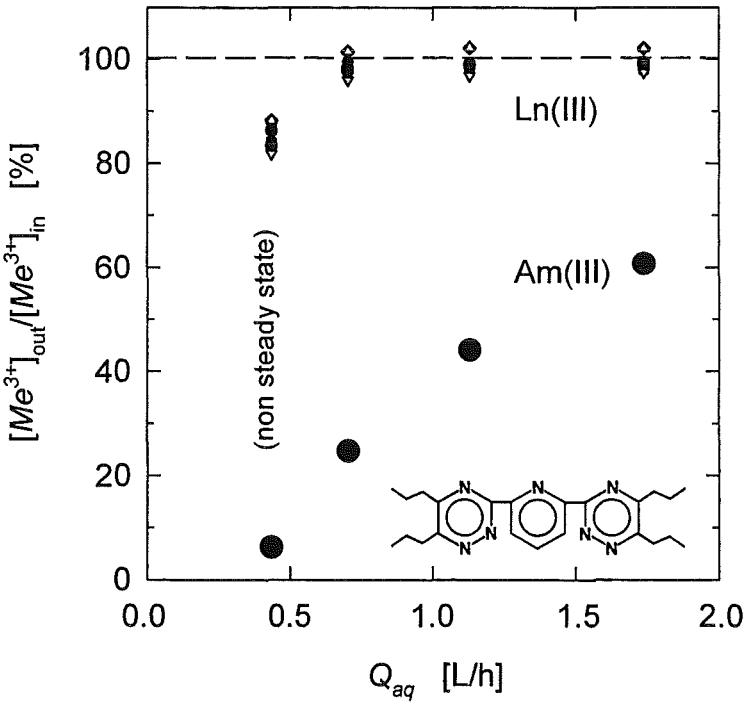


Abbildung 1: Am(III)/Ln(III)-Trennung im HFM mit n-Pr-BTP 0,04 kmol/m^3 in Kerosin/1-Octanol (7:3 vol.). Am(III) + Ln(III) in HNO_3 1,0 kmol/m^3. Q_{org} = 0,5 l/h.

Während, je nach Volumenstrom, bis zu 95% Am(III) abgetrennt werden, verbleiben die Lanthaniden fast vollständig in der wässrigen Phase. (Die erhöhte Koextraktion der Spaltlanthaniden bei einem Volumenstrom von 0,4 l/h lässt sich dadurch erklären, dass der Versuch bei diesem Volumenstrom noch nicht stationär war, wie an den Massenbilanzen zu erkennen war.)

Ein zweiter Versuch (Abbildung 2) wurde mit einer synergistischen Mischung von Bis(chlorphenyl)dithiophosphinsäure und Trioctylphosphinoxid (TOPO) [5] als Extraktionsmittel durchgeführt. Auch hier konnte Am(III) – in Abhängigkeit vom Volumenstrom – fast vollständig extrahiert werden; allerdings wurde ca. 20% des Lanthanideninventars koextrahiert. Die koextrahierten Lanthaniden können in einer nachgeschalteten Scrubbing-Stufe wieder selektiv reextrahiert werden.

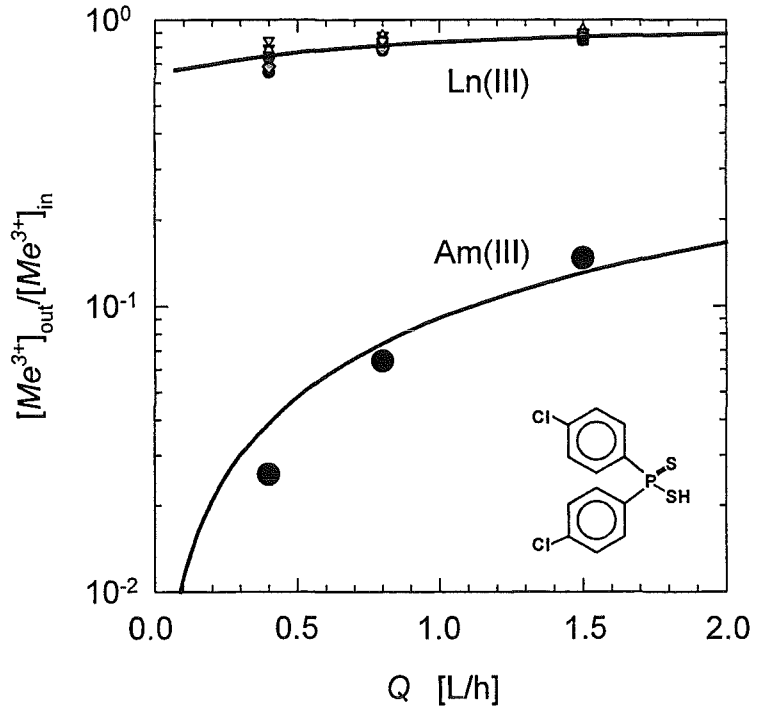


Abbildung 2: Am(III)/Ln(III)-Trennung mit einer synergistischen Mischung aus Bis(chlorphenyl)dithiophosphinsäure 0,5 kmol/m^3 + [*TOPO*] = 0,25 kmol/m^3 in tert.-Butylbenzol. Am(III) + Ln(III) in HNO_3 0,5 kmol/m^3. $Q_{org} = Q_{aq}$. Symbole: Experiment; Linien: Berechnung.

Die in Abbildung 2 dargestellten Linien sind berechnete wässrige Austrittskonzentrationen. Die durchgeführte Modellierung berücksichtigt die wesentlichen im Hohl-

fasermodul ablaufenden physiko-chemischen Prozesse und verzichtet auf Anpassungsparameter. Insofern ist sie ein geeignetes Werkzeug zur Prozessauslegung. Einzelheiten zur Modellierung finden sich in [6,7].

Stoffaustauschkinetik

Weiterhin wurde die Kinetik der Extraktion von Aktiniden(III) und Lanthaniden mit Dimethyl-dibutyl-tetradecylmalonamid (DMDBTDMA) untersucht. Dieser Komplexbildner eignet sich sehr gut zur direkten gemeinsamen Abtrennung der dreiwertigen minoren Aktiniden, Am(III) und Cm(III), und der Spaltlanthaniden aus dem PUREX-Raffinat im sogenannten DIAMEX-Prozess [8]. Es sollten insbesondere Daten für die Modellierung vorgesehener Experimente zum DIAMEX-Prozess im Hohlfasermodul (s.o.) gewonnen werden.

Aus Rührzellenversuchen zur Extraktion von Am(III), La(III), Ce(III), Pr(III), Nd(III), Sm, Eu(III) in 3,5M Salpetersäure ergab sich folgender Befund [9]:

1. Die Extraktionsrate ist im untersuchten hydrodynamischen Bereich transportlimitiert, d.h. die chemische Reaktion läuft im Vergleich zu den diffusiven Transportvorgängen zur Phasengrenze schnell ab.
2. Die Extraktionsraten für Am(III), La(III), Ce(III), Pr(III) liegen ca. 50% über denen für Nd(III), Sm, Eu(III).

Weitere Details dazu sowie eine quantitative Erklärung der experimentellen Ergebnisse werden demnächst an anderer Stelle gegeben [10].

Literatur

[1] B. M. Kim, *Membrane-Based Solvent Extraction for Selective Removal and Recovery of Metals,* J. Membr. Sci. 21, 5 (1984)

[2] Z. Kolarik, U. Müllich, F. Gassner, *Verfahren zur Trennung der Transplutoniden von den Spaltlanthaniden durch selektive Extraktion,* DE 1998-19810895 (erteilt: Juni 1999)

[3] Z. Kolarik, U. Müllich and F. Gassner, *Selective Extraction of Am(III) over Eu(III) by 2,6-Ditriazolyl- and 2,6-Ditriazinylpyridines,* Solv. Extr. Ion Exch. 17(1), 23 (1999)

[4] Z. Kolarik, U. Müllich and F. Gassner, *Extraction of Am(III) and Eu(III) Nitrates by 2,6-Di(5,6-dipropyl-1,2,4-triazin-3-yl)pyridine,* Solv. Extr. Ion Exch. 17(5), 1155 (1999)

[5] G. Modolo, R. Odoj, *Synergistic Selective Extraction of Actinides(III) over Lanthanides From Nitric Acid Using New Aromatic Diorganyldithiophosphinic Acids and Neutral Organophosphorus Compounds,* Solv. Extr. Ion Exch. 17(1), 33 (1999)

[6] U. Daiminger, A. Geist, W. Nitsch, P. Plucinski, *Efficiency of Hollow Fiber Modules for Nondispersive Chemical Extraction,* Ind. Eng. Chem. Res. 35, 184 (1996)

[7] A. Geist, P. Plucinski, W. Nitsch, *Modellierung der Multikationenkoextraktion in Hohlfasermodulen auf der Basis von kinetischen Messungen und Gleichgewichtsdaten,* Chem. Ing. Tech. 69(7), 946 (1997)

[8] L. Spjuth, J. O. Liljenzin, M. J. Hudson, M. G. B. Drew, P. B. Iveson, C. Madic, *Comparison of Extraction Behavior and Basicity of Some Substituted Malonamides,* Solv. Extr. Ion Exch. 18(1), 1 (2000)

[9] A. Geist, M. Weigl, U. Müllich, K. Gompper, *Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen*, in: Sammlung der Vorträge anlässlich des INE-Mitarbeiterseminars vom 9. – 10. Dezember 1999, Hrsg.: A. Loida (2000)

[10] M. Weigl, A. Geist, *Kinetics of Lanthanide/Actinide Co-extraction with DMDBTDMA (N,N'-dimethyl-N,N'-dibutyltetradecylmalonic diamide),* in preparation

32.23.03 Sicherheitsuntersuchungen zum dynamischen Verhalten von Kernen mit Aktinidenanteil

I. Status of SIMMER-III and SIMMER-IV Code Development
(W. Maschek, IKET)

The SIMMER-III/IV code system /1/ has been under development at JNC (Japan Nuclear Cycle Development Institute, O-arai Engineering Center) with cooperation of Forschungszentrum Karlsruhe and CEA (Commissariat a l'Energie Atomique, CEN Grenoble and CE Cadarache). Originally the code has been designed to simulate transients and severe accidents in liquid metal cooled critical reactors /2-4/ but in the meanwhile its application has been extended to other areas. At FZK and CEA the main interest for the SIMMER development is related to its application in the framework of accelerator driven systems (ADS) /5, 6/. For safety investigations in critical waste burning reactors (CAPRA/CADRA reactors /7, 8/) the code has already been extensively used. Another future field of application may be for LWR severe accident investigations related to the low pressure corium dispersal problem /9/. Other recent application areas were e.g. investigations on lithium-lead/water interactions in fusion blankets /10/ or the analysis of the criticality accident at the uranium processing plant JCO (Tokai) /11/.

SIMMER-III is a two-dimensional, three-velocity-field, multi-phase, multi-component, Eulerian, fluid-dynamics code coupled with a structure model and a space-, time- and energy-dependent neutron dynamics model. Two liquids and a gas field can move separately. In total 46 conservation equations (mass, momentum and energy) are solved. The numerics of the fluid-dynamics module utilizes a 2^{nd} order difference scheme in space and time. One feature is the tracking of interfacial areas with their respective sources and sinks. Pool and channel flow regimes are treated. The code utilizes an elaborate equation of state (EOS) system, describing fuels, steel, various coolants (sodium, lead, water), gases and simulation materials in their solid/liquid and gaseous states up to the critical point. With the structure model, real structures (pin, hexcan, vessel) but also 'virtual' structures with 'special' qualities can be modeled. The fluid-dynamics part of the code is designed in a very general way; it is

not restricted to the simulation of accident phenomena in reactors and can be run independently from the neutronics module.
The neutronics module provides nuclear heat sources based on the mass and energy distributions calculated by the other code elements. The transient neutron flux distribution is calculated based on the improved quasistatic method /12/. For the space dependent part, a TWODANT based flux shape calculation scheme has been implemented recently /13/. The decay heat is taken into account separately. The fluid-dynamics and neutronics equations are usually solved on different meshes giving the necessary flexibility and fulfilling accuracy conditions. For ADS application a time dependent external neutron source with a space-energy distribution defined by the user has been integrated into the kinetics equations /5/.

The next step in the code development is the extension of the code to 3 dimensions, SIMMER-IV. The fluid-dynamics part has already been developed by JNC and will be coupled to the THREEDANT module at FZK. First analyses with THREEDANT have been performed and gave satisfactory results (see later). Neutronics modules based on nodal methods have been discarded for the moment, as they showed unsatisfactory results for severely distorted core configurations typical for accident conditions. The code running time is a significant point for 3D codes. In SIMMER-III and also in SIMMER-IV the operator-split or fractional step method /14/ has been applied in the fluid-dynamics part. First analyses show the favorable result that the computing time is directly proportional to the number of mesh cells

Much effort has been devoted to the verification/validation of the code. In a Phase-I assessment more fundamental and separate effect tests of individual code models have been performed. The 34 test problems documented cover e.g. shock-tube problems, bubble columns, liquid sloshing motions, freezing in tubes, rapid vaporization of fuel, two-phase blow-down tests. This first round of verification has set the boundary conditions for further code development and improvement. Now, the Phase-II assessment has been finished with the recalculation of more integral experiments. A conclusion of Phase I and Phase II assessment is that the code can reliably describe phenomena and scenarios encountered in transients and severe accidents in liquid metal cooled reactors. Additionally, due to the generality and

versatility of the fluid-dynamics/thermal-hydraulics modules, the code can be applied to multi-phase problems in other reactor types too.

/1/ S. Kondo, K. Morita, Y. Tobita, N. Shirakawa: SIMMER-III : An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis, ANP'92, Tokyo, Japan (1992)

/2/ K. Morita, S. Kondo, Y. Tobita, D.J. Brear: SIMMER III Application to Key Phenomena of CDAs in LMFR, NURETH-8, Kyoto, Japan (1997)

/3/ W. Maschek, D.Struwe, M. Eigemann, M.Flad, P. Lo Pinto: Risk Reduction of Core-Melt Accidents in Advanced CAPRA Burner Cores; ARS'97,Orlando, USA (1997)

/4/ W. Maschek, K. Morita, M. Flad: SIMMER-III Analyses of Enhanced Fuel Removal Processes under Core Disruptive Accident Conditions, ICONE-6, San Diego, USA (1998).

/5/ R. Rineiski, B. Merk, W. Maschek: ADS Related Extension of the Neutronics Module in the Accident Analysis Code SIMMER-III, ADDTA'99, Praha (1999)

/6/ R. Rineiski, E. Kiefhaber, B. Merk, W. Maschek, M. Flad: Neutron Kinetics Developments of the SIMMER-III Safety Code for ADS Application, OECD/NEA Workshop on the Utilization and Reliability of High Power Proton Accelerators, Cadarache ,France (1999)

/7/ A. Conti, J.C. Garnier, P. Lo Pinto, R.E. Sunderland, T. Newton, W. Maschek: CAPRA Exploratory Studies of Uranium-Free Fast Pu Burner Cores; GLOBAL '95, Versailles, France (1995)

/8/ A. Languille, J.C. Garnier, P. Lo Pinto, D. Verrier, J. Delpaix, P. Allan, T. Newton, R.E. Sunderland, E. Kiefhaber, W. Maschek, D. Struwe: CAPRA Core Studies – the Oxide Reference Option, GLOBAL '95, Paris, France (1995).

/9/ Wilhelm, personal communication (2000)

/10/ P. Sardain: Modeling of lithium-lead water interaction, 9th JNC/FZK/CEA SIMMER Review Meeting, O-arai, Japan (2000)

/11/ J. Tobita, H. Yamano, S. Fujita, S. Kondo: The analysis of criticality accident in JCO, 9th JNC/FZK/CEA SIMMER Review Meeting, O-arai, Japan (2000)

/12/ K.O. Ott, R.J. Neuhold: Nuclear Reactor Dynamics, ANS, La Grange Park, USA (1985)

/13/ G. Buckel, E. Hesselschwerdt, E. Kiefhaber, S. Kleinheins, W. Maschek: A new SIMMER-III version with improved neutronics solution algorithms, FZKA 6290 (1999)

/14/ H.B. Stewart, B. Wendroff, Two-Phase Flow: Models and Methods, Journal of Comp. Physics 56, 363 (1984)

II. Status of SIMMER-III Code Verification

(W. Maschek, IKET; S. Kondo, JNC; P. Coste, J. Louvet, CEA)

The SIMMER development /1/ has been accompanied by two extended verification/ validation phases /2/. The second phase which dealt with more integral tests, including in-pile experiments has now been finished and a final report is prepared. In the framework of the Phase-II assessment the neutronics part of the code has been evaluated too. This was necessary as a new neutronics model based on TWODANT /3/ had been implemented and had to be tested and compared to critical assemblies. The SIMMER-III code development was originally mainly dedicated to LMR severe accident studies, but besides the investigations with sodium, most of its assessment in 1D and 2D two-phase flows was performed with air/water or vapor/water experiments. Therefore closure laws for momentum exchange functions were chosen as general as possible with regard to the materials and the original engineering correlations were not tuned to a specific experiment. The same holds for heat transfer coefficients, which of course are different for metals or water, mostly because of the difference of the Prandtl numbers. In 2D, the flow regime map is so simple (bubbly, transition and dispersed) that no material physical properties dependence is included. In 1D, it depends also on the droplet entrainment based on the Ishii and Mishima correlation /4/. The basic strategy to utilize as general models and correlations as possible was a prerequisite of a successful treatment of very different experiments within the verification effort for the code.

In the Phase-II assessment 5 categories of code application can be defined:

- Boiling pool dynamics
- Fuel freezing and material relocation
- Fuel-coolant interactions
- Material expansion dynamics
- Disrupted core neutronics

In Tab. 1 the different experiments and phenomena are briefly described and the experimental name or test facilities are mentioned. In case no name is entered usually a comparison with a small scale test, with a benchmark solution or a

comparison with other code systems e.g. the French ERANOS neutronics system /5/ has been made.
The outcome of the verification/validation effort was very satisfying. SIMMER can reliably describe steady and transient two-phase flow problems and also numerical stability is satisfactory. Fuel freezing phenomena can be simulated well reflecting also differences in fuel freezing behaviour of e.g. UO_2 and alumina. In the fuel coolant interaction area the code is especially suited for fuel/sodium interactions, but the satisfactory simulation of corium/water interactions gives further confidence into the code. The neutronic part has matured so far that the complicated distorted material configurations under core disruption can be described with high reliability.

Based on this favourable outcome of the Phase-II assessment phase the extension of the SIMMER-III code towards SIMMER-IV with 3 dimensions and extended modelling features can be performed on a sound basis.

From the Phase-II assessment analyses important conclusions can be drawn on future work. The treatment of interfacial areas and momentum exchange functions will be an ongoing research area including experimental tests. Multi-dimensional bubble behaviour may require further model improvements when the resolution of detailed bubble behaviour needs to be simulated. Another important point is the modelling of flows heavily loaded with particles. This is also of relevance for fuel freezing and relocation. To distinguish between refrozen fuel particles after melting and broken-up fuel chunks may have to be addressed. Further, the tracing of molten fuel jet surfaces might be desirable for simulating jet break-up behaviour during penetration processes and resultant fuel coolant interactions.

The intended application of SIMMMER-IV to new reactor systems with different coolants will necessitate another round of verification efforts. This also holds for the neutronics part. Investigations in benchmarks and experiments related to source neutronics in ADS applications will gain more importance.

A new extended development phase might have to be initiated in SIMMER-IV in case that e.g. for accelerator driven systems new innovative fuels have to be investigated. This would necessitate a totally new development of the pin model. In the past such

with PuN fuel /7/. In this core design the safety issue was a key question because of the PuN disintegration at high temperatures /8/. In the case of new fuels introduced into ADS designs, besides a theoretical development, an extended experimental program on fuel behaviour under steady state and transient conditions is needed.

/1/ S. Kondo, K. Morita, Y. Tobita, N. Shirakawa: SIMMER-III : An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis, ANP'92, Tokyo, Japan (1992)

/2/ S. Kondo, Y. Tobita, K. Morita, D.J. Brear, K. Kamiyama, H. Yamano, S. Fujita, W. Maschek, E.A. Fischer, E. Kiefhaber, G. Buckel, E. Hesselschwerdt, M. Flad, P. Coste, S. Pigny: Current Status and Validation of the SIMMER-III LMFR Safety Analysis Code, ICONE-7, Tokyo, Japan (1999)

/3/ P. Coste, S. Pigny: Current Status of Thermohydraulic Validation Studies at CEA-Grenoble for the SIMMER-III Code, AIEA TCM Mtg, Obninsk, Russia (1998)

/4/ G. Buckel, E. Hesselschwerdt, E. Kiefhaber, S. Kleinheins, W. Maschek: A new SIMMER-III version with improved neutronics solution algorithms, FZKA 6290 (1999)

/5/ M. Ishii, K. Mishima: Liquid Transfer and Entrainment Correlation for Droplet Annular Flow, Proc. of 7^{th} Int. Heat Transf. Conf., Muenchen, Germany (1972).

/6/ J. Y. Doriath, C. W. McCallien, E. Kiefhaber, U. Wehmann, J.M. Rienier: ERANOS1: The Advanced European System of Codes for Reactor Physics Calculations, Int. Conf. On Math. Methods and Supercomputing in Nucl. Applications, Karlsruhe, Germany (1993)

/7/ A. Conti, J.C. Garnier, P. Lo Pinto, R.E. Sunderland, T. Newton, W. Maschek: CAPRA Exploratory Studies of Uranium-Free Fast Pu Burner Cores; GLOBAL '95, Versailles, France (1995)

/8/ W. Maschek, M. Flad, P. Lo Pinto, Core Disruptive Accident Analyses for Advanced CAPRA Cores, ICONE-4, New Orleans, USA (1996)

Table 1. List of Test Problems for SIMMER-III Phase 2 Assessment

Brief Description of Test	*Name of Facility/Test*
Category 1: Boiling Pool Dynamics	
Isothermal 3D bubble column	
Two-phase flow with large liquid-to-gas density ratio	
Void distribution of two-phase flow in a pipe	
Vaporization and condensation in an internally heated boiling pool	SEBULON
Two phase flow: gas-jets and large bubbles	Burty + Castillejos
Vaporization and stratification of a multi-phase, multi-component material configuration	MMB
In-pile loss of flow experiment	SCARABEE - APL3
In-pile experiment of a nuclear heated fuel pool	SCARABEE - BF2
Steady state two phase flow	LOTUS
Rapid depressurization of a tube initially filled with water	Bartak
Category 2: Fuel Freezing and Relocation	
Freezing of an Al_2O_3 melt in a quartz tube	THEFIS
Freezing of an Al_2O_3 melt in a quartz tube with particles	THEFIS
Basic freezing tests in tubes with simulation materials	
Molten fuel freezing in steel tubes	GEYSER/BLOKKER II
Two-phase flow freezing of simulation material	BULLAGE
In-pile post failure extended fuel motion	CABRI E11
Fuel relocation of UO_2 melt through control rod structures	CAMEL C6, C7
In-pile structure-wall melt attack and fuel relocation	SCARABEE - PV-A
Category 3: Fuel-Coolant Interactions	
Alumina thermite melt injection into sodium	THINA
Premixing and quenching of UO_2/ZrO_2 melt in water	FARO-LWR L06
Large-scale fuel-sodium interaction	FARO-TERMOS T1
FCI experiment in alumina/water system with propagation	KROTOS
Premixing and quenching of an alumina jet in water	PREMIX PM06
Premixing and quenching of high temperature solid balls in water	QUEOS Q08, Q12
Category 4: Material Expansion Dynamics	
Scaled post-disassembly expansion of nitrogen or steam in water	SGI
Post-disassembly expansion	OMEGA
Expansion and condensation of a large steam bubble in water	CARAVELLE 6
High speed two-phase flows through simulated upper core structures	VECTORS
Developing annular flow	
Category 5: Disrupted Core Neutronics	
Reactivity changes from fuel re-distributions: slumping and dispersed configurations (TWOTRAN based calculations)	FCA-VIII
Transients simulated with space-time neutron kinetics using the improved quasi-static method	
Reactivity changes from fuel re-distributions: slumping and dispersed configurations (TWODANT based calculations)	FCA-VIII
Comparison of SIMMER neutronics with the ERANOS system	

III. Neutron Kinetics Developments of the SIMMER-III Safety Code for ADS Application

(A. Rineiski, E. Kiefhaber, B. Merk, W. Maschek, IKET; M. Flad, DTI)

Abstract

Recent developments extending the capabilities of the SIMMER-III code for dealing with transients and accidents in an ADS are presented. The impact of weighting functions on the point-kinetics parameters at steady-state is shown. Some preliminary results of using a space-time kinetics model for beam-trip related transients are highlighted.

Introduction

The SIMMER-III code /1/ has been extended in order to provide tools for the analysis of transients and postulated accidents in accelerator driven systems (ADS). In Ref. /2/, the basic approach applied in the SIMMER-III code was presented. The use of two adjoint fluxes (k-adjoint and α-adjoint) fluxes as weighting functions for computing the kinetics parameters in the frame of the improved quasistatic scheme was discussed. A comparison of transients caused by inserting a strong perturbation under critical and subcritical conditions (sustained by a time-independent source) was given.

Recently the procedure of iterative α-search in SIMMER-III has been significantly improved. That allows us to analyze the impact of different weighting procedures for lower subcriticality levels. Some related results are presented in this paper.

Impact of weighting procedures on the point-kinetics parameters at steady-state

The results of transient simulations presented in Ref. /2/ were not considerably influenced by different weighting procedures. This finding was certainly related to the fact that the subcriticality levels were not too low; thus the existing standard (k_{eff}) and recently proposed (α-) adjoint fluxes were fairly similar. However, we observed an extreme sensitivity of the existing standard α-search procedure to the user-provided

α-guess and correlated search parameters at low subcriticality levels (confirming Ref. /3/, p.7-37: "If EV (the eigenvalue α) is negative, then there is a possibility that the corrected removal cross-section will become negative. If this happens, the automatic search procedure may fail dramatically.")

In this chapter we consider the same small sodium cooled reactor model (with reactor height/diameter of 158.0/234.4 cm) as was investigated earlier /2/ (see Fig. 1) for 3 subcriticality levels corresponding to the following k_{eff} values: 0.992, 0.975 and 0.959. In Table 1, the reactivity (ρ), mean generation time (Λ), and the ρ/Λ ratio computed with two different weighting functions (α-adjoint and k-adjoint) are given. In the last column the α-eigenvalues for the corresponding reactor states are presented (all times are given in seconds). The effective delayed neutron fractions are rather independent (in this case) of the weighting scheme; therefore, they are not shown.

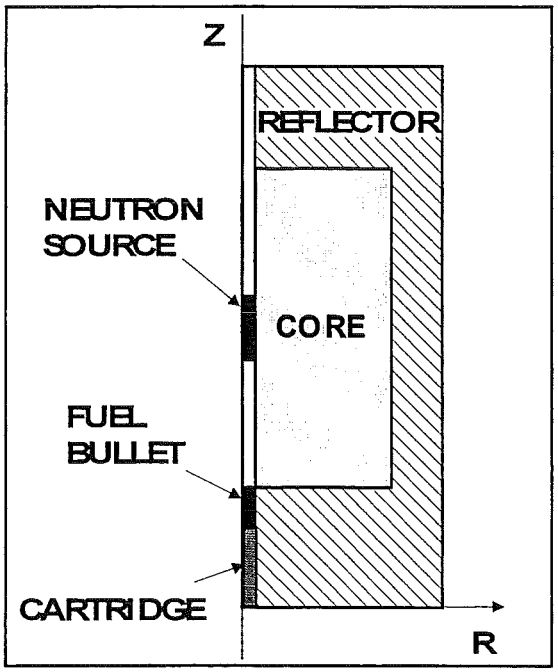


Figure 1: Geometry of the Standard Test problem for Neutronics (STN)

k_{eff}	$\rho_\alpha \cdot 10^{-3}$	$\rho_k \cdot 10^{-3}$	$\Lambda_\alpha \cdot 10^{-7}$	$\Lambda_k \cdot 10^{-7}$	$\rho_\alpha/\Lambda_\alpha \cdot 10^4$	$\rho_k/\Lambda_k \cdot 10^4$	$\alpha \cdot 10^4$
0.99	-7.72	-7.73	3.08	3.04	-2.51	-2.54	-2.60
0.97	-24.4	-24.5	3.22	3.09	-7.58	-7.93	-7.88
0.95	-39.8	-41.3	4.58	3.14	-8.69	-13.15	-9.12

Table 1. Kinetics parameters computed with different weighting functions for the STN problem

The presented data indicate: with decreasing keff , α-weighting influences most significantly the neutron generation time and the ρ/Λ ratio. This fact is related to the sharp increase of the lower energy α-adjoint flux, especially in the reflector region surrounding the reactor core while (following the decrease of k_{eff} value from 0.992 to 0.959) the fission-to-absorption-rate ratio in the core decreases.

From the mathematical point of view, this effect is due to significant reduction (or even approaching a slightly negative value) at subcritical conditions of the "effective" absorption (the sum of the "real" absorption and negative α/v ratio):

$$\Sigma_{effective_absorption,group} = \Sigma_{absorption,group} - \frac{|\alpha|}{v_{group}} . \qquad (15)$$

This reduction is particularly pronounced if the cross-sections are small (in the reflectors) and the neutron velocity is low (i.e. at low energies).

This phenomenon has also a physical interpretation: in a subcritical system the slow reflector neutrons may contribute more (compared to a similar critical reactor) to the flux level at a fixed time point in the future. With decreasing the fission-to-absorption-rate ratio within the core, a neutron (with taking into account its progeny if the neutron is observed in the fissile region) may have more chances "to survive" outside the core (and moving slowly at the same time). Thus, such a neutron may play a more important role in contributing to "average neutron generation time" and to transient flux behavior in the decay mode after switching-off the source.

On the other hand, the results obtained with α-weighting are related to the asymptotic (relevant for the neutron importance in the "far" future) mode of the prompt component of the adjoint function. The influence of the higher adjoint α-modes (relevant for the neutron importance in the "nearest" future) is currently ignored. Thus, the k- and α-adjoints may be considered as too possible approximate types of an adjoint function associated to a subcritical system. Differences in the results obtained by applying these two different approaches provide a certain guess about the sensitivity of these results to the choice of a particular scheme for computing the point-kinetics parameters.

Some preliminary results of beam-trip-related transient simulations

Recent implementations of data and models for lead into the thermal-hydraulics part of SIMMER allowed transient analyses of a small ADS design proposal.

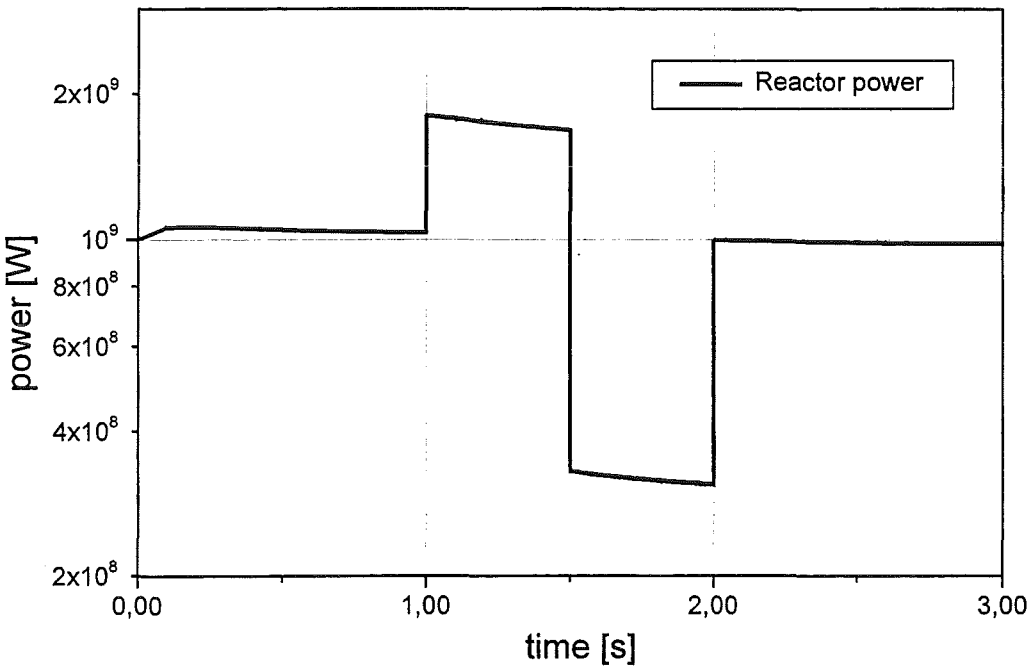


Figure 2: Power trace for a beam-trip in a small ADS model

The important type of transients in an ADS – which is a novel one compared to conventional reactors – is related to the possible time-dependent variation of the beam power. Interesting results on this type of transients have already been published /4, 5/ corresponding usually to the conventional point-kinetics models.

We have performed analyses of beam trips for some ADS models with SIMMER. One of the models – which we use currently – is a relatively small Th/U system (with reactor height/diameter of 186.0/288.4 cm). The k_{eff} value is about 0.975. An example of the power-vs.-time dependence for a particular kind of beam trip is given in Fig. 2: the neutron source strength is constant initially, then it is rapidly (within 0.1 ms) doubled for almost 0.5s, then almost shut off (to 1% of the original level) and after about 0.5s returned (within 0.1 ms) to its initial value. The initial very small deviation of the reactor power just after the start of the transient is related to a slight

imbalance at steady-state conditions. The standard (with k_{eff}-adjoint flux computed at t=0) weighting procedure was employed.

Running a space-time kinetics code, we had observed two reactivity jumps (the relative reactivity changed by a few percents, the absolute reactivity change was of about 0.2$) of the same magnitude but different sign at the points of source shut-off and switching-on to the initial strength. These jumps disappear if shape recalculations during the transient are omitted (that is effectively the point-kinetics scheme). Thus one can assign the observed effect to prompt shape variations. For the current case the inaccuracy in total reactor power variation during change of the beam power – due to neglecting shape-variation-induced reactivity jumps in the point-kinetics scheme – is of the order of a few percents. The detailed impact of flux shape variations on the spatial power distribution will be further investigated.

Conclusions

The current version of the SIMMER-III code includes new source-related neutronics capabilities and additional thermal-hydraulics options. With the amended neutronics features coupled to an elaborate accident code, SIMMER-III represents a new and versatile tool for assessing safety issues of an ADS.

Determination of the α-weighting option was made significantly more reliable and user-friendly. The obtained results show that the choice of weighting function may affect remarkably the computed values of some point-kinetics parameters.

Preliminary analyses of beam transients show that space-time kinetics effects are visible but have (for the investigated model) no pronounced effect on the total power excursion. These analyses will be continued.

The calculation results – obtained up to now – are reasonable and internally consistent. Verification efforts for the new SIMMER neutronics model by comparing it with other models and codes are under way.

References

/1/ S. Kondo et al.: SIMMER-III : An Advanced Computer Program for LMFBR Severe Accident Analysis, ANP'92, Tokyo, Japan (1992)

/2/ A. Rineiski et al: ADS Related Extension of the Neutronics Module in the Accident Analysis Code SIMMER-III, ADTTA'99, Praha, (1999)

/3/ R. Alcouffe et al.: DANTSYS: A Diffusion Accelerated Neutral Particle Transport Code System, LA-12969, USA (1995)

/4/ H.U. Wider et al.: Severe Accident Studies in Fast Accelerator - Driven Systems, 2 nd Int. Conf. on ADS Transmutation Technology and Application., Kalmar, Sweden (1996)

/5/ A. D'Angelo et al.: Preliminary Analysis of Neutronic-Source Transients in a Small ADS Prototype, ADTTA'99, Praha, Czech Republic (1999)

IV. THREEDANT test calculations for a particular FCA VIII-2 assembly

(G. Buckel, E. Kiefhaber, A. Rineiski, IKET)

In the framework of further developing the SIMMER /1/ code package for the analyses of transients and accidents in nuclear power plants it is intended to extend the code to a 3-dimensional geometry /2/. The 3-dimensional fluid dynamics has been developed by JNC. Concerning the neutronics part there exist several possibilities for using available neutron transport codes for 3-dimensional geometry. NSHEX (a Japanese development) and THREEDANT (a LANL development, routinely applied at FZK/Germany) are potential candidates for such type of codes which are easily accessible to the partners cooperating in the SIMMER development.

Worried by convergence problems observed by our Japanese colleagues /3/ in calculations of a hex-z model of FCA VIII-2 when applying the NSHEX code, it was investigated whether similar difficulties might be encountered when using THREEDANT for a corresponding x-y-z model, that is in accordance with the original FCA VIII-2 pattern regarding the vertical (x-y) cross section of that critical assembly. (see Figures 1 and 2)

The THREEDANT /4/ test calculations exhibited no peculiar difficulties in the convergence behavior for both cases which were investigated, the modified geometry as well as the original geometry, respectively. The convergence performance was very similar and the CPU-time (RISC6000) was surprisingly short (a bit more than 6 min. for each case, which is considered as to be very efficient for a 3-dim. 9 groups problem with 27*27*62 meshes in S_4).

Table 1 reproduces the iteration protocol for the original geometry and Table 2 that one for the modified geometry. Evidently there is a fairly smooth and rapid convergence progression and no extraordinary feature or irregular behavior can be found. For the sake of completeness in a further test run the filled up blanket was removed and replaced by vacuum. The results presented in Table 3 confirm that this change caused a degradation of the convergence behavior as could be expected from previous experience but was considered to be very reasonable and, furthermore, the CPU-time did not increase too much.

The k_{eff}-values given in Tables 1-3 are fairly reasonable and the differences are at least quite plausible: for the original geometry k_{eff} in Table 1 is rather close to unity indicating that the 9-group cross section set is rather well suited to the recalculation of FCA Assembly VIII-2. The transition from the original to the modified geometry leads to a noticeable decrease in criticality because the exchange of driver and blanket drawers at the end brings fertile material closer to the core center and relocates fissile material in the opposite direction, or in other words: driver material is moved from a region of higher importance to a region of lower importance and blanket material is relocated just in the other direction. This is compatible with the k_{eff}-difference between Table 2 and Table 1. The calculation model was simplified by filling the empty corner with blanket material. Removing this additional blanket material (i.e. replacing it by vacuum) naturally increases the total leakage rate. The k_{eff}-difference between Table 3 and Table 1 illustrates that this influence remains fairly small as could be expected.

The described test calculations have shown that THREEDANT is a very suitable and powerful tool for 3-dimensional neutronics calculations in x-y-z geometry for critical x-y-z assemblies such as FCA Assembly VIII-2, for which NSHEX was found in the past to suffer from convergence problems for an equivalent hex-z geometry. This finding for THREEDANT holds for the original geometry as well as for a modified one where intentionally the position of some drawers was exchanged in order to generate a more irregular shape of the inner and outer surface of the driver region. There were speculations that the fact that a driver assembly in the hex-z model was surrounded by 4 blanket assemblies could be responsible for the encountered convergence problems with NSHEX. No similar tendency was found in the THREEDANT calculations although there, in the modified geometry, individual (square) driver assemblies were surrounded by 3 blanket assemblies; i.e. 3/4 of its surface as compared to 4/6 in the hex-z configuration. (see Figures 1 and 2)

Summary

The results of the described test calculations confirmed the confidence in the reliability, accuracy and robustness of THREEDANT. At least it is not susceptible to revisions of the driver/blanket interface leading to a less regular shape of the inner and outer boundaries of the driver region. According to the speculative cause of

convergence problems found when using NSHEX at JNC, it was feared that analogous difficulties might be encountered too when applying THREEDANT. Fortunately enough, such difficulties were **not** encountered in the test calculations, for the realistic calculation model of FCA VIII-2 as well as for an intentionally modified, more complicated model for which more pronounced convergence problems seemed possible. This possible danger could be excluded by the results of the present study, so that THREEDANT still can be considered as an attractive tool (for x-y-z-geometry) for an envisaged 3-dimensional version of SIMMER.

Three final comments regarding the possible incorporation of THREEDANT in an advanced version of SIMMER seem to be appropriate:

(C1) Although this test proved to be successful and confirmed the applicability and favorable performance of that code in 9 groups calculations for a critical assembly (FCA VIII-2) with a fast neutron energy spectrum, it cannot be taken for sure that this favorable feature will also be valid for cases with neutron upscattering. Therefore, additional tests may be needed for representative cases of LWRs if the then chosen energy group structure would require an upscatter treatment.

(C2) Up to now THREEDANT was not explicitly tested for heavily distorted core configurations like the compacted core of SRA investigated in the TWODANT tests /5/ where a large fraction of the reactor is voided, i.e. is completely empty. However, according to the experience gained with TWODANT, there is no reason to doubt that THREEDANT can treat such cases in a suitable manner too.

(C3) In the current SIMMER version the quality and reliability of the solution determined for the neutron flux distribution can be assessed by the monitored percentages of negative flux fixups). An equivalent monitoring is at present missing for THREEDANT. However, if really needed or desired, it could be incorporated fairly easily using the same principles as applied in TWODANT.

More detailed information concerning these investigations may be found in /5/.

Literature

/1/ W.R. Bohl, L.B. Luck: SIMMER-II: A Computer Program for LMFBR Disrupted Core Analysis; Los Alamos National Laboratory report LA-11415-MS (June 1990)

/2/ W. Maschek: Private communication, March 1999.

/3/ Y. Tobita, JNC: Test problem for the convergence test of three dimensional neutronic codes; FAX dated April 7, 1999.

/4/ RSIC COMPUTER CODE COLLECTION; DANTSYS 3.0, One-, Two-, and Three-Dimensional, Multigroup, Discrete Ordindates Transport Code System, contributed by: Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, (1995).

/5/ E. Kiefhaber: Test Calculations with THREEDANT for FCA Assembly VIII-2, Internal report (April 2000)

Table 1 : THREEDANT iteration protocol for the original geometry

```
*****************************************************************************************
*
*                     ...flux and eigenvalue convergence as monitored by threedant...
*
*****************************************************************************************
*******************************
*key start iteration monitor *
*******************************
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
*   2.06     0
*  42.88     1      0       5       .98390357  7.52811E-03  0.00000E+00  0.00000E+00  **no**
*  91.70     2     11       3      1.00304736  1.34098E-02  9.49048E+00  2.91105E+00  **no**
* 133.22     3     10       2      1.00320840 -1.40066E-04  4.96617E-01  9.15763E-01  **no**
* 171.07     4      9       2      1.00327934  5.21079E-05  1.17704E-01  2.10778E-02  **no**
* 210.40     5      9       2      1.00328433  5.97620E-06  1.80997E-02  2.02159E-03  **no**
* 249.65     6      9       2      1.00328427  9.13821E-07  7.96256E-03  3.55653E-04  **no**
* 286.69     7      9       2      1.00328395  1.15370E-07  2.98722E-03  7.09153E-05  **no**
*
*     ------------------------------------------------------------------
*
*              -- inner iteration summary for outer iteration no.   8 --
*
*                                  iter per max flux   at
*                              group  group   change   mesh
*                                 1     2    .99E-05  27, 27,  1
*                                 2     2    .69E-05  27, 27, 17
*                                 3     2    .35E-05   5, 11, 52
*                                 4     2    .75E-05   9,  9, 51
*                                 5     3    .98E-05   9,  9, 51
*                                 6     4    .37E-05   9,  9, 51
*                                 7     8    .49E-05  27, 27, 57
*                                 8     3    .57E-05  27, 27,  1
*                                 9     5    .59E-05  27, 27,  1
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
* 376.53     8     31       2      1.00328377  1.83233E-08  9.93894E-06  1.30972E-06   yes
*
*                $$$$$$ all convergence criteria satisfied $$$$$$
*
*  particle balance =  3.15577E-10     total inners all outers =   88
*
*****************************************************************************************
```

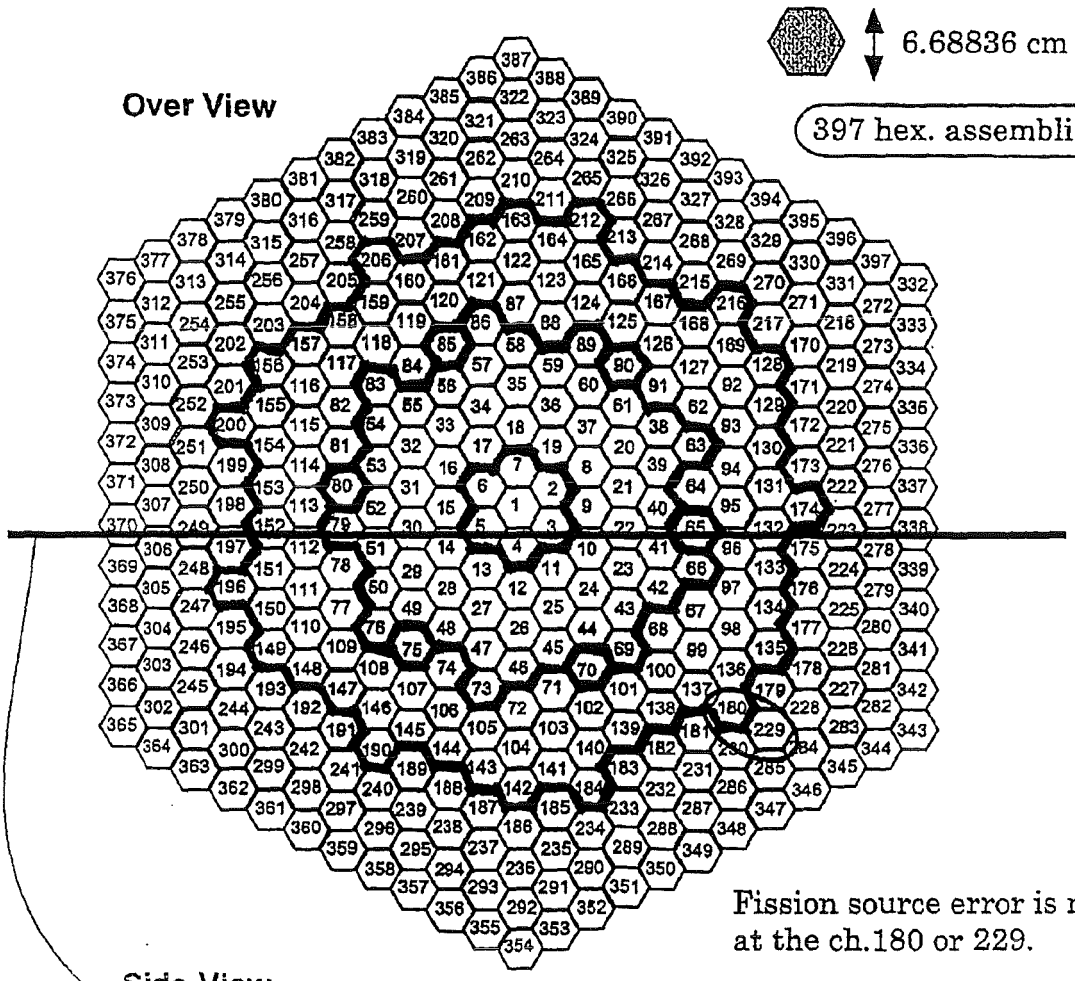
Table 2 : THREEDANT iteration protocol for the modified geometry

```
*****************************************************************************************
*
*                     ...flux and eigenvalue convergence as monitored by threedant...
*
*****************************************************************************************
*******************************
*key start iteration monitor *
*******************************
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
*   2.00     0
*  42.94     1      0       5       .97736992  7.88178E-03  0.00000E+00  0.00000E+00  **no**
* 102.79     2     15       3       .99678830  1.34167E-02  3.24304E+00  2.96231E+00  **no**
* 141.53     3      9       2       .99681503 -2.31697E-04  2.94260E-01  1.00090E-01  **no**
* 180.88     4      9       2       .99684514  1.79697E-05  5.15199E-02  1.58403E-02  **no**
* 219.82     5      9       2       .99684356  2.46784E-06  1.40394E-02  2.80816E-03  **no**
* 258.76     6      9       2       .99684215  4.43154E-07  3.21741E-03  5.47749E-04  **no**
* 295.38     7      9       2       .99684149  2.84894E-08  9.59905E-04  1.12015E-04  **no**
* 324.47     8      9       1       .99684132 -2.22058E-08  3.27005E-04  2.75742E-05  **no**
*
*     ------------------------------------------------------------------
*
*              -- inner iteration summary for outer iteration no.   9 --
*
*                                  iter per max flux   at
*                              group  group   change   mesh
*                                 1     2    .53E-05  27, 27, 62
*                                 2     1    .67E-05   5,  7, 32
*                                 3     1    .45E-05   7,  9, 52
*                                 4     1    .81E-05   7, 11,  1
*                                 5     2    .88E-05   5, 11, 51
*                                 6     2    .97E-05   5, 11, 51
*                                 7     5    .52E-05  27, 27,  6
*                                 8     2    .58E-05  27, 27, 62
*                                 9     4    .39E-05  27, 27, 62
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
* 381.03     9     20       1       .99684118 -6.33133E-08  9.65888E-06  8.61723E-06   yes
*
*                $$$$$$ all convergence criteria satisfied $$$$$$
*
*  particle balance =  4.63942E-09     total inners all outers =   89
*
*****************************************************************************************
```

Table 3 : THREEDANT iteration protocol for the original geometry without filled-up blanket corner

```
*****************************************************************************************************
*
*                    ...flux and eigenvalue convergence as monitored by threedant...
*
*****************************************************************************************************
*******************************
*key start iteration monitor *
*******************************
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
*   2.13     0
*  40.17     1      0       5       .98364347  5.65967E-03  0.00000E+00  0.00000E+00  **no**
*  94.31     2     15       3      1.00268362  1.37236E-02  5.17290E+01  1.32725E+01  **no**
* 141.42     3     13       2      1.00280432 -1.73971E-04  9.28476E-01  1.28258E+00  **no**
* 177.76     4      9       2      1.00286495  3.56933E-05  2.60032E-01  1.90147E-01  **no**
* 214.10     5      9       2      1.00287044  4.10798E-06  9.50495E-02  6.01119E-02  **no**
* 250.46     6      9       2      1.00287061  5.11236E-07  4.09750E-02  2.00477E-02  **no**
* 285.65     7      9       2      1.00287036  2.49918E-10  1.68426E-02  7.02268E-03  **no**
* 320.80     8      9       2      1.00287020 -3.76708E-08  7.04754E-03  2.58082E-03  **no**
* 355.98     9      9       2      1.00287013 -2.19423E-08  3.00462E-03  9.75627E-04  **no**
* 391.68    10      9       2      1.00287010 -9.77319E-09  1.28376E-03  3.77269E-04  **no**
* 427.36    11      9       2      1.00287009 -3.95438E-09  5.93649E-04  1.48130E-04  **no**
* 463.06    12      9       2      1.00287009 -1.53054E-09  2.73836E-04  5.87690E-05  **no**
*
*     ------------------------------------------------------------------
*
*              -- inner iteration summary for outer iteration no.  13 --
*
*                                  iter per max flux   at
*                               group  group   change   mesh
*                                  1     1    .83E-05  23, 17, 61
*                                  2     3    .40E-05  17, 23, 62
*                                  3     4    .45E-05  17, 23,  1
*                                  4     4    .91E-05  17, 23,  1
*                                  5     5    .51E-05  17, 23,  1
*                                  6     4    .81E-05  23, 17,  1
*                                  7     4    .78E-05  23, 17,  1
*                                  8     4    .58E-05  17, 23, 62
*                                  9     4    .73E-05  17, 23, 62
*
*
* cpu time outer       diffusion      k-eff                 max ptwise   max ptwise   inners
*  (sec)    no. inners sub-outers  eigenvalue   lambda-1     flux change  fiss change converged
* 552.42    13     33       2      1.00287009 -6.54716E-10  9.12084E-06  3.88068E-08   yes
*
*                $$$$$$ all convergence criteria satisfied $$$$$$
*
*  particle balance =  0.58719E-11     total inners all outers =  142
*
*****************************************************************************************************
```

Fig. 1 Cross Section of a reconfigurated calculational model of FCA Assembly VIII-2 adapted to hex-z geometry



(8)	(6)	(4)	(2)	(4)	(10)	(6)	(8)
(7)	(5)	(3)	(1)	(3)	(9)	(5)	(7)
(8)	(6)	(4)	(2)	(4)	(10)	(6)	(8)

15.24cm
20.32cm
15.24cm
15.24cm
15.24cm
15.24cm
15.24cm
15.24cm
20.32cm
15.24cm

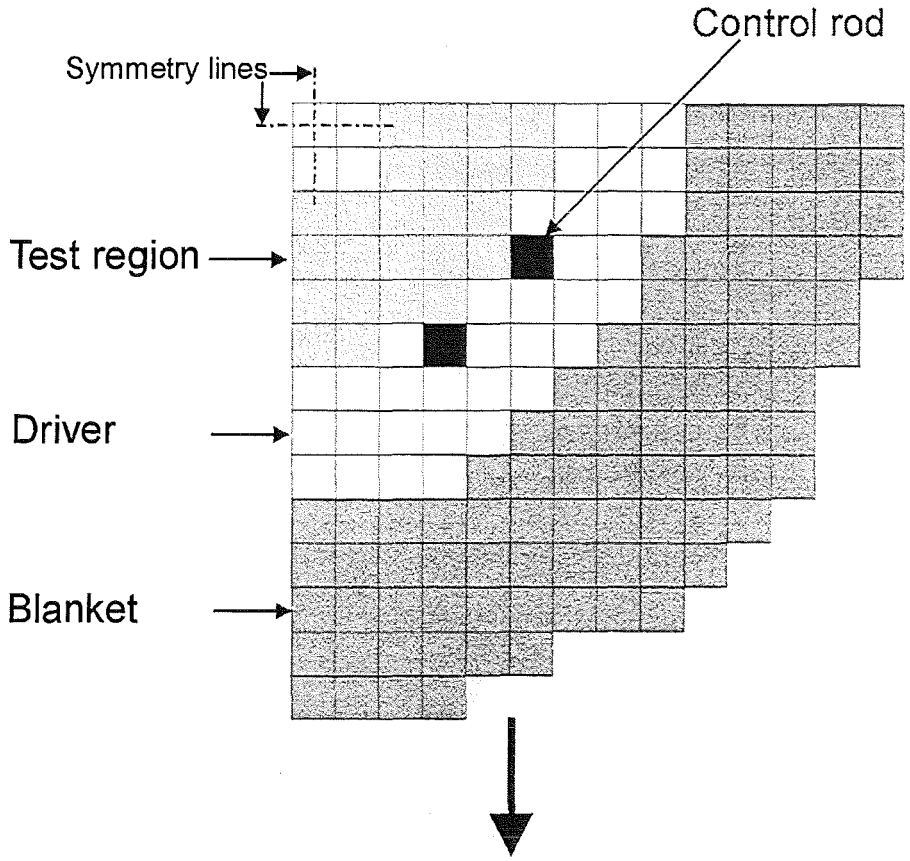
10 nodes along Z-axis

Whole assemblies are divided into 10 regions (Region 1 ~ 10).

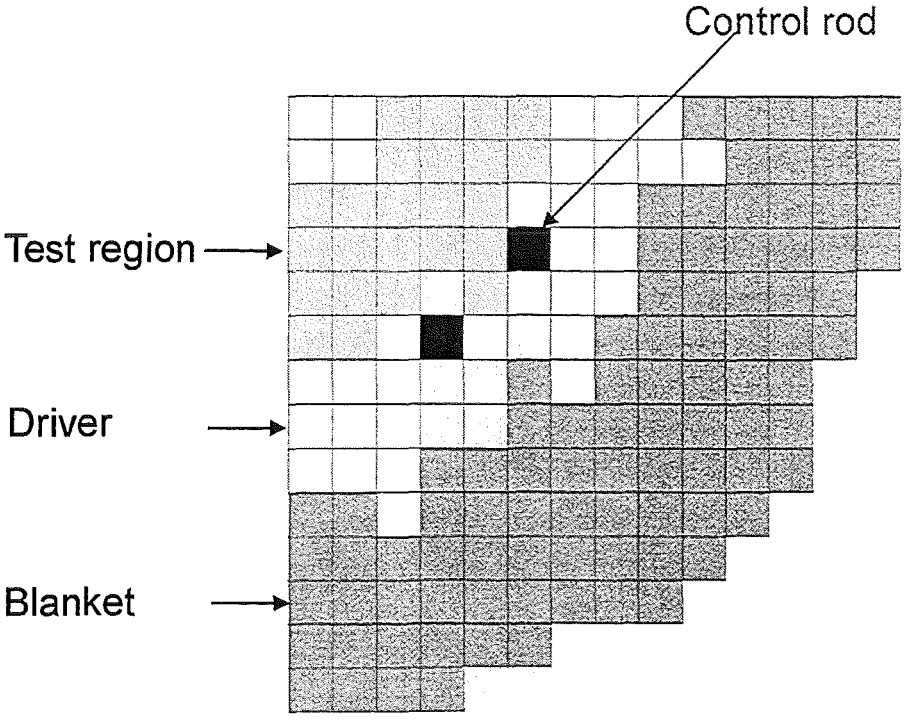
Region 1 : Test region core 1	Region 5 : Driver region core	Region 9 : Contol Rod
Region 2 : Test region UAB/LAB 1	Region 6 : Na. U Blanket 1	Region 10 : Na. U Blanket 2
Region 3 : Test region core 2	Region 7 : Radial Blanket 1	
Region 4 : Test region UAB/LAB 2	Region 8 : Radial Blanket 2	

Fig. 2 Quarter Section of FCA Assembly VIII-2; nominal and intentionally modified geometry

The original geometry



An example of the modified geometry



32.23.04 Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR

(H. Plitz, PSF)

FZK is participating in the CAPRA programme (Consommation Accrue de Plutonium dans les Rapides), which is mainly conducted by CEA (France). The first objective of the CAPRA programme is to evaluate the performance of a fast neutron reactor core which is dedicated to burn as much plutonium as possible and to burn or transmute long-living actinides. An enrichment of up to 45 % plutonium is chosen to remain compatible with current fuel cycle technology (dry route fabrication and Purex process). To implement a mixed oxide fuel pin with a maximum Pu-enrichment of 45 % means that the fraction of fuel in a given volume (fuel pin) has to be reduced, i.e. it requires a low smeared density in the fuel pin. This concept, called diluted concept, requires small diameter fuel pins with hollow pellets, in order to get a low fuel smeared density. But there are concerns whether the high plutonium content and the high surface fission rate, respective, is compatible with the stainless steel clad materials, whether there are plutonium migration effects with burnup, and whether such fuel columns with a large central hole (annular pellets with O.D. of 5,4 mm, I.D. of 2,5 mm) are mechanical stable. Although the advantages of the large hole of the CAPRA pellets with regard to temperature are evident (lowering the maximum fuel temperature), on the other hand, there is some concern as to the preservation of fuel stack integrity at the beginning of life: Fuel cracking increases the risk of fragments falling into the central hole of the stack.

In order to demonstrate the good performance of such a CAPRA mixed oxide fuel pin an irradiation programme has been launched already in 1994. After termination of a very first test irradiation with one IFOP fuel pin in the SILOE reactor at Grenoble (45 % Pu, 1.1 % burnup, 460 W/cm, 230 m fuel length, pellet O.D. = 5,42 mm, I.D. = 2.5 mm), which showed the general good behaviour of this CAPRA-type experimental fuel pin, the irradiation experiment TRABANT 1 was performed in the HFR. The High Flux Reactor (HFR) at Petten (NL) was chosen to perform an experimental irradiation programme within specially designed irradiation devices called TRABANT

(Transmutation And Burning of Actinides iN TRIOX) which can contain 3 fuel pins which are independently cooled.

The main objectives of TRABANT 1 were to demonstrate the performance of high plutonium content fuel up to 10 % burnup in respect to clad corrosion attack, thermal behaviour and mechanical behaviour of the hollow pellet columns under several startup and shutdown periods imposed by the HFR reactor cycles. In cooperation with the Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), Forschungszentrum Karlsruhe and the Institute for Transuranium Elements (ITU), the TRABANT 1 fuel pins have been designed, specified and manufactured [1]:

Pin 1, a CAPRA reference high-plutonium-content (45 % Pu) oxide fuel pin manufactured by CEA

Pin 2, another reference oxide fuel pin with 40 % Pu content plus 5 % Np, manufactured by ITU

Pin 3, a Pu without U oxide fuel pin with $(Pu_{0.44},Ce_{0.56})O_2$ pellets, containing two tightly separated short fuel columns of different O/M ratios and densities, manufactured by ITU.

As the pins 2 and 3 were available rather late, the pin 1 began irradiation separately in May 1995 up to 4.1 at% b.u., when a mandatory neutron radiograph revealed no abnormal behaviour. The irradiation then continued with the two other fresh pins (2 and 3), with higher linear powers than planned for pin 1 (up to 20 % more) and to a lesser extend for pin 3, until pin 1 reached 9,5 at% b.u. and pin 2 about 4.5 at% b.u. The mandatory neutron radiograph inspection showed a failure of pin 1, fuel melting of pin 3, and nothing abnormal for pin 2. Perturbations of the sodium temperatures above the top of the fuel column indicated that the failure of pin 1 probably occurred before or at 7 at% b.u. The pins 1 and 3 were discharged from the reactor at 9.5 at% and 4.6 at%, respectively. The pin 2 continued up to 9.3 at% b.u. and was interrupted once to perform a neutron radiograph at about 7 at% b.u.

Th pin failure of the CAPRA-type pin 1 was clearly to be seen in the neutrographs. Also the upper fuel column of fuel pin 3 was showing fuel melting, but no clad failure did occur. For pin 3, the cause of fuel melting is clearly due to the poor conductivity of

the $(Ce,Pu)O_2$ fuel with low density and low O/M radio submitted to higher operating powers [2].

According to the sodium temperature registration, the failure of pin 1 occurred at about 7 at% b.u., in the beginning of the reactor cycle 7. Just before reactor cycle 7, the 3-pin cluster TRABANT was turned in such a way that pin 1 attained by chance a power ramp up to 660 W/cm, which might be the cause for a clad failure occurring in this cycle, but without being detected. The pin therefore continued to run with a clad failure during3 more cycles (60 days), causing conditions still more severe (fuel/ sodium reaction leading to lower fuel conductivity, fission gas release in sodium, etc.) Results of post-test examinations (neutrographs, gammascans, macrographs of ceramographics) indicate that a massive sodium/MOX reaction did occur and was obviously maintained for another 3 irradiation cycles with 3 shutoffs and startups. Due to the axial fuel relocations and due to the massive thermal isolation of the reaction product uranate-plutonate (thermal conductivity only 10 % of MOX) even clad melting occurred.

From the neutrographs, from the non-destructived post test gammametries and from the findings of destructive examinations in hot labs (ceramographs, microprobings) of the failed fuel pin 1/1 it can be stated:

- the plutonium content of originally 45 % did vary after the irradiation from 25 w% up to 60 w%, this means that strong plutonium migration effects due to evporation/condensation occurred;
- clad wall thickness was reduced by 100 microns, due to chemical attack;
- a large zone of interaction is visible between fuel/sodium/cladding in the failure affected region, the original central hole in the fuel columns is filled by condensed material.

Further microscopic investigations will furtheron clarify the fuel pin behaviour.

The destructive examinations of the intact fuel pin 1/2 revealed clad attack up to 100 microns, the analytical work continues at the hot lab at Cadarache.

The post test examination of the pin 1/3 is not foreseen due to problems to use the available hot lab capacities at ITU and CEA.

The TRABANT irradiation series will continue with TRABANT 2. The irradiation vehicle was ordered already in 1998, but the manufacturing of the 3 test fuel pins was rather delayed. The 3 CAPRA type pins, all with annular pellets, were manufactured at ITU, using both mechanical mixing (MM) of powders and the SOL-GEL method. The main data are given in Table I.

Table I: Fuels prepared for the TRABANT2 irradiation experiment

Pin No.	Fuel	Fabrication Process	Pu content Pu / (U+Pu)	O/M	Density (% dt)
2/1	$(U,Pu)O_2$	MM	0.40	1.971	94.18
2/2	$(U,Pu)O_2$	MM	0.40	1.995	93.40
2/3	$(U,Pu)O_2$	SOL-GEL	0.45	1.990	86.36

The transport of these fuel pins was also delayed due to formalities and non-availability of transport containers.

Considering the low sintered density of the pin 2/3 a special irradiation campaign in the irradiation of the 3 pin-capsule is proposed. the irradiation will start in June 2000.

References

[1] J.F. Gueugnon, K. Richter, G. Mühling, H. Plitz
Design and Fabrication of Fuel Pins for the HFR Experiment TRABANT
Global '95, Sep. 11-14, 1995, Palais des Congrès, Versailles, France, Proc.

[2] E. Picard, H. Noirot, H. Plitz
High Plutonium Content Oxide Fuel for Pu Burning in Fast Reactors. CAPRA Irradiation Programme and First In-pile Experimental Results.
Global '97, Oct. 5-10, 1997, Yokohama, Japan, Proc. Vol. 1, 528-536.

32.23.05 Untersuchungen zu Beschleuniger getriebenen, unterkritischen Anlagenanordnungen (ADS)

I. Thermalhydraulic Investigations on Accelerator Driven Systems (ADS)

(J.U. Knebel, H.Y. Chen, X. Cheng, G. Janssens-Maenhout, K.J. Mack, H.J. Neitzel, He. Schmidt, IKET)

ABSTRACT

At the Forschungszentrum Karlsruhe the characteristics of an accelerator-driven systems (ADS) are critically evaluated, mainly with respect to the potential of transmutation of minor actinides and long-lived fission products, to the feasibility and to safety aspects.

One main component of an ADS is the spallation target, which mainly consists of a beam window separating the evacuated proton beam pipe from the heavy liquid metal spallation area. The beam window is exposed to a high radiation and thermal field. Thus, cooling of the beam window is considered as one of the most critical issues in designing a spallation target.

In spite of many proposals worldwide for liquid metal target designs, most work on beam window cooling remains in the stage of theoretical investigations. To go the first step into the practice, two liquid lead-bismuth targets of 1 MW beam power are designed and fabricated within two different projects: ISTC 559 at the Institute of Physics and Power Engineering (IPPE) Russia, and MEGAPIE at the Paul Scherrer Institute (PSI) Switzerland. This 1999 progress report, describes:

- Experimental results achieved at the HYTAS test facility for the ISTC 559 project,
- A design study of the Karlsruhe 4 MW spallation target K4T which can be implemented in the FZK Three-Beam Concept,
- The outline of the MEGAPIE Initiative the objective of which is to run a 1 MW liquid metal target in 2004 in the SINQ Accelerator Facility at PSI,
- The objectives of the European Benchmark Working Group and a typical numerical result on the cooling of an ADS relevant beam window.

1. INTRODUCTION

An accelerator-driven system (ADS) consists of three main parts (figure 1): an accelerator for primary particles (protons), a target in which the protons produce free nucleons (neutrons) in a spallation reaction (external neutron source), and a subcritical blanket in which the fission reaction takes place, producing fission neutrons (internal neutron source) and thermal energy. The protons are injected into the target through a vacuum beam pipe, the beam pipe being closed by a window at the end. The target is a heavy liquid metal (e.g. lead Pb or eutectic lead bismuth alloy Pb-Bi). The spallation neutrons produced in the target are completely independent of the subcritical blanket. A shut-down of the accelerator or an interruption of the proton beam immediately stops the fission reaction. Due to the subcriticality of the system advantages to safety are expected [1-2].

The main advantage of an ADS is its potential to transmute minor actinides and long-lived fission products, thus participating in closing the fuel cycle [3-6]. An ADS provides a powerful proton beam which produces a high number of neutrons, due to the spallation reaction in the heavy metal target. These neutrons are a good requirement for a transmutation machine.

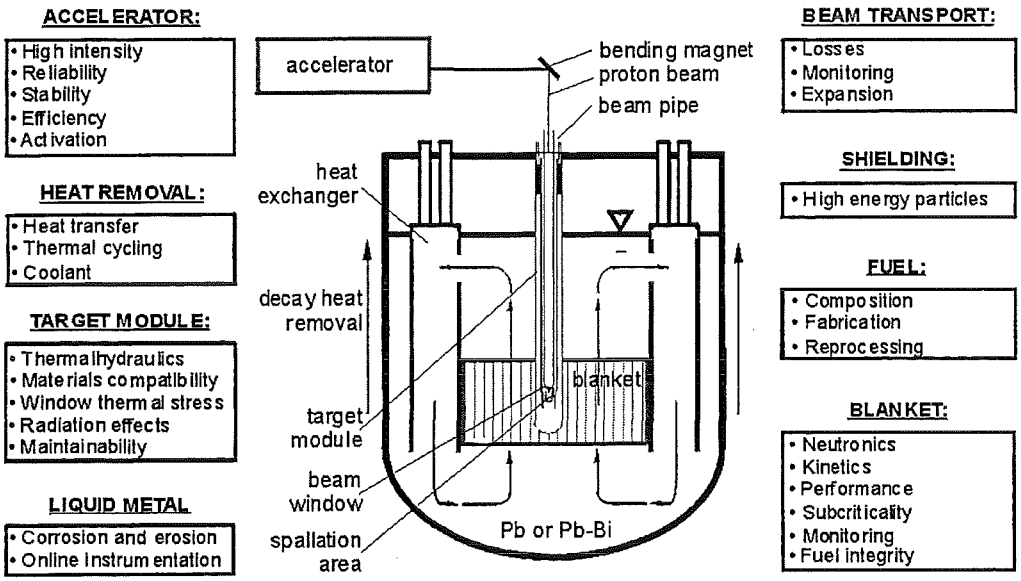


Figure 1: Sketch of an accelerator-driven subcritical system (ADS) with main research areas.

Such a new reactor system involves the development of new technologies, e.g. a new reactor design using the heavy liquid metal Pb-Bi as spallation material and coolant, an improved accelerator technology to drive the system, new fuel, new fuel fabrication and fuel reprocessing systems, new waste management arrangements [7]. The main open research areas are mentioned in figure 1.

2. PILOT SPALLATION TARGET OF THE ISTC 559 PROJECT

2.1 Test Facility HYTAS at IKET

A detailed description of the 1 MW pilot spallation target is given in previous publications [6, 8]. The spallation material and the coolant are liquid lead-bismuth eutectic. Different designs of the spallation area where most of the heat is deposited have been proposed. Based on a systematic numerical analysis, Forschungszentrum Karlsruhe has made a design proposal, shown in figure 2. The target has a semi-spherical beam window surface, the diameter being 110 mm. The spallation area consists of two coaxial cylinders with inner diameters of 130 mm and 185 mm, respectively. The coolant flows into the annular gap of the outer cylinder, is bended at the top, cools down the window surface and exits the spallation area via the central cylinder. To reduce the flow stagnation zone near the window center, a perforated plate made of steel with distributed holes is installed downstream of the beam window. In this way, coolant flow and heat transfer near the window center will be enhanced significantly. The distribution of the holes has to be optimized based on experimental and numerical studies. The coolant, liquid lead-bismuth, cools down the beam window and removes the heat deposited in the active part of the target. The temperature of the liquid metal coolant is 220°C when entering the active part of the target. The design value of the flow rate is 15 m^3/h. In order to keep the coolant temperature as low as possible before it reaches the beam window, the coolant should enter into the spallation area through the inner channel (opposite flow direction as for figure 2).

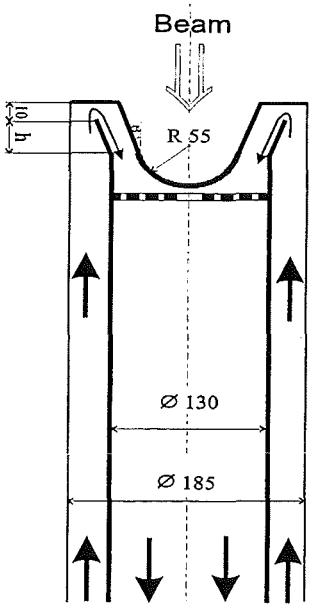


Figure 2: Target geometry proposed by IKET for the ISTC559 Project.

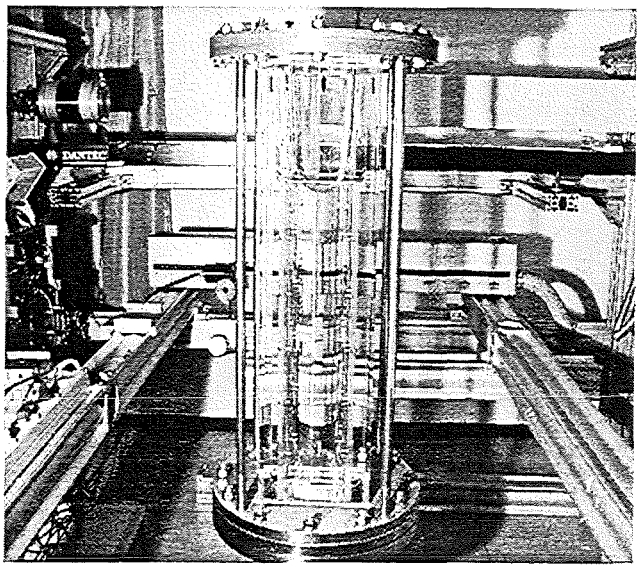


Figure 3: Test facility HYTAS at IKET.

2.2 Experimental Investigations

Experiments have been performed at the HYTAS test facility using water as the working fluid. The loop is operated under an atmospheric pressure and is capable of circulating a maximun volume flow rate of 100 m^3/h. The test section, shown in figure 3, is geometrically similar to the proposed target geometry. In the first phase, tests were performed without perferated plate. Two different flow directions, i.e. either flowing upwards or downwards through the inner channel, has been realized to study the effect of flow direction on the flow behaviour. The local velocity and velocity fluctuation of the fluid were measured with a 2-D Laser-Doppler Anemometer (LDA). Moreover, the flow field has been visualized by using the laser light sheet technique.

Figure 4 shows the flow pattern around the beam window for water flowing upwards through the central channel. The water diverges in the vicinity of the beam window, and is carried to the two sides. Flow stagnation is observed at the central surface of the beam window (stagnation point). Figure 5 shows the flow pattern around the beam window for water flowing downwards through the central channel.

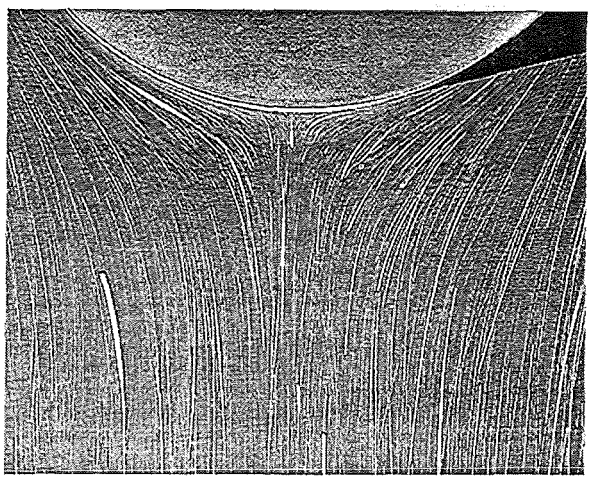


Figure 4: Flow pattern for upward flow without perforated plate.

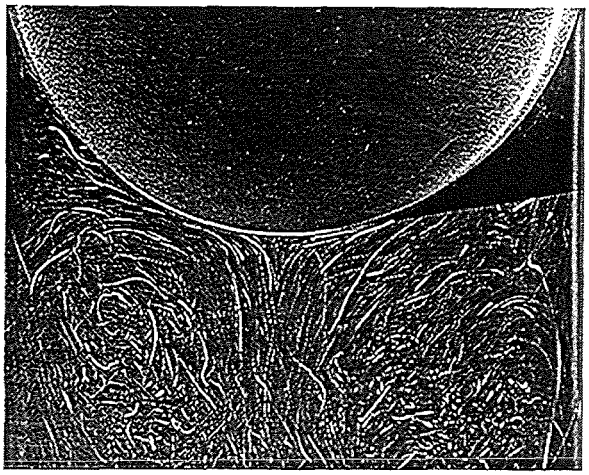


Figure 5: Flow pattern for downward flow without perforated plate.

The fluid flows nearly vertically downwards along the wall after entering the central channel from the top. As expected, flow detachment from the beam window surface is observed. Downstream of the beam window two symmetrical large vortices are formed: Some amount of water reverses its direction and flows upwards in the central region of the channel. It is well known that flow stagnation as well as flow recirculation near the window results in a reduction of the window cooling efficiency. Additional measures, e.g. by introducing a perforated plate, have to be taken in order to reduce the flow stagnation and the recirculation zones.

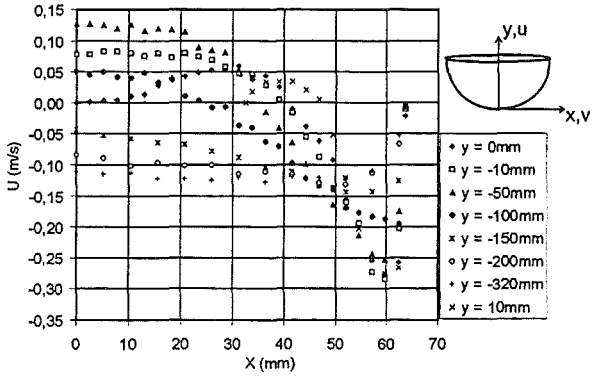


Figure 6a: Velocity profiles with downward flow, no perforated plate.

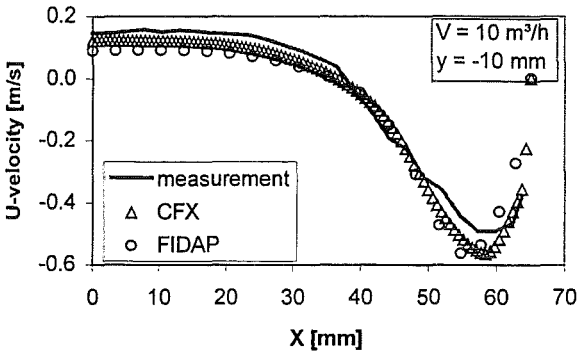


Figure 6b: Comparison between calculation and experiment.

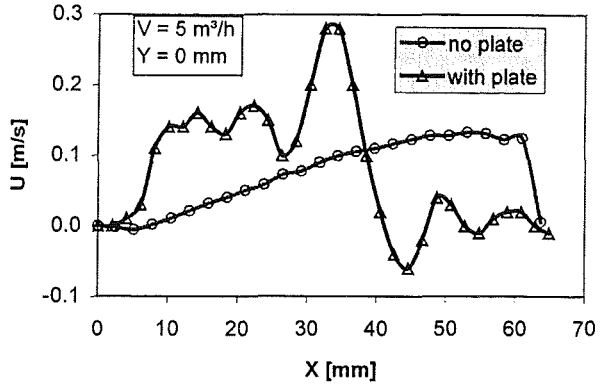


Figure 7: Velocity profile for upward flow with and without perforated plate.

Figure 6a shows typical radial velocity profiles at different elevations (y-values) for downward flow. The origin of the coordinate is the middle point on the window surface. X and y are the coordinates from the origin to the channel wall and to the upward direction, respectively. The axial velocity *u* is positive, if the fluid flows upwards. As is expected, the plotted data show two distinct flow regions below the beam window: the downward flow close to the wall and the upward flow in the central region of the channel. A high velocity downward flow can be seen at $x \approx 60$ mm. The fluid flowing in the central region changes sign from upward to downward at a certain distance downstream of the window. At y = 10 mm, the velocity is positive near the surface of the window: this indicates the separation of the boundary layer. In figure 6b, the velocity measurement at y = -10 mm is compared with CFD calculations using the numerical codes CFX and Fidap. In general, a good agreement between the experiment and the calculation is observed.

Figure 7 demonstrates the influence of a perforated plate for upward flow. The plate is installed in 14 mm distance from the stagnation point. The flow resistance of the plate forces the flow towards the centre, thus increasing the flow rate on the axis and the cooling of the beam window.

2.3 Conclusions

At the HYTAS test facility the flow behaviour in a spallation target has been investigated. Laser measurement techniques have been used to visualize the flow and to measure the velocity field. The main conclusions are:

- The HYTAS test loop is well equipped and suitable for investigating the hydraulic behaviour of spallation target systems.
- A zone of flow stagnation, flow recirculation and separation of the boundary layer near the beam window has been observed in the ISTC 559 pilot target for the case without perforated plate. A perforated plate significantly can increase the cooling characteristics.

3. KARLSRUHE 4 MW SPALLATION TARGET K4T

The objective of the Karlsruhe 4 MW Spallation Target work is to design an integral experiment on the steady-state and transient thermal-hydraulic behaviour of a spallation target to be performed in the KArlsruhe Lead LAboratory KALLA as a consequent continuation of the HGF Strategy Fund Project 99/16, 32.23.06.

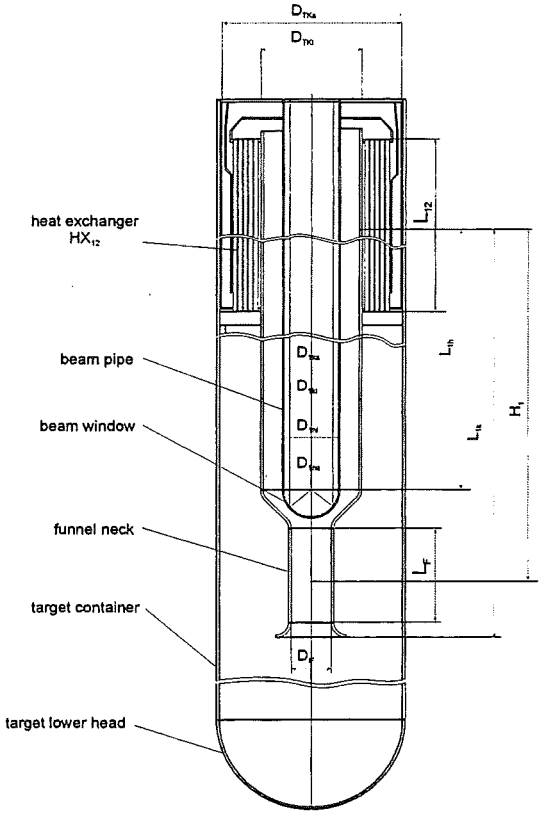


Figure 8: Sketch of the Karlsruhe 4 MW Spallation Target K4T.

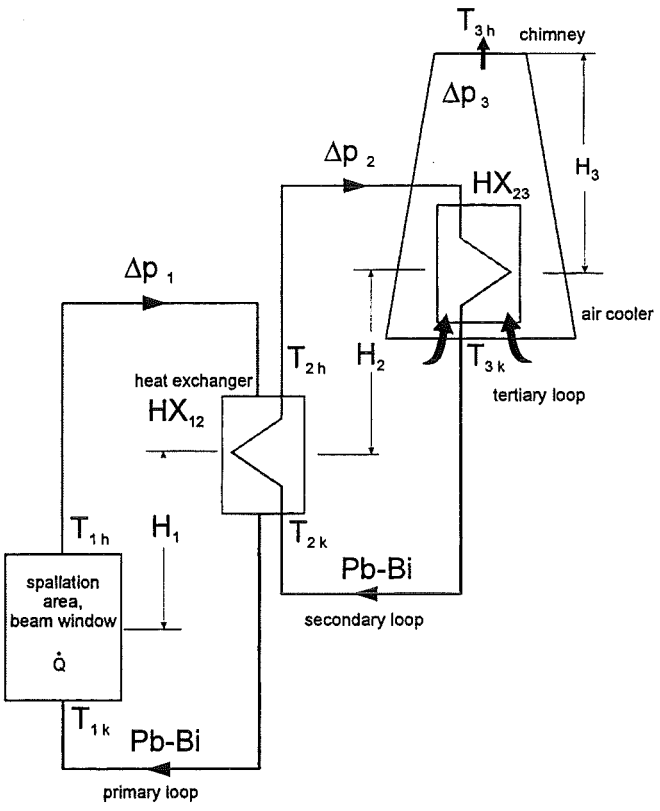


Figure 9: Heat removal chain.

The emphasis of this study is on the characteristics of the complete heat removal chain from the spallation area to the environment under normal operation and decay heat removal conditions. The experimental results can be used for physical model and numerical code validation.

The design is applicable to the FZK Three-Beam Concept described in [9].

Figure 8 gives a sketch of the Karlsruhe 4 MW Spallation Target K4T, the heat removal chain is given in figure 9. Based on preliminary assumptions on the geometrical design and the overall dimensions, the main results for a spallation heat of 4 MW are summarized in table 1. A detailed description is given in [10].

Table 1: Main results for the design of the Karlsruhe 4 MW Spallation Target.

	Primary loop	Secondary loop	Tertiary loop
Power	$\dot{Q} = 4\ MW$		
Fluid	Pb-Bi	Pb-Bi	Air
Temperature hot leg / cold leg	$T_{1h} = 500°C$ $T_{1k} = 350°C$	$T_{2k} = 200°C$ $T_{2h} = 350°C$	$T_{3h} = 150°C$ $T_{3k} = 30°C$
Mass flux	$\dot{m}_1 = 181\ kg/s$	$\dot{m}_2 = 181\ kg/s$	$\dot{m}_3 = 33\ kg/s$
Pressure drop	$\Delta p_1 = 9130\ Pa$	$\Delta p_2 = 19300\ Pa$	$\Delta p_3 = 13\ Pa$
Driving height	$H_1 = 5.17\ m$	$H_2 = 10.36\ m$	$H_3 = 4.05\ m$

The main result of this study is a technically feasible design which can be investigated in KALLA, considering a geometrical scaling of the whole system of 1:1 and a power scaling of 1:1 as well. The spallation heat will be simulated by high performance heater rods with a helically shaped inconel heating wire, producing a maximum linear heat flux rating of 360 W/cm.

From the calculated pressure drops and required driving natural circulation heights it can be concluded that a natural circulation heat removal from a closed spallation module of 4 MW beam power is feasible.

4. MEGAPIE INITIATIVE

MEGAPIE (MEGAwatt PIlot Experiment) is a collaborative initiative of PSI Switzerland, CEA France and the Forschungszentrum Karlsruhe as founding members and CNRS France, ENEA Italy, JAERI Japan and SCK-CEN Belgium as additional members. The final goal of the MEGAPIE initiative is to design, build, operate, examine and decommission an exploratory liquid lead-bismuth spallation target for 1MW of beam power, taking advantage of the existing spallation neutron facility SINQ at PSI, [11], cf. Figure 10. The project has been running since May 1999, right now it is at the end of the feasibility study phase.

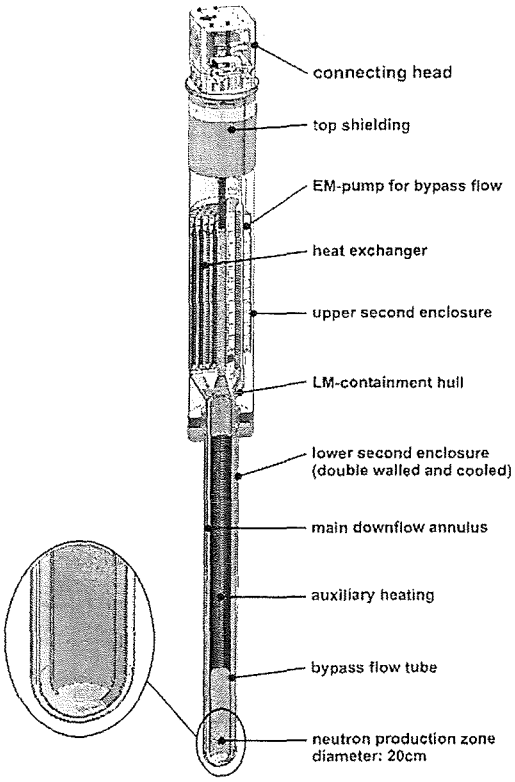


Figure 10: Sketch of the 1 MW exploratory liquid lead-bismuth spallation target MEGAPIE.

The major objectives are:

- A full feasibility demonstration of a spallation target system,
- The description of radiation and damage effects of structures and window in a realistic spallation spectrum,
- The effectiveness of the window cooling under realistic conditions,
- Liquid metal / metal interactions under radiation and stress,
- The MEGAPIE spallation target is to be operated in 2004.

MEGAPIE is a milestone on the way to demonstrate the feasibility of coupling a high power accelerator, a spallation target and a subcritical blanket for future use in an ADS. MEGAPIE is an extensively instrumented liquid metal spallation target under realistic operating conditions, providing data for benchmarking neutronic and thermalhydraulic computer codes. In addition, it allows experience to be gained in the safe handling and decommissioning of irradiated components which have been in contact with lead-bismuth.

5. EUROPEAN BENCHMARK WORKING GROUP

The European Benchmark Working Group consists of 17 European partners from research institutions and industry. The overall objective is to develop and validate commercial and research computer codes that can simulate ADS relevant thermal-hydraulic phenomena. Up to now work has been performed in the following fields:

- Definition of areas to investigate (turbulence, heat exchange, wall functions, free surface, two-phase flow) and development of adequate physical models,
- Definition of experimental proofs needed from specific designs and codes,
- Setup of a common physical and thermodynamic data bank for lead-bismuth,
- Definition of existing and required fluiddynamic experiments for benchmark calculations and code validation.

The used computer codes are CFX, StarCD, Fidap, Fluent, Flutan, TrioU.
First computational results on the isothermal flow around a beam window similar to the geometry given in figure 8 are achieved for the scaled water experiment COULI at CEA Grenoble. A typical result for the flow field calculated with CFX is given in figure 11.

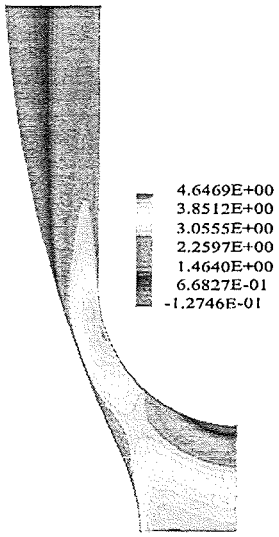


Figure 11: Typical flow field around the COULI beam window, similar to the design given in figure 8.

6. MAIN PROGRESS

This 1999 progress report gives an overview of the work performed at Institut für Kern- und Energietechnik (IKET) that is related to an Accelerator Driven System (ADS), especially focussing on

- Spallation target design work:
  Simulation experiments in HYTAS and CFD numerical calculations for the ISTC 559 Project,
- FZK Three-Beam Concept:
  Design of the Karlsruhe 4 MW spallation target K4T,
- MEGAPIE Initiative:
  Participation in the European initiative to design, build, operate, examine and decommission an exploratory liquid lead-bismuth spallation target for 1 MW of beam power,
- European Benchmark Working Group:
  Development and validation of CFD codes for ADS applications.

The work related to the KArlsruhe Lead LAboratory KALLA which is designed for technological, thermal-hydraulic and corrosion investigations, is described within the HGF Strategy Fund Project in chapter 32.23.06.

7. FUTURE ACTIVITIES

- Participation in the international ADS design development of a lead or lead-bismuth cooled pool-type system;
- Qualitative and quantitative water experiments (2D and 3D geometry) to investigate the hydraulic and thermal-hydraulic behaviour of a beam window related to, first, the ISTC 559 Project and, second, the MEGAPIE Initiative;
- Numerical simulation of the experiments above using CFD-codes, such as CFX, participation in European CFD benchmarks within the European Benchmark Working Group;
- Detailed design of the Karlsruhe 4 MW Spallation Target K4T for future experimental investigations in KALLA, and implementation of K4T in the FZK Three-Beam Concept;
- Participation in the detailed design of the Pb-Bi Pilot Target MEGAPIE, e.g. by performing experiments on the beam window in KALLA and accompanying validation CFD calculations.

REFERENCES

[1] H. Wider, Safety of acclerator-driven nuclear waste burners, Proc. of the Jahrestagung Kerntechnik'98, München, pp.217-220, (1998)

[2] W. Maschek, D. Thiem, G. Heusener, Safety assessment of a reactor core dedicated to burn minor actinides, Proc. of the Jahrestagung Kerntechnik'99, Karlsruhe, pp.635-638, (1999)

[3] G. Heusener, M. Salvatores, Use of heavy liquid metal: A perspective for critical/subcritical fast neutron concepts, HLMC'98, 5-9 October, Obninsk, Russia, (1998)

[4] 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, CERN/AT/93-47 (ET), November 1, (1993)

[5] C. Rubbia, Rubio, J.A., Buono, S., Carminati, F., Fiétier, F., Galvez, J., Gelès, C., Kadi, Y., Klapisch, R., Mandrillon, P., Revol, J.P., Roche, Ch., Conceptual design of a fast neutron operated high power energy emplifier, CERN/AT/95-44(ET), September (1995)

[6] T. Takizuka, et al., Heavy liquid-metal cooling option of JAERI accelerator-driven transmutation systems, HLMC'98, October 5-9, Obninsk, Russia, (1998)

[7] 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)

[8] Cheng, X., Knebel, J.U., Hofmann, F., Thermalhydraulic Design of an ADS with Three Spallation Targets, Proc. of the ADTTA'99 Conference, Prague, (1999)

[9] Knebel, J.U., Cheng, X., Janssens-Maenhout, G., Mack, K.J., Neitzel, H.J., Untersuchungen zu Beschleuniger getriebenen Anordnungen, Kapitel 32.23.05, in: Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, pp. 625 – 643, (1999)

[10] Neitzel, H.J., Knebel, J.U., Überlegungen zur Konzeption und zur Auslegung eines geschlossenen 4 MW-Targetmoduls mit Wärmeabfuhrsystem für eine ADS-Anordnung, Forschungszentrum Karlsruhe, Interner Bericht IKET 5/00 und PSF 3339, (2000)

[11] Salvatores, M., Bauer, G., Heusener, G., The MEGAPIE Initiative – Executive Outline and Status as per November 1999, Paul Scherrer Institut, (1999)

II. Untersuchungen an Hüll- und Strukturwerkstoffen für den Einsatz in ADS

(R. Hübner, K. Ehrlich, IMF I)

Abstract

The investigation of highly irradiated (≤ 107 dpa) pressurised tubes of a ferritic-martensitic 12% CrMoVNb (DIN 1.4914) steel revealed negligible swelling in the temperature range from 420-600°C and irradiation creep or thermal creep, dependent upon irradiation temperature and stress level. Strength generally decreases for given irradiation conditions which can be explained by irradiation recovery - in accordance with previous low-dose results. New activities regarding characterisation of radiation damage and He-embrittlement in f/m steels in ADS typical irradiation environment are in preparation.

Zusammenfassung

Das Schwell- und Kriechverhalten eines 12% CrMoVNb Stahls (DIN 1.4914) wurde im Temperaturbereich von 420-600°C und Dosen bis zu 107 dpa bestimmt. Schwellen ist vernachlässigbar. Bestrahlungsinduzierte Durchmesseraufwertung erfolgt überwiegend über SIPA-Kriechen, bei hohen Spannungen/Temperaturen über thermisches Kriechen. In Ringversuchen wurde generell eine Festigkeitsminderung im Bereich von 150-200 MPa festgestellt, die auf bestrahlungsbedingte Erholungsvorgänge zurückzuführen ist. In Vorbereitung sind Arbeiten zur Charakterisierung der Strahlenschädigung für ADS typische Bedingungen zur He-Versprödung und der Zeitstandfestigkeit in Kontakt mit flüssigem Pb-Bi.

1. Einleitung

In beschleunigergebtriebenen unterkritischen Anordnungen (ADS) werden die Hüllmaterialien von Brennelementen durch Neutronenbestrahlung ähnlich stark belastet wie in Schnellen Brutreaktoren. Deshalb sind Informationen zum Bestrahlungsverhalten des ferritisch-martensitischen Stahls 1.4914, der als potentielles Hüllmaterial von Brennstäben in Frage kommt und im Bestrahlungsexperiment PFR-M2 hohen Neutronendosen ausgesetzt worden war, von großem Interesse.

2. Ergebnisse

Im Bestrahlungsexperiment PFR-M2 wurden drucklose und z.T. druckbeaufschlagte Rohrproben des ferritisch-martensitischen 12% CrMoVNb-Stahls 1.4914 bei 420, 500 und 600°C mit Dosen bis zu 106,81 bzw. 57 dpa bestrahlt und der Verlauf der Durchmesseraufweitungen durch punktuelle Zwischenvermessungen bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abb. 1a-c dargestellt. Bei allen drei Temperaturen ist das aus den drucklosen Proben bestimmte Schwellen vernachlässigbar, die Durchmesseraufweitung also durch bestrahlungsinduziertes Kriechen hervorgerufen. Die Proben bei 420°C Bestrahlung zeigen als Besonderheit keinen gemeinsamen Nullpunkt, was auf Materialabtrag durch die angewendete Reinigungsprozedur während der Zwischenvermessungen zurückzuführen ist. Anhand der protokollierten Probenmassen und der gemessenen Dichte konnten jedoch die Probenaufweitungen für die Hochdosisproben gut reproduziert werden. Während bei 420°C die Durchmesseraufwertung linear mit Dosis und Spannung zunimmt, ist bei 500°C bei der höchsten Spannung (120 MPa) ein deutlich beschleunigtes Kriechen und bei 600°C bei den Proben mit den hohen Spannungen (60 + 120 MPa) ein Druckverlust nach Erreichen von mehr als 2-3% Dehnung zu beobachten.

Die Festigkeit der Proben nach Erreichen der Höchstdosis wurde mittels sog. Ringzugversuche ermittelt und mit den Ausgangsdaten der Festigkeit über den gesamten Temperaturbereich in Abb. 2 verglichen. Es ergibt sich eine gleichförmige Festigkeitsreduktion von 150-200 MPa. Insbesondere ist kein Einfluss der Spannung und damit der Kriechdehnung auf die Festigkeit festzustellen.

3. Planung zukünftiger Aktivitäten

Das IMF I hat sich an der Ausarbeitung eines EU-Proposals "Spire" Spallation und Irradiation Effects beteiligt und Untersuchungen zur Charakterisierung der Strahlenschädigung ferritischer Stähle unter den komplexen Bestrahlungsbedingungen von hochenergetischen Spallationsneutronen und Protonen vorgeschlagen. Der Vorschlag ist genehmigt worden. Außerdem ist ein Experiment mit bordotierten ferritisch-martensitischen Stählen in Vorbereitung, welches es gestattet, den Einfluss des Heliums auf Versprödungsphänomene unter ADS-Bedingungen zu studieren. Kriechuntersuchungen an ADS-Legierungen zur Bestimmung des Korrosionseinflusses in flüssigem Pb-Bi sollen ebenfalls aufgenommen werden.

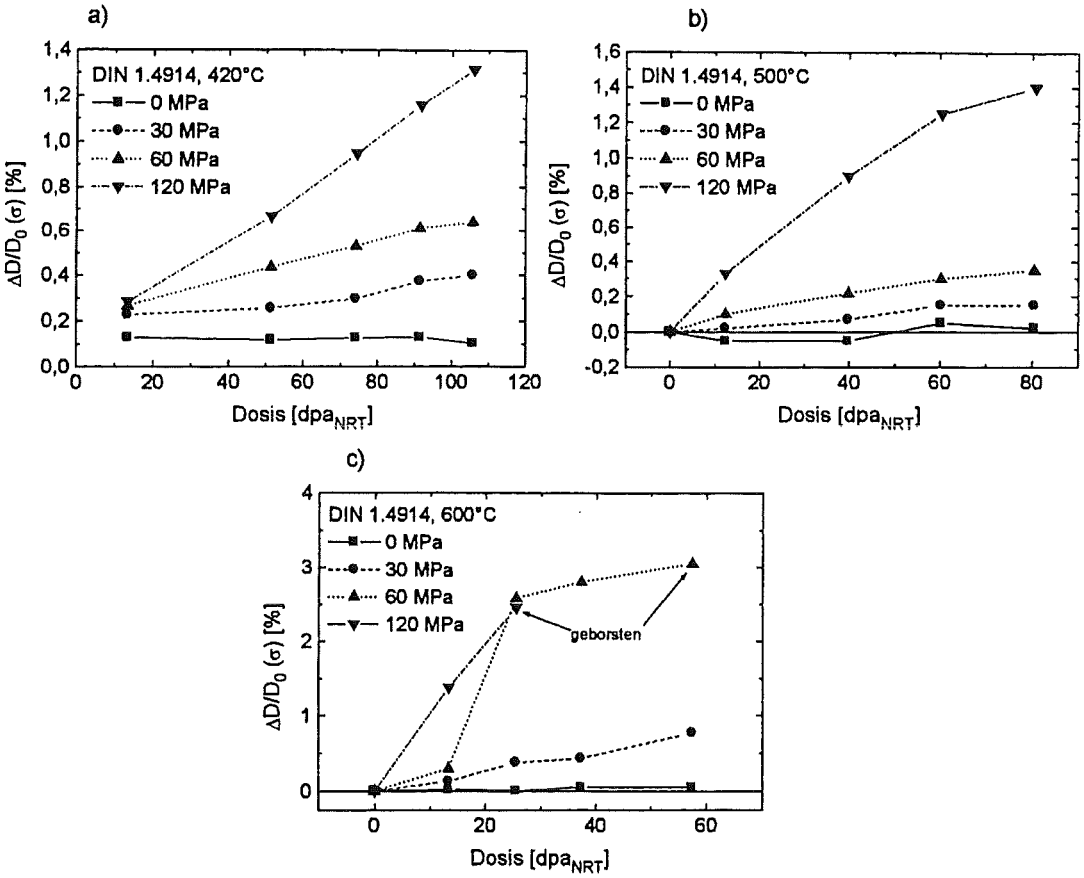


Abbildung 1: Dosisabhängigkeit der Durchmesseränderung des DIN 1.4914.
a) 420°C, b) 500°C, c) 600°C.

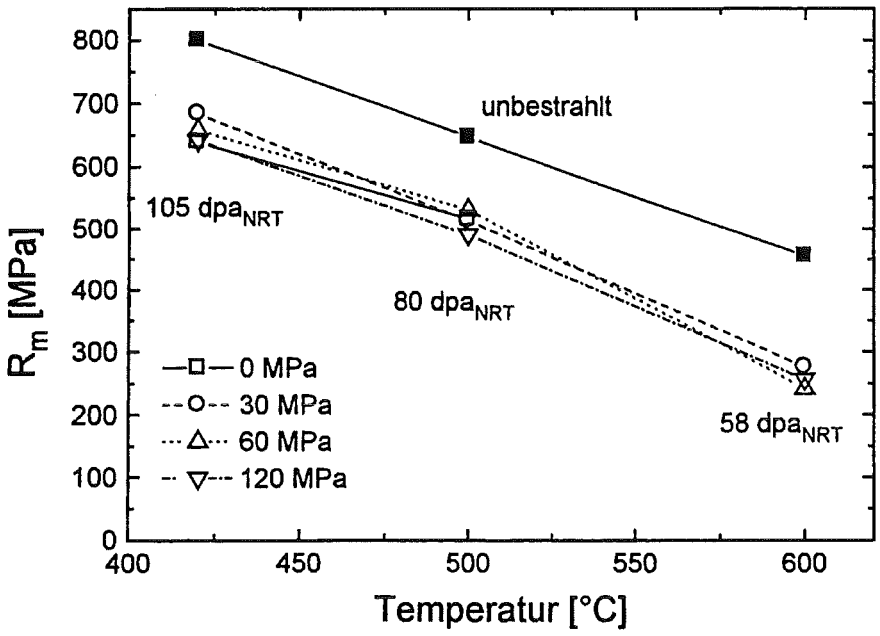


Abbildung 2: Zugfestigkeit R_m als Funktion der Bestrahlungs- bzw. Prüftemperatur

III. Liquid metal corrosion

(J. Konys, H. Glasbrenner, IMF III; G. Müller, G. Schumacher, IHM; A. Rusanov, IPPE Obninsk)

Abstract

Corrosion tests with 1.4970, 1.4948, Optifer IVc and EM10 steels have been carried out up to 3037 hours in a flow of liquid lead at temperatures of 400 and 550°C at IPPE, Obninsk. First results of specimens exposed for 1027 h are already available. The flow rate of the liquid lead was 1,9±0,1 m/s, the oxygen concentration in the range of $3\text{-}4\cdot10^{-5}$ wt.-%.

All steels formed oxide layers on the surface during the corrosion exposure. No typical liquid metal corrosion could be found. The thickness of the oxide films was higher at 550°C, compared to 400°C. The maximum thickness was obtained for the ferritic-martensitic steels Optifer IVc and EM10, whereas the minimum thickness was found for both austenitic steels 1.4970 and 1.4948. The total thickness of the oxide layers and the internal oxidation zones increased from 1.4970 over 1.4958, Optifer IVc to EM10.

Zusammenfassung

Es wurden Korrosionstests der austenitischen Stähle 1.4970 und 1.4948 sowie der ferritisch-martensitischen Stähle Optifer IVc und EM10, mit Versuchsdauern bis zu 3037 Stunden in strömendem Blei bei Temperaturen von 400 und 550°C am IPPE, Obninsk durchgeführt. Erste Ergebnisse der Nachuntersuchung nach 1027 Stunden liegen vor. Die Fleißgeschwindigkeit des Bleis betrug 1,9±0,1 m/s. Die Sauerstoffkonzentration im Blei während des Versuchs lag im Bereich von $3\text{-}4\cdot10^{-5}$ Gew.-%.

Alle Stähle zeigten nach der Auslagerung im Blei eine Oxidschichtbildung auf den Oberflächen. Die Schichten waren auf den bei 550°C ausgelagerten Stählen dicker als auf den Proben die bei 400°C eingesetzt wurden. Es wurde kein typischer Flüssigmetallkorrosionsangriff gefunden. Die dicksten Oxidschichten wurden auf den Stählen Optifer IVc und EM10 gebildet, während die beiden Austenite 1.4979 und 1.4948 die dünnsten Schichten aufwiesen. Die Gesamtdicke der Schädigungszone (äußeres Oxid + interne Oxidation) nimmt von 1.4970 und 1.4948 über Optifer IVc nach EM10 zu.

1. Introduction

Lead and lead-bismuth alloys are considered as spallation target for the so-called hybrid reactor in which long-lived actinides should be transmuted [1]. Pb and Pb-Bi have a high neutron yield and are very transparent to neutrons of energies below 1 MeV. The molten metal should be used not only as a target but also as a coolant in the reactor system. It is known, that the heavy metals Pb and Bi are much more corrosive than alkali metals [2-4]. For the development of an accelerator driven system (ADS) the corrosion problems of structural materials in the coolant must be solved. Until now there is only little or no experience in the field of corrosion except for military application in the former USSR, but unfortunately these results are unpublished. Therefore, corrosion experiments are strongly required. The tests should be performed in a corrosion loop in which the liquid metal has a flow velocity in the order of 2 m/s and temperatures up to 550 °C. Such a loop is under design at FZK (KALLA). Beforehand some corrosion experiments have been carried out in collaboration with IPPE in Obninsk, Russia. Two ferritic-martensitic and two austenitic steels in original condition and with a surface treatment by GESA were exposed to Pb in a loop at 400 °C and 550 °C resp. for 1027, 2000 and 3000 h. First results of specimens exposed for 1027 h are already available.

2. Experimental

2.1. Materials and specimen preparation

Different types of steel were selected for corrosion testing in the Pb loop: two ferritic-martensitic steels (Optifer IVc and EM10) and two austenitic steels (1.4948 and 1.4970). The two ferritic-martensitic steels were developed as low activation steels to be used as structural materials in a common fusion reactor. Optifer IVc was developed in FZK, EM10 is an Italian development. Both austenitic steels are highly resistant to elevated temperatures. Large experience exists on the steel 1.4948 which was used for tubes, pressure vessels and other structural components in sodium cooled fast breeder reactors.

The chemical composition of these steels is given in table 1.

Material	C%	Mn%	Si%	Cr%	Ni%	Mo%	W%	V%	Nb%
1.4970	0.08-0.12	1.6-2.0	0.25-0.45	14.5-15.5	15-16	1.05-1.25	--	--	--
1.4948	0.04-0.08	0-2.0	0-0.75	17-19	10-12	--	--	--	--
Optifer IVc	0.13	0.52	--	9.05	--	--	1.0	0.25	--
EM 10	0.10	0.51	0.37	8.8	0.2	1.0	--	0.03	0.01

Table 1: The chemical composition of the steels tested in Pb.

The specimens to be tested were machined in FZK before delivering to IPPE. The shape of the specimens is cylindrically (see fig. 1) with a length of about 110 mm in total and 8 mm in diameter. The original specimens were not heat treated before exposure. Other specimens were treated by GESA (Gepulste Elektonen-Strahl-Anlage) on approximately one third of the total length of the specimens. The rapid solidification after the pulse with about 10^7 K/s, results in a very fine grained structure. The GESA installation is described elsewhere [5]. In this work the corrosion behaviour of GESA treated and original specimens will be examined in flowing Pb.

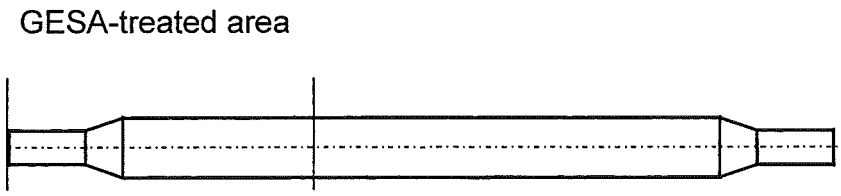


Fig. 1: Shape of the specimens exposed to flowing Pb. Some materials were treated by pulsed electron beam (GESA).

The degreased samples were weighed before corrosion testing. After the exposure, the specimens were washed to remove adherent Pb at 170 – 180 °C in a special medium, not interacting with steels and oxide films.

2.2. Test conditions

Two test sections were situated in two temperature zones in the Pb-loop in Obninsk: at the outlet of from the heating section (550 °C) and at the inlet into the cooler

(400 C). The flow velocity of Pb was around 1.9 ± 0.1 m/s. The concentration of oxygen dissolved in liquid Pb was about 3 – 4 x 10^{-5} wt%.

The specimens to be tested were fit together in the test sections by fixing their tails through pins in adapters and in upper and bottom grids. A sample of each steel was inserted untreated (i.e. without an extra surface treatment) and another in GESA-treated condition (except EM 10, only the original specimens were exposed) into the Pb-loop at 550 °C for 1027 h (7 specimens). The original steels 1.4970, Optifer IVc, 14948 and 1.4948 GESA-treated were exposed to Pb at 400 °C for 1027 h (4 specimens). The exposed materials and the corresponding test conditions are summarised in table 2.

Material	**400 °C**	**550 °C**
1.4970	1027 h	1027 h
1.4970 – GESA	--	1027 h
1.4948	1027 h	1027 h
1.4948 – GESA	1027 h	1027 h
Optifer Ivc	1027 h	1027 h
Optifer IVc-GESA	--	1027 h
EM 10	--	1027 h

Table 2: List of the materials exposed to flowing Pb for 1027 h at 400 °C and 550 °C, resp.

3. Results

The exposure of the specimens to flowing Pb at 400 °C for 1027 h had only a little influence on the surface structure. The steels 1.4970, Optifer IVc and 1.4948 showed a thin oxide scale on top of the surface which had a thickness of about 3 µm. The metallographical cross sections of the untreated specimens exposed to Pb at 400 °C for 1027 h are presented in fig. 2 a, b and c. The scales seem to be very uniform and dense. Dissolved oxygen in lead had reacted with elements of the steel to form a protecting oxide layer. The chemical composition of these layers still has to be determined with surface sensitive methods. Hence, no dissolution attack between the three steels and the liquid melt was detected.

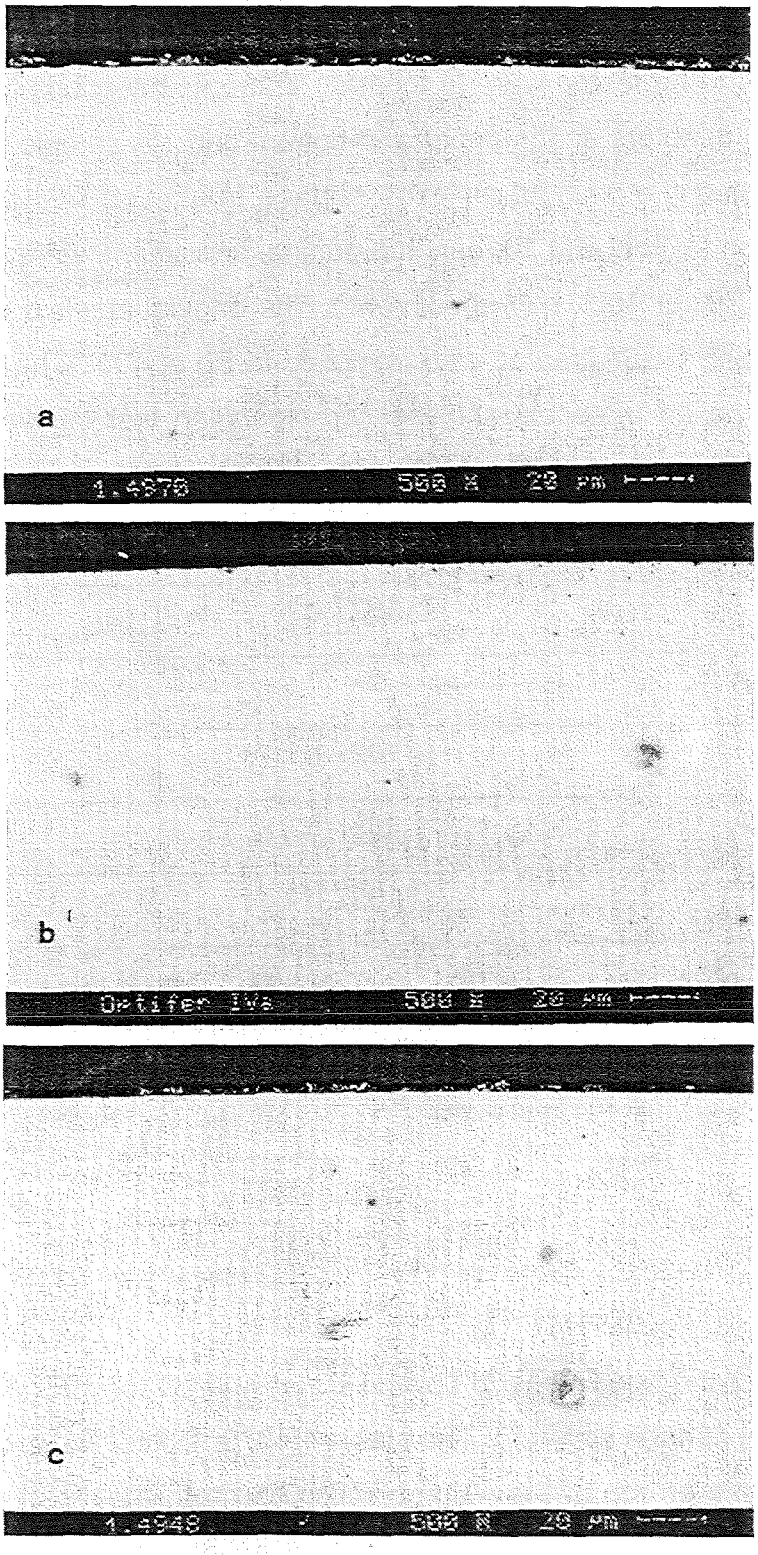


Fig. 2: Metallographical cross sections on steel specimens exposed to flowing Pb at 400 °C for 1000 h: a) 1.4970, b) Optifer IVc and c) 1.4948.

The cross section of the GESA treated 1.4948 steel after the exposure to flowing Pb at 400 °C showed two differences compared to the untreated, original steel. Firstly,

the surface of the steel showed a macroscopic wavelike contour in the cross section due to the treatment by GESA. This effect can be clearly seen in fig. 3. Secondly, an inhomogeneous interaction between the surface of the GESA-treated steel 1.4948 and the oxygen dissolved in Pb was detected. An irregular layer with a maximum of less than 1 µm in thickness has been built as a result of the reaction of oxygen with the steel. It seems that in some areas of the steel an oxygen penetration along grain boundaries up to 2 µm into the steel matrix has occurred.

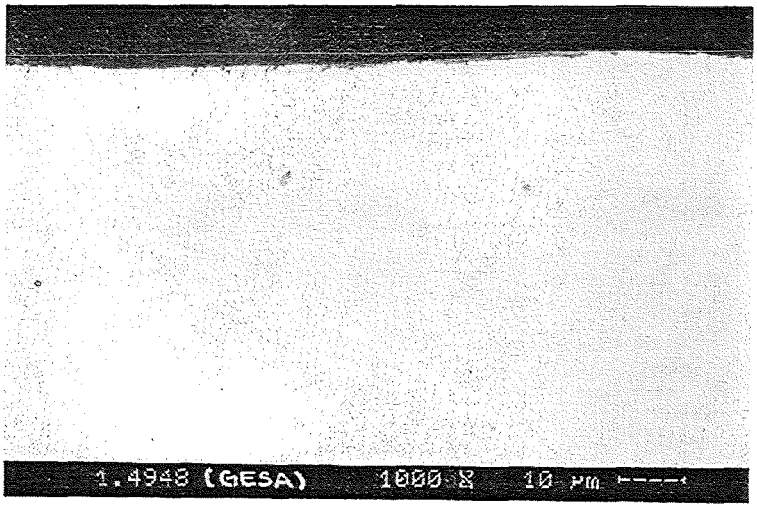


Fig. 3: Metallographical cross sections on steel 1.4948 GESA-treated after the exposure to flowing Pb at 400 °C for 1000 h.

During the corrosion test at 550 °C for 1000 h the original austenitic steels 1.4948 and 1.4970 were passivated by the formation of an oxide scale on top of the surface. This scale protected the steels from leaching out of nickel into the liquid lead. The cross sections are shown in fig. 4 a and 5 a.

In contrary, the GESA treated austenitic specimens showed a complete different feature of the cross section (compare with fig. 4b and 5b). Two uneven zones have been formed. The external layer varied between 0 to 12 µm on both steels, the intermediate layer showed a thickness of 0 to 18 µm and 0 to 20 µm for the steels 1.4948 and 1.4970, respectively. The adhesion of the whole irregular layer system to the basic material seemed to be good. EDX analysis were carried out on the cross sections of the specimens. The composition of the layers on 1.4948 and 1.4970 gave comparable results. The external layer (surface scale) consists of iron oxide Fe_3O_4. No Cr or Ni could be detected in this magnetite scale. The analysis of the intermediate layer showed the formation of Fe-Cr-spinel + Ni. Due to the Fe diffusion

into the magnetite scale, the elements Cr and Ni were enriched in this layer compared to the bulk material.

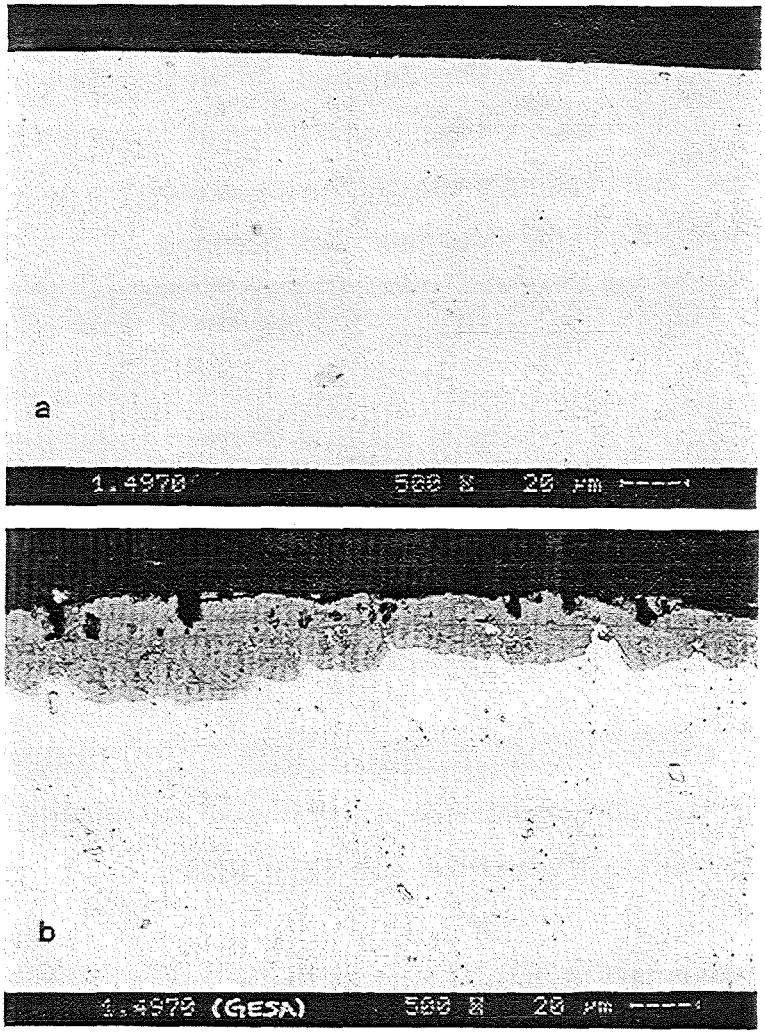


Fig. 4: The steel 1.4970 after the exposure to flowing Pb at 550 °C for 1000 h a) original condition and b) GESA treated surface.

After exposure to flowing Pb at 550 °C for 1027 h, the ferritic-martensitic steel Optifer IVc showed the same reaction zones independent of the pretreatment (original or GESA treated conditions). Hence, the observations made for the treated and un-treated specimens will be discussed together. The cross sections of the original and GESA treated specimens showed three different zones (see fig. 6 a and b), which will be called external, intermediate and internal layer in the following description. The intermediate and external layer were very homogenous in thickness. On the other hand the internal zone showed a great variation in thickness (compare table 4). The intermediate layer and the internal zone were separated by a band of pores which was formed due to the different diffusion rates of Fe and O (Kirkendall effect). In the

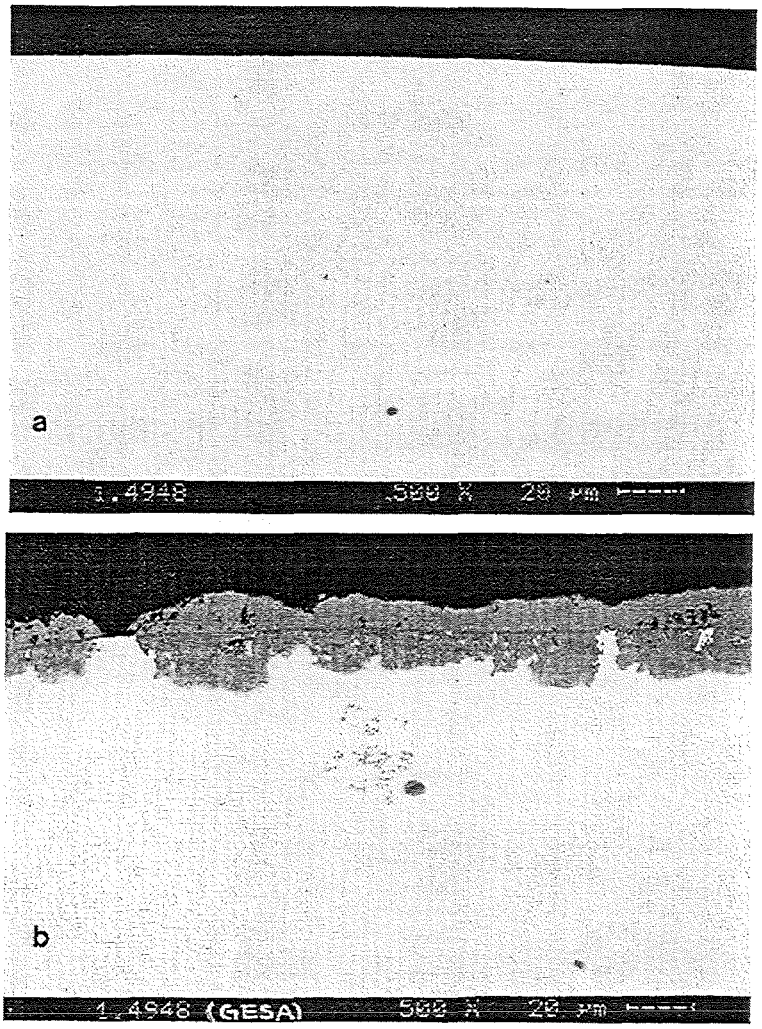


Fig. 5: The steel 1.4948 after the exposure to flowing Pb at 550 °C for 1000 h a) original condition and b) GESA treated surface.

internal zone oxygen diffusion along grain boundaries could be observed. The adhesion between the external and intermediate layer seemed to be very good. The layer system (external and intermediate) was completely remained without spallation. The chemical composition of the layers was examined by EDX analysis. The external layer consisted of pure Fe_3O_4. The intermediate layer was a Fe-Cr spinel. The Cr content attained nearly twice of the concentration of the steel matrix due to the iron depletion by diffusion into the external layer. The analysis of the internal zone, the area below the porous band, showed that Cr was still enriched compared to the steel composition. But the oxygen content was lower which indicates the formation of a hypostoichiometric Fe-Cr spinel.

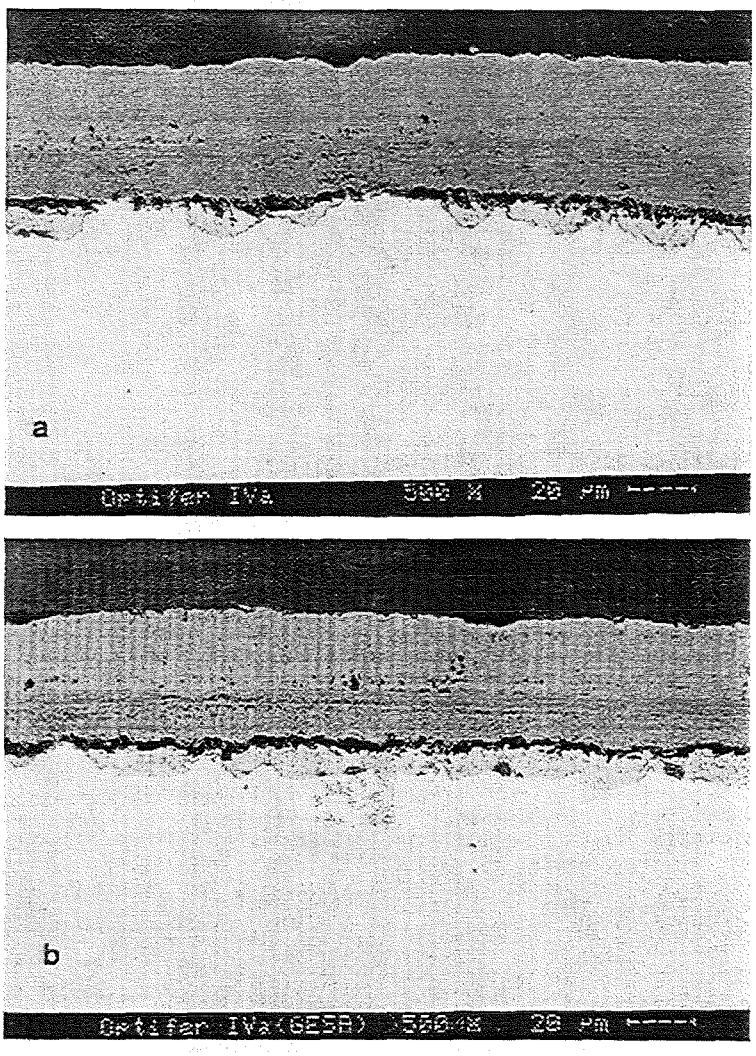


Fig. 6: The steel Optifer IVc after the exposure to flowing Pb at 550 °C for 1000 h a) original condition and b) GESA treated surface.

The cross section of the ferritic-martensitic steel EM 10 showed as well a three layer system comparable to the exposed Optifer IVc specimens (see fig. 7). The external and intermediate layers were quite homogenous in thickness and showed good adherence. The thickness of the internal zone was around 8 µm without any variation. On the other hand, no adherence between the intermediate layer and the internal zone existed.

In many areas of the sample the two layers (external and intermediate) even could not be observed anymore. The area of the porous band has increased as a consequence of the Kirkendall effect which led to a total detachment of the intermediate and external layer system.

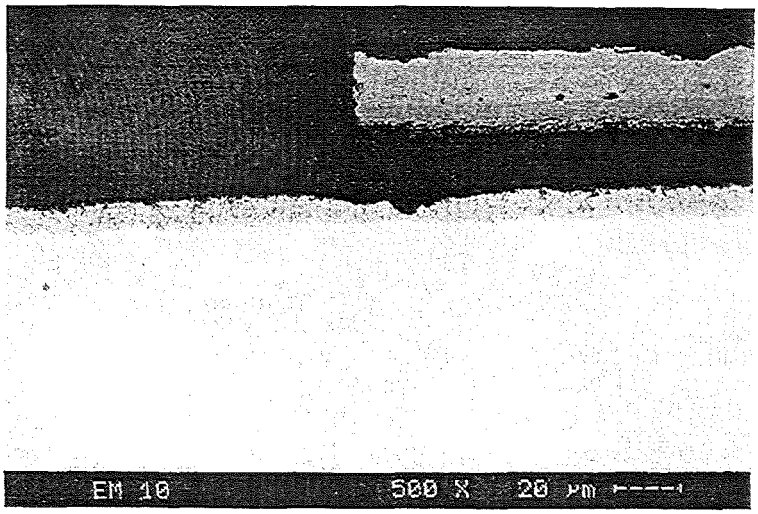


Fig. 7: The steel EM 10 after the exposure to flowing Pb at 550 °C for 1000 h in original condition.

With EDX analysis the following results on the EM 10 specimens were obtained. The external layer existed of Fe_3O_4 and was free of Cr. The intermediate layer indicated a Fe-Cr spinel in which the Fe content was lower and the Cr content was higher than in the steel matrix. In the internal zone, Cr was still enriched, but the oxygen content was already lower than in the intermediate layer. This indicated the formation of a hypostoichiometric Fe-Cr spinel.

Material	**External Layer**	**Intermediate Layer**	**Internal Zone**
1.4970	> 1 µm	--	--
1.4970 GESA	0 – 12 µm*	0 – 20 µm*	--
1.4948	> 1 µm	--	--
1.4948 GESA	0 – 12 µm*	0 – 18 µm*	--
Optifer IVc	24 µm (20 – 26)	14 µm	0 – 10 µm*
Optifer IVc GESA	24 µm (20 – 26)	14 µm	0 – 10 µm*
EM 10	14 µm	8 µm	8 µm

* very irregular in thickness

Table 4: The thickness of the different layers formed on the specimens exposed to flowing Pb at 550 °C for 1027 h.

4. Discussion

In general, all specimens investigated did not show any liquid metal dissolution attack. The dissolved oxygen has reacted with the surface of the different steels by forming an in-situ passivating oxide scale on top of the surface. These oxide scales were responsible for the protection of the steel against corrosion attack. The morphology of the oxide scale (one, two or three layer system) was dependent on the kind of steel and the pretreatment of the surface. In general, the oxide layers observed on austenitic steels were thinner than on ferritic-martensitic steels at 550 °C and the oxide layers formed at 550 °C are thicker than the layers formed at 400 °C. In the case of austenitic steels the oxide layer adhered very well to the surface, in the case of ferritic-martensitic steels spallation of the oxide layer system was observed (EM 10).

The surface treatment by GESA had no visible advantage for the reaction behaviour of the ferritic-martensitic steels. The thickness and the composition of the scale system observed after the corrosion testing was the same for the original and the GESA treated Optifer IVc specimens. There was no principal difference between the oxidation behaviour of the ferritic-martensitic steels in liquid lead and in a gas atmosphere. Both oxidation processes resulted in the same oxide structure [6]: an external layer existing of Fe_3O_4, an intermediate layer of Fe-Cr spinel and an internal zone with hypostoichiometric Fe-Cr spinel.

On the other hand, the GESA treatment showed a significant influence on the corrosion behaviour of austenitic steels in flowing lead. The original austenitic steels formed a thin oxide layer on top of the surface. On GESA treated specimens a two layer system was formed during the exposure to liquid lead. The irregular external layer was pure magnetite, the inhomogeneous intermediate layer consisted of Fe-Cr spinel and nickel. The adherence of the layer seemed to be good, but the irregularity was not desired for the function as a protecting oxide scale. The reason for the different behaviour of the GESA treated samples compared with the original specimens is possibly the induction of stresses during the GESA treatment. The influence of annealing after the GESA treatment has to be investigated.

Analytical investigations of the different oxide layers formed on the steels are urgently required to get more information about the processes taking place during the exposure to lead.

5. Conclusions

The constant oxygen concentration in the Pb loop ($3 - 4 \times 10^{-5}$ wt%) was responsible for the formation of oxide layers on the surface of all steels tested during the exposure. Oxide layers on top of a steel surface can effectively protect the steel matrix from liquid metal dissolution attack. Generally, the oxide layers found on austenitic steels were thinner than on ferritic-martensitic steels at 550 °C and the oxide layers formed at 550 °C were thicker than the layers formed at 400 °C. The GESA treatment of the steel surfaces had no beneficial effect on the corrosion behaviour of the steel in liquid lead.

Thus, it is needed to find alloys which fulfil the mechanical properties required and that form stable protective oxide scales with good adherence to the basic materials under oxygen control in liquid lead. Austenitic steels seem to be promising candidates as structural materials for a common ADS system.

References

[1] C. Rubbia, J.A. Rubio, S. Buono, F. Carminati, CERN/AT/95-44 (ET), September, 1995.

[2] W.E. Berry in „Corrosion in Nuclear Applications", John Wiley and Sons, New York 1971, p. 308.

[3] G.M. Tolson, A. Taboada, ORNL-TM1437, April 1966.

[4] R.C. Asher, D. Davies, S.A. Beetham, Cor. Sci. 17 (1977) 545.

[5] G. Müller, G. Schumacher, D. Strauß, Surface and Coating Technoloy, 108-109 (1998) 43.

[6] K. Hauffe, Oxidation of Metals, Plenum Press 1965.

IV. Entwicklung des Rechenprogramms FLUTAN für thermo- und fluiddynamische Anwendungen

(G. Grötzbach, L. Carteciano, B. Dorr, N. Lehmann, W. Olbrich, IRS; X. Jin, Siemens/KWU)

Die Analyse der Kühlungsmöglichkeiten in Tanks von beschleunigergetriebenen unterkritischen Anordnungen erfordert thermo- und fluiddynamische Rechenprogramme, die speziell an die Eigenschaften der schweren Flüssigmetalle angepasst sind [1,2]. Ein internationaler Vergleich zeigt, dass keines der in kommerziellen Codes enthaltenen Turbulenzmodelle für die Wärmetransportberechnung in diesen Fluiden geeignet ist. Das früher unter 32.22.02 für FLUTAN entwickelte ‚Turbulence Model for Buoyant Flows TMBF' kommt den Anforderungen noch am nächsten [2]. Entsprechend werden wir für ADS-spezifische thermofluiddynamische numerische Analysen zunächst dem Programm FLUTAN den Vorzug geben. Dennoch erfordert auch das TMBF-Modell noch die Entwicklung von speziellen Anpassungen für die im ADS verwendeten schweren Flüssigmetalle. Die entsprechenden Arbeiten zur Turbulenzmodellierung werden unter dem neuen durch den HGF-Strategiefonds finanzierten Vorhaben 32.23.06 durchgeführt.

Die nicht die Turbulenzmodelle betreffende und früher unter 32.22.02 [3] geführte Weiterentwicklung des Rechenprogramms FLUTAN wird hier erfolgen. Sie wird nicht nur die Bereitstellung von weiteren geeigneten physikalischen Modellen betreffen, sondern auch die notwendige Verbesserung der Effizienz der verwendeten numerischen Methoden. Dabei ist die Realisierung eines Verfahrens zur Diskretisierung der Transportgleichungen in komplexen Geometrien mit Hilfe von körperangepassten Koordinaten ein wichtiger Entwicklungsschwerpunkt. Darüber hinaus wird über die notwendigen Modernisierungsmaßnahmen des Prä- und Post-Prozessors und über eine Programmentwicklung zur On-Line-Konvergenz-Beobachtung und -Beeinflussung berichtet.

Im Rahmen einer von SIEMENS-KWU finanzierten Doktorarbeit wird ein Verfahren zur Diskretisierung der Transportgleichungen in komplexen Geometrien mit Hilfe von körperangepassten Koordinaten entwickelt [3]. Damit wird eine effiziente und genaue

Lösung bei der Gestaltung krummliniger Oberflächen, die bisher in FLUTAN nur durch stufige Ränder modelliert werden können, angestrebt. Die Stufendarstellung ist aus Genauigkeitsgründen zu vermeiden. Das vorgeschlagene Verfahren stellt eine dreidimensionale Koordinatentransformation für das Gleichungssystem in FLUTAN dar. Die von der Geometrie abhängigen Koeffizienten für die transformierten Transportgleichungen des Impulses wurden inzwischen in FLUTAN implementiert. Das Verfahren wurde für rechtwinklige und schiefwinklige Gitter am Beispiel isothermer Strömung in Plattenkanälen und Diffusoren erfolgreich getestet. Im Plattenkanal werden bei rechtwinkligem Gitter mit dem Verfahren die gleichen Ergebnisse erzielt wie mit der alten FLUTAN-Version ohne körperangepassten Koordinaten. Bei schiefwinkligen Gittern zeigt sich, dass FLUTAN mit dem neuen Verfahren Testrechnungen bis herab zu sehr spitzen Winkeln von nur 20 Grad besteht, ohne dass Konvergenzprobleme oder merkliche Genauigkeitsprobleme auftreten. In der Literatur findet man dagegen bisher, dass unterhalb von 45 Grad bei zentrierten Gittern Konvergenzprobleme auftreten. Der Grund dieses Erfolgs liegt in der Komplexität des Verfahrens, in dem alle drei kartesische Geschwindigkeitskomponenten an jeder Oberfläche eines Kontrollvolumens berücksichtigt werden.

Die erweiterten Möglichkeiten der Geometrieabbildung machen für das FLUTAN Programm ein Werkzeug zur programmgestützten interaktiven Erstellung von Gittern mit unregelmäßiger Topologie in kartesischen Koordinaten erforderlich. Zu diesem Zweck wurde sowohl für das neue FLUTAN-Programm, als auch für die orthogonale Version ein Programm zur Ankopplung der Ausgabe des kommerziellen CFX-Meshbuild-Preprozessors an die FLUTAN-Eingabe erstellt und für unterschiedliche Geometrie erfolgreich getestet.

Zur Analyse der mit körperangepassten Gittern berechneten Ergebnisse fehlt FLUTAN noch eine geeignete Möglichkeit zur graphischen Darstellung der Ergebnisse. Die Darstellung kann z.B. mit einer neu entwickelten Schnittstelle mit Hilfe der Visualisierungssoftware AVS erfolgen. Es werden derzeit AVS-Express-Netzwerke entwickelt, um die graphische Darstellung der mit dem oben beschriebenen Verfahren berechneten Ergebnisse mit Hilfe der Visualisierungssoftware AVS-UCD zu ermöglichen.

Die Postprozessing-Möglichkeiten für das orthogonale FLUTAN wurden durch Programmierung eines Interpreters für Restartfiles erweitert. Damit können Daten für die graphische Darstellung mit unterschiedlichen Grafikprogrammen aussortiert und in den entsprechenden Fileformaten gespeichert werden, z.B. werden diagonale Traversen der Geschwindigkeiten sowie gemeinsame Darstellungen der Struktur- und Fluidbereiche auf einem Bild ermöglicht. Das Testen dieser Anwendung ist erfolgreich abgeschlossen.

Das Programm ONLIVIS (ON-Line-VISualisierung) zur On-Line-Konvergenzbeobachtung während einer FLUTAN-Rechnung wurde weiterentwickelt. Es soll der Kommunikation in beiden Richtungen zwischen dem auf einem Hochleistungsrechner im Batch-Betrieb laufenden FLUTAN-Programm und einem auf einem AIX- oder NT-System laufenden interaktiven Beobachtungs- und Auswerteprozess dienen. Die Schnittstelle zur On-Line-Visualisierung wurde mit FLUTAN auf der VPP getestet und eingesetzt. Sowohl für die Generierung einer compilationsfähigen Programmversion als auch für den Start von FLUTAN und der On-Line-Visualisierung wurden Prozeduren in Form von Shellscripts erstellt. Parallel dazu wird die früher entwickelte auf Unigraph basierende und an IBM/AIX gebundene Version von ONLIVIS neu auf Basis von TCL/TK programmiert, das sowohl unter UNIX, als auch unter WINDOWS-NT anwendbar ist. Dabei wurde eine neue Kommunikationsmethode zwischen dem FLUTAN-Prozess und dem Beobachtungsprozess ONLIVIS programmiert. Sie basiert auf einer aktiven Kommunikationsverbindung und ist dank einer eigenen Sicherung der in der interaktiven Sitzung anfallenden Ergebnisse schneller und stabiler als die alte Kommunikationsmethode. Der Prototyp läuft auf einem PC unter NT und bietet eine neue Graphik. Mit der neuen auf TCL/TK basierenden Methode wird auch die parallele Beobachtung von mehreren FLUTAN-Rechnungen möglich sein.

Literatur

1 X. Cheng, J.U. Knebel, L. N. Carteciano,
Numerical investigations on ADS thermalhydraulics.
Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Thermal-Hydraulics, Brasimone, I, April 12-13, 1999, ENEA 1999, S. 277 - 308

2 G. Grötzbach, L. N. Carteciano,
FZK benchmark calculations for experiments with various fluids.
Internat. Workshop on Heavy Liquid Metal Thermal-Hydraulics, Geneva, June 29-30, 1999

3 G. Grötzbach, L. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin,
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, September 1999, pp. 491 - 506

32.23.06 HGF-Strategiefonds-Projekt: Thermohydraulische und materialspezifische Untersuchungen zur Realisierung einer Beschleuniger getriebenen Anlagenanordnung (ADS) zur Transmutation von Aktiniden

(J.U. Knebel, F. Fellmoser, C. Lefhalm, K. Mack, C. Pettan, H. Piecha, IKET; J. Konys, C. Adelhelm, H. Glasbrenner, H. Muscher, J. Novotny, Z. Voss, O. Wedemeyer, IMF; G. Müller, A. Heinzel, G. Schumacher, R. Huber, F. Zimmermann, IHM; G. Grötzbach, B. Dorr, L.N. Carteciano, IRS)

ABSTRACT

Within the Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF) an HGF-Strategy Fund Project entitled "Innovative Technologies to Reduce Radiotoxicity" is funded since October 1999. The objectives of this HGF-Strategy Fund Project is the development of new methods and technologies to design and manufacture thin-walled and highly thermally-loaded surfaces which are cooled by a corrosive heavy liquid metal (lead-bismuth eutectic).

The result of this project will be the basic scientific-technical tool which allows the conception and the design of a European Demonstrator of an ADS system (cf. 32.23.05). The work performed at Forschungszentrum Karlsruhe is embedded in a broad European research and development programme on ADS systems. The project is divided in three sub-projects:

Sub-Project 1: Thermalhydraulic Investigations,

Sub-Project 2: Material Specific Investigations,

Sub-Project 3: Oxygen Control System.

This progress report gives a general description of the project and its envisaged objectives. As a selection of the results achieved, first, FLUTAN calculations for the COULI beam window design and, second, the oxygen control system for the KArlsruhe Lead LAboratory KALLA are described in detail. Finally, the design and status of KALLA is given.

1. DESCRIPTION OF THE PROJECT AND ENVISAGED OBJECTIVES

1.1 Concrete Objectives of the Project

The objective of this HGF Strategy Fund Project is the development of new methods and technologies to design and manufacture thin-walled and highly thermally-loaded surfaces (e.g. beam window) which are cooled by a corrosive heavy liquid metal (lead-bismuth eutectic). The beam window is a vital component of an ADS spallation target.

The project is divided in three sub-projects:

Sub-Project 1: Thermalhydraulic Investigations

In the field of experimental thermalhydraulics physical models for conductive and convective heat transfer along thin-walled and highly thermally-loaded surfaces (e.g. beam window) in turbulent lead-bismuth flow are developped. In parallel, a thermalhydraulic computer programme is validated for the low Prandtl number fluid lead-bismuth. Finally, a complete spallation target is numerically designed.

Sub-Project 2: Material Specific Investigations

In the field of material science physical methods to describe corrosion mechanisms and to solve the corrosion challenge for potential structure and window materials with and without surface treatment are developped for flowing lead-bismuth.

Sub-Project 3: Oxygen Control System

In the field of reaction kinetics a physical / chemical method to measure and control the oxygen potential in a lead-bismuth loop is developped in order to prevent the corrosion of the materials used.

The strategy of the project is based both on a theoretical / numerical approach and on an experimental approach. The results of both approaches are tightly linked within all sub-projects. The sub-projects are complementing one another.

The investigation of a complexe integral system in the fields of heat transfer along corroded surfaces and heat transport within lead-bismuth, having well-defined chemical and material specific boundary conditions, is still lacking today.

The summary of the results of the three sub-projects participates to the method and technology to realise critical and system-relevant components of an Accelerator Driven System (ADS), such as the beam window and the spallation target. The safe design of these components relative to heat transfer, material selection and corrosion control is a basic requirement to guarantee the integral funtionality of an ADS.

The methods and technologies which are resulting from this project are regularly discussed and harmonized with our European partners during various working group meetings, e.g. TECLA Project of the 5th EU-Framework Programme [1], MEGAPIE Initiative [2], Wissenschaftlich-Technische Zusammenarbeit, European Benchmark Working Group. The most important partners are: CEA and CNRS France, ENEA, CRS4 and ANSALDO Italy, PSI Switzerland, CIEMAT and LAESA Spain, RIT Sweden, SCK/CEN Belgium, IPPE and PROMETEY Russian Federation. The methods and technologies are essential steps towards the concept of a common European Experimental Demonstrator of an ADS, [3, 4]. An ADS has the potential and the strategic objective to transmute minor actinides and long-lived fission products, thus essentially participating in closing the fuel cycle now including minor actinides, [5, 6].

The research work of this HGF strategy fund project is of high international actuality and of engineering and scientific importance.

1.2 Long-Term and Strategic Objectives

The overall and long-term objective of the project is – on the basis of the newly developped methods and technologies – to provide the scientific-technical tool which allows, now, the conceptual design and, at a later stage, the detailed design of a European Experimental Demonstrator of an ADS.

The tools comprise of a thermalhydraulic and material specific data base resulting from fundamental and application-oriented experiments, a computational fluid dynamics (CFD) code validated for lead-bismuth, an identification of beam window and structure materials, and an instruction for corrosion control, material conditioning and oxygen control in lead-bismuth loops.
The Experimental Demonstrator with a thermal power of about 100 MW_{th} is a major milestone towards the long-term realization of a prototypical ADS with a thermal power of about 1500 MW_{th}.

An accelerator driven system (ADS) consists of three main parts: an accelerator for primary particles (protons), a spallation target (or target module) in which the protons produce free nucleons (neutrons) in a spallation reaction (external neutron source), and a subcritical blanket in which, first, the fission reaction takes place, producing fission neutrons (internal neutron source) and thermal energy, and second, the transmutation reaction occur, [7]. The protons are injected into the spallation target through a vacuum beam pipe, the beam pipe being closed by a beam window at the end. The target is a heavy liquid metal (e.g. lead Pb or eutectic lead-bismuth Pb-Bi). The spallation neutrons produced in the spallation target are completely independent of the subcritical blanket. A shut-down of the accelerator or an interruption of the proton beam immediately stops the fission reaction. Due to the subcriticality of the system advantages to safety are expected, [8, 9]. A sketch of an ADS is given in figure 1.

The strategic objective of an ADS is to transmute long-lived radioactive waste and thus to close the fuel cycle including minor actinides, [10, 11, 12, 13]. The waste which is treated in an ADS can be divided into two parts: the minor actinides such as Neptunium, Americium und Curium and some long-lived fission products such as Technetium 99 and Jod 129. The two latter species can diffuse in the biosphere in the long run where they can be selectively incorporated by organisms.

The ADS technology is a natural extention to the existing park of light water reactors (LWR). The use of ADS reduces the amount and the radiotoxicity of radioactive waste which has to be transported and stored in a final repository, [14].

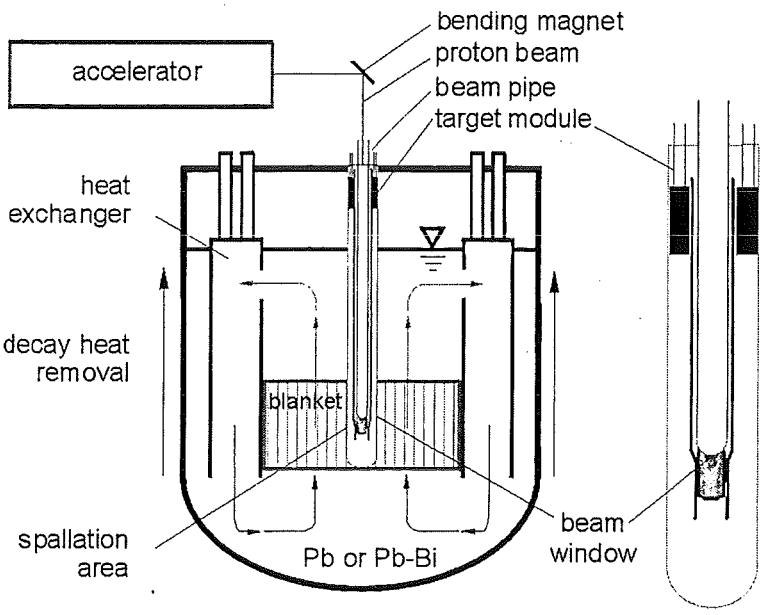


Figure 1: Sketch of an accelerator driven system (ADS).

The evaluation commission of the Bundesministerium für Wirtschaft (BMWi) considers the strategic work on transmutation a priority task. The evaluation commission considers it as required to fundamentally investigate the physical and technical conditions for the technological realization of the ADS technology,[15].

The objective of the Experimental Demonstrator is to provide experimental data and to obtain practical experience in the field of nuclear technology and energy technology. In the field of nuclear technology there is a need to improve the accuracy and reliability of nuclear cross-section data, to amend data for missing elements or isotopes, and to extend the high energy range of existing evaluations for those nuclei relevant for ADS concepts. On the basis of updated data libraries, the calculation methods have to be benchmarked to assess their capability for predicting the interaction of highly energetic protons and neutrons with the materials of a spallation target and a subcritical blanket.

In the field of energy technology there is a need to establish a broader basis of understanding, knowledge and experience related to heavy liquid metal coolant technology and to gain experience in the field of thermalhydraulics (experiment, physical model development, numerics) of the beam window, the spallation target and the primary circuit, as well as detailed knowledge about the corrosion mechanisms and the long-term behaviour of materials used for the beam window, the target module and the primary system under realistic conditions. In addition, methods to measure, control and remove impurities, caused by proton and neutron induced particle reactions and by liquid metal corrosion within the cooling loops, have to be developped.

This HGF Strategy Fund Project provides an essential scientific contribution to the application-oriented fundamental research work within the energy technology of an ADS as mentioned above.

The strategic objective of the Experimental Demonstrator is to prove the safe and continuous coupling of an accelerator, a spallation target and a subcritical blanket in order to finally transmute minor actinides and long-lived fission products.

2. OXYGEN CONTROL SYSTEM (OCS)

2.1 Introduction

Using a heavy liquid metal such as Pb-Bi or Pb as a coolant in an ADS system results in serious corrosion problems with the structural materials. Steel and Pb-Bi or Pb are not compatible. For NiPb an eutectic is reported in [16] at 324°C that contains 0.46 at% Ni. At 550°C about twice as much Ni is dissolved in Pb than at 324°C. The solubility of iron in liquid Pb is reported to be as low as $2-3\cdot10^{-4}$ *wt%* at 1000°C in [16], the solubility of Cr to be 0.03 wt%. Since all the solubilities vary with temperature, transport processes will take place which live from the enhanced solubility of steel components at high temperatures and precipitation of the corrosion products at low temperatures. A temperature difference of 150 K is typical for Pb-Bi

cooling loops. Having high flow velocities in the range of m/s and long in pile times even small solubilities can lead to heavy corrosion effects.

One possibility to slow down corrosion of metals in liquid Pb-Bi is the application of metals with no or very low solubility in Pb-Bi. This could be Mo and W with a solubility below 0.005 wt% at 1200°C. Another possibility is to protect the metal surface by an oxide layer that has the ability to slow down the dissolution of the protected metal components to tolerable values, [17, 18]. With the latter possibility oxygen is added to the liquid Pb-Bi in a concentration at which a protective oxide layer is formed on the surface of the metal, however, no PbO is precipitated in the liquid Pb-Bi. The significant results are given in figure 2. A steep increase of the corrosion effects at oxygen concentrations below 10^{-8} *wt%* can be seen because of decreasing protection properties of the surface layer on the metal. The transition zone is characterised by an intact protecting oxide layer that allows only very low corrosion attack. At higher oxygen concentrations (above 10^{-5} *wt%*) the corrosion effects increase slowly due to the reaction of PbO with the oxide layer, [18]. A more important disadvantage of a high oxygen concentration is the precipitation of solid PbO at lower temperature regions in the coolant loop. Figure 2 shows a slight shift of the transition zone as a function of the material used.

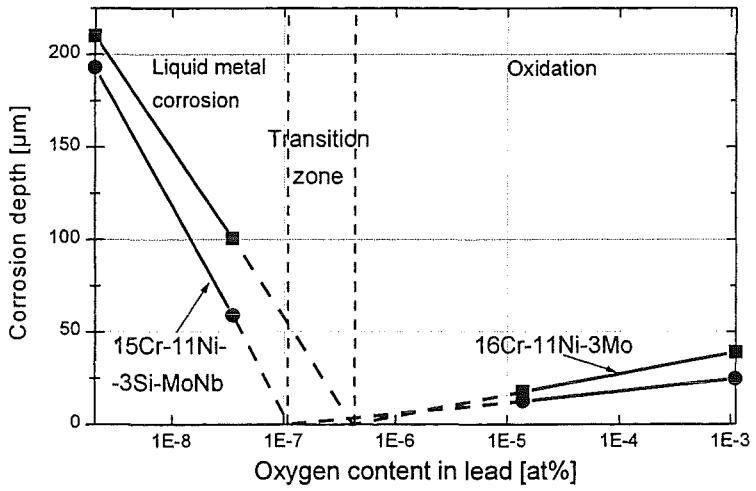


Figure 2:
Corrosion behaviour of steels in flowing Pb after 3000 h at 550°C [18].

These results clearly demonstrate that the measurement and the control of the oxygen concentration is necessary in order to safely operate a liquid Pb-Bi loop.

Without any control processes, oxygen would be depleted by oxide formation on the metal surface after a certain time of operation. Thus, the conditions will shift to the region with low oxygen concentration and, hence, strong corrosion effects.

2.2 Working conditions for a Pb-Bi test loop

In large loops that are operated at IPPE Obninsk, Russia, the concentration of oxygen is controlled by solid electrolyte cells that measure and feed oxygen into the liquid Pb-Bi. Strong deviations from the desired oxygen concentration are corrected by adding Bismuth oxide to the liquid Pb-Bi. Solid electrolyte cells are sophisticated and require a special know-how to build and operate them. Another possibility to control the oxygen concentration in liquid Pb-Bi is by a gas atmosphere with a definite oxygen partial pressure p_{O_2} that determines the chemical potential μ_{O_2} of oxygen within the liquid metal pool. To prevent PbO precipitation and to support Fe_2O_3 formation the following condition must be established:

$$2\,\Delta G^0_{PbO} > \mu_{O_2} = RT \ln P_{O_2} > 1.5\,\Delta G^0_{Fe_2O_3} \qquad (1)$$

The standard values ΔG^0 of the free reaction enthalpy for the oxides in question are known for the relevant temperatures, and thus the proper range of the chemical potential μ_{O_2} of oxygen. Now, the equilibrium partial pressure region of oxygen that retains the stable condition for the transition zone in figure 2 can be determined. This can be comfortably done with the modified Ellingham-Richardson diagramme (figure 3) that contains the relevant oxides PbO, NiO, Fe_2O_3, Cr_2O_3 and the oxygen partial pressure from equ. (1) and the H_2/H_2O ratios as a function of the chemical potential μ_{O_2} of oxygen and the temperature T. The H_2/H_2O ratio is used to control the oxygen partial pressure and with it the oxygen potential as shown by the following relation:

$$P_{O_2} = \frac{P^2_{H_2O}}{P^2_{O_2}} \exp \frac{2\,\Delta G^0_{H_2O}}{RT} \qquad (2)$$

The modified Ellingham-Richardson diagramme demonstrates the regions of stable conditions and how these can be established. Dashed lines represent the isobars of the oxygen partial pressure and the lines of constant H_2/H_2O ratios in the gas atmosphere above the liquid Pb-Bi that dissolved oxygen, respectively. For the safe operation of a Pb-Bi- or Pb-loop with ADS relevant temperatures the typical working conditions are between the lines of the oxygen potentials for PbO and Fe_2O_3 and in the temperature regime $300°C < T < 450°C$ and $400°C < T < 550°C$, respectively. Lines of constant H_2/H_2O ratios within the boarders of this field show the ratios that must be established to maintain the appropriate oxygen partial pressures.

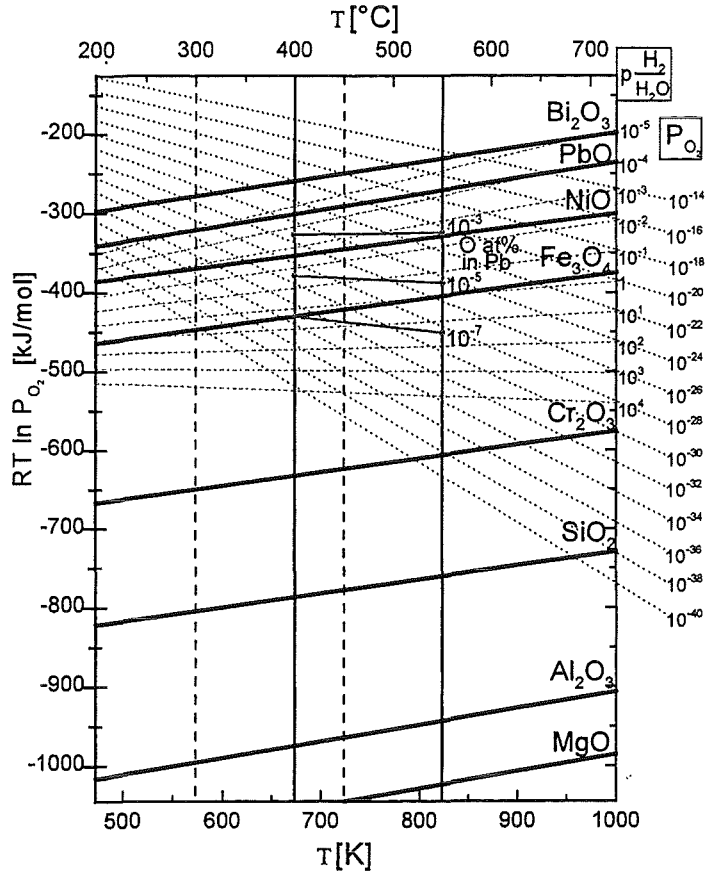


Figure 3:
Modified Ellingham-Richardson diagramme of PbO, NiO, Fe_2O_3, Cr_2O_3, [19].

An example: A H_2/H_2O ratio of 0.4 results in an oxygen partial pressure of $p_{O_2} = 10^{-24}$ at 550°C and of $p_{O_2} = 10^{-31}$ at 400°C. In the case of stagnant Pb-Bi or Pb, iron oxide is formed at both temperatures, but not PbO. In the case of a liquid Pb-Bi- or Pb-loop (flowing liquid metal), there is no equilibrium across the

temperature region via the H_2/H_2O ratio but via the oxygen dissolved in the flowing liquid Pb-Bi or Pb. In this case the p_{O_2} isobar has to be followed. E.g., a set value of H_2/H_2O = 0.4 at 550°C corresponds with an oxygen partial pressure of $p_{O_2} = 10^{-24}$. Following the p_{O_2} isobar the working condition comes close to the PbO-line at 400°C. Thus, the maximum temperature difference ΔT within one loop must be below 150 K, otherwise PbO is formed.

2.3 Corrosion test stand, gas-phase oxygen control and results

A corrosion test stand was installed in which the oxygen potential of liquid Pb is controlled via the gas phase as described above, figure 4. The reactor is a Quartz tube inside an oven that is controlled at 550°C. A mixture of Ar and Ar/5%H_2 allows to adjust the hydrogen concentration in the gas. The water vapor is added by passing the gas through water of 7.4°C. In the actual experiment the gas mixture is chosen thus that the H_2/H_2O ratio is 0.4. Looking at figure 3 one can see that these conditions guarantee the formation of iron oxide and correspond to an oxygen partial pressure of about 10^{-24} *at* 550°C. Moisture sensors and an oxygen detector allow to determine the oxygen potential of the gas by 2 different methods.

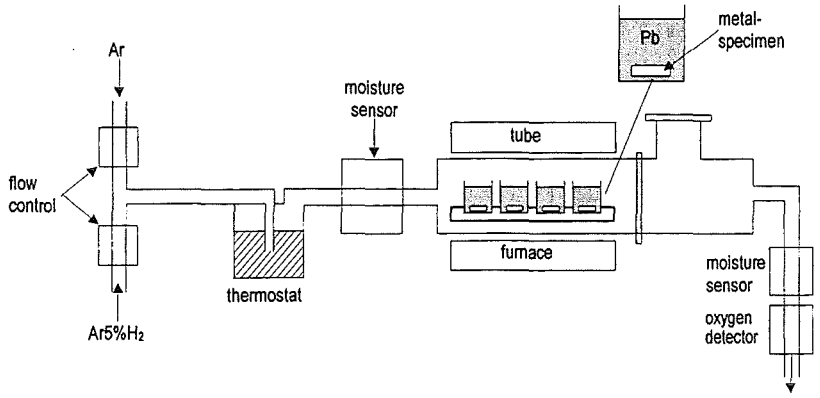


Figure 4:
Scheme of the corrosion test stand with stagnant liquid lead /2/.

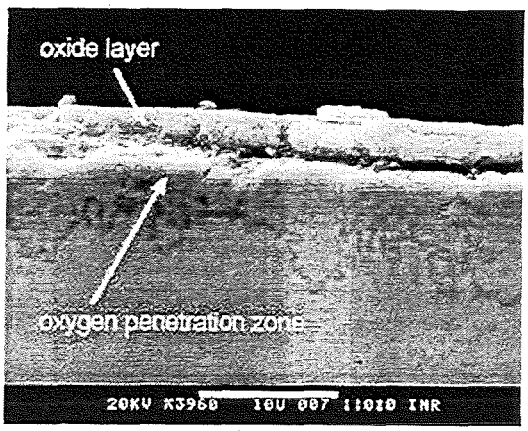


Figure 5:
Cross section of OPTIFER IVc steel after 1000 h in liquid lead at 550°C, oxygen control by H_2/H_20 ratio of 0.4.

Up to now corrosion tests run 1000 h with several steel specimens. As an example the cross section perpendicular to the surface of an OPTIFER steel specimen is shown in figure 5. The surface of this specimen was treated by a pulsed electron beam with the GESA installation [19] to improve the corrosion behavior. The scanning electron micrograph shows a dense oxide scale of about 3-4 μm thickness on top and an oxygen penetration zone below the steel surface.

In the oxygen control test stand KOCOS (Kinetics of Oxygen COntrol Systems, [20]), which is set up within the KArlsruhe Lead Laboratory KALLA, investigations of the kinetics of the oxygen control process via the gas phase are performed. The test stand basically consists of a crucible which is filled with 688 g of liquid Pb-Bi and heated from the side. Within the Pb-Bi a natural circulation flow establishes which results in a good mixing of the fluid. The gas-phase oxygen control system applied is similar to the system described in figure 4.

Up to now two important characteristics of the gas-phase oxygen control system have been demonstrated: first, the time scale in which the thermodynamic equilibrum for this setup establishes is found to be about *1.5* hours when changing the H_2/H_2O ratio up to one dimension at a constant total gas flow rate of *8 l/h*, figure 6. The free surface of the liquid metal to the gas atmosphere is 47 cm^2. The thermodynamic equilibrium is observed over more than *60* hours and can be supposed to be stable. This rather short time scale shows that the limiting process is the solution of oxygen from the gas phase into the liquid metal or vice versa, probably allowing a good temperature following behaviour of such an oxygen control system in an ADS.

Second, experiments are performed that demonstrate the reversibility of the process. The oxygen concentration in figure 6 can be perfectly re-established after 1.5 hours when setting back to the old boundary conditions. However, a good mixing of the fluid within the bulk and along the free surface to the gas phase, e.g. by natural circulation, has to be ensured.

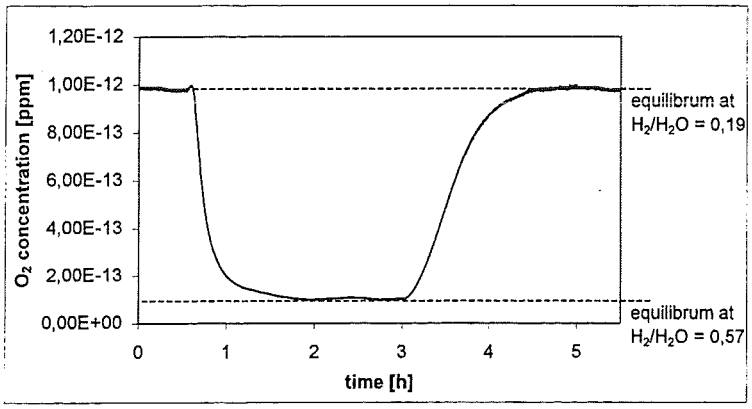


Figure 6:
Oxygen conentration as a function of time for different H_2/H_2O ratios.

2.4 Summary

Liquid metal loops with Pb-Bi that are of interest for accelerator-driven systems (ADS) are only feasible if the problem of steel corrosion by liquid Pb-Bi at the relevant temperatures can be solved. It is known that an oxide scale at the surface of steel can act as a protective barrier for the solution of steel components in the liquid metal. The conditions are described under which an iron oxide scale is formed on the steel surface, but not PbO that would precipitate at the lowest temperature of a loop and could eventually block the liquid metal flow. These conditions are maintained in the temperature region of 400°C - 550°C by an oxygen concentration in liquid Pb-Bi or Pb that is in equilibrium with a gas phase which contains hydrogen and water vapor with a H_2/H_2O-ratio of 0.4. Corrosion experiments in stagnant lead at 550°C were carried out that show protective oxide formation on steel after 1000 h under those conditions.

The applied gas-phase oxygen control system will be used for oxygen control in the KArlsruhe Lead LAboratory KALLA.

3. PRELIMINARY CALCULATIONS FOR THE COULI BENCHMARK WITH THE COMPUTER CODE FLUTAN

3.1 Introduction

One topic of the HGF-Strategy Fund Project is the numerical and experimental investigation of momentum and heat transport in turbulent lead-bismuth flows [21]. Previous related code development work was reported on under 32.22.02 [22]. The current investigations are supplementing those of 32.23.05. The required development of physical models for the numerical simulation of the turbulent heat transport will be performed by means of experiments, mainly within KALLA, and by means of results from direct numerical simulations with the TURBIT-code [23].

The current activity on the computer code FLUTAN [24] regards the numerical investigation of the thermalhydraulic behavior of a spallation target and the heat removal system. Preliminary to the experiments in KALLA on a realistic spallation target geometry, which will be used to investigate the Pb-Bi flow with a thermal field inside the beam pipe, the COULI experiment was proposed in order to study the fluid dynamics of the spallation region of the ADS target inside the beam pipe. This experiment will be performed in water in isothermal conditions at CEA Grenoble.

A major problem with the preparation of both experiments is related to the shape of the connector in the target geometry (figure 7). It was developed by optimizing the heat transfer at the stagnation point at the centre of the beam window, but on the other hand, it should be determined in such a way that boundary layer detachments are avoided. However, the turbulence field generated near the stagnation point downstream of the beam window strongly influences the flow behaviour in the connector.

A benchmark for the fluid-dynamics simulation of a given target geometry for the COULI experiment was proposed by CRS4, Italy in order to test the turbulence models of different CFD codes for an isothermal flow in this kind of geometry and to clarify whether this specified geometry is free of boundary layer separation problems. Preliminary calculations were performed by CRS4 with Star-CD and by

Forschungszentrum Karlsruhe with CFX (cf. 32.23.05) and FLUTAN. Here, the FLUTAN calculations are documented.

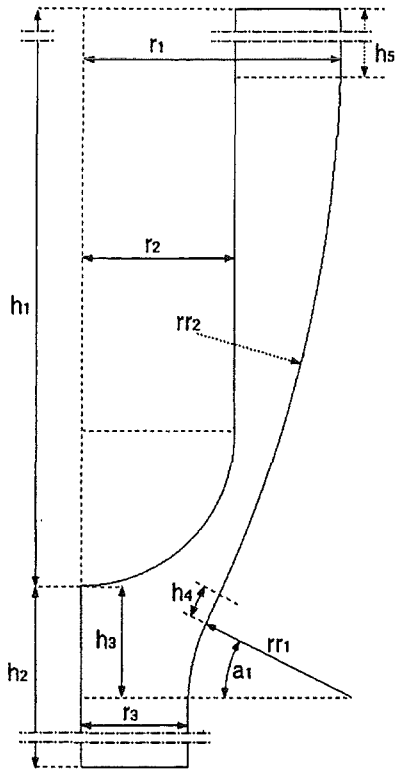
3.2 Target geometry and boundary conditions

A target geometry was proposed for the benchmark calculations (figure 7). Two cases, one for a small, and one for a realistically high Reynolds number were given, table 1. V_f and D_f are the mean velocity in the funnel and the funnel diameter (D_f=0.1 m), respectively. The water temperature is 60 °C. The funnel length must be set to $h_2 = 14\ D_f = 1.4286$ m in order to achieve a fully developed flow at the inlet of the connector. A uniform inlet distribution is used for the mean velocity; uniform inlet distributions for k and ε are calculated as requested:

$$k_f = 1.5 * I^2 * v_f^2 = 1.5 * (0.1)^2 * v_f^2 = 0.015 * v_f^2 \quad (3)$$

$$\varepsilon_f = C_\mu^{0.75} * k_f^{1.5} / L_t = 16.43\ k_f^{1.5} \quad (4)$$

where I is the turbulence intensity, L_t is the turbulence integral length and C_μ=0.09. For the calculations, it is assumed that I=0.1 and L_t=0.1*D_f.



Parameter	Full scale value	COULI (1/1.4)
h_1 (mm)	1000	714.29
h_2 (mm)	1000	714.29
h_3 (mm)	80	57.14
h_4 (mm)	10	7.14
h_5 (mm)	(638.93)	(456.38)
r_1 (mm)	170	121.43
r_2 (mm)	100	71.43
r_3 (mm)	70	50
rr_1 (mm)	134	95.71
a_1 (deg)	25	25
rr_2 (mm)	(888.22)	(634.4)

Figure 7: Target geometry for the COULI benchmark (the number in brackets can be deduced from the other dimensions).

Table 1: Case specifications for the benchmark.

Case		Re	V_f (m/s)
1b	*Water*	$2x10^4$	0.095
2b	Water	$9x10^5$	4.25

3.3 Calculation parameters

The calculations with the computer code FLUTAN were performed with a 2D numerical grid. The mesh size was uniform ($\Delta x=\Delta z=0.71$ mm) in the connector area. A coarser grid size was used in the vertical direction for the funnel ($\Delta z=7.1$ mm) and for the riser ($\Delta z=3.6$ mm). The total length of the geometry, which was simulated with 55,929 cells in cylindrical coordinates, was 2.176 m including funnel and riser.

The standard k-ε turbulence model was used. The system of the momentum equations and turbulence equations was solved using iterative solvers, respectively CRESOR and SOR. A very low value for the convergence criterion parameter was chosen: $\varepsilon_3=10^{-7}$. The steady state is reached when the change of each velocity component from one time step to the next one divided by the maximum velocity magnitude in the entire field is less than ε_3. The calculations were performed with a first order upwind discretisation method of the convective terms for the momentum and turbulence equations. A first order time discretisation was used with a time step width of $\Delta t=0.1$s.

3.4 Results

The numerical results for the high Reynolds number case will be shown here. Similar results were obtained for the case with the lower Reynolds number. The field of the modulus of velocity is shown on figure 8. A flow detachment is simulated at the inner wall downstream of the beam window. The field of the turbulent viscosity (figure 9) shows a high production of turbulence around the stagnation point.

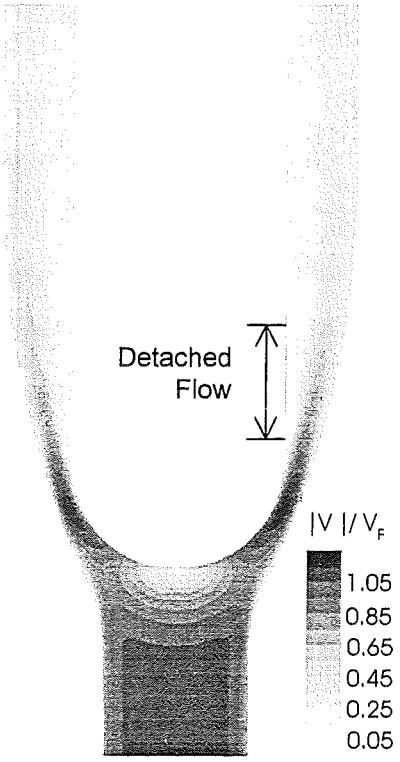


Figure 8: FLUTAN results. Field of the modulus of velocity for Re = $9x10^5$

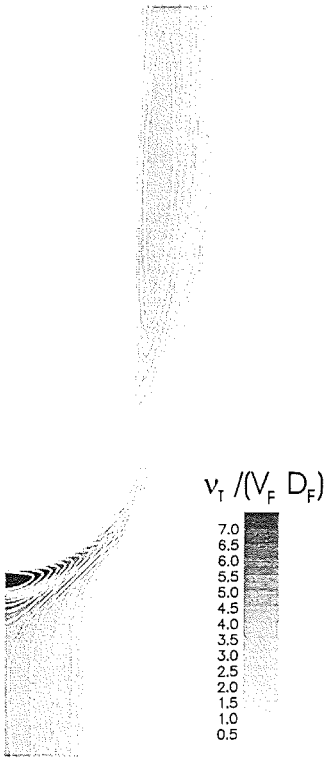


Figure 9 FLUTAN results. Field of the turbulence viscosity for Re = $9x10^5$

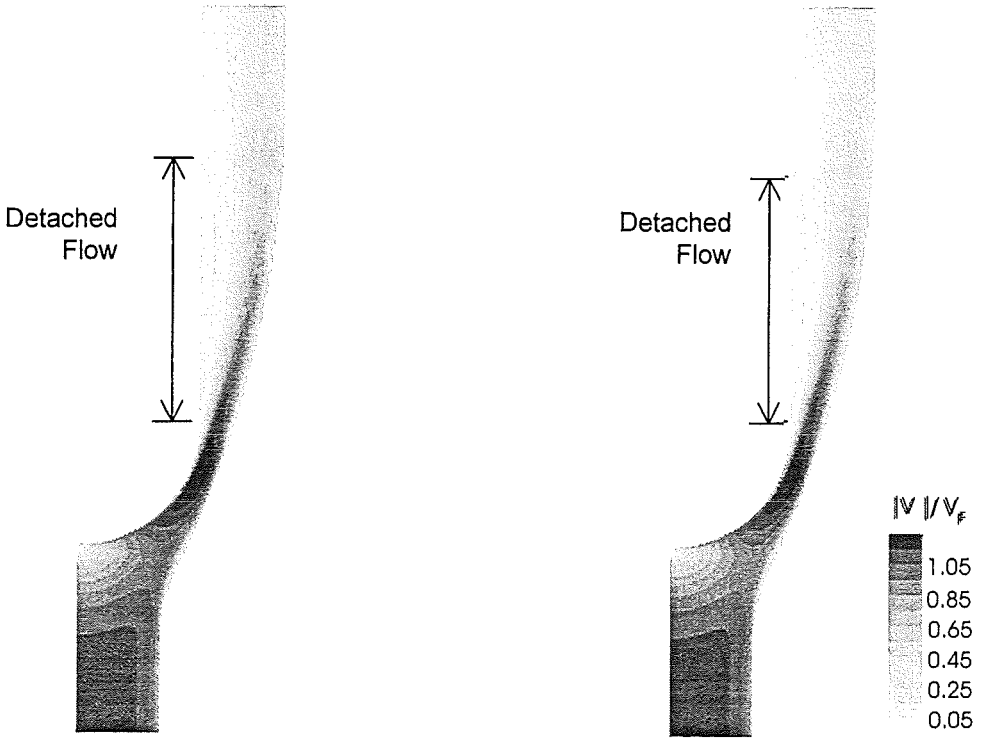


Figure 10: FLUTAN Results. Fields of the modulus of the velocity calculated with QUICK scheme (left) and LECUSSO scheme (right)

Calculations with discretisation methods of second order like QUICK and LECUSSO for the momentum equations were likewise performed with the same numerical grid. Using the QUICK method, a very low value of the time step must be used, Δt=0.0002. Otherwise, wrong results could be obtained. The comparison of the fields of the modulus of velocity between three calculations using first order Upwind, QUICK, and LECUSSO shows that the extension of the detached flow depends also on the discretisation scheme (figures 8 and 10). However, no qualitative influence from the discretisation method is seen when adequate iteration parameters are used. This means, all three calculations show a flow detachment on the inner wall.

The mean velocity profiles calculated with the first order upwind scheme at sections 1-9 are shown on figure 11. The locations of the sections are specified in figure 12. A typical turbulent velocity profile is simulated inside the funnel (section 1); the influence of the stagnation point can be seen at section 2 by the relative minimum of the profile at the axis, and at section 3 by the axial decrease of the velocity in the flow direction; the negative values of the velocity at section 7 mark the flow detachment at the inner wall.

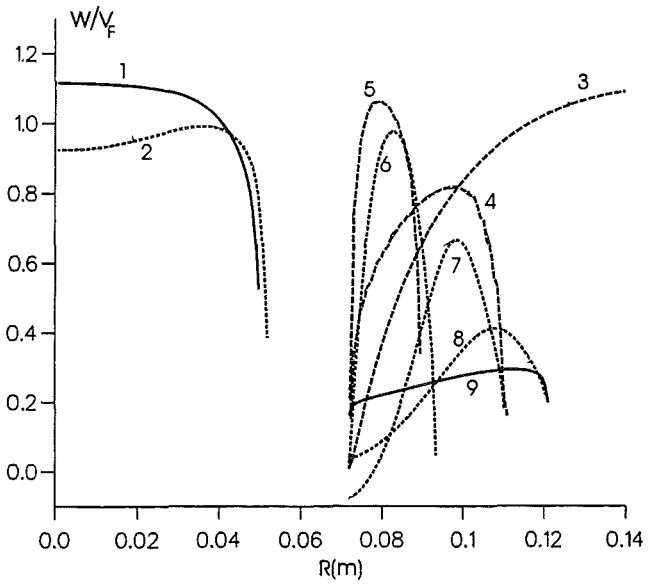
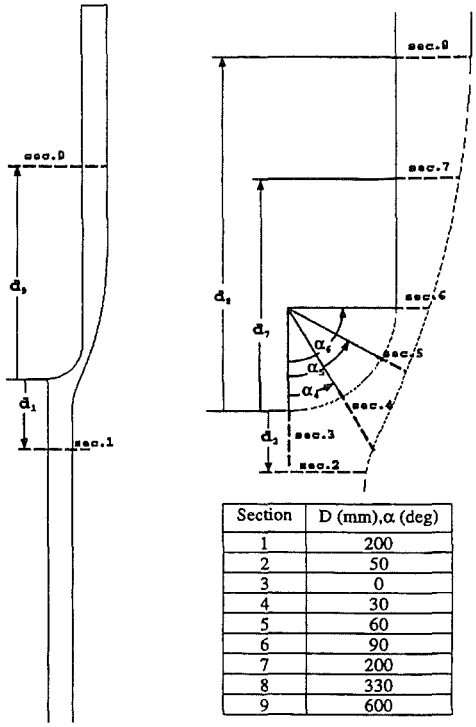


Figure 11: FLUTAN results: Vertical mean velocity at sections 1-9 for Re = $9x10^5$.



Section	D (mm),α (deg)
1	200
2	50
3	0
4	30
5	60
6	90
7	200
8	330
9	600

Figure 12: Positions of the probe sections for the presentation of results.

The calculated profiles of k and ε are shown on figures 13 and 14. The distributions of k and ε inside the connector (section 4 and 5) are asymmetric; higher values of k and ε are calculated near the inner wall. Due to the detachment, an increase of the production of k is simulated at section 7.

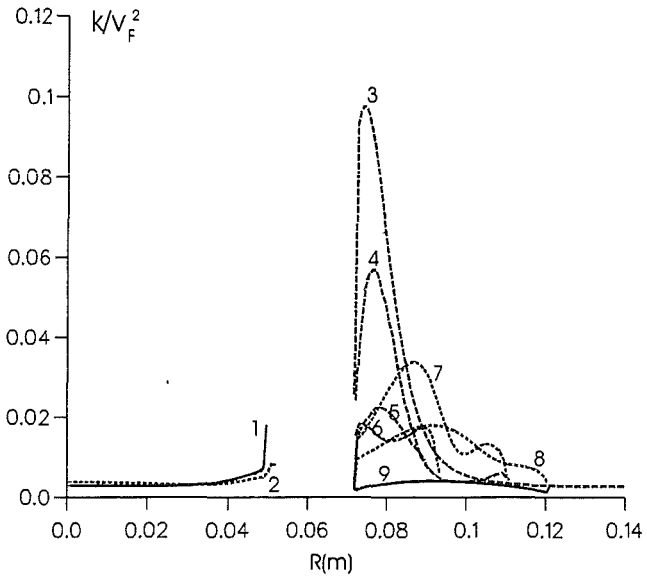


Figure 13: FLUTAN results: Turbulent kinetic energy at sections 1-9 for Re=9x10^5.

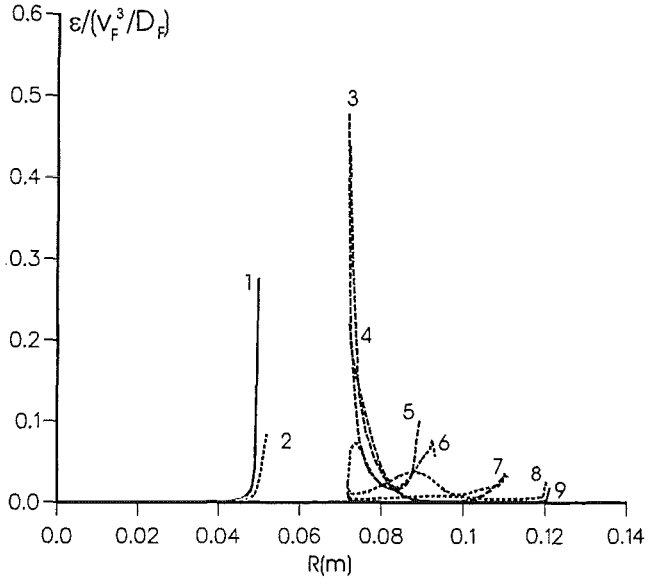


Figure 14: FLUTAN results: Dissipation rate of k at sections 1-9 for Re=9x10^5.

3.5 Conclusions

FLUTAN calculations were performed for the COULI-benchmark. This benchmark was proposed in order to test the turbulence models of different CFD codes for an isothermal flow in an ADS target geometry which will be experimentally simulated in the COULI and KALLA experiments. Preliminary calculations were performed by CRS4 with Star-CD and by Forschungszentrum Karlsruhe with CFX and FLUTAN.
FLUTAN calculations, which were performed using the standard k-ε model, simulate a flow detachment at the inner wall downstream of the beam window. The reliability of this result is doubtful because the standard k-ε model uses the universal wall functions for the velocity which are not valid in the surrounding of the stagnation point and in the detachment area.

Turbulence models without universal wall functions must be used for this case. Calculations for the smaller Reynolds number with a k-ε model, which contains functions and extra terms in the transport equations for k and ε developed by Nagano, were also performed with FLUTAN. The calculated field of the modulus of velocity shows a clear reduction of the size of the detachment area at the inner wall (figure 15). At the outer wall the area with small velocities increased, so that there may be a tendency to develop also a detached flow at the outer wall. However, this result is not representative for a reliable analysis because the numerical grid is too course for this kind of turbulence models.

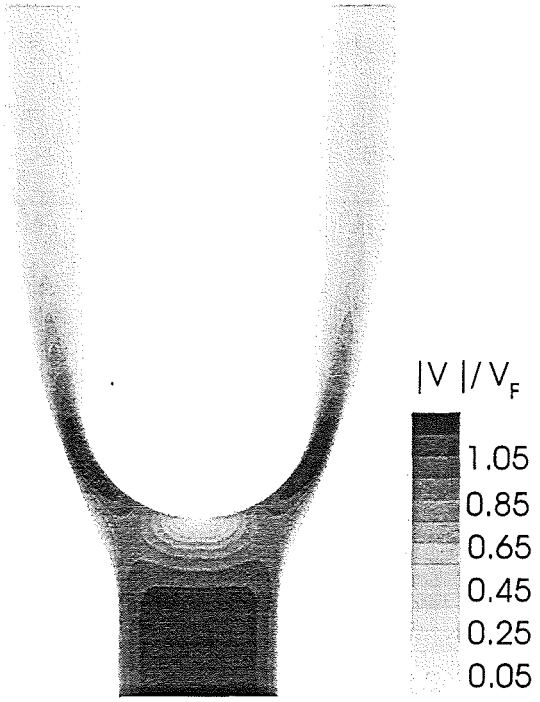


Figure 15: FLUTAN results with k-ε model for low Reynolds numbers. Field of the modulus of the velocity for Re = $2x10^4$.

Two other benchmark participants, CRS4 and IKET (cf. 32.23.05), presenting their results at the benchmark discussion at Karlsruhe in October 99 found different results using different codes. The calculations performed by CRS4 with Star-CD using a two layer turbulence model show a flow detachment at the outer wall downstream of the beam window. The calculations were performed with the QUICK scheme for the momentum equations and with a first order upwind scheme for the

turbulence equations. The calculations performed with CFX predict a recirculation in the external part of the connector when an RNG k-ε model is used.
Presently, no computer code participating in the COULI benchmark can reliably predict the location and the extension of the flow detachment at least with the used models. Therefore, already without heat transport a complex interaction turns out between physical models and numerics in the simulation of flows which are typical for ADS applications and which will be experimentally investigated in KALLA, so that an extremely careful modeling is necessary. A final conclusion on the quality of the numerical results can only be based on the experiments to come.

4. KARLSRUHE LEAD LABORATORY KALLA

At the Forschungszentrum Karlsruhe the KArlsruhe Lead LAboratory KALLA is being planned and constructed. A sketch of KALLA is given in figure 16. KALLA comprises three different experimental loops, each emphasizing on different specific objectives, briefly summarized in table 2 together with the main data.

The *Technology Loop* concentrates on fundamental lead-bismuth technologies, e.g. the establishment of an oxygen measurement and control technique, the most important prerequisite to safely operate a Pb or Pb-Bi loop. Thermalhydraulic measurement techniques are adapted to or specially developed for Pb and Pb-Bi (temperature: thermocouples and PT100-thermometers; pressure: pressure gauges with coupling fluid; velocity: miniature permanent magnet flowmeter probe, ultrasonic Doppler technique; wall heat flux: heat emitting temperature sensing surface). Basic heat transfer and turbulence experiments will be performed. In addition, high performance inconel coil heaters are developped.
State by December 1999: The Technology Loop is erected. Commissioning tests will start in early 2000.

The *Thermalhydraulic Loop*, first, is designed for single-effect investigations of the thermally highly-loaded beam window and the heat removal from a complete closed

target module. Furtheron, detailed experiments can be done for a fuel element and a steam generator. Second, integral real-height investigations into the heat removal from the blanket and spallation target under normal and decay heat removal conditions can be performed. The piping and instrumentation plan is given in figure 17.
State by December 1999: The detailed CAD design is finished; manufacturing, assembling and commissioning will be in 2000.

The *Corrosion Loop* allows for fundamental investigations of corrosion mechanisms of low-activation steels and structural materials, the formation and the stability of protection layers and the performance of mechanical tests. The final aim is the development of a structure and a beam window material that can withstand corrosion. The piping and instrumentation plan is given in figure 18.
State by December 1999: The detailed CAD design is finished; manufacturing, assembling and commissioning will be in 2000.

The automization scheme of KALLA, e.g. control and monitoring processes, safety instrumentation, data acquisition, is based on Siemens S5 technology and National Instruments BridgeView and LabView architecture.

The KALLA Homepage is http: //www.kalla.fzk.de.

Parallel to the lead-bismuth experiments in KALLA, model experiments with water as fluid are performed in the test facility HYTAS (HYdraulic behaviour in spallation TArget Systems), cf. 32.23.05. HYTAS allows for hydraulic and heated experiments in various lucid test sections, the measurement techniques being a 4-beam 2-component fiber optical Laser Doppler Anemometry (LDA) and Laser light sheet for the velocity field and thermocouples and shadow graph for temperature. The application of particle image velocimetry (PIV) is envisaged.

Table 2: KArlsruhe Lead LAboratory KALLA: Investigations.

Technology Loop	Thermalhydraulic Loop	Corrosion Loop
	Single-effect investigations:	Corrosion mechanisms
Oxygen measurement	Beam window	Protection layers
Oxygen control	Closed Target module	Mechanical tests
Measurement techniques	Fuel element	
Heat transfer	Steam generator	
Turbulence	Heat exchanger	
High-performance heaters	*Integral investigations:*	
	Heat removal	
	Decay heat removal	
Fluid volume: 0.1 m³	Fluid volume: 0.5 - 4.0 m³	Fluid volume: 0.1 m³
Temperature: max 550°C	Temperatur: max 550°C	Temperature: max 550°C
	Power: 0.3 - 4.0 MW	
Flow rate: max 5 m³/h	Flow rate: max 100 m³/h	Flow rate: max 3.5 m³/h

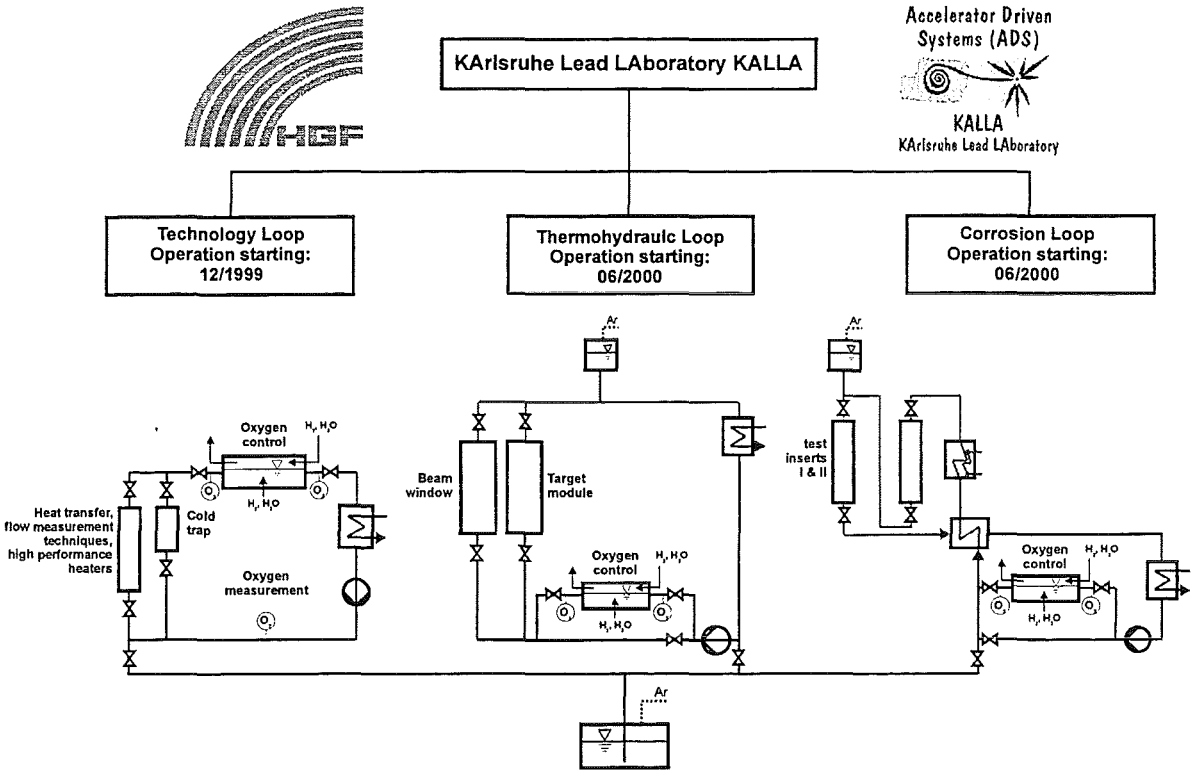


Figure 16: KArlsruhe Lead LAboratory KALLA: Sketch of the loops.

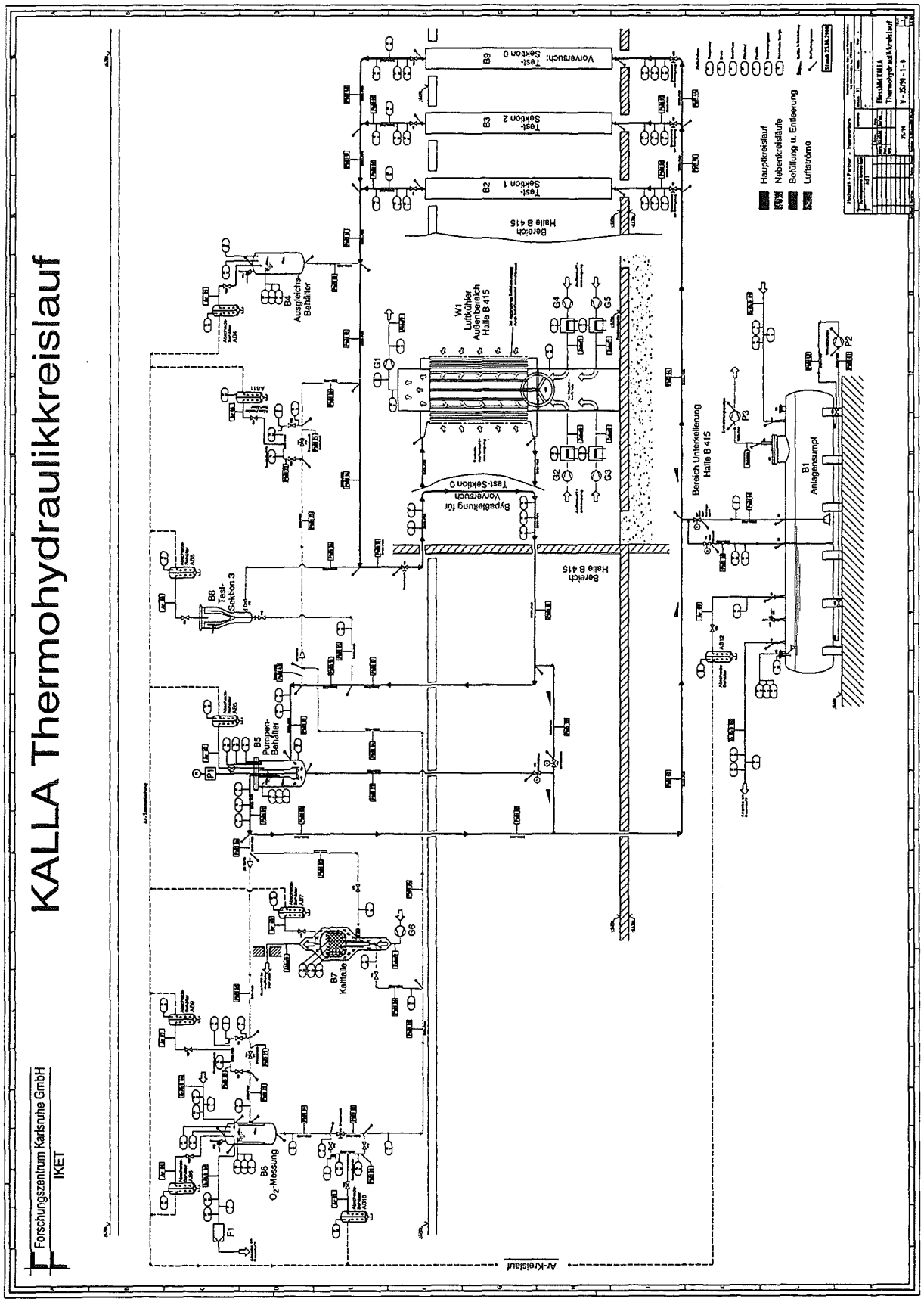


Figure 17: Piping and instrumentation plan of the Thermohydraulic Loop of KALLA.

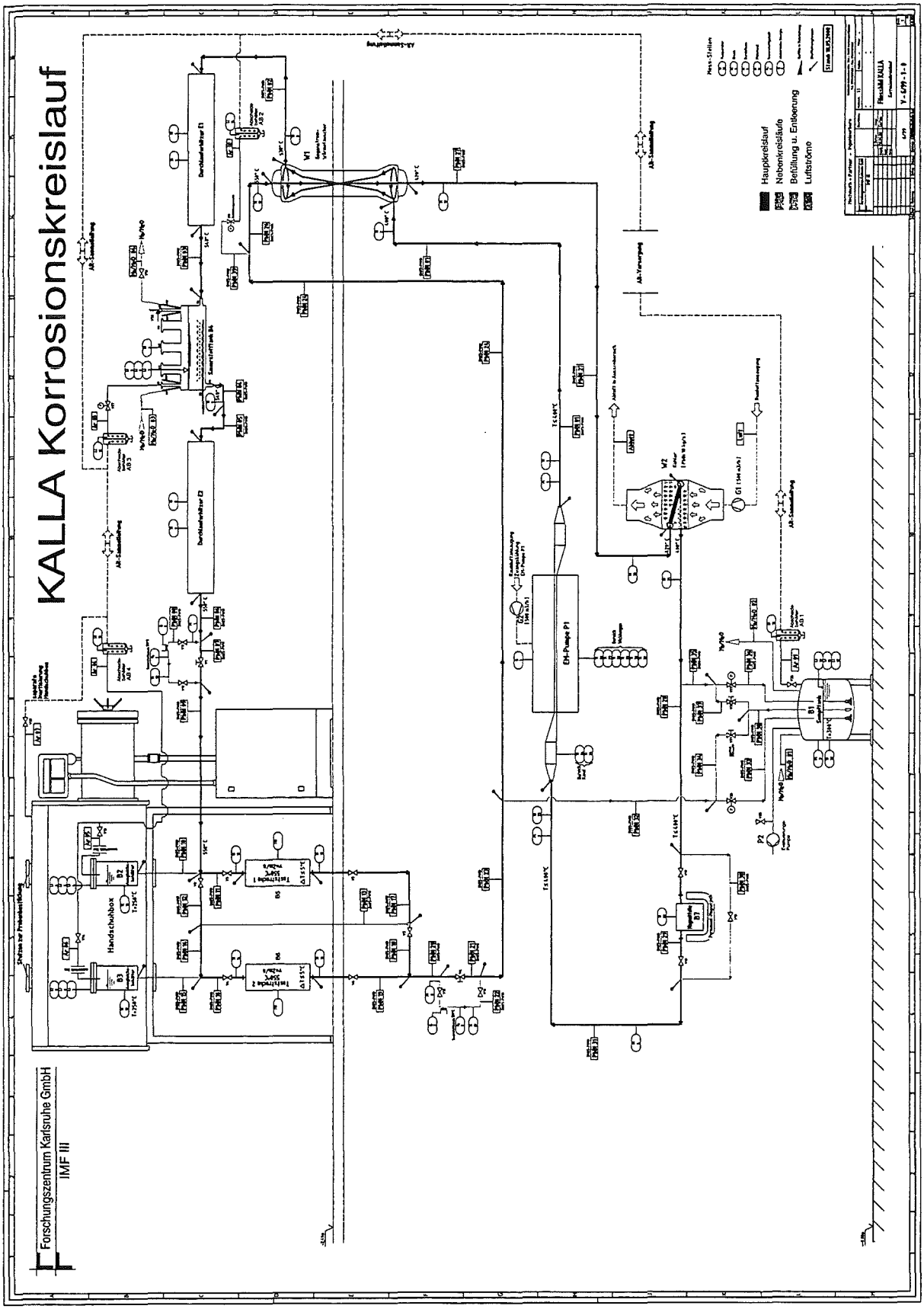


Figure 18: Piping and instrumentation plan of the Corrosion Loop of KALLA.

4. FUTURE ACTIVITIES

The future activities are given according to the sub-projects, work packages and milestones of the project plan, [25].

- Sub-Project 1: Thermalhydraulic Investigations of Thin-Walled and Highly Thermally-Loaded Surfaces with Lead-Bismuth as Coolant
  - ° Work Package 1: Design of a Beam Window Based on Numerical Simulations and Model Experiments with Water as Fluid
  - ° Work Package 2: Fundamental Experiments in Liquid Lead-Bismuth on Heat Transfer and Model Development / Model Validation
  - ° Work Package 3: Simulation Experiments for the Optimized Beam Window in Lead-Bismuth and Numerical Simulation

- Sub-Project 2: Investigation of Corrosion of metals in Flowing Lead-Bismuth
  - ° Work Package 1: Investigation of the Corrosion and Erosion of Structure and Window Materials in Flowing Lead-Bismuth
  - ° Work Package 2: Improvement of the Corrosion Resistivity using Surface Protection
  - ° Work Package 3: Surface Modification using the Pulsed Electron Beam Facility (GESA)

- Sub-Project 3: Oxygen Measurement and Oxygen Control in Lead-Bismuth
  - ° Work Package 1: Oxygen measurement in flowing lead-bismuth
  - ° Work Package 2: Oxygen control in flowing lead-bismuth

The result of this project enables Forschungszentrum Karlsruhe to design, construct and operate the Karlsruhe 4 MW Spallation Target (cf. 32.23.05) for integral thermal-hydraulic investigations of the steady-state and transient behaviour of a 1:1 scaled spallation target together with the heat removal chain.

REFERENCES

[1] Benamati, G. , Latge, C. Knebel, J.U., Technologies for Lead Alloys, TECLA Project within the 5th Europ. Framework Prog., Ref.No. FIS5-1999-00308, 2000

[2] Salvatores, M., Bauer, G., Heusener, G., The MEGAPIE Initiative – Executive Outline and Status as per November 1999, Paul Scherrer Institut, 1999

[3] Technical Working Group, Interim Report of the TWG on ADS, Issued by the three parties (France/Italy/Spain) TWG on ADS chaired by C. Rubbia, October 12, 1998

[4] Technical Working Group, Overview of the Ongoing Activities in Europe and Recommendations of the TWG on ADS, Issued by the Enlarged TWG on ADS chaired by C. Rubbia, September 6, 1999

[5] Heusener, G., Transmutation, ein neuer Weg der Entsorgung?, VDI Berichte Nr. 1493, pp. 187-201, 1999

[6] Heusener, G., Transmutation – ein alternativer Weg der Entsorgung?, Vortrag Informationskreis Kernenergie, Bonn, 21.03.2000

[7] C.D. Bowman et al., Nuclear Energy Generation And Waste Transmutation Using an Accelerator-Driven Intense Thermal Neutron Source, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A320, pp. 336-367, 1992

[8] H. Wider, Safety of acclerator-driven nuclear waste burners, Proc. of the Jahrestagung Kerntechnik'98, München, pp.217-220, 1998

[9] W. Maschek, D. Thiem, G. Heusener, Safety assessment of a reactor core dedicated to burn minor actinides, Proc. of the Jahrestagung Kerntechnik'99, Karlsruhe, pp.635-638, 1999

[10] G. Heusener, M. Salvatores, Use of heavy liquid metal: A perspective for critical/subcritical fast neutron concepts, HLMC'98, 5-9 October, Obninsk, Russia, 1998

[11] 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, CERN/AT/93-47 (ET), Nov. 1, 1993

[12] C. Rubbia, Rubio, J.A., Buono, S., Carminati, F., Fiétier, F., Galvez, J., Gelès, C., Kadi, Y., Klapisch, R., Mandrillon, P., Revol, J.P., Roche, Ch., Conceptual design of a fast neutron operated high power energy emplifier, CERN/AT/95-44(ET), September 1995

[13] T. Takizuka, et al., Heavy liquid-metal cooling option of JAERI accelerator-driven transmutation systems, HLMC'98, October 5-9, Obninsk, Russia, 1998

[14] United States Department of Energy, A Roadmap for Developing Accelerator Transmutation of Waste (ATW) Technology, A Report to Congress, DOE/RW-0519, October 1999

[15] Evaluierungskommission, Nukleare Sicherheits- und Endlagerforschung in Deutschland, Bericht der vom BMWi berufenen Arbeitsgruppe (Evaluierungskommission), 2000

[16] Hansen, M., Constellation of Binary Alloys, Metallurgy and Metallurgical Engineering Series, 2nd Edition, McGraw-Hill Book Company, p. 1065, 1958

[17] Orlov, Y., Stages of Development of Lead-Bismuth as a Coolant for Nuclear Reactors in Russia, Presentation at Forschungszentrum Karlsruhe, IATF, July 7, 1998

[18] Markov, V. Personal comm., Seminar on Lead Cooled Fast Reactors, Cadarache, 22-23 Sept. 1997

[19] Müller, G., Schumacher, G. Application of GESA for Improvement of Corrosion Resistance of Steel in Liquid Lead., in "Physics of Intense Light Ion Beams, Production of High Energy Density in Matter, and Pulsed Power Applications.",Edt. H.-J.Bluhm, FZKA Rep. 6206, Annual Report 1998

[20] Lefhalm, C.H., Mack, K.J., Knebel, J.U., Investigations into ADS at FZK within the HGF-Strategy Fund Project 99/16: Reduction of Radiotoxicity, Jahrestagung Kerntechnik 2000 Bonn, pp. 567-572, 2000

[21] J.U. Knebel, X. Cheng, G. Janssens-Maenhout, K. Mack, H. Neitzel, J. Konys, H. Glasbrenner, G. Grötzbach, L.N. Carteciano, G. Müller, G. Schumacher, HGF-Strategiefonds-Projekt: Thermohydraulische und materialspezifische Untersuchungen zur Realisierung einer beschleunigergetriebenen Anordnung (ADS) zur Transmutation von Aktiniden, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6300, Sept. 1999, pp. 644 – 657

[22] G. Grötzbach, L. Carteciano, M. Wörner, A. Blahak, B. Dorr, S. Mitran, W. Olbrich, W. Sabisch, M. Alef, E. Aronskaia, U. Gentner, St. Genz, N. Lehmann, A. Müller, D. Seldner, X. Jin, Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen, Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, Jahresbericht 1998, Forschungszentrum Karlsruhe FZKA 6300, Sept.1999, pp.491–506

[23] Wörner, M., Direkte Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard Konvektion in flüssigem Natrium, Dissertation, Univ. Karlsruhe, KfK 5228, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1994

[24] G. Willerding, W. Baumann, FLUTAN 2.0 Input Specifications, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5712, Mai 1996

[25] Knebel, J.U., Innovative Technology to Reduce Radiotoxicity, HGF Strategy Fund Project 99/16, funded by Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), Förderkennzeichen 01SF9926/3, 1999

Veröffentlichte Berichte

ABERLE, J.; CHERDRON, W.; GRÖTZBACH, G.; HEINZEL, V.; PHILIPP, P.; SAUTER, H.; SENGPIEL, W.; SIMON, M.; TISEANU, I.
Experimentelle Untersuchungen von Wechselwirkungsmechanismen und Phasentransportprozessen in Zweiphasenströmungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.507-16 (46141)

ADELHELM, C.
The determination of corrosion products and oxygen in PbBi.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.229-46 (46655)

ALBRECHT, G.; BRÜGGEMANN, H.; HUBER, F.; RAUPP, D.; SCHÜTZ, W.
Untersuchungen zum EPR-Konzept. KAJET-Versuche.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.281-85 (46125)

ALBRECHT, G.; JENES, E.; KAISER, A.; SCHÜTZ, W.
KAJET experiments on pressurized melt jets with view to their interaction with substratum materials.
Proc.of the 9th Internat.Topical Conf. on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9), San Francisco, Calif., October 3-8, 1999
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Society, 1999
CD-ROM (46275)

ALSMEYER, H.; ALBRECHT, G.; FIEG, G.; STEGMAIER, U.; WERLE, H.
Simulationstests mit Eisen- und Hochtemperaturschmelzen (Projekte KAJET, KAPOOL, KATS, COMET).
Jahrestagung Kerntechnik '99, Fachsitzung 'Maßnahmen zur Beherrschung von Kernschmelze im Sicherheitsbehälter' Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1999 S.53-74 (45467)

ALSMEYER, H.; BÜRGER, M.; TROMM, W.; WIDMANN, W.
Corium cooling by bottom flooding: confirmation of the COMET concept.
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.256-64
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (46625)

ALSMEYER, H.; CRON, T.; SCHMIDT-STIEFEL, S.; SCHNEIDER, H.; TROMM, W.; WENZ, T.; 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 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.237-60 (46123)

ALSMEYER, H.; TROMM, W.
The COMET concept for cooling core melts: evaluation of the experimental studies and use in the EPR.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6186 (Oktober 99)
EXV-CSC(99)-D036
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6186.htm (46083)

ARONSKAIA, E.; CARTECIANO, L.; DAGAN, R.; DORR, B.; GRÖTZBACH, G.; PFRANG, W.; SCHIKORR, M.; SCHMIDT, P.; STRUWE, D.; ZIMMERER, W.
Auslegungsorientierte Analysen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.688-90 (46158)

BAUMANN, W.
Effects of oversized jet flow areas in GASFLOW analyses. Investigations of Canadian gas mixing tests.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.41-47 (46111)

BAUMANN, W.; CARTECIANO, L.; DORR, B.; GRÖTZBACH, G.
Validierung des k-ε-σ_t Turbulenzmodells im 3D Thermohydraulik-Code Flutan 3.0 an Turbulenzmessdaten.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6395 (Dezember 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6395.htm (46611)

BEJAN, A.; DAN, N.; CACUCI, D.G.; SCHÜTZ, W.
Energy analysis of energy conversion during the thermal interaction between hot particles and water.
Energy, 23(1999) S.913-28 (45800)

BENAMATI, G.; LATGE, C.; KNEBEL, J.
Technologies, materials, thermalhydraulics for lead alloys based ADS reactor.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.219-28 (46654)

BENZ, G.; EHRHARDT, J.; FISCHER, F.; HALLER, CH.; HASEMANN, I.; HESSELSCHWERDT, E.; LORENZ, A.; PÄSLER-SAUER, J.; RAFAT, M.; RASKOB, W.; SCHICHTEL, T.; SCHÜLE, O.; STEINHAUER, C.
Entwicklung von Methoden zur Abschätzung und Minimierung der radiologischen Folgen von Reaktorunfällen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.475-82 (46138)

BIELERT, U.; BREITUNG, W.
Ignition of hydrogen-steam-air mixtures under severe accident conditions.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.159-62 (45473)

BIELERT, U.; BURGETH, B.; REDLINGER, R.
Implementation of a parallel AMR algorithm.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.113-33 (46115)

BIELERT, U.; KOTCHOURKO, A.; VESER, A.; BREITUNG, W.; ROYL, P.; SCHOLTYSSEK, W.; WILKENING, H.; HULD, T.; EDLINGER, B.; PORUBA, C.; EDER, A.; MAYINGER, F.; MOVAHED, M.; DABBENE, F.; STUDER, E.
Multi-dimensional simulation of hydrogen distribution and combustion in severe accident.
FI4S-CT-95-0001 (October 99) (46727)

BLANCHAT, T.K.; PILCH, M.M.; LEE, R.Y.; MEYER, L.; PETIT, M.
Direct containment heating experiments at low reactor coolant system pressure in the Surtsey test facility.
NUREG/CR-5746 (July 99)
SAND99-1634 (46455)

BOTTONI, M.; TRAVIS, J.R.; ROYL, P.
Development and application of a dynamic film model for spherical PWR containments under hypothetical accident conditions.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.7-27 (46109)

BREITUNG, W.
Summary of EPR analyses.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.134-49 (46116)

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.B.
Summary of DDT criteria for nuclear power plant analysis.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.185-90 (45476)

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.
Flame acceleration criterion.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.48-53 (46112)

BREITUNG, W.; VESER, A.
Flame acceleration and DDT in obstacle arrays.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.54-103 (46113)

BROEDERS, C.H.M.
A comparison of some neutronics characteristics of critical reactors and accelerator driven subcritical systems.
Actinide and Fission Product Partitioning and Transmutation : Proc.of the 5th Internat.Information Exchange Meeting, Mol, B, November 25-27, 1998
Paris : OECD, 1999 S.343-53
EUR-18898-EN (45631)

BROEDERS, C.; BROEDERS, I.
Calculations of the energy deposition in the target of an ADS.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.663-72 (46156)

BRÜGGEMANN, H.H.; JENES, E.; KAISER, A.; KORNELSON, I.; PROTHMANN, N.; RAUPP, D.; SCHÜTZ, W.; WILL, H.
Experimente zur Vorvermischungsphase (PREMIX).
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.159-71 (46118)

BUCKEL, G.; HESSELSCHWERDT, E.; KIEFHABER, E.; KLEINHEINS, S.; MASCHEK, W.
A new SIMMER-III version with improved neutronics solution algorithms.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6290 (Juni 99) (45438)

BUCKEL, G.; HESSELSCHWERDT, E.; KIEFHABER, E.; KLEINHEINS, S.; MASCHEK, W.
Test calculations for the validation and verification of the newly developed SIMMER-III neutronics module.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.574-93 (46149)

BUNK, M.
Spreading with basal solidification.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6197 (März 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6197.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6197.pdf (45209)

BUNK, M.
Modellierung zur Ausbreitung von Schmelzen bei gleichzeitiger Erstarrung.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6365 (Oktober 99)
Dissertation, Universität Karlsruhe 1999
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6365.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6365.pdf (46223)

BUNK, M.; EHRHARD, P.
Theoretische Beschreibung der Ausbreitung und Erstarrung viskoser Schmelzen.
GAMM-Jahrestagung, Regensburg, 24.-27.März 1997
Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 78(1998) Suppl.1, S.S317-S318 (40985)

CACUCI, D.G.
The role of mathematics, computations and simulations in nuclear and environmental applications.
Aragones, J.M. [Hrsg.]
Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications : Internat.Conf., Madrid, E, September 27-30, 1999
Proc.Vol.1 S.9-14
Madrid : Senda Editorial, 1999 (46420)

CACUCI, D.G.; IONESCU-BUJOR, M.; FINNEMANN, H.; DEPISCH, F.
Adjoint sensitivity analysis of coupled thermal-hydraulics/Neutron-kinetics codes: the RELAP5/PANBOX/COBRA system.
Aragones, J.M. [Hrsg.]
Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications : Internat.Conf., Madrid, E, September 27-30, 1999
Proc.Vol.1 S.503-12
Madrid : Senda Editorial, 1999 (46421)

CARTECIANO, L.N.; DORR, B.; GRÖTZBACH, G.
Theoretical interpretation of the single phase sump cooling experiments SUCOS with the FLUTAN code.
Proc.of the 9th Internat.Topical Conf. on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9), San Francisco, Calif., October 3-8, 1999
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Society, 1999
CD-ROM (46274)

CARTECIANO, L.N.; WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.
Erweiterte Turbulenzmodelle für technische Anwendung von Flutan auf Naturkonvektion.
Jahrestagung Kerntechnik 99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.129-33 (45468)

CHENG, X.; BAZIN, P.; CORNET, P.; HITTNER, D.; JACKSON, J.D.; LOPEZ JIMENEZ, J.; NAVIGLIO, A.; ORIOLO, F.; PETZOLD, H.
Experimental data base for containment thermalhydraulic analysis.
Proc.of the 9th Internat.Topical Conf. on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9), San Francisco, Calif., October 3-8, 1999
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Society, 1999
CD-ROM (46106)

CHENG, X.; BAZIN, P.; CORNET, P.; HITTNER, D.; JACKSON, J.D.; LOPEZ-JIMENEZ, J.; NAVIGLIO, A.; ORIOLO, F.; PLANK, H.
Common experimental data base for the development of physical models and correlations for thermal-hyraulic containment analysis (DABASCO).
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.383-91
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (46700)

CHENG, X.; KNEBEL, J.U.; CARTECIANO, L.
Numerical investigations on ADS thermalhydraulics.
Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Thermal-Hydraulics, Brasimone, I, April 12-13, 1999
ENEA, 1999 S.277-308 (45755)

CHENG, X.; KNEBEL, J.U.; HOFMANN, F.
Thermalhydraulic design of an ADS with three spallation targets.
Proc.of the 3rd Internat.Conf.on Accelerator Driven Transmutation Technologies and Applications (ADTTA'99), Praha, CZ, June 7-11, 1999 CD-ROM
Book of Abstracts S.11 (45600)

CHENG, X.; MÜLLER, U.
Critical heat flux and turbulent mixing in hexagonal tight rod bundles.
International Journal of Multiphase Flow, 24(1998) S.1245-63 (45058)

CHENG, X.; MÜLLER, U.
Turbulent natural convection coupled with thermal radiation in large flow channel.
Tien, C.L. [Hrsg.]
Proc.of the 1st Internat.Conf.on Engineering Thermophysics (ICET'99), Beijing, China, August 18-21, 1999
Bejing : Internat.Academic Publishers, 1999
S.552-59 (46162)

CHENG, X.; NEITZEL, H.J.; SCHMIDT, H.; KNEBEL, J.U.
PASCO-Programm.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.317-22 (46129)

COGNET, G.; ALSMEYER, H.; TROMM, W.; MAGALLON, D.; WITTMAACK, R.; SEHGAL, B.R.; WIDMANN, W.; DE CECCO, L.; OCELLI, R.; AZARIN, G.; PINEAU, D.; SPINDLER, B.; FIEG, G.; WERLE, H.; JOURNEAU, C.; CRANGA, M.; LAFFONT, G.
Corium spreading and coolability (CSC project).
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.247-55
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (45871)

DAN, N.; BEJAN, A.; CACUCI, D.G.; SCHÜTZ, W.
Evolution of a mixture of hot particles, steam, and water immersed in a water pool.
Numerical Heat Transfer A, 34(1998) S.463-78 (45747)

DAUM, E.; EHRLICH, K.; FALKENSTEIN, A.; HEGER, S.; HÜBNER, R.; SCHIRRA, M.
Untersuchungen an austenitischen Stählen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.517-23 (46142)

DOLENSKY, B.; GÖLLER, B.; HAILFINGER, G.; JONATZKE, O.; JORDAN, J.; KORNELSON, I.; KRIEG, R.; LANG, K.H.; MALMBERG, T.; MESSEMER, G.; STRATMANNS, E.; VORBERG, G.
Mechanische Auswirkungen auf den Reaktordruckbehälter.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.323-38 (46130)

DOROFEEV, S.B.; KUZNETSOV, M.S.; ALEKSEEV, V.I.; EFIMENKO, A.A.; BEZMELNITSYN, A.V.; YANKIN, YU.G.; BREITUNG, W.
Effect of scale and mixture properties on behaviour of turbulent flames in obstructed areas.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6268 (April 99)
IAE-6167/3 (45333)

DOROFEEV, S.B.; KUZNETSOV, M.S.; ALEKSEEV, V.I.; EFIMENKO, A.A.; BEZMELNITSYN, A.V.; YANKIN, YU.G.; BREITUNG, W.
Effects of scale and mixture properties on behavior of turbulent flames in obstructed areas.
17th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Heidelberg, July 25-30, 1999
Heidelberg : Universität Heidelberg, 1999
CD-ROM (46692)

DOROFEEV, S.B.; KUZNETSOV, M.S.; ALEKSEEV, V.I.; EFIMENKO, A.A.; BREITUNG, W.
Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6349 (Dezember 99) (46824)

EGLIN, W.; KRUGMANN, U.; WEISSHÄUPTL, H.A.; SCHOLTYSSEK, W.
Assessment of the severe accident mitigation features of the European pressurized water reactor by cooperative research and development.
Nuclear Technology, 126(1999) S.143-52 (46752)

ENGEL, G.; FELLMOSER, F.; FIEG, G.; MASSIER, H.; WERLE, H.; PROTHMANN, N.; RAUPP, D.; SCHÜTZ, W.; STEGMAIER, U.; FOIT, J.; STERN, G.; VESER, A.
Investigations for the EPR concept. KAPOOL- and KATS-experiments.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.261-80 (46124)

FELLMOSER, F.; ENGEL, G.; FIEG, G.; MASSIER, H.; WERLE, H.
Simulationsexperimente zum Verhalten von Kernschmelzen in der Reaktorgrube des EPR: KAPOOL 1-5.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6212 (Mai 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6212.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6212.pdf (45495)

FIEG, G.; STEGMAIER, U.; WERLE, H.
Spreading and coolability of core melts (simulant material tests KATS).
FI4S-CT96-0041 (June 99) (46741)

FOIT, J.J.
Similarity solutions for non-isothermal spreading and CORFLOW validation.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.286-98 (46126)

FOIT, J.J.; VESER, A.
Similarity solutions for non-isothermal spreading. KATS experiments and CORFLOW results.
ICONE-7 : Proc.of the 7th Internat.Conf. on Nuclear Engineering, Tokyo, J, April 19-23, 1999
Tokyo : JSME, 1999 CD-ROM (45172)

FOIT, J.J.; VESER, A.
Similarity solutions, KATS experiments and CORFLOW results.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6260 (April 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6260.htm (45355)

FRENCH, S.; EHRHARDT, J.; LOCHARD, J.; MORREY, M.; SINKKO, K.; SOHIER, A.
What sort of support is needed in nuclear emergency management?
Despotis, D.K. [Hrsg.]
Integrating Technology and Human Decisions : Global Bridges into the 21st Century ; Proc.of the 5th Internat.Conf.of the Decision Sciences Institute, Athinai, GR, July 4-7, 1999 Vol. 1 S.443-47
Athinai : New Technologies Publ., 1999
(45623)

FRENCH, S.; PAPAMICHAIL, N.; EHRHARDT, J.; BARTZIS, J.
RODOS: decision support for nuclear emergencies. A demonstration.
Despotis, D.K. [Hrsg.]
Integrating Technology and Human Decision : Global Bridges into the 21st Century ; Proc.of the 5th Internat.Conf.of the Decision Sciences Institute, Athinai, GR, July 4-7, 1999 Vol. 1 S.434-38
Athinai : New Technologies Publ., 1999
(45757)

GEIST, A.; NITSCH, W.; KIM, J.I.
On the kinetics of rare-earth extraction into D2EHPA.
Chemical Engineering Science, 54(1999) S.1903-07 (45617)

GELFAND, B.E.; KHOMIK, S.V.; MEDVEDEV, S.P.; POLENOV, A.N.; BARTENEV, A.M.; BREITUNG, W.; VESER, A.
Investigation of H_2 + air fast flame propagation and DDT in a tube with multi-dimensional endplates.
Roy, G. [Hrsg.]
Gaseous and Heterogeneous Detonations : Science to Applications ; Papers from an Internat.Colloquium on Advances in Experimentation and Computation of Detonations, St.Petersburg, Russia, September 14-17, 1998
Moscow : ENAS Publ., 1999 S.213-24 (46645)

GLASBRENNER, H.; KONYS, J.; VOSS, Z.; WEDEMEYER, O.
Flüssigmetallkorrosion.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.658-62 (46155)

GLASBRENNER, H.; KONYS, J.; VOSS, Z.; WEDEMEYER, O.
Behaviour of different ferritic steels in stagnant Pb at 600°C.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.43-65 (46651)

GLASBRENNER, H.; MÜLLER, G.; RUSANOV, A.
Corrosion investigations of steels in flowing lead at 400 and 550°C.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.67-89 (46652)

GRÖTZBACH, G.; CARTECIANO, L.; DORR, B.
Analyse der einphasigen Langzeitkühlung des Sumpfes mit dem Rechenprogramm FLUTAN.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.309-16 (46128)

GRÖTZBACH, G.; CARTECIANO, L.; WÖRNER, M.; BLAHAK, A.; DORR, B.; MITRAN, S.; OLBRICH, W.; SABISCH, W.; ALEF, M.; ARONSKAIA, E.; DUNKER, T.; GENTNER, U.; GENZ, ST.; LEHMANN, N.; MÜLLER, A.; SELDNER, D.; JIN, X.
Entwicklung von Thermofluiddynamikprogrammen und ingenieurtechnische Anwendungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.491-506 (46140)

GRÖTZBACH, G.; WÖRNER, M.
Direct numerical and large eddy simulations in nuclear applications.
International Journal of Heat and Fluid Flow, 20(1999) S.222-40 (45708)

HARTNAGEL, M.; KIRSTAHLER, M.; MEYER, L.; ROTH, A.; SCHWALL, M.; WACHTER, E.; WÖRNER, G.; BLANCHAT, T.
Experimente zur Dispersion von Corium.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.206-19 (46121)

HAYWARD, P.J.; HOFMANN, P.; STUCKERT, J.; VESHCHUNOV, M.S.; BERDYSHEV, A.V.
UO_2 Dissolution by molten Zircaloy. New experimental results and modelling.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6379 (Dezember 99)
INV-CIT(99)-P029
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6379.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6379.pdf (46615)

HEINZEL, A.; HUBER, R.; MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.; ZIMMERMANN, F.
Investigation on oxygen controlled liquid lead corrosion of surface treated steels.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.673-87 (46157)

HENNEGES, G.
Parameterstudien für den EPR.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300
(September 99) S.339-53 (46131)

HERING, W.
Reflood calculations for the projected
European pressurized water reactor using
SCDAP/RELAP5 mod3.1.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6299
(Dezember 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS
/6299.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Beri
chte/FZKA6299.pdf (46673)

HERING, W.; HOMANN, C.; SENGPIEL, W.;
SMIT, S.; STRUWE, D.; MESSAINGUIRAL, C.
Analysen zum Ablauf kernzerstörender Unfälle.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300
(September 99) S.434-59 (46136)

HERING, W.; HOMANN, CH.;
SANCHEZ-ESPINOZA, V.H.
Accident mitigation analyses for the EPR
using SCDAP/RELAP5.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe,
18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.267-70 (45905)

HERING, W.; SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.
Theoretische Interpretation der
experimentellen Ergebnisse.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300
(September 99) S.483-90 (46139)

HILES, R.P.; HOMANN, CH.; LINNEMANN, TH.;
HASTE, T.J.; HERING, W.; KOCH, M.K.;
UNGER, H.
Scaling studies and support for FZK bundle
quench experiments.
AEAT-4484 Issue 1 (November 1998) (44982)

HOFMANN, P.
Current knowledge on core degradation
phenomena, a review.
Journal of Nuclear Materials, 270(1999)
S.194-211 (45464)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.; NOACK, V.;
STEINBRÜCK, M.; HOMANN, C.; PLITZ, H.;
[FZKA-MITARB.]; U.A.
Investigation of core degradation (COBE).
EUR-18982-EN (1999)
INV-COBE(99)-P10 (46514)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.; NOACK, V.;
STEINBRÜCK, M.; HOMANN, C.; PLITZ, H.;
[FZKA-MITARB.]; U.A.
Investigation of core deradation (COBE).
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety,
Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.60-68
Luxembourg : Commision of the European
Communities, 1999 (46717)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.; STEINBOCK, L.;
STEINBRÜCK, M.; BERDYSHEV, A.V.;
BOLDYREV, A.V.; PALAGIN, A.V.; SHESTAK, V.E.;
VESHCHUNOV, M.S.
Quench behavior of Zircaloy fuel rod cladding
tubes. Small-scale experiments and modeling
of the quench phenomena.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6208 (März 99)
INV-COBE(98)-D018 (45210)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.;
STEINBRÜCK, M.; SCHMIDT, L.; PIEL, D.;
SEPOLD, L.; LEILING, W.
QUENCH experiments.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300
(September 99) S.382-426 (46134)

HOFMANN, P.; STEINBRÜCK, M.;
MIASSOEDOV, A.; SCHMIDT, L.; PIEL, D.;
SEPOLD, L.; LEILING, W.
Zircaloy cladding tube behavior of PWR fuel
rods during quenching from high temperatures
(QUENCH test results).
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe,
18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.259-62 (45903)

HOFMANN, P.; STUCKERT, J.; MIASSOEDOV, A.;
VESHCHUNOV, M.S.; BERDYSHEV, A.V.;
BOLDYREV, A.V.
ZrO_2 dissolution by molten zircaloy and
cladding oxide shell failure. New
experimental results and modelling.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6383
(Dezember 99)
INV-CIT(98)-P026
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS
/6383.htm (46616)

HOMANN, CH.; HERING, W.
Analytical activities for the QUENCH facility
using the mechanistic code system
SCDAP/RELAP5.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe,
18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.263-66 (45904)

HUBER, R.; KIRSTAHLER, M.; KUHN, D.;
MEYER, L.; ROTH, A.; SCHWALL, M.;
WACHTER, E.; WÖRNER, G.
Experimente zur Vorvermischungsphase (QUEOS).
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung.
Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300
(September 99) S.150-58 (46117)

HÄUSLER, O.
Anisotropes plastisches Fließen bei großen Deformationen.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6351 (September 99)
Dissertation, Universität Karlsruhe 1999
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6351.pdf (45889)

HÄUSLER, O.; TSAKMAKIS, CH.; AIFANTIS, E.C.
On anisotropic plastic flow.
Bruhns, O.T. [Hrsg.]
Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity : Proc.of the IUTAM Symp., Bochum, August 25-29, 1997
Dordrecht [u.a.] : Kluwer Acad.Publ., 1999
S.69-78 (44949)

HÜBNER, R.
Untersuchungen zur Sättigung des Volumenschwellens im austenitischen Stahl DIN 1.4864 während der Bestrahlung mit Neutronen.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6377 (Dezember 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6377.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6377.pdf (46810)

IONESCU-BUJOR, M.; CACUCI, D.G.
Adjoint sensitivity analysis of the two-fluid model in RELAP5/MOD3.2.
Aragones, J.M. [Hrsg.]
Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications : Internat.Conf., Madrid, E, September 27-30, 1999
Proc.Vol.1 S.745-54
Madrid : Senda Editorial, 1999 (46422)

JAAG, S.; KIEFHABER, E.
Improving the agreement between many-groups transport and few-groups diffusion calculations by a semi-automatic scheme for deriving adjusted diffusion coefficients.
5th CAPRA-Seminar, Karlsruhe, November 30 – December 2, 1998
Tagungsband (44559)

JAAG, S.; KIEFHABER, E.
Americium incineration - challenge in plutonium burning and minor actinide transmutation.
Global '99 : Nuclear Technology - Bridging the Millenia ; Proc.of the Internat.Conf.on Future Nuclear Systems, Jackson Hole, Wyo., August 29 - September 3, 1999
Madison, Wis. : Omnipress, 1999 CD-ROM (45624)

JAAG, S.; KIEFHABER, E.
Improving the agreement between many-groups transport and few-groups diffusion calculations by a semi-automatic scheme for deriving adjusted diffusion coefficients.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.533-42 (46145)

JACKSON, C.J.; CACUCI, D.G.; FINNEMANN, H.B.
Dimensionally adaptive neutron kinetics for multidimensional reactor safety transients.
I: New features of RELAP5/PANBOX.
Nuclear Science and Engineering, 131(1999) S.143-63 (45024)

JACKSON, C.J.; CACUCI, D.G.; FINNEMANN, H.B.
Dimensionally adaptive neutron kinetics for multidimensional reactor safety transients.
II: Dimensionally adaptive switching algorithms.
Nuclear Science and Engineering, 131(1999) S.164-86 (45025)

JACOBS, G.
Nachrechnungen der DISCO-Versuche mit RELAP5.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.220-36 (46122)

JACOBS, H.; STEHLE, B.; THURNAY, K.; VÄTH, L.; BÖTTCHER, M.; IMKE, U.; LUMMER, M.; STRUWE, D.
Theoretische Arbeiten zur Schmelze-Kühlmittel-Wechselwirkung.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.172-83 (46119)

JANSSENS-MAENHOUT, G.
Beiträge zur Modellierung und numerischen Simulation von Zweiphasenströmungen mit Wärmeübertragung.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6228 (Februar 99)
Dissertation, Universität Karlsruhe 1999
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6228.pdf (44909)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; DAUBNER, M.; KNEBEL, J.; MÜLLER, U.
Boiling induced mixed convection for a passive cooling system.
Chen, X.J. [Hrsg.]
Multiphase Flow and Heat Transfer : 4th Internat.Symp., Xi'an, China, August 22-24, 1999
Xi'an : Xi'an Jiaotong Univ.Press, 1999
S.547-54 (45602)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; DAUBNER, M.; KNEBEL, J.U.
SUCO-Programm.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.299-308 (46127)

JORDAN, T.; MALMBERG, T.
Failure strain of the reactor pressure vessel head under impact loading: experiments on scale influence.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. X S.41-52 (46301)

KAISER, A.; SCHÜTZ, W.; WILL, H.
PREMIX tests PM12, PM13, and PM14. Documentation and evaluation of experimental data.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6370 (November 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6370.htm (46435)

KAMLAH, M.; TSAKMAKIS, CH.
Use of isotropic thermoelasticity laws in finite deformation viscoplasticity models.
Continuum Mechanics and Thermodynamics, 11(1999) S.73-88 (46018)

KESSLER, G.
Das Sicherheitskonzept für neue Reaktoren.
Atomwirtschaft-Atomtechnik, 44(1999) Nr.1, S.19-23 (44946)

KESSLER, G.
Aus aktuellem Anlaß: Für die Sicherheit deutscher Reaktoren keine gute Entscheidung.
Atomwirtschaft-Atomtechnik, 44(1999) Nr.1, S.55-56 (44997)

KLEIN, R.; BREITUNG, W.; COE, I.; HE, L.; OLIVIER, H.; REHM, W.; STUDER, E.
Models and criteria for prediction of deflagration-to-detonation transition (DDT) in hydrogen-air-steam systems under severe accident conditions.
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.338-46
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (46699)

KLEINHEINS, S.
Das VISART-Konzept einer standardisierten Schnittstelle zwischen Codes und Auswerteprogrammen.
Teil 5: VISARVOL - ein Programm zur Visualisierung von Volumenanteilen aus VISART-Dateien.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5999 (Mai 99) (45353)

KLEINHEINS, S.
Das VISART-Konzept einer standardisierten Schnittstelle zwischen Codes und Auswerteprogrammen.
Teil 3: VISAPTER - ein Programm zum Anschluß einiger Visualisierungssysteme an VISART-Dateien.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5997 (April 99) (45354)

KLEINHEINS, S.
Das VISART-Konzept einer standardisierten Schnittstelle zwischen Codes und Auswerteprogrammen.
Teil 4: VISARTOP - ein Programm zum Bearbeiten von VISART-Dateien.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-5998 (Juni 99) (45505)

KLEYKAMP, H.
Selection of materials as diluents for burning of plutonium fuels in nuclear reactors.
Journal of Nuclear Materials, 275(1999) S.1-11 (46486)

KNEBEL, J.U.
Overview on ADS design.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.11-42 (46234)

KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; BROEDERS, C.H.M.
The FZK three-beam concept for an accelerator-driven system (ADS).
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.639-43 (45348)

KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; BROEDERS, C.; GLASBRENNER, H.; KONYS, J.; MACK, K.J.; MÜLLER, G.; NEITZEL, H.J.; SCHUMACHER, G.
Investigations at KALLA for an ADS system: ongoing and planned experiments.
Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Thermal-Hydraulics, Brasimone, I, April 12-13, 1999
ENEA, 1999 S.79-115 (45415)

KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; JANSSENS-MAENHOUT, G.; MACK, K.J.; NEITZEL, H.J.
Thermohydraulische Untersuchungen zur Auslegung des Kerns und des Spallationstargets einer ADS-Anordnung.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.625-43 (46153)

KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; JANSSENS-MAENHOUT, G.; MACK, K.J.; NEITZEL, H.; KONYS, J.; GLASBRENNER, H.; GRÖTZBACH, G.; CARTECIANO, L.N.; MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.
HGF-Strategiefonds-Projekt: Thermohydraulische und material-spezifische Untersuchungen zur Realisierung einer beschleunigergetriebenen Anordnung (ADS) zur Transmutation von Aktiniden.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.644-57 (46154)

KNEBEL, J.U.; CHENG, X.; MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.; KONYS, J.; GLASBRENNER, H.
Thermalhydraulic and corrosion challenges for the target module of an accelerator-driven system (ADS).
Proc.of the 3rd Internat.Topical Meeting on Nuclear Applications of Accelerator Technology (AccApp '99), Long Beach, Calif., November 14-18, 1999
LaGrange Park, Ill. : ANS, 1999 S.367-76 (45872)

KNEBEL, J.U.; MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.
Gas-phase oxygen control processes for lead/bismuth loops and accelerator-driven systems.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.645-49 (45347)

KNEISSL, F.; GEIST, A.; NITSCH, W.
Europium extraction into D2EHPA: kinetics of mass transfer in a stirred cell.
Solvent Extraction and Ion Exchange, 17(1999) S.475-93 (45561)

KOLARIK, Z.; MÜLLICH, U.; GASSNER, F.
Verfahren zur Trennung der Transpultoniden von den Spaltlanthaniden durch selektive Extraktion.
DE-PS 19 810 895 (30.6.1999) (46404)

KOLARIK, Z.; MÜLLICH, U.; GEIST, A.
Abtrennverfahren für Aktiniden aus hochradioaktiven Abfällen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.564-66 (46147)

KONDO, S.; TOBITA, Y.; MORITA, K.; BREAR, D.J.; KAMLYAMA, K.; YAMANO, H.; FUJITA, S.; MASCHEK, W.; FISCHER, E.A.; KIEFHABER, E.; BUCKEL, G.; HESSELSCHWERDT, E.; FLAD, M.; COSTE, P.; PIGNY, S.
Current status and validation of the SIMMER-III LMFR safety analysis code.
ICONE-7 : Proc.of the 7th Internat.Conf.on Nuclear Engineering, Tokyo, J, April 19-23, 1999
Tokyo : JSME, 1999 CD-ROM (45382)

KONYS, J.; [HRSG.]
Corrosion and oxygen control. Minutes of the workshop on heavy liquid metal technology, Forschungszentrum Karlsruhe, September 16-17, 1999.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) (46650)

KOTCHOURKO, A.; BREITUNG, W.; VESER, A.
Reactive flow simulations in complex 3D geometries using the COM3D code.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.173-76 (45475)

KOTCHOURKO, A.; BREITUNG, W.; VESER, A.
Validation of COM3D code for fast turbulent H2-air-steam combustion.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.104-12 (46114)

KOTCHOURKO, A.S.; DOROFEEV, S.B.; BREITUNG, W.
Test of extended eddy break up model in simulations of turbulent H_2-air combustion.
17th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Heidelberg, July 25-30, 1999
Heidelberg : Universität Heidelberg, 1999 CD-ROM (46693)

KRAUSS, W.; SCHANZ, G.
Reaktionsverhalten von Zircaloy-4 in Luft.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.460-74 (46137)

KRAUTSCHICK, V.; HENNEGES, G.
Iodine analysis for a one-cell EPR model with CONTAIN/CONTI/IMAPAIR.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.354-68 (46132)

KRIEG, R.
Reactor pressure vessel under severe accident loading (RPVSA). Final report of EU-project contract FI4S-CT95-0002.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6358 (Dezember 99) (46849)

KRIEG, R.; DEVOS, J.; CAROLI, C.; SOLOMOS, G.; ENNIS, P.J.; KALKHOF, D.
On the prediction of the reactor vessel integrity under severe accident loadings (RPVSA).
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.126-35
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (46716)

KRIEG, R.; GÖLLER, B.; HAILFINGER, G.; MESSEMER, G.; VORBERG, G.
Reactor pressure vessel head loaded by a corium slug. Results of model experiments BERDA I.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. XI S.81-92 (46303)

KRIEG, R.; HUBER, A.; PFEIFER, P.A.; [HRSG.]
SMiRT-14 post conference seminar no 4. Containment of nuclear reactors.
Nuclear Engineering and Design, 191(1999) No.1 (46809)

KUZNETSOV, M.; ALEKSEEV, V.;
BEZMELNITSYN, A.; BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.;
MATSUKOV, I.; VESER, A.; YANKIN, YU.
Effect of obstacle geometry on behaviour of turbulent flames.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6328 (Juli 99)
IAE-6137/3 (45751)

LÄMMER, H.; TSAKMAKIS, CH.
On the identification of material parameters by means of neural networks.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.184-205 (46120)

MALMBERG, T.; KROMPHOLZ, K.; SOLOMOS, G.; AIFANTIS, E.C.
Investigations on size effects in ferritic and austenitic materials.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. X S.299-306 (46302)

MASCHEK, W.; FAUSKE, H.K.; KONDO, S.
Severe recriticalities: still a concern for future liquid-metal reactors?
1999 ANS Annual Meeting : The Atom and the Next Millenium, Boston, Mass., June 6-10, 1999
Transactions of the American Nuclear Society, 80(1999) S.172-73 (45662)

MASCHEK, W.; THIEM, D.; HEUSENER, G.
Safety assessment of a reactor core dedicated to burn minor actinides.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.635-38 (45480)

MASCHEK, W.; THIEM, D.; HEUSENER, G.
Safety features of a reactor core with minor actinide transmutation and burning capabilities.
Global '99 : Nuclear Technology - Bridging the Millenia ; Proc.of the Internat.Conf.on Future Nuclear Systems, Jackson Hole, Wyo., August 29 - September 3, 1999
Madison, Wis. : Omnipress, 1999 CD-ROM (45607)

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
Nuclear Engineering and Design, 189(1999) S.191-204 (41874)

MEYER, L.; KUHN, D.
The interaction of very hot particles falling into water.
Celata, G.P. [Hrsg.]
Two-Phase Flow Modeling and Experimentation 1999 : Proc.of the 2nd Internat.Symp., Pisa, I, May 23-26, 1999
Pisa : Edizioni ETS, 1999 Vol.2 S.897-906 (45481)

MINGES, J.; SCHÜTZ, W.; KOCH, M.K.
KAREX-Experimente zum radiologischen Quellterm infolge Resuspension.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.528-32 (46144)

MORITA, K.; KONDO, S.; TOBITA, Y.;
MASCHEK, W.; FLAD, M.; ARNECKE, G.;
COSTE, P.
Applications of the SIMMER-III fast reactor safety analysis code to thermal interactions of melts with sodium and water.
ICONE-7 : Proc.of the 7th Internat.Conf.on Nuclear Engineering, Tokyo, J, April 19-23, 1999
Tokyo : JSME, 1999 CD-ROM (45383)

MÜHL, B.; [HRSG.]
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) (46107)

MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.; ZIMMERMANN, F.
Investigation on oxygen controlled liquid lead corrosion of surface treated steels.
Konys, J. [Hrsg.]
Corrosion and Oxygen Control : Minutes of the Workshop on Heavy Liquid Metal Technology, Karlsruhe, September 16-17, 1999
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6389 (Dezember 99) S.177-96 (46653)

MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.; STRAUSS, D.
Oxide scale growth in MCrAlY coatings after pulsed electron beam treatment.
25th Internat.Conf.on Metallurgical Coatings and Thin Films (ICMCTF 98), San Diego, Calif., April 27 - May 1, 1998
Surface and Coatings Technology, 108-109(1998) S.43-47 (43461)

MÜLLER, G.; SCHUMACHER, G.; STRAUSS, D.; ZIMMERMANN, F.; ENGELKO, V.
Verbesserung des Oxidationsverhaltens von MCrAlY-Schutzschichten für Gasturbinen durch Behandlung mittels gepulster Elektronenstrahlen.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 31(1999) S.5-12 (45275)

PFRANG, W.; PORSCHA, B.; STRUWE, D.; ZIMMERER, W.
Untersuchungen zu Brennstoff- und Brennstabverhalten innovativer Systeme.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.524-27 (46143)

PLITZ, H.
Bestrahlungsexperimente zur Transmutation von Aktiniden im HFR.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.621-24 (46152)

PLITZ, H.; HOFMANN, F.; SCHOLTYSSEK, W.
Experimental program to quantify the effects of severe accidents for PWR design.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. XI S.19-26 (45021)

REDLINGER, R.
DET3D: a code for calculating detonations in reactor containments.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.191-94 (45477)

REHM, W.; BREITUNG, W.; COE, I.; HE, L.; KLEIN, R.; OLIVIER, H.; STUDER, E.
Models and criteria for prediction of deflagration-to-detonation transition (DDT) in hydrogen-air-steam systems under severe accident conditions.
CONT H2-DDT (96) P006 (September 99)(46726)

RINEISKI, A.
SIRENE: SAS4A interface to reactor data evaluated using the nuclear code system ERANOS.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.543-63 (46146)

RINEISKI, A.; KIEFHABER, E.; THIEM, D.; STRUWE, D.
SIRENE : SAS4A interface to reactor data evaluated using the nuclear code system ERANOS.
5th CAPRA-Seminar, Karlsruhe, November 30 - December 2, 1998
Tagungsband (44471)

RINEISKI, A.; MERK, B.; MASCHEK, W.
ADS related extension of the neutronics module in the accident analysis code SIMMER-III.
Proc.of the 3rd Internat.Conf.on Accelerator Driven Transmutation Technologies and Applications (ADTTA'99), Praha, CZ, June 7-11, 1999 CD-ROM
Book of Abstracts S.97 (45597)

RINEISKI, A.; MERK, B.; MASCHEK, W.
Extension of the SIMMER-III code neutronics for ADS application.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.594-604 (46150)

ROYL, P.; ROCHHOLZ, H.; NECKER, G.; TRAVIS, J.R.
GASFLOW Anwendungsrechnungen.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.28-40 (46110)

ROYL, P.; ROCHHOLZ, H.; TRAVIS, J.R.; NECKER, G.; BREITUNG, W.; SEYFFARTH, L.; GEHRIG, W.
Three-dimensional analysis of steam/hydrogen transport with catalytic recombiners in nuclear reactor containments using the computer code GASFLOW.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. XI S.189-96 (46304)

SCHIRRA, M.
Studies on the creep behaviour of the structural material 316 L (N) in the low-stress range at 550 and 600^{0}C.
Nuclear Engineering and Design, 188(1999) S.381-84 (45615)

SCHMIDT, L.; HOFMANN, P.; PIEL, D.; STEINBRÜCK, M.; LEILING, W.; SEPOLD, L.; SCHÄFER, H.; RÖDEL, M.; PERST, M.; WOLTER, J.
QUENCH-Anlage für Abschreckexperimente mit LWR-Brennelementsimulatoren.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.255-58 (45738)

SCHMUCK, P.; TOTH, B.
Analyses of severe accidents for the EPR using MELCOR.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.369-81 (46133)

SCHULTHEISS, C.; ENGELKO, V.; KRAFFT, G.; SCHUMACHER, G.; MÜLLER, G.
Gepulste Elektronenstrahlquelle und deren Verwendung.
DE-OS 19 541 510 (15.5.1997)
DE-PS 19 541 510 (6.4.1999) (42068)

SEPOLD, L.; HOFMANN, P.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; STEINBRÜCK, M.
Reflooding experiments with LWR-type fuel rod simulators in the quench facility.
Proc.of the 9th Internat.Topical Conf. on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9), San Francisco, Calif., October 3-8, 1999
La Grange Park, Ill. : American Nuclear Society, 1999
CD-ROM (44978)

SEPOLD, L.; HOFMANN, P.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; STEINBRÜCK, M.
Reflood behavior of PWR-type rod simulator bundles used in the QUENCH experiments.
Proc.of the 33rd Nat.Heat Transfer Conf.(NHTC'99), Albuquerque, N.M., August 15-17, 1999
New York, N.Y. : ASME, 1999
CD-ROM, NHTC99-17 (44996)

SIMON, M.
An experimental study of the transition of flow patterns in horizontal evaporator tubes.
Celata, G.P. [Hrsg.]
Two-Phase Flow Modeling and Experimentation 1999 : Proc.of the 2nd Internat.Symp., Pisa, I, May 23-26, 1999
Pisa : Edizioni ETS, 1999 Vol.2 S.795-802 (45956)

SIMON, M.
3D-Tomograph macht das Unsichtbare sichtbar.
Industrieanzeiger, (1999) Nr.19, S.50-51 (46104)

SIMON, M.; CHERDRON, W.; CACUCI, D.G.
Anwendung von Röntgen-Computertomographie bei Zweiphasenströmungen.
Jahrestagung der VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, Leipzig, 29.September - 1.Oktober 1999
Chemie Ingenieur Technik, 71(1999) S.1060 (Abstract) (46264)

STARFLINGER, J.
Hydrogen sources in course of a nuclear reactor accident.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.155-58 (45472)

STARFLINGER, J.
Analysis of hydrogen- and steam generation using the nuclear reactor accident analysis code MELCOR1.8.4.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.1-6 (46108)

STEINER, H.
Modeling of hydrogen uptake by Zry claddings under high temperature conditions.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.409-12 (45728)

STEINER, H.
Speculations on mechanisms for temperature escalations in LWR fuel rod bundles under quench conditions.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.427-33 (46135)

STEINER, H.; HECK, M.
Modelltheorie zum Abschreckverhalten oxidierter Zircaloy-Hüllrohre.
Nachrichten - Forschungszentrum Karlsruhe, 31(1999) S.67-81 (45282)

STRUWE, D.; JACOBS, H.; IMKE, U.; KRIEG, R.; HERING, W.; BÖTTCHER, M.; LUMMER, M.; MALMBERG, T.; MESSEMER, G.; SCHMUCK, PH.; GÖLLER, B.; VORBERG, G.
Consequence evaluation of in-vessel fuel coolant interactions in the European pressurized water reactor.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6316 (Juli 99)
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/ABSTRACTS/6316.htm
http://hikwww4.fzk.de/hbk/literatur/FZKA_Berichte/FZKA6316.pdf (45791)

STRUWE, D.; PFRANG, W.; SCHIKORR, M.; THIEM, D.
New SAS4A analyses of the CAPRA 4/94 core design for actinide burning and transmutation.
5th Internat.CAPRA-Seminar, Karlsruhe, November 30 - December 2, 1998
Tagungsband (45170)

STRUWE, D.; PFRANG, W.; SCHIKORR, M.; THIEM, D.
New SAS4A analyses of the CAPRA4/94 core design for actinide burning and transmutation.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.605-20 (46151)

TENCHINE, D.; BERTHOUX, M.; KNEBEL, J.U.; JACKSON, J.D.; AN, P.; NAVIGLIO, A.; CARUSO, G.
Thermalhydraulics of passive decay heat removal systems (POOLTHY).
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.700-08
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (45603)

THIEM, D.; MASCHEK, W.; HEUSENER, G.
Neutronic and safety analyses for an annular high leakage burner core.
5th CAPRA-Seminar, Karlsruhe, November 30 - December 2, 1998
Tagungsband (44560)

THIEM, D.; MASCHEK, W.; HEUSENER, G.
Safety investigations for an annular high leakage core.
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung. Jahresbericht 1998.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6300 (September 99) S.567-73 (46148)

TISEANU, I.; SIMON, M.
High resolution cone-beam tomography for two-phase flow diagnostics.
Celata, G.P. [Hrsg.]
Two-Phase Flow Modeling and Experimentation 1999 : Proc.of the 2nd Internat.Symp., Pisa, I, May 23-26, 1999
Pisa : Edizioni ETS, 1999 Vol.3 S.1485-92 (45957)

TRAVIS, J.R.; NECKER, G.; ROYL, P.
The theoretical and computational bases for the GASFLOW-II nuclear reactor safety containment code.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.301-06 (45907)

TRAVIS, J.; SPORE, J.; ROYL, P.; NECKER, G.
Theoretical and computational models of the GASFLOW-II code.
Chang, S.P. [Hrsg.]
Transactions of the 15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 15-20, 1999
Vol. XI S.157-164 (46591)

VESER, A.; BIELERT, U.; BREITUNG, W.; KOTCHOURKO, A.; ROYL, P.; BECCANTINI, A.; DABBENE, F.; PAILLERE, H.; STUDER, E.; HULD, T.; WILKENING, H.; EDLINGER, B.; PORUBA, C.; MOVAHED, M.
Multidimensional simulation of hydrogen distribution and turbulent combustion in severe accidents.
FISA-99 : EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, L, November 29 - December 1, 1999
Preprints S.365-82
Luxembourg : Commision of the European Communities, 1999 (46698)

VESER, A.; BREITUNG, W.; ENGEL, G.; STERN, G.; KOTCHOURKO, A.
Deflagration to detonation transition experiments with hydrogen-air mixtures in shock tube and obstacle array geometries.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6355 (Dezember 99) (46823)

VESER, A.; KOTCHOURKO, A.; BREITUNG, W.
Experiments on turbulent combustion and COM3D verification.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.167-72 (45474)

WIDER, H.U.; MASCHEK, W.; JONES, A.V.
Safety advantages of heavy metal- versus gas-cooled accelerator-driven fast system.
Proc.of the 3rd Internat.Conf.on Accelerator Driven Transmutation Technologies and Applications (ADTTA'99), Praha, CZ, June 7-11, 1999 CD-ROM
Book of Abstracts S.140 (45920)

WILL, H.; KAISER, A.; SCHÜTZ, W.
Influence of the system pressure on the mixing of a hot melt released into water.
Jahrestagung Kerntechnik '99, Karlsruhe, 18.-20.Mai 1999
Bonn : INFORUM GmbH, 1998 S.275-81 (45906)

WOLL, D.
Introduction to the use of the UNIX-version of the KArlsruhe PROgram System KAPROS.
Wissenschaftliche Berichte, FZKA-6280 (Juli 99) (45668)

WÖRNER, M.; YE, Q.Y.; GRÖTZBACH, G.
Consistent modelling of fluctuating temperature-gradient-velocity-gradient correlations for natural convection.
Rodi, W. [Hrsg.]
Engineering Turbulence Modelling and Experiments 4 : Proc.of the 4th Internat.Symp., Ajaccio, F, May 24-26, 1999
Amsterdam [u.a.] : Elsevier, 1999 S.165-74 (45522)

Vorträge, die nicht in gedruckter Form vorliegen

BIELERT, U.
Modeling the ignition of hydrogen-steam-air mixtures during severe accidents in nuclear power plants.
17th Internat.Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Heidelberg, June 25-30, 1999 (V45419)

BREITUNG, W.; DOROFEEV, S.B.
Criteria for deflagration to detonation transition (DDT) in nuclear containment analysis.
15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Post Conf.Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Seoul, Korea, August 23-24, 1999 (V46724)

BREITUNG, W.; ROYL, P.; EYINK, J.
Effect of hydrogen/steam source term parameters on the analysis of hydrogen behavior in severe accidents.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46812)

BUNK, M.; EHRHARD, P.
Spreading with basal solidification.
Workshop on Phase Change with Convection: Modelling and Validation (PCC 99), Warszawa, PL, June 24-26, 1999
IPPT Reports 5/99 S.53-56 (Abstracts)
(V45598)

BUNK, M.; EHRHARD, P.; MÜLLER, U.
Viscous gravity currents with solidification.
Interfaces and Mathematics for the 21st Century, Monterey, Calif., August 16-18, 1999
(V45898)

EHRHARDT, J.; JONES, A.; GOOSSENS, L.
Probabilistic accident consequence uncertainty analysis of the whole program package COSYMA.
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), Avifauna, NL, June 21-24, 1999 (V45599)

FELLMOSER, F.; FIEG, G.; MASSIER, H.; MESSAINGUIRAL, CHR.; WERLE, H.
KAPOOL experiments to simulate molten corium-sacrificial concrete interaction and gate opening in the EPR core catcher concept.
CSNI Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Karlsruhe, November 16-18, 1999
(V46352)

FISCHER, F.; HASEMANN, I.; JONES, J.A.
Techniques applied in the COSYMA accident consequence uncertainty analyses.
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), Avifauna, NL, June 21-24, 1999 (V45601)

GEIST, A.
Extraktive Actiniden/Lanthaniden-Trennung. Ein Schritt auf dem Weg zur Transmutation.
Ausschuß 'Extraktion' der Deutschen Vereinigung für Chemie- und Verfahrenstechnik (DVCV), Münster, 5.Mai 1999 (V45762)

GEIST, A.; KIM, J.I.; PLUCINSKI, P.; NITSCH, W.
Hollow fiber modules as novel phase contactors for the separation of multi-cation mixtures by chemical extraction.
Internat.Solvent Extraction Conf. (ISEC '99), Barcelona, E, July 11-16, 1999 (V46561)

GOOSSENS, L.H.J.; WAKEFORD, R.; LITTLE, M.; MUIRHEAD, C.; HASEMANN, I.; JONES, J.A.
Probabilistic accident consequence uncertainty analysis of the late health effects module in the COSYMA package.
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), Avifauna, NL, June 21-24, 1999 (V45596)

GRUPA, J.B.; HASEMANN, I.
Probabilistic accident consequence uncertainty analysis of the early health effects module in the COSYMA package.
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), Avifauna, NL, June 21-24, 1999 (V45595)

GRÖTZBACH, G.
Experimental investigation of vertical turbulent air/water bubbly flows and related model developments.
Vortr.: Institut de Mecanique des Fluides, Universite Louis Pasteur, Strasbourg, F, 11.Februar 1999 (V45121)

HERING, W.; HOMANN, C.; SENGPIEL, W.; STRUWE, D.; SANCHEZ, V.H.
Reflood analyses using SCDAP/RELAP5mod3.2.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46433)

HERING, W.; HOMANN, CH.; SANCHEZ, V.; SENGPIEL, W.; SMIT, S.O.; STRUWE, D.; MESSAINGUIRAL, CH.
SCDAP/RELAP5 code validation and core degradation analyses.
CSARP Meeting (Cooperative Severe Accident Research Program), Albuquerque, N.M., May 3-6, 1999 (V46451)

HOFMANN, P.; HOMANN, CH.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHANZ, G.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Hydrogen behaviour during bundle tests QUENCH-03 and QUENCH-04.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46736)

HOFMANN, P.; HORN, S.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Experimental results of test QUENCH-03.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46730)

HOFMANN, P.; HORN, S.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Influence of the thermocouple location on the measured quenching temperature.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46731)

HOFMANN, P.; HORN, S.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
First results of test QUENCH-04.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46732)

HOFMANN, P.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Flooding experiments on the determination of the hydrogen source term.
CSARP Meeting (Cooperative Severe Accident Research Program), Albuquerque, N.M., May 3-6, 1999 (V46729)

HOFMANN, P.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
QUENCH program at FZKA.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46733)

HOFMANN, P.; LEILING, W.; MIASSOEDOV, A.; PIEL, D.; SCHANZ, G.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.
Metallographic post-test examination of the QUENCH-02 test bundle.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46735)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.
Experiments on the ZrO_2 shell failure.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46815)

HOFMANN, P.; MIASSOEDOV, A.; STEINBRÜCK, M.
Hydrogen absorption in small-scale and bundle tests.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46734)

HOFMANN, P.; STUCKERT, J.
UO_2 and ZrO_2 dissolution by molten Zircaloy.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46816)

HOMANN, C.; HERING, W.
Analytical investigations of tests QUENCH-03 and QUENCH-04.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46432)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; MÜLLER, U.
A closed two-fluid-model for subcooled nucleate boiling.
Vortr.: University of Ljubljana, Slovenia, 29.Juni 1999
Vortr.: Universität Stuttgart, 26.November 1999 (V45722)

JANSSENS-MAENHOUT, G.; MÜLLER, U.
A stepwise approach for disperse two-phase flow in cooling loops.
European Two-Phase Flow Group Meeting, London, GB, September 28-30, 1999 (V45895)

KNEBEL, J.U.
Stand der Arbeiten zu einer beschleunigergetriebenen Anlagenanordnung (ADS) am Forschungszentrum Karlsruhe zur Transmutation von Aktiniden.
Vortr.: Forschungszentrum Rossendorf, Dresden, 14.Januar 1999 (V45057)

KNEBEL, J.U.
Accelerator driven systems: thermalhydraulic and corrosion challenges.
School of Engineering, University of Manchester, GB, April 26, 1999 (V45466)

KOCH, M.K.; VOSSNACKE, A.; STARFLINGER, J.; SCHÜTZ, W.; UNGER, H.
Resuspension of radionuclides at bubbling water pool surfaces.
3rd OECD Specialist Meeting on Nuclear Aerosols in Reactor Safety, Köln, June 15-18, 1999 (V46801)

KRAUSS, W.; SCHANZ, G.
Comparative studies on the Zry-4/air and Zry-4/O_2 reaction behaviour towards air ingress scenarios.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46740)

MEYER, L.; JACOBS, G.; WILHELM, D.; GARGALLO, M.
Experiments on corium dispersion after lower head failure at moderate pressure.
15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Post Conf.Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Seoul, Korea, August 23-24, 1999 (V45896)

MIASSOEDOV, A.; HOFMANN, P.; LEILING, W.; PIEL, D.; SCHMIDT, L.; SEPOLD, L.; STEINBRÜCK, M.; HERING, W.; HOMANN, C.
Flooding experiments on the investigation of the hydrogen source term (QUENCH test results).
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46750)

MINGES, J.; CHERDRON, W.; SCHÜTZ, W.
Short report of an accident during sodium cleanup with ethyl carbitol in a storage tank of a research facility.
IAEA Technical Committee Meeting on Sodium Removal and Disposal from LMFBRs in Normal Operation and in the Framework of Decommissioning, Aix-en-Provence, F, November 3-7, 1997 (V46300)

MOVAHED, M.A.; TRAVIS, J.R.; BREITUNG, W.
Hydrogen mitigation concept and its justification method for the European pressurized water reactor (EPR).
15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Post Conf.Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Seoul, Korea, August 23-24, 1999 (V46725)

NAKAZAWA, T.; OTOGURO, Y.; KIMURA, H.; KAGUCHI, H.; SCHIRRA, M.
Long term creep rupture properties and precipitation in type 316 stainless steels.
1999 TMS Annual Meeting and Exhibition, San Diego, Calif., March 1-4, 1999 (V45614)

PÄSLER-SAUER, J.; JONES, A.
Probabilistic accident consequence uncertainty analysis of the atmospheric dispersion and deposition module in the COSYMA package.
Workshop on Expert Judgement and Accident Consequence Uncertainty Analysis (COSYMA), Avifauna, NL, June 21-24, 1999 (V45594)

REINKE, N.; KOCH, M.K.; SCHÜTZ, W.; WERLE, H.; UNGER, H.
Entwicklung des Computercodes MECO zur Simulation der Ausbreitung heißer Schmelzen über Flächen.
63.Physikertagung gemeinsam mit der Frühjahrstagung DPG, Heidelberg, 15.-19. März 1999
Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, R.6, Bd.34 (1999) AKE 3.4 (V45201)

RINEISKI, A.; KIEFHABER, E.; MERK, B.; MASCHEK, W.; FLAD, M.
Neutron kinetics developments of the SIMMER-III safety code for ADS application.
OECD/NEA Workshop on Utilization and Reliability of High Power Proton Accelerators, Cadarache, F, November 22-24, 1999 (V46763)

ROYL, P.; ROCHHOLZ, H.; BREITUNG, W.; TRAVIS, J.R.; NECKER, G.
Analysis of steam hydrogen distribution with mitigation in large reactor containments.
15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Seoul, Korea, August 23-24, 1999 (V46592)

SABISCH, W.; WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.; CACUCI, D.
Methode zur Simulation von Blasenströmungen mit TURBIT-VoF.
GVC-Fachausschußsitzung 'Mehrphasenströmungen', Bad Kissingen, 1.-3.März 1999 (V45984)

SABISCH, W.; WÖRNER, M.; GRÖTZBACH, G.; CACUCI, D.G.
An improved volume of fluid method for numerical simulation of clusters of bubbles.
9th Workshop on Two-Phase Flow Predicitons, Merseburg, 13.-16.April 1999 (V45985)

SANCHEZ, V.; CHANG-HWAN, B.
Status of reflood model assessment in RELAP5/mod.3.2.2beta.
14th CAMP-Meeting, San Carlos de Bariloche, RA, April 28-30, 1999 (V46196)

SANCHEZ, V.; HERING, W.; KNOLL, A.
1st exercise MSLB-benchmark FZK/SKWU final results obtained with RELAP5/mod.3.2.
3rd OECD/NEA MSLB-Workshop, Garching, March 24-25, 1999 (V46103)

SCHANZ, G.
Comments on the kinetic evaluation of oxidation experiments.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46739)

SENGPIEL, W.; SAMSTAG, M.; HEINZEL, V.; SIMON, M.
Messungen der Eigenschaften von kontinuierlicher und disperser Phase in Luft-Wasser-Blasenströmungen.
3.Workshop Meßtechnik für stationäre und transiente Mehrphasenströmungen, Forschungszentrum Rossendorf, Dresden, 14.Oktober 1999 (V46266)

SIMON, M.; CHERDRON, W.; CACUCI, D.G.
Hochauflösende 3D-Röntgentomographie zur Analyse von Blasenströmungen.
GVC-Fachausschußsitzung 'Mehrphasenströmungen', Bad Kissingen, 1.-3.März 1999 (V46032)

SIMON, M.; SCHMID, S.; HEINZEL, V.
Effiziente Kopplung fossil befeuerter Kraftwerke mit solarthermischen Anlagen.
Fachtagung der VDI-Gesellschaft Energietechnik 'Entwicklungslinien in der Energie- und Kraftwerkstechnik', Essen, 22.-23.September 1999 (V46273)

STARFLINGER, J.
In-vessel hydrogen source terms during severe accidents.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46813)

STEINBOCK, L.
Status of spectral pyrometry at FZ.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46814)

STEINER, H.; HECK, M.
Survey on mechanisms triggering temperature escalations in FZKA QUENCH tests.
5th Internat.QUENCH Workshop, Karlsruhe, October 19-21, 1999 (V46544)

TRAVIS, J.R.
A computationally efficient thermal radiation transport model for the GASFLOW code.
15th Internat.Conf.on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-15), Post Conf.Seminar on Containment of Nuclear Reactors, Seoul, Korea, August 23-24, 1999 (V46723)

VOSSNACKE, A.; KOCH, M.K.; SCHÜTZ, W.; UNGER, H.
Radionuclide release at bubbling water pool surfaces.
18th Annual Conf.of the American Association for Aerosol Research, Tacoma, Wash., October 11-15, 1999 (V46456)

WIESE, H.W.
Equilibrium in pools of PWRs and burner reactors with homogeneous recycling of plutonium and minor actinides.
Frederic Joliot/Otto Hahn Summer School on Modern Reactor Physics and the Modelling of Complex Systems, Karlsruhe, August 18-27, 1999 (V46233)

WINTRUFF, I.
Entwicklung des numerischen Verfahrens zur Berechnung des Kernschmelzverhaltens außerhalb des Reaktordruckbehälters.
Jahrestagung Kerntechnik 1999, Workshop 'Kompetenzerhaltung in der Kerntechnik', Karlsruhe, 20.Mai 1999 (V46719)

WÖRNER, M.
Ein Konzept zur Grobstruktursimulation von Zweiphasenströmungen mit Interface Tracking.
Seminarreihe Numerische Simulation von Strömungs- und Transportprozessen, Universität Stuttgart, 26.Oktober 1999 (V46354)