



KfK 5084
September 1992

Analyse der In-pile-Blockade-Experimente Mol 7C mit einem erweiterten SIMMER-II Programm

U. Bungeroth
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

KfK 5084

**Analyse der In-pile-Blockade-Experimente Mol 7C
mit einem erweiterten SIMMER-II Programm**

U. Bungereoth

**Dissertation genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Karlsruhe**

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Die In-pile-Blockadeexperimente Mol 7C wurden in Zusammenarbeit zwischen KfK und SCK/CEN im Versuchsreaktor BR2 in Mol/Belgien zur Untersuchung schwerer Kühlungsstörungen in Brennelementen natriumgekühlter Brutreaktoren durchgeführt. Die Kühlungsstörung wurde dabei durch eine zentrale poröse Blockade, gefüllt mit hochangereicherten Uranoxidkugeln, simuliert. Hauptziel der Mol 7C Versuche ist, zu untersuchen, ob und inwieweit sich ein einmal entstandener Schaden über größere Bereiche des Bündels ausbreitet. Über die entscheidenden Vorgänge im inneren Bereich der Blockade gibt es nach Schmelzen der dort befindlichen Thermolemente keine experimentellen Informationen mehr. Daher wurden Analysen mit dem Computerprogramm SIMMER-II durchgeführt. Sie sollen zu einem besseren Verständnis vor allem der Versuche Mol 7C/4 und 5 mit vorbestrahlten Brennstäben aus der KNK II führen. Dazu muß der gesamte Versuchsablauf, ausgehend von einem stationären Ausgangszustand über Natriumsieden, Dryout, Stahl- und Brennstoffschmelzen und Bildung einer von einer Brennstoff/Stahlkruste umschlossenen Kaverne bis hin zu dem Endzustand nach Abschalten des Reaktors, nachgerechnet werden. Von besonderem Interesse sind dabei der Zustand und die möglichen Stoffe in der Kaverne sowie die Bedingungen, unter welchen eine solche Konfiguration über längere Zeit stabil sein kann. Das verwendete zweidimensionale Mehrphasen-Mehrkomponenten Hydrodynamikprogramm SIMMER-II wurde im Los Alamos National Laboratory zur Analyse schwerer kernzerstörender Unfälle in flüssigmetall-gekühlten Schnellen Brutreaktoren entwickelt. Da es zur Berechnung des gesamten Reaktorkerns konzipiert wurde, waren für die Anwendung auf die Mol 7C-Versuche mit geringer Ausdehnung und komplizierten Details einige Modellerweiterungen notwendig. Die wichtigste Erweiterung war die Modellierung des axialen Wärmetransports über Maschengrenzen hinweg, der unabhängig vom Massentransport stattfindet. Hierbei wurde axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien und axialer Wärmetransport durch Konvektion berücksichtigt und ihre Funktionsweise anhand von Testbeispielen überprüft. Erst mit diesen Erweiterungen war eine vollständige Nachrechnung der Mol 7C-Versuche möglich.

Die Rechnung für die Anfangsphase von Mol 7C/4 mit einer schnellen Einleitung der Transiente zeigen gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment. Die langsame Einleitung der Transiente von Mol 7C/5 läßt sich wegen des hohen Rechenzeitbedarfs mit SIMMER-II nicht nachvollziehen. Vergleichsrechnungen haben aber gezeigt, daß die Schadensentwicklung weitgehend unabhängig von der Art der Einleitung der Transiente ist. Der komplette Versuchsablauf von

Mol 7C/5 wurde deshalb mit einer schnellen Einleitung der Transiente nachgerechnet. Der Endzustand ohne Leistungserzeugung deckt sich hierbei gut mit den Nachuntersuchungsergebnissen mit vergleichbaren Materialverteilungen, z.B. hinsichtlich der Krustendicken der entstandenen Kaverne. Daraus kann geschlossen werden, daß der Versuchsablauf insgesamt von der Rechnung gut wiedergegeben wird. In der Rechnung wurde nach Bildung der Kaverne mit einem siedenden Brennstoffpool im Innern ein thermisches Gleichgewicht erreicht. Damit bestätigen die Analysen, daß die in den Nachuntersuchungen von Mol 7C/5 vorgefundene Konfiguration bei voller Leistung über längere Zeit stabil sein kann, ohne daß es zu einer Propagation des Schadens kommt.

Analysis of MOL 7C In-Pile Blockage Experiments with an Extended SIMMER-II Program

Abstract

The Mol 7C in-pile blockage experiments were carried out jointly by KfK and SCK/CEN in the BR2 experimental reactor in Mol, Belgium, to study severe cooling disturbances in fuel subassemblies of sodium cooled breeder reactors. The local cooling disturbances were simulated by a porous central blockage filled with highly enriched uranium oxide spheres. The Mol 7C experiments mainly serve to study whether and to what extent a failure, once generated, will propagate through large parts of the bundle. No experimental information can be obtained about the decisive events going on inside the blockage, once the thermocouples installed in that region have molten. Consequently, analyses were carried out by means of the SIMMER-II computer code. They are to improve our knowledge especially of the Mol 7C/4 and 5 experiments with pre-irradiated fuel pins from KNK II. This requires the recalculation of the complete course of the experiment, starting from initial steady-state and going on through sodium boiling, dryout, melting of steel and fuel the formation of a cavity surrounded by a fuel/steel crust, and terminating with the final configuration after the reactor has been shut down. Factors of special interest in this regard are the state of the cavity and the materials possibly contained in it, and the conditions under which a configuration of this kind can be stable over prolonged periods of time. The SIMMER-II code is a two-dimensional multiphase-multicomponent hydrodynamic program developed at the Los Alamos National Laboratory for analyses of severe core disruptive accidents in liquid metal cooled fast breeder reactors. As it was designed originally for calculations of the whole reactor core, some model extensions had to be made to adapt it to applications in the Mol 7C experiments, whose dimensions were smaller and whose details were more complicated. The most important extension was modeling the axial heat transport across mesh cell boundaries, which occurs independent of mass transport. In this case, axial heat conduction within solid materials and axial heat transport by convection were taken into account and their functioning verified on the basis of test examples. A complete analyses of the Mol 7C experiments was only possible with these extensions.

Calculations for the initial phase of Mol 7C/4, with fast initiation of the transient, show good agreement between calculation and experiment. The slow initiation of the transient in Mol 7C/5 cannot be recalculated because of the long computa-

tion time required with SIMMER-II. However, comparison calculations have shown failure development to be largely independent of the type of transient initiation. The complete sequence of the Mol 7C/5 experiment therefore was recalculated with a fast initiation of the transient. The final configuration without power generation is in good agreement with the post-irradiation examination findings obtained, e.g., with respect to the material distributions and the thickness of the crust of the cavity produced. It can be concluded from these findings that, on the whole, the experimental sequence is simulated quite well by the calculation. In the calculation, a thermal equilibrium was established after the cavity had been generated with a boiling fuel pool inside. The analyses confirm that the configuration found in the post-irradiation examinations of Mol 7C/5 can be stable over a prolonged period of time at full power without causing failure propagation.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
2. Die Mol 7C-Versuche	5
2.1 Aufbau und Durchführung	5
2.2 Meßwerterfassung	7
2.3 Nachuntersuchungen	8
3. Grundlagen für die Analyse der Mol 7C-Versuche	11
3.1 Erhaltungsgleichungen	12
3.1.1 Feste Materialien	13
3.1.2 Flüssige Materialien	14
3.1.3 Gasförmige Materialien	17
3.2 Wärmeübergangsgleichungen	19
4. Das SIMMER-II Computerprogramm	21
4.1 Beschreibung	21
4.1.1 Wärmetransport	22
4.1.2 Massentransport	24
4.1.3 Impulstransport	27
4.1.4 Zustandsdaten	29
4.2 Erweiterungen im Hinblick auf die Nachrechnung der Mol 7C-Versuche	30
4.2.1 Axialer Wärmetransport über Maschengrenzen hinweg	30
4.2.1.1 Axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien	30
4.2.1.2 Axialer Wärmetransport durch Konvektion	32
4.2.1.3 Integration der Erweiterungen in das SIMMER-II Programm	36
4.2.1.4 Zusätzliche Änderungen	41
4.2.1.5 Einbau in den Programmablauf	42
4.2.2 Überprüfung der Programmerweiterungen	42
4.2.2.1 Wärmeleitung im stationären Fall	43
4.2.2.2 Wärmeleitung im instationären Fall	45
4.2.2.3 Wärmetransport durch Konvektion im stationären Fall	47
4.2.2.4 Wärmetransport durch Konvektion im instationären Fall	49
4.2.3 Druckverlust in der Kugelschüttung	50
4.2.4 Weitere Programmänderungen	53

	Seite
5. Modellierung der Mol 7C-Experimente mit SIMMER II	54
5.1 Modellierung der Blockade	54
5.1.1 Darstellung der UO ₂ -Kugeln	54
5.1.2 Das verwendete Maschennetz	55
5.2 Auswahl des Experiments	57
5.3 Fahrweise	57
6. SIMMER-II Rechnungen	59
6.1 Einige Eingabedaten	59
6.2 Referenzrechnung	60
6.3 Parametervariationen	65
6.4 Analyse der Anfangsphase	68
7. Diskussion der Ergebnisse und Vergleich mit den Experimenten	70
8. Zusammenfassung und Schlußfolgerungen	78
Referenzen	81
Nomenklatur	84
Anhang A: Programmerweiterungen	
Anhang B: Eingabedatei	

1. Einleitung

Im Rahmen der Sicherheitsanalyse flüssigmetall-gekühlter Schneller Brutreaktoren (LMFBR) wird untersucht, ob die Ausbreitung lokaler Kühlungsstörungen in einzelnen Brennelementen zu einem schweren Störfall führen kann (Propagation) [1 - 5]. Die Hauptursache solcher Störungen sind lokale Blockaden innerhalb der Spaltzone der Brennelemente. Sie können durch Schwellen defekter Stäbe oder durch Ablagerungen von Partikeln an den Engstellen des Bündels zustande kommen. Von solchen Blockaden wird erwartet, daß sie in der Anfangsphase ihrer Bildung eine hohe Porosität haben [6], und der verbleibende Kühlmittelstrom für eine effektive Kühlung der Blockade ausreicht [7]. Zunächst wächst eine solche Blockade langsam und der damit verbundene Temperaturanstieg ist gering. Wird jedoch eine Blockade nicht erkannt bevor das Natrium siedet, so kann die Verdampfung des Natriums eine völlige Unterbrechung des Natriumstroms bewirken. Dies würde zu einem schnellen Anstieg der Temperaturen, zum Schmelzen der Hüllrohre und des Brennstoffs und möglicherweise zu einer Propagation des Schadens führen, z.B. durch eine thermische Wechselwirkung zwischen dem Kühlmittel und den geschmolzenen Materialien oder durch Materialumverteilung und Bildung von sekundären Blockaden. Das Hüllrohrversagen ist mit einem deutlichen Anstieg der DND-Signale (Delayed Neutron Detection) verbunden [8]. Dieser Anstieg kann erst nach einer Verzögerung registriert werden, die durch die Transportzeit des Kühlmittels zum DND-Monitor, im Reaktor ungefähr 30 s - 60 s, bestimmt ist. Für diese Zeitspanne muß gezeigt werden, daß sich der Schaden einerseits nicht so weit ausbreitet, daß die Kühlung eines gesamten Brennelements gefährdet ist und daß andererseits das mit dem Schaden verbundene DND-Signal ausreicht, um zuverlässig eine automatische Abschaltung des Reaktors zu bewirken.

Zur Untersuchung solcher Kühlungsstörungen und deren Folgen wurden daher in Zusammenarbeit zwischen dem KfK und dem CEN/SCK Mol (Belgien) die insgesamt sieben In-pile-Blockadeexperimente Mol 7C im Versuchsreaktor BR2 in Mol durchgeführt [9]. Hauptziel der Mol 7C-Experimente war es zu untersuchen, ob und in wieweit sich ein einmal entstandener Schaden über größere Bereiche des Brennstabbündels ausbreitet. Bei den Versuchen wurde die Kühlungsstörung durch eine vorgegebene poröse Blockade in einem Brennstabbündel mit 19 bzw. 37 Stäben hervorgerufen. Die gewählte Blockade ließ eine Restdurchströmung zu, so daß in der Anfangsphase ein noch kühlbarer Zustand vorlag. Die Versuchsbedingungen, insbesondere der Kühlmittelmassenstrom im Bündel, waren so eingestellt, daß bei maximaler Bündelleistung in der Blockade die Natriumsiedetem-

peratur erreicht wurde. Von diesem Ausgangszustand entwickelt sich der Schaden vom Natriumsieden über Verdampfen, Kühlungsverlust (Dryout) bis hin zum Schmelzen der Hüllrohre und des Brennstoffs und Wiedergefrieren der geschmolzenen Materialien automatisch, d.h. ohne Beeinflussung von außen, weiter. Die Phase der Schadensentwicklung wird nachfolgend als "Transiente" bezeichnet. In den Versuchen Mol 7C/4 und 5 bildete sich, wie die Nachuntersuchungen zeigen, im Bereich der lokalen Blockade eine von einer Brennstoff/Stahl-Kruste umschlossene Kaverne [10]. Die Versuche Mol 7C/4 bis 6 mit bestrahlten Brennstäben aus der KNK II (Kompakte natriumgekühlte Kernreaktoranlage) unterscheiden sich von einander vor allem durch ihren Abbrand.

Die im folgenden dargestellten Analysen der Experimente Mol 7C/4 und 5 sollen zu einem besseren Verständnis der Versuchsabläufe führen und die Interpretation der Versuchsergebnisse unterstützen, da es über die Vorgänge im inneren Bereich der Blockade nur Informationen aus den Messungen der Thermolemente bis zum Erreichen ihrer Schmelztemperatur gibt. Dazu muß der Versuchsablauf, ausgehend von einem stationären Anfangszustand über die Entstehung der Kaverne bis hin zum Endzustand nach Abschalten des Reaktors nachgerechnet werden. Der Zustand der Kaverne während des Experiments sowie die möglichen Inhaltsstoffe, wie z.B. flüssiger Brennstoff, sollen bestimmt werden. Bei Mol 7C/4 und 6 und in geringem Umfang auch bei Mol 7C/5 wurde nach einiger Zeit ein Aufbrechen der Kaverne, verbunden mit einem Austrag von heißem, flüssigem Material beobachtet. Damit stellt sich die Frage, ob und unter welchen Bedingungen eine solche Konfiguration über längere Zeit (Stunden) Bestand haben kann. Da es sich bei den Mol 7C-Versuchen um künstliche Blockaden handelte, sollen auch andere Blockadekonfigurationen und Randbedingungen berechenbar werden. Letztlich soll ein Werkzeug zur Verfügung gestellt werden, mit dem die Erkenntnisse aus den Mol 7C-Versuchen auf Reaktorbedingungen übertragen werden können.

Der Versuchsablauf ist ein komplexer transienter Prozeß, bei dem die verschiedenen Materialien wie Brennstoff, Stahl und Natrium in den verschiedenen Aggregatzuständen (Phasen) fest, flüssig und dampfförmig vorkommen können. Bisherige Berechnungen beschränken sich entweder auf die einphasige zweidimensionale Berechnung des kompletten thermohydraulischen Zustands im Bündel in der Anfangsphase, z.B. mit dem BACCHUS-Computerprogramm [11], oder auf einfache zweidimensionale Wärmeleitrechnungen ausgewählter Abschnitte der beim Versuch Mol 7C/5 entstandenen Konfiguration [12]. Die komplette Analyse der Mol 7C-Versuche erfordert jedoch die Behandlung aller Phänomene, die das

Versuchsgeschehen entscheidend bestimmen. Phänomene wie ein- und mehrphasige Strömungen, Phasenwechsel wie Schmelzen, Gefrieren, Verdampfen und Kondensieren der verschiedenen vorhandenen Materialien und Wärme-, Stoff- und Impulsaustausch zwischen den einzelnen Komponenten müssen berücksichtigt werden.

Für die vorliegenden Rechnungen wurde deshalb das zweidimensionale Mehrphasen-Mehrkomponenten-Computerprogramm SIMMER-II verwendet [13, 14]. SIMMER-II wurde im Los Alamos National Laboratory zur Analyse schwerer kernzerstörender Störfälle in flüssigmetall-gekühlten Schnellen Brutreaktoren entwickelt. Es wurde für die Behandlung des gesamten Reaktorkerns konzipiert und nicht für Geometrien mit geringen Ausdehnungen und komplizierten Details, wie sie in den Mol 7C-Versuchen vorliegen.

Für eine realistische Analyse der Mol 7C-Versuche waren deshalb einige wesentliche Erweiterungen des SIMMER-II Programms erforderlich [15]. Da SIMMER-II in axialer Richtung nur Wärmetransport mittels Massentransport über Maschengrenzen hinweg zuläßt, war die wichtigste Erweiterung die Einführung von axialem Wärmetransport über Maschengrenzen hinweg unabhängig vom Massentransport. Der erste Transportmechanismus ist die axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien. Sie ist für die Mol 7C-Experimente von großer Bedeutung, da in den Randbereichen der relativ kurzen Zentralblockade sehr hohe Temperaturdifferenzen vorliegen. Als zweites ist es notwendig, den axialen Wärmetransport durch Konvektion zu berücksichtigen, d.h. Wärmetransport von einer strömenden Flüssigkeit in einer Masche an die festen Strukturen in den axial benachbarten Maschen, jedoch ohne daß gleichzeitig ein Massentransport über diese Maschengrenzen stattfindet. Dieser Effekt spielt bei der Entstehung und der Kühlung einer Kaverne mit einem siedenden Pool in ihrem Innern eine Rolle, wie sie wahrscheinlich bei Mol 7C/4 und 5 vorlag. In radialer Richtung ist in der Referenzversion von SIMMER-II ein Wärmetransport in die Nachbarzelle auch unabhängig von Massentransport möglich.

Die Spaltprodukte und -gase werden in der vorliegenden Arbeit wegen der beschränkten Möglichkeiten des SIMMER-II Computerprogramms im Hinblick auf die in den Mol 7C-Experimenten vorliegenden Bedingungen nicht berücksichtigt.

In diesem Bericht werden zunächst der Versuchsaufbau, die Durchführung, die Meßwerterfassung sowie die Nachuntersuchungsergebnisse der Mol 7C-Versuche dargestellt und die für eine komplette Nachrechnung der Versuche erforderlichen Erhaltungsgleichungen sowie die für Mol 7C relevanten Phänomene erläu-

tert. Im weiteren werden die in SIMMER-II bisher verwendeten Modelle und die eingeführten Modellerweiterungen und ihre Verifizierung dargestellt. Der Verlauf der Rechnungen mit dem erweiterten SIMMER-II Programm - insbesondere des Experiments Mol 7C/5, aber auch der Anfangsphase des Experiments Mol 7C/4 - werden beschrieben, die Ergebnisse diskutiert und mit den Versuchsergebnissen verglichen. In der Zusammenfassung werden die wichtigsten Ergebnisse kurz wiederholt und die möglichen Schlußfolgerungen daraus gezogen, außerdem wird ein Ausblick auf weitere mögliche Verbesserungen des SIMMER-II Programms für die Analyse der Mol 7C-Versuche gegeben.

2. Die Mol 7C-Versuche

2.1 Aufbau und Durchführung

Die insgesamt sieben Versuche der Reihe Mol 7C wurden in einem Natriumkreislauf im zentralen Bestrahlungskanal des Versuchsreaktors BR2 in Mol/Belgien in Zusammenarbeit zwischen dem KfK, dem SCK/CEN Mol und dem JRC Ispra durchgeführt (Abb. 2.1). Die wichtigsten Bestandteile des Natriumkreislaufs sind (in Abb. 2.1 von oben nach unten betrachtet): der Expansionstank mit dem DND-Monitor, der Natrium-Helium-Wärmetauscher, der einen kontinuierlichen Leistungsbetrieb der Testeinrichtung erlaubt, die Natriumpumpen und die Teststrecke. Das Natrium fließt aus dem Expansionstank durch den Wärmetauscher, die Natriumpumpen und den äußeren Ringspalt nach unten. Von dort fließt ein Teil durch den Bypass, der andere Teil durch das Brennstabbündel wieder nach oben. Das 37-Stabbündel hat einen Gesamtdurchmesser von 49,6 mm und besteht aus 30 Brennstäben und sieben Dummystäben (sechs Eck- und ein Zentraldummy) und erstreckt sich axial über insgesamt ca. 1,5 m. Die wichtigsten Brennstabdaten der Versuche Mol 7C/4 bis 6 sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Versuch	4	5	6
Brennstoff	PuO ₂ -UO ₂		
PuO ₂ -Anteil	30 Gew. %		
U ₂₃₅ -Anreicherung	93 at %		
Pu-Anreicherung	84 at %		
Hüllrohrstahl	1.4981	1.4970	1.4970
Hüllrohrdurchmesser außen	6 mm		
Hüllrohrdurchmesser innen	5,24 mm		
Brennstablänge	1574,4 mm		
Brennstofflänge	600 mm		
Pelletdurchmesser	5,09 mm		
Brennstoffdichte	86,5 % TD		
Stabmittenabstand (pitch)	7,9 mm		
maximaler Abbrand	5 at %	1,7 at %	10,6 at %

Abbildung 2.2 zeigt den Bereich der Blockade der Versuche Mol 7C/4 bis 6 im Quer- und Längsschnitt. Die Kühlungstörung wird durch eine Zentralblockade hervorgerufen. Sie beginnt in axialer Richtung 40 mm über Coremitte, ist 40 mm lang und erstreckt sich in radialer Richtung bis zur Mitte der zweiten Stabreihe der insgesamt drei Stabreihen. Die Blockade besteht aus einem Käfig, der mit ca. 50 g hochangereicherten (90 at %) UO₂-Kugeln mit einem Durchmesser von 0,56 mm gefüllt ist. Der Käfig setzt sich aus insgesamt vier Blechen als axiale Begrenzungen bzw. Unterteilungen des Blockadebereichs und einem Drahtgitter als radiale Begrenzung zusammen. Die Kugelschüttung mit einer Porosität von ca. 40 %, die Maschen des Drahtgitters und die Ringspalte zwischen den Blechen und den Stäben erlauben einen Natrium-Restdurchsatz durch die Blockade. In der Anfangsphase des Experiments kann die Blockade zusätzlich durch das im Bereich der Blockade geschlitzte Zentralsdummy gekühlt werden. Durch das Zentralsdummy fließt dann vom Bündeleintritt kaltes Natrium direkt in die Mitte der Blockade. An der Eintrittsöffnung des Dummyrohres befindet sich das sogenannte Blockadeventil, das zur Unterbrechung der Blockadezusatzkühlung geschlossen werden kann.

Die in den folgenden Kapiteln aufgeführten Rechnungen orientieren sich vor allem an den Daten der Experimente Mol 7C/4 und 5. Die wichtigsten Parameter der Experimente 7C/4 bis 6 zu Beginn der Transiente, d.h. für Mol 7C/4 und 6 nach Schließen des Blockadeventils, sind in folgender Tabelle zusammengestellt:

	Mol 7C/4	Mol 7C/5	Mol 7C/6
gesamter Na-Strom durch das Bündel:	1,4 kg/s	1,86 kg/s	1,55 kg/s
mittl. Na-Geschwindigkeit im Bündel:	1,9 m/s	2,4 m/s	2,0 m/s
mittlere maximale Stableistung:	350 W/cm	385 W/cm	398 W/cm
Na-Temperatur am Bündeleintritt:	354 °C	363 °C	383 °C
Na-Temperatur am Bündelaustritt:	642 °C	605 °C	688 °C

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, wurden die Bedingungen in allen Versuchen so eingestellt, daß bei nomineller Leistung ohne Zusatzkühlung das Natrium innerhalb der Blockade siedete. Dieser Zustand wurde auf zwei verschiedene Arten erreicht. Bei den Experimenten Mol 7C/4 und Mol 7C/6 war das Blockadeventil zunächst offen. Dadurch wurde die Blockade zusätzlich durch das Zentralsdummy gekühlt. Nach Erreichen der vollen Reaktorleistung wurde die zweite Phase der

Experimente, die Transiente, durch Schließen des Blockadeventiles eingeleitet. Damit kam es zu einem schnellen Temperaturanstieg bis zum Erreichen des Siedezustands im Blockadebereich. Im Gegensatz dazu blieb bei Mol 7C/5 das Ventil von vorneherein geschlossen. Die Reaktorleistung wurde in Schritten von 10 % langsam erhöht (Abb. 2.3). Natriumsieden im Bereich der Blockade begann kurz vor Erreichen der nominellen Stableistung (s. Abb. 2.3).

Die Fahrweise des Experimentes Mol 7C/5 kommt den möglichen Vorgängen bei einer Blockadebildung im Reaktor am nächsten. Dabei würden die Temperaturen wahrscheinlich bei konstanter Leistung und insgesamt gesehen konstantem Natriumdurchfluß mit zunehmender Blockadegröße lokal langsam ansteigen.

Ausgehend vom Natriumsieden entwickelte sich bei den Versuchen der Schaden über Verdampfen des Natriums, Dryout und anschließendem Schmelzen der Hüllrohre und später auch des Brennstoffs bis hin zum Erstarren der geschmolzenen Materialien weiter. Zunächst wurde nur der innere Bereich der Blockade beschädigt. Nach etwa 18 Minuten kam es bei dem Versuch Mol 7C/5 zu einer geringen Ausweitung des Schadens durch Aufbrechen der inzwischen entstandenen Kavertne, verbunden mit einem Brennstoffverlust. Bei Mol 7C/4 hingegen breitet sich der Schaden schon nach ca. 3 Minuten an einer Seite bis hin zum Bündelrohr aus, das das Testbündel umschließt. Nach Erreichen einer stabilen Konfiguration wurde in beiden Fällen das Bündel noch ca. vier Stunden weiterbestrahlt und damit beheizt, bevor in der dritten Phase die Reaktorleistung langsam abgefahren wurde. Im Versuch Mol 7C/6 kam es im Gegensatz zu den beiden vorherigen Experimenten in weniger als einer Minute zu einer Schadensausbreitung und einer Schnellabschaltung des BR2. Da zu diesem Experiment noch keine Nachuntersuchungsergebnisse vorlagen, wurde es im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

2.2 Meßwerterfassung

Über den Verlauf der Experimente gibt es globale Meßdaten wie z.B. den Druck am Bündeleintritt, das DND-Signal, die Natriumdurchsätze und die Ein- und Austrittstemperaturen des Natriums. Auch in den Randbereichen und außerhalb der Blockade wurden die Temperaturen während des kompletten Versuchsablaufs gemessen. Die Temperaturverläufe aus dem inneren Bereich der Blockade sind dagegen nur bis zum Schmelzen der NiCr-Ni-Thermoelemente (ca. 1500 °C) bekannt. Die Positionen der Thermoelemente im Testbündel sind in Abb. 2.2 eingezeichnet. Sie befinden sich jeweils in den Unterkanälen zwischen den Brennstäben und messen die Temperaturen in den Kühlkanälen der Kugelschüttung, d.h.

bis zum Dryout die Natriumtemperatur. Wegen der geringen Kugeldurchmesser ist die mittlere Brennstofftemperatur der Kugeln in der Schüttung nicht wesentlich höher als die angezeigte Temperatur. Abb. 2.4 zeigt beispielhaft zwei Temperaturverläufe aus dem Blockadebereich (TE 36, TE 37) und einen aus der Rezirkulationszone hinter der Blockade (TE 47) und das DND-Signal für den Beginn der Schadensentwicklung im Experiment Mol 7C/4 [10]. Die wichtigsten Schritte der Schadensentwicklung in dieser Phase des Experiments wie Siedebeginn, Dryout und Beginn vom Stahlschmelzen sind eindeutig zu erkennen.

2.3 Nachuntersuchungen

Weitere Informationen liefern die nach Abschluß der Experimente durchgeführten zerstörenden Nachuntersuchungen, kurz PIE (Post-Irradiation Examination). Insbesondere die in den heißen Zellen des KfK hergestellten keramografischen Schnittbilder des Blockadebereichs zeigen den Zustand des Experiments nach dem Ende der Bestrahlung. Zum Konservieren des Schadensbildes wurde das Bündel vor dem Schneiden der Proben mit Kunstharz (Araldit) ausgegossen [16, 17].

Der Querschnitt (Abb. 2.5) und der Längsschnitt (Abb. 2.6) der Nachuntersuchungen von Mol 7C/5 zeigen, daß der geschmolzene Stahl und der Brennstoff in den gut gekühlten Randbereichen der Blockade wieder gefroren sind. Der Stahl erscheint auf den Schnittbildern weiß und der Brennstoff grau, teilweise mit deutlich erkennbaren Rißstrukturen. Es hat sich, wie die Bilder zeigen und bereits in Kapitel 1 erwähnt wurde, eine von einer Stahl/Brennstoffkruste umschlossene Kaverne gebildet. Die Brennstoffkruste umschließt die Kaverne direkt und ist ringsum geschlossen. Der Stahl befindet sich weiter außen und bildet keine durchgehende Schicht. Die Kaverne erstreckt sich bei Mol 7C/5 in radialer Richtung etwa bis zum äußeren Rand der ersten Stabreihe und in axialer Richtung über etwa dreiviertel der Blockadenlänge. Die Krustendicke beträgt im oberen Bereich der Kaverne etwa 1,4 mm, in unteren bis zu 3,5 mm. Es scheint jedoch während des Experiments nur der auf dem Längsschnitt (Abb. 2.6) feiner strukturierte "dunklere" Teil der Kruste über längere Zeit fest gewesen zu sein. Im unteren Bereich der Kaverne ist dieser Anteil nur etwa 0,5 mm bis 0,8 mm dick. Nach oben hin nimmt die Dicke der feinstrukturierten Zone zu. Im oberen Bereich der Kaverne scheint daher während des Experiments der größte Teil der in den Nachuntersuchungen vorgefundenen Kruste in fester Form vorhanden gewesen zu sein. Der Rest der Kruste, der grob strukturierte "hellere" Bereich, vor allem im unteren Teil der Kaverne, entstand wahrscheinlich durch Erstarren des im Innern der Kaverne enthaltenen flüssigen Brennstoffs beim Abfahren der Reaktorlei-

stung. In diesem Zusammenhang wurde zunächst abgeschätzt, wie dick eine feste Kruste unter den im Experiment vorliegenden Bedingungen sein kann. Einfache stationäre eindimensionale Wärmeleitrechnungen zeigten, daß die Dicke der Kruste maximal 1,8 mm betragen kann [12]. Hierbei wurde angenommen, daß die Temperaturdifferenz über der Kruste 1300 K beträgt (Brennstoffschmelztemperatur (3000 K) an der inneren und Stahlschmelztemperatur (1700 K) an der äußeren Oberfläche der Kruste) und daß kein zusätzlicher Wärmestrom durch die Kruste vorhanden ist, z.B. von flüssigem Brennstoff im Inneren der Kaverne. Wird hingegen die gesamte erzeugte Wärme des 3,5 mm dicken Kavernenbodens nach unten abgeleitet, so kann der feste Anteil der Kruste nur noch etwa 0,5 mm betragen. Schon dieser einfachen Wärmeleitrechnungen sprechen für die Annahme, daß ein großer Teil der Kruste im unteren Bereich der Kaverne erst während des Abschaltvorgangs des Reaktors durch Gefrieren des bis dahin flüssigen Brennstoffs entstanden ist.

Eine Brennstoffmassebilanz aufgrund der Schnittbilder ergab einen Brennstoffverlust aus dem Blockadebereich bei Mol 7C/5 von etwa 11 g bis 17 g [12]. Dies sind etwa 8 % bis 13 % des ursprünglich insgesamt im Blockadebereich vorhandenen Brennstoffs der Brennstäbe und der Kugeln. Mit dem DN/RAT-Computerprogramm wurde aus den DND-Signalen berechnet, daß davon 10 g erst etwa 18 Minuten nach dem Aufbrechen der Kaverne verloren gegangen sind [18]. Gefrorener Brennstoff ist vereinzelt außerhalb des Blockadebereichs zwischen den Brennstäben gefunden worden (Abb. 2.7). Nach dem Aufbrechen scheint die Brennstoffkruste wieder "verheilt" zu sein und die geschlossene Kaverne, gefüllt mit flüssigem Brennstoff, fortbestanden zu haben.

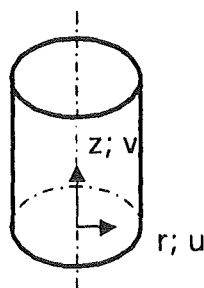
Beim Versuch Mol 7C/4 mit dem höheren Abbrand ist das Ausmaß des Schadens, wie aus den Nachuntersuchungen (Abb. 2.8) ersichtlich, wesentlich größer. Nach Bildung einer ähnlichen Anfangskonfiguration kam es nach etwa drei Minuten zum Aufbrechen der Kaverne und zu einem radialen Austritt von Brennstoff. Der Schaden breitete sich auf einer Seite über den ursprünglichen Bereich der Blockade hinaus bis zum ersten Bündelrohr aus. Dieses schmolz sogar an einer Stelle durch, und der flüssige Brennstoff gelangte in den Spalt zwischen den Bündelrohren. Die nun entstandene Konfiguration scheint nicht mehr ringsum geschlossen gewesen zu sein, da im Gegensatz zu Mol 7C/5 im Innern der Kaverne bei den Nachuntersuchungen Natrium gefunden wurde. Zusätzlich sind keine Strukturen vorhanden, die auf das Gefrieren von flüssigem Brennstoff während des Abfahrens der Leistung hinweisen. Unmittelbare Aussage über die Vorgänge und Zustände im Innern der geschlossenen Kaverne während der Transiente, z.B. über

Druck und Temperatur, lassen sich aus den Nachuntersuchungen des Experiments ebenso wenig ableiten wie aus den Meßwerten.

3. Grundlagen für die Analyse der Mol 7C-Versuche

Der Versuchsablauf der Mol 7C-Versuche ist ein sehr komplexer Vorgang. Er erstreckt sich von einem stationären Ausgangszustand mit einphasiger Natriumströmung über eine Zweiphasenströmung durch Verdampfen des Natriums bis zum Dryout und zum Schmelzen des Stahls und des Brennstoffs. Die Bewegung der geschmolzenen Materialien wird durch die Schwerkraft, die Reibung und die Restströmung durch die Blockade bestimmt. Flüssiger Stahl und flüssiger Brennstoff gefrieren vor allem in den besser gekühlten Randbereichen der Blockade wieder aus. Dadurch kommt es zu der im Experiment beobachteten Bildung einer Kaverne. In der Kaverne befindet sich während des Experiments möglicherweise ein siedender Pool. Alle diese Phänomene müssen von einer Rechnung wiedergegeben werden. Daher sind nicht nur die Materialien Brennstoff, Stahl und Natrium darzustellen, sie müssen auch in verschiedenen Phasen vorkommen und z.B. durch Schmelzen oder Gefrieren von einer Phase in eine andere übergehen können. Der Brennstoff und der Stahl können dabei fest, flüssig oder dampfförmig vorliegen, das Natrium in flüssiger Form oder als Dampf.

Für eine komplette Berechnung des Versuchsablaufs müssen alle diese Materialien und Phasen berücksichtigt werden. Daher müssen die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie für alle drei Phasen und die jeweiligen Materialien und die Gleichung zur Berechnung des Drucks gelöst werden [13, 19]. Es müssen alle Phasenwechsel wie Schmelzen, Gefrieren, Verdampfen und Kondensieren und die damit verbundenen Massen-, Impuls- und Energietransporte wiedergegeben werden. Zusätzlich muß eine Energieerzeugung, z.B. im Brennstoff, möglich sein. Die im folgenden aufgeführten Erhaltungsgleichungen sind jeweils auf ein festes Volumenelement bezogen. Weiterhin wurde die Geometrie auf ein rotationssymmetrisches Modell vereinfacht. Damit reicht es aus, die Größen in radialer Richtung (r) und in axialer Richtung (z) zu berücksichtigen mit der radialen Geschwindigkeit (u) und der axialen (v).



3.1 Erhaltungsgleichungen

In allen nachfolgenden Erhaltungsgleichungen werden die makroskopischen Dichten der jeweiligen Materials verwendet, d.h. die Masse des Materials bezogen auf ein festes Volumenelement (Zelle). Es gilt z.B. für die makroskopische Dichte eines festen Materials s_m :

$$\bar{\rho}_{s_m} = \frac{m_{s_m}}{V_{Zelle}} \quad (3.1)$$

$\bar{\rho}_{s_m}$ - makroskopische Dichte des festen Materials s_m [kg/m^3]

m_{s_m} - Masse des festen Materials s_m innerhalb des Volumenelements (Zelle)
[kg]

V_{Zelle} - Volumen der Zelle [m^3]

Der Volumenanteil eines Materials in einer Zelle berechnet sich aus dem Quotienten der makroskopischen Dichte geteilt durch die mikroskopische Dichte dieses Materials, z.B. für ein flüssiges Material ℓ_m gilt:

$$\alpha_{\ell_m} = \frac{\bar{\rho}_{\ell_m}}{\rho_{\ell_m}} \quad (3.2)$$

α_{ℓ_m} - Volumenanteil des flüssigen Materials ℓ_m [-]

$\bar{\rho}_{\ell_m}$ - makroskopische Dichte des flüssigen Materials ℓ_m [kg/m^3]

ρ_{ℓ_m} - mikroskopische Dichte des flüssigen Materials ℓ_m [kg/m^3]

Der Volumenanteil aller Materialien einer Phase in einer Zelle ergibt sich aus der Summe der Volumenanteile der einzelnen Materialien dieser Phase, z.B. gilt für die Flüssigkeiten:

$$\alpha_L = \sum_{\ell_m} \alpha_{\ell_m} \quad (3.3)$$

α_L - Volumenanteil der gesamten flüssigen Phase [-]

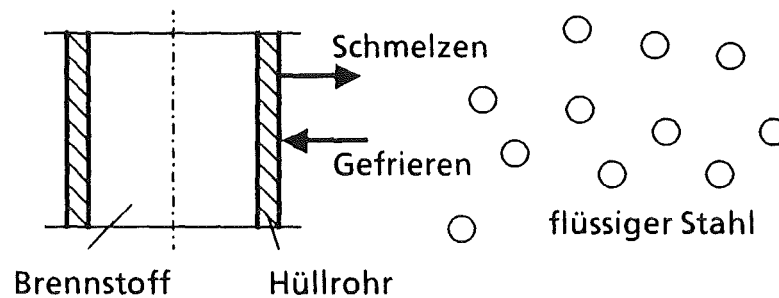
Analog dazu gilt für die makroskopische Dichte z.B. der gesamten flüssigen Phase:

$$\bar{\rho}_L = \sum_{\ell_m} \bar{\rho}_{\ell_m} \quad (3.4)$$

3.1.1 Feste Materialien

Die Erhaltungsgleichungen werden zunächst für ein beliebiges, festes Material sm aufgeführt.

Massenerhaltung



Bei der Massenbilanz für feste Materialien müssen Schmelz- und Gefriervorgänge berücksichtigt werden (in der Skizze am Beispiel des Hüllrohres eines Brennstabs dargestellt). Die Änderung der Masse eines festen Materials sm , bezogen auf ein festes Volumenelement, d.h. die Änderung der makroskopischen Dichte ($\bar{\rho}_{sm}$), pro Zeit muß gleich der gesamten Massentransportrate zu diesem Stoff sm ($-\Gamma_{sm}$) sein. Diese Rate bestimmt sich aus der Differenz der durch Gefrieren zugeführten Masse minus der durch Schmelzen verloren gegangenen Masse des Materials sm pro Volumeneinheit. Es gilt also:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{sm}}{\partial t} = -\Gamma_{sm} \quad (3.5)$$

Γ_{sm} - gesamte abgegebene Massentransportrate des festen Materials sm
[kg/m³ s]

Die für die Berechnung der Mol 7C-Versuche mit dem SIMMER-II Programm verwendeten Massentransportraten werden in Kapitel 4.1.2 genauer erläutert.

Impulsgleichung

Der Impuls ($m\vec{v}$) eines ortsfesten Materials ist Null. Die feste Phase wird als Impulsenke angenommen. Die Impuls- oder Massenaustauschgrößen mit der festen Phase werden in den jeweiligen Gleichungen für die flüssigen und dampfförmigen Materialien beschrieben.

Energiegleichung

Die Änderung der gesamten Energie eines festen Materials sm in einem Volumenelement pro Zeit ist gleich der Energietransportrate zu diesem Material plus der von diesem Material im Volumenelement erzeugten Leistung. Es gilt also für die Energieerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{sm} e_{sm}}{\partial t} = Q_{sm} + NQ_{Nsm} \quad (3.6)$$

e_{sm} - spezifische innere Energie des Materials sm [J/kg]

Q_{sm} - gesamte Energietransportrate zu dem festen Material sm [W/m³]

NQ_{Nsm} - im Material sm erzeugte spezifische Leistung [W/m³]

Die Energietransportrate setzt sich aus den Raten für den Wärmetransport, den Massentransport und die durch Reibung zusammen.

$$Q_{sm} = q_{Hsm} + q_{\Gamma sm} + q_{Ksm} \quad (3.7)$$

q_{Hsm} - durch Wärmetransport

$q_{\Gamma sm}$ - durch Massentransport

q_{Ksm} - durch Reibung

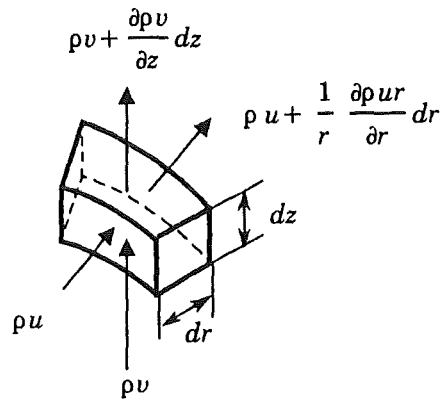
Die für die Berechnungen relevanten Energietransportraten werden in Kapitel 4.1.1 aufgeführt.

3.1.2 Flüssige Materialien

Für alle vorkommenden flüssigen Materialien ℓm müssen die folgenden Erhaltungsgleichungen gelöst werden.

Massenerhaltung

Bei mehrphasigen Vorgängen muß die zeitliche Änderung der Masse eines Materials ℓm in der flüssigen Phase in einem Volumenelement gleich der Differenz der ein- und austretenden Massenströme sein (siehe Skizze) zuzüglich der innerhalb des Volumenelements durch Schmelzen und Kondensieren zugeführten Massen bzw. abzüglich der durch Gefrieren und Verdampfen abgeführten Massen.



In der folgenden Gleichung wird die innerhalb eines Volumenelements durch Phasenwechsel insgesamt von einem flüssigen Material ℓ_m abgegebene Masse pro Volumenelement und Zeit mittels Γ_{ℓ_m} dargestellt. Damit lautet die Massenerhaltung für eine Flüssigkeit ℓ_m :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{\ell_m}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{\ell_m} \vec{v}_L) = -\Gamma_{\ell_m} \quad (3.8)$$

Γ_{ℓ_m} - gesamte abgegebene Massentransportrate des flüssigen Materials ℓ_m [kg/m³ s]

\vec{v}_L - Geschwindigkeitsvektor der Flüssigkeiten mit der radialen Komponente u_L und der axialen v_L [m/s]

Der erste Term der linken Seite in Gleichung (3.8) stellt die zeitliche Änderung der Masse innerhalb des Volumenelements dar. Der zweite Term ergibt sich aus der Differenz der ein- und austretenden Massenströme (siehe Skizze). Es gilt:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_{\ell_m} \vec{v}_L) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho}_{\ell_m} u_L r) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho}_{\ell_m} v_L) \quad (3.9)$$

Impulsgleichung

Bei der Aufstellung der Impulsbilanz kann die flüssige Phase insgesamt betrachtet werden, wenn sich alle verschiedenen Materialien der flüssigen Phase mit der gleichen Geschwindigkeit (\vec{v}_L) bewegen. Damit kann die Impulsgleichung für die makroskopische Dichte der gesamten flüssigen Phase (siehe Gl. (3.4)) aufgestellt werden. Die zeitliche Änderung des Impulses der flüssigen Phase (erster Term der linken Seite in Gl. (3.10)) ist dann gleich der Differenz des eintretenden und austretenden Impulsstroms (der zweite Terme der linken Seite Gl. (3.10)) zuzüglich

der Impulstransportraten zu der Flüssigkeit und der am Volumenelement wirkenden Kräfte.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_L \bar{v}_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_L \bar{v}_L \bar{v}_L) = - \alpha_L \nabla p + \bar{\rho}_L \bar{g} + \Gamma_{GL} \bar{v}_G - (\Gamma_{LS} + \Gamma_{LG}) \bar{v}_L + K_{GL} (\bar{v}_G - \bar{v}_L) - K_{LS} \bar{v}_L + \nabla \cdot \tau_L \quad (3.10)$$

- P - Druck [N/m²]
- \bar{g} - Erdbeschleunigung [m/s²]
- K_{GL} - Impulsaustausch zwischen der Flüssigkeit und dem Dampf [kg/m³ s]
- K_{LS} - Impulsaustauschkoeffizient zwischen Flüssigkeit und fester Struktur [kg/m³ s]
- τ_L - Schubspannungstensor für die Flüssigkeitsströmung [N/m²]
- Γ_{GL} - Massentransportrate von der Flüssigkeit an den Dampf [kg/m³ s]
- Γ_{LG} - Massentransportrate vom Dampf an die Flüssigkeit [kg/m³ s]
- Γ_{LS} - Massentransportrate von der Flüssigkeit an die feste Struktur [kg/m³ s]

Die Oberflächenkräfte setzen sich aus den Druckkräften (erster Term der rechten Seite in Gl. (3.10)) und den durch Scher- und Normalspannungen innerhalb der Flüssigkeitsströmung hervorgerufenen Kräfte (letzter Term rechte Seite) zusammen. Die Oberflächenkräfte $\nabla \cdot \tau_L$ werden dabei wie folgt berechnet:

in radialer Richtung

$$v_L \left[\frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{\rho}_L}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_L) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{\rho}_L \frac{\partial u_L}{\partial z} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{\rho}_L \frac{\partial v_L}{\partial r} \right) \right) \right] \quad (3.11)$$

und in axialer Richtung

$$v_L \left[\frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{\rho}_L \left(\frac{\partial u_L}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\bar{\rho}_L r \frac{\partial v_L}{\partial r} \right) + \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\bar{\rho}_L r \frac{\partial u_L}{\partial z} \right) \right) \right] \quad (3.12)$$

- v_L - kinematische Zähigkeit [m²/s]

Die übrigen Terme der rechten Seite der Gleichung (3.10) kommen durch Impuls- und Massenaustausch mit der flüssigen Phase zustande. Die verwendete Impulsaustauschgrößen und die Massentransportraten werden wiederum in Kapitel 4 näher diskutiert.

Energiegleichung

Bei der Betrachtung der Energiebilanz ist es im Gegensatz zu den Impulsgleichungen notwendig, alle verschiedenen flüssigen Materialien ℓ_m getrennt zu behandeln. Die zeitliche Änderung der Energie eines Materials ℓ_m in einem Volumenelement (erster Term linke Seite in Gleichung (3.13)) muß gleich der Differenz der

ein- und austretenden Energieströme (zweiter Term linke Seite) zuzüglich der innerhalb des Volumenelements insgesamt durch Energietransport zugeführten und der im Material ℓ_m erzeugten Leistung und der Leistung der Druckkräfte am Volumenelement sein.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{\ell_m} e_{\ell_m}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{\ell_m} e_{\ell_m} \vec{v}_L) = Q_{\ell_m} + N Q_{N\ell_m} - p \nabla \alpha_L \vec{v}_L \quad (3.13)$$

- e_{ℓ_m} - spezifische innere Energie des flüssigen Materials ℓ_m [J/kg]
- $N Q_{N\ell_m}$ - im Material ℓ_m erzeugte spezifische Leistung [W/m³]
- $p \nabla \alpha_L \vec{v}_L$ - Leistung der Druckkräfte (für kompressible Flüssigkeiten) [W/m³]
- Q_{ℓ_m} - gesamte Energieströme zu dem flüssigen Material ℓ_m [W/m³]

Die Energieströme bestimmen sich aus der Summe der zugeführten Leistung durch Energie- und durch Massentransport und durch die Oberflächenkräfte:

$$Q_{\ell_m} = q_{H\ell_m} + q_{\Gamma\ell_m} + q_{K\ell_m} \quad (3.14)$$

- $q_{H\ell_m}$ - Energieströme durch Wärmetransport
- $q_{\Gamma\ell_m}$ - Energieströme durch Massentransport
- $q_{K\ell_m}$ - Energieströme durch Reibung

Die wichtigsten Energieströme werden in Kapitel 4.1.1 und 4.1.2 beschrieben.

3.1.3 Gasförmige Materialien

Für die gasförmige Phase müssen wiederum alle drei Erhaltungsgleichungen gelöst werden.

Massenerhaltung

Für eine Komponente g_m der Gasphase gilt für die Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{g_m}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{g_m} \vec{v}_G) = - \Gamma_{g_m} \quad (3.15)$$

- $\bar{\rho}_{g_m}$ - makroskopische Dichte des dampfförmigen Material g_m [kg/m³]
- Γ_{g_m} - gesamte Massentröme von dem Stoff g_m [kg/m³ s]
- \vec{v}_G - Geschwindigkeitsvektor der Dampfphase mit der radialen Komponente u_G und der axialen v_G [m/s]

Impulsgleichung

Für die Gasphase gelten die gleichen Betrachtungen wie für die Flüssigkeiten, damit lautet die Impulsgleichung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_G \vec{v}_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_G \vec{v}_G \vec{v}_G) = -\alpha_G \nabla p + \bar{\rho}_G \vec{g} + \Gamma_{LG} \vec{v}_L - \Gamma_{GL} \vec{v}_G + K_{GL} (\vec{v}_L - \vec{v}_G) - K_{GS} \vec{v}_G + \nabla \cdot \tau_G \quad (3.16)$$

- α_G - Volumenanteil der gesamten Dampfphase [-]
- K_{GS} - Impulsaustauschkoeffizient zwischen Dampf und fester Struktur [kg/m³ s]
- τ_G - Schubspannungstensor für die Dampfströmung [N/m²]

Energiegleichung

Zusätzlich wird angenommen, daß die einzelnen Bestandteile der Gasphase sich so gut vermischen, daß sie alle die gleiche Temperatur haben. Es reicht also auch, die Energiegleichung für das Gemisch der gasförmigen Materialien zu lösen.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_G e_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_G e_G \vec{v}_G) = -p \nabla \alpha_G \vec{v}_G + Q_G + N Q_{NG} \quad (3.17)$$

- e_G - spezifische innere Energie des Dampfs [J/kg]
- $P \nabla \alpha_G \vec{v}_G$ - Leistung der Druckkräfte [W/m³]
- Q_G - gesamte Energietransportrate zum Dampf [W/m³]
- $N Q_{NG}$ - im Gas erzeugte spezifische Leistung [W/m³]

Berechnung des Drucks

Der Druck eines Dampfgemisches ist gleich der Summe der Partial-Drücke; mit der allgemeinen Gasgleichung gilt:

$$p = \sum_m \rho_{gm} R_m T_G \quad (3.18)$$

- T_G - Temperatur des Gasgemisches [K]
- R_m - spezifische Gaskonstante [J/kg K]
- ρ_{gm} - Dichte des dampfförmigen Materials gm [kg/m³]

3.2 Wärmeübergangsgleichungen

Die durch Leitung und Konvektion übertragenen Wärmeströme lassen sich bei bekannten Temperaturdifferenzen mit Hilfe allgemein gültiger Gleichungen bestimmen. Im eindimensionalen Fall gilt für die Wärmeleitung in x-Richtung (Fourier'sches Gesetz) innerhalb fester Materialien:

$$q''_{\text{Leitung}} = -k \frac{dT}{dx} \quad (3.19)$$

- q''_{Leitung} - Wärmestromdichte [W/m²]
- k - Wärmeleitfähigkeit [W/mK]
- T - Temperatur [K]
- x - Länge [m]

Der effektive Wärmestrom ist:

$$\dot{Q} = -k \frac{dT}{dx} A \quad (3.20)$$

- \dot{Q} - Wärmestrom [W]
- A - Querschnittsfläche [m²]

Für den konvektiven Wärmetransport gilt:

$$q''_{\text{Konvektion}} = h \Delta T \quad (3.21)$$

- h - Wärmeübergangskoeffizient [W/m²K]

oder

$$\dot{Q}_{\text{Konvektion}} = h \Delta T A \quad (3.22)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient h wird für die erzwungene Konvektion über die Nusseltzahl mit Hilfe der Prandtl- und der Reynoldszahl berechnet [13]. Mit den Beziehungen für die Nusseltzahl

$$Nu = c_1 Re^{c_2} Pr^{c_3} + c_4 \quad (3.23)$$

und

$$Nu = \frac{h D_h}{k} \quad (3.24)$$

folgt für den Wärmeübergangskoeffizienten:

$$h = h_L = \frac{k}{D_h} (c_1 Re^{c_2} Pr^{c_3} + c_4) \quad (3.25)$$

D_h - hydraulischer Durchmesser [m]

c_1, c_2, c_3, c_4 - dimensionslose Konstanten

Hierbei gilt für die Reynoldszahl:

$$Re = \frac{D_h |\vec{v}| \rho}{\mu} \quad (3.26)$$

μ - dynamische Viskosität [kg/ms]

ρ - Dichte [kg/m³]

$|\vec{v}|$ - Betrag des Geschwindigkeitsvektors [m/s]

und für die Prandtlzahl:

$$Pr = \frac{c_v \mu}{k} \quad (3.27)$$

c_v - spezifische Wärme bei konstantem Volumen [J/kg K]

Der hydraulische Durchmesser wird im allgemeinen wie folgt berechnet:

$$D_h = \frac{4 A}{U} \quad (3.28)$$

A - Strömungsfläche [m²]

U - benetzter Umfang (Stäbe und Kastenwand) [m]

4. Das SIMMER-II Computerprogramm

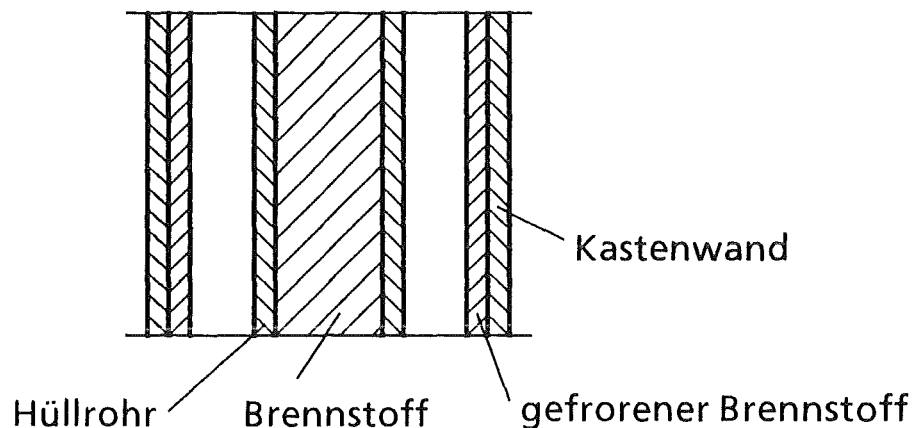
4.1 Beschreibung

Die Forderung, die Mol 7C-Experimente vom Ausgangszustand bis hin zum Schmelzen und Gefrieren der vorhandenen Materialien durch Lösung der in Kapitel 3 aufgeführten Erhaltungsgleichungen nachzurechnen, schränkt die Zahl der zur Verfügung stehenden Computerprogramme von vornherein ein. Die französischen Programme PHYSURA-GRAPPE [20] und SURFASS [21] zur Berechnung von Störfällen, die zum Niederschmelzen einzelner Brennelemente führen, sind, ebenso wie SIMMER-II, in der Lage, solche Probleme zu berechnen. Jedoch waren die beiden französischen Programme nicht verfügbar und die Dokumentation und die Verifikation unzureichend. Darüber hinaus haben sie keine Vorteile gegenüber SIMMER-II, sie behandeln z.B. den axialen Wärmetransport ebenso wie die ursprüngliche SIMMER-II Version unzureichend, zusätzlich löst SURFASS die Impulsgleichung nicht. Daher wurde das SIMMER-II Programm gewählt.

Wie in Kapitel 1 erwähnt, ist SIMMER-II ein im Los Alamos National Laboratory entwickeltes zweidimensionales (r , z -Richtung) Hydrodynamik-Computerprogramm mit gekoppelter Neutronik zur Berechnung schwerer kernzerstörender Unfälle in flüssigmetall-gekühlten Schnellen Brutreaktoren. Es gibt insgesamt drei Phasen - fest, flüssig und gasförmig - und die Materialien Brennstoff (Spalt- und Brutstoff), Stahl (bestehend aus Hüllrohr und Kastenwand), Absorbermaterial, Natrium und Spaltgas. In SIMMER-II wird zwischen einphasiger Flüssigkeits- und zweiphasiger Dampf/Flüssigkeitsströmung unterschieden. Die zweiphasige Strömung ist in Blasenströmung für geringere und in Tröpfchenströmung für höhere Dampfanteile (α_G) unterteilt. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden jeweils für das Gas- und das Flüssigkeitsfeld und die Massenerhaltungs- und die Energiegleichungen für die festen Stoffe gelöst. Ihre Lösung erfolgt zum Teil implizit, zum Teil explizit nach der Finite-Differenzen-Methode auf einem versetzten Euler'schen Maschennetz mit variabler Maschenlänge. Hierbei werden für die Ableitungen nach der Zeit Vorwärts-Differenzen und nach dem Raum Zentrale-Differenzen 1. Ordnung verwendet.

Das SIMMER-II Programm hat ein sehr einfaches Brennstabmodell. In den Brennstabzellen können sich als feste Bestandteile die Brennstäbe, bestehend aus Brennstoff und Hüllrohr, eine Kastenwand und eine Schicht gefrorener Brennstoff auf der Kastenwand befinden (siehe Skizze). In einer Kontrollstabzelle ersetzt das Absorbermaterial den Brennstoff. Zusätzlich können in allen Zellen flüs-

sige und gasförmige Materialien vorhanden sein. Die einzelnen Komponenten einer Zelle werden in SIMMER-II mit Hilfe ihrer Volumenanteile (Gl. 3.2) und ihren Wärmeübergangsflächen dargestellt. Es können keine einzelne Brennstäbe bzw. Brennstabreihen dargestellt werden. Das hat zur Folge, daß für jedes Material nur eine mittlere Temperatur pro Zelle berechnet wird und keine radialen Temperaturgradienten, z.B. innerhalb des Brennstoffs der Stäbe, modelliert werden können.



SIMMER-II ist zur Berechnung von Störfällen im gesamten Reaktor konzipiert worden und nicht zur Berechnung von Geometrien, mit kleinen Abmessungen und vielen komplizierten Details wie bei den Mol 7C-Versuchen. Es gibt keine Möglichkeiten, über die üblichen Komponenten hinaus andere Strukturbestandteile zu definieren. Die Bleche, die zusätzlichen Uranoxidkugeln und der Drahtkäfig lassen sich damit nicht direkt darstellen. Die gewählten Modellierungen der Komponenten der Mol 7C-Versuche werden in Kapitel 5 beschrieben.

4.1.1 Wärmetransport

Die Möglichkeiten des Wärmetransports innerhalb einer Masche sind für ein Beispiel in der Abb. 4.1 dargestellt und werden im folgenden genauer erklärt.

Der Wärmetransport zwischen zwei festen Materialien einer bestimmten Masche wird in SIMMER-II aus der Temperaturdifferenz, der Wärmeübergangsfläche und den Wärmeübergangskoeffizienten der beiden Materialien bestimmt. Damit gilt für den Wärmetransport von einem festen Material s_k zu einem festen Material s_m (z.B. vom Brennstoff der Stäbe an das Hüllrohr):

$$Q_{Hsm sk} = \frac{h_{sm} h_{sk}}{h_{sm} + h_{sk}} A_{skm} (T_{sk} - T_{sm}) \quad (4.1)$$

- A_{skm} - Wärmeübergangsfläche pro Volumeneinheit zwischen den festen Materialien sm und sk [1/m]
 h_{sm}, h_{sk} - Wärmeübergangskoeffizienten für die festen Materialien sm und sk [W/m²K]
 T_{sm} - Temperatur des festen Materials sm [K]

Die Wärmeübergangskoeffizienten für die festen Materialien werden in SIMMER-II im allgemeinen aus den Eingabewerten für die Wärmeübergangskoeffizienten ($h_{sm, Ein}$) und dem momentanen und anfänglichen Volumenanteilen dieser Komponenten berechnet:

$$h_{sm} = h_{sm, Ein} \frac{\alpha_{sm, Ein}}{\alpha_{sm}} \quad (4.2)$$

- $h_{sm, Ein}$ - Eingabewert des Wärmeübergangskoeffizienten des festen Materials sm [W/m²K]
 α_{sm} - Volumenanteil des festen Materials sm [-]
 $\alpha_{sm, Ein}$ - Volumenanteil des festen Materials sm zu Beginn der Rechnung [-]

Der Wärmetransport von einem festen Material sm an ein flüssiges Material ℓk wird wie folgt berechnet:

$$Q_{H\ell ksm} = \frac{h_{sm} h_{\ell k} \frac{\alpha_{\ell k}}{1 - \alpha_s}}{h_{sm} + \sum_k (h_{\ell k} \frac{\alpha_{\ell k}}{1 - \alpha_s})} A_{sm} (T_{sm} - T_{\ell k}) \quad (4.3)$$

- A_{sm} - Wärmeübergangsfläche pro Volumen des festen Materials sm zum Fluid [1/m]
 $h_{\ell k}$ - Wärmeübergangskoeffizient von der Flüssigkeit ℓk an die Struktur [W/m²K]
 $T_{\ell k}$ - Temperatur des flüssigen Materials ℓk [K]

Der erste Quotient auf der rechten Seite in Gl. (4.3) stellt den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen einer Flüssigkeit ℓk und einem festen Stoff sm dar. Er ist durch die Reihenschaltung des konvektiven Wärmeübergangs von flüssig nach fest (vgl. Gl. 3.22 und Gl. 3.25) und der Wärmeleitung innerhalb des festen Materials (vgl. Gl. 3.20) entstanden. Der Volumenanteil der jeweiligen Flüssigkeit $\alpha_{\ell k}$ (siehe Gleichung 3.2), bezogen auf den Volumenanteil, der den Flüssigkeiten und

Gasen insgesamt zur Verfügung steht ($\alpha_G + \alpha_L = 1 - \alpha_S$), stellt den seitens der Flüssigkeit zur Verfügung stehenden Flächenanteil dar.

Der Wärmeübergang zwischen den verschiedenen flüssigen Materialien basiert in SIMMER-II auf einem Tropfenkollisionsmodell und verwendet zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten die Radien der Tropfen und die Volumenanteile der beiden Flüssigkeiten (siehe [13] Anhang D); prinzipiell gilt:

$$Q_{H_{\ell_m \ell_k}} = H_{\ell_m \ell_k} (T_{\ell_k} - T_{\ell_m}) \quad (4.4)$$

$H_{\ell_m \ell_k}$ - Wärmeübergangskapazität pro Volumeneinheit zwischen den flüssigen Materialien ℓ_k und ℓ_m [W/m³K]

Zusätzlich gibt es in der bisher vorliegenden SIMMER-II Version die Möglichkeit des radialen Wärmetransports über Maschengrenzen ohne Massentransport. Hierbei muß in genau einer von zwei radial benachbarten Maschen eine Kastenwand vorhanden sein. Wärme kann dann innerhalb einer Masche an die Kastenwand und von dort radial über die Maschengrenze, z.B. an das flüssige Natrium der radial benachbarten Masche, transportiert werden. Axial über eine Maschengrenze kann Wärme in der bisher vorliegenden SIMMER-II Version nur zusammen mit einem strömenden Medium transportiert werden.

4.1.2 Massentransport

Der Massentransport zwischen flüssig und fest wird durch Gefrier- und Schmelzvorgänge bestimmt. Hierbei können alle festen Materialien schmelzen. Beim Gefrieren gibt es verschiedene Möglichkeiten. Der flüssige Stahl kann entweder am Hüllrohr oder an der Kastenwand der entsprechenden Masche wieder zu festem Material gefrieren, der flüssige Brennstoff nur als Schicht auf der Kastenwand. Hierbei spielt es keine Rolle, ob sich die Kastenwand in der gleichen oder in der radial benachbarten Masche befindet. Zusätzlich können beide Materialien zu Partikeln gefrieren, die sich im Flüssigkeitsfeld befinden und mit der gleichen Geschwindigkeit wie die Flüssigkeiten mitbewegt werden. Die Rate der entstandenen Partikel ist proportional der abgegebenen Wärme des entsprechenden flüssigen Materials an die anderen Bestandteile des Flüssigkeitsfelds und beim flüssigen Brennstoff zusätzlich an die Brennstäbe. Die verschiedenen Möglichkeiten des Phasenwechsels für den Brennstoff und den Stahl sind auf den Abbn. 4.2 und 4.3 dargestellt.

Zur Bestimmung der Schmelz- und Gefrierenraten zu ortsfesten Materialien wird zunächst eine Kontakttemperatur zwischen dem festen Material und den Flüssigkeiten über eine Wärmebilanz berechnet. Hierbei muß die durch Konvektion von

den flüssigen Materialien zugeführte Wärme gleich der durch Leitung in das feste Material abgeführten sein. Daraus ergibt sich für die Kontakttemperatur:

$$T_i = \frac{h_{sk} T_{sk} + \sum_m h_{\ell m} T_{\ell m}}{h_{sk} + \sum_m h_{\ell m}} \quad (4.5)$$

T_i - Kontakttemperatur zwischen den Flüssigkeiten und einem festen Material sk [K]

Ist diese Temperatur kleiner als die Schmelztemperatur einer flüssigen Komponente ℓm , so gefriert diese in den zuvor aufgeführten Fällen an der Oberfläche. Mit der Schmelztemperatur an der Oberfläche des festen Materials gilt für die Gefriertrate $\Gamma_{\ell m sk}$ von der flüssigen Komponente ℓm zu der feste Komponente sk :

$$\Gamma_{\ell m sk} = \frac{h_{sk} (T_{melt, m} - T_{sk}) + \sum_P h_{\ell P} (T_{melt, m} - T_{\ell P})}{h_{fus, m} + c_{v\ell m} (T_{\ell m} - T_{melt, m})} \quad (4.6)$$

$\Gamma_{\ell m sk}$ - Massentransportrate von dem flüssigen Material ℓm an das feste Material sk [$\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$]

$h_{fus, m}$ - Schmelzenthalpie des Materials m [J/kg]

$T_{melt, m}$ - Schmelztemperatur des Materials m [K]

$c_{v\ell m}$ - spezifische Wärme bei konstantem Volumen des flüssigen Materials ℓm [J/kg K]

Erreicht die Kontakttemperatur die Schmelztemperatur des festen Materials, so beginnt dieses zu schmelzen. Zur Berechnung der Schmelzrate wird die Kontakttemperatur auf Schmelztemperatur begrenzt; damit ergibt sich:

$$\Gamma_{sk \ell m} = \frac{h_{sk} (T_{melt, k} - T_{sk}) + \sum_P h_{\ell P} (T_{melt, k} - T_{\ell P})}{h_{fus, k} + c_{vsk} (T_{melt, k} - T_{sk})} \quad (4.7)$$

$\Gamma_{sk \ell m}$ - Massentransportrate von dem festen Material sk an das flüssige Material ℓm [$\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$]

Die Partikel des Flüssigkeitsfeldes schmelzen, wenn ihre Schmelztemperatur erreicht wird, und flüssiges Material gefriert zu Partikeln, wenn sie unterschritten wird und die Wärme z.B. an andere flüssige Materialien abgegeben wird.

Die Flüssigkeiten können bei entsprechender Energiezufuhr in SIMMER-II auch verdampfen. Der Dampf wiederum kann entweder an einer festen Struktur oder an den Tröpfchen der Flüssigkeit des gleichen Materials, z.B. Brennstoffdampf an flüssigem Brennstoff, kondensieren. Hierbei wird die Wärme jeweils an das Material abgegeben, an dem der Dampf kondensiert. Der Massentransport erfolgt jedoch immer vom Dampf an die entsprechende Flüssigkeit. Bei der Berechnung des Massentransports wird analog zum Schmelzen und Gefrieren von einer Kontaktfläche ausgegangen, die jedoch Sättigungstemperatur hat. Damit lassen sich die Wärmeströme zu der Kontaktfläche und daraus wiederum die Massentransportraten für Kondensieren und Verdampfen berechnen (siehe [13] Seite III-97 bis III-101).

Verbunden mit dem Massentransport durch die Phasenwechsel wird auch Energie transportiert. Die gesamte Energietransportrate durch Phasenwechsel zu einem festen Material s_m ist:

$$q_{\Gamma s k} = e_{sol, k} \sum_m (\Gamma_{\ell m s k} - \Gamma_{s k \ell m}) \quad (4.8)$$

$e_{sol, k}$ - spezifische innere Energie des Materials k im festen Zustand bei Schmelztemperatur [J/kg]

Energietransportrate durch Phasenwechsel zu einem flüssigen Material ℓm :

$$q_{\Gamma \ell m} = e_{liq, m} \sum_k (\Gamma_{s k \ell m} - \Gamma_{\ell m s k} + \Gamma_{\ell k \ell m} - \Gamma_{\ell m \ell k} + \Gamma_{g k \ell m} - \Gamma_{\ell m g k}) \quad (4.9)$$

$e_{liq, m}$ - spezifische innere Energie des Materials m im flüssigen Zustand bei Schmelztemperatur [J/kg]

$\Gamma_{\ell k \ell m}$ - Massentransportrate durch Schmelzen von Partikeln [kg/m³ s]

$\Gamma_{\ell m \ell k}$ - Massentransportrate durch Gefrieren zu Partikeln [kg/m³ s]

$\Gamma_{\ell m g k}$ - Massentransportrate durch Verdampfen der Flüssigkeit ℓm [kg/m³s]

$\Gamma_{g k \ell m}$ - Massentransportrate durch Kondensieren des Dampfs $g k$ [kg/m³s]

Energietransportrate durch Phasenwechsel zu Partikeln im Flüssigkeitsfeld:

$$q_{\Gamma \ell m} = e_{sol, m} \sum_k (\Gamma_{s k \ell m} + \Gamma_{\ell k \ell m} - \Gamma_{\ell m \ell k}) \quad (4.10)$$

Energietransportrate durch Phasenwechsel zu der Gasphase:

$$q_{\Gamma G} = \sum_m \left[e_{vap, m} \sum_k (\Gamma_{\ell k g m} - \Gamma_{g m \ell k}) \right] \quad (4.11)$$

$e_{vap, m}$ - spezifische innere Energie des Dampfs des Materials m bei Siedetemperatur [J/kg]

4.1.3 Impulstransport

Der Druckverlust zwischen der Zweiphasenströmung und der Struktur wird nach der Martinelli-Beziehung berechnet. Dabei wird jede Phase behandelt, als ob sie alleine vorhanden wäre. Für den Zusammenhang zwischen Druckverlust und Reibbeiwert f gilt im allgemeinen für einphasige Strömungen:

$$f = \frac{|\Delta p|}{4 \frac{\ell}{D_h} \rho \frac{|\vec{v}|^2}{2}} \quad (4.12)$$

- f - Reibbeiwert [-]
- ℓ - charakteristische Länge [m]
- Δp - Druckverlust über der Länge ℓ [N/m²]

Die dafür benötigten Reibbeiwerte werden für die Flüssigkeit und für den Dampf getrennt berechnet. Dabei gilt für f_L und f_G mit der jeweiligen Reynoldszahl nach Gl. (3.26) für den laminaren Bereich, d.h. für $Re \leq 2000$:

$$f = \frac{16}{Re} \quad (4.13)$$

und für den turbulenten Bereich, d.h. für $Re > 2000$

$$f = f_{s1} Re^{f_{s2}} \quad (4.14)$$

Für eine Standardanwendung werden die Koeffizienten $f_{s1} = 0,046$ und $f_{s2} = -0,2$ verwendet.

Für den Zweiphasendruckverlust gilt:

$$\nabla P = \phi_L^2 \nabla P_L + \phi_G^2 \nabla P_G \quad (4.15)$$

mit

$$\nabla P_L = - \frac{2f_L}{D_h} \rho_L |\vec{v}_L| |\vec{v}_L| \quad (4.16)$$

$$\nabla P_G = - \frac{2f_G}{D_h} \rho_G |\vec{v}_G| |\vec{v}_G| \quad (4.17)$$

und

$$\phi_L^2 = \left[1 + \left(\frac{1}{x^2} \right)^{\frac{1}{n}} \right]^n \quad (4.18)$$

$$\phi_G^2 = \left[1 + \left(x^2 \right)^{\frac{1}{n}} \right]^n \quad (4.19)$$

und

$$x^2 \equiv \frac{\phi_G^2}{\phi_L^2} = \frac{f_L \rho_L |\vec{v}_L|^2}{f_G \rho_G |\vec{v}_G|^2} \quad (4.20)$$

Hierbei ist $n = 3,5$ für Re_G oder Re_L kleiner als 2000 und $n = 4$ für Re_G und Re_L größer als 2000.

Addiert man nun die Impulsgleichung für die Flüssigkeits- und Gasphase und vernachlässigt die bei der Berechnung des Druckverlustes irrelevanten Terme für die Beschleunigung, den Phasenwechsel und die Volumenkräfte, so erhält man:

$$(\alpha_L + \alpha_G) \nabla P = -K_{LS} \vec{v}_L - K_{GS} \vec{v}_G \quad (4.21)$$

Daraus folgend wird für die Impulsaustauschkoeffizienten angenommen:

$$K_{LS} = \alpha_L \frac{\phi_L^2 \nabla P_L}{|\vec{v}_L|} \quad (4.22)$$

$$K_{GS} = \alpha_G \frac{\phi_G^2 \nabla P_G}{|\vec{v}_G|} \quad (4.23)$$

In SIMMER-II wird eine Strömung als einphasig betrachtet, wenn ihr Dampfanteil α_G gering ist, d.h. wenn $\alpha_G / (1 - \alpha_S) < \alpha_0$. Hierbei ist α_0 der Dampfvolumenteil am Umschlagpunkt zwischen ein- und zweiphasiger Strömung.

Bei einphasiger Strömung wird der Impulsaustauschkoeffizient zwischen Dampf und Struktur (K_{GS}) gleich Null gesetzt. Zusätzlich bewegen sich Flüssigkeit und Dampf mit der gleichen Geschwindigkeit, da der Impulsaustauschkoeffizient zwischen Dampf und Flüssigkeit (K_{GL}) gleich unendlich angenommen wird. Die Impulsaustauschkoeffizienten zwischen Dampf und Flüssigkeit basieren für kleine Reynoldszahlen auf einem Modell für Stok'sche Flüssigkeiten und für große Reynoldszahlen auf einem Widerstandsmodell (siehe [13, Seite III-83 - III-85]).

4.1.4 Zustandsdaten

Die Schmelztemperaturen betragen bei den in Kapitel 6 durchgeführten Rechnungen für Brennstoff 2950 K und für Stahl 1700 K.

Die Siede- bzw. Sättigungstemperaturen der verschiedenen Materialien (Brennstoff, Stahl und Natrium) werden aus den Dampfdrücken der entsprechenden Materialien wie folgt berechnet:

$$T_{sat, m} = \frac{T_m^*}{\ln\left(\frac{p_m^*}{p_{gm}}\right)} \quad (4.24)$$

- $T_{sat, m}$ - Siedetemperatur des Materials m [K]
- $T_m^*; p_m^*$ - SIMMER-II Eingabeparameter des Materials m [K] bzw. [N/m²]
- p_{gm} - Dampfpartialdruck des Materials m [N/m²]

Für die spezifische innere Energie eines festen Materials sm gilt:

$$e_{sm} = c_{vsm} T_{sm} \quad (4.25)$$

c_{vsm} - spez. Wärme bei konstantem Volumen des festen Materials sm [J/kg K]

Die spezifische Energie eines festen Materials bei Schmelztemperatur (Soliduspunkt) ist somit:

$$e_{sol, m} = c_{vsm} T_{melt, m} \quad (4.25)$$

Feste Materialien gehen in SIMMER-II in den flüssigen Zustand über (Liquiduspunkt), wenn zu der Solidusenergie die Schmelzenthalpie hinzugekommen ist:

$$e_{liq, \ell m} = c_{vsm} T_{melt, m} + h_{f, m} \quad (4.27)$$

$h_{f, m}$ - Schmelzenthalpie des Materials m [J/kg]

Die spezifische innere Energie eines flüssigen Materials und die Kondensationsenergie werden für Siedetemperaturen unterhalb einer vorgegebenen Temperatur wie folgt berechnet:

$$e_{\ell m} = e_{liq, m} + c_{v\ell m} (T_{\ell m} - T_{melt, m}) \quad (4.28)$$

$c_{v\ell m}$ - spezifische Wärme bei konstantem Volumen des flüssigen Materials ℓm [J/kg K]

$T_{\ell m}$ - Temperatur des flüssigen Materials ℓm [K]

$$e_{con, m} = c_{v\ell m} (T_{sat, m} - T_{melt, m}) \quad (4.29)$$

$e_{con, m}$ - Kondensationsenergie des Materials m [J/kg]

Für höhere Temperaturen kommen in den Gleichungen (4.28) und (4.29) Terme für die Abhängigkeit vom Druck hinzu (siehe [13], Seite III-33).

Die spezifische innere Energie eines dampfförmigen Materials für Temperaturen über dem Siedepunkt lautet:

$$e_{gm} = e_{vap, m} + c_{vgm} (T_G - T_{sat, m}) \quad (4.30)$$

c_{vgm} - spezifische Wärme bei konstantem Volumen des Dampfes gm [J/kg K]

4.2 Erweiterungen im Hinblick auf die Analyse der Mol 7C-Versuche

Die vorhandenen Möglichkeiten der bisher vorliegenden SIMMER-II Version 12.C reichen für eine zufriedenstellende Nachrechnung der Mol 7C-Versuche nicht aus. Daher wurden einige, zum Teil weitreichende Programmerweiterungen vorgenommen.

4.2.1 Axialer Wärmetransport über Maschengrenzen hinweg

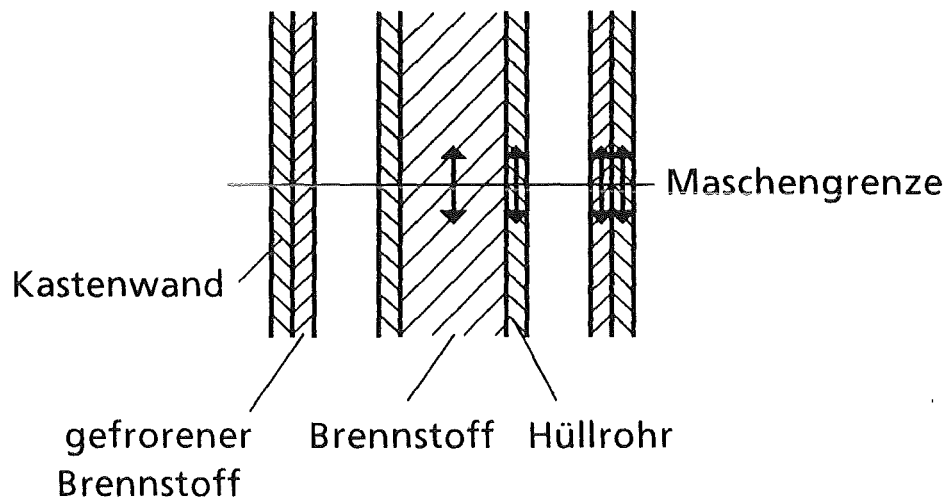
In der bisher vorliegenden SIMMER-II Version kann Energie im allgemeinen nur mittels strömender Medien (Gas oder Flüssigkeiten) von einer Masche zur nächsten transportiert werden. In Ausnahme davon kann wie gesagt in radialer Richtung Energie auch über eine die Zelle begrenzende Wand, die Kastenwand, übertragen werden (siehe auch letzter Absatz Abschnitt 4.1.1). In axialer Richtung gibt es keinen entsprechenden Mechanismus.

Diese Wärmetransportmechanismen reichen für die Nachrechnungen der Mol 7C-Versuche mit den hohen axialen Temperaturgradienten nicht aus. Daher wurden in SIMMER-II zusätzliche Möglichkeiten des axialen Wärmetransports über Maschengrenzen hinweg eingeführt, die nachfolgend beschrieben werden.

4.2.1.1 Axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien

Bei der Anwendung von SIMMER-II, sowohl auf den gesamten Reaktorkern als auch auf wesentlich kleinere Ausschnitte, erstrecken sich die Brennstäbe (bzw. der Brennstab) im allgemeinen über mehrere axial benachbarte Maschen. Ist nun die axiale Maschenlänge sehr klein und (oder) sind die Temperaturdifferenzen innerhalb der festen Strukturen groß, so spielt die axiale Wärmeleitung innerhalb dieser Strukturen über Maschengrenzen hinweg durchaus eine Rolle und kann nicht, wie in der bisher vorliegenden SIMMER-II Version, vernachlässigt werden. Bei der Einführung der axialen Wärmeleitung gilt es, alle relevanten Fälle voll-

ständig abzudecken. Bei zwei axial benachbarten Maschen mit intakter identischer Struktur kann eine axiale Wärmeleitung in Abhängigkeit von der jeweiligen Temperaturdifferenz, z.B. innerhalb des Brennstoffs der Brennstäbe, innerhalb der Hüllrohre und innerhalb der Kastenwand stattfinden. Natürlich kann das Bündel auch von Flüssigkeiten und Gasen durchströmt werden und Wärme zusätzlich durch die strömenden Medien über die Maschengrenzen hinweg transportiert werden. Die Wärmeleitung wird zunächst für den einfachsten Fall, daß die Strukturanteile zweier benachbarter Maschen, z.B. der Anteil des Brennstoffs, gleich groß sind, dargestellt. In ein Brennstabmodell übertragen, sieht die Situation beispielsweise wie folgt aus (vgl. [22]):

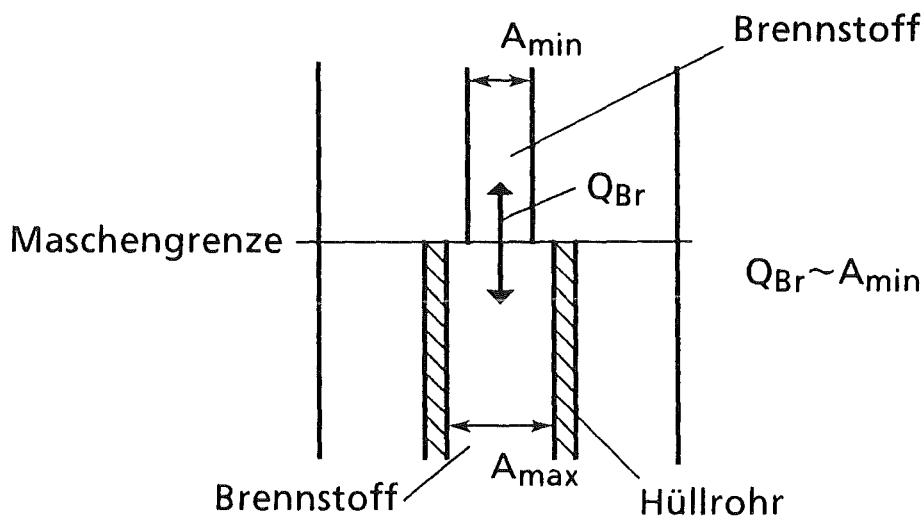


Die Wärmeleitung ist innerhalb der fünf verschiedenen festen Materialien zu berücksichtigen.

1. Brennstoff der Stäbe ↔ Brennstoff der Stäbe
2. gefrorener Brennstoff ↔ gefrorener Brennstoff
3. Hüllrohr ↔ Hüllrohr
4. Kastenwand ↔ Kastenwand
5. Absorbermaterial ↔ Absorbermaterial

Axiale Wärmeleitung über Maschengrenzen hinweg sollte natürlich auch noch nach Beginn des Schmelzens der festen Strukturen möglich sein; d.h., wenn ein Teil der festen Materialien geschmolzen ist. Es muß also die Wärmeleitung von einer bzw. in eine Masche mit nur teilweise vorhandener Struktur berücksichtigt werden. Dieser Fall läßt sich mit einem Beispiel verdeutlichen. In einer von zwei axial benachbarten Maschen sind die Hüllrohre vollständig geschmolzen und ein

Teil des Brennstoffs der Stäbe, wie auf den folgendem Bild dargestellt. In der anderen der beiden Maschen befindet sich eine intakte Struktur. In diesem Fall kann zwischen den Hüllrohren natürlich keine Wärmeleitung stattfinden. Aber zwischen dem noch vorhandenen Rest Brennstoff der einen Masche und dem Brennstoff der benachbarten Masche kann noch ein Wärmestrom vorhanden sein. In ähnlicher Weise werden die Fälle eines in einer Masche teilweise abgeschmolzenen Hüllrohres oder einer (teilweise) vorhandenen Brennstoffkruste bzw. einer Kastenwand behandelt.



Als Wärmeübergangsfläche wird für diese Fälle die Fläche der Masche mit dem geringeren Strukturanteil des betreffenden Materials angenommen. Innerhalb und zwischen den Maschen können Flüssigkeiten und Gase in beliebiger Richtung fließen, d.h. ,in allen diesen Fällen ist im allgemeinen ein zusätzlicher Wärmetransport über die Maschengrenzen hinweg durch die strömenden Medien möglich. Es kann zusätzlich, wie im folgenden Abschnitt erläutert wird, ein konvektiver Wärmetransport über die axialen Maschengrenzen stattfinden.

4.2.1.2 Axialer Wärmetransport durch Konvektion

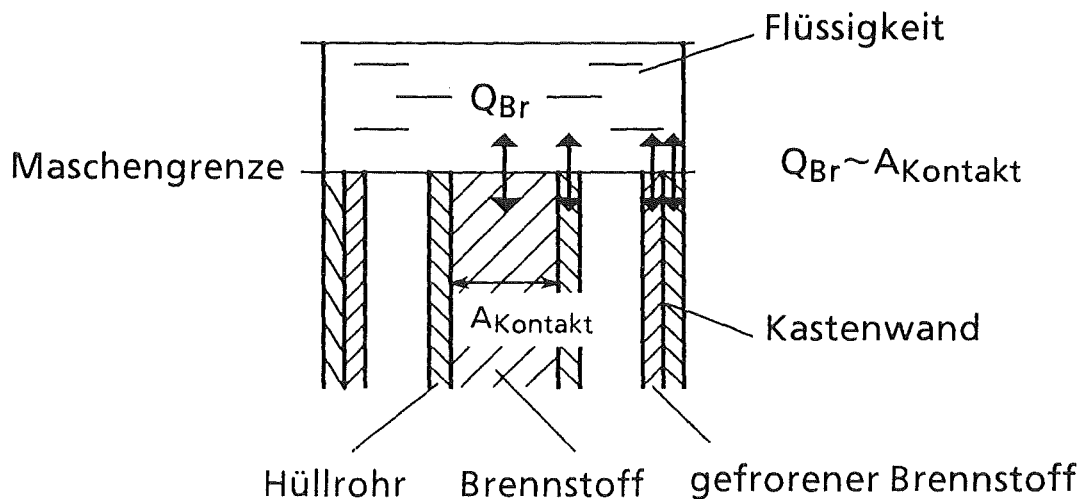
Es soll weiterhin möglich sein, Wärme durch Konvektion zwischen festen Materialien in der einen Masche und flüssigen Materialien in der axial benachbarten Masche auszutauschen. Die Notwendigkeit der Einführung von axialem Wärmetransport durch Konvektion läßt sich mit Hilfe einer Konfiguration der Versuche Mol 7C/4 und 5 erläutern. In der allseits von einer Brennstoff/Stahl-Kruste umschlossene Kaverne befand sich während des Experimentes wahrscheinlich flüssiger Brennstoff, der sogenannte Pool. Dabei konnte die im flüssigen Brennstoff

der Kaverne erzeugte Wärme über die Kruste an das vorbeiströmende relativ kalte Natrium abgegeben werden. Im Experiment wurde die Kaverne sowohl radial als auch axial von Natrium gekühlt. In der vorliegenden SIMMER II-Version ist kein axialer Wärmeübergang vom flüssigen Material im Innern der Kaverne an die Kruste und von der Kruste nach außen möglich. Eine dem Experiment vergleichbare Konfigurationen läßt sich nur erreichen, wenn diejenigen Maschen, die die Kruste repräsentieren, vollständig blockiert sind. Das heißt, sie sind für Flüssigkeiten und Gas praktisch undurchlässig. Der flüssige Brennstoff des Pools befindet sich in der Masche über der Kruste. Bisher ist jedoch in SIMMER-II kein axialer Wärmeaustausch zwischen Flüssigkeit einer Masche und festem Material einer axial benachbarten Masche möglich. Damit kann sowohl der Pool als auch die Kruste axial nicht gekühlt werden. Zur Kühlung dieser Konfiguration während des Experiments trug aber der konvektive axiale Wärmeübergang wesentlich bei. Daher wurde für die Nachrechnung der Mol 7C-Versuche auch axialer Wärmetransport durch Konvektion von Flüssigkeiten in einer Masche an feste Strukturen in den axial benachbarten Maschen ohne gleichzeitigen Massentransport über die jeweiligen Maschengrenzen in SIMMER-II eingeführt.

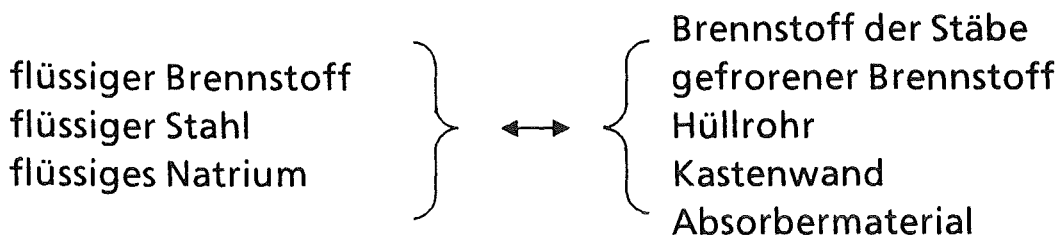
Hinsichtlich der hierfür anzuwendenden Wärmeübergangsbeziehungen ist zwischen der äußeren und der inneren Oberfläche der die Kaverne bildenden Kruste zu unterscheiden. An der äußeren Oberfläche wird Wärme an das außen vorbeiströmende Natrium abgegeben. Auf diesen Fall ist die in SIMMER-II verwendete Beziehung (3.25) für erzwungene Konvektion anwendbar. Darüberhinaus sind die Temperaturunterschiede zwischen der Oberfläche und dem Kühlmittel wegen der guten Wärmeübertragungseigenschaften des Kühlmittels Natrium im Vergleich zu den Temperaturdifferenzen in den festen Materialien gering. Somit hat die für die äußere Oberfläche verwendete Wärmeübergangsbeziehung keinen wesentlichen Einfluß auf den Zustand in der Kaverne. Der Wärmeübergang zwischen dem flüssigen oder siedenden Pool im Innern der Kaverne und der inneren Oberfläche der Kruste wird durch Naturkonvektionsvorgänge bestimmt. Die maßgebende Kennzahl für diese Art des Wärmeübergangs ist die Grashofzahl (Gr) bzw. die Rayleighzahl (Ra), mit $Ra = Gr \cdot Pr$. Die charakteristische Länge für die Berechnung sowohl der Rayleighzahl als auch der in diesem Fall geltenden Nusseltzahl ist die Höhe des Pools. Da in SIMMER-II alle Größen maschenweise, d.h. lokal berechnet werden, wäre die Einführung einer zweiten Wärmeübergangsbeziehung, für die integrale Größen wie die Poolhöhe benötigt werden, mit erheblichem Aufwand verbunden gewesen. Deshalb wurde für den konvektiven Wärmeübergang an den inneren Oberflächen der Kavernenkruste ebenfalls Gl. (3.25) verwendet. Die Abweichungen der in SIMMER-II so für

das Experiment Mol 7C/5 berechneten Wärmeübergangskoeffizienten vom Pool im Innern der Kaverne an die Kruste von den experimentell ermittelten Wärmeübergangskoeffizienten anderer Autoren für einen Pool mit Naturkonvektion und inneren Wärmequellen werden im Kapitel 7 abgeschätzt.

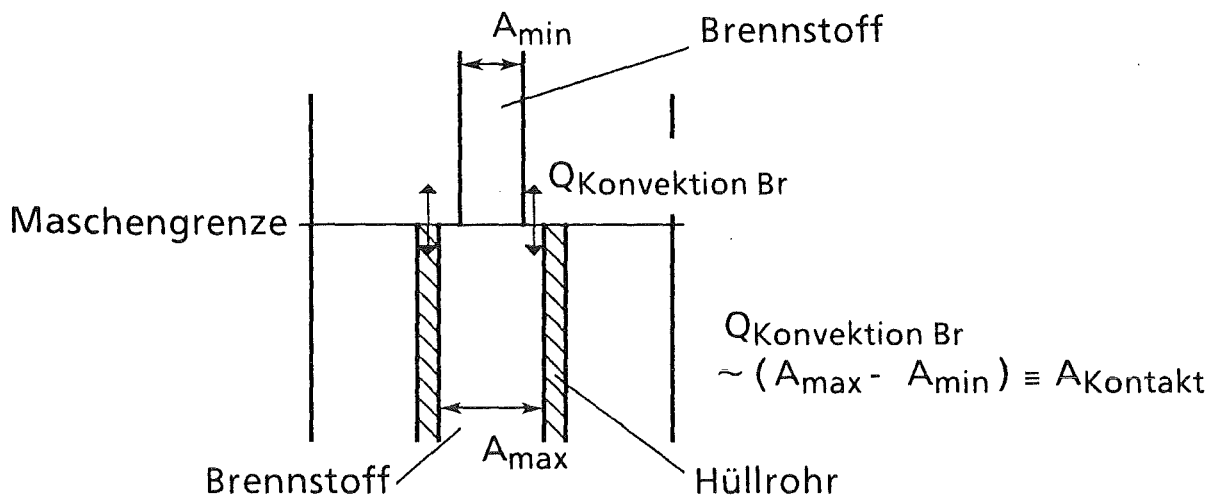
Der einfachste Fall eines möglichen axialen konvektiven Wärmeübergangs liegt vor, wenn in einer Masche nur Flüssigkeiten und keine festen Materialien (mehr) vorhanden sind, in der folgenden Skizze die obere Masche, und die axial benachbarte Masche eine intakte feste Struktur hat, z.B. mit Brennstäben. Ein konvektiver Wärmeaustausch findet zwischen den verschiedenen Flüssigkeiten der oberen Masche und den Strukturmaterialien der unteren Masche statt. Hierbei ist durch die verwendete Beziehung für die erzwungene Konvektion der Wärmeübergangskoeffizient h (siehe Gl. (3.25)) über die Reynoldszahl von dem Betrag der Geschwindigkeit der Flüssigkeit in der oberen Masche abhängig. Ist die Konstante c_4 in Gl. (3.25) größer als Null, so bleibt auch ohne Flüssigkeitsbewegung in der oberen Masche ein Wärmetransport übrig, der einer Wärmeleitung von der Flüssigkeit der oberen Masche an die feste Struktur der unteren Masche entspricht. Für den axial konvektiven Wärmetransport spielt es keine Rolle, ob und wie die untere Masche durchströmt wird.



Bei der Realisierung werden drei verschiedene Flüssigkeiten - Brennstoff, Stahl und Natrium - und alle vorhandenen Strukturmaterialien berücksichtigt. Es gibt also insgesamt 3×5 mögliche Wärmeübergangswege.



Hierbei ist es wie bei der Wärmeleitung notwendig, alle wichtigen Konfigurationen zu berücksichtigen. Zum Beispiel kann die Struktur in einer Masche nur teilweise geschmolzen sein, während die Struktur der benachbarten Masche noch völlig intakt ist. Im folgenden Beispiel (siehe nachfolgende Skizze) sind wiederum in der oberen Masche die Hüllrohre vollständig und der Brennstoff der Brennstäbe teilweise geschmolzen. Ein konvektiver Wärmeübergang ist von den Flüssigkeiten der oberen Masche an die Hüllrohre und auch an einen Teil des Brennstoffs der unteren Masche möglich. Für die Flüssigkeitsströmungen gilt dasselbe wie im vorherigen Beispiel.



In dem abgebildeten Beispiel steht für den konvektiven Wärmeübergang zwischen dem Brennstoff der benachbarten Maschen nur eine geringere Wärmeübergangsfläche zur Verfügung als bei vollständig geschmolzener Struktur in der oberen Masche. Der Wärmestrom wird der Differenz der Wärmeübergangsflächen ($\equiv A_{\text{Kontakt}}$) der beiden benachbarten Maschen proportional angenommen. Diese Realisierung bewirkt darüberhinaus, daß bei gleichem Strukturanteil eines

Materials in zwei benachbarten Zellen zwischen diesen und der Flüssigkeit der Nachbarzelle kein konvektiver Wärmeübergang stattfindet. In allen Fällen, mit Ausnahme einer totalen Blockade einer Masche, kann zusätzliche Energie durch strömende Medien über Maschengrenzen hinweg transportiert werden. Zusätzlich kann noch, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, axiale Wärmeleitung innerhalb der noch in den benachbarten Maschen bestehenden Strukturen stattfinden.

4.2.1.3 Integration der Erweiterung in das SIMMER-II Programm

Die axialen Wärmetransportmöglichkeiten müssen so in das Programm eingeführt werden, daß die Wärmeströme von jeder und in jede Masche nach den Gleichungen (3.20) und (3.22) bzw. für den konvektiven Wärmetransport analog zu Gl. (4.3) berücksichtigt werden. Die Energiebilanz muß nach Einführung der axialen Wärmetransportmechanismen insgesamt gesehen stimmen, d.h. die Energie, die eine Masche axial verläßt, muß in der benachbarten Masche hinzukommen.

Ein Teil der Erhaltungsgleichungen (siehe Kap. 3.1) wird in SIMMER-II implizit, ein Teil explizit gelöst. Die für den Energieaustausch relevante Energiegleichung wird explizit gelöst, d.h. aus den jeweiligen Funktionswerten eines (alten) Zeitschnittes wird jeweils ein neuer Wert für die innere Energie des jeweils betrachteten Stoffes in der jeweils berechneten Masche für den darauffolgenden (neuen) Zeitschnitt berechnet.

Die Energiegleichungen werden für alle drei Phasen und alle Materialien in jeder einzelnen Masche gelöst. Es ist also erforderlich, die durch die axialen Wärmetransportmechanismen zusätzlich auftretenden Wärmeströme in den jeweiligen Energiegleichungen zu berücksichtigen.

Axiale Wärmeleitung

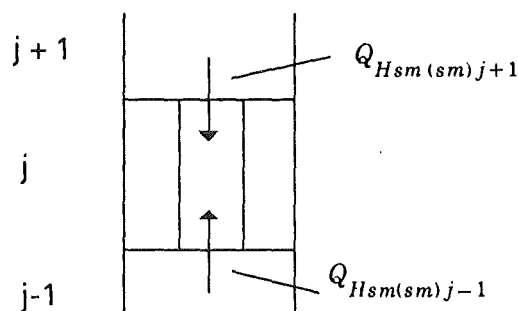
In den folgenden Betrachtungen der Energiegleichungen werden die Wärmeströme, verbunden mit Massenströmen bei Phasenwechsel und durch Reibung, vernachlässigt. Damit setzt sich die den festen Materialien in Gl. (3.6) zugeführte Energie Q_{sm} in der bisher vorliegenden SIMMER-II Version nur aus den Wärmeströmen durch Wärmeaustausch innerhalb der jeweiligen Masche (mit der erwähnten Ausnahme des Wärmetransports über eine Kastenwand) zusammen. In SIMMER-II werden zunächst die vorläufigen Temperaturen der einzelnen Komponenten aller Maschen bestimmt und daraus die Wärmeströme innerhalb dieser Maschen durch Wärmeleitung (Gl. 4.1), z.B. von einem festen Stoff s_n zu einem

anderen festen Stoff sm ($Q_{Hsm\ell k}$) und durch Konvektion (Gl. 4.3) von einem flüssigen Stoff ℓk zu einem festen Stoff sm ($Q_{Hsm\ell k}$), berechnet. Im SIMMER-II Programm wird der zusätzliche Wärmestrom über die Kastenwand an die radial benachbarte Masche, abhängig von der vorhandenen Konfiguration, entweder bei den Wärmeströmen durch Leitung oder denen durch Konvektion berücksichtigt. Zusammen mit der Leistungserzeugung innerhalb des betreffenden Materials lautet damit die im Original-SIMMER-II Programm realisierte Energiegleichung für alle festen Materialien $sm = 1, \dots, 5$:

$$\frac{\partial \bar{p}_{sm} e_{sm}}{\partial t} = \sum_n Q_{Hsm\ell n} + \sum_k Q_{Hsm\ell k} + NQ_{Nsm} \quad (4.31)$$

Um eine axiale Wärmeleitung innerhalb der festen Strukturen über Maschengrenzen hinweg zu ermöglichen, müssen in den Energiegleichungen für feste Materialien die entsprechenden Terme ergänzt werden. Dazu muß die Gleichung (4.31) jeweils um einen Term für den Wärmestrom von unten und einen für den von oben erweitert werden. Damit die Bilanz insgesamt wieder stimmt, sind diese Wärmeströme für alle Maschen zu berücksichtigen. In ein Material sm einer Masche i, j kann damit jeweils ein Wärmestrom von oben aus der Masche $j + 1$ und von unten aus der Masche $j - i$ fließen. Das sind folgende Wärmeströme:

$$Q_{Hsm(sm)j+1} \quad \text{und} \quad Q_{Hsm(sm)j-1}$$



Der Index i ist hier und in allen folgenden Gleichungen konstant und daher nicht aufgeführt. Zu beachten ist, daß über die oberen und unteren Ränder eines Maschennetzes keine Wärme durch die Leitung (oder auch Konvektion) fließen darf, da ansonsten Wärmequellen oder -senken entstünden. Die erste axiale Masche

(j = 1) kann also nur Wärme mit der zweiten axialen Masche (j = 2) austauschen. Entsprechendes gilt auch für die letzte Masche.

Die um die axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien erweiterte Energiegleichung lautet damit für eine Masche j und alle festen Materialien sm:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{sm} e_{sm}}{\partial t} = \sum_n Q_{Hsmns} + \sum_k Q_{Hsmk} + NQ_{Nsm} + Q_{Hsm(sm)j+1} + Q_{Hsm(sm)j-1} \quad (4.32)$$

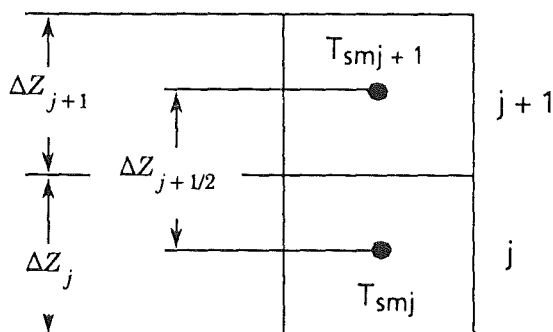
Die Energiegleichung wird in SIMMER-II wie gesagt explizit gelöst, d.h. aus dem vorhandenen Wert z.B. für die Temperaturen oder die innere Energie wird jeweils ein neuer Wert für die innere Energie berechnet. Die zusätzlich benötigten Temperaturwerte der axial benachbarten Maschen des vorherigen Zeitschrittes sind ebenfalls bekannt. Damit läßt sich die obige Gleichung problemlos lösen.

Die zusätzlichen Wärmeströme lassen sich nach Gl. (3.20) u.a. aus den Temperaturgradienten $\Delta T/\Delta Z$ berechnen. Dabei ist zu beachten, daß in SIMMER-II die Temperaturen jeweils für die Maschenmitte berechnet werden, zusätzlich kann die Länge der Masche variieren.

Somit ergibt sich für die Wärmeleitung aus einer Zelle j + 1 in die Zelle j:

$$Q_{Hsm(sm)j+1} = k_{sm} (T_{smj+1} - T_{smj}) \frac{A_{Kontakt}}{\Delta Z_{j+1/2}} \cdot \frac{1}{V_{Zelle}} \quad (4.33)$$

k_{sm} - Wärmeleitfähigkeit des festen Materials sm [W/mK]



$$\text{mit } \Delta Z_{j+1/2} = \frac{\Delta Z_j + \Delta Z_{j+1}}{2}$$

Dabei ist $A_{Kontakt}$ die Wärmeübergangsfläche zwischen zwei gleichen Materialien der Zelle j und j + 1. V_{Zelle} ist das Volumen der betrachteten Zelle j.

Der Term $A_{Kontakt} / V_{Zelle}$ läßt sich mit den in SIMMER-II vorhandenen Größen auch anders ausdrücken. Für jeden Stoff sm läßt sich der Volumenanteil α_{sm} bestimmen (vgl. Gl. (3.2)):

$$\alpha_{sm} = \frac{V_{sm}}{V_{Zelle}} \quad \text{mit } V_{sm} = A_{sm} \cdot \Delta Z_j \quad (4.34)$$

V_{sm} - Volumen des Stoffes sm [m³]

V_{Zelle} - Volumen der Zelle [m³]

wobei hinsichtlich der Wärmeleitung $A_{Kontakt} = A_{sm}$ gesetzt wird. Daraus ergibt sich

$$\frac{A_{Kontakt}}{V_{Zelle}} = \frac{\alpha_{sm}}{\Delta Z_j} \quad (4.35)$$

Es wird jeweils der kleinere Volumenanteil des betreffenden Stoffes sm in den beiden Maschen, zwischen denen die Wärmeleitung stattfindet, gewählt, z.B. zwischen den Maschen j und $j + 1$ gilt damit

$$\alpha_{sm} = \min(\alpha_{smj}, \alpha_{smj+1}) \quad (4.36)$$

Somit ergibt sich für den Wärmetransport pro Zellenvolumen in eine Masche j aus der benachbarten $j + 1$:

$$Q_{Hsm(sm)j+1} = k_{sm} (T_{smj+1} - T_{smj}) \frac{\alpha_{sm}}{\Delta Z_j \cdot \Delta Z_{j+1/2}} \quad (4.37)$$

Axialer Wärmeübergang durch Konvektion

Bei der Berücksichtigung des axialen Wärmetransports durch Konvektion müssen nicht nur die Energiegleichungen für die festen Materialien, sondern auch die für die betreffenden Flüssigkeiten um die Terme für den axialen Wärmeaustausch mittels Konvektion erweitert werden. Die Energiebilanz muß auch hier insgesamt stimmen. Bei der Realisierung des axialen Wärmeübergangs durch Konvektion muß ein Wärmeaustausch aller fester Materialien der Masche j mit allen drei berücksichtigten Flüssigkeiten der benachbarten Maschen $j + 1$ und $j - 1$ möglich sein. Für alle festen Stoffe sm müssen also die Wärmeströme

$$\sum_k Q_{Hsm(\ell k)j+1} + \sum_k Q_{Hsm(\ell k)j-1}$$

ergänzt werden.

Die um Wärmeleitung und Konvektion erweiterte Energiegleichung für alle festen Materialien $sm = 1, \dots, 5$ lautet für alle Maschen j :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{p}_{sm} e_{sm}}{\partial t} &= \sum_n Q_{Hsm sn} + \sum_k Q_{Hsm \ell k} + N Q_{Nsm} \\ &+ Q_{Hsm(sm)j+1} + Q_{Hsm(sm)j-1} \\ &+ \sum_k Q_{Hsm(\ell k)j+1} + \sum_k Q_{Hsm(\ell k)j-1} \end{aligned} \quad (4.38)$$

In Gleichung (4.38) wird in der zweiten Zeile der axiale Wärmetransport durch Leitung und in der dritten der durch Konvektion berücksichtigt. In jeder Masche muß sowohl ein Wärmestrom zu allen festen Stoffen als auch einer zu allen berücksichtigten Flüssigkeiten möglich sein. Zur Erfüllung der Energiebilanz muß für zwei benachbarte Maschen j und $j + 1$ gelten:

$$Q_{H(\ell k)j+1(sm)j} \cdot V_{Zelle j+1} = - Q_{H(sm)j(\ell k)j+1} \cdot V_{Zelle j} \quad (4.39)$$

Für die flüssigen Materialien $\ell k = 1, 2, 3$ (d.h. Brennstoff, Stahl und Natrium) wird die ebenfalls explizit gelöste Energiegleichung (3.13) für alle Maschen j um folgende Terme erweitert:

$$\sum_m Q_{H\ell k(sm)j+1} \quad \text{und} \quad \sum_m Q_{H\ell k(sm)j-1}$$

Die um den axialen Wärmeübergang erweiterte Energiegleichung für ein flüssiges Material ℓk lautet bei Vernachlässigung der Druckkräfte damit:

$$\frac{\partial \bar{p}_{\ell k} e_{\ell k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{p}_{\ell k} e_{\ell k} \vec{v}_{\ell}) = Q_{\ell k} + N Q_{N\ell k} + \sum_m Q_{H\ell k(sm)j+1} + \sum_m Q_{H\ell k(sm)j-1} \quad (4.40)$$

$Q_{\ell k}$ berücksichtigt in SIMMER-II nur die von Materialien innerhalb der Zelle zugeführten Energien (mit der erwähnten Ausnahme des radialen Wärmetransports über Maschengrenzen).

Für den konvektiven Wärmeübergang von einer Flüssigkeit ℓk , der Masche $j + 1$ an einen festen Stoff sm in der Masche j gilt analog zu Gleichung (4.3):

$$Q_{Hsm(\ell k)j+1} = \frac{h_{\ell k} \cdot h_{sm}}{h_{sm} + \sum \left(h_{\ell k} \cdot \frac{a_{\ell k}}{1 - a_s} \right)} \frac{a_{\ell k}}{1 - a_s} \frac{A_{\text{Kontakt}}}{V_{\text{Zelle}}} \left(T_{\ell k j+1} - T_{sm j} \right) \quad (4.41)$$

$$\text{mit} \quad \frac{A_{\text{Kontakt}}}{V_{\text{Zelle}}} = \frac{a_{(sm)j} - a_{(sm)j+1}}{\Delta Z_j} \quad \text{und} \quad h_{sm j} = \frac{2k_{smj}}{\Delta Z_j} \quad (4.42)$$

Die Kontaktfläche A_{Kontakt} bestimmt sich aus der Differenz der Volumenanteile des festen Materials sm der benachbarten Maschen (vgl. Skizze Abschnitt 4.2.1.2). Es ist jeweils das Volumen V_{Zelle} derjenigen Zelle zu wählen, für die die Energiegleichung gelöst wird.

4.2.1.4 Zusätzliche Änderungen

Die Erföhrung der axialen Wärmetransportmechanismen machten einige weitere, kleinere Änderungen nötig.

Begrenzung des hydraulischen Durchmessers

Bei der Berechnung des neu eingeföhrten axialen Wärmetransports durch Konvektion ergibt sich ein Problem für den Fall, daß in einer Masche gar keine feste Struktur mehr vorhanden ist. In diesem Fall wird der hydraulische Durchmesser D_h gleich 10^{10} , d.h. praktisch unendlich gesetzt. Der Wärmeübergangskoeffizient, der eine Funktion des Kehrwertes des hydraulischen Durchmesser ist, im allgemeinen gilt $h_{ek} \sim 1/D_h^{0,2}$, wird damit sehr klein und mit ihm der konvektive Wärmeübergang. Im Original SIMMER-II Code spielt dieses keine Rolle, da es ohne Struktur auch keinen konvektiven Wärmeübergang innerhalb dieser Zelle geben kann. Anders sieht es bei der vorgenommenen Erweiterung um den axialen Wärmetransport durch Konvektion aus. Es muß auch einen axialen konvektiven Wärmeaustausch einer Zelle mit fester Struktur mit einer benachbarten Zelle ohne feste Struktur geben. Gerade dieser Fall ist für die Anwendung auf die Mol 7C Berechnungen von besonderer Bedeutung. Daher wurde der hydraulische Durchmesser für die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten und der dafür benötigten Reynoldszahl auf $D_h = 2\Delta r$ begrenzt, d.h. auf den hydraulischen Durchmesser des Ringkanals, der die Zelle darstellt. Im weiteren Programmablauf, z.B. bei der Berechnung der Reibbeiwerte, werden wieder die von SIMMER-II zunächst berechneten hydraulische Durchmesser verwendet.

Nur mit der Begrenzung des hydraulischen Durchmessers bei der Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten ist es möglich, auch für Maschen ohne feste Materialien axialen Wärmeübergang durch Konvektion zu erhalten.

Parameter für das Gefrieren

Bei den Gefriervorgängen innerhalb einer Zelle spielt es im SIMMER-II Programm eine Rolle, wohin die Wärme von den jeweiligen flüssigen Materialien transportiert wird. Der flüssige Brennstoff z.B. kann entweder zu einer Kruste auf der Kastenwand gefrieren oder zu festen Partikeln, die sich weiterhin innerhalb des Flüssigkeitsfelds befinden. Dabei wird zunächst berechnet, wieviel flüssiger Brennstoff insgesamt innerhalb eines Zeitschrittes gefriert. Danach wird bestimmt, wie sich diese Masse auf Partikel und gefrorenen Brennstoff aufteilt. Die entstehenden Massen hängen von dem Verhältnis der Wärmemengen ab, die an

die jeweiligen Komponenten fließen. Der zu einer Kruste gefrierende Massenanteil ist proportional dem Wärmestrom an die Kastenwand, bezogen auf den gesamten Wärmestrom aus dem flüssigen Brennstoff. Der Massenanteil der Brennstoffpartikel berechnet sich aus der Summe der Wärmeströme an alle anderen Flüssigkeiten und an die Brennstäbe wiederum bezogen auf den gesamten Wärmestrom. Durch den neu eingeführten axialen Wärmetransport durch Konvektion kann nun auch Wärme von den flüssigen Materialien an die Strukturen der axial benachbarten Zellen fließen. Diese Wärmeströme müssen auch beim Gefrieren der Flüssigkeiten berücksichtigt werden. Da sich in SIMMER-II keine Krusten an den axialen Maschengrenzen bilden können, erhöhen die neu eingeführten axialen Wärmeströme den Anteil der bei einem möglichen Gefriervorgang entstehenden Partikel.

Dies gilt sowohl für den Brennstoff als auch für den Stahl. Diese Behandlung kann zu einer Überschätzung der bei Gefrieren entstehenden Partikel führen.

4.2.1.5 Einbau in den Programmablauf

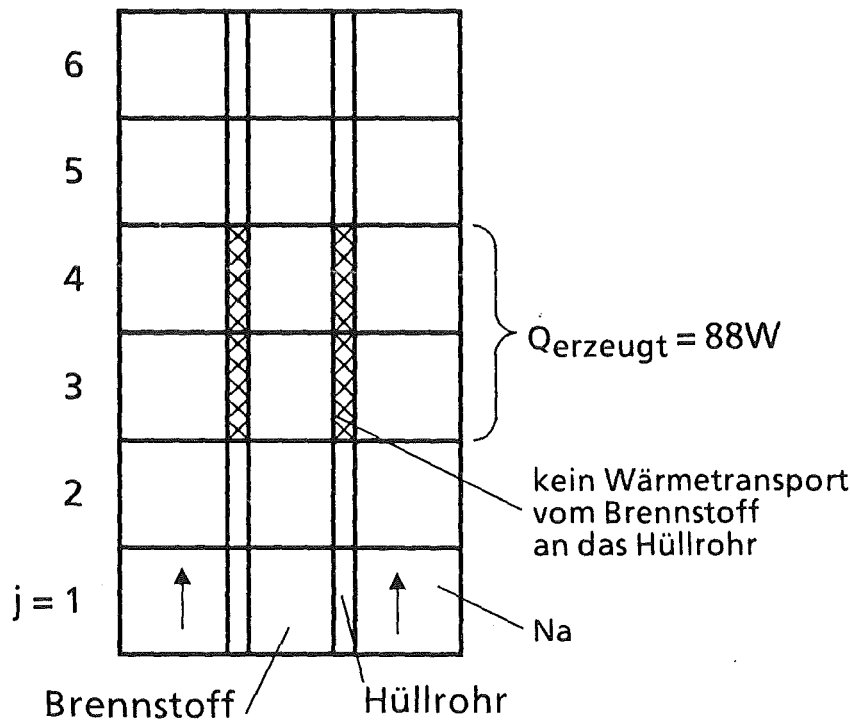
Die Erweiterung für die axiale Wärmeleitung und den axialen Wärmeübergang durch Konvektion (siehe Anhang A) wurde am Ende der Subroutine TSHTTR eingefügt. Zu diesem Punkt des Programmablaufs sind alle Wärmeströme innerhalb der Zelle und die radialen Wärmeströme über die Maschengrenze, jedoch nicht die mit einem Phasenwechsel verbundenen Wärmeströme, berechnet. Mit Hilfe der Temperaturen und der Stoff- und Zustandswerte des vorherigen Zeitschrittes lassen sich an diesem Programmpunkt die zusätzlichen Wärmeströme axial über die Maschengrenzen an bzw. von allen festen und flüssigen Bestandteilen aller einzelnen Maschen berechnen und damit die jeweiligen Änderungen der inneren Energien der betreffenden Stoffe. Mit den neuen Werten für die inneren Energien wird anschließend die Subroutine für die Phasenwechsel ausgeführt. Für alle Materialien wird die Summe der zugeführten Wärmeströme einschließlich derjenigen für den axialen Wärmetransport berechnet. Mit diesen werden in der im Programmablauf folgenden Subroutine EXFLUD für alle inneren Maschen die Energiegleichungen für feste und flüssige Materialien gelöst. Die Begrenzung des hydraulischen Durchmessers für die Konvektion erfolgt an der entsprechenden Stelle in Subroutine TSHTTR (vgl. [22], Block 8).

4.2.2 Überprüfung der Programmerweiterungen

Die Funktionsweise der eingefügten Programmerweiterungen müssen mit Hilfe von geeigneten Beispielen überprüft werden.

4.2.2.1 Wärmeleitung im stationären Fall

Ob die Wärmeleitung im stationären Fall korrekt implementiert ist, läßt sich am besten mit Hilfe einer stationären eindimensionalen Wärmeleitrechnung überprüfen. Bei Rechnungen mit dem um axiale Wärmeleitung erweiterten SIMMER II-Programm muß nach Erreichen eines stationären Zustandes für alle Maschen die abgeführte bzw. zugeführte Wärme gleich der innerhalb der Maschen produzierten Wärme sein (Energieerhaltung). Als Beispiel wurde hierfür ein eindimensionaler Fall mit 6 axialen Maschen gewählt (s. Skizze).



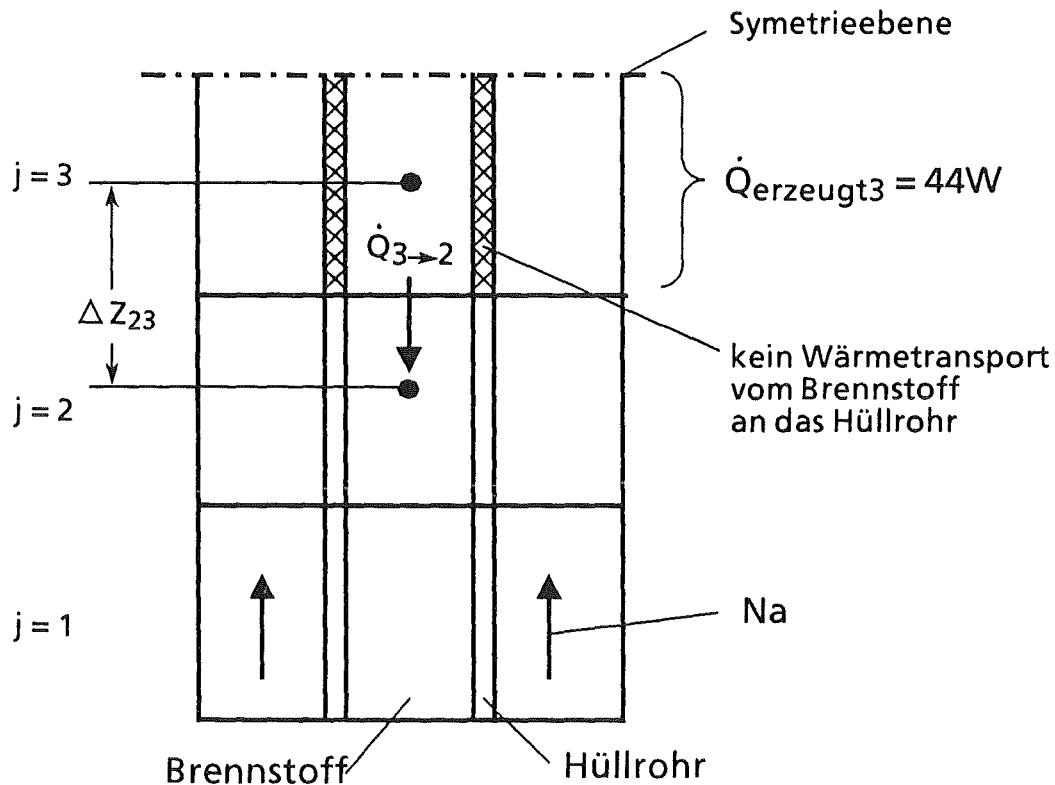
Das Natrium fließt hierbei von $j = 1$ nach $j = 6$. Nur im Brennstoff der Maschen $j = 3$ und $j = 4$ wird Leistung erzeugt. Innerhalb dieser Maschen ist die radiale Wärmeübertragung vom Brennstoff an die Hüllrohre unterbunden.

Durch die Erweiterung um die axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien, also auch innerhalb des Brennstoffes über Maschengrenzen, kann die Wärme über den Brennstoff z.B. von $j = 4$ nach $j = 5$ fließen und von dort über das Hüllrohr an das vorbeiströmende Natrium abgeführt werden. Ist ein stationärer Endzustand erreicht, so wird alle in den Maschen $j = 3$ und $j = 4$ produzierte Wärme an die benachbarten Maschen abgeführt.

Es wird angenommen, daß die Aufwärmspanne des Natriums aufgrund der schnellen Durchströmung klein ist und damit der Temperaturunterschied zwischen den Maschen $j = 2$ und $j = 5$ im Vergleich zu den anderen Temperaturdifferenzen vernachlässigt werden kann. Damit kann das Problem als symmetrisch betrachtet werden. Es reicht somit aus, eine Hälfte des Testbeispiels zu betrach-

ten z.B. von $j = 1$ bis $j = 3$. Die im Brennstoff der Masche $j = 3$ erzeugte Wärme kann aus Symmetriegründen nur an die Masche $j = 2$ abgegeben werden. Folglich muß für den stationären Endzustand gelten:

$$\dot{Q}_{\text{erzeugt}3} = \dot{Q}_{3 \rightarrow 2}$$



Der Wärmestrom von $j = 3$ nach $j = 2$ berechnet sich wie folgt:

$$\dot{Q}_{3 \rightarrow 2} = k_{Br} \frac{\Delta T_{32}}{\Delta Z_{23}} A_{Br} \quad (4.43)$$

Die zu erwartende Temperaturdifferenz zwischen 3 und 2 ist damit:

$$\Delta T_{32} = \frac{\dot{Q}_{3 \rightarrow 2} \cdot \Delta Z_{23}}{k_{Br} \cdot A_{Br}} = \frac{\dot{Q}_{\text{erzeugt}3} \cdot \Delta Z_{23}}{k_{Br} \cdot A_{Br}} \quad (4.44)$$

Mit $\dot{Q}_{\text{erzeugt}3} = 44\text{ W}$, $\Delta Z_{23} = 2 \cdot 10^{-3}\text{m}$ der Wärmeleitfähigkeit $k_{Br} = 4\text{ W/mK}$ und $A_{Br} = 1,4285 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2$ muß sich eine Temperaturdifferenz von $\Delta T_{23} = 1540,0\text{ K}$ einstellen.

Nach 60 s Problemzeit der SIMMER-II Rechnung ist ein stationärer Zustand erreicht mit: $\Delta T_{32} = \Delta T_{45} = 1539,5\text{ K}$; daraus läßt sich folgender Wärmestrom berechnen:

$$\dot{Q}_{3 \rightarrow 2} = 43,99\text{ W}.$$

Somit ist, wie gefordert, die von $j = 3$ nach $j = 2$ bzw. von $j = 4$ nach $j = 5$ abgegebene Wärme gleich der jeweils produzierten. Der Temperaturunterschied des Natrium zwischen den Maschen $j = 2$ und $j = 5$ betrug weniger als 0,1 Grad. Damit ist die Annahme der Symmetrie der Testanordnung im Hinblick auf die untersuchte Wärmeleitung in sehr guter Näherung richtig.

4.2.2.2 Wärmeleitung im instationären Fall

Weiterhin muß gewährleistet sein, daß die Wärmeleitprozesse auch im transienten Fall richtig dargestellt werden. Dieses zeigt der Vergleich der zeit- und ortsabhängigen Temperaturverläufe einer analytischen Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit den entsprechenden Temperaturverläufen der Rechnung mit dem um die axiale Wärmeleitung erweiterten SIMMER-II Code. Die instationäre Wärmeleitgleichung ohne Wärmequellen lautet:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4.45)$$

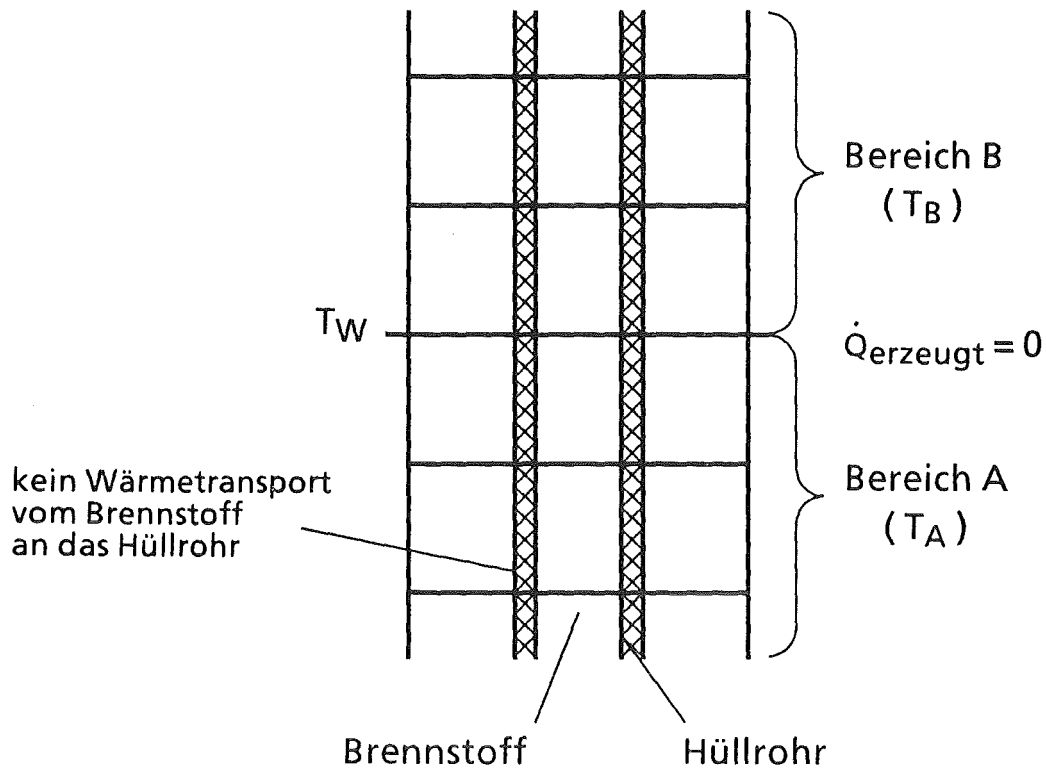
mit $a = \frac{k}{\rho c_v}$

a - Temperaturleitfähigkeit [m²/s]

Eine theoretische Lösung dieser Gleichung gibt es für eine halbumendliche Platte mit aufgeprägter Wandtemperatur [23, 24]. Einer Platte mit konstanter Anfangstemperatur wird zum Zeitpunkt $t = 0$ eine für $t > 0$ konstante Oberflächentemperatur, die von der Anfangstemperatur verschieden ist, aufgezwungen. Dieses Beispiel läßt sich mittels einer eindimensionalen SIMMER-II Rechnung nachvollziehen. Hierzu wird eine Brennstoffsäule mit mehreren axialen Maschen ohne Leistungserzeugung verwendet (s. Skizze). Der radiale Wärmeübergang von Brennstoff an die Hüllrohre ist unterbunden. Als Anfangsverteilung hat der Bereich A der Brennstoffsäule eine hohe Temperatur T_A , der Bereich B eine niedrige Temperatur T_B .

Da vom Brennstoff weder Wärme radial an das Hüllrohr abgegeben werden kann noch Leistung erzeugt wird, bestimmt sich die Temperaturverteilung lediglich durch den zeit- und ortsabhängigen Temperatenausgleich mittels Wärmeleitung.

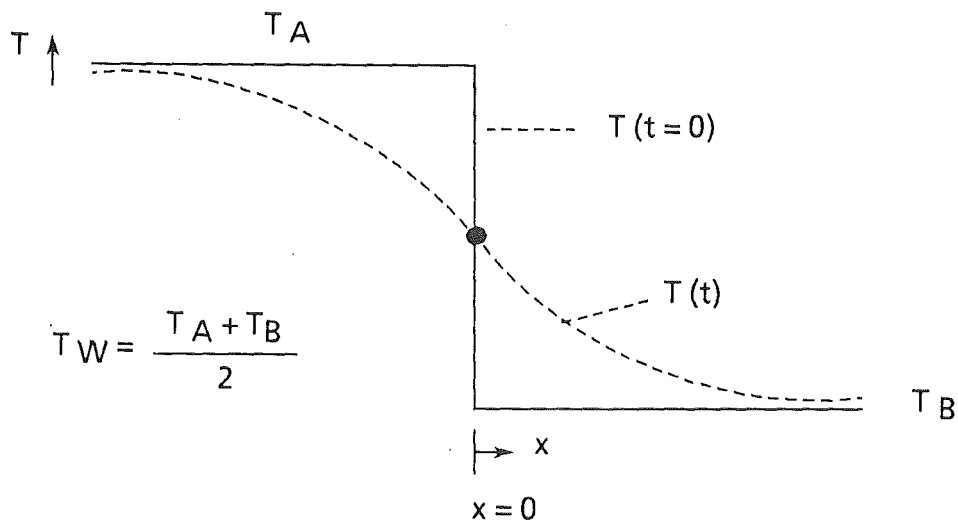
Betrachtet man nur jeweils einen Bereich, z.B. den mit der niedrigen Anfangstemperatur, so entspricht dieser der halbumendlichen Platte. Die aufgeprägte



Oberflächentemperatur ist dabei der Mittelwert zwischen der hohen und der niedrigen Anfangstemperatur der beiden Bereiche:

$$T_w = \frac{T_A + T_B}{2}$$

Die Temperaturverteilungen zu Beginn ($t = 0$) und zu einem späteren Zeitpunkt t über der Brennstabhöhe sehen wie folgt aus:



Beginnt nun die Koordinate x an der Kontaktstelle ($x = 0$), so gilt als Anfangsbedingung für

$$t = 0 \text{ und } 0 < x < \infty : T(x, t) = T_B$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ beginnt der Temperatenausgleich. Für die Kontaktstelle $x = 0$ gilt für

$$t > 0 \text{ und } x = 0 : T(x, t) = \frac{T_A + T_B}{2}$$

weiterhin ist für

$$t > 0 \text{ und } x \rightarrow \infty : T(x, t) = T_B$$

Die Herleitung der Lösung der 1-dimensionalen Wärmeleitgleichung mit den oben gegebenen Anfangs- und Randbedingungen ist in der Literatur [25, 26] beschrieben. Für den Temperaturverlauf in dem betrachteten Teil des Brennstabes in Abhängigkeit von der Zeit und dem Ort mit den beiden Anfangstemperaturen T_A und T_B gilt:

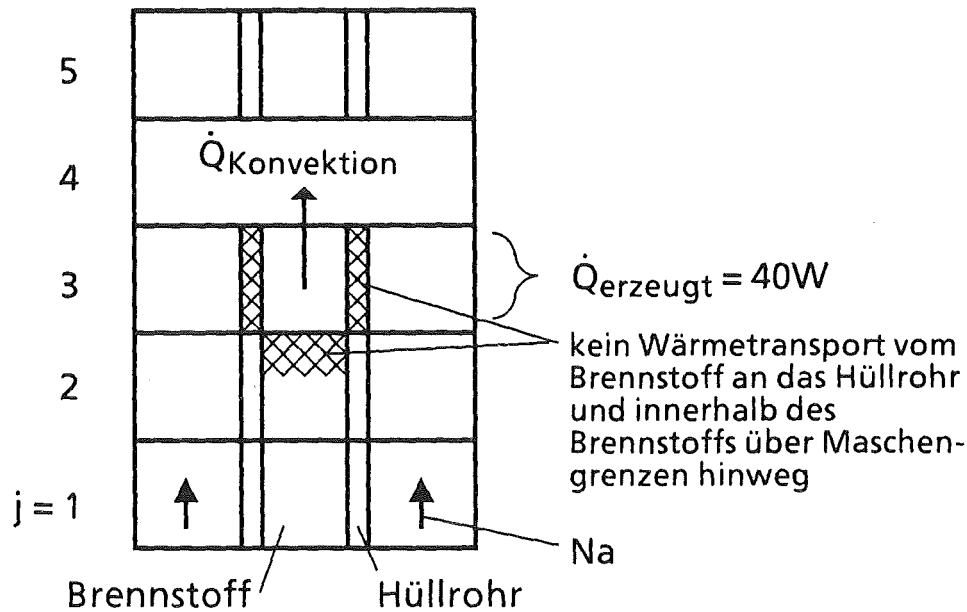
$$T(x, t) = T_B + \frac{T_A - T_B}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4at}} \right) \right) \quad (4.46)$$

Mit dem erweiterten SIMMER-II Programm wurde ein Brennstab mit $T_A = 2500$ K und $T_B = 500$ K berechnet. Auf der betrachteten Seite waren 7 Maschen mit einer axialen Maschenlänge von 2 mm. Hierbei wird, wie schon zuvor erwähnt, die Temperatur in SIMMER jeweils für die Maschenmitte berechnet. Daraus ergibt sich, daß der Temperaturverlauf der ersten Masche der betrachteten kälteren Seite ($x \geq 0$) vergleichbar ist mit dem Ergebnis der theoretischen Lösung für $x = 1$ mm, der der zweiten Masche mit $x = 3$ mm usw. Abbildung 4.4 zeigt den Vergleich der Temperaturverläufe über der Zeit jeweils in den Maschenmitten der theoretischen Lösung mit den Ergebnissen aus der Rechnung mit dem erweiterten SIMMER-II Code. Die Übereinstimmung der Temperaturverläufe ist recht gut.

4.2.2.3 Wärmetransport durch Konvektion im stationären Fall

Zur Überprüfung der korrekten Einführung des axialen Wärmeübergangs zwischen festen Materialien in der einen und strömenden flüssigen Materialien in der benachbarten Masche für den stationären Fall wurde wiederum ein eindimensionales SIMMER-II Modell gewählt (s. Skizze).

Dabei enthält eine der insgesamt 5 axialen Maschen ($j = 4$) keinen Brennstab, sondern ist statt dessen nur mit flüssigem Natrium gefüllt. Alle anderen Maschen besitzen Brennstäbe. Nur der Brennstoff der Masche $i = 3$ erzeugt Leistung ($\dot{Q}_{\text{erzeugt}} = 40$ W). Da der Wärmeübergang vom Brennstoff an das Hüllrohr gleich



Null gesetzt ist und die axiale Wärmeleitung innerhalb der festen Strukturen nicht berücksichtigt wird, kann die Wärme nur mittels des neu eingeführten konvektiven Wärmeübergangs an das strömende Natrium der Masche ohne Brennstab abgegeben werden.

Im stationären Fall muß die produzierte Wärme gleich der abgegebenen sein:

$$\dot{Q}_{\text{erzeugt}} = \dot{Q}_{\text{Konvektion}}$$

Mit dem Wärmeübergangskoeffizient für Natrium $h_{\ell\text{Na}}$ analog zur SIMMER-II Terminologie (vgl. Gl. (3.25))

$$h_{\ell\text{Na}} = \frac{\alpha_{\ell\text{Na}}}{1 - \alpha_s} k_{\ell\text{Na}} (0,025 Re^{0,8} Pr^{0,8} + 5) \frac{1}{D_h} \quad (4.47)$$

gilt für die vom Brennstoff in Masche $j = 3$ an das vorbeiströmende Natrium der Masche $j = 4$ abgegebenen Wärme (vgl. Gl. (4.3)):

$$\dot{Q}_{\text{Br} \rightarrow \text{Na}} = \frac{h_{\ell\text{Na}} h_{s\text{Br}}}{h_{\ell\text{Na}} + h_{s\text{Br}}} \frac{\alpha_{s\text{Br}}}{\Delta Z} V_{\text{Zelle}} \Delta T \quad (4.48)$$

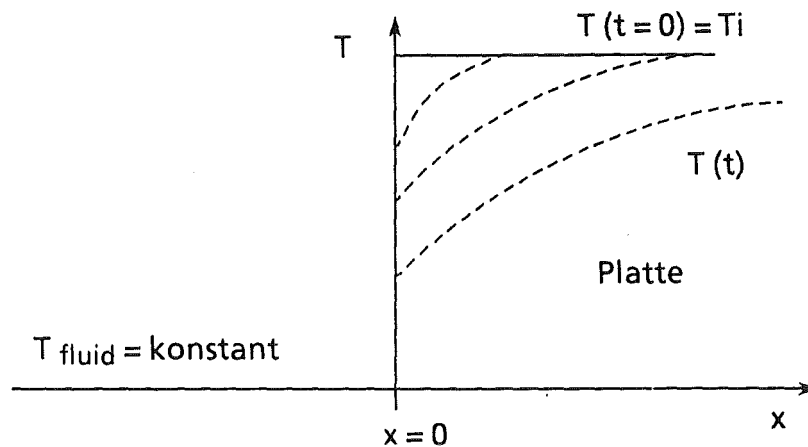
Für das vorliegende Beispiel war ein quasi stationärer Zustand nach 20 s Problemzeit erreicht. Der Wärmestrom von Brennstoff an das Natrium berechnet sich aus der berechneten Temperaturdifferenz von $\Delta T = 766,07\text{ K}$ zu:

$$\dot{Q}_{\text{Br} \rightarrow \text{Na}} = 39,99\text{ W}$$

Dies entspricht der in der Masche $j = 3$ erzeugten Wärme, d.h., die Energiebilanz ist erfüllt.

4.2.2.4 Wärmetransport durch Konvektion im instationären Fall

Auch für den instationären Fall der Kühlung einer halbunendlichen Platte bei konstanter Fluidtemperatur und konstanter Wärmeübergangszahl gibt es eine analytische Lösung [24].



Die Anfangstemperatur der Platte ist konstant:

$$t = 0 \text{ und } x > 0 : T(x,t) = T_i$$

An der Oberfläche, d.h. für $x = 0$, muß der konvektive Wärmestrom von Fluid an die Platte gleich dem Wärmestrom innerhalb der Platte für $x = 0$ sein. Es muß also für $x = 0$ als Randbedingung gelten:

$$k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = h (T_{x=0} - T_{fluid})$$

Weiterhin gilt für:

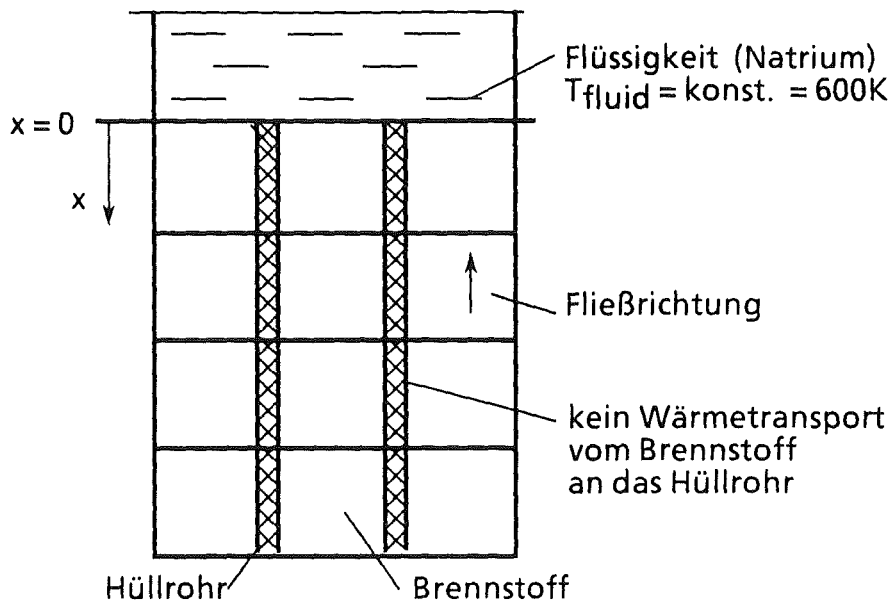
$$t > 0 \text{ und } x \rightarrow \infty : T(x,t) = T_i$$

Die theoretische Lösung der Wärmeleitgleichung mit den oben genannten Anfangs- und Randbedingungen lautet wie folgt [24]:

$$T(x,t) = T_i - (T_i - T_{fluid}) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) - e^{\frac{hx}{k} + at \left(\frac{h}{k} \right)^2} \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} + \sqrt{at} \frac{h}{k} \right) \right) \right] \quad (4.49)$$

Für die Darstellung dieses Falles mit SIMMER-II wurde ein 1-dimensionales Modell ohne Leistungserzeugung gewählt. In dem einen Teil ($x > 0$) befinden sich Brennstäbe im anderen ($x < 0$) nur Natrium (siehe Skizze).

Der Brennstoff hat eine konstante Anfangstemperatur von $T_i = 2600$ K, das Natrium eine Temperatur von $T_{fluid} = 600$ K. Radial kann der Brennstoff keine Wärme abgeben. Es ist jedoch Wärmeleitung innerhalb des Brennstoffs und konvek-



ver Wärmeübergang an der Stirnfläche der Brennstoffsäule an das darüber vorbeiströmendem Natrium möglich. Es findet ein orts- und zeitabhängiger Temperaturengleichvorgang statt. Aufgrund der hohen Fließgeschwindigkeit der Natriums erhöht sich die Natriumtemperatur nur in der Anfangsphase des Ausgleichvorgangs um weniger als 1 Grad; sie kann damit näherungsweise als konstant angesehen werden. Die axiale Maschenlänge der Rechnung beträgt 1 mm. Abb. 4.5 zeigt die zeitabhängigen Temperaturverläufe, die für das beschriebene Modell mit dem um axialen Wärmetransport durch Leitung und Konvektion erweiterten SIMMER-II Programm jeweils für die Maschenmitten berechnet werden, im Vergleich mit denen der analytischen Lösung. Die anfängliche geringe Diskrepanz zwischen Rechnung und analytischer Lösung ist durch die endlichen Diskretisierung des Modells und die geringfügige Temperaturerhöhung des Fluids bedingt. Darüberhinaus stimmen jedoch beide Ergebnisse gut überein. Dies bestätigt die korrekte Implementierung der beschriebenen Erweiterungen in das SIMMER-II Programm.

4.2.3 Druckverlust in der Kugelschüttung

Ein weiteres Problem ist, daß der Druckverlust in der Kugelschüttung der Blockade sehr viel höher ist als im ungestörten Bündel. Der Druckverlust in der Kugelschüttung mit einer Porosität ε kann nach der Ergun-Beziehung für Partikelschüttungen [25, 26] berechnet werden:

$$\frac{\Delta p}{\Delta l} = 180 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \cdot w}{d_{sp}^2} + 1,8 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{w^2 \rho_l}{d_{sp}} \quad (4.50)$$

- d_{sp} - Kugeldurchmesser [m]
 ε - Porosität der Kugelschüttung [-]

Die Geschwindigkeit w der Ergun-Beziehung entspricht derjenigen, die in einer ungestörten Strömung vorliegen würde. Die tatsächliche mittlere Geschwindigkeit in der Kugelschüttung ist demnach $v = w/\varepsilon$.

In der Standardversion von SIMMER-II läßt sich der Druckverlust mittels Eingabe nur über die Reibbeiwerte f beeinflussen. Die Reibbeiwerte für den laminaren Bereich werden nach Gleichung (4.13) berechnet, sie sind also nur von der Reynoldszahl abhängig. Bei der Berechnung der Reibbeiwerte für den turbulenten Bereich, d.h. $Re > 2000$ nach Gl. (4.14) sind f_{s1} und f_{s2} Eingabeparameter. Zusätzlich wird über die Eingabe ein minimaler Reibbeiwert f_{min} für beide Bereiche vorgegeben. Der turbulente Bereich ist also direkt zu beeinflussen, der laminare nur über den konstanten Wert f_{min} . Bei Erhöhung der Reibung über die Eingabe würde der Druckverlust im gesamten Bündel, d.h. auch außerhalb der Kugelschüttung der Blockade, erhöht werden, da es in SIMMER-II nicht möglich ist, für verschiedene Bereiche unterschiedliche Reibbeiwerte vorzugeben. Es war also notwendig, für Berechnungen des gesamten Testbündels ortsabhängige Reibbeiwerte, z.B. für den erhöhten Druckverlust in der Kugelschüttung der Blockade, in das SIMMER-II Programm einzuführen.

Vor der Beschreibung der vorgenommenen Änderungen ist es zunächst erforderlich, auf die Wahl der hydraulischen Durchmesser D_h für den Bereich der Blockade mit der Kugelschüttung einzugehen, da die Reibbeiwerte von den hydraulischen Durchmessern abhängen. Der hydraulische Durchmesser (Gl. 3.28) wurde bei in SIMMER-II vorgegebenem benetztem Umfang U der leeren Unterkanäle so gewählt, daß die Strömungsfläche A richtig wiedergegeben wird. Ausgehend von einem Bündel ohne zusätzliche Kugeln mit der Strömungsfläche $A_{ohne Kugeln}$ wird, bei ansonsten gleicher Geometrie, jedoch mit Kugeln, die Strömungsfläche dieses Bereiches wie folgt berechnet:

$$A_{mit Kugel} = \varepsilon \cdot A_{ohne Kugeln} \quad (4.51)$$

Analog dazu wird der hydraulische Durchmesser in der Kugelschüttung wie folgt berechnet:

$$D_{h mit Kugel} = \varepsilon \cdot D_{h ohne Kugel} \quad (4.52)$$

Mit der Ergun-Beziehung (Gl. 4.50) und mit Gl. (4.12) lassen sich die Reibbeiwerte f für die Kugelschüttung berechnen. Diese werden durch reynoldszahlabhängige Reibbeiwerte für den laminaren und für den turbulenten Bereich angenähert. Innerhalb der Kugelschüttung befinden sich in den Rechnungen zwei radiale Ringe ($i = 2$ und $i = 3$). Da die nach Gl. (4.52) gewählten hydraulischen Durchmesser dieser beiden Ringe unterschiedlich sind, ergaben sich auch unterschiedliche Gleichungen für die Reibbeiwerte. Diese Reibbeiwerte beschreiben jedoch nur den Druckverlust in der Kugelschüttung, der zusätzliche Druckverlust durch die Blockadebleche und den Drahtkäfig ist darin nicht enthalten. Die letztendlich verwendeten Beziehungen wurden so gewählt, daß wie in den BACCHUS-Rechnungen [11] ermittelt wurde, etwa 1 % des gesamten Natriumdurchsatzes des Bündels durch die Blockade fließt. Dadurch ergab sich bei der Berechnung der Reibbeiwerte nach Ergun ein zusätzlicher multiplikativer Faktor von etwa 6.

Die verwendeten Beziehungen für den zweiten radialen Ring ($i = 2$) sind:

für den laminaren Bereich, d. h. $Re \leq 2000$

$$f = 258 \cdot Re^{-0,3}$$

für den turbulenten Bereich, d. h. $Re > 2000$

$$f = 79,2 \cdot Re^{-0,14}$$

und für den dritten radialen Ring ($i = 3$):

für $Re \leq 2000$

$$f = 315 \cdot Re^{-0,3}$$

für $Re > 2000$

$$f = 93,6 \cdot Re^{-0,14}$$

Ist in einer Masche im Bereich der Kugelschüttung etwas mehr als eine den Kugeln entsprechende Brennstoffmasse geschmolzen, das ist ungefähr die Hälfte des insgesamt vorhandenen Brennstoffs der Stäbe und der Kugeln, dann wird auf die Reibung umgeschaltet, die für die Bereiche außerhalb der Kugelschüttung gelten.

Der Reibbeiwert für das Zentralsdummy im Bereich der Blockade wurde so gewählt, daß der relative Massenstrom durch das Zentralsdummy vergleichbar denjenigen in den BACCHUS-Rechnungen [11] ist. Die Druckverluste der Gitterabstandshalter wurde ebenfalls aus den BACCHUS-Rechnungen übernommen und in Form einer Erhöhung der Reibbeiwerte in den jeweiligen Maschen in das Pro-

gramm integriert (vgl. Kap. 5.1). Die nach Einführung dieser Änderungen von SIMMER-II berechneten fluiddynamischen Bedingungen bei Transientenbeginn und die Druckdifferenz über das Bündel (siehe Abb. 4.6) stimmen recht gut mit den BACCHUS-Ergebnissen [11] (Abb. 4.7) überein. Dies wird durch den Vergleich der in den Abbn. 4.6 und 4.7 aufgetragenen Vektordiagramme der Geschwindigkeitsverteilungen bestätigt. Mit den BACCHUS-Rechnungen ist eine gute Modellierung der Strömungs- und Wärmeübergangsvorgänge, jedoch keine Berechnung von Schmelz- und Gefriervorgängen möglich.

4.2.4 Weitere Programmänderungen

Neben den beschriebenen Ergänzungen waren noch weitere kleine Änderungen des Original-SIMMER-II Programms notwendig (siehe auch Anhang A). Zunächst wurde die Behandlung des Gefrierens des Brennstoffs in Form einer festen Kruste geändert. In der bisher vorliegenden SIMMER-II Version steigt die Temperatur der festen Brennstoffreste aus numerischen Gründen wenige Hundertstel Grad über die Schmelztemperatur hinaus, sobald der flüssige Brennstoff in einer Masche überhitzt ist. Damit kann in SIMMER-II der flüssige Brennstoff nicht mehr an der Kruste gefrieren. Läßt man hingegen eine Überschreitung der Schmelztemperatur von nur 0,1 Grad für den festen Brennstoff zu, so wird die Unterdrückung des Gefrierens vermieden, und es kann auch weiterhin flüssiger Brennstoff an einer relativ kalten Kruste gefrieren, wie es in der Realität sein muß.

In der ursprünglichen Version von SIMMER-II geht der Brennstoff in einer Zelle ohne Kastenwand in Partikel über, sobald dort die Hüllrohre geschmolzen sind. Eine weitere Änderung bewirkt, daß der Brennstoff auch in einer Zelle ohne Kastenwand bei geschmolzenem Hüllrohr langsam abschmelzen kann.

Weiterhin wurde das von der UKAEA in Winfrith [27] entwickelte Dryout-Modell übernommen (siehe Anhang A). In dem Dryout-Modell wird der Wärmeübergang von den Brennstäben an das restliche flüssige Natrium in der Übergangsphase vom Sieden zum Dryout verbessert. Es wird dabei davon ausgegangen, daß die verbliebene Flüssigkeit einen Film auf den Stäben bildet, der für einen guten Wärmeübergang von den Stäben an die Flüssigkeit sorgt. Dies bewirkt ein stabileres Siedeverhalten im Bereich der Blockade zu Beginn der Transiente.

5. Modellierung der Mol 7C-Experimente mit SIMMER-II

5.1 Modellierung des Blockade

Bei der Modellierung der im Experiment vorliegenden Blockade gibt es aufgrund der beschränkten Möglichkeiten von SIMMER-II einige Komplikationen. Im folgenden wird dargestellt, wie trotzdem eine akzeptable Modellierung erreicht wird.

5.1.1 Darstellung der UO_2 -Kugeln

In der Blockade befinden sich zwischen den Brennstäben die Brennstoffkugeln. Sie können den Blockadebereich nicht verlassen, da sie radial von einem Drahtkäfig und axial von zwei Blechen zurückgehalten werden. In der Anfangsphase des Experiments ist eine geringe Natriumströmung durch die Kugelschüttung zwischen den Brennstäben vorhanden. Die UO_2 -Kugeln erzeugen Leistung und haben eine Temperatur, die nur wenig über der Natriumtemperatur liegt, und damit zu Beginn der Transiente im Mittel etwa 800 K geringer als die Temperatur des Brennstoffs der Stäbe ist. Die Masse und die Leistungserzeugung der Kugeln müssen auf jeden Fall berücksichtigt werden. Darüberhinaus bewirkt die Kugelschüttung den in Kap. 4.2.3 beschrieben sehr hohen Druckverlust. Da in SIMMER-II keine zusätzlichen ortsfesten Partikel definiert werden können, müssen andere Möglichkeiten der Darstellung in Betracht gezogen werden. Es gibt in SIMMER-II die Möglichkeit, Brennstoffpartikel als Teil des Flüssigkeitsfeldes zu behandeln. Diese Partikel können Leistung erzeugen, eine vorgegebene Masse und eine eigene durch Leistungserzeugung und Kühlung bestimmte Temperatur haben. Das Problem bei dieser Darstellung ist, daß sich die Partikel innerhalb des Flüssigkeitsfeldes mit der gleichen Geschwindigkeit wie die Flüssigkeit bewegen. Dadurch werden sie im Lauf der Zeit aus dem Bereich der Blockade heraus transportiert. Da damit bereits in der Anfangsphase der Rechnung die Masse der Partikel innerhalb der Blockade immer kleiner werden würde, ist diese Möglichkeit nicht praktikabel.

Ein zweiter Weg ist die Erhöhung der Masse des festen Brennstoffs um die Masse der Brennstoffkugeln. Hierbei gibt es prinzipiell zwei Möglichkeiten. In SIMMER-II wird, wie in Kapitel 4 gesagt, zwischen ursprünglich vorhandenem Brennstoff der Stäbe und zunächst geschmolzenem und dann wieder auf den Kastenwänden gefrorenem Brennstoff unterschieden. Die Masse der Kugeln könnte zunächst in Form von gefrorenem Brennstoff vorgegeben werden mit dem Vorteil, daß dieser Brennstoff eine eigene Temperatur hätte. Die Masse der Kugeln

(ca. 53 g) ist jedoch so groß, daß die Kühlkanäle nicht mehr durchlässig wären. Durch eine künstliche Erhöhung der Kanaldurchmesser ließe sich dieses beheben. Der entscheidende Nachteil ist jedoch, daß der gefrorene Brennstoff, der sich auf der Kastenwand befindet, aufbricht, sobald die Kastenwand geschmolzen ist, und als Partikel in das Flüssigkeitsfeld übergeht. Diese bewegen sich wieder wie oben beschrieben mit dem Natrium aus der Blockade. Somit ist auch diese Lösungsmöglichkeit nicht akzeptabel.

Die Masse der Kugeln kann auch der Brennstoffmasse der Stäbe hinzugefügt werden. Da die Anteile der spaltbaren Atome im Brennstoff der Stäbe und der Kugeln etwa gleich groß sind, ist die insgesamt produzierte Leistung bei dieser Darstellung korrekt. Die Wärmeübergangsflächen des Brennstoffs der Stäbe und der Hüllrohre werden entsprechend der Zunahme der Brennstoffmasse erhöht. Damit stellt sich eine mittlere Brennstofftemperatur in den Stäben ein, die derjenigen im Experiment entspricht. Der Nachteil dieser Lösung ist, daß die Kugeln dadurch keine eigene Temperatur haben und ihre Temperatur gleich der des Brennstoffs der Stäbe ist. Im Experiment ist die Anfangstemperatur der Kugeln niedriger als die des Brennstoffs der Stäbe. Dies führt zu einer Überschätzung der Energie des gesamten Brennstoffs zu Beginn der Transiente von ca. 15 %. Auf den transienten Verlauf der Siedephase hat dies wenig Auswirkungen, da hier nur die von Brennstoff abgegebene Energie von Bedeutung ist. Der Zeitpunkt des Schmelzbegins wird durch die korrekte mittlere Brennstofftemperatur der Stäbe gut wiedergegeben, da im Experiment zunächst der Brennstoff der Stäbe schmilzt. Die Dauer des Brennstoffschmelzens wird wegen der höheren Anfangsenergie etwas unterschätzt. Insgesamt kommt diese Lösung den in den Experimenten vorliegenden Bedingungen am nächsten. Sie wird deshalb in den nachfolgend beschriebenen Rechnungen angewandt.

5.1.2 Das verwendete Maschennetz

Eine vorliegende Konfiguration wird für die SIMMER-II Berechnungen in i radiale und j axiale Abschnitte (Maschen) aufgeteilt. Für die Darstellung der Mol 7C-Geometrie wurde ein aus 4×18 Maschen bestehendes Netz verwendet. Abb. 2.2 und 5.1 zeigen die gewählte Aufteilung im Bereich der Blockade. Die erste radiale Masche ($i = 1$) im inneren Bereich der Blockade besteht aus dem Zentraldummy, das in Form einer Kastenwand dargestellt wird. Vor und hinter der Blockade einschließlich der ersten und der letzten Masche innerhalb der Blockade ist der Stahlanteil so hoch, daß das Zentraldummy in diesen Bereichen blockiert, d.h. für Flüssigkeits- und Dampfströmungen praktisch undurchlässig ist. Die zweite radia-

le Masche ($i = 2$) reicht bis zu den Stabmitten der ersten Reihe. Für die dritte Masche ($i = 3$) wird die Fläche zwischen dem Außenradius der zweiten Masche und dem Sechseck, auf dem die Stabmitten der zweiten Reihe liegen, in eine Kreisringfläche umgerechnet. Die vierte und letzte Masche umschließt die verbleibende Fläche bis zum Bündelrohr, ausgenommen die sechs Eckdummies. Die wirkliche Fläche ist auch hier in einen flächengleichen Kreisring umgerechnet. Die Blockade wird radial von einer Kastenwand begrenzt, die sich an der Innenseite der vierten radialen Masche ($i = 4$) befindet.

In axialer Richtung besteht das gewählte Modell aus insgesamt 18 Maschen; es erstreckt sich über die gesamte Bündellänge von ca. 1,5 m. Die ersten und die letzten vier axialen Maschen repräsentieren das Bündel vor und hinter der Blockade. Der Blockadebereich selbst wird durch zehn Maschen dargestellt. Die in axialer Richtung gesehen ersten und letzten Maschen des Blockadebereichs ($j = 5$ und $j = 14$) haben im zweiten und dritten Ring ($i = 2$ und $i = 3$) gegenüber dem Bündel vor und hinter der Blockade einen erhöhten Stahlanteil, der den Begrenzungsblechen entspricht. Hierfür wurden in diesen Maschen die Stahlmassen der Hüllrohre erhöht. Diese Maschen haben damit insgesamt einen sehr hohen Anteil an festen Strukturmaterialien. Abb. 5.2 zeigt für alle vier radialen Maschen die Anfangsverteilungen der Volumenanteile der verschiedenen Komponenten (siehe Gl. 3.2). Bei dieser Darstellung wird zwar zwischen dem Stahl der Hüllrohre und der Kastenwand, aber nicht zwischen dem Brennstoff der Stäbe und dem auf der Kastenwand gefrorenen Brennstoff, den es jedoch in der Anfangsphase noch nicht gibt, unterschieden. Diese Längsschnitte beginnen axial eine Masche vor der Blockade (bei $j = 4$) und enden eine Masche hinter der Blockade (bei $j = 15$). Sie zeigen neben den beschriebenen zusätzlichen Stahlanteilen, daß sich im inneren Bereich der Blockade des zweiten und dritten radialen Rings ein erhöhter Brennstoffanteil befindet. Dieser entspricht dem zusätzlichen Volumen an Brennstoff durch die Uranoxidkugeln. Im inneren Ring ($i = 1$) ist im inneren Blockadebereich ($i = 6$ bis $i = 13$) nur das Zentralsdummy in Form der Kastenwand vorhanden. In den Maschen davor und dahinter zeigt die Abb. 5.2 den zusätzlichen Stahlanteil.

Die Masse der Kastenwand im äußeren Ring ($i = 4$) in der Rechnung entspricht derjenigen des Drahtkäfigs, der die Blockade radial begrenzt. Diese Kastenwand ist auf Abb. 5.2 als dünner schwarzer Balken im Blockadebereich in Ring $i = 4$ zu erkennen. Von einer Kastenwand wird in SIMMER-II angenommen, daß sie sich sowohl am inneren als auch am äußeren radialen Rand einer Zelle befindet. Erste Rechnungen mit durchlässiger Kastenwand zeigten in der Anfangsphase recht gute thermohydraulische Ergebnisse. Nach Beginn der Transienten kam es aber

durch ständiges seitliches Einfließen von relativ kaltem Natrium zu sehr instationärem Verhalten mit häufigen Phasenwechseln. In SIMMER-II ist der radiale Strömungswiderstand gleich dem axialen. Da der radiale Strömungswiderstand des Drahtgitters im Experiment aber sehr viel höher ist als der axiale Strömungswiderstand im Bündel bzw. in der Kugelschüttung, kommt eine materialundurchlässige Kastenwand den wirklichen Verhältnissen am radialen Blockaderand näher als eine durchlässige. Diese Annahme führte in den SIMMER-II Rechnungen zu einem stabileren Verhalten während der Siedephase mit anschließendem Dryout und Materialschmelzen.

5.2 Auswahl des Experiments

Bei der im folgenden Kapitel beschriebenen Rechnung des gesamten Versuchsablaufs wurde von den Versuchsparametern des Experiments Mol 7C/5 ausgegangen. Hierfür gibt es mehrere Gründe, zunächst liegen vollständige Nachuntersuchungsergebnisse bisher nur für die Versuche Mol 7C/4 und 5 vor. Bei Mol 7C/4 ist über den anfänglichen Schaden nur wenig bekannt, da er sich nach kurzer Zeit stark ausweitete. Da aber die Bestimmung des anfänglichen Zustandes der Kaverte und des Potentials für eine mögliche Propagation Hauptziel dieser Arbeit ist, wurde Mol 7C/5 gewählt, bei dem es nur zu einer geringen Ausweitung des Schadens kam. Ein weiterer Grund, die Versuche Mol 7C/4 und 6 nicht zu wählen, ist der hohe Abbrand. In den bisher vorliegenden Rechnungen wird das Spaltgas, dessen Menge mit höherem Abbrand zunimmt, nicht berücksichtigt. Seine Einführung würde aufgrund der in SIMMER-II vorhandenen begrenzten Möglichkeiten der Modellierung der in den Mol 7C-Experimenten vorliegenden Verhältnisse, z.B. durch das primitive Brennstabmodell, auf erhebliche Schwierigkeiten stoßen.

5.3 Fahrweise

Bei Mol 7C/5 wurde die Leistung bis zum Beginn der Transienten über zwei Tage hochgefahren. Dies führte zu einer längeren Siedephase (etwa 15 min. bis zum ersten Dryout) als bei Mol 7C/4 (ca. 3 s - 4 s). Diese Fahrweise ist aufgrund des hohen Rechenzeitbedarfs so nicht nachvollziehbar. Das Problem wurde dadurch gelöst, daß in der Referenzrechnungen für Mol 7C/5 die Fahrweise von Mol 7C/4 bzw. Mol 7C/6 zugrunde gelegt wurde. Hierdurch sind die Temperaturverläufe der Referenzrechnung nicht direkt mit den Meßwerten des Experiments vergleichbar. Deshalb wurde für die Anfangsphase der Transienten eine Vergleichsrechnung mit den in Mol 7C/4 vorliegenden Bedingungen durchgeführt. Mit Hilfe von einer zusätzlichen Rechnung für Mol 7C/5 mit langsamer Einleitung der Transienten wird in Kapitel 6.4 weiterhin gezeigt, daß die für die Einleitung der Tran-

sienten gewählte Fahrweise keine wesentlichen Auswirkungen auf die nachfolgende Schadensentwicklung hat.

Das Schließen des Blockadeventils läßt sich mit dem SIMMER-II Programm nicht direkt modellieren. Der Haupteffekt der Zusatzkühlung ist, daß bei voller Leistung der Blockadebereich noch kühlbar ist. Das kann aber auch durch einen höheren Massenstrom durch das Bündel und damit auch durch die Blockade erreicht werden. Dieser wird durch eine künstlich erhöhte Druckdifferenz über den gesamten Berechnungsausschnitt vor Beginn der Transiente erzwungen. Der so erhöhte Natriumdurchsatz bewirkt eine bessere Kühlung und damit Reduzierung der Temperaturen sowohl des Blockadebereichs als auch der Bereiche außerhalb der Blockade. Die Druckdifferenz wurde so gewählt, daß das Temperaturniveau innerhalb der Blockade nach Erreichen eines stationären Zustandes richtig wiedergegeben wird. Die Temperaturen vor und hinter der Blockade, aber auch im äußeren Ring $i = 4$ in dem Teil, in dem das Natrium an der Blockade vorbeiströmt, sind durch diese Vorgehensweise etwas zu niedrig. Für den weiteren Verlauf der Rechnung spielt dies eine untergeordnete Rolle, da die Vorgänge im Blockadebereich dominieren. Nach Erreichen eines stationären Zustandes, was in SIMMER-II nur in Form einer transienten Rechnung über einen längeren Zeitraum möglich ist, wird die Druckdifferenz schlagartig auf die im Experiment vorliegende reduziert und damit die Transiente eingeleitet. Der durch die anfänglich erhöhte Druckdifferenz zunächst noch kühlbare Blockadebereich geht durch die Rücksetzung der Druckdifferenz in einen nicht mehr kühlbaren Zustand über. Die wesentlichen Charakteristika der Fahrweise der schnellen Einleitung der Transienten sind damit hinreichend gut wiedergegeben.

Die Experimente Mol 7C/4 und 5 wurden nach der Schadensentstehung für weitere vier Stunden bei voller Leistungserzeugung fortgesetzt. Diese Zeit wird in der Rechnung für Mol 7C/5 stark verkürzt. Nach Ausbildung des Schadens wird nur bis zum Erreichen eines quasi stationären Zustands weitergerechnet. Auch das Abfahren der Leistung über etwa zwei Stunden (vgl. Abb. 2.3) muß in der Rechnung gerafft werden. Daher wird die Leistung in der Referenzrechnung linear über 20 s auf Null reduziert und danach noch 5 s weitergerechnet.

Die Reduzierung der sehr langen Zeitabschnitte des Experimentes auf sehr viel kürzere Zeiträume in der Rechnung erscheint zulässig, da jeweils bis zum Erreichen eines quasi stationären Zustandes gerechnet wurde. Es ist nicht zu erwarten, daß sich auch bei längeren Rechenzeiten für die einzelnen Phasen die erreichten Zustände wesentlich geändert hätten.

6. SIMMER-II Rechnungen

Alle hier aufgeführten Rechnungen für die Mol 7C-Experimente wurden mit den in Kapitel 4.2 beschriebenen und in Anhang A aufgelisteten Änderungen bzw. Erweiterungen durchgeführt. Neben der Referenzrechnung für den kompletten Versuchsablauf des Experiments Mol 7C/5 werden Rechnungen mit Variationen der für den Verlauf der Rechnung wesentlichen Wärmeübergangparameter und Rechnungen speziell für die Anfangsphasen der Versuche Mol 7C/4 und 5 dargestellt. In allen Fällen wurde die in Kapitel 5.1 beschriebene Geometrie mit dem in Abb. 5.1 dargestellten Netz von 72 Maschen verwendet.

6.1 Wichtige Eingabedaten

Einige wichtige Daten der Rechnungen wie Maschenlängen und -radien, die relative radiale Leistungsverteilung und die Verteilung der Volumenanteile der festen Materialien für den Anfangszustand im gesamten Rechennetz werden in den folgenden Tabellen zusammengefaßt.

axiale Länge des Berechnungsausschnitts: 1,5 m

axiale Längen der Maschen im Blockadebereich: 2 mm ÷ 5 mm

Anzahl der axialen Maschen im Blockadebereich: 10

Außenradien der Maschen und relative radiale Leistungsverteilung

i =	1	2	3	4
r_a [mm]	3,7	7,9	14,27	23,70
P_{SHAPR}	1	1	1,06101	1,35957

Volumenanteile der festen Stoffe (Fortsetzung auf Seite 60)

i =	1	2	3	4
j =	6 ÷ 13			5 ÷ 14
$\alpha_{\text{Brennstoff}}$	-	0,6570	0,5917	0,3074
$\alpha_{\text{Hüllrohr}}$	-	0,1165	0,1262	0,1014
$\alpha_{\text{Kastenwand}}$	0,1556	-	-	0,0080
j =	5 und 14			
$\alpha_{\text{Brennstoff}}$		0,3715	0,3765	
$\alpha_{\text{Hüllrohr}}$		0,4891	0,4827	
$\alpha_{\text{Kastenwand}}$	-	-	-	

Volumenanteile der festen Stoffe (Fortsetzung von Seite 59)

i =	1	2	3	4
j =	1 ÷ 5, 14 ÷ 18	1 ÷ 4, 15 ÷ 18		
$\alpha_{\text{Brennstoff}}$	-	0,3715	0,3765	0,3074
$\alpha_{\text{Hüllrohr}}$	0,6524	0,1163	0,1262	0,1014
$\alpha_{\text{Kastenwand}}$	0,1556	-	-	-

r_a - Außenradien der Maschen [mm]

P_{SHARP} - relative radiale Leistungsverteilung [-]

α - Volumenanteile [-]

Massenstrom durch das Bündel nach der Einleitung der Transiente $\sim 1,85$ kg/s

Druckverlust über das Bündel nach Einleitung der Transiente $\sim 1,57$ bar

Leistungserzeugung in der Blockade bis zur Brennstoffumverteilung $\sim 22,7$ kW

Da die Rückwirkungen der Brennstoffbewegungen auf die Leistungserzeugung gering sind, wurde mit konstanten massenbezogenen radialen und axialen Leistungsverteilungen gerechnet [28]. Diese Leistungserzeugung wurde bis zum Beginn der Leistungsreduzierung als konstant angenommen.

6.2 Referenzrechnung für Mol 7C/5

Die Referenzrechnung mit den Versuchsdaten von Mol 7C/5, aber der Fahrweise von Mol 7C/4 wurde mit dem in Anhang B zusammengestellten Eingabedatensatz durchgeführt und erstreckt sich insgesamt über drei Phasen. In der ersten Phase wird ein stationärer Ausgangszustand ermittelt (Rechnung bis 12 s Problemzeit). Die zweite Phase stellt die sogenannte "Transiente" (bis 64 s) dar. In der dritten und letzten Phase bildet sich während einer kontinuierlichen Reduzierung der Leistung auf Null (bis 84 s) und anschließender Rechnung ohne Leistungserzeugung (bis 90 s Problemzeit) die Endkonfiguration.

In der Anfangsphase wird zunächst mit einer über das gesamte Bündel erhöhten Druckdifferenz von 6,77 bar der quasi stationäre Ausgangszustand ermittelt (vgl. Kapitel 5.3). Er ist nach ca. 12 s erreicht. Die Natriumtemperaturen (Abb. 6.1) steigen kaum mehr an.

Zwischen 12 s und 12,5 s wird die Druckdifferenz auf den im Experiment vorliegenden Wert reduziert und damit der Beginn der zweiten Phase, der sogenannten „Transiente“, erzwungen (Abb. 6.2). Der Druck am Bündeleintritt wird dabei so reduziert und der am Bündelaustritt so erhöht, daß der Druck im Blockadebe-

reich nahezu konstant bleibt. Die schlagartige Reduzierung der Druckdifferenz über das Bündel auf 1,57 bar, verbunden mit einer Verminderung des Bündeldurchsatzes auf den Wert von ca. 1,85 kg/s, bewirkt eine plötzliche Verschlechterung der Kühlung des Blockadebereichs und führt dort zu einem rapiden Anstieg aller Temperaturen, z.B. des Natriums in Abb. 6.1.

Die Siedephase der vorliegenden Rechnungen beginnt etwa 0,5 s nach Transientenbeginn in der Masche $i = 2$, $j = 10$ etwa in der Mitte der Blockade. In der Masche $i = 3$, $j = 8$ (Abb. 6.3) beträgt die Zeit von Siedebeginn bis Dryout ca. 4 s, und nach weiteren ca. 0,7 s setzt Stahlschmelzen ein.

Abbildung 6.4 zeigt die Masse des gesamten flüssigen Natriums in allen Maschen der Blockade über der Zeit. Nach Siedebeginn wird ein großer Teil des Natriums sehr schnell durch partielles Verdampfen aus dem Bereich der Blockade herausgetrieben. Bei 19 s ist der Blockadebereich zum ersten mal fast vollständig leeresiedet. In den axialen Randbereichen der Blockade kommt es aber zum Wiedereintritt von flüssigem Natrium, bis ab 26 s die Blockade wieder weitergehend von Natrium entleert ist.

Das Stahlschmelzen (Abb. 6.5) beginnt während der Phase des starken Natriumverdampfens bei ca. 13,7 s Problemzeit, d.h. ca. 1,7 s nach Transientenbeginn in der Mitte von Ring $i = 2$. Nach ca. 10 s ist das Stahlschmelzen abgeschlossen. Die Hüllrohre und die Kastenwand in Ring $i = 1$, die das Zentraldummy darstellt, sind im inneren Bereich der Blockade vollständig geschmolzen. Nur in den äußeren, besser gekühlten Maschen bleiben die Hüllrohre erhalten. Hier zeigt sich u.a. die Wirkung der neu eingeführten axialen Wärmetransportmechanismen. In den äußeren axialen Blockadebereichen gefriert auch ein Teil des flüssigen Stahls an den Hüllrohren und den Kastenwänden. Der größte Teil des geschmolzenen Stahls verläßt aber den Blockadebereich entweder in Form von flüssigem Stahl oder als Stahlpartikel. Insgesamt gesehen geht im Laufe der Rechnung etwa die Hälfte des ursprünglich vorhandenen Stahls der Blockade aus diesem Bereich verloren.

Brennstoffschmelzen beginnt, wie die in Abb. 6.6 dargestellte Gesamtbilanz der Brennstoffmassen im Blockadebereich über der Zeit zeigt, bei 16 s, d.h. 4 s nach Transientenbeginn. Abb. 6.7 oben zeigt für die beiden Ringe $i = 2$ und $i = 3$ die Verteilung der Volumenanteile innerhalb des Blockadebereichs im Längsschnitt bei 17,15 s Problemzeit. Die Hüllrohre im Ring $i = 2$ sind im axial gesehen inneren Bereich vollständig geschmolzen. Brennstoffschmelzen ist etwas oberhalb der Mitte der Blockade für $j = 10$ und $j = 11$ am weitesten fortgeschritten. Im radial

weiter außenliegenden Ring $i = 3$ sind zu diesem Zeitpunkt noch nicht einmal die Hüllrohre geschmolzen.

Der Transport der geschmolzenen Materialien aus dem inneren Bereich der Blockade wird in der Anfangsphase der Transiente bestimmt durch das Verdampfen von wiedereintretendem Natrium, aber auch durch die Reibung und die Schwerkraft.

Ein Teil des flüssigen Stahls und des Brennstoffs gefriert insbesondere in den besser gekühlten axialen und radialen Randbereichen der Blockade wieder aus. Da der Strukturanteil der axialen Randmaschen von vorneherein sehr hoch war, genügt relativ wenig zusätzliches festes Strukturmaterial, um diese Maschen zu blockieren. In der vorliegenden Referenzrechnung ist der maximale Strukturmaterialanteil, ab dem eine Masche als undurchlässig angenommen wird, auf 90 % gesetzt. Alle vier anfänglich durchlässigen Randmaschen haben bei 26,3 s durch Gefrieren von Stahl und Brennstoff diesen maximalen Strukturmaterialanteil erreicht und sind damit blockiert. In radialer Richtung war der Blockadebereich von vorneherein durch die undurchlässige Kastenwand zwischen dem dritten ($i = 3$) und vierten ($i = 4$) Ring abgeschlossen. Die Maschen $j = 5$ und $j = 14$ im innersten Ring $i = 1$ waren ebenfalls von vorneherein undurchlässig. Damit ist zum Zeitpunkt 26,3 s eine allseits umschlossene Konfiguration entstanden, die mit der Umgebung kein Material mehr austauscht.

Bild 6.7 unten zeigt die Verteilung der Volumenanteile für den Zeitpunkt 30 s, d.h. 3,7 s nach der Bildung der geschlossenen Kaverne. Die Hüllrohre im Innern sind zu diesem Zeitpunkt vollständig geschmolzen, nur in den Randbereichen der Blockade gibt es noch intakte Hüllrohre. Der Brennstoff im Innern ist ebenfalls weitgehend geschmolzen. Ein Teil des flüssigen Brennstoffs ist zu Partikeln erstarrt. Abb. 6.6 zeigt, daß das Brennstoffschmelzen nach ca. 38 s Problemzeit beendet ist. Der flüssige Brennstoff im Innern der Kaverne gefriert jedoch weiterhin teilweise auf der Kastenwand, die sich in Ring vier befindet und die Blockade radial begrenzt, in Form einer Kruste aus. Gleichzeitig schmelzen die Brennstoffpartikel, die sich in dem "Pool" aus flüssigem Brennstoff im Innern der Kaverne befinden, wieder auf. Die Temperatur des flüssigen Brennstoffs steigt erst an, nachdem der größte Teil dieser Partikel geschmolzen ist. Abb. 6.8 zeigt die Temperaturen des flüssigen Brennstoffs, des flüssigen Stahls und des gefrorenen Brennstoffs in Masche $i = 3, j = 9$ sowie der Kastenwand in der axial benachbarten Masche $i = 4, j = 9$, etwa in der Mitte der Blockade. Mit dem Anstieg der Brennstofftemperatur setzt ab 45 s eine partielle Verdampfung des flüssigen Brennstoffs ein

(siehe Abb. 6.9), verbunden mit einem leichten Druckanstieg (Abb. 6.10); der Pool beginnt zu sieden. Die noch vorhandene Menge des flüssigen Stahls von 2 g (s. Abb. 6.5) trägt durch ihre Verdampfung mit zum Gesamtdruck bei.

Die in Abb. 6.11 oben dargestellten Volumenanteile zeigen, daß zum Zeitpunkt 36 s in dem weiter innen gelegenen und damit heißeren Ring $i = 2$ fast alle Brennstoffpartikel geschmolzen sind. Im Ring $i = 3$ wird ein großer Teil der produzierten Wärme über die Brennstoffkruste und die Kastenwand an das in Ring $i = 4$ vorbeiströmende Natrium abgegeben. Ein geringerer Teil wird mit Hilfe der in SIMMER-II neu eingeführten Transportmechanismen axial an die blockierten Randmaschen und von da an das Natrium der über bzw. unter der Blockade liegenden Maschen abgeführt.

Diese zweite Phase der Rechnung, die sogenannte Transiente, wurde bei voller Leistungserzeugung bis 64 s Problemzeit fortgeführt. Der Druck im Innern bleibt zu diesem Zeitpunkt nahezu konstant (Abb. 6.10). Die Temperatur des flüssigen Brennstoffs (Abb. 6.8) steigt bei 64 s kaum mehr an. Die Temperaturen der Brennstoffkruste und der Kastenwand sind konstant. Die Leistungsbilanz für den Blockadebereich als Funktion der Zeit (Abb. 6.12) zeigt, daß die aus der Blockade an das vorbeiströmende Natrium insgesamt abgegebenen Leistung ungefähr gleich der in der Blockade insgesamt produzierten Leistung ist. Damit ist ein quasi stationärer, kühlbarer Zustand bei voller Leistung, einer Temperatur von ca. 3600 K und einem Druck von ca. 2,3 bar im Innern erreicht.

Im Inneren der Kaverne finden, bedingt durch Verdampfung und Kondensation, stark oszillierende Vorgänge statt. Der Anteil des Brennstoffdampfes, z.B. in der Masche $i = 2, j = 7$ (Abb. 6.9), schwankt sehr stark. Auch die Geschwindigkeiten im Inneren, wie z.B. die Geschwindigkeit der Flüssigkeit in der axial etwa in der Mitte gelegenen Masche $i = 3, j = 10$ (Abb. 6.13), zeigen große Schwankungen. Abb. 6.14 zeigt die momentanen Geschwindigkeiten des Dampfes und der Flüssigkeiten innerhalb der Kaverne zum Zeitpunkt 64 s in Form eines zweidimensionalen Vektordiagramms. Bedingt durch die Siedevorgänge kommt es im radial gesehen Innenbereich der Kaverne zu einem Aufsteigen des Dampfes und der Flüssigkeiten. Im gesamten oberen Bereich der Kaverne und in dem weiter außen liegenden Ring $i = 3$ kondensiert der Dampf an der radialen, gekühlten Brennstoffkruste wieder, und es ergibt sich schwerkraftbedingt eine Abwärtsbewegung der Flüssigkeiten.

Die zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Volumenanteile zeigt Abb. 6.11 unten. In dieser Darstellung wird, wie gesagt, nicht zwischen dem Brennstoff der Kruste

und dem der Stäbe unterschieden. Die geometrische Konfiguration ist in Abb. 6.15 dargestellt. Der in den Maschen $i = 3$ an der benachbarten Kastenwand erstarrte Brennstoff ist dabei in äquivalente Kreisringflächen umgerechnet; die daraus resultierenden Radien sind in der Abbildung aufgetragen. Die mittlere radiale Krustendicke beträgt hierbei im oberen Bereich ($j = 9$ bis $j = 12$) etwa 1,1 mm, im unteren Bereich etwa 1,0 mm. Weiterhin ist die momentane Oberfläche des siedenden Pools, der aus einem Dampf/Flüssigkeitsgemisch besteht, eingezeichnet. Hierbei nehmen der Dampf und die Flüssigkeit je etwa die Hälfte des Poolvolumens ein.

In der dritten Phase wird zwischen 64 s und 84 s die gesamte Leistung linear auf Null reduziert. Anschließend wird noch 6 s, d.h. bis 90 s Problemzeit, ohne Leistungserzeugung weitergerechnet. Etwa 1,5 s bis 2 s nach dem Anfang der Leistungsreduzierung beginnen die Temperatur des flüssigen Brennstoffs und der Druck im Innern der Kaverne (Abbn. 6.8 und 6.10) zu sinken. Ab etwa 70 s setzt allmählich Gefrieren von Brennstoff an der Brennstoffkruste in Ring $i = 3$ ein. Der flüssige Stahl gefriert, wie Abb. 6.5 zeigt, ab etwa 75 s in der Masche $i = 3$, $j = 7$ zu Stahlpartikeln. Ab etwa 77 s bis 78 s, d.h. bei etwa einem Drittel der relativen Leistung, ist der Brennstoff bis auf Schmelztemperatur abgekühlt (Abb. 6.8); es kommt zum verstärkten Gefrieren an der Kruste und zusätzlich zur Bildung von Brennstoffpartikeln (Abb. 6.6). Abb. 6.16 zeigt die Volumenanteile im Längsschnitt bei 74 s Problemzeit, d.h. bei halber Leistungserzeugung. In den radial weiter innen gelegenen Ringen $i = 1$ und $i = 2$ befindet sich zu diesem Zeitpunkt noch hauptsächlich flüssiger Brennstoff. In dem weiter außen gelegenen Ring $i = 3$ hat jedoch der Anteil des gefrorenen Brennstoffs deutlich zugenommen.

Abb. 6.17 zeigt die Volumenanteile für den Endzustand bei 90 s. Der Stahl und der Brennstoff sind erstarrt. Der Stahl liegt in Form von Partikeln und der Brennstoff, teilweise in Form von Partikeln, teilweise als Brennstoffkruste vor. Der Druck im Innern sinkt laut Abb. 6.10 auf sehr kleine Werte ab. Der Wärmetransport aus der Kaverne an das vorbeiströmende Natrium (Abb. 6.12) geht erst gegen Ende der Rechnung (bei fast 90 s) auf Null zurück. Damit ist bei 90 s der stationäre Endzustand ohne Leistungserzeugung erreicht. Dieser Zustand ist mit den Schnittbildern aus den zerstörenden Nachuntersuchungen vergleichbar. Die in der Rechnung entstandene Konfiguration ist im oberen Teil der Abb. 6.18 dargestellt, die gefrorene Brennstoffvolumina wurde wiederum in entsprechende Radien umgerechnet. In dieser Konfiguration hat die Brennstoffkruste im unteren Bereich der Kaverne eine maximale Dicke von 3,24 mm. Im oberen Bereich (von Masche $j = 10$ bis $j = 12$) hat die Kruste eine mittlere Dicke von ca. 1,5 mm. Am Boden

der Kaverne beträgt die Dicke der Kruste, bestehend aus den blockierten Maschen $j = 5$ und der darüberliegenden Partikelschicht, zusammen etwa 10 mm. Ein Vergleich der Kaverne aus der Rechnung mit der in den zerstörenden Nachuntersuchungen vorgefundenen folgt in Kapitel 7.

6.3 Parametervariationen

In den nachfolgend beschriebenen Vergleichsrechnungen wurden drei für den Verlauf der Rechnung entscheidende, Parameter variiert. Die Wärmeübergangskoeffizienten zwischen festen Strukturen und Flüssigkeiten für die beiden Kastenwände, d.h. diejenige, die das Zentraldummy repräsentiert (h_{cw12}), und die Kastenwand zwischen Ring $i=3$ und $i=4$ als die radiale Begrenzung des Blockadebereichs (h_{cw34}) werden erhöht. Weiterhin wurde in einem Teil der Rechnungen mit erhöhtem Wärmeübergang vom flüssigen Brennstoff an feste Strukturen über den Faktor c_4 in Gl. (3.25) gerechnet. Die erhöhten Wärmeübergangskoeffizienten bewirken, daß die flüssigen Materialien ihre Wärme besser an die festen Strukturen abgeben können und damit schneller gefrieren. Die variierten Parameter dieser Rechnungen sind im Vergleich mit denen der Referenzrechnung in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

	h_{cw12} [10^4 W/m ² K]	h_{cw34} [10^4 W/m ² K]	c_4 [-]	geschlossene Kaverne [s]	Durchschmelzen der Kruste [s]
Referenzrechnung	1,6	1,6	1	26 - 27	-
Parameter- variation 1	1,8	1,5	1	18 - 19	ca. 36
2	1,5	1,5	1	13 - 20	ca. 33
3	1,6	1,6	3	20 - 21	ca. 28
4	2,0	1,6	3	nicht dicht	-
5	1,8	1,8	2	20 - 21	ca. 34

In einem der in der Tabelle aufgeführten Fälle (Parametervariation 4) kommt es nicht zur Blockierung der axialen Randmaschen der Blockade ($\alpha_{smax} \geq 0,9$). Hier ist der Wärmeübergang vom flüssigen Brennstoff an die Struktur und von den Flüssigkeiten an die Kastenwand im inneren Ring $i = 1$ erhöht. Dadurch gefriert

der zunächst geschmolzene Brennstoff schon weit innerhalb der Blockade, also in Maschen, die einen geringeren Strukturmaterialanteil haben. Als Folge davon wird in keiner Masche der für die Blockadebildung erforderliche Strukturmaterialanteil erreicht. So kommt es nach anfänglichem Schmelzen der Hüllrohre und des Brennstoffs zu einem Wiedereintritt von flüssigem Natrium. Dies führt zu einem stabilen, kühlbaren Zustand ohne weiteres Materialschmelzen und ohne Bildung einer Kaverne. In den frühen Mol 7C-Versuchen [29, 30] mit frischen Brennstäben kam es ebenfalls nicht zur Bildung einer Kaverne.

In den anderen untersuchten Parametervariationen entstanden aber wie in der Referenzrechnung zunächst ringsum geschlossene Konfigurationen. Diese sind neben dem Referenzfall die für den Mol 7C/5-Versuch interessanten Fälle. In den insgesamt vier Rechnungen mit diesem Verhalten (siehe Tabelle) sind die Randmaschen der Blockade nach sehr viel kürzerer Problemzeiten (zwischen 6,5 s und 9 s nach Transientenbeginn) als in der Referenzrechnung (14 s - 15 s) blockiert. Dies hat zur Folge, daß eine sehr viel größere Masse an Stahl und Brennstoff im Innern der Kaverne verbleibt als in der Referenzrechnung und als im Experiment Mol 7C/5. Dadurch kommt es einerseits zu schwächeren Oszillationen im Innern der Kaverne, und damit zu einem geringeren Wärmetransport vom Pool nach außen. Andererseits wird insgesamt mehr Energie erzeugt, die über die Kruste abgeführt werden muß. Dies führt in den hier aufgeführten Vergleichsrechnungen zu so hohen Pooltemperaturen, daß die Kruste zu schmelzen beginnt, und zwar zunächst in der Masche $i = 1, j = 5$, die ausschließlich aus Stahl besteht. Durch das Schmelzen der Kruste kann das flüssige Material das Innere der Kaverne und damit den Blockadebereich verlassen und kälteres Natrium einfließen. Nach Abschluß dieses Austauschprozesses kommt es wieder zu einer stabilen, kühlbaren Situation. Die folgende Tabelle gibt die wichtigsten Ergebnisse der Parametervariation und der Referenzrechnung wieder. Hierbei ist in der ersten Spalte der gesamte Brennstoffverlust aus der Blockade, bevor die Kaverne durchschmilzt, in der zweiten die in der Kaverne befindliche Stahlmenge, in der dritten die maximale Pooltemperatur und in der letzten der maximal Druck aufgeführt.

	Brennstoff- verlust aus der Blockade [g]	Stahlmenge in der Kaverne (fl. + Partikel) [g]	T _{max} [K]	P _{max} [bar]
Referenz- rechnung	45,5	2	3600	2,3
Parameter- variation 1	7,2	13,7	3800	25
2	9,3	13,7	3800	25
3	14,6	8,2	3400	5,8
4	-	-	-	-
5	18,3	5,5	4110	40

Als Beispiel für den Verlauf einer Rechnung, bei der zunächst eine Kaverne entsteht, wird diejenige Rechnung mit den geringsten Masse an flüssigem Stahl und Brennstoff im Innern der Kaverne ausgewählt (siehe Tabelle, Fall 5). In dieser Rechnung ist der Wärmeübergang für die das Zentralsdummy repräsentierende Kastenwand an die Flüssigkeiten und der Wärmeübergang von flüssigem Brennstoff an feste Strukturen erhöht (s. Tabelle S. 65). Der bessere Wärmeübergang des flüssigen Brennstoffs hat u.a. zur Folge, daß in den Randmaschen pro Zeiteinheit mehr Brennstoff gefrieren kann. Dies wiederum führt zu einer früheren Blockierung der Randmaschen der Blockade und damit zu einem geringeren Materialverlust aus dem Blockadebereich. In dieser Vergleichsrechnung sind insgesamt nur ca.18,3 g Brennstoff verloren gegangen (Abb. 6.19). Im Vergleich dazu geht in der Referenzrechnung 45,5 g Brennstoff verloren. In der Vergleichsrechnung sind zusätzlich noch etwa 5,5 g flüssiger Stahl im Innern der Kaverne vorhanden (Abb. 6.20). In der Referenzrechnung sind nur eine Menge von etwa 2 g und im Experiment keine nennenswerte Menge an Stahl mehr in der Kaverne vorhanden. Trotz des etwas besseren Wärmeübergangs von flüssigem Brennstoff an die Kruste steigt die Temperatur im Innern der Kaverne auf über 4100 K (Abb. 6.21) und der Druck auf fast 40 bar an (Abb. 6.22). Dabei erzeugt allein der Stahldampf vor dem Durchschmelzen der Kruste ca. 60 % des Innendrucks der Kaverne. Trotz des hohen Drucks kommt es in der Rechnung nicht zu einem mecha-

nischen Versagen der entstandenen Kaverne, da bei der vorliegenden Konfiguration in SIMMER-II nur ein thermisches Versagen simuliert werden kann. Erst nach ca. 34 s versagt die Kaverne in der Rechnung durch Aufschmelzen der Kruste.

6.4 Analysen der Anfangsphasen

Da sich, wie in Kapitel 5.3 erläutert, die Anfangsphasen der Transiente der bisher dargestellten Rechnungen nicht direkt mit denen der Versuche vergleichen lassen, wurden weitere spezielle Rechnungen für die Anfangsphasen der Experimente Mol 7C/4 und 5 durchgeführt. Diese sollen zeigen, daß die Anfangsphasen von Experiment und Rechnung ausreichend gut übereinstimmen und die für den Referenzfall und die Parametervariationen von Mol 7C/5 gewählte Fahrweise akzeptabel ist.

Zunächst wurde eine Rechnung mit den Versuchsdaten von Mol 7C/4 durchgeführt (siehe Tabelle in Kapitel 2.1). Es wurde die gleiche Fahrweise wie in den zuvor dargestellten Rechnungen gewählt, die Fahrweise der Rechnung entspricht somit der des Experiments. Die Abbildungen 6.23 und 6.24 zeigen die berechneten Temperaturverläufe (in Grad Celsius) des Natriums und der Hüllrohre im Vergleich mit den Meßwerten der Thermoelemente TE38 und TE65 des Experiments Mol 7C/4. Die für die Abbildungen ausgewählten Maschen entsprechen etwa der Lage der Thermoelemente. Der Nullpunkt der Zeitachse entspricht dem Transientenbeginn der Rechnungen (\equiv 12 s Problemzeit der übrigen Darstellungen) und des Experiments. Ein genauer Vergleich zwischen den Meßwerten aus Mol 7C/4 und den Ergebnissen der Rechnung für Mol 7C/4 folgt in Kapitel 7. Diese Rechnung wurde nicht weitergeführt, da bei dem Versuch Mol 7C/4 mit dem höheren Abbrand das Spaltgas für den weiteren Verlauf der Rechnung eine entscheidende Rolle spielt.

Zusätzlich wurde die Anfangsphase von Mol 7C/5 mit einer dem Versuch vergleichbaren Fahrweise nachgerechnet. Hierzu wurde von vorneherein mit dem Kühlmittelmassendurchsatz des Experiments gerechnet und die Leistungserzeugung linear über 20 s Problemzeit von Null auf 100 % erhöht. Dieser Rechenverlauf entspricht dem langsamen Hochfahren der Reaktorleistung (Abb. 2.3) bei geschlossenem Blockadeventil, die Zeit bis zum Erreichen der vollen Leistung ist in der Rechnung jedoch stark verkürzt. Abb. 6.25 zeigt die in der Rechnung insgesamt erzeugte Leistung (in den Maschen $j = 2$ bis $j = 17$) über der Zeit. Natrium-sieden beginnt in der Mitte der Blockade schon bei etwa 16,6 s, d.h. bei 83 % Leistungserzeugung. Die Temperaturverläufe des Hüllrohrs und des flüssigen Natriums in der Masche $i = 3, j = 8$ im Randbereich der Blockade sind in Abb. 6.26

dargestellt. Bis 19,3 s steigen die Temperaturen linear mit der Leistung an. Zu diesem Zeitpunkt beginnen weite Teile des inneren Bereichs der Blockade leerzusieden und der Stahl zu schmelzen. Die Phasenänderungen im Innern der Blockade führen zu einer Strömungsumverteilung und damit auch zu einem schnellen Anstieg der Temperaturen in den äußeren Bereichen der Blockade. Ähnliches Verhalten der Temperaturverläufe ist im Versuch vor Erreichen der vollen Reaktorleistung beobachtet worden. In der dargestellten Masche (s. Abb. 6.26) beträgt die Zeit von Siedebeginn bis Dryout etwa 2,5 s und von Dryout bis zum Stahlschmelzen etwa 0,8 s. In der Referenzrechnung mit der schnellen Einleitung der Transienten ist die Siedephase in derselben Masche (s. Abb. 6.3) sogar noch länger. Bei 23 s Problemzeit (Abb. 6.27) ist in der Vergleichsrechnung mit der langsamen Einleitung der Transienten der Stahl der Hüllrohre in dem weiter innen gelegenen Ring $i = 2$ vollständig geschmolzen und zusätzlich, vor allem in der Mitte der Blockade, etwa ein Viertel des ursprünglich vorhandenen Brennstoffs. Im Ring $i = 3$ hat zu diesem Zeitpunkt der Schmelzvorgang noch nicht begonnen. Dieser Zustand entspricht in etwa dem Zustand in der Referenzrechnung bei 17,15 s Problemzeit (Abb. 6.7).

7. Diskussion der Ergebnisse und Vergleich mit den Experimenten

Die Referenzrechnung basiert im wesentlichen auf den Versuchsdaten des Experiments Mol7C/5 mit verhältnismäßig niedrigem Abbrand der Brennstäbe. Nur in Bezug auf die Einleitung der Transienten unterscheiden sich Rechnung und Experiment. Hier orientiert sich die Referenzrechnung an den Versuchen Mol7C/4 und 6. Damit ist für die Anfangsphase der Transienten ein direkter Vergleich der Rechnung mit dem Versuch Mol 7C/5 nicht möglich. Aus diesem Grunde wurde eine spezielle Vergleichsrechnung für die Anfangsphase des Experiments Mol 7C/4 durchgeführt. In der nachfolgenden Tabelle sind für Mol 7C/4 die Zeiten bis Siedebeginn und zwischen Siedebeginn und Dryout von Transientenbeginn bis zum Stahlschmelzen einiger Thermoelemente und der entsprechenden Maschen der SIMMER-II Rechnung zusammengestellt (vgl. Kap. 6.4 und Abbn. 6.23 und 6.24).

Thermoelemente	Siedebeginn	Zeit zwischen Siedebeginn und Dryout	Zeit zwischen Transientenbeginn und Stahlschmelzen
entsprechende Maschen	[s]	[s]	[s]
TE 65	3,5	3,4	8,5
$i = 3; j = 9/10$	3,0	3,3	8,5
TE 37	5,2	2,3	8,8
$i = 3; j = 11/12$	3,6	3,5	8,3
TE 38	7	2,8	10,5
$i = 3; j = 7/8$	5,5	2,8	11,3
TE 35	4,3	1,0	7,6
$i = 2; j = 11/12$	2	-	3,5
TE 36	3,5	3,4	8,6
$i = 2; j = 9/10$	1,7	-	4

Es ist festzustellen, daß vorallem im weiter außen liegenden Ring $i = 3$ der Blockade die Rechenergebnisse für Mol 7C/4 gut mit den Meßergebnissen aus Mol 7C/4 übereinstimmen, im weiter innen gelegenen Ring $i = 2$ jedoch nicht so gut. In der Anfangsphase der Transienten macht sich in diesem Ring noch bemerkbar, daß die Einströmung vor Transientenbeginn von kälterem Natrium durch das Zentralsdummy direkt in den Blockadebereich in der Rechnung nicht

modelliert wird. Die Temperaturgradienten vor Siedebeginn und nach Dryout (s. Abb. 6.24) sind in der Rechnung etwa gleich denen des Experiments. Aus diesen Ergebnissen kann geschlossen werden, daß die gewählte, in Kapitel 5.1.1 beschriebene Behandlung der Brennstoffkugeln als Teil des Brennstoffs der Stäbe, verbunden mit der Erhöhung der Oberfläche, zulässig ist.

Im Versuch Mol 7C/5 gab es, bedingt durch das langsame Hochfahren der Reaktorleistung, eine längere Siedephase (ca. 15 min) im Bereich der Blockade, bevor es zum Dryout und zu einer weiteren Schadensentwicklung kam. In der Referenzrechnung hingegen beginnt, bedingt durch die gewählte Fahrweise, die Schadensentwicklung nach sehr viel kürzerer Zeit, z.B. setzt Stahlschmelzen schon ca. 1,7 s nach Transientenbeginn ein. Der Vergleich der Referenzrechnung mit der schnellen Einleitung der Transienten durch schlagartiges Reduzieren des gesamten Massendurchsatzes (s. Abb. 6.7) mit der Rechnung für Mol 7C/5 mit der langsamen Einleitung der Transiente (s. Abb. 6.27) zeigt, daß vergleichbare Zustände erreicht werden. Damit ist der weitere Verlauf der Schadensentwicklung nach Beginn des Schmelzvorgangs weitgehend unabhängig von der in der Rechnung gewählten Fahrweise. Für den Ablauf der Schmelz- und Gefriervorgänge spielen die Ereignisse während der Siedephase somit keine entscheidende Rolle. Von besonderem Interesse sind die Vorgänge, die zur Bildung einer Kaverne führen, und unter welchen Bedingungen diese stabil ist.

In der vorliegenden Referenzrechnung ist ca. 14,3 s nach Transientenbeginn eine ringsumschlossene Kaverne entstanden. Im Experiment Mol 7C/5 ergab sich die Lage der Kruste der Kaverne aufgrund der Kühlungsbedingungen. Die Randbereiche der Blockade wurden im Experiment dabei noch so gut gekühlt, daß sich, wie die Abbn. 2.5 und 2.6 zeigen, die Brennstoffkrusten innerhalb des Blockadebereichs gebildet haben. In SIMMER-II kann der Brennstoff dagegen nur auf einer vorgegebenen Kastenwand gefrieren. In den Rechnungen liegt eine solche Kastenwand am radialen Rand der Blockade. Dort bildet sich im Laufe der Rechnung auch die Brennstoffkruste. In axialer Richtung können sich in SIMMER-II Rechnungen keine durchgängigen Krusten bilden. Die axialen Randmaschen haben, bedingt durch die zusätzlichen Begrenzungsbleche, von vornherein mehr Strukturmaterial als die übrigen Maschen der Blockade. Folglich werden auch diese Maschen zuerst durch Gefrieren von geschmolzenen Materialien blockiert und stellen dann den Boden und den Deckel der Kaverne dar. Somit werden die radialen und axialen Begrenzungen der Kaverne in der Rechnung durch die beschränkten Möglichkeiten bei der Behandlung von Ausfriervorgängen in

SIMMER-II von vornherein vorgegeben. In der Rechnung ist dadurch sowohl die radiale als auch die axiale Ausdehnung der entstandenen Konfiguration zu groß. Folglich lassen sich auch die Zahlenwerte für den Verlust von ursprünglich vorhandenem Brennstoff aus dem Bereich der Kaverne nicht direkt vergleichen. Im Experiment beträgt der gesamte Brennstoffverlust im Endzustand [12] etwa 11 g bis 17 g, in der Rechnung hingegen 45,5 g. In der Rechnung gehen weiterhin 16,2 g Stahl verloren. Innerhalb der Kaverne befindet sich in der Phase der Leistungserzeugung noch etwas weniger als 2 g flüssiger Stahl. Im Vergleich dazu zeigt die Nachuntersuchung von Mol7C/5 keinen nennenswerten Stahlanteil in der Kaverne; der zunächst geschmolzene Stahl lagerte sich überwiegend im Randbereich der Blockade wieder an, z.B. befindet sich unterhalb der Blockade ein größerer Stahlpfropfen (Abb. 2.5). Dieses Verhalten läßt sich in den Rechnungen nicht wiedergeben. Hier gefriert der Stahl zu Partikeln, die bis zum Zeitpunkt der Blockierung der Randmaschen die Blockade und folglich auch das Bündel verlassen.

Entscheidend für die Kühlbarkeit der entstandenen Konfiguration ist aber nicht die Masse des Brennstoffverlustes aus der Blockade, sondern die in der Kaverne insgesamt verbleibende Brennstoffmasse (flüssiger Brennstoff und Brennstoffkruste), bezogen auf die äußere Oberfläche der Konfiguration. Im Experiment Mol7C/5 beträgt dieser Wert:

$$\left(\frac{m}{A}\right)_{\text{Exp.}} \approx 21 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2} - 23 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$$

in der Rechnung:

$$\left(\frac{m}{A}\right)_{\text{Rechnung}} \approx 18 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$$

Hierbei ist eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung festzustellen.

Die Meßwerte und die Nachuntersuchung des Experiments Mol 7C/5 liefern keine direkte Informationen darüber, welcher Zustand in der Kaverne bei voller Reaktorleistung vorlag. Aus den Nachuntersuchungsergebnissen lassen sich jedoch indirekte Schlußfolgerungen über die Beschaffenheit der Kaverne während des Versuchs nach dem zusätzlichen Brennstoffverlust nach etwa 18 Minuten (vgl. Kap.2.2) ableiten. Die bei den Nachuntersuchungen von Mol7C/5 im oberen Bereich der Kaverne festgestellte radiale Krustendicke beträgt etwa 1,4 mm. Die

Krusten in diesem Bereich sind wahrscheinlich in der Anfangsphase der Transiente entstanden und haben sich im weiteren Verlauf des Experiments nicht mehr wesentlich verändert [12]. In der Rechnung beträgt die mittlere radiale Krustendicke in diesem Bereich ($j = 9$ bis $j = 12$) bei voller Leistung nach Erreichen eines Gleichgewichtszustandes (bei 64 s Problemzeit) etwa 1,1 mm. Im unteren Bereich der Kaverne, d.h. im Bereich des Pools, ist in der SIMMER-II Rechnung die feste Kruste zu diesem Zeitpunkt wesentlich dünner als im Endzustand ohne Leistungserzeugung. Unterhalb des siedenden Pools befinden sich (bei 64 s) die blockierten Maschen der ersten drei radialen Ringe ($i = 1$ bis $i = 3$) mit dem zusätzlichen Stahlanteil für die Begrenzungsbleche im festen Zustand. Im dritten Ring befindet sich darüber zusätzlich eine mit Partikeln gefüllte Masche (siehe Abb. 6.11 unten), die aufgrund der in SIMMER-II verwendeten Gefriermodelle ebenfalls der Kruste zugerechnet werden muß. Auch im Experiment war während der Leistungserzeugung der größte Teil des später bei den Nachuntersuchungen im unteren Bereichs der Blockade vorgegefundenen Kavernenbodens (vgl. Kapitel 2) in flüssiger Form im Innern der Kaverne eingeschlossen [12]. In der Rechnung ist also eine Konfiguration entstanden, die die bisherige Vermutungen für diesen Zustand des Experiments bestätigt.

Die in der Referenzrechnung entstandene Kaverne mit einer dem Experiment vergleichbaren, auf die Oberfläche bezogenen Brennstoffmenge, aber einem zusätzlichen geringen Stahlanteil, ist bei voller Leistung über einen längeren Zeitraum thermisch stabil und kühlbar. In den gut gekühlten Randbereichen der Kaverne, vor allem in den Maschen ($i = 3, j = 7$ und $i = 3, j = 13$), kann der ursprünglich vorhandene Natriumdampf kondensieren. Das Natrium sammelt sich dort an und trägt damit nicht mehr zum Innendruck der Kaverne bei, daher sinkt der Druck unter den durch die Druckverteilung im Bündel vorgegebenen Ausgangswert. Der Druck während der Transiente wird hauptsächlich durch den Brennstoff- und Stahldampf erzeugt.

Für den berechneten Zustand bei 64 s Problemzeit, das heißt 52 s nach Transientenbeginn und 37,7 s nach Bildung einer ringumschlossenen Kaverne, sieht die Leistungsbilanz des Blockadebereiches wie folgt aus:

In der Blockade insgesamt erzeugte Leistung:

15,03 kW

An das vorbeiströmende Natrium abgegebenen Leistungen:

radial:	11,90 kW
nach unten:	1,56 kW
nach oben:	0,97 kW

Somit werden insgesamt 14,43 kW, d.h. 96 % der insgesamt in der Blockade erzeugten Leistung, an das vorbeiströmende Natrium abgegeben. Unberücksichtigt bleibt bei dieser Bilanz u.a. der mit dem Impulsverlust verbundene Leistungsverlust an festen Strukturen, da in SIMMER-II feste Struktur eine Impulssenke darstellen und die damit verbundene Erwärmung unberücksichtigt bleibt. Die Abfuhr der Wärme aus der Kaverne nach oben und unten wird durch die neu eingeführten axialen Wärmetransportmechanismen bewirkt. Durch den axialen Wärmetransport wird nach unten ca. 10 % und nach oben ca. 6,5 % der erzeugten Leistung abtransportiert. Trotz des relativ geringen Anteils des axialen Wärmetransports an der Gesamtbilanz spielen diese Beiträge eine entscheidende Rolle, da ohne sie die Bildung einer Kaverne nicht möglich wäre.

Der mittlere Wärmestrom von der Kaverne an die Umgebung im stationären Zustand (bei voller Leistungserzeugung) läßt sich für das Experiment sehr einfach abschätzen. Er betrug etwa 304 W/cm². In guter Übereinstimmung damit ergibt die Referenzrechnung einen mittleren Wärmestrom aus der Kaverne von etwa 297 W/cm². Hierbei beträgt die maximale Temperatur des flüssigen Brennstoffs im Innern der Kaverne ca. 3600 K und die maximale mittlere Temperatur der Brennstoffkruste ca. 2500 K. Der maximale Druck in der Kaverne liegt bei ca. 2,4 bar.

Die Temperatur in der Kaverne hängt entscheidend von den für den Wärmeübergang vom Pool an die Krust verwendeten Wärmeübergangsbeziehungen ab. In SIMMER-II werden, wie in Abschnitt 4.2.1.2 gesagt, für den konvektiven Wärmeübergang grundsätzlich nur die Beziehungen für erzwungene Konvektion verwendet. In dem siedenden Pool der Kaverne ist der Wärmetransport von den Flüssigkeiten an die innere Oberfläche der Kruste aber hauptsächlich durch natürliche Konvektionsvorgänge bestimmt. Es ist also abzuschätzen, ob die in der Rechnung verwendeten Werte der den Wärmetransport bestimmenden Wärmeübergangskoeffizienten auf die in den Experimenten vorliegenden Bedingungen anwendbar sind. Zum Wärmetransport aus Pools mit inneren Wärmequellen gibt es zahlreiche experimentelle Untersuchungen, die jedoch alle mit erheblichen Unsicher-

heiten behaftet sind. Diese Unsicherheiten resultieren aus der Schwierigkeit der Bestimmung der Pooltemperatur bei Experimenten mit Brennstoff und Stahl bzw. der Übertragbarkeit der Ergebnisse von Experimenten mit Simulationsmaterialien. Für den Vergleich mit den in SIMMER-II verwendeten Werten wurden die Arbeiten von Breton [31] und Experimente von Fieg [32] herangezogen. Breton überträgt die Wärmeübergangsbeziehungen zur Berechnung von siedenden Wasserpools auf siedende Pool sowohl aus reinem Brennstoff als auch aus einem Brennstoff-Stahl-Gemisch. Fieg hingegen untersucht eine volumetrisch beheizte wäßrige Salzlösung.

Schätzt man die Wärmeübergangskoeffizienten für den in der Referenzrechnung vorliegenden Fall nach Breton ab, so liegt der mittlere Wärmeübergangskoeffizient vom Pool an die Kruste zwischen $0,9 \cdot 10^4$ und $1 \cdot 10^4$ W/m²K. Der über die Höhe des Pools gemittelte Wärmeübergangskoeffizient beträgt in der Referenzrechnung bei voller Leistung (64 s Problemzeit) ungefähr $0,32 \cdot 10^4$ W/m²K. In der SIMMER-II Rechnung wird also im Vergleich zu den Arbeiten von Breton der Wärmeübergangskoeffizient vom Pool an die Brennstoffkruste um ungefähr einen Faktor zwischen 2,8 und 3 unterschätzt. Bezogen auf diese Beziehungen würde die Pooltemperatur in der Rechnung entsprechend überschätzt (vgl. Gl. (3.21)). Die Anwendung der von Breton verwendeten Beziehungen auf einen siedenden Brennstoff/Stahlpool weisen jedoch erhebliche Unsicherheiten auf [33].

Bei den Betrachtungen von Fieg wird im Gegensatz zu den Betrachtungen von Breton zwischen dem horizontalen und vertikalen Wärmetransport unterschieden. Im vorliegenden Fall ist der Raum nicht vollständig gefüllt, daher sind nur die Wärmeströme zur Seite und nach unten, d.h. zum Boden, von Bedeutung. Da sich die Zahlenwerte als solche aufgrund der verschiedenen Materialien und Bedingungen nicht direkt vergleichen lassen, wurde nur das Verhältnis der beiden Wärmeströme betrachtet. Sowohl bei den Versuchen von Fieg als auch bei den SIMMER-II Berechnungen ist der Wärmetransport aus dem Pool an die Kruste zur Seite etwa doppelt so groß wie nach unten. Das Verhältnis des radialen zum axialen Wärmeübergang aus dem Pool ist somit in guter Übereinstimmung mit den Experimenten von Fieg.

Die Vergleichsrechnungen mit einem erhöhten Wärmeübergang von flüssigem Brennstoff an feste Materialien, die zu einer höheren Brennstoffmasse und damit Leistungserzeugung im Pool führen, zeigen, daß unter solchen Bedingungen die Kruste schmilzt und die Konfiguration nicht über längere Zeit bestehen kann. Die

Ergebnisse der Vergleichsrechnungen mit höheren Brennstoffmassen in der Kaverne lassen sich mit den Zuständen in Mol 7C/4 und 5 vor dem Aufbrechen der Kaverne vergleichen. Auch dort kommt es in Übereinstimmung mit den Vergleichsrechnungen zum Durchschmelzen der Kruste und zum Austrag von flüssigem Brennstoff.

Direkt vergleichbar mit dem Experiment ist neben dem Anfangszustand für Mol 7C/4 der Endzustand der Rechnung für Mol 7C/5 nach Reduzierung der Leistung auf Null. Es wurde ohne Leistung so lange weitergerechnet, bis die Wärmeabfuhr aus der Kaverne beendet war. Die Kaverne in der Rechnung ist, wie bereits oben beschrieben, wegen der beschränkten Fähigkeiten von SIMMER-II sowohl in axialer als auch in radialer Richtung zu groß. Jedoch lassen sich die Krustendicken des Endzustands der Rechnung sehr gut mit denen des Experiments vergleichen. Die radialen Krustendicken aus der Nachuntersuchung des Experiments Mol 7C/5 sind in der folgenden Tabelle im Vergleich mit den Werten aus der Referenzrechnung für den Endzustand, d.h. nach Reduzierung der Leistung auf Null (90 s Problemzeit), und für den stationären Zustand dieser Rechnung bei voller Leistungserzeugung (64 s Problemzeit) dargestellt.

Experiment / Rechnung	Krustendicke [mm]
oberer Bereich der Kaverne:	
Mol 7C/5	1,4
Rechnung (Endzustand)	1,5
Rechnung (bei voller Leistung)	1,1
unterer Bereich der Kaverne:	
Mol 7C/5	3 - 3,5
Rechnung (Endzustand)	3,24
Rechnung (bei voller Leistung)	1,0

Im oberen Bereich der Blockade beträgt die mittlere Dicke der radialen Kruste in der Rechnung ca. 1,5 mm, bei Mol7C/5 ca. 1,4 mm. Im unteren Bereich hat die Kruste in der Rechnung eine maximale Dicke von 3,24 mm, im Experiment liegt die

Krustendicke dort zwischen 3 mm und 3,5 mm. Die Krustendicken stimmen also gut überein. Die Partikel, die sich im Endzustand der Rechnung am Boden der Kaverne befinden, sind der Kruste zugeschlagen, da aufgrund der SIMMER-II spezifischen Möglichkeiten in diesem Bereich ein Gefrieren des flüssigen Brennstoffs zu Partikeln erfolgt ist. Der entstandene innere Hohlraum der Kaverne ist in der Rechnung aufgrund der dicken Bodenschicht nur unwesentlich höher als im Experiment.

Insgesamt gesehen läßt sich sagen, daß die Rechenergebnisse für die Phase direkt nach Transientenbeginn von Mol 7C/4 gut mit den Meßergebnissen dieses Experiments übereinstimmt. Der Vergleich mit der Rechnung mit langsamer Einleitung der Transiente zeigt, daß auch der Beginn der Schadensentwicklung in der Referenzrechnung für Mol 7C/5 richtig wiedergegeben wird. Auch die berechnete Endkonfiguration entspricht etwa der in den Nachuntersuchungen des Experiments Mol 7C/5 vorgefundenen Kaverne. Daraus kann geschlossen werden, daß die Referenzrechnung recht gut den Verlauf des gesamten Experiments Mol 7C/5 beschreibt. Insbesondere hat sich in der Referenzrechnung bestätigt, daß sich unter ähnlichen Bedingungen wie im Experiment Mol 7C/5 nach Austrag eines Teils des flüssigen Brennstoffs eine über längere Zeit stabile und kühlbare Kaverne bildet. Im Gegensatz dazu ist eine Kaverne mit einer wesentlich höheren Masse an flüssigem Brennstoff und Stahl in ihrem Innern, entsprechend dem Zustand vor dem Aufbrechen der Kaverne im Experiment, thermisch nicht stabil. In den in Kapitel 6.3 dargestellten Parameteruntersuchungen steigen die Temperaturen im Innern soweit an, daß es zum Durchschmelzen der Kruste kommt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die Ergebnisse der Referenzrechnung in Anbetracht der Möglichkeiten des erweiterten SIMMER-II Programms mit dem Mol 7C/5 Experiment qualitativ und in Bezug auf die wesentlichen Phänomene auch quantitativ recht gut übereinstimmen.

8. Zusammenfassung und Schlußfolgerungen

Das Ziel der Analysen ist ein besseres Verständnis des Ablaufs der In-pile-Blockadeexperimente Mol 7C. Informationen über die Zustände im inneren Bereich der Blockade geben die Meßwerte der Thermoelemente nur bis zum Erreichen ihrer Schmelztemperatur. Über die Schmelz- und Gefriervorgänge, die letztendlich zur Bildung der Kaverne führten, und über den Zustand im Innern der Kaverne, ist aus den Experimenten selbst wenig bekannt. Ergebnisse gibt es erst wieder aus den zerstörenden Nachuntersuchungen. Daher liegt der Schwerpunkt der Analysen auf dem besseren Verständnis derjenigen Vorgänge, über die es keine Information mehr aus den Meßwerten der Experimente gibt. Da es sich bei den Versuchsabläufen um komplexe, instationäre Mehrkomponenten-, Mehrphasen-Prozesse handelt, ist die Analyse nur mit Hilfe aufwendiger Computerprogramme möglich. Hierfür wurde das SIMMER-II Programm ausgewählt, das ursprünglich zur Analyse von Sekundäreinkursionsen für Kernschmelz-Störfälle in schnellen, natriumgekühlten Brutreaktoren entwickelt wurde. Es war jedoch notwendig, die in SIMMER-II vorhandenen Modelle zu erweitern. Die wichtigste Ergänzung ist die Modellierung von axialem Wärmetransport über Maschengrenzen hinweg. Hierzu wurde die axiale Wärmeleitung innerhalb fester Materialien und der axiale Wärmetransport durch Konvektion implementiert und anhand von Testbeispielen überprüft. Die Ergebnisse dieser Testrechnungen mit dem erweiterten SIMMER-II Programm stimmen sehr gut mit den orts- und zeitabhängigen Temperaturverläufen spezieller analytischer Lösungen überein.

Mit dem erweiterten SIMMER-II Programm wurden Rechnungen für die Versuche Mol 7C/4 und 5 durchgeführt. Für den Versuch Mol 7C/4 wurde mit einer dem Versuch vergleichbaren Fahrweise nur die Anfangsphase der Transienten bis zum Beginn des Hüllrohrschmelzens berechnet. Die dafür ermittelten Temperaturverläufe stimmen recht gut mit den im Experiment gemessenen überein. Die Anfangsphase des Versuchs Mol 7C/5 wurde hingegen mit zwei verschiedenen Fahrweisen gerechnet: zum einen mit einer langsamen Einleitung der Transienten, vergleichbar der Fahrweise dieses Experiments, zum anderen mit einer schlagartigen Einleitung entsprechend der Vorgehensweise in den Versuchen 4 und 6. In beiden Rechnungen wurden zum Ende der Siedephase, nach Beginn der Schmelzvorgänge, Zustände der Schadensentwicklung erreicht, die einander sehr ähnlich sind. Daraus kann geschlossen werden, daß es für den weiteren Verlauf der Rechnung von untergeordneter Bedeutung ist, welche Fahrweise für die Einleitung der Transienten der Rechnung zugrunde liegt.

Für Mol 7C/5 wurde der komplette Versuchsablauf, ausgehend von einem stationären Zustand über Natriumsieden, Dryout, Materialschmelzen und Bildung einer Kaverne bis hin zu einem Endzustand ohne Leistungserzeugung, mit einer schnellen Einleitung der Transiente analysiert. Der Endzustand der Rechnung deckt sich mit den Nachuntersuchungsergebnissen mit vergleichbaren Materialverteilungen, wie z.B. Krustendicken. Hieraus und aus der guten Übereinstimmung der Anfangsphase der Transienten der Rechnung für Mol 7C/4 mit diesem Experiment kann geschlossen werden, daß die Rechnung für Mol 7C/5 den Verlauf des Experiments insgesamt gut wiedergibt. Die Rechnung für Mol 7C/5 bestätigte den bisher nur vermuteten Verlauf der Schadensentwicklung. Es kam zur Bildung einer Kaverne mit einem siedendem Brennstoffpool im Innern. Die Krustendicke im Bereich des Pools war im thermischen Gleichgewicht bei voller Leistung erheblich dünner als im Endzustand der Rechnung ohne Leistung. Es wurde bei voller Leistung und thermischem Gleichgewicht eine Temperatur von ca. 3600 K und ein Druck von ca. 2,4 bar im Innern der Kaverne erreicht. Die Temperatur und der Druck werden wahrscheinlich aufgrund der Unsicherheiten bei den verwendeten Beziehungen für den Wärmeübergang vom Pool an die Kruste etwas überschätzt.

Parametrische Rechnungen, bei denen sich ein geringerer Materialaustrag und damit ein höheres Brennstoffinventar in der Kaverne als im Experiment ergab, führten zu einem thermischen Versagen der Kaverne, jedoch zu keiner Schadensausweitung.

Die Rechnungen bestätigen, daß es bei geringem Abbrand der Stäbe nicht zu einer Propagation des Schadens kommt. Mit dem nun zur Verfügung stehenden, erweiterten SIMMER-II Programm lassen sich auch andere Blockadekonfigurationen berechnen. Dies ermöglicht eine bessere Übertragung der Ergebnisse der Mol 7C-Experimente auf Reaktorbedingungen.

Mit den vorliegenden Rechnungen sind die Möglichkeiten des erweiterten SIMMER-II Programms in Bezug auf die Analysen des Experiments Mol 7C/5 weitgehend ausgeschöpft. Weitere Verbesserungen könnten durch zusätzliche Modellerweiterungen, z.B. verbunden mit einer teilweise durchlässigen radialen Begrenzung des Blockadebereichs, erzielt werden. Auch eine Erweiterung der Gefriermodelle, z.B. zur Darstellung axialer Krusten, erscheint sinnvoll. Aus Rechenzeitgründen ist eine feinere Diskretisierung des Blockadebereichs kaum möglich. Die Analyse des kompletten Ablaufs des Versuchs Mol 7C/5 hat schon in der vorliegenden verkürzten Form über 30 Stunden CPU-Zeit auf dem Skalarrechner IBM 3010 der KfK benötigt. Für die Analyse der Versuche mit höherem Abbrand ist es

erforderlich, die Modelle für die Freisetzung des Spaltgases an die Erfordernisse der Mol 7C-Experimente anzupassen und das bislang unberücksichtigte Spaltgas einzuführen. Alle diese möglichen Erweiterungen des SIMMER-II Rechenprogrammes sind jedoch nur mit größerem Aufwand realisierbar und konnten daher im Rahmen dieser Arbeit nicht ausgeführt werden.

Referenzen

- [1] G.J. Vaughan, Event tree analysis of the subassembly accident, The Science and technology of fast reactor safety, BNES, London, 1986, Vol. 1, S. 457-463.
- [2] K. Haga et al., Review and future needs of experimental studies on local faults, Science and technology of fast reactor safety, St. Peter Port, Guernsey (1986).
- [3] C. Le Rigoleur et al., Subassembly accidents in the "Rapid 1500" associated Programmes of R and D, Proc. Int. Top. Meeting on Fast Reactor Safety, Knoxville, Tennessee (1985), Vol. 1, S. 111 - 117.
- [4] K. Schleisiek, Risk oriented analysis of subassembly accidents, Proc. Int. Top. Meeting Fast Reactor Safety, Knoxville, TN, 1985, Vol. 1, S. 141 - 149.
- [5] Gesellschaft für Reaktorsicherheit, Risikoorientierte Analyse zum SNR 300, GRS-51 (1982).
- [6] G.F. Schultheiß, Analyse der Bildung lokaler Kühlungsstörungen in schnellen Natriumgekühlten Brutreaktoren, KfK 2331 (1976).
- [7] D. Smidt and K. Schleisiek, Fast breeder safety against propagation of local failure, Nucl. Engrg. Des. 40 (1977) S. 393-402.
- [8] S. Jacobi, The delayed neutron detection method for cladding tube monitoring and experimental results. Int. Top. Meeting on Irradiation Technology, Grenoble, France (1982).
- [9] W. Kramer et al., In-pile experiments "Mol 7C" related to pin to pin failure propagation, Int. Meeting Fast Reactor Safety Technol., Seattle (1979).
- [10] K. Schleisiek et al., Mol 7C Experiments on Local Fault Propagation in Irradiated LMFBR Fuel Subassemblies; Nuclear Engineering and Design 100 (1987), North-Holland, pp. 435-445.
- [11] C. Homann, M. Bottoni, B. Dorr, D. Struwe, Two-dimensional Thermo-Hydraulic Calculations for Mol 7C Experiments with the Computer Code BACCHUS, Nuclear Technology, Sept. 1990, S. 275-286.

- [12] U. Bungeroth, K. Schleisiek, Analysis and Interpretation of the Mol 7C/5 In-pile Local Blockage Experiment; Nuclear Energy, 29, No. 3, pp. 195-203, June 1990.
- [13] W.R. Bohl, L.B. Luck, SIMMER II: A Computer Program for LMFBR Disrupted Core Analysis, Los Alamos Scientific Laboratory, June 1990.
- [14] L.L. Smith et al., SIMMER as a safety analysis tool, Proc. LMFBR Safety Topical Meeting, Lyon (1982), Vol. II, S. 35.
- [15] U. Bungeroth, Analysis of the Mol 7C Experiments with the SIMMER II Code, Liquid Metal Boiling Working Group, Brasimone / Italien, 1991.
- [16] P. Weimar, K. Schleisiek, PIE-Results of the In-pile-Blockade Experiments Mol 7C/4 and 5, International Fast Reactor Safety Meeting, Snowbird, 1990.
- [17] D. Geithoff, Examination of heavily defected fuel pin bundles, BWES, Int. Conf. on Postirradiation Examination, Grange-Over-Sands (1980).
- [18] K. Schleisiek, T.H. Bauer, T.H. Braid, Qualitative Studies of Severe Fuel Damage Using Delayed Neutron Data; to be published in Nuclear Technology.
- [19] G.P. Merker, Konvektiver Wärmeübergang, Springer Verlag, 1987.
- [20] J. Papin, R. Stansfield, Thermal-Hydraulic Behaviour of a Fast Breeder Reactor Subassembly during an undercooling Accident: The PHYSURA-GRAPPE Code and its Validation on Scarabee Experiments, Nureth-4 Proceedings, Fourth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Karlsruhe 1989, Vol. 1, S. 656-660.
- [21] P. Anzieu, J.P. Van Dorsselaere, Total instantaneous blockade calculations with the SURFASS code for fast reactor subassemblies, Int. Conf. on Fast Reactor core and fuel structural behaviour, BNES, London, 1990, S. 105 - 111
- [22] S. Kleinheins, SIMMER-II.9: unveröffentlicher Bericht, KfK, August 1984.
- [23] H. Gröber, S. Erk, U. Grigull, Die Grundgesetze der Wärmeübertragung, Springer Verlag, 1963.

- [24] P.J. Schneider, Conduction Heat Transfer, Addison-Wesley Publishing Company, 1974.
- [25] S. Ergun, Fluid Flow through Packed Columns; Chemical Engineering Progress, Vol. 48, No. 2, pp. 89-94, Feb. 1952.
- [26] N.J. Brealey, Transient Debris Bed Calculations in one Dimension, CLM-R256, 1985.
- [27] T.G. Williams, UKAEA Improvements to the SIMMER II Code made at Winfrith Technology Centre, International Fast Reactor Safety Meeting, Snowbird, Aug. 1990.
- [28] M. Kühle, persönliche Mitteilung (Mol 7C-Notiz)
- [29] W. Kramer et al., Comparative discussion of three Mol 7C in-pile blockage experiments, Proc. LMFBR Safety Topical Meeting, Lyon (1982), Vol. II, 112.
- [30] G. Karsten, Post irradiation examination of the coolant blockage experiments Mol 7C/1 and 2, Proc. LMFBR Safety Topical Meeting Lyon, 1982, Vol. IV, S. 427.
- [31] J.P. Breton, Development of Models of Boiling Pools for Hypothetical Subassembly Accident and Applications to Scarabee Tests, Nureth-4 Proceedings, Fourth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Karlsruhe 1989, Vol. 1, S. 662-668.
- [32] G. Fieg, Wärmeübergangsmessung aus intern beheizten Flüssigkeiten in zylinderförmigen Konvektionszellen, KfK-Bericht 2712, Okt. 1978.
- [33] G. Kayser, persönliche Mitteilungen.

Liste der verwendeten Buchstaben und Symbole

A	-	Querschnittsfläche [m^2]
A_{sm}	-	Wärmeübergangsfläche pro Volumen des festens Materials sm [$1/m$]
A_{skm}	-	Wärmeübergangsfläche pro Volumen zwischen dem festen Material sm und sk [$1/m$]
a	-	Temperaturleitfähigkeit [m^2/s]
c_1, c_2, c_3, c_4	-	Kennzahlen [-]
c_v	-	spezifische Wärme bei konstantem Volumen [$J/kg K$]
$c_{v_{gm}}, c_{v_{\ell m}}$	-	spezifische Wärme bei konstantem Volumen des Dampfs gm und des flüssigen Materials ℓm [$J/kg K$]
D_h	-	hydraulischer Durchmesser [m]
d	-	Durchmesser [m]
e	-	spezifische innere Energie [J/kg]
$e_{gm}, e_{\ell m}, e_{sm}$	-	spezifische innere Energie eines dampfförmigen, flüssigen und festens Materials [J/kg]
$e_{con, m}$	-	Kondensationsenergie des Materials m [J/kg]
$e_{liq, m}$	-	spezifische innere Energie des Materials m in flüssigem Zustand bei Schmelztemperatur [J/kg]
$e_{sol, m}$	-	spezifische innere Energie des Materials m in festem Zustand bei Schmelztemperatur [J/kg]
$e_{vap, m}$	-	spezifische innere Energie des Dampfs des Materials m bei Siedetemperatur [J/kg]
f	-	Reibbeiwert [-]
f_{s1}, f_{s2}	-	Koeffizienten zur Berechnung des Reibbeiwertes [-]
g	-	Erdbeschleunigung [m/s^2]
h	-	Wärmeübergangskoeffizient [$W/m^2 K$]
$h_{gm}, h_{\ell m}, h_{sm}$	-	Wärmeübergangskoeffizienten für dampfförmige, flüssige und feste Materialien [$W/m^2 K$]
$h_{fus, m}$	-	Schmelzenthalpie des Materials m [J/kg]
$H_{\ell m \ell k}$	-	Wärmeübergangskapazität zwischen dem flüssigen Material ℓk und ℓm [$W/m^3 K$]
k	-	Wärmeleitfähigkeit [$W/m K$]
K_{GL}, K_{LG}, K_{GS}	-	Impulsaustausch zwischen Flüssigkeit und Dampf, zwischen Dampf und Flüssigkeit und zwischen Dampf und fester Struktur [$kg/m^3 s$]
ℓ	-	Länge [m]

n	-	Parameter der Martinelli-Beziehung [-]
m	-	Masse [kg]
m_{sm}	-	Masse des festen Materials s_m in einer Zelle [kg]
$NQ_{gm}, NQ_{\ell m}, NQ_{sm}$	-	im dampfförmigen g_m , flüssigen ℓ_m und festen Material s_m erzeugte spezifische Energie [W/m^3]
Nu	-	Nusseltzahl [-]
P	-	Druck [N/m^2]
P_{gm}	-	Partialdruck des dampfförmigen Materials g_m [N/m^2]
P_{SHARP}	-	relative radiale Leistungsverteilung [-]
Pr	-	Prandtlzahl [-]
$q_{\Gamma G}$	-	Energietransportrate zu der Gasphase durch Massentransport [W/m^3]
$q_{H\ell m}, q_{\Gamma\ell m}, q_{K\ell m}$	-	Energietransportrate zum flüssigen Material ℓ_m durch Wärmetransport, durch Massentransport, durch Reibung [W/m^3]
$q_{Hs m}, q_{\Gamma s m}, q_{Ks m}$	-	Energietransportrate zum festen Material s_m durch Wärmetransport, durch Massentransport, durch Reibung [W/m^3]
q''	-	Wärmestromdichte [W/m^2]
$Q_{H\ell k s m}$	-	Energietransportrate von festem Material s_m zum festen Material s_m durch Wärmetransport [W/m^3]
$Q_{H\ell m \ell k}$	-	Energietransportrate von flüssigen Material ℓ_k zum flüssigen Material ℓ_m durch Wärmetransport [W/m^3]
$Q_{Hs m \ell k}$	-	Energietransportrate von flüssigen Material ℓ_k zum festen Material s_m durch Wärmetransport [W/m^3]
$Q_{Hs m s k}$	-	Energietransportrate von festem Material s_k zum festen Material s_m durch Wärmetransport [W/m^3]
$Q_{gm}, Q_{\ell m}, Q_{sm}$	-	gesamte Energietransportrate zu einem dampfförmigen, flüssigen und festen Material [W/m^3]
\dot{Q}	-	Wärmestrom [W]
r	-	Radius [m]
R_m	-	spezifische Gaskonstante [$J/kg K$]
Re	-	Reynoldszahl [-]
T	-	Temperatur [K]
T_G	-	Temperatur des Dampfs [K]
T_i	-	Kontakttemperatur zwischen Flüssigkeit und einem festen Material [K]

$T_{\ell m}, T_{sm}$	-	Temperatur des flüssigen Materials ℓm und des festen sm [K]
$T_{melt, m}$	-	Schmelztemperatur des Materials ℓm [K]
T_m^*, P_m^*	-	SIMMER II-Eingabeparameter des Materials m [K] bzw. [N/m ²]
$T_{sat, m}$	-	Siedetemperatur des Materials m [K]
t	-	Zeit [s]
U	-	Umfang [m]
V	-	Volumen [m ³]
V_{Zelle}	-	Volumen einer Maschenzelle [m ³]
\vec{v}_G, \vec{v}_L	-	Geschwindigkeitsvektoren der Dampf- und der Flüssigkeitsströmung mit den radialen Komponenten u und den axialen v [m/s]
w	-	Geschwindigkeit [m/s]
x, z	-	Längen [m]
x^2	-	Parameter der Martinelli-Beziehung [-]
z	-	axiale Richtung [m]

griechische Buchstaben:

α_o	-	Dampfvolumenanteil am Umschlagspunkt zwischen ein- und zweiphasiger Strömung [-]
$\alpha_{gm}, \alpha_{\ell m}, \alpha_{sm}$	-	Volumenanteil eines dampfförmigen, flüssigen und festen Materials [-]
$\alpha_G, \alpha_L, \alpha_s$	-	Volumenanteil der gesamten dampfförmigen, flüssigen und festen Phase [-]
$\Gamma_{gm}, \Gamma_{\ell m}, \Gamma_{sm}$	-	gesamte abgegebene Massentransportrate eines dampfförmigen, flüssigen und festen Materials [kg/m ³ s]
$\Gamma_{GL}, \Gamma_{LG}, \Gamma_{LS}$	-	Massentransportrate von Dampf nach flüssig, von flüssig nach Dampf und von fest nach flüssig [kg/m ³ s]
$\Gamma_{\ell m sk}$	-	Gefrierate vom flüssigen Material ℓm zum festen sk [kg/m ³ s]
$\Gamma_{sk \ell m}$	-	Schmelzrate vom festen Material sk zum flüssigen ℓm [kg/m ³ s]
$\Gamma_{\ell k \ell m}, \Gamma_{\ell m \ell k}$	-	Massentransportrate durch Schmelzen von Partikeln bzw. durch Gefrieren zu Partikeln [kg/m ³ s]

$\Gamma_{gk \ell m}$	-	Massentransportrate durch Kondensieren des Dampfes gk [$kg/m^3 s$]
$\Gamma_{\ell m gk}$	-	Massentransportrate durch Verdampfen der Flüssigkeit ℓm [$kg/m^3 s$]
ε	-	Porosität [-]
ϕ_{G^2}, ϕ_{L^2}	-	Zweiphasen-Reibungsfaktoren für Gas und Flüssigkeit in der Martinelli-Beziehung [-]
μ	-	dynamische Zähigkeit [kg/ms]
ν	-	kinematische Zähigkeit [m^2/s]
ρ	-	Dichte [kg/m^3]
$\rho_{gm}, \rho_{\ell m}, \rho_{sm}$	-	mikroskopische Dichte eines dampfförmigen, flüssigen oder festen Materials [kg/m^3]
$\bar{\rho}_{gm}, \bar{\rho}_{\ell m}, \bar{\rho}_{sm}$	-	makroskopische Dichte eines dampfförmigen, flüssigen oder festen Materials [kg/m^3]
$\bar{\rho}_G, \bar{\rho}_L$	-	makroskopische Dichte des Dampfes und der gesamten flüssigen Phase [kg/m^3]
τ_G, τ_L	-	Schubspannungstensor der Dampf- und der Flüssigkeitsströmung [N/m^2]

Indices:

G	-	Dampf
gm, gk	-	gasförmige Materialien
i	-	Maschennummer in r-Richtung
j	-	Maschennummer in z-Richtung
L	-	Flüssigkeit
liq	-	Liquidus
$\ell m, \ell k$	-	flüssige Materialien
S	-	Struktur
sm, sk	-	feste Materialien
sol	-	Solidus
vap	-	Dampf

ANHANG A: PROGRAMMERWEITERUNGEN

```
*/      BEGRENZUNG DES HYDRAULISCHEN DURCHMESSERS FUER DIE BERECHNUNG
*/      DER WAERMEUEBERGANGSKOEFFIZIENTEN IN SUBROUTINE TSHTR BLOCK 8
*/      ----- 18.07.1991 -----
*IDENT DHM
*D TSHT.140
C      BEGRENZUNG DES HYDRAULISCHEN DURCHMESSERS AUF 2*DR(I)
      DHM=TWO*DR(I)
      DHJ=DMIN1(DHM,DH(1))
      REL(N)=VELL*DHJ*ROLC(N)*REL(N)
*D TSHT.146,147
      * *PRL(N)**COREL(3,N)+COREL(4,N))/DHJ)
*/
*/
*/
*IDENT QAXI
*/      ----- AXIALE WAERMELEITUNG INNERHALB FESTER MATERIALIEN -----
*/      ----- IN SUBROUTINE TSHTR BLOCK 13 -----
*/      ----- 22.07.1991 -----
*I SKC.1730
      DIMENSION ALS(5,3),RS(5),ALL(3,2),HLSP(3),HLSM(3)
*I TSHT.507
C-----BLOCK 13.1
C      BERECHNUNG EINER AXIALEN WAERMELEITUNG INNERHALB FESTER STOFFE
      QJM1=ZERO
      QJP1=ZERO
      IJJ=IJM
      DO 701 N=1,3
      ALS(1,N)=RSBR(IJJ)*RROS(1) + RSBR(IJJ+1)*RROS(2)
      ALS(2,N)=RSBR(IJJ+2)*RROS(3) + RSBR(IJJ+3)*RROS(4)
      ALS(3,N)=RSBR(IJJ+4)*RROS(5)
      ALS(4,N)=RSBR(IJJ+5)*RROS(6)
      ALS(5,N)=RSBR(IJJ+6)*RROS(7)
      IJJ=IJJ+NQI
701 CONTINUE
      RS(1)=RSBR(IJ)+RSBR(IJ+1)
      RS(2)=RSBR(IJ+2)+RSBR(IJ+3)
      RS(3)=RSBR(IJ+4)
      RS(4)=RSBR(IJ+5)
      RS(5)=RSBR(IJ+6)
      DO 700 M=1,5
      K=IEOSSE(M)
      ALSM=DMIN1(ALS(M,1),ALS(M,2))*RDZ(J)*THCONS(K)
      ALSP=DMIN1(ALS(M,2),ALS(M,3))*RDZ(J)*THCONS(K)
      IF(J.GT.TWO) QJM1=RDZIP(J-1)*(SIES(IJM+M-1)*RCVS(K)-TN(M))*ALSM
      IF(J.LT.JP1) QJP1=RDZIP(J)*(SIES(IJP+M-1)*RCVS(K)-TN(M))*ALSP
      QS(IJ+M-1)=QS(IJ+M-1) + QJP1 + QJM1
      IF(RS(M).GT.ZERO) SIESN(M)=DMAX1((SIESN(M)+DTT*(QJP1+QJM1)/
1 RS(M)),ZERO)
700 CONTINUE
```

```
*/ ----- BERUECKSICHTIGUNG DES AXIALEN WAERMESTROMES ZUR BESTIMMUNG
*/ DER ANTEILE BEIM GEFIEREN (PARTIKEL, BZW. FEST)
*/
C-----BLOCK 13.2
C BERECHNUNG EINES AXIALEN WAERMEUEBERGANGS VON BZW. AN EINE
C FLUESSIGKEIT VON BZW AN ZUSAETZLICHE STUKTUR (KONVEKTIV)
  IJJ=IJM
  DO 703 N=1,2
  IF(J.LE.TWO.AND.N.EQ.1) GOTO 706
  ALL(1,N)=(RLBR(IJJ) + RLBR(IJJ+1))/RHOLMI(IJJ)
  ALL(2,N)=RLBR(IJJ+2)/RHOLMI(IJJ+1)
  ALL(3,N)=RLBR(IJJ+3)/RHOLMI(IJJ+2)
  IF(J.GE.JP1) GOTO 707
706 IJJ=IJJ+NQI2
703 CONTINUE
707 CONTINUE
C
  IF(J.GT.TWO) VELLM=HALF*DSQRT((VL(IJM)+VL(IJM-NQI))**2+(UL(IJM)+
1  UL(IMJ-NQI))**2)
  IF(J.LT.JP1) VELLP=HALF*DSQRT((VL(IJ)+VL(IJP))**2+(UL(IJP)+
1  UL(IMJ+NQI))**2)
  HLSMS=ZERO
  HLSPS=ZERO
  IF(DHSTOR(IJM).GT.ZERO.AND.J.GT.TWO) THEN
*/ ----- BEGRENZUNG DES HYDRAULISCHEN DURCHMESSERS AUF DHM
  DHJM=DMIN1(DHM,DHSTOR(IJM))
  DO 704 N=1,3
  RELM=VELLM*DHJM*RHOLMI(IJM+N-1)/XMUL(N)
  HLSM(N)=THCONL(N)*(COREL(1,N)*RELM**COREL(2,N)*PRL(N)**COREL(3,N)
1  +COREL(4,N))/DHJM
  HLSM(N)=HLSM(N)*ALL(N,1)/(ONE-ALPHS(IJM))
  HLSMS=HLSMS+HLSM(N)
704 CONTINUE
  END IF
  IF(DHBELL(IJP).GT.ZERO.AND.J.LT.JP1) THEN
  DHJP=ONE/DHBELL(IJP)
*/ ----- BEGRENZUNG DES HYDRAULISCHEN DURCHMESSERS AUF DHM
  DHJP=DMIN1(DHM,DHJP)
  DO 705 N=1,3
  RELP=VELLP*DHJP*RHOLMI(IJP+N-1)/XMUL(N)
  HLSP(N)=THCONL(N)*(COREL(1,N)*RELP**COREL(2,N)*PRL(N)**COREL(3,N)
1  +COREL(4,N))/DHJP
  HLSP(N)=HLSP(N)*ALL(N,2)/(ONE-ALPHS(IJP))
  HLSPS=HLSPS+HLSP(N)
705 CONTINUE
  END IF
  HFUAX=ZERO
  HSTAX=ZERO
```

```
C -----SCHLEIFE UEBER ALLE FLUESSIGE + FESTE STOFFE
  DO 702 M=1,5
  K=IEOSSE(M)
  HSS=THCONS(K)*TWO
  HSSM=HSS*RDZ(J-1)
  HSSP=HSS*RDZ(J+1)
  HLPSP=HSSM + HTLS
  HLPSP=HSSP + HTLS
  DALSM=ALS(M,1)-ALS(M,2)
  DALSP=ALS(M,3)-ALS(M,2)
  DO 702 N=1,3
  IF(ALPHLC(N).GT.ZERO) THEN
  QLNM=ZERO
  QLNP=ZERO
  QSLM=ZERO
  QSLP=ZERO
C
C ----- WAERMEUEBERGANG AN FLUESSIGKEITEN IN J -----
C
  IF(DALSM.GT.ZERO.OR.DALSP.GT.ZERO)THEN
  QLN=HLSAL(N)*RDZ(J)
C ----- WAERMEUEBERGANG VON J-1 -----
  IF(DALSM.GT.ZERO.AND.HLPSP.GT.ZERO.AND.J.GT.TWO) THEN
  QLNM=QLN*HSSM/HLPSP*DALSM*(SIES(IJM+M-1)*RCVS(K)-TN(5+N))
  END IF
C ----- WAERMEUEBERGANG VON J+1 -----
  IF(DALSP.GT.ZERO.AND.HLPSP.GT.ZERO.AND.J.LT.JP1) THEN
  QLNP=QLN*HSSP/HLPSP*DALSP*(SIES(IJP+M-1)*RCVS(K)-TN(5+N))
  END IF
  IF(ROLP(N).GT.ZERO) SIELN(N)=DMAX1((SIELN(N)+DTT*(QLNM+QLNP)/
1  ROLP(N)),ZERO)
  QL(IJ+N-1)=QL(IJ+N-1) + QLNM + QLNP
  END IF
  END IF
C
C ----- WAERMEUEBERGANG AN STRUKTUR IN J -----
C
  HSSJ=HSS*RDZ(J)
C
C ----- VON (J - 1) :
  IF(DALSM.LT.ZERO.AND.DHSTOR(IJM).GT.ZERO.AND.J.GT.TWO.AND.ALL(N,1)
1  .GT.ZERO) THEN
  HLPSP=HSSJ+HLSMS
  IF(HLPSP.GT.ZERO) QSLM=HSSJ*HLSM(N)/HLPSP*(-DALSM)*RDZ(J)*
1  (SIEL(IJM+N-1)*RCVL(N)-TS(M))
*/ 1  (SIEL(IJM+N-1)*RCVL(N)-TN(M))
  END IF
C
```

```
C ----- VON ( J + 1 ) :
      IF((DALSP.LT.ZERO.AND.J.LT.JP1).AND.ALL(N,2).GT.ZERO.AND.
1     DHBELL(IJP).GT.ZERO) THEN
      HLPSP=HSSJ+HLSPS
      IF(HLPSP.GT.ZERO) QSLP=HSSJ*HLSP(N)/HLPSP*(-DALSP)*RDZ(J)
1           *(SIEL(IJP+N-1)*RCVL(N)-TS(M))
*/ 1           *(SIEL(IJP+N-1)*RCVL(N)-TN(M))
      END IF
      IF(RS(M).GT.ZERO) SIESN(M)=DMAX1((SIESN(M)+DTT*(QSLP+QSLM)/RS(M))
1     ,ZERO)
      QS(IJ+M-1)=QS(IJ+M-1) + QSLP + QSLM
      IF(N.EQ.1) HFUAX=HFUAX-QLNM-QLNP
      IF(N.EQ.2) HSTAX=HSTAX-QLNM-QLNP
702 CONTINUE
C     IF(RSBR(IJ+5).GT.ZERO) THEN
C     HFLLF1=HFLLF1+DMAX1(ZERO,HFUAX)
C     ELSE
      HFLLF2=HFLLF2+DMAX1(ZERO,HFUAX)
C     END IF
      HFLLS3=HFLLS3+DMAX1(ZERO,HSTAX)
```

```
*IDENT BUN
*/ - erhoehte Reibung durch die Kugelschuetzung und die Abstandshalter
*/ ----- Version fuer 18 axiale Maschen -----
*/ ----- PLUS EINGANGSGITTER (IN FAM) 5.07.91
*I FAM.56
    FRRMIN=30.
*D B5A3.4
C    REIBUNGSFAKTOREN FUER RE.LE.2000 GASFOERMIG
    IF(IREG.LT.85.AND.IREG.GT.1.AND.RSBR(IJ+1).GT.3000)THEN
        FLSSL2=-.3
        IF(IREG.EQ.29)THEN
            FRG=DMAX1(FRGMIN,258.*REG**FLSSL2)
        ELSE
            FRG=DMAX1(FRRMIN,315.*REG**FLSSL2)
        ENDIF
    ELSE
        FRG=DMAX1(EM3,C16P/REG)
        IF(IREG.EQ.85.AND.J.GT.11.AND.J.LE.15) FRG=FRG+0.028
    ENDIF
*I FAM.62
*/    REIBUNGSFAKTOREN FUER RE.GT.2000 GASFOERMIG
    IF(IREG.LT.85.AND.IREG.GT.1.AND.RSBR(IJ+1).GT.3000)THEN
        IF(IREG.EQ.29)THEN
*I FAM.64
            ELSE
                FLSSL2=-.14
                FRG=DMAX1(FRRMIN,93.6*REG**FLSSL2)
            ENDIF
        ELSE
            FRG=DMAX1(EM3,.046*REG**(-.2))
            IF(IREG.EQ.85.AND.J.GT.11.AND.J.LE.15) FRG=FRG+0.028
        ENDIF
*I FAM.67
            IF(IREG.EQ.1.OR.IREG.EQ.169) FRG=170.*FRG
            IF(J.EQ.2) FRG=FRG+0.0749
            IF(J.EQ.3) FRG=FRG+0.0588
            IF(J.EQ.JP1) FRG=FRG+0.00726
*D B5A3.8
*/    REIBUNGSFAKTOREN FUER RE.LE.2000 FLUESSIG
    IF(IREG.LT.85.AND.IREG.GT.1.AND.RSBR(IJ+1).GT.3000)THEN
        FLSSL2=-.3
        IF(IREG.EQ.29)THEN
            FRL=DMAX1(FRLMIN,258.*RELT**FLSSL2)
        ELSE
            FRL=DMAX1(FRRMIN,315.*RELT**FLSSL2)
        ENDIF
    ELSE
```

```
FRL=DMAX1(EM3,C16P/RELT)
  IF(IREG.EQ.85.AND.J.GT.11.AND.J.LE.15) FRL=FRL+.028
ENDIF
```

*I FAM.73

```
*/ REIBUNGSFAKTOREN FUER RE.GT.2000
  IF(IREG.LT.85.AND.IREG.GT.1.AND.RSBR(IJ+1).GT.3000)THEN
    IF(IREG.EQ.29)THEN
```

*I FAM.75

```
  ELSE
    FLSL2=-.14
    FRL=DMAX1(FRRMIN,93.6*RELT**FLSL2)
  ENDIF
```

```
  ELSE
    FRL=DMAX1(EM3,.046*RELT**(-.2))
    IF(IREG.EQ.85.AND.J.GT.11.AND.J.LE.15) FRL=FRL+.028
  ENDIF
```

*I FAM.78

```
  IF(IREG.EQ.1.OR.IREG.EQ.169) FRL=170.*FRL
  IF(J.EQ.2) FRL=FRL+0.0749
  IF(J.EQ.3) FRL=FRL+0.0588
  IF(J.EQ.JP1) FRL=FRL+0.00726
```

```
*IDENT BUNF2
*/ ----- KORREKUR DAMIT SCHMELZEN VON BRENNSTOFF IN ZELLEN
*/ --- OHNE CAN-WALL MOEGELICH WIRD, UND TROTZDEM FUER ZELLEN
*/ --- OHNE CAN-WALL FAIL=0 IST STATT FAIL=1-----
*D P9C3.83
C ----- AENDERUNG VON .GE. IN .GT. -----
  IF((RSBR(IJ+5).GT.ROSFLR).OR.(RSBR(IPJ+5).GT.ROSFLR))
```

```
*/ AENDERUNG DES GEFIERMODELLES ( IN TMLT(1)+EM1 )
*/ ----- 10.7.1991 -----
*IDENT BUN1
*D I4G1.237
  IF(TN(NCHT).GT.(TMLT(1)+EM1).OR.TN(NCSE+1).LT.TMLT(1)) GOTO 681
*/
```

```
*/ AUSGABE NUR JEDEN 2. ITERATIONSSCHRITT
*D HYDR.505
  ACY=NCYC/TWO
  IF((ACY-IDINT(ACY)).EQ.ZERO) WRITE(NOUT,4120) T,NCYC,DT,NUMINC
  * ,NUMIT
```

```
*/
*/ AUSGABE EINER 6 STELLIGEN CYCLE-NUMMER MOEGELICH
*/
*D FLPR.622
1000 FORMAT(7H1 T =,1PE12.5,9H, CYCLE =,I6,10H, NAME = ,18A4//)
*D FLPR.647
1050 FORMAT(7H1 T =,1PE12.5,9H, CYCLE =,I6,20H HAS THE FOLLOWING,
*D DMPR.235
  *,8H AT T = ,1PE12.5,12H AT CYCLE = ,I6
*D DMPW.63
  */14X,9H T = ,1PE12.5,9H CYCLE = ,I6
*D P5F0.3
  500 FORMAT(7H1 T =,1PE12.5,9H, CYCLE =,I6,9H, NAME =,18A4//)
```



```
*/
*/ CORRECTION SET TO INCLUDE DRYOUT
*/
*/ID WDRY
*/
*/ ADDITION TO COMMON BLOCK SIMCOM
*/
*/B KOM.64
    *, DRYSTA, DRYEND, DRYFIT(4)
*/
*/ INPUT IN ROUTINE SETUP, AFTER OTHER HEAT TRANSFER DATA
*/
*/I SETU.244
C
C    READ DRYOUT DATA INPUT, AND CALCULATE FITTING VALUES
C
C    READ(NINP,811) DRYSTA, DRYEND
C
C    CALL FITDRY(DRYSTA, DRYEND, DRYFIT)
*/
*/ INPUT DATA EDIT SETOUT DECK SETO
*/
*/I SETO.188
    WRITE(KT,881)
    WRITE(KT,8811) DRYSTA
    WRITE(KT,8812) DRYEND
    WRITE(KT,8813)(DRYFIT(I), I=1,4)
*/I SETO.525
881  FORMAT(///,41X,23H DRYOUT VOLUME FRACTIONS/1X)
8811 FORMAT(32H START OF DRYOUT VOLUME FRACTION,10X,9H(DRYSTA)=
    1,E12.5)
8812 FORMAT(30H END OF DRYOUT VOLUME FRACTION,12X,9H(DRYEND)=
    1,E12.5)
8813 FORMAT(26H DRYOUT CUBIC COEFFICIENTS,6X,19H(DRYFIT(J),J=1,4)=
    1,4E12.5)
*/
*/ INSERTION IN HEAT TRANSFER MODELLING ROUTINE XCHANG
*/
*/I TSHT.149
C
C    DRYOUT MODELLING,
C    DRIED OUT DROPLET CONTACT FACTORS CALCULATED ABOVE
C    RESET IF NONE OF DRYOUT CRITERION REACHED
C
C    IF (ALSRAT(3).LT.DRYEND) GOTO 3900
C    IF (RSBR(IJ+4).LT.EM1*VFCLAD(IREG)*ROS(5)) GOTO 3900
C    ALSTOT=0.0
C    DO 3010 N=1,NCLEM2
C        ALSTOT=ALSTOT+ALSRAT(N)
3010  CONTINUE
```

```
DO 3020 N=NCLEM2+1,NCLE
    IF(ROLC(N).GT.0.0) ALSTOT=ALSTOT+ROLP(N)/ROLC(N)
3020 CONTINUE
    IF((ALSTOT-ALSRAT(3))/ALSRAT(3).GT.EM1) GOTO 3900
    IF(ALSRAT(3).GT.DRYSTA) THEN
        ALSRAT(3)=1.0
    ELSE
        ALSRAT(3)=DRYFIT(1)*ALSRAT(3)**3+DRYFIT(2)*ALSRAT(3)**2
1      +DRYFIT(3)*ALSRAT(3)+DRYFIT(4)
    ENDIF
3900 CONTINUE
*/
*/ END OF CORRECTION SET
*/   ADDFILE CONTAINING SUBROUTINE FITDRY ALSO NEEDED.
*/
```

```
*DECK FITD
*/
*/  ADDFILE FOR USE WITH DRYOUT CORRECTIONS
*/
      SUBROUTINE FITDRY(DRYSTA,DRYEND,DRYFIT)
*IF DEF,IBM,1
*CALL IBMC
C
C   FITS CUBIC COEFFICIENTS BETWEEN DRYOUT LIMITS, CONDITIONS
C   FROM THE MODEL USED. SETS DATA IN MATRIX AND CALLS MATRIX
C   SOLVING ROUTINE.
C
      DIMENSION AC(4,4),BC(4),DRYFIT(4)
C
      AC(1,1)=DRYSTA**3
      AC(1,2)=DRYSTA**2
      AC(1,3)=DRYSTA
      AC(1,4)=1.0
      AC(2,1)=3*DRYSTA**2
      AC(2,2)=2*DRYSTA
      AC(2,3)=1.0
      AC(2,4)=0.0
      AC(3,1)=DRYEND**3
      AC(3,2)=DRYEND**2
      AC(3,3)=DRYEND
      AC(3,4)=1.0
      AC(4,1)=3*DRYEND**2
      AC(4,2)=2*DRYEND
      AC(4,3)=1.0
      AC(4,4)=0.0
C
      BC(1)=1.0
      BC(2)=0.0
      BC(3)=DRYEND
      BC(4)=1
C
      CALL GAUSS(AC,DRYFIT,BC,4,4)
C
      END
```

ANHANG B: EINGABEDATEI / REFERENZRECHNUNG

```

0           MOL7C/5 18 MASCHEN BUNGEROTH ----- 26.7.91
2       0       0       0       0       3       1       0 1500       0
MOL7C/5 MIT 18 MASCHEN -- HSCW=1.6E4 -- MIT ALDRG = 0.90 + STAHL
UND DP=10.;2.3 BAR ;MPS 9 + 10 BIS IN BLOCKADE LEISTUNG IN GES. BLOCK.
          12.0          10.0          .97
4       18
FLUID DYNAMICS INTEGER INPUT
16      18      -4      -4      6      0      10      2      0      2      0      0
0
20      0
2       1       3       1       4       1       1      14      2      14      3      14
1       5       2       5       3       5       4       5      2       9      3       9
4       14      2       11      3      11      1      15      2      15      3      15
4       15      1       9
4       100     500     50     20      5       0       1       2       6       6       1
-1      -1      1       1
PROBLEM DIMENSIONS AND OPERATIONAL CONTROLS
3.7E-03          1      4.2E-03          2      6.37E-03          3
9.43E-03          4
74.00E-02        1      2.50E-02          2      1.50E-02          3
1.00E-02         4      0.20E-02          5      0.30E-02          6
0.50E-02         12     0.30E-02          13     0.20E-02          14
1.00E-02         15     1.50E-02          16     2.50E-02          17
62.00E-02        18
0.5             0.0             -9.8
.001            .001            .001            .001
1.0E-8          1.0E-9          1.0E-9          1.0E-5          0.1
.05             .90             0.30            0.              .1              20.
EDIT CONTROLS AND POSTPROCESSOR CONTROLS
0.0
4.00E-00        6.00E+00        2.00E+00        1.00E+00
0.0
4.00E+00        1.00E+01        1.20E+01        7.00E+01
0.0
1.00E-01        0.25E-01        0.40E-01
0.0
1.20E+01        5.00E+01        7.00E+01
0.0
1.00E+01        5.00E+00        3.00E+00        2.00E+00
1.00E+01        1.50E+01        1.80E+01        7.00E+01

0.0
0.0
0.0
0.0
0.0
0.0
0.0
0.0

```

VIEW POINT PARAMETERS

TIME STEP CONTROLS

0.0	5.00E-05	1.0000E-07		1.0		
	2.0E-3	0.50	10.0	10.0	1.0	1.0
1.610387E+05	0.0	0.0				

STRUCTURE AND FAILURE PARAMETERS

0.0	0.0	.5	.5	0.0	0.0
0.0					
1.0	1.0	1.0	1.0	1.	
3.E+6	1.E+6	7.E+5	8.E+5	9.E+5	2.E+3
3.E+4	9.E+3	2.E+1			

15

3.232E+2	4.732E+2	6.732E+2	8.732E+2	9.232E+2	9.732E+2
1.02E+3	1.073E+3	1.123E+3	1.148E+3	1.172E+3	1.200E+3
1.223E+3	1.273E+3	1700.16			
9.030E+8	8.438E+8	7.353E+8	5.922E+8	5.329E+8	4.747E+8
4.204E+8	3.652E+8	3.069E+8	2.773E+8	2.487E+8	2.161E+8
1.895E+8	1.303E+8	100.0			

FUEL PROPERTIES AND EQUATION OF STATE

9515.0	380.0	2950.0	2.80000E+05	2.0	
8767.4	504.0	0.45	5.	4.30000E-03	
2.07000E+12	6.12550E+04	0.0	2.62000E+06	6401.5	0.597
511.0	1.05	4.4	4.69537E+06	270.0	6468.
2763.0		2763.0			
9.999943E+3	1.905027E-1	-2.510704E-4	1.830919E-8		
3.155782E+0	4.658050E-1	-1.071800E+0			
2212.339	0.3539176	400.			

STEEL PROPERTIES AND EQUATION OF STATE

7500.0	639.0	1700.0	2.60000E+05	25.0	
7400.0	750.0	1.6	20.0	5.36000E-03	
1.33800E+11	4.33700E+04	0.0	8.17000E+06	10500.0	0.360
492.0	1.26	1.64	0.000000000	56.0	7700.
3134.0		3134.0			
8.710436E+3	-8.460045E-1	4.323923E-5	6.345715E-10		
1.938042E+0	7.897118E-1	-1.607633E+0			

SODIUM PROPERTIES AND EQUATION OF STATE

0.0	830.0	1260.0	0.157	67.0	0.23400E-03
3.27600E+09	1.20230E+04	5.0	4.81600E+06	2509.0	0.341
543.4	1.665	3.567	4.53500E+06	23.0	1375.
214.10	46.7	214.100			
1011.6301	-0.22432619	-1.9224896	-55.6378764E-9		
2.3710	.31465	1.52186			

CONTROL MATERIAL PROPERTIES AND EQUATION OF STATE

2520.0	1893.0	2623.0	2.50000E+05	83.74	
2520.0	1890.0	1.0	80.0	1.00000E-03	
4.28600E+14	8.36800E+04	0.0	5.00000E+06	7107.0	0.350
500.0	1.50	1.46	0.000000000	55.3	5472.

FISSION GAS PROPERTIES AND EQUATION OF STATE

0.0

0.0

3.2412E06	14.045	0.0	29.193	5.3	0.3
3118.0	1.667	2.576	0.0	4.0	10.22

COMPONENT PROPERTIES

9515.0	9515.0	11000.0	11000.0	7500.0	7500.0
2520.0	0.0				
8767.4	8767.4	7400.0	830.0	2520.0	9515.0
9515.0	7500.0	0.0			
1.20000E+03	1.20000E+03	1.20000E+03	1.20000E+03	1.20000E+03	1.20000E+03
1.20000E+03	1.20000E+03	1.20000E+03			

HEAT TRANSFER CORRELATION DATA

1.	1.	1.	1.	1.	1.
1.	1.	1.	1.	1.	1.
1.	1.	1.			
0.023	0.8	0.4	1.0		
0.025	0.8	0.8	5.0		
0.025	0.8	0.8	5.0		
0.023	0.8	0.4	0.0		
0.023	0.8	0.4	1.0		
0.37	0.6	0.33	0.0		
0.001	.0005				

DRAG CORRELATION DATA

1.0	12.0	2.0E-4	9.2E-7	1.0	
2.5	1.0	0.5			
79.20	-0.14	22.8	79.20	-0.14	22.8

PRESSURE AT TOP AND BOTTOM

1.75E+05	1.75E+05	2.850E+05	2.850E+05
0.0	12.	12.5	70.
11.75E+05	11.75E+05	5.150E+05	5.150E+05
00.0	12.	12.5	70.
753.	753.		
0.0	70.		

PARAMETER REGION 1(DUMMY PIN (CAN-WALL) INSIDE THE BLOKADE)

5.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.00E-04
0.0	0.0	496.71	0.0	0.0	.1556
6.8E-03	6.8E-03	6.8E-03	2801.0	6.9E+04	1.60E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 2(FUEL PINS WITHOUT CAN-WALL)

1.0	2.14E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-4
497.23	547.57	151.89	.6570	.1165	.1556
1.7713E-03	2.4963E-03	8.40E-03	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 3(FUEL PINS INSIDE THE BLOCKAGE)

1.0	2.28E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-4
470.78	558.67	202.09	.5917	.1262	.0080
1.9352E-03	3.0678E-03	1.9793E-02	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 4(FUEL PINS OUTSIDE THE BLOCKAGE WITH CANWALL)

1.0	1.84E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	1.E-04
241.61	284.80	79.71	.3074	.1014	.0080
4.900E-03	8.5070-03	2.2723E-02	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 5(FUEL PINS)

1.0	2.14E-02	1.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-4
281.16	324.52	151.89	.3715	.1165	.1556
4.1194E-03	5.8054E-03	8.40E-03	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 6(FUEL PINS WITHOUT CAN-WALL)

1.0	2.23E-02	1.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	.0E-4
299.57	355.51	000.00	.3765	.1262	0.0000
5.5674E-03	8.5967E-03	1.2532E-02	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 7(DUMMY PIN (CAN-WALL) BEFORE AND AFTER THE BLOKADE)

3.0	0.0	0.0	0.0	3.4E-03	3.0E-04
0.0	496.71	496.71	0.0	.7644	.1556
2.09E-03	6.80E-03	6.80E-03	2801.0	6.90E+04	1.60E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 8(FUEL PINS I=4 OUTSIDE THE BLOCKAGE)

1.0	1.85E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-04
241.61	284.80	0.00	.3074	.1014	.0000
4.900E-03	8.5070-03	2.2723E-02	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 9(FUEL PINS WITHOUT CAN-WALL; I=2)

1.0	2.14E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-4
281.16	324.52	151.89	.3715	.4891	.1556
0.5000E-03	2.4963E-03	8.40E-03	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

PARAMETER REGION 10(FUEL PINS INSIDE THE BLOCKAGE ; I=3)

1.0	2.28E-02	0.00E+06	2.545E-03	3.0E-03	0.E-4
299.57	355.51	202.09	.3765	.4827	.0080
0.5000E-03	3.0678E-03	1.9793E-02	2801.0	6.90E+04	1.6E+04
1950.0	0.64	0.0	2.3E-5	1.0E-17	.001
5.0E-05	0.0	0.0	1.0		

VAPOR AND LIQUID VELOCITIES ON THE BOTTOM BOUNDARY

.00001 4.5 5.0 5.0
 .00001 4.5 5.0 5.0

MESH CELL PARAMETERS DUMMY PIN(CAN-WALL) (INSIDE THE BLOCKADE)

6	13	1	1	1	1	1	0	1	
	0.0		0.0		0.0		0.0		1167.0
	0.0		0.0		0.0				
	0.0		0.0		0.0		753.	0.0	
	0.0		0.0		0.0		737.74	0.0	0.0
	0.0		0.0						
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0	00.
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0	0.0
	753.								
	.001		0.001		0.0		0.0	.0001	.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,2. MESH (BLOCKADE)

6	13	2	2	1	1	1	0	2	
	0.0		6251.11		0.0		0.0	873.75	00.00
	0.0		0.0		0.0				
	1460.0		0.0		800.		000.	0.0	
	0.0		0.0		0.0		180.12	0.0	0.0
	0.0		0.0						
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0	0.0
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0	0.0
	753.								
	0.2		0.2		0.0		0.0	.0001	.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,3. MESH (BLOCKADE)

6	13	3	3	1	1	1	0	3	
	0.0		5637.03		0.0		0.0	946.50	0.0
	0.0		0.0		0.0				
	1480.0		0.0		800.		0.0	0.0	
	0.0		0.0		0.0		226.55	0.0	0.0
	0.0		0.0						
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0	0.0
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0	0.0
	753.								
	0.3		0.3		0.0		0.0	.0001	.0001

MESH CELL PARAMETERS 4. MESH (BUNDLE)

5	14	4	4	1	1	1	0	4	
	0.0		2924.9		0.0		0.0	760.5	60.0
	0.0		0.0		0.0				
	1800.0		0.0		800.0		753.0	0.0	
	0.0		0.0		0.0		493.46	0.0	0.0
	0.0		0.0						
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0	0.0
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0	0.0
	753.								
	5.0		5.0		0.0		0.0	.0001	.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION, (5) MESH-POINTS AFTER THE BLOCKADE

15	18	2	2	1	1	1	0	5		
	0.0	3534.82			0.0		0.0	873.75		00.00
	0.0	0.0			0.0					
	753.0	0.0			753.		000.	0.0		
	0.0	0.0			0.0		428.64	0.0		0.0
	0.0	0.0								
	0.0	0.0			753.		0.0	0.0		0.0
	0.0	0.0			0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	1.0	1.0			0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION, (6) (I=3) M.-P. AFTER THE BLOCKADE

15	18	3	3	1	1	1	0	6		
	0.0	3582.40			0.0		0.0	946.50		00.0
	0.0	0.0			0.0					
	753.0	0.0			753.		0.0	0.0		
	0.0	0.0			0.0		415.00	0.0		0.0
	0.0	0.0								
	0.0	0.0			753.		0.0	0.0		0.0
	0.0	0.0			0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	1.0	1.0			0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION, (7), MESH-POINTS BEFORE THE BLOCKADE

1	4	2	2	1	1	1	0	5		
	0.0	3534.82			0.0		0.0	873.75		00.00
	0.0	0.0			0.0					
	753.0	0.0			753.		000.	0.0		
	0.0	0.0			0.0		428.64	0.0		0.0
	0.0	0.0								
	0.0	0.0			753.		0.0	0.0		0.0
	0.0	0.0			0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	4.5	4.5			0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION, (8); (I=3) M.-P. BEFORE THE BLOCKADE

1	4	3	3	1	1	1	0	6		
	0.0	3582.31			0.0		0.0	946.50		00.0
	0.0	0.0			0.0					
	753.0	0.0			753.		0.0	0.0		
	0.0	0.0			0.0		415.00	0.0		0.0
	0.0	0.0								
	0.0	0.0			753.		0.0	0.0		0.0
	0.0	0.0			0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	5.0	5.0			0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS DUMMY PIN(CAN-WALL),(9) ; AFTER THE BLOCKADE

14	18	1	1	1	1	1	0	7		
	0.0		0.0		0.0		0.0	5733.00		1167.0
	0.0		0.0		0.0					
	0.0		0.0		753.		753.	0.0		
	0.0		0.0		0.0		69.89	0.0		0.0
	0.0		0.0							
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0		00.
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	.00001		.00001		0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS DUMMY PIN(CAN-WALL),(10) ; BEFORE THE BLOCKADE

1	5	1	1	1	1	1	0	7		
	0.0		0.0		0.0		0.0	5733.00		1167.0
	0.0		0.0		0.0					
	0.0		0.0		753.		753.	0.0		
	0.0		0.0		0.0		69.89	0.0		0.0
	0.0		0.0							
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0		00.
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	.00001		.00001		0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS 4. MESH (BUNDLE),(11); BEFORE THE BLOCKAGE

1	4	4	4	1	1	1	0	8		
	0.0		2924.9		0.0		0.0	760.4		0.0
	0.0		0.0		0.0					
	753.0		0.0		753.0		0.0	0.0		
	0.0		0.0		0.0		500.35	0.0		0.0
	0.0		0.0							
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0		0.0
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	5.0		5.0		0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS 4. MESH (BUNDLE),(12), AFTER THE BLOCKAGE

15	18	4	4	1	1	1	0	8		
	0.0		2924.9		0.0		0.0	760.4		0.0
	0.0		0.0		0.0					
	753.0		0.0		753.0		0.0	0.0		
	0.0		0.0		0.0		500.35	0.0		0.0
	0.0		0.0							
	0.0		0.0		753.		0.0	0.0		0.0
	0.0		0.0		0.0		1.2128	0.0		0.0
	753.									
	5.0		5.0		0.0		0.0	.0001		.0001

MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,2. MESH (FIRST MESH BLOCKAGE) (13)

5	5	2	2	1	1	1	0	9		
	0.0		3534.82		0.0		0.0	3668.25		00.00
	0.0		0.0		0.0					
	1460.0		0.0		800.		000.	0.0		

	0.0	0.0	0.0	103.09	0.0	0.0
	0.0	0.0				
	0.0	0.0	753.	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.2128	0.0	0.0
	753.					
	0.6	0.6	0.0	0.0	.0001	.0001
MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,3. MESH (FIRST MESH BLOCKADE)(14)						
5	5	3	3	1	1	10
	0.0	3582.40	0.0	0.0	3620.25	0.0
	0.0	0.0	0.0			
1480.0	0.0	0.0	800.	753.	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	103.09	0.0	0.0
0.0	0.0					
0.0	0.0	753.	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.2128	0.0	0.0
	753.					
	0.6	0.6	0.0	0.0	.0001	.0001
MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,2. MESH (LAST MESH BLOCKAGE) (15)						
14	14	2	2	1	1	9
	0.0	3534.82	0.0	0.0	3668.25	00.00
	0.0	0.0	0.0			
1460.0	0.0	0.0	800.	000.	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	103.09	0.0	0.0
0.0	0.0					
0.0	0.0	753.	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.2128	0.0	0.0
	753.					
	0.2	0.2	0.0	0.0	.0001	.0001
MESH CELL PARAMETERS FISSILE REGION,3. MESH (LAST MESH BLOCKADE)(16)						
14	14	3	3	1	1	10
	0.0	3582.40	0.0	0.0	3620.25	0.0
	0.0	0.0	0.0			
1480.0	0.0	0.0	800.	753.	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	103.09	0.0	0.0
0.0	0.0					
0.0	0.0	753.	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.2128	0.0	0.0
	753.					
	0.3	0.3	0.0	0.0	.0001	.0001
TIME DEPENDENT NORMALIZED POWER						
	0.0	7.0E+1				
	1.0	1.00E+00				
SPATIAL POWER DISTRIBUTION						
0.0						
	1.0	1.0000	1.06101	1.35957		
	0.00	.9775	.9655	.9535	.9415	.9415
	.9415	.9295	.9295	.9175	.9175	.9055
	.9055	.9055	.8935	.8815	.86950	.800

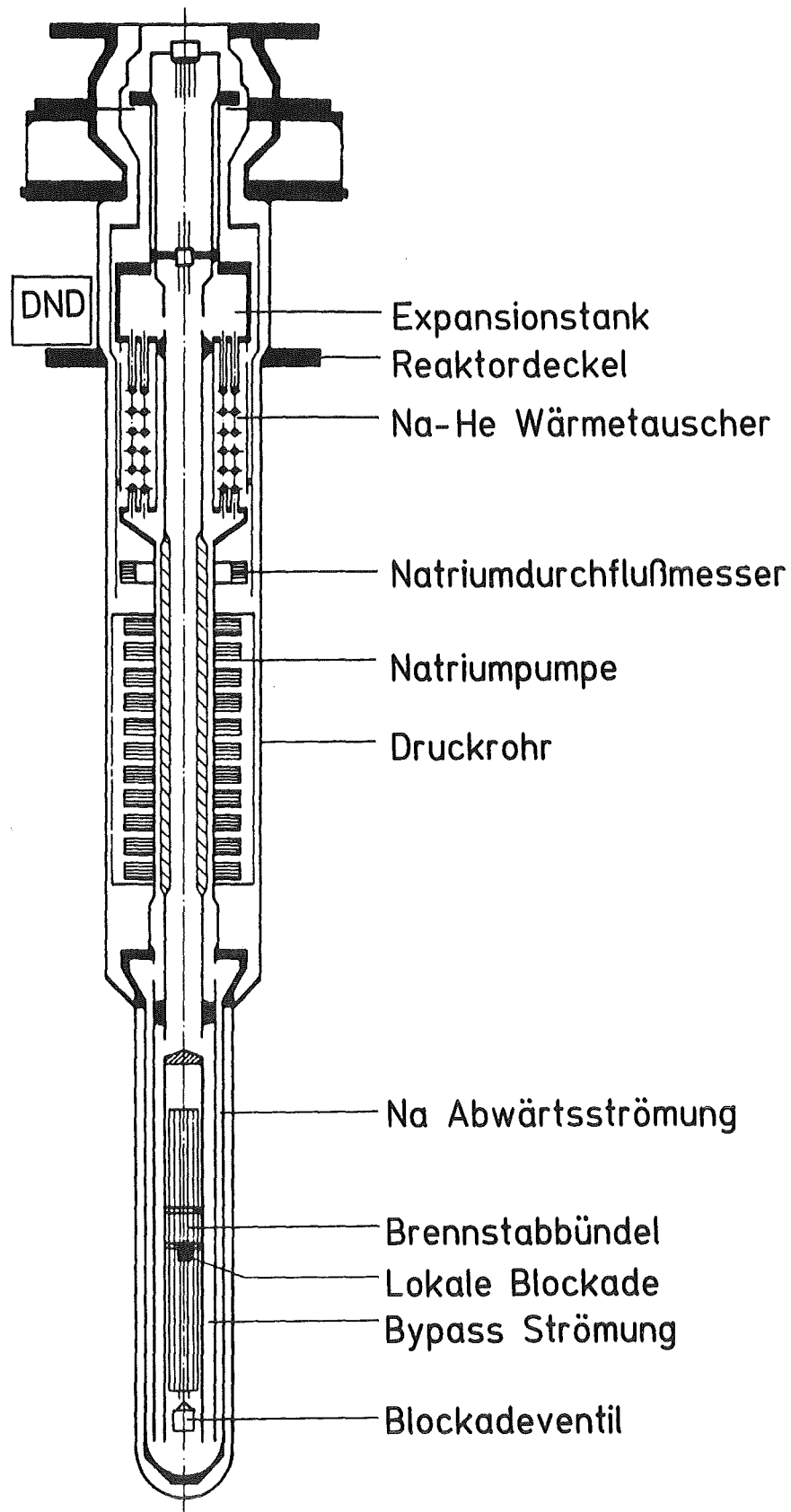


Abb. 2.1: In-pile Natriumkreislauf der Mol 7C-Versuche

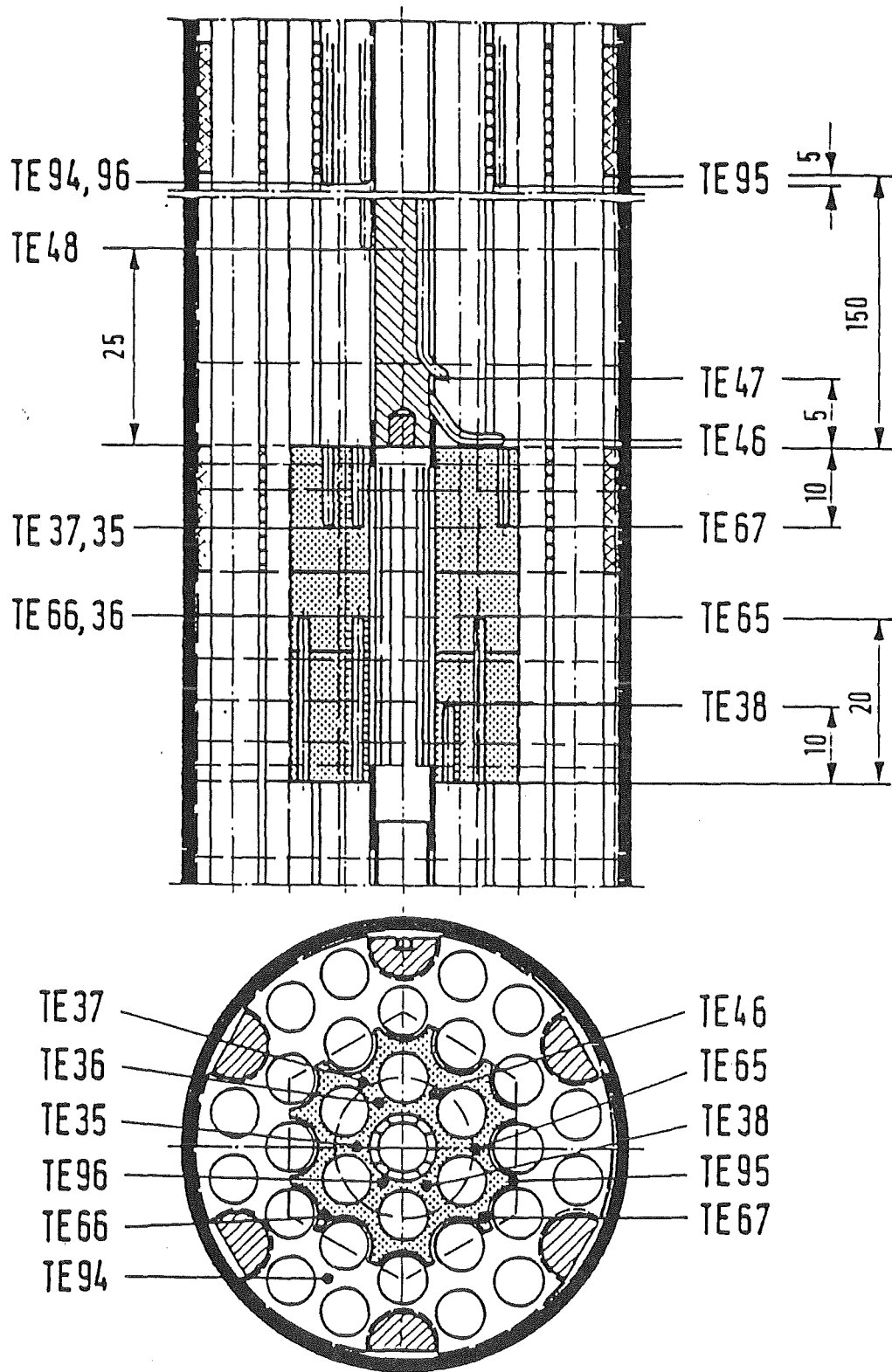


Abb. 2.2: Lokale Blockade in Mol 7C/4 bis 6 und ihre Aufteilung in Maschen für die SIMMER-II Berechnung

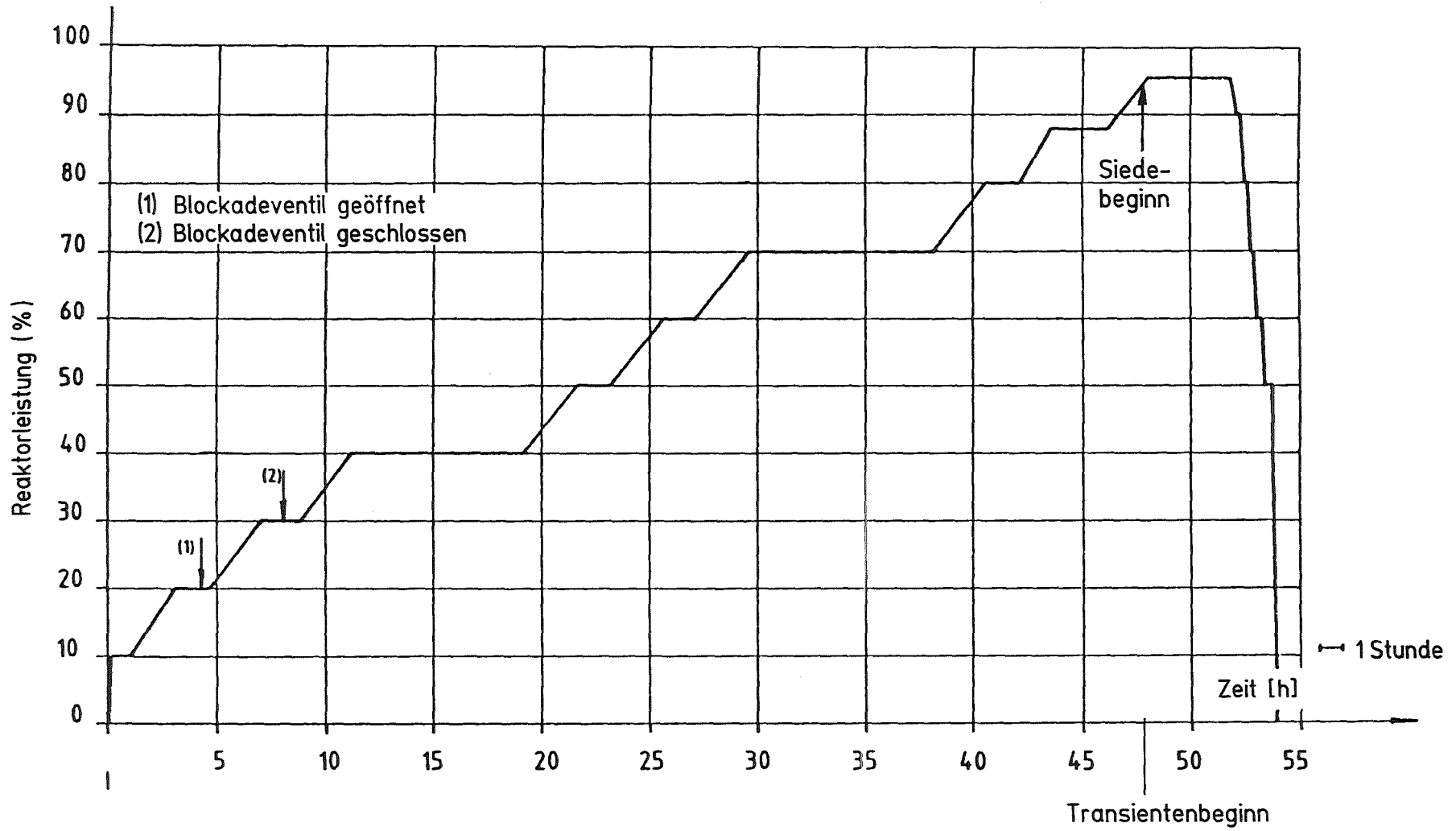


Abb. 2.3: Verlauf der Reaktorleistung während des Experiments Mol 7C/5

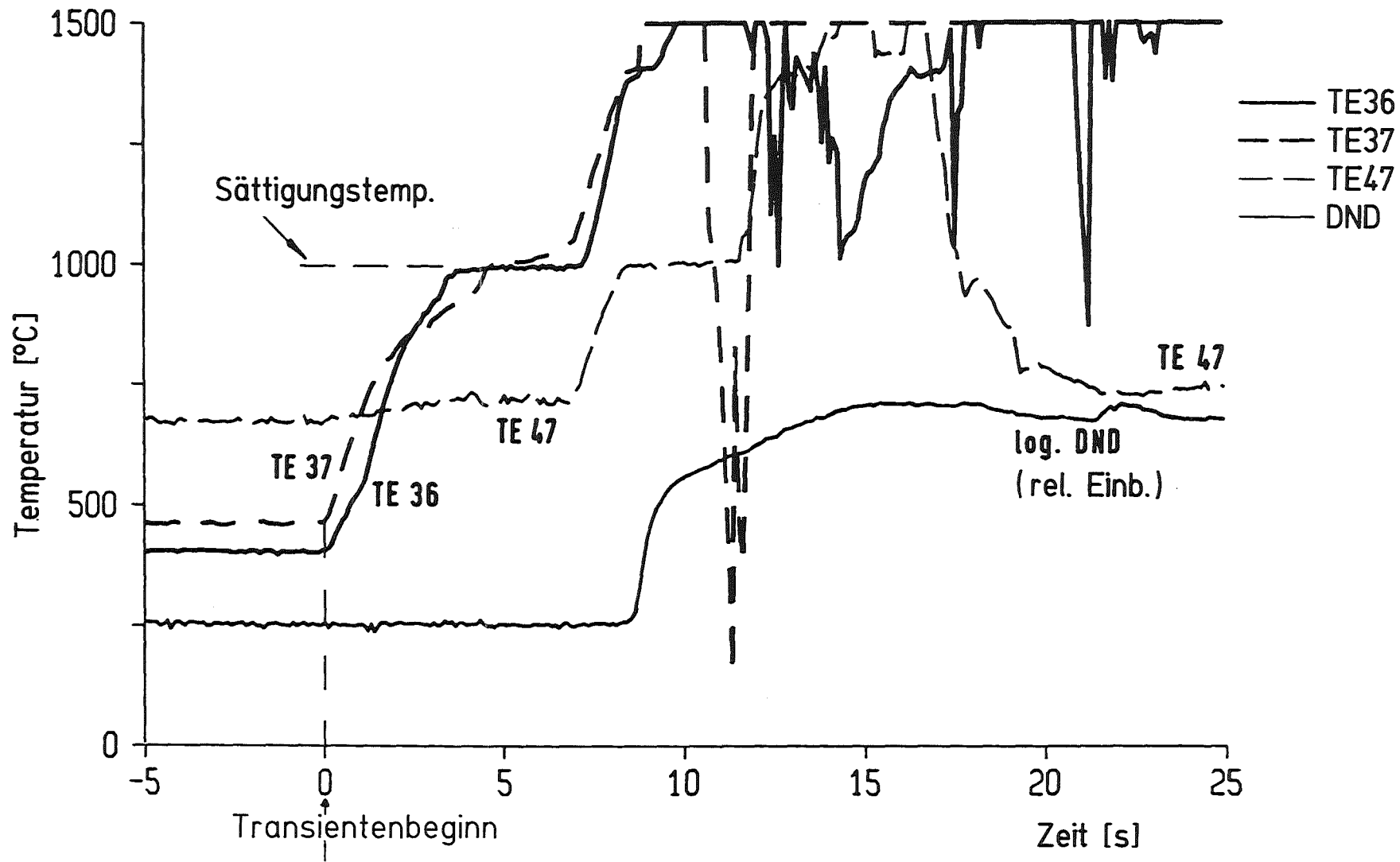


Abb. 2.4: Beginn der Schadensentwicklung Mol 7C/4

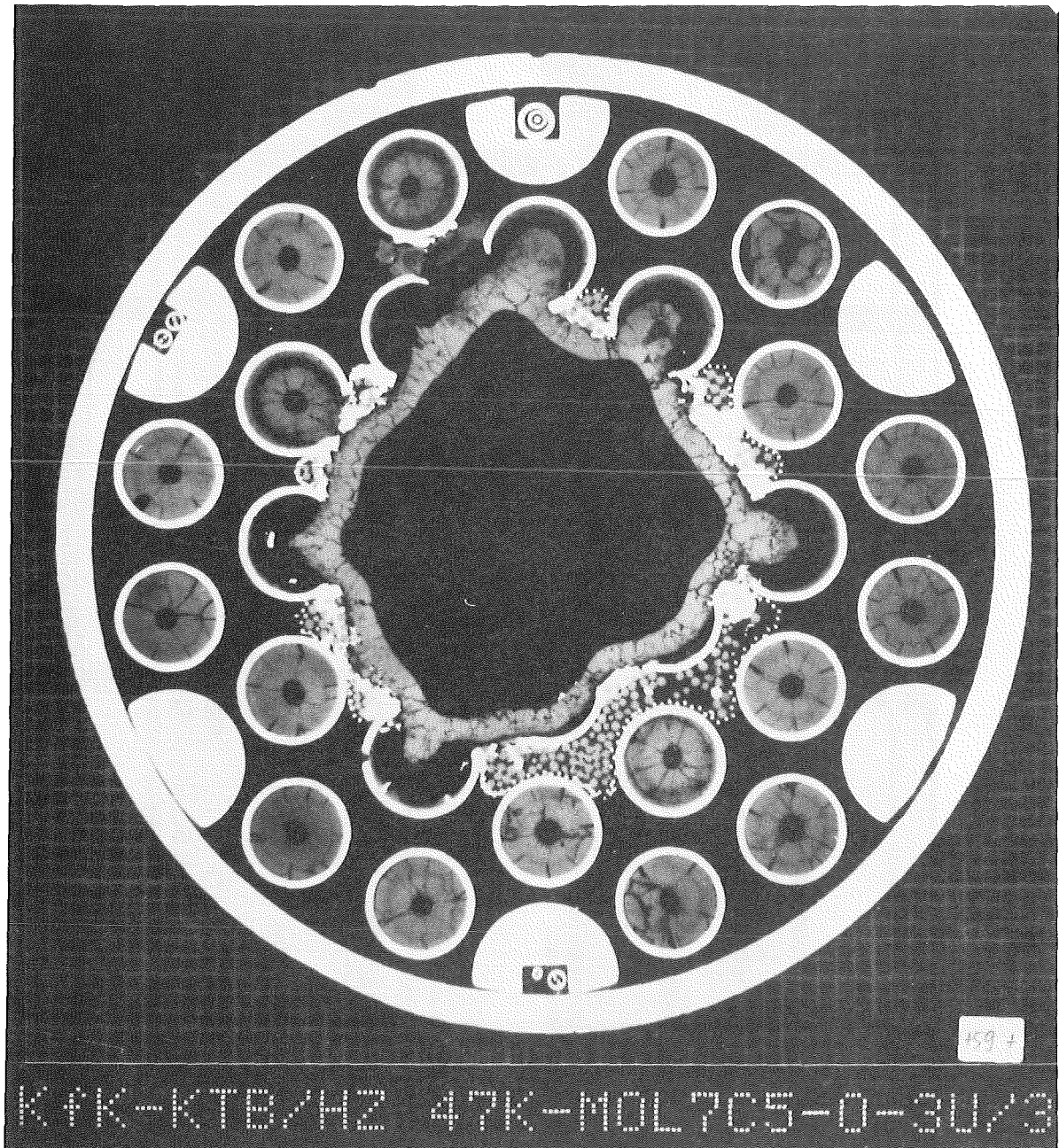


Abb. 2.5: Querschnitt Mol 7C/5

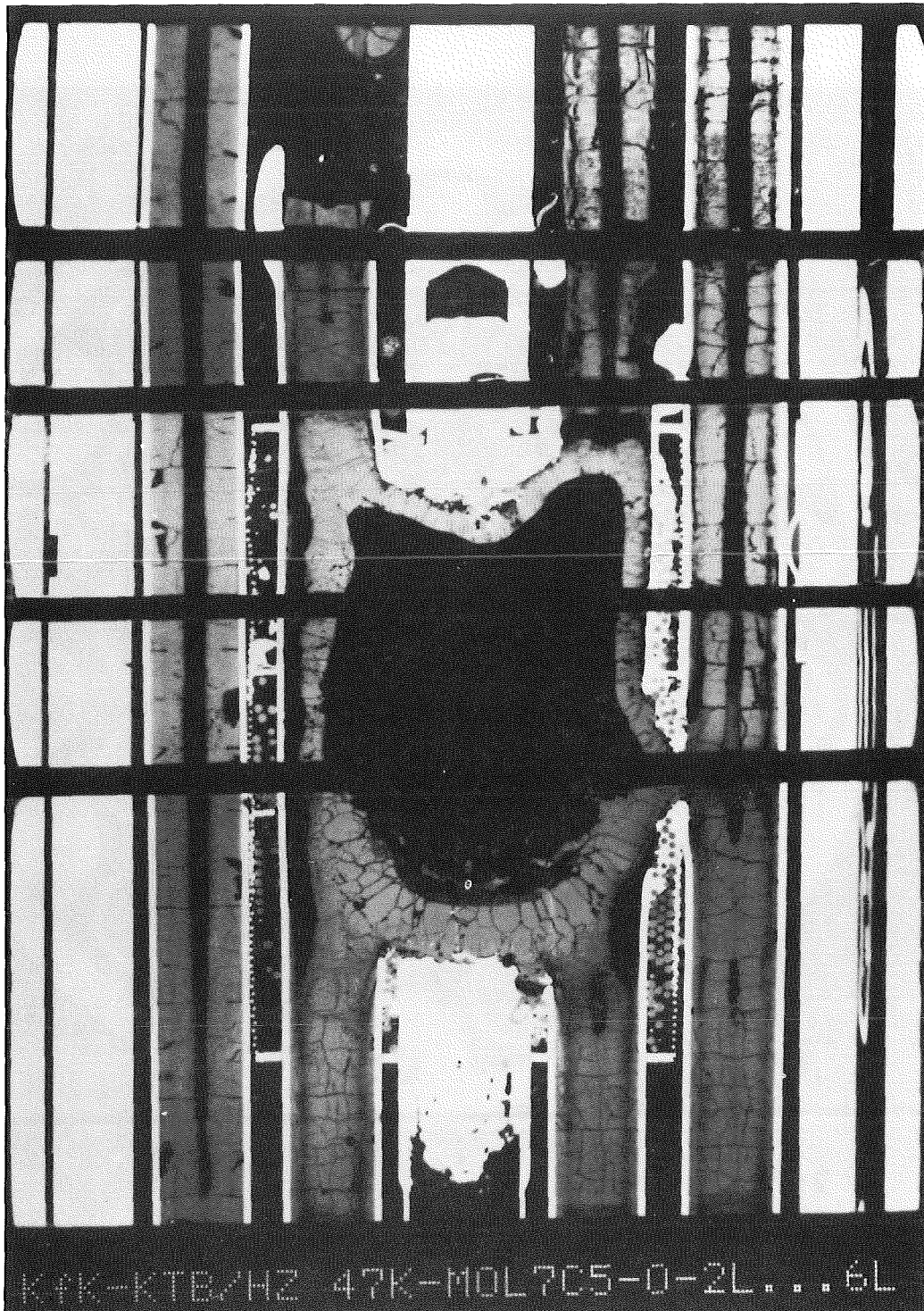


Abb. 2.6: Längsschnitt Mol 7C/5

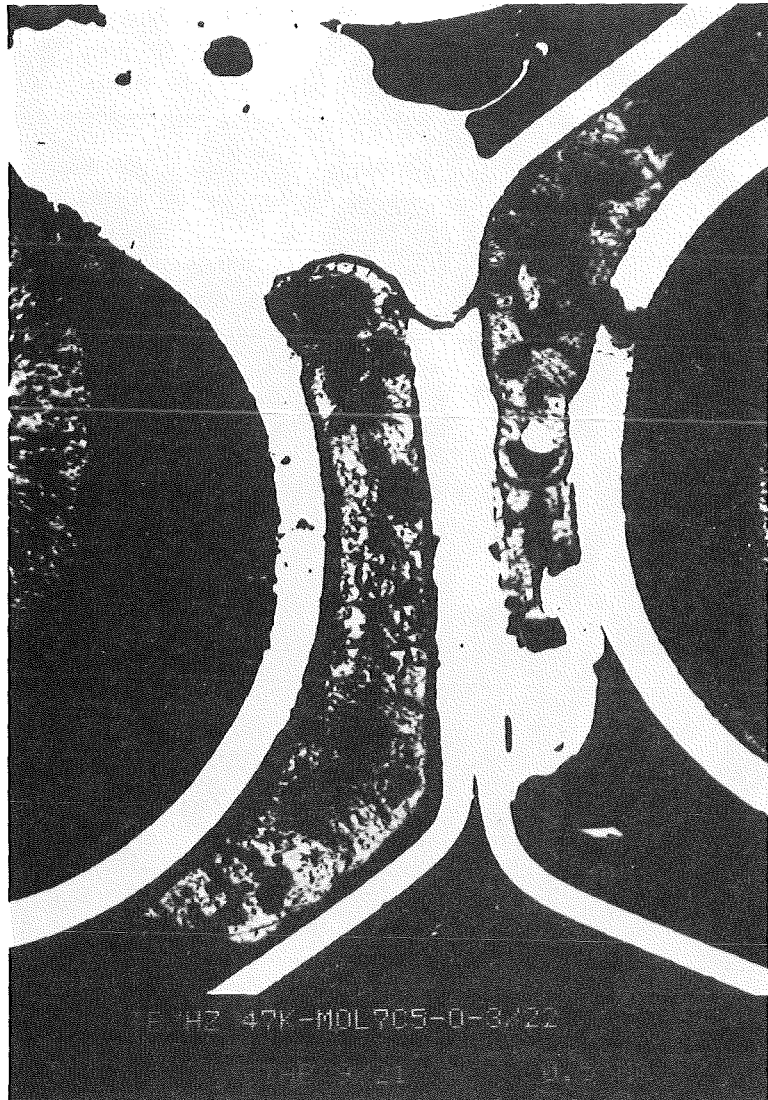


Abb. 2.7: Brennstoffablagerungen zwischen den Brennstäben

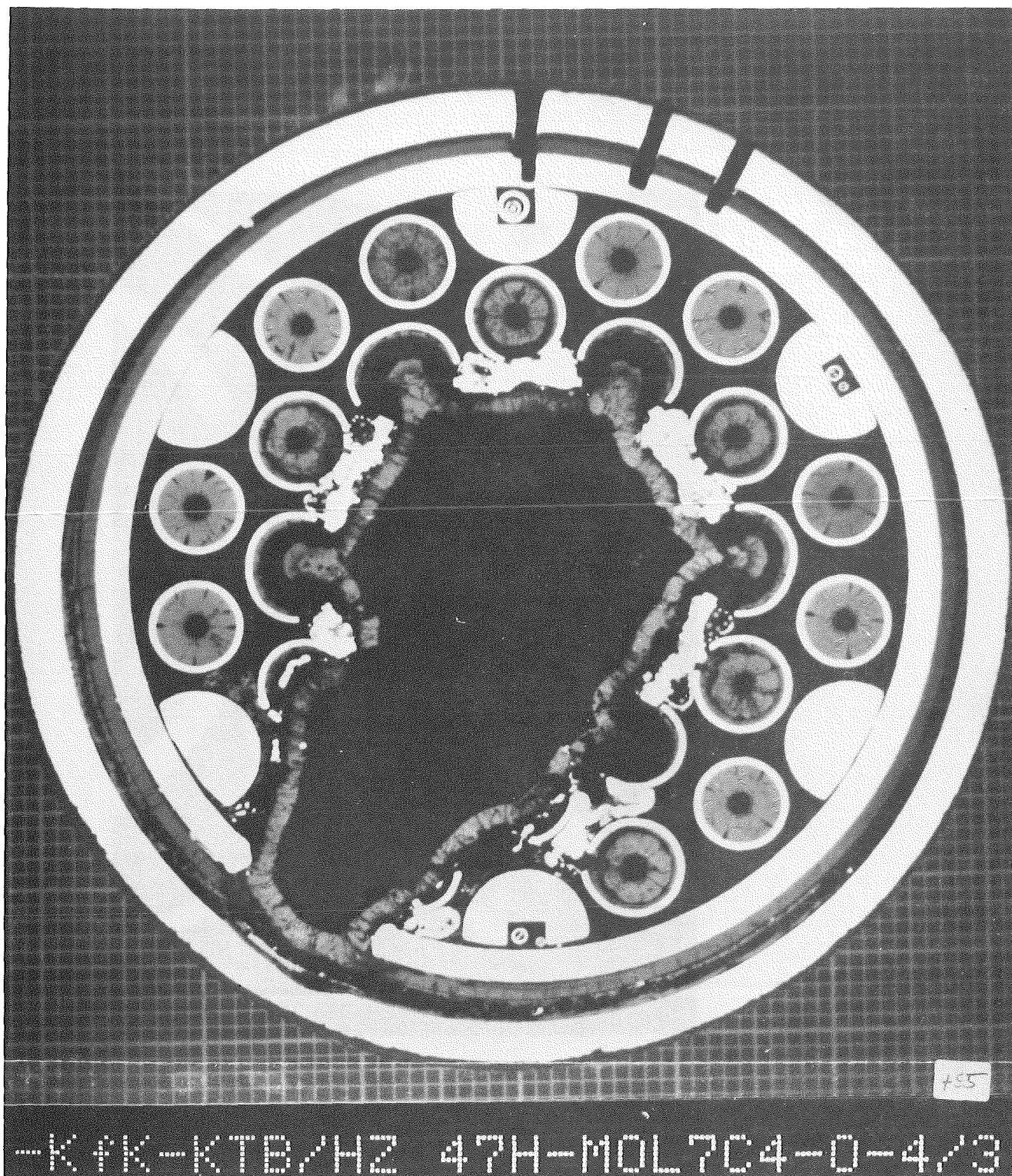


Abb. 2.8: Querschnitt Mol 7C/4

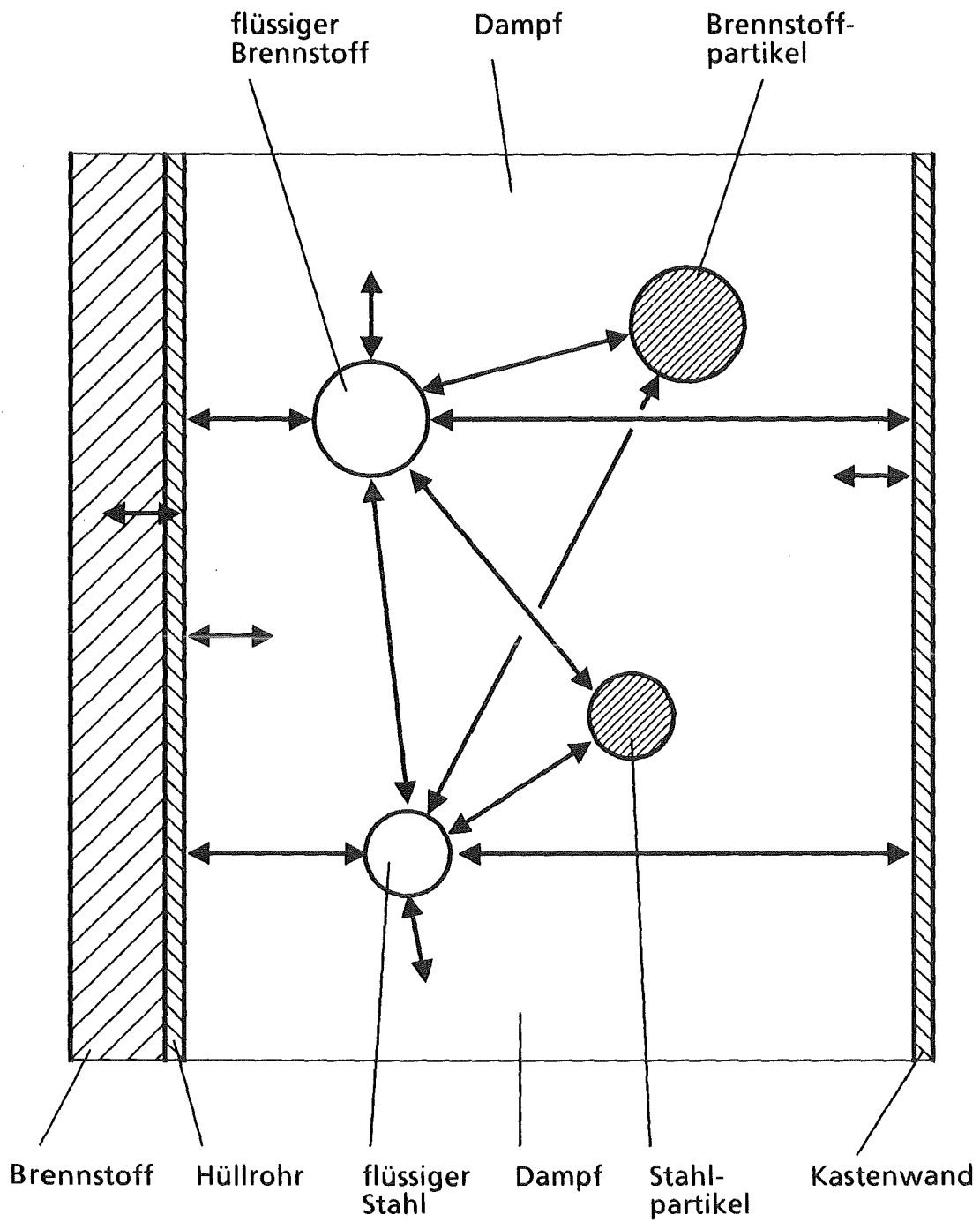


Abb. 4.1 : Möglichkeiten des Wärmeaustausches in SIMMER- II am Beispiel einer intakten Geometrie mit Brennstoff und Stahl in Form von Flüssigkeit, Partikeln und Dampf

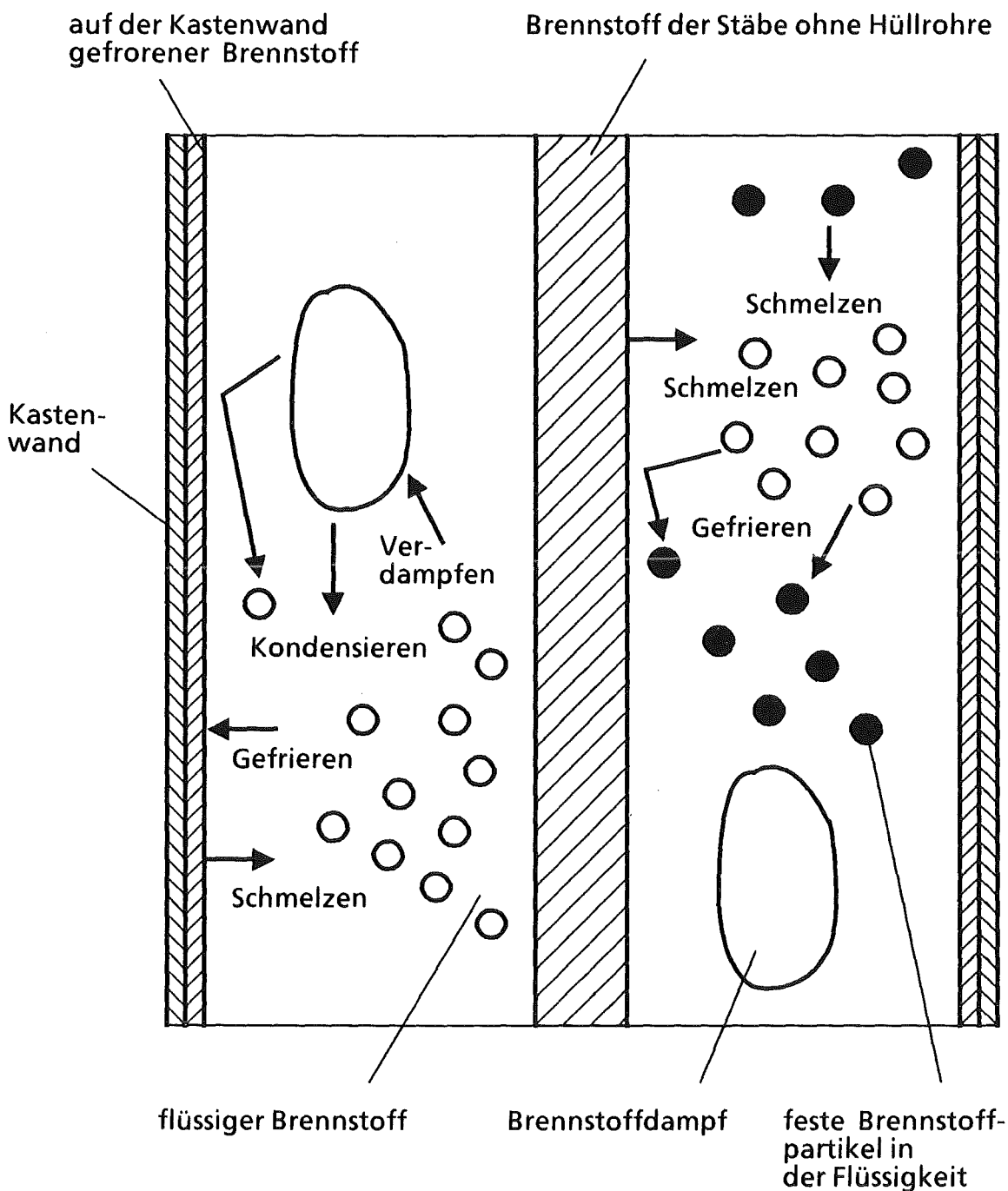


Abb. 4.2 : Prinzipelle Möglichkeiten des Phasenwechsel in SIMMER- II für den Brennstoff

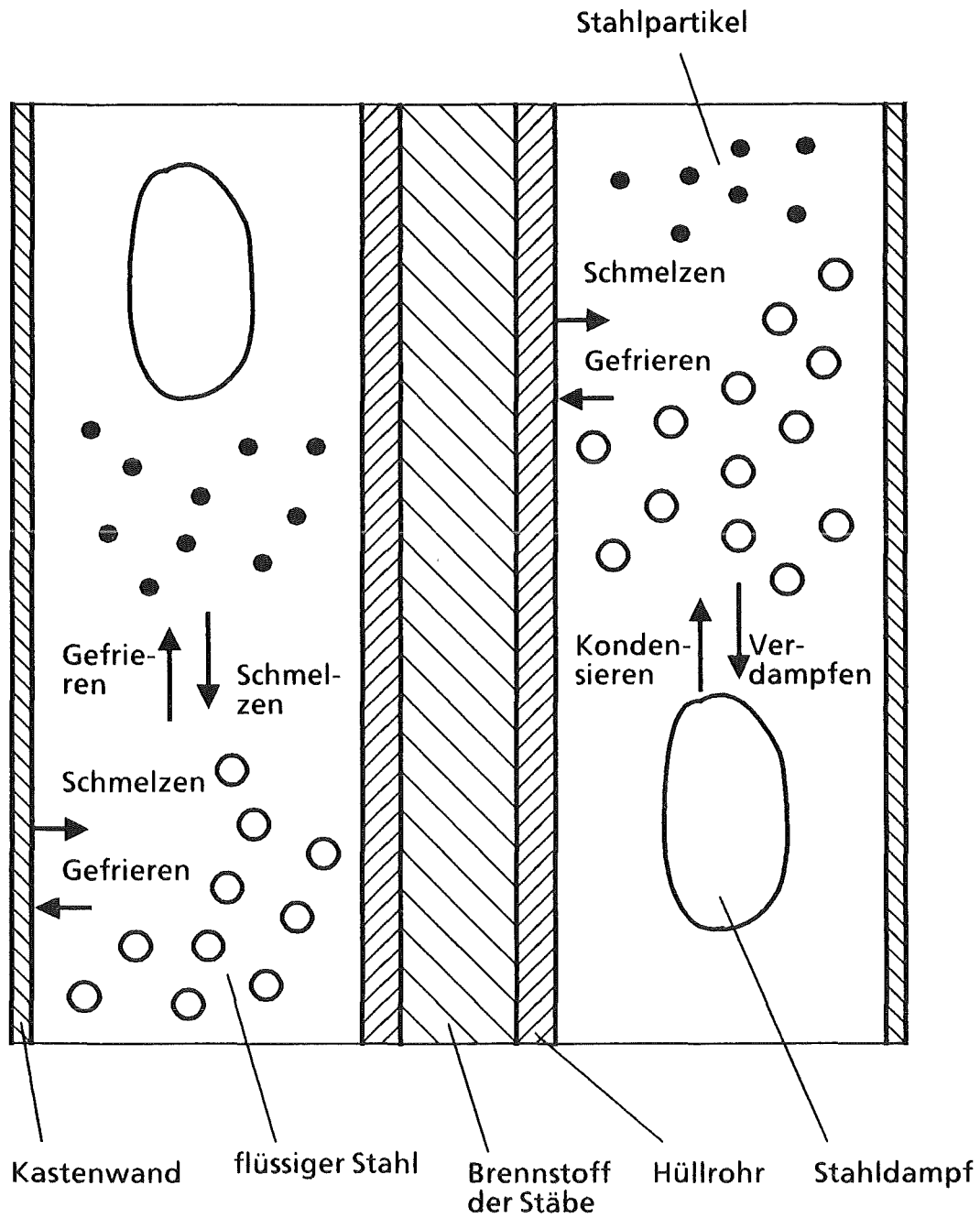


Abb. 4.3 : Prinzipelle Möglichkeiten des Phasenwechsels für den Stahl in SIMMER-II

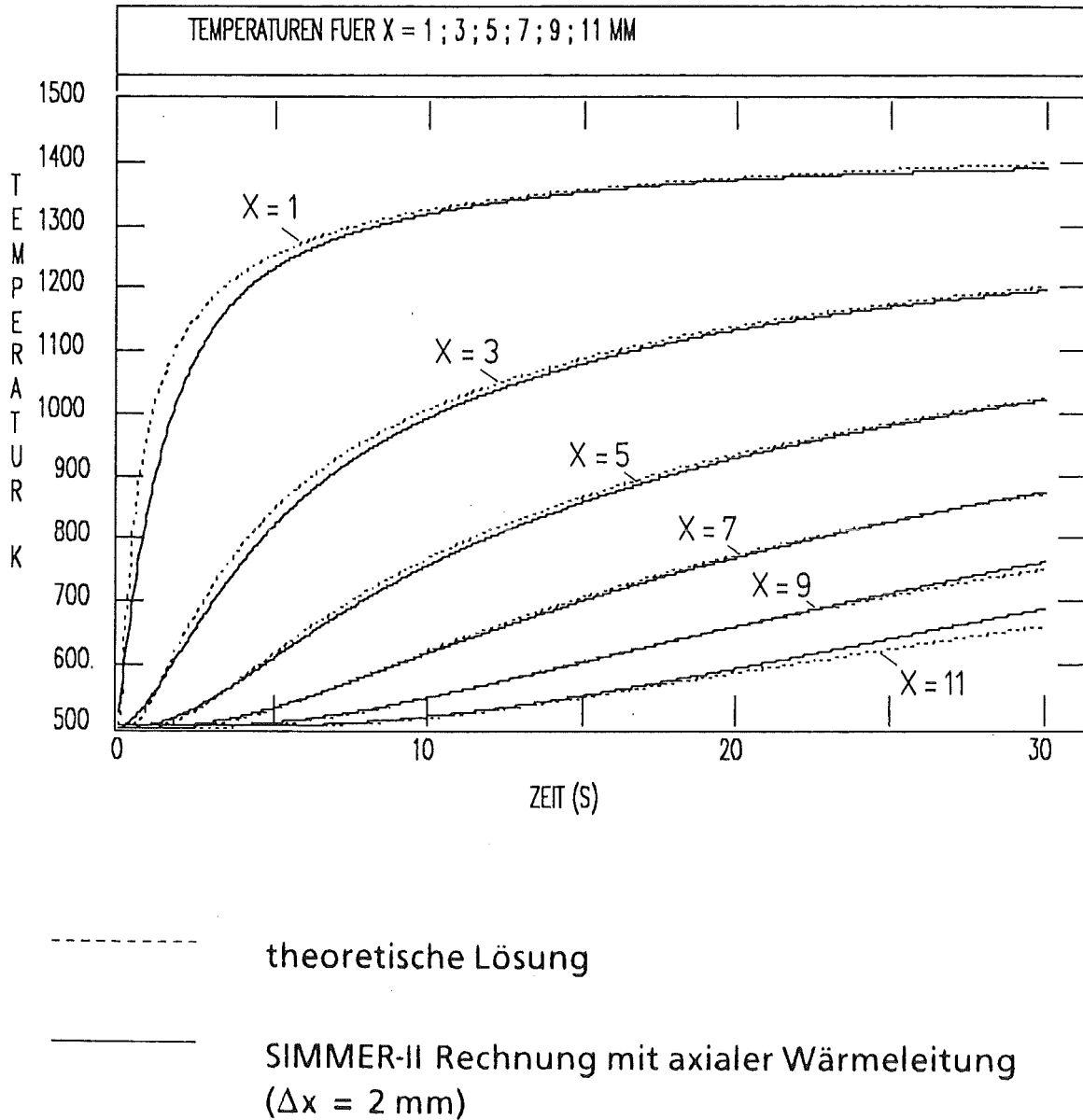


Abb. 4.4: Vergleich der Temperaturverläufe der SIMMER-II Rechnung mit axialer Wärmeleitung mit der theoretischen Lösung für die halb unendliche Platte mit aufgeprägter konstanter Wandtemperatur

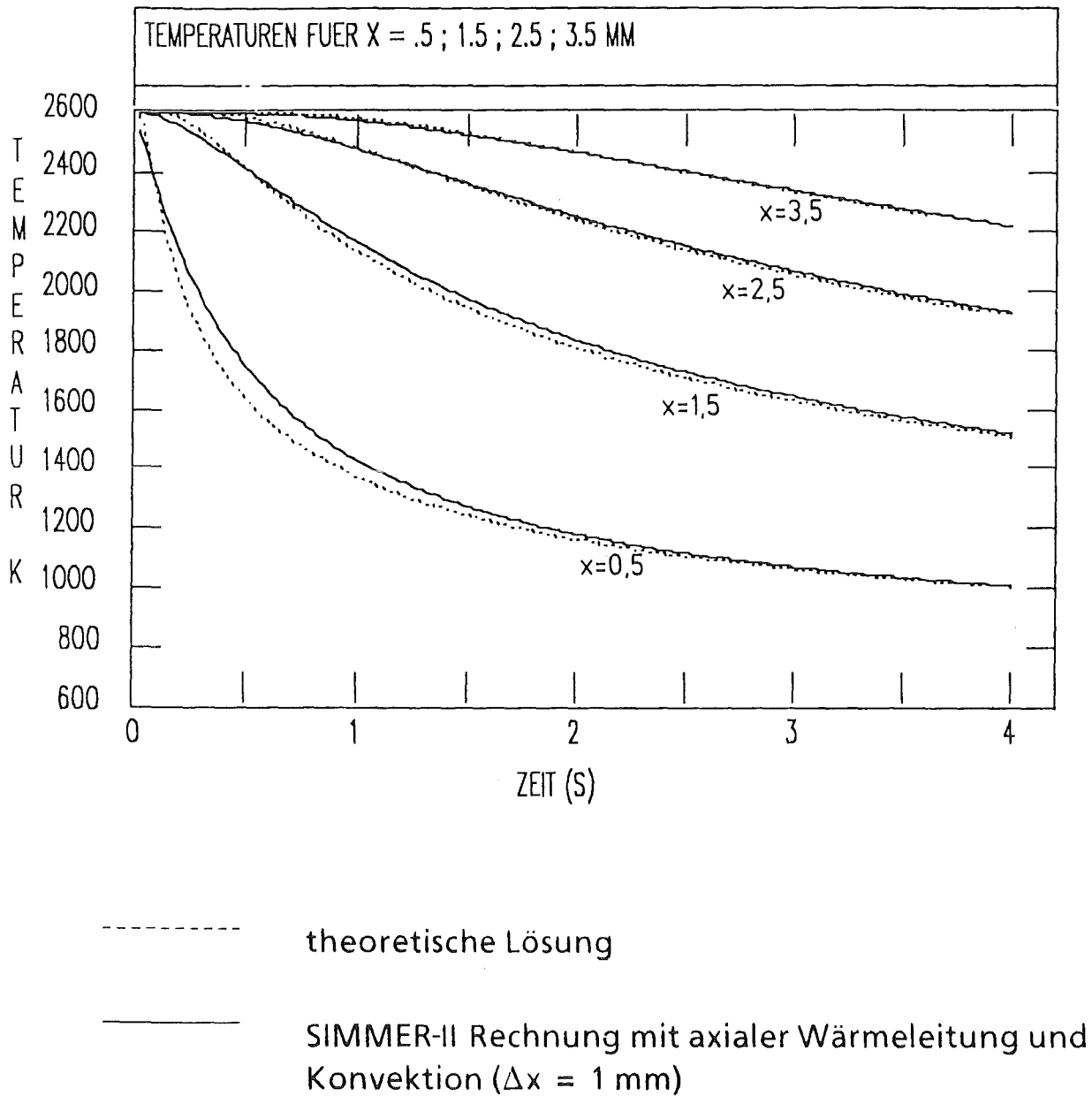


Abb. 4.5: Vergleich der Temperaturverläufe über der Zeit der SIMMER-II Rechnung mit axialem Wärmeübergang durch Leitung und Konvektion mit denen der theoretischen Lösung für eine halb unendliche Platte und konstanter Fluidtemperatur ($T_{\text{fluid}} = 600$ K)

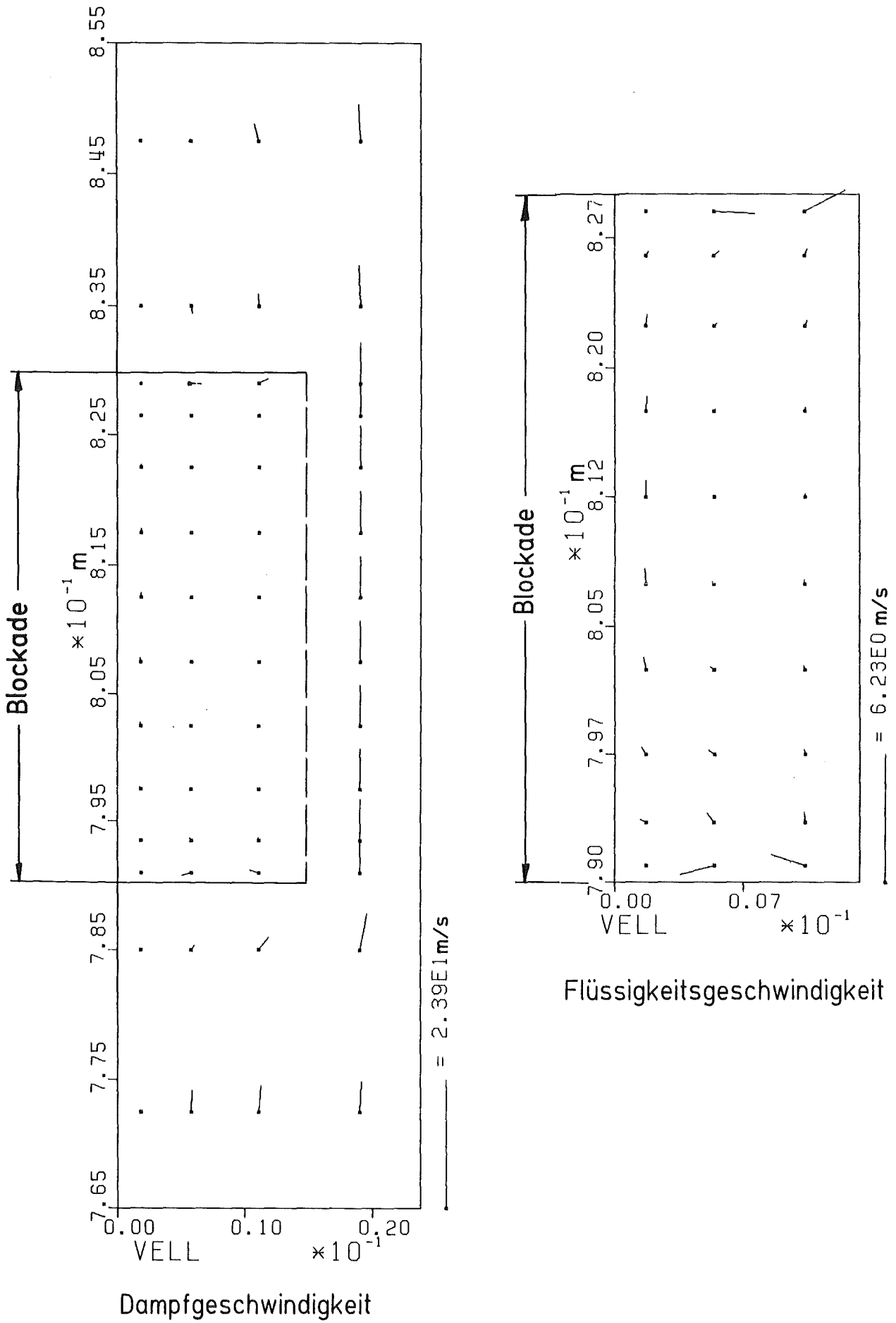


Abb. 4.6: Strömungsverteilung in der und um die Zentralblockade aus der SIMMER-II Rechnung vor Transientenbeginn

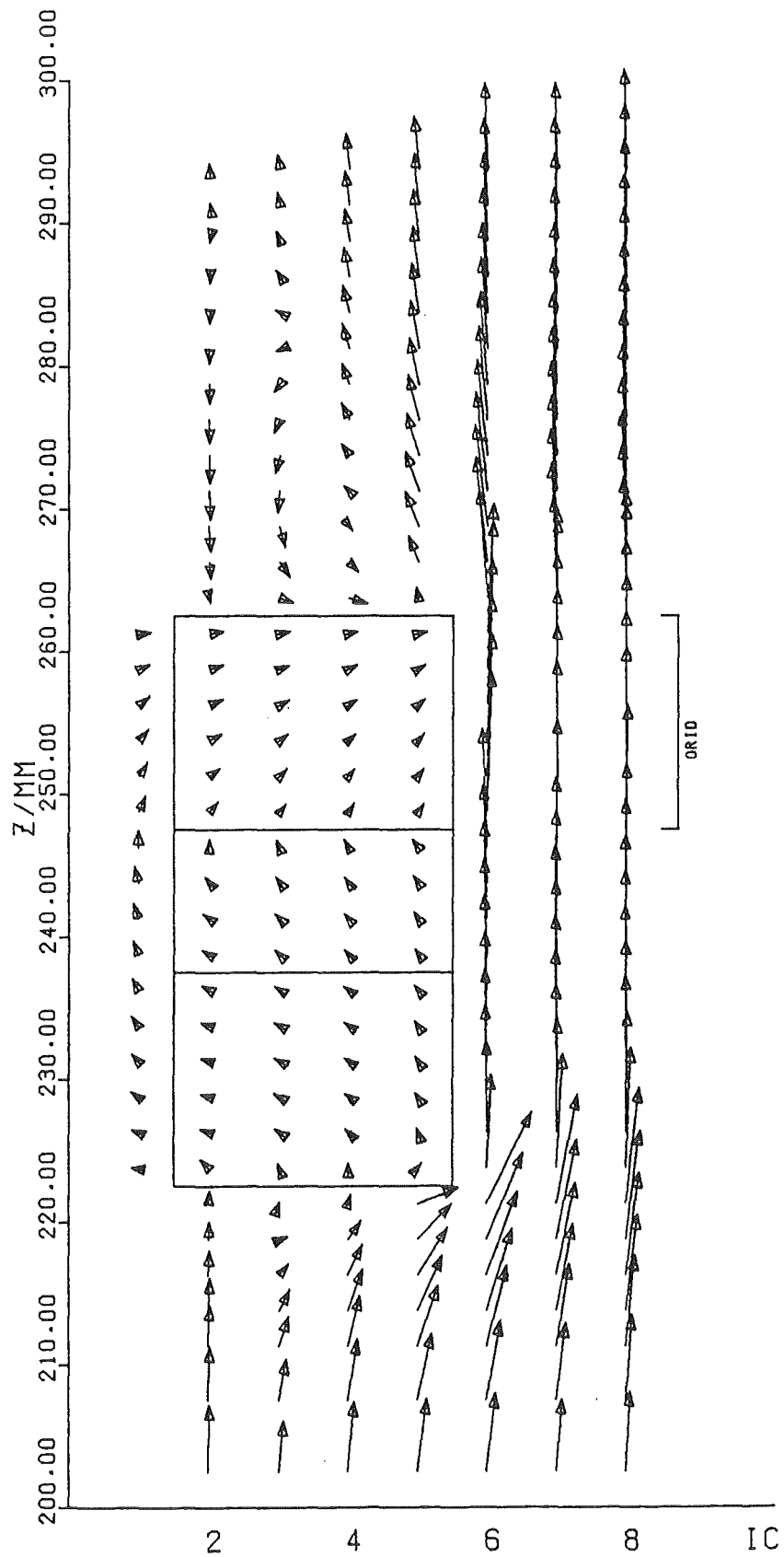


Abb. 4.7: Strömungsverteilung in der und um die Zentralblockade aus den BACCHUS-Rechnungen

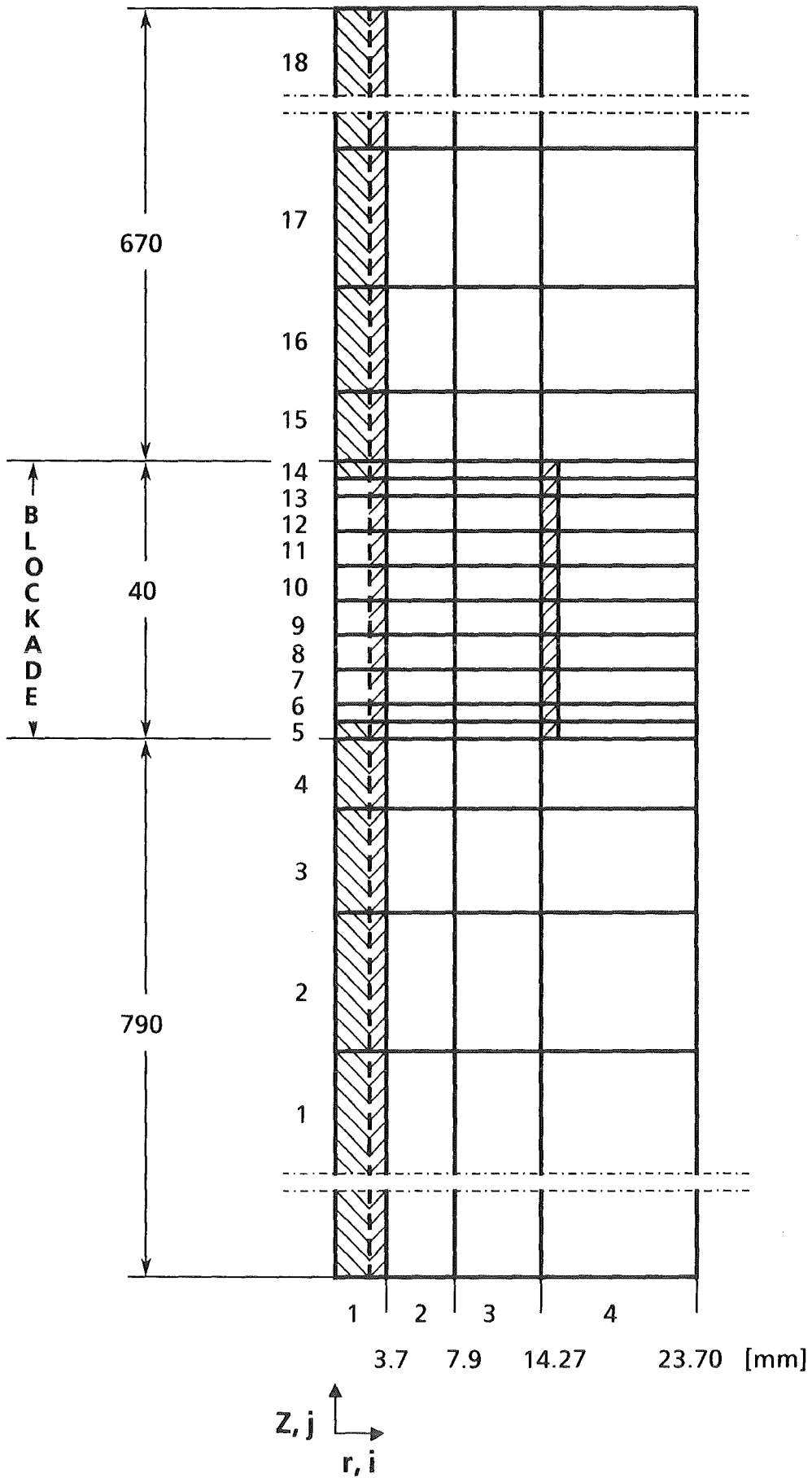
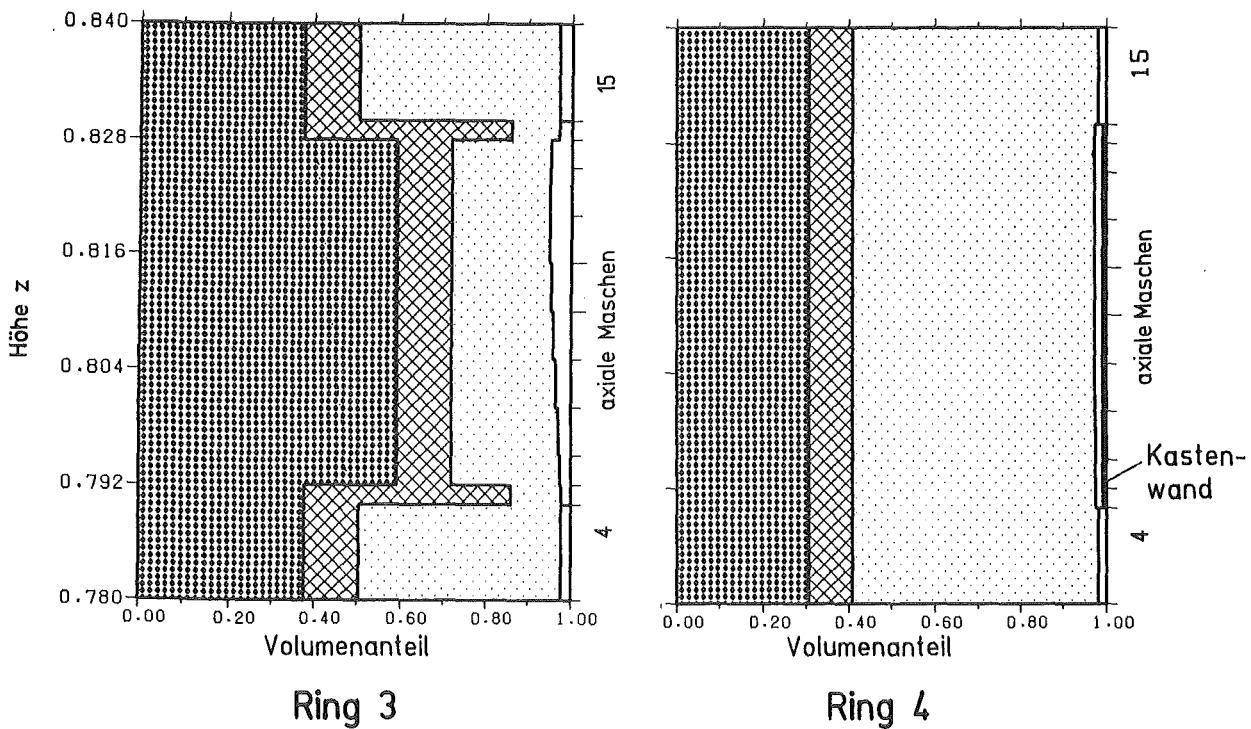
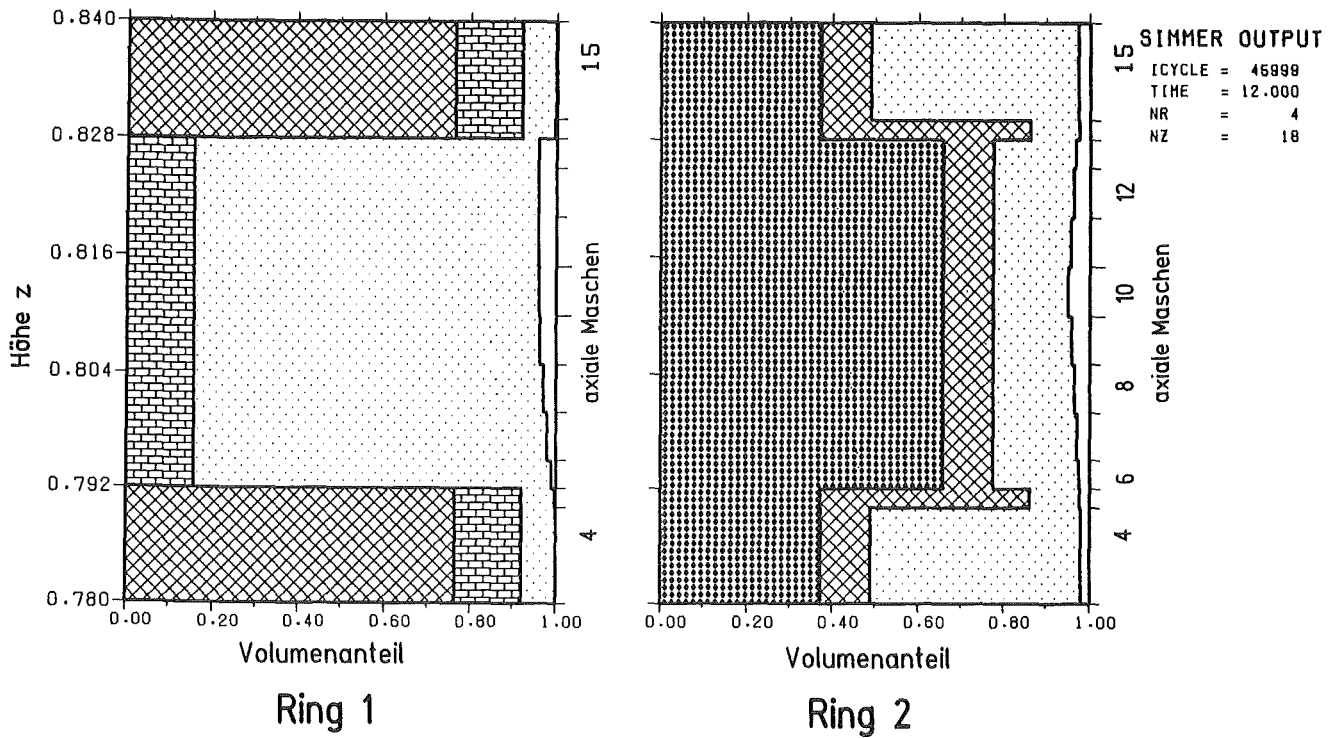


Abb.: 5.1

Modell für die SIMMER-II Rechnungen der MOL 7C -Experimente



$t = 12$ s

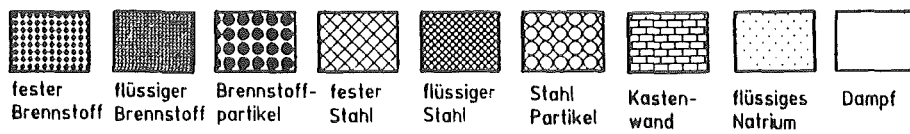


Abb. 5.2: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade vor Transientenbeginn

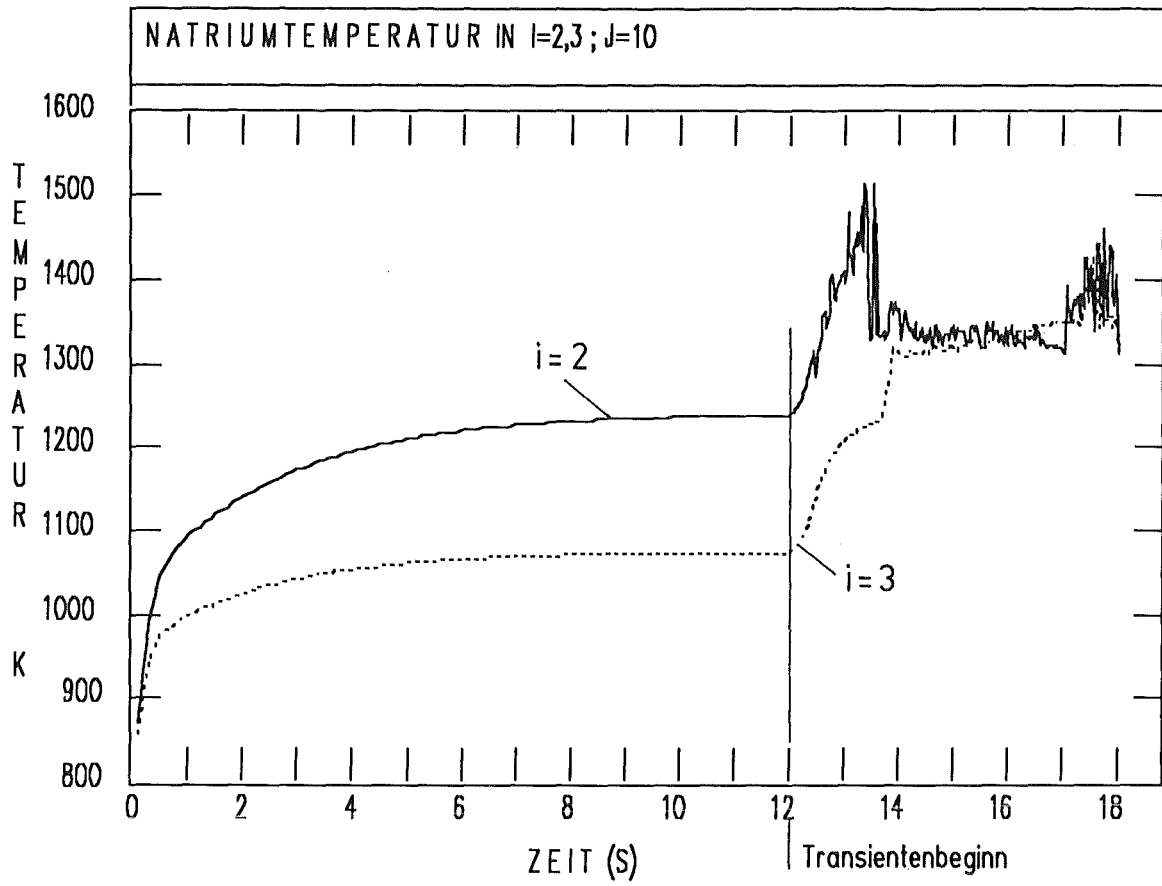


Abb. 6.1: Natriumtemperaturen über der Zeit in der Mitte der Blockade

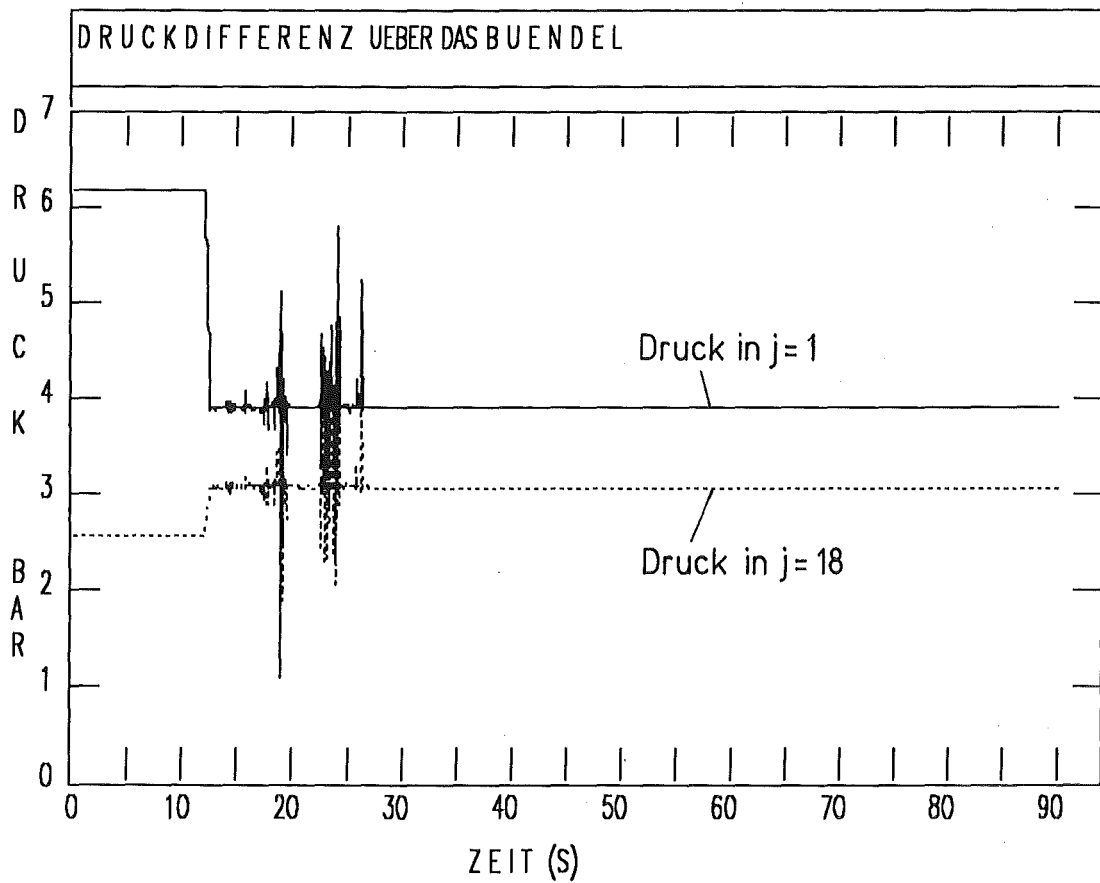


Abb. 6.2: Druckdifferenz über dem gesamten Bündel

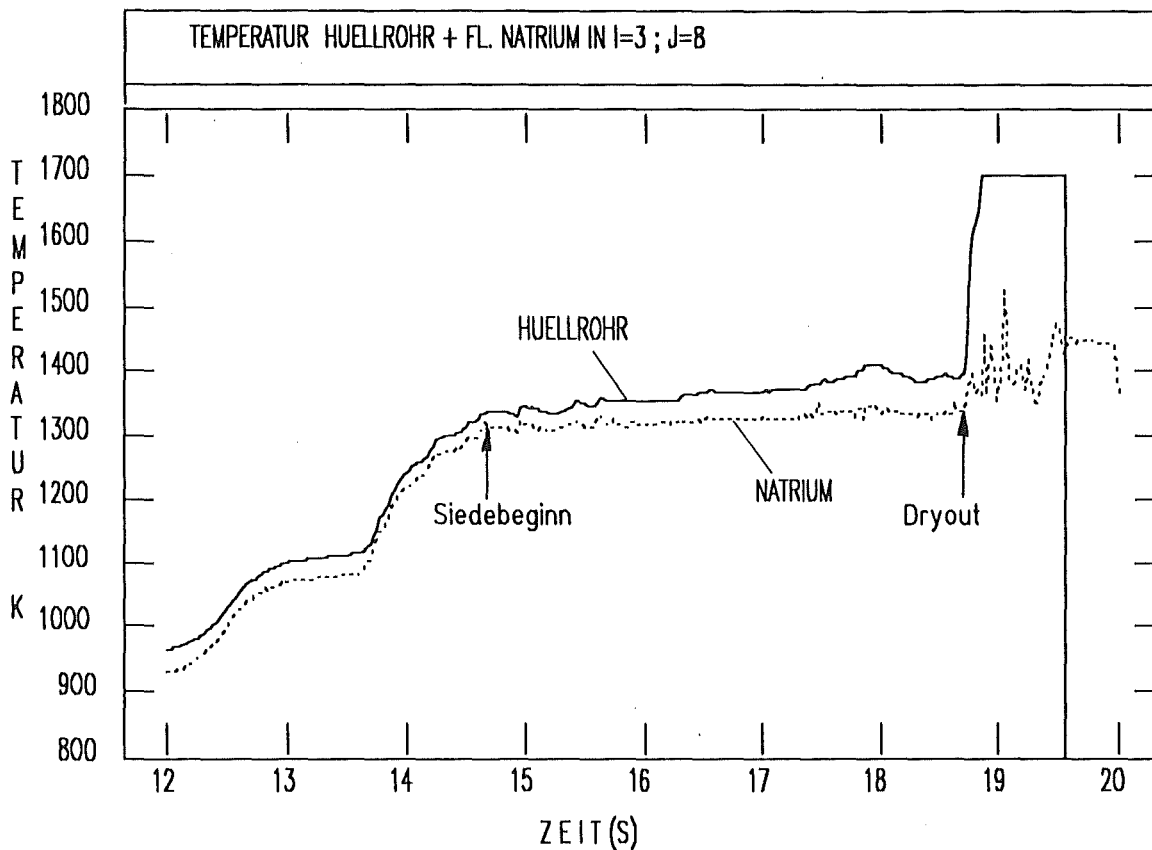


Abb. 6.3: Temperaturverläufe des flüssigen Natriums und der Hüllrohre zu Beginn der Transiente im unteren Randbereich der Blockade

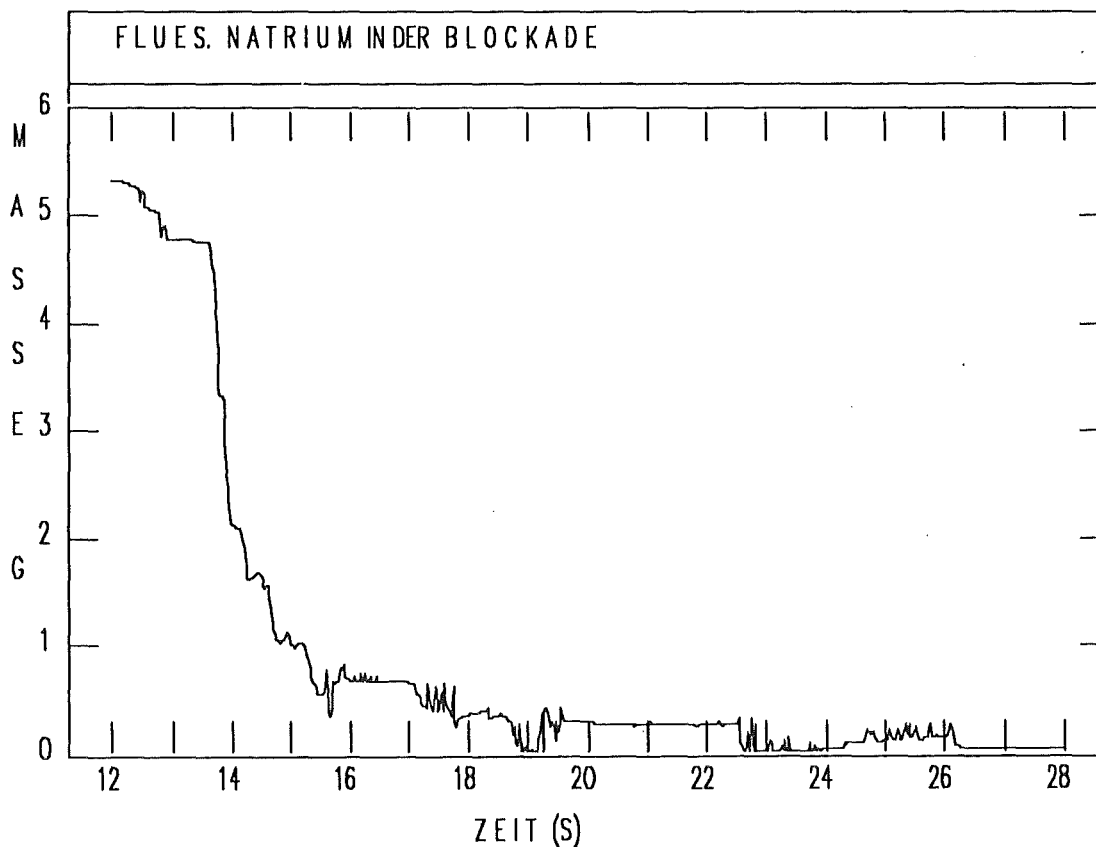


Abb. 6.4: Masse des flüssigen Natriums im Blockadebereich

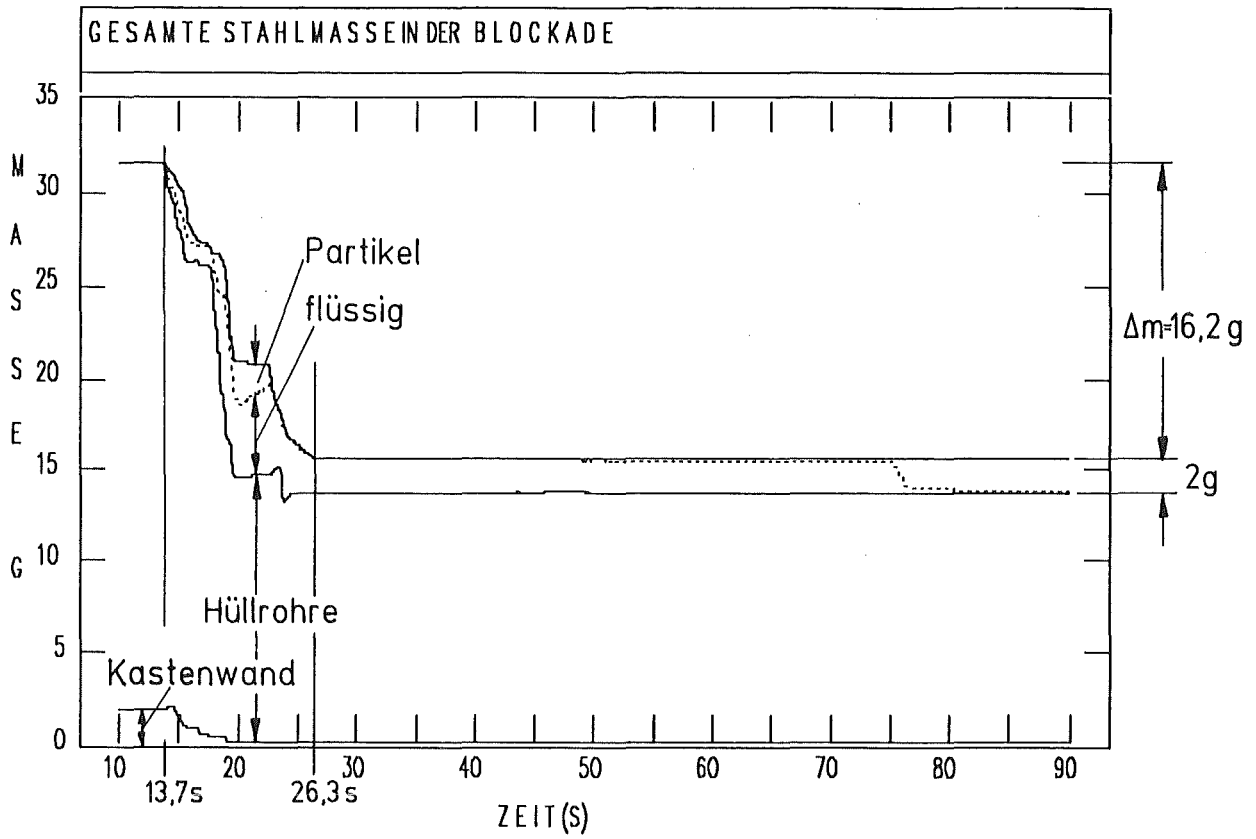


Abb. 6.5: Stahlmassen im Blockadebereich

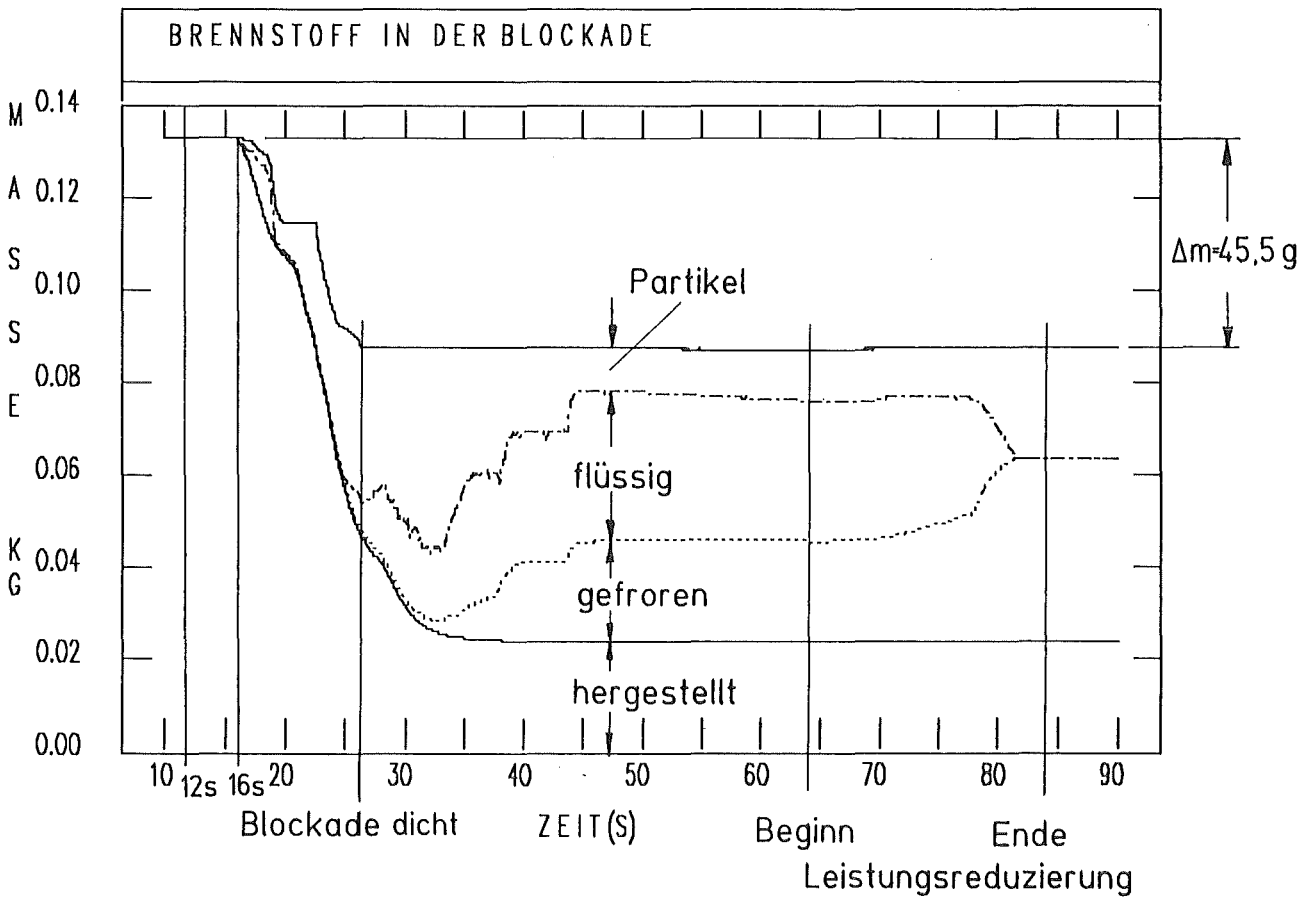


Abb. 6.6.: Brennstoffmassen im Blockadebereich

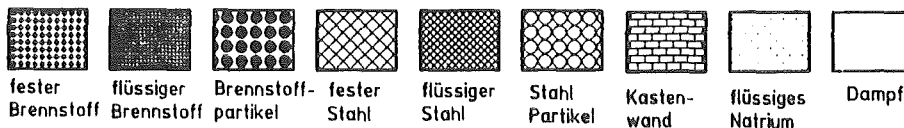
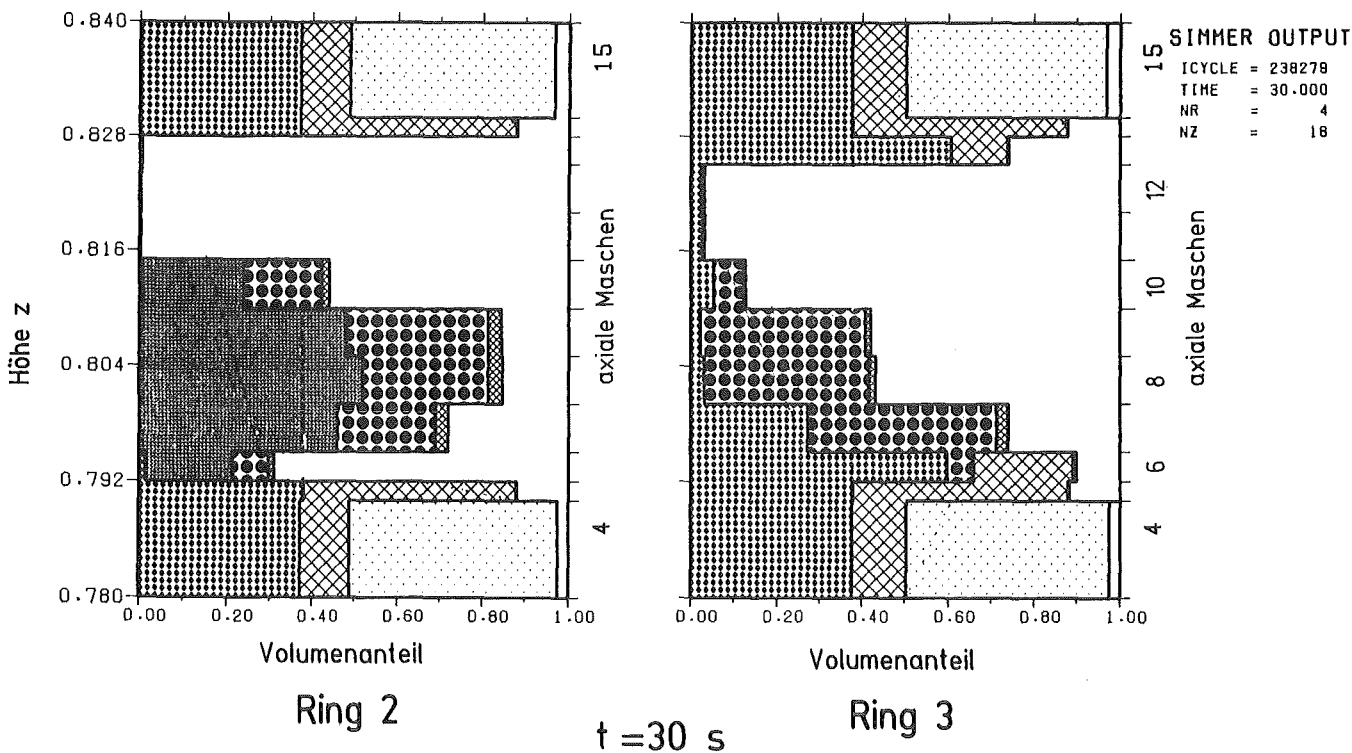
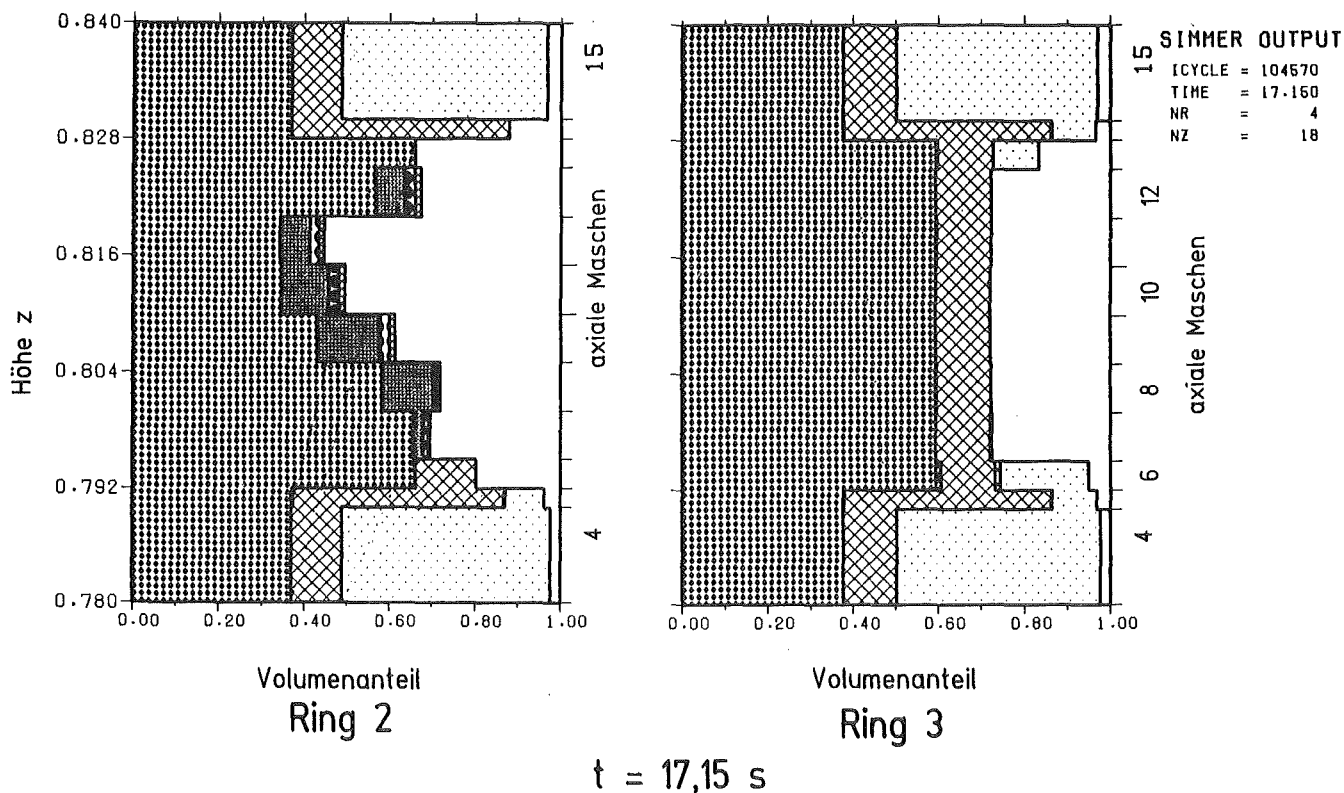


Abb. 6.7: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade bevor und nachdem die Blockade "dicht" ist

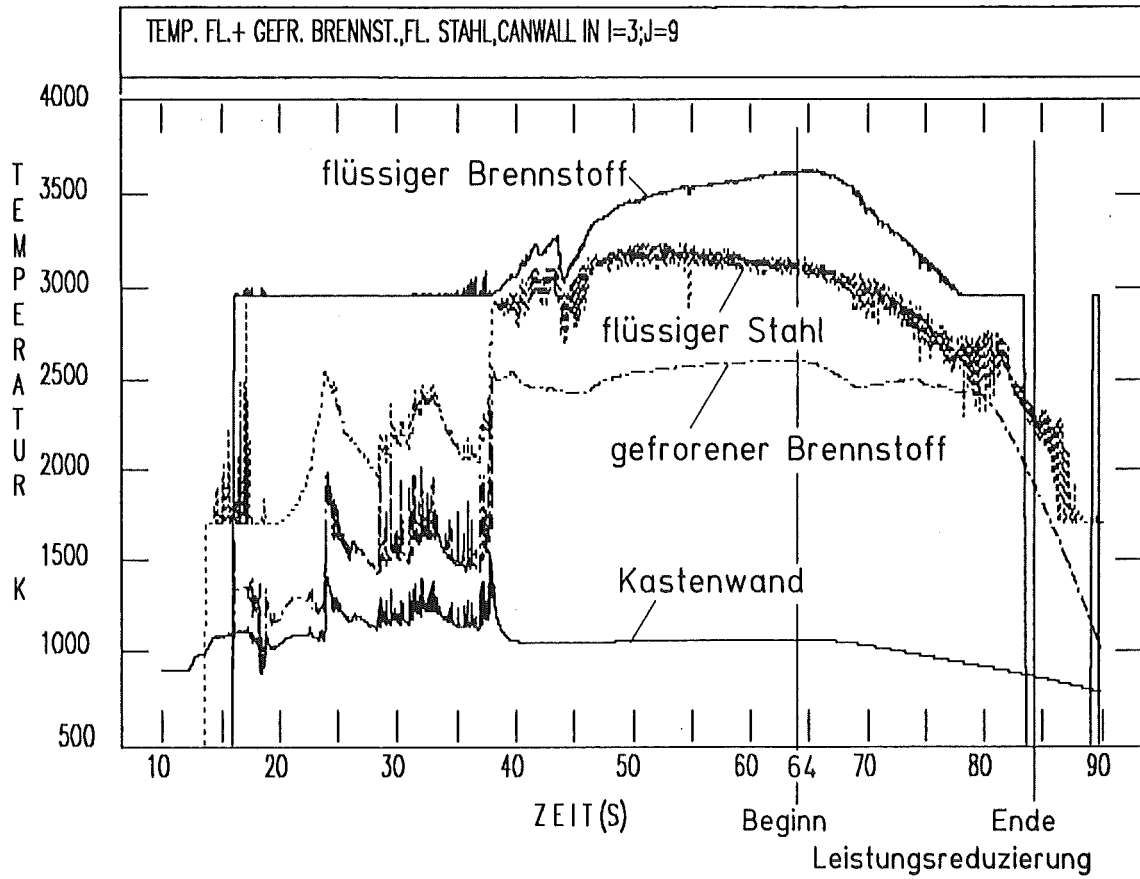


Abb. 6.8: Temperaturverläufe des flüssigen und des gefrorenen Brennstoffs, des flüssigen Stahls und der Kastenwand in der Mitte der Blockade

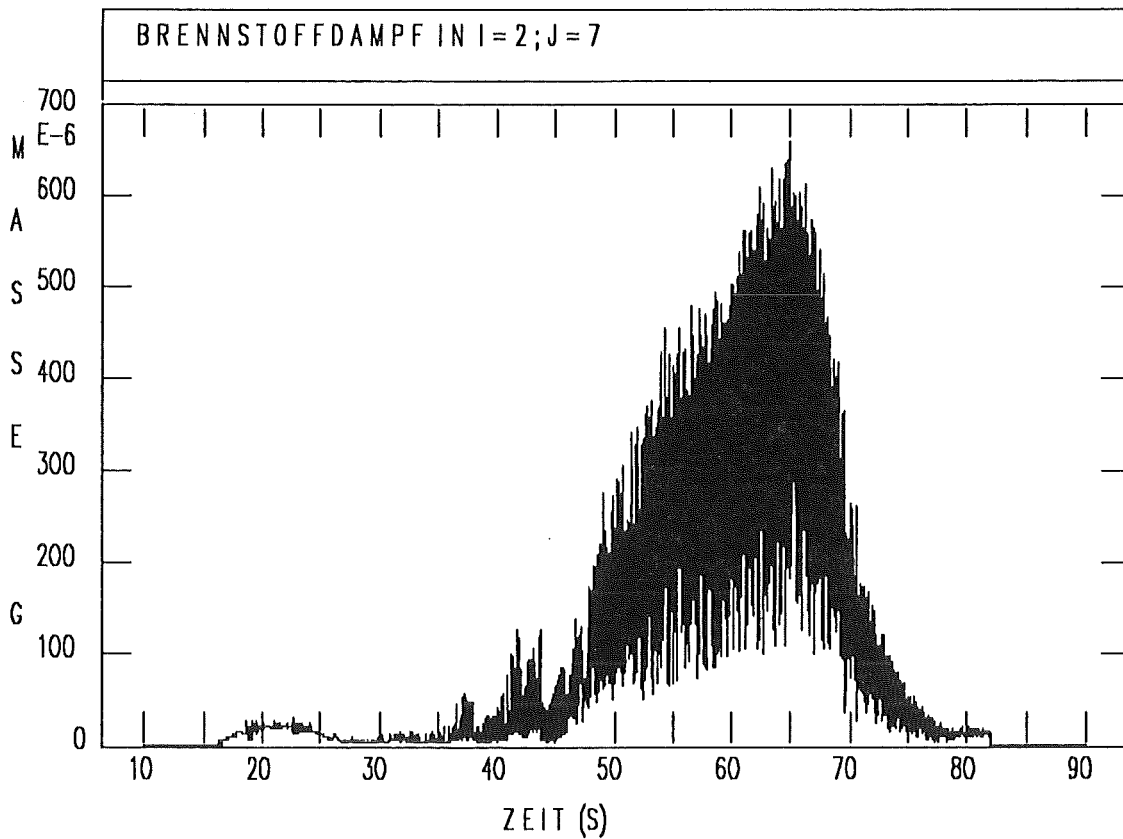


Abb. 6.9 Entwicklung der Masse des Brennstoffdampfes in einer Masche in der Blockade

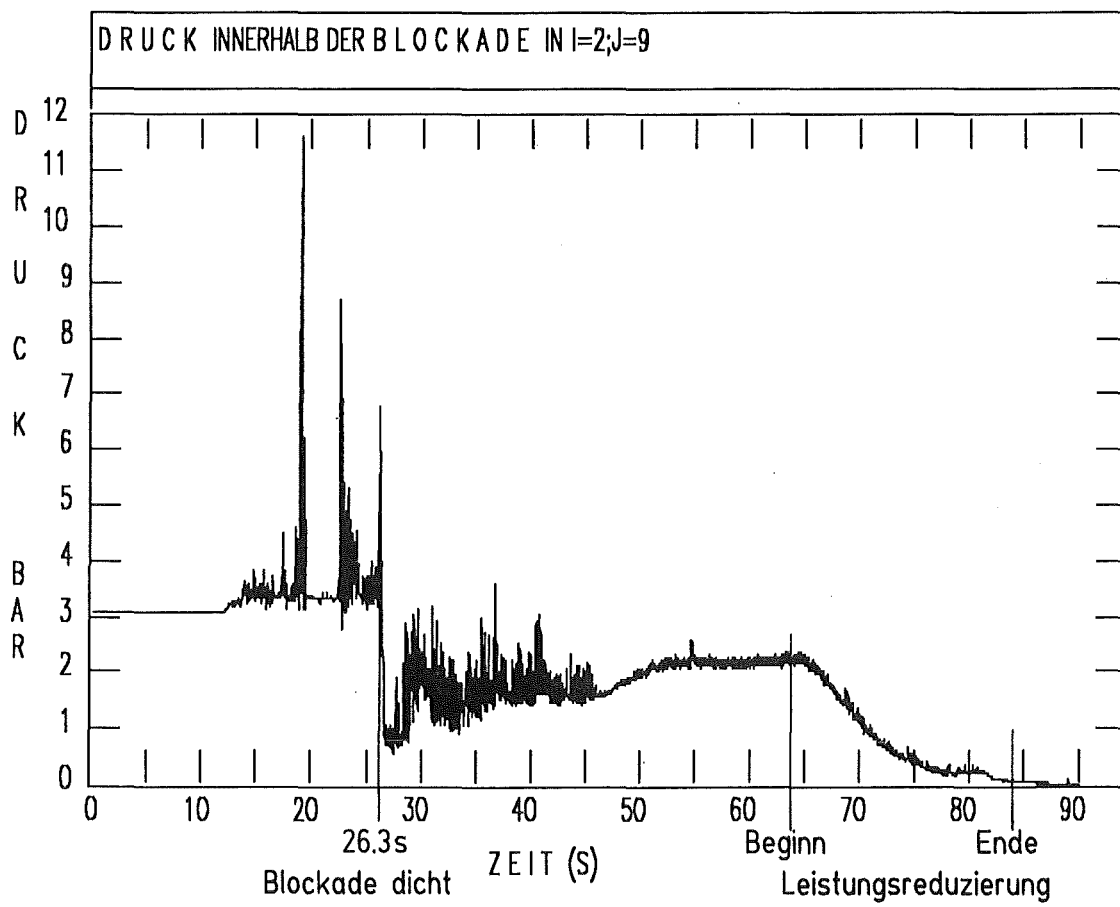


Abb. 6.10: Druckverlauf in der Blockade (Kaverne)

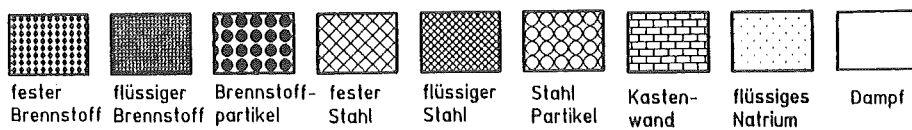
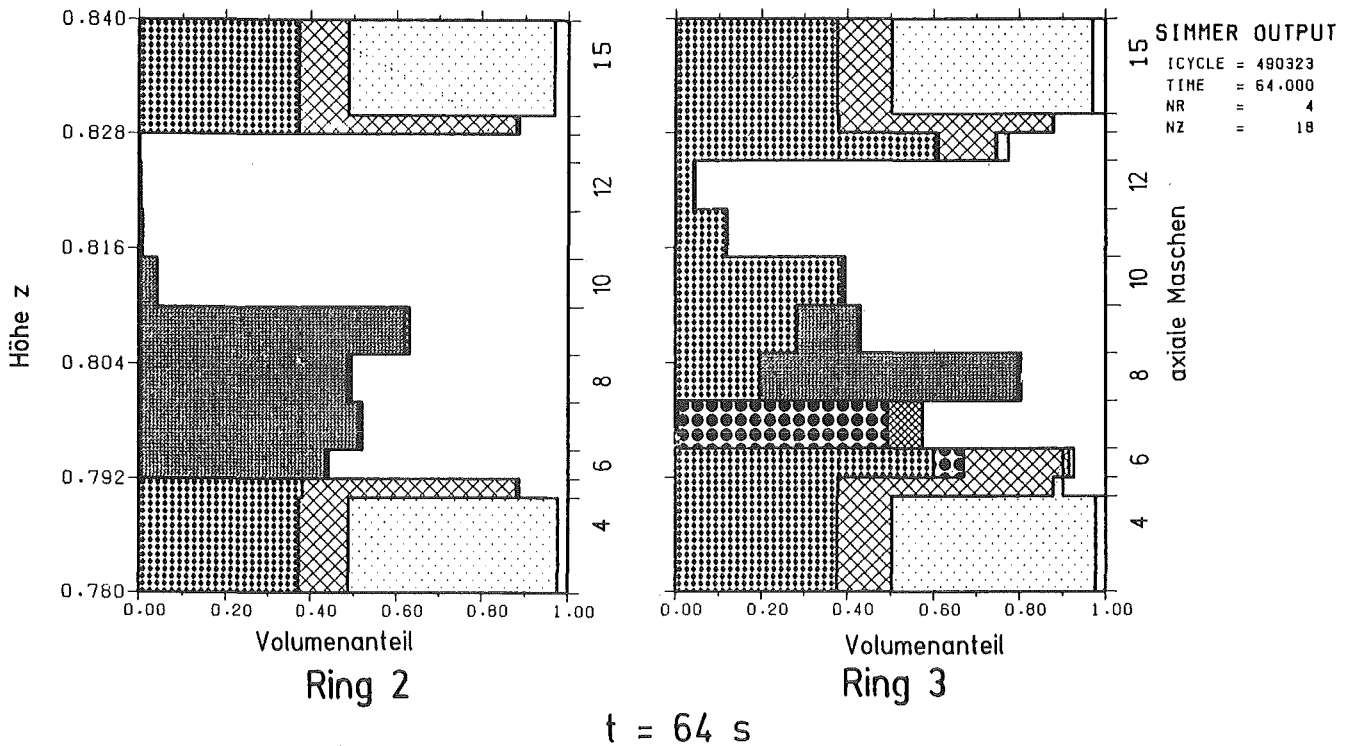
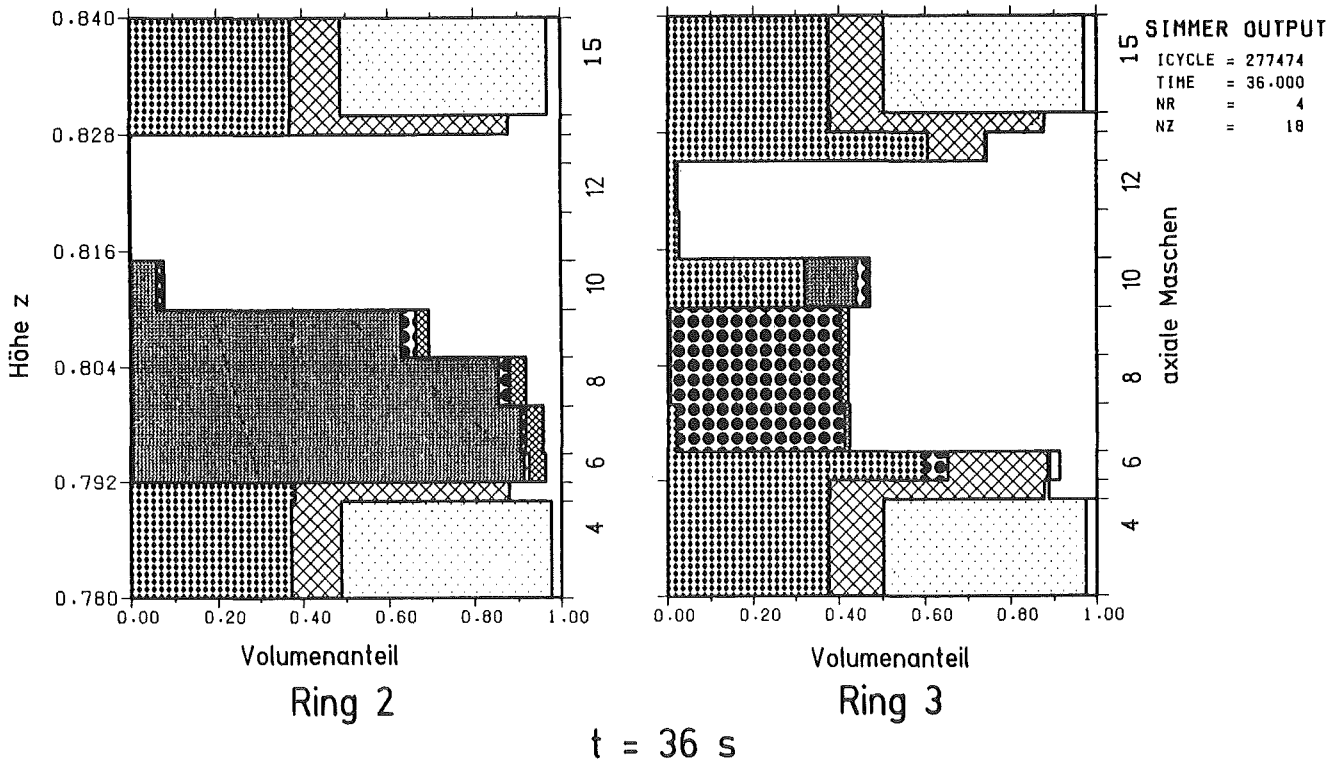


Abb. 6.11: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade zu zwei Zeitpunkten bei voller Leistung

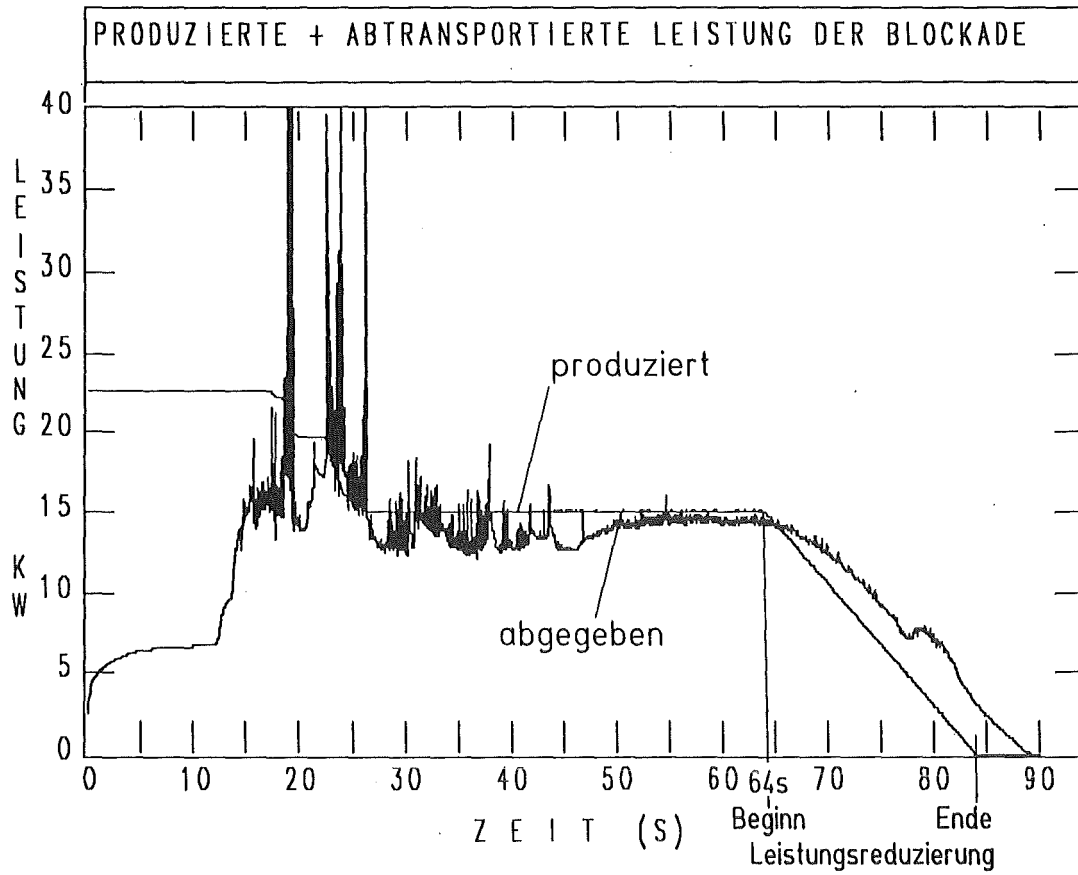


Abb. 6.12: Im Blockadebereich erzeugte Leistung und an das vorbeiströmende Natrium abgegebene Leistung

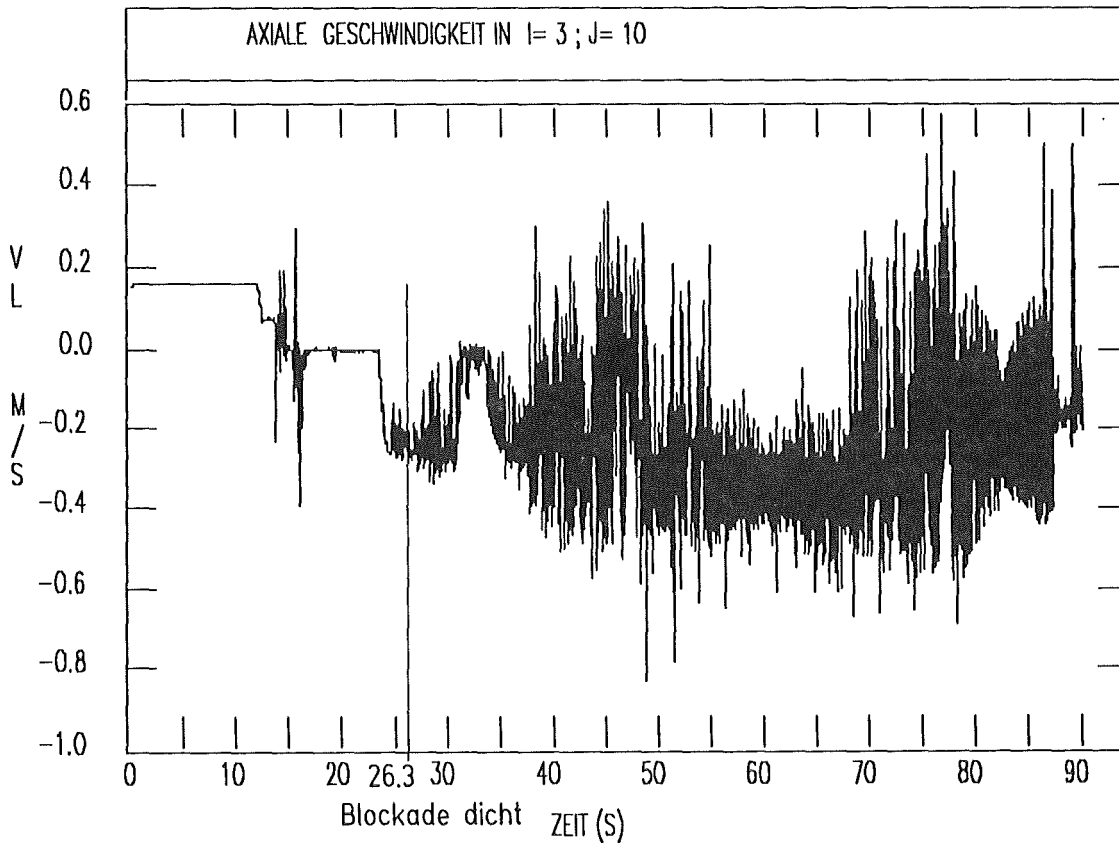
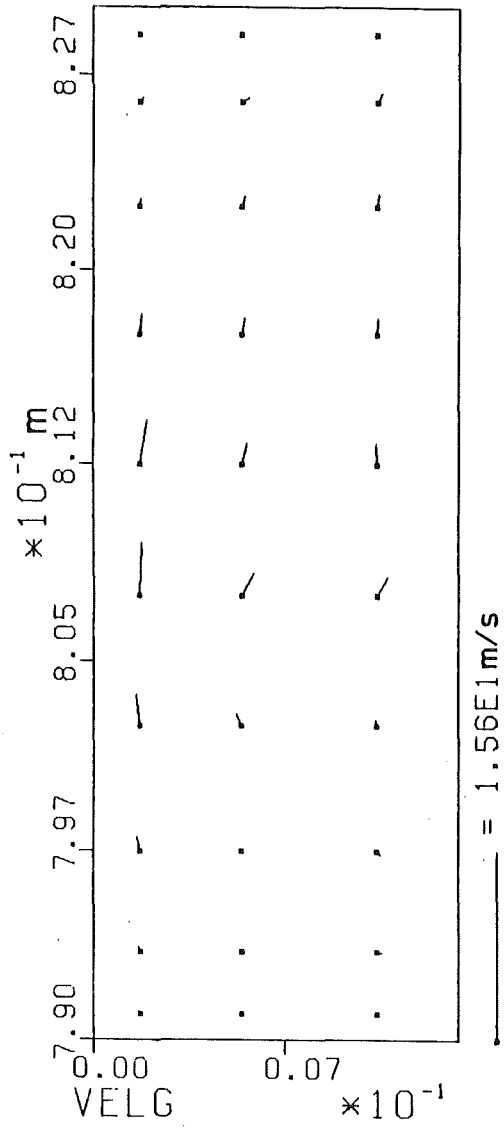
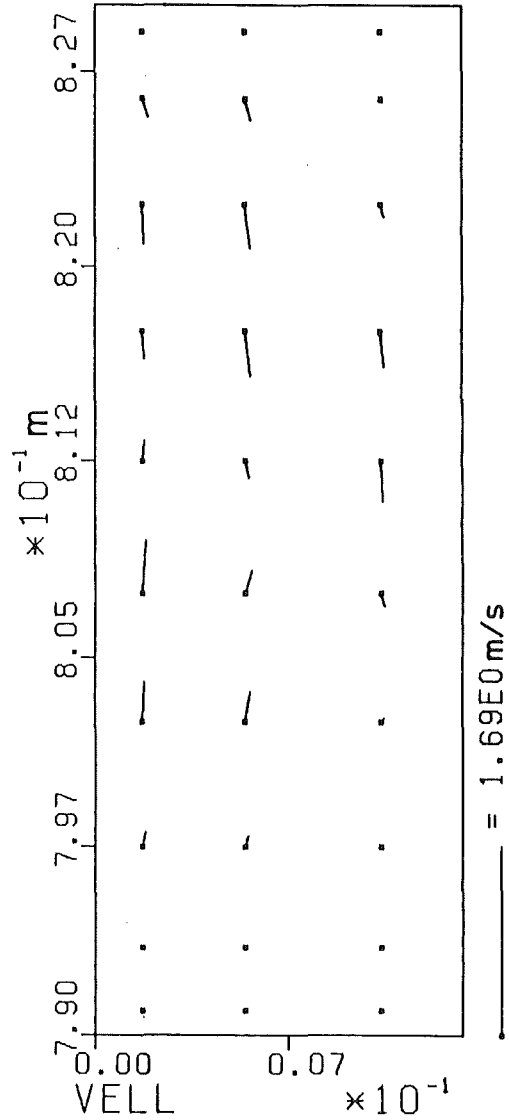


Abb. 6.13: Axiale Geschwindigkeit der Flüssigkeit in der Blockade (Kaverne)



Dampfgeschwindigkeit



Flüssigkeitgeschwindigkeit

T = 64.000 S NCYC = 490323

Abb. 6.14: Dampf- und Flüssigkeitgeschwindigkeiten in der Kaverne bei voller Leistungserzeugung

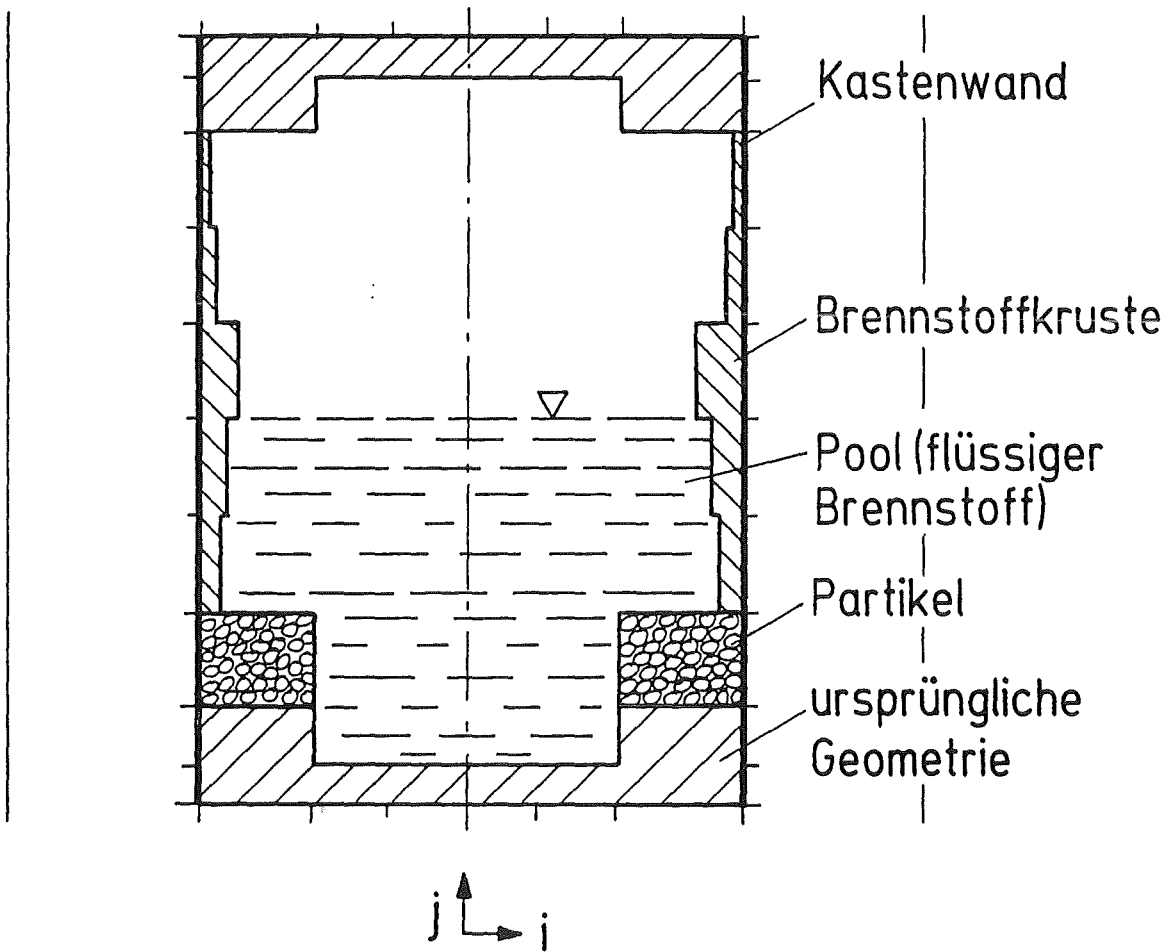
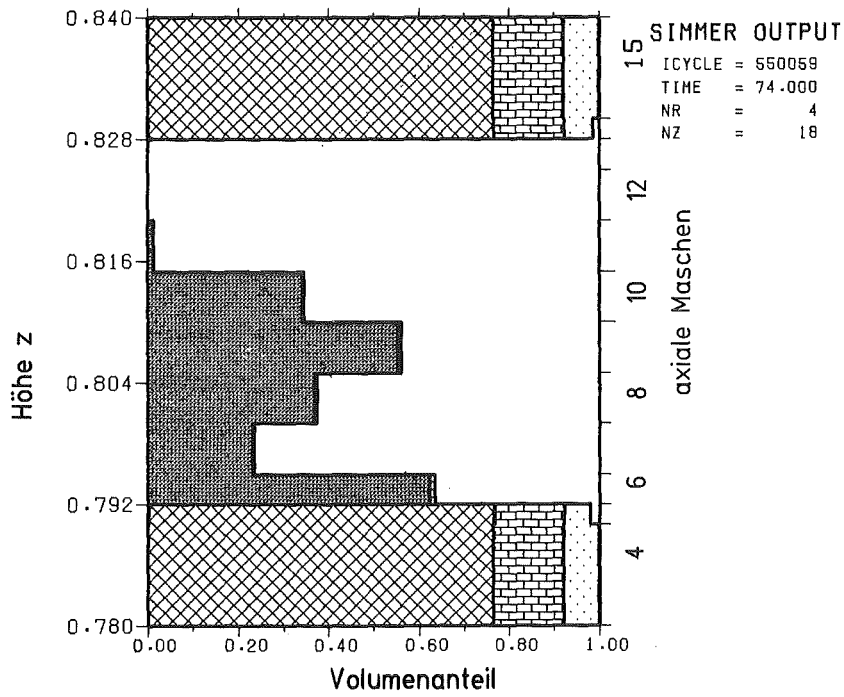
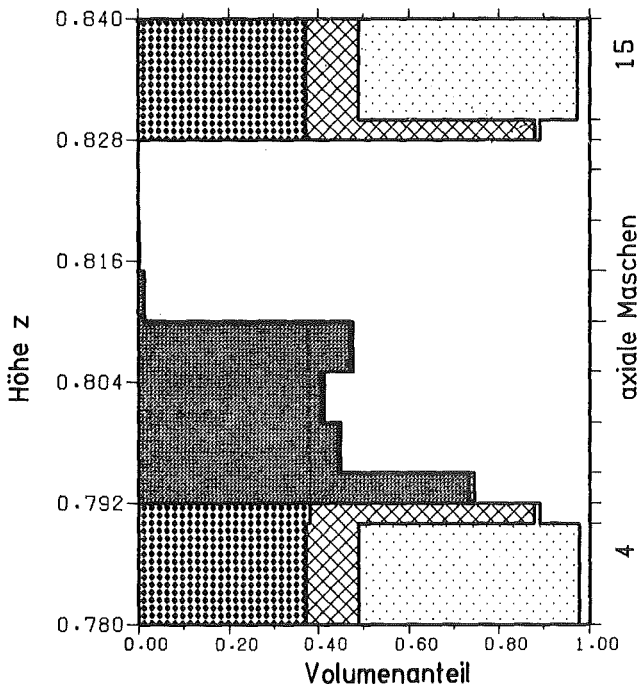


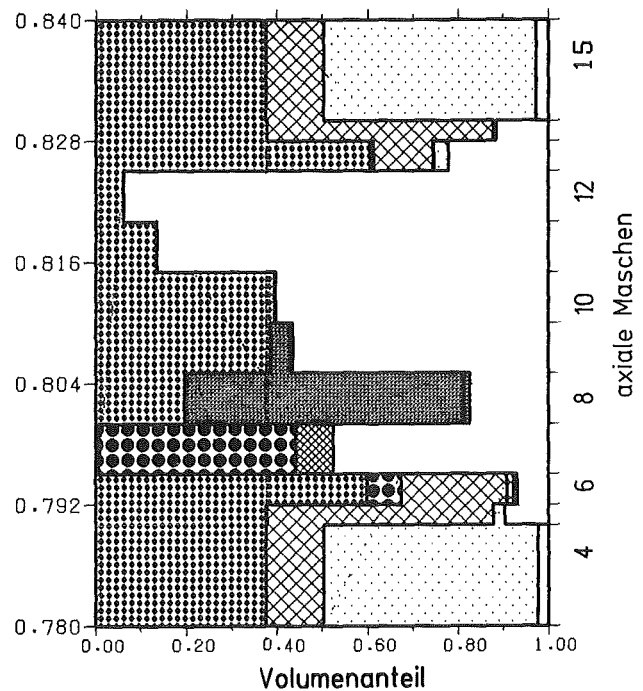
Abb. 6.15: Kaverne bei voller Leistung nach Erreichen eines stationären Zustandes



Ring 1



Ring 2



Ring 3

$t = 74 \text{ s}$

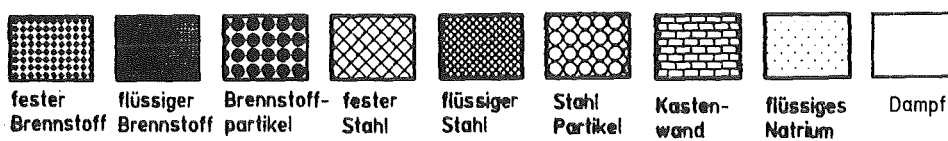
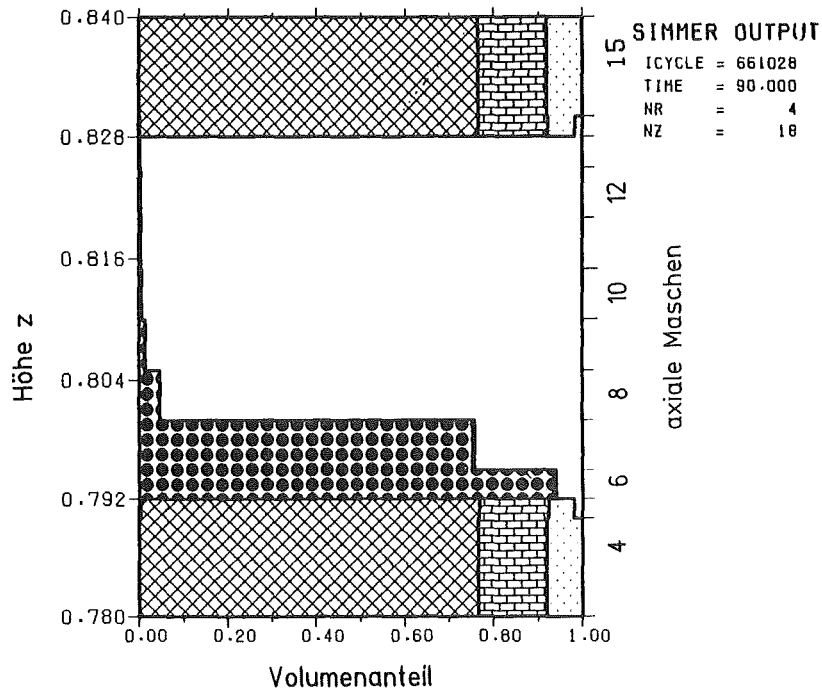
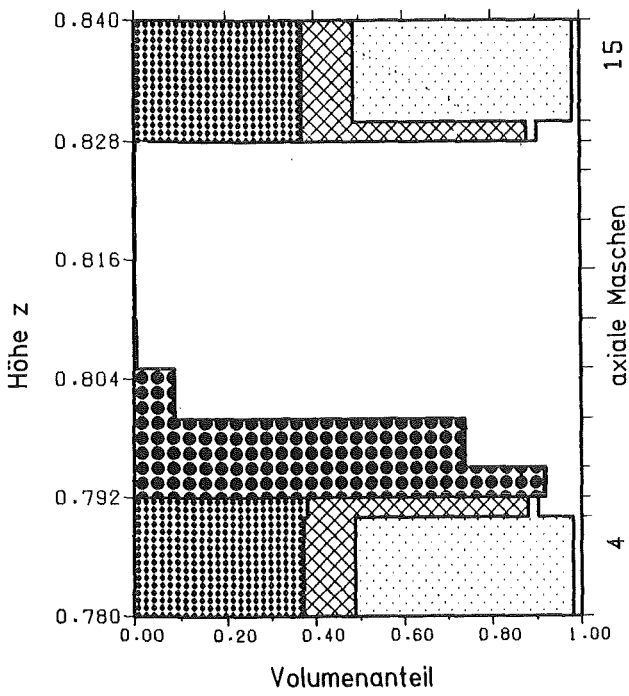


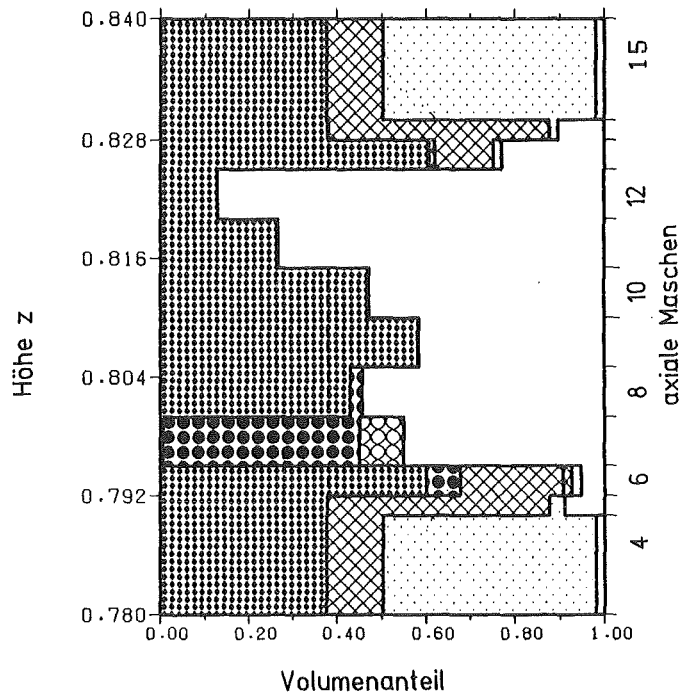
Abb. 6.16: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade bei halber Leistungserzeugung



Ring 1



Ring 2



Ring 3

t = 90 s

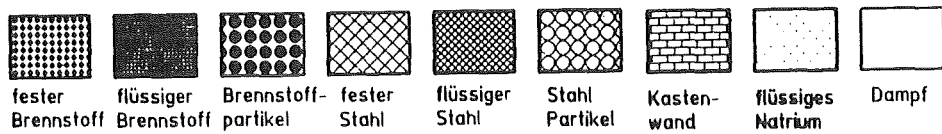


Abb. 6.17: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade im Endzustand ohne Leistungserzeugung

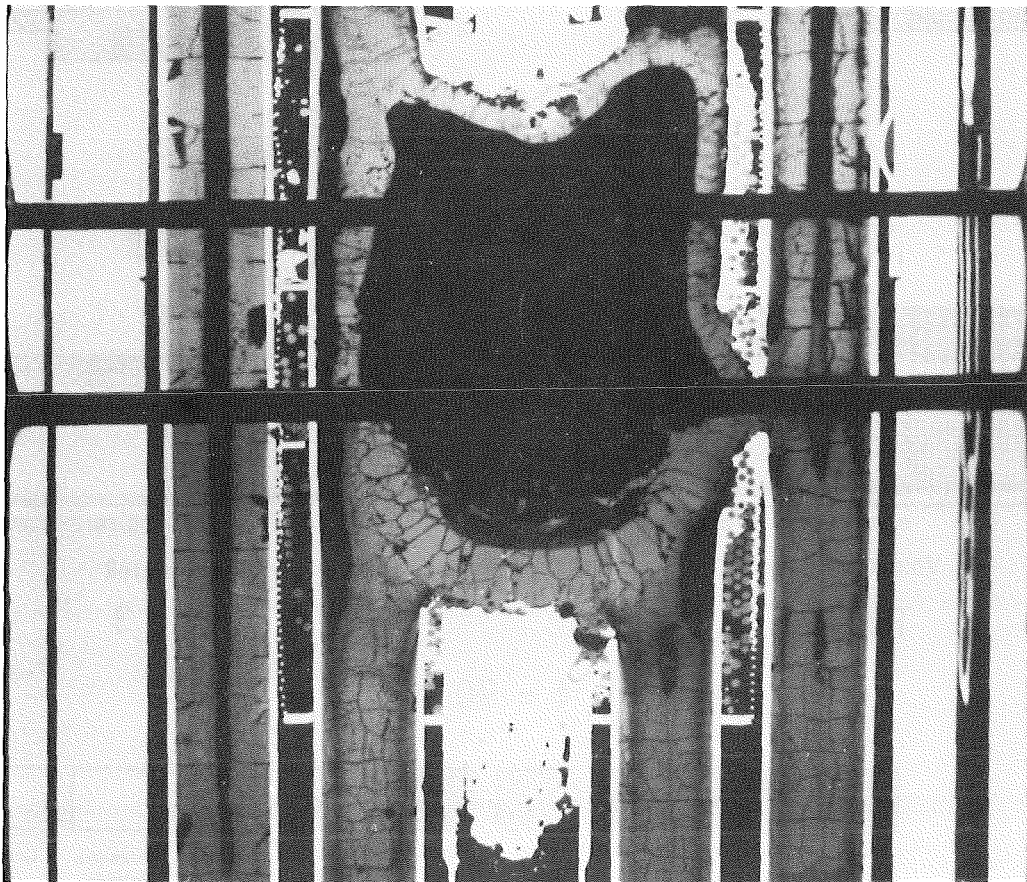
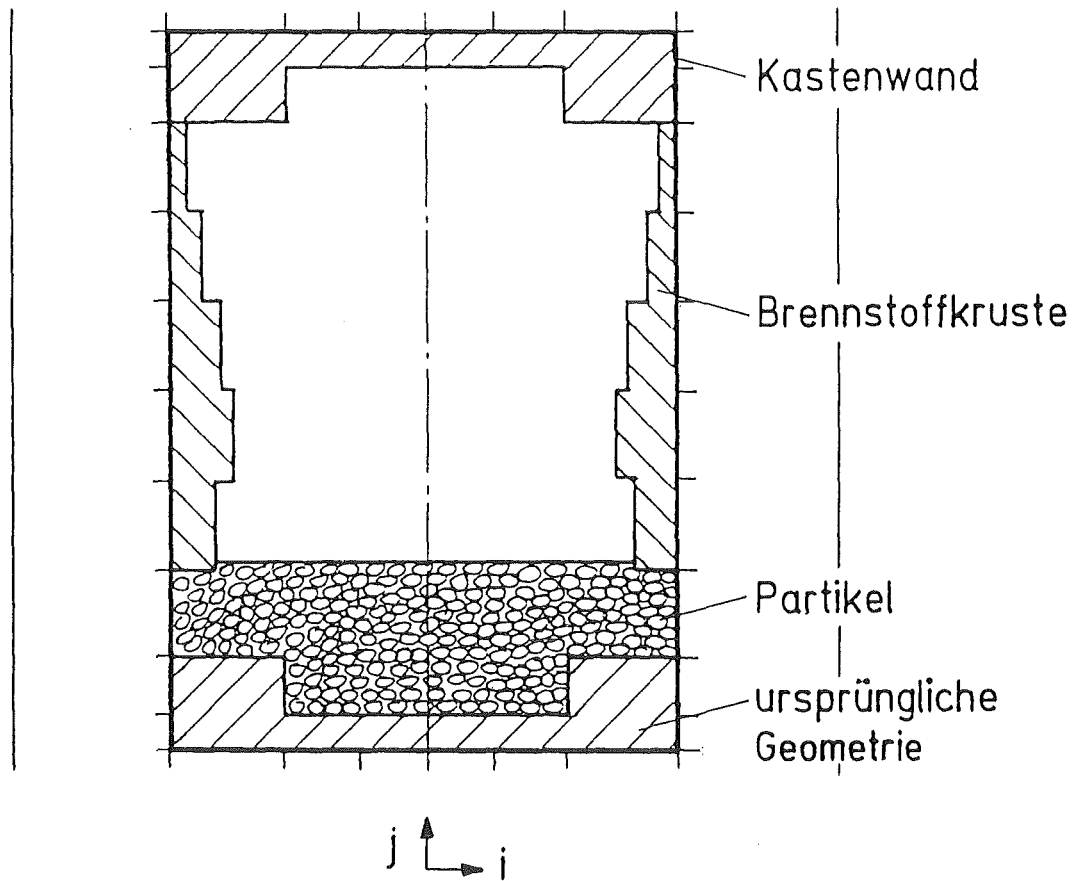


Abb. 6.18: Vergleich des Endzustandes der Rechnung ohne Leistungserzeugung mit dem Längsschnitt Mol 7C/5

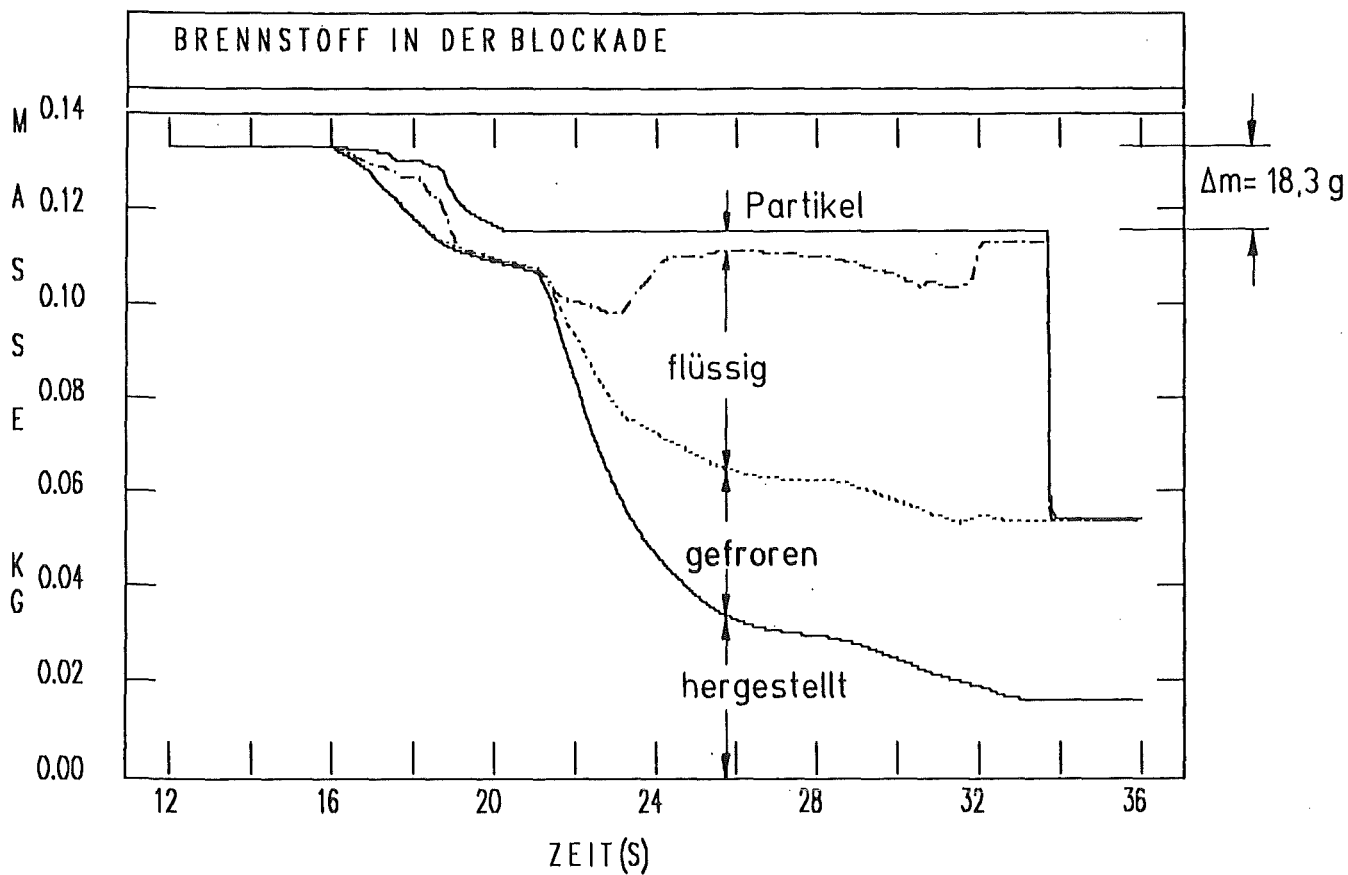


Abb. 6.19: Brennstoffmassen in der Blockade der Vergleichsrechnung

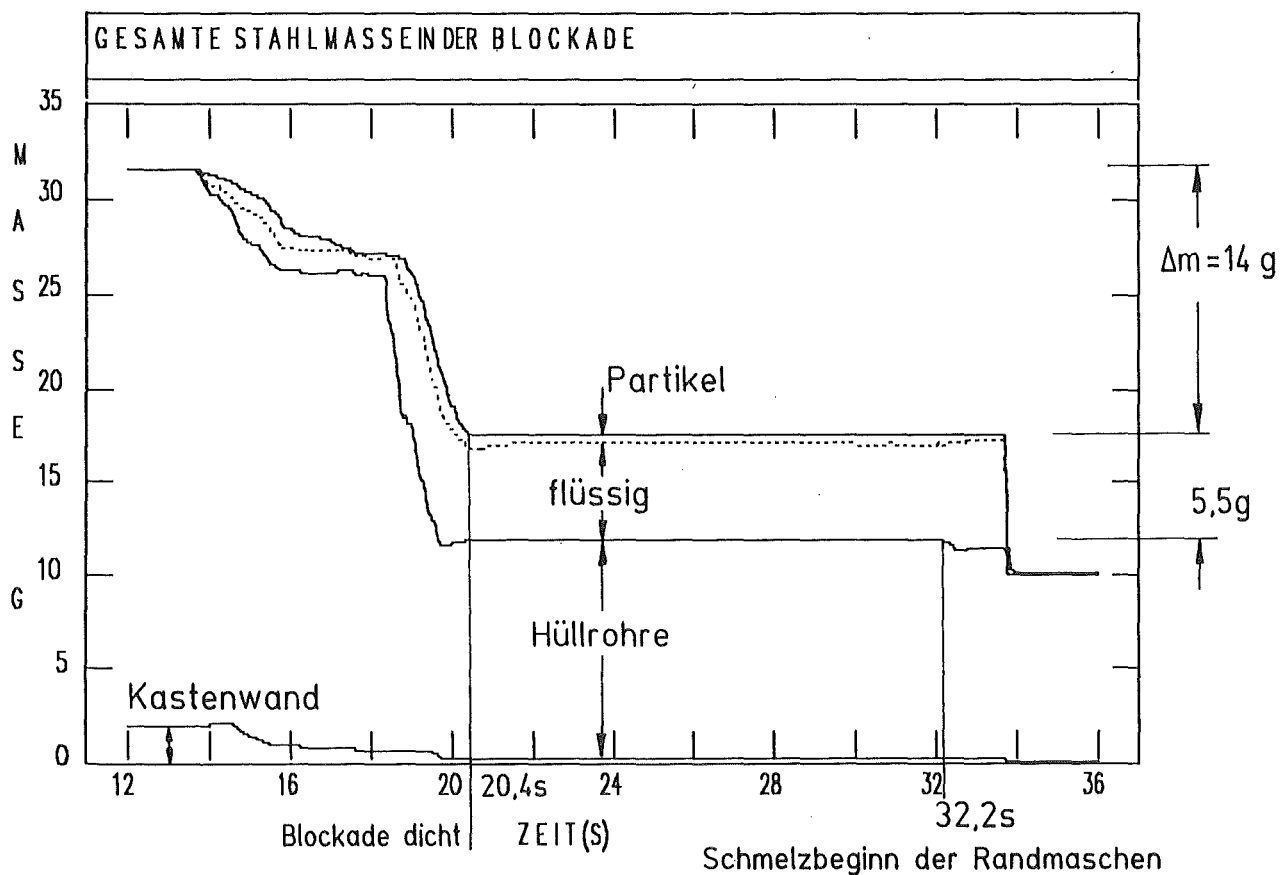


Abb. 6.20: Stahlmassen in der Blockade der Vergleichsrechnung

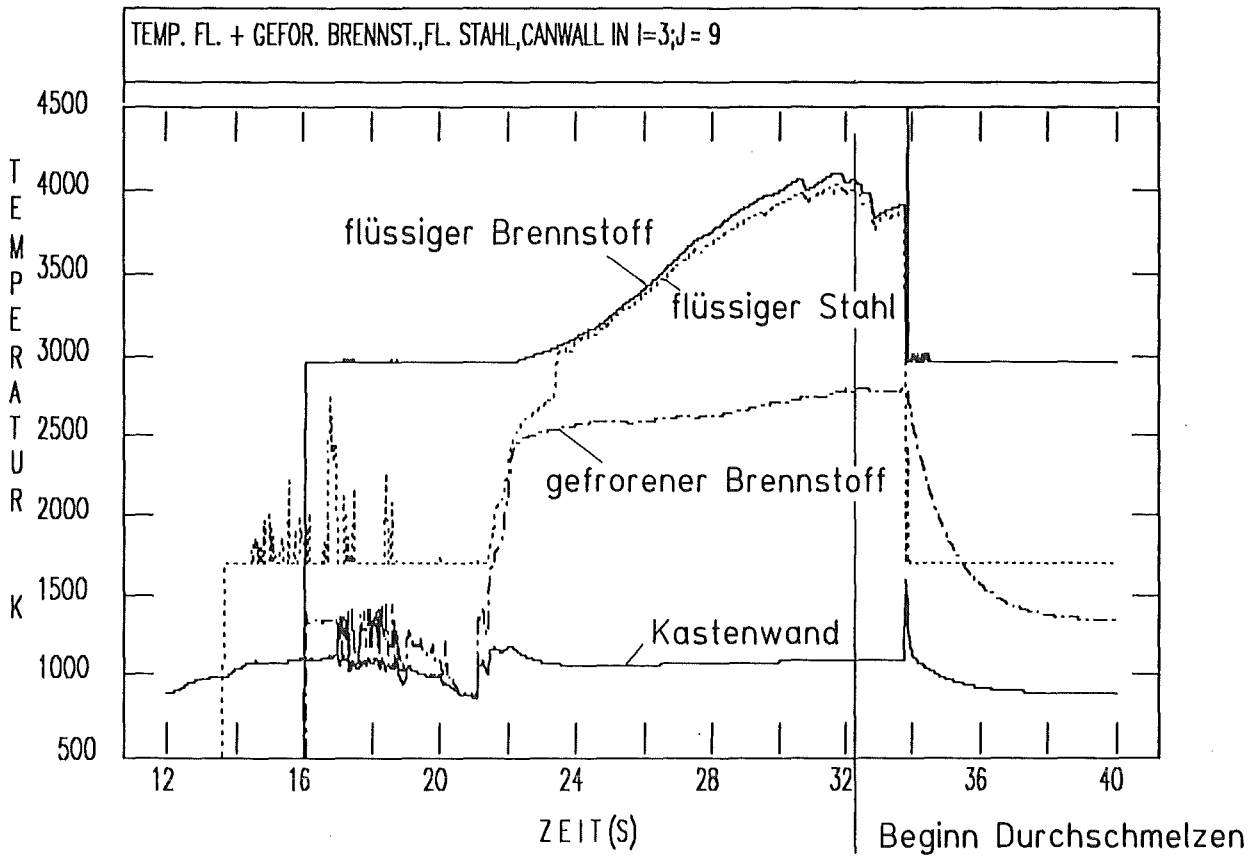


Abb. 6.21: Temperaturverläufe des flüssigen und gefrorenen Brennstoffs, des flüssigen Stahls und der Kastenwand in der Vergleichsrechnung

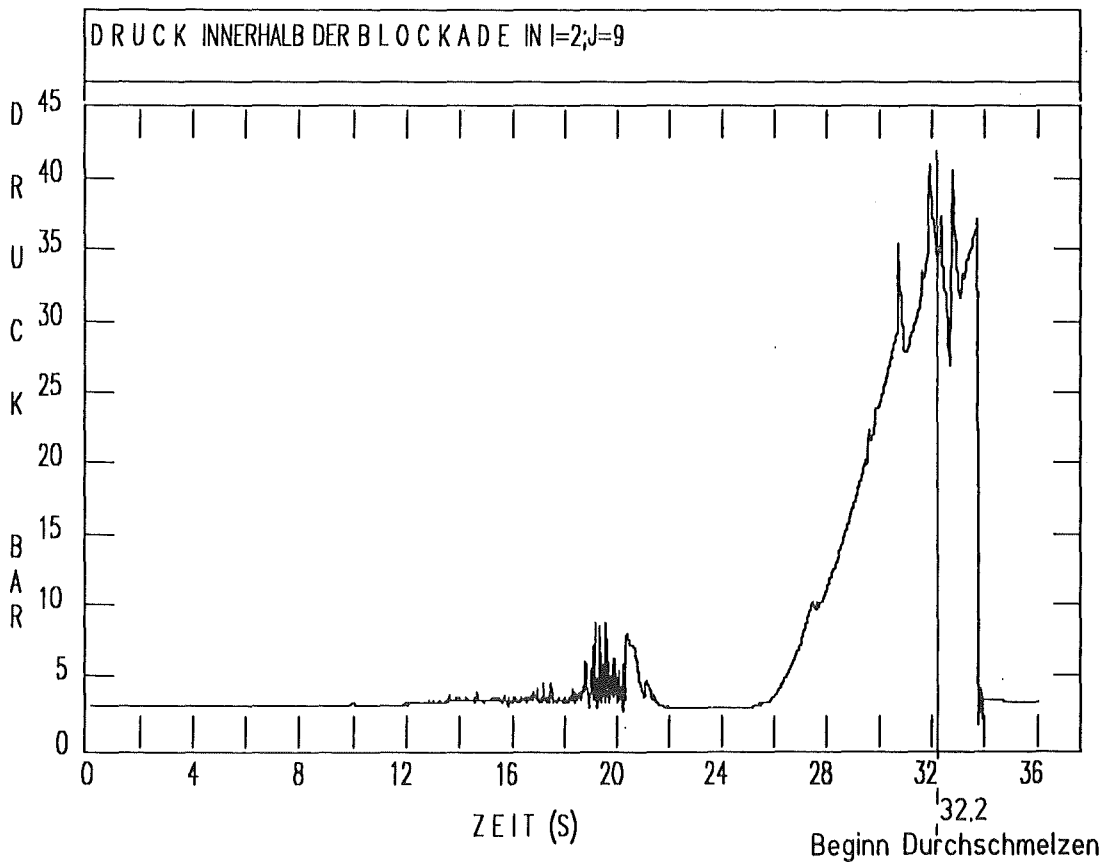


Abb. 6.22: Druckverlauf in der Blockade der Vergleichsrechnung

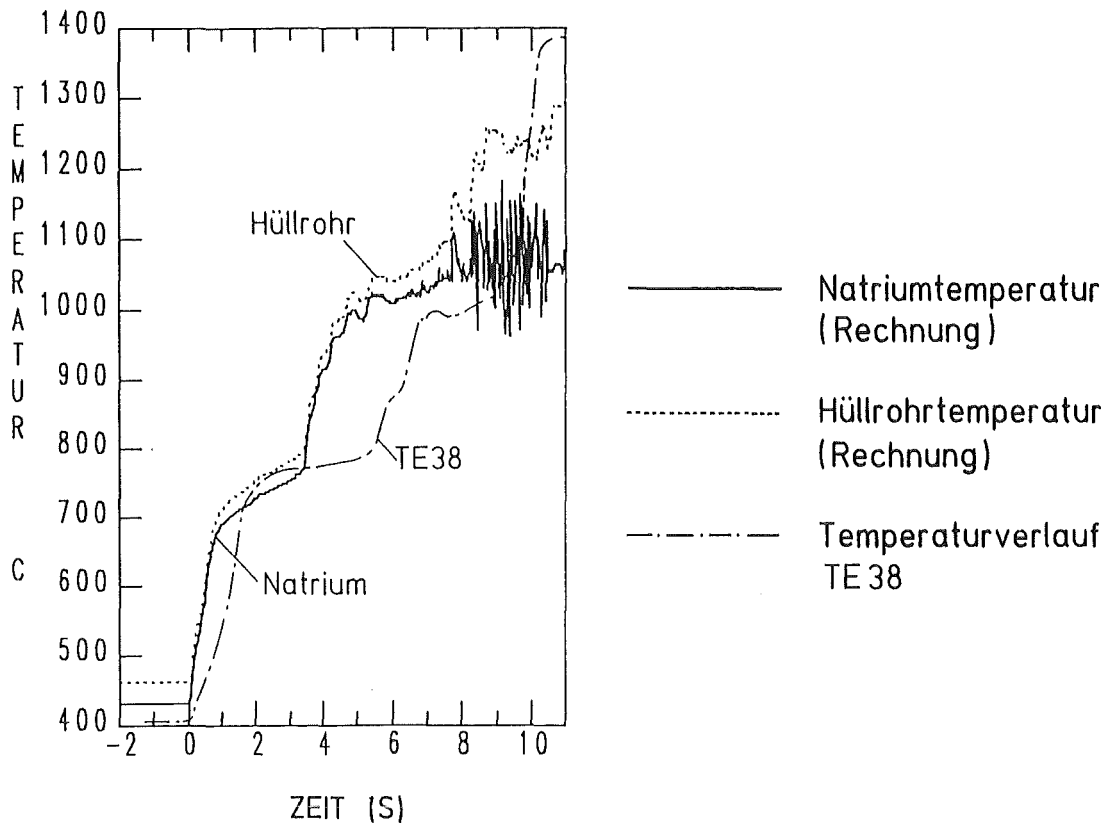


Abb. 6.23: Vergleich der Temperaturverläufe der Rechnung mit dem entsprechenden Thermoelement des Versuchs Mol 7C/4 für den unteren Bereich der Blockade

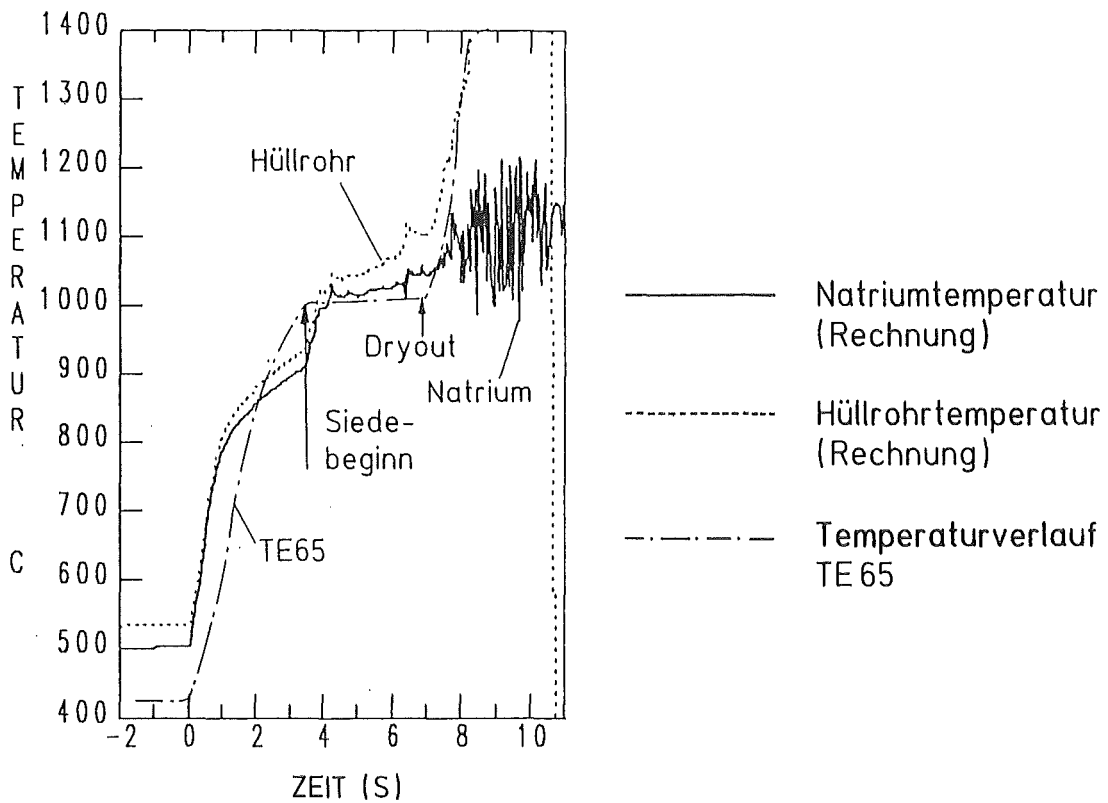


Abb. 6.24: Vergleich der Temperaturverläufe der Rechnung mit dem entsprechenden Thermoelement des Versuchs Mol 7C/4 in der Mitte der Blockade

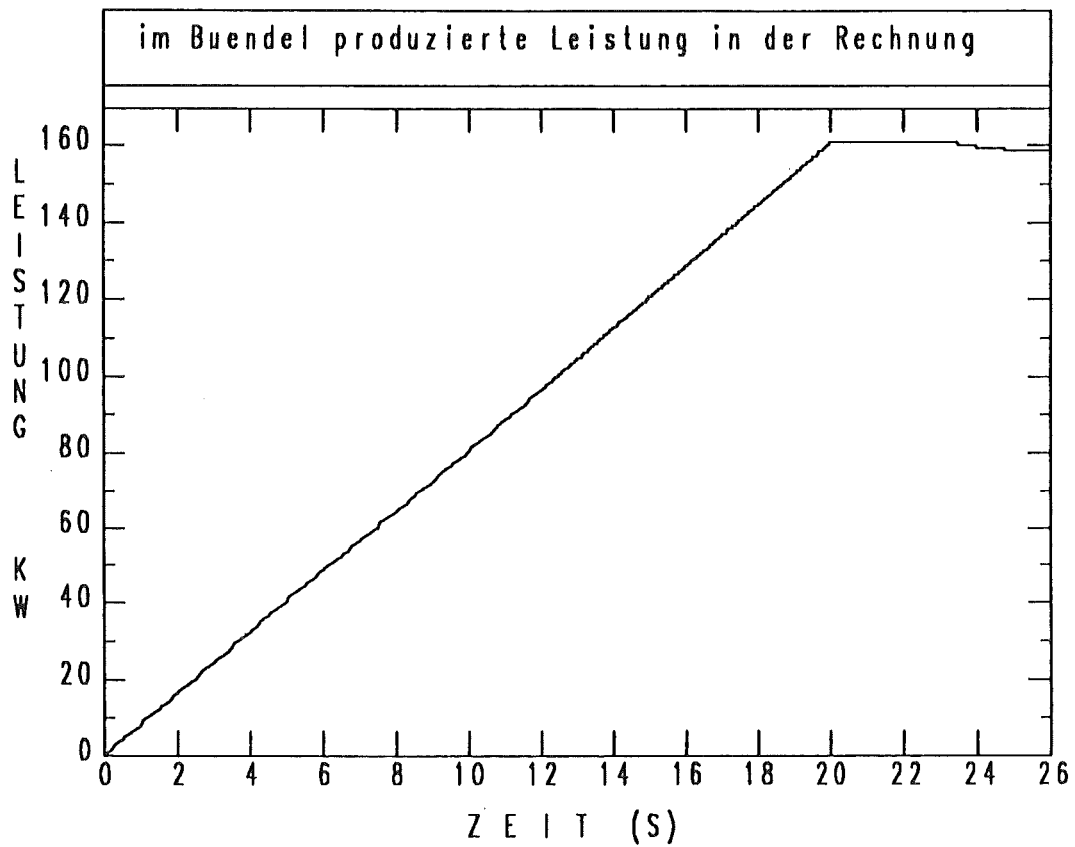


Abb. 6.25: In den Maschen $j = 2$ bis $j = 17$ erzeugte Leistung der Mol 7C/5-Rechnung mit der Leistungsrampe

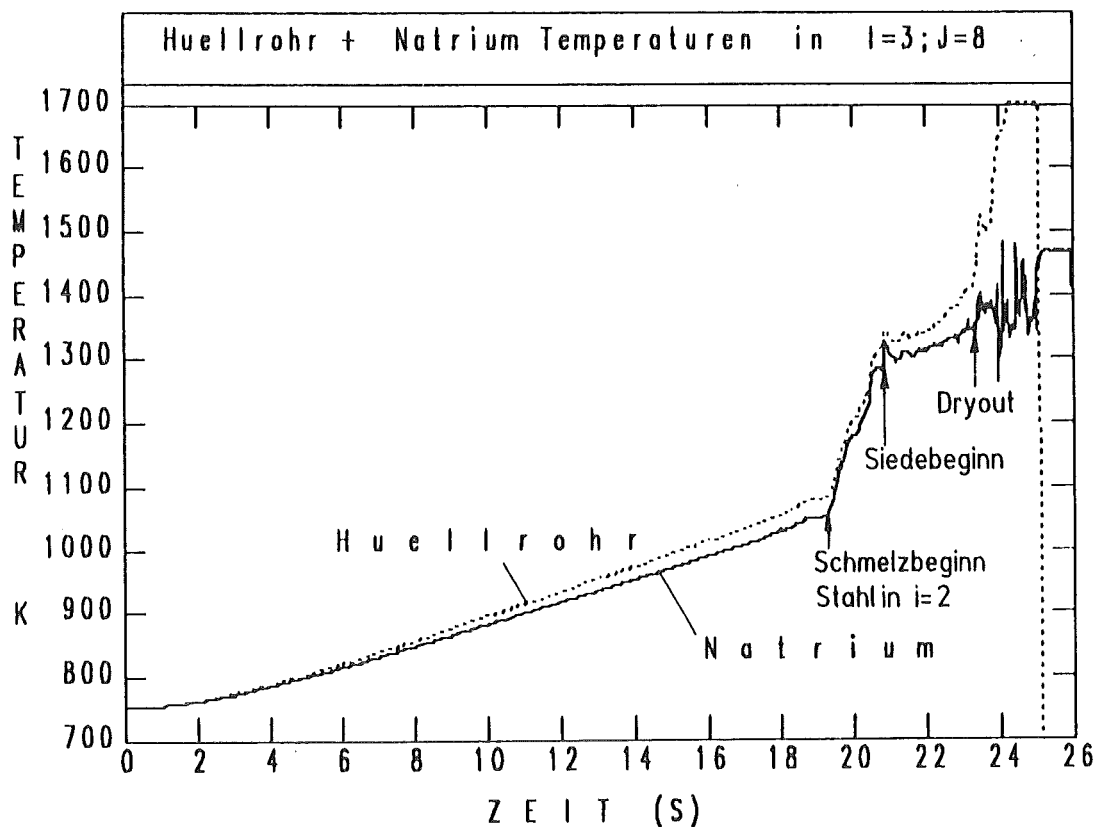


Abb. 6.26: Temperaturverläufe des flüssigen Natriums und der Hüllrohre der Anfangsphase der Mol 7C/5-Rechnung mit der Leistungsrampe

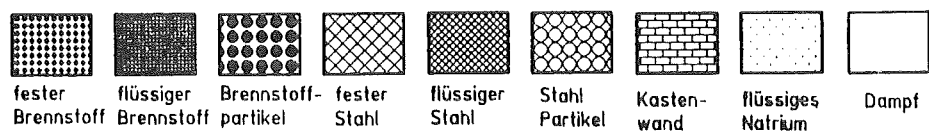
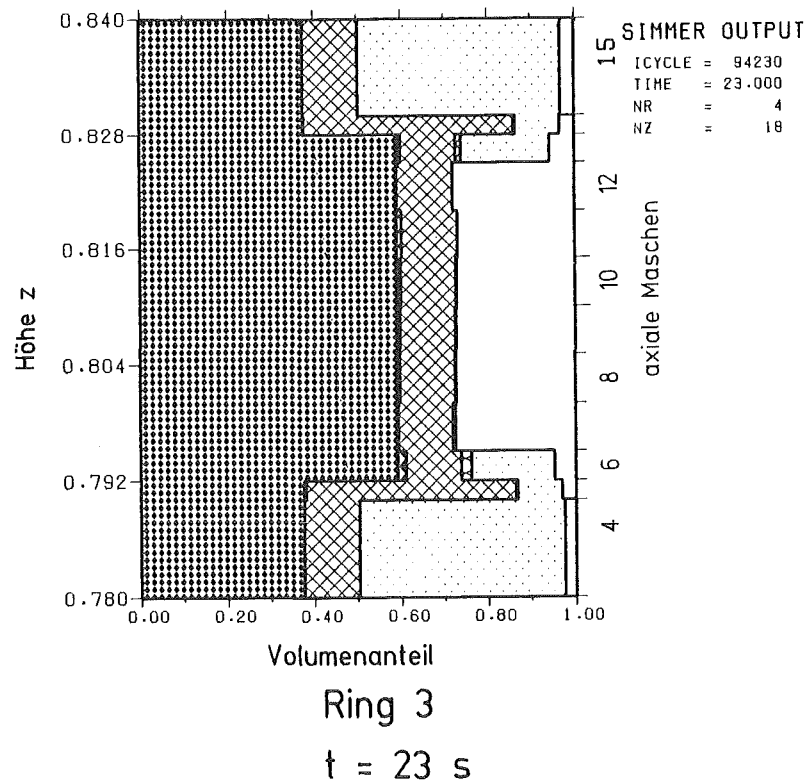
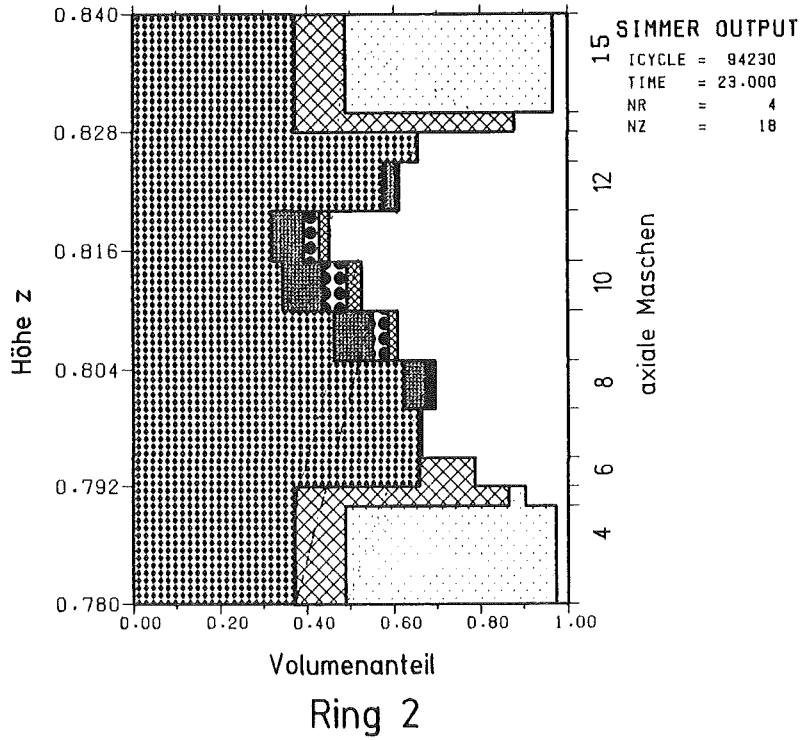


Abb. 6.27: Volumenanteile im Längsschnitt durch die Blockade der Mol 7C/5-Rechnung mit der Leistungsrampe bei 23 s Problemzeit