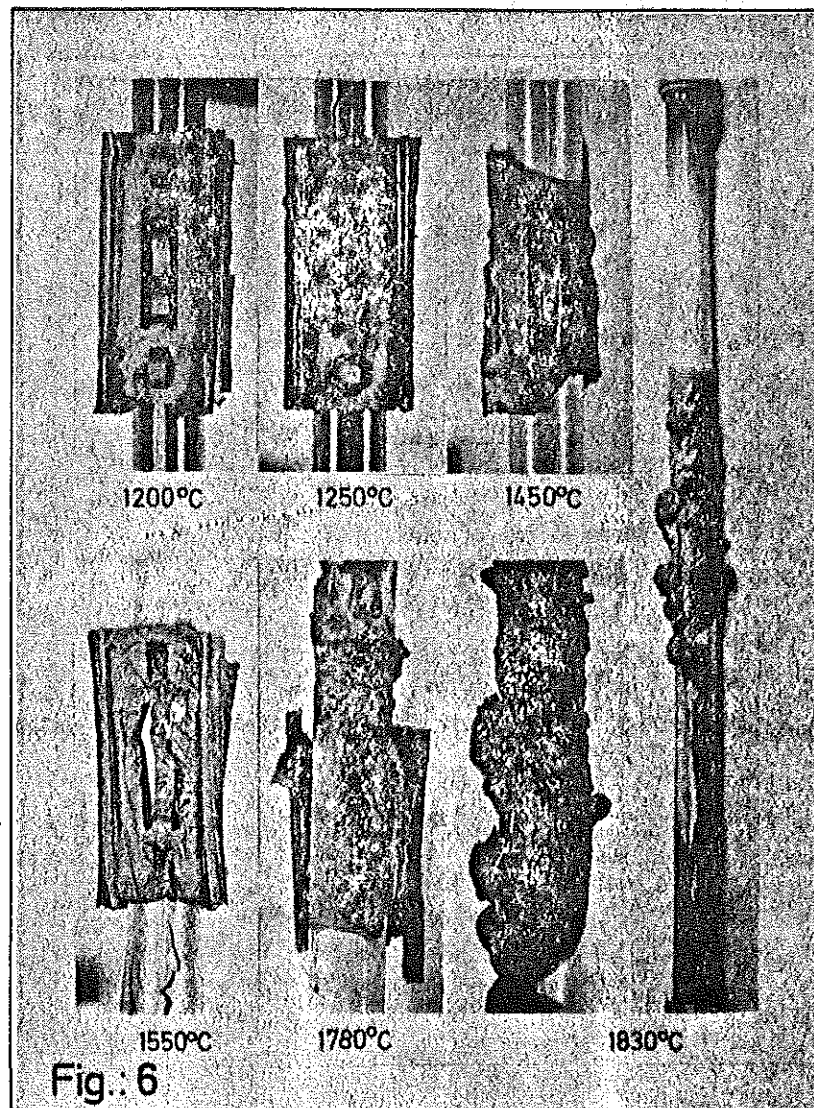


Kuva 3.4. Inertissä kaasussa (He) sulatettuja polttoainesauvoja eri lämpötiloissa (KfK) /34/.

3.3.2 Sulaminen oksidoivassa ympäristössä

Oksidoivassa vesihöyryssä välitukien kontaktipintojen Zr-Ni-systeemin sulaminen alkaa vasta 1250°C :ssa. 1550°C :ssa välituki on deformoitunut ja 1850°C :ssa sulanut, mutta oksidoituneessa zircaloy-suojakuoressa esiintyy vain muodonmuutoksia (kuva 3.5) /34/. Polttoainetabletit olivat sulia 2200°C :ssa, mikä johtuu U-Zr-O -systeemin sulamislämpötilaa alentavasta eutektisestä reaktiosta. Kontaktin laadulla voi olla vaikutusta sulamiskäyttäytymiseen.



Kuva 3.5. Oksidoivassa kaasussa (vesihöyryssä) sulatettuja polttoainesauvoja eri lämpötiloissa (KfK) /34/.

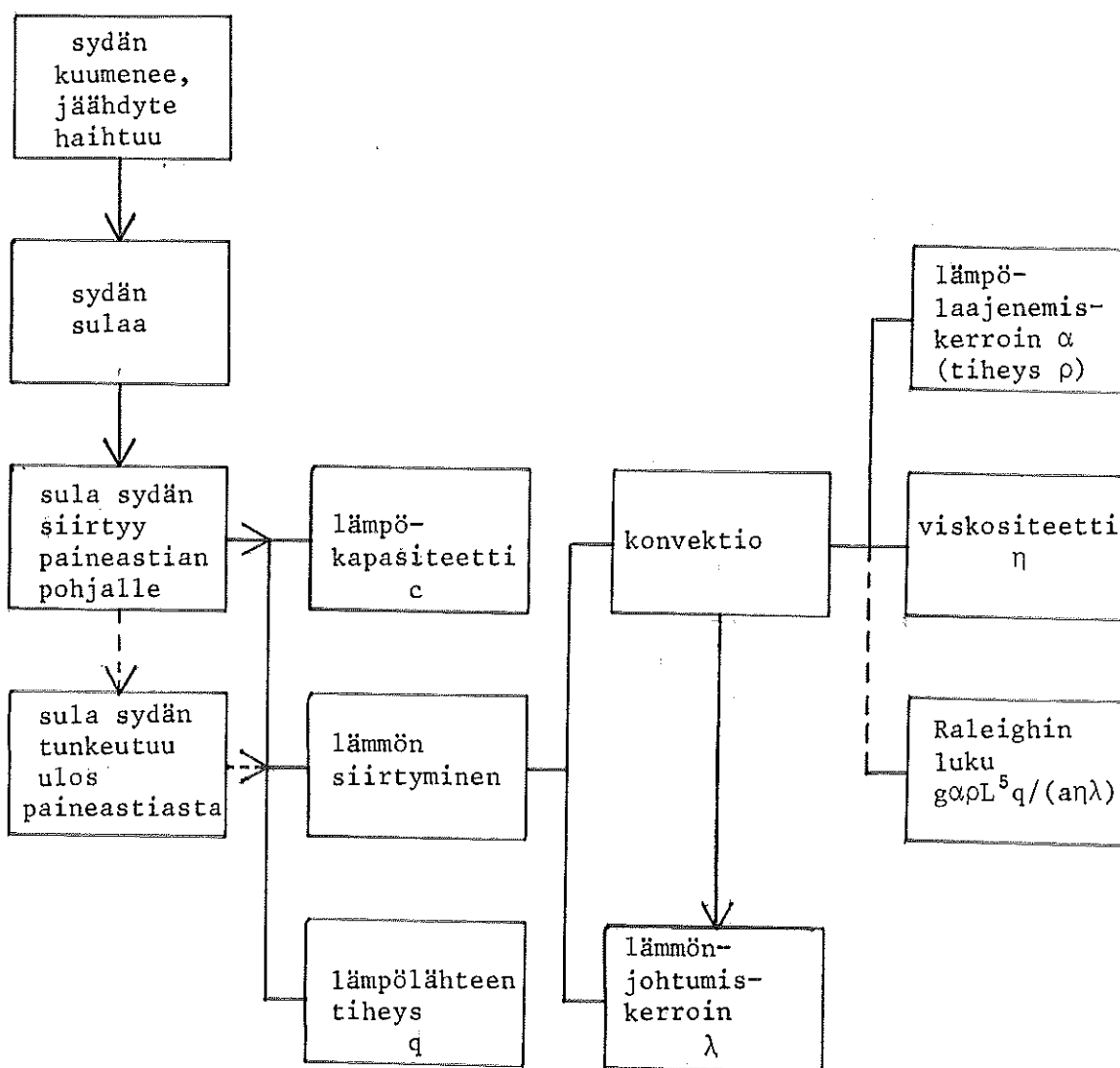
Hannoverin teknillisessä korkeakoulussa tehdyissä kokeissa kaikissa eri olosuhteissa sulatetut teräs-zircaloy-UO₂ -polttoainesauvat olivat täysin sulia 2400°C:ssa /36/, uudelleen sulatettaessa 1950°C:ssä /36/.

UO₂:n sulamislämpötilaa 2850°C ei voida enää perustellusti käyttää polttoaineen sulamiskriteerinä vakavan reaktori-onnettomuuden kehittymisen laskennassa.

4. SULAN REAKTORISYDÄMEN KÄYTTÄYTYMINEN

4.1 Johdanto

Sulan sydänmateriaalin käyttäytyminen riippuu sydämen materiaalien koostumuksesta, metallurgisista vuorovaikutuksista sekä sulan materiaalin ominaisuuksista (kuva 4.1) //43/.

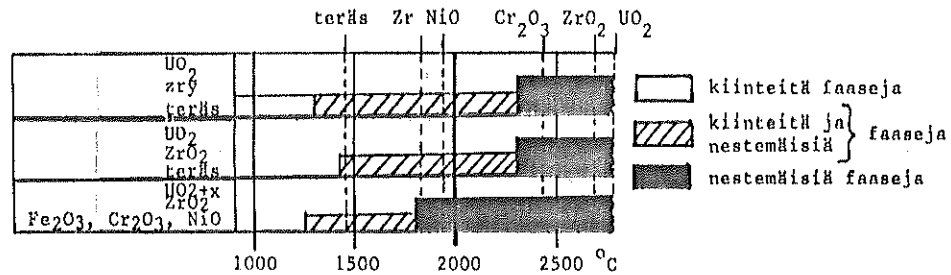


Kuva 4.1. Sulan sydänmateriaalin tärkeimmät ominaisuudet.

4.2 Polttoainenipun ja sydämen rakenneosien sulamisilmiöt

4.2.1 Coriumin koostumus

Reaktorisydämen teräsosat alkavat sulaa oksidoitumisasteesta riippuen 1300...1400°C:ssa (kuva 4.2) /36, 37, 38/. Sulaa



Kuva 4.2. LWR:n sydämen osien sulamislämpötilat oksidoitumisasteen funktiona /34/.

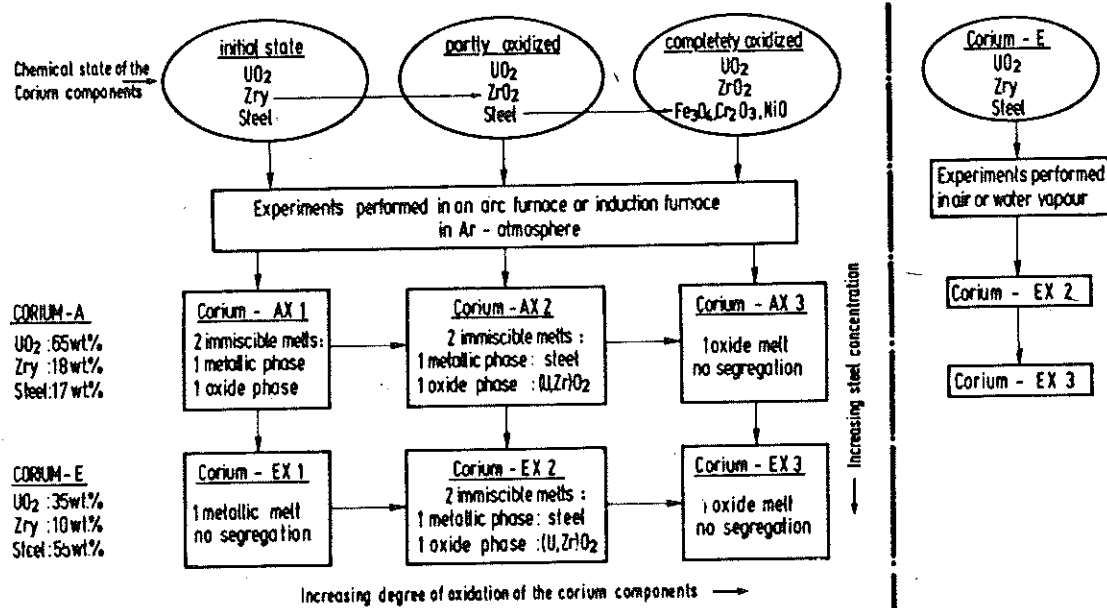
sydänmassaa, joka sisältää polttoaineen lisäksi muutkin rakenteet, kutsutaan coriumiksi. Corium A (Anfang = alku) sisältää polttoaineniput, alahilalevyn ja sydämen tukirakenteet. Corium E:ssä on lisäksi muut paineastian sisäiset teräs-rakenteet (kuva 4.3) /34/.

Jos sydäntä kannattavat tukirakenteet deformatuivat tai sulavat, sula sydänmassa vajoaa paineastian pohjalla jäljellä olevaan veteen /39/. Suurten massojen putoaminen kerrallaan saattaa aiheuttaa höyryräjähdysten. Höyryräjähdysten mahdollisuudesta, laukaisumekanismeista ja vaikutuksista on useita eri käsityksiä /36, 48, 49, 58, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86/.

Mikäli tukirakenteet eivät petä, sulan massan voidaan olettaa vähitellen valuvan paineastian pohjalle. Valumisnopeutta rajoittaa massan jäähtyminen sen edetessä kylmempien sauvan osien pinnalla.

4.2.2 Coriumin faasitila

Coriumin faasitila riippuu oksidoitumisasteesta ja teräskonsentraatiosta kvalitatiivisesti kuvan 4.3 mukaisesti.

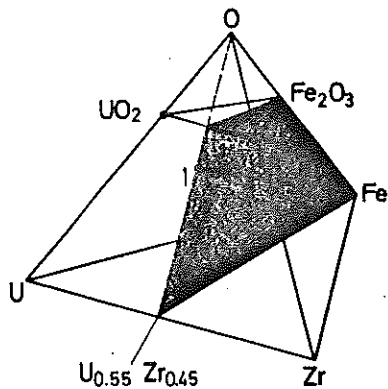
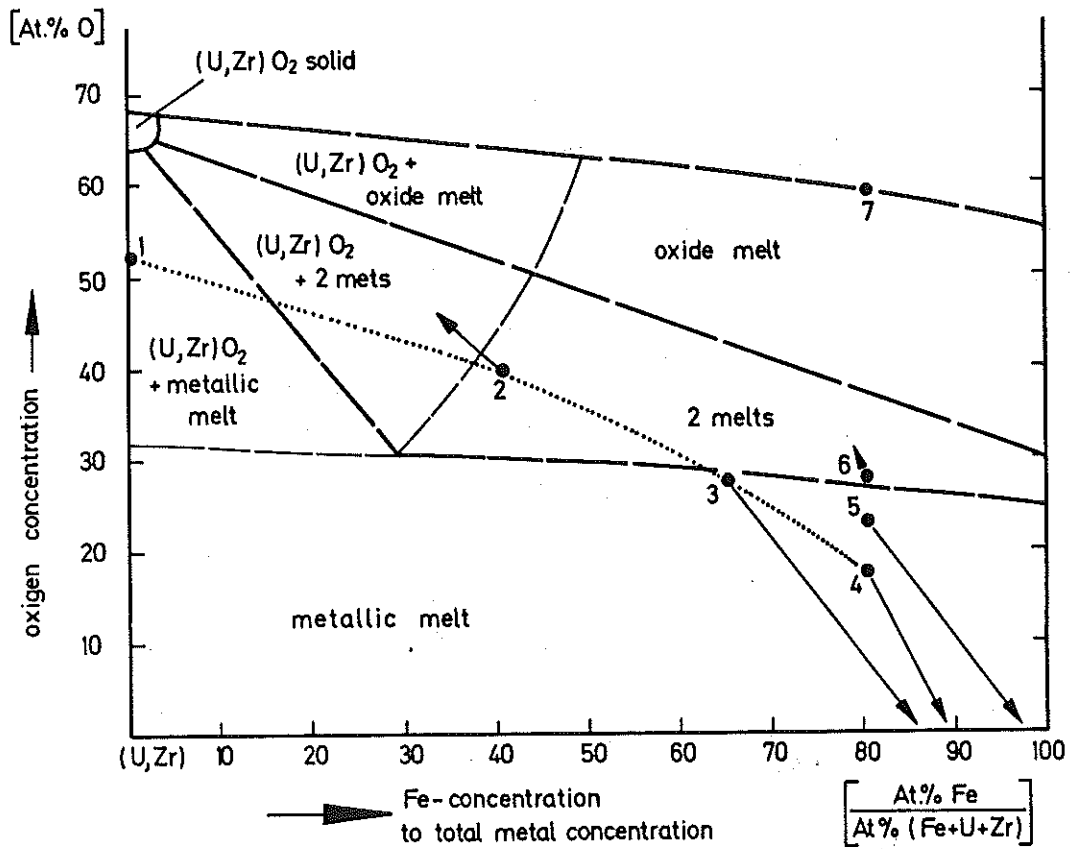


Kuva 4.3. Faasimuutokset LWR:n sydänmateriaalien sulaessa teräskonsentraation ja oksidoitumisasteen funktiona kvalitatiivisesti esitettyinä sekä inertissä (Ar) että oksidoivassa (ilma, vesihöyry) ympäristössä /34/.

Erään U-Zr-Fe-O -systeemin faasidiagramma on esitetty kuvassa 4.4. /Linja 1-2-3-4 esittää faasimuutokset polttoaineen sulaessa inertissä ympäristössä.

Coriumin haihtumista eri faaseissa kuvaavat nuolien pituudet. Kahdesta toiseensa liukenemattomasta sulasta faasista haihtuu noin 5 paino-%, pääosin teräksen komponentteja. Metallisen sulan muodostuessa haihtuu happea, uraania ja zirkoniumia noin 30 paino-%.

Linja 4-5-6-7 kuvaa corium-E:n oksidoitumista, jolloin metallinen sula muuttuu toiseensa liukenemattomien oksidi- ja metallisulien kautta oksidisulaksi (piste 7).



- 1 Fuel rod
- 2 Corium A
- 3 Corium A+E (1:1)
- 4 Corium E₁
- 5 (4+6, 1:1)
- 6 Corium E₂ (partly oxidized)
- 7 Corium E₃ (compi. oxidized)

Kuva 4.4. $(\text{U}_{0.55}\text{Zr}_{0.45})\text{-Fe-O}$ -systeemin oletettu faasi-
diagramma 2500°C lämpötilassa /34/.

4.3 Sulan sydänmateriaalin ominaisuudet

4.3.1 Lämpökapasiteetin arviointi

Molaarinen lämpökapasiteetti vakiotilavuudessa on

$$C_V = 3R \quad (4-1),$$

jossa R = kaasuvakio.

Molaarinen lämpökapasiteetti vakio-paineessa on

$$C_P = \frac{\alpha^2 V_M T}{K} + C_V \quad (4-2),$$

jossa α = tilavuuden lämpölaajenemiskerroin ($1/\sqrt{K}$)

K = kompressibiliteetti ($m^2 kg/N$)

T = lämpötila (K)

V_M = moolitilavuus (m^3).

Eri coriumien koostumuksen perusteella on laskettu C_p :n arvot taulukkoon 4.1.

4.3.2 Viskositeetin arviointi

Andraden /44/ mukaan

$$\eta_s = \frac{6.12 \cdot 10^{-4} \sqrt{T_s A}}{3 \sqrt{V_m}} \quad (4-3),$$

jossa η_s = viskositeetti (poise)

T_s = sulamislämpötila (K)

A = atomipaino (g)

V_m = molekyytilavuus (cm^3).

Coriumin viskositeetti voidaan /43, 45/ laskea komponenttien mooliosuuksilla painotettujen viskositeettien keskiarvona

$$\eta_{s, \text{ corium}} = \sum_{i=1}^n V_i \eta_i \quad (4-4).$$

Kahden toiseensa liukenemattoman kerroksen tapauksessa päällimmäinen kerros on ylikuumentunut, ja viskositeetti on laskettava kaavasta

$$\eta(T) = \eta_0 \exp(Q/RT) \quad (4-5),$$

jossa $\eta(T)$ = viskositeetti (poise) lämpötilassa T (K)

η_0 = vakio

R = kaasuvakio

T = lämpötila (K)

Q = viskositeetin aktivaatioenergia

$0.431 T_s^{1.348}$ cal/(g·atomi) /43, 46/.

Lasketut viskositeetit ovat taulukossa 4.1.

4.3.3 Lämmönjohtavuuden arviointi

Lämmönjohtavuuden mittaamista korkeissa lämpötiloissa vaikeuttaa näytteiden käsittely. Taulukon 4.1 arvot on saatu ekstrapoloimalla lineaarisesti mittaustuloksista 1200 K asti käyttäen hyväksi relaatiota

$$\frac{\lambda_{\text{solid}}}{\lambda_{\text{liquid}}}(T_s) = \text{vakio} /43, 45/ \quad (4-6).$$

Taulukko 4.1. Sulan sydänmateriaalin arvioidut ominaisuudet /43/.

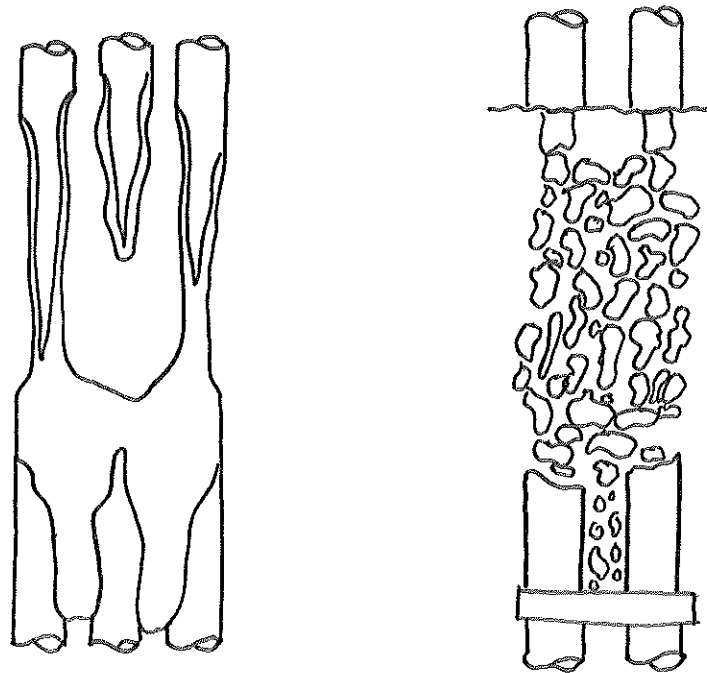
CORIUM MELT TYPE	MELTING POINT (K)	HEAT CAPACITY at the melting point (cal/g K)	VISCOSITY (cP)	THERMAL CONDUCTIVITY (at the melting point) ($\frac{\text{cal}}{\text{cm K sec}}$)
AX1 Metal-Phase	~2275	0.085	3.4 (at ~2675 K)	
Oxide-Phase	~2675	0.071	5.4 (at ~2275 K)	
EX1	~2275	0.129	5.7 (at ~2675 K)	0.049
EX2 Metal-Phase	~1825	0.146	2.1 (at ~2675 K)	0.044
Oxide-Phase	~2675	0.080	5.4 (at ~1875 K)	0.008
EX3	~2075	0.202	5.7 (at ~2675 K)	
			4.3 (at ~2075 K)	

4.4 Sulaneen polttoaineen konfiguraatio

4.4.1 Polttoaine sydänalueella

Jos lämpötila ei nouse yli UO_2 :n, Zr:n, Ni:n ja teräksen eutektisen sulamislämpötilan eikä kuumaa polttoainetta ulospuhalluksen (blowdown) jälkeen äkillisesti jäähdytetä kylmällä hätäjäähdytysvedellä (quenching), reaktorisydän saattaa säilyttää alkuperäisen sauvageometriansa (intact rod geometry) /52/.

Korkeamissa lämpötiloissa sydänalueelle muodostuu koossapysyvä sulaneen sydänmateriaalin kerros (cohesive debris). Reaktiivisuustransientin tai äkillisen jäähtymisen seurauksena polttoainesauvat voivat pirstoutua, jolloin syntyy pirstalekerros (rubble debris) /53/ (kuva 4.5).



Kuva 4.5. Koossapysyvä sydänmassa ja pirstalekerros.

4.4.2 Polttoaine reaktoripaineastian pohjalla

Sulanut polttoaine saattaa tukirakenteiden sulaessa vajota reaktoripaineastian pohjalle, jossa todennäköisesti on vettä /36, 39, 48, 49/. Mahdollinen höyryräjähdys pirstoo polttoaineen 0.1...10 mm halkaisijaisiksi pirstaleiksi /54/.

Corium voi myös esiintyä homogeenisena massana (molten pool) tai kahtena toiseensa liukenemattomana kerroksena, jolloin termohydrauliset olosuhteet muuttuvat /52/.

4.5 Sulan sydänmateriaalin metallurgiset vuorovaikutukset paineastiateräksen kanssa

Reaktoripaineastian pohjalla corium saattaa joutua mekaaniseen kosketukseen paineastiateräksen kanssa, jolloin eutektisen seoksen muodostuminen ja siihen liittyvä sulamislämpötilan aleneminen olisi mahdollinen /36/.

Useilla coriumtyypeillä ja eri paineastiateräslaaduilla tehdyissä kokeissa ei ole havaittu merkittäviä metallurgisia reaktioita eikä eutektista sulamista. Kaikissa tapauksissa paineastiateräs sulaa 1400°C:ssa /38/.

5. MARCH-OHJELMISTO

5.1 Ohjelmiston synty ja käyttö

MARCH (Meltdown Accident Response Characteristics) on kehitetty Yhdysvalloissa Battelle Columbus -laboratoriossa /28/. Kehitystyön rahoitti Yhdysvaltain ydinvalvontaviranomainen, U. S. Nuclear Regulatory Commission, koska sen itsensä teettämä Reactor Safety Study WASH-1400 (1975) /58/ osoitti kevytvesireaktoriensa yleisölle aiheuttaman riskin merkittävimmäksi lähteeksi siihen asti epätodennäköisenä pidetyn sydämensulamisonnettomuuden /28/.

MARCH-ohjelmistoa käytetään Yhdysvalloissa lisääntyvässä määrin analysoitaessa suunnitteluperustaista pahempia ("beyond design basis") /27/ onnettomuusketjuja.

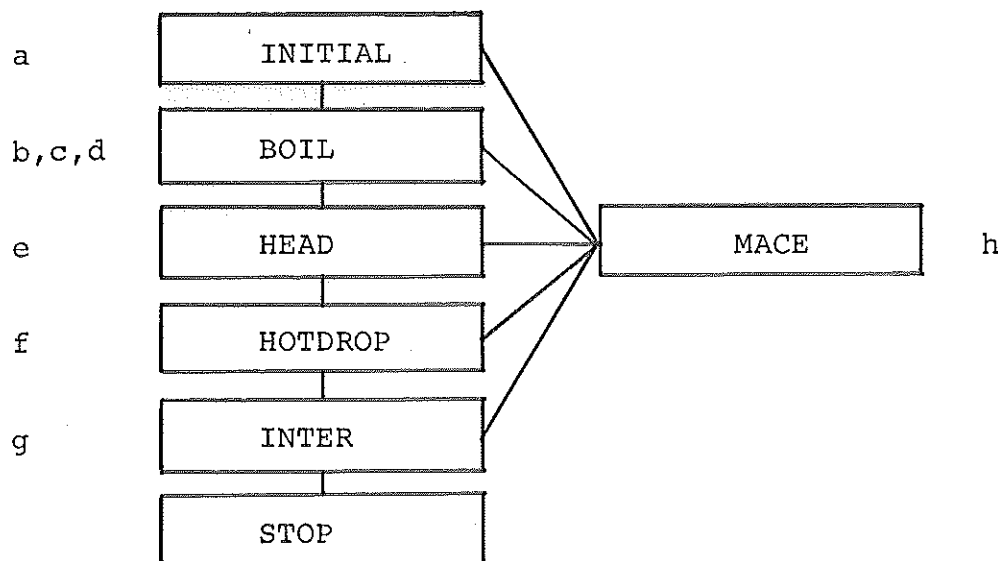
5.2 Ohjelmiston yleiskuvaus

MARCH-ohjelmisto kuvaa kevytvesireaktorilaitoksen vasteita pieniin ja suurin putkirikkoihin (SBLOCA, Small-Break-LOCA; LBLOCA, Large-Break-LOCA) ja transienttionnettomuuksiin, jotka voivat turvalaitteiden pettäessä johtaa reaktorisydämen sulamiseen.

MARCH laskee onnettomuuden etenemisen alkuhetkestä

- a) ulospuhalluksen (blowdown)
- b) sydämen kuumentumisen (core heat-up)
- c) jäähdytteen kiehumisen (coolant boiloff)
- d) sydämen sulamisen (core melting)
- e) paineastian pohjan sulamisen ja puhkeamisen
- f) sulan sydänmassan ja veden vuorovaikutuksen reaktori-
kuilussa
- g) sulan sydänmassan ja betonin vuorovaikutuksen ja
- h) suojarakennuksen vasteen niihin.

Oletettua sulamisonnettomuutta MARCH käsittelee sekvenssiaalisesti kuvan 5.1 osoittamalla periaatteella /28/.



Kuva 5.1. MARCH-ohjelmiston rakenne /28/.

Suojarakennus voidaan jakaa enintään kahdeksaan toisiinsa kytkettävissä olevaan tilaan. Turvalaitteina voidaan käyttää hätäjähdytysjärjestelmää (ECCS), suojarakennuksen suihkujärjestelmää (Containment Spray System) ja jäähdytystä, tilojen välisiä puhaltimia, PWR:ssä jäälauhduttimia, BWR:n paineenalennusaltaita ja hätäjähdytyksen sekä suihkujärjestelmien lämmönvaihtimia.

Analyysi ottaa huomioon vesi-metalli -reaktiot, vetypalon ja lämpöhäviöt suojarakennuksen rakenteisiin.

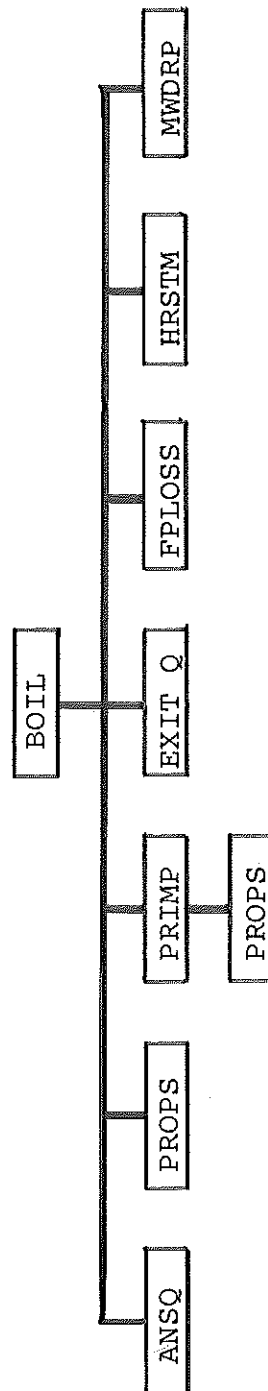
MARCH:issa on 325 lähtötietomuuttujaa, joista 50 on taulukkomuuttujia. Koodin pituus on n. 12000 riviä FORTRAN-käskyjä, ja se on asennettuna VTT:n Cyber 170 -tietokoneelle.

Fysikaalisten prosessien mallintamisessa on pyritty nopea-käyntisyyteen tarkkuuden kustannuksella; esimerkiksi ison BWR-LOCA:n simulointi ilman hätäjähdytystä 17 cm:n betoniin tunkeutumiseen asti vastaa 210 min onnettomuuden alusta ja kestää Cyber 74:llä alle 70 CPUs ja Cyber 73:lla alle 200 CPUs /28/.

Ohjelmisto on varsin puutteellisesti dokumentoitu. Tämän vuoksi eri käyttäjät saattavat saada varsin erilaisia tuloksia samalle laitokselle lähtötietojen erilaisuuden vuoksi.

5.3 Primääripiiriä simuloiva BOIL-ohjelmisto

BOIL-ohjelmisto ja siihen liittyvät aliohjelmat (kuva 5.2) analysoivat primääripiirin tapahtumia ja olosuhteita sydämen kuumenemisen ja sulamisen aikana. Kun sydän romahtaa paineastian pohjalle ja pohja kiehuu kuivaksi, olosuhteet lasketaan HEAD-ohjelmistolla.



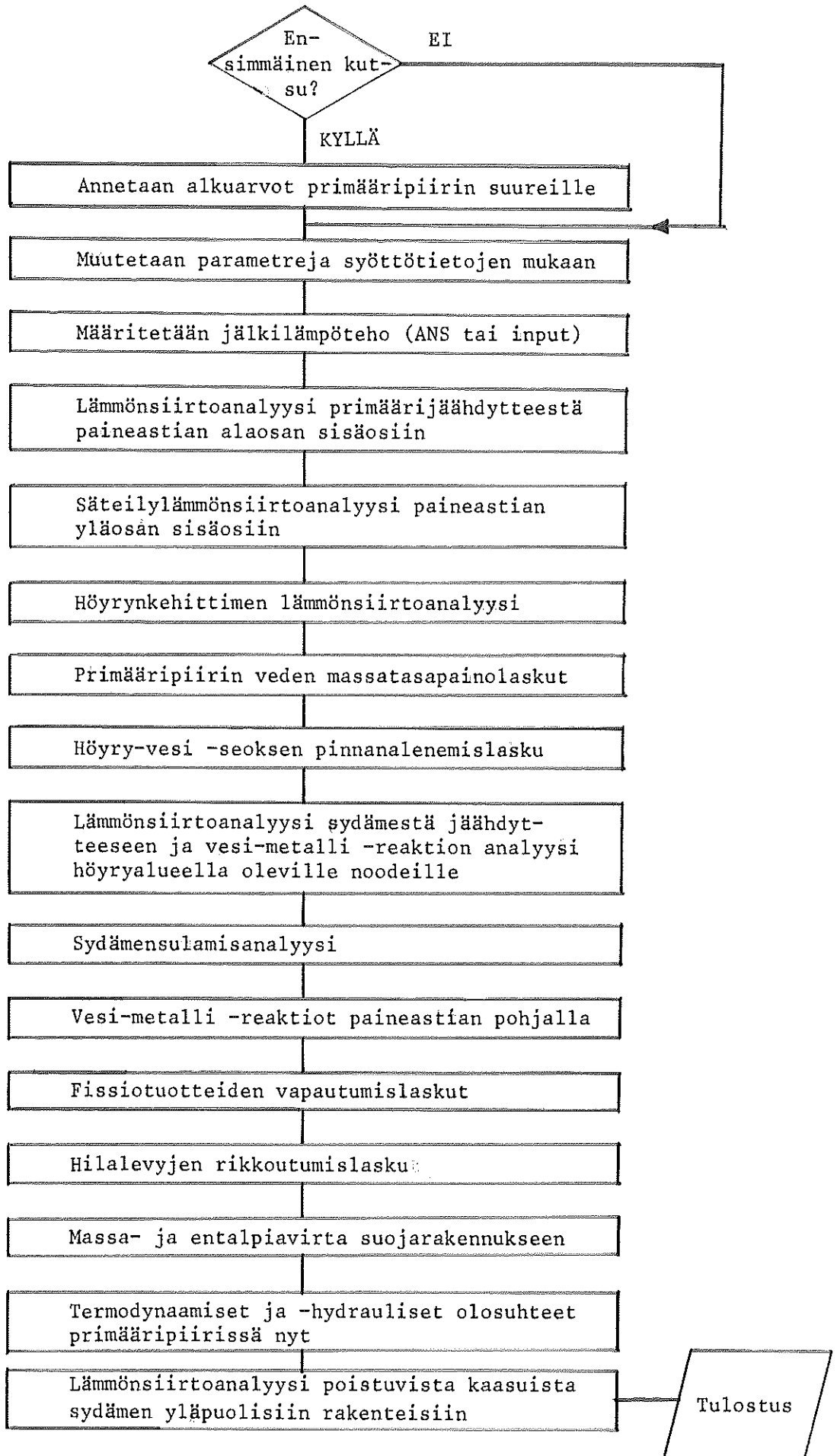
Kuva 5.2. BOIL:in aliohjelmien rakenne /28/.

BOIL on alunperin kehitetty Reactor Safety Study:a /58/ varten erillisenä ohjelmistona. MARCH:iin kytketyn BOIL:in joitakin malleja on parannettu alkuperäisestä versiosta.

Kuva 5.3 havainnollistaa laskennan etenemistä. Oleellisimmat vaiheet ovat:

- 1) primääripiirin suureille annetaan alkuarvot syöttötiedoista ja lasketaan joitakin alustavia laskuja
- 2) muutetaan joitakin parametreja syöttötietojen edellyttämällä tavalla (kuten aika-askel, murtuman pinta-ala ja korkeus, RESTART-parametri jne.)
- 3) määritetään jälkilämpöteho
- 4) analysoidaan lämmönsiirto primäärijäähdytteestä paineastian alapään sisäosiin
- 5) simuloidaan höyrynkehittintä
- 6) lasketaan sydänalueen aukko-osuus ja höyry-vesi -seoksen pinnankorkeus
- 7) analysoidaan lämmönsiirtomekanismi sydänalueessa
- 8) lasketaan vesi-metalli -reaktioiden massa- ja energiatasapainovaikutukset
- 9) lasketaan sulan sydänmateriaalin osuudet noodeissa
- 10) määritetään fissiotuotteiden vapautumisosuudet (aliohjelmassa FPLOSS)
- 11) tarkistetaan, ovatko alahilalevyt pettäneet
- 12) lasketaan primäärijärjestelmän vuotonopeudet (transientin ja pienen putkimurtuman tapauksessa aliohjelmassa PRIMP)
- 13) lasketaan primääripiirin paine
- 14) analysoidaan sydänalueen yläosasta poistuvien kaasujen ja sydämen yläpuolisten rakenteiden välinen lämmönsiirto
- 15) tulostetaan primääripiirin nykytilaa kuvaavata BOIL:in parametrit.

BOIL:ia varten sydänalue jaetaan enintään 50 aksiaaliseen ja 10 radiaaliseen vyöhykkeeseen, jotka yhdessä muodostavat enintään 500 tilavuusalkiota eli noodia. Kullekin noodille



Kuva 5.3. BOIL:in laskujen lohkokaavio /28/.

lasketaan lämmöntuotto, lämpötasapaino polttoaine- ja jäähdystenoodin välillä, höyry-vesi -seoksen pinnankorkeus ja höyryn poistumisnopeus sekä sulaminen silloin, kun noodin lämpötila ylittää sydänmateriaalin sulamislämpötilan.

5.3.1 Reaktorisydämen lämmönsiirtomallit

BOIL:in reaktorisydämen lämmönsiirtomallit ottavat huomioon

- 1) konvektiivisen lämmönsiirron polttoainesauvoista veteen tai höyryyn,
 - 2) säteilylämmönsiirron polttoainesauvoista höyryyn ja veden alta paljastuneista noodeista sydämen yläpuolisiin rakenteisiin tai noodien alapuoliseen veteen ja
 - 3) lämmönsiirron sammutettaessa (quenching) romahtanutta sydänmassaa ja uudelleen veden alle joutuneita noodeja.
- Seuraavassa kuvaillaan vain sydänalueen sisäisten lämmönsiirtomekanismien malleja.

Sydän on jaettu kahteen lämmönsiirtoalueeseen: kaasumaisen (höyry ja vety) jäähdytteen ja höyry-vesi -seosjäähdytteen alueeseen. Kaasumaisen jäähdytteen alueella lämmönsiirto polttoainesauvoista kaasuun lasketaan käyttäen tehollista lämmönsiirtokerrointa h siten, että

$$Q_C = h (T_R - T_G) \quad (5-1),$$

jossa T_R = polttoainesauvan pintalämpötila (K)
 T_G = kaasun lämpötila (K).

$$h = h_c + h_{rad} \quad (5-2),$$

jossa h_c = konvektiivinen lämmönsiirtokerroin ($W/m^2/K$)
 h_{rad} = säteilylämmönsiirtokerroin ($W/m^2/K$).

h_c :ksi valitaan suurempi h_{CD} :stä ja h_{nat} :sta; h_{CD} lasketaan yksinkertaistetusta Dittus-Boelterin korrelaatiosta /59/ ja h_{nat} on luonnollisen konvektion lämmönsiirtokerroin.

$$h_{CD} = 0.0144 C_p G^{0.8} / D^{0.2} \quad (5-3),$$

jossa C_p = kaasun ominaislämpö (Btu/lb/F)
 G = kaasun massavirran tiheys (lb/hr/ft²)
 D = kanavan ekvivalentti halkaisija (ft).

$$C_p = \frac{\dot{M}_s C_{ps} + \dot{M}_H C_{pH}}{\dot{M}_s + \dot{M}_H} \quad (5-4),$$

jossa \dot{M}_s, \dot{M}_H = höyryn ja vedyn syntymisnopeudet sydänelueessa (lb/h)

C_{ps}, C_{pH} = höyryn ja vedyn ominaislämmöt sydänelueessa (Btu/lb/F).

$$C_{ps} = 0.43 + 0.8 \frac{T_G}{10000} \quad (5-5),$$

$$C_{pH} = 3.4 + 0.11 \frac{T_G}{1000}, \text{ kun } T_G \leq 1000 \quad (5-6),$$

$$= 3.26 + 2.48 \frac{T_G}{10000}, \text{ kun } T_G \geq 1000$$

$$G = \frac{\dot{M}_H + \dot{M}_s}{A_{core}} \quad (5-7),$$

jossa A_{core} = sydämen virtauspinta-ala (m²).

$$h_{nat} = 0.095 (T_R - T_G)^{1/3} \quad (5-8).$$

Oletetaan, että polttoainesauva säteilee vain höyryyn:

$$h_{rad} = 17.3 \cdot 10^{-10} (\epsilon_{SR} T_R'^4 - \epsilon_{SG} T_G'^4) / (T_R' - T_G') \cdot (1 + \epsilon_R) / 2 \quad (5-9),$$

Btu/hr/ft²/F

missä ϵ_{SR} = höyryn emissiviteetti lämpötilassa T_R'

ϵ_{SG} = höyryn emissiviteetti lämpötilassa T_G'

ϵ_R = polttoainesauvan emissiviteetti

T_R' = polttoainesauvan lämpötila (°R)

T_G' = höyryn lämpötila (°R).

Höyryn emissiviteetit ilmaistaan optisen paksuuden (optical thickness) arvolla PD_h , jossa P on paikallinen höyryn osapaine virtauskanavassa ja D_h on sen hydraulinen halkaisija. Pienillä

paineen arvoilla (kuten suuren LOCA:n tapauksessa) McAdamsin tulokset /59/ osoittavat, että optinen paksuus ja emissiviteetti ovat pieniä, ja säteilylämmönsiirto voidaan jättää huomiotta. Samoin jos kaikki kaasu kanavassa on vetyä, säteilylämmönsiirto on olematonta. Korkeissa paineissa (kuten transienttitapauksissa) höyryn emissiviteetistä ei ole kokeellista tietoa. Ekstrapoloimalla matalapaineisista tuloksista saadaan korkeissa paineissa korkeita emissiviteetin arvoja. Joissakin tapauksissa säteilylämmönsiirtokertoimet voivat olla kertaluokkaa suurempia kuin konvektiiviset lämmönsiirtokertoimet.

Veden tai höyry-vesi -seoksen peittämissä noodeissa käytetään vakio­lämmönsiirtokerrointa, jonka käyttäjä antaa suurten putkimurtumien tapauksessa. Muissa tapauksissa se lasketaan ajon alussa kaavasta

$$h_B = \frac{Q_D}{(T_{ci} - T_{wi}) A_f} \quad (5-10)$$

jossa h_B = lämmönsiirtokerroin
 Q_D = reaktorisydämen termien teho
 T_{ci} = " keskimääräinen lämpötila
 T_{wi} = jäähdytysveden lämpötila
 A_f = kostutettu polttoainesauvan pinta-ala.

Lämpöä voi myös säteillä paljastuneista noodeista paineastian sisäosiin sydänalueen yläpuolelle ja sydämen sisällä tai sen alapuolella olevaan veteen:

$$Q_{rad} = 0.173 F A_R \{ (T_{RO}/100)^4 - (T_O/100)^4 \} \quad (5-11),$$

jossa Q_{rad} = säteilylämmönsiirto (Btu/hr)
 A_R = säteilevä pinta-ala (ft²)
 T_{RO} = säteilevän noodin lämpötila (°R)
 T_O = vastaanottavan noodin lämpötila (°R)
 F = näkyvyyskerroin.

Käyttäjä antaa F :n arvon. Säteilylämmönsiirrolle paljastu-
neiden noodien alapuoliseen veteen käytetään vakioarvoa 0.5.
 A_r on kyseisen radiaalivyöhykkeen poikkileikkauspinta-ala.
Kokonaissäteilylämpömäärä saadaan laskemalla yhteen Q_{rad} :it
koko sydämen poikkipinta-alalta. Säteilylämmönsiirrolle
sydäimestä veteen T_{RO} :ille annetaan ensimmäisessä veden-
pinnan yläpuolella olevassa noodissa vallitseva lämpötila.
Säteilylämmönsiirrolle sydämen yläpuolisiin rakenteisiin
 T_{RO} :n arvot saadaan sydänelueen ylimmällä tasolla olevien
noodien lämpötiloista.

BOIL:issa on mallit veteenputoavan sulan sydänmassan
sammuttamiselle (äkilliselle jäädyttämislle; quenching)
ja uudelleen veden alle joutuneiden kuumentuneiden poltto-
ainesauvojen sammuttamiselle (hätäjäähdytysvedellä tai
höyry-vesi -seoksella). Sammutusnopeudeksi valitaan minimi
kiehumislämmönsiirtokertoimella ja aikavakiolla τ saaduista
arvoista:

$$QB1 = h_B A (T_{ROD} - T_{POOL}) \Delta t \quad (5-12),$$

$$QB2 = M C (T_{ROD} - T_R) \Delta t / \tau \quad (5-13) \text{ ja}$$

$$QB3 = \rho_L V_L h_{fg} (1 - \alpha) \Delta t / \tau \quad (5-14),$$

jossa h_B = kiehumislämmönsiirtokerroin (Btu/hr/ft²/F)
 A = noodin lämmönsiirtopinta-ala (ft²)
 MC = noodin lämpökapasiteetti (Btu/F)
 ρ_L = veden tiheys (lb/ft³)
 h_{fg} = höyrystymislämpö (Btu/lb)
 V_L = noodin vesitilavuus (ft³)
 T_{ROD} = polttoainenoodin lämpötila (F) (edell. aika-ask.)
 T_R = tasapainolämpötila (F) (5-1:stä, kun Q_D = jälki-
lämpöteho noodissa)
 Δt = aika-askel (min)
 τ = aikavakio (min)
 α = paikallinen aukko-osuus.

$QB2$ on se varastoituneen energian muutos, joka saadaan
sammuttamalla jälkilämpö- tai tasapainolämpötasolle. $QB3$ on

lämpö määrä, joka tarvitaan höyryttämään lähinnä noodia olevan jäädytyskanavan vesi. Aikavakion arvolla $\tau = 1.0$ min QB2 ja QB3 tavallisesti määräävät sammutusnopeuden.

Kaasualueessa olevan noodin lämpötila yleensä nousee, koska kaasun virtaus ei siirrä jälkilämpöä tehokkaasti pois. Yleistetty polttoainesauvanoodilämpötasapaino kaasualueessa on

$$\text{RHOCU} \cdot V_R \frac{\delta T_R}{\delta t} + \dot{F}_{\text{melt}} \lambda \rho V_R = Q_{D,R} + Q_{\text{MW}} + Q_{\text{melt}} - Q_{\text{rad}} - h A (T_R - T_G) \quad (5-15),$$

jossa V_R = noodin tilavuus (ft^3)
 RHOCU = noodin lämpökapasiteetti yksikkötilavuutta kohti ($\text{Btu}/\text{ft}^3/\text{F}$)
 \dot{F}_{melt} = aikayksikössä sulaneen noodin osan suhteellinen osuus
 λ = noodimateriaalin muodostumislämpö (Btu/lb)
 ρV_R = sydänmateriaalin massa noodissa (lb)
 $Q_{D,R}$ = jälkilämpöteho noodissa (Btu/hr)
 Q_{MW} = vesi-metalli -reaktion lämmöntuotto (Btu/hr)
 Q_{melt} = lämpö määrä, joka lisätään noodin sulamisen ja romahtamisen aikana (Btu/hr)
 Q_{rad} = säteilylämmönsiirtohäviöt (Btu/hr)
 h = yhtälöstä (5-2)
 T_G = kaasun lämpötila noodissa (F).

Kaasun lämpötilan nousu kanavassa saadaan yhtälöstä

$$m C_p \frac{\delta T_G}{\delta Z} = h p (T_R - T_G) \quad (5-16),$$

jossa m = kaasun kokonaismassavirta (lb/hr)
 Z = etäisyys kanavan alapäästä (ft)
 p = polttoainesauvan piiri (ft).

Veden tai höyry-vesi -seoksen peittämällä alueilla yleinen polttoainesauvanoodilämpötasapainoyhtälö on

$$Q_{D,R} + Q_{\text{melt}} = h_B A (T_R - T_W) \quad (5-17),$$

missä h_B on joko syöttötieto tai lasketaan yhtälöstä (5-10).

Jos paljastunut noodi joutuu uudelleen hätäjähdytysveden tai höyry-vesi -seoksen peittämäksi, polttoainenoodin lämpötilaksi otetaan maksimi yhtälöstä (5-17) ja (5-12), (5-13) ja (5-14) lasketuista arvoista.

5.3.2 Primääripiirin massa- ja energiatasapainomallit

Primääripiirissä onnettomuuden alussa oleva vesimäärä annetaan syöttötietona. Onnettomuuden aikana primääripiiriin voi tulla vettä hätäjähdytysjärjestelmän kautta ja poistua sieltä rikkoutuneiden putkien tai ylipaineventtiilien kautta joko höyrynä tai vetenä. Höyryä voi kulua myös vesi-metalli -reaktioon suojakuoren zirkoniumin kanssa, jolloin syntyy ZrO_2 :a ja H_2 :ä.

Primääripiiriin veden ja höyryn massatasapainoyhtälö onnettomuuden aikana on

$$WM = WMO + (WECC - WLBRK - WSBRK - DWS + SGDWS) \Delta t \quad (5-18),$$

jossa WM = primääripiirin veden ja höyryn massa

WMO = " " " "

edellisen aika-askeleen lopussa

WECC = hätäjähdytyksen ruiskutusnopeus

WLBRK = vedenmenetyksenopeus murtumien ja/tai venttiilien kautta

DWS = vesi-metalli -reaktioiden höyrynkulutus

SGDWS = höyrygeneraattorista tuleva lauhdevesi

Δt = aika-askel

WLBRK ja WSBRK lasketaan aliohjelmassa PRIMP transientin ja ja pienten putkirikko-onnettomuuksien tapauksessa. Suuren putkirikon tapauksessa BOIL käynnistyy ulospuhallusvaiheen jälkeen, ja WLBRK ja WSBRK lasketaan BOIL:issa.

Vesi voi höyrystyä primääripiirissä kiehumisen ja kuohahtamisen seurauksena. Höyrygeneraattorissa höyry voi tiivistyä.

Veden kiehumista koskevat lämmönsiirtomekanismit on käsitelty kohdassa 5.3.1, ja höyrykehittymisnopeus M_s esitetään yhtälössä (5-20).

Vesi kuohahtaa höyryksi, mikäli primääripiirin paine äkillisesti laskee veden ollessa saturaatiopisteessä. Kuohahdushöyryyn kehitysnopeus saadaan kaavasta

$$WFLASH = \frac{WM C_p (T_{sold} - T_{snew})}{h_{fg} \Delta t} \quad (5-19),$$

jossa C_p = veden ominaislämpö
 T_{sold} = veden kyllästyslämpötila ennen paineenpudotusta
 T_{snew} = " " " " paineenpudotuksen jälkeen
 h_{fg} = veden höyrystymislämpö lämpötilassa T_{snew} .

Laskennallisista syistä kuohahdushöyrykehitysnopeus on rajoitettu 5 %:iin aika-askelta kohti.

Höyryyn tiivistyminen höyrykehittimen primääripiirissä voidaan määritellä lähtötiedoissa. Tiivistymisnopeus SGDWS lasketaan kohdassa 5.3.4 käyttäen yhtälöä (5-30). Käyttäjä määrittelee, kiertääkö lauhde primääripiirissä vai menetetäänkö se.

Veden peitossa olevien sydämen osien tuottama lämpö voi nostaa veden kyllästyslämpötilaan ja keittää sen:

$$Q_{cT} = \frac{m_w C_{pW} (T_{sat} - T_w) + m_s h_{fg}}{\Delta t} \quad (5-20),$$

jossa Q_{cT} = veteen siirtynyt kokonaislämpömäärä
 m_w = sydänelueessa olevan veden kokonaisuudessa
 C_{pW} = veden ominaislämpö
 T_{sat} = veden kyllästymislämpötila
 T_w = veden lämpötila edellisessä aika-askeleessa, $\leq T_{sat}$
 m_s = höyrykehitysnopeus sydämessä
 h_{fg} = veden höyrystymislämpö lämpötilassa T_{sat} .

Jos (5-20):n oikean puolen ensimmäinen termi $\geq Q_{CT}$, $m_s = 0$, ja (5-20):n avulla lasketaan veden uusi lämpötila T_{Wnew} , jolla korvataan T_{sat} . T_{sat} on veden kyllästymislämpötila primääripiirin kokonaispaineessa.

Kokonaislämmönlisäys primääripiirin veteen koostuu lämmönlisäyksistä sydämessä, paineastian alaosan rakenteissa ja höyrykehittimessä. Jäähdytteen vuoto ja hätäjähdytysveden ruiskutus aiheuttavat myös osaltaan energianmuutoksia veden kokonaisentalpiaan. Veden energiatasapainoyhtälö on

$$Q_{CT} = Q_{DK} + Q_B + Q_{RAD} + Q_{SLAB} - Q_{SG} - WECC (HL' - HECC) - WLBRK (HL' - HL) + SGDWS (HCON - HL) \quad (5-21),$$

jossa Q_{DK} = höyry-vesi -seoksen peittämien noodien jälkilämpöteho

Q_B = yhtälöt (5-12)...(5-14)

Q_{RAD} = " (5-11)

Q_{SLAB} = " (5-48)

Q_{SG} = " (5-30)

HL' = uusi veden ominaisentalpia

HL = vanha veden ominaisentalpia

$HECC$ = hätäjähdytysveden entalpia

$HCON$ = lauhteen entalpia.

5.3.3 Höyry-vesi -seoksen pinnankorkeusmalli

BOIL:in laskema nestepinnan korkeus määritellään

$$YLIQ = WMASS / (RHOL \cdot ATOT) \quad (5-22),$$

jossa $ATOT$ on veden kokonaispoikkileikkauspinta-ala aktiivisella sydänavalueella. $WMASS$ on sydänavaluen alareunan yläpuolella oleva vesimäärä. Kun laskettu $YLIQ$ on sydänavalueella, $YLIQ$ on laskeutunut vedenpinta, jonka nollassa on sydänavaluen alareuna. Kun $YLIQ$ on sydänavaluen ulkopuolella, se on keinotekoinen parametri, sillä todellisessa reaktorissa $ATOT$ vaihtelee korkeuden funktiona.

Kun sydänalueella kiehuu, seoksen pinnankorkeus lasketaan olettaen aukko-osuuden muuttuvan lineaarisesti korkeuden funktiona. Höyrystymisnopeus \dot{M}_s riippuu faasien nopeuserosta V ja sydämen keskimääräisestä aukko-osuudesta ALF yhtälön

$$\dot{M}_s = \text{RHOS} \cdot \text{ACOR} \cdot V \cdot (2 \cdot ALF) \quad (5-23)$$

mukaan. Huomaa, että $2 \cdot ALF$ on aukko-osuus seoksen yläpäässä. Wilsonin /60/ korrelaatiot nopeuserolle ja aukko-osuudelle ovat BOIL:in laskennan pohjana. Sliferin ja Henchin /61/ suosituksen mukaan miniminopeudeksi on määriteltä 1 ft/s. Wilsonin korrelaatio on

$$V = \left\{ \frac{ALF}{0.75} \frac{1}{H F} \right\}^{0.78} \left\{ \text{DH} F^{0.19} \cdot 33.2 \right\}^{0.5} \text{ ft/s} \quad (5-24)$$

$$\text{jossa } H = \left\{ \frac{\text{RHOS}}{\text{RHOL} - \text{RHOS}} \right\}^{0.32} \quad (5-25)$$

$$F = \left\{ \frac{1}{\text{DH}} \left(\frac{\text{SIG}/32.2}{\text{RHOL} - \text{RHOS}} \right)^{0.5} \right\}^{0.19} \quad (5-26)$$

$$\text{SIG} = 8.33 \cdot 10^{-6} (705 - \text{TSAT}) \quad (5-27)$$

DH = hydraulinen halkaisija, ft

TSAT = kyllästymislämpötila, F.

Kohonnut seoksen pinnankorkeus on

$$\text{YM} = \text{YLIQ} / (1.0 - ALF) \quad (5-28)$$

jos seoksen pinnankorkeus on sydänalueella ($\text{YM} < H$).

Jos pinnankorkeus on sydänalueen yläpuolella, vain sydänalueen kohoaminen on mallitettu:

$$\text{YM} = \text{YLIQ} + H \cdot ALF \quad (5-29)$$

kun $\text{YM} > H$, jossa H on sydämen korkeus.

Seoksen peitossa olevat noodit siirtävät lämpöä veteen ja ovat siis riittävästi jäädytettyjä. Seoksen yläpuolella

olevien noodien oletetaan olevan höyryalueella. Höyryvirtauksen ei oleteta sekoittavan nestepisaroihin.

5.3.4 Höyrynkehittimen lämmönsiirtomalli

BOIL:in höyrynkehittimen malli sallii joko veden jäähtymisen tai höyryn tiivistymisen. Veden jäähtymistä varten malli määrittää aluksi lämmönsiirtokertoimen H_1 alkuperäisten käyttöarvojen avulla:

$$H_1 = QZERO / (A \Delta T_1),$$

jossa $QZERO$ = alkuperäinen reaktorin termien teho (Btu/min)
 A = höyrynkehittimen lämmönsiirtopinta-ala (ft²)
 ΔT_1 = alkuperäinen primääri- ja sekundääripiirin lämpötilaero (F).

Lämmönsiirtonopeutta QSG ekstrapoloidaan kaavalla

$$QSG = FSG \cdot H_1 \cdot (\Delta T / \Delta T_1)^{1/2} \cdot A \cdot \Delta T \quad (5-30),$$

jossa ΔT on lämpötilaero ko. aika-askeleella. Kerroin FSG korjaa tehollisen lämmönsiirtopinta-alan muutokset primääri- ja sekundääriveden määrän vaihdellessa. FSG on minimi suhteesta (WTRSG/FULSG) tai termista, joka on verrannollinen (YLIQ - YLEG):iin. FULSG on sekundääripuolen vesisisältö alkuhetkellä ja YLEG on syöttötietona annettu luku. Termiä (YLIQ - YLEG) käytetään simuloitaessa primääriveden vuotoa höyrynkehittäimestä.

Sekundääripiirin lämpö- ja massatasapaino ottaa huomioon sekä kiehtuksen että syöttöveden lisäyksen. Sekundääripiirin paine annetaan syöttötietona. Sekundääripiirin ylipaineventtiileitä ei ole eksplisiittisesti mallitettu, mutta niiden oletetaan olevan riittävän suurina päästääkseen lasketun kiehtus- höyryn ulos.

Syöttötiedoissa määritellyinä aikoina höyrynkehitin voi tiivistää höyryä primääripiirin höyrytilavuudesta, esimerkiksi pumpattaessa kylmää hätäsyöttövettä höyrynkehittimen

yläpäältä sisään. Tiivistymisnopeus on

$$\text{SGDWS} = \text{FS} \cdot \text{STM} / \text{DTM} \cdot \{1 - (\text{PSG} + \text{PRES}) / (2\text{PRES})\} \quad (5-31),$$

jossa DTM = aika-askel (min)

FS = höyryn mooliosuus

STM = primääripiirin höyryn massa (lb)

PSG = (syöttötiedoissa annettu) sekundääripiirin
paine (psia)

PRES = primääripiirin paine (psia).

Malli tiivistää höyryä primääripiiristä, kunnes sen höyryn osapaine on yhtä suuri kuin sekundääripiirin höyryn osapaine. Tiivistynyt höyry voidaan palauttaa paineastian veteen tai olettaa sen jäävän höyrykehittimen pohjalle.

BOIL:in höyrykehittimen malli antaa yleensä suuria lämmön- siirtokertoimen arvoja. Näin ollen primääriveden lämpötila seuraa yleensä tiiviisti sekundääriveden lämpötilaa edellyttäen, että primääri- ja sekundääriveden pinnankorkeus pysyy riittävänä.

5.3.5 Sydämen sulamismalli

BOIL:issa on kolme mallia, joiden avulla arvioidaan sydämen sulamisen vaikutusta sydämen kuumenemiseen. Mallit eivät ole fenomenologisia siinä mielessä, että sydämen romahtaminen ei perustu jännityksen, virumisen eikä sulan materiaalin virtausnopeuden laskemiseen. Polttoaine vahingoittuu, kun noodit saavuttaa sydämen sulamislämpötilan ja absorboi muodostumis- lämpöä (heat of fusion) vastaavan energiamäärän. Sydämen- sulamismallit A ja B olettavat polttoaineen pysyvän sulaneena jatkuvana vyöhykkeenä sydänalueessa, ja malli C olettaa sulaneen polttoaineen romahtavan paineastian pohjalle. Laskut osoittavat, että mallien erilaiset olettamukset johtavat huomattaviin sydämen kuumenemiseroihin kiehutusnopeuden ja suojaakuori-vesi -reaktion riippuessa voimakkaasti mallista.

Koska reaktorin teho piikittyy sydänalueen keskiosaan ja suojaakuori-vesi -reaktio lisää kuumimpien alueiden kuumenemisnopeutta entisestäänkin, sydämen sulaminen alkaa tavallisesti

sydämen keskiosasta tai hiukan sen yläpuolelta jäädytteenmenetysonnettomuuksissa. Tehon piikittymisen ja sydänalueen pohjalla olevan veden vuoksi sydämen lämpötilan 30 cm sulaneen alueen alapuolella lasketaan tavallisesti olevan 540 K polttoaineen sulamislämpötilan alapuolella. Näissä suhteellisen viilleissä alueissa UO_2 voi pysyä kiinteässä muodossa, vaikka suojakuori sulaisikin. Koska polttoainesauvat ovat varsin tiiviisti pakattuja, polttoainetabletit kiinteässä olomuodossaan eivät mahdu putoamaan sydänalueesta. Sydämen kiinteiden osien vääntymisen ei ole laajalti mahdollista. Sulan polttoaineen alapuolelle uskotaan syntyvän kiinteän murskan (rubble) vyöhyke; sulan polttoaineen oletetaan pysyvän sydämessä. Kuitenkin murska kehittää jatkuvasti lämpöä ja lopulta sulaa, ja jatkuvasti suureneva sula vyöhyke liikkuu alaspäin. Jos sul vyöhyke liikkuu alaspäin riittävän nopeasti, se kohtaa sydänalueen pohjalla kiehuvan veden. Tällöin joko tapahtuu höyryräjähdys tai höyrykehitysnopeus kasvaa ja lisää myös suojakuori-vesi-reaktion nopeutta. Kun sulaneen vyöhykkeen laajuus saavuttaa 50...80 % koko sydämen koosta, on kyseenalaista, voiko sula pysyä sydänalueen sisällä. Tässä vaiheessa tyypillisessä 1000 MW:n reaktorissa sulan vyöhykkeen paksuus on 0,9...1,2 m, ja sitä oletettavasti kannattaa murskakerros. Tukihilalevyihin ja vaippoihin kohdistuu suuri lämpökuorma. Näiden rikkoutuminen johtaisi sulan vyöhykkeen romahtamiseen paineastian pohjalle, jolloin joko jäljellä oleva vesi kiehuisi ulos paineastiasta tai syntyisi höyryräjähdys.

Sydämensulamismallissa A oletetaan, että se lämpömäärä, jota ei tarvita pitämään sulaa vyöhykettä sulana, siirtyy alaspäin. Konvektiota ylös tai sivuille ei ole. Fysikaalisesti tämä merkitsee sulan vyöhykkeen tunkeutumista allaan olevien kiinteiden vyöhykkeiden läpi, eli sulamismekanismia, jossa sula vyöhyke peittää kiinteän vyöhykkeen ja sekoittuu siihen liikkueessaan alaspäin sillä rajanopeudella, jolla homogeeninen sula seos pysyy juuri sulamislämpötilassaan. Tämä malli maksimoi sulan vyöhykkeen liikkumisen alaspäin. Oletusten mukaan sula vyöhyke jähmettyisi uudelleen, mikäli se liikkuisi alaspäin nopeammin; samoin oletetaan, että sulaan vyöhykkeeseen ei putoa ylhäältä päin kiinteitä sydänmateriaalia.

Sydämensulamismallissa B oletetaan, että sulan vyöhykkeen ylijäämälämpö siirtyy kokonaan ylöspäin. Sulassa vyöhykkeessä lämpö voi siirtyä radiaalisesti, mikäli radiaalisen teho-vyöhykkeen keskilämpötila ylittää sulamislämpötilan. Ylöspäin siirtynyt lämpö sulattaa kinteää sydänmateriaalia, jota oletetaan putoavan sulaan vyöhykkeeseen siinä määrin, että homogeeniseksi oletettu sula seos pysyy sulamislämpötilassaan. Kun sydämen ylimmät noodit ovat sulaneet, sulan vyöhykkeen jälkilämmön oletetaan säteilevän sydänalueen yläpuolisiin tukirakenteisiin.

Mallin A ja B keskinäisestä paremmuudesta ei voida sanoa mitään varmasti. Mallit antavat hyvin samanlaisia tuloksia 50 % sulaneeseen sydänmassaan saakka, mutta suuremmilla sulan osuuksilla malli A johtaa sydänalueen nopeampaan kuumenemiseen. Sulan vyöhykkeen nopeampi liike alaspäin johtaa mallissa A lisääntyneeseen vesi-metalli -reaktioon sulan kohdatessa veden. Jos oletetaan, että sulamisvaiheessa pieni osa sulaa sydäntä (~ 1 % / aika-askel) putoaa jatkuvasti veteen, mallien tulokset ovat samanlaiset.

Sydämensulamismallissa C oletetaan polttoainenoodin sulaessaan välittömästi putoavan paineastian pohjalle. Noodi sammutetaan (quenching) yhden aika-askeleen aikana ja sen jälkilämpöteho ohjataan veteen. Näillä oletuksilla saadut suuret höyrystymisnopeudet johtavat suuriin suojakuori-vesi -reaktionopeuksiin ja näin ollen nopeaan sydämen kuumenemiseen sulamisen alkuhetken ja veden loppumishetken välisenä aikana. Mallin C ei uskota kuvaavan sulamista realistisesti; se on kehitetty havainnollistamaan sulan materiaalin putoamisen ja sydämessä pysymisen eroa.

5.3.6 Vesi-metalli -reaktion malli

5.3.6.1 Reaktio sydänalueessa

Yli 1250 K lämpötilassa zircaloy-suojakuori voi reagoida eksotermisesti läsnäolevan vesihöyryn kanssa (2-2). Sydänalueen noodit oletetaan niin pieniksi, että niiden lämpötila voidaan ilmaista keskiarvona koko noodissa.

Jokaisessa noodissa vesi-metalli -reaktio on kaksivaiheinen prosessi, jota aluksi säätelee vesihöyryn kaasudiffuusio kuumaa polttoainesauvaa kohti ja vetykaasun diffuusio pois polttoainesauvasta. Polttoainesauvan halkaisijan, oksidoituneen kerroksen paksuuden ja höyryn ja polttoainesauvan lämpötilan määräämänä ajanhetkenä reaktionopeutta alkaa säädellä hapen kiinteän olomuodon diffuusio suoja-kuoreen.

Kaasudiffuusion hallitessa oksidikerroksen paksuuden kasvunopeus on

$$\dot{X}_1 = \frac{1.849 \cdot 10^{-7} \cdot TFILM^{0.68}}{(RP - XO/30.48)^{2.0}} \quad (5-33)$$

Baker-Justin kaasudiffuusiokaavan mukaan /62/.

Kiinteän olomuodon diffuusion hallitessa

$$\dot{X}_2 = \frac{0.03732}{XO} \cdot \exp\left(-\frac{36181.0}{ROD + 460.0}\right) \quad (5-34)$$

Cathcartin mukaan /63/ tai

$$\dot{X}_2 = \frac{0.394}{XO} \cdot \exp\left(-\frac{41220.0}{ROD + 460.0}\right) \quad (5-35)$$

Baker-Justin kiinteän olomuodon diffuusiokaavan mukaan. Syöttötietona annettava parametri valitsee käytettävän kaavan. Yhtälöissä esiintyvät muuttujat ovat:

- $\dot{X}_{1,2}$ = oksidikerroksen paksuuden kasvunopeus (cm/s)
- RP = polttoainesauvan säde (ft)
- XO = oksidoituneen kerroksen paksuus (cm)
- TFILM = polttoainesauvan ja höyryn keskim. lämpötila (K)
- ROD = polttoainesauvan lämpötila (F).

BOIL laskee sekä \dot{X}_1 :n että \dot{X}_2 :n ja käyttää pienempää. Zirkoniumin reaktionopeus on tällöin

Kun noodit putoaa, yleensä osittain oksidoitunut suojakuori voi reagoida edelleen veden kanssa paineastian pohjalla. Reaktioiden määrä lasketaan aliohjelmassa MWDRP, jota BOIL kutsuu aina, kun noodit putoaa. MWDRP:n laskuissa oletetaan, että kaikki pohjalle putoava materiaali on pallonmuotoista. Pallojen halkaisija DCR annetaan syöttötietona. Pallojen lukumäärä NDROP lasketaan noodin kokonaistilavuudesta ja pallon säteestä. Polttoaineen, zirkoniumin ja zirkoniumoksidin tilavuus pallossa lasketaan polttoainesauvan mitoista, niiden lukumäärästä, noodin aksiaaliseen pituudesta, sydämen tilavuusosuudesta siinä sekä NDROP:ista.

Pallojen oletetaan koostuvan sydäimestä, jonka ympärillä on samankeskisesti nolla, yksi tai kaksi kuorta. Kaikkio uraanidioksidi on sydämessä. Sydämessä voi olla myös zirkoniumia ja zirkoniumoksidia, joiden sijainti määritellään seuraavissa syöttötiedoissa:

FZRCOR = zirkoniumin suhteellinen osuus sydämessä
(lopun sijoitetaan kuoreen 1)

FZOCOR = zirkoniumoksidin suhteellinen osuus sydämessä
(lopun sijoitetaan kuoriin 1 ja 2)

FZOS1 = zirkoniumoksidin suhteellinen osuus kuoreen 1
(osuus 1-FZOCOR-FZOS1 sijoitetaan kuoreen 2).

Hapettumista voi esiintyä kaikissa kerroksissa, joissa on jäljellä zirkoniumia, joka ei ole täysin oksidoitunut. Hapettumisrintaman etenemisnopeus oletetaan samaksi kuin puhtaassa zirkoniumissa, eli X on minimi kaasudiffuusionopeudesta X_1 ja kiinteän olomuodon diffuusionopeudesta X_2 , jotka on määritelty kohdassa 5.3.6.1. Käytetty XO :n arvo on kuoren 2 paksuus. Höyryn lämpötila korvataan paineastian pohjalla olevan veden lämpötilalla TPOOL. Lämmöntuotto on yhtälön (5-38) mukainen, mutta jos oksidoitava materiaali ei ole puhtaasta zirkoniumia, lämmöntuotto kerrotaan puhtaan zirkoniumin osuudella seoksessa.

Oksidoitusreaktio lasketaan DO-silmukassa, joka käyttää aika-askelta