

**Erprobung und  
Validierung von  
CFD-Codes für die  
Simulation von unfall-  
typischen Phänomenen  
im Sicherheitsein-  
schluss**

Zwischenbericht GRS-A-3711





Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH

## Zwischenbericht RS1500

Vorhaben RS1500

Erprobung und Validierung  
von CFD-Codes für die  
Simulation von unfall-  
typischen Phänomenen im  
Sicherheitseinschluss

Zwischenbericht RS1500



## **Zwischenbericht RS1500 Progress Report**

Reaktorsicherheitsforschung -  
Vorhabens Nr.:/  
Reactor Safety Research-Project No.:  
RS1500

Vorhabensitel / Project Title:  
Erprobung und Validierung von  
CFD-Codes für die Simulation  
von unfalltypischen Phänome-  
nen im Sicherheitseinschluss

Berichtstitel / Report Title:  
Zwischenbericht RS1500

Autor / Authors:  
B. Schramm  
J. Stewering  
M. Sonnenkalb

Berichtszeitraum / Publication Date:  
Januar 2013

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zu Grunde lie-  
gende F&E-Vorhaben wurde im  
Auftrag des Bundesministeriums für  
Wirtschaft und Technologie (BMWi)  
unter dem Kennzeichen RS1500  
durchgeführt.

Der Bericht gibt die Auffassung und  
Meinung des Auftragnehmers wie-  
der und muss nicht mit der Meinung  
des Auftraggebers übereinstimmen



## Kurzfassung

Zur der Simulation und Beurteilung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitseinschluss eines Kernkraftwerkes erlangen CFD-Simulationstechniken immer stärkere Bedeutung. Bestimmte strömungsmechanische Probleme wie z. B. die Ermittlung von Strömungswiderständen in komplexen Geometrien, Turbulenzberechnung oder die Berechnung von beschleunigten Verbrennungsprozessen von nicht-kondensierbaren Gasen sind nur in Spezialfällen exakt lösbar und mit klassischen lumped parameter Modellen auch nicht immer hinreichend genau abbildbar und sollen daher mit numerischen Methoden approximiert werden. International werden deshalb CFD-Methoden auf Konferenzen wie z. B. der CFD4NRS-Konferenz von einem stetig wachsenden Fachpublikum diskutiert. Auch in Fachzeitschriften wie z. B. Nuclear Engineering and Design nimmt der Anteil von Artikeln mit CFD-Schwerpunkt stetig zu. Weiterhin werden CFD-Tools wie z. B. GASFLOW oder GOTHIC bereits in europäischen Genehmigungsverfahren für Auslegungsrechnungen zukünftiger KKW (EPR, AP1000) angewendet und die Ergebnisse von den Behörden akzeptiert. Aus diesen Gründen ist ein Aufbau von nationalen Kompetenzen zum Thema CFD und die intensive Validierung und Bewertung der vorhandenen Softwaretools von großer Bedeutung.

Im Rahmen des vom BMWi geförderten Projektes RS1500 hat die GRS ihre im Vorgängerprojekt (RS1181) begonnenen Arbeiten zur Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss fortgesetzt. Der vorliegende Zwischenbericht fasst die Arbeiten der ersten zwei der drei Projektjahre zusammen. Vor diesem Hintergrund ist zu beachten, dass einige Arbeiten noch nicht abgeschlossen sind. Inhaltlich widmet sich der Bericht den folgenden Schwerpunkten:

- *Beiträge zur gezielten Erweiterung der Möglichkeiten von CFX und zu seiner Validierung für die Simulation unfalltypischer Phänomene im Sicherheitseinschluss:* Hierbei wurden die Kondensationsmodelle (von GRS, FZJ und ANSYS) weiter validiert und ein neues Kondensatmodell entwickelt. Außerdem wird die Validierung eines neuen Turbulenzmodells beschrieben, welches durch ANSYS in Kooperation mit der Uni Stuttgart entwickelt wurde.
- *Zur Thematik der Ausbildung und Auflösung von Leichtgasschichtungen ( $H_2$ /Dampf/Luft)* wurden weitere Großexperimente nachgerechnet. Weiterhin konnte durch die Analyse experimenteller Daten der THAI-Anlage eine verbesserte Korrelation zur Beschreibung des Abbauverhaltens von AREVA-Rekombinatoren erarbeitet werden. Mit Hilfe der verbesserten Korrelation wurden entsprechende Experimente zur Validierung nachgerechnet. Außerdem wurden Untersuchungen zur Simulation

von H<sub>2</sub>-Verbrennungen mit CFX durchgeführt. Dabei wurden sowohl H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Gemische, als auch inhomogene H<sub>2</sub>-Schichtungen mit seitlichem Venting analysiert.

- *Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX:* Hierzu wurden drei unterschiedliche Experimente mit GASFLOW und CFX nachgerechnet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Dabei wurde insbesondere auch der Einfluss einer gröberen Nodalisierung analysiert.

## Abstract

CFD (Computational Fluid Dynamic) simulation techniques have a growing relevance for the simulation and assessment of accidents in nuclear reactor containments. Some fluid dynamic problems like the calculation of the flow resistances in a complex geometry, turbulence calculations or the calculation of deflagrations could only be solved exactly for very simple cases. These fluid dynamic problems could not be represented by lumped parameter models and must be approximated numerically. Therefore CFD techniques are discussed by a growing international community in conferences like the CFD4NRS-conference. Also the number of articles with a CFD topic is increasing in professional journals like Nuclear Engineering and Design. CFD tools like Gasflow or Gothic are already in use in European nuclear site licensing processes for future nuclear power plants like EPR or AP1000 and the results of these CFD tools are accepted by the authorities. For these reasons it seems to be necessary to build up national competences in the field of CFD techniques and it is important to validate and assess the existing CFD tools.

GRS continues the work for the validation and assessment of CFD codes for the simulation of accident scenarios in a nuclear reactor containment within the framework of the BMWi sponsored project RS1500 (previous project was RS1181). The progress report in hand describes the work of the first two of three project years. Because of this the work is not yet completed. The focus of this report is on the following topics:

- Further validation of condensation models from GRS, FZJ and ANSYS and development of a new condensate model.
- Validation of a new turbulence model which was developed by the University of Stuttgart in cooperation with ANSYS.
- The formation and dissolution of light gas stratifications are analyzed by large scale experiments. These experiments were simulated by GRS.
- The Areva correlations for hydrogen recombiners could be improved by GRS after the analysis of experimental data. Relevant experiments were simulated with this improved recombiner correlation.
- Analyses on the simulation of H<sub>2</sub> deflagration were performed. The simulation of H<sub>2</sub>/steam/air mixtures and also the simulation of inhomogeneous H<sub>2</sub> stratifications with venting are presented.
- Three different experiments were calculated to compare the performance of CFX and Gasflow. The focus of these simulations lies on the influence of coarser grids.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Entwicklung und Validierung eines Modells zur Simulation des bei der Wand- und Volumen Kondensation entstehenden Kondensats (AP 1.1)</b>	<b>3</b>
2.1	Einleitung .....	3
2.2	Vergleich der Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS .....	4
2.2.1	Vergleich der physikalischen Korrelationen .....	4
2.2.2	Vergleich der Implementierungen .....	5
2.2.3	CONAN-Versuche: SARNET Benchmark No. 2 .....	6
2.2.4	THAI-Versuch TH-2.....	22
2.2.5	Zusammenfassung des Modellvergleichs .....	27
2.3	Weitere Validierungen des ANSYS-Modells .....	28
2.3.1	Parameterstudien anhand des TH-2 Experiments .....	28
2.3.2	Modellvalidierung anhand von TH-24 .....	32
2.3.3	Modellvalidierung anhand von Panda4bis .....	33
2.4	Entwicklung eines einfachen Modells zur Behandlung des Kondensates .	37
2.4.1	Prozessbeschreibung.....	37
2.4.2	Ablaufdiagramm für die Wandkondensatbehandlung .....	38
2.4.3	Verifizierung des Kondensatmodells.....	40
2.5	Zusammenfassung und Ausblick.....	42
2.6	Anhang.....	43
2.6.1	Volumenkondensationsmodell der GRS .....	43
<b>3</b>	<b>Validierung eines verbesserten Turbulenzmodells für Strömungsvorgänge im Sicherheitsbehälter (AP 1.2)</b> .....	<b>44</b>
3.1	Einleitung .....	44
3.2	Simulation des Experiments TH-20-2 .....	44
3.2.1	Einleitung .....	44
3.2.2	CFD-Gitter und verwendete Modelle .....	45
3.2.3	Kurze Diskussion der Ergebnisse.....	46

3.3	Nachrechnung des Panda4 Experiments .....	47
3.3.1	Einleitung .....	47
3.3.2	Randbedingungen des Versuchs.....	47
3.3.3	Diskussion der Simulationsergebnisse .....	48
3.3.4	Zusammenfassung.....	53
3.4	Nachrechnung der SETH2 Experimente ST1-4 und ST2-1.....	54
3.5	Zusammenfassung.....	55
<b>4</b>	<b>Simulation des Phänomens der Bildung und Auflösung von Gasschichtungen im Sicherheitsbehälter (AP 1.3) .....</b>	<b>56</b>
4.1	Einleitung und Zielsetzung .....	56
4.2	Nachrechnung des SETH2-Versuchs ST1-4 .....	56
4.2.1	Einleitung .....	56
4.2.2	Beschreibung des Experiments ST1-4 .....	56
4.2.3	Simulation ST1-4 mit CFX .....	59
4.2.4	Gitterstudie.....	60
4.2.5	Konvergenzkriterium und Einfluss des Zeitschritts.....	62
4.2.6	Diffusionskoeffizient .....	65
4.2.7	Turbulenzmodell.....	70
4.2.8	Wärmestrahlung.....	81
4.2.9	Simulation mit dem TSF Turbulenzmodell und dem Multiband- Strahlungsmodell.....	90
4.2.10	Zusammenfassung.....	98
4.3	Nachrechnung des SETH2-Versuches ST2-1 .....	99
4.3.1	Einleitung .....	99
4.3.2	Geometrie und Randbedingung.....	99
4.3.3	Vergleich zwischen Simulation und Experiment .....	101
4.3.4	Durchführung von Parametervariationen .....	109
4.3.5	Zusammenfassung.....	126
4.4	Simulation des Phänomens der Bildung und Auflösung von Gasschichtungen im Sicherheitsbehälter (Nachrechnung des THAI Experimentes TH-22) .....	127
4.4.1	Zielsetzung.....	127

4.4.2	Einleitung .....	127
4.4.3	Start- und Randbedingungen .....	128
4.4.4	Vergleich von blinder und offener Rechnung mit den experimentellen Daten .....	130
4.4.5	Sensitivitätsanalyse .....	143
4.4.6	Zusammenfassung .....	158
4.5	Nachrechnung des Experimentes TH-24 (CV5).....	159
4.5.1	Beschreibung des Experimentes .....	159
4.5.2	Geometrie und Randbedingungen in der Simulation .....	160
4.5.3	Vergleich der Simulation mit experimentellen Ergebnissen .....	163
4.5.4	Durchführung einer Gitterstudie.....	177
4.5.5	Einfluss des Materialmodells .....	179
4.5.6	Test des neuen Kondensatmodells .....	180
4.5.7	Zusammenfassung und Ausblick.....	180
4.6	Zusammenfassung.....	181
<b>5</b>	<b>Modifikation des Rekombinatormodells (AP 1.4).....</b>	<b>182</b>
5.1	Experimentelle Grundlagen .....	182
5.2	Korrelation für Effizienz .....	183
5.2.1	Herleitung einer Korrelation für die Effizienz.....	183
5.2.2	Vergleich der Effizienz-Korrelation mit Messdaten der HR-Versuche .....	185
5.3	Modifikation des Parameters $x_{H_2}^{\min}$ und $x_{H_2}^{\max}$ in der AREVA-Gleichung .....	188
5.4	Abhängigkeit der Abbaurrate vom Dampfgehalt bzw. von der O <sub>2</sub> - Konzentration .....	190
5.4.1	Experimentelle Beobachtungen.....	190
5.4.2	Erklärungsansätze.....	191
5.4.3	Möglicher Einfluss des (gasförmigen) Dampfes auf die Abbauleistung...191	
5.4.4	Einfluss von Nebeltröpfchen.....	193
5.4.5	Zusammenfassung und Schlussfolgerung aus der qualitativen Untersuchung zum Einfluss des O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> -Verhältnisses .....	193
5.5	Verbesserung der AREVA-Gleichung für Sauerstoffarmut.....	194

5.6	Berechnung der Wärmeverluste an den Rekombinatorstrukturen.....	196
5.6.1	Temperatur der Rekombinatorwände und des austretenden Gases.....	196
5.6.2	Korrelation für $f_T$ .....	201
5.7	Abschließender Vergleich der ursprünglichen und der modifizierten AREVA-Korrelation.....	205
5.8	Implementation des Rekombinatorsmodells in CFX .....	207
5.9	Validierung des Rekombinatorsmodells .....	210
5.9.1	Nachrechnung HR-2.....	210
5.9.2	Nachrechnung HR-12.....	219
5.10	Zusammenfassung .....	229
<b>6</b>	<b>Simulation der turbulent-beschleunigten Wasserstoffverbrennung mit CFX für Wasserstoff / Dampf / Luftgemischen (AP 1.5).....</b>	<b>230</b>
6.1	Nachrechnung des THAI HD-22 Experiments .....	230
6.1.1	Einleitung .....	230
6.1.2	Kurze Versuchsbeschreibung.....	230
6.1.3	Verwendete physikalische Modelle.....	231
6.1.4	Vergleich von Experiment und Simulation .....	233
6.1.5	Untersuchung des Einflusses der räumlichen Diskretisierung .....	239
6.1.6	Test verschiedener Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit .....	242
6.1.7	Simulation mit dem ECFM Verbrennungsmodell .....	246
6.1.8	Untersuchung zum Einfluss der Anfangsturbulenz .....	251
6.1.9	Einfluss des Strahlungsmodells.....	256
6.1.10	Vergleich Inertgas-Modell mit einer angepassten Flamelet-Bibliothek ....	260
6.1.11	Zusammenfassung.....	263
6.2	Beteiligung am SARNET2-Verbrennungsbenchmark .....	264
<b>7</b>	<b>Validierung der Wasserstoffverbrennung mit CFX bei geschichteten Ausgangsverteilungen (AP 1.6).....</b>	<b>266</b>
7.1	Versuche bei ProScience zur $H_2$ -Verbrennung .....	266
7.2	Parameterstudie zur Gitterabhängigkeit bei der Modellierung der $H_2$ -Verbrennung in einem Kanal ohne Hindernisse.....	267

7.2.1	Einleitung .....	267
7.2.2	Ergebnisse des Testfall 1 .....	268
7.2.3	Ergebnisse des Testfall 2 .....	271
7.2.4	Ergebnisse des Testfall 3 .....	272
7.3	Nachrechnung der Versuche ProScience Nr. 36 und Nr. 47 .....	274
7.3.1	Modellierung in CFX.....	274
7.3.2	Vergleich 2D/3D .....	274
7.3.3	Gitterstudie glatte Wände .....	278
7.3.4	Studie zum Einfluss von Hindernissen an der Decke des Verbrennungskanals in der Versuchsanlage .....	281
7.3.5	Einfluss der H <sub>2</sub> -Anfangskonzentration bei Simulation mit Hindernissen ..	288
7.3.6	Einfluss der Korrelation für turbulente Brenngeschwindigkeit .....	289
7.4	Schlussfolgerungen.....	291
<b>8</b>	<b>Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX (AP 3) ...</b>	<b>293</b>
8.1	Einleitung .....	293
8.2	THAI Versuch TH-2.....	293
8.2.1	Vergleich der Simulationsergebnisse.....	294
8.2.2	Analyse der Gittersensitivität .....	299
8.2.3	Vergleich der Berechnungsdauer .....	304
8.3	PANDA-Versuch SETH 2.1 .....	305
8.3.1	Vergleich der Simulationsergebnisse.....	307
8.3.2	Analyse der Gittersensitivität .....	312
8.3.3	Vergleich der Berechnungsdauer .....	316
8.4	VANAM M3 (Battelle Modell-Containment).....	317
8.4.1	Vergleich der Simulationsergebnisse.....	319
8.5	Zusammenfassung.....	326
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung.....</b>	<b>327</b>
<b>10</b>	<b>Literatur .....</b>	<b>333</b>
<b>11</b>	<b>Verteiler.....</b>	<b>337</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.2-1	Temperaturabhängigkeit des Sättigungsdampfdrucks .....	5
Abb. 2.2-2	Versuchsaufbau für die CONAN-Versuche (SARNET-Benchmark Nr. 2 / Bild: /AMB09/) .....	6
Abb. 2.2-3	Simulationsergebnis des CONAN-Versuches (mit dem GRS- Modell berechnet) .....	8
Abb. 2.2-4	Vergleich der Kondensationsrate (ANSYS-, FZJ-, GRS-Modell und Experiment) .....	10
Abb. 2.2-5	Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P10- T30-V25) .....	11
Abb. 2.2-6	Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P15- T30-V25) .....	11
Abb. 2.2-7	Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P20- T30-V25) .....	12
Abb. 2.2-8	Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P25- T30-V25) .....	12
Abb. 2.2-9	Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P30- T30-V25) .....	13
Abb. 2.2-10	Vergleich der Ergebnisse mit unterschiedlicher Gitterfeinheit .....	13
Abb. 2.2-11	Vergleich der Wärmeströme für Versuch P10_T30_V25.....	14
Abb. 2.2-12	Vergleich der Wärmeströme für Versuch P15_T30_V25.....	15
Abb. 2.2-13	Vergleich der Wärmeströme für Versuch P20_T30_V25.....	15
Abb. 2.2-14	Vergleich der Wärmeströme für Versuch P25_T30_V25.....	16
Abb. 2.2-15	Vergleich der Wärmeströme für Versuch P30_T30_V25.....	16
Abb. 2.2-16	Vergleich der Temperaturen an der Auslassöffnung (P20-T30-V25).....	17
Abb. 2.2-17	Einfluss der Auslass-Modellierung auf die Kondensationsrate .....	18
Abb. 2.2-18	Einfluss des Diffusionsmodells auf die Kondensationsrate.....	18
Abb. 2.2-19	Einfluss der Dampfmodellierung auf die Kondensationsrate .....	19
Abb. 2.2-20	Gitterabhängigkeit der Kondensationsrate (Versuch P20-T30-V25).....	20
Abb. 2.2-21	Abhängigkeit der Kondensationsrate von der Zeitkonstante (Versuch P20-T30-V25) .....	21

Abb. 2.2-22	Dampfanteil am Auslass in Abhängigkeit vom Kondensationsmodell (GRS Rechnungen) .....	21
Abb. 2.2-23	Temperaturen am Auslass in Abhängigkeit vom Kondensationsmodell (GRS Rechnungen) .....	22
Abb. 2.2-24	Dampfeinspeisung im TH-2 Experiment.....	23
Abb. 2.2-25	Vergleich des simulierten Druckverlaufs (GRS, FZJ und ANSYS) mit den experimentellen Daten .....	24
Abb. 2.2-26	Vergleich des Temperaturverlaufs in 7,0 m Höhe .....	25
Abb. 2.2-27	Vergleich des Temperaturverlaufs in 6,3 m Höhe .....	26
Abb. 2.2-28	Vergleich des Temperaturverlaufs in 5,6 m Höhe .....	26
Abb. 2.3-1	Abhängigkeit des Drucks von der Gitterfeinheit in Wandnähe.....	29
Abb. 2.3-2	Abhängigkeit des Temperaturverlaufs in 8,4 m Höhe von der Zeitkonstanten des Volumenkondensationsmodells.....	31
Abb. 2.3-3	Abhängigkeit des Drucks vom Materialmodell.....	32
Abb. 2.3-4	Links: Geometrie beim Panda4bis –Versuch, rechts: Messstellen im Behälter D1 .....	34
Abb. 2.3-5	Molare Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern .....	35
Abb. 2.3-6	Temperatur an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern .....	37
Abb. 2.4-1	Transportprozesse im Kondensatfilm.....	38
Abb. 2.4-2	Ablaufdiagramm für das GRS-Kondensatmodell.....	39
Abb. 2.4-3	Verifizierung der Wandkondensationsrate .....	41
Abb. 2.4-4	Verifizierung der Wandkondensatmasse.....	41
Abb. 3.2-1	Helium-Schichtung zu Beginn der Simulation (links), rechts: CFD- Gitter .....	45
Abb. 3.2-2	Heliumkonzentration an mehreren Messstellen .....	46
Abb. 3.3-1	Messstellen im Behälter DW1.....	48
Abb. 3.3-2	Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen .....	52
Abb. 3.3-3	Dampfkonzentration nach ca. 250 s. Links: SST-Turbulenzmodell, Rechts TSF-Modell .....	53
Abb. 3.3-4	Dampfkonzentration nach ca. 1000 s. Links: SST- Turbulenzmodell, Rechts TSF-Modell .....	53

Abb. 4.2-1	Schematische Darstellung der PANDA-Versuchsanlage (Bild: /PAL08/) .....	58
Abb. 4.2-2	Helium-Schichtung zu Beginn des Experiments (links), ausgewählte Messstellen im 1. Behälter .....	58
Abb. 4.2-3	Schematische Darstellung der bei ST1_4 ablaufenden Prozesse, die zur Schichtungsauflösung beitragen /MIG10/ .....	59
Abb. 4.2-4	CFD-Gitter im 1. Panda Behälter. Links: 372 000 Zellen; Mitte 910 000 Zellen; Rechts 4 353 000 Zellen .....	61
Abb. 4.2-5	Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlich feinem Gitter .....	62
Abb. 4.2-6	Verwendeter Zeitschritt über der Problemzeit in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium.....	63
Abb. 4.2-7	Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlichen Konvergenzkriterium .....	64
Abb. 4.2-8	Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlichem Konvergenzkriterium.....	65
Abb. 4.2-9	Dampfkonzentration in Abhängigkeit von der Wahl der kinematischen Diffusivität von Helium D .....	67
Abb. 4.2-10	Vertikalgeschwindigkeit im Jet in Abhängigkeit von der kinematischen Diffusivität von Helium nach 50 s .....	67
Abb. 4.2-11	Verlauf der Schichtung in Abhängigkeit vom Diffusionskoeffizienten, aufgetragen ist der H <sub>2</sub> O-Massenbruch über der Behälterhöhe .....	68
Abb. 4.2-12	Dampfkonzentrationen an mehreren Messstellen im ersten Behälter des Panda-Versuchstands.....	73
Abb. 4.2-13	Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	74
Abb. 4.2-14	Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	74
Abb. 4.2-15	Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	75

Abb. 4.2-16	Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	75
Abb. 4.2-17	Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	76
Abb. 4.2-18	Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	76
Abb. 4.2-19	Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	77
Abb. 4.2-20	Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	77
Abb. 4.2-21	Turb. kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	78
Abb. 4.2-22	Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	78
Abb. 4.2-23	Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF .....	79
Abb. 4.2-24	Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST.....	79
Abb. 4.2-25	Starke Instabilitäten im späteren Verlauf der Simulation (ca. 700 s) bei TSF Turbulenzmodell; oben He-Konzentration, unten turbulente kinetische Energie.....	80
Abb. 4.2-26	Blending Funktionen beim SST-Modell nach 50 s.....	81
Abb. 4.2-27	Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Modellierung der Wärmestrahlung .....	87
Abb. 4.2-28	Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Modellierung der Wärmestrahlung .....	89

Abb. 4.2-29	Temperatur nach 150 s und 2000 s bei Simulation mit dem SST Turbulenzmodell und dem Multiband-Discrete-Transfer Strahlungsmodell.....	89
Abb. 4.2-30	He-Konzentration und Strahlungsintensität nach 150 s bei Simulation mit dem SST Turbulenzmodell und dem Multiband-Discrete-Transfer Strahlungsmodell.....	90
Abb. 4.2-31	Heliumkonzentration bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell .....	93
Abb. 4.2-32	Geschwindigkeit bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell .....	93
Abb. 4.2-33	Temperatur bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell .....	94
Abb. 4.2-34	Turbulente kinetische Energie bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell .....	95
Abb. 4.2-35	Strahlungsintensität nach 98 s bei Simulation mit dem TSF-Modell.....	95
Abb. 4.2-36	Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen .....	97
Abb. 4.2-37	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	98
Abb. 4.3-1	Versuchsführung beim SETH-Versuch ST2-1 (Bild: /ZBO10/) .....	100
Abb. 4.3-2	Verlauf der Heliumkonzentration in 8,03 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1A 20).....	102
Abb. 4.3-3	Verlauf der Heliumkonzentration in 6,93 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1C 20).....	102
Abb. 4.3-4	Verlauf der Heliumkonzentration in 6,28 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1D 20).....	103
Abb. 4.3-5	Verlauf der Heliumkonzentration in 6,00 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1F 20).....	103
Abb. 4.3-6	Verlauf der Heliumkonzentration in 5,63 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1G 20) .....	104
Abb. 4.3-7	Verlauf der Heliumkonzentration in 4,33 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1I 20) .....	104
Abb. 4.3-8	Verlauf der Heliumkonzentration im Verbindungsrohr (Messpunkt: MCG TD1.1) .....	105

Abb. 4.3-9	Verlauf der Temperatur in 8,03 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1A 20) .....	106
Abb. 4.3-10	Verlauf der Temperatur in 6,50 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1CD2 20).....	106
Abb. 4.3-11	Verlauf der Temperatur in 6,28 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1D 20) .....	107
Abb. 4.3-12	Verlauf der Temperatur in 5,63 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1G 20).....	107
Abb. 4.3-13	Verlauf der Temperatur in 4,98 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1H 20) .....	108
Abb. 4.3-14	Verlauf der Temperatur in 4,33 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1I 20).....	108
Abb. 4.3-15	Verlauf der Temperatur in 0,54 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1T 20).....	109
Abb. 4.3-16	Einfluss der Elementzahl auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1A 20 in 8,03 m Höhe).....	110
Abb. 4.3-17	Einfluss der Elementzahl auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MCG D1D 20 in 6,28 m Höhe).....	111
Abb. 4.3-18	Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1A 20) .....	112
Abb. 4.3-19	Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1D 20) .....	112
Abb. 4.3-20	Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Abbau der Helium-schichtung (Messpunkt: MCG D1D 20).....	114
Abb. 4.3-21	Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die Abbaueiten.....	114
Abb. 4.3-22	Vergleich der Helium-Anteile (oben: SST, unten: TSF) .....	116
Abb. 4.3-23	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1A 20).....	117
Abb. 4.3-24	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1C 20).....	117
Abb. 4.3-25	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1D 20).....	118
Abb. 4.3-26	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1F 20) .....	118

Abb. 4.3-27	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1G 20).....	119
Abb. 4.3-28	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1I 20) .....	119
Abb. 4.3-29	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG TD1.1) .....	120
Abb. 4.3-30	Vergleich der Temperaturverteilung (oben: SST, unten TSF) .....	121
Abb. 4.3-31	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1A 20) .....	122
Abb. 4.3-32	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1CD2 20) .....	122
Abb. 4.3-33	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1D 20) .....	123
Abb. 4.3-34	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1G 20).....	123
Abb. 4.3-35	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1H 20) .....	124
Abb. 4.3-36	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1I 20).....	124
Abb. 4.3-37	Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1T 20) .....	125
Abb. 4.3-38	Vergleich der Rechenzeiten für die unterschiedlichen Turbulenzmodelle .....	126
Abb. 4.4-1	Ergebnis des blinden TH-22 Benchmarks: Heliumkonzentration in 8,7 m Höhe (Bild aus /FIS10/).....	128
Abb. 4.4-2	Unterteilung der Wände für die unterschiedlichen Wärmetransferkoeffizienten .....	130
Abb. 4.4-3	Schnitt durch den THAI-Behälter: Temperaturen und Strömungsvektoren.....	132
Abb. 4.4-4	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten in 6,4 m Höhe am Ende der Aufwärmphase (t = 24 h) .....	132
Abb. 4.4-5	Gastemperaturprofil am Ende der Aufwärmphase (t = 24 h) .....	133
Abb. 4.4-6	Wandtemperaturen (innen) am Ende der Aufwärmphase (t = 24 h) ....	133

Abb. 4.4-7	Vergleich des Druckverlaufs an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m).....	135
Abb. 4.4-8	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT58M00 (Höhe: 5,8 m).....	136
Abb. 4.4-9	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT28M00 (Höhe: 2,8 m).....	136
Abb. 4.4-10	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT28F06 (Höhe 2,8 m) .....	137
Abb. 4.4-11	Heliumkonzentration an Messstelle DCH87B005 (Höhe 8,7 m) .....	138
Abb. 4.4-12	Heliumkonzentration an Messstelle DCH77H11 (Höhe 7,7 m) .....	139
Abb. 4.4-13	Heliumkonzentration an Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m) .....	139
Abb. 4.4-14	Heliumkonzentration an Messstelle CCH28B005 (Höhe 2,8 m) .....	140
Abb. 4.4-15	Temperaturverlauf an Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m).....	141
Abb. 4.4-16	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF70H15 (Höhe: 7,0 m) .....	141
Abb. 4.4-17	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF63M00 (Höhe: 6,3 m).....	142
Abb. 4.4-18	Temperaturverlauf an Messstelle BTF21M00 (Höhe: 2,1 m).....	142
Abb. 4.4-19	Temperaturverlauf an Messstelle STC07M00 (Höhe: 0,7 m) .....	143
Abb. 4.4-20	Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m).....	145
Abb. 4.4-21	Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 2,8 m).....	146
Abb. 4.4-22	Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe: 7,0 m) ...	146
Abb. 4.4-23	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m).....	147
Abb. 4.4-24	Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m).....	148
Abb. 4.4-25	Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 2,8 m).....	149
Abb. 4.4-26	Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m) ....	149
Abb. 4.4-27	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m).....	150
Abb. 4.4-28	Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m).....	151
Abb. 4.4-29	Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe 2,8 m).....	152
Abb. 4.4-30	Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m) ....	152
Abb. 4.4-31	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m).....	153
Abb. 4.4-32	Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m).....	154

Abb. 4.4-33	Heliumkonzentration an Messstelle DCH70F005 (Höhe: 7,0 m) .....	155
Abb. 4.4-34	Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m) .....	156
Abb. 4.4-35	Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 5,8 m).....	156
Abb. 4.4-36	Heliumkonzentration an der Messstelle DCH77H11 (Höhe: 7,7 m) .....	157
Abb. 4.4-37	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m).....	157
Abb. 4.5-1	Abbau einer Dampfschicht im TH-24 Experiment (Ergebnis einer CFX-Simulation .....	159
Abb. 4.5-2	Konfiguration des TH-24 Experimentes (Bildquelle: /GUP12/) .....	160
Abb. 4.5-3	Netz zur Berechnung des TH-24 Experiments (Schnitte durch die Einspeiseebene) .....	161
Abb. 4.5-4	Dampfkonzentration in 8,7 m Höhe (Messposition DCH87M00) .....	164
Abb. 4.5-5	Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe (Messposition DCH77M00) .....	164
Abb. 4.5-6	Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe (Messposition DCH77D11).....	165
Abb. 4.5-7	Dampfkonzentration in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00) .....	165
Abb. 4.5-8	Dampfkonzentration in 6,3 m Höhe (Messposition DCH63M00) .....	166
Abb. 4.5-9	Dampfkonzentration in 5,6 m Höhe (Messposition DCH56H11).....	166
Abb. 4.5-10	Dampfkonzentration in 2,8 m Höhe (Messposition CCH28M00) .....	167
Abb. 4.5-11	Dampfkonzentration in 1,6 m Höhe (Messposition BCH16M00).....	167
Abb. 4.5-12	Temperaturverlauf in 8,7 m Höhe (Messposition: DTF87M00) .....	168
Abb. 4.5-13	Temperaturverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition: DTF70H11) .....	169
Abb. 4.5-14	Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe (Messposition: DTF63H11) .....	169
Abb. 4.5-15	Temperaturverlauf in 4,9 m Höhe (Messposition: CTF49M00) .....	170
Abb. 4.5-16	Temperaturverlauf in 2,1 m Höhe (Messposition: BTF21M00) .....	170
Abb. 4.5-17	Wandtemperatur in 6,8 m Höhe (Messposition JTW68H16) .....	171
Abb. 4.5-18	Wandtemperatur in 7,4 m Höhe (Messposition: JTW74G16) .....	172
Abb. 4.5-19	Wandtemperatur in 8,0 m Höhe (Messposition: JTW80D16) .....	172
Abb. 4.5-20	Wandtemperatur am Innenzylinder in 4,3 m Höhe (Messposition: CTW43H07).....	173
Abb. 4.5-21	Vertikalgeschwindigkeiten in 5,8 m Höhe (Messposition: CVT58M00) .....	174
Abb. 4.5-22	Vertikalgeschwindigkeiten in 3,5 m Höhe (Messposition: CVT35D11) .....	174

Abb. 4.5-23	Vertikalgeschwindigkeiten in 2,8 m Höhe (Messposition: CVT28F06) .....	175
Abb. 4.5-24	Druckverlauf im THAI-Behälter .....	176
Abb. 4.5-25	An der gekühlten Wandfläche anfallende Kondensatmasse .....	176
Abb. 4.5-26	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Druckverlauf .....	178
Abb. 4.5-27	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Konzentrationsverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00) .....	178
Abb. 4.5-28	Einfluss des Materialmodells auf den Druckverlauf .....	179
Abb. 4.5-29	Einfluss des Materialmodells auf den Konzentrationsverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00) .....	180
Abb. 5.1-1	Aufbau der HR Experimente und der Rekombinatoren FR-380 ½ /KAN09a/ .....	182
Abb. 5.2-1	Vergleich der gemessenen Effizienz mit der Korrelation für die Effizienz. Schwarz: Experiment; rot: vollständige Korrelation; grün und türkis: modifizierte Korrelationen; blau: xH <sub>2</sub> .....	188
Abb. 5.3-1	Vergleich der Abbauraten bei Berechnung mit der original AREVA-Korrelation und mit einer modifizierten AREVA-Korrelation.....	189
Abb. 5.4-1	Oberflächenreaktionen auf den Rekombinatorplatten /GUN98/ .....	192
Abb. 5.5-1	Abbauleistung über der Zeit für HR-Versuche mit Sauerstoffarmut.....	196
Abb. 5.6-1	Temperatur des aus dem Rekombinator austretenden Gases. Schwarz: Experiment; Rot: Simulation; Blau: Simulation bei Vernachlässigung der Wärmeverluste; Orange: mittlere Wandtemperatur in der Simulation.....	200
Abb. 5.6-2	Austrittstemperaturen am Rekombinatoraustritt bei unterschiedlichem c <sub>wand</sub> bei T <sub>adia</sub> < T <sub>wand</sub> .....	201
Abb. 5.6-3	Abhängigkeit von T <sub>aus</sub> und T <sub>wand</sub> von der konstante c <sub>wand</sub> .....	201
Abb. 5.6-4	Abbaute im Experiment, bei der modifizierten AREVA-Korrelation, und bei der modifizierten AREVA-Korrelation mit f <sub>τ</sub> =1 .....	204
Abb. 5.6-5	Abbauraten im Experiment, bei der modifizierten AREVA-Korrelation und bei der modifizierten AREVA-Korrelation mit f <sub>τ</sub> =1, Vergleich der ursprünglichen mit der modifizierten AREVA-Korrelation .....	205
Abb. 5.7-1	Abbauraten im Experiment, bei der ursprünglichen und der modifizierten AREVA-Korrelation .....	207

Abb. 5.9-1	Links: CFD-Gitter bei der Simulation mit CFX. Der Rekombinator ist far-big dargestellt (rot: PAR-Auslass, grün: PAR Einlass, blau: PAR-Wand). Rechts: Position der Messstellen für die Gaszusammensetzung .....	211
Abb. 5.9-2	H <sub>2</sub> -Konzentration und Temperatur nach 1260 s .....	214
Abb. 5.9-3	Links: Dampfkonzentration nach 1260 s, rechts: Effizienz .....	215
Abb. 5.9-4	H <sub>2</sub> Eintrittskonzentration am Rekombinator (links) und Abbaurrate (rechts) .....	215
Abb. 5.9-5	H <sub>2</sub> -Austrittskonzentration (links) und Austrittstemperatur (rechts) am Re-kombinator .....	216
Abb. 5.9-6	H <sub>2</sub> -Konzentration an verschiedenen Messstellen .....	217
Abb. 5.9-7	Temperatur an verschiedenen Messstellen .....	218
Abb. 5.9-8	H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko Einlass .....	220
Abb. 5.9-9	H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko-Auslass .....	220
Abb. 5.9-10	Effizienz des Rekombinators .....	221
Abb. 5.9-11	H <sub>2</sub> -Rekombinationsrate des Rekombinators .....	222
Abb. 5.9-12	Temperatur am Reko-Auslass .....	222
Abb. 5.9-13	Vergleich der H <sub>2</sub> -Rekombinationsrate mit der H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko Einlass.....	223
Abb. 5.9-14	Vergleich der H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko-Auslass mit der H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko Einlass .....	224
Abb. 5.9-15	Vergleich der Temperatur am Reko-Auslass mit der H <sub>2</sub> -Konzentration am Reko Einlass .....	224
Abb. 5.9-16	Druck im THAI-Behälter .....	225
Abb. 5.9-17	Temperatur an der Messstelle DTF84M00 (in 8,4 m Höhe) .....	226
Abb. 5.9-18	Temperatur an der Messstelle DTF53H12 (in 5,3 m Höhe).....	226
Abb. 5.9-19	Temperatur an der Messstelle BTF17M00 (in 1,7 m Höhe).....	227
Abb. 5.9-20	H <sub>2</sub> -Konzentration an Messstelle DCH84M00 (in 8,4 m Höhe) .....	227
Abb. 5.9-21	H <sub>2</sub> -Konzentration an Messstelle CCH31M00 (in 3,1 m Höhe) .....	228
Abb. 5.9-22	H <sub>2</sub> -Konzentration an der Messstelle SCH07M00 (in 0,7 m Höhe) .....	228
Abb. 6.1-1	Schematische Darstellung des HD-22 Experiments.....	231
Abb. 6.1-2	Flammenausbreitung zu verschiedenen Zeitpunkten .....	237

Abb. 6.1-3	Flammenausbreitung nach 2 s. Die Pfeile symbolisieren die Richtung und Stärke der Strömungsgeschwindigkeit. ....	237
Abb. 6.1-4	Druck in Simulation und Experiment .....	238
Abb. 6.1-5	Flammenankunftszeiten (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (rechts) entlang der Mittelachse in Simulation und Experiment .....	238
Abb. 6.1-6	Laminare Flammengeschwindigkeit zu verschiedenen Zeiten. In Regionen, in denen kein unverbranntes Gemisch vorliegt (Reaktionsfortschrittsvariable =1), wird zur Verdeutlichung der relevanten Bereiche die laminare Flammengeschwindigkeit mit 0 angezeigt.....	239
Abb. 6.1-7	Druck (links) und vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittelachse (rechts).....	241
Abb. 6.1-8	Druck (links) und vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittelachse.....	242
Abb. 6.1-9	Laminare Flammenfronten für H <sub>2</sub> -Luft und CH <sub>4</sub> -Luft Flammen /JOR99/, /POR02/.....	245
Abb. 6.1-10	Druckverlauf (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) im Experiment und bei Verwendung von unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit.....	245
Abb. 6.1-11	Flammenfront (rot) bei einer Simulation mit dem ECFM-Modell, bei der es zur unphysikalischen Zündung oberhalb der Flammenfront kam. ....	248
Abb. 6.1-12	Reaktionsfortschrittsvariable zum Zeitpunkt wenn die Flamme die Höhe von ca. 4 m erreicht hat. Links: unverändertes ECFM-Modell, rechts: modifiziertes ECFM-Modell .....	249
Abb. 6.1-13	Simulation mit dem unmodifizierten ECFM, links: Reaktionsfortschrittsvariable, Mitte: Laminare Flammengeschwindigkeit, rechts: turbulente Flammengeschwindigkeit in Bereichen in denen die Reaktionsfortschrittsvariable >0 ist .....	250
Abb. 6.1-14	Links Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, rechts: Druck über einer modifizierten Zeitachse, bei der die Druckkurven so	

	verschoben wurden, dass der Zeitpunkt des Druckanstiegs gleich ist.....	250
Abb. 6.1-15	Druckverlauf (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) im Experiment und in der Simulation bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz .....	253
Abb. 6.1-16	Verbrennungsfortschritt bei Erreichen der Höhe 4 m. Bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz in der Reihenfolge $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 1$ , $k = 1.0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 100$ ) .....	254
Abb. 6.1-17	Verbrennungsfortschritt bei Erreichen der Höhe 8 m. Bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz in der Reihenfolge $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 1$ , $k = 1.0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 10$ , $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ und $v = 100$ ) .....	255
Abb. 6.1-18	Druck (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) bei unterschiedlicher Strahlungsmodellierung .....	257
Abb. 6.1-19	Flammenfront (Reaction Progress Variable) bei Erreichen von 4 m Höhe. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases) .....	258
Abb. 6.1-20	Flammenfront (Reaction Progress Variable) bei Erreichen von 8 m Höhe. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases) .....	259
Abb. 6.1-21	Temperatur, wenn die Flammenfront von 4 m Höhe erreicht. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases) .....	260
Abb. 6.1-22	Druck (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (rechts) bei Verwendung des Inertgas-Modell und bei Verwendung einer angepassten Flamelet-Library .....	262
Abb. 6.1-23	Massenbruch der OH-Radikale links: Inertgas-Modell; rechts: angepasste Flamelet-Bibliothek .....	263
Abb. 6.1-24	Temperatur links: Inertgas-Modell; rechts: angepasste Flamelet-Bibliothek .....	263
Abb. 7.1-1	Schematische Darstellung des Versuchsaufbau /FRI11/ .....	266
Abb. 7.2-1	Geometrie des Testfalls, Monitorpunkte durch gelbe Kreuze markiert .....	268

Abb. 7.2-2	Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testbeispiel 1 .....	270
Abb. 7.2-3	Flammenausbreitung im Testbeispiel 1 (298 701 Zellen). Rot: verbranntes Gas, blau: unverbranntes Gas .....	270
Abb. 7.2-4	Flammenausbreitung im Testbeispiel 1 (261 Zellen). Rot: verbranntes Gas, blau: unverbranntes Gas .....	271
Abb. 7.2-5	Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testbeispiel 2 .....	272
Abb. 7.2-6	Flammenausbreitung im Testbeispiel 2 (298 701 Zellen). Rot: ver- branntes Gas, blau unverbranntes Gas .....	272
Abb. 7.2-7	Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testfall 3.....	273
Abb. 7.2-8	Reaktionsfortschrittsvariable an 3 verschiedenen Monitorpunkten bei den verschiedenen Testfällen .....	273
Abb. 7.3-1	Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten Pro47 /FRI11/ .....	277
Abb. 7.3-2	Position der Monitorpunkte in der Simulation .....	277
Abb. 7.3-3	Links: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in Experiment und in 3-dimensionaler Simulation. Rechts: Vergleich Flammenausbreitungsgeschwindigkeit 3-D mit 2-D .....	278
Abb. 7.3-4	Mittlerer relativer Druck bei Vorbeiziehen der Flammenfront.....	278
Abb. 7.3-5	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher räumlicher Diskretisierung. (Links: Ausschnitt zur besseren deutlicheren Darstellung der Ergebnisse) .....	280
Abb. 7.3-6	Flammenausbreitung bei einer gleichmäßigen räumlichen Diskretisierung im Verbrennungskanal.....	280
Abb. 7.3-7	Flammenausbreitung bei einer sehr starken Gitterverfeinerung in Wandnähe ( $\Delta = 1 \text{ mm}$ ).....	281
Abb. 7.3-8	Bild des Versuchsstands, erhalten in Email von Hr. Friedrich .....	282
Abb. 7.3-9	CFD-Gitter bei Berücksichtigung von Hindernissen .....	285
Abb. 7.3-10	Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten Pro36 /FRI11/ .....	285
Abb. 7.3-11	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Berücksichtigung der Hindernisse bei Simulation der Versuche Pro47 und Pro36.....	286
Abb. 7.3-12	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Berücksichtigung der Hindernisse bei der Simulation mit homogener H <sub>2</sub> -	

	Anfangskonzentration (Pro36, links) und H <sub>2</sub> -Anfangskonzentration mit Gradienten (Pro47, rechts).....	286
Abb. 7.3-13	Reaktionsfortschrittsvariable und turbulente kinetische Energie bei der Simulation ohne Hindernisse bei Pro36 .....	287
Abb. 7.3-14	Reaktionsfortschrittsvariable und turbulente kinetische Energie bei der Simulation mit Hindernissen bei Pro36 .....	287
Abb. 7.3-15	Turbulente Brenngeschwindigkeit bei Pro36, links: bei Simulation mit Hindernissen, Mitte und rechts: Simulation ohne Hindernissen (bei unterschiedlicher Farbskala) .....	288
Abb. 7.3-16	Mischungsbruch in der Nähe der Flammenfront, Flammenfront durch rote Linie markiert, links: keine Hindernisse, Mitte: große Hindernisse (Hi), rechts: kleine Hindernisse (Hib) .....	288
Abb. 7.3-17	H <sub>2</sub> -Anfangskonzentration (links) Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher H <sub>2</sub> -Anfangskonzentration (rechts) .....	289
Abb. 7.3-18	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Verwendung der Koroll- und der Zimont-Korrelation. Links: Versuch mit homogener Mischung (Pro36); rechts: geschichtete H <sub>2</sub> -Verteilung (Pro47) .....	290
Abb. 7.3-19	Reaktionsfortschrittsvariable, links Simulation mit Zimont-Korrelation, rechts: mit Koroll-Korrelation.....	291
Abb. 8.2-1	Dampfkonzentration bei t = 200 s (links CFX, rechts GASFLOW).....	295
Abb. 8.2-2	Dampfeinspeisung beim TH-2 Experiment (Bildquelle: /KAN03/) .....	295
Abb. 8.2-3	Vergleich des berechneten und gemessenen Druckverlaufs im THAI-Behälter.....	296
Abb. 8.2-4	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF77H07 (Höhe 7,7 m).....	297
Abb. 8.2-5	Temperaturverlauf an der Messstelle DTF63H07 (Höhe 6,3 m).....	298
Abb. 8.2-6	Temperaturverlauf an der Messstelle CTF35H03 (Höhe 3,5 m).....	298
Abb. 8.2-7	Unterschiedliche Randnetze für die Gitterstudie (unten ist das Randelement jeweils blau/violett eingefärbt) .....	299
Abb. 8.2-8	Druckverlauf für unterschiedlich feine Netze .....	300
Abb. 8.2-9	Temperatur in 7,7 m Höhe .....	302
Abb. 8.2-10	Temperatur in 6,3 m Höhe .....	302
Abb. 8.2-11	Temperatur in 3,5 m Höhe .....	303

Abb. 8.2-12	Vergleich der Gitterabhängigkeit des Drucks ( $t = 1500$ s) bei GASFLOW und CFX.....	304
Abb. 8.2-13	Berechnungsdauer für 3600 s Simulationsdauer .....	305
Abb. 8.3-1	Unterschiedliche Schnittebenen durch das PANDA-Gitter in der GASFLOW-Rechnung .....	306
Abb. 8.3-2	Vergleich der Heliumkonzentration im PANDA-Behälter Nr. 1 bei $t = 1030$ s, links: CFX, rechts: GASFLOW .....	307
Abb. 8.3-3	Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1A 20 .....	308
Abb. 8.3-4	Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1D 20 .....	308
Abb. 8.3-5	Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1G 20.....	309
Abb. 8.3-6	Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1I 20.....	309
Abb. 8.3-7	Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1A 20 .....	310
Abb. 8.3-8	Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1D 20 .....	311
Abb. 8.3-9	Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1G 20.....	311
Abb. 8.3-10	Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1I 20.....	312
Abb. 8.3-11	Unterschiedlich feine Rechengitter im Bereich der He-Schichtung für GASFLOW .....	313
Abb. 8.3-12	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Verlauf der He-Konzentration an Messstelle MCG D1A (in 8,03 m Höhe) .....	314
Abb. 8.3-13	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Verlauf der He-Konzentration an Messstelle MCG D1D .....	314
Abb. 8.3-14	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1A .....	315
Abb. 8.3-15	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1D .....	315
Abb. 8.3-16	Vergleich der Berechnungsdauern für die unterschiedlichen Simulationen.....	316
Abb. 8.4-1	Raumaufteilung im Battelle-Modell-Containment (CFX-Geometrie) ....	318
Abb. 8.4-2	Ausschnitt aus dem VANAM M3 Rechengitter (GASFLOW-Berechnung) .....	318
Abb. 8.4-3	Druckverlauf im Battelle-Modell-Containment .....	320
Abb. 8.4-4	Temperatur in Raum R9 (Dom) .....	321
Abb. 8.4-5	Temperatur in Raum R8 .....	321

Abb. 8.4-6	Temperatur in Raum R7 .....	322
Abb. 8.4-7	Temperatur in Raum R6 .....	322
Abb. 8.4-8	Temperatur in Raum R5 (Einspeisezone) .....	323
Abb. 8.4-9	Temperatur in Raum R4 .....	323
Abb. 8.4-10	Temperatur in Raum R3 .....	324
Abb. 8.4-11	Geschwindigkeit in Öffnung U59B .....	325
Abb. 8.4-12	Geschwindigkeit in Öffnung U79B .....	325

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.2-1	Korrelationen für den Sättigungsdampfdruck (GRS, FZJ und ANSYS) .....	4
Tab. 2.2-2	Experimentelle Randbedingungen /AMB09/ .....	7
Tab. 2.2-3	Infobox SARNET-2 Condensation Benchmark.....	8
Tab. 2.2-4	Infobox THAI TH-2.....	23
Tab. 2.3-1	Infobox THAI TH-2 (Gitterstudie) .....	28
Tab. 2.3-2	Infobox THAI TH-2 (Studie Zeitkonstante) .....	30
Tab. 2.3-3	Infobox THAI TH-2 (Studie Materialmodell) .....	31
Tab. 4.3-1	Verwendete Start- und Randbedingungen .....	100
Tab. 4.3-2	Infobox SETH-2 Test 2.1 .....	100
Tab. 4.3-3	Durchgeführte Parametervariationen .....	101
Tab. 4.4-1	Veränderung der Simulationsparameter .....	129
Tab. 4.4-2	Parametervariationen in der Sensitivitätsstudie (Blinde Rechnung: CFX 07 002, Offene Rechnung / Referenzrechnung: 21 009).....	144
Tab. 4.5-1	Infobox THAI TH-24 Experiment.....	162
Tab. 4.5-2	Netzparameter für die Gitterstudie .....	177
Tab. 5.9-1	Infobox THAI HR-12 (neue Rechnung) .....	219
Tab. 8.2-1	Infobox THAI TH-2.....	294
Tab. 8.2-2	Variationsrechnungen mit GASFLOW.....	300
Tab. 8.2-3	Berechnungsdauer für 3600 s Simulationsdauer .....	305
Tab. 8.3-1	Infobox SETH 2.1 .....	306
Tab. 8.3-2	Variationsrechnungen mit GASFLOW.....	313
Tab. 8.3-3	Vergleich der Berechnungszeiten von GASFLOW und CFX.....	317
Tab. 8.4-1	Infobox zum VANAM M3 Experiment.....	319

# 1 Einleitung

Zur der Simulation und Beurteilung von unfalltypischen Vorgängen im Sicherheitseinschluss eines Kernkraftwerkes erlangen CFD-Simulationstechniken immer stärkere Bedeutung. Bestimmte strömungsmechanische Probleme wie z. B. die Ermittlung von Strömungswiderständen in komplexen Geometrien, Turbulenzberechnung oder die Berechnung von beschleunigten Verbrennungsprozessen von nicht-kondensierbaren Gasen sind nur in Spezialfällen exakt lösbar und mit klassischen lumped parameter Modellen auch nicht immer hinreichend genau abbildbar und sollen daher mit numerischen Methoden approximiert werden. International werden deshalb CFD-Methoden auf Konferenzen wie z. B. der CFD4NRS-Konferenz von einem stetig wachsenden Fachpublikum diskutiert. Auch in Fachzeitschriften wie z. B. Nuclear Engineering and Design nimmt der Anteil von Artikeln mit CFD-Schwerpunkt stetig zu. Weiterhin werden CFD-Tools wie z. B. GASFLOW oder GOTHIC bereits in europäischen Genehmigungsverfahren für Auslegungsrechnungen zukünftiger KKW (EPR, AP1000) angewendet und die Ergebnisse von den Behörden akzeptiert. Aus diesen Gründen ist ein Aufbau von nationalen Kompetenzen zum Thema CFD und die intensive Validierung und Bewertung der vorhandenen Softwaretools von großer Bedeutung.

Im Rahmen des vom BMWi geförderten Projektes RS1500 hat die GRS ihre im Vorgängerprojekt (RS1181) begonnenen Arbeiten zur Erprobung und Validierung von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss fortgesetzt. Der vorliegende Zwischenbericht fasst die Arbeiten der ersten zwei der drei Projektjahre zusammen. Vor diesem Hintergrund ist zu beachten, dass einige Arbeiten noch nicht abgeschlossen sind. Inhaltlich widmet sich der Bericht den folgenden Schwerpunkten:

- *Beiträge zur gezielten Erweiterung der Möglichkeiten von CFX und zu seiner Validierung für die Simulation unfalltypischer Phänomene im Sicherheitseinschluss:* Hierbei wurden die Kondensationsmodelle (von GRS, FZJ und ANSYS) weiter validiert und ein neues Kondensatmodell entwickelt. Dieses Vorgehen wird im Abschnitt 2 erläutert. In Abschnitt 3 wird die Validierung eines neuen Turbulenzmodells beschrieben, welches durch ANSYS in Kooperation mit der Uni Stuttgart entwickelt wurde.
- *Zur Thematik der Ausbildung und Auflösung von Leichtgasschichtungen ( $H_2$ /Dampf/Luft)* wurden weitere Großexperimente nachgerechnet und in Abschnitt 4 beschrieben. Weiterhin konnte durch die Analyse experimenteller Daten der THAI-Anlage eine verbesserte Korrelation zur Beschreibung des Abbauverhaltens von AREVA-Rekombinatoren erarbeitet werden. Mit Hilfe der verbesserten Korrelation

wurden entsprechende Experimente zur Validierung nachgerechnet. Dieses wird in Abschnitt 5 erläutert. In den Abschnitt 6 und 7 finden sich Untersuchungen zu Simulation von H<sub>2</sub>-Verbrennungen mit CFX. Dabei wurden sowohl H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Gemische, als auch inhomogene H<sub>2</sub>-Schichtungen mit seitlichem Venting analysiert.

- *Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX:* Hierzu wurden drei unterschiedliche Experimente mit GASFLOW und CFX nachgerechnet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Dabei wurde insbesondere auch der Einfluss einer gröberen Nodalisierung analysiert. Diese Ergebnisse können in Abschnitt 8 nachgelesen werden.

## **2 Entwicklung und Validierung eines Modells zur Simulation des bei der Wand- und Volumen Kondensation entstehenden Kondensats (AP 1.1)**

### **2.1 Einleitung**

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden zunächst die Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS mit einander verglichen. Dieses geschieht sowohl anhand der Daten der CONAN-Anlage als auch des THAI-Versuchs TH-2. Ursprünglich war nur der Vergleich von zwei Modellen (GRS und FZJ) geplant gewesen, das ANSYS-Modell ist erst im laufenden Projekt hinzugekommen. Hierdurch hat sich der Arbeitsaufwand für die GRS deutlich erhöht, da sowohl die meisten CONAN-Versuche als auch das TH-2 Experiment (und das TH-24 Experiment) von der GRS mit dem neuen ANSYS-Modell auch nachgerechnet wurden. Hierzu waren auch neue Parameterstudien und Anpassungen notwendig.

Der Vergleich der drei Kondensationsmodelle wird im folgenden Abschnitt 2.2 diskutiert. Wichtigstes Vergleichskriterium ist die korrekte Wiedergabe des physikalischen Kondensationsprozesses sowie der dabei anfallenden Kondensationsraten. Weitere Kriterien für die Auswahl des Modells sind insbesondere Nutzerfreundlichkeit, Implementierung, Erweiterbarkeit und Dokumentation für CFX. Aus den drei Modellen wurde dann eines für die weiteren Arbeiten ausgewählt.

Im Abschnitt 2.3 finden sich weitere Validierungen zum Kondensationsmodell. Hierzu gehören sowohl Parameterstudien mit dem TH-2 Experiment als auch Validierungsrechnungen mit dem TH-24 und dem Panda4bis Experiment.

Anschließend wurde ein Modell zur Behandlung des anfallenden Wandkondensats erstellt und implementiert. Dieses Vorgehen wird in Abschnitt 2.4 beschrieben. Anschließend erfolgte die Verifizierung des neu erstellten Modells durch die Nachrechnung mehrerer Experimente.

Die Ergebnisse werden im Abschnitt 2.5 zusammengefasst. Der Anhang im Abschnitt 2.6 enthält Informationen zum Volumenkondensationsmodell.

## 2.2 Vergleich der Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS

### 2.2.1 Vergleich der physikalischen Korrelationen

Grundsätzlich gehen alle drei Kondensationsmodelle von einem gemeinsamen physikalischen Grundverständnis aus. Die (Wand-)Kondensation wird mit Hilfe eines Stofftransportansatzes beschrieben. Zu den notwendigen physikalischen Korrelationen für die Kondensationsmodellierung gehört die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes. In Tab. 2.2-1 sind die Korrelationen aufgeführt, die in den Modellen von GRS, FZJ und ANSYS implementiert sind. In Abb. 2.2-1 ist die Temperaturabhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes entsprechend der Gleichungen in Tab. 2.2-1 dargestellt. Es zeigt sich in dem relevanten Bereich von 50 °C bis 120°C kaum ein Unterschied zwischen den von der GRS, dem FZJ und ANSYS verwendeten Modellen.

Ein deutlicher Unterschied zwischen den Kondensationsmodellen von GRS und FZJ bestand jedoch darin, dass die Modelle vom FZJ und von ANSYS nur ein Wandkondensationsmodell enthielten, während im GRS Modell sowohl die Wand- als auch die Volumenkondensation berücksichtigt waren. Das FZJ und das ANSYS Modell wurden deshalb um ein Volumenkondensationsmodell entsprechend dem GRS Modell /SCH10/ erweitert. Dieses Volumenkondensationsmodell wurde in Form einer zusätzlichen Massensenke mit Wärmefreisetzung implementiert. Die Werte für die Kondensationsrate wurden in Form von User Expressions berechnet. Die entsprechenden Expressions finden sich in Kapitel 2.6.1.

Tab. 2.2-1 Korrelationen für den Sättigungsdampfdruck (GRS, FZJ und ANSYS)

$p_s = 1,198 \cdot 10^{-3} \cdot T^4 - 0,08564 \cdot T^3 + 7,312 \cdot T^2 - 72,753 \cdot T + 117,72$	GRS
$p_s = 133 \cdot \exp\left(18,3036 - \left(\frac{3816,44}{T - 46,13}\right)\right)$	FZJ [Antoine]
$p_s = \exp\left(11,7792 - \left(\frac{3885,71}{T - 42,92}\right)\right)$	ANSYS [Antoine]

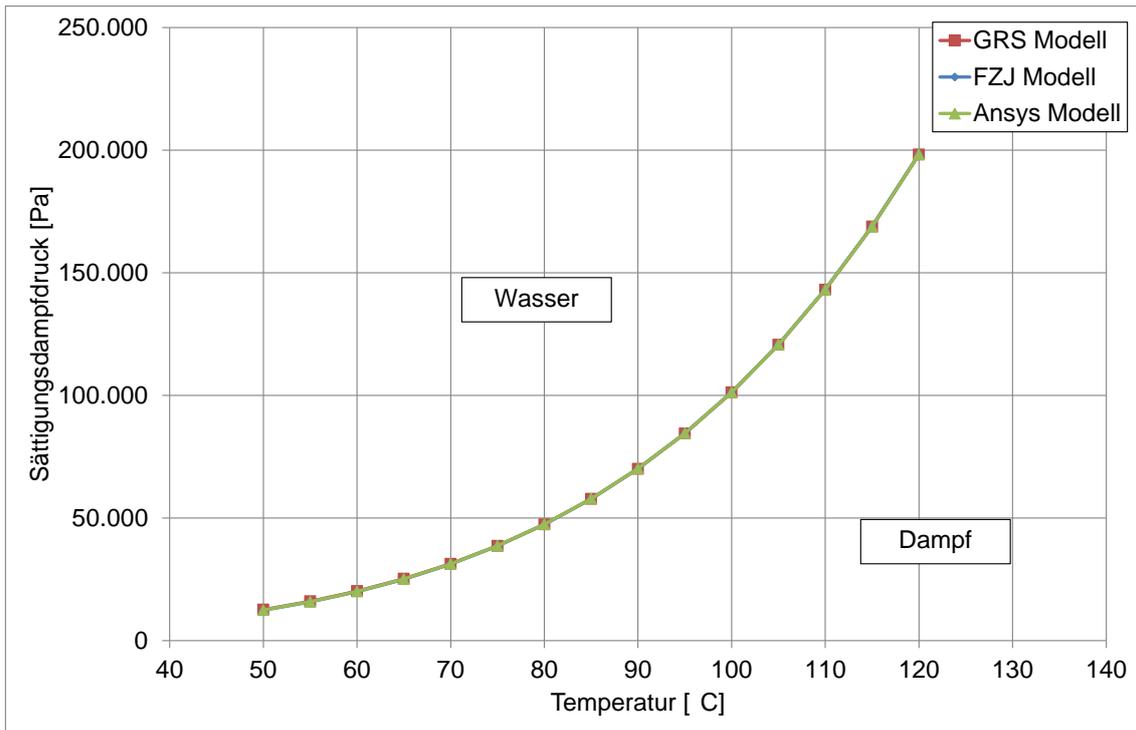


Abb. 2.2-1 Temperaturabhängigkeit des Sättigungsdampfdrucks

## 2.2.2 Vergleich der Implementierungen

Wie schon erwähnt, gehen alle Kondensationsmodelle (von GRS, FZJ und ANSYS) von einem Stofftransportansatz aus. Im Detail ergeben sich jedoch in folgenden Bereichen Unterschiede:

- *Implementierung:* Das FZJ-Modell und das GRS-Modell verwenden USER-FORTRAN Routinen. Das ANSYS-Kondensationsmodell wurde direkt in den CFX-Sourcecode implementiert und lässt sich ab Version 14 über die Preprocessor-Oberfläche hinzuschalten. Damit wurde für das ANSYS-Modell die beste Art der Implementierung geschaffen.
- *Regelung der Kondensationsrate:*
  - Im GRS-Modell wird das Einstellen des Gleichgewichtes bei der Kondensationsrate durch einen reinen Proportionalitätsfaktor geregelt (P-Regelung). Dieses ist beim Volumenkondensationsmodell die Zeitkonstante.
  - Im FZJ-Modell gibt es zusätzlich zur P-Regelung noch einen integrierenden und einen differenzierenden Regler (I- und D-Regler), so dass es hier insgesamt eine PID-Regelung gibt. Dadurch ergibt sich beim FZJ-Modell ein genaueres Regelungsverhalten mit kleineren Abweichungen zum Soll-Zustand.

Genauere Details zu der PID-Regelung im FZJ-Modell finden sich im Bericht des Forschungszentrums Jülich /KEL10/.

- Da das ANSYS-Modell der GRS nicht als Source-Code vorliegt, können keine Angaben zur Regelung dieses Modells gemacht werden.

In den nun folgenden Abschnitten werden die Kondensationsmodelle anhand von Versuchsnachrechnungen (CONAN-Versuche, THAI TH-2 Experiment) miteinander verglichen.

## 2.2.3 CONAN-Versuche: SARNET Benchmark No. 2

### 2.2.3.1 Versuchsbeschreibung der CONAN-Versuche

In Abb. 2.2-2 ist der Versuchsaufbau für die CONAN-Versuche dargestellt. Hierbei wird ein Dampf/Luft-Gemisch in einen Schacht mit quadratischer Grundfläche von oben eingespeist. Der Dampf kann an einer gekühlten Metalloberfläche kondensieren und das (dampfärmere) Gemisch tritt dann am unteren Ende des Schachtes wieder aus. Die Metallplatte wird auf der Außenseite mit Hilfe von Wasser gekühlt.

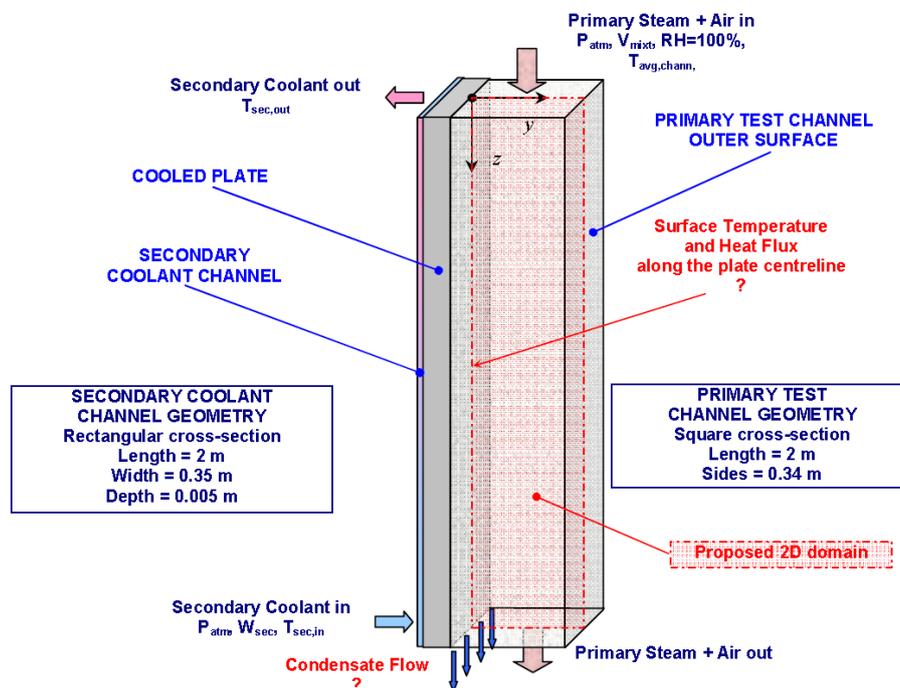


Abb. 2.2-2 Versuchsaufbau für die CONAN-Versuche (SARNET-Benchmark Nr. 2 / Bild: /AMB09/)

In Tab. 2.2-2 sind die notwendigen experimentellen Randbedingungen aufgeführt. Für den Vergleich der Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS wurden die ersten fünf Versuche (mit der Kennzeichnung „P...-T30-V25“) jeweils mit den drei Kondensationsmodellen berechnet. Dabei wurden die gleichen Start- und Randbedingungen für die Simulationen gewählt, nur das Kondensationsmodell war unterschiedlich. In Tab. 2.2-3 findet sich eine Übersicht über die verwendeten Start- und Randbedingungen. In allen Berechnungen wurde nicht der gesamte Kanal simuliert sondern nur ein schmaler Ausschnitt des Kanals, der an den Seiten mit Symmetrie-Randbedingungen versehen wurde (quasi 2D-Rechnung). Abb. 2.2-6 zeigt beispielhaft das Ergebnis einer Berechnung mit CFX und dem GRS-Modell.

Tab. 2.2-2 Experimentelle Randbedingungen /AMB09/

Test Units	Secondary System Parameters				Primary System Parameters			
	PowerSG [W]	TinSec [°C]	ToutSec [°C]	SecFlow [kg/s]	MixtVel [m/s]	RH [%]	TRH [°C]	TavgCh [°C]
P10-T30-V25	10092	30.4	31.6	1.30	2.57	100.00	75.6	75.6
P15-T30-V25	15163	29.6	31.4	1.31	2.60	100.00	83.4	83.5
P20-T30-V25	20046	30.7	33.8	1.31	2.59	100.00	91.2	91.5
P25-T30-V25	25077	31.1	34.8	1.30	2.60	100.00	93.6	93.8
P30-T30-V25	29994	34.8	39.4	1.30	2.62	100.00	96.6	97.0
P10-T40-V25	10065	40.3	41.3	1.78	2.68	100.00	80.3	79.8
P15-T40-V25	15137	39.0	40.4	1.79	2.48	100.00	85.5	85.4
P20-T40-V25	20146	40.0	41.9	1.77	2.69	100.00	89.6	89.5
P25-T40-V25	25375	39.4	42.3	1.65	2.61	100.00	94.9	95.4
P30-T40-V25	30165	42.3	46.9	1.28	2.63	100.00	97.1	97.5

Evaluation of secondary wall-to-fluid HTC									
TEST Units	TavgSec [°C]	k_water-sec [W/(mK)]	visc_water-sec [Pa s]	Cp_water-sec [J/(kgK)]	Pr_water-sec [-]	Re-sec [-]	Nu-DB [-]	HTC-DB [W/(m2k)]	HTC-eq [W/(m2k)]
P10-T30-V25	31.0	0.62	7.81E-04	4179.8	5.29	9405	67.57	4229.4	1610.2
P15-T30-V25	30.5	0.62	7.89E-04	4179.9	5.35	9365	67.66	4229.3	1610.2
P20-T30-V25	32.2	0.62	7.61E-04	4179.5	5.14	9691	68.40	4294.9	1619.6
P25-T30-V25	32.9	0.62	7.50E-04	4179.3	5.06	9737	68.23	4291.4	1619.1
P30-T30-V25	37.1	0.63	6.90E-04	4178.7	4.60	10576	70.21	4461.5	1642.7
P10-T40-V25	40.8	0.63	6.43E-04	4178.6	4.25	15597	92.82	5948.0	1809.2
P15-T40-V25	39.7	0.63	6.57E-04	4178.6	4.35	15322	92.37	5904.7	1805.1
P20-T40-V25	40.9	0.63	6.42E-04	4178.6	4.24	15534	92.44	5924.9	1807.0
P25-T40-V25	40.9	0.63	6.43E-04	4178.6	4.25	14466	87.37	5599.0	1775.5
P30-T40-V25	44.6	0.64	6.00E-04	4178.7	3.94	12049	73.22	4729.6	1677.7

Plate physical parameters		Secondary channel geometrical data			
k-plate		Depth		X-sect Area	
117	W/(mK)	0.005	m	0.00175	m^2
s-plate		Length		Perimeter	
0.045	m	2	m	0.710	m
HTC-plate		Width		Dh	
2600.00	W/(m2K)	0.35	m	9.8592E-03	m

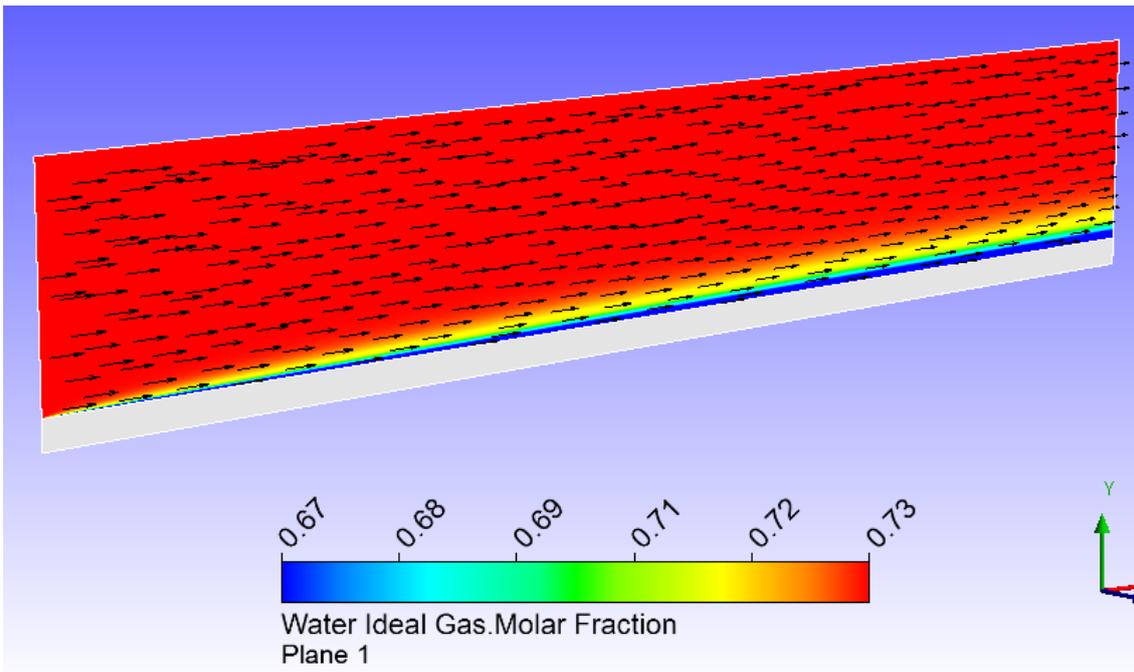


Abb. 2.2-3 Simulationsergebnis des CONAN-Versuches (mit dem GRS-Modell berechnet)

Tab. 2.2-3 Infobox SARNET-2 Condensation Benchmark

Experiment	SARNET-2 Condensation Benchmark (CONAN Anlage)		
Phänomene	Kondensation		
Rechnung / Modell	GRS-Rechnung	FZJ-Rechnung	ANSYS-Rechnung
Elementzahl	133 200	133 200	31 805
Gitterfeinheit an der Wand	0,08 mm – 2,0 mm	0,01 mm – 2,0 mm	0,3 mm
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 89,9° (OK) Max. Expansion Factor: 1,1 (OK) Max. Aspect Ratio: 787,0 (ok)	Min. Winkel: 89,9° (OK) Max. Expansion Factor: 1,1 (OK) Max. Aspect Ratio: 787,0 (ok)	Min. Winkel: 45,8° (ok) Max. Expansion Factor: 2 (OK) Max. Aspect Ratio: 75 (OK)
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKv (reales Gas / Redlich-Kwong)	Air Ideal Gas, Water Ideal Gas	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> O (Ideales Gas / Nasa-Polynome)
Turbulenzmodell	SST	SST	SST
Inlet-Turbulenz	10 %	10 %	10 %
Wärmestrahlung	Ohne	Ohne	Ohne
Kondensations-	GRS-Modell	FZJ-Modell	ANSYS-Modell

Experiment	SARNET-2 Condensation Benchmark (CONAN Anlage)		
Phänomene	Kondensation		
Rechnung / Modell	GRS-Rechnung	FZJ-Rechnung	ANSYS-Rechnung
modell			
Wand-kondensation	Ja	Ja	Ja
Volumen-kondensation	Nein	Nein	Nein
Zeitverhalten	Steady State	Steady State	Steady State
Konvergenz	RMS < 0,0001	MAX < 0,000001	MAX < 0,0001
CFX-Version	11.0	12.0	14.0

### 2.2.3.2 Vergleich der Simulationsergebnisse

In Abb. 2.2-4 werden die Simulationsergebnisse der CONAN-Versuche (SARNET-Benchmark Nr. 2) miteinander verglichen. Die Bezeichnung der Experimente, z. B. P20-T30-V25 hat folgende Bedeutung: P (Power-Steam-Generator [1000\*Watt]) gibt an wie viel Dampf produziert wurde, T gibt die Temperatur für die gekühlte Wand in °C an und V die Strömungsgeschwindigkeit am Einlass [10\*cm/s]. In Abb. 2.2-4 steigt somit von links nach rechts der Dampfanteil am Einlass, während die Kühltemperatur und die Einströmgeschwindigkeit gleich bleiben. Neben den experimentellen Ergebnissen sind die Berechnungsergebnisse von GRS, FZJ und ANSYS für die fünf Versuche aufgetragen. In der Abbildung zeigt sich, dass bei niedrigen Dampfanteilen (z. B. bei P10-T30-V25) die experimentelle Kondensationsrate von allen drei Modellen gut wiedergegeben wird. Je höher der Dampfanteil am Einlass, desto stärker wird die Kondensationsrate überschätzt (z. B. bei P30-T30-V25). Bei der GRS-Rechnung des Versuchs P30-T30-V25 traten (vermutlich aufgrund der sehr hohen Dampfkonzentration) Konvergenzprobleme auf; hier sollte das Ergebnis nicht überbewertet werden. Bei allen Rechnungen zeigt sich weiterhin, dass die mit dem ANSYS-Modell berechneten Kondensationsraten etwas näher an den experimentellen Werten liegen als die mit den anderen beiden Modellen berechneten Kondensationsraten.

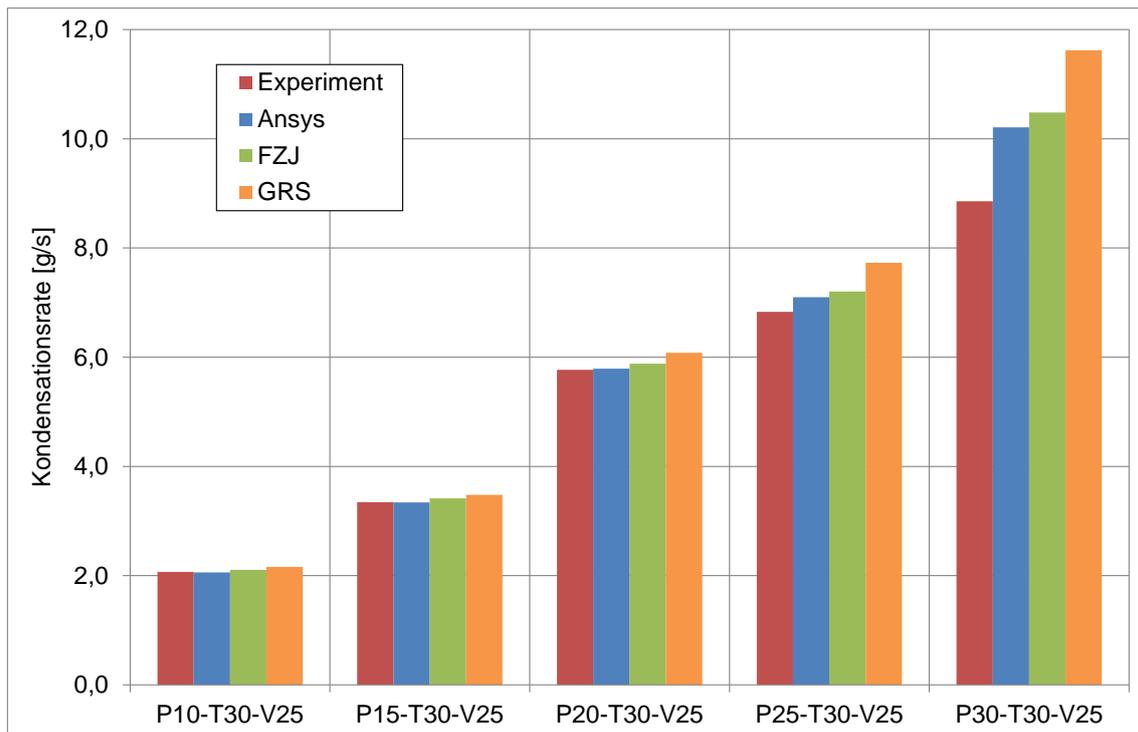


Abb. 2.2-4 Vergleich der Kondensationsrate (ANSYS-, FZJ-, GRS-Modell und Experiment)

In Abb. 2.2-5 bis Abb. 2.2-9 werden jeweils die Temperaturen an der Metalloberfläche entlang der Strömungsrichtung des Dampfes miteinander verglichen. Hier zeigen alle drei Kondensationsmodelle eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Dabei liegen die GRS-Werte meistens etwas unterhalb der experimentellen Daten und die FZJ-Werte liegen meistens etwas oberhalb der experimentellen Werte. Die ANSYS-Werte liegen etwa in der Mitte und damit relativ nahe an den experimentellen Werten. Der Unterschied zwischen der GRS- und der FZJ-Rechnung lässt sich zum Teil auf eine Berechnung mit unterschiedlicher Netzfeinheit (an der Wand/Gas-Grenzfläche) zurückführen (GRS: 0,25 mm / FZJ: 0,01 mm). In Abb. 2.2-10 wird gezeigt, dass sich die Temperaturverläufe der beiden Berechnungen annähern, wenn auch für die FZJ-Rechnung eine Gitterfeinheit von 0,25 mm (wie bei der GRS-Rechnung) gewählt wird.

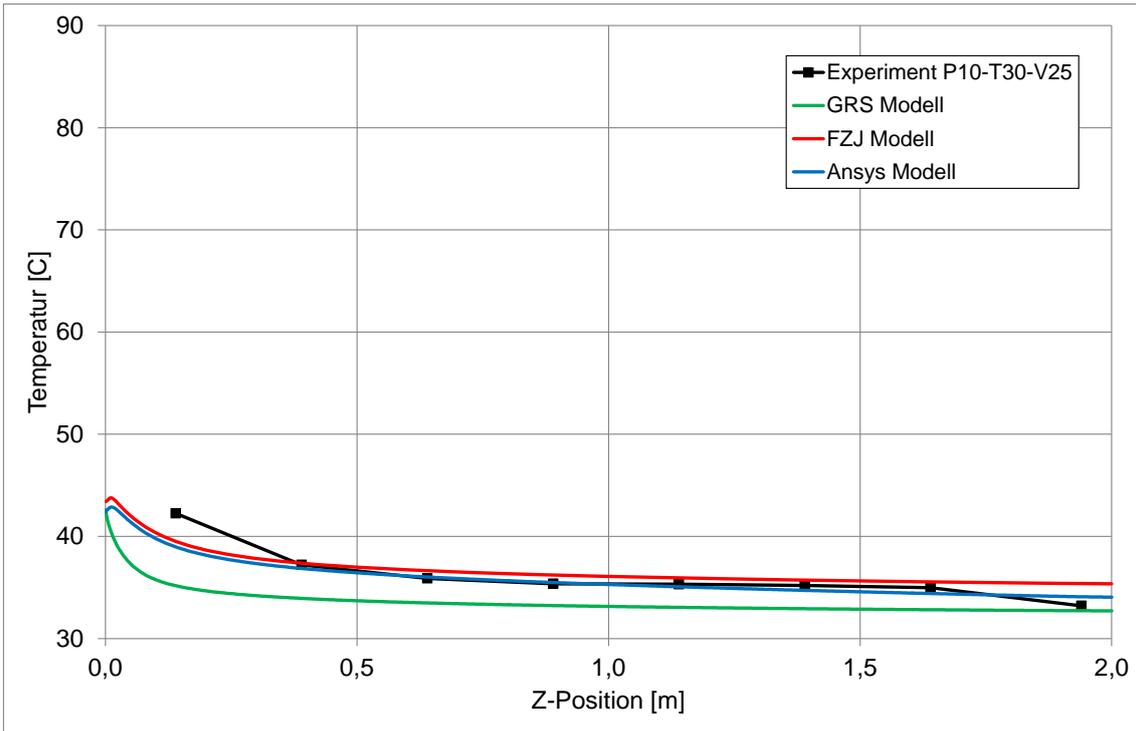


Abb. 2.2-5 Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P10-T30-V25)

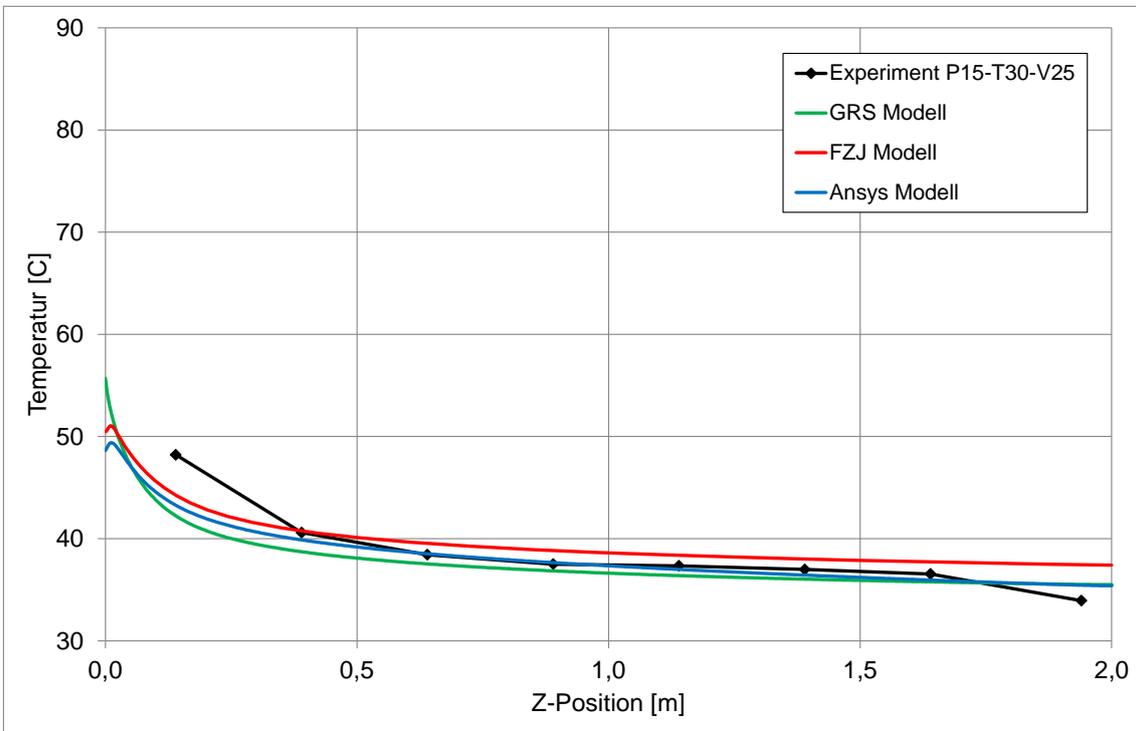


Abb. 2.2-6 Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P15-T30-V25)

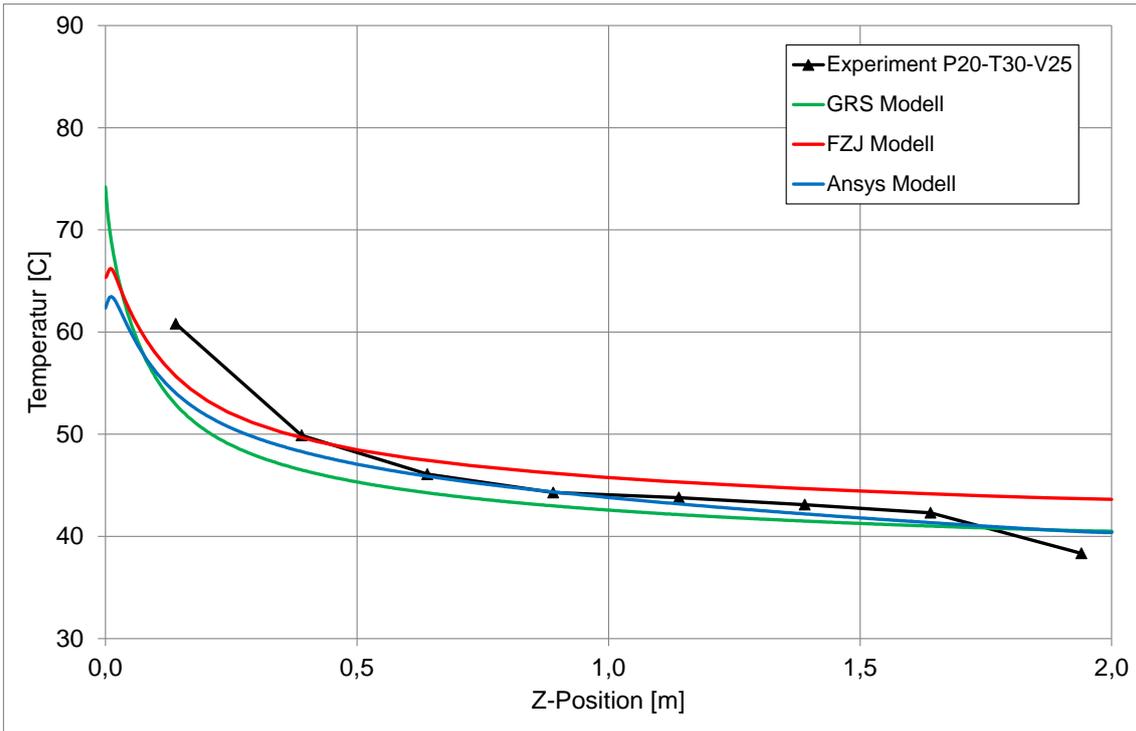


Abb. 2.2-7 Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P20-T30-V25)

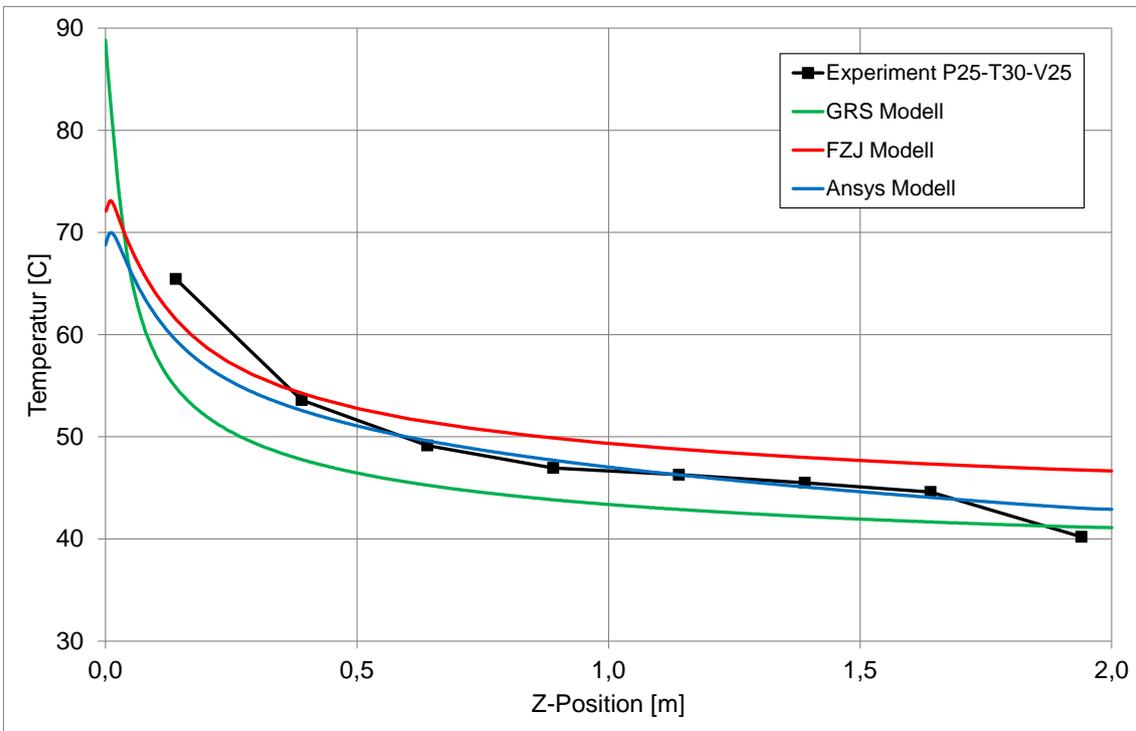


Abb. 2.2-8 Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P25-T30-V25)

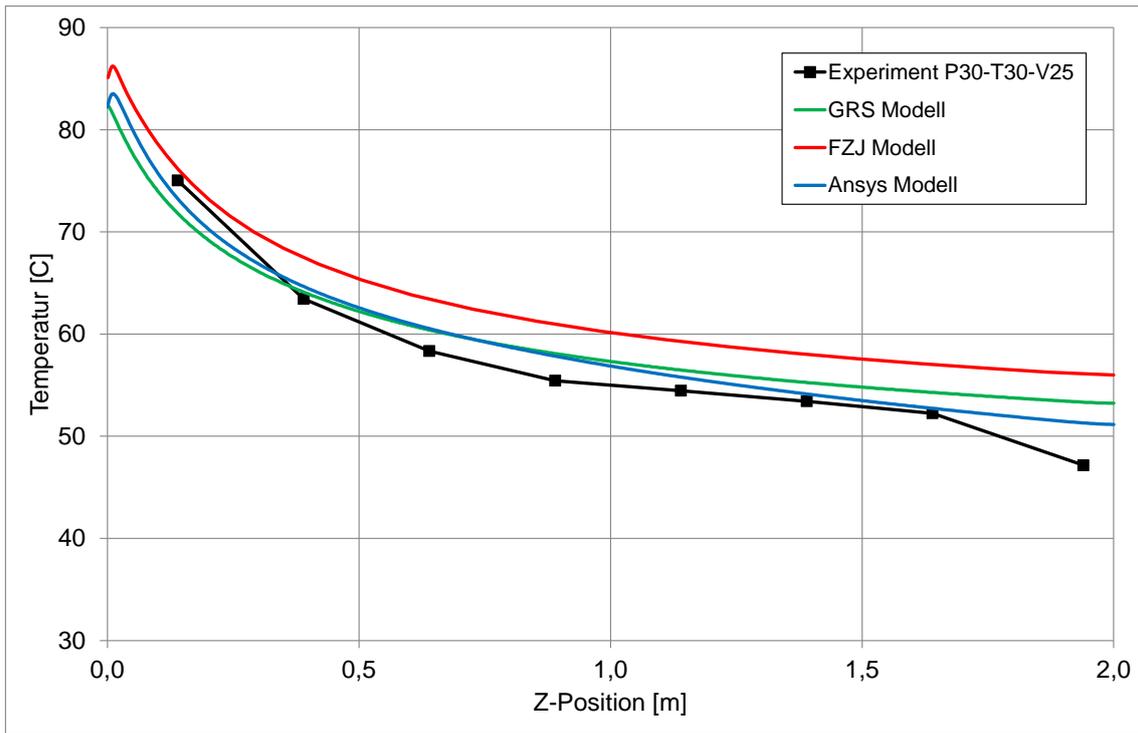


Abb. 2.2-9 Vergleich der Temperaturen an der Oberfläche (Experiment P30-T30-V25)

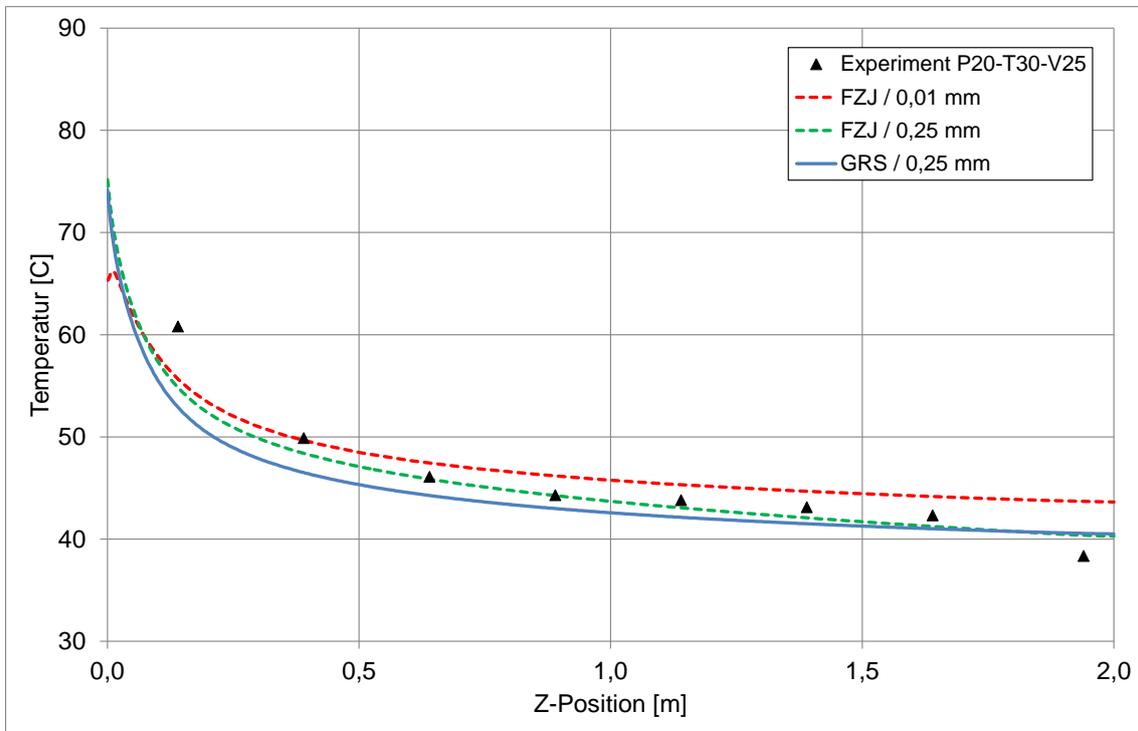


Abb. 2.2-10 Vergleich der Ergebnisse mit unterschiedlicher Gitterfeinheit

Abb. 2.2-11 bis Abb. 2.2-15 zeigen die mit dem GRS-, dem FZJ- und dem ANSYS-Modell berechneten Wärmeströme in die gekühlte Wandfläche. Alle drei Berechnungen kommen zu sehr ähnlichen Ergebnissen und sie haben auch eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Ausnahme bildet hier wieder die Rechnung P30-T30-V25 (siehe Abb. 2.2-15), bei der die GRS Rechnung (aufgrund der hohen Dampfkonzentration) Konvergenzprobleme hatte.

In Abb. 2.2-16 werden die Temperaturen an der Auslassöffnung dargestellt. Die Temperaturen sind über der Höhe über der gekühlten Wand aufgetragen. Die drei Simulationen zeigen hier ähnliche Werte, experimentelle Daten liegen hierzu nicht vor.

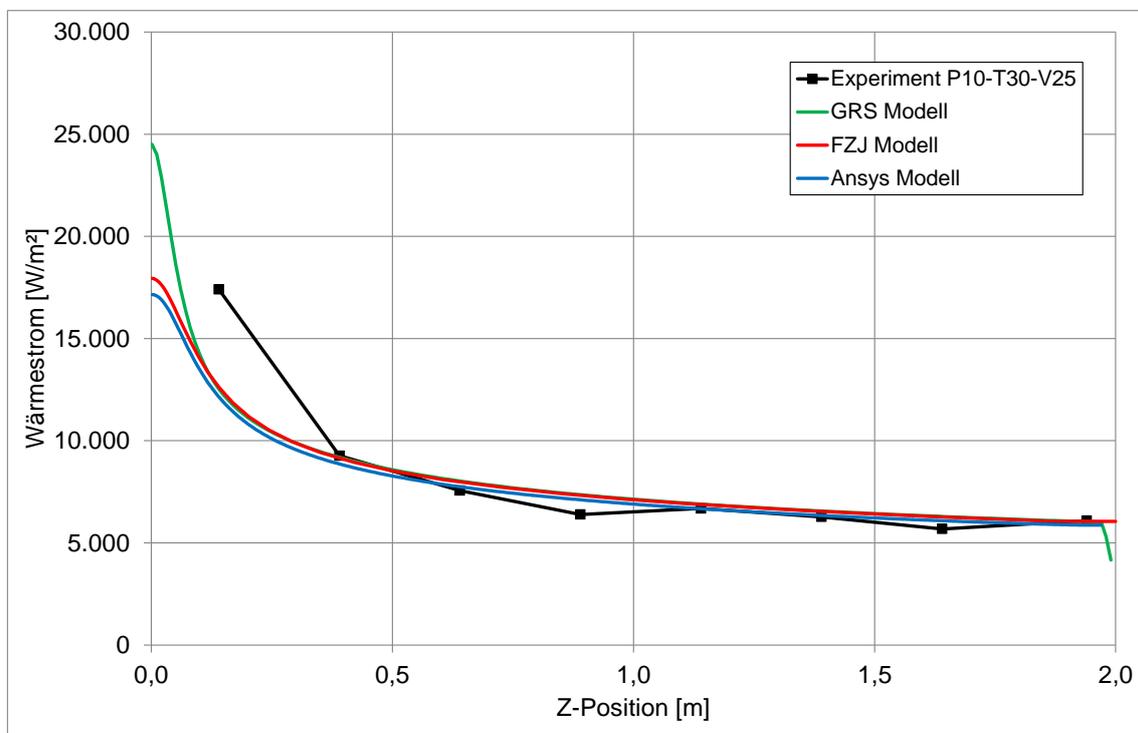


Abb. 2.2-11 Vergleich der Wärmeströme für Versuch P10\_T30\_V25

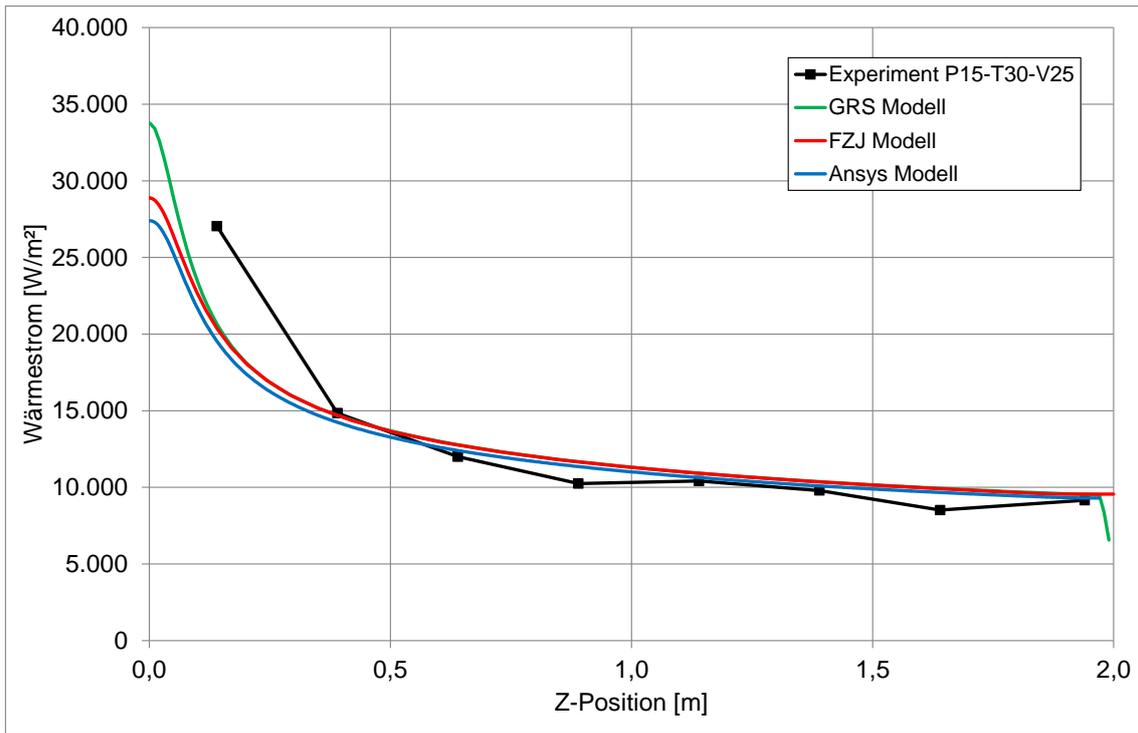


Abb. 2.2-12 Vergleich der Wärmestrome für Versuch P15\_T30\_V25

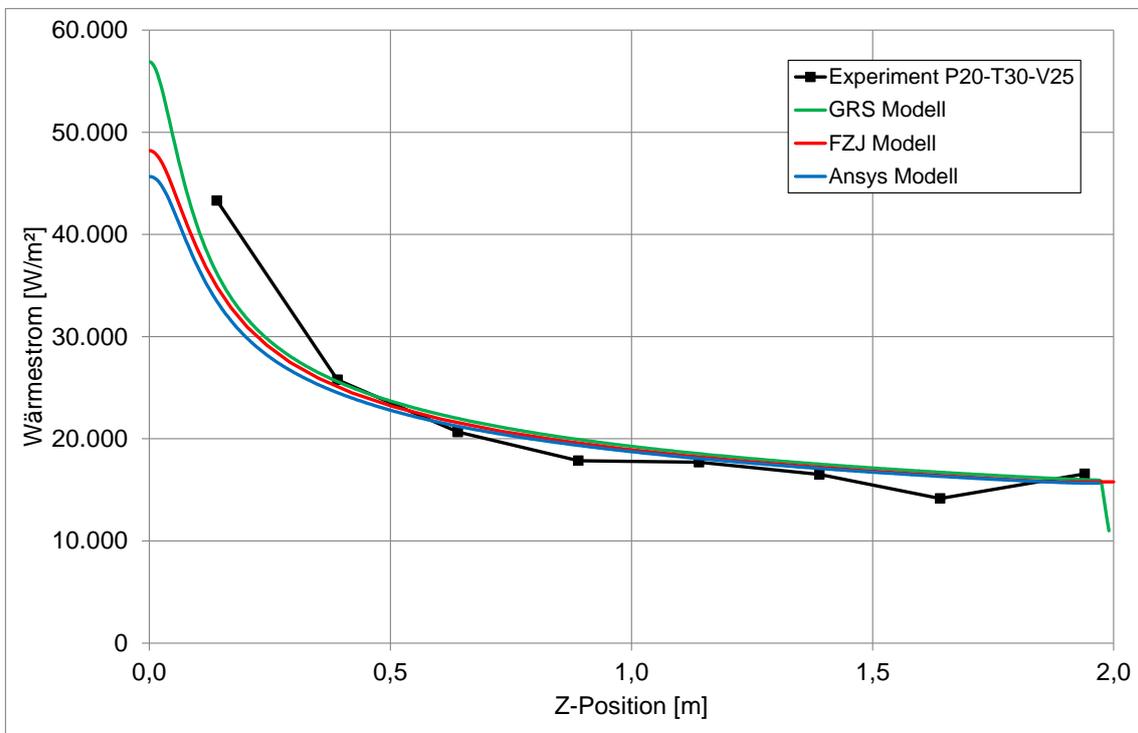


Abb. 2.2-13 Vergleich der Wärmestrome für Versuch P20\_T30\_V25

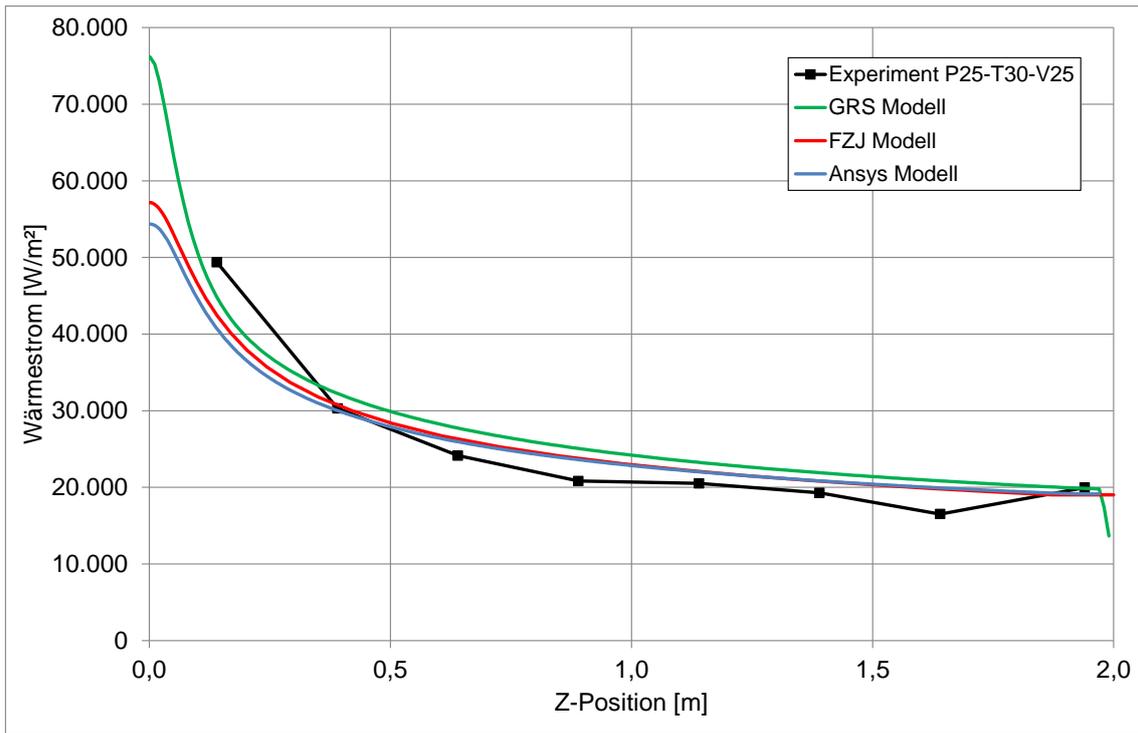


Abb. 2.2-14 Vergleich der Wärmestrome für Versuch P25\_T30\_V25

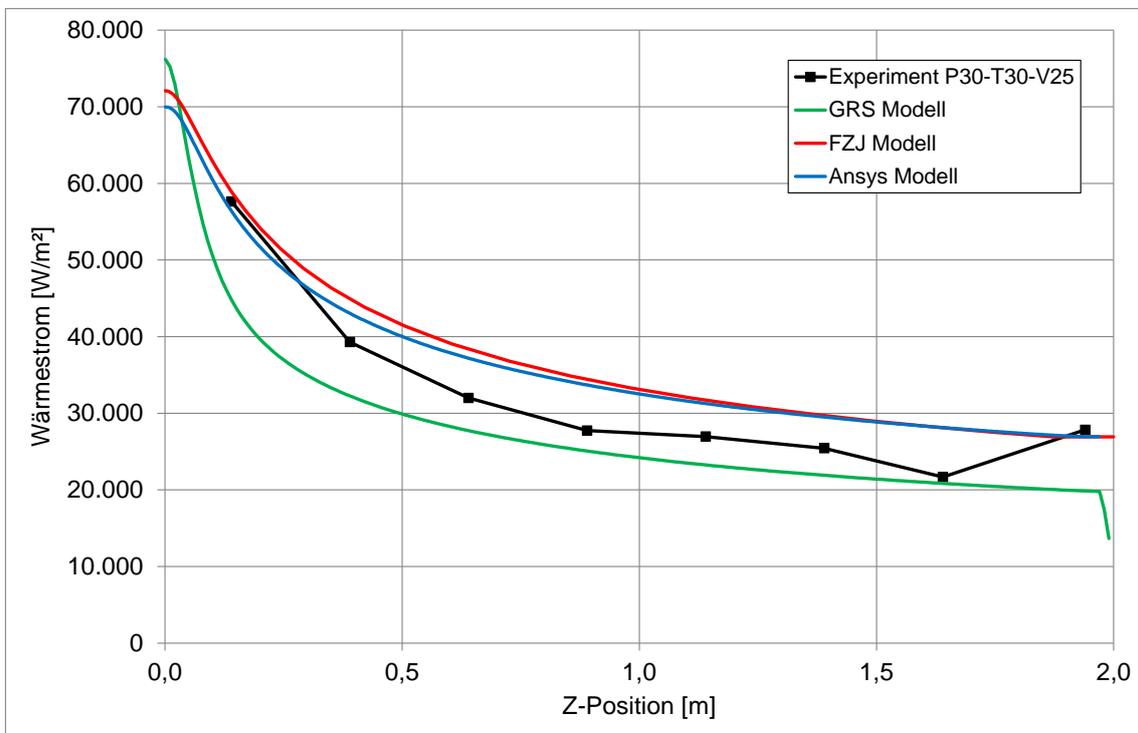


Abb. 2.2-15 Vergleich der Wärmestrome für Versuch P30\_T30\_V25

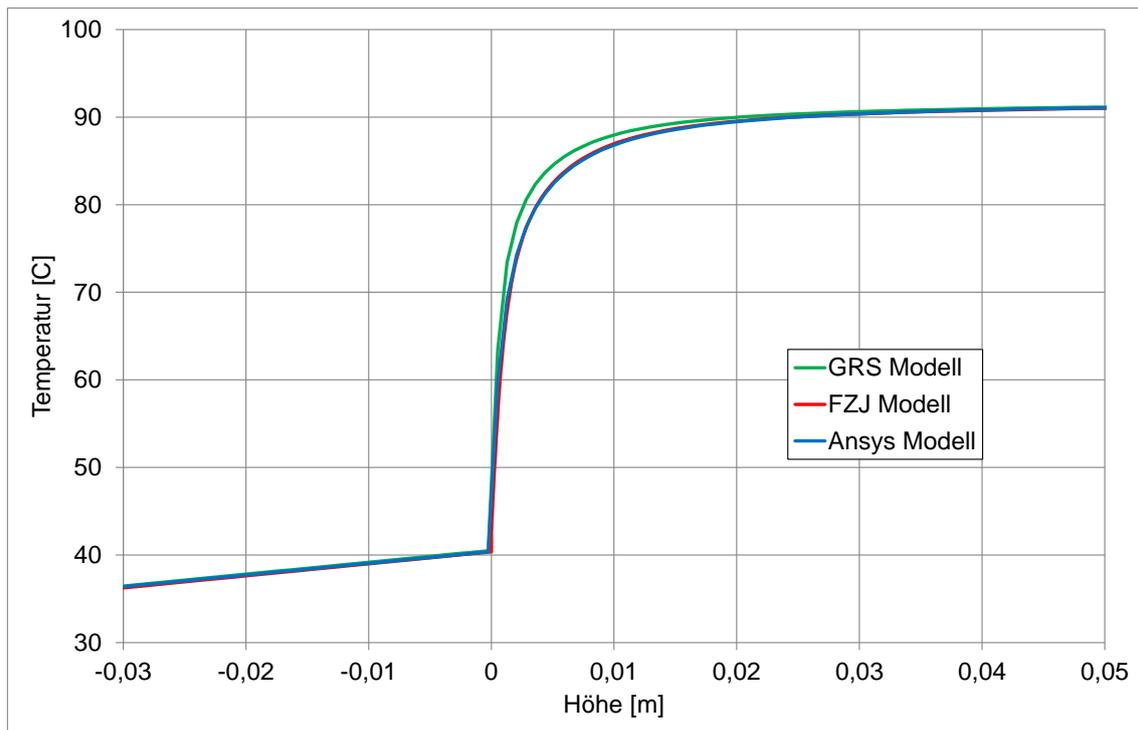


Abb. 2.2-16 Vergleich der Temperaturen an der Auslassöffnung (P20-T30-V25)

### 2.2.3.3 Durchführung einer Sensitivitätsanalyse

Im letzten Abschnitt wurde bereits an einem einzelnen Beispiel (Gitterfeinheit) gezeigt, dass bestimmte numerische Berechnungsparameter das Simulationsergebnis beeinflussen können. In diesem Abschnitt soll der Einfluss bestimmter Berechnungsparameter etwas systematischer untersucht werden. Dieses soll jedoch nicht mehr für alle drei Kondensationsmodelle geschehen.

Abb. 2.2-17 bis Abb. 2.2-19 zeigen den Einfluss der Auslass-Modellierung, des Diffusionsmodells und des Dampfmodells auf die berechnete Kondensationsrate (GRS-Rechnung P20-T30-V25). Jeder dieser Parameter zeigt einen eher kleinen Einfluss auf die berechnete Kondensationsrate.

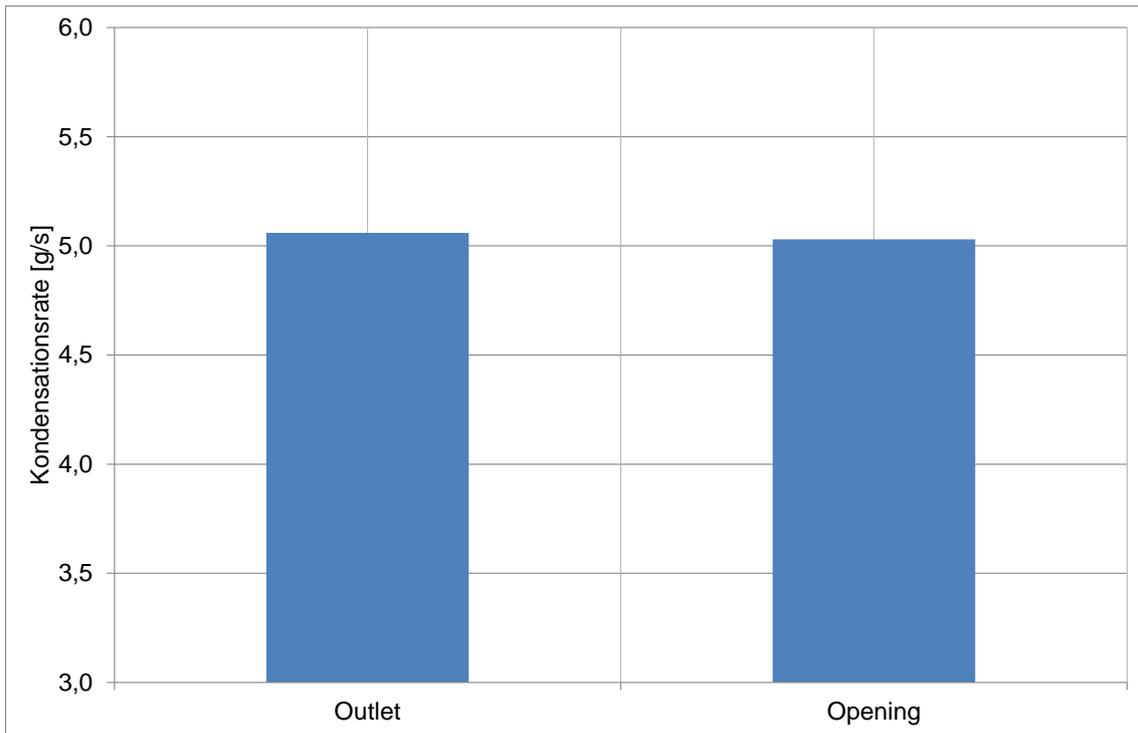


Abb. 2.2-17 Einfluss der Auslass-Modellierung auf die Kondensationsrate

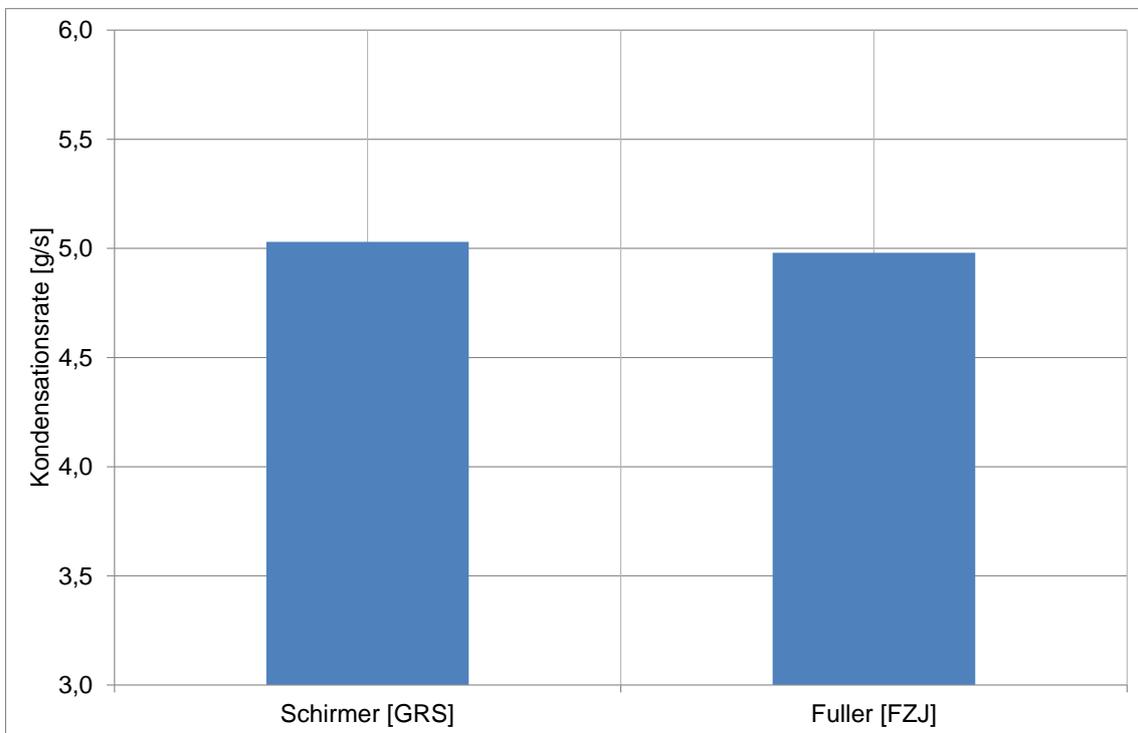


Abb. 2.2-18 Einfluss des Diffusionsmodells auf die Kondensationsrate

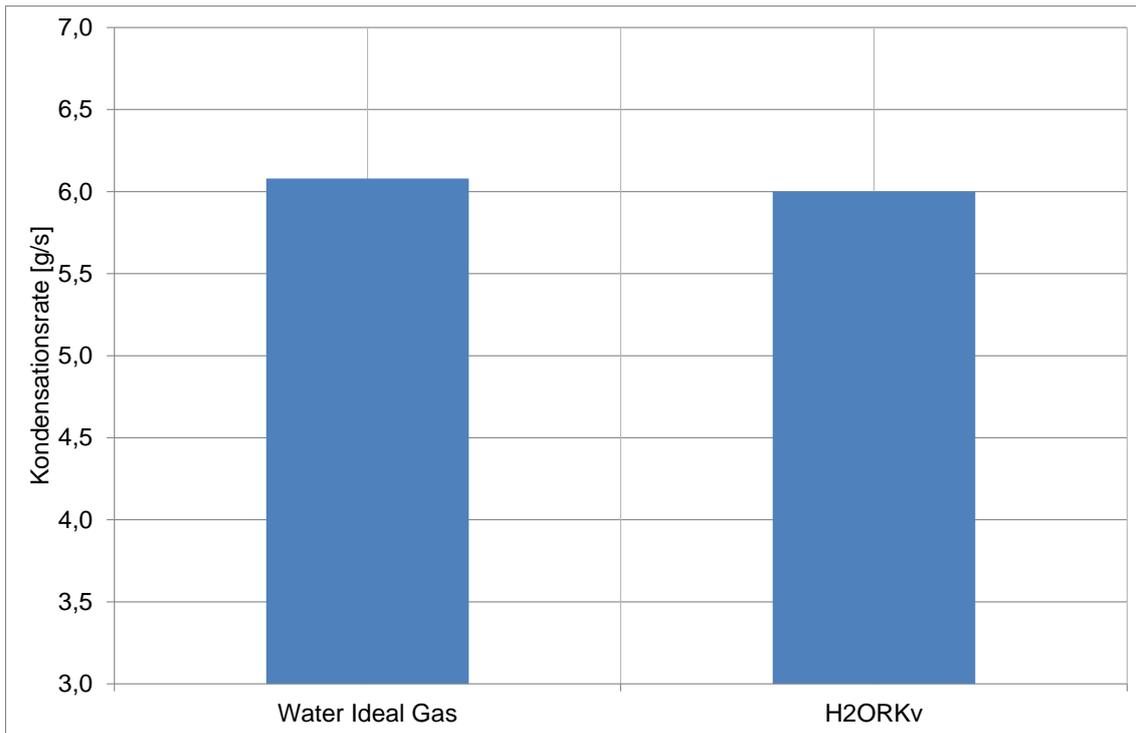


Abb. 2.2-19 Einfluss der Dampfmodellierung auf die Kondensationsrate

Abb. 2.2-20 zeigt die Gitterabhängigkeit der Kondensationsrate für die Kondensationsmodelle der GRS und des FZJ. Bei beiden Modellen steigt mit größer werdendem Gitter die Abweichung zum experimentellen Ergebnis. Das GRS-Modell berechnet mit dem größten Gitter (2,0 mm) allerdings eine zu geringe Kondensationsrate, während das FZJ-Modell für das größte Gitter eine zu hohe Kondensationsrate berechnet.

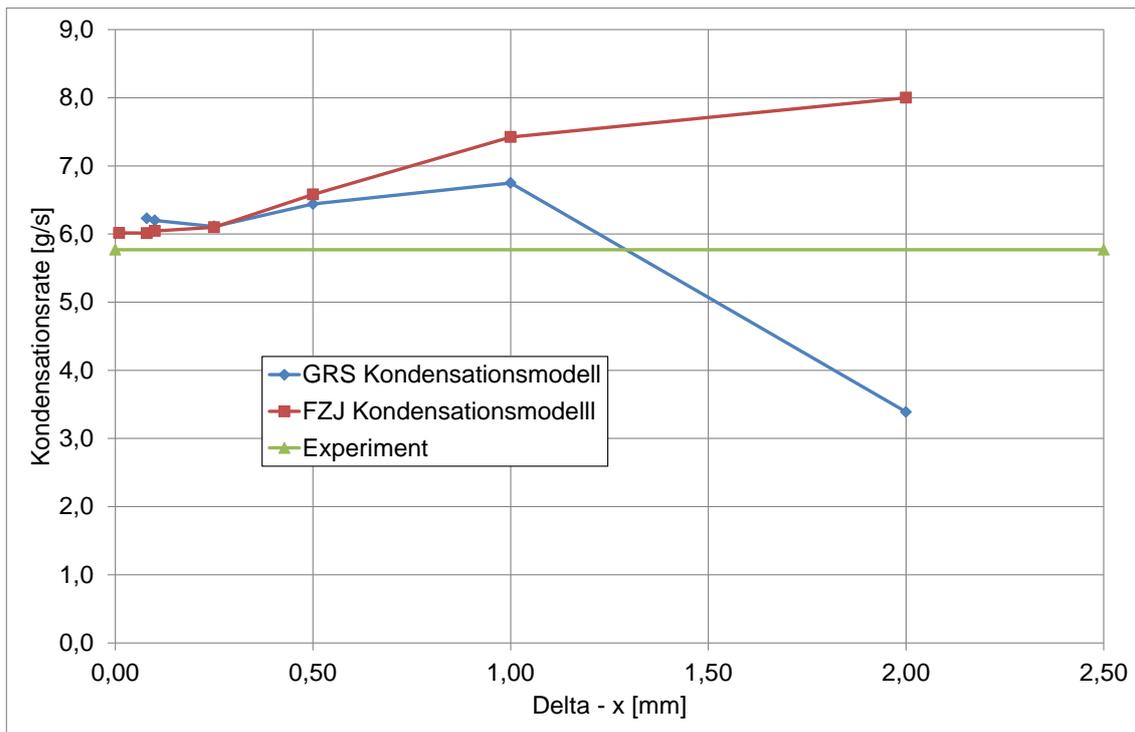


Abb. 2.2-20 Gitterabhängigkeit der Kondensationsrate (Versuch P20-T30-V25)

In Abb. 2.2-21 ist die Abhängigkeit der Kondensationsrate von der Zeitkonstante des Volumenkondensationsmodells dargestellt. Hier zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen dem GRS-Modell und dem FZJ-Modell. Während das FZJ Modell nahezu unabhängig von den Zeitkonstanten ist, nimmt die mit dem GRS-Modell berechnete Kondensationsrate mit zunehmender Zeitkonstante deutlich ab. Mit zunehmender Zeitkonstante findet wesentlich weniger Volumenkondensation statt. Es zeigt sich, dass in diesem Beispiel der Wandkondensationsanteil des GRS-Modells alleine (ohne die Volumenkondensation) eine deutlich zu geringe Kondensationsrate berechnet. Dieser Effekt wird durch die experimentelle Anordnung verstärkt, in der der Dampf sich nur eine sehr begrenzte Zeit im Strömungskanal aufhält ( $< 1$  s).

Abb. 2.2-22 zeigt den Dampfanteil am Auslass für drei unterschiedliche Modellannahmen: Nur Wandkondensation, nur Volumenkondensation und eine Kombination von Wand- und Volumenkondensation (nur für das GRS-Modell). Hier zeigt sich eine Kopplung zwischen den einzelnen Kondensationsmodellen. Die Kombination von Wand- und Volumenkondensation reduziert den Dampfanteil (am Auslass) wesentlich stärker als die Summe der einzelnen Modelle. Dieses Modellverhalten ist problematisch. Grundsätzlich wäre zu erwarten, dass sich die Modelle eventuell kompensieren könnten (was nicht im Volumen kondensiert, kann an der Wand kondensieren oder umgekehrt). Eine gegenseitige Verstärkung von Wand- und Volumenkondensation widerspricht jedoch den physikalischen Vorstellungen.

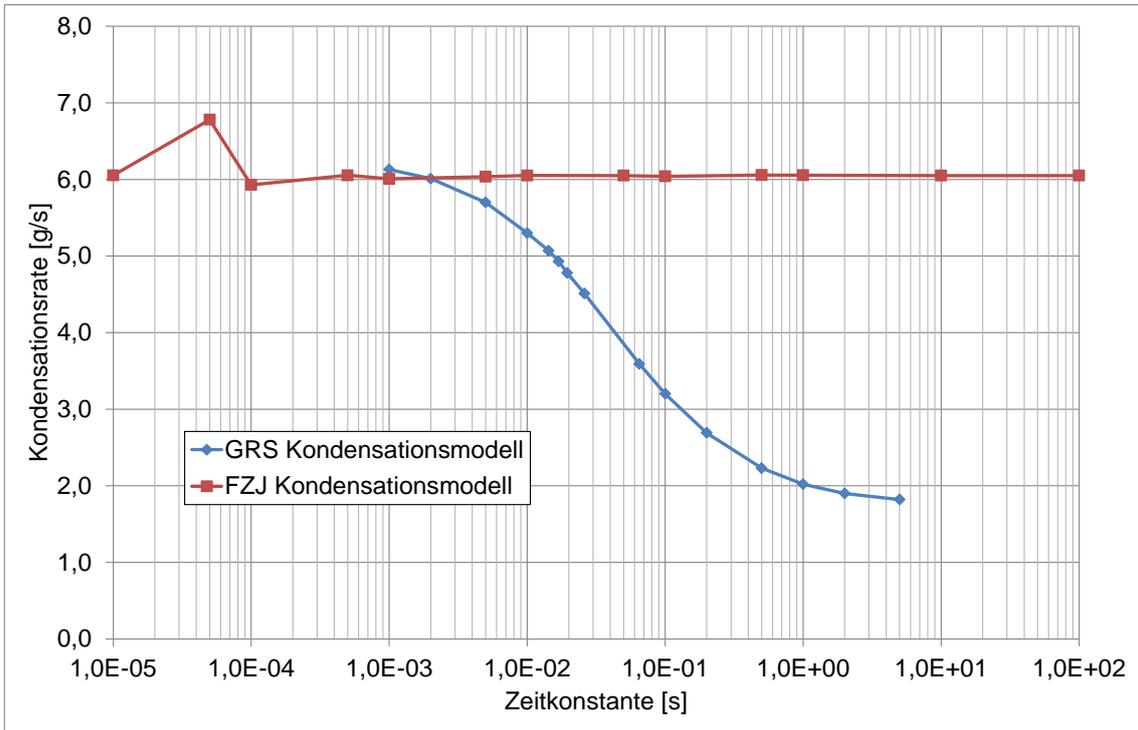


Abb. 2.2-21 Abhängigkeit der Kondensationsrate von der Zeitkonstante (Versuch P20-T30-V25)

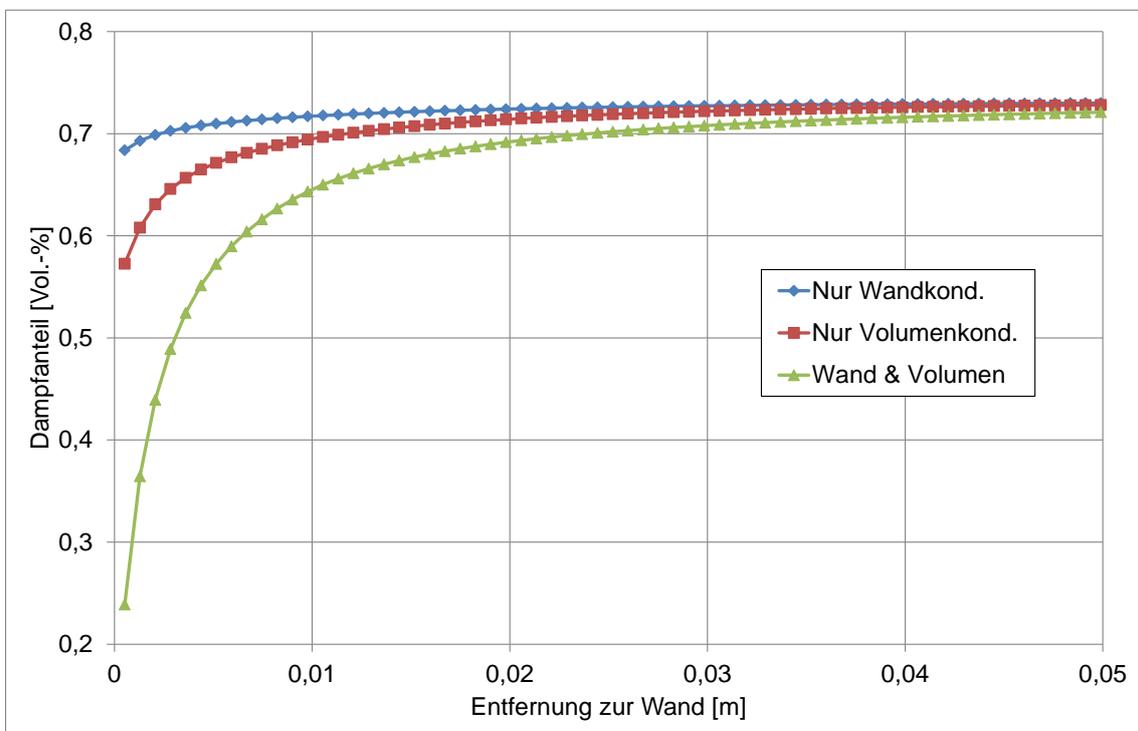


Abb. 2.2-22 Dampfanteil am Auslass in Abhängigkeit vom Kondensationsmodell (GRS Rechnungen)

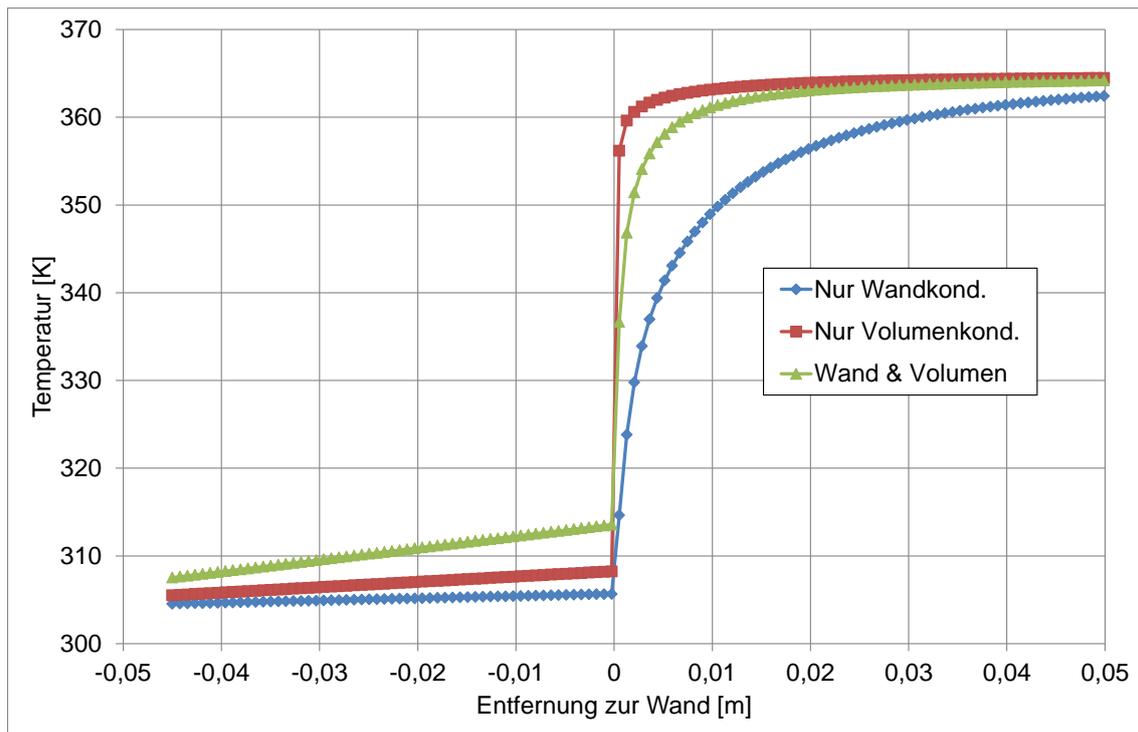


Abb. 2.2-23 Temperaturen am Auslass in Abhängigkeit vom Kondensationsmodell (GRS Rechnungen)

#### 2.2.4 THAI-Versuch TH-2

Beim THAI-Versuch TH-2 wird Dampf in den THAI-Behälter eingespeist (hierzu siehe Abb. 2.2-24). Dabei bildet sich im oberen Bereich eine Dampfschicht aus und der Druck steigt an. Dieser Druckanstieg wird im Wesentlichen durch den Kondensationsprozess begrenzt. Der Versuch TH-2 und die Nachrechnung des Versuches durch die GRS wurden schon im Abschlussbericht des Vorläufer-Projektes beschrieben /SCH10/. Dieser Versuch ist jetzt mit dem gleichen Rechengitter und den gleichen Start- und Randbedingungen, aber statt mit dem GRS-Kondensationsmodell mit dem FZJ-Kondensationsmodell (durch das FZJ) nachgerechnet worden. Eine weitere Berechnung wurde mit dem neuen ANSYS-Modell durchgeführt. Hierbei wurde allerdings schon ein optimiertes Gitter (feiner in Wandnähe, bessere Darstellung des Inlet-Bereiches) und optimierte Parameter (z. B. mit Wärmestrahlung) verwendet, da die früheren Rechnungen/Parametersätze nicht mehr dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. In Tab. 2.2-4 findet sich eine Auflistung der verwendeten Berechnungsparameter. Der Vergleich der unterschiedlichen Berechnungsergebnisse wird in den folgenden Abschnitten diskutiert.

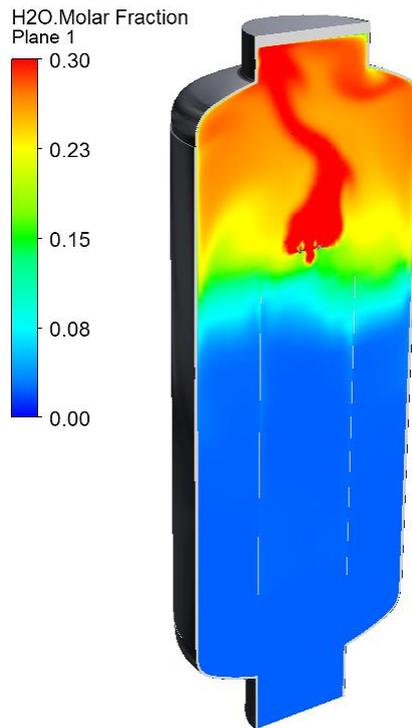


Abb. 2.2-24 Dampfeinspeisung im TH-2 Experiment

Tab. 2.2-4 Infobox THAI TH-2

Experiment	THAI TH-2		
Phänomene	Kondensation		
Rechnung	<b>GRS Rechnung</b>	<b>FZJ Rechnung</b>	<b>ANSYS Rechnung</b>
Elementzahl	162 463	162 463	337 616
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 26,8 Max. Expansion Factor: 272,4 Max. Aspect Ratio: 173,8	Min. Winkel: 26,8 Max. Expansion Factor: 272,4 Max. Aspect Ratio: 173,8	Min. Winkel: 24,1 Max. Expansion Factor: 321 Max. Aspect Ratio: 697
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKv	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKv	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKv
Turbulenzmodell	SST	SST	SST
Diffusionskoeffizient	Ohne	Ohne	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Ohne	Ohne	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Kondensationsmodell	GRS-Modell	FZJ-Modell	ANSYS-Modell
Wandkondensation	Ja	Ja	Ja
Volumenkondensation	Ja	Ja	Ja

Konvergenz	RMS < 0,00012	RMS < 0,00012	RMS < 0,0001
CFX-Version	11.0	13.0	14.0

### 2.2.4.1 Vergleich der Simulationsergebnisse

In Abb. 2.2-25 wird der mit dem Kondensationsmodell (GRS, FZJ und ANSYS) simulierte Druckverlauf mit dem experimentellen Druckverlauf des THAI Experiments TH-2 verglichen. Es zeigt sich, dass alle drei Modelle in der Lage sind den Druckverlauf qualitativ richtig wiederzugeben. Das GRS-Modell zeigt zwar quantitativ die beste Übereinstimmung mit dem Druckverlauf, die (qualitative) Steigung der Kurve wird jedoch am besten vom ANSYS-Modell wiedergegeben. Der Druckverlauf ist der wichtigste Hinweis auf die berechnete Kondensationsrate, da diese beiden Größen unmittelbar miteinander zusammenhängen.

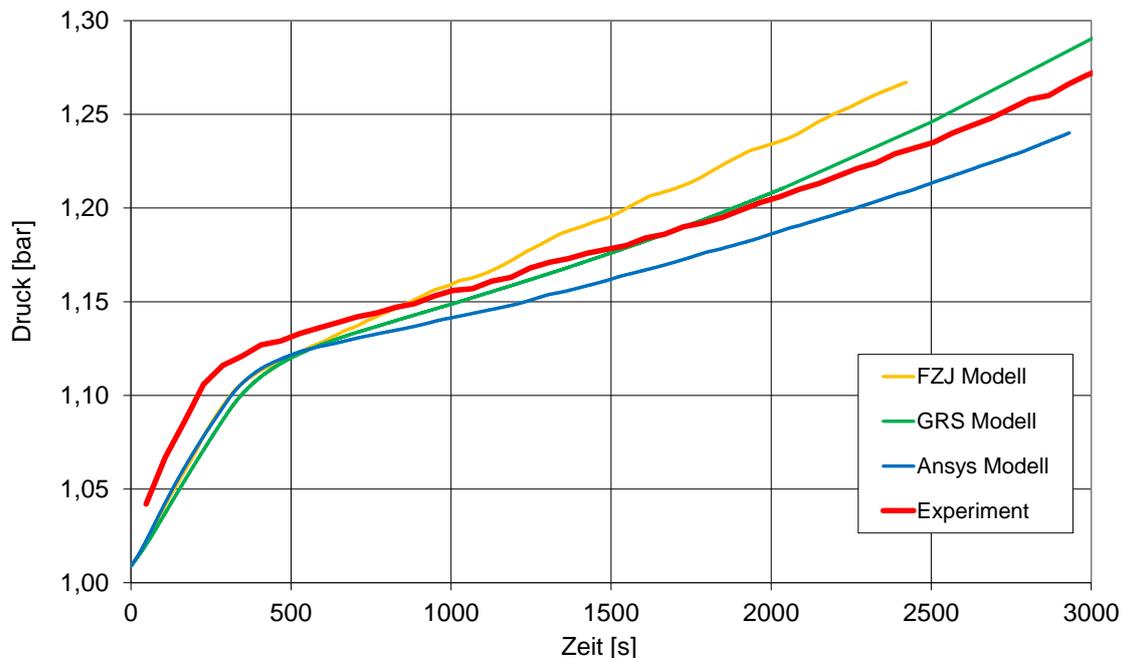


Abb. 2.2-25 Vergleich des simulierten Druckverlaufs (GRS, FZJ und ANSYS) mit den experimentellen Daten

In Abb. 2.2-26 bis Abb. 2.2-28 findet sich ein Vergleich der simulierten Temperaturverläufe mit den experimentellen Werten. Im oberen Bereich des THAI-Behälters (siehe Abb. 2.2-26 und Abb. 2.2-27) berechnen die Simulationen mit dem FZJ-Modell und mit dem ANSYS-Modell eine niedrigere Temperatur als die Simulation mit dem GRS-Modell. Damit liegen die Temperaturwerte des FZJ-Modells und des ANSYS-Modells näher an den experimentellen Werten. Ursache hierfür könnte sein, dass bei der GRS-Rechnung ein wesentlich höherer

Anteil an Volumen Kondensation stattfindet (und dafür weniger Wandkondensation). Die dabei frei werdende Wärme sorgt für den Temperaturanstieg im oberen THAI-Behälter. Im mittleren und unteren Bereich des THAI-Behälters zeigen die Berechnungen mit drei unterschiedlichen Modellen einen sehr ähnlichen Temperaturverlauf (siehe Abb. 2.2-28). Hier liegen alle Simulationen unterhalb der experimentellen Werte. Die Ursache hierfür liegt möglicherweise in der geometrischen Modellierung der Dampfeinspeisung.

Insgesamt findet man also für alle drei Kondensationsmodelle eine mittlere bis gute Übereinstimmung des Druck- und Temperaturverlaufs mit den experimentellen Werten.

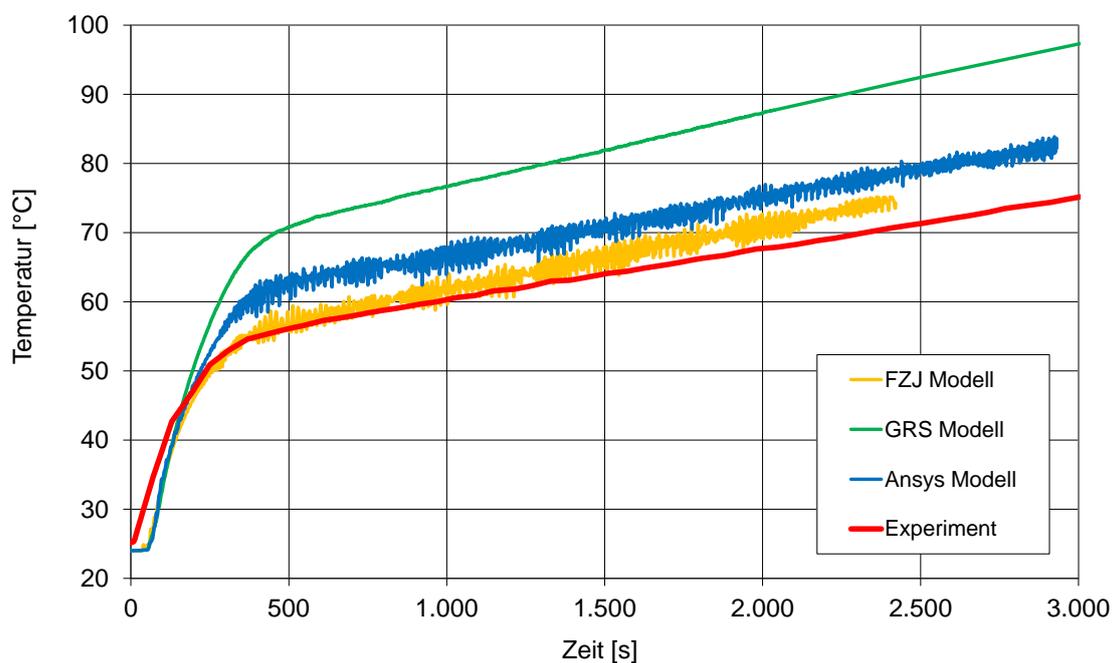


Abb. 2.2-26 Vergleich des Temperaturverlaufs in 7,0 m Höhe

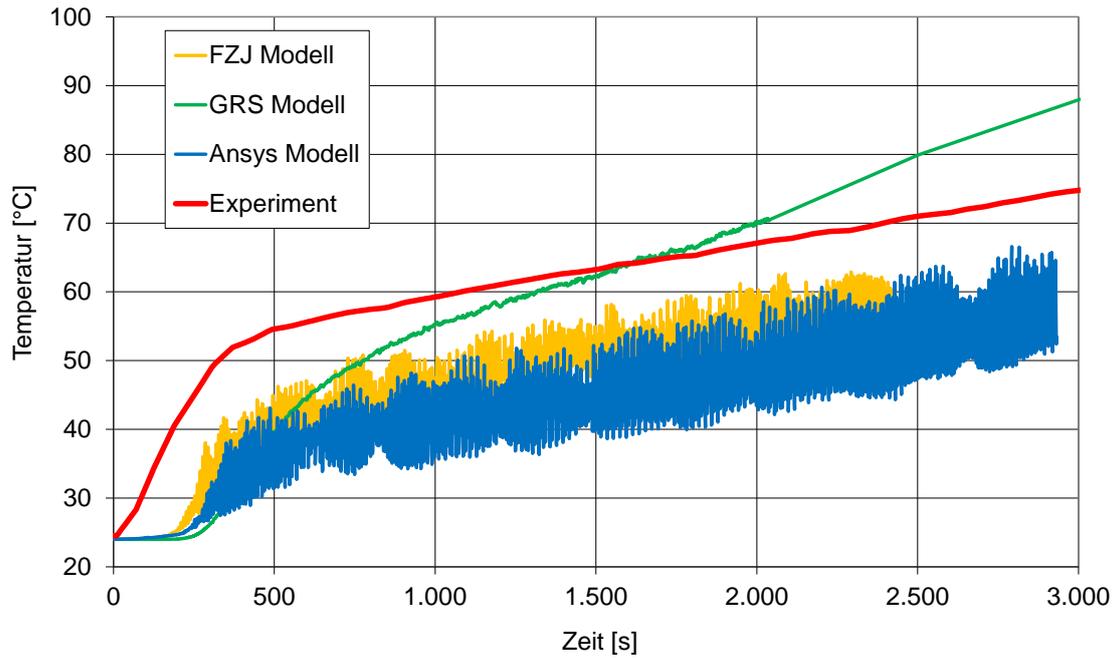


Abb. 2.2-27 Vergleich des Temperaturverlaufs in 6,3 m Höhe

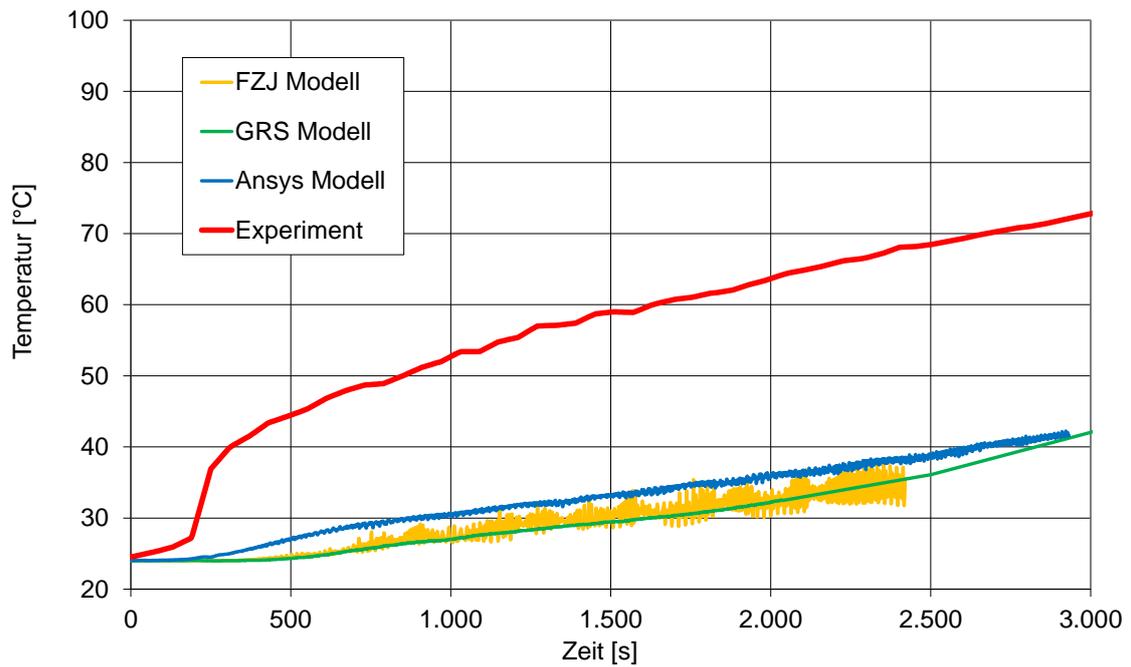


Abb. 2.2-28 Vergleich des Temperaturverlaufs in 5,6 m Höhe

## 2.2.5 Zusammenfassung des Modellvergleichs

Im Folgenden werden aller untersuchten Aspekte noch einmal stichpunktartig zusammengefasst:

- *Physikalische Modelle/Korrelationen:* Die Korrelationen für den Sättigungsdampfdruck sind in GRS-, FZJ und ANSYS-Modell sehr ähnlich und zeigen keine oder nur sehr geringe Unterschiede (siehe Abb. 2.2-1). Sowohl das FZJ- als auch das ANSYS-Modell waren (in ihrer ursprünglichen Fassung) jedoch reine Wandkondensationsmodelle. Beide mussten jeweils um das (GRS-) Volumenkondensationsmodell ergänzt werden (siehe Anhang 2.6.1), sobald Volumenkondensation stattfinden kann (z. B. in allen großvolumigen Versuchen und Containmentrechnungen).
- *Implementierung:* Das FZJ-Modell und das GRS-Modell verwenden USER-FORTRAN Routinen. Das ANSYS-Kondensationsmodell wurde direkt in den CFX-Sourcecode implementiert und lässt sich ab Version 14 über die Preprocessor-Oberfläche hinzuschalten. Damit wurde für das ANSYS-Modell die beste Art der Implementierung geschaffen.
- *Regelung:* Das FZJ-Modell hat durch eine PID-Regelung ein genaueres Regelungsverhalten und geringere Regelabweichungen als das GRS-Modell, welches einem reinen P-Regler entspricht. Da das ANSYS-Modell der GRS nicht als Source-Code vorliegt, können keine Angaben zur Regelung dieses Modells gemacht werden.
- *Vergleich mit dem Experiment:* Insgesamt findet sich bei allen drei Modellen (GRS, FZJ und ANSYS) eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Dieses gilt sowohl für die CONAN-Versuche als auch für den THAI-Versuch TH-2. Bei den CONAN-Versuchen findet sich allerdings für das ANSYS- und das FZJ-Modell eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment als für das GRS-Modell. Beim THAI-Versuch TH-2 wird die globale Kondensationsrate von allen drei Modellen gut wiedergegeben. Dieses zeigt sich bei einer Betrachtung des Druckverlaufs, der hierfür die entscheidende Größe darstellt (siehe Abb. 2.2-25). Das GRS-Modell zeigt zwar quantitativ die beste Übereinstimmung mit dem Druckverlauf, die (qualitative) Steigung der Kurve wird jedoch am besten vom ANSYS-Modell wiedergegeben.
- *Sonstiges:* Beim GRS-Modell gibt es eine gegenseitige Verstärkung von Wand- und Volumenkondensationsmodell (siehe Kapitel über CONAN-Versuchsnachrechnung). Eine solche Kopplung ist problematisch, da sie nicht den physikalischen Gegebenheiten entspricht.

Da die physikalischen Korrelationen und die experimentellen Ergebnisse für alle drei Kondensationsmodelle recht ähnlich sind, das ANSYS-Modell aber die beste Implementierung aufweist, wird das (um das GRS-Volumenkondensationsmodell erweiterte) ANSYS-Wandkondensationsmodell für die weiteren Arbeiten ausgewählt.

## 2.3 Weitere Validierungen des ANSYS-Modells

Zur weiteren Absicherung der Entscheidung für das ANSYS-Modell wurden noch weitere Rechnungen und Parameterstudien mit diesem Modell durchgeführt. Anhand des TH-2 Experimentes werden weitere Parameterstudien, wie z. B. eine Gitterstudie durchgeführt. Dieses wird im Folgenden erläutert. Weiter unten findet sich noch eine Validierung des ANSYS-Modells durch Nachrechnung des THAI TH-24 Versuchs.

### 2.3.1 Parameterstudien anhand des TH-2 Experiments

#### Gitterabhängigkeit

Um die Gitterabhängigkeit zu untersuchen wurden vier Berechnungen mit unterschiedlich feinem Gitter in Wandnähe durchgeführt. Dabei hatte jeweils die erste Zelle in der Gasphase eine Dicke von 20 mm, 7,5 mm, 2 mm und 1 mm. Die weiteren Berechnungsparameter wurden in dieser Studie konstant gehalten; sie sind in Tab. 2.3-1 nachzulesen. In Abb. 2.3-1 ist jeweils der Druckverlauf für diese vier Berechnungen dargestellt. Es zeigt sich, dass die Änderung der Gitterfeinheit von 20 mm auf 7,5 mm sowie von 7,5 mm auf 2 mm jeweils zu einer deutlichen Änderung des Druckverlaufes führen. Je feiner das Netz in Wandnähe ist, desto niedriger ist der berechnete Druck. Er liegt bei den Analysen mit den feinsten Gittern dann deutlich unterhalb des experimentellen Wertes. Bei der Änderung der Gitterfeinheit von 2 mm auf 1 mm ist nahezu keine Änderung des Drucks mehr zu beobachten. Hier wurde der Bereich der Gitterunabhängigkeit erreicht.

Tab. 2.3-1 Infobox THAI TH-2 (Gitterstudie)

Experiment	THAI TH-2
Phänomene	Kondensation
Elementzahl	337 616
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 24,1 Max. Expansion Factor: 321 Max. Aspect Ratio: 697

Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKv
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Kondensationsmodell	ANSYS-Modell, Zeitkonstante Volumenk. = 100 s
Rekomodell	Ohne
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	14.0

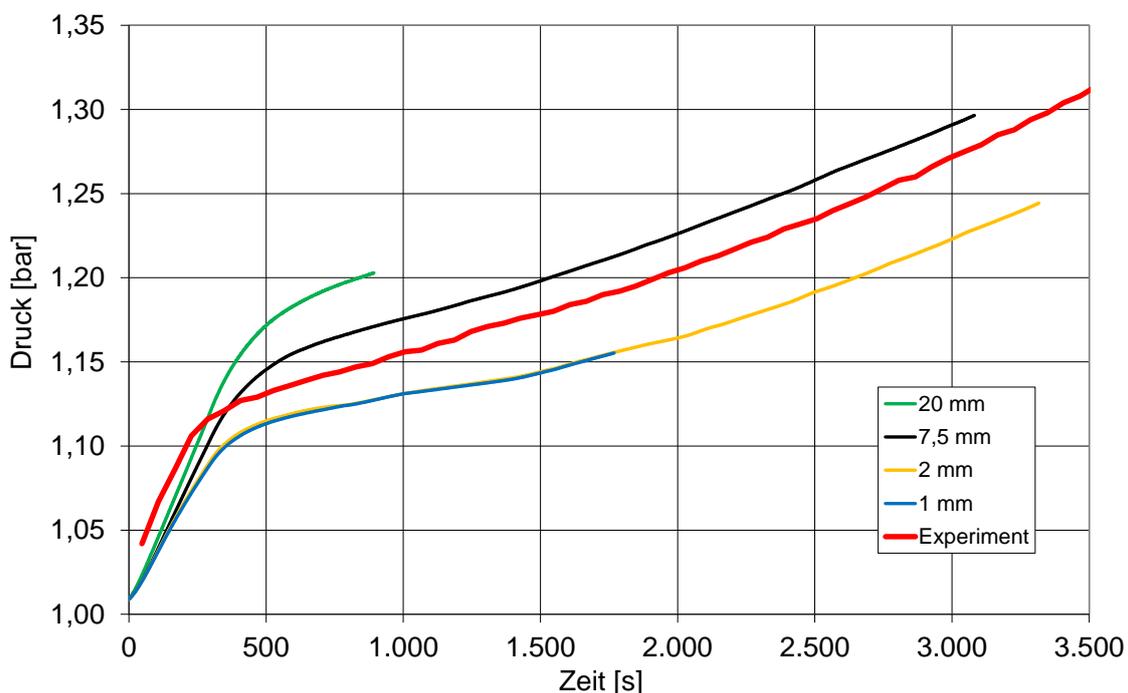


Abb. 2.3-1 Abhängigkeit des Drucks von der Gitterfeinheit in Wandnähe

### Variation der Zeitkonstante für das Volumenkondensationsmodell

Die Zeitkonstante des Volumenkondensationsmodells ist ein Parameter der beschreibt wie schnell das physikalische System in den Gleichgewichtszustand übergeht. Da für diesen Wert keine physikalischen Daten vorliegen wurde hier eine Sensitivitätsstudie durchgeführt. Dabei wurden drei Rechnungen jeweils mit den Zeitkonstanten 0,1 s, 10 s und 100 s durchgeführt. 100 s stellen dabei einen Extremwert dar, der sehr wahrscheinlich nicht der Physik entspricht. Alle weiteren Simulationsparameter wurden während dieser Studie konstant gehalten. Sie sind in Tab. 2.3-2 nachzulesen.

Bei den Rechnungen zeigt sich nur ein sehr geringer Einfluss der Zeitkonstanten auf den Druck. Die lokalen Temperaturwerte werden jedoch deutlich durch eine Änderung dieser Zeitkonstanten beeinflusst; dieses ist in Abb. 2.3-2 zu sehen. Hierbei findet sich beim Wert von 100 s die größte Übereinstimmung des Temperaturverlaufs mit dem Experiment. Dieses könnte darauf hindeuten, dass die Volumencondensation in diesem Experiment eine eher geringe Rolle spielt.

Tab. 2.3-2 Infobox THAI TH-2 (Studie Zeitkonstante)

Experiment	THAI TH-2
Phänomene	Kondensation
Elementzahl	260 574
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 24,1 Max. Expansion Factor: 321 Max. Aspect Ratio: 697
Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORkV
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Kondensationsmodell	ANSYS-Modell
Rekomodell	Ohne
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	14.0

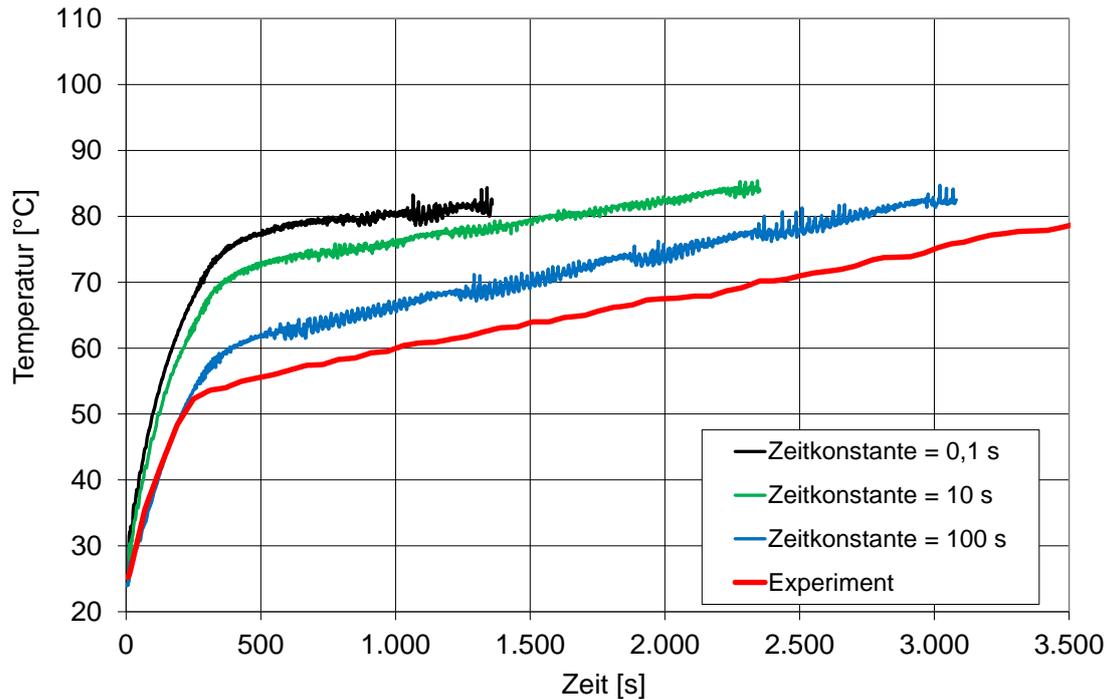


Abb. 2.3-2 Abhängigkeit des Temperaturverlaufs in 8,4 m Höhe von der Zeitkonstanten des Volumenkondensationsmodells

### Variation des Materialmodells

Um den Einfluss des Materialmodells auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlichen Materialmodellen durchgeführt. Hierbei wurden für den Dampf einmal ein ideales Gasmodell mit Nasa-Polynomen für die spezifische Wärmekapazität (Material in CFX: H<sub>2</sub>O) und zum anderen ein Redlich-Kwong-Modell (Material in CFX: H<sub>2</sub>ORKv) verwendet. Auch hierbei wurden alle weiteren Simulationsparameter konstant gehalten, sie sind in Tab. 2.3-3 nachzulesen.

In Abb. 2.3-3 ist der Einfluss des Materialmodells auf den berechneten Druckverlauf dargestellt. Hier zeigt sich das der Druckanstieg zwar parallel erfolgt, der absolute Druck jedoch für das Redlich-Kwong-Modell etwas höher (und damit etwas näher am Experiment) liegt.

Tab. 2.3-3 Infobox THAI TH-2 (Studie Materialmodell)

Experiment	THAI TH-2
Phänomene	Kondensation
Elementzahl	826 073
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 10,0 Max. Expansion Factor: 220 Max. Aspect Ratio: 347

Materialien	Air Ideal Gas, H <sub>2</sub> ORKV oder H <sub>2</sub> O
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray, 64 Strahlen
Kondensationsmodell	ANSYS-Modell
Rekomodell	Ohne
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	14,0

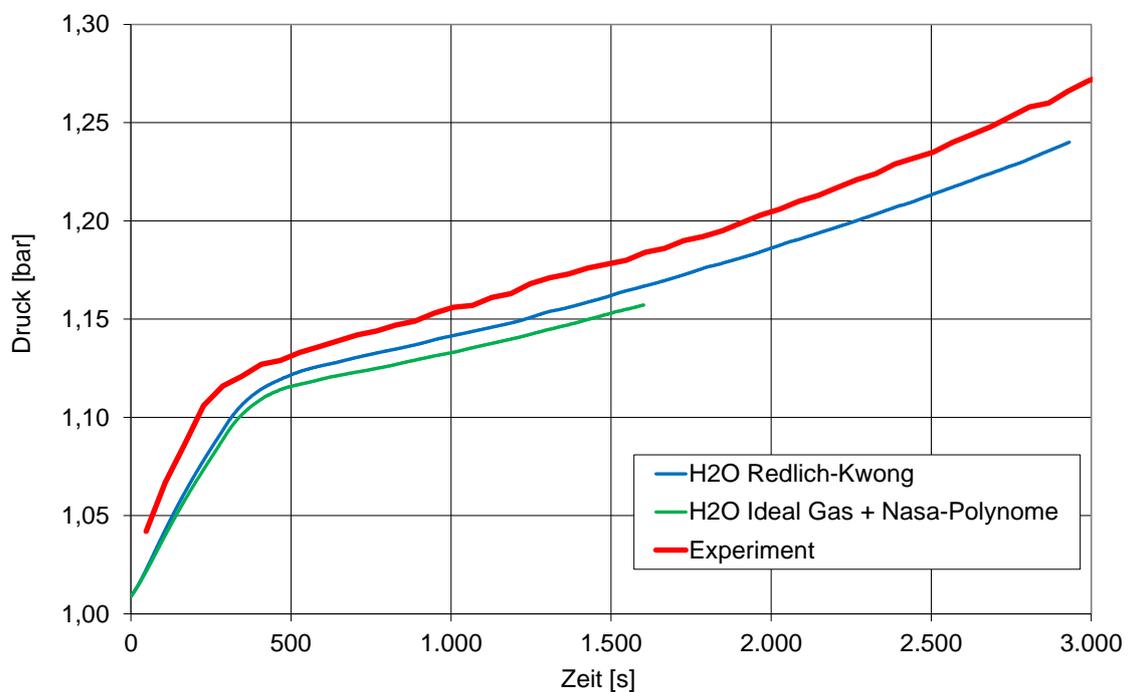


Abb. 2.3-3 Abhängigkeit des Drucks vom Materialmodell

### 2.3.2 Modellvalidierung anhand von TH-24

Auch das Experiment TH-24 wurde mit dem ANSYS-Kondensationsmodell nachgerechnet. Eine Beschreibung zu den TH-24 Simulationen findet sich in Kapitel 4.5.

### **2.3.3 Modellvalidierung anhand von Panda4bis**

#### **2.3.3.1 Zielsetzung**

Für die Validierung des GRS-Wand- und Volumenkondensationsmodells eignet sich auch das im Rahmen des SETH-Versuchsprogramms am Paul Scherer Institute in der Schweiz durchgeführte Panda4bis Experiment. Im folgenden Abschnitt soll geprüft werden ob die Neuimplementation des Wandkondensationsmodells erfolgreich war. Da das Kondensatmodell gegenwärtig noch nicht vollständig implementiert ist (es fehlt insbesondere noch die Berücksichtigung von Verdampfungsvorgängen), wurde bei den durchgeführten Simulationen das Kondensationsmodell ohne Kondensatmodellierung verwendet. Sobald die Implementation des Wandkondensatmodells abgeschlossen ist, wird die Simulation des Panda4bis Experiments wiederholt. Das Volumenkondensationsmodell hat sich nicht gegenüber den Rechnungen in RS1181 geändert.

Die Modellannahmen für das in RS1181 /SCH10/ verwendete Kondensationsmodell der GRS und für die Neuimplementation von ANSYS unterscheiden sich nur unwesentlich (Abschnitt 2.2). Deshalb ist zu erwarten, dass sich die Simulationsergebnisse für beide Modelle ebenfalls nicht deutlich unterscheiden.

#### **2.3.3.2 Geometrie und Randbedingungen**

Der Versuchsstand besteht aus zwei Behältern D1 und D2. (Abb. 2.3-4). In den Behälter D1 strömt horizontal Dampf mit einem mittleren Massenstrom von 54,16 g/s ein. Die Temperatur des Dampfes beträgt 107,8 °C und liegt damit nur knapp unter der Sättigungstemperatur des Wassers bei 1,3 bar Druck. Das Rohr, durch das der Dampf einströmt, befindet sich in einer Höhe von 2 m über dem Behälterboden und endet in der Mitte des Behälters. Die Dauer der Einspeisung beträgt 7200 s. In der oberen Kuppel des Behälters D2 befindet eine ein Ventil, mit dem der Druck in den Behältern auf konstant 1,3 bar gehalten wird. Zu Beginn des Versuches befindet sich trockene Luft mit einer Temperatur von 76 °C im Versuchsstand. Die Außenwände werden ebenfalls auf 76 °C gehalten. Bei diesen Start- und Randbedingungen ist mit Kondensationsvorgängen zu rechnen. In allen Simulationen erfolgt die Turbulenzmodellierung mit dem SST-Modell. Das CFD Gitter besteht aus ca. 247 000 Zellen wobei das Gitter in Wandnähe verfeinert wurde, so dass  $\Delta x_{\text{wand}} \sim 2$  cm. Eine detaillierte Beschreibung der Modelle und des CFD-Gitters in /SCH10/ zu finden.

Es wurde eine weitere Simulation durchgeführt, bei der die Wärmestrahlung mit dem Discrete Transfer Modell berechnet wird. Der Absorptionskoeffizient für Dampf wird mit Hilfe der in Abschnitt 4 hergeleiteten Korrelation berechnet.

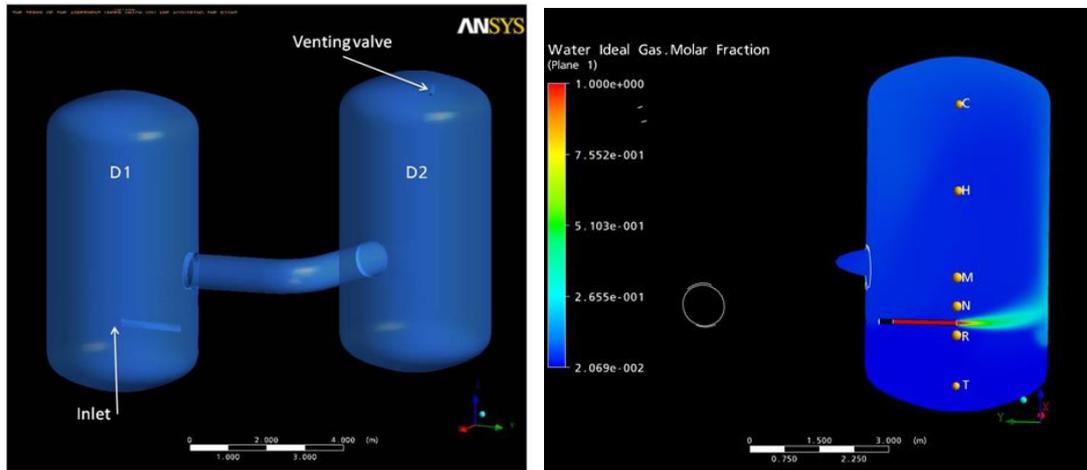


Abb. 2.3-4 Links: Geometrie beim Panda4bis –Versuch, rechts: Messstellen im Behälter D1

### 2.3.3.3 Diskussion der Versuchsergebnisse

Die Nachrechnung von Panda4bis mit dem neuen Wandkondensationsmodell liefert für die Dampfkonzentration und auch für die Temperaturen nahezu gleiche Ergebnisse wie das alte Wandkondensationsmodell (Abb. 2.3-5, Abb. 2.3-6). Daraus kann gefolgert werden, dass die Neuimplementation des Wandkondensationsmodells erfolgreich war. Es treten allerdings weiterhin dieselben Abweichungen gegenüber den experimentellen Daten auf. Insbesondere in der unteren Hälfte des 2. Behälters D2 zeigen die Temperatur und die Dampfkonzentration einen anderen Verlauf. Eine deutliche Verbesserung kann für diesen Bereich erst erwartet werden, wenn die das vollständige Kondensatmodell für Wand- und Volumenkondensation zur Anwendung kommt, da in diesem Bereich im Experiment Verdampfungsvorgänge aufgetreten sind. Eine detailliertere Diskussion der Nachrechnung des Experiments ist unter /SCH10/ zu finden.

Die Berücksichtigung von Wärmestrahlung hat auf die Dampfkonzentration an den Messstellen keinen Einfluss. Bei der Temperatur konnte dagegen bei den meisten Messpunkten eine bessere Übereinstimmung erzielt werden (Abb. 2.3-6). Bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung wird die Temperatur in D1 in der Anfangsphase (bis ca. 750 s) in besserer Übereinstimmung zum Experiment berechnet. Danach hat das Strahlungsmodell keinen signifi-

kanten Einfluss auf die Temperatur; auch ohne Strahlungsmodellierung kann die Temperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. In der oberen Hälfte des 2. Behälters (D2C20, D2L20, Abb. 2.3-6) kann durch Berücksichtigung der Wärmestrahlung in den ersten 1500 s ebenfalls eine deutliche Verbesserung erzielt werden. Danach hat auch hier die Wärmestrahlung keinen signifikanten Einfluss mehr. Im unteren Bereich des Behälters (D2R20, D2S20) bewirkt die Wärmestrahlung eine Temperaturerhöhung ab ca. 1500 s, während ohne Strahlungsmodell die Temperatur nahezu konstant bleibt. Im Experiment dagegen sinkt die Temperatur sogar ab. In diesem Bereich treten Verdampfungsvorgänge auf, die gegenwärtig noch nicht modelliert werden. Deshalb kann aus diesen Abweichungen noch kein Rückschluss auf die Strahlungsmodellierung gezogen werden.

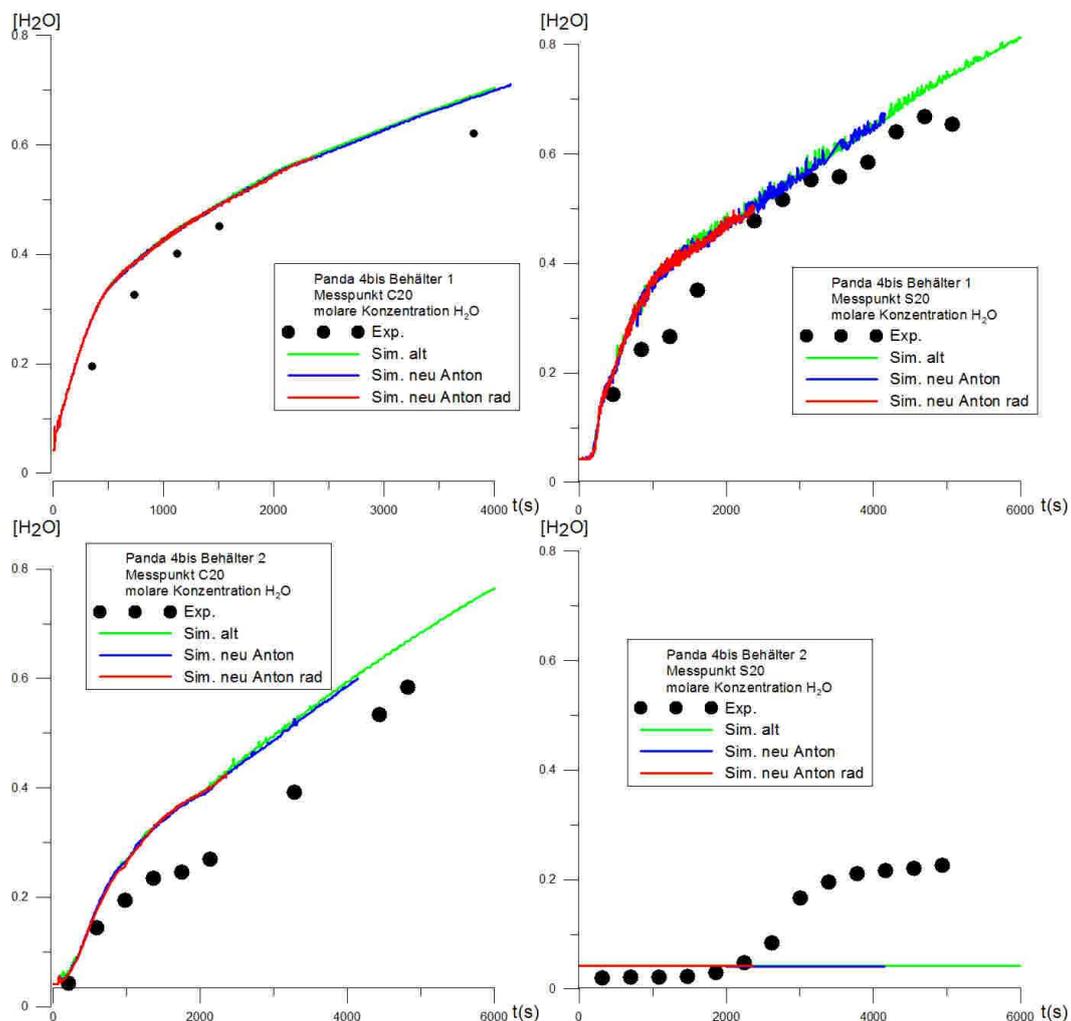
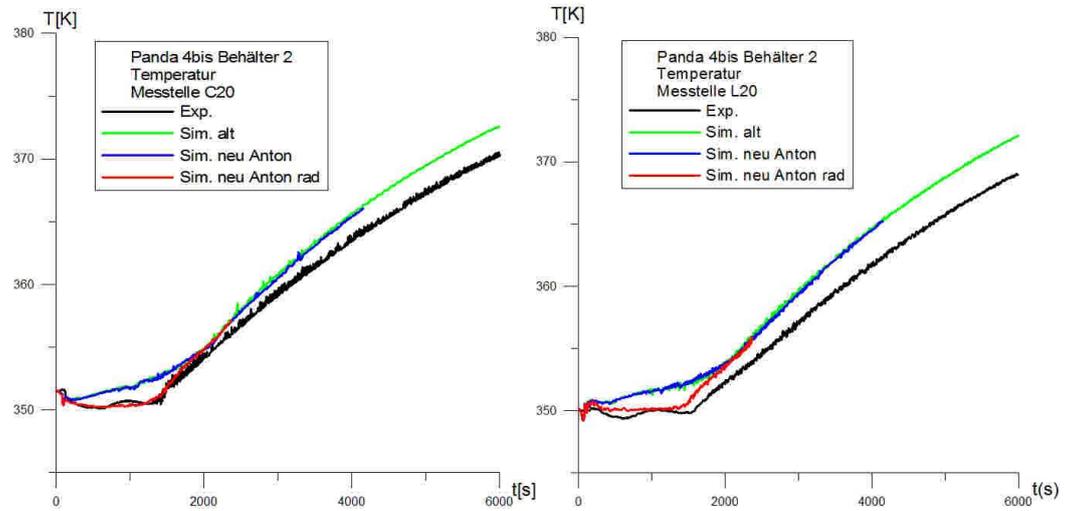
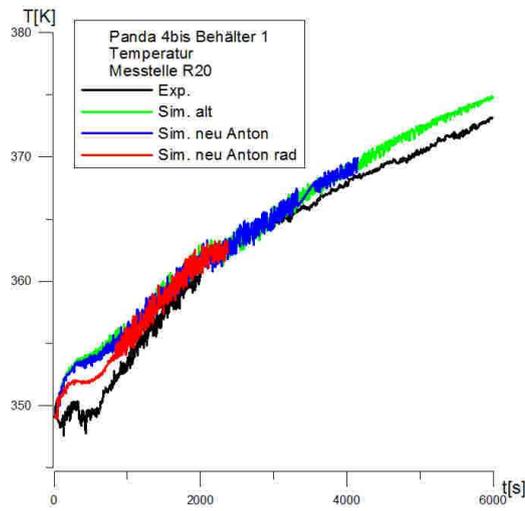
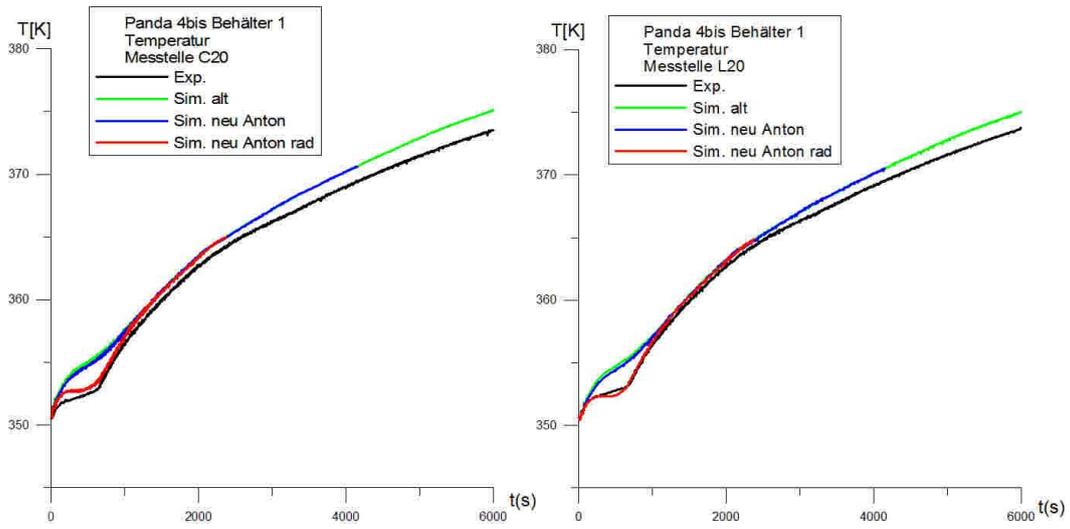


Abb. 2.3-5 Molare Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern



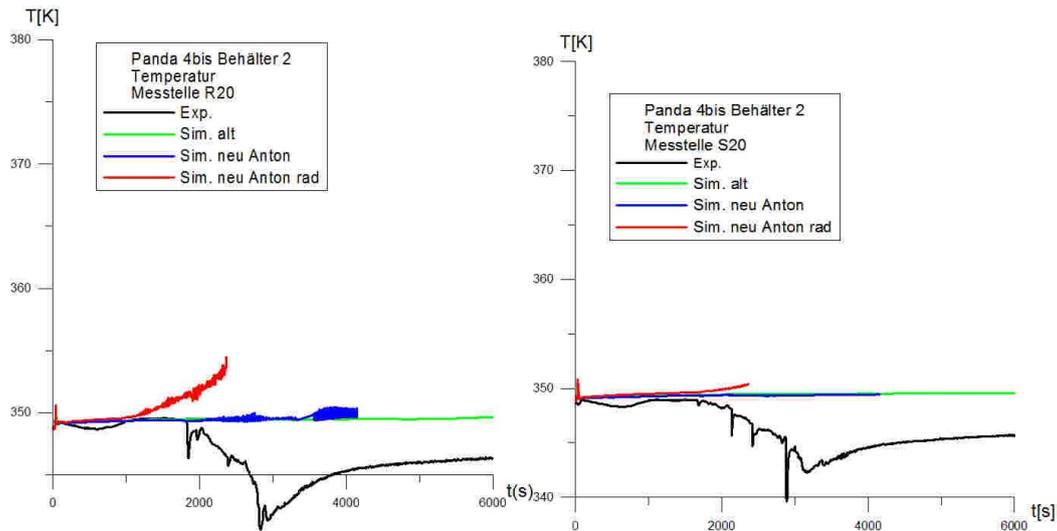


Abb. 2.3-6 Temperatur an verschiedenen Messstellen in beiden Behältern

## 2.4 Entwicklung eines einfachen Modells zur Behandlung des Kondensates

### 2.4.1 Prozessbeschreibung

Beim bisherigen Wand-Kondensationsmodell wurde der kondensierte Dampf an der Wand aus dem Volumen entfernt und nicht weiter behandelt. Dadurch entstand allerdings ein Fehler in der Massenbilanz und aus diesem Grund sollte im Vorhaben ein Modell entwickelt werden, das das entstandene Kondensat in das vorhandene Modell integriert. Ein ähnlicher Fehler entsteht auch bei der Volumenkondensation. Hier entwickelt das IKE Stuttgart ein verbessertes Modell.

Nachdem der Dampf bei der Wandkondensation an der Wand kondensiert ist, finden die folgenden Prozesse statt (hierzu siehe auch Abb. 2.4-1):

- Das kondensierte Wasser bildet eine Schicht auf der Wand (Kondensatfilm).
- Dieser Kondensatfilm kann charakterisiert werden durch verschiedene Größen; hierzu gehören: Filmdicke und Temperatur des Kondensatfilms.
- Dieser Kondensationsfilm beeinflusst den Wärmetransport von der Gasphase in die Wand bzw. umgekehrt.
- Der Kondensatfilm fließt im Falle freier Konvektion laminar ab /KEL11/.
- Das abfließende Wasser kann sich auf dem Boden des Raumes oder in entsprechenden Senken sammeln (Wasservorlage). Es kann u.U. auch in andere angeschlossene Räume abfließen.

- Je nach Druck- und Temperaturverhältnissen kann das Wasser sowohl aus dem Kondensatfilm als auch aus der Wasservorlage wieder verdampfen und erneut in die Gasphase übergehen.

Als erstes soll die Kondensatmenge auf der Wand bilanziert werden. In einem vereinfachten Modell wird angenommen, dass es eine maximale Filmdicke gibt und – sobald diese überschritten ist – das Wasser in den Sumpf übertragen wird. Ein ähnliches vereinfachtes Modell ist z. B. in COCOSYS implementiert. Weitere Modelldetails (Wasserabfluss entlang der Wand, Änderung des Wärmetransports) können zu einem späteren Zeitpunkt noch hinzugefügt werden. Zu diesem Vorgang wurde von der GRS ein (Programm-)Ablaufdiagramm erstellt, welches im nächsten Abschnitt diskutiert wird.

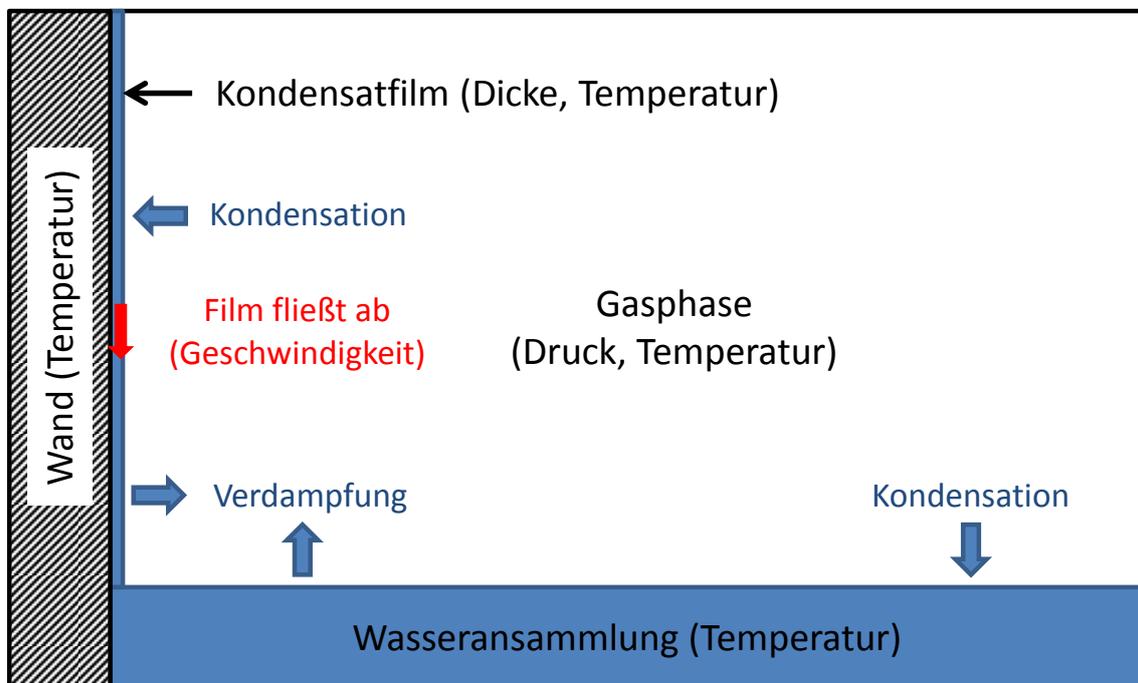


Abb. 2.4-1 Transportprozesse im Kondensatfilm

## 2.4.2 Ablaufdiagramm für die Wandkondensatbehandlung

In ist das Ablaufdiagramm für die Kondensatbehandlung dargestellt. Nach dem Beginn eines neuen Zeitschritts wird zunächst durch Zeitintegration das Kondensat für jedes Wandelement einzeln addiert. Je nachdem, ob die Kondensationsrate positiv oder negativ ist, findet Kondensation oder Verdampfung statt. Bei Kondensation wird weiterhin geprüft, ob die maximale Filmdicke überschritten wurde. Falls dieses der Fall ist wird das überschüssige Kondensat in einer separaten Variable „Sumpfmasse“ aufsummiert. Diese Variable(n) reprä-

sentiert(en) also die Menge des Wassers in einem oder in unterschiedlichen Gebäudesümpfen. Bei einer Verdampfung muss zunächst geprüft werden, ob noch genügend Wasser im Wandfilm vorhanden ist, welches verdampfen kann.

Dieser Programmablauf wurde von der GRS mit ANSYS besprochen und anschließend wurde von ANSYS das Modell durch eine User-FORTRAN-Routine implementiert. Die Aufgabe der GRS war es dann, das neu entwickelte Programm zu verifizieren. Das wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

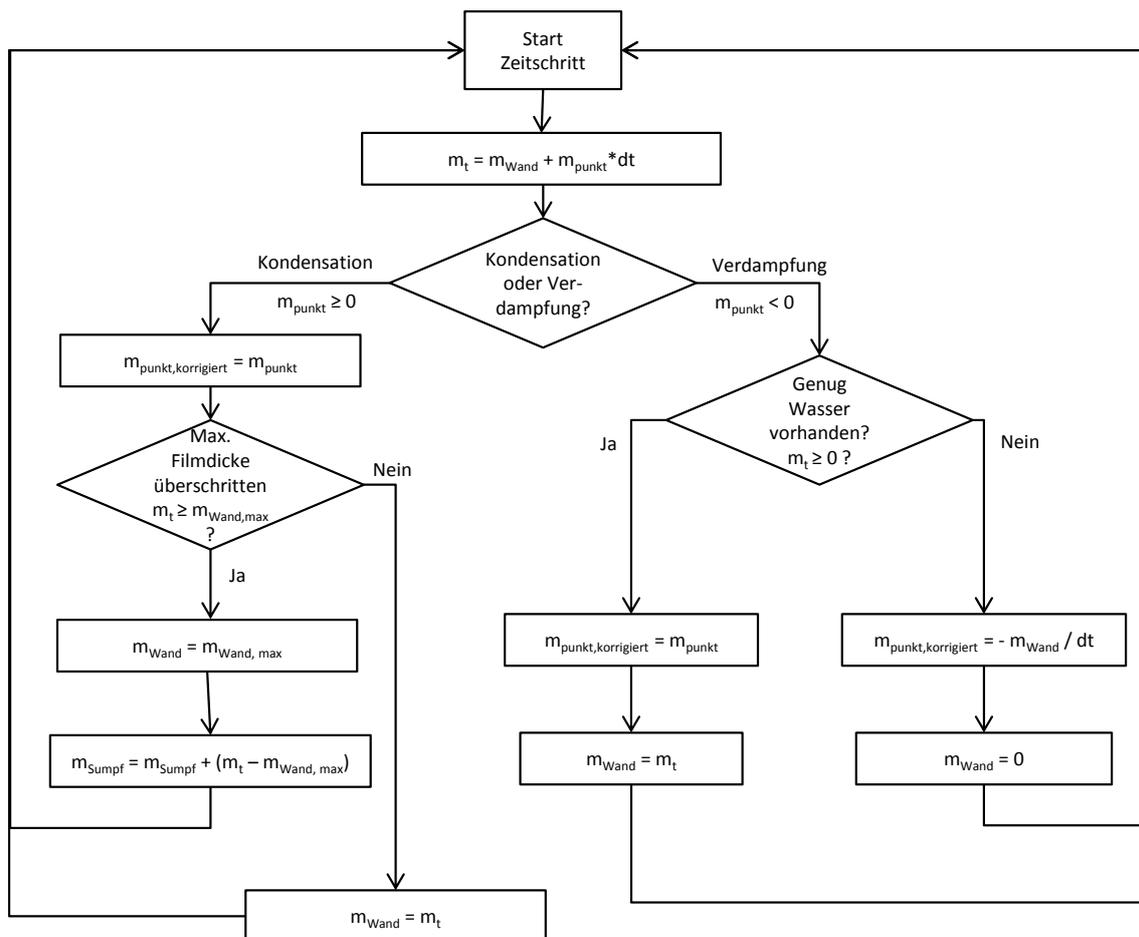


Abb. 2.4-2 Ablaufdiagramm für das GRS-Kondensatmodell

Variablen im Diagramm:

- $m_{punkt}$  : Dampf-Massenstrom an die Wand (positiv bei Kondensation, negativ bei Verdampfung)
- $m_{punkt, korrigiert}$  : Korrigierter Dampfmassenstrom (bei Verdampfung darf maximal die an der Wand vorhandene Masse verdampfen)
- $m_t$ : Hilfsvariable für die Berechnung
- $m_{Wand}$ : Wassermasse an der Wand (im Kondensatfilm)

- $m_{Wand,max}$ : Maximale Wassermasse an der Wand (ergibt sich aus maximaler Filmdicke und der Dichte)
- $m_{Sumpf}$ : Wassermasse im Sumpf
- $dt$ : Zeitschrittweite Delta-t

### 2.4.3 Verifizierung des Kondensatmodells

Zur Verifizierung des Kondensatmodells wurde der THAI Versuch TH-2 mit dem Modell nachgerechnet. Dieser Versuch ließ sich problemlos mit dem Modell berechnen. Es ist auch eine parallele Berechnung möglich, allerdings kann (zurzeit) mit dem Modell noch kein Re-Start ausgeführt werden, da dann alle Modellvariablen gelöscht sind. Um zu verifizieren, ob die Werte in den einzelnen Modellvariablen stimmen, wurden sie mit separat berechneten Werten verglichen. In Abb. 2.4-3 findet sich ein solcher Vergleich für die Wandkondensationsrate. Hier stimmt der Wert des Kondensatmodells (AV Source) exakt mit dem CFX-Solver-Wert für die Wandkondensation ( $H_2O$ .Condensation Mass Flux) überein.

Im neuen Kondensatmodell wird die zeitlich integrierte Kondensatmasse pro Flächeneinheit aufgespalten in eine Masse im Kondensatfilm (Source Integral, siehe Abb. 2.4-4) und in eine Sumpfmasse (Sump Mass). Hieraus lässt sich die über die gesamte Wandfläche integrierte Kondensatmasse bestimmen (rot gepunktete Linie in Abb. 2.4-4). Weiterhin wurde diese Kondensatmasse in Excel durch die Kondensationsrate und die Zeitschrittweite berechnet (blau gestrichelte Linie). Ein Vergleich ergibt hier wieder eine exakte Übereinstimmung der Werte.

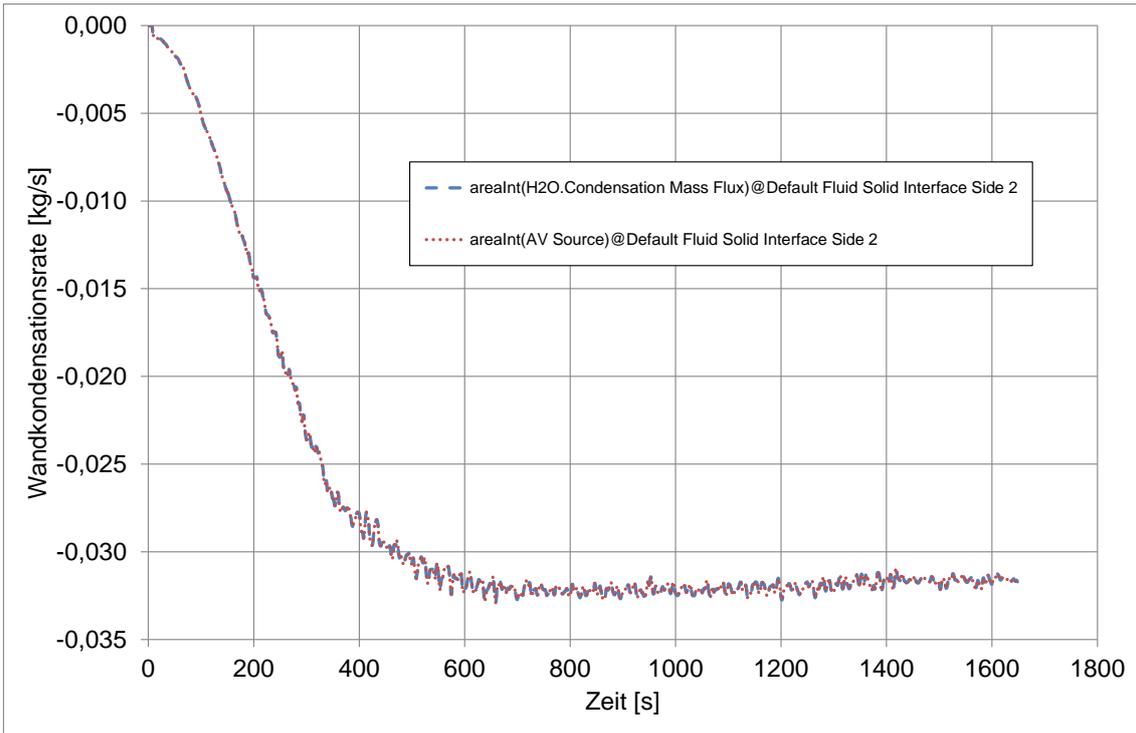


Abb. 2.4-3 Verifizierung der Wandkondensationsrate

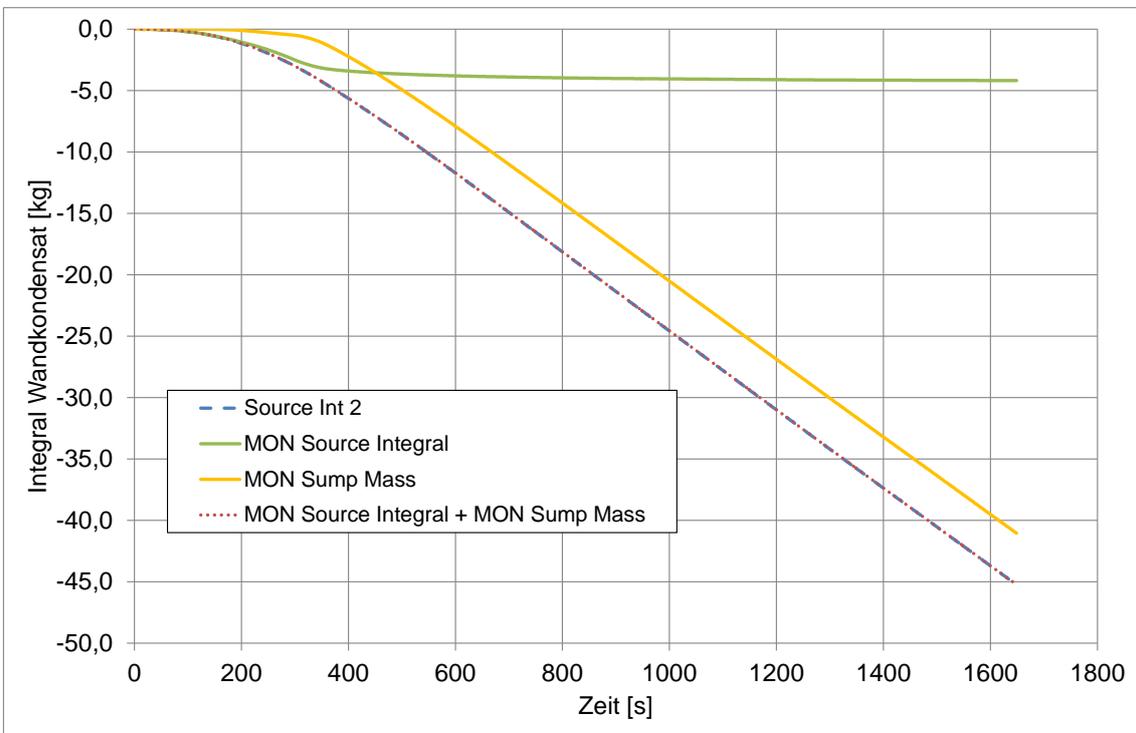


Abb. 2.4-4 Verifizierung der Wandkondensatmasse

Als letzter Verifizierungsschritt wurde noch das gesamte Dampf-/Wasser-Inventar im THAI-Behälter mit der Einspeisemenge verglichen. Das Gesamtinventar wurde aus der Summe von Dampf im THAI-Behälter, der Masse an Volumenkondensat, dem Wandkondensat und der Sumpfmasse errechnet. Hier zeigt sich ein leichter Unterschied im Vergleich zur Einspeisemenge. Dieses muss aber nicht unbedingt ein Fehler in der Massenbilanz des Kondensatmodells sein, sondern kann auch durch eine Ungenauigkeit in der Auswerterroutine entstanden sein. Die Unterschiede sind allerdings so klein, dass sie vernachlässigt werden können.

Bis zum Zeitpunkt der Berichterstellung war bei dem neu entwickelten Kondensatmodell eine Wiederverdampfung des Kondensates von der Wand oder aus dem Sumpf noch nicht möglich. Dieses ist seit dem neuesten CFX-Release 14.5 jetzt grundsätzlich möglich. Allerdings muss noch sichergestellt werden, dass maximal so viel Wasser verdampft, wie lokal an der Wand oder im Sumpf vorhanden ist (siehe Ablaufdiagramm / rechter Zweig). Sobald diese Funktion noch von ANSYS implementiert wird, können weitere Test-Rechnungen mit dem vollständigen Kondensatmodell durch die GRS durchgeführt werden.

## **2.5 Zusammenfassung und Ausblick**

Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden die Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS miteinander verglichen. Da das ANSYS-Modell im ursprünglichen Projektplan nicht vorgesehen war, fiel hier eine deutliche Mehrarbeit für die GRS an. Zum Vergleich der Modelle wurden mehrere CONAN-Versuche (SARNET2) und der THAI TH-2 Versuch nachgerechnet, sowie weitere Modelleigenschaften wie z. B. die Implementierung miteinander verglichen. Insgesamt findet sich für alle drei Modelle eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, jedoch zeichnet sich das ANSYS-Modell durch eine verbesserte Implementierung aus. Aus diesem Grund wurde das ANSYS-Modell für die oben beschriebenen Arbeiten ausgewählt. Zur weiteren Absicherung dieser Entscheidung wurden noch weitere Rechnungen und Parameterstudien mit dem ANSYS-Modell durchgeführt werden (z. B. Gitterstudien, TH-24 Nachrechnung, Panda4bis Nachrechnung).

Weiterhin wurde mit der Entwicklung eines einfachen Kondensatmodells begonnen. Hier wurde zunächst ein Ablaufdiagramm erstellt und dann das Modell in CFX implementiert. Durch eine Verifizierungsrechnung konnte die korrekte Implementation sichergestellt werden.

Bisher war bei dem neu entwickelten Kondensatmodell jedoch eine geschlossene Berechnung der Wiederverdampfung des Kondensates von der Wand oder aus dem Sumpf noch

nicht möglich. Erste Tests wurden mit dem Release CFX 14.5 erfolgreich durchgeführt. Sobald diese Funktion vollständig von ANSYS implementiert wurde, können weitere Test-Rechnungen mit dem vollständigen Kondensatmodell durch die GRS durchgeführt werden.

## 2.6 Anhang

### 2.6.1 Volumenkondensationsmodell der GRS

```

LIBRARY:
CEL:
  EXPRESSIONS:
    BulkCondHeat = Stufenfunktion*TRISE*Cp*density/Timeconst
    GRAD = \
      (-4.695552E+01)+PL*(2.0*(9.490957E+00)+PL*(3.0*(-6.789472E-01)+4.0*PL\
        *(2.067723E-02)))
    GesamtDampf = volumeAve(Water Ideal Gas.Mass Fraction)@Default Domain \
      * volumeAve(Density)@Default Domain * volume()@Default Domain
    LatenteWaerme = -((( -1.09222E-05*(TempC) +2.10473E-04)*(TempC) - \
      2.35310)* (TempC) +2.50072E+03) [kJ kg^-1]
    P2 = 133*exp(18.3036-(3816.44/(T1-46.13)))
    PL = ln((Ppartial * 1 [Pa^-1]))
    Ppartial = (Absolute Pressure)*max(H2ORKv.molf, 0.00001)
    Stufenfunktion = step(H2ORKv.molf-0.0001)
    T1 = \
      (3.279469E+02+PL*(-4.695552E+01+PL*(9.490957E+00+PL*(-6.789472E-01+PL\
        *2.067723E-02))))
    T2 = T1-GRAD*(ln(P2)-PL)
    TRISE = max(T2-(T/1 [K]),0.0) * 1 [K]
    TempC = (T / 1 [K])-273.15
    Timeconst = 0.13 [s]
    VolumenKondRate = Stufenfunktion*min(BulkCondHeat/LatenteWaerme, 0.0 \
      [kg m^-3 s^-1])
  END
END
END

```

### **3 Validierung eines verbesserten Turbulenzmodells für Strömungsvorgänge im Sicherheitsbehälter (AP 1.2)**

#### **3.1 Einleitung**

Im Rahmen der CFD-Arbeiten am IKE Stuttgart und bei ANSYS wurde ein neues Turbulenzmodell entwickelt, ein Turbulent Scalar Flux Modell (TSF) /ZIR11/, /LÜB10/. Dieses Modell wurde anhand der Nachrechnung mehrerer großskaliger Versuche durch die GRS validiert und mit den Ergebnissen von Simulationen mit RANS Turbulenzmodellen verglichen. Hierzu wurden das Panda4 Experiment, der THAI-Versuch TH-20, sowie die SETH2-Versuche ST1-4 und ST2-1 mit Hilfe des TSF-Modells nachgerechnet. Bei der Nachrechnung des Experiments TH-22 zeigte sich das TSF-Modell instabil, so dass diese Berechnung nicht erfolgreich durchgeführt werden konnte. Die Nachrechnungen der anderen Experimente werden im Folgenden näher erläutert.

#### **3.2 Simulation des Experiments TH-20-2**

##### **3.2.1 Einleitung**

Bei dem Versuch TH-20 in der THAI-Anlage wurde die Vermischung eines geschichteten Helium-Luft-Gemisches (Abb. 3.2-1) bei erzwungener Konvektion untersucht. Zu Beginn besteht eine stabile He-Schichtung. Durch ein Gebläse wird ein Gasstrahl erzeugt, der die Helium-Schichtung erodiert. Der zeitliche Verlauf der Helium-Schichtung wird an verschiedenen Stellen gemessen. Im Projekt RS1181 hat die GRS diesen Versuch bereits blind vorausgerechnet und auch offene Nachrechnungen durchgeführt. Dabei kamen verschiedene standardmäßig in CFX implementierte Turbulenzmodellen zum Einsatz. Das IKE Stuttgart /ZIR11/ und ANSYS /LÜB10/ haben diesen Versuch ebenfalls intensiv untersucht und an ihm wurde das neu entwickelte TSF-Modell validiert. Hinsichtlich der Versuchsdurchführung gibt es beim Experiment TH-20 noch offene Fragen insbesondere im Hinblick auf das im Versuch verwendete Gebläse. Deshalb ist auch im neuen THAI-Versuchsprogramm geplant, den Versuch in modifizierter Form zu wiederholen. Trotz dieser Unsicherheiten wurde TH-20 als erster Testfall ausgewählt, da die Ergebnisse mit dem TSF-Turbulenzmodell aus Arbeiten von ANSYS/IKE bekannt sind. Um eine Vergleichbarkeit mit den bereits in RS1181 durchgeführten Rechnungen mit dem SST-Turbulenzmodell zu gewährleisten, werden bei der hier durchgeführten Simulation dasselbe Gitter und die gleiche Modellierung des Gebläses ver-

wendet. Auf eine Nachrechnung des Versuchs mit einem feineren Gitter, anderer Modellierung des Gebläses etc. wurde verzichtet, da dies bereits von anderen Partnern im CFD-Verbund durchgeführt wurde und aufgrund der Unsicherheiten bei der Versuchsdurchführung keine abschließende Klärung der noch offenen Fragestellungen zu erwarten ist.

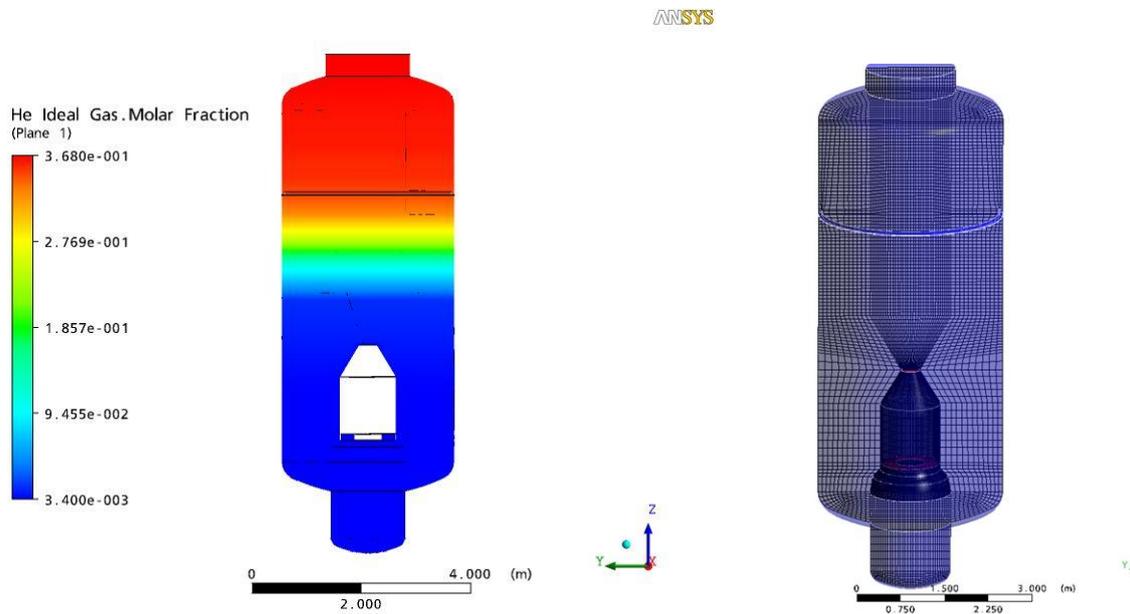


Abb. 3.2-1 Helium-Schichtung zu Beginn der Simulation (links), rechts: CFD-Gitter

### 3.2.2 CFD-Gitter und verwendete Modelle

Wie schon in RS1181 wird ein CFD-Gitter mit ca. 282 000 Zellen für den gesamten THAI-Behälter verwendet (siehe Abb. 3.2-1). Im Bereich des Jets am Gebläseaustritt wurde das Gitter stark verfeinert. Die Details des Gebläses werden nicht mit CFX simuliert. Der Eintritt in das Gebläse wird als Druckrandbedingung vorgegeben und am Gebläseaustritt wurden die von Becker Technologies zur Verfügung gestellte Geschwindigkeitsverteilung vorgegeben. Die Turbulenz wurde mit dem BSL-Reynolds-Stress-Modell und dem TSF-Modell zur Simulation der skalaren Flüsse für die Helium-Konzentration simuliert.

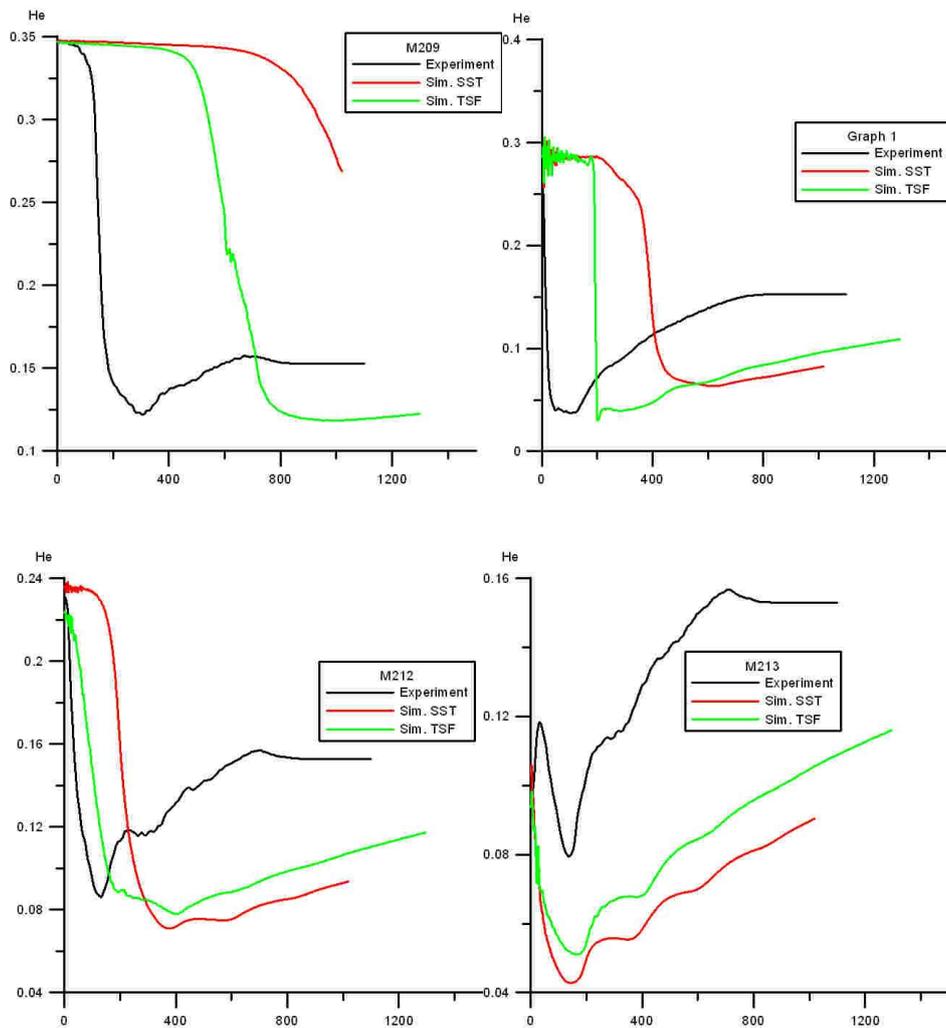


Abb. 3.2-2 Heliumkonzentration an mehreren Messstellen

### 3.2.3 Kurze Diskussion der Ergebnisse

Das TSF-Modell konnte erfolgreich mit der Solver-Version 12.1 und einem zusätzlichen Solver-File angewendet werden. Auch ohne Veränderungen am Gitter konnte das TSF-Modell in Verbindung mit dem BSL-Modell verwendet werden. Im Gegensatz zu den Simulationen mit Reynolds-Stress-Modell ohne TSF-Modell (RS1181) traten keine numerischen Probleme auf.

Bei der Simulation mit den genannten Turbulenzmodellen wird eine deutlich geringere Zeit für die Schichtungsauflösung benötigt (Abb. 3.2-2). Allerdings dauert die Schichtungsauflösung auch bei dieser Modellierung noch deutlich länger als im Experiment. Untersuchungen am IKE haben gezeigt, dass durch Verwendung einer feineren Diskretisierung und einer anderen Modellierung des Gebläses noch weitere Verbesserungen erzielt werden können. Eine genauere Untersuchung soll später zu dem noch nicht durchgeführten modifizierten Wiederholungsexperiments (ohne Gebläse) in THAI erfolgen.

### **3.3 Nachrechnung des Panda4 Experiments**

#### **3.3.1 Einleitung**

Der Panda4-Versuch wurde bereits in RS1181 /SCH10/ erfolgreich mit CFX-11 nachgerechnet. Dabei wurden neben einer Gitterstudie auch verschiedene Parametervariationen u. a. auch zum Einfluss des Turbulenzmodells auf das Simulationsergebnis untersucht. Die in diesem Projekt durchgeführte Simulation mit dem TSF Turbulenzmodell baut auf den bereits gesammelten Ergebnissen auf. Das TSF-Modell wird wieder zusammen mit dem BSL-Reynolds-Stress-Modell verwendet. Das primäre Ziel dieser Untersuchung ist es, das neue TSF-Turbulenzmodell im Hinblick auf die Qualität der Simulationsergebnisse aber auch hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit und der numerischen Robustheit zu testen. Um die Vergleichbarkeit der Simulationen zu gewährleisten sollen außer dem Turbulenzmodell keine anderen physikalischen Modelle modifiziert werden. Deshalb werden für beide Simulationen das gleiche CFD-Gitter (ca. 600 000 Elemente) verwendet und auch die verwendeten physikalischen Modelle sind identisch (z. B. Wasserdampf wird als ideales Gas modelliert, Wärmestrahlung wird vernachlässigt etc.). Die Simulationsergebnisse werden mit der Simulation mit dem SST Turbulenzmodell verglichen.

#### **3.3.2 Randbedingungen des Versuchs**

Der Versuchsstand Panda4 besteht aus zwei Behältern (DW1 und DW2), die durch ein Rohr miteinander verbunden sind. Dieses Rohr ist um 110° gekrümmt. In den Behälter DW1 strömt horizontal Dampf mit einem mittleren Massenstrom von 49,95 g/s ein. Die Temperatur des Dampfes beträgt 140 °C. Das Rohr, durch das der Dampf einströmt, befindet sich in einer Höhe von 2 m über dem Behälterboden und endet in der Mitte des Behälters (Abb. 3.3-1). Die Dauer der Einspeisung beträgt 7200 s.

In der oberen Kuppel des 2. Behälters (DW2) befindet sich ein Ventil, mit dem der Druck in den Behältern auf konstant 1,3 bar gehalten wurde. Zu Beginn des Versuchs befindet sich trockene Luft mit einer Temperatur von 108 °C im Versuchsstand. Die Außenwände werden auf ebenfalls 108 °C gehalten. Durch diese Randbedingungen wurde sichergestellt, dass während des Versuches keine Kondensationsvorgänge ablaufen. Die Dampfkonzentration wurde an mehreren Messstellen in den beiden Behältern und im Verbindungsrohr gemessen. Die Konzentrationsmessungen in den Behältern DW1 und DW2 werden in der Behältermitte an verschiedenen Höhen durchgeführt.

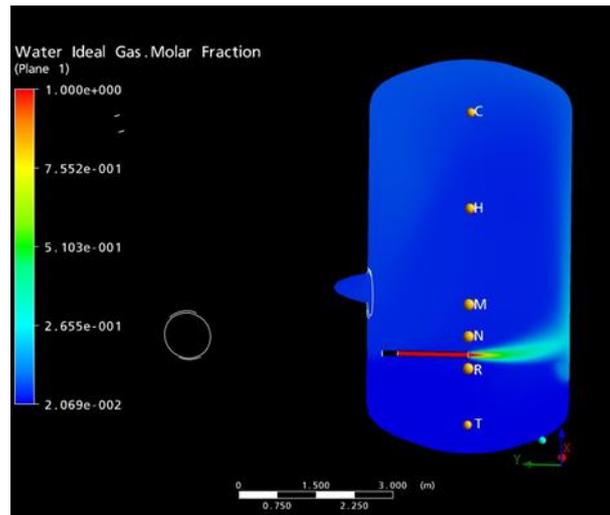


Abb. 3.3-1 Messstellen im Behälter DW1

### 3.3.3 Diskussion der Simulationsergebnisse

Die Simulationen mit dem SST und dem TSF-Turbulenzmodell zeigen an fast allen Messstellen sehr ähnliche Simulationsergebnisse und sie stimmen gut mit den experimentellen Daten überein (Abb. 3.3-2). Im Behälter DW1 sind bis auf die Messstelle D1T20, die unterhalb des Einspeiserohrs liegt, die Simulationsergebnisse mit beiden Turbulenzmodellen fast identisch. Die Ergebnisse mit dem TSF-Modell sind dabei geringfügig niedriger (Abweichung  $\sim 1$  vol.%) und liegen damit etwas näher an den Messstellen. Die Abweichung zu den experimentellen Daten ist bei der Simulation mit dem SST-Modell aber auch gering  $\sim 2$  vol.% und liegt ebenfalls fast noch im Bereich der Messgenauigkeit von  $\pm 1,5$  %. An der Messstelle D1T20 wird der verzögerte Anstieg der Dampfkonzentration vom TSF-Modell besser vorhergesagt. Die Unterschiede bei den beiden Simulationen werden auch qualitativ deutlich (Abb. 3.3-3, Abb. 3.3-4). Nach ca. 1000 s liegt bei der Simulation mit TSF-Modell unterhalb des Einspeiserohrs eine geschichtete Dampfverteilung vor, während bei SST-Modell eine stärkere Durchmischung beobachtet wird. Die stärkeren Abweichungen sind aber temporär begrenzt. Nach ca. 3000 s haben sich die beiden Simulationen einander und dem Experiment angenähert, allerdings ist die Dampfkonzentration im Experiment um ca. 4-5 vol.% niedriger.

Die Gegenströmung im Verbindungsrohr zwischen den beiden Behältern wird von beiden Simulationen richtig berechnet. Bei den Messstellen TD6 und TD8 ist eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment vorhanden, beide Rechnungen sagen dabei fast eine identische Dampfkonzentration voraus. Am untersten Messpunkt TD10 im Verbindungsrohr wird von beiden Simulationen die Dampfkonzentration bei ca. 3000 s um bis zu 5 vol.% über-

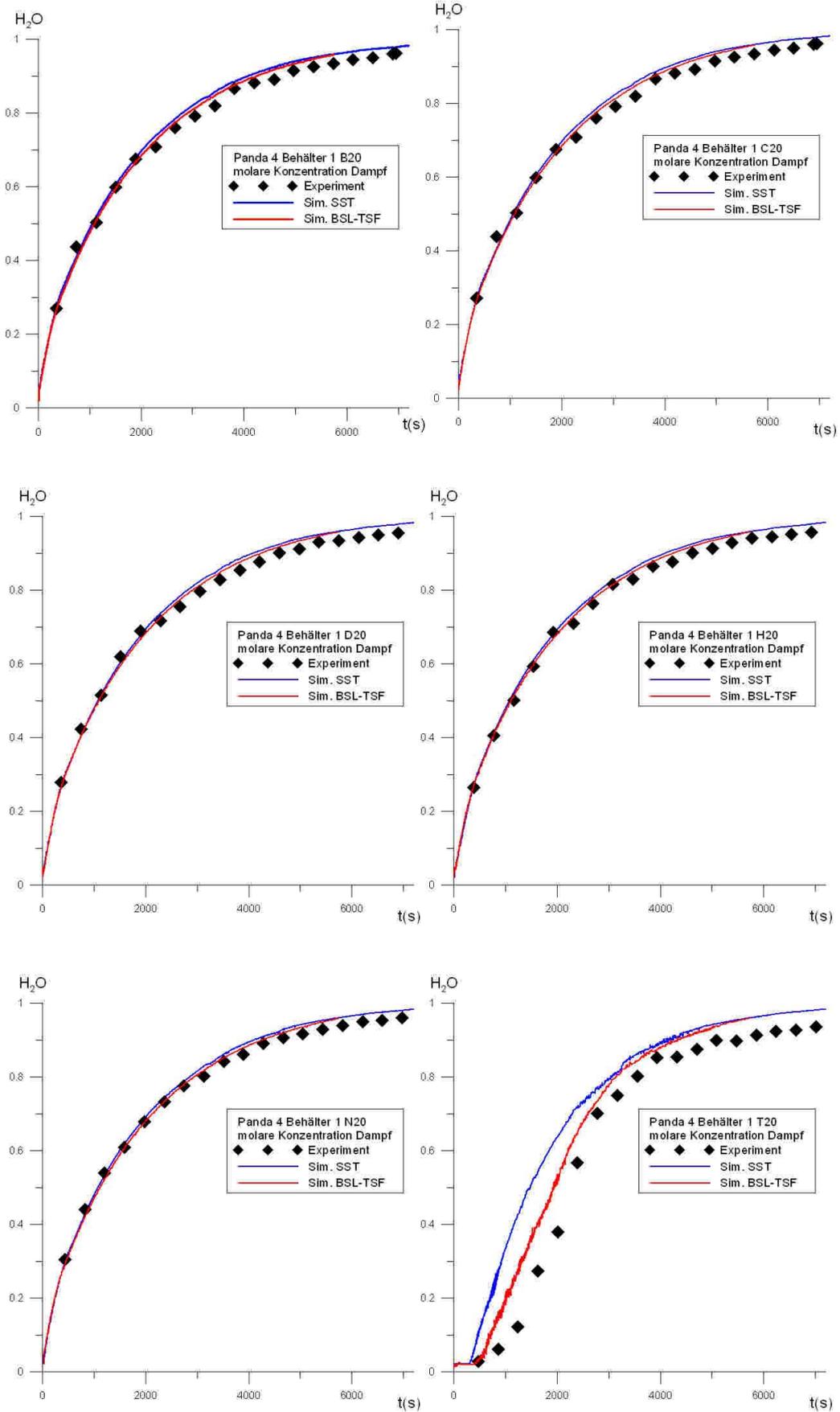
schätzt, die Simulation mit dem TSF-Modell hat dabei eine noch etwas höhere Dampfkonzentration (bis zu 1 vol.%) .

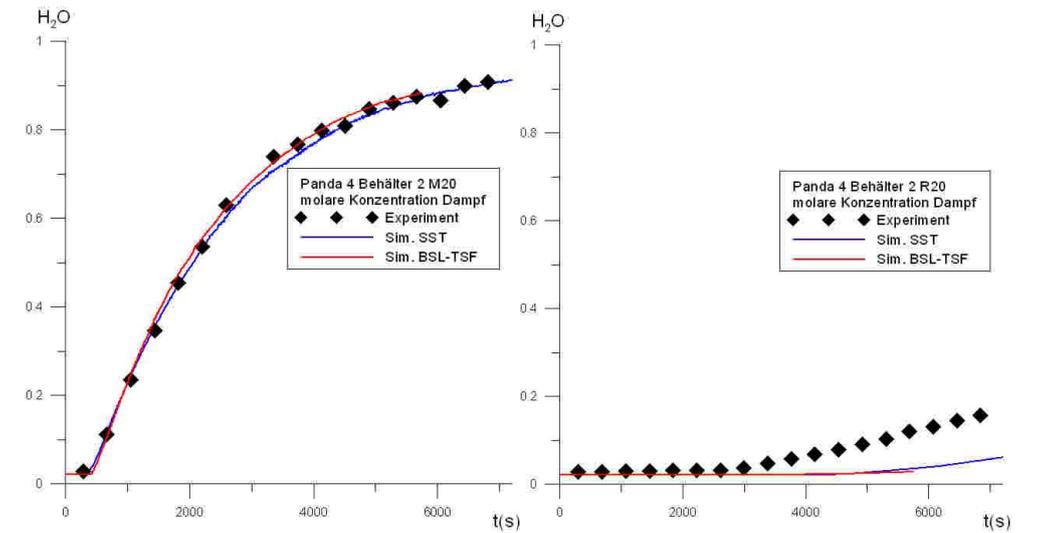
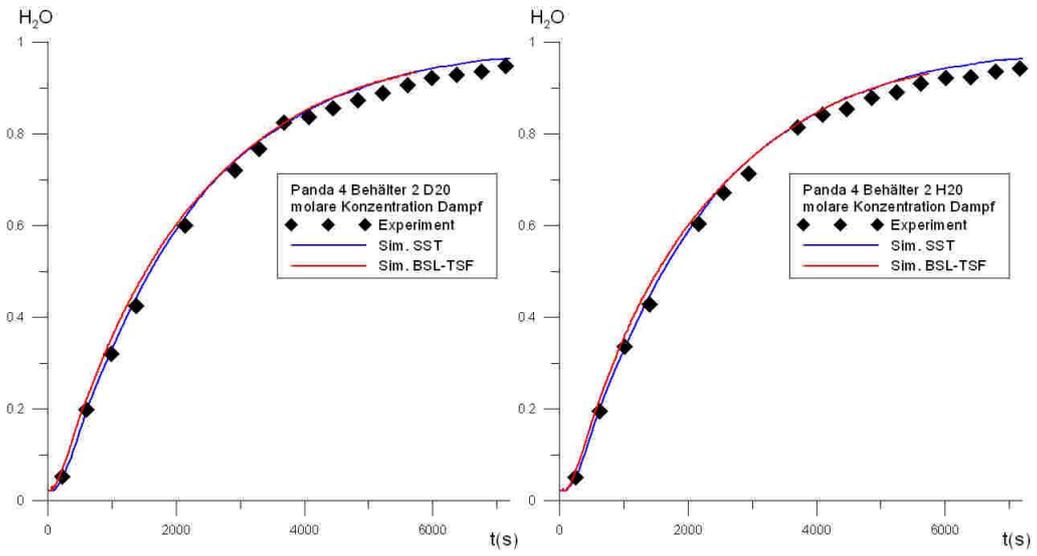
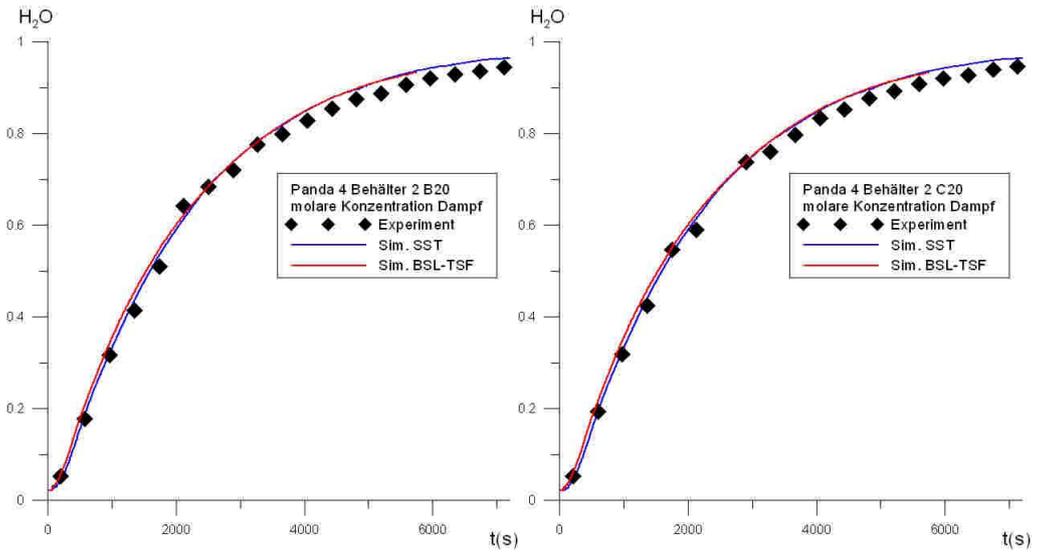
Die Contour-Plots (Abb. 3.3-3 und Abb. 3.3-4) der Dampfkonzentration zeigen, dass der Neigungswinkel des Dampfplumes bei beiden Turbulenzmodellen unterschiedlich ist. Beim TSF-Modell ist er etwas flacher als beim SST-Modell. Da die Messstellen der Dampfkonzentrationen auf der Mittelachse des Behälters liegen, schlägt sich dieser Unterschied kaum in den berechneten Dampfkonzentrationen an den Messstellen nieder. Beide Simulationen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung für alle Messstellen in DW2 oberhalb des Verbindungsrohrs (D2B20- D2M20). Dabei liegt zu Beginn (bis ca. 2000 s) die Simulation mit dem TSF-Modell tendenziell bei den Messstellen D2H20-D2B20 etwas zu hoch, danach liefern beide Simulationen fast identische Ergebnisse. Dies kann als Indiz gewertet werden, dass der Plume beim TSF-Modell etwas zu schräg verläuft, so dass das dampfreichere Gas des Plumes die Messstellen erreicht. Allerdings muss bei allen Schlussfolgerungen berücksichtigt werden, dass die Abweichungen zwischen den beiden Simulationen kleiner sind als die Messungenauigkeit von  $\pm 1,5\%$  und beide Rechnungen noch im Rahmen der Messungenauigkeit mit dem Experiment übereinstimmen.

Unterhalb des Verbindungsrohrs liefern beide Simulationen fast identische Ergebnisse. Sie unterschätzen beide den Dampfgehalt in DW2 unterhalb des Verbindungsrohrs.

Die Simulation mit dem TSF-Modell war numerisch stabil, es traten keine numerischen Schwierigkeiten auf. Damit ist dieses Turbulenzmodell stabiler als das BSL-Reynolds-Stressmodell ohne TSF-Modellierung. Dieses Modell konnte aufgrund numerischer Instabilitäten nicht erfolgreich zur Simulation des Experiments verwendet werden. Ursache war hier vermutlich die schlechte Konvergenz der Omega-Turbulenz-Frequenz-Gleichung, siehe RS1181.

Da die Simulation mit dem SST-Modell mit CFX-11 auf einem älteren Linux-Cluster durchgeführt wurde, ist es schwierig die benötigte Rechenzeit zwischen beiden Simulationen zu vergleichen. Eine grobe Abschätzung ergibt eine Zunahme der Rechenzeit bei Verwendung des TSF-Modells um einen Faktor 4 bis 5. Grund für diese Zunahme ist neben der größeren Anzahl der Erhaltungsgleichungen die gelöst werden müssen, dass der typische Zeitschritt (beide Rechnungen mit adaptiven Zeitschritt) von 1 s beim SST-Modell auf 0,5 s beim TSF-Modell abgenommen hat.





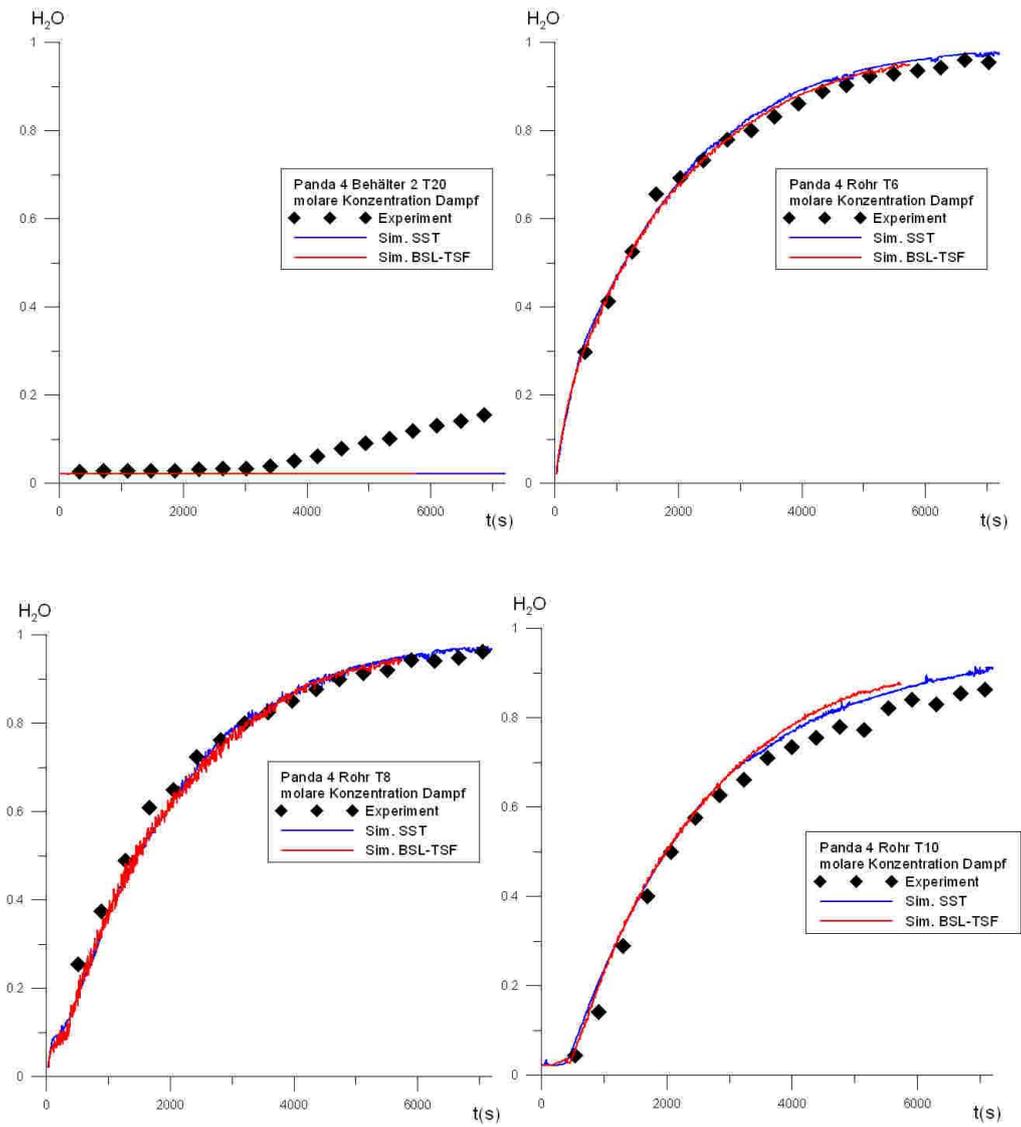


Abb. 3.3-2 Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen

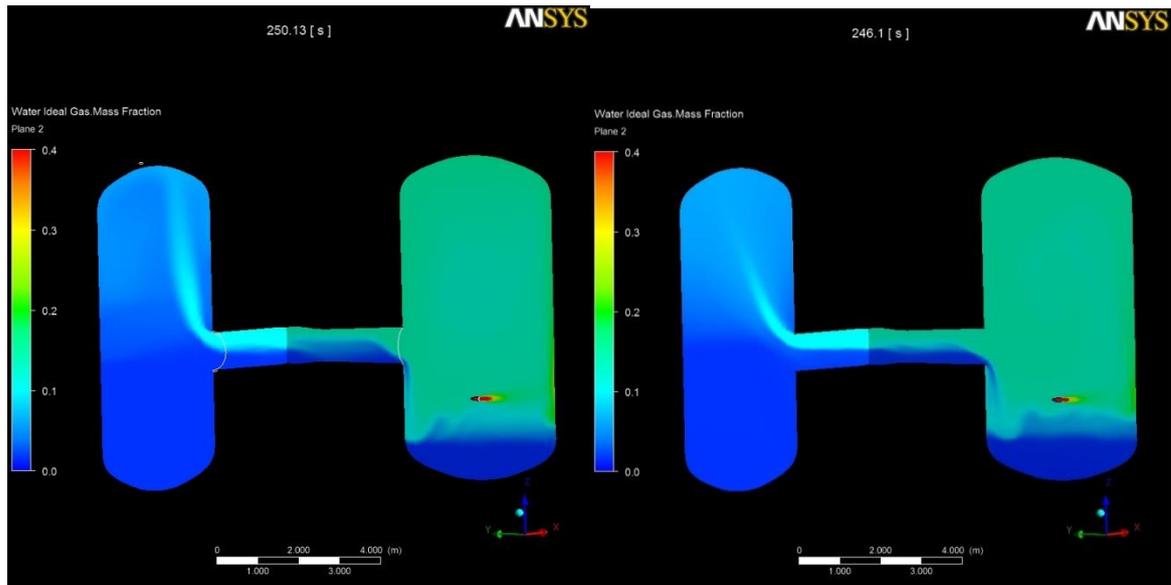


Abb. 3.3-3 Dampfkonzentration nach ca. 250 s. Links: SST-Turbulenzmodell, Rechts TSF-Modell

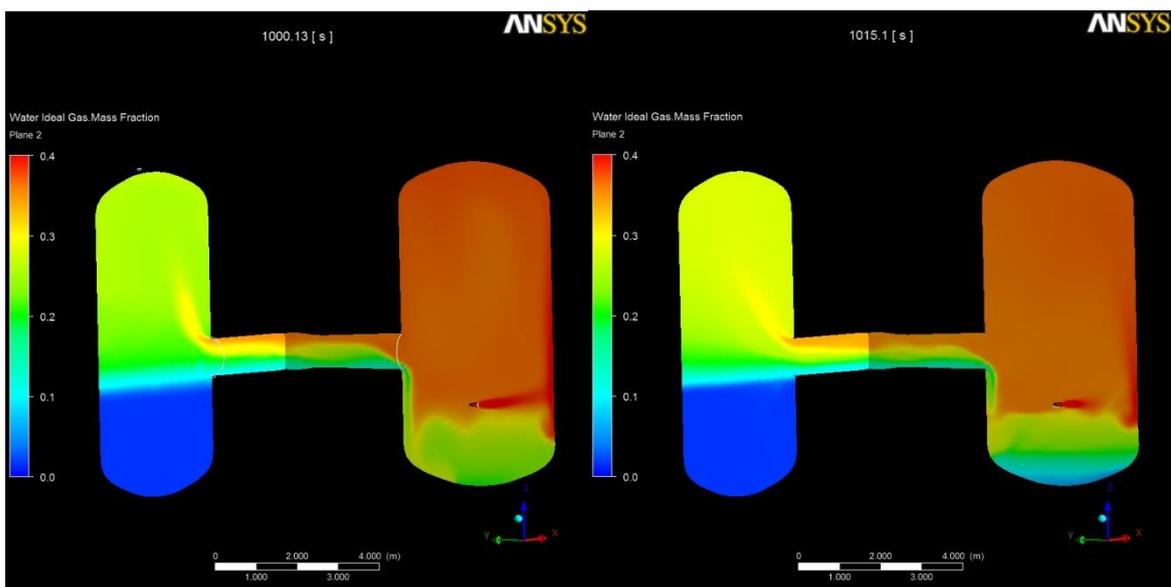


Abb. 3.3-4 Dampfkonzentration nach ca. 1000 s. Links: SST-Turbulenzmodell, Rechts TSF-Modell

### 3.3.4 Zusammenfassung

Sowohl die Simulation mit dem SST-Modell als auch mit dem neuen TSF-Turbulenzmodell kann das PANDA4 Experiment gut beschreiben. An den meisten Messstellen sind keine signifikanten Unterschiede zwischen den beiden Simulationen und dem Experiment zu finden.

Nur in den unteren Bereichen der beiden Behälter sind deutlichere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment vorhanden.

Unterhalb des Einspeiserohrs (D1T20) kann mit dem TSF-Modell eine Verbesserung erzielt werden. Im Verbindungsrohr erzielt dagegen das SST-Modell etwas bessere Ergebnisse (TD10). Unterhalb des Verbindungsrohrs in DW2 berechnen beide Simulationen fast identische Dampfkonzentrationen unterschätzen dabei aber den experimentellen Wert.

### **3.4 Nachrechnung der SETH2 Experimente ST1-4 und ST2-1**

Die Nachrechnung der SETH2 Experimente ST2-1 und ST4-1 mit dem TSF-Modell wird unter dem Arbeitspunkt AP 1.3 im Kap. 4 detailliert beschrieben. Hier finden sich auch alle Informationen zu den SETH2 Experimenten und Nachrechnungen ohne das TSF-Modell. Deshalb werden an dieser Stelle nur die Ergebnisse kurz zusammengefasst:

- Experiment ST1-4: Die Berechnung mit dem TSF-Modell (ohne Strahlungsmodellierung) unterscheidet sich deutlich von den Berechnungen mit anderen Turbulenzmodellen (k-epsilon, SST). Mit dem TSF-Modell erfolgt die Schichtungsauflösung sehr viel schneller als mit den anderen Turbulenzmodellen und auch schneller als im Experiment. Berücksichtigt man bei diesem Turbulenzmodell die Strahlung ebenfalls, so erfolgt bei diesem Turbulenzmodell die Schichtungsauflösung ebenfalls später. Allerdings kommt es in diesem Fall zu einer starken seitlichen Schwankung des Dampfstrahls und nach ca. 350 s beginnt die gesamte Heliumschicht stark zu schwingen, was in dieser Form nicht dem Experiment entspricht. Die starken Instabilitäten beim TSF-Modell - die bei Berücksichtigung der Strahlung noch ausgeprägter waren - sind neben der erhöhten Anzahl von Erhaltungsgleichungen der Grund, warum bei diesem Turbulenzmodell der Rechenzeitbedarf drastisch höher war (ca. Faktor 50), so dass die Simulationen nur die ersten 1000 s Versuchszeit abdecken.
- Experiment ST2-1: Das PANDA Experiment ST2-1 konnte erfolgreich mit CFX nachgerechnet werden. Der Vergleich der Turbulenzmodelle SST und TSF hat gezeigt, dass die Verwendung des TSF-Turbulenzmodells zu vergleichbaren Ergebnissen (Heliumkonzentrationen, Temperaturen) wie beim SST-Modell führt, allerdings bei einer wesentlich höheren Rechenzeit. Auch bei diesem Versuch kommt es bei Verwendung des TSF-Modells zwischenzeitlich zu starken Schwankungen an der Helium/Dampf-Grenzschicht.

### **3.5 Zusammenfassung**

Die Experimente Panda4, THAI TH-20, sowie die SETH2 Experimente ST1-4 und ST2-1 konnten erfolgreich mit dem TSF-Modell nachgerechnet werden. Bei den meisten Experimenten (z. B. Panda4) sind die Ergebnisse mit dem TSF-Modell relativ ähnlich zu den Ergebnissen mit RANS-Modellen (k-epsilon, SST) teilweise gibt es aber auch Verbesserungen (z. B. ST1.4). Beim THAI TH-20 Experiment führt die Verwendung des TSF-Modells zu einer schnelleren Schichtungsauflösung, die zwar näher am Experiment liegt, aber das Experiment noch nicht trifft. Bei einigen Experimenten konnten dagegen deutliche Schwankungen an der Helium/Dampf-Grenzschicht beobachtet werden (SETH2 Experimente), die nicht als physikalisch betrachtet werden. Insgesamt führt die Verwendung des TSF-Modells zu einem starken Anstieg der benötigten Rechenzeiten.

## **4 Simulation des Phänomens der Bildung und Auflösung von Gasschichtungen im Sicherheitsbehälter (AP 1.3)**

### **4.1 Einleitung und Zielsetzung**

Die Ergebnisse bisheriger Versuchsnachrechnungen (ISP-47, TH-20, ...) haben gezeigt, dass bei der Simulation der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen auch mit CFD-Programmen noch erhebliche Schwierigkeiten bestehen. Im Rahmen dieses Arbeitspunktes soll durch die Nachrechnung weiterer Experimente der aktuelle Entwicklungsstand aufgezeigt werden. Hierbei sollen neue Erkenntnisse zur Modellierung von Schichtungs- und -auflösung in die Simulationen einfließen (z. B. Berücksichtigung von Wärmestrahlung, neues Turbulenzmodell, ...). Im Folgenden werden die Nachrechnung von zwei Panda-Versuchen aus dem OECD-SETH2-Programm, sowie die Nachrechnung des THAI TH-24 Experimentes (CV5) beschrieben.

### **4.2 Nachrechnung des SETH2-Versuchs ST1-4**

#### **4.2.1 Einleitung**

Zunächst soll der SETH2-Versuch ST1-4 beschrieben werden. In diesem Experiment wird eine stabile Helium-Schichtung durch eine vertikale Dampfeinspeisung aufgelöst. Im zweiten Versuch (ST2-1) erfolgt die Erosion der Helium-Schichtung durch eine horizontale Dampfeinspeisung. Die beiden Experimente werden getrennt voneinander beschrieben, in diesem Kapitel wird zunächst das Experiment ST1-4 erläutert, das Experiment ST2-1 folgt im nächsten Kapitel.

Ein Schwerpunkt der Arbeiten war die Untersuchung des Einflusses der Turbulenzmodellierung. Neben standardmäßig in CFX implementierten RANS-Turbulenzmodellen (SST, k-epsilon, BSL-Reynolds Stress) soll auch das vom IKE Stuttgart und ANSYS neu entwickelte TSF-Turbulenzmodell (Turbulent-Scalar-Flux) validiert werden.

#### **4.2.2 Beschreibung des Experiments ST1-4**

Der Versuch ST1-4 wurde in der Panda-Versuchsanlage des Paul Scherrer Instituts durchgeführt. Abb. 4.2-1 zeigt eine schematische Darstellung der PANDA-Versuchsanlage. Diese

besteht aus zwei großen Metallbehältern, sowie einem senkrechten geknickten Verbindungsrohr. Im Behälter 1 besteht die Möglichkeit Helium und Dampf einzuspeisen, im Behälter 2 ist ein Ablassventil zur Druckentlastung angebracht.

Im Experiment ST1-4 wurden beiden Behälter mit überhitztem Dampf gefüllt, die Anfangstemperatur des Gases und der Behälterwände lag bei ca. 105 °C, der Druck betrug ca. 1,28 bar und wurde durch das Venting-Ventil bis auf kleinere Schwankungen konstant gehalten. Ab ca. 6 m Höhe wurde eine stabile He-Leichtgasschicht (He-Konzentration ~ 25 vol.%) erzeugt (siehe Abb. 4.2-2). In der Behältermittelachse befindet sich ein Rohr, durch das mit einem Massenstrom von ~22 g/s heißer Dampf (T=140 °C) eingespeist wurde. Durch diesen Dampfstrahl wurde die He-Schicht langsam erodiert. Im Experiment wurden die Dampfkonzentration und die Temperatur an verschiedenen Messstellen gemessen. Die Experimentatoren haben den Messfehler bei der Temperaturmessung mit +/- 0,7 K und bei der Konzentrationsmessung den absoluten Fehler mit 1,5 % spezifiziert. Eine ausführlichere Versuchsbeschreibung ist unter /ERK09/, /PAL08/ und /MIG10/ zu finden.

Die Experimentatoren haben die physikalischen Prozesse detailliert untersucht und haben 4 Prozesse identifiziert, die für den Schichtungsabbau wichtig sind /MIG10/ (siehe Abb. 4.2-3):

- molekulare Diffusion
- direkte Erosion durch den Dampfstrahl
- verstärkte turbulente Vermischung
- Verdünnung des mitgerissenen Heliums.

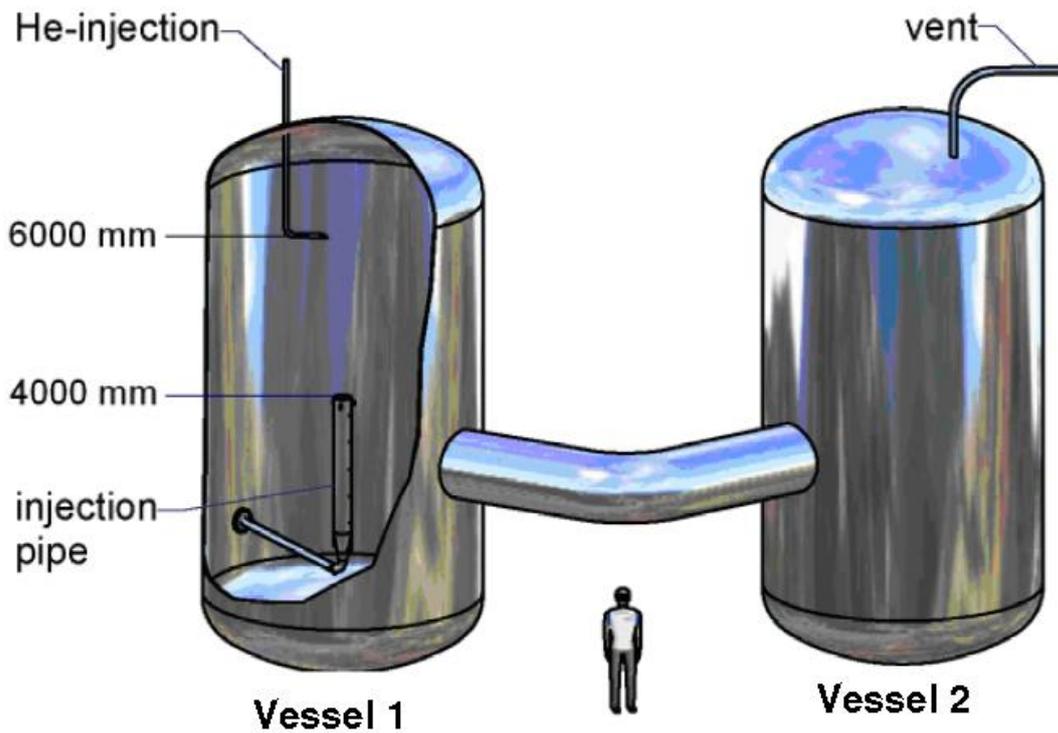


Abb. 4.2-1 Schematische Darstellung der PANDA-Versuchsanlage (Bild: /PAL08/)

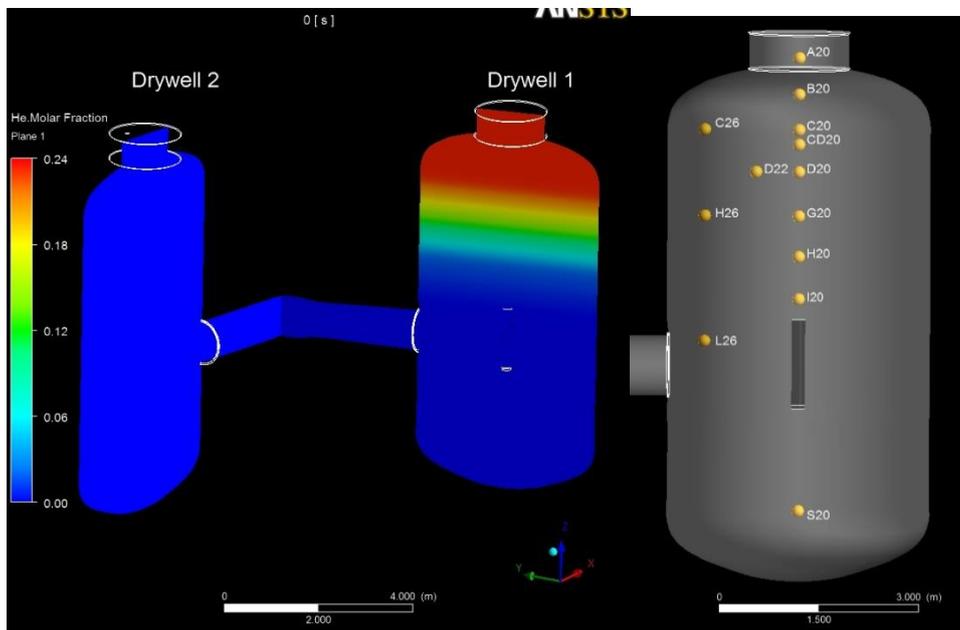


Abb. 4.2-2 Helium-Schichtung zu Beginn des Experiments (links), ausgewählte Messstellen im 1. Behälter

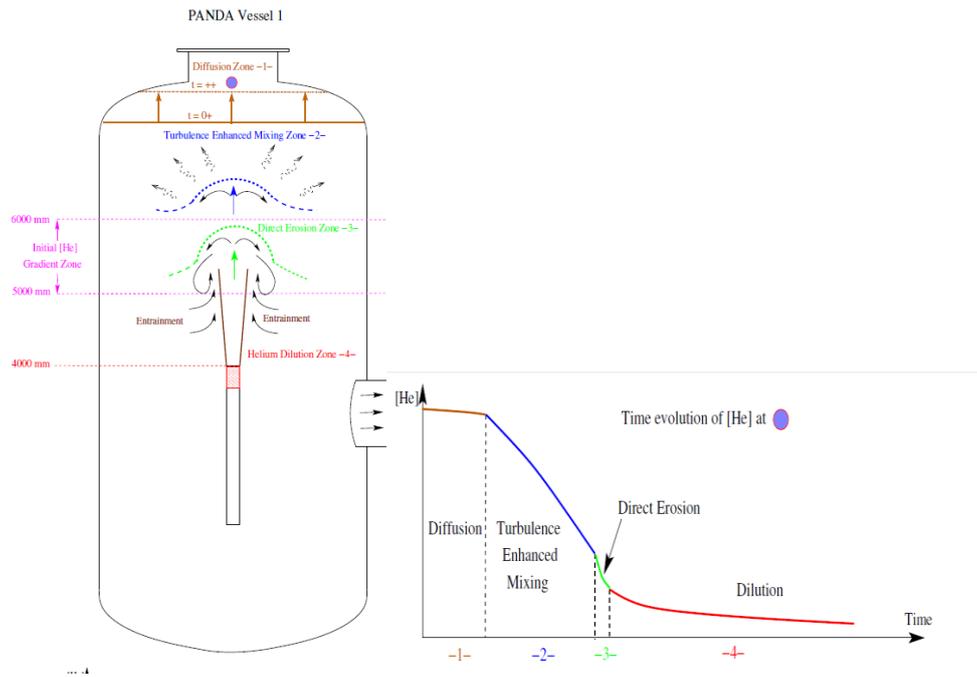


Abb. 4.2-3 Schematische Darstellung der bei ST1\_4 ablaufenden Prozesse, die zur Schichtungsauflösung beitragen /MIG10/

### 4.2.3 Simulation ST1-4 mit CFX

Die Simulationen des Experiments ST1-4 wurden mit CFX-13 durchgeführt. Im Folgenden werden die standardmäßig verwendeten Modelle aufgeführt. Es wurde ein hybrides CFD-Gitter bestehend aus 910 000 Elementen verwendet; davon sind ca. 782 000 Zellen strukturiert (siehe 4.2.4). Die Behälterwände wurden als „Solid-Blocks“ simuliert, d. h. die Wärmeleitung im Festkörper wird von CFX simuliert. Die Außenwände des Stahlbehälters wurden als adiabatisch angenommen. Die Anfangsheliumkonzentration wurde entsprechend den Messwerten auf der Behälterachse gesetzt; dabei wurde davon ausgegangen, dass die Konzentration innerhalb eines Behälters nur von der Höhe abhängt. (Abb. 4.2-2). Die Anfangstemperatur wurde wie in der Spezifikation angegeben auf 108 °C gesetzt. Die gemessene Temperatur weicht um (ca. 2-3 °C) von diesem mittleren Wert ab, ohne dass sich eine klar erkennbare Schichtung ausgebildet hätte. Der einströmende Dampf wird entsprechend der gemessenen Temperatur und dem gemessenen Massenstrom eingespeist. Um das Geschwindigkeitsprofil am Einlass realistischer zu modellieren, wird ein Teil des Rohres, durch das der Dampf einströmt, in der Simulation berücksichtigt. Der Auslass wird durch eine Druckrandbedingung (1,28 bar) modelliert. Entsprechend den Versuchsrandbedingungen brauchte keine Kondensation berücksichtigt werden.

#### 4.2.4 Gitterstudie

Um den Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurde eine Gitterstudie durchgeführt. Es wurden 3 Simulation mit einem unterschiedlich feinen Gitter durchgeführt. Ziel der Arbeiten zum Experiment ST1-4 ist es, die Schichtungsauflösung im ersten Behälter richtig zu simulieren. Die Strömungsvorgänge und die Gasverteilung im 2. Behälter sind dabei von sekundärem Interesse. Um die Rechenzeit in einem vertretbaren Rahmen zu halten und trotzdem ein möglichst feines CFD-Gitter im Bereich des Dampfstrahls und der Schichtung zu erhalten wurde die Gitterverfeinerung im Wesentlichen nur im 1. Behälter durchgeführt. Verfeinerungen im Verbindungsrohr und im 2. Behälter wurden nur vorgenommen soweit es die Topologie und die Gitterqualität notwendig gemacht haben. Das größte Gitter hat 372 000 Zellen, das standardmäßig für Parameterstudien verwendete Gitter hat 910 000 Zellen und das Gitter mit der feinsten Auflösung besitzt 4 353 000 Zellen (siehe Abb. 4.2-4). Bei der Gitterstudie wurde das SST-Turbulenzmodell verwendet. Wärmestrahlung wurde für diese Untersuchungen vernachlässigt.

Alle drei Simulationen zeigen qualitativ den gleichen zeitlichen Verlauf der Dampfkonzentration. Die Simulation mit dem größten Gitter zeigt aber quantitativ noch deutliche Abweichungen zu den beiden Rechnungen mit der feineren Diskretisierung. Bei den Messstellen im oberen Bereich (A20, C20) wird die He-Schichtung beim größeren Gitter schneller abgebaut, entsprechend steigt die Dampfkonzentration früher an (Abb. 4.2-5). Die Simulation mit 910 000 Zellen und die Simulation mit 4,3 Millionen Zellen zeigen kaum noch Unterschiede. Deshalb wurde das Gitter mit 910 000 Zellen als hinreichend fein für die Parameterstudien betrachtet.

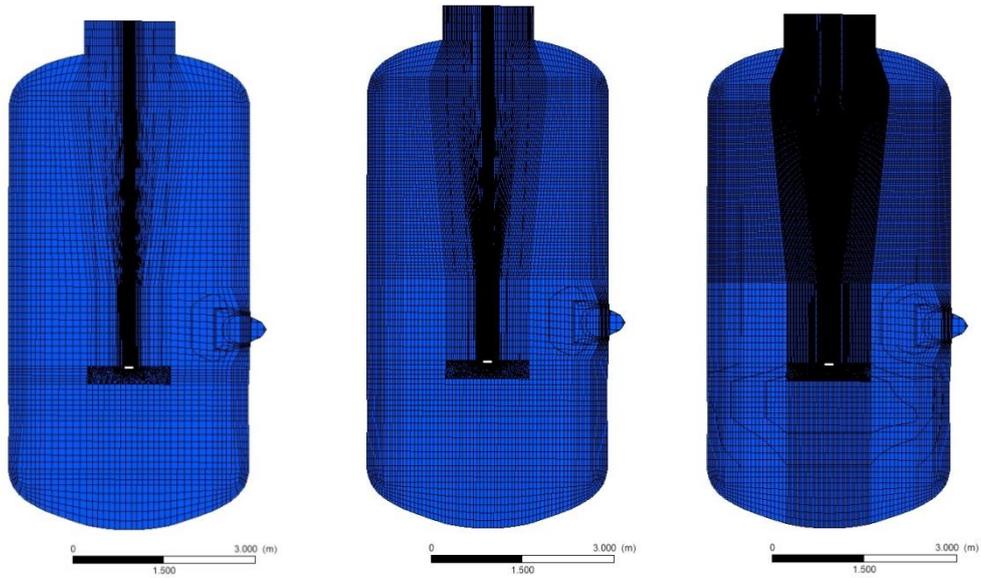
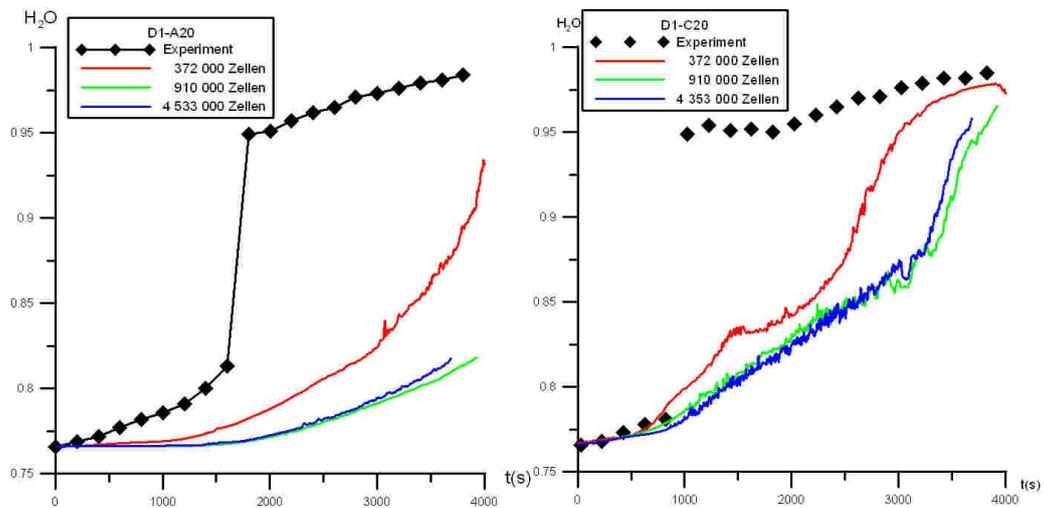


Abb. 4.2-4 CFD-Gitter im 1. Panda Behälter. Links: 372 000 Zellen; Mitte 910 000 Zellen; Rechts 4 353 000 Zellen



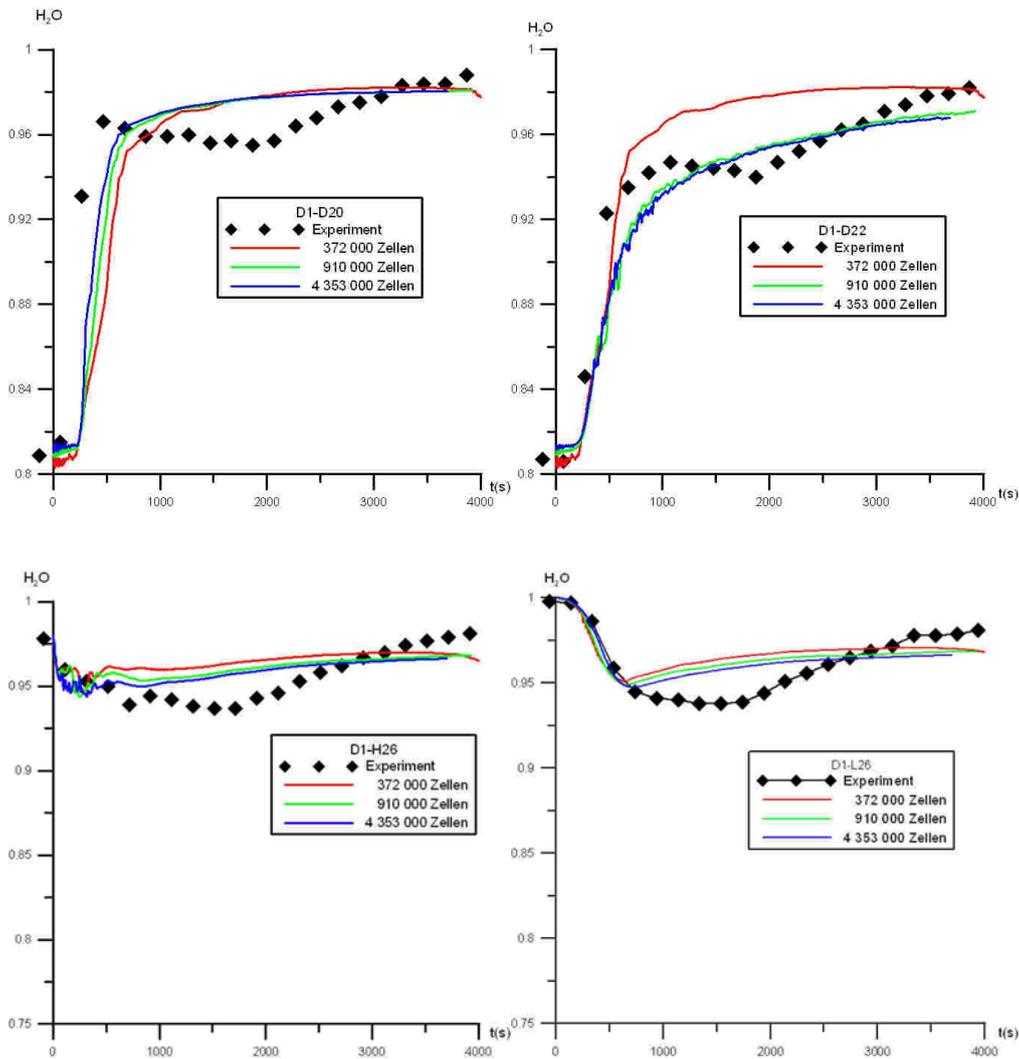


Abb. 4.2-5 Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlich feinem Gitter

#### 4.2.5 Konvergenzkriterium und Einfluss des Zeitschritts

Um den Einfluss des Konvergenzkriteriums zu untersuchen wurden zwei Simulationen mit unterschiedlichem Konvergenzkriterium durchgeführt. Bei einer Simulation wurde das Standardkonvergenzkriterium RMS-Residuum  $<1,0e-4$  verwendet. Bei der zweiten Simulation wurde das schärfere Konvergenzkriterium Max-Residuum  $<5,0e-4$  verwendet. Um dieses schärfere Kriterium erfüllen zu können, muss auch ein kleinerer Zeitschritt gewählt werden. Beide Simulationen wurden mit einem adaptiven Zeitschritt berechnet. CFX wählt den Zeitschritt so, dass innerhalb von 3 bis 5 Iterationen eine konvergente Lösung gefunden wird, der maximale Zeitschritt wurde auf 1 s begrenzt. Bei der Simulation mit dem schwächeren Konvergenzkriterium RMS  $<1,0e-4$  konnte nach wenigen Sekunden der Zeitschritt auf 0,7 s angehoben werden; nach 1000 s steigt der Zeitschritt sogar auf den Maximalwert von 1 s an.

Dies korrespondiert mit einer mittleren RMS-Courant-Zahl von  $\sim 3,5 - 7$ . Beim schärferen Konvergenzkriterium sinkt der Zeitschritt dagegen auf  $0,045 \text{ s} - 0,035 \text{ s}$  ab, was zu der deutlich kleineren RMS-Courant-Zahl von  $0,3$  führt. (Abb. 4.2-6).

Vergleicht man die Simulationsergebnisse der beiden Rechnungen so sind für die meisten Messstellen keine signifikanten Unterschiede zu beobachten (Abb. 4.2-7 und Abb. 4.2-8). Nur im Bereich, bei dem die verstärkte turbulente Vermischung der dominante Effekt ist (z. B. C20  $800 \text{ s} - 1100 \text{ s}$ ), wird bei Verwendung des strengeren Konvergenzkriteriums eine schnellere Zunahme der Dampfkonzentration beobachtet. Insgesamt sind die Unterschiede zwischen den beiden Simulationen so klein, das davon ausgegangen werden kann, dass auch mit dem RMS-Kriterium und dem größeren Zeitschritt eine hinreichend große Genauigkeit erzielt werden kann. In diesem Fall scheint auch bei einer Courant-Zahl von deutlich über  $1$  das Strömungsfeld von CFX richtig simuliert zu werden.

Aufgrund des deutlich kleineren Zeitschritts benötigt die Simulation mit dem strengeren Konvergenzkriterium ca. 20-mal länger, als die Simulation mit dem Standard-Konvergenzkriterium, die ca. 3 Tage auf 8 CPUs auf einem Linux-Cluster benötigt hat. Aufgrund des sehr viel größeren Rechenzeitbedarfs und aufgrund der ähnlichen Simulationsergebnisse wurden bei den weiteren Rechnungen das Standardkonvergenzkriterium und die größere Zeitschrittweite verwendet.

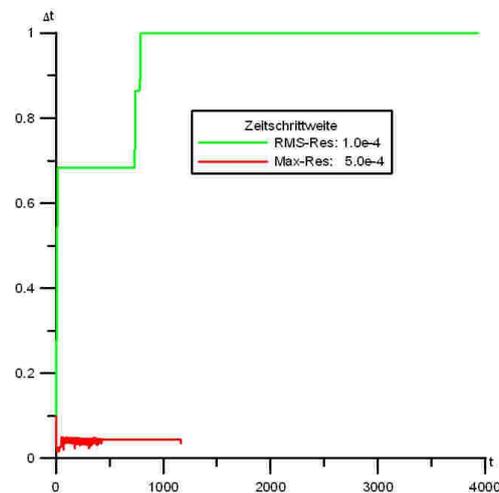


Abb. 4.2-6 Verwendeter Zeitschritt über der Problemzeit in Abhängigkeit vom Konvergenzkriterium

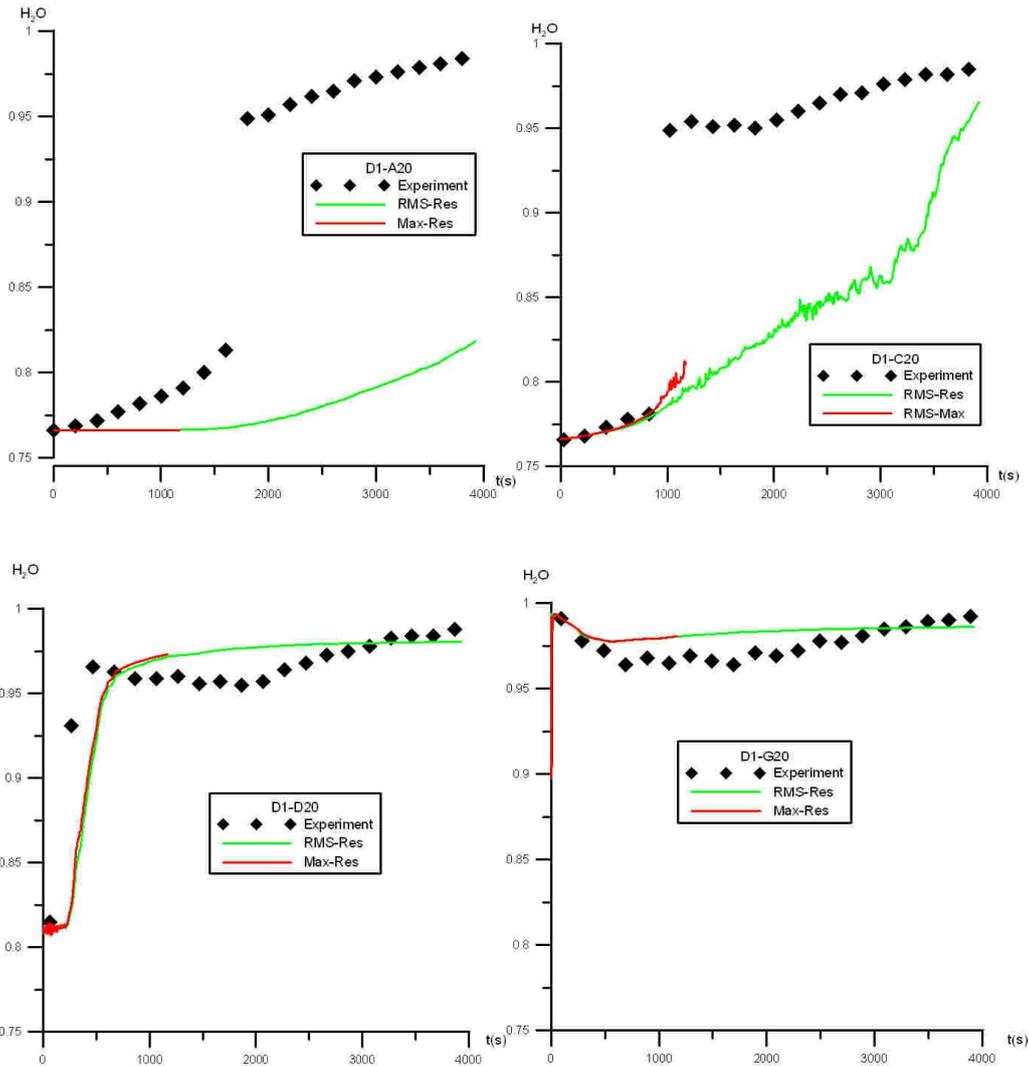
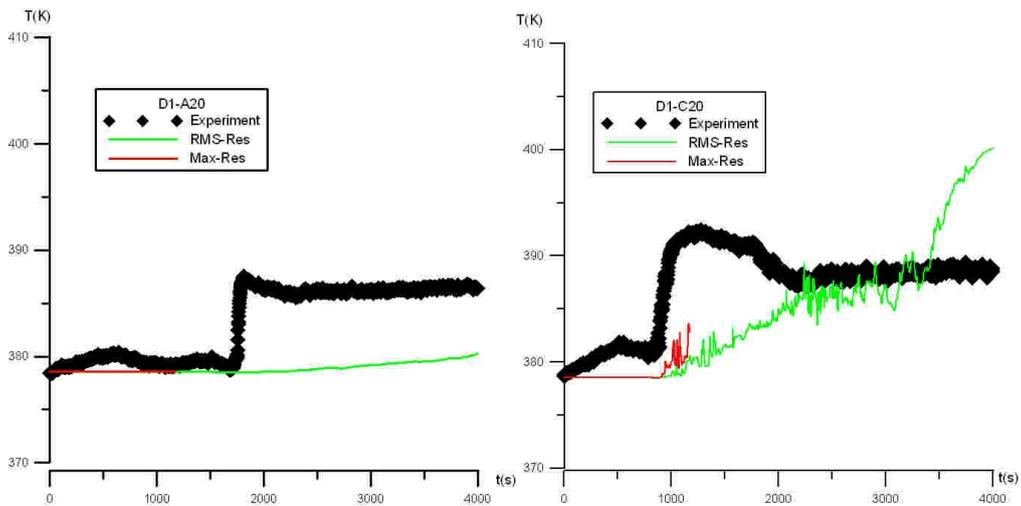


Abb. 4.2-7 Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlichen Konvergenzkriterium



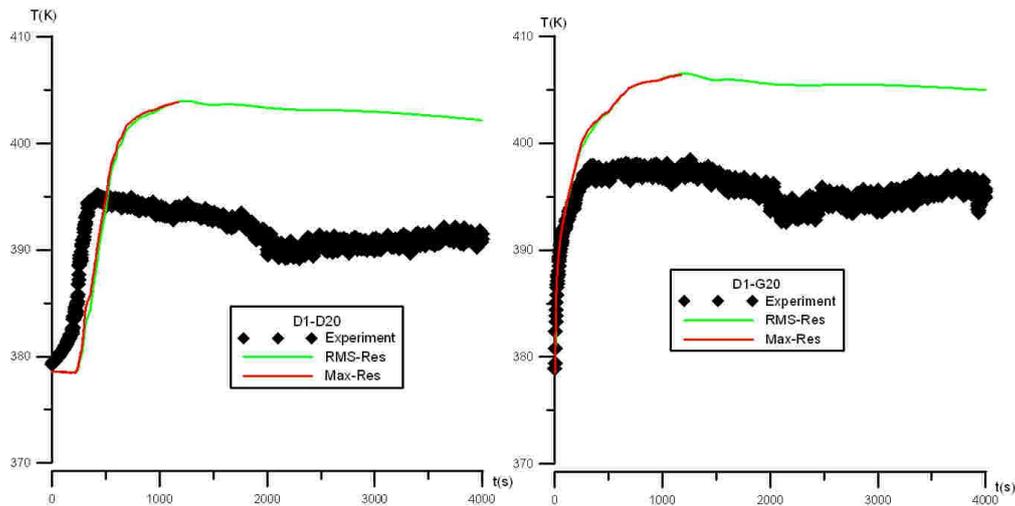
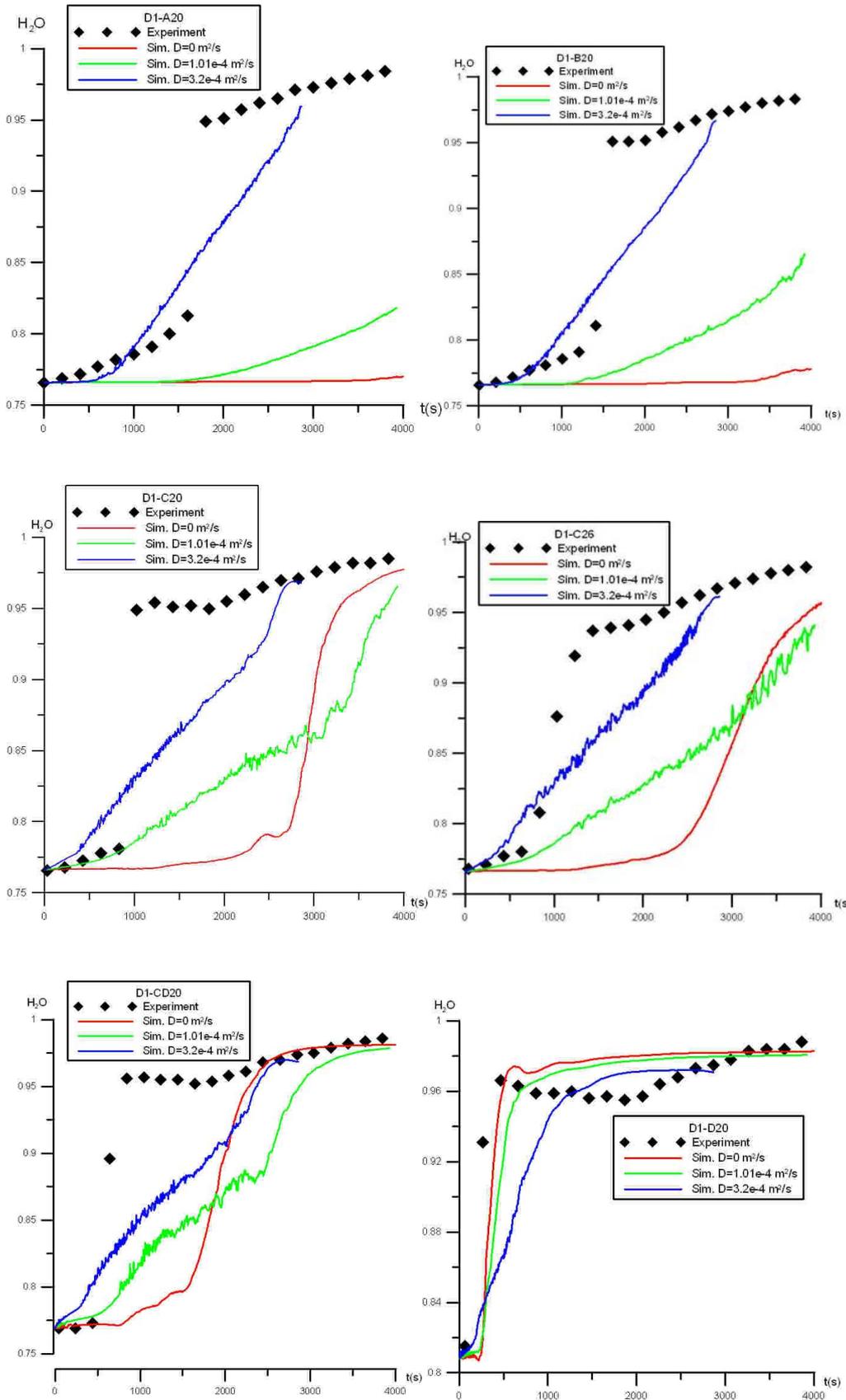


Abb. 4.2-8 Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlichem Konvergenzkriterium

#### 4.2.6 Diffusionskoeffizient

In einem Vorversuch, bei dem die Schichtungsauflösung durch Diffusion gemessen wurde, wurde experimentell eine Diffusionskonstante von  $D = 3,2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  bestimmt /MIG10/. Korrelationen liefern eine Diffusionskonstante im Bereich von  $1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  bis  $3,1 \text{ m}^2/\text{s}$ . Um zu untersuchen, welchen Einfluss die Diffusionskonstante auf die Simulation hat, wurden 3 Simulationen miteinander verglichen. Sie unterscheiden sich nur durch die Diffusionskonstante. Bei einer dieser Rechnungen wird die Diffusion vernachlässigt (kinematischen Diffusivität  $D = 0 \text{ m}^2/\text{s}$ ). Bei der zweiten Simulation wurde die Korrelation von Fuller /POL01/ verwendet ( $D = 1,01 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ ). Bei der dritten Simulation wurde der experimentell bestimmte Wert von  $D = 3,2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  verwendet. Bei gleicher Schichtung (nach 50 s) ist erwartungsgemäß kein signifikanter Einfluss der Diffusionskonstante auf die Vertikalgeschwindigkeit im Dampfjet zu erkennen. (Abb. 4.2-10)

Die Simulationen zeigen aber einen signifikanten Einfluss der Diffusionskonstanten auf die Schichtungsauflösung. Mit zunehmender Diffusionskonstante wird der Gradient der Schichtung schwächer (Abb. 4.2-11). Bei  $D = 3,2 \text{ cm}^2/\text{s}$  ist nach 1000 s der maximale Heliummassenbruch an der Behälterdecke von ca. 0,065 auf ca. 0,055 abgesunken, nach 3000 s hat sich die Heliumschichtung fast komplett abgebaut. Bei  $D = 1,01 \text{ cm}^2/\text{s}$  hat sich die maximale Heliumkonzentration an der Behälterdecke noch nicht verringert. Erst nach 3000 s ist eine leichte Abnahme erkennbar. Selbst nach 4000 s liegt der maximale Heliummassenbruch bei über 5%.



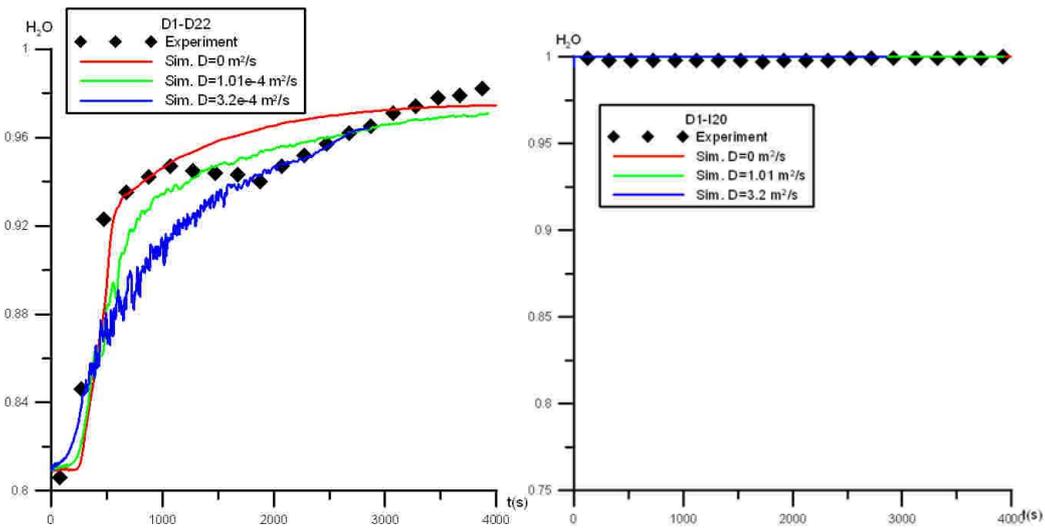


Abb. 4.2-9 Dampfkonzentration in Abhängigkeit von der Wahl der kinematischen Diffusivität von Helium D

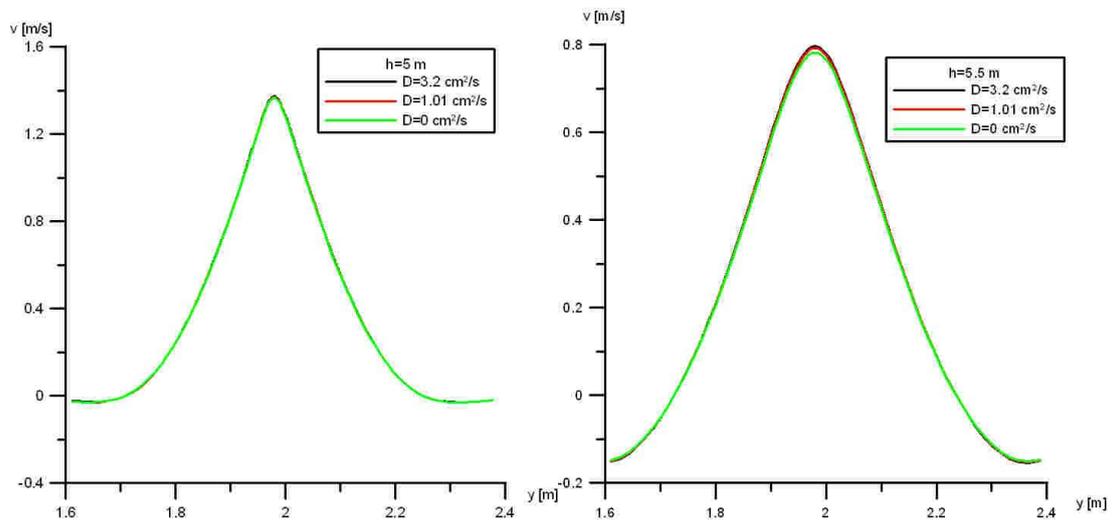


Abb. 4.2-10 Vertikalgeschwindigkeit im Jet in Abhängigkeit von der kinematischen Diffusivität von Helium nach 50 s

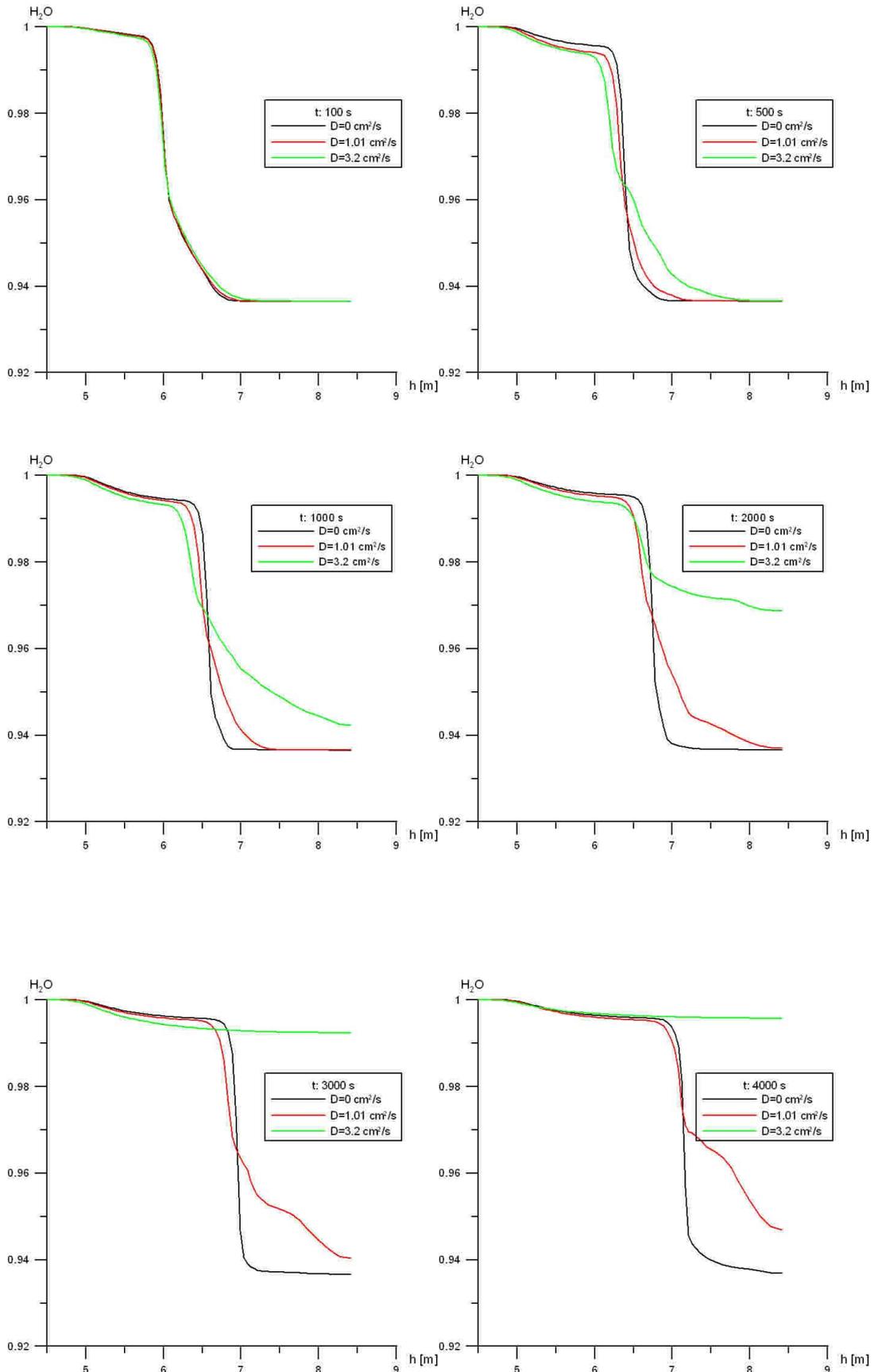


Abb. 4.2-11 Verlauf der Schichtung in Abhängigkeit vom Diffusionskoeffizienten, aufgetragen ist der H<sub>2</sub>O-Massenbruch über der Behälterhöhe

Beim Vergleich mit experimentellen Daten besteht das Problem, dass mit dem SST-Modell und bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung die Schichtungsauflösung nicht richtig beschrieben wird. Die Erosion der Schichtung durch den Dampfstrahl - erkennbar an der schnellen Zunahme der Dampfkonzentration an einem Messpunkt - wird um einen Faktor 3 bis 5 zu langsam berechnet (siehe Abb. 4.2-9).

Je nach Diffusionskonstante unterscheidet sich der Zeitpunkt der Erosion deutlich. Wobei sich kein einheitliches Bild ergibt. Teilweise beginnt die Erosion bei Vernachlässigung der Diffusion zuerst, teilweise aber auch bei der Simulation mit  $D = 3,2 \text{ cm}^2/\text{s}$ , der größten Diffusionskonstante. Bei  $D = 3,2 \text{ cm}^2/\text{s}$  ist der Anstieg der Dampfkonzentration bei allen Messstellen deutlich langsamer als im Experiment. Es wird an vielen Messstellen z. B. C20 die Schichtung im Wesentlichen durch die Diffusion erodiert, was nicht dem Experiment entspricht. Bei C20 und CD20 ist zu sehen, dass schon in der Anfangsphase vor Erreichen des Dampfstrahles die Schichtung wesentlich schwächer wurde, was nicht dem Experiment entspricht.

Insgesamt zeigen diese Ergebnisse, dass  $D = 3,2 \text{ cm}^2/\text{s}$  ein zu hoher Wert für die kinematische Diffusivität von Helium ist. Bezüglich des Gradienten in der Heliumschicht erreicht man mit  $D = 1,01 \text{ cm}^2/\text{s}$  und ohne Diffusion deutlich bessere Ergebnisse. Der langsamere Anstieg der Konzentration, bevor der Dampfstrahl die Messstelle erreicht, wird mit  $D=1,01 \text{ cm}^2/\text{s}$  besser wiedergegeben (Abb. 4.2-9 C20/C26 bis 700 s).

Bei den Messpunkten A und B ergibt sich in der Anfangsphase für alle Diffusionskonstanten folgende Abweichung: im Experiment wird quasi sofort eine langsame Zunahme der Dampfkonzentration gemessen werden, während in der Simulation immer in den ersten 300 s - 1000 s eine konstante Konzentration berechnet wird, da zu Beginn der Simulation in dieser Region keine signifikanten Konzentrationsgradienten vorliegen. Offensichtlich wird ein bisher nicht näher identifizierter physikalischer Prozess nicht berücksichtigt, bzw. führen Vereinfachungen bei den Randbedingungen (z. B. bei der Anfangstemperatur) zu diesen Abweichungen. Aufgrund der großen Unsicherheiten beim Vergleich mit den Experimenten wird auf eine genauere Anpassung der Diffusionskonstante verzichtet, insbesondere da dieser Wert durch eine gebräuchliche Korrelation abgesichert ist (/POL01/, Fuller-Korrelation) mit der bereits gute Ergebnisse erzielt wurden (z. B. Panda4, Panda4bis).

Erst nach Abschluss dieser Untersuchung wurde der starke Einfluss der Wärmestrahlung auf das Simulationsergebnis festgestellt. Für das SST und das TSF-Modell wurde dann eine

Simulation mit Berücksichtigung der Wärmestrahlung durchgeführt. Ergebnisse sind in Abschnitt 4.2.8 und Abschnitt 4.2.9 beschrieben.

#### **4.2.7 Turbulenzmodell**

Im Folgenden wird der Einfluss der Turbulenzmodellierung auf die Simulationsergebnisse untersucht. Es wurden Simulationen mit den 2-Gleichungsmodellen SST und  $k-\epsilon$ , dem BSL-Reynolds-Stress-Modell und mit dem neu von IKE/ANSYS entwickelten TSF-Modell durchgeführt /ZIR11/, /LÜB10/. Dabei wird das TSF-Modell zur Simulation der skalaren Flüsse der Heliumkonzentration wieder zusammen mit dem BSL-Reynolds-Stress-Modell verwendet.

In diesen Rechnungen wurde die Wärmestrahlung auch noch vernachlässigt, da sich der entscheidende Einfluss der Strahlungsmodellierung erst nach Abschluss dieser Parameterstudie herausgestellt hat. Die aus den Untersuchungen gewonnenen Erkenntnisse können aber qualitativ auch auf Simulationen mit Berücksichtigung von Strahlung übernommen werden. Die Ergebnisse der Simulation mit Berücksichtigung der Wärmestrahlung für das SST und das BSL-TSF Modell sind in Abschnitt 4.2.8 und Abschnitt 4.2.9 beschrieben.

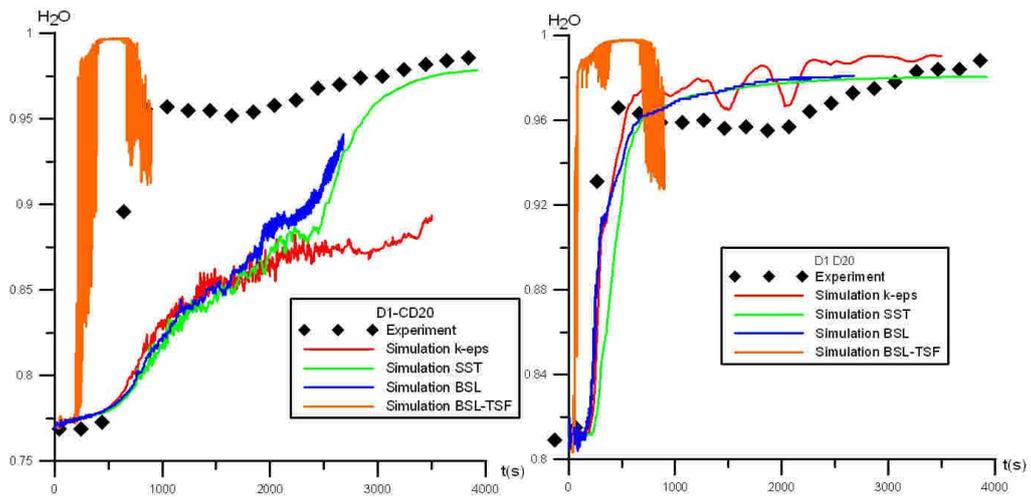
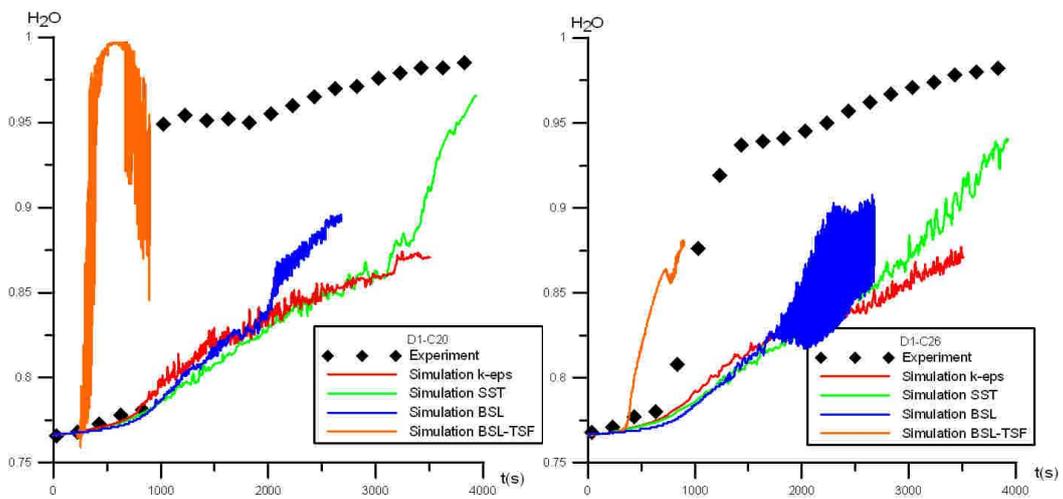
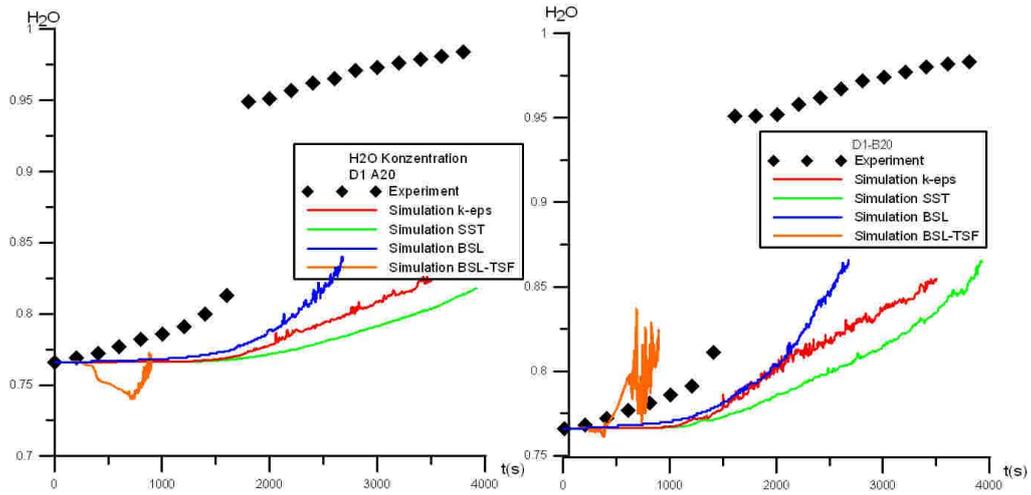
Der Vergleich zeigt, dass sich das TSF-Modell deutlich von den SST,  $k$ -epsilon und BSL-Reynolds-Stress Modellen unterscheidet. (Abb. 4.2-12). Die Form des Dampf-Jets, die Strömungsgeschwindigkeiten und die turbulente kinetische Energie ist bei diesen drei Turbulenzmodellen ähnlich (Abb. 4.2-13 - Abb. 4.2-22) wohingegen das TSF-Modell eine andere Form des Jets zeigt und die Rückströmung nach unten am oberen Ende des Jets stärker ausgeprägt ist. Der Jet dringt beim TSF-Modell tief in die Leichtgasschicht ein, was bei den anderen Turbulenzmodellen nicht in diesem Maße der Fall ist (Abb. 4.2-13, Abb. 4.2-15). Die turbulente kinetische Energie ist im Bereich des Jets beim TSF-Modell insgesamt niedriger als bei den anderen drei Turbulenzmodellen und die Bereiche mit hoher turbulenter kinetischer Energie sind anders verteilt. Beim TSF-Modell kommt es im Verlauf der Simulation zu einer starken Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie im dem Bereich in dem der Dampfstrahl in die Leichtgasschicht eindringt und mit ihr wechselwirkt (Abb. 4.2-23). Der Jet wird im Verlauf der Simulation zunehmend instabil, was sich u. a. in starken Konzentrationschwankungen insbesondere in der Behältermitte zeigt (Abb. 4.2-25).

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse an den verschiedenen Messstellen im ersten Behälter quantitativ verglichen.

Beim Vergleich der Ergebnisse des SST, des  $k-\epsilon$ , und des BSL-Modells zeigt sich, dass an den oberen Messstellen (A20, B20, C20 in Abb. 4.2-12) die Schichtungsauflösung mit dem BSL-Reynolds-Stress-Modell schneller erfolgt als mit dem SST und dem  $k-\epsilon$ -Modell. Bei den beiden höchsten Messstellen (A20 und B20) erfolgt die Schichtungsauflösung mit dem  $k-\epsilon$ -Modell etwas schneller als mit dem SST-Modell; an den tiefergelegenen Messpunkten CD-20 und C-20 ist es umgekehrt. Die Blending-Funktionen beim SST-Modell geben an, in welchen Bereichen zwischen  $k-\epsilon$  (blau) und  $\omega$ -Modell (rot) umgeschaltet wird. Neben dem Bereich der Wände, liefert das  $\omega$ -Modell auch einen (kleinen) Betrag unterhalb der Schichtung und im Jet (2. Blending Funktion, Abb. 4.2-17). Dies ist eine mögliche Erklärung für die moderaten Abweichungen bei der Berechnung der Schichtungsauflösung zwischen beiden Turbulenzmodellen. Eine Bewertung, welches dieser drei Modell ohne Berücksichtigung der Wärmestrahlung die besseren Ergebnisse liefert, ist schwierig, da die Abweichungen mit/ohne Strahlungsmodellierung viel größer sind, als die Unterschiede zwischen den einzelnen Turbulenzmodellen. Hinzu kommt, dass auch bei der Strahlungsmodellierung noch erhebliche Unsicherheiten bestehen (z. B. Absorptionskonstante).

Mit dem TSF-Modell erfolgt die Schichtungsauflösung sehr viel schneller als mit den anderen Turbulenzmodellen und auch schneller als im Experiment. An den Messstellen in der Behältermitte B20, C20, CD20, D20 erfolgt die Auflösung der He-Schicht deutlich schneller als im Experiment; an den Messstellen seitlich von der Mittelachse stimmt die berechnete Dampfkonzentration deutlich besser mit dem Experiment überein. An den seitlich gelegenen Monitorpunkten erfolgt die Schichtungsauflösung in der Simulation (TSF) später als auf der Mittelachse, da dort der Dampfjet, der in die Schichtung eindringt, zu einer früheren Absenkung der He-Konzentration führt.

Die Simulation der turbulenten skalaren Flüsse hat also einen sehr starken Einfluss auf das Simulationsergebnis (zumindest mit den gewählten Parameter). Der Einfluss ist viel größer als der Wechsel von einem 2-Gleichungsmodell zu einem Reynolds-Stress-Modell. Da eine Aufgabe dieses Projekts die Validierung des TSF-Turbulenzmodells ist, wurde eine weitere Rechnung mit dem TSF-Modell durchgeführt, bei der die Wärmestrahlung mit dem Multi-Band-Ansatz simuliert wurde (siehe Abschnitt 4.2.8.1).



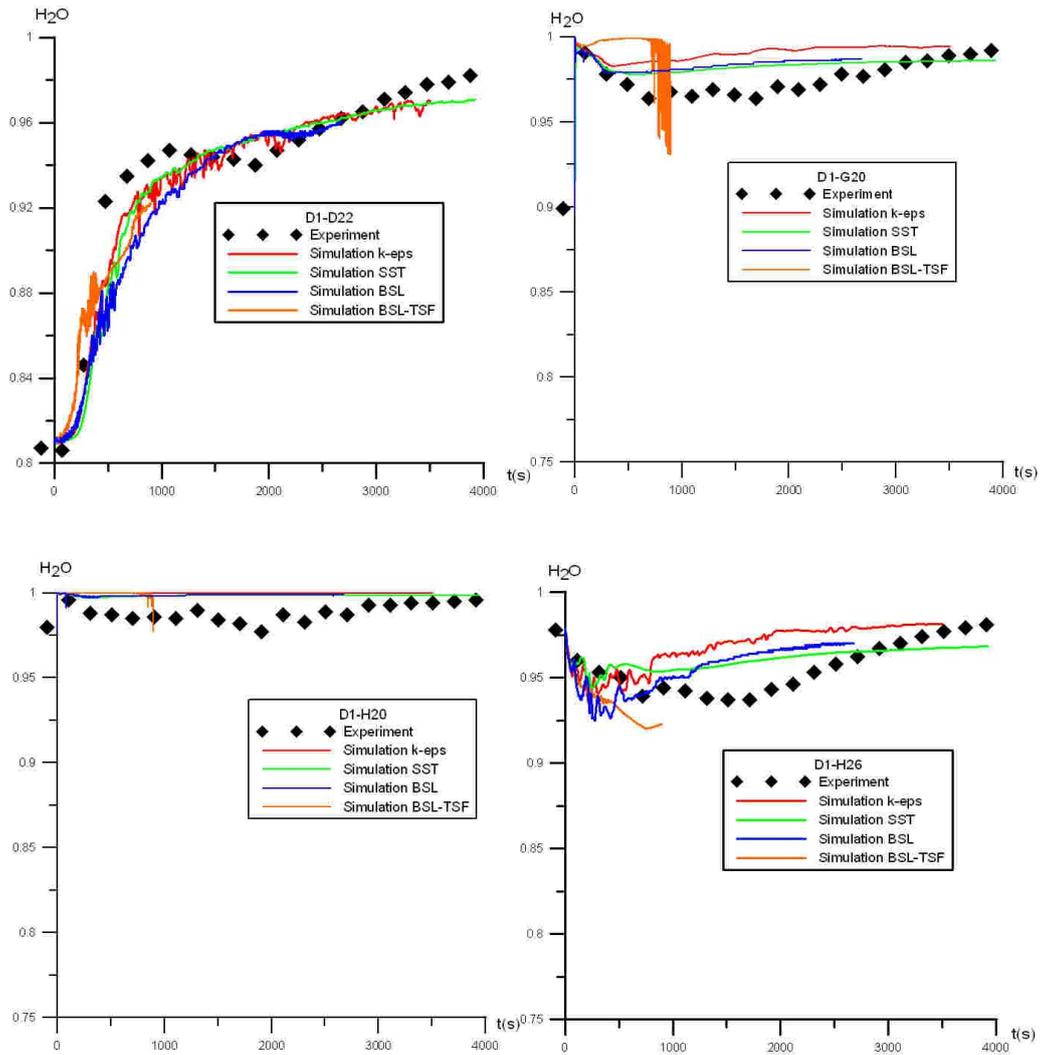


Abb. 4.2-12 Dampfkonzentrationen an mehreren Messstellen im ersten Behälter des Panda-Versuchsstands

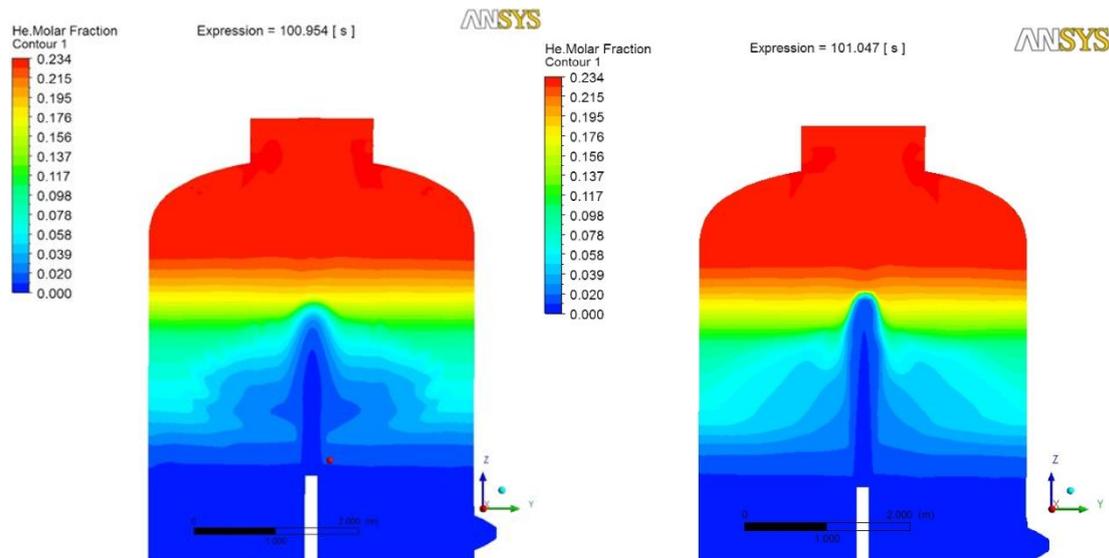


Abb. 4.2-13 Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

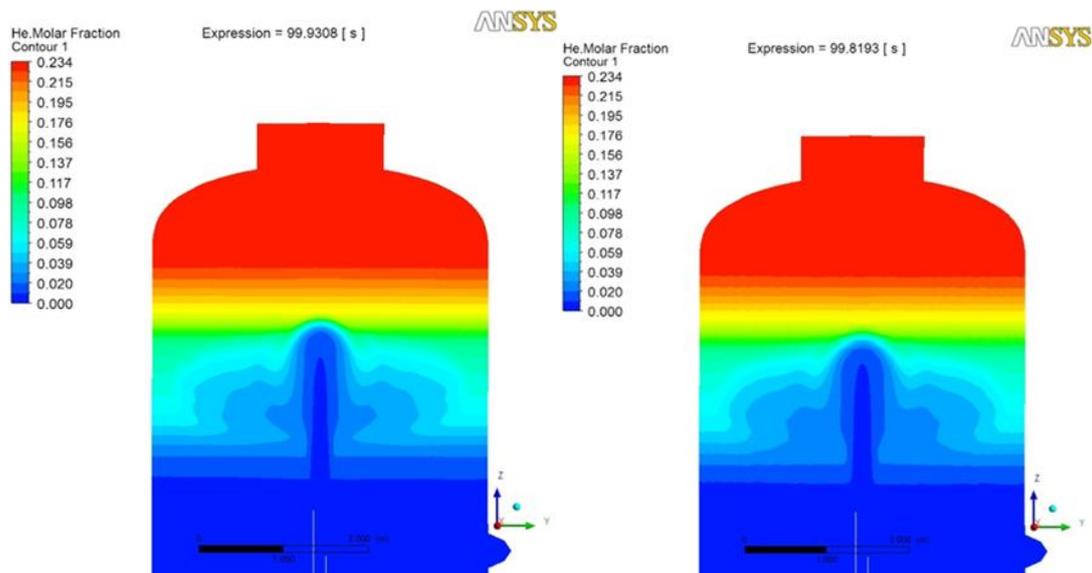


Abb. 4.2-14 Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

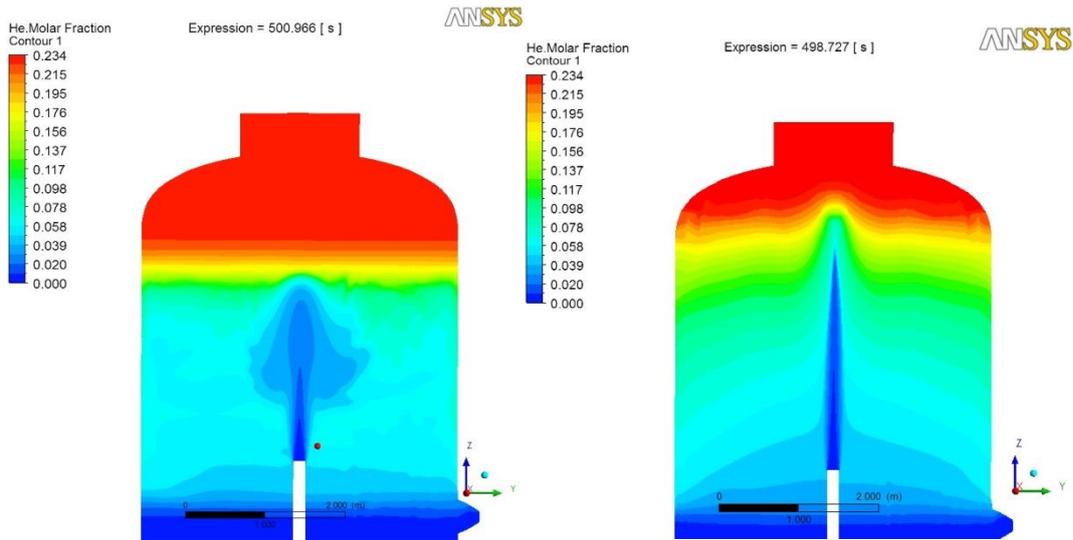


Abb. 4.2-15 Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

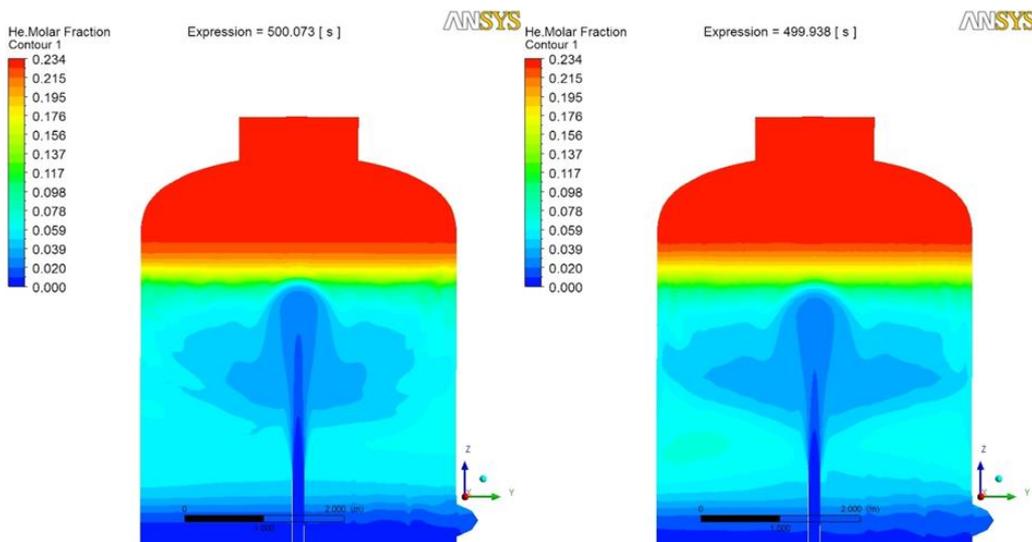


Abb. 4.2-16 Helium-Konzentration in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

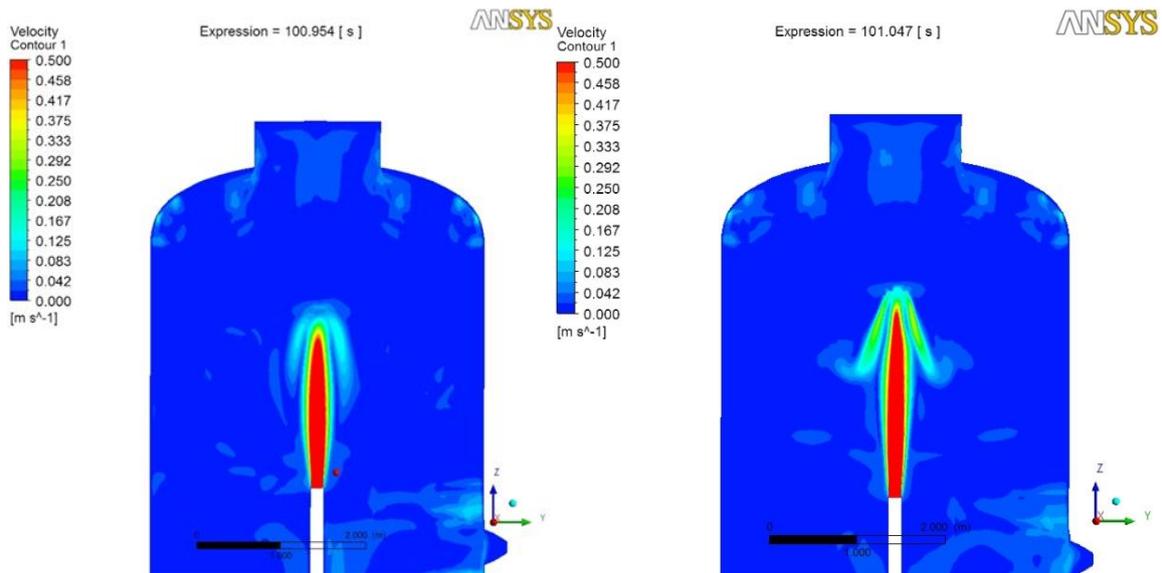


Abb. 4.2-17 Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

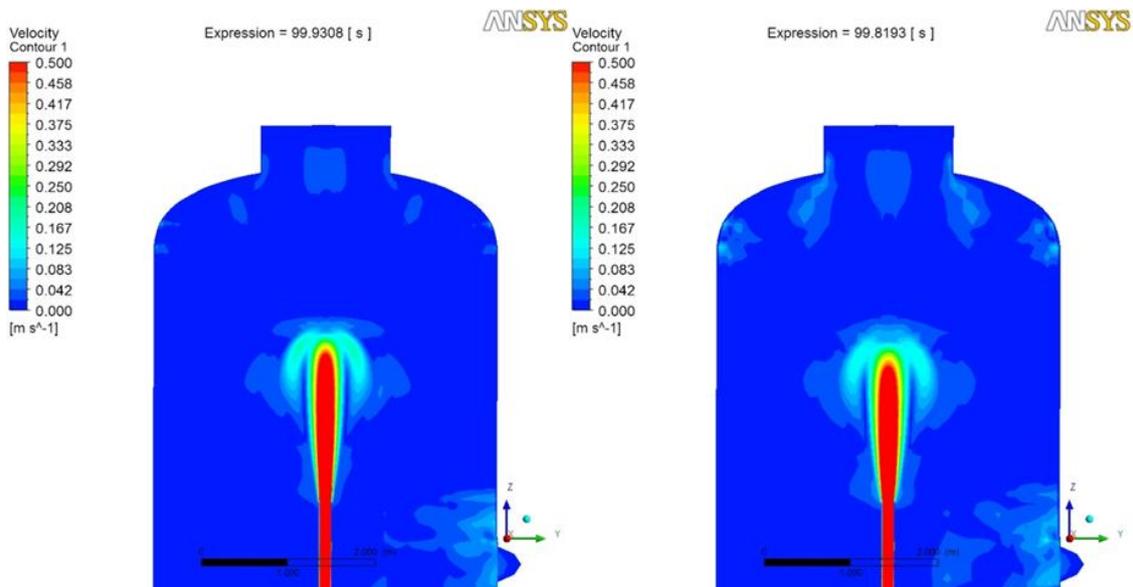


Abb. 4.2-18 Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

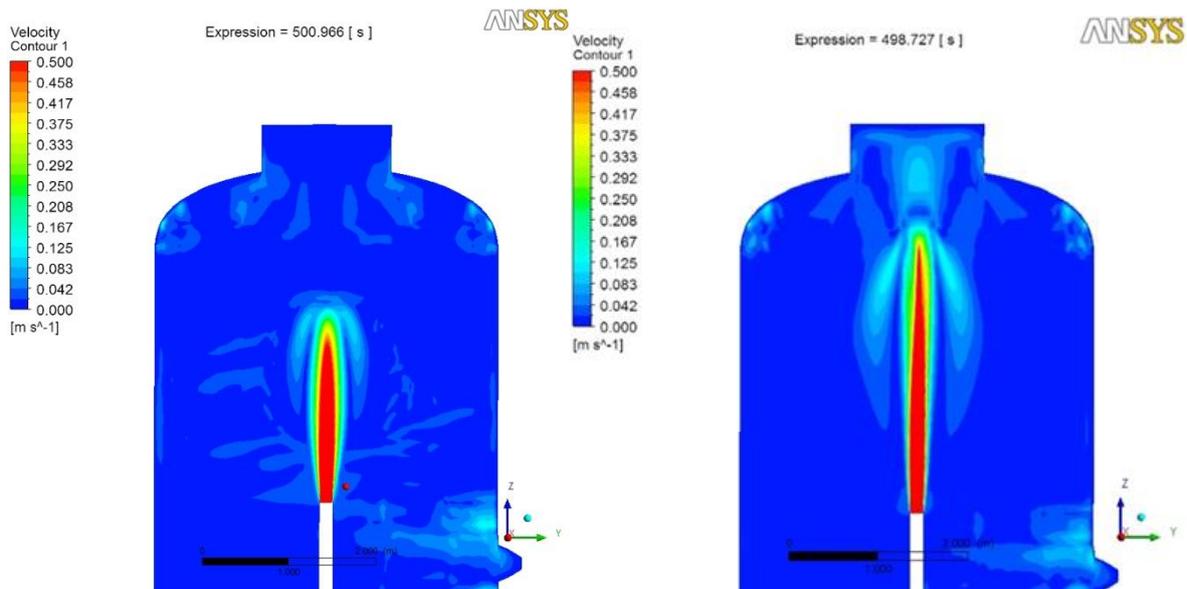


Abb. 4.2-19 Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

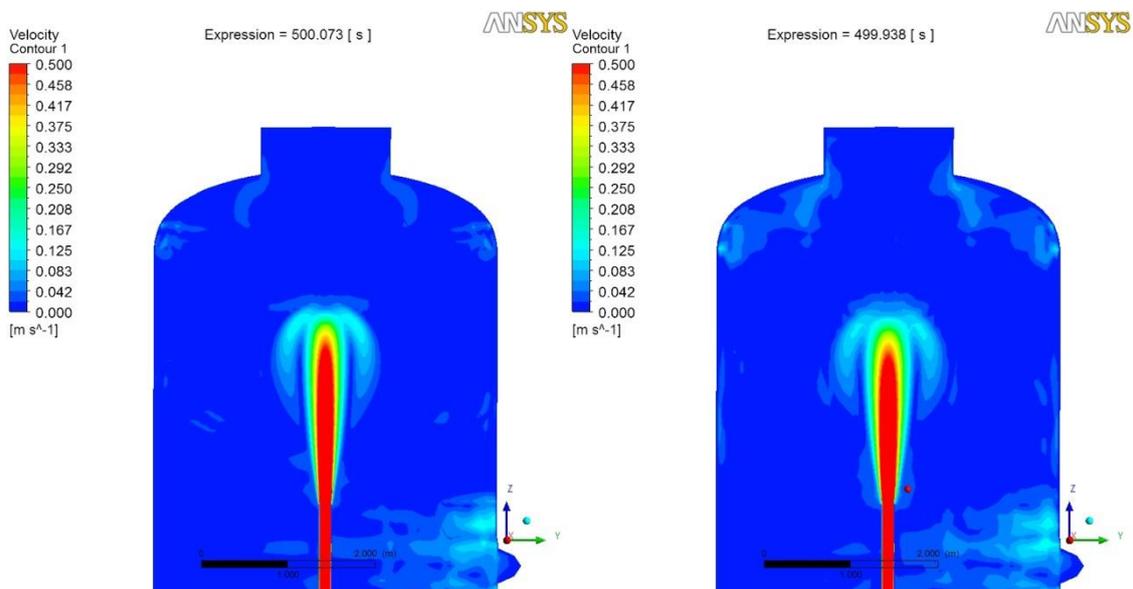


Abb. 4.2-20 Geschwindigkeit in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

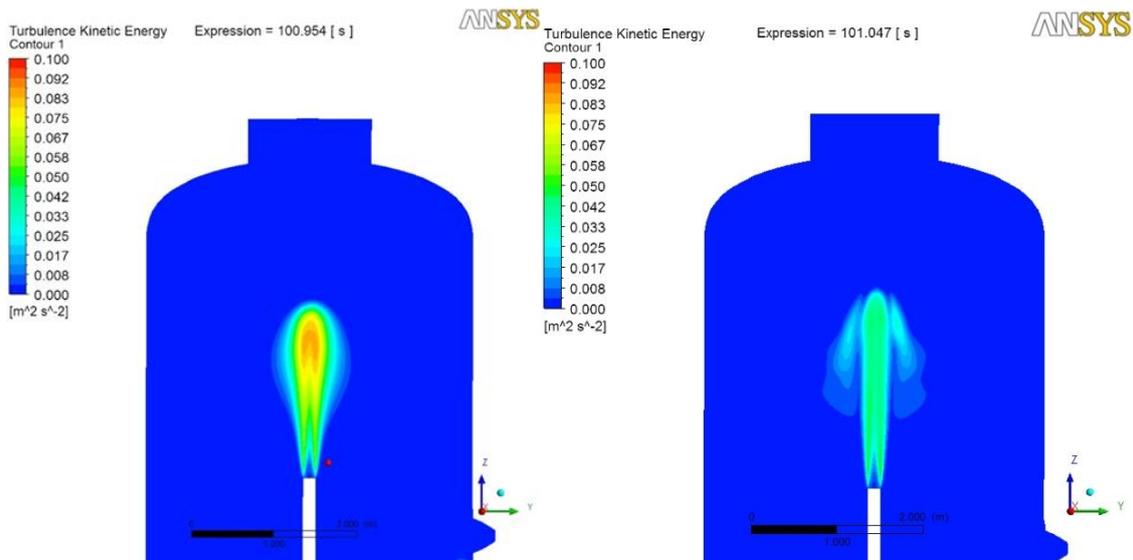


Abb. 4.2-21 Turb. kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

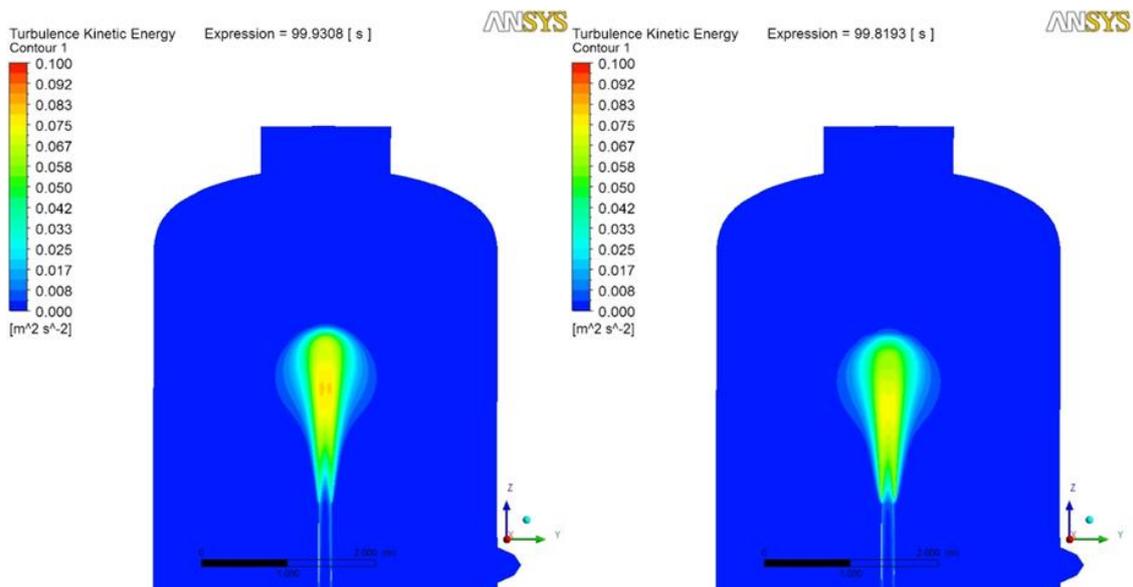


Abb. 4.2-22 Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

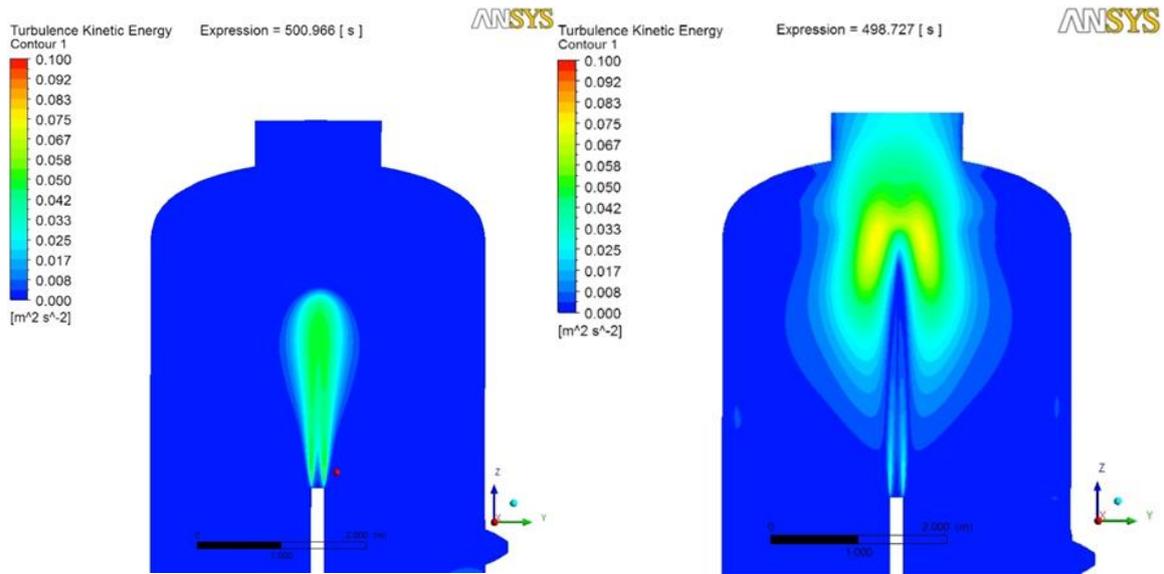


Abb. 4.2-23 Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 500 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: BSL-Reynolds-Stress, rechts TSF

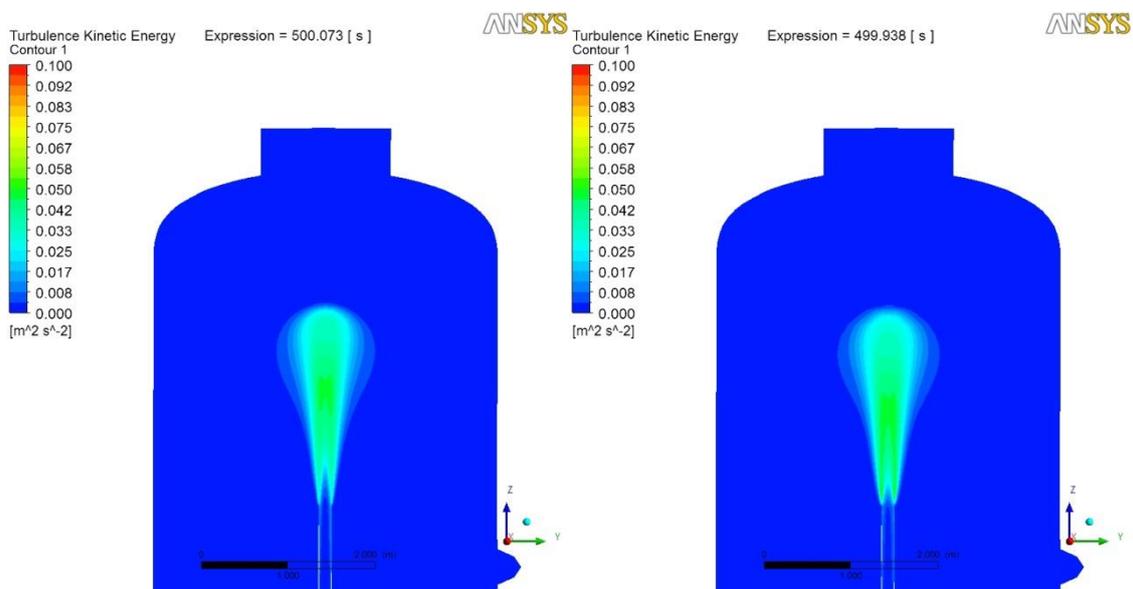


Abb. 4.2-24 Turb. Kinetische Energie in der oberen Hälfte des ersten Behälters nach ca. 100 s bei unterschiedlicher Turbulenzmodellierung. Links: k-epsilon, rechts: SST

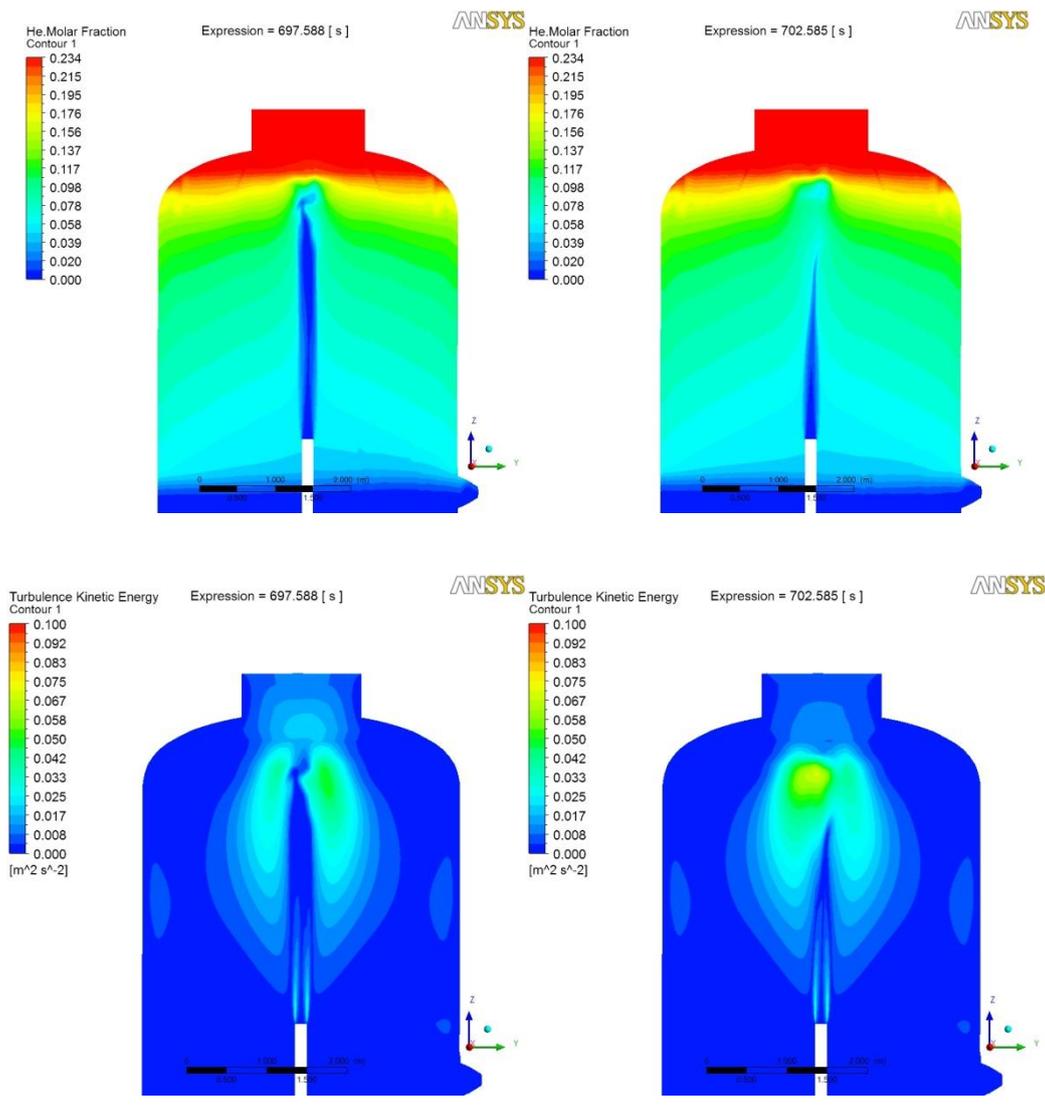


Abb. 4.2-25 Starke Instabilitäten im späteren Verlauf der Simulation (ca. 700 s) bei TSF Turbulenzmodell; oben He-Konzentration, unten turbulente kinetische Energie

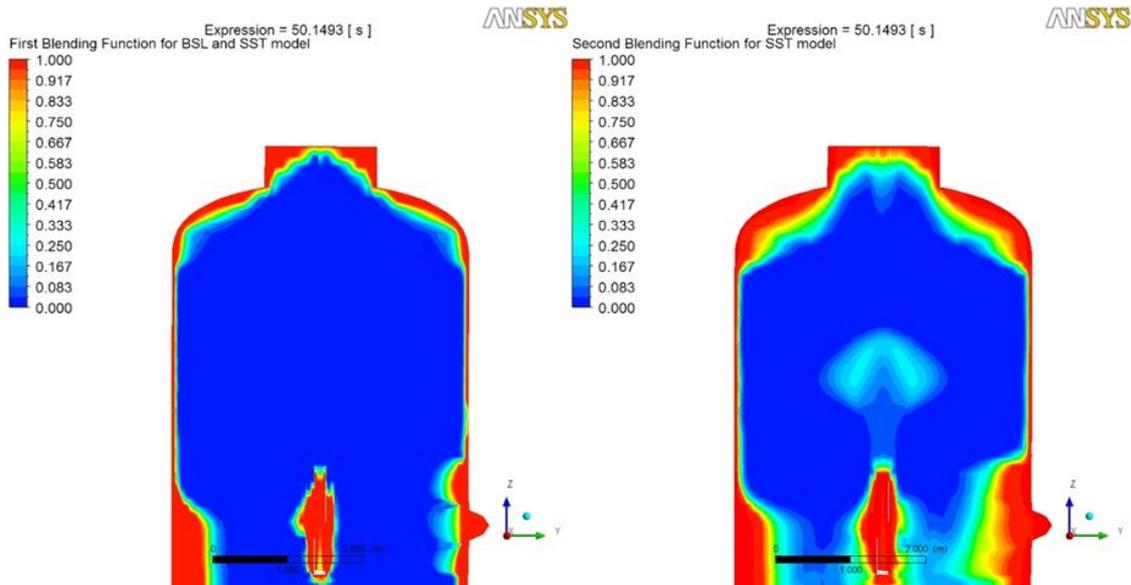


Abb. 4.2-26 Blending Funktionen beim SST-Modell nach 50 s

## 4.2.8 Wärmestrahlung

### 4.2.8.1 Modellierung der Wärmestrahlung

Bei den Untersuchungen zur Diffusionskonstanten und zur Turbulenzmodellierung wurde die Wärmestrahlung bisher vernachlässigt. Da diese Simulationen nicht in der Lage waren, die Schichtungsauflösung zufriedenstellend zu simulieren, wird im Folgenden untersucht, ob durch Modellierung der Wärmestrahlung eine Verbesserung erzielt werden kann. In CFX-13 stehen verschiedene Wärmestrahlungsmodelle zur Verfügung [CFX13]. Zur Modellierung der Wärmestrahlung wurde das Discrete Transfer Modell ausgewählt. Bei der Modellierung der Strahlung ergibt sich das Problem, dass in der Materialdatenbank für die meisten Stoffe keine Angaben zu den Absorptionskoeffizienten  $k$  gemacht werden (es wird immer  $k=1 \text{ m}^{-1}$  gesetzt). Aus der Literatur ist bekannt, dass man für einatomige Gase wie He in guter Näherung die Absorption vernachlässigen kann ( $k=0 \text{ m}^{-1}$ ).

Bei Wasserdampf ist die Angabe eines Absorptionskoeffizienten dagegen schwierig. Der Absorptionskoeffizient ist stark von der Wellenlänge abhängig. Um die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse vom Absorptionskoeffizienten zu untersuchen, wurde der mittlere Absorptionskoeffizient für Dampf von  $0,1 \text{ m}^{-1}$  bis  $80 \text{ m}^{-1}$  variiert. Dabei wird unterstellt, dass der Absorptionskoeffizient unabhängig vom Frequenzspektrum der Strahlung ist (graues Medium).

Bei Wärmestrahlung liegt ein ganzes Frequenzspektrum vor. Unterstellt man schwarze Strahler, so liegt das Maximum an Strahlungsintensität bei einer Frequenz von  $5.88e+10 \text{ K/s} \cdot T$  (Wiensche Verschiebungsgesetz) und die Energiedichte ist proportional zu  $T^4$  (Stefan-Boltzmann-Gesetz). Deshalb ist die Modellierung der Absorption von Wasserdampf mit einer mittleren Absorptionskonstante schwierig, insbesondere muss die Abhängigkeit der Absorption von der Frequenz und damit indirekt von der Temperatur berücksichtigt werden. In CFX gibt es unterschiedliche Spektralmodelle, unter anderem das „Multigray“-Modell. Das Modell beruht auf der Annahme, dass die Absorption des Gases, durch eine gewichtete Summe „grauer“ Medien angenähert werden kann. Bei der Simulation mit dem Multigray-Modell werden vier verschiedene Medien mit unterschiedlicher Gewichtung (Temperatur) und unterschiedlichem Absorptionskoeffizienten (Dampfkonzentration  $x_{\text{H}_2\text{O}}$  und Druck  $p$ ) angenommen:

Band	Absorptionskoeffizient	Gewichtung
1	0	$0.364 + 4.74E-05 [K^{-1}] \cdot T$
2	$0.69 \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \cdot p$	$0.266 + 7.19E-05 [K^{-1}] \cdot T$
3	$7.4 \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \cdot p$	$0.252 - 7.41E-05 [K^{-1}] \cdot T$
4	$80 \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \cdot p$	$0.118 - 4.52E-05 [K^{-1}] \cdot T$

Die Modellkonstanten beruhen auf einer Empfehlung von ANSYS. Sie wurden ursprünglich für die Verbrennung von Methan-Luft-Flammen angepasst, wobei hier angenommen wird das  $x_{\text{CO}} = x_{\text{CO}_2} = x_{\text{CH}_4} = 0$ . Da die Modellparameter für einen anderen Temperaturbereich und für eine andere Stoffzusammensetzung (geringe  $x_{\text{H}_2\text{O}}$ , Vorhandensein von  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  und  $\text{CH}_4$  (Konzentrationen korrelieren miteinander)) optimiert wurden, ist zu erwarten, dass dieser Parametersatz für Containmentanwendungen noch optimiert werden kann.

In der Literatur sind auch Werte für einen Emissionsgrad von Wasserdampf in Abhängigkeit vom Druck und von der Temperatur zu finden [VDI], [SCH70]. Dieser Wert kann nicht direkt in CFX verwendet werden, da CFX einen Absorptionskoeffizienten  $k$  benötigt. Nach dem Beerschen Absorptionsgesetz gilt für die Abnahme der Intensität entlang eines Weges  $s$  durch Absorption:

$$dI = -kI ds$$

Bei konstantem  $k$  ergibt sich durch Integration:

$$I = I_0 e^{-ks}$$

Und die insgesamt absorbierte Intensität beträgt:

$$I_0 - I = I_0(1 - e^{-ks}) = A_v I_0$$

$A_v$  wird als geometrieabhängiger Absorptionsgrad bezeichnet /VDI84/. Daraus ergibt sich für  $s > 0$  m:

$$-\ln(1 - A_v) = ks$$

Unterstellt man thermisches Gleichgewicht, so sind der Emissions- und der Absorptionsgrad des Gases identisch.

$$A_v = \varepsilon_g$$

Nach /SCH70/ kann man den Emissionsgrad von Wasserdampf durch folgende Gleichungen annähern:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}} &= \varepsilon_\infty (1 - e^{f(\text{ps})g(\text{ps}, \text{T})}) \\ \varepsilon_\infty &= 0.747 - 0.000168 * \text{T} \\ g(\text{ps}, \text{T}) &= 1 + \frac{0.11923}{0.137 + (\text{ps})^{0.79}} \left( 0.001 * \text{T} - 0.273 - \frac{0.99}{0.495 + (\text{ps})^4} \right)^2 \\ f(\text{ps}) &= (1.785 - 0.039\text{ps} + 0.2436(\text{ps})^2) \text{ps} \end{aligned}$$

Betrachtet man der Einfachheit halber  $s = 1$  m so ergibt sich ein Zusammenhang:

$$-\ln(1 - \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}) = k$$

für die mittlere Absorptionskonstante von Wasserdampf. Wendet man diese relativ komplizierte Formel auf die Versuchsbedingungen des SETH1.4 Versuchs an, so ergibt sich eine Absorptionskonstante von  $0,9 \text{ m}^{-1} < k < 1,1 \text{ m}^{-1}$ . Da die Simulationsergebnisse fast identisch sind mit denen der Simulation mit  $k=1 \text{ m}^{-1}$  werden sie im Folgenden nicht gesondert dargestellt.

Für die Stahlwände des Pandabehälters liegen keine Informationen bezüglich ihres Strahlungsverhaltens vor. Deshalb wurden die Wände als schwarze Strahler modelliert.

Bei den hier durchgeführten Simulationen mit dem Discrete Transfermodell muss die Zahl der Strahlen auf 32 bzw. 64 gesetzt werden, bei weniger Strahlen kommt es zu einer fehlerhaften Modellierung der Strahlung. Bei Verwendung der Standardeinstellung 8 Strahlen pro Element gab es Bereiche ohne Strahlungsintensität. Trotzdem ist die Strahlungsintensität von (kleinen) Fluktuationen geprägt (Abb. 4.2-30), die auf eine zu geringe Zahl von Strahlen pro Element und auf das gröbere Gitter zurückzuführen ist, das für das Strahlungsmodell verwendet wird. Eine weitere Erhöhung der Anzahl von Strahlen auf (256) ist an der benötigten Rechenzeit gescheitert. Als Grund für den starken Anstieg der Simulationszeit wurde identifiziert, dass bei CFX-13 durch das Strahlungsmodell eine Datei auf der Festplatte/Filesystem erzeugt wird, auf die fortlaufend mit IO-Operationen zugegriffen wird. Bei den Standardeinstellung (8 Strahlen, Gittervergrößerung) ist diese Datei klein, so dass dadurch kaum eine Verzögerung bewirkt wird. Bei Erhöhung der Genauigkeit durch Erhöhung der Anzahl von Strahlen, nimmt die Dateigröße aber stark zu. Schon bei 256 Strahlen hat sie bei der Simulation mit dem TSF-Modell zu einer deutlichen Verlangsamung der geführt.

Bei Verwendung des Strahlungsmodells entstehen im Temperaturfeld auch kleine Fluktuationen, bei der Heliumschichtung scheint es aber zu keinen stärkeren Schwankungen zu kommen (Abb. 4.2-29, Abb. 4.2-30). Die Schwankungen beim Temperaturfeld nehmen bei der Simulation mit dem SST-Turbulenzmodell ab. Nach 2000 s sind kaum noch solche Fluktuationen zu erkennen. Es sei betont, dass das Standard-Konvergenzkriterium von CFX (RMS-Residuum =  $1,0e-4$ ) bei allen hier diskutierten Simulationen erfüllt wurde, die Schwankungen also nicht auf fehlende Konvergenz zurückzuführen sind. Auf die Verwendung eines strengeren Konvergenzkriteriums (z. B. Max-Residuum =  $1,0e-4$ ) musste aufgrund des damit stark ansteigenden Rechenzeitbedarfs verzichtet werden.

#### **4.2.8.2 Simulationsergebnisse mit Wärmestrahlung**

Die Berücksichtigung der Wärmestrahlung hat einen signifikanten Einfluss auf die berechnete Temperaturverteilung und auch auf die Schichtungsauflösung (Abb. 4.2-27, Abb. 4.2-28), was bis dato nicht erwartet wurde.

Ohne Wärmestrahlung bleibt zu Beginn der Simulation im oberen Bereich die Dampfkonzentration für einen langen Zeitraum konstant ( $\sim 1800$  s bei A20). Bei  $k = 1 \text{ m}^{-1}$  bis  $80 \text{ m}^{-1}$  und beim Multi-Band-Modell setzt der Anstieg der Dampfkonzentration unmittelbar ein, wie dies

auch im Experiment beobachtet wurde. Beim Multi-Band-Modell wird dieser Effekt allerdings bei einigen Messpunkten überschätzt (z. B. B20) und mit  $k < 1 \text{ m}^{-1}$  unterschätzt. Ohne Berücksichtigung der Wärmestrahlung wird die Zeit, die zur Auflösung der Schichtung benötigt wird, deutlich überschätzt (z. B. Abb. 4.2-27, D1-A20, B-20). Mit zunehmendem Absorptionskoeffizienten erfolgt der Schichtungsabbau früher. Mit  $k = 1 \text{ m}^{-1}$ ,  $10 \text{ m}^{-1}$  oder  $80 \text{ m}^{-1}$  oder auch mit dem Multi-Band Ansatz wird der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung in guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt.

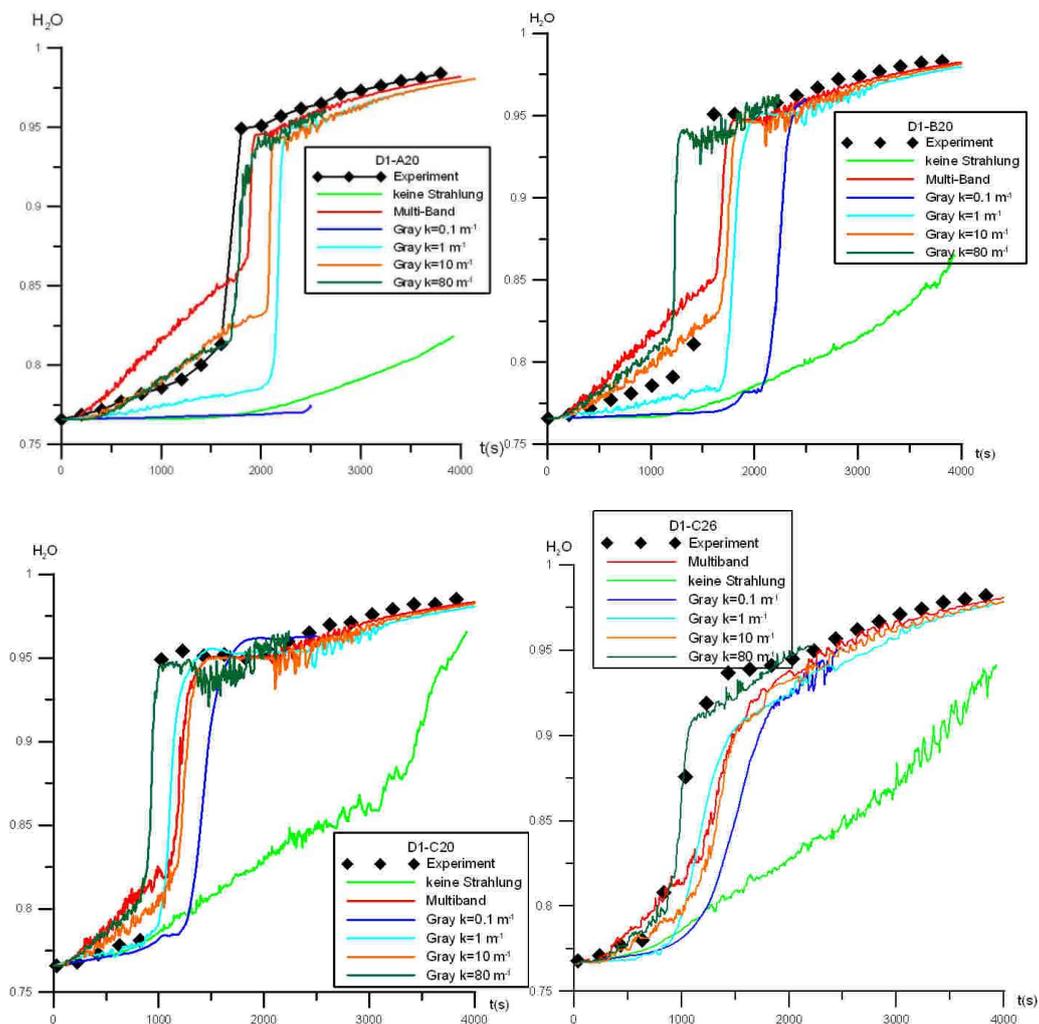
Ohne Simulation der Wärmestrahlung bleibt die Temperatur im oberen Bereich mit der He-Schichtung (Abb. 4.2-28, z. B. A20, B20, C20) bis zur Schichtungsauflösung nahezu konstant, während im Experiment unmittelbar nach Einspeisung des heißeren Dampfes eine geringe Temperaturerhöhung beginnt. Diese kann durch Wärmestrahlung erklärt werden, die über die Schichtungsgrenze wirksam ist. Bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung wird dieses Phänomen auch in der Simulation wiedergegeben bei einem mittleren Absorptionskoeffizienten von  $k = 1 \text{ m}^{-1}$  am besten, während bei einem höheren Absorptionskoeffizienten oder beim Multi-Band-Modell dieser Effekt etwas überschätzt wird.

Unterhalb der He-Schicht steigt in der Simulation ohne Strahlungsmodellierung die Temperatur zu stark an, während bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung die Temperatur unterhalb der Schicht in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet wird (z. B. bei den Messpunkten D20, G20 in Abb. 4.2-28). Bei dem höchsten mittleren Absorptionskoeffizienten ( $k=80 \text{ m}^{-1}$ ) wird die Temperatur allerdings etwas unterschätzt.

Zusammengefasst kann festgestellt werden, dass die Wärmestrahlung bei diesem Experiment einen signifikanten Einfluss hat. Ohne Berücksichtigung der Wärmestrahlung kann die Schichtungsauflösung nicht richtig berechnet werden. Es herrscht aber noch eine relativ große Unsicherheit bezüglich der Modellierung der Strahlung, insbesondere da bei Wasserdampf das Absorptionsverhalten stark von der Wellenlänge der Strahlung abhängt, und im Behälter ein ganzes Frequenzspektrum vorliegt. Die Modellierung über ein Multi-Band-Modell scheint dabei der Physik prinzipiell näher zu kommen, als die Annahme eines mittleren Absorptionskoeffizienten. Da die Parameter beim Multi-Band-Modell für eine Methan-Verbrennung optimiert wurden, kann vermutlich durch eine Anpassung der Modellparameter eine weitere Verbesserung erzielt werden. Auch wenn mit keinem Strahlungsmodell / Parametersatz alle Effekte exakt berechnet werden konnten, so konnte mit einer großen Bandbreite von mittleren Absorptionskoeffizienten  $k = 1 \text{ m}^{-1}$  bis  $80 \text{ m}^{-1}$  und mit dem Multi-Band-Modell sowohl der Temperaturverlauf als auch die Schichtungsauflösung zufriedenstellend

simuliert werden. Bei Berücksichtigung der Strahlung konnte unabhängig vom verwendeten Modell / Parameter eine Verbesserung erzielt werden.

Offen bleibt allerdings die Frage, ob die kleinen Schwankungen im Temperaturfeld bei Verwendung des Strahlungsmodells einen merklichen Einfluss auf die Schichtungsauflösung haben (siehe Abschnitt 4.2.8.1). Dazu müsste eine Simulationen mit einer verbesserten Strahlungsmodellierung (mehr Strahlen, keine Gittervergrößerung und/oder Monte-Carlo-Simulation der Strahlung) durchgeführt werden.



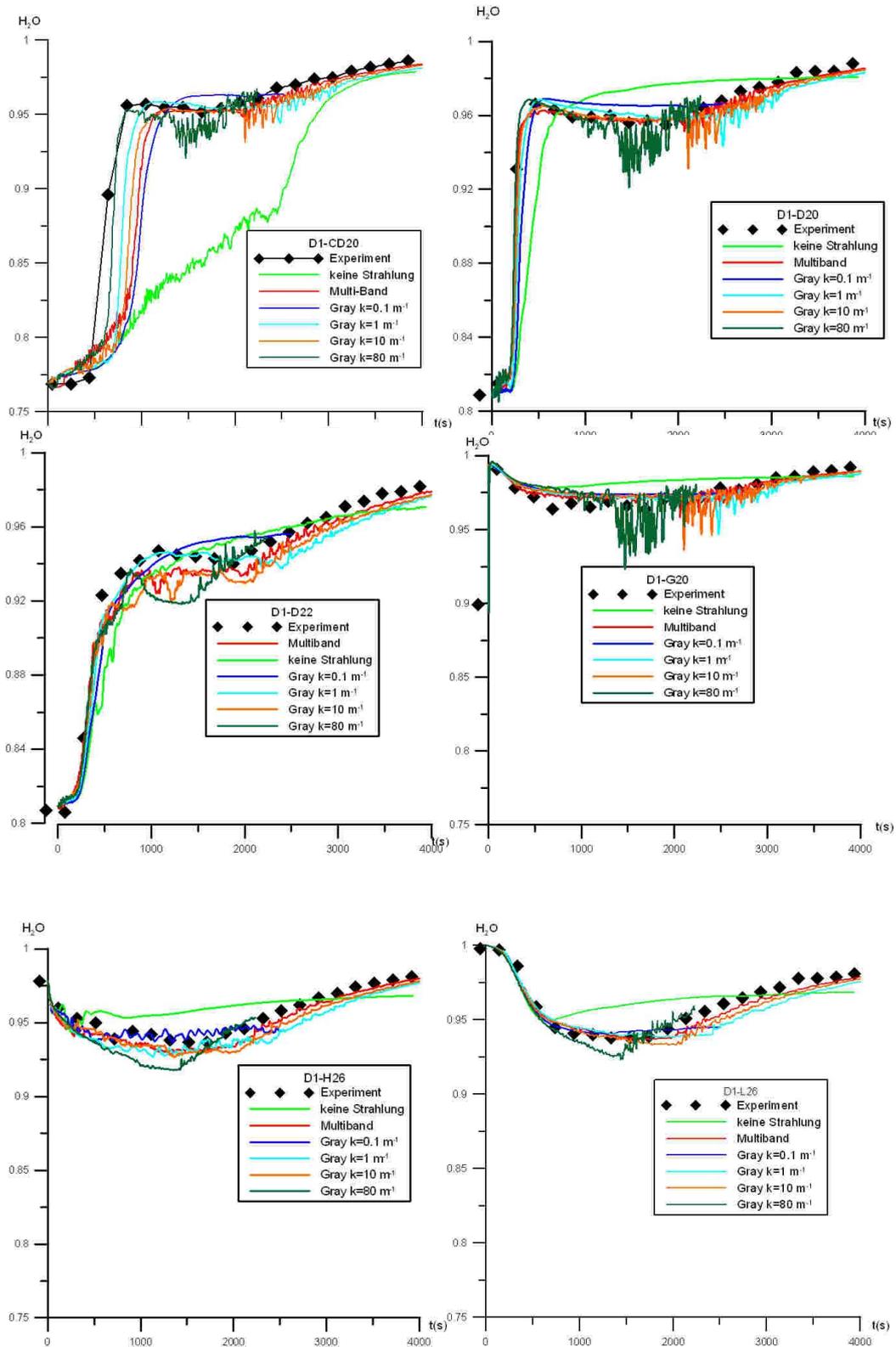
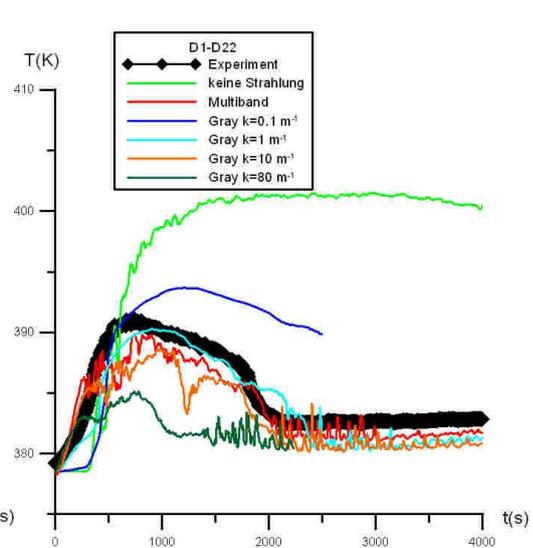
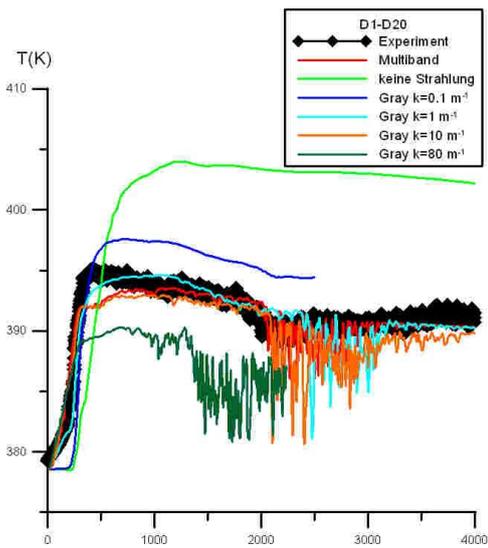
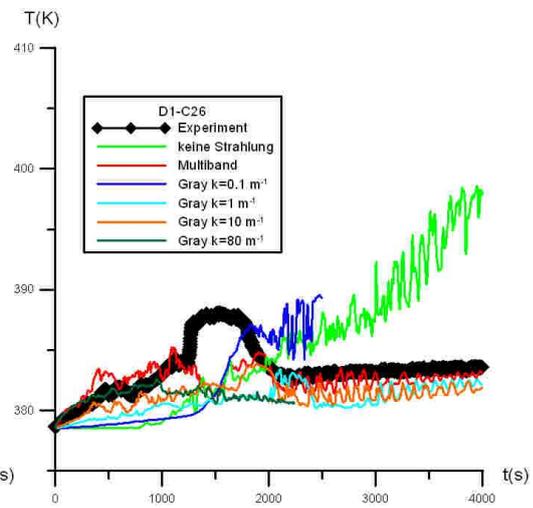
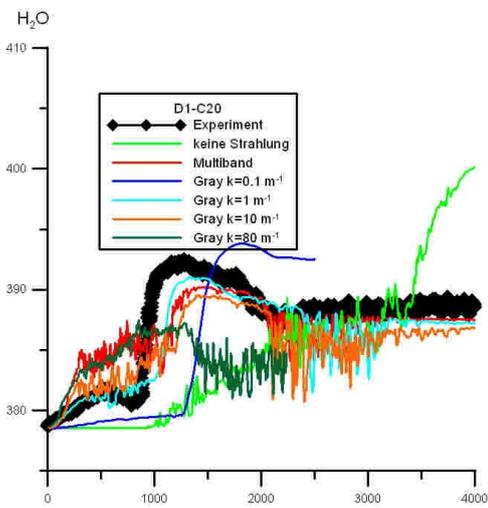
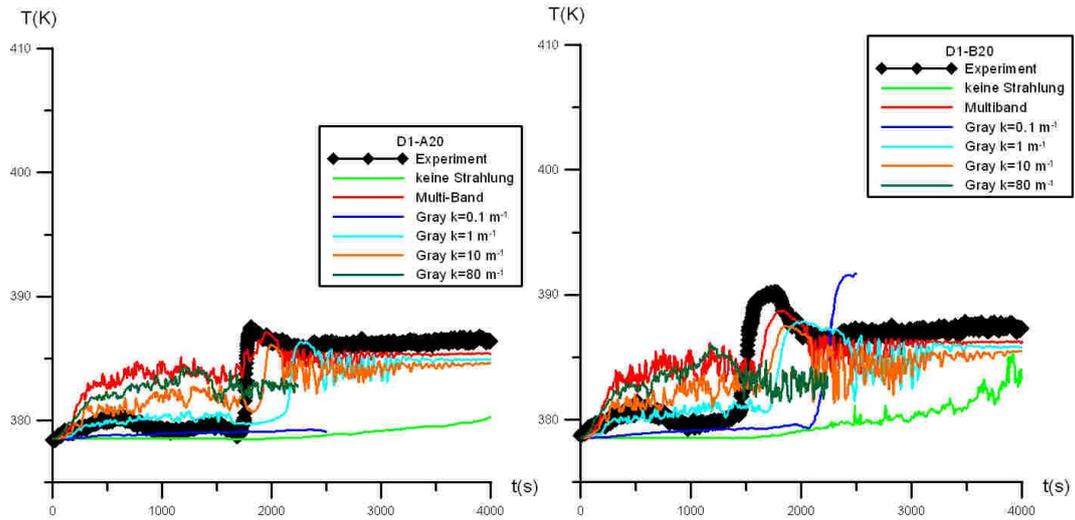


Abb. 4.2-27 Dampfkonzentrationen an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Modellierung der Wärmestrahlung



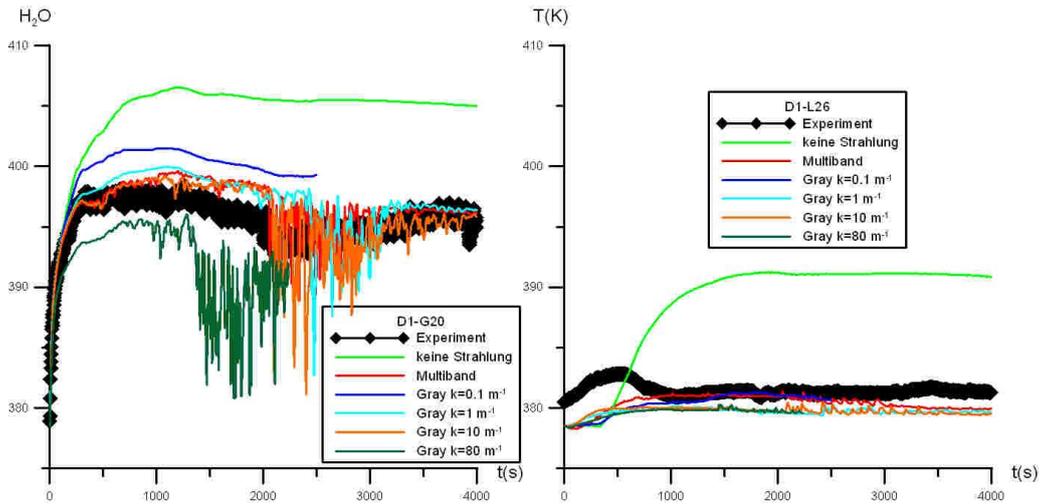


Abb. 4.2-28 Temperatur an verschiedenen Messstellen bei unterschiedlicher Modellierung der Wärmestrahlung

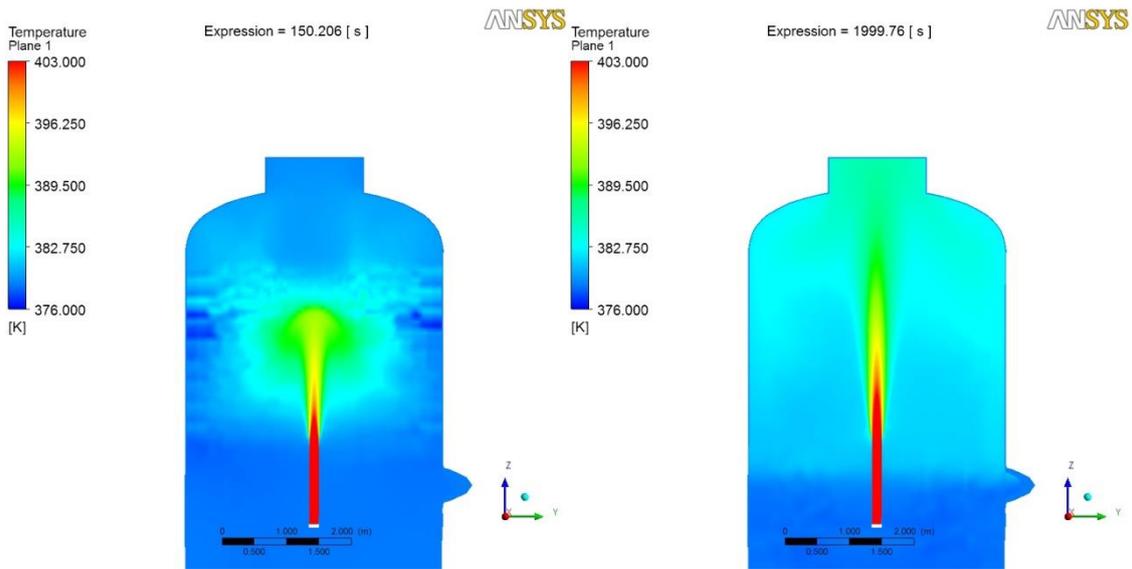


Abb. 4.2-29 Temperatur nach 150 s und 2000 s bei Simulation mit dem SST Turbulenzmodell und dem Multiband-Discrete-Transfer Strahlungsmodell

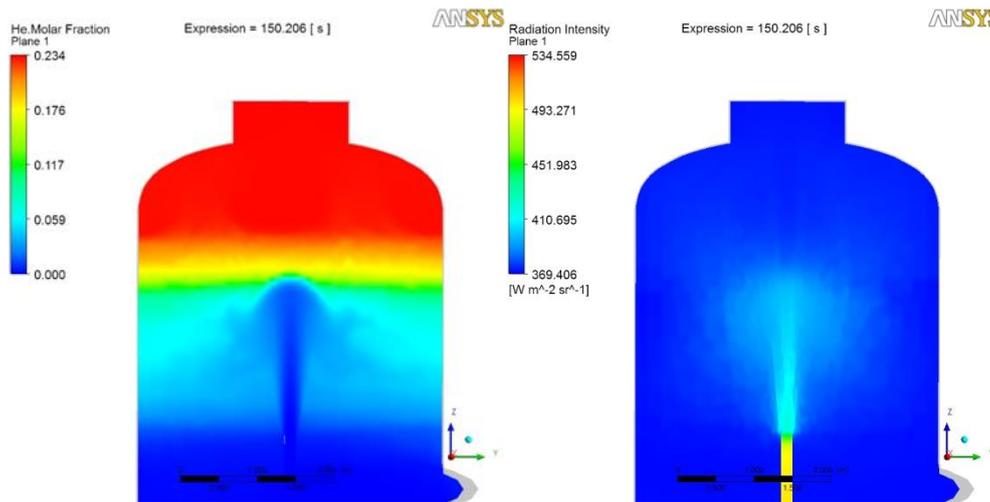


Abb. 4.2-30 He-Konzentration und Strahlungsintensität nach 150 s bei Simulation mit dem SST Turbulenzmodell und dem Multiband-Discrete-Transfer Strahlungsmodell

#### 4.2.9 Simulation mit dem TSF Turbulenzmodell und dem Multiband-Strahlungsmodell

Im Folgenden wird eine Simulation diskutiert bei der das TSF-Turbulenzmodell zusammen mit dem Discrete-Transfer-Strahlungsmodell verwendet wird. Zur Beschreibung der Absorption von Wasserdampf wird der in Abschnitt 4.2.8.2 beschriebene Multiband-Ansatz genutzt. Die Zahl der Strahlen im Discrete-Transfer-Modell wurde wieder auf 64 erhöht. Bei Verwendung des voreingestellten Werts von 8 gibt es in der Simulation Bereiche mit einer unphysikalisch kleinen Strahlungsintensität. Selbst bei diesen erhöhten Werten ist das Feld der Strahlungsintensität etwas unregelmäßig und es sind schwach gewisse „Vorzugsrichtungen“ zu erkennen (Abb. 4.2-35). Diese Unregelmäßigkeiten sind vermutlich auch der Grund warum das Temperaturfeld bei Verwendung dieses Strahlungsmodells ebenfalls Fluktuationen aufweist. Um die Genauigkeit des Modells zu erhöhen wurden auch Rechnungen gestartet, bei denen die Zahl der Strahlen weiter erhöht wurde (auf 256). In diesem Fall wurde die Rechenzeit stark erhöht. Grund ist vermutlich wieder, dass in CFX-13 das Strahlungsmodell während jedes Zeitschritts Daten (auf die „Festplatte“) ausschreibt. Diese Dateien werden mit zunehmender Anzahl von Strahl deutlich größer. Bei Verwendung von mehr als 64 Strahlen wurde dieser permanente IO zu einem limitierenden Faktor für die Rechengeschwindigkeit. Monto-Carlo-Simulationen der Strahlung konnten auf Grund der hohen Zahl der benötigten Partikel und des daraus resultierenden Rechenaufwands nicht erfolgreich durchgeführt werden.

Die Instabilitäten der Ergebnisse mit dem TSF-Modell sind bei Verwendung des Strahlungsmodells noch deutlich stärker ausgeprägt. Bei Verwendung des Strahlungsmodells fängt der Dampfjet nach ca. 250 s an seitlich zu schwanken. Dies führt dazu, dass nach ungefähr 350 s die gesamte Heliumleichtgasschicht im Behälter hin und her schwankt. Dieses Verhalten äußert sich in starken Oszillationen an den Monitorpunkten. Bei den experimentellen Daten (sowohl Konzentrationsmessungen als auch Temperaturmessungen) lassen sich solch starke Oszillationen nicht beobachten. Aus der Tatsache, dass auch ohne Strahlungsmodell bereits Schwankungen aufgetreten sind und dass bei Verwendung des SST-Modells mit Wärmestrahlung (bei ähnlichen Ungenauigkeiten im Strahlungsfeld) kein instabiles Verhalten des Jets aufgetreten ist, kann geschlossen werden, dass das TSF-Modell eher zu solch instabilen Lösungen (bei URANS-Simulationen) führt, die durch das Strahlungsmodell verstärkt werden

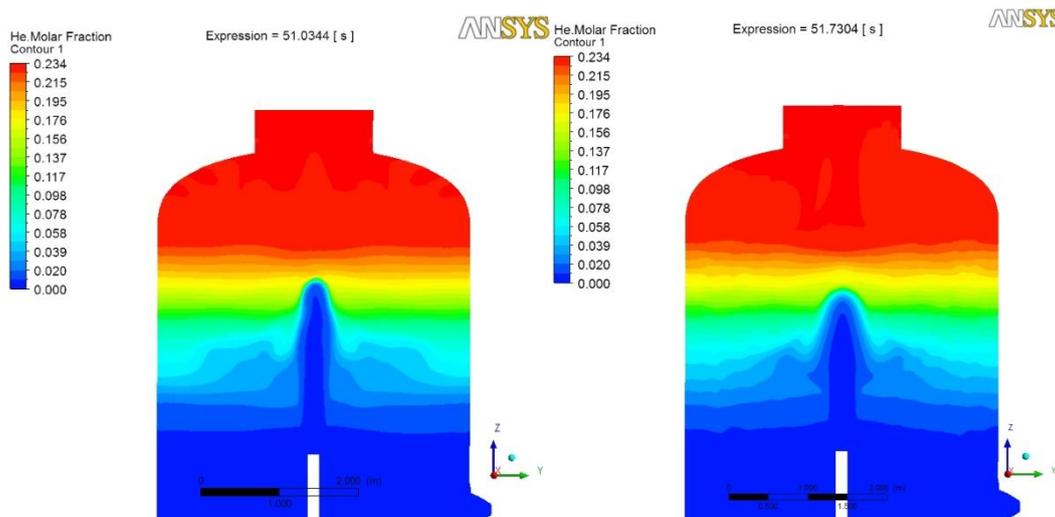
Vergleicht man die Simulation mit Berücksichtigung der Wärmestrahlung mit der Simulation ohne Strahlungsmodell, so sieht man, dass der Dampfjet bei Berücksichtigung der Wärmestrahlung etwas breiter ist und weniger tief in die Heliumschicht eindringt. (Abb. 4.2-28, Abb. 4.2-29). Vergleicht man die Dampfkonzentrationen an den Messstellen beim TSF-Modell, so sieht man, dass bei Verwendung des Strahlungsmodells die Schichtungsauflösung in der Behältermitte später erfolgt als ohne Strahlungsmodell (Abb. 4.2-36). Dies korrespondiert mit der geringeren Eindringtiefe des Dampfjets. Vergleicht man die zeitlich gemittelte Dampfkonzentration beim TSF-Modell und beim SST-Modell (beide mit Strahlung), so sind die Abweichungen zwischen den beiden Simulationsergebnissen deutlich geringer, als beim Vergleich ohne Strahlung. Beim TSF-Modell ist der Anstieg der Dampfkonzentration bevor der Dampfjet den Messpunkt erreicht stärker als beim SST-Modell (was vermutlich auf die starken Schwankungen der Heliumschicht zurückzuführen ist). Am Messpunkt D20 erfolgt beim TSF-Modell nach ca. 500 s ein erneuter Anstieg der Helium-Konzentration, die auf die Schwankungen der Helium-Schicht zurückzuführen ist und so im Experiment nicht beobachtet wurde. Der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung durch den Strahl ist aber bei beiden Turbulenzmodellen ähnlich. Insgesamt sind die Simulationsergebnisse bei Berücksichtigung der Strahlung beim SST-Modell näher an den experimentellen Werten. Die beim TSF-Modell berechnete starke Schwankung der Heliumschicht entspricht in dieser Form nicht den experimentellen Beobachtungen.

Betrachtet man die Temperaturverläufe, so fällt auf, dass bei Simulation mit dem TSF-Modell ohne Strahlungsmodellierung der Temperaturverlauf stark vom Experiment abweicht (Abb. 4.2-37). In der Behältermitte wird an den Messstellen D20 und C20 ein viel zu starker Temperaturanstieg berechnet. Der kommt dadurch zustande, dass der heiße Dampfjet in die küh-

lere Heliumschicht eindringt. Auch unterhalb der Heliumschicht (L26) erfolgt ein zu starker Temperaturanstieg bei dieser Berechnung. Bei der Simulation mit dem TSF-Modell mit Berücksichtigung der Wärmestrahlung wird der Temperaturverlauf dagegen wie auch schon beim SST-Modell deutlich besser getroffen. Dies ist ein Hinweis darauf, dass auch bei schnellerer Schichtungsauflösung das Temperaturfeld ohne Berücksichtigung von Wärmestrahlung nicht richtig berechnet werden kann.

Die Instabilitäten bei den Simulationen mit dem TSF-Modell sind auch ein Grund für den sehr viel höheren Rechenzeitbedarf bei diesen Simulationen, denn der Zeitschritt musste wegen der schnellen Schwankungen bei den TSF-Simulationen kleiner als 0,05 s gewählt werden, um eine konvergente Lösung zu erhalten. Aufgrund des viel kleineren Zeitschritts (0,05 s gegenüber 0,5 s - 1 s beim SST Modells) und da die Anzahl der zu lösenden Gleichungen entsprechend größer war, benötigt die Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell sehr viel länger, als eine Simulation mit einem 2-Gleichungs-Turbulenzmodell. In diesem Fall lag der Unterschied in der Größenordnung von einem Faktor 50. Die Berechnung der 1000 s Problemzeit hat mehr als 2 Monate auf 4 bis 8 CPUs gedauert. Dies ist auch der Grund warum mit diesem Turbulenzmodell keine weiteren Parametervariationen durchgeführt werden konnten.

Positiv ist anzumerken ist, dass sich das TSF-Modell numerisch stabiler verhalten hat, als das BSL-Reynolds-Stress-Modell. Beim BSL-Modell traten wiederholt Programmabbrüche auf (omega-Gleichung konvergierte nicht). Diese konnten nur vermieden werden, wenn die Gitterqualität sehr hoch war. Aber auch beim TSF-Modell mussten zu Beginn der Simulation (ersten zwei Sekunden) mit dem SST-Modell simuliert werden, ansonsten brach die Simulation wegen numerischer Fehler ab.



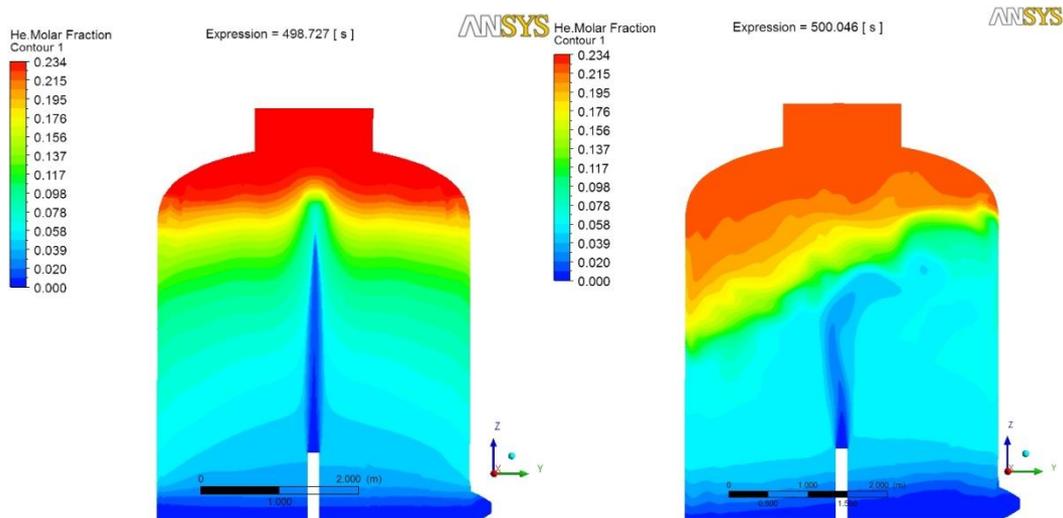


Abb. 4.2-31 Heliumkonzentration bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell

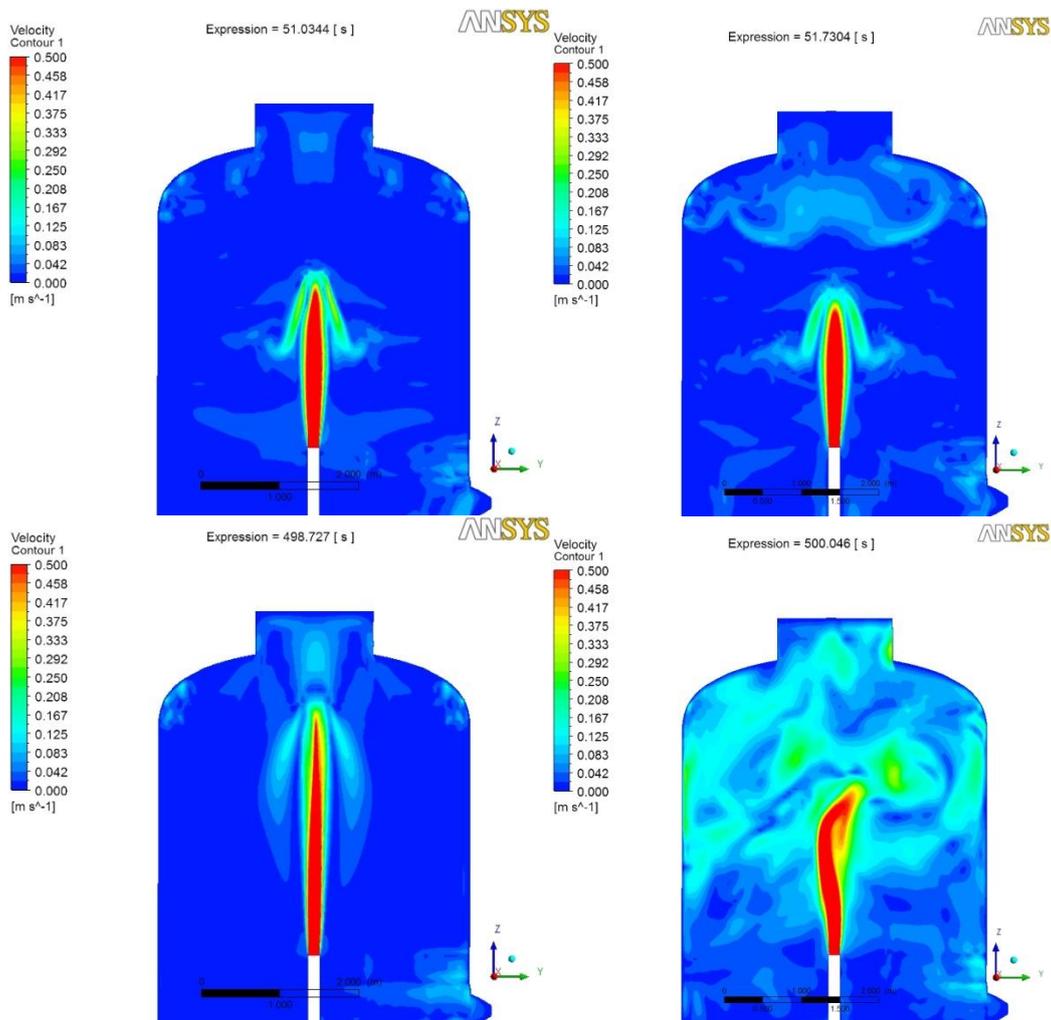


Abb. 4.2-32 Geschwindigkeit bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell

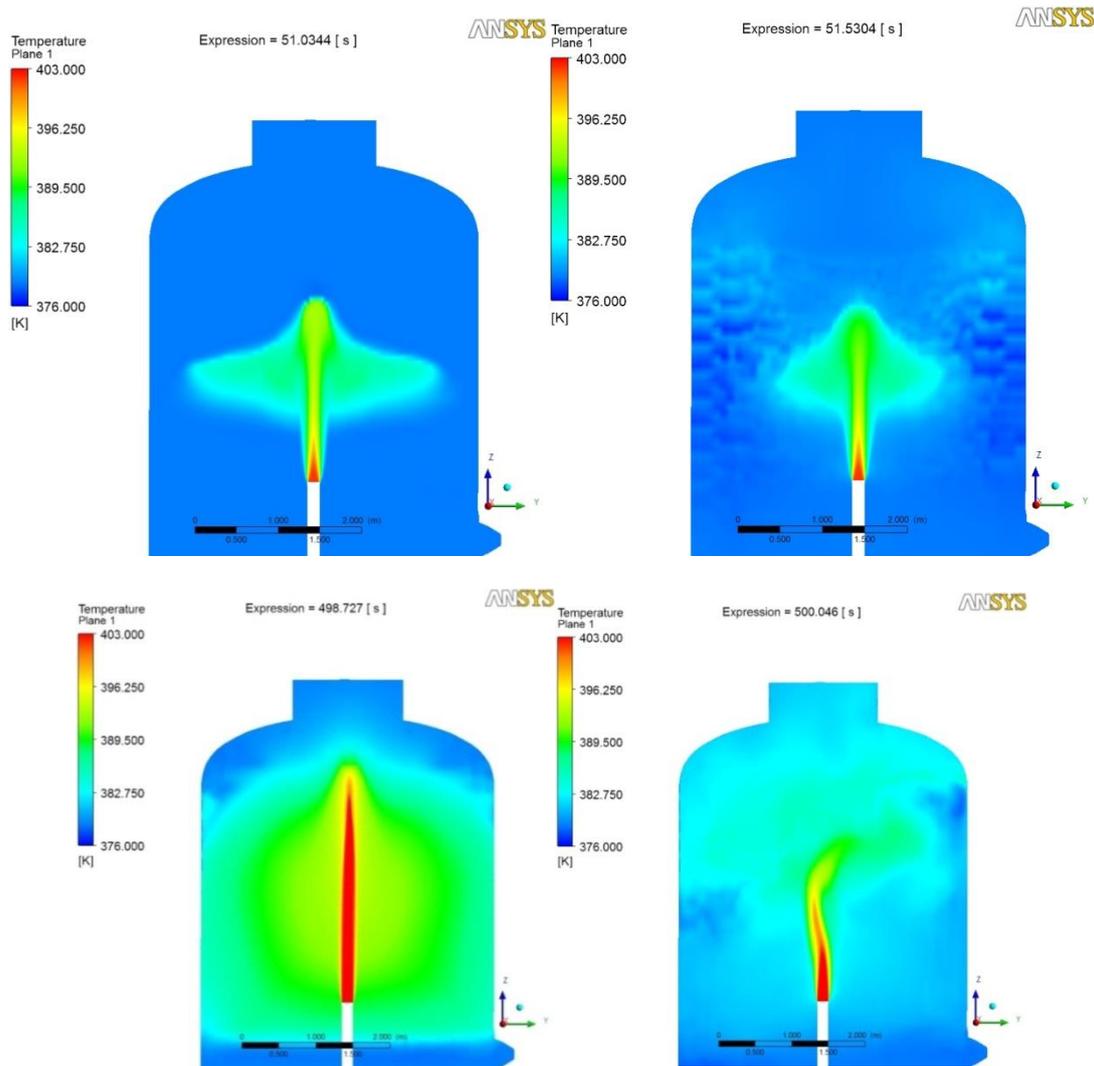


Abb. 4.2-33 Temperatur bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell

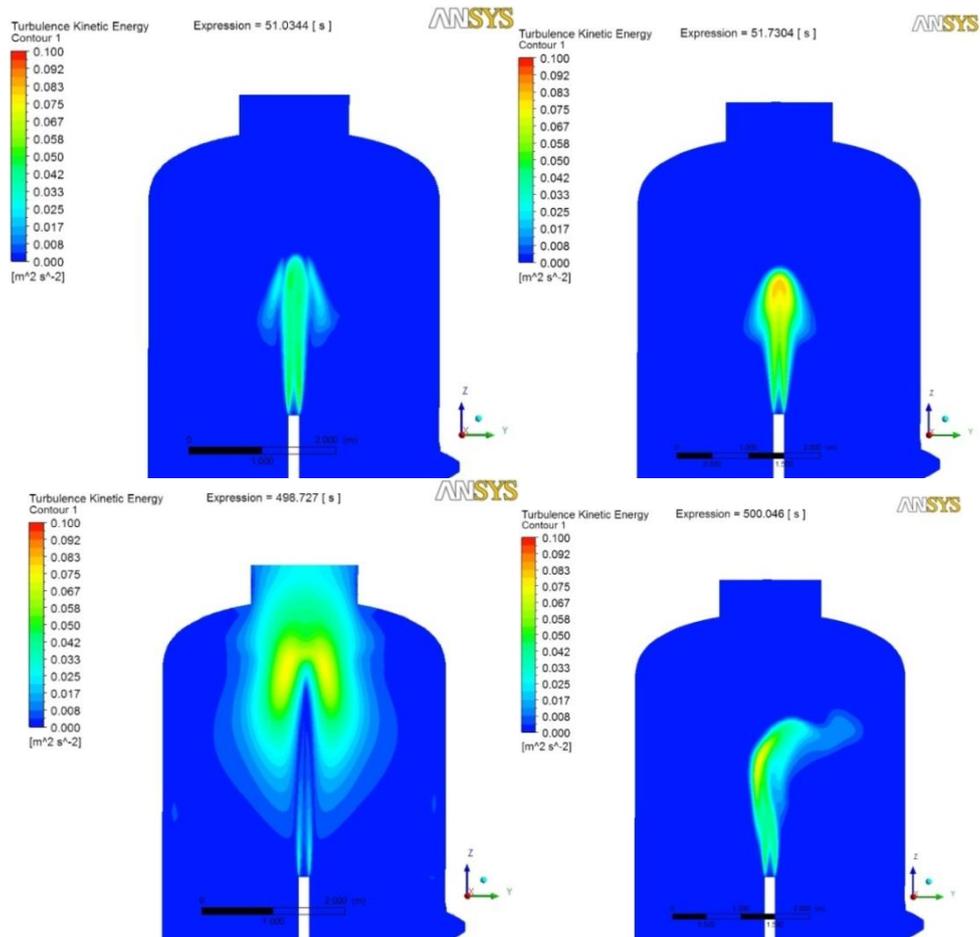


Abb. 4.2-34 Turbulente kinetische Energie bei der Simulation mit dem TSF-Turbulenzmodell. Links: keine Wärmestrahlung; rechts: Discret-Transfer-Modell

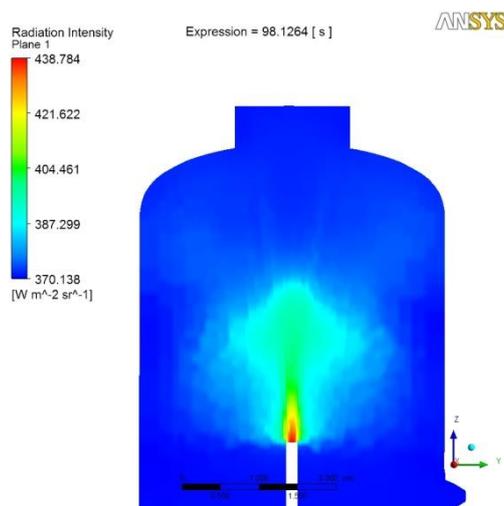
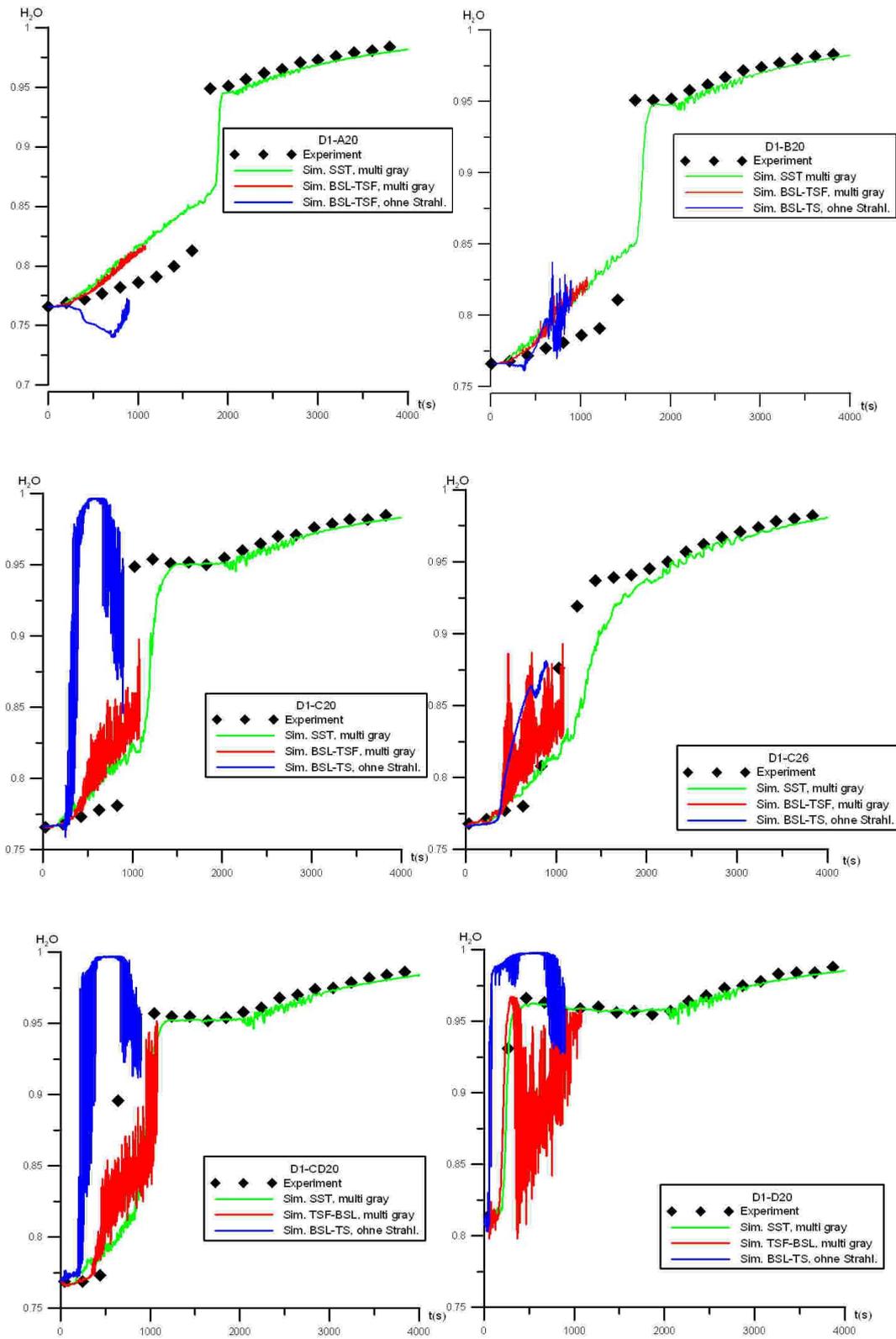


Abb. 4.2-35 Strahlungsintensität nach 98 s bei Simulation mit dem TSF-Modell



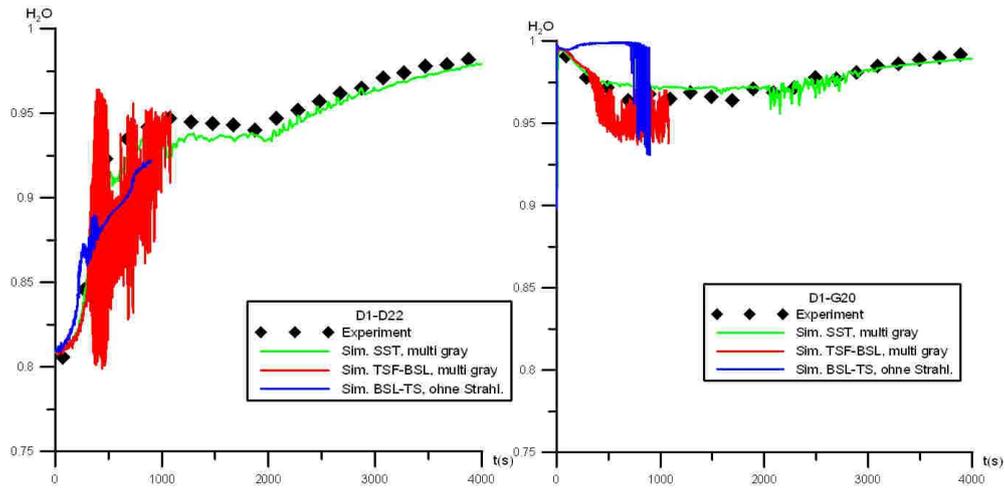
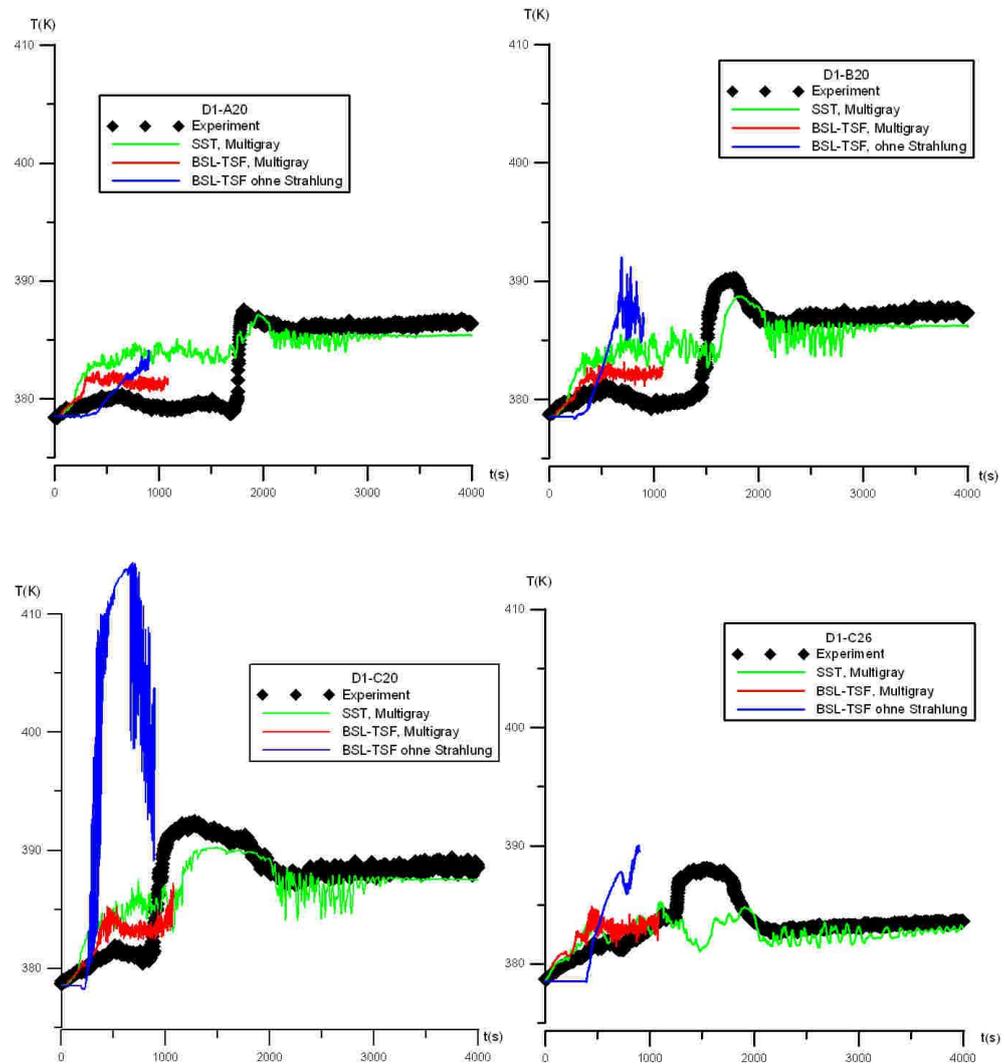


Abb. 4.2-36 Dampfkonzentration an verschiedenen Messstellen



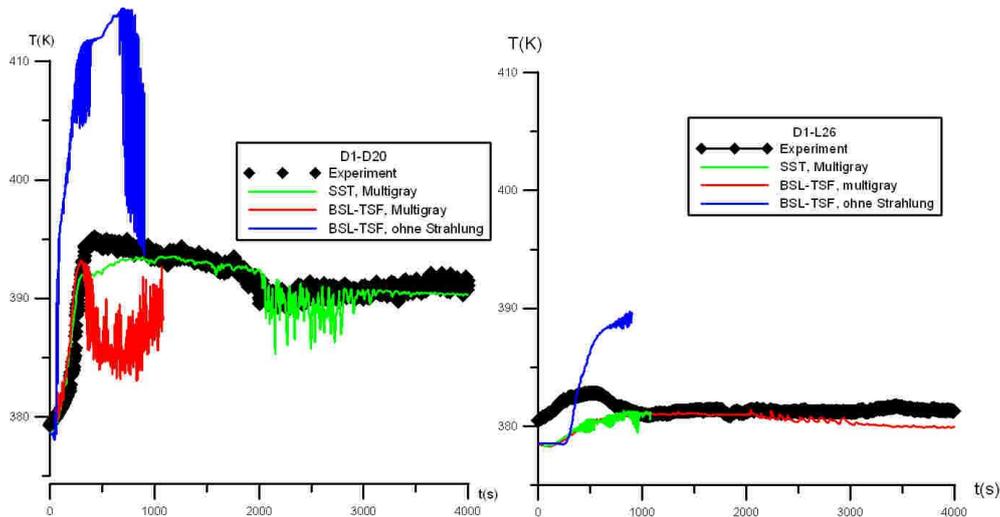


Abb. 4.2-37 Temperatur an verschiedenen Messstellen

#### 4.2.10 Zusammenfassung

Der Experiment ST1-4 wurde mit CFX nachgerechnet. Dabei wurden verschiedene Turbulenzmodelle getestet. Vernachlässigt man die Wärmestrahlung, so erfolgt die Schichtungsauflösung beim SST,  $k-\epsilon$ , und BSL Modell deutlich zu langsam. Aufgrund der Versuchsbedingungen (über 100 °C, hoher Dampfgehalt) wurde der Einfluss der Wärmestrahlung untersucht. Dazu wurde das Discrete-Transfer-Modell verwendet. Allerdings gibt es noch einige Unsicherheiten hinsichtlich der Modellierung. Insbesondere die Wahl des Absorptionskoeffizienten für Dampf ist aufgrund der Wellenlängenabhängigkeit schwierig. Deshalb wurde eine Parameterstudie mit unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten durchgeführt, bei der das SST-Turbulenzmodell zum Einsatz kam. Bei Wahl des Absorptionskoeffizienten im Bereich von  $1 \text{ m}^{-1}$  bis  $80 \text{ m}^{-1}$  bzw. mit dem Multiband-Ansatz konnte eine deutliche Verbesserung der Simulationsergebnisse erzielt werden. Der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung erfolgt in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment.

Beim neuen TSF-Modell ohne Strahlungsmodellierung erfolgte die Schichtungsauflösung in der Behältermitte schneller als im Experiment, da der Dampfjet tief in die Heliumschicht eindringt. An den seitlich gelegenen Messstellen erfolgt der Anstieg der Dampfkonzentration später. Hier wird eine relativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Berücksichtigt man bei diesem Turbulenzmodell die Strahlung ebenfalls, so erfolgt bei diesem Turbulenzmodell die Schichtungsauflösung ebenfalls später. Allerdings kommt es in diesem Fall zu einer starken seitlichen Schwankung des Dampfstrahls und nach ca. 350 s beginnt die gesamte Heliumschicht stark zu schwingen, was in dieser Form nicht dem Experiment entspricht.

Die starken Instabilitäten beim TSF-Modell - die beim Berücksichtigung der Strahlung noch ausgeprägter waren - sind neben der erhöhten Anzahl von Erhaltungsgleichungen der Grund, warum bei diesem Modell Turbulenzmodell der Rechenzeitbedarf drastisch höher war (ca. Faktor 50), so dass die Simulationen nur die ersten 1000 s Versuchszeit abdecken.

Wenn man die Ergebnisse der Versuchsnachrechnung zusammenfasst, so ist zu folgern, dass die Simulation mit dem SST-Turbulenzmodell und einer Absorptionskonstante von  $k \sim 1 \text{ m}^{-1} - 10 \text{ m}^{-1}$  für Dampf bzw. mit dem Multiband-Ansatz die beste Übereinstimmung mit dem Experiment gezeigt hat.

### **4.3 Nachrechnung des SETH2-Versuches ST2-1**

#### **4.3.1 Einleitung**

Nach der Beschreibung des Experiments ST1-4 wird im Folgenden die Nachrechnung des PANDA-Versuchs SETH ST2-1 erläutert. Dieses Experiment hat im Gegensatz zum Experiment ST1-4 eine horizontale Dampfeinspeisung. Bei der Nachrechnung wurde auch der Einfluss des Turbulenzmodells (SST, BSF-Reynolds-Stress) untersucht.

#### **4.3.2 Geometrie und Randbedingung**

Die genaue Konfiguration für den Versuch ST2-1 aus der SETH-Versuchsreihe ist in Abb. 4.3-1 dargestellt. Bei diesem Versuch wurde zunächst eine Heliumschichtung in Behälter 1 erzeugt, die dann in diesem Versuch durch eine horizontale Dampfeinspeisung aufgelöst wurde. Als Startbedingungen lag eine Heliumkonzentration (in der Schicht) von etwa 25 % Helium vor, ansonsten waren beide Behälter vollständig mit Dampf gefüllt. In den Behältern lag eine mittlere Temperatur von 108 °C, sowie einen Druck von 1,3 bar vor. Das Auslassventil in Behälter 2 wurde so geregelt, dass der Druck konstant bei diesen 1,3 bar gehalten wurde. Tab. 4.3-1 enthält die in der Simulation verwendeten Start- und Randbedingungen, sowie die verwendeten numerischen Parameter. In Tab. 4.3-2 sind die Parametervariationen dargestellt, die im Rahmen dieses Arbeitspunktes durchgeführt wurden.

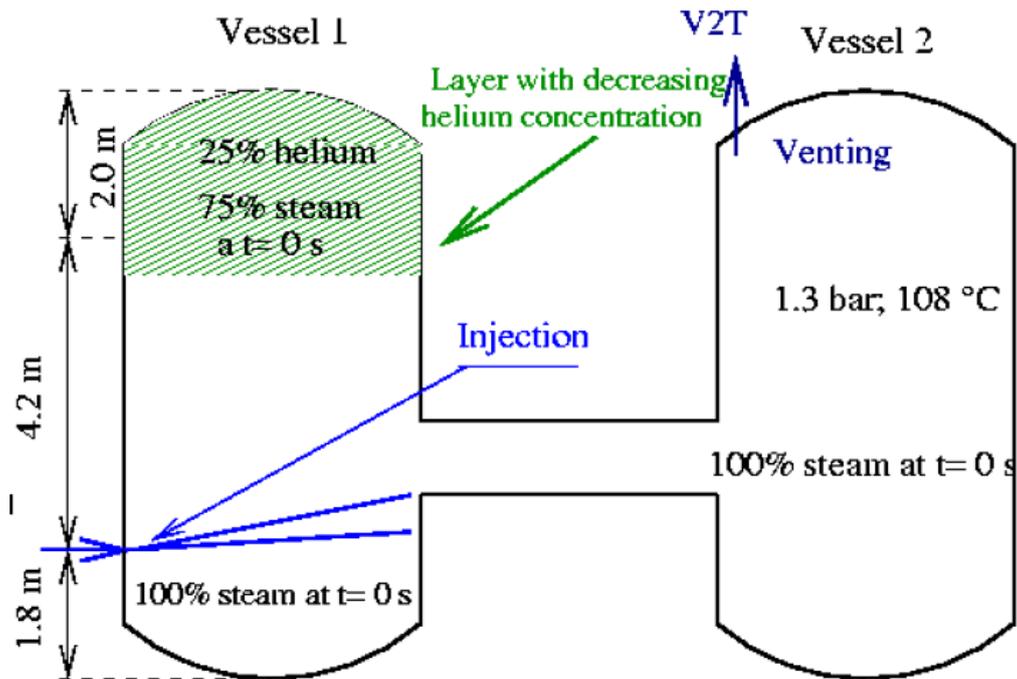


Abb. 4.3-1 Versuchsführung beim SETH-Versuch ST2-1 (Bild: /ZBO10/)

Tab. 4.3-1 Verwendete Start- und Randbedingungen

Druck	1,3 bar
Einspeisemenge	40,1 g/s
Einspeisetemperatur	150,3 °C
Wärmetransfer Außenwand	0,43 W /m <sup>2</sup> K

Tab. 4.3-2 Infobox SETH-2 Test 2.1

Experiment	SETH-2 Test ST2-1 (PANDA-Anlage)
Phänomene	Schichtungsbildung/-auflösung
Elementzahl	294 280
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 20,9° (OK) Max. Expansion Factor: 569 (!) Max. Aspect Ratio: 38 (OK)
Materialien	He Ideal Gas, Water Ideal Gas
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Helium: 1,0 [cm <sup>2</sup> /s]
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray Anzahl Strahlen: 8 Absorpt. Dampf: 0,1 [m <sup>-1</sup> ] Absorpt. Helium: 0,0 [m <sup>-1</sup> ]
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	12.0

Tab. 4.3-3 Durchgeführte Parametervariationen

Rechnung	Elementzahl	Strahlung	Absorp. Dampf [m <sup>-1</sup> ]	Absorp. Helium [m <sup>-1</sup> ]	Turbulenz
CFX 15_004	294.280	Gray	1 = CFX-Standard (unphysikalisch!)		SST
CFX 15_005	294.280	Gray	1	0	SST
CFX 15_007	294.280	Gray	50	0	SST
CFX 15_010	294.280	Gray	13	0	SST
CFX 15_012	294.280	Gray	0,8	0	SST
CFX 15_013	294.280	Gray	0,1	0	SST
CFX 15_016	294.280	Gray	0	0	SST
CFX 16_001	668.954	Gray	1 = CFX-Standard (unphysikalisch!)		SST
CFX 19_002	294.280	Gray	0,1	0	TSF

### 4.3.3 Vergleich zwischen Simulation und Experiment

Von allen durchgeführten Parametervariationen (siehe Tab. 4.3-3) zeigt die Rechnung CFX 15\_013 die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Im Folgenden werden die Ergebnisse dieser CFX-Simulation mit den experimentellen Daten in gemeinsamen Diagrammen verglichen. Zunächst werden die Heliumkonzentrationen betrachtet, weiter unten findet sich ein Vergleich der Temperaturverläufe.

#### 4.3.3.1 Zeitlicher Verlauf der Heliumkonzentration

Der zeitliche Verlauf der Heliumkonzentration ist für unterschiedliche Messpositionen in den Abb. 4.3-2 bis Abb. 4.3-8 dargestellt. Die dargestellten Messpositionen befinden sich alle im Behälter 1 oder im Verbindungsrohr. An allen diesen Positionen findet sich eine gute bis sehr gute Übereinstimmung zwischen dem simulierten Verlauf und dem experimentellen Verlauf der Heliumkonzentration. Die Auflösung der Heliumschicht und die Verteilung im Behälter können also sowohl qualitativ als auch quantitativ gut durch die Simulation wiedergegeben werden.

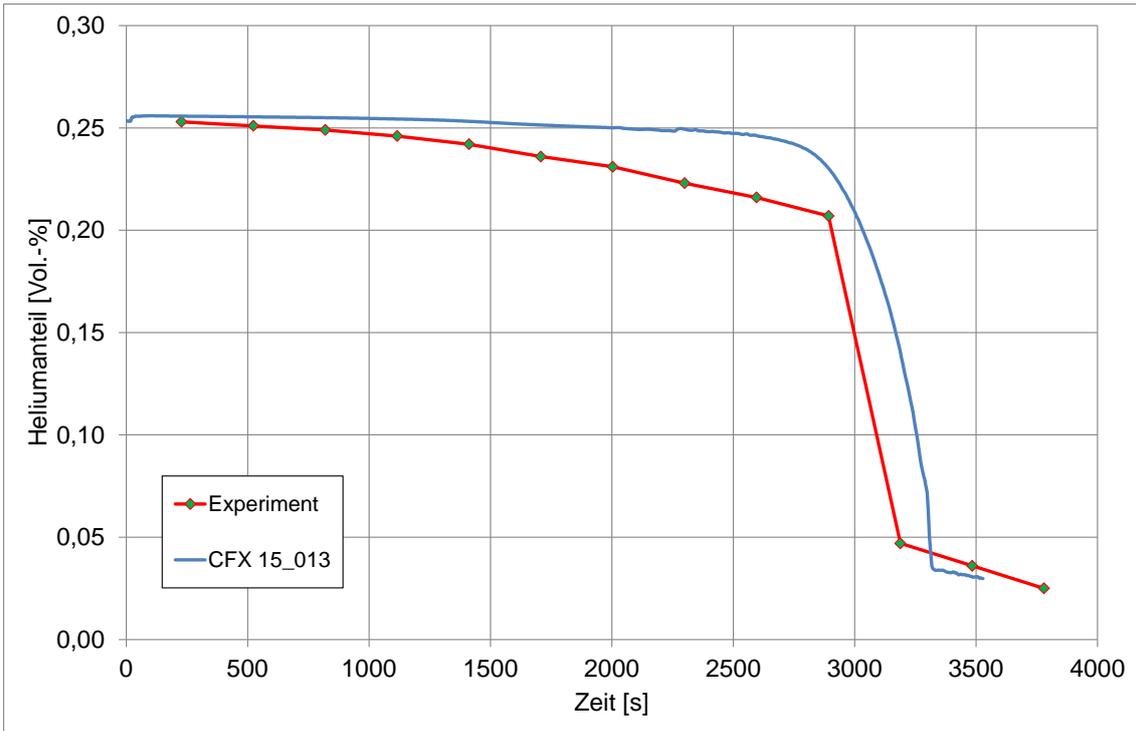


Abb. 4.3-2 Verlauf der Heliumkonzentration in 8,03 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1A 20)

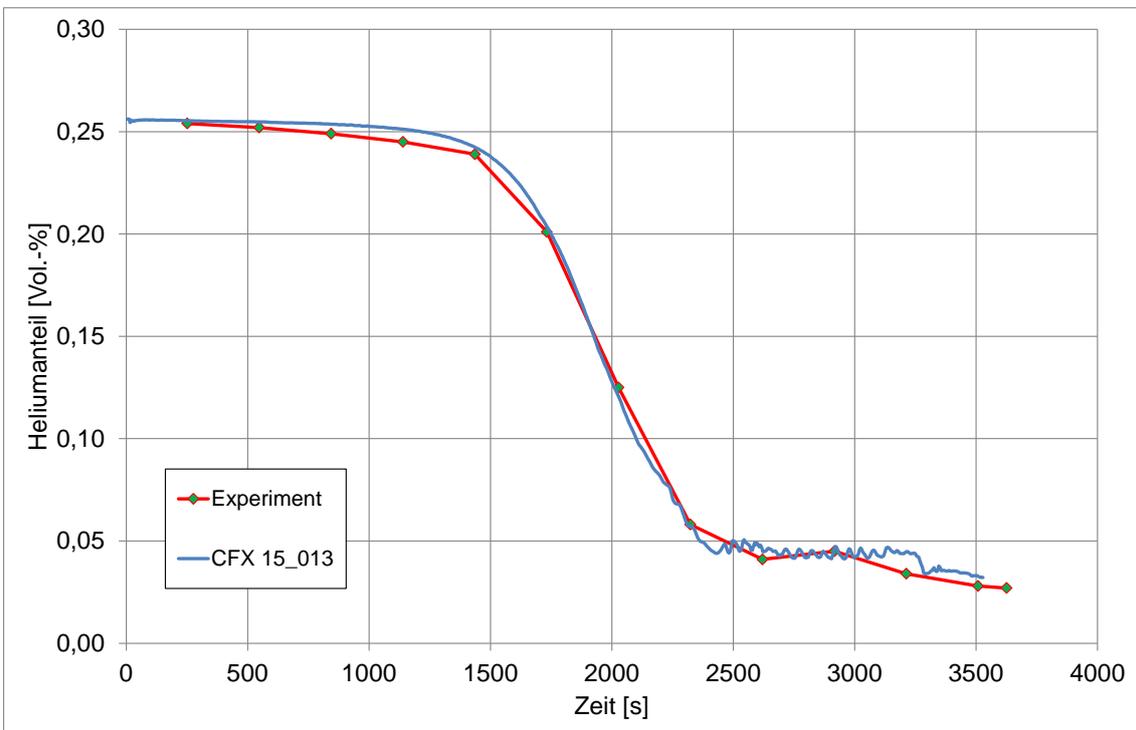


Abb. 4.3-3 Verlauf der Heliumkonzentration in 6,93 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1C 20)

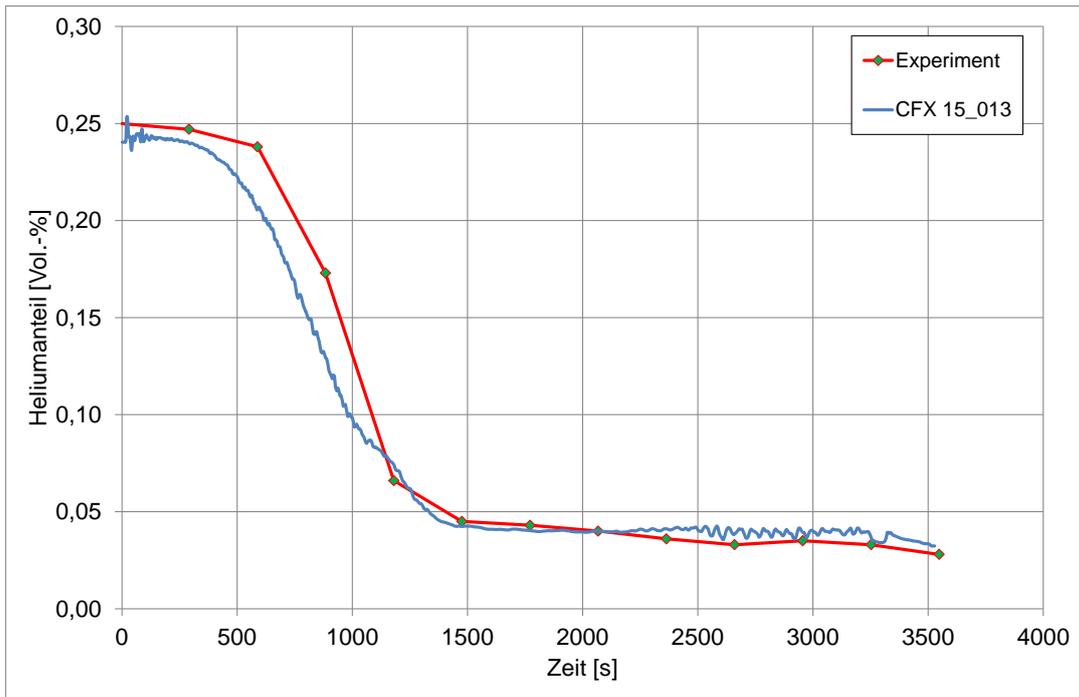


Abb. 4.3-4 Verlauf der Heliumkonzentration in 6,28 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1D 20)

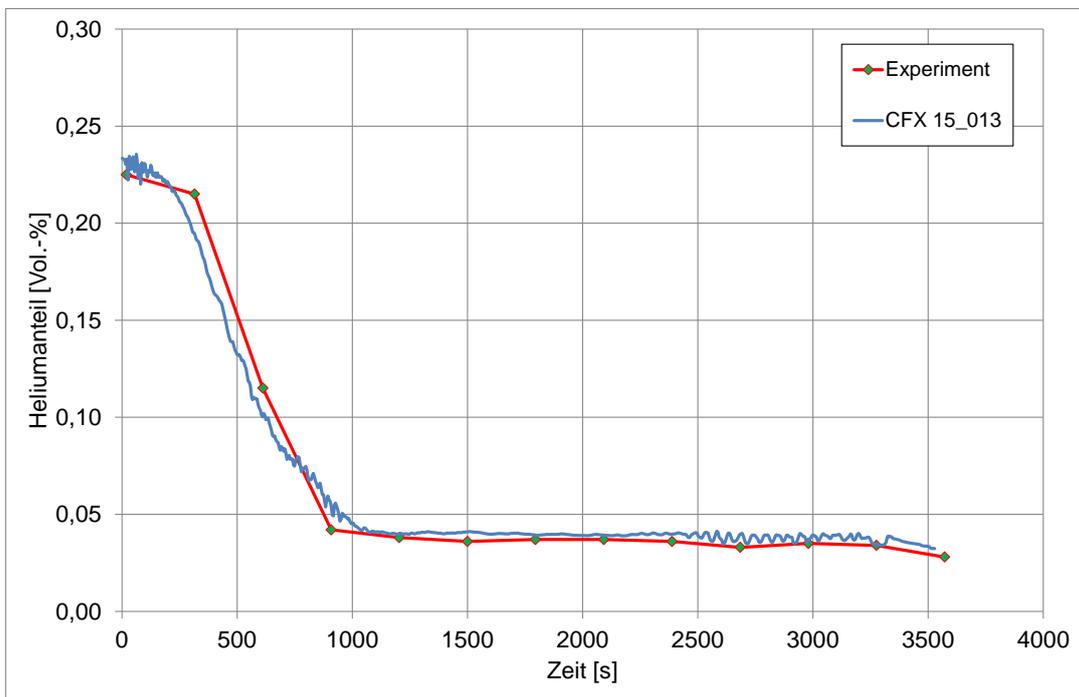


Abb. 4.3-5 Verlauf der Heliumkonzentration in 6,00 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1F 20)

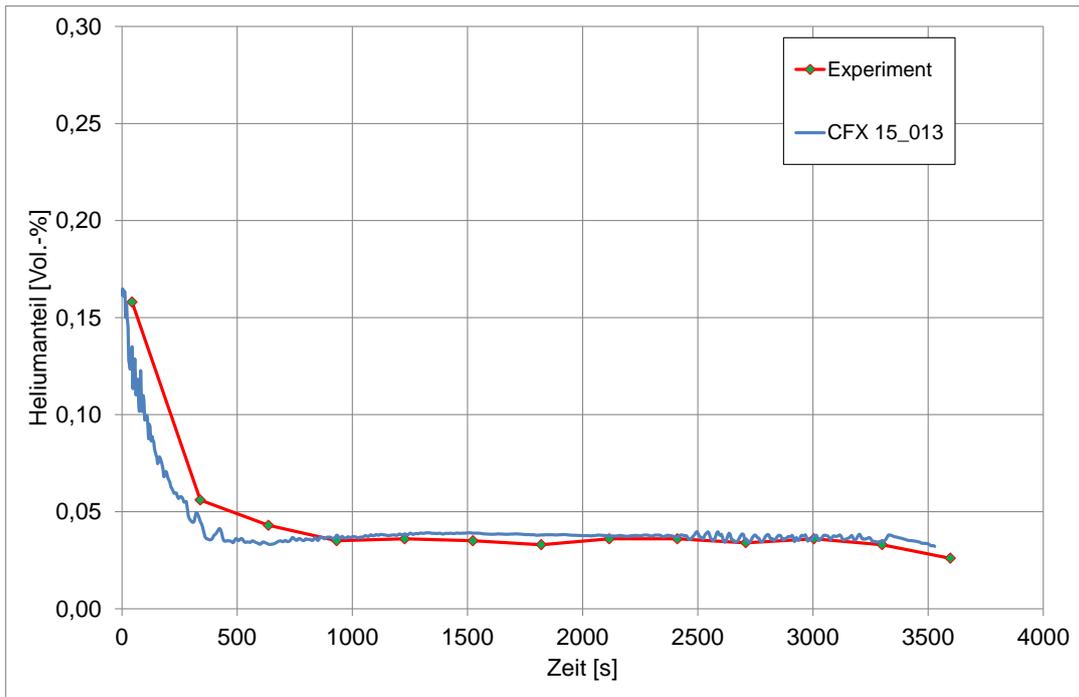


Abb. 4.3-6 Verlauf der Heliumkonzentration in 5,63 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1G 20)

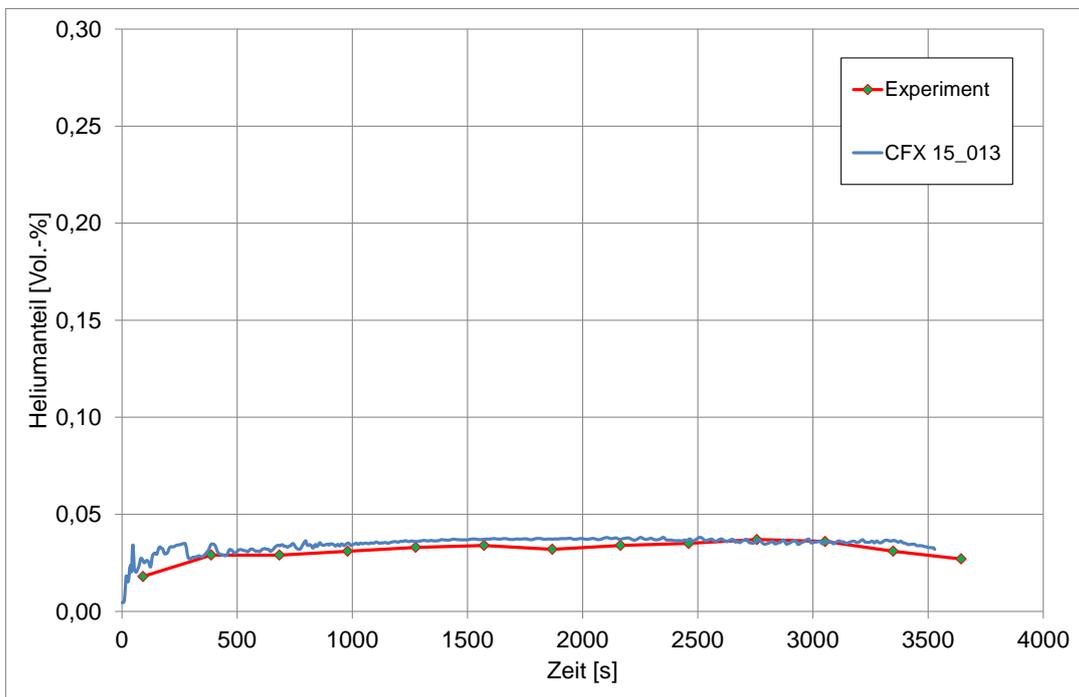


Abb. 4.3-7 Verlauf der Heliumkonzentration in 4,33 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MCG D1I 20)

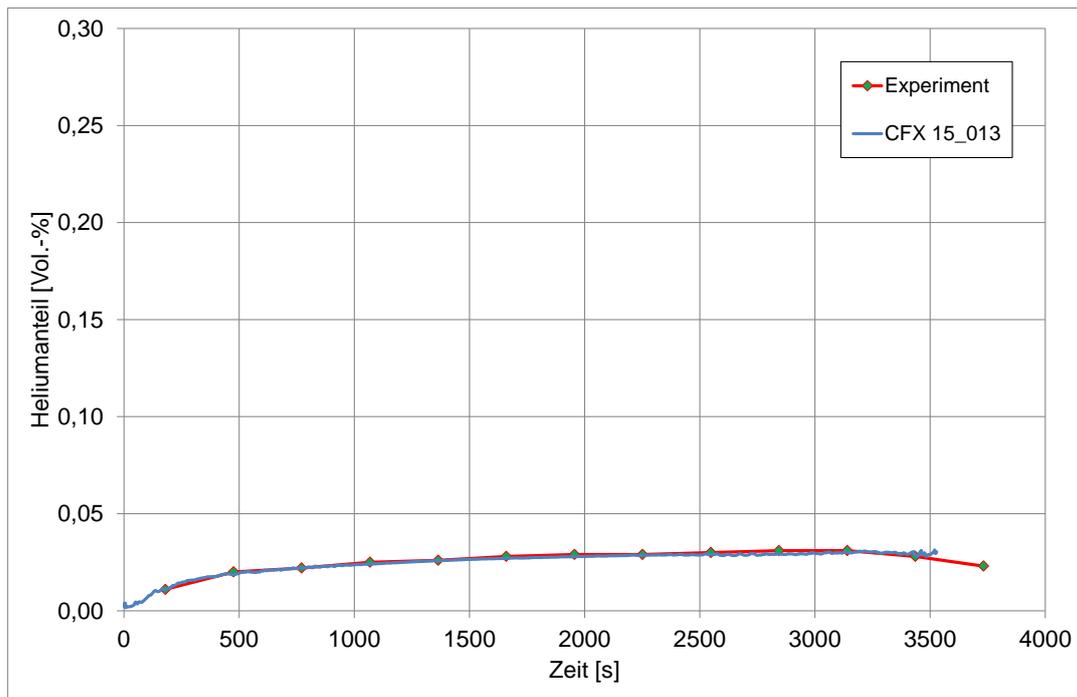


Abb. 4.3-8 Verlauf der Heliumkonzentration im Verbindungsrohr (Messpunkt: MCG TD1.1)

#### 4.3.3.2 Zeitlicher Verlauf der Temperaturen

In den Abb. 4.3-9 bis Abb. 4.3-15 sind die Temperaturverläufe an verschiedenen Positionen im Behälter 1 dargestellt. Dabei werden jeweils wieder die Simulationsdaten aus Rechnung CFX 15\_013 mit den experimentellen Daten verglichen. In den Diagrammen ist zusätzlich der in /PAL08/ angegebene maximale Messfehler der experimentellen Daten (1,16 °C) als Fehlerbalken dargestellt. Insgesamt findet sich auch hier bei den Temperaturen eine gute qualitative und quantitative Übereinstimmung. Lediglich in mittlerer Höhe (5 - 6 m, siehe Abb. 4.3-12 und Abb. 4.3-13) findet sich etwa in den ersten 1500 s eine etwas größere Abweichung zwischen Experiment und Simulation. Dabei wird die experimentelle Temperatur durch die Simulationen um ca. 3 - 8 °C überschätzt.

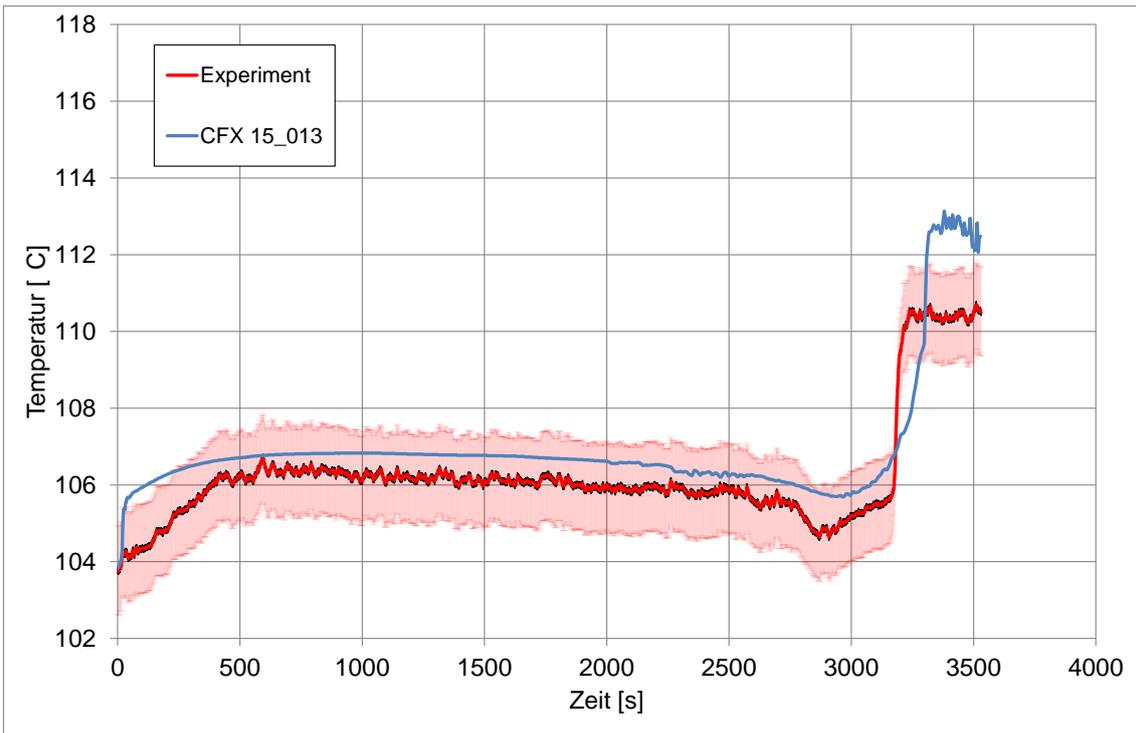


Abb. 4.3-9 Verlauf der Temperatur in 8,03 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1A 20)

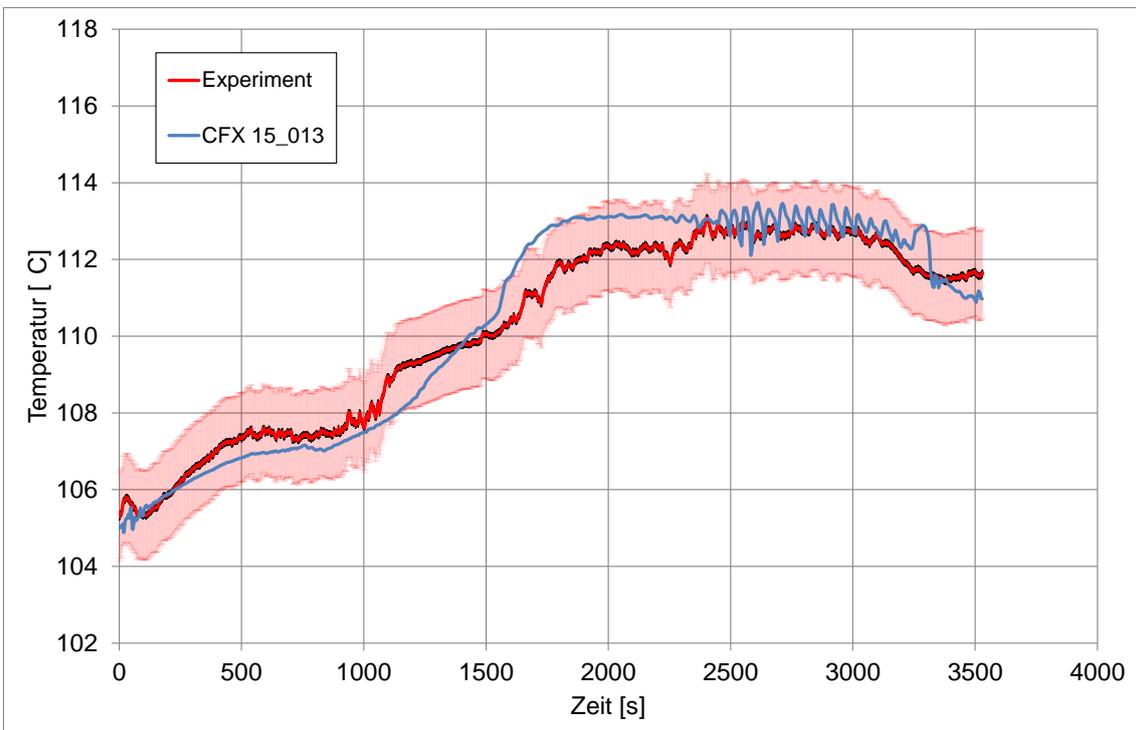


Abb. 4.3-10 Verlauf der Temperatur in 6,50 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1CD2 20)

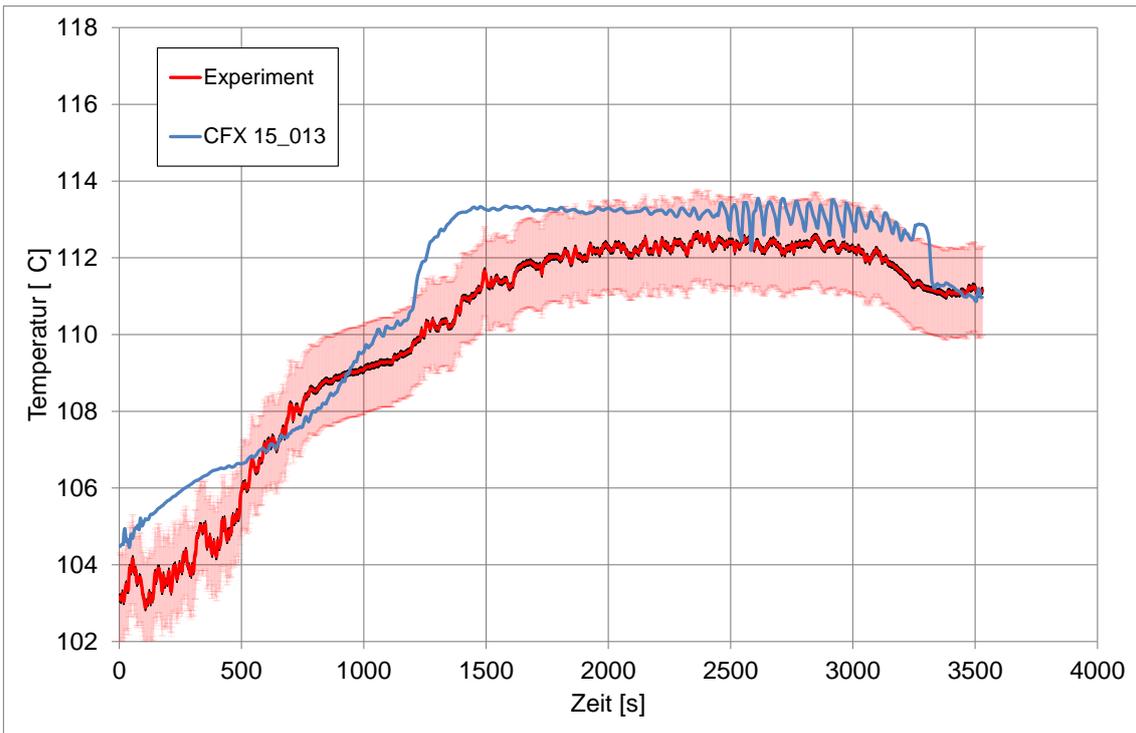


Abb. 4.3-11 Verlauf der Temperatur in 6,28 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1D 20)

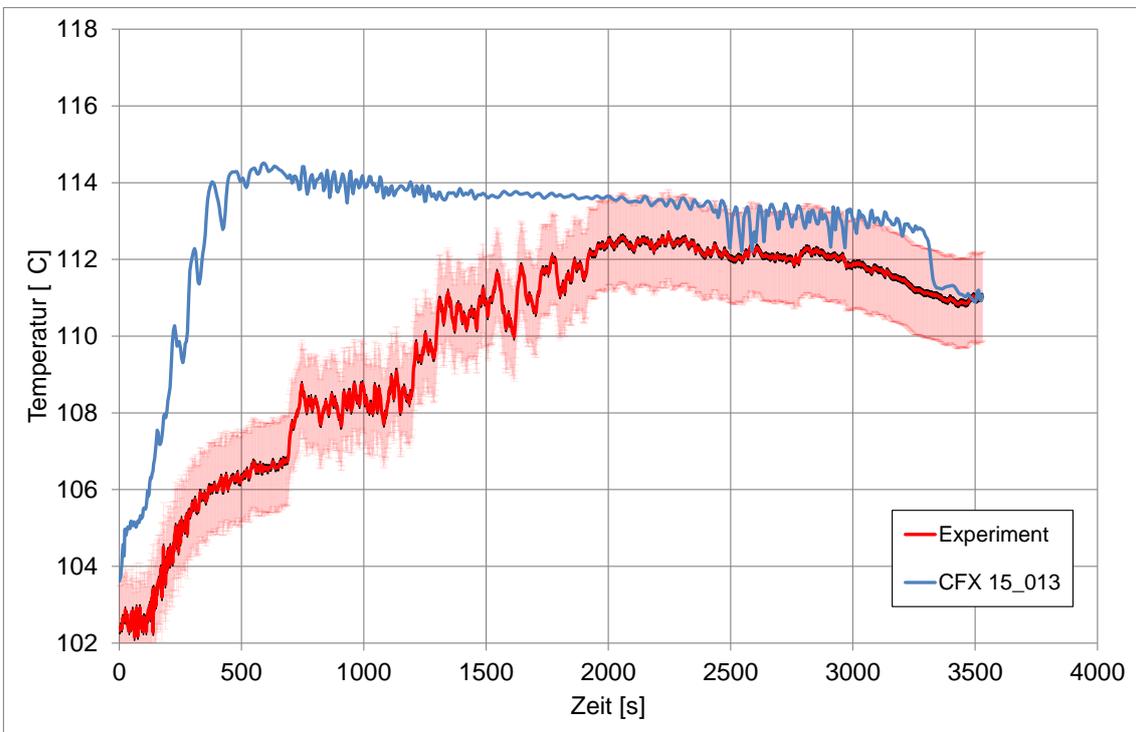


Abb. 4.3-12 Verlauf der Temperatur in 5,63 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1G 20)

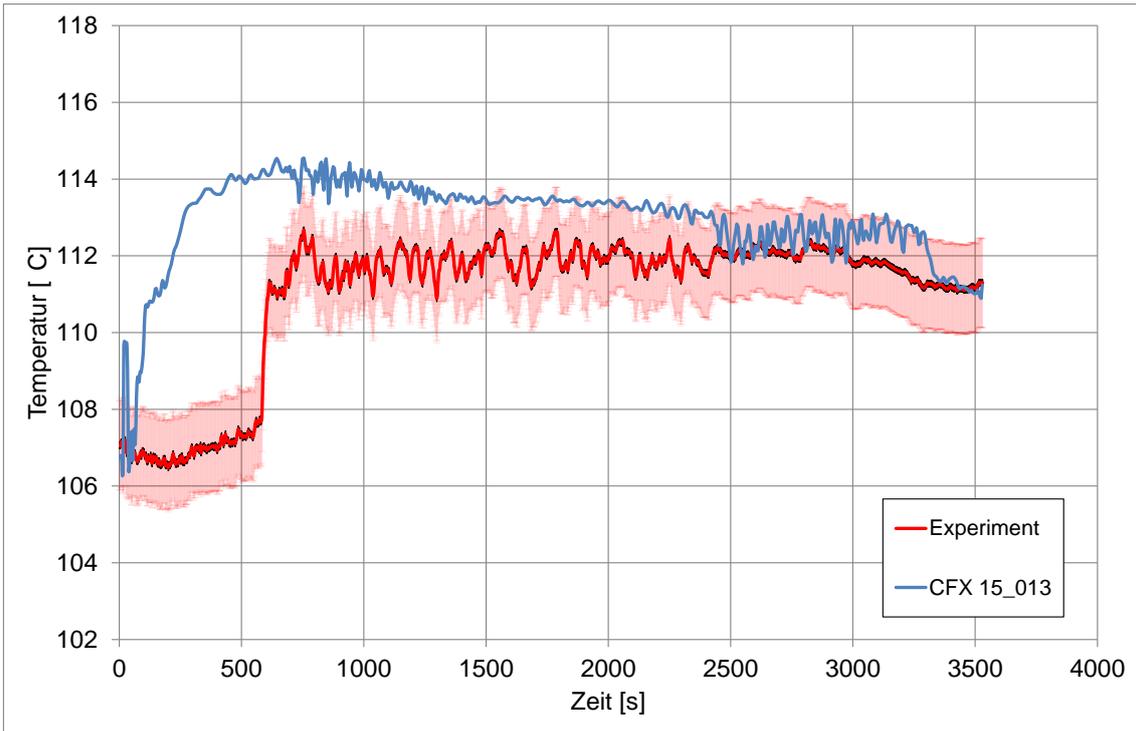


Abb. 4.3-13 Verlauf der Temperatur in 4,98 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1H 20)

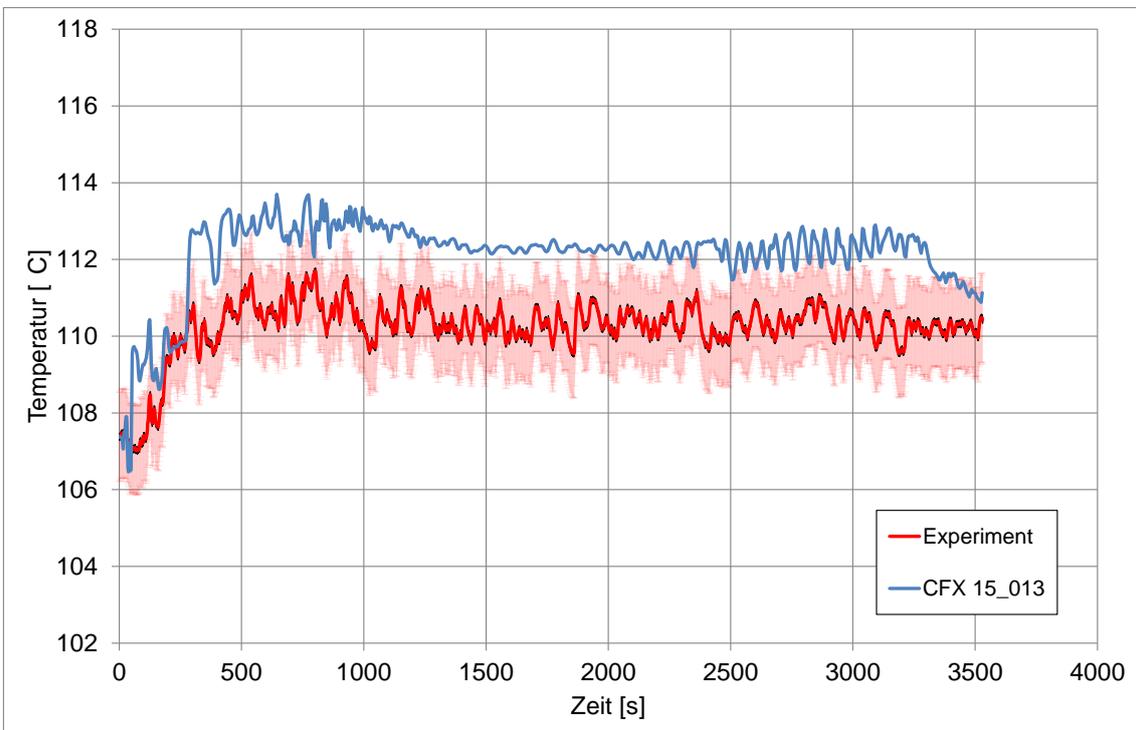


Abb. 4.3-14 Verlauf der Temperatur in 4,33 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1I 20)

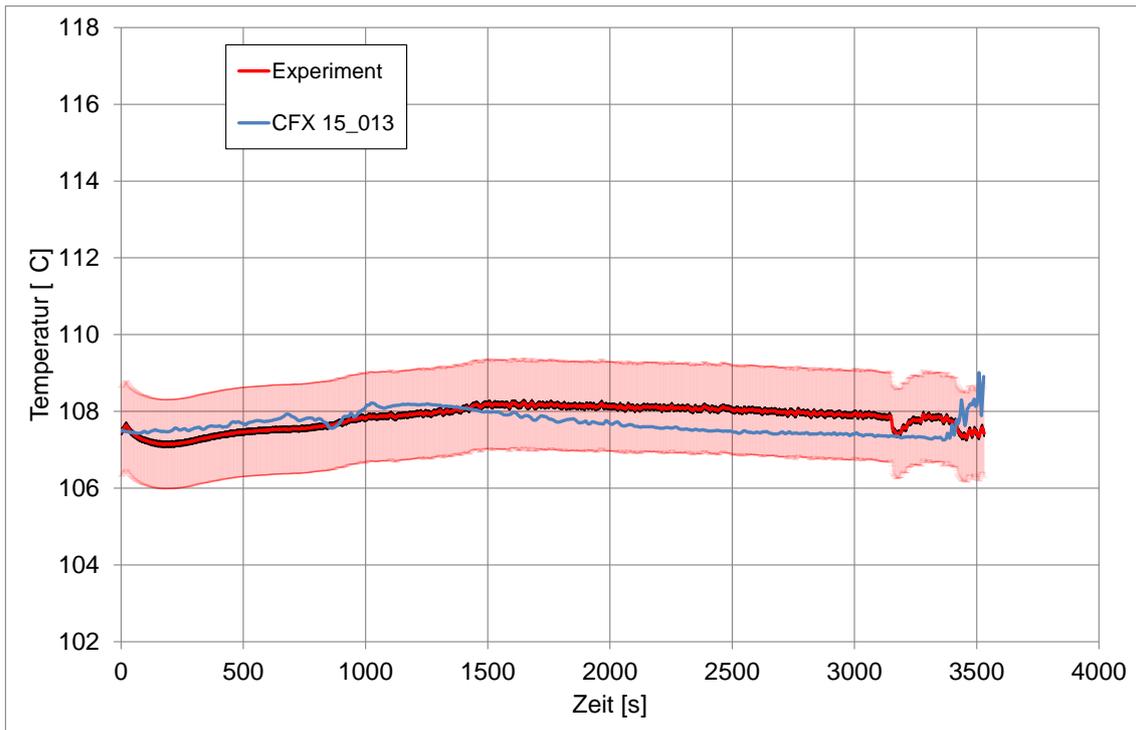


Abb. 4.3-15 Verlauf der Temperatur in 0,54 m Höhe im Behälter 1 (Messpunkt: MTG D1T 20)

#### 4.3.4 Durchführung von Parametervariationen

Wie in Tab. 4.3-3 dargestellt wurden zahlreiche Parametervariationen durchgeführt, in denen insbesondere die Elementzahl, die Strahlungsabsorption und auch das Turbulenzmodell variiert wurden. Die Ergebnisse dieser Parametervariationen werden im Folgenden miteinander verglichen und diskutiert.

##### 4.3.4.1 Analyse der Gitterabhängigkeit

Zunächst soll die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Elementzahl des Berechnungsgitters untersucht werden. Dazu werden die Ergebnisse der Simulationen CFX 15\_004 (mit 294 280 Elementen) und CFX 16\_001 (668 954 Elemente) miteinander verglichen. Beide Rechnungen unterscheiden sich nur durch ihre Elementzahl, alle anderen Simulationsparameter sind gleich. Die Absorptionskoeffizienten für thermische Strahlung hatten bei beiden Berechnungen jeweils den Wert  $1 \text{ m}^{-1}$ . Dieses entspricht zwar den CFX-Standardwerten, ist aber insbesondere für Helium unphysikalisch. Weiter unten wird erläutert, wie dieser Parameter noch optimiert wird.

Abb. 4.3-16 zeigt den Einfluss der Elementzahl auf den Verlauf der Heliumkonzentration an einem Messpunkt in 8,03 m Höhe im Behälter 1. Bei der Rechnung mit 294 280 ist die Heliumschicht etwa bei  $t = 2650$  s vollständig abgebaut, bei der Rechnung mit 668 954 ist die Heliumschicht etwas schneller schon bei 2500 s vollständig abgebaut. Insgesamt zeigt sich auch bei den anderen Messpunkten ein ähnliches Verhalten. Das Helium wird in der Berechnung mit mehr Elementen etwas schneller abgebaut. Es ist also in den Berechnungen noch eine Gitterabhängigkeit zu beobachten, die aber nicht besonders stark ist.

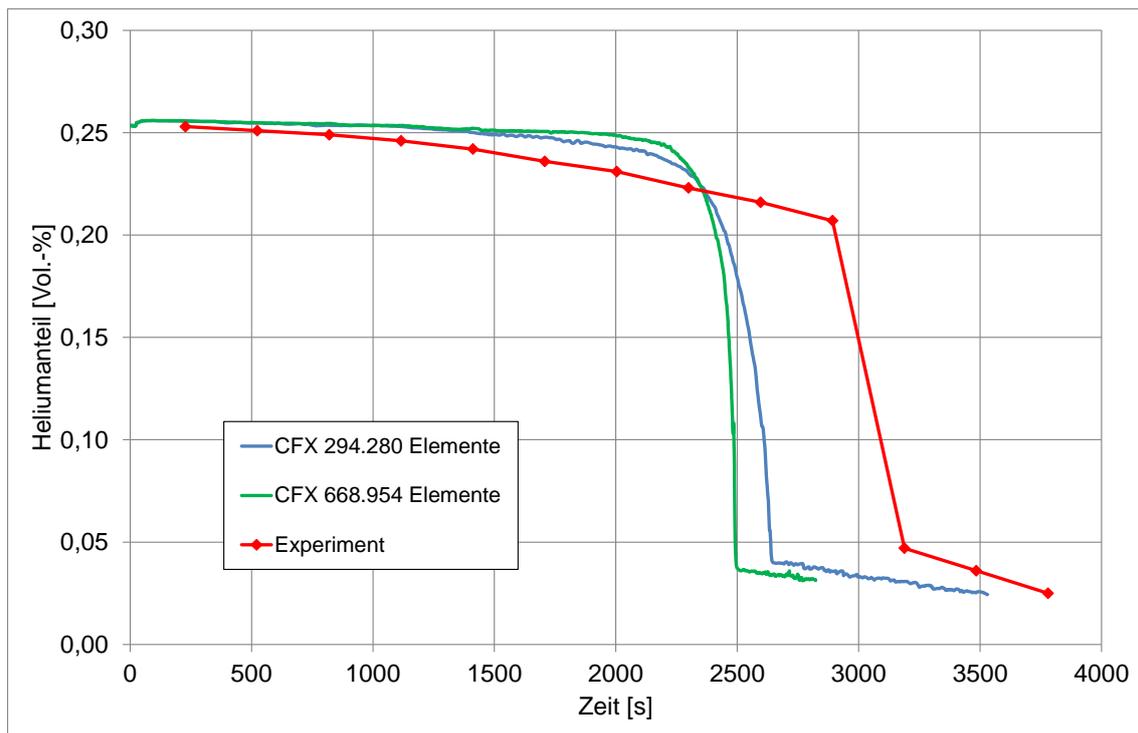


Abb. 4.3-16 Einfluss der Elementzahl auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1A 20 in 8,03 m Höhe)

Betrachtet man den Einfluss der Elementzahl auf den Temperaturverlauf exemplarisch an Messpunkt MCG D1D (siehe Abb. 4.3-17), so kann man nur sehr geringe Unterschiede zwischen den beiden Berechnungen mit großer und kleiner Elementzahl erkennen. Auch bei den anderen (Temperatur-)Messpunkten zeigt sich nur ein geringer Einfluss der Elementzahl auf den berechneten Temperaturverlauf (hier nicht dargestellt).

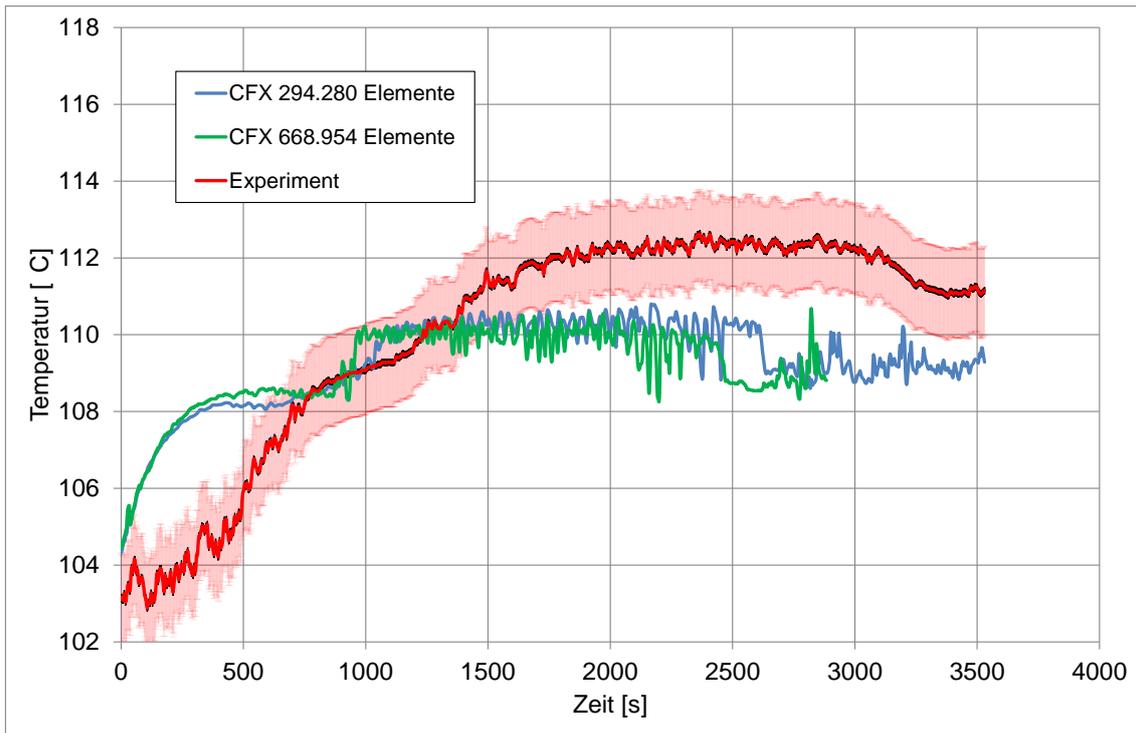


Abb. 4.3-17 Einfluss der Elementzahl auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MCG D1D 20 in 6,28 m Höhe)

#### 4.3.4.2 Variation der Strahlungsabsorption

Die Berechnungen mit CFX haben gezeigt, dass die Berücksichtigung von Wärmestrahlung einen deutlichen Einfluss auf die Temperaturverteilung und auf die Abbauzeit der Heliumschichtung haben kann. Bei der Verwendung des CFX-Strahlungsmodell „Discrete Transfer“-Radiation mit der Spektral-Modelloption „Gray“ wird als Eingabeparameter ein (integraler) Absorptionskoeffizient für die einzelnen Gase benötigt. Da Edelgase praktisch durchlässig für Wärmestrahlung sind wurde für das Helium der Wert  $0 \text{ m}^{-1}$  gewählt. Für Wasserdampf kann nur sehr schwer ein einzelner Absorptionskoeffizient angegeben werden. In der Literatur finden sich meist Absorptionskoeffizienten, die eine komplexe Wellenlängenabhängigkeit besitzen. Je nach Absorptionsbande werden Absorptionskoeffizienten von  $0 \text{ m}^{-1}$  bis  $80 \text{ m}^{-1}$  angegeben. Bei Betrachtung der Wichtigkeit der einzelnen Absorptionsbanden liegt der mittlere Absorptionskoeffizient von Wasserdampf aber bei eher kleineren Werten. Aus diesem Grund wird eine Parameterstudie mit einer Variation des Absorptionskoeffizienten von Wasserdampf im Bereich zwischen  $0 \text{ m}^{-1}$  und  $50 \text{ m}^{-1}$  durchgeführt.

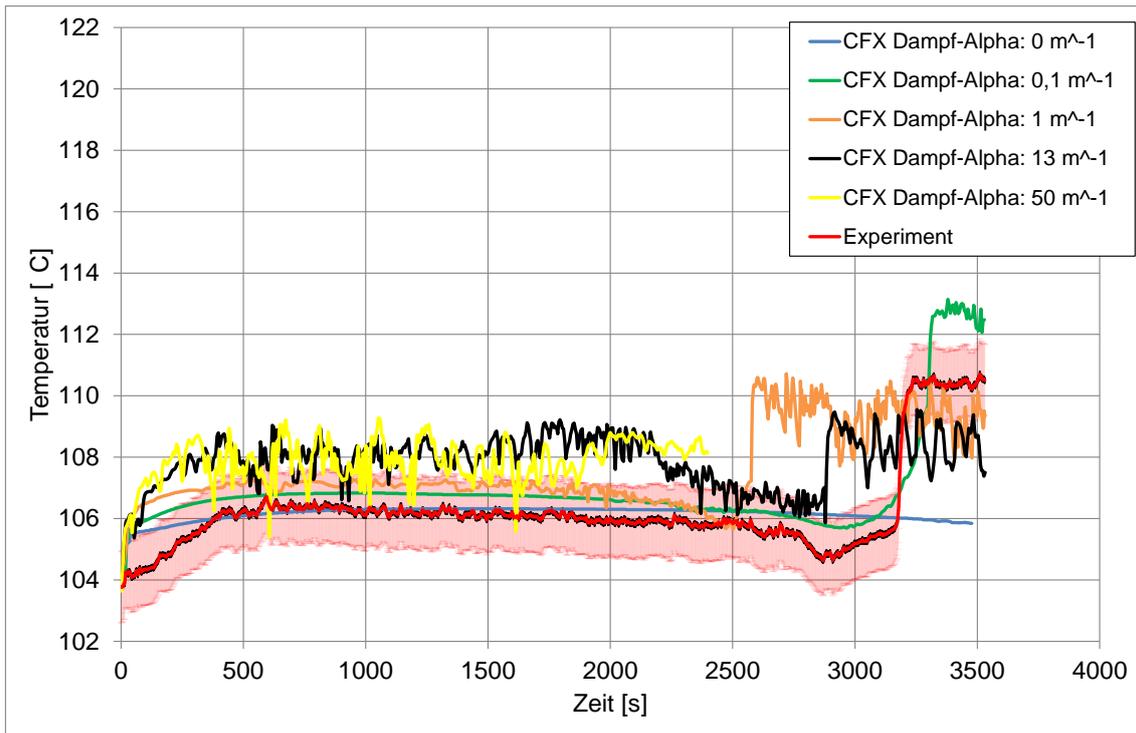


Abb. 4.3-18 Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1A 20)

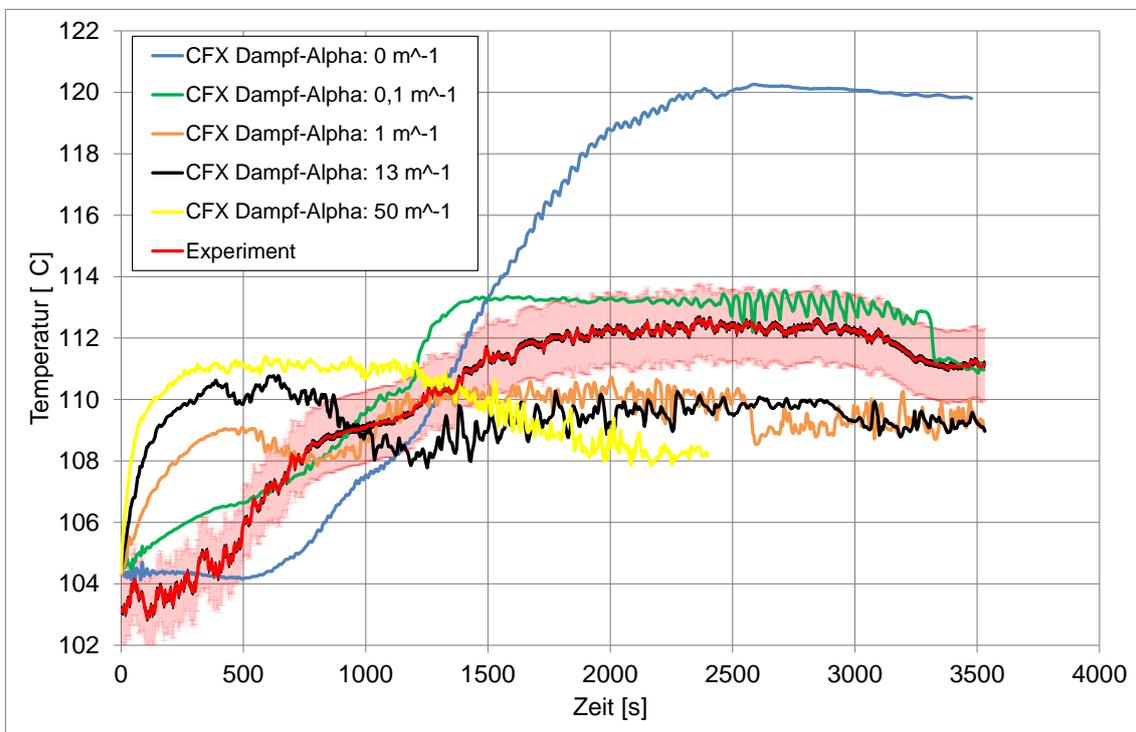


Abb. 4.3-19 Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1D 20)

Abb. 4.3-18 und Abb. 4.3-19 zeigen den Einfluss des Absorptionskoeffizienten von Wasserdampf auf den Temperaturverlauf. Insbesondere bei Messpunkt MTG D1D 20 in 6,28 m Höhe im Behälter 1 zeigt sich, dass die Änderung des Absorptionskoeffizienten im betrachteten Bereich zu deutlichen Änderungen im Temperaturverlauf führt. Hierbei zeigt die Kurve mit einem Absorptionskoeffizienten von  $0,1 \text{ m}^{-1}$  die beste qualitative und quantitative Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

In Abb. 4.3-20 ist der Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf den Abbau der Heliumschicht in 6,28 m Höhe im Behälter 1 dargestellt. Auch hier zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen den einzelnen Rechnungen. Bei Verwendung eines sehr kleinem Absorptionskoeffizienten ( $0 \text{ m}^{-1}$  / dieses entspricht der Situation ohne Berücksichtigung von Wärmestrahlung), als auch mit sehr großem Absorptionskoeffizienten ( $50 \text{ m}^{-1}$ ) dauert der Abbau der Heliumschicht deutlich länger als bei einem mittleren Absorptionskoeffizienten. Die Kurven mit einem Koeffizienten von  $0,1 \text{ m}^{-1}$  und  $13 \text{ m}^{-1}$  liegen am nächsten an den experimentellen Werten.

Definiert man eine Abbauzeit als die Zeit bis zum Erreichen eines Heliumanteils von 10 %:  $t_{Abbau} = t(\text{Heliumanteil} = 10 \text{ Vol.}\text{-}\%)$  und trägt die so definierte Abbauzeit gegen den zugehörigen Absorptionskoeffizienten für Wärmestrahlung auf, so ergibt sich daraus das in Abb. 4.3-21 gezeigte Bild. Es zeigt sich ein nichtlinearer, nichteindeutiger Zusammenhang zwischen Abbauzeit und Absorptionskoeffizienten. Die durch die Simulationen erstellte Kurve schneidet den experimentellen Wert an zwei Stellen, etwa bei  $0,08 \text{ m}^{-1}$  und bei  $15,5 \text{ m}^{-1}$ . Will man nur den zeitlichen Verlauf der Heliumschichtung (siehe Abb. 4.3-20) möglichst gut wiedergeben, so sind hierfür beide Punkte gleich gut geeignet. Berücksichtigt man aber auch den Verlauf der Temperaturen (siehe Abb. 4.3-19), so scheint ein Absorptionskoeffizient mit einem Wert etwa um  $0,08 \text{ m}^{-1}$  am besten geeignet zu sein um die experimentellen Daten zu reproduzieren.

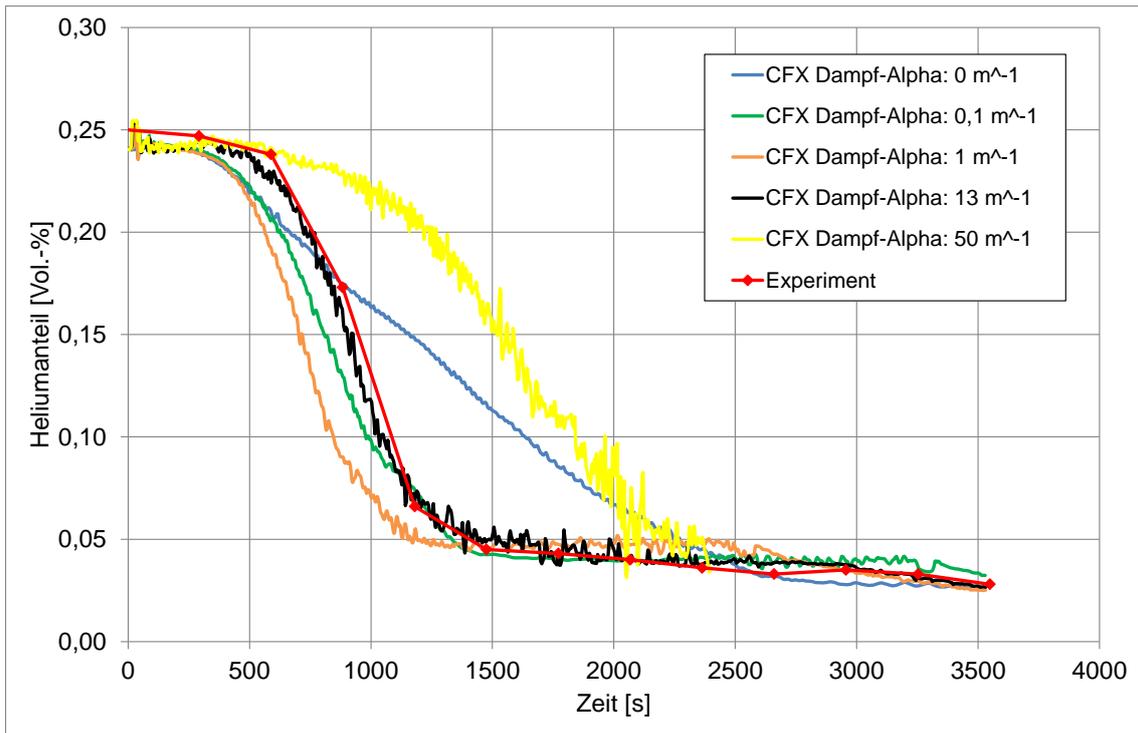


Abb. 4.3-20 Einfluss des Absorptionskoeffizient von Dampf auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1D 20)

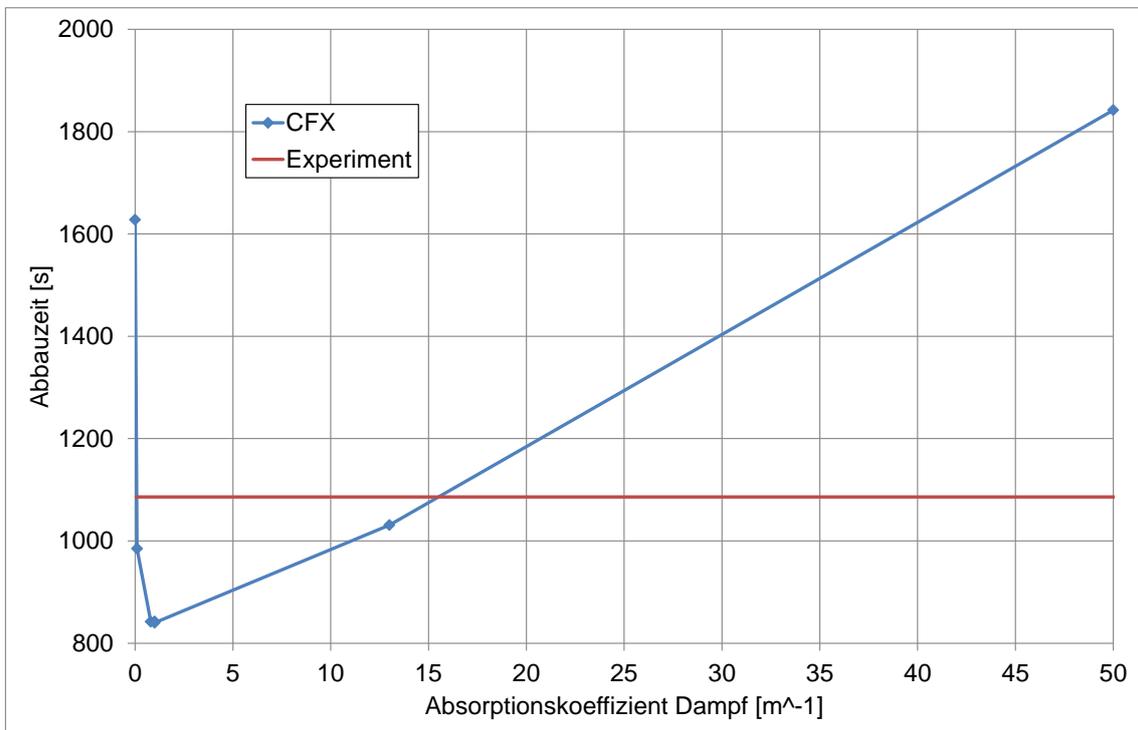


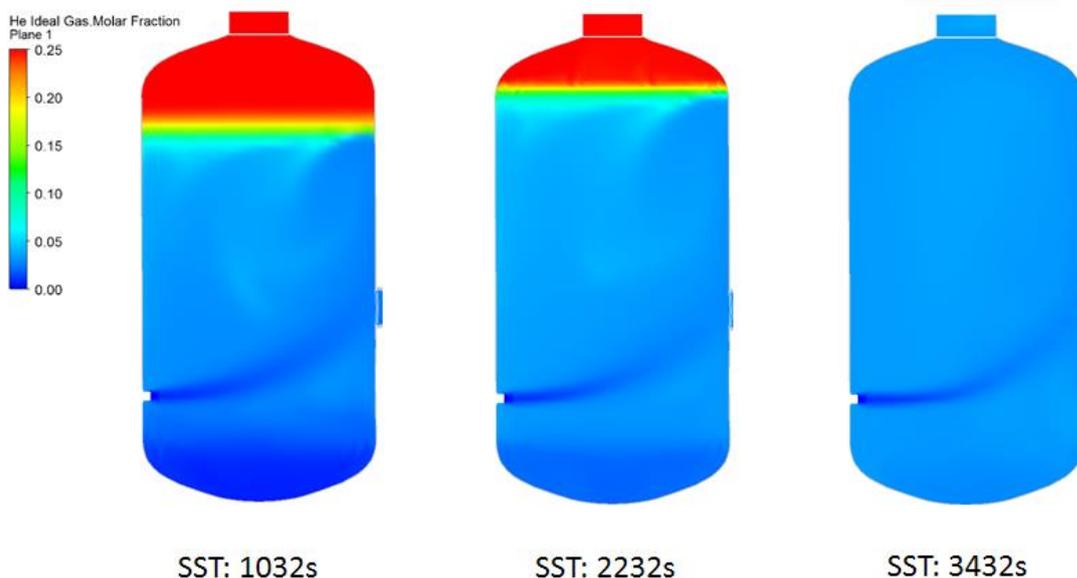
Abb. 4.3-21 Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die Abbaueiten

#### 4.3.4.3 Einfluss des Turbulenzmodells (TSF)

Im folgenden Abschnitt soll der Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung und auf die Temperaturverteilung im PANDA-Behälter untersucht werden. Dazu wurden eine Rechnung mit dem SST-Turbulenzmodell (CFX 15\_003) und eine Rechnung mit dem TSF-Turbulenzmodell (CFX 19\_002) durchgeführt. Die Ergebnisse der beiden Berechnungen werden im Folgenden miteinander verglichen.

- **Heliumkonzentrationen**

Abb. 4.3-22 zeigt die Heliumkonzentration im PANDA Behälter 1. In der oberen Reihe sind die Ergebnisse der Berechnung mit dem SST-Modell dargestellt, in der unteren Reihe sind die entsprechenden Ergebnisse aus der Berechnung mit dem TSF-Modell. Grundsätzlich sehen sich die Ergebnisse sich recht ähnlich. Allerdings kann während der Abbauphase (im Zeitbereich um 2200 s) beim TSF-Modell beobachtet werden, dass die Helium/Luft-Grenzschicht deutlich unregelmäßiger ist als beim SST-Modell. Die Ursache hierfür ist eine zeitliche Schwankung der Grenzfläche.



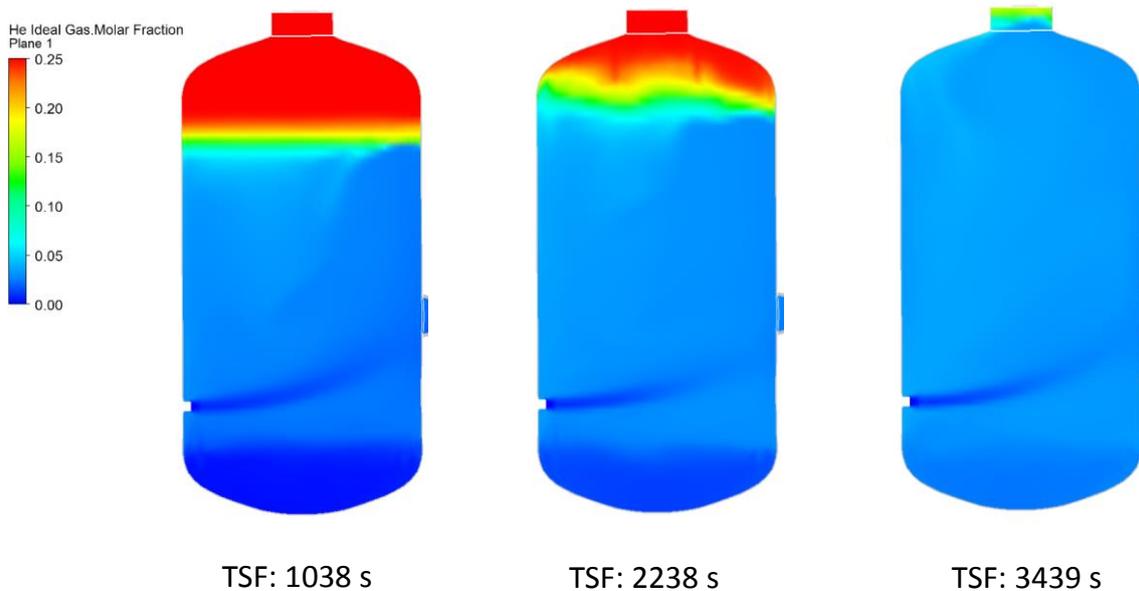


Abb. 4.3-22 Vergleich der Helium-Anteile (oben: SST, unten: TSF)

Betrachtet man den Verlauf der Heliumkonzentration an den einzelnen Messpunkten in den Abb. 4.3-23 bis Abb. 4.3-29, so bestätigt sich die Beobachtung, dass die Kurvenverläufe für das SST- und das TSF-Modell insgesamt recht ähnlich sind. Abweichungen gibt es lediglich im oberen Bereich (Messstellen MCG D1A / MCG D1C), wie in den Abb. 4.3-23 und Abb. 4.3-24 zu sehen ist. In Abb. 4.3-24 kann man auch im Kurvenverlauf die zeitlichen Schwankungen der Helium/Luft-Grenzschicht sehen, die schon in Abb. 4.3-22 zu beobachten waren. Insgesamt führt die Verwendung des TSF-Turbulenzmodells bei den Heliumkonzentrationen zu ähnlichen Ergebnissen, wie das SST-Modell.

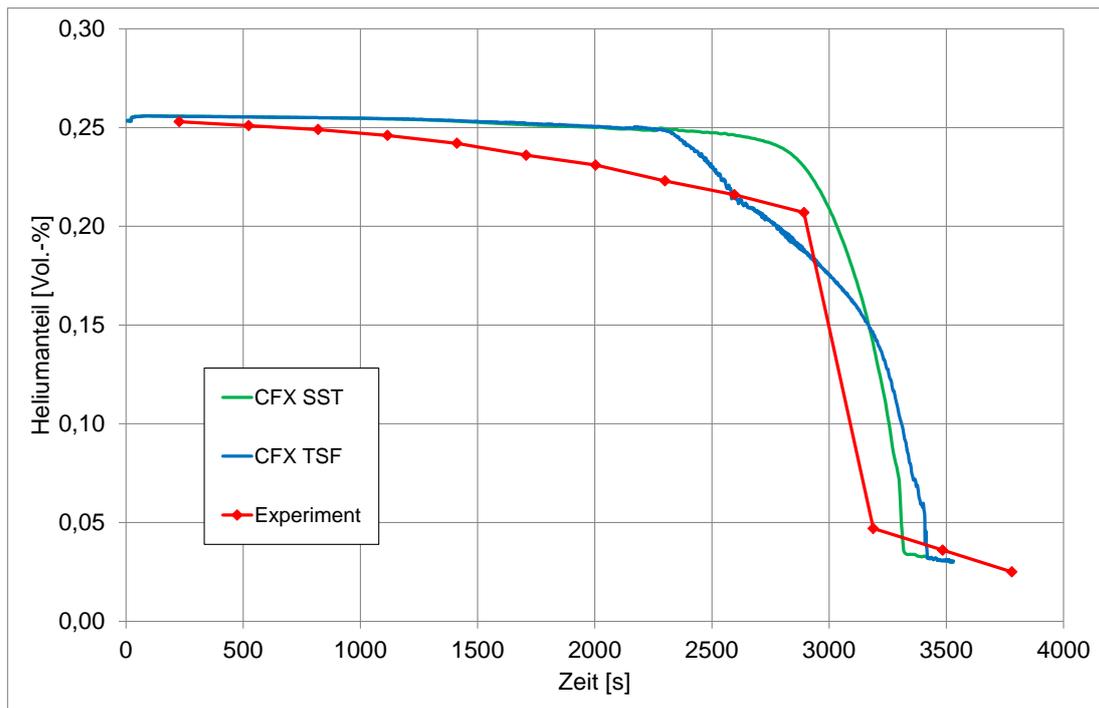


Abb. 4.3-23 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1A 20)

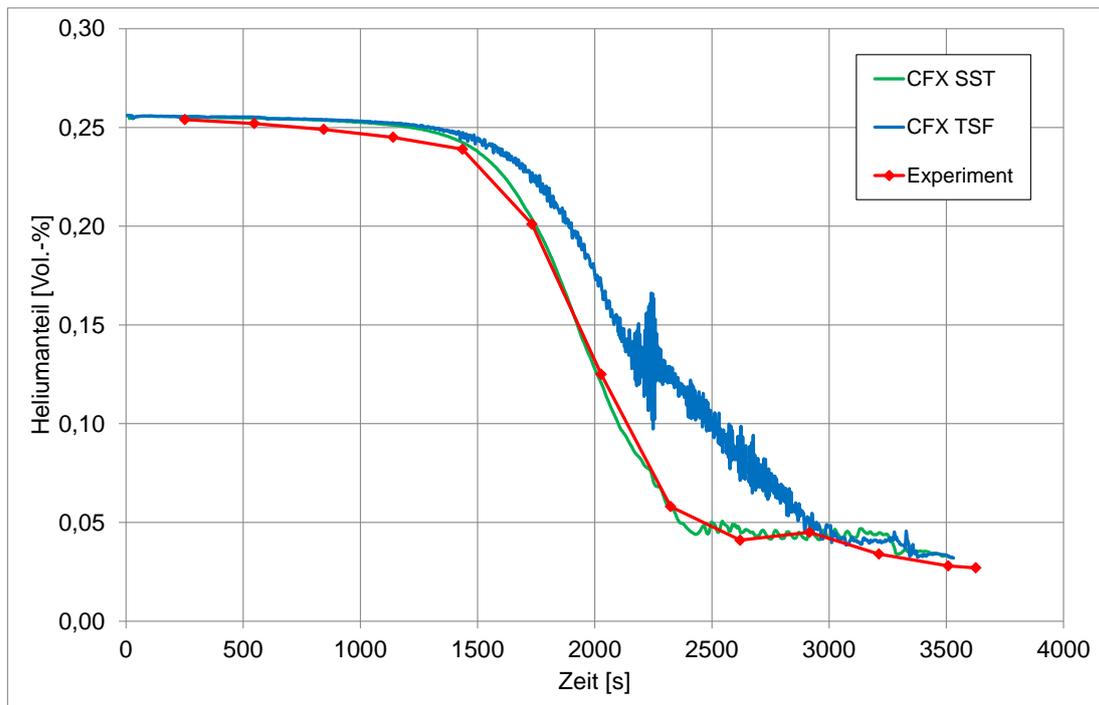


Abb. 4.3-24 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1C 20)

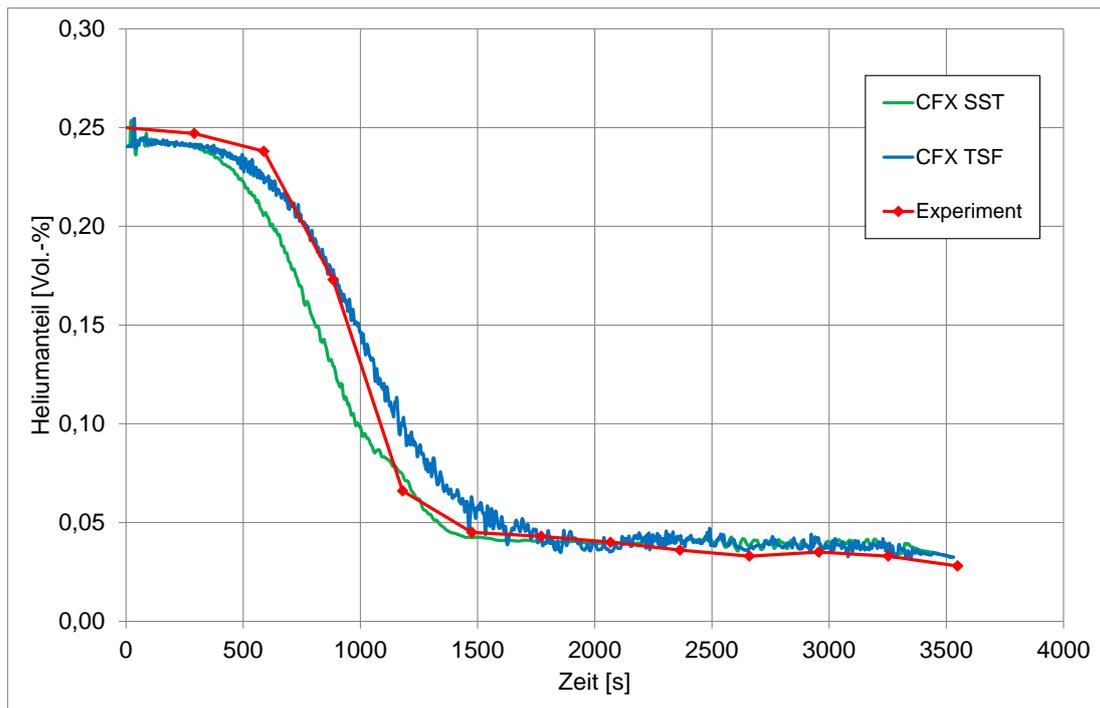


Abb. 4.3-25 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1D 20)

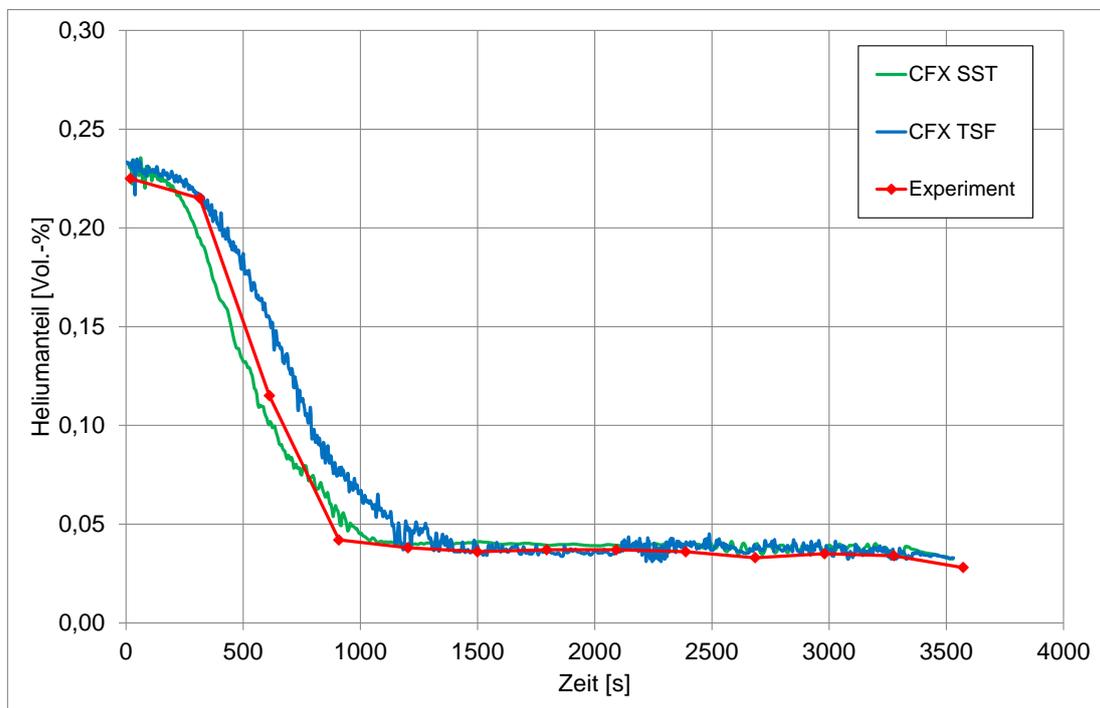


Abb. 4.3-26 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1F 20)

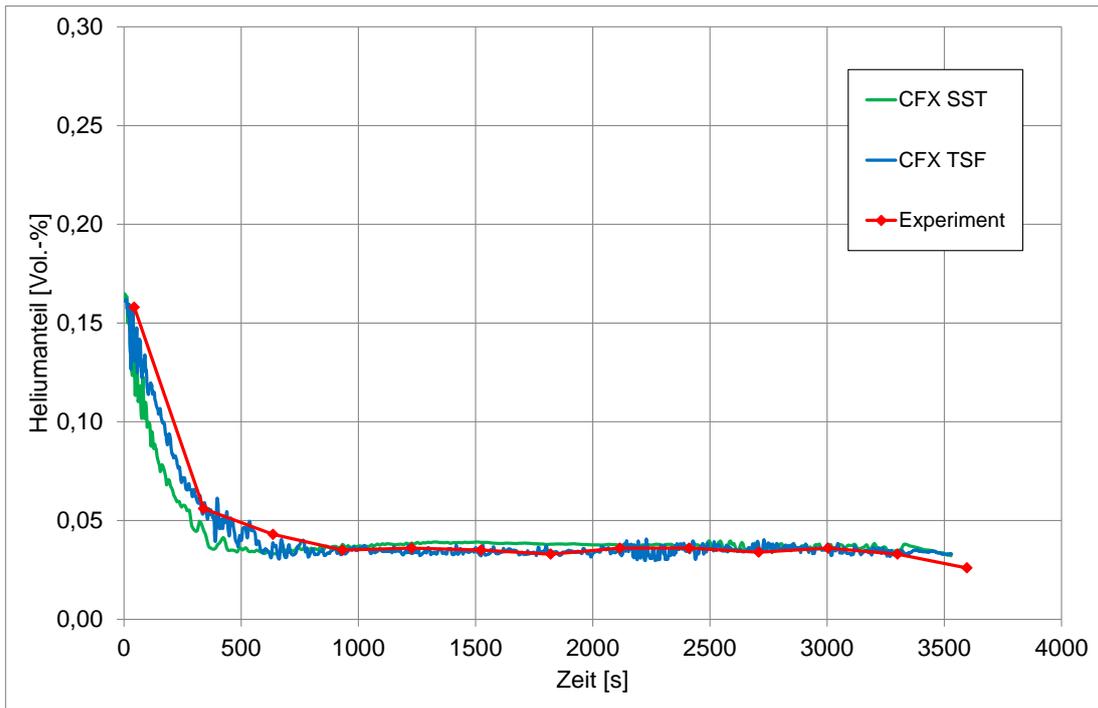


Abb. 4.3-27 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1G 20)

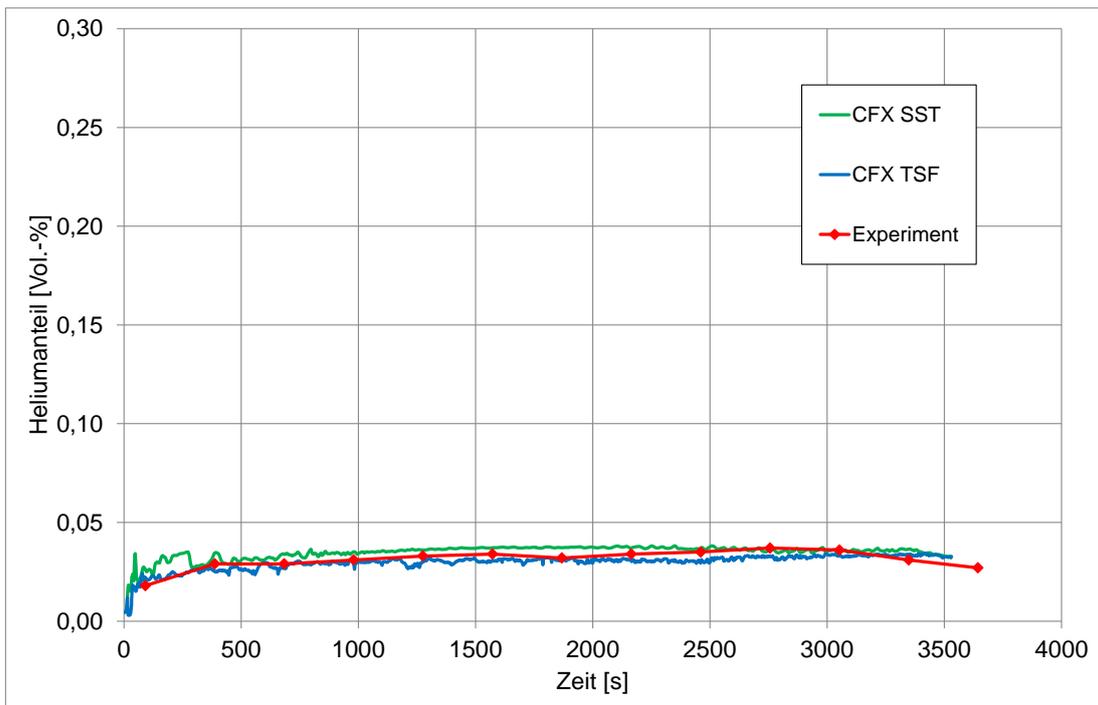


Abb. 4.3-28 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG D1I 20)

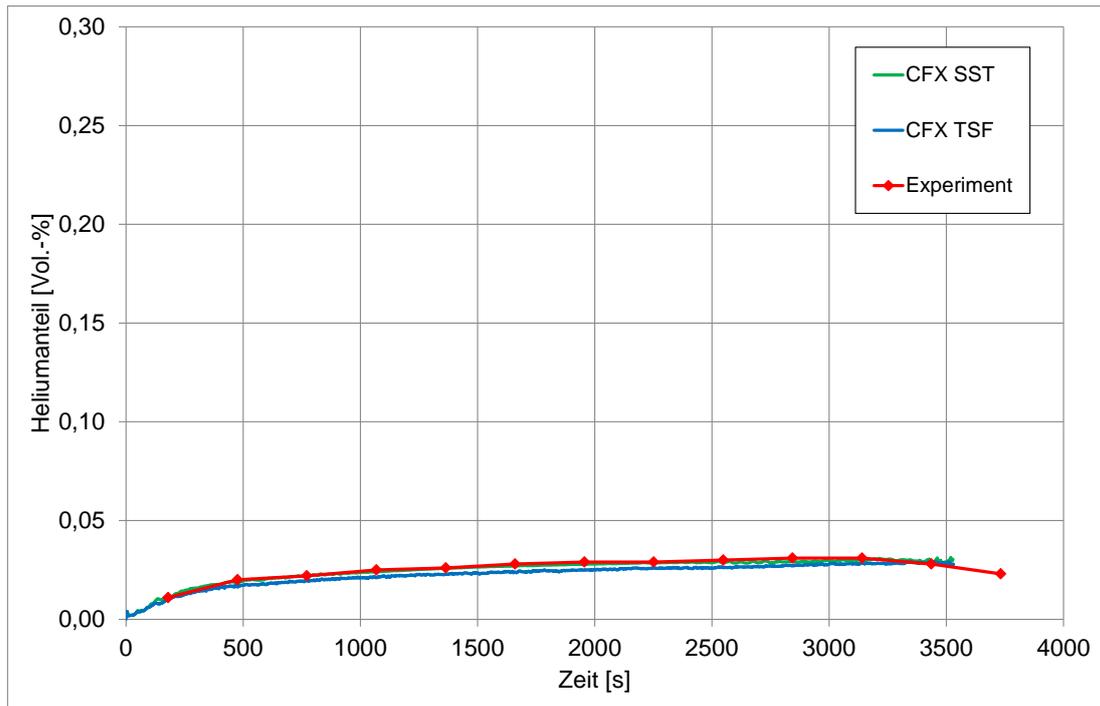


Abb. 4.3-29 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Abbau der Heliumschichtung (Messpunkt: MCG TD1.1)

- **Temperaturen**

In Abb. 4.3-30 sind die Temperaturverteilungen im PANDA-Behälter dargestellt. In der oberen Reihe ist wieder die SST-Simulation zu sehen und in der unteren Reihe, die entsprechenden Abbildungen aus der TSF-Simulation. Grundsätzlich sind auch die Temperaturverteilungen der beiden Simulationen recht ähnlich. Beim TSF-Modell kann man im oberen bzw. unteren Teil des Behälters etwas höhere Temperaturen beobachten. Weiterhin sind beim TSF-Modell wieder Unregelmäßigkeiten zu sehen, die auf zeitlichen Schwankungen der Helium/Luft-Grenzfläche beruhen.

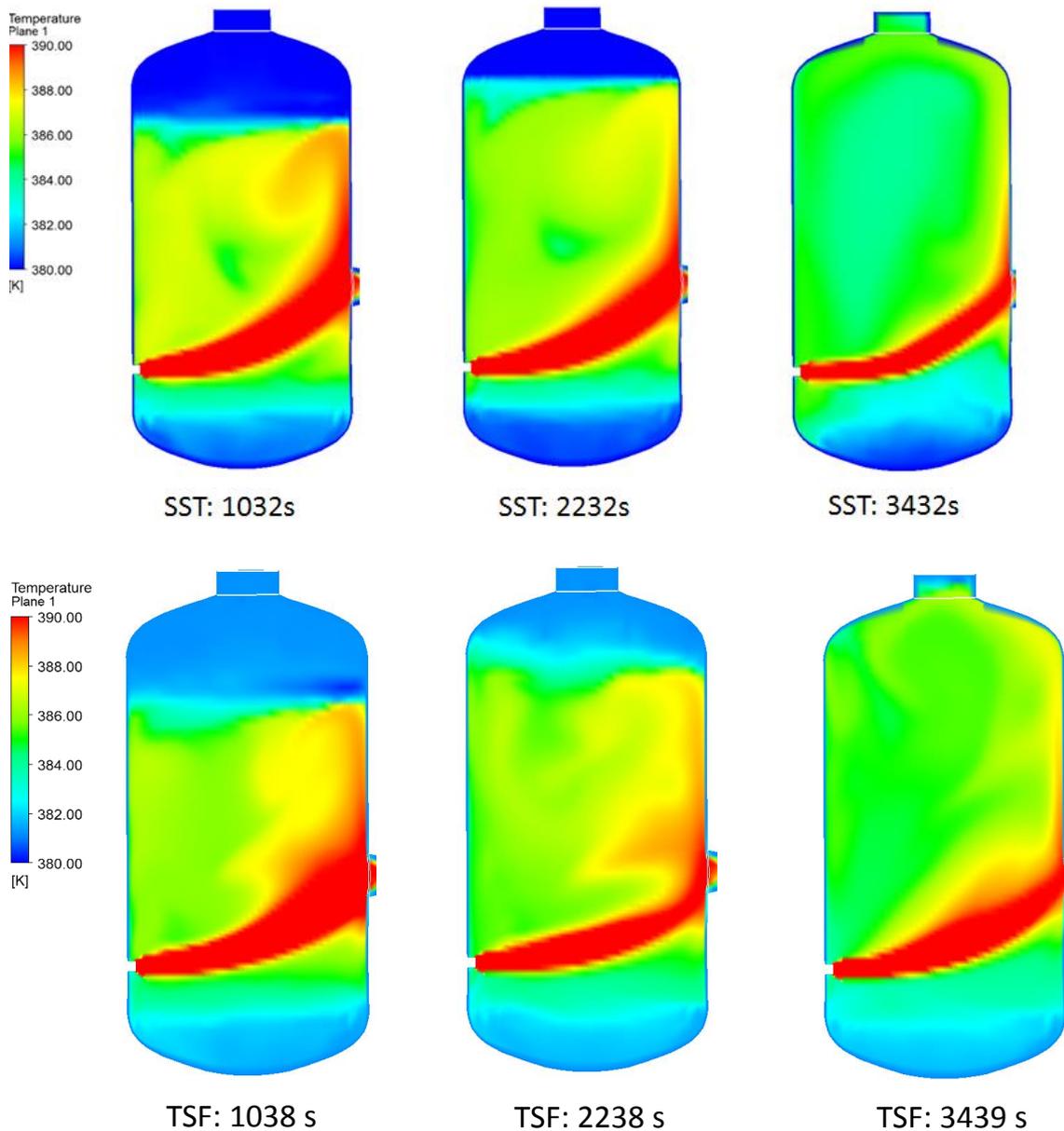


Abb. 4.3-30 Vergleich der Temperaturverteilung (oben: SST, unten TSF)

Auch bei der Betrachtung der Temperaturen an den einzelnen Messstellen in den Abb. 4.3-31 bis Abb. 4.3-37 kann man nur geringe Unterschiede zwischen dem SST- und dem TSF-Modell feststellen. In Abb. 4.3-31 zeigt sich wieder, dass die Temperatur im oberen Behälter beim TSF-Modell etwas höher ist als beim SST-Modell. Damit sind die Werte des TSF-Modells aber auch etwas weiter von den experimentellen Werten entfernt als die Werte der SST-Simulation. Auch im unteren Behälter, bei Messstelle MTG D1T (siehe Abb. 4.3-37) hat das TSF-Modell etwas höhere Werte, die damit aber auch etwas weiter von der Simulation entfernt sind, als die Werte des SST-Modells. Insgesamt führt die Verwendung des TSF-Turbulenzmodells bei den Temperaturen zu ähnlichen Ergebnissen wie das SST-Modell.

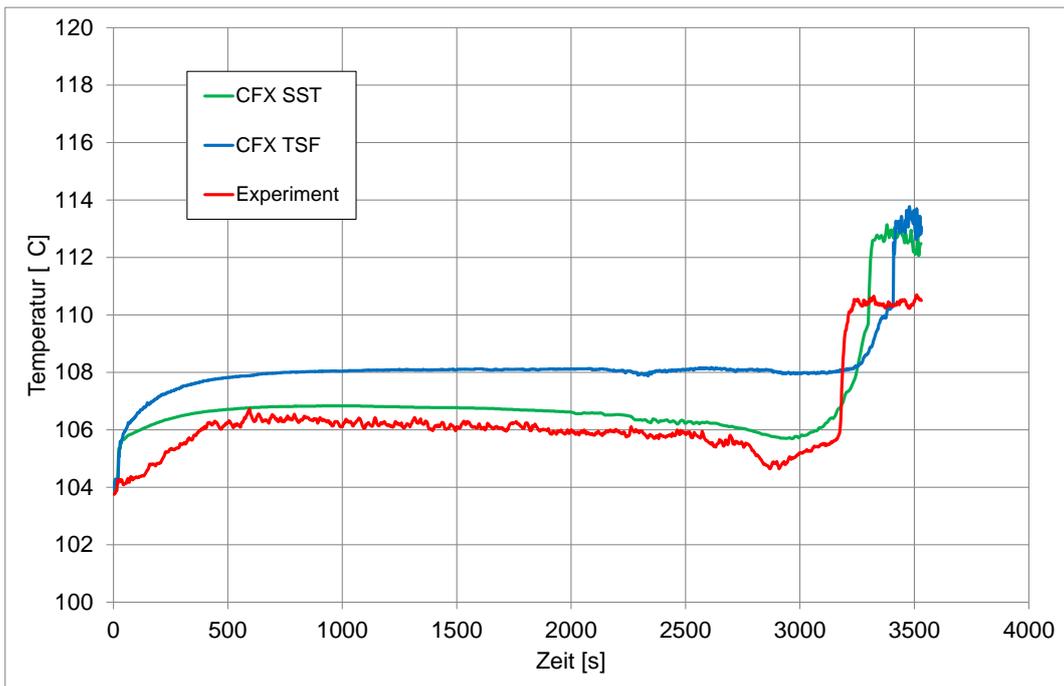


Abb. 4.3-31 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1A 20)

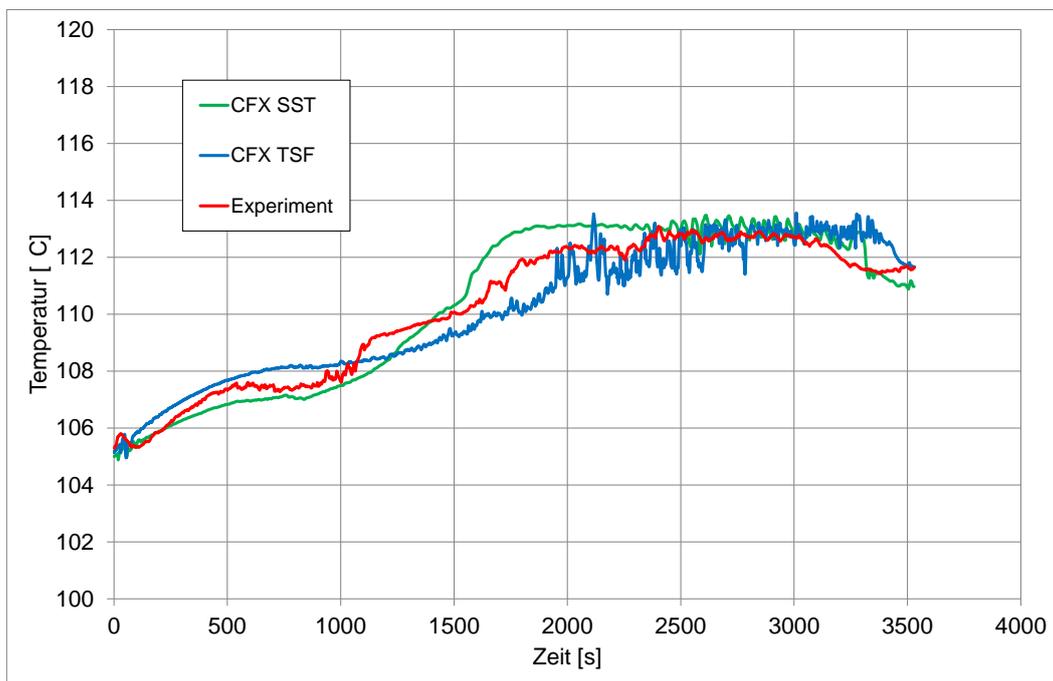


Abb. 4.3-32 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1CD2 20)

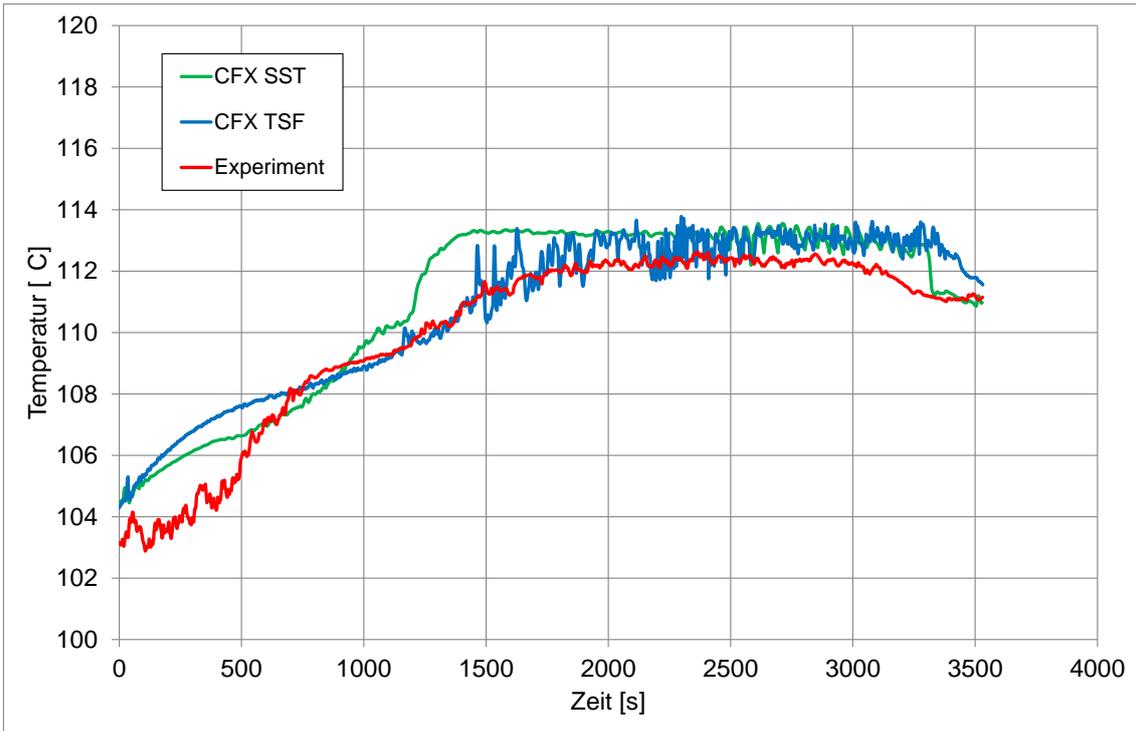


Abb. 4.3-33 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1D 20)

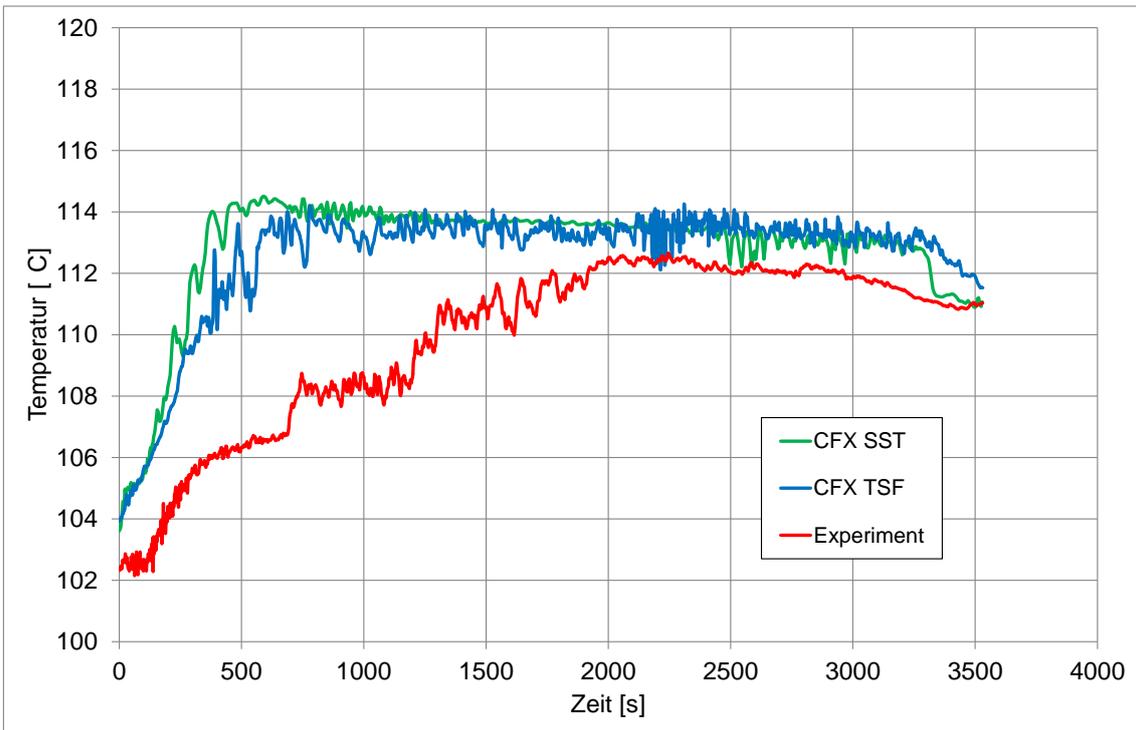


Abb. 4.3-34 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1G 20)

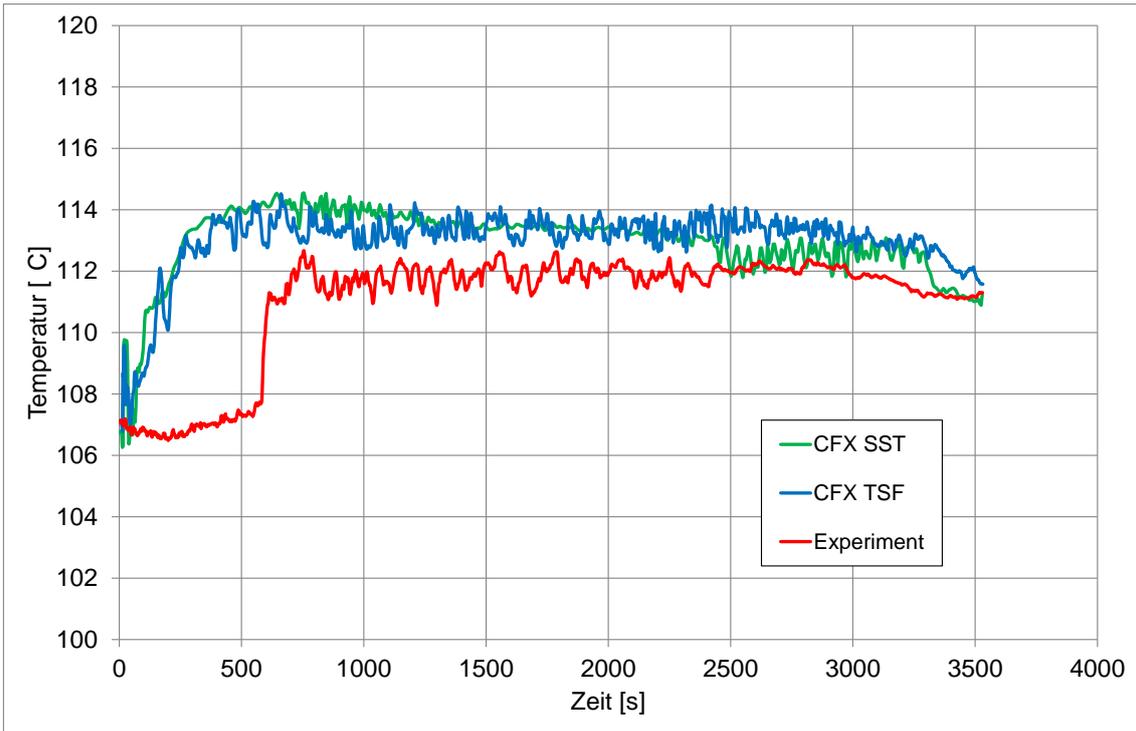


Abb. 4.3-35 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1H 20)

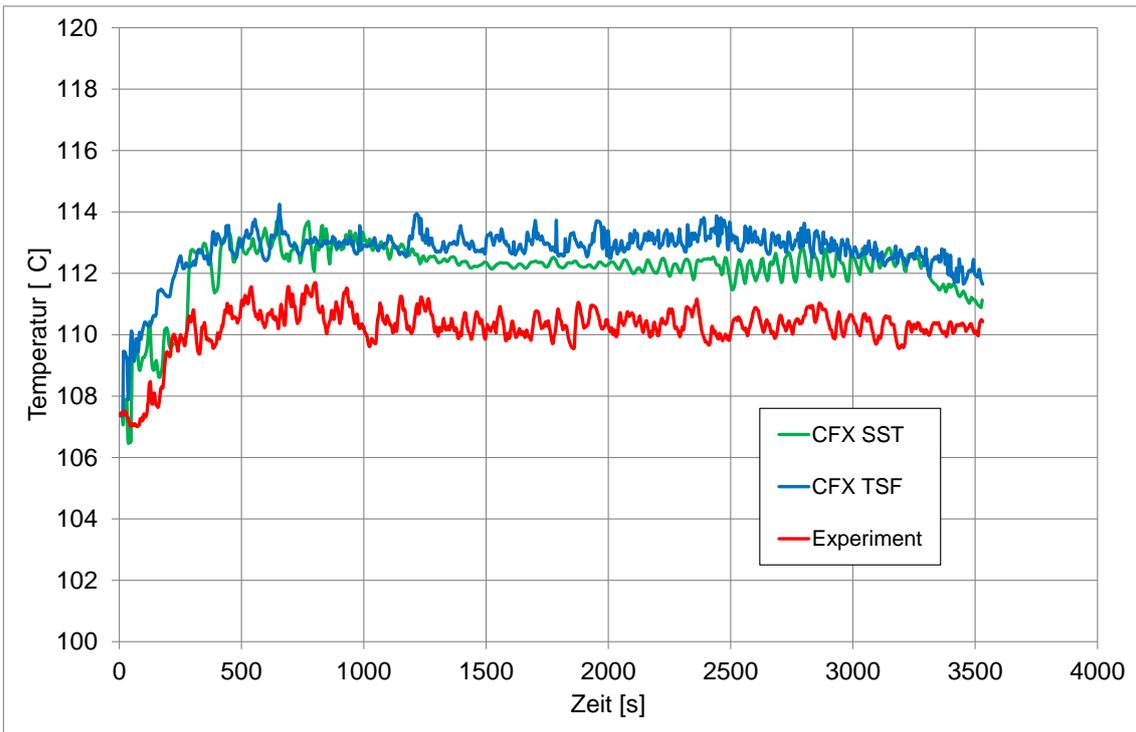


Abb. 4.3-36 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1I 20)

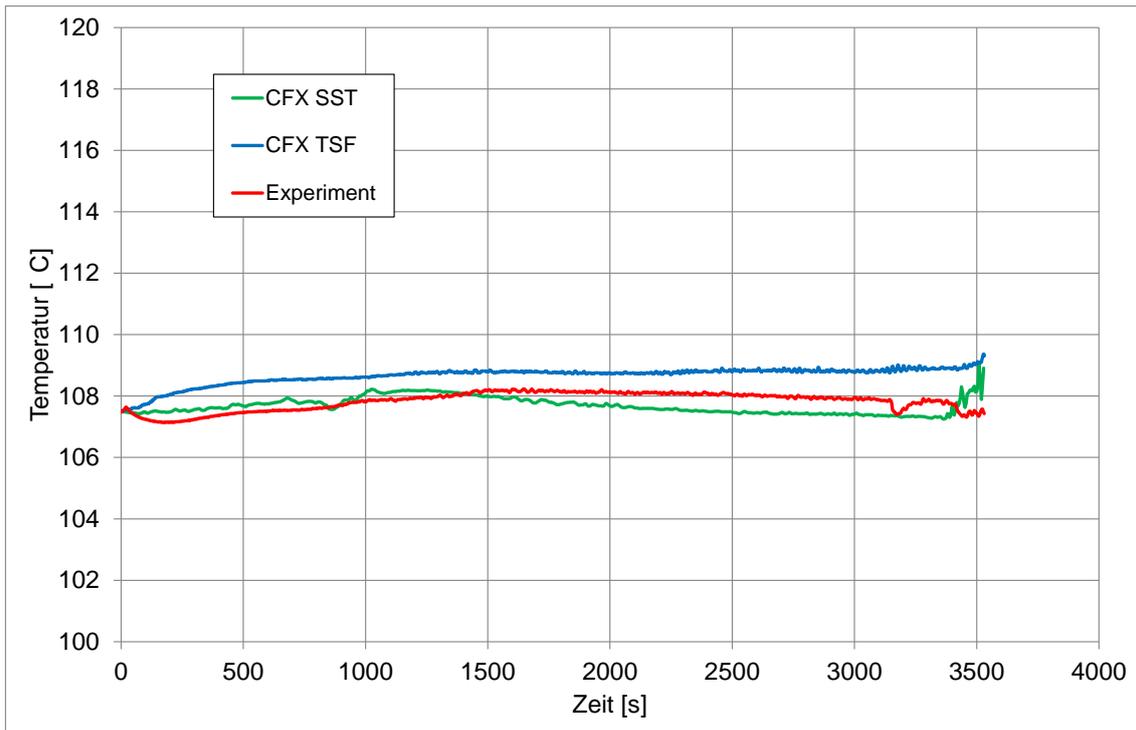


Abb. 4.3-37 Einfluss des Turbulenzmodells auf den Temperaturverlauf (Messpunkt: MTG D1T 20)

- **Vergleich der Rechenzeiten**

In Abb. 4.3-38 sind die Rechenzeiten für die unterschiedlichen Turbulenzmodelle dargestellt. Es zeigt sich wiederum, dass das TSF-Modell wesentlich mehr Rechenzeit als das SST-Modell benötigt. Mit dem SST-Modell hat die Berechnung des SETH-Versuches 21,5 CPU-Stunden benötigt, das TSF-Modell benötigte 180,6 CPU-Stunden, was etwa dem acht- bis neunfachen an Rechenzeit entspricht.

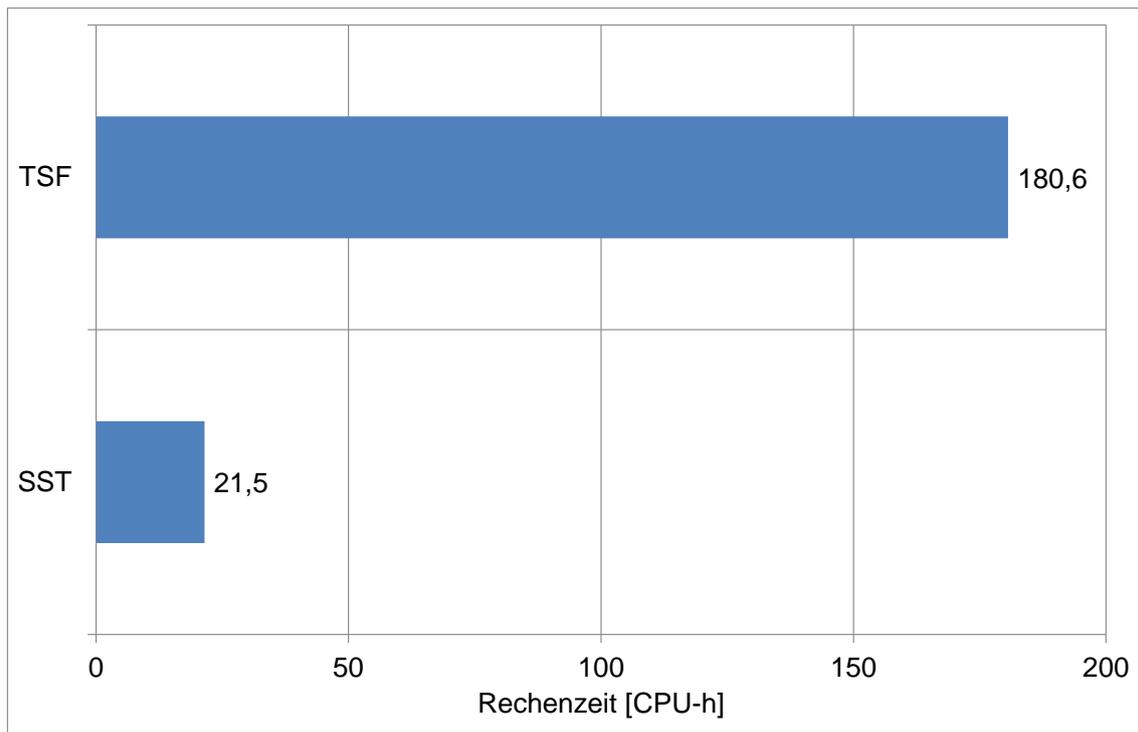


Abb. 4.3-38 Vergleich der Rechenzeiten für die unterschiedlichen Turbulenzmodelle

#### 4.3.5 Zusammenfassung

Das PANDA Experiment SETH ST2-1 konnte erfolgreich mit CFX nachgerechnet werden. Mit einer bestimmten Parameterkombination (Rechnung CFX 15\_013, siehe Tab. 4.3-3) konnte sowohl der Verlauf der Heliumkonzentration als auch der Temperaturverlauf an zahlreichen Messpunkten mit hoher Genauigkeit berechnet werden.

Im Rahmen einer Parametervariation wurden sowohl der Aspekt der Gitterabhängigkeit, als auch der Einfluss eines (thermischen) Strahlungsmodells und der Einfluss von unterschiedlichen Turbulenzmodellen untersucht. Es zeigte sich in den Ergebnissen noch eine geringe Gitterabhängigkeit. Die Abhängigkeit des Schichtungsabbaus vom eingestellten DampfabSORPTIONSKoeffizienten ist ziemlich stark. Für diesen Koeffizienten konnten keine befriedigenden Literaturwerte ermittelt werden. Bei den Parametervariationen mit CFX stellte sich aber ein Wert von etwa  $0,1 \text{ m}^{-1}$  als gut geeignet heraus. Der Vergleich der Turbulenzmodelle SST und TSF hat gezeigt, dass die Verwendung des TSF-Turbulenzmodells zu vergleichbaren Ergebnissen wie SST-Modell führt, allerdings bei einer wesentlich höheren Rechenzeit.

## **4.4 Simulation des Phänomens der Bildung und Auflösung von Gasschichtungen im Sicherheitsbehälter (Nachrechnung des THAI Experimentes TH-22)**

### **4.4.1 Zielsetzung**

Im Folgenden soll die Nachrechnung des THAI Versuches TH-22 erläutert werden. Da zu diesem Versuch im Vorläuferprojekt RS1181 bisher nur eine blinde Vorrausrechnung vorlag, wird diese zunächst mit den nun vorliegenden experimentellen Werten verglichen. Durch die Variation von Simulationsparametern wurde eine verbesserte Nachrechnung zu TH-22 (mit dem SST-Turbulenzmodell) erstellt und nachfolgend beschrieben. Weiterhin kann die genauere Analyse des Versuches TH-22 zu einem Erfahrungsgewinn im Hinblick auf die Berechnung des THAI-Versuches TH-24 „Auflösung Luft-Dampf-Stratifikation“ / CV5 aus THAI-4) dienen.

### **4.4.2 Einleitung**

Im THAI Experiment TH-22 wird die Auflösung einer Leichtgasschicht (aus Helium) durch natürliche Konvektion untersucht. Die natürliche Konvektion wird durch eine unterschiedliche Beheizung des THAI-Behälters erzeugt (unten heiß, oben kalt). Im Sommer 2010 gab es einen Simulationsbenchmark mit blinden Vorrausrechnungen. Der Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen und den experimentellen Daten zeigte unterschiedliche Probleme bei den CFD-Berechnungen. Insgesamt wurden fünf blinde CFX-Simulationen durch ANSYS, FZJ, GRS, IKE und KIT eingereicht. Drei dieser Simulationen erreichten nicht den Zeitpunkt  $t = 88\ 000\ \text{s}$ , welcher auch nur ein Sechstel der Auflösungszeit der Heliumschichtung repräsentiert (siehe Abb. 4.4-1). Aus diesen Berechnungen lassen sich schwer Aussagen zur Validität der CFX Modelle ableiten. Die blinde Berechnung der GRS erreichte zwar das Ende der Berechnungsdauer bei  $93\ 000\ \text{s}$ , gab aber die Auflösung der Heliumschichtung nicht wieder. Nur in der blinden Berechnung des KIT zeigte sich eine Auflösung der Helium-Wolke, die aber deutlich verzögert im Vergleich zum Experiment war (siehe Abb. 4.4-1).

In offenen Nachrechnungen wurde durch die GRS der Einfluss unterschiedlicher Simulationsparameter auf die Simulationsergebnisse untersucht. Die Ergebnisse dieser Nachrechnungen werden in den folgenden Abschnitten diskutiert.

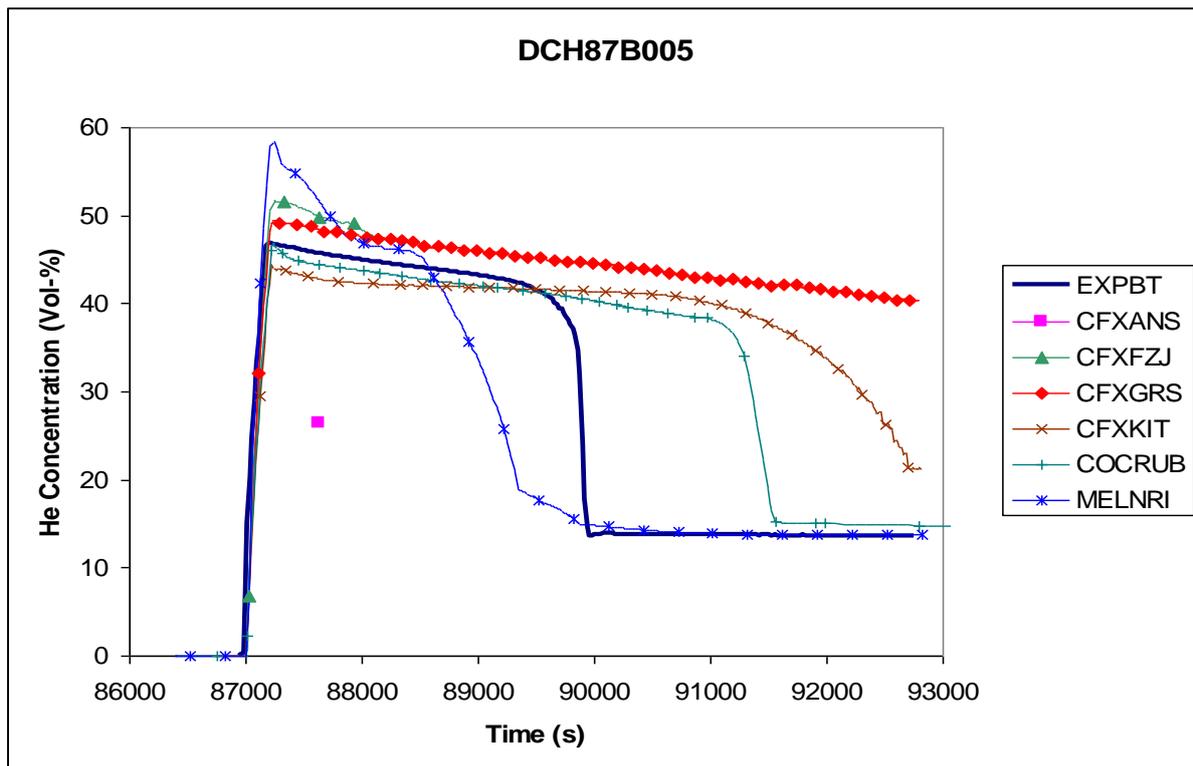


Abb. 4.4-1 Ergebnis des blinden TH-22 Benchmarks: Heliumkonzentration in 8,7 m Höhe (Bild aus /FIS10/)

#### 4.4.3 Start- und Randbedingungen

In der offenen Nachrechnung des Versuchs TH-22 wurden durch die GRS mehrere Simulationsparameter verändert. In Tab. 4.4-1 findet sich ein Vergleich der Berechnungsparameter für die blinde und für die offene Simulation.

In der blinden Vorrausrechnung des Experimentes TH-22 stellte das Gitter nur eine Hälfte (180°) des THAI-Behälters dar und es wurde eine Symmetrierandbedingung gewählt. In der offenen Nachrechnung des Experimentes wurde die volle 360° Geometrie verwendet. Der Innenzylinder wurde in der blinden Rechnung nur durch eine (adiabate) Randbedingung dargestellt. Er wurde in der offenen Rechnung explizit vernetzt. Weiterhin wurde das Netz deutlich verfeinert und zwar von 36 490 Elementen in der blinden Rechnung auf 746 751 Elemente in der offenen Rechnung. Hierbei wurde das Netz insbesondere in der Nähe der Behälterwände verfeinert, um den Wärmeübergang besser abzubilden und es wurde an der Helium/Luft-Grenzfläche verfeinert, um den Konzentrationsgradienten aufzulösen.

Das Material des Behälterdeckels wurde von Cr-Ni-Stahl in Stahl 35 geändert und das Turbulenzmodell wurde von k-epsilon zum SST Modell verändert. In der offenen Simulation wurde der Diffusionskoeffizient Helium/Luft von  $1,75E-5 \text{ m}^2/\text{s}$  auf  $9,0E-5 \text{ m}^2/\text{s}$  erhöht. Dieser neue Wert entspricht besser den Werten, die in der Literatur zu finden sind /POL01/.

In der blinden Simulation wurde die Aufwärmphase (0 – 24 h) durch eine stationäre Rechnung ohne Wärmeaustausch mit der Raumluft außerhalb des THAI-Behälters simuliert. Die Heliumeinspeisung und die Schichtungsauflösung wurden durch eine transiente Simulation abgebildet. Hierbei wurde ein Wärmetransfer mit der Raumluft (23 °C) durch einen Transferkoeffizienten von  $5 \text{ W/m}^2\text{K}$  berücksichtigt. Die Stahlwände des THAI-Behälters wurden dabei explizit durch das CFD-Gitter dargestellt, während die Mineralwolle-Isolation außen implizit durch den Wärmetransferkoeffizienten berücksichtigt wurde (siehe auch Tab. 4.4-1). Der Wärmetransferkoeffizient ist sowohl für die Aufwärmphase als auch für die Einspeise- und Auflösephase der gleiche. Die oben genannte Vorgehensweise in der blinden Simulation stellt also eine falsche Modellierung dar. Dieser Fehler wurde in der offenen Nachrechnung korrigiert. In der offenen Nachrechnung wurden für alle Phasen die gleichen Wärmetransferkoeffizienten verwendet. Hierbei wurde versucht, ein Optimum für die Wand- und Lufttemperaturen am Ende der Aufwärmphase (für  $t = 24 \text{ h}$ ) zu finden. Hierzu wurden in der offenen Nachrechnung die unbeheizten Behälterwände noch einmal in verschiedene Bereiche unterteilt (Deckel, Boden und sonstige unbeheizte Wände), für die jeweils ein eigener Wärmetransferkoeffizient ermittelt wurde. Diese Aufteilung ist in Abb. 4.4-2 dargestellt.

Tab. 4.4-1 Veränderung der Simulationsparameter

	<b>Blinde Simulation</b>	<b>Offene Simulation</b>
Geometrie	180° (halber THAI-Behälter + Symmetrie- Randbed.)	360° (kompletter THAI-Behälter)
Innerer Zylinder	Adiabatische Randbed.	Vernetzt
Elementzahl	36 490	746 751
Material des Behälterdeckels	Cr-Ni-Stahl	Stahl 35
Turbulenz-Modell	k-epsilon	SST
Diffusionskoeffizient Helium	$1,75 \text{ e-}5 \text{ [m}^2/\text{s]}$	$9,0 \text{ e-}5 \text{ [m}^2/\text{s]}$
Wärmestrahlungsmodell	Ohne	Ohne

		Blinde Simulation	Offene Simulation
Startwerte		Druck: 0,998 bar / mittlere Gastemperatur: 17,7 °C	
Temperatur Heizmantel		119 °C	
Temperatur Kühlmantel		41 °C	
Wärmetransfer-Koeffizienten			
Aufwärmphase	Unbeheizte Wände	0,00 [W/m <sup>2</sup> K]	0,08 [W/m <sup>2</sup> K]
	Deckelisololation	0,00 [W/m <sup>2</sup> K]	2,00 [W/m <sup>2</sup> K]
	Isolation Boden	0,00 [W/m <sup>2</sup> K]	0,70 [W/m <sup>2</sup> K]
Helium-Injektionsphase	Unbeheizte Wände	5,00 [W/m <sup>2</sup> K]	0,08 [W/m <sup>2</sup> K]
	Deckelisololation	5,00 [W/m <sup>2</sup> K]	2,00 [W/m <sup>2</sup> K]
	Isolation Boden	5,00 [W/m <sup>2</sup> K]	0,70 [W/m <sup>2</sup> K]

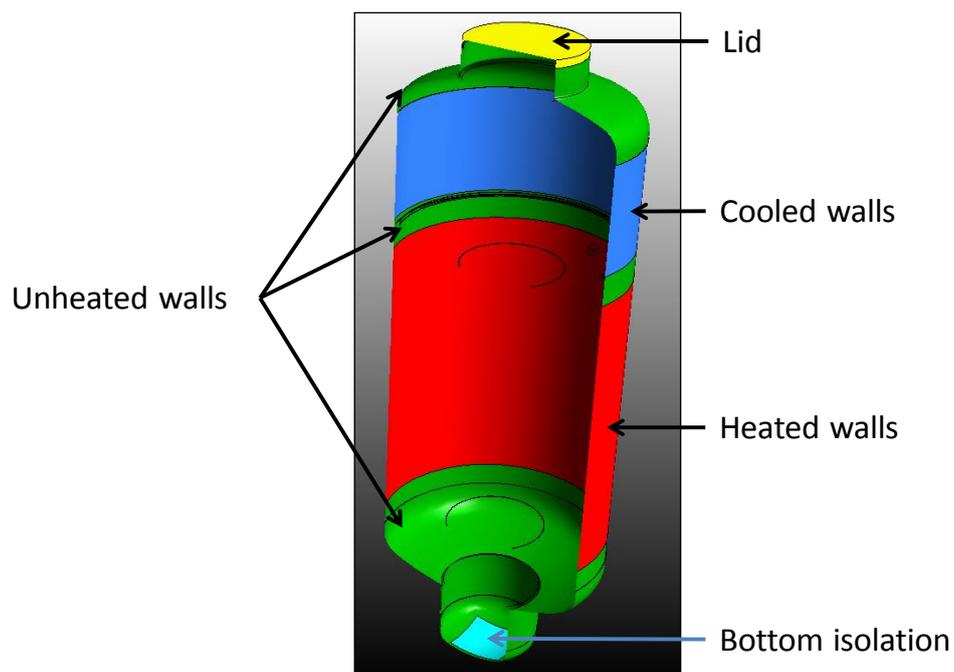


Abb. 4.4-2 Unterteilung der Wände für die unterschiedlichen Wärmetransferkoeffizienten

#### 4.4.4 Vergleich von blinder und offener Rechnung mit den experimentellen Daten

Die von der GRS durchgeführten Simulationen bestehen aus zwei Teilen. Zunächst wird die Aufwärmphase des THAI-Behälters durch eine stationäre Berechnung simuliert. Das Ergeb-

nis dieser Rechnung dient dann als Startpunkt für die Berechnung der Heliumeinspeisung und –verteilung durch eine instationäre Rechnung. Beide Teile werden im Folgenden in einzelnen Kapiteln diskutiert.

#### **4.4.4.1 Phase 1: Aufwärmen des THAI-Behälters**

Die Aufwärmphase wurde durch eine stationäre Rechnung abgebildet. In Abb. 4.4-3 findet sich ein beispielhaftes Ergebnis der CFX-Berechnungen. Hier kann man sehen wie sich Temperaturen und Strömungswirbel im THAI-Behälter verteilen. Dieses Bild stellt aber nur eine Momentaufnahme dar, die lokalen Temperaturen und Strömungsgeschwindigkeiten zeigen gewisse Schwankungen. Abb. 4.4-4 zeigt die vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten (in der Höhe von 6,4 m) die gegen den Radius aufgetragen wurden. Die Fehlerbalken stellen ein Maß für die lokalen Schwankungen dar (berechnet wurde die Standardabweichung). Die Veränderung der Simulationsparameter in der offenen Nachrechnung zeigt nur geringfügige Verbesserungen im Vergleich zur blinden Vorrausrechnung.

Abb. 4.4-5 zeigt ein Temperaturprofil in der Gasphase am Ende der Aufwärmphase ( $t = 24$  h). Die blinde Berechnung zeigt eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Schaut man sich aber die Wandtemperaturen am Ende der Aufwärmphase an (siehe Abb. 4.4-6), so kann man (für die blinde Berechnung) eine deutliche Abweichung von den experimentellen Werten erkennen. In der offenen Nachrechnung wurde versucht die simulierten Wandtemperaturen den experimentellen Werten anzunähern, was aber zur Folge hatte, dass die simulierten Gastemperaturen (Abb. 4.4-5) nun etwas stärker von den experimentellen Werten abweichen. Eine gleichzeitige Übereinstimmung sowohl von Gas- als auch von Wandtemperaturen mit den experimentellen Werten konnte in der Nachrechnung nicht erreicht werden. Der Grund hierfür ist noch unklar.

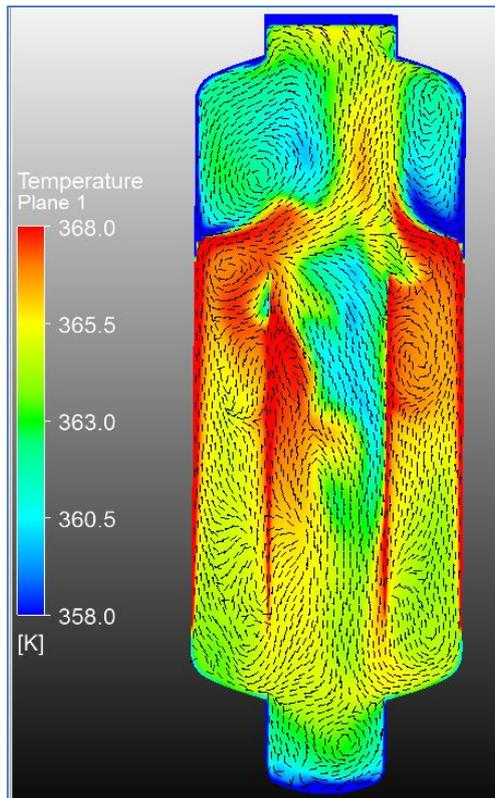


Abb. 4.4-3 Schnitt durch den THAI-Behälter: Temperaturen und Strömungsvektoren

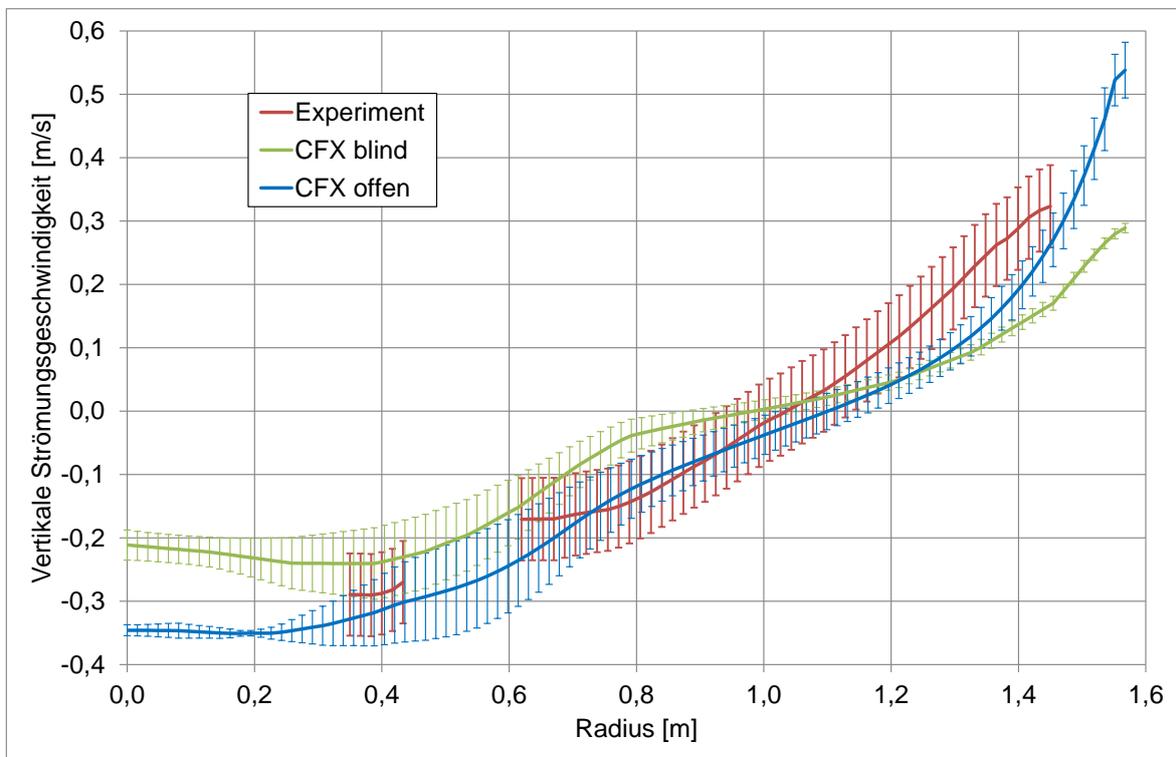


Abb. 4.4-4 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten in 6,4 m Höhe am Ende der Aufwärmphase ( $t = 24$  h)

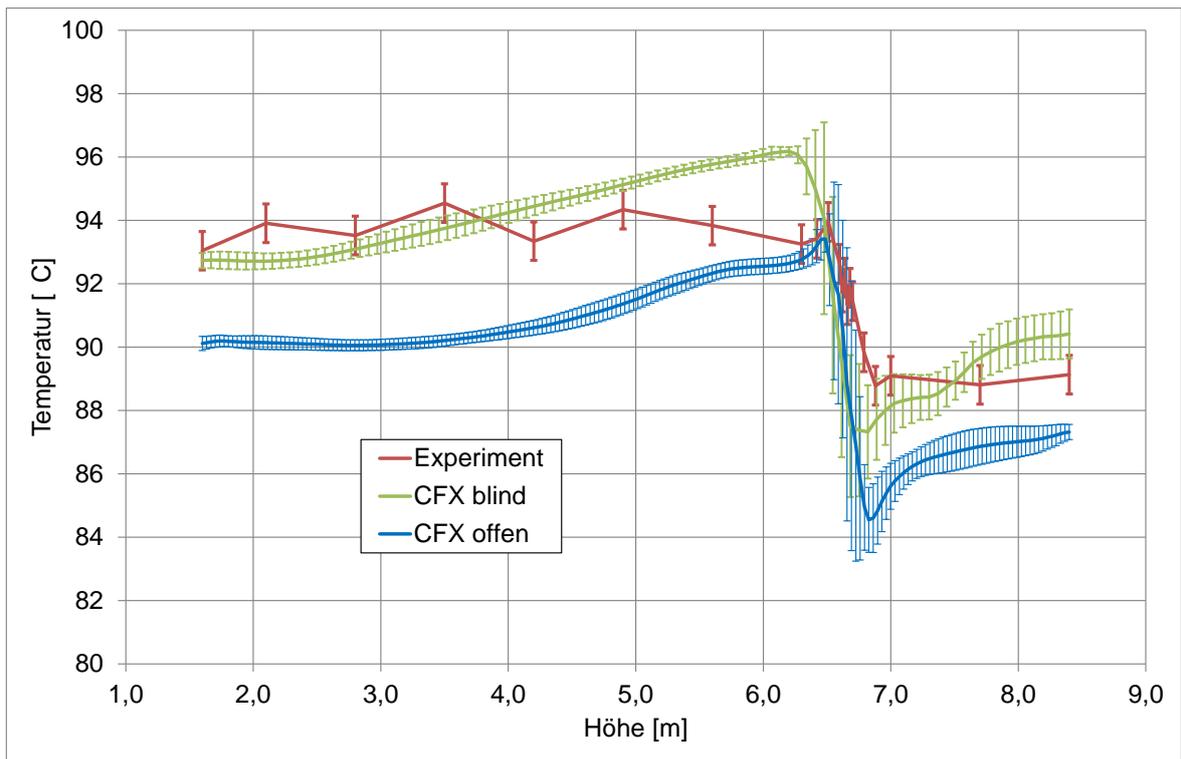


Abb. 4.4-5 Gastemperaturprofil am Ende der Aufwärmphase (t = 24 h)

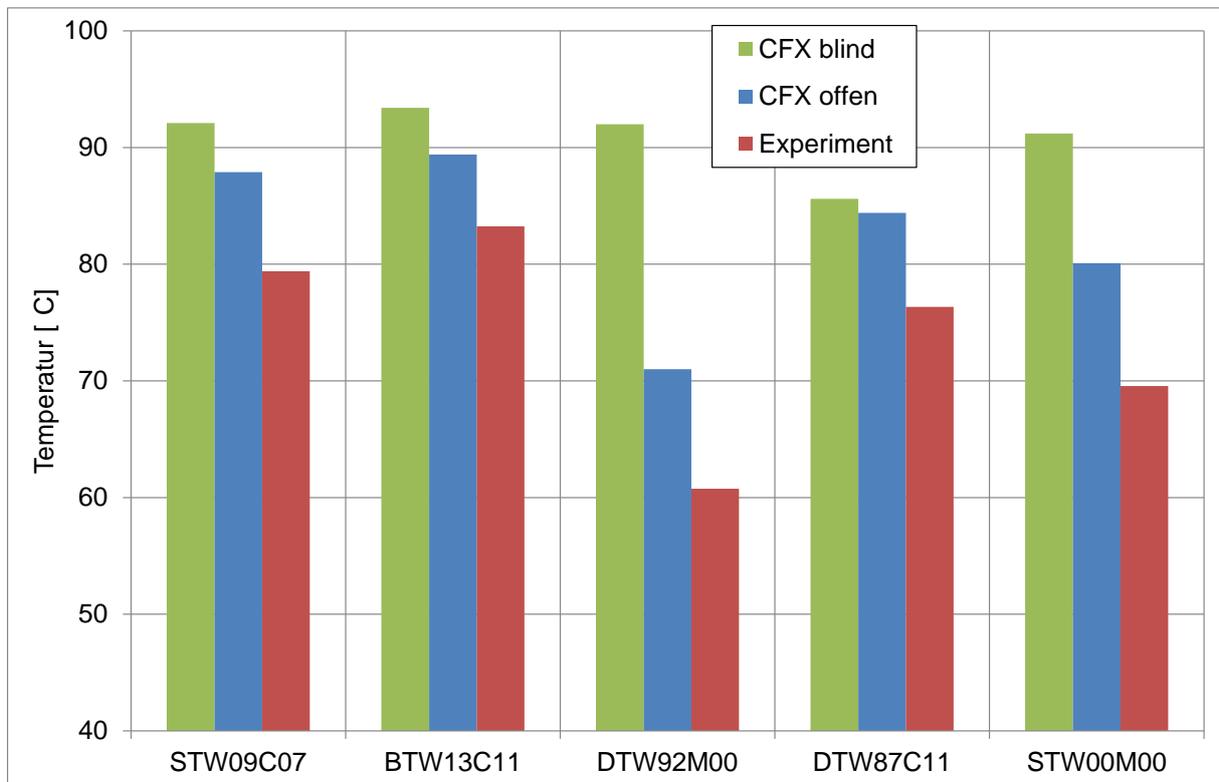


Abb. 4.4-6 Wandtemperaturen (innen) am Ende der Aufwärmphase (t = 24 h)

#### **4.4.4.2 Phase 2: Heliumeinspeisung und Schichtungsaflösung**

Die Phase der Heliumeinspeisung und Schichtungsaflösung wurde durch eine transiente Simulation abgebildet. Die Ergebnisse dieser Rechnungen (Druck, Strömungsgeschwindigkeiten, Heliumkonzentrationen und Temperaturen) werden in den folgenden Kapiteln mit den experimentellen Werten verglichen.

#### **4.4.4.3 Druckverlauf**

In Abb. 4.4-7 werden der berechneten und der gemessene Druckverlauf miteinander verglichen. Zum Zeitpunkt der Heliuminjektion (ca. bei 87 000 s) berechnen beide Simulationen einen Druckanstieg der dem experimentellen Druckanstieg ähnlich ist. Der deutliche Druckabfall nach der Heliumeinspeisung im Zeitraum  $87\ 000\ \text{s} < t < 93\ 000\ \text{s}$  wird von den beiden Simulationen jedoch nicht wiedergegeben. Ursache hierfür ist wahrscheinlich, dass in diesen Simulationen das Gas-Sampling-System (GfG und Massenspektrometer) nicht berücksichtigt wurden. Diese Gas-Sampling-Systeme entnehmen Gasproben aus dem THAI-Behälter wodurch der Druck abgesenkt wird. In einer Sensitivitätsstudie wurde der Einfluss dieses Sampling-Systems untersucht, darauf wird weiter unten noch eingegangen.

Zusätzlich kann sich auch der Wärmetransfer von der Behälteratmosphäre an die Behälterwände ändern, wenn sich die Strömung innerhalb des THAI-Behälters ändert. Dieses kann über einen verstärkten oder verringerten Wärmeaustausch mit der Außenseite zu einer Veränderung des Druckniveaus führen.

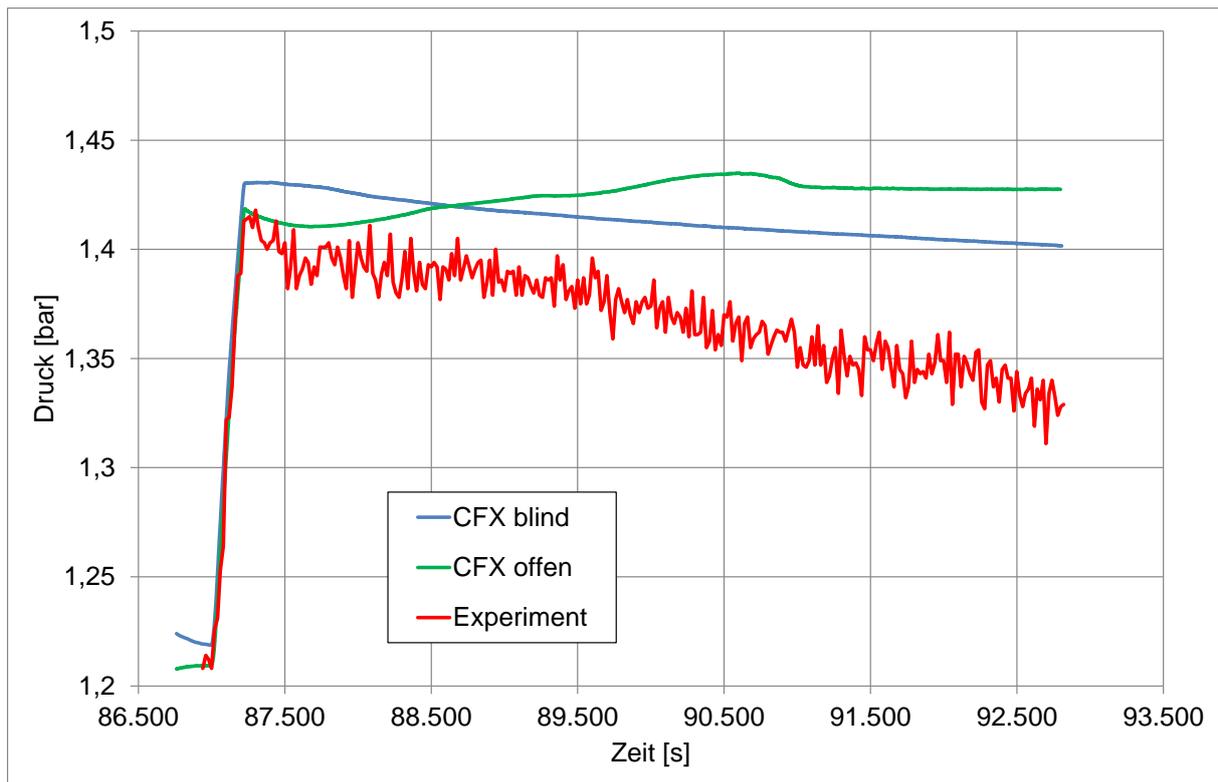


Abb. 4.4-7 Vergleich des Druckverlaufs an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

#### 4.4.4.4 Strömungsgeschwindigkeiten

Die experimentellen Messpunkte zeigen, dass sich unmittelbar nach der Heliumeinspeisung (bei  $t = 87\ 000\ \text{s}$ ) die Strömungsgeschwindigkeiten deutlich reduzieren und dass bei etwa  $t = 88\ 500\ \text{s}$  die natürliche Konvektion wieder einsetzt (siehe Abb. 4.4-8 bis Abb. 4.4-10). In der blinden Simulation konnte dieses Wiedereinsetzen der natürlichen Konvektion nicht beobachtet werden. Dieser Effekt des Wieder Einsetzens der natürlichen Konvektion konnte in der offenen Nachrechnung abgebildet werden. Dieses ist eine deutliche Verbesserung im Vergleich zur blinden Berechnung, auch wenn das Wiedereinsetzen in der offenen Nachrechnung noch verzögert auftritt.

Um die Simulationen besser mit der experimentellen Messfrequenz vergleichen zu können, wurden die Simulationsdaten auf einen Datenpunkt in zwanzig Sekunden reduziert. Das entspricht der experimentellen Messfrequenz und die Simulationsdatenpunkte wurden durch eine zeitliche Mittelung über die CFX-Werte jeweils in einem Zeitraum von zwanzig Sekunden berechnet.

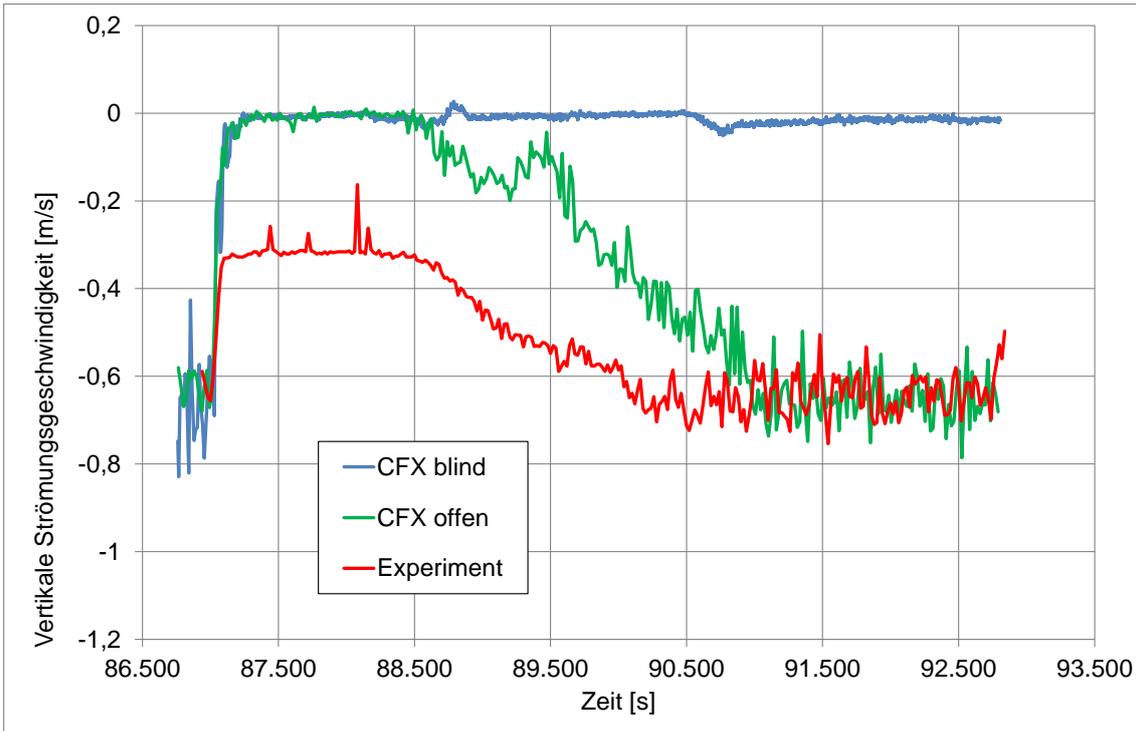


Abb. 4.4-8 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT58M00 (Höhe: 5,8 m)

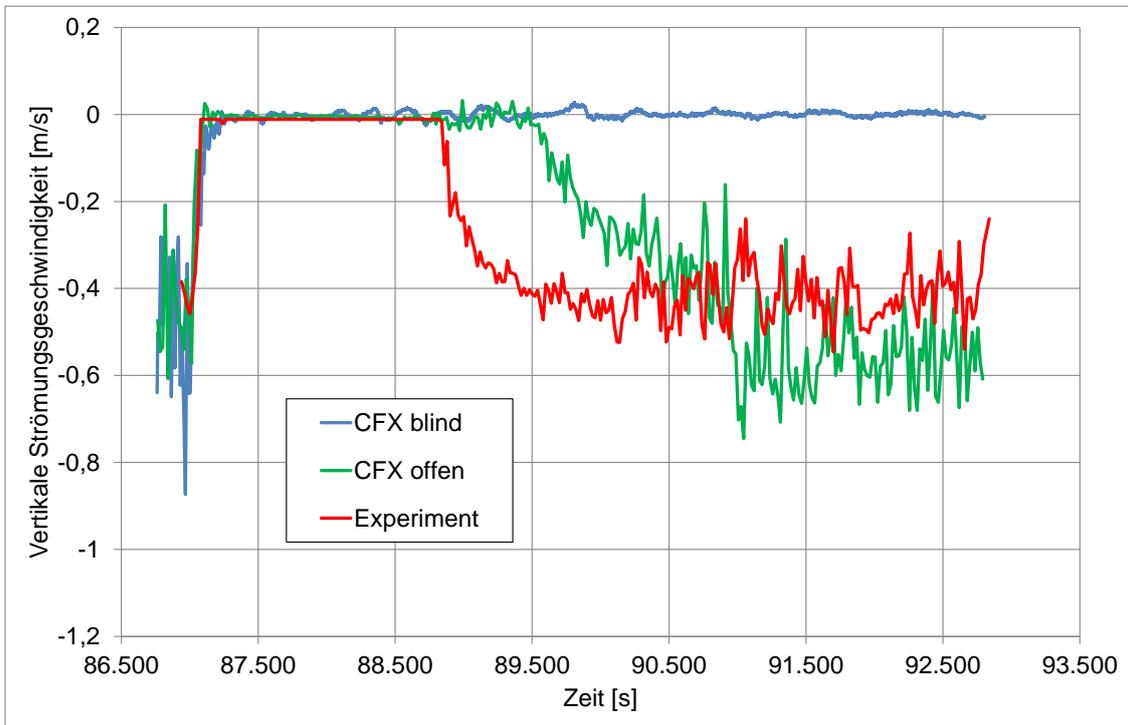


Abb. 4.4-9 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT28M00 (Höhe: 2,8 m)

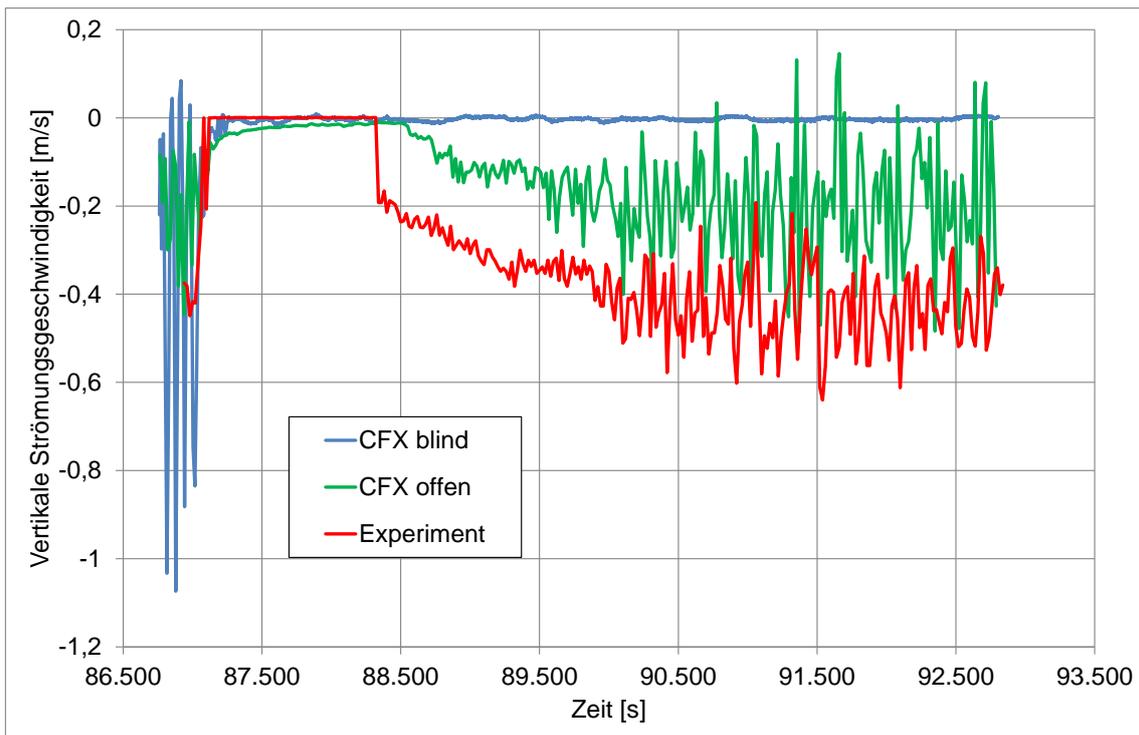


Abb. 4.4-10 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an der Messstelle CVT28F06 (Höhe 2,8 m)

#### 4.4.4.5 Helium-Konzentrationen

Der zeitliche Verlauf der Heliumkonzentrationen wird in Abb. 4.4-11 bis Abb. 4.4-14 dargestellt. In den blinden Simulationen wurde kein Wiedereinsetzen der Naturkonvektion beobachtet (ähnlich wie bei den Strömungsgeschwindigkeiten). Bei den blinden Rechnungen hat nur die Diffusion einen - wenn auch geringen – Einfluss auf die Heliumkonzentration an den unterschiedlichen Messstellen gehabt. Wie man an der Messstelle in 2,8 m Höhe beobachten kann, gelangt kein Helium aus der oberen Heliumschicht in den unteren THAI-Behälter (siehe Abb. 4.4-14).

In der offenen CFX Nachrechnung zeigt sich ein Wiedereinsetzen der Konvektion. Dieses zeigt sich z. B. durch einen plötzlichen Abfall der Heliumkonzentration an den Messpunkten im Bereich von 8,7 m bis 7,0 m Höhe (siehe Abb. 4.4-11 bis Abb. 4.4-13). An dem tieferliegenden Messpunkt in 2,8 m Höhe kann ein Anstieg der Heliumkonzentration beobachtet werden (siehe Abb. 4.4-14). Für die offene Nachrechnung zeigt sich hier also eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, auch wenn das Einsetzen der Konvektion gegenüber dem Experiment noch verzögert ist. Im Experiment dauert es etwa

3100 s bis zur vollständigen Auflösung der Heliumschicht, während es in der offenen Nachrechnung noch ca. 4000 s dauert.

Da in der offenen Nachrechnung mehrere Simulationsparameter verändert wurden, ist an dieser Stelle noch nicht klar, welcher dieser Parameter den größten Einfluss auf das Wiedereinsetzen der Konvektion hat. Hierzu ist eine Sensitivitätsstudie zu den einzelnen Berechnungsparametern (Gitterfeinheit, Diffusionskonstante,...) notwendig. Diese wurde durchgeführt und sie wird in den späteren Abschnitten dieses Kapitels näher erläutert.

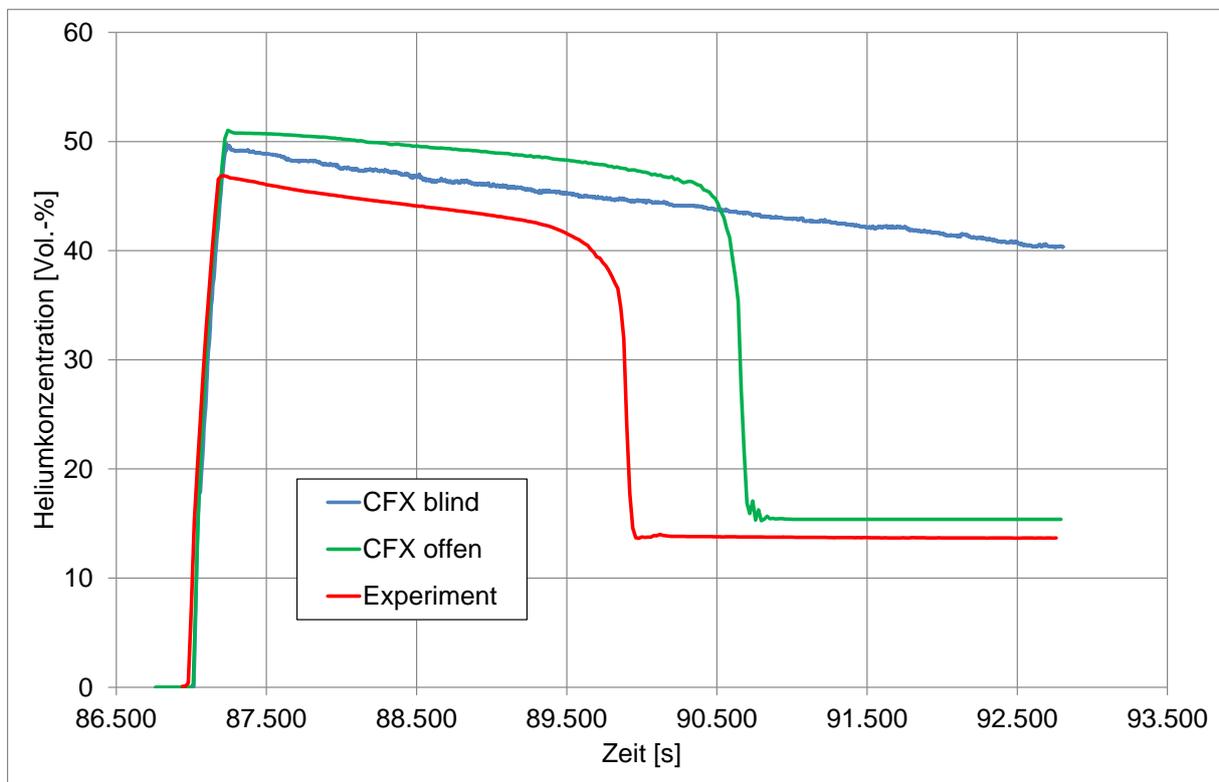


Abb. 4.4-11 Heliumkonzentration an Messstelle DCH87B005 (Höhe 8,7 m)

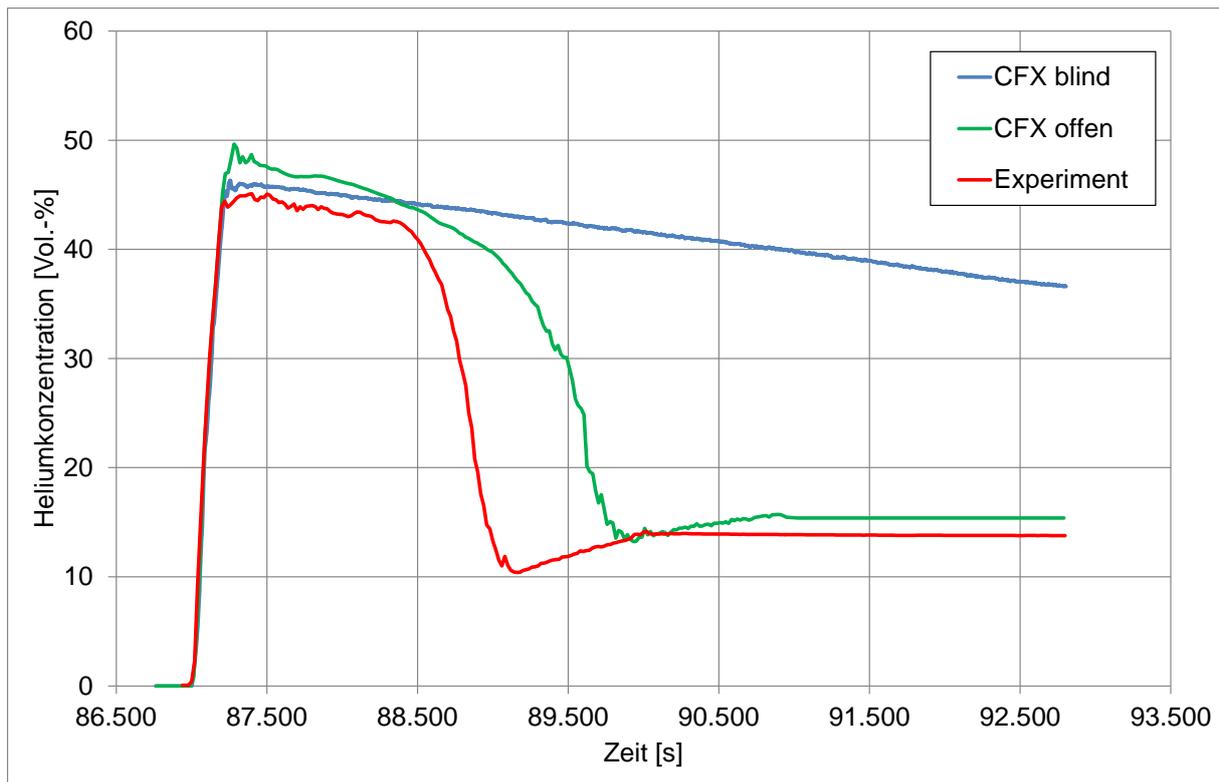


Abb. 4.4-12 Heliumkonzentration an Messstelle DCH77H11 (Höhe 7,7 m)

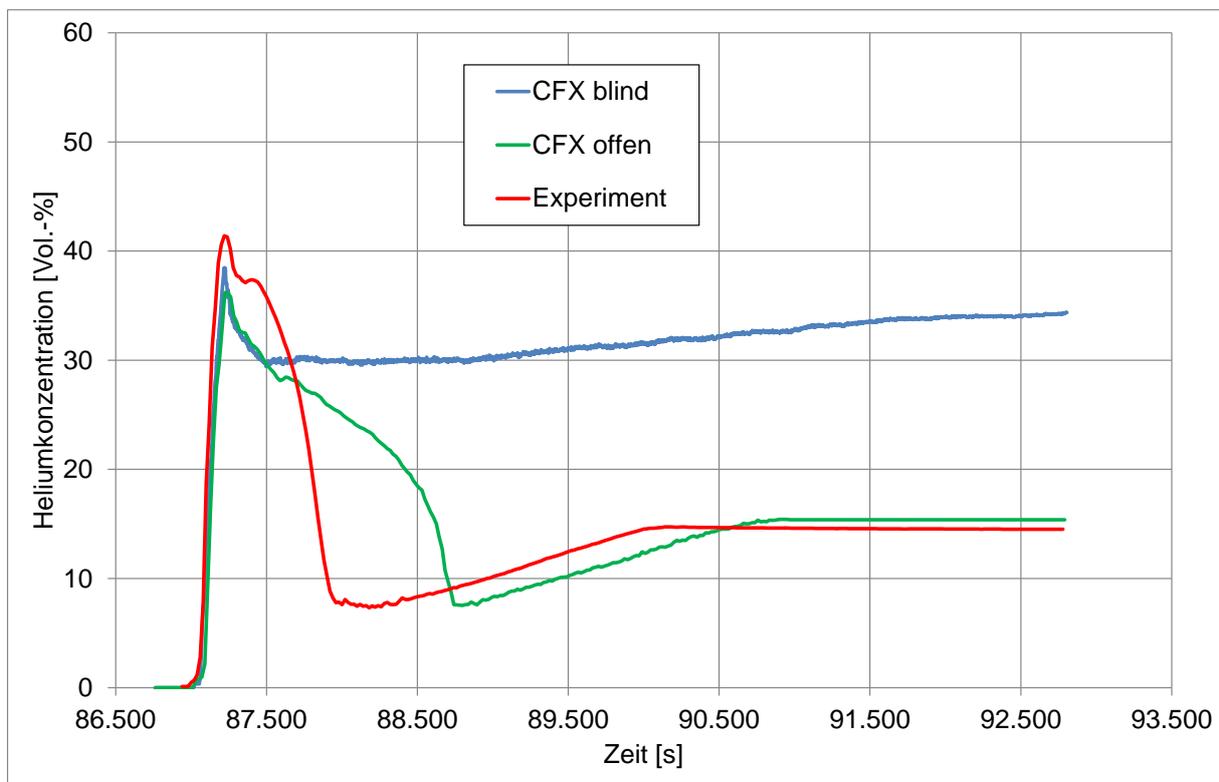


Abb. 4.4-13 Heliumkonzentration an Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m)

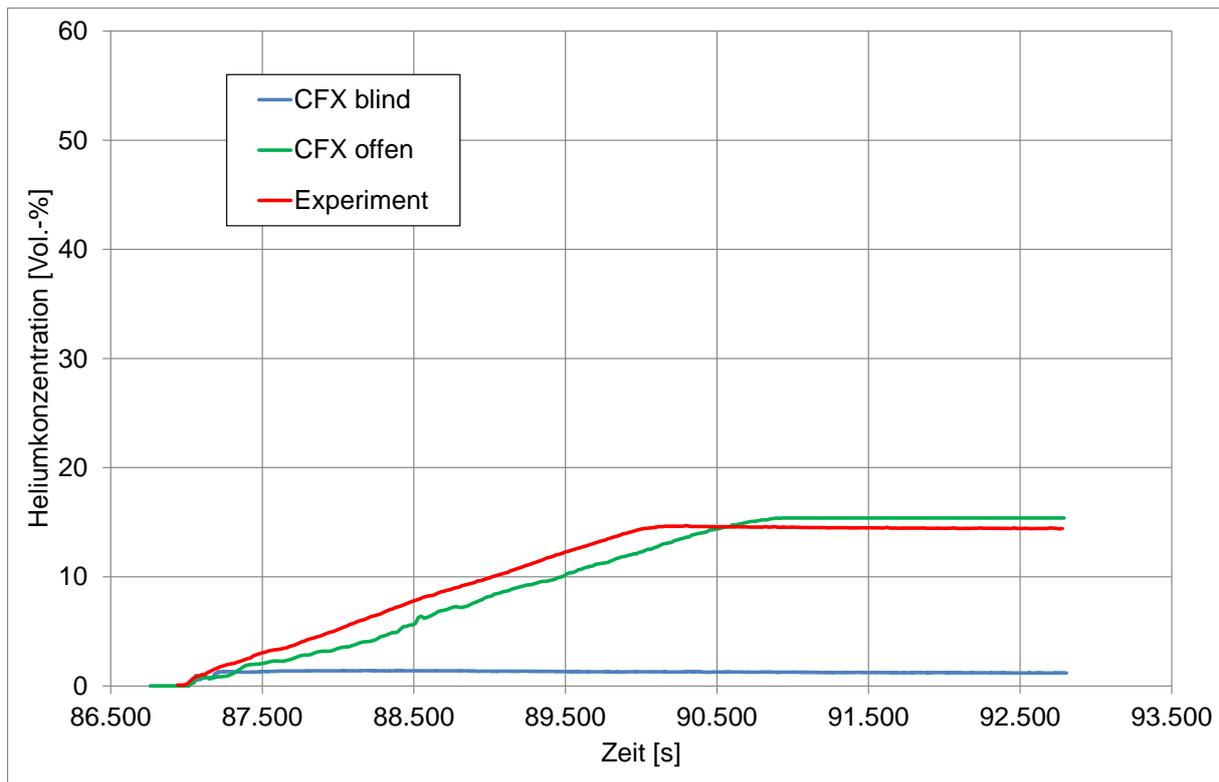


Abb. 4.4-14 Heliumkonzentration an Messstelle CCH28B005 (Höhe 2,8 m)

#### 4.4.4.6 Atmosphärische Gastemperaturen

Unmittelbar nach der Heliumeinspeisung ist der konvektive Wärmeaustausch zwischen der oberen und der unteren Behälteratmosphäre blockiert, da das Helium die Konvektionsströmung bremst. Dieses führt zu einem Temperaturabfall im oberen THAI-Behälter (siehe Abb. 4.4-15 und Abb. 4.4-16) und einem Temperaturanstieg im unteren THAI-Behälter (siehe Abb. 4.4-17 und Abb. 4.4-18). Nach der Auflösung der Heliumschichtung setzt die Konvektionsströmung wieder ein, der Wärmeaustausch kann wieder stattfinden und die Temperaturen kehren wieder zu ihren ursprünglichen Werten (vor der Heliumeinspeisung) zurück.

In der blinden Vorrausrechnung kommt es nicht zu einem Wiedereinsetzen der Konvektionsströmung und so bleibt der Wärmeaustausch blockiert und die Temperaturwerte kehren nicht wieder zu ihren ursprünglichen Werten zurück (siehe Abb. 4.4-15 bis Abb. 4.4-18). Die Beobachtungen für die offene Nachrechnung entsprechen den Beobachtungen bei den Strömungsgeschwindigkeiten und bei den Heliumkonzentrationen: Die offene Nachrechnung entspricht deutlich besser den experimentellen Werten. Es wird ein Wiedereinsetzen der Konvektionsströmung beobachtet, aber es zeigt sich eine Verzögerung gegenüber den experimentellen Werten.

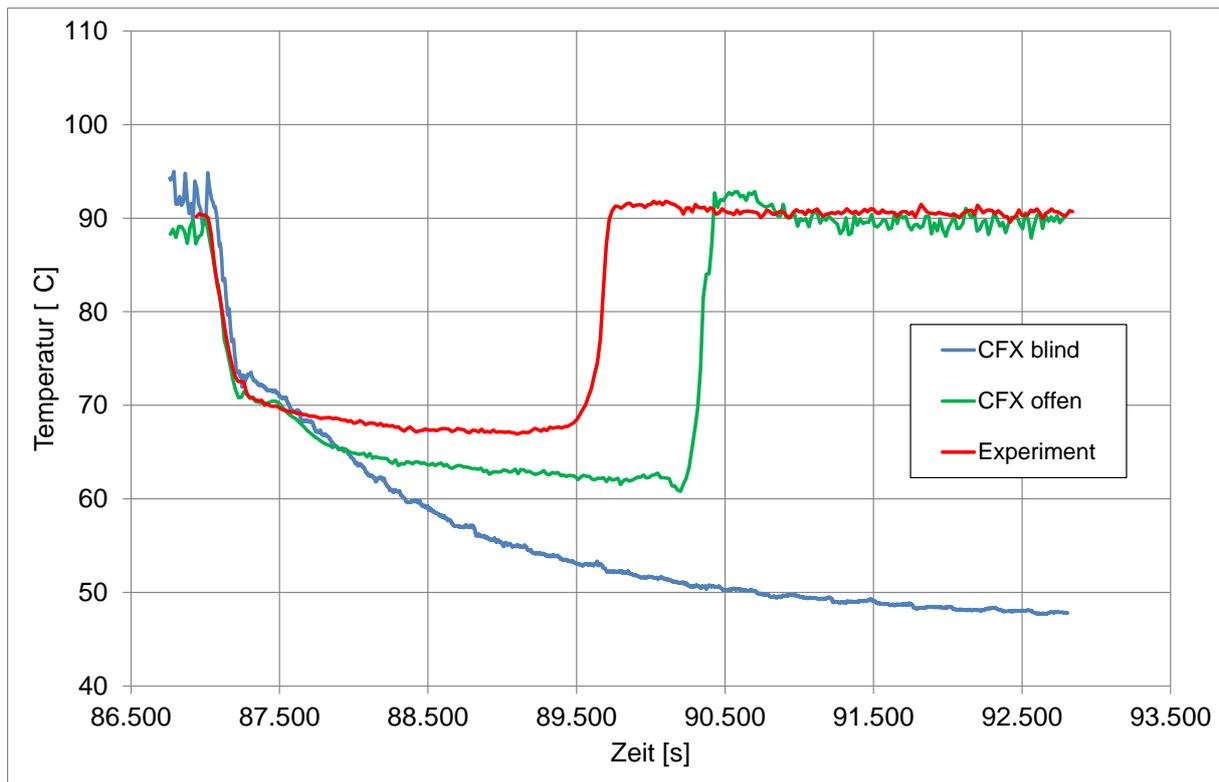


Abb. 4.4-15 Temperaturverlauf an Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m)

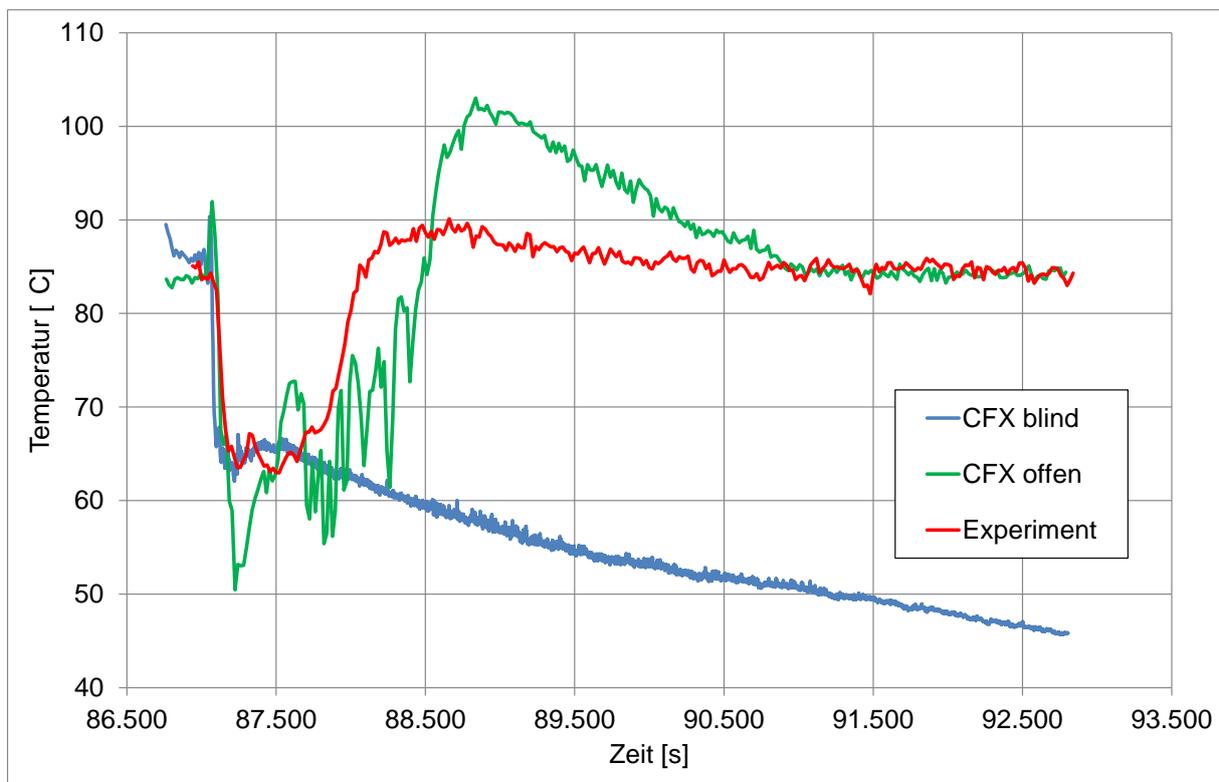


Abb. 4.4-16 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF70H15 (Höhe: 7,0 m)

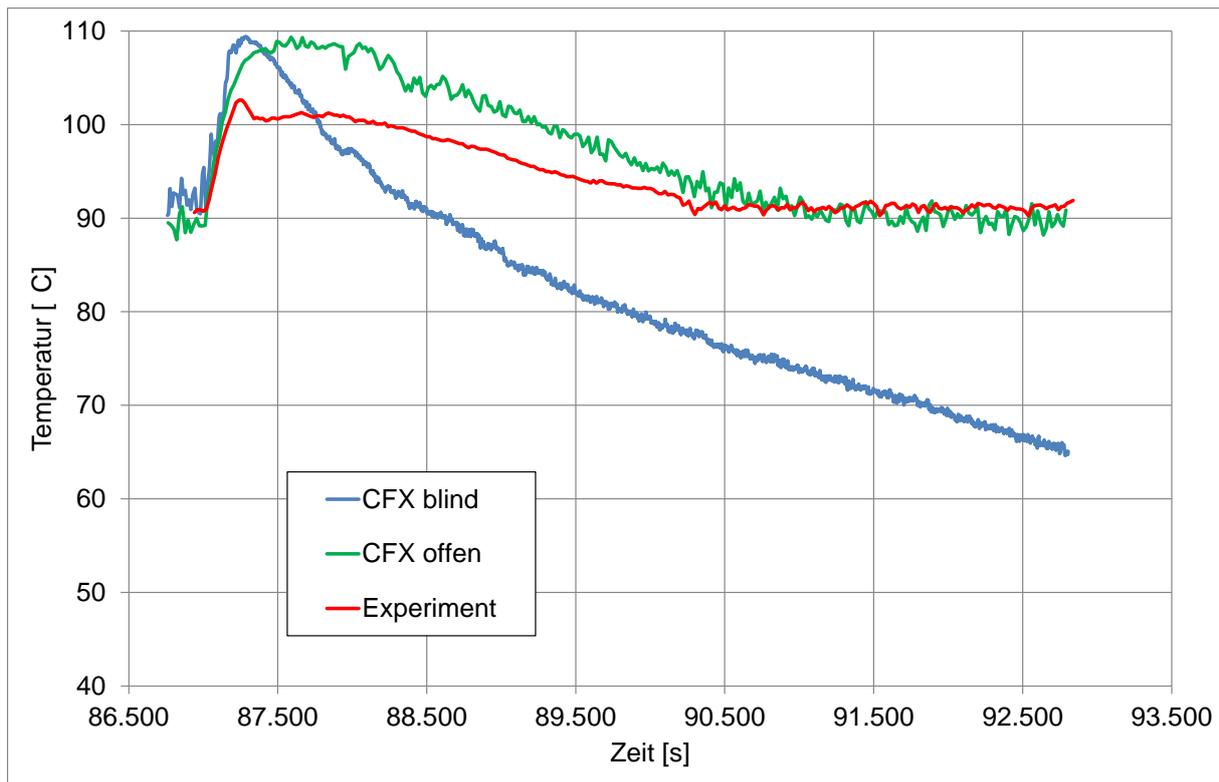


Abb. 4.4-17 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF63M00 (Höhe: 6,3 m)

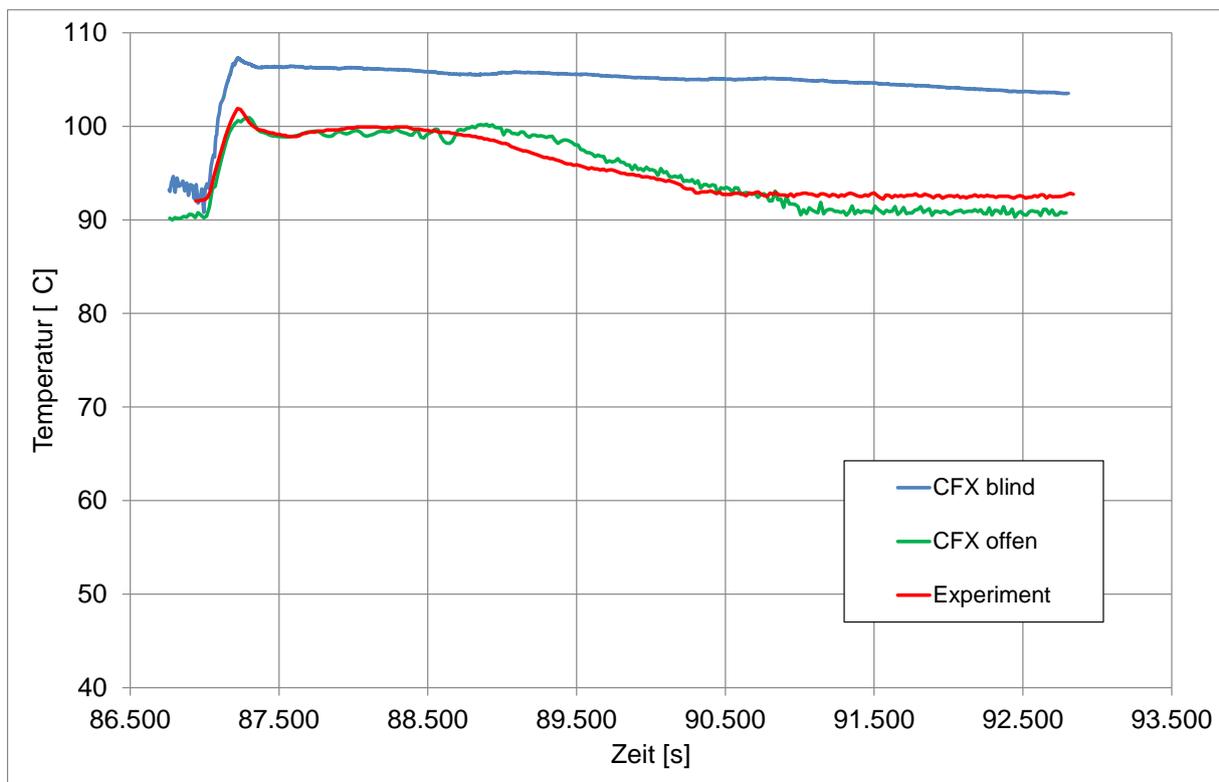


Abb. 4.4-18 Temperaturverlauf an Messstelle BTF21M00 (Höhe: 2,1 m)

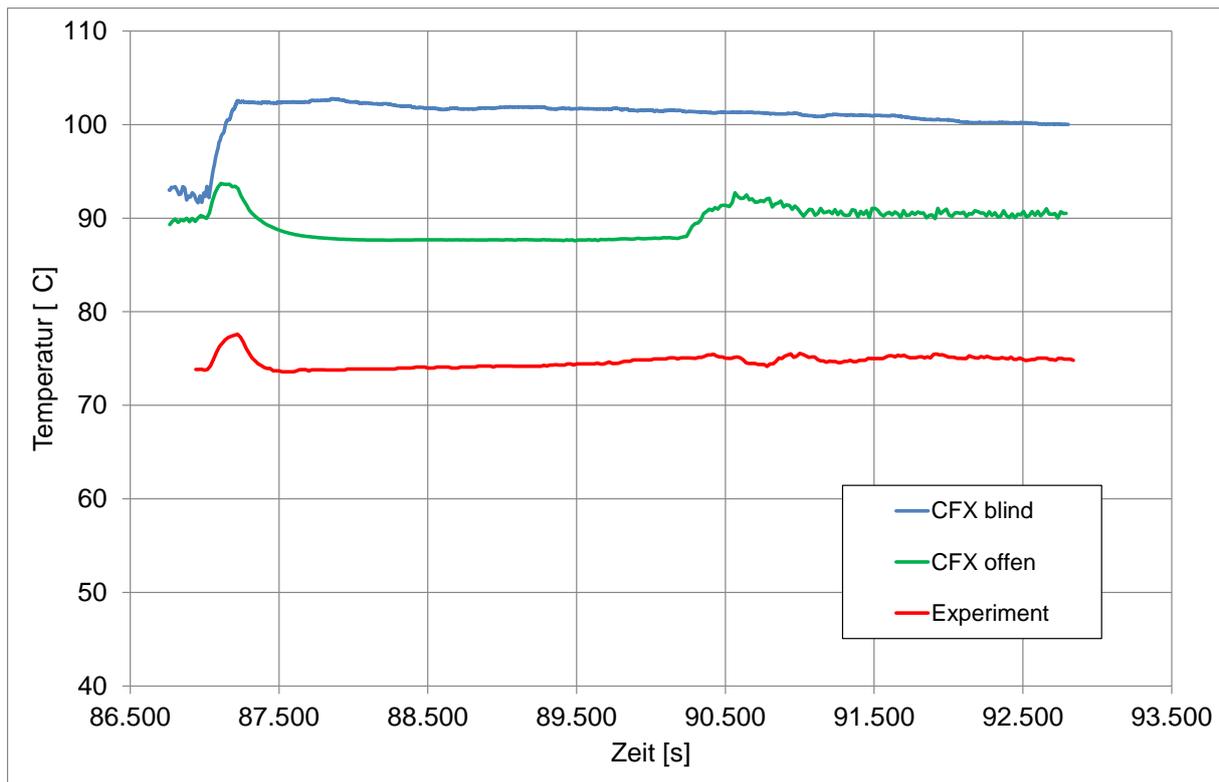


Abb. 4.4-19 Temperaturverlauf an Messstelle STC07M00 (Höhe: 0,7 m)

#### 4.4.5 Sensitivitätsanalyse

Die durchgeführte Sensitivitätsstudie zu den einzelnen Berechnungsparametern (Gitterfeinheit, Diffusionskonstante,...) wird nachfolgend erläutert (siehe Tab. 4.4-2).

Tab. 4.4-2 Parametervariationen in der Sensitivitätsstudie (Blinde Rechnung: CFX 07 002, Offene Rechnung / Referenzrechnung: 21 009)

Simulation number	Geometry	Inner cylinder	Lid	Number of elements	Turbulence	Diffusion	Heat Transfer Coefficients			Helium injection phase			Gas-Leakage	Max. Courant	Radiation	Abs. Air [m <sup>-1</sup> ]	Abs. Helium [m <sup>-1</sup> ]	Abs. Steel [m <sup>-1</sup> ]	# of rays	Schmidt-Nr.						
							Heat-up phase			Unheated walls											Lid			Bottom		
							Unheated walls	Lid	Bottom	Unheated walls	Lid	Bottom									Unheated walls	Lid	Bottom	Unheated walls	Lid	Bottom
						[m / s <sup>2</sup> ]	[W / m <sup>2</sup> K]	[W / m <sup>2</sup> K]	[W / m <sup>2</sup> K]	[W / m <sup>2</sup> K]	[W / m <sup>2</sup> K]	[W / m <sup>2</sup> K]														
CFX 07 002	180 °	Without	Cr Ni Steel	36.490	k-epsilon	1,75 e-5	0	0	0	5	5	5	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 08 003	360 °	With	Cr Ni Steel	153.733	SST	1,75 e-5	0	0	0	1	1	1	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 08 004	360 °	With	Cr Ni Steel	153.733	SST	9,0 e-5	0	0	0	1	1	1	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 08 006	360 °	With	Cr Ni Steel	153.733	SST	9,0 e-5	0	0	0	4	4	4	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 10 006	360 °	With	Steel 35	290.911	SST	9,0 e-5	0,19	3,3	0,19	0,19	3,3	0,19	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 11 002	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 14 002	360 °	With	Steel 35	1.145.179	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	GiG/Mass-Spectro	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 15 001	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	20 und 5	Ohne					2,0						
CFX 16 002	360 °	With	Steel 35	323.161	TSF	3,2 e-4	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	20 und 5	Ohne					2,0						
CFX 17 002	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Gray	0,01	0,01	1	8	2,0						
CFX 18 004	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	1,75 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 19 010	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Ohne					0,7						
CFX 20 002	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 21 009	360 °	With	Steel 35	746.751	SST	9,0 e-5	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 16 018	360 °	With	Steel 35	323.161	TSF	1,0 e-4	0,08	2	0,7	0,08	2	0,7	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 22 001	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 23 001	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 24 002	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	Without	Kein Limit	Gray	0,01	0	0,4	64	2,0						
CFX 25	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	7,35 e-5	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	Without	Kein Limit	Ohne					2,0						
CFX 24 004	360 °	With	Steel 35	323.161	SST	9,0 e-5	2,25	2,25	2,25	2,25	2,25	2,25	Without	Kein Limit	Gray	0,01	0	0,4	64	2,0						

#### 4.4.5.1 Einfluss der Gitterfeinheit

Um den Einfluss der Gitterfeinheit auf die Berechnungsergebnisse zu untersuchen wurden zwei Berechnungen mit unterschiedlicher Gitterfeinheit durchgeführt (mit 323 161 Elementen und mit 746 751 Elementen (Vergleich der Rechnungen 11 002 und 21 009 in Tab. 4.4-2)). Bei Betrachtung des Druckverlaufs in Abb. 4.4-20 ist zu erkennen, dass die unterschiedliche Gitterfeinheit nur einen geringen Einfluss auf den Druckverlauf hat. Ein anderes Bild ergibt sich jedoch, wenn man sich die Strömungsgeschwindigkeiten, Heliumkonzentrationen und Temperaturen anschaut (siehe Abb. 4.4-21 bis Abb. 4.4-23). In allen drei Abbildungen zeigt sich, dass Gitterfeinheit einen deutlichen Einfluss hat. Bei der Berechnung mit der größeren Elementzahl kommt es zu einem schnelleren Wiedereinsetzen der Konvektionsströmung (siehe Abb. 4.4-21) und einer schnelleren Auflösung der Heliumschichtung (siehe Abb. 4.4-22). Entsprechend schnell kommen die Temperaturen auch wieder auf ihr Ausgangsniveau zurück (siehe Abb. 4.4-23). Ob mit einer Elementzahl von 746 751 Elementen schon eine gitterunabhängige Lösung gefunden wurde, kann nicht gesagt werden. Hierzu wären noch weitere Rechnungen mit noch feineren Gittern notwendig.

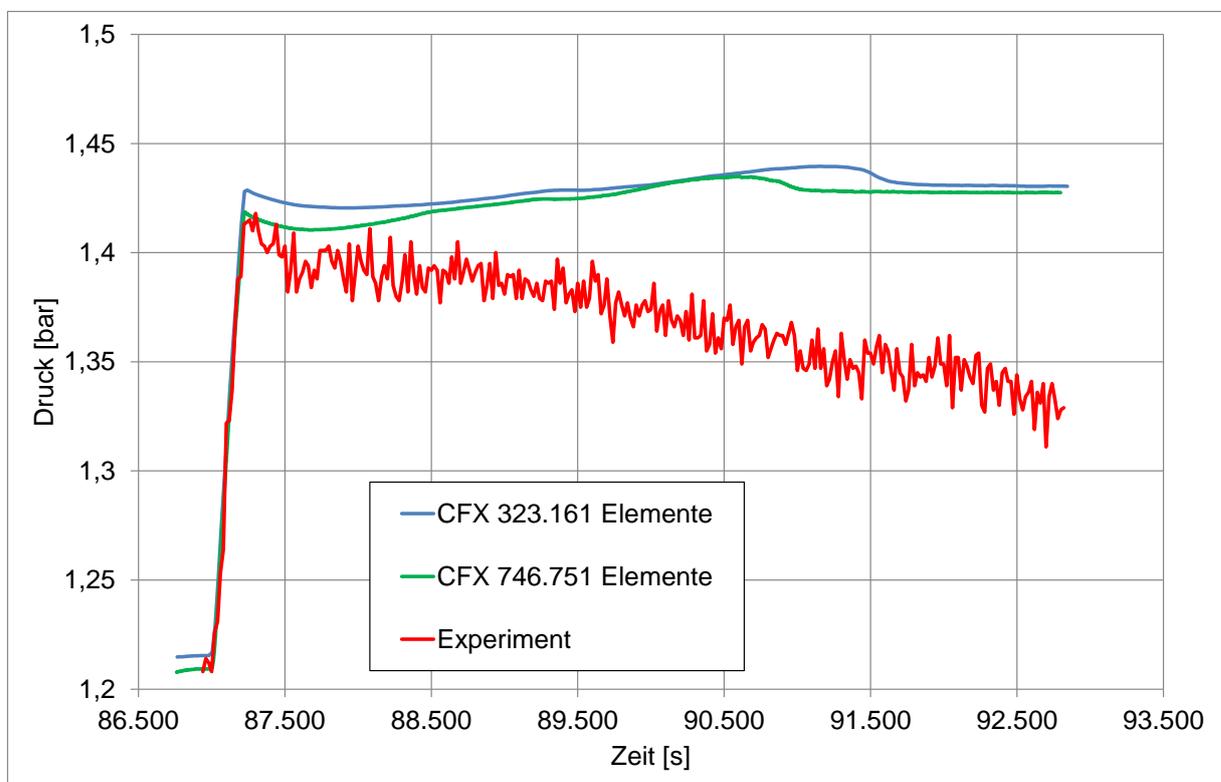


Abb. 4.4-20 Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

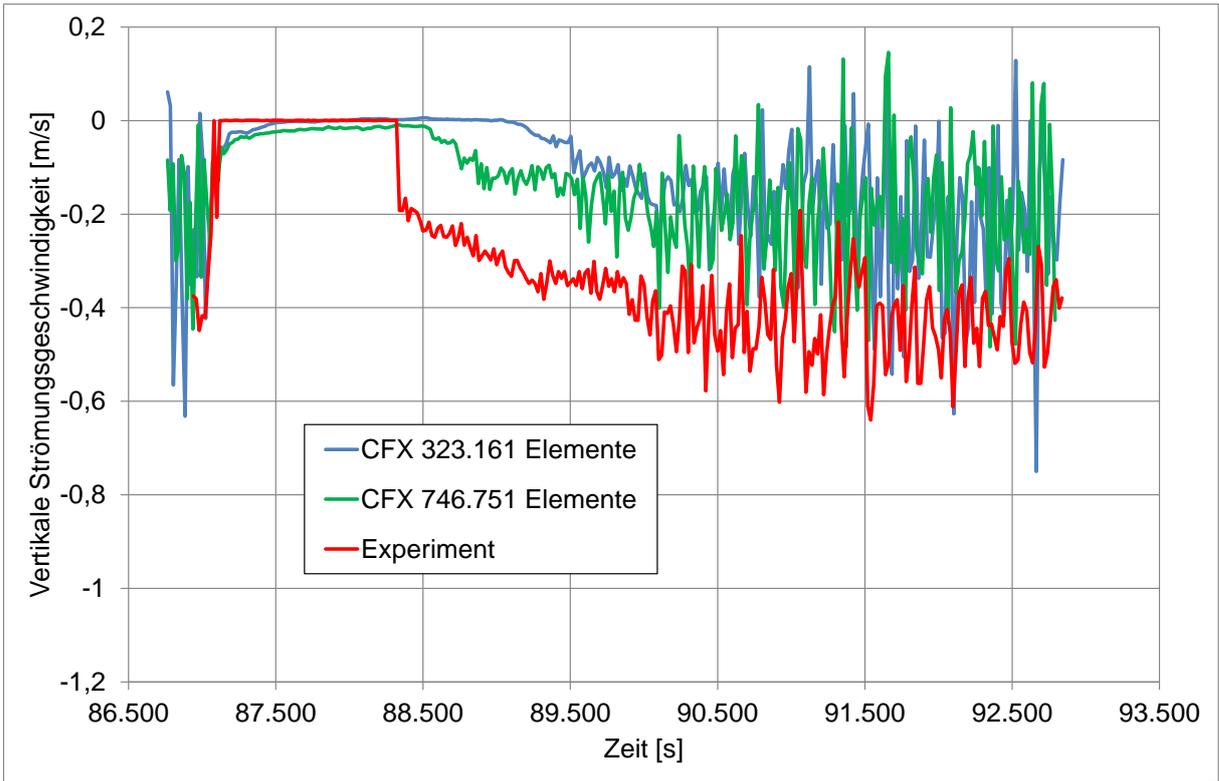


Abb. 4.4-21 Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 2,8 m)

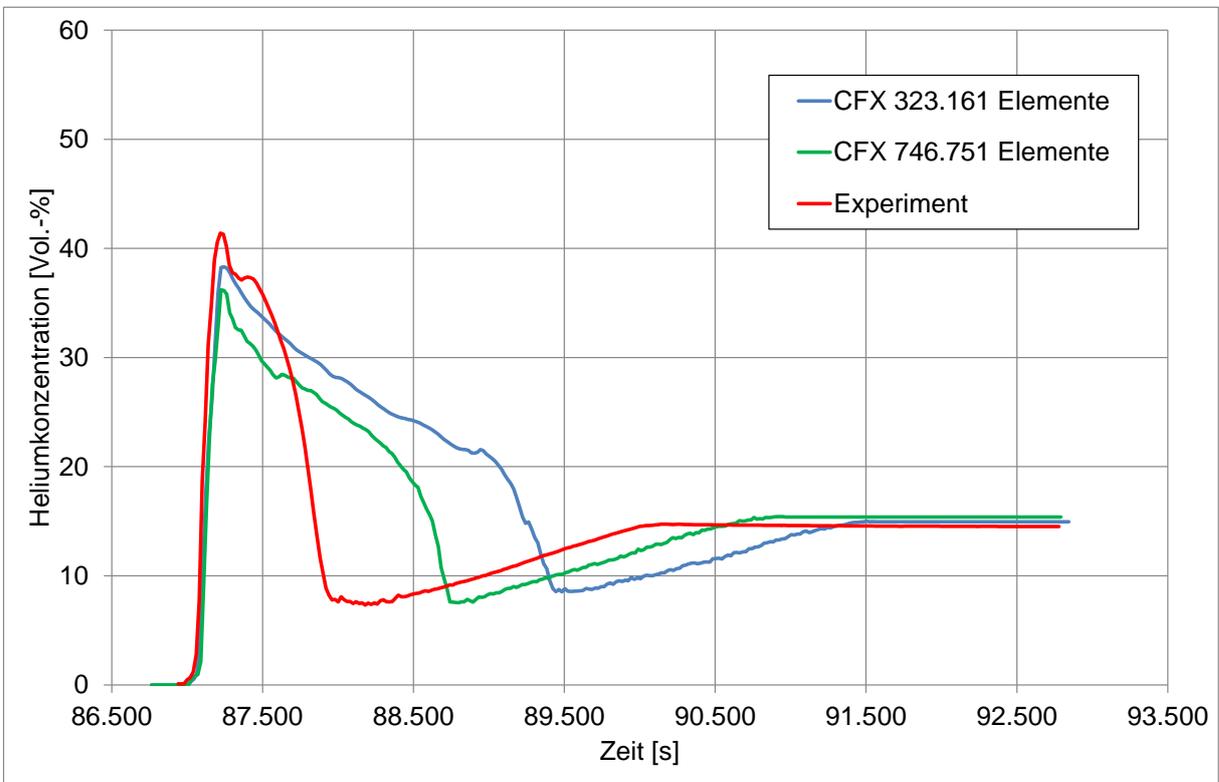


Abb. 4.4-22 Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe: 7,0 m)

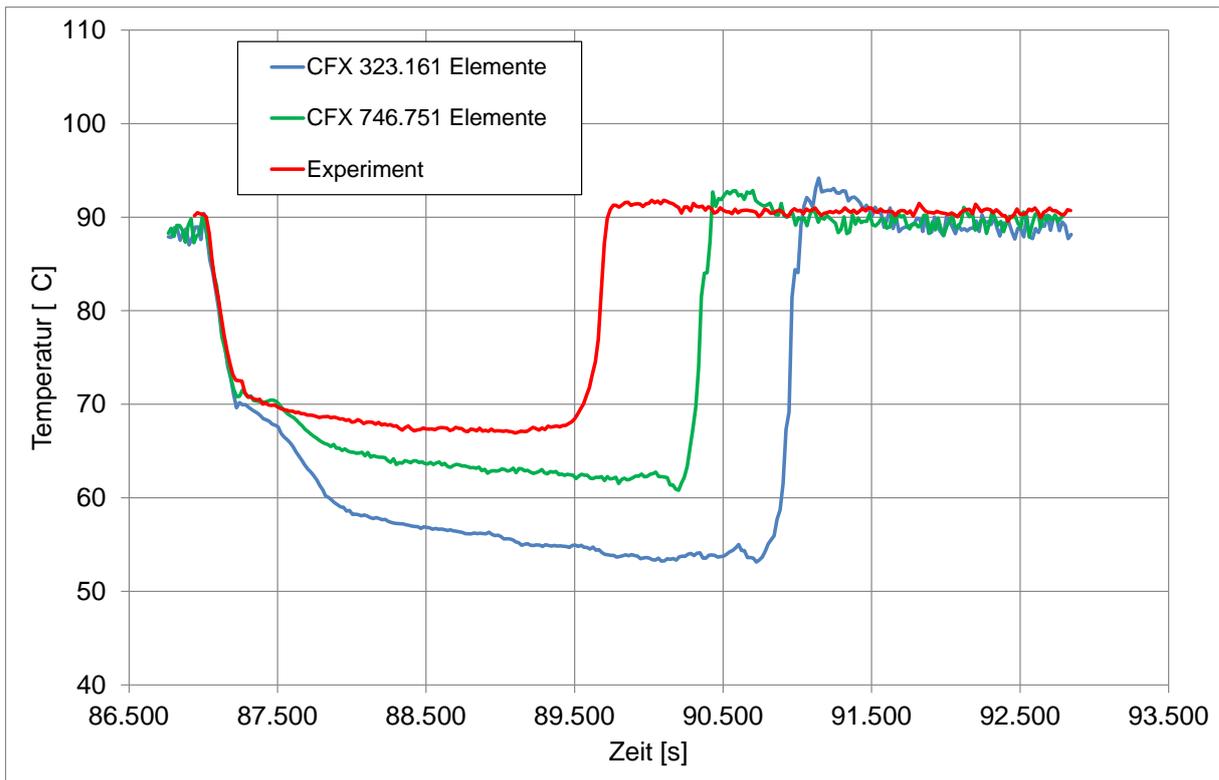


Abb. 4.4-23 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m)

#### 4.4.5.2 Einfluss der Zeitschrittweite (Courant-Zahlen)

Um den Einfluss der Zeitschrittweite zu untersuchen wurden wiederum zwei Berechnungen durchgeführt – eine mit und eine ohne Begrenzung der Courant-Zahl (Rechnungen CFX 11 002 und CFX 15 001 in Tab. 4.4-2). Es wurde eine Berechnung ohne eine Begrenzung der Courant-Zahl durchgeführt (CFX 11 002, die im Folgenden als „Standard-Berechnung“ bezeichnet wird) und eine Berechnung, bei der die Courant-Zahl auf den Wert 20 für die Phase der Heliumeinspeisung und auf den Wert 5 für die Phase der Schichtungsauflösung limitiert war (CFX 15 001). Die so gewählten Werte stellten einen Kompromiss zwischen Genauigkeit (kleine Courant-Zahlen) und akzeptabler Rechenzeit dar.

Abb. 4.4-24 zeigt, dass der Einfluss der Courant-Zahl auf den berechneten Druckverlauf relativ gering ist. Bei den vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten kann beobachtet werden, dass die Konvektion im Falle kleinerer Courant-Zahlen etwas später wieder einsetzt (siehe Abb. 4.4-25). Allerdings ist die Heliumschicht in beiden Fällen etwa zur gleichen Zeit aufgelöst, wie man anhand der Konzentrationen in Abb. 4.4-26 sehen kann. Auch anhand der Temperaturen können nur geringe Unterschiede zwischen bei-

den Berechnungen festgestellt werden (siehe Abb. 4.4-27). Insgesamt kann gesagt werden, dass die Einschränkung der Courant-Zahl und die damit verbundene Reduzierung der Zeitschrittweite zwar an einzelnen Stellen einen Einfluss hat, für den Gesamtprozess der Heliumauflösung ist dieser Einfluss jedoch nicht signifikant.

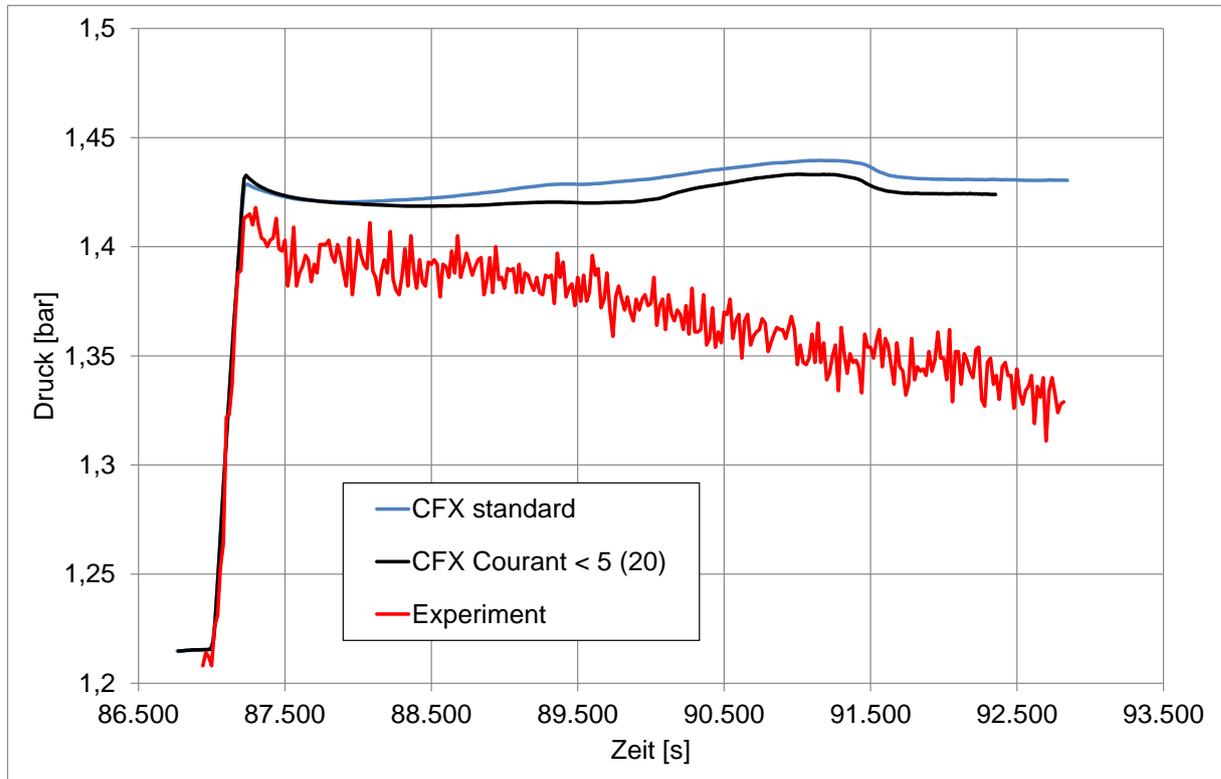


Abb. 4.4-24 Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

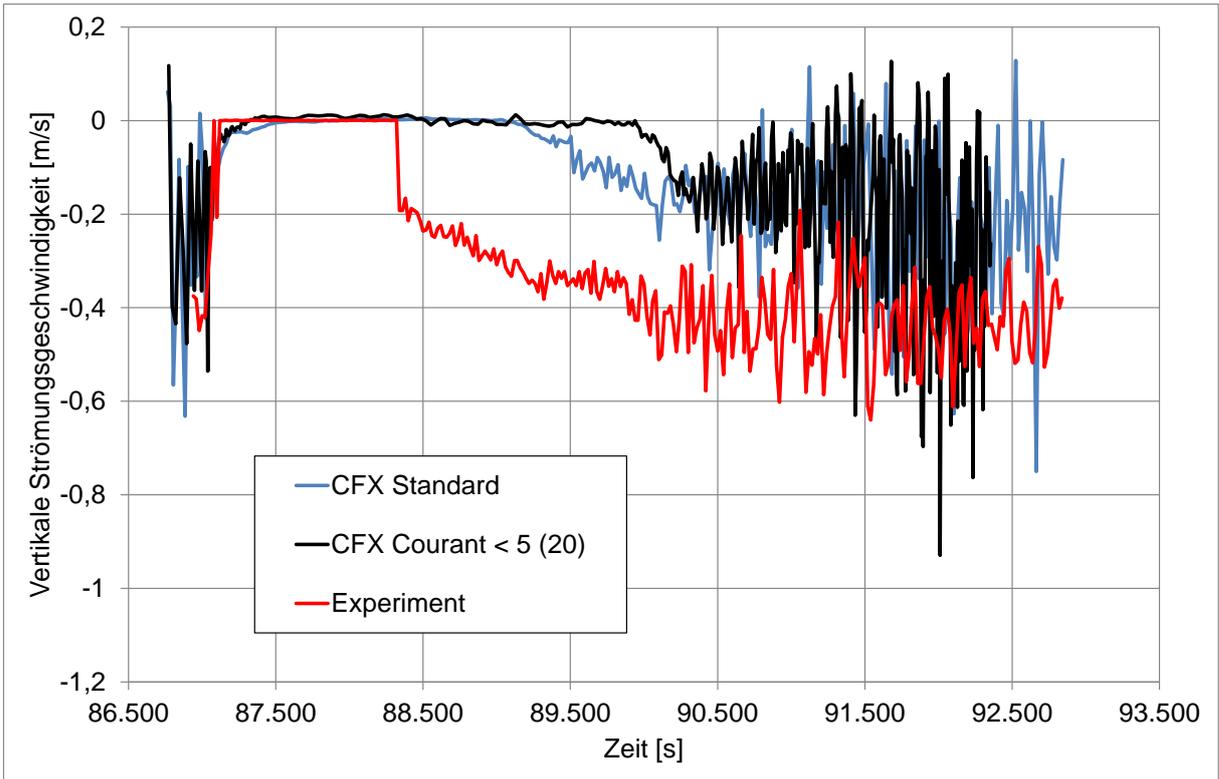


Abb. 4.4-25 Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 2,8 m)

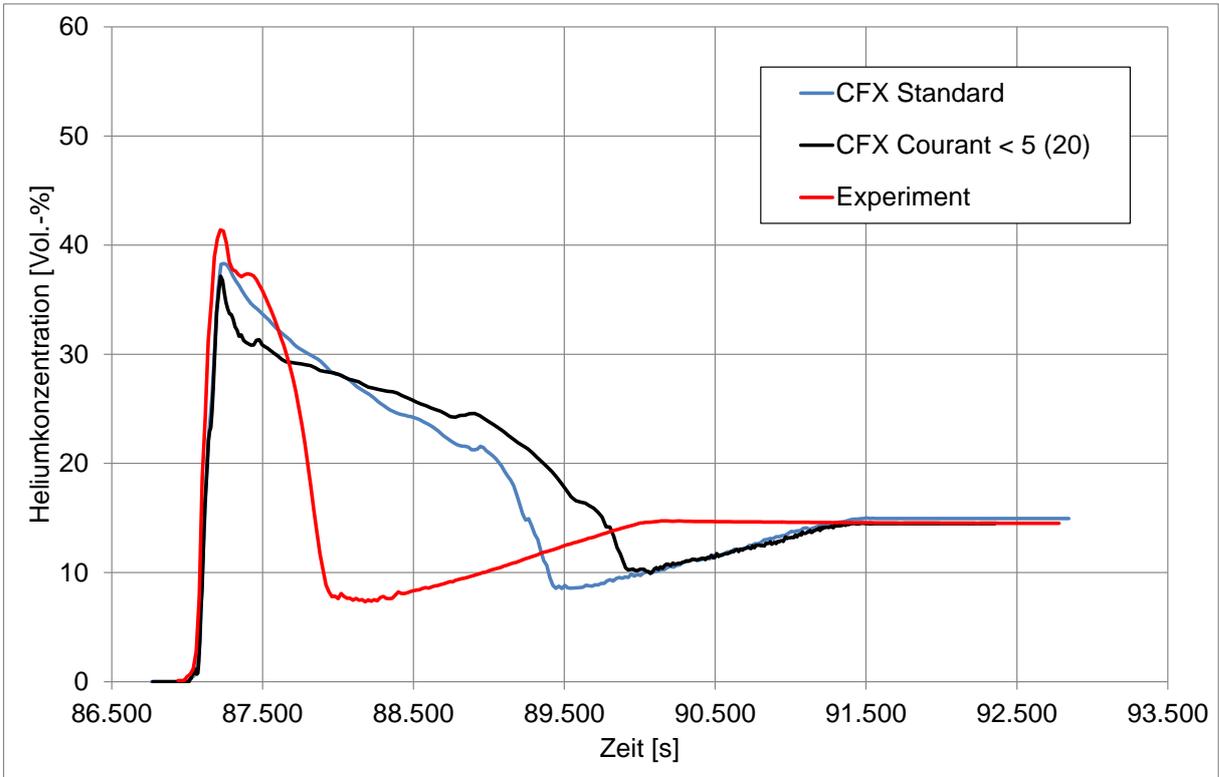


Abb. 4.4-26 Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m)

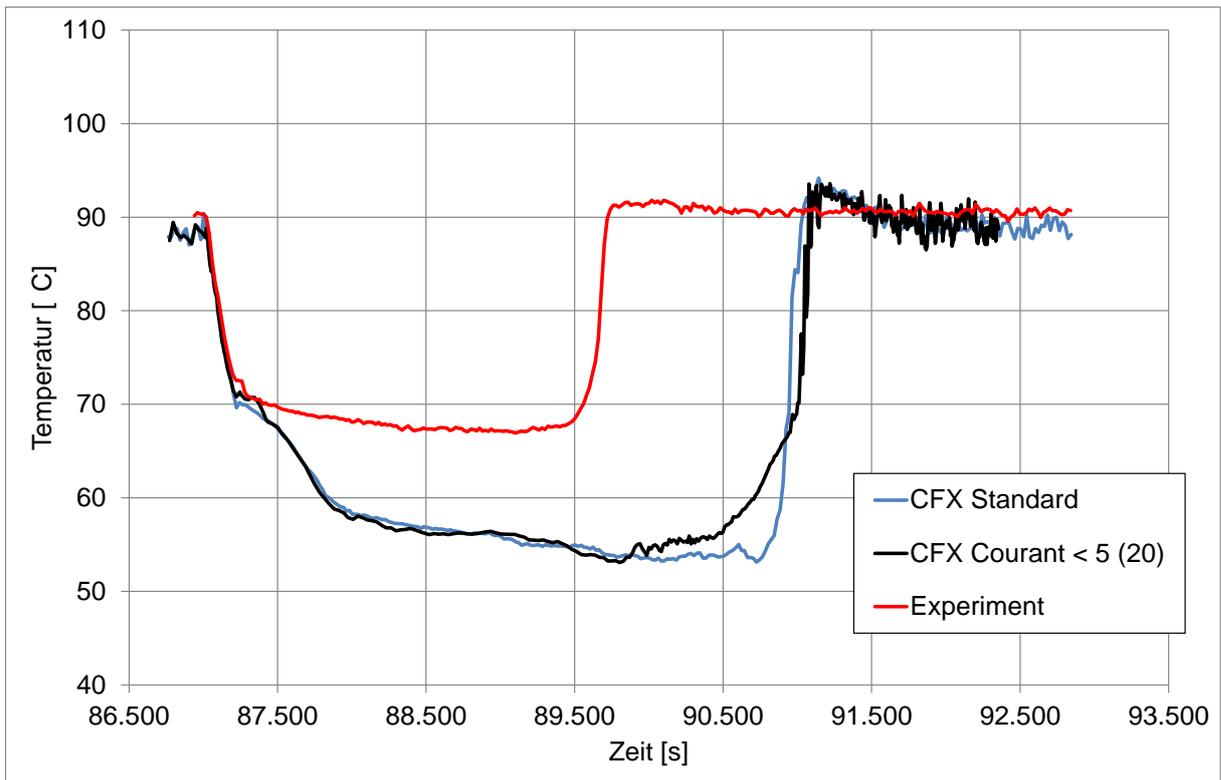


Abb. 4.4-27 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m)

#### 4.4.5.3 Einfluss des Turbulenzmodells (TSF-Modell)

Die Berechnung mit dem TSF-Modell stellte sich leider als instabil heraus. Bei der Einspeisung des Heliums stürzte CFX immer mit einer Fehlermeldung ab. Eine Lösung des Problems konnte trotz Kooperation mit ANSYS-Germany nicht gefunden werden.

#### 4.4.5.4 Einfluss des Wärmetransportes über die Behälterwand nach außen (HTC-Koeffizient)

Der Wärmetransfer über die isolierten, aber nicht beheizten Wände des THAI-Behälters an die Raumatmosphäre konnte experimentell leider nicht ermittelt werden. In CFX wird dieser Wärmetransfer durch einen Wärmetransferkoeffizienten (Heat transfer coefficient: HTC) an der Behälteraußenseite beschrieben. Dieser enthält implizit auch die Wirkung der Isolationsschicht aus Mineralwolle, die im CFD-Gitter nicht explizit abgebildet wurde. Um den Einfluss dieser Wärmeleitung zu studieren wurden drei unterschiedliche Rechnungen mit den Koeffizienten  $0,1 \text{ W/m}^2\text{K}$ ,  $0,75 \text{ W/m}^2\text{K}$  und  $2,0 \text{ W/m}^2\text{K}$  an der Behälteraußenseite angenommen (nur für die unbeheizten Flächen).

In Abb. 4.4-28 ist der Einfluss des HTC auf den Druckverlauf dargestellt. Abb. 4.4-29 zeigt anhand der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten, dass ein höherer HTC zu einem schnelleren Wiedereinsetzen der Konvektionsströmung führt. Eine ähnliche Beobachtung kann man auch anhand der Heliumkonzentrationen machen (siehe Abb. 4.4-30). Auch auf die Temperaturen im THAI-Behälter hat die Höhe des HTC einen Einfluss (siehe Abb. 4.4-31).

Anhand der vorliegenden Rechnungen kann aber nicht abschließend beurteilt werden, ob sich mit dem HTC auch die absolute Zeit bis zur vollständigen Auflösung der Heliumschicht verändert. Die vorliegenden Analysen zeigen also eine gewisse Sensitivität auf den HTC, sie können aber nicht klären wie hoch der reale HTC im Experiment war.

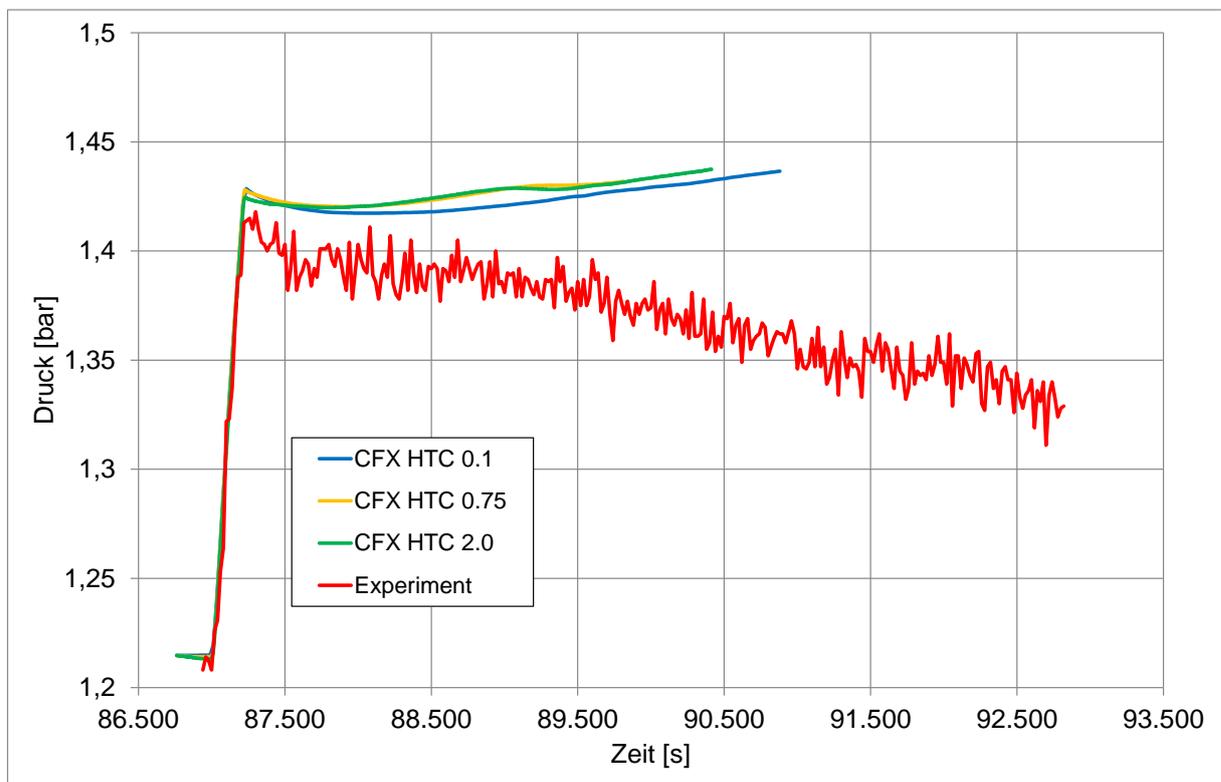


Abb. 4.4-28 Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

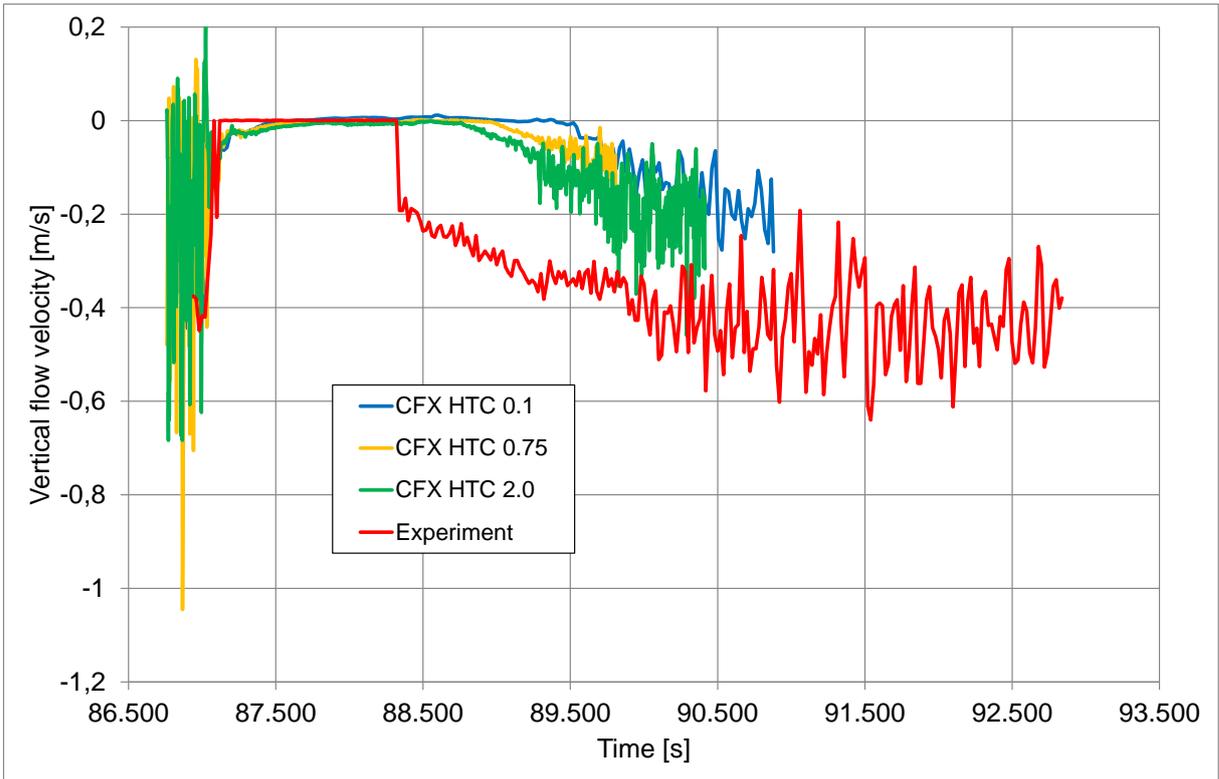


Abb. 4.4-29 Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe 2,8 m)

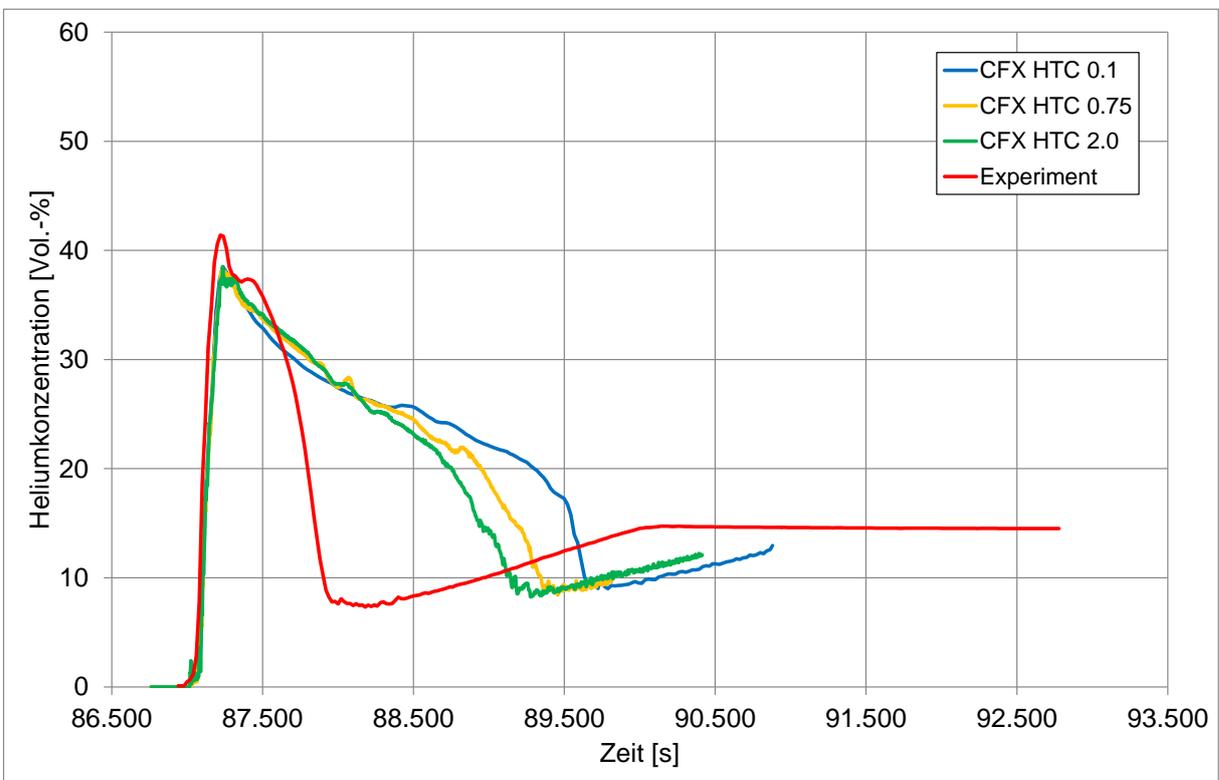


Abb. 4.4-30 Heliumkonzentration an der Messstelle DCH70F005 (Höhe 7,0 m)

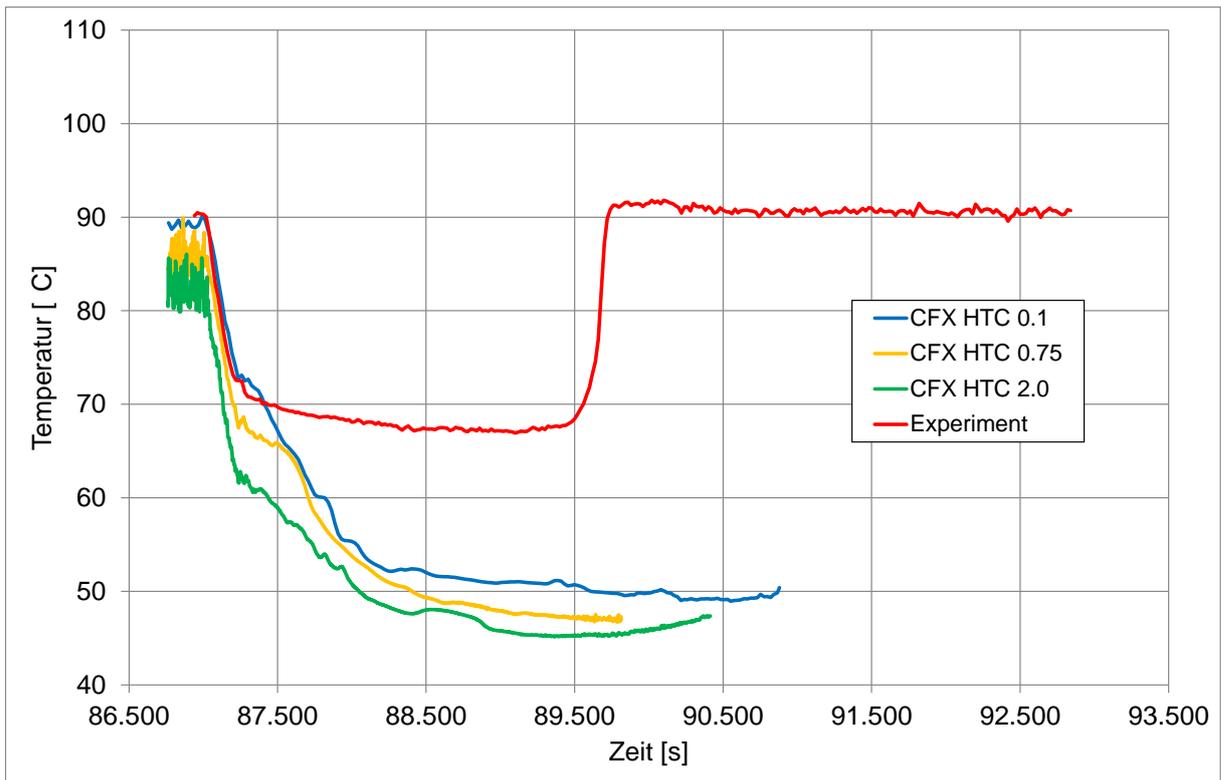


Abb. 4.4-31 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m)

#### 4.4.5.5 Einfluss der Probenentnahme

Um den Einfluss der Probenentnahme aus dem THAI-Behälter zu studieren wurden eine Berechnung mit und eine Berechnung ohne Probenentnahme durchgeführt (Rechnung CFX 14 003 und CFX 11 002 in Tab. 4.4-2). Die Probenentnahme wurde durch fünfzehn Entnahmepunkte für das GFG-System (Massensenke von insgesamt 535 l/h) und zehn Entnahmepunkte für das Massenspektrometer (Massensenke von insgesamt 1292 l/h) modelliert. Abb. 4.4-32 zeigt, dass die Modellierung des Gas Entnahmesystems (wie erwartet) zu einer Abnahme des Drucks führt. Dieser Verlauf entspricht schon besser dem Experiment, auch wenn es den experimentellen Druckabfall noch nicht ganz erklären kann. Es gibt aber Hinweise, dass die Spezifikation der im Experiment entnommenen Gasmenge möglicherweise die real entnommene Gasmenge unterschätzt.

Es wird neben dem Druck auch eine Veränderung der anderen Messgrößen (Gaskonzentrationen, Strömungsgeschwindigkeiten, Temperaturen) beobachtet, siehe z. B. Abb. 4.4-33. Da zum Einfügen der Entnahmepunkte in das CFD-Modell gleichzeitig auch eine Verfeinerung des CFD-Gitters notwendig wurde (von 323.000 auf 1.145.000

Elemente), können die Effekte von Probenentnahme und Gitterverfeinerung z. B. auf die Strömungsgeschwindigkeiten jedoch nicht sauber voneinander getrennt werden.

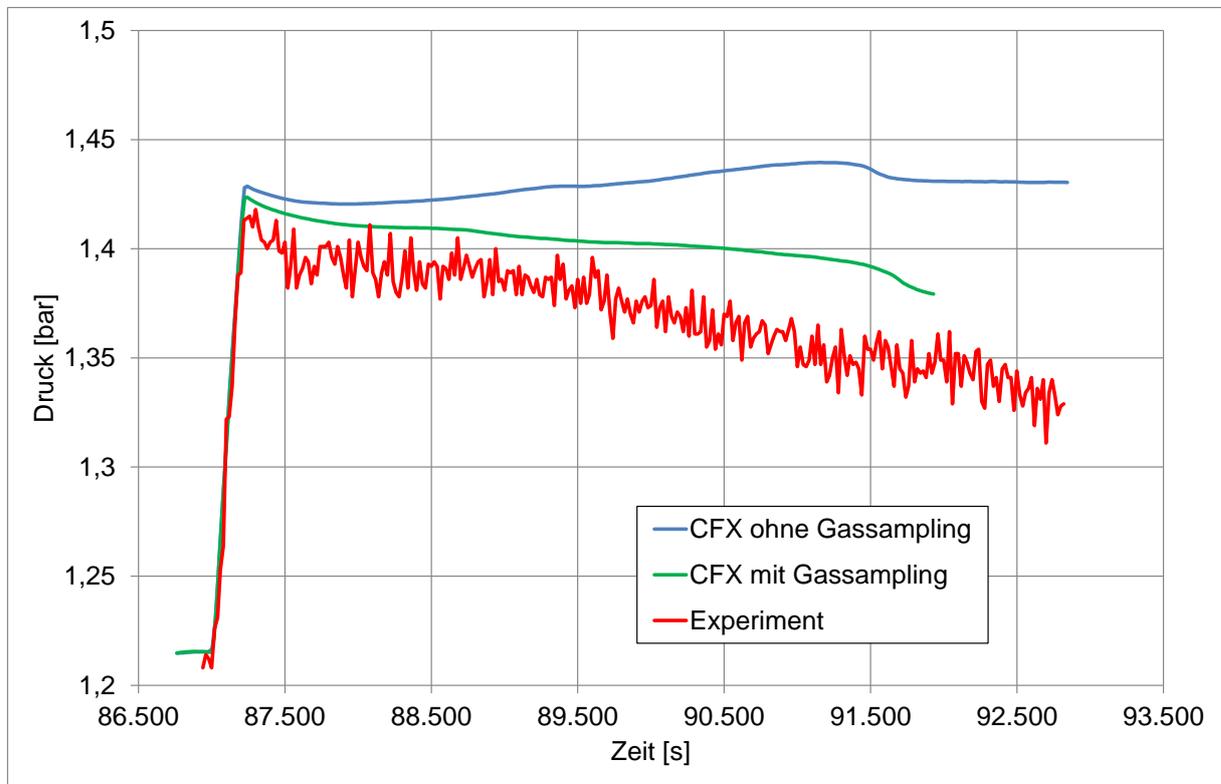


Abb. 4.4-32 Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

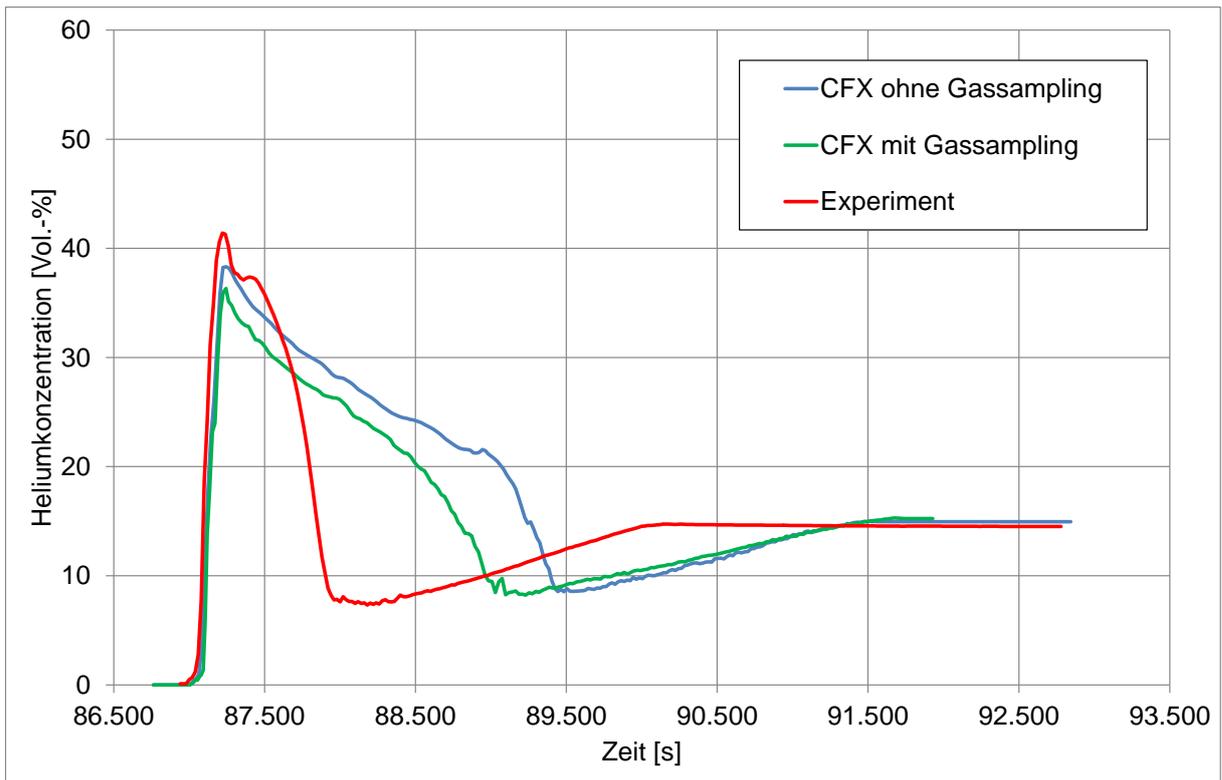


Abb. 4.4-33 Heliumkonzentration an Messstelle DCH70F005 (Höhe: 7,0 m)

#### 4.4.5.6 Einfluss der Wärmestrahlung

Um den Einfluss der Wärmestrahlung zu untersuchen wurden zwei unterschiedliche Rechnungen – mit und ohne Strahlungsmodell – miteinander verglichen. Bei der Berechnung mit Strahlung wurde das „Discrete Transfer“-Modell mit der Spektraldarstellung „Gray“ und den Absorptionskoeffizienten  $0,0 \text{ m}^{-1}$  für Helium und  $0,01 \text{ m}^{-1}$  für Luft verwendet. Das Ergebnis ist in den Abb. 4.4-34 bis Abb. 4.4-37 dargestellt. Es zeigt sich in Abb. 4.4-34, dass das Strahlungsmodell nahezu keinen Einfluss auf den Druckverlauf hat, ähnliches gilt für die vertikale Strömungsgeschwindigkeit (siehe Abb. 4.4-35). Der Abbau der Heliumschicht wird bei Verwendung des Strahlungsmodells etwas beschleunigt, dieses ist in Abb. 4.4-36 zu sehen. Den deutlichsten Einfluss hat das Strahlungsmodell auf die Gastemperaturen, wie sich in Abb. 4.4-37 zeigt. Bei Verwendung des Strahlungsmodells liegen die Temperaturen im Gas deutlich höher als ohne das Strahlungsmodell und damit näher am Experiment.

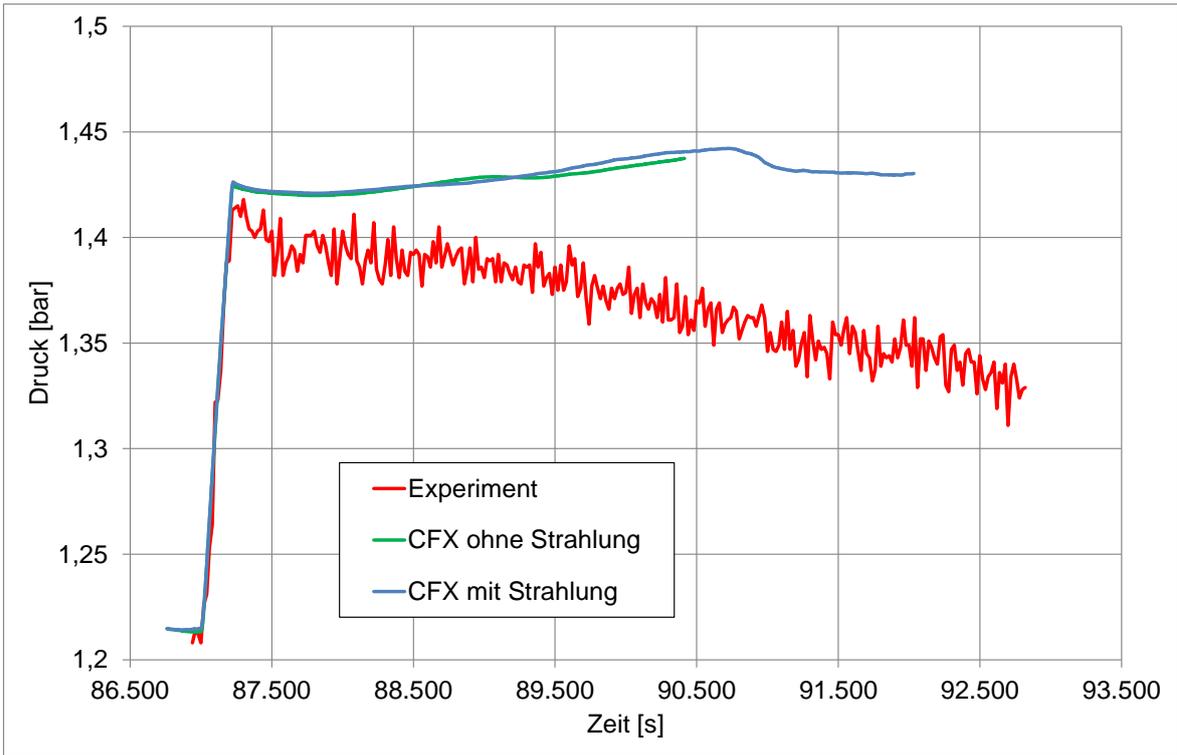


Abb. 4.4-34 Druckverlauf an Messstelle BPA21H16 (Höhe: 2,1 m)

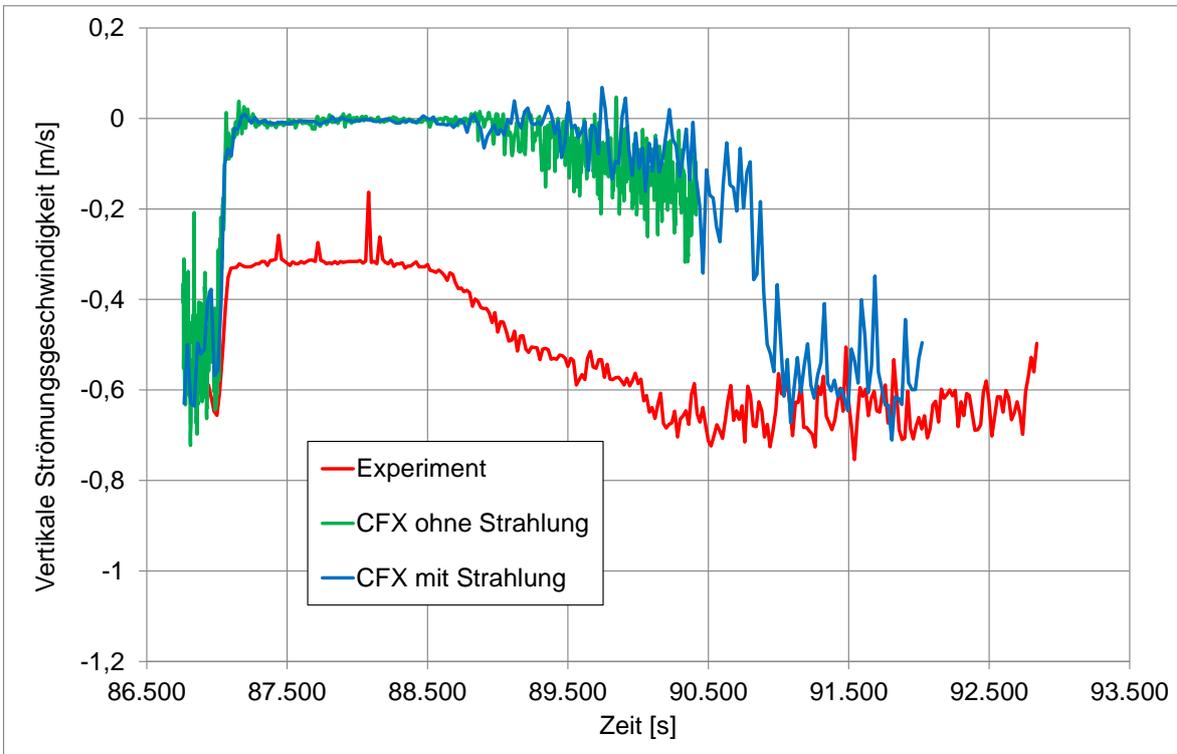


Abb. 4.4-35 Vertikale Strömungsgeschwindigkeit an Messstelle CVT28F06 (Höhe: 5,8 m)

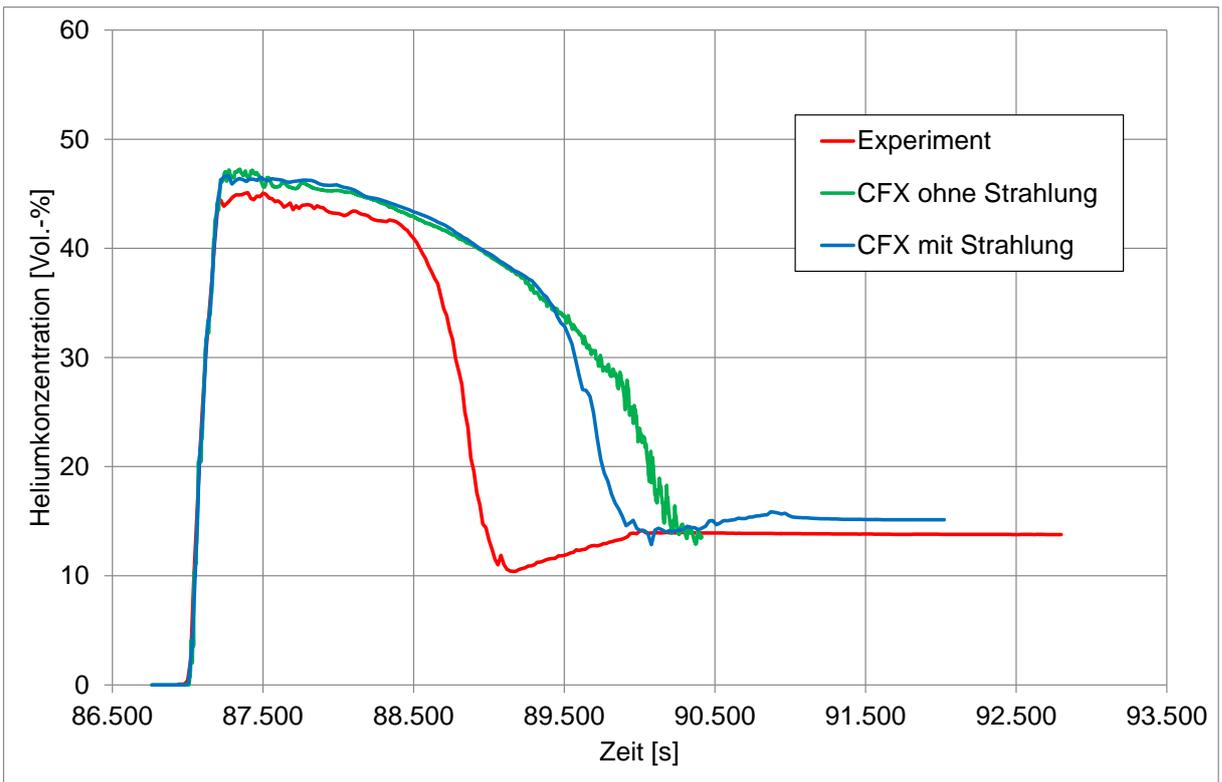


Abb. 4.4-36 Heliumkonzentration an der Messstelle DCH77H11 (Höhe: 7,7 m)

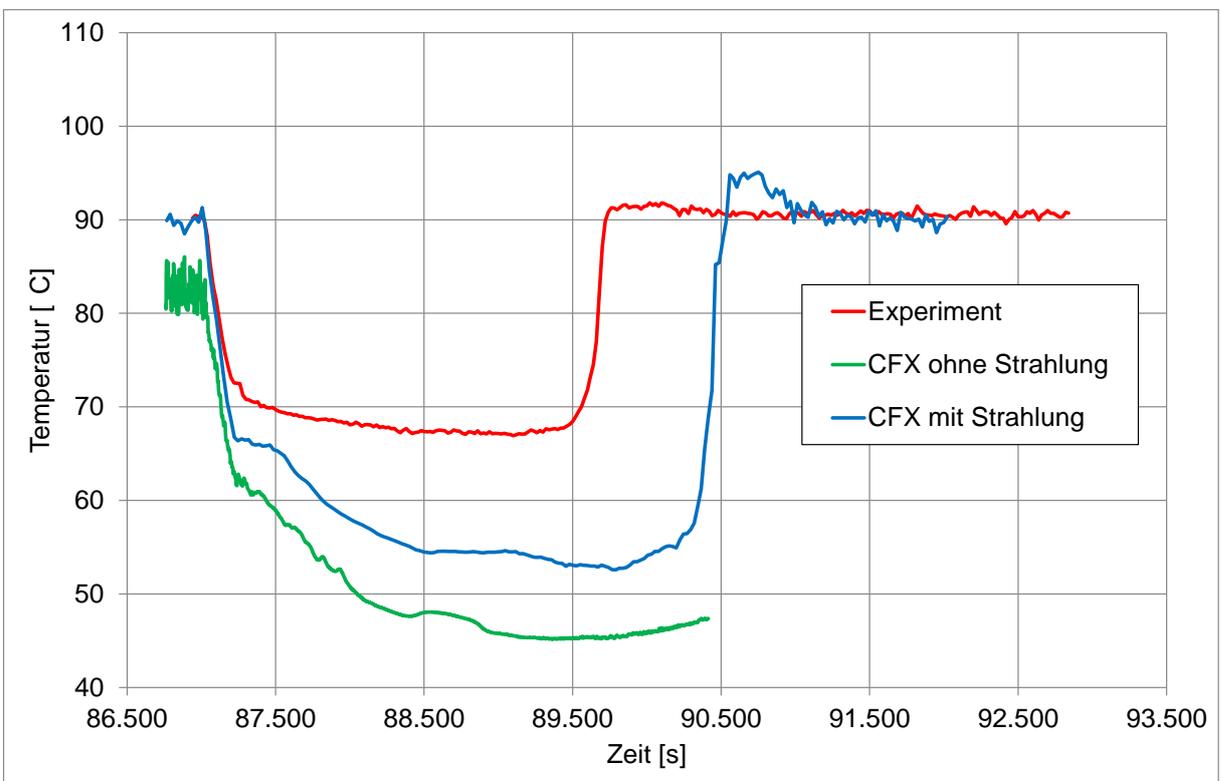


Abb. 4.4-37 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF84M00 (Höhe: 8,4 m)

#### **4.4.5.7 Einfluss der Schmidtzahl**

Um den Einfluss der turbulenten Schmidtzahl auf die Berechnung zu prüfen, wurden zwei Simulationen mit unterschiedlichen Schmidtzahlen durchgeführt (mit 0,7 und 2,0). Bei beiden Rechnungen ergaben sich nur recht geringe Unterschiede für den Druck, die Strömungsgeschwindigkeiten, die Heliumkonzentrationen und die Temperaturen. Die Variation der Schmidtzahl zeigt also nur sehr geringen Einfluss auf die Simulationsergebnisse.

#### **4.4.6 Zusammenfassung**

Durch die Veränderung mehrerer Berechnungsparameter in der offenen Nachrechnung konnten die Simulationsergebnisse im Vergleich zur blinden Vorrausrechnung deutlich verbessert werden. Weiterhin konnten die Ursachen für die Probleme bei der Simulation der Auflösung von Leichtgasschichten durch eine Parameterstudie teilweise aufgeklärt werden. Eine Verbesserung der Ergebnisse wurde insbesondere erzielt durch:

- Anwendung eines feinen CFD-Gitters mit etwa 750 000 Elementen
- Modellierung des Gas-Samplingsystems
- Verwendung eines Strahlungsmodells
- Erhöhung des Wärmetransferkoeffizienten (HTC) vom Behälter nach außen

Ob auch das Turbulenzmodell noch Teil der Problemursache ist und ob das TSF-Modell in diesem Sinne zu einer (weiteren) deutlichen Verbesserung führt, konnte leider nicht geklärt werden, da die Berechnung mit dem TSF-Modell nicht funktionierte.

Einige der Parameteränderung sollten in zukünftigen blinden Vorrausrechnungen berücksichtigt werden (z. B. Geometrie, Elementzahl, Strahlungsmodell). Aber einige andere Parameter müssen durch die Experimentatoren exakt gemessen und für die Simulation bereitgestellt werden (z. B. Wärmetransferkoeffizienten, Gasverlustmassen des Samplingsystems). Hierbei handelt es sich um experiment-spezifische Randbedingungen, die für eine gute Vorrausrechnung notwendigerweise bekannt sein müssen.

## 4.5 Nachrechnung des Experimentes TH-24 (CV5)

### 4.5.1 Beschreibung des Experimentes

Das THAI Experiment TH-24 stellt eine Fortführung der Experimente TH-21 (Naturkonvektion) und TH-22 (Naturkonvektion und Auflösung einer Heliumschicht dar). In steigender Komplexität stellt TH-24 eine Naturkonvektion und die Auflösung einer Dampfschicht dar. Hierbei wird Dampf in den THAI-Behälter eingespeist. Diese Dampfschicht wird anschließend wieder durch den sich herausbildenden Naturumlauf im THAI-Behälter verteilt (siehe Abb. 4.5-1). Im Experiment TH-24 kommt zusätzlich noch der Effekt der Kondensation hinzu.

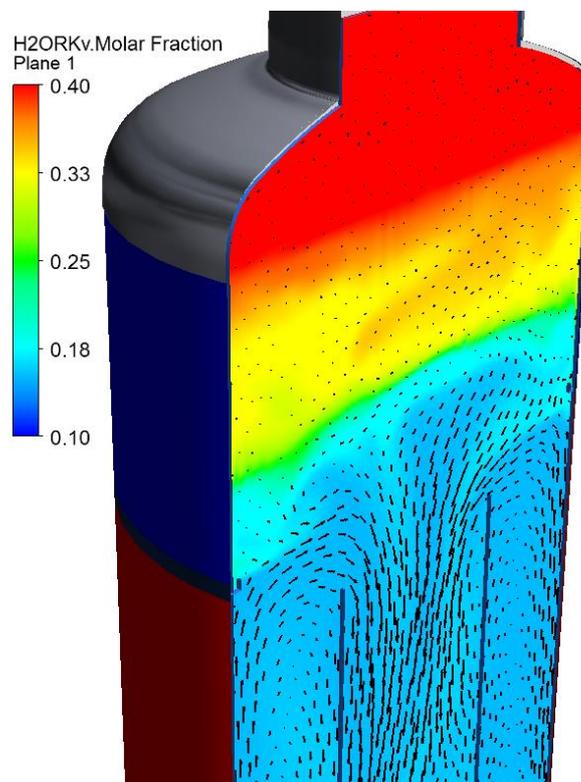


Abb. 4.5-1 Abbau einer Dampfschicht im TH-24 Experiment (Ergebnis einer CFX-Simulation)

Abb. 4.5-2 zeigt die Konfiguration des TH-24 Experiments. Der untere und mittlere Teil werden mit einem Wärmemantel auf etwa 100 °C erhitzt, während der Kühlmantel im oberen Bereich auf eine Temperatur von 60 °C eingestellt ist. Nachdem sich der Behäl-

ter aufgeheizt hat, wird der Dampf im oberen Bereich (in 6,8 m Höhe) eingespeist. Weitere Details zum Versuch finden sich in /GUP12/.

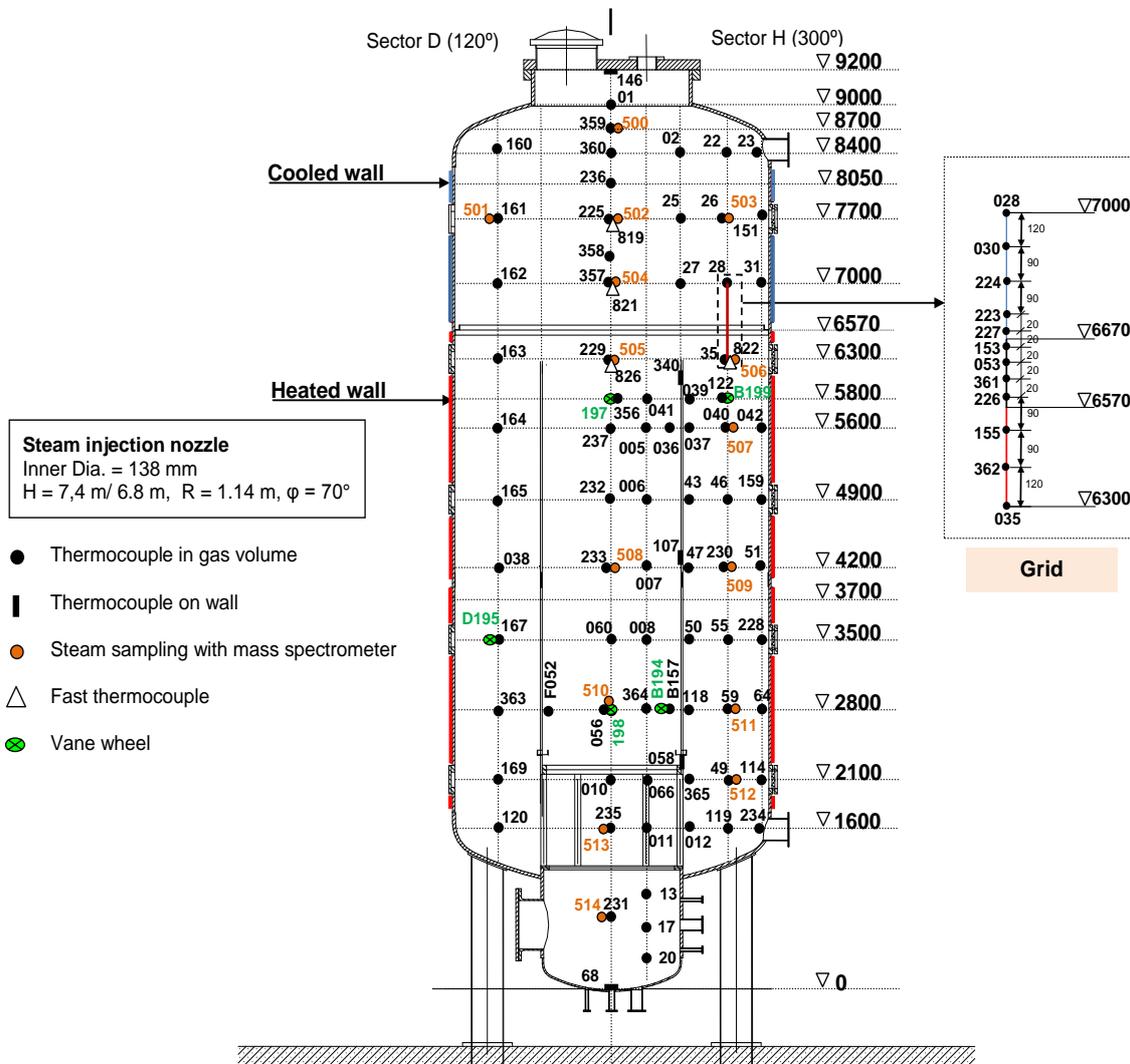


Abb. 4.5-2 Konfiguration des TH-24 Experimentes (Bildquelle: /GUP12/)

#### 4.5.2 Geometrie und Randbedingungen in der Simulation

Die Aufheizphase wird durch eine stationäre Rechnung simuliert, während die Dampfeinspeisung und Auflösung der Dampfschicht durch eine transiente Rechnung abgebildet werden. Die Simulationen werden im Folgenden beschrieben. Es handelt sich hierbei um Ergebnisse der offenen Nachrechnung des TH-24 Versuchs. Weiterhin hat es auch eine blinde Versuchsberechnung im Rahmen eines Benchmarks gegeben. Tendenziell wurde die Zeit für den Abbau der Dampfschicht hier von der GRS-Rechnung

etwas überschätzt. Ein Vergleich ist allerdings schwierig, da in der Spezifikation für die blinde Rechnung fehlerhafte Angaben waren (Startbedingungen, Dampfeinspeiserate). Die Ergebnisse der blinden Simulationen wurden bereits in /FRE12/ beschrieben.

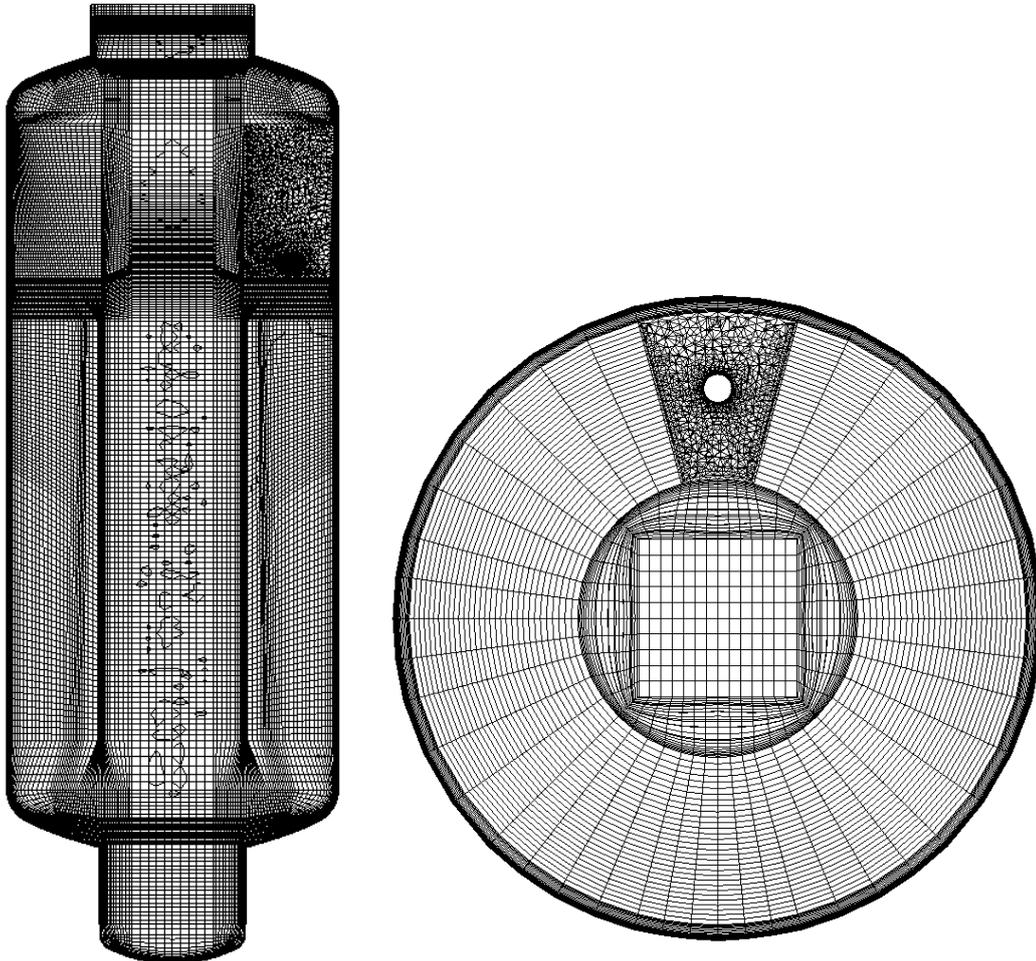


Abb. 4.5-3 Netz zur Berechnung des TH-24 Experiments (Schnitte durch die Einspeiseebene)

In Abb. 4.5-3 ist die Geometrie und das Netz für die Berechnung des TH-24 Experiments dargestellt. Das Netz hat insgesamt etwa 1,4 Millionen Elemente und wurde insbesondere im Bereich der Wände verfeinert. Die Geometrie in der Nähe der Einspeise- stelle wurde durch ein unstrukturiertes Netz modelliert, während das übrige Netz struk- turisiert ist. Die Wände des THAI-Behälters sind als Solid im Netz enthalten, an dessen Außenseite Temperaturrandbedingungen entsprechend dem Experiment vorgegeben wurden.

In der Infobox in Tab. 4.5-1 sind die Parameter für die Simulation dargestellt. Als Mate- rialien wurden „Air ideal gas“ und „H<sub>2</sub>O“ verwendet. Dampf und Luft wurden als ideales

Gas modelliert. Der Phasenübergang Dampf/Wasser wird mit der Antoine-Gleichung beschrieben. Als Turbulenzmodell wurde das SST-Modell gewählt und der Diffusionskoeffizient H<sub>2</sub>O/Luft wird nach der Formel von Fuller berechnet. Das Modell zur Wärmestrahlung und das Kondensationsmodell (CFX-Version 14.0) wurden für die Berechnung eingeschaltet.

Tab. 4.5-1 Infobox THAI TH-24 Experiment

Experiment	TH-24.3 (THAI-Anlage)
Phänomene	Schichtungsbildung/-auflösung und Kondensation
Elementzahl	1 371 895
Best-Practice-Guidelines / Gitterqualität	Min. Winkel: 7.3° (!) Max. Expansion Factor: 9544 (!) Max. Aspect Ratio: 604 (OK)
Materialien	Air ideal Gas, H <sub>2</sub> O
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	Nach Fuller
Wärmestrahlung	Discrete Transfer, Gray Anzahl Strahlen: 64 Absorpt. Dampf: radH <sub>2</sub> O = radH <sub>2</sub> O(p,T) (siehe 4.2.8.1)
Kondensationsmodell	ANSYS-Modell
Konvergenz	RMS < 0,0001
CFX-Version	14.0

### **4.5.3 Vergleich der Simulation mit experimentellen Ergebnissen**

#### **4.5.3.1 Dampfkonzentrationen**

Bei Betrachtung der Dampfkonzentration im THAI-Behälter ist zu erkennen, dass die Simulation den Verlauf der Dampfkonzentrationen qualitativ richtig wiedergibt (siehe Abb. 4.5-4 bis Abb. 4.5-11). Grundsätzlich wird also der Aufbau und Abbau der Dampfschicht durch die Simulation gut wiedergegeben.

Anhand der Details ist zu erkennen, dass in der Einspeisephase die Dampfkonzentration im Dombereich etwas überschätzt wird (siehe Abb. 4.5-4 bis Abb. 4.5-6). In der Simulation liegt die Konzentration ca. 10 % höher als im Experiment. Hierfür gibt es zwei mögliche Erklärungen:

1. Möglicherweise wird die eingespeiste Dampfmenge in der Simulation überschätzt, da hier eine Kondensation in der Einspeiseleitung nicht berücksichtigt werden kann. Laut Becker-Technologies kam es im Experiment zu Beginn der Einspeisephase zu einer Kondensation innerhalb der Einspeiseleitung, die aber quantitativ nicht erfasst wurde.
2. Eine andere Möglichkeit wäre, dass die Strömungsverhältnisse während der Einspeisephase nicht richtig wiedergegeben werden und durch die Strömung mehr Dampf direkt in den unteren THAI-Behälter gebracht wird und somit weniger in den Dom gelangt.

Im gesamten mittleren und unteren Bereich des THAI-Behälters wird der Konzentrationsverlauf ebenfalls qualitativ richtig wiedergegeben. Er liegt jedoch stets 5 % - 10 % zu niedrig (siehe Abb. 4.5-7 bis Abb. 4.5-11). Ursache hierfür könnte eine Überschätzung der Kondensationsrate sein (hierzu siehe Abb. 4.5-25).

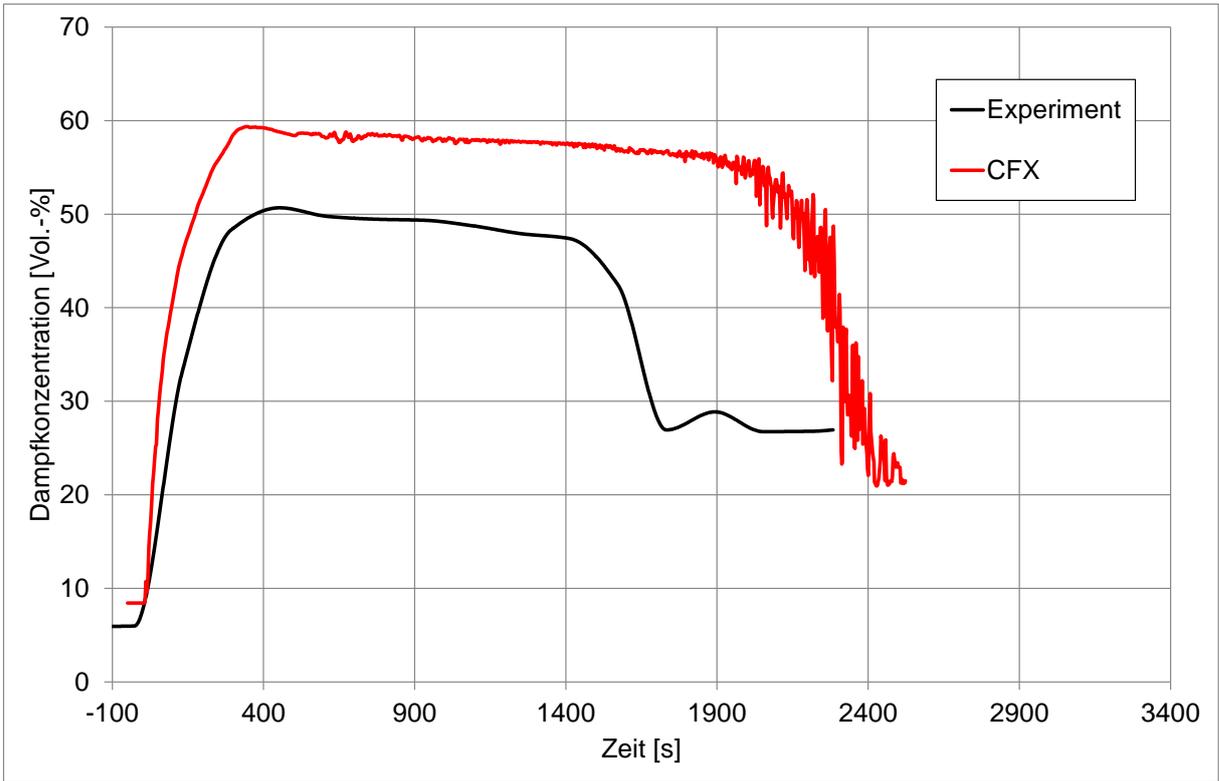


Abb. 4.5-4 Dampfkonzentration in 8,7 m Höhe (Messposition DCH87M00)

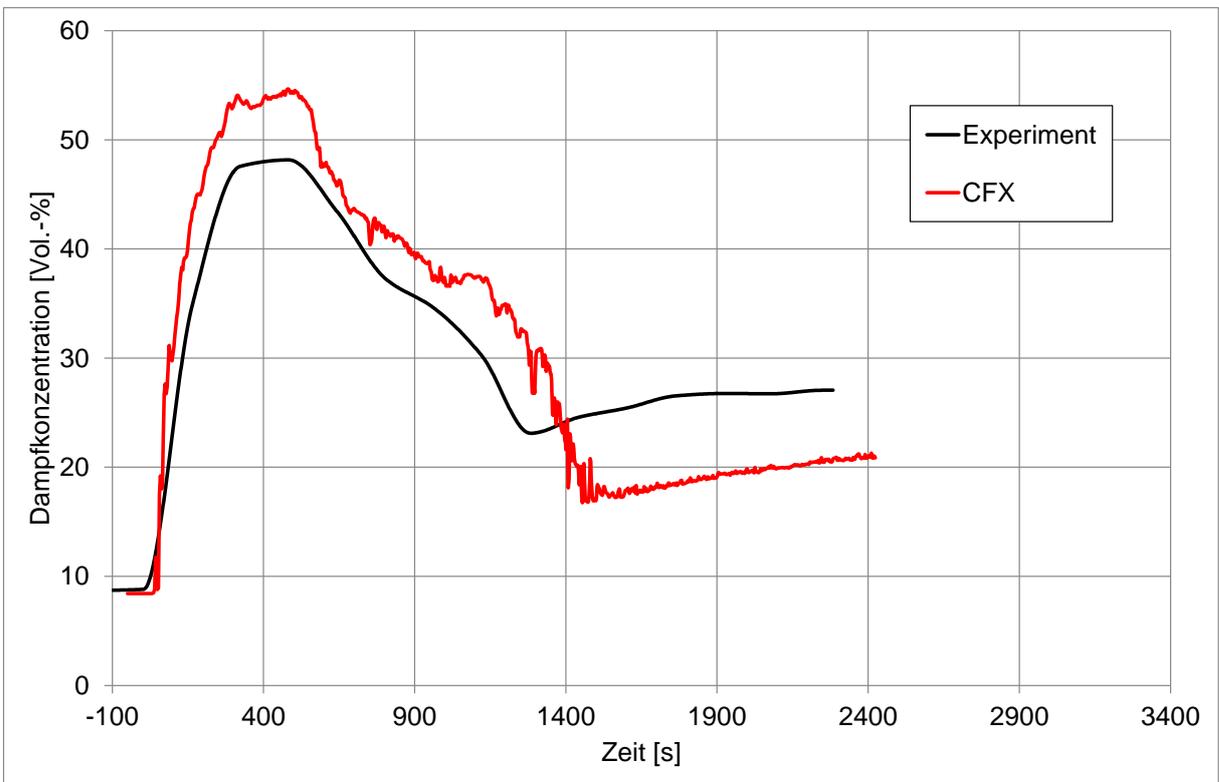


Abb. 4.5-5 Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe (Messposition DCH77M00)

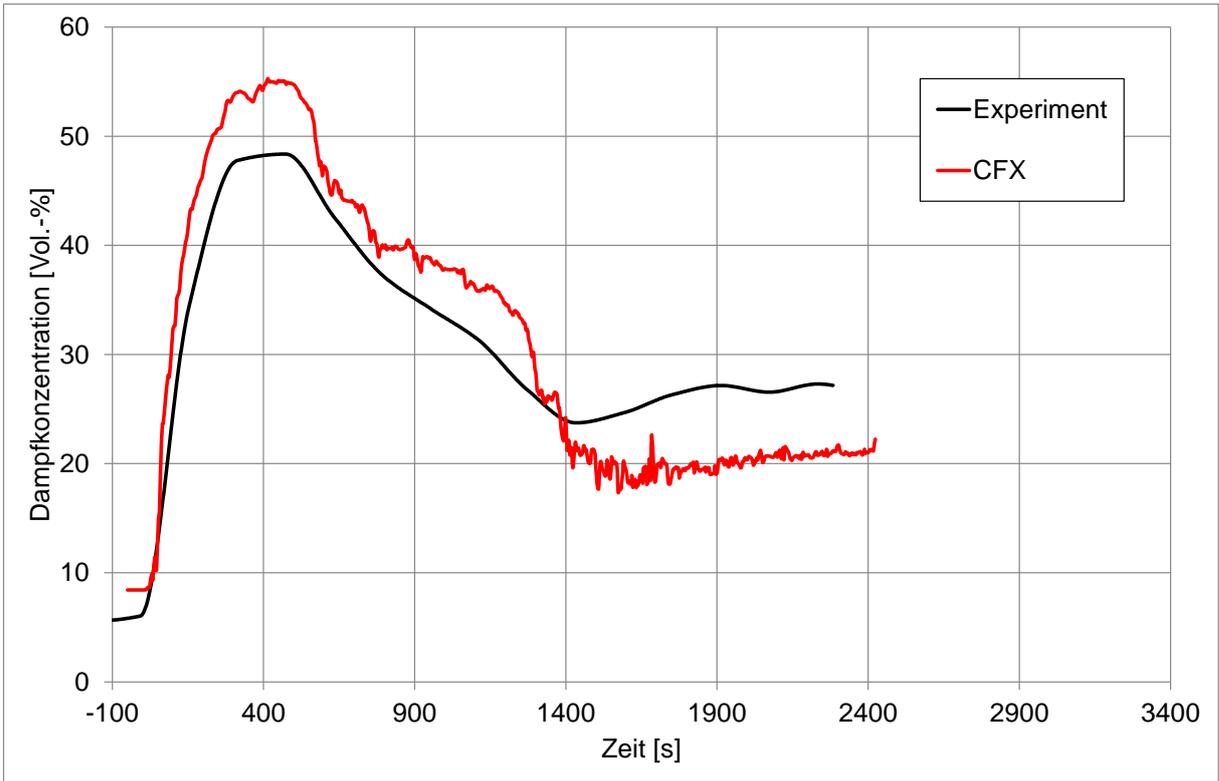


Abb. 4.5-6 Dampfkonzentration in 7,7 m Höhe (Messposition DCH77D11)

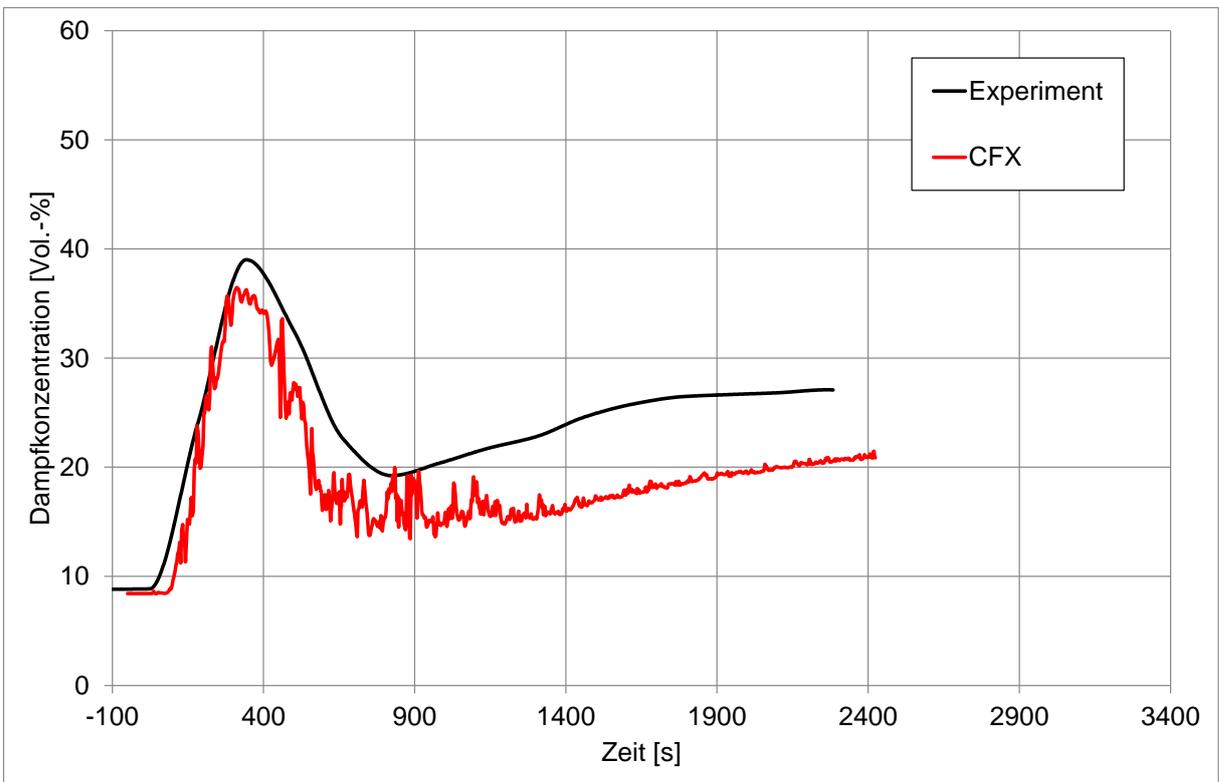


Abb. 4.5-7 Dampfkonzentration in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00)

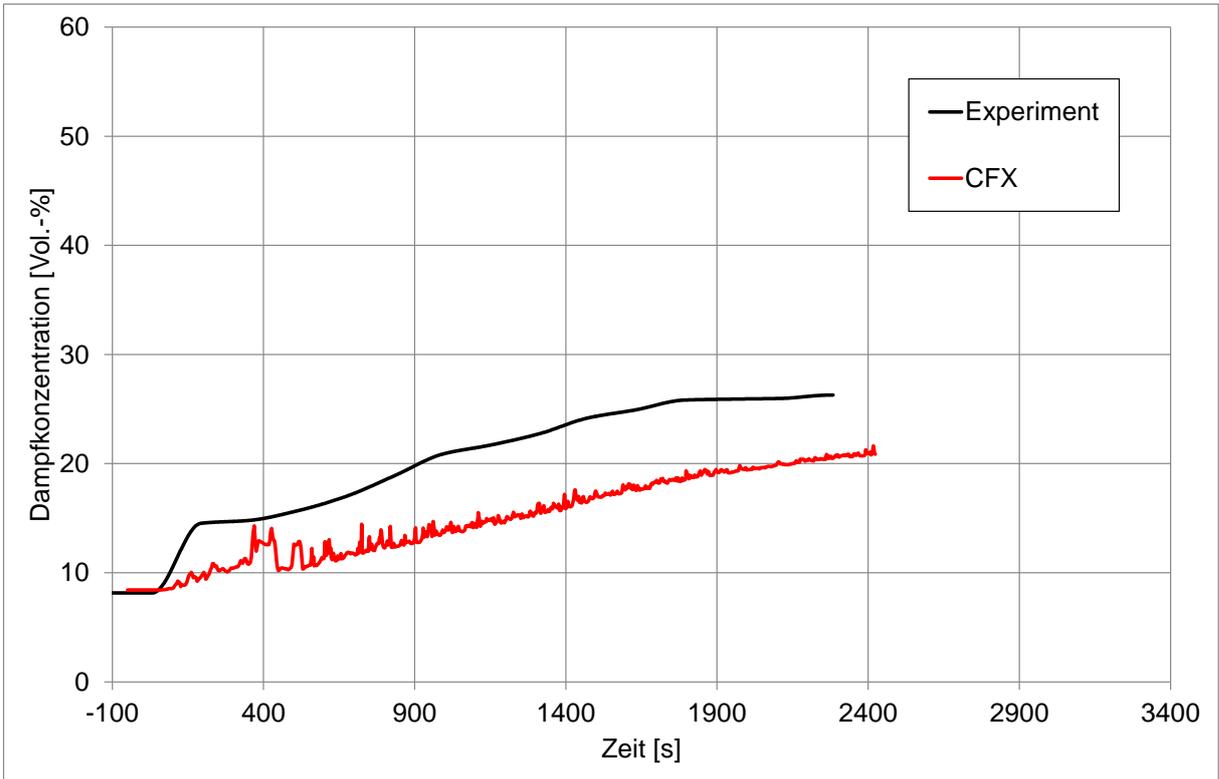


Abb. 4.5-8 Dampfkonzentration in 6,3 m Höhe (Messposition DCH63M00)

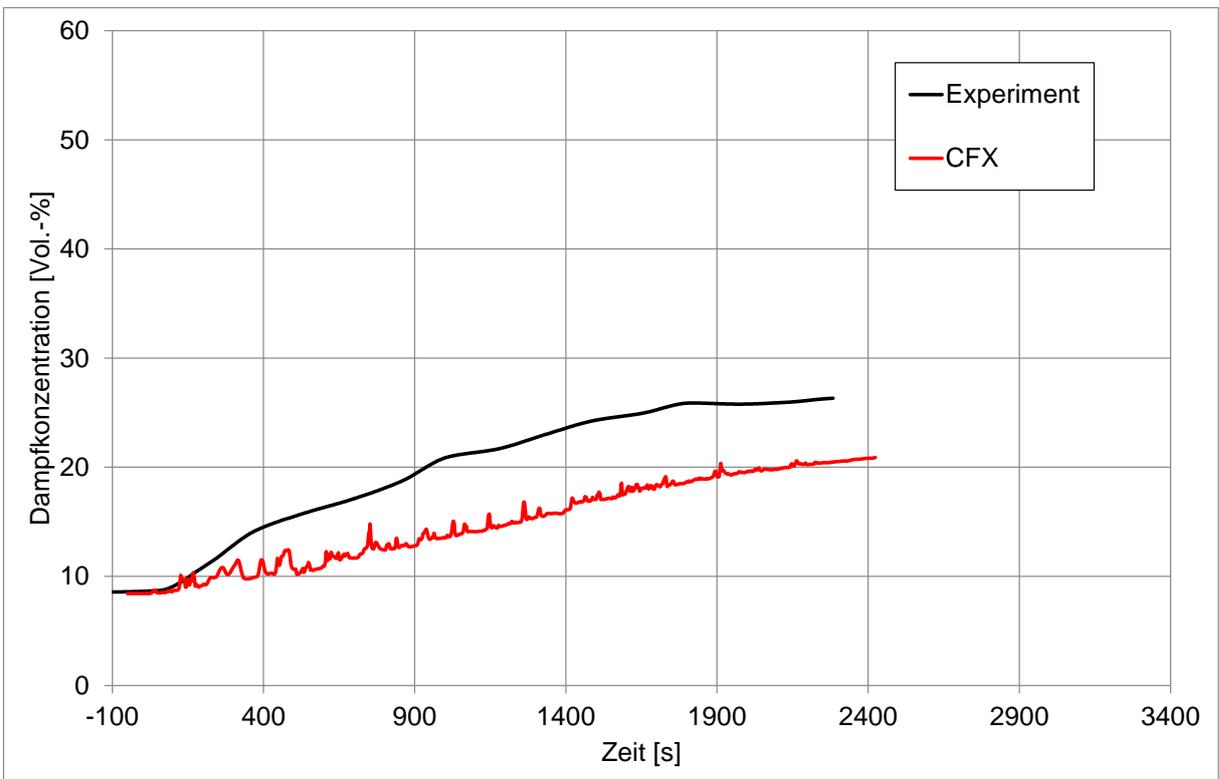


Abb. 4.5-9 Dampfkonzentration in 5,6 m Höhe (Messposition DCH56H11)

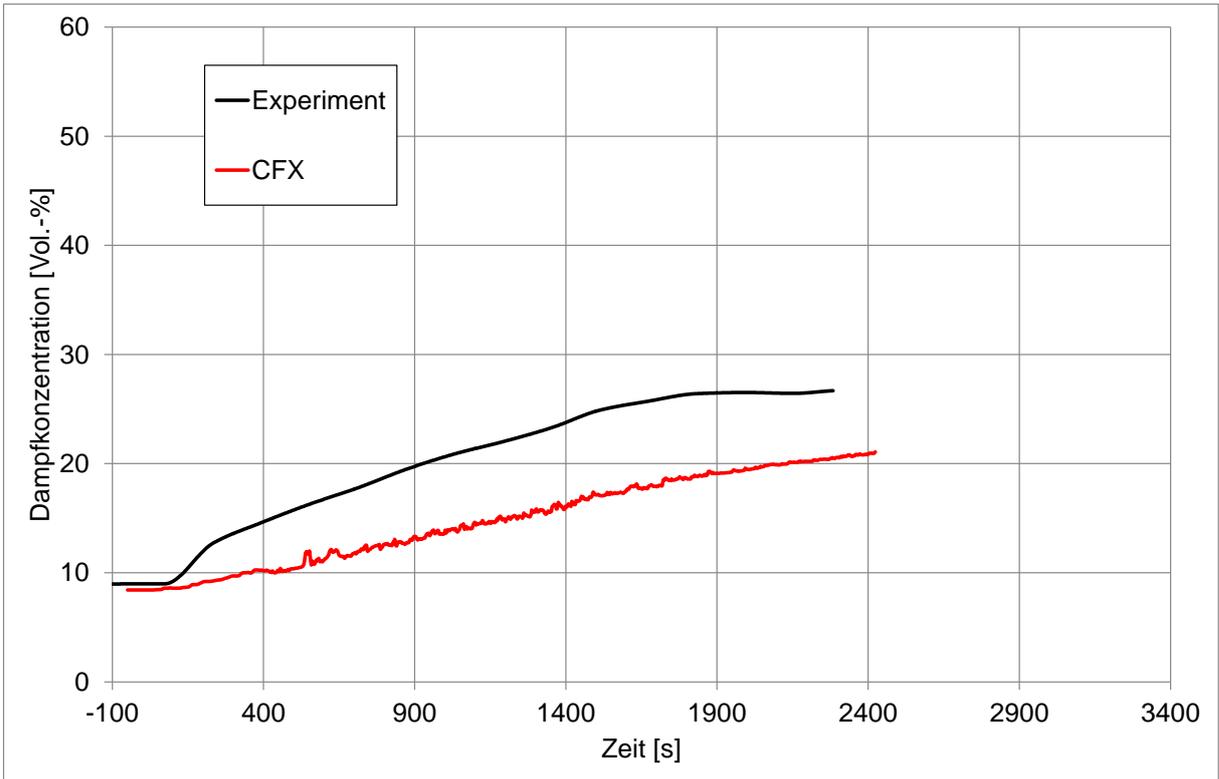


Abb. 4.5-10 Dampfkonzentration in 2,8 m Höhe (Messposition CCH28M00)

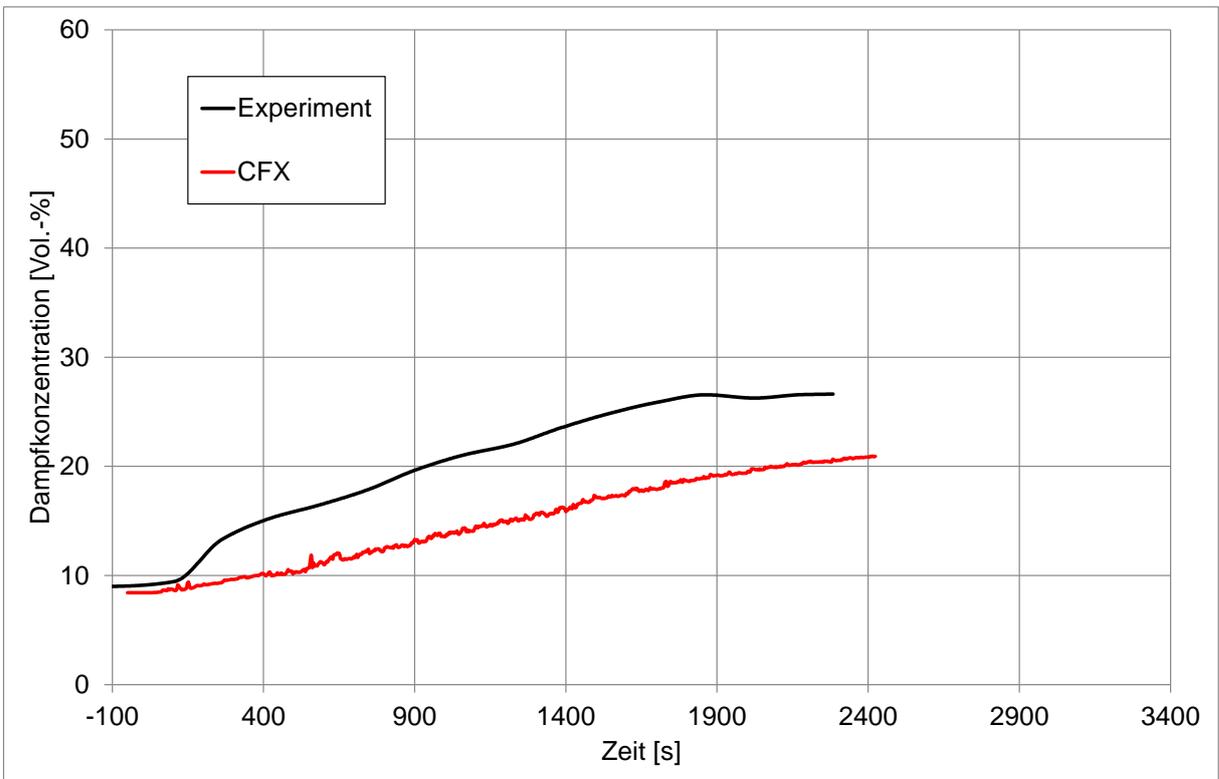


Abb. 4.5-11 Dampfkonzentration in 1,6 m Höhe (Messposition BCH16M00)

### 4.5.3.2 Gastemperaturen

Auch der Verlauf der Gastemperaturen im THAI-Behälter wird durch die Simulationen grundsätzlich qualitativ gut wiedergegeben (siehe Abb. 4.5-12 bis Abb. 4.5-16). Es fällt jedoch auf, dass der Temperaturanstieg durch die Dampfeinspeisung in der Simulation an allen Messpunkten überschätzt wird (für  $t = 0 - 400$  s). Mögliche Ursache für den zu hohen Temperaturanstieg ist wieder eine zu hohe Dampfeinspeiserate in der Simulation, da die Kondensation in der Einspeiseleitung nicht berücksichtigt wurde. Die Temperaturen gehen zwar in der Simulation auch wieder deutlich zurück, liegen aber auch später insgesamt etwas zu hoch (für  $t > 400$  s).

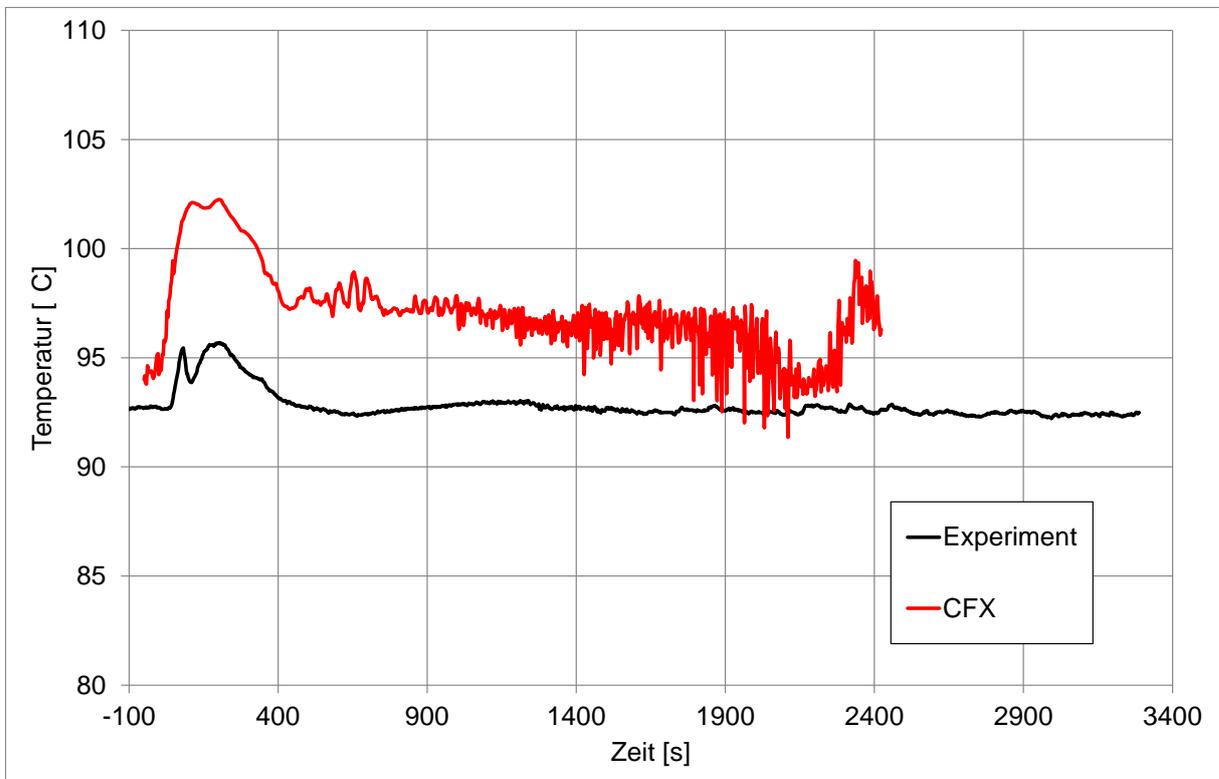


Abb. 4.5-12 Temperaturverlauf in 8,7 m Höhe (Messposition: DTF87M00)

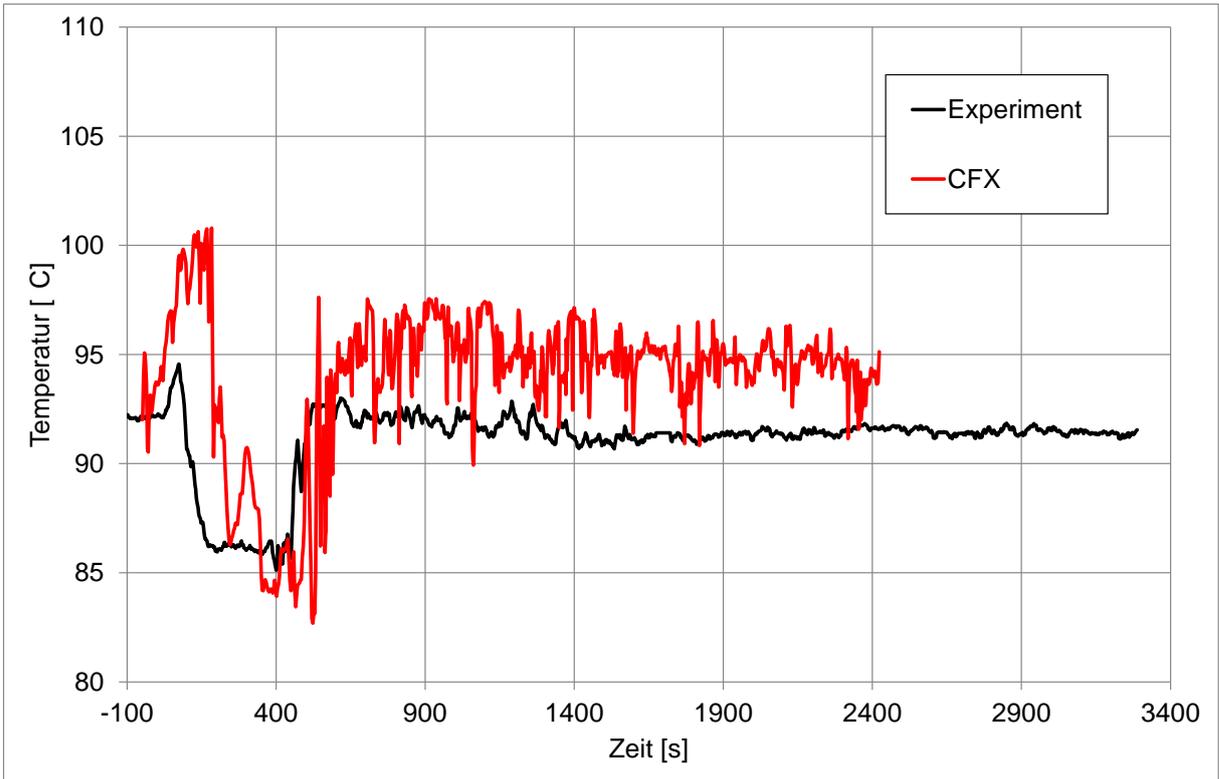


Abb. 4.5-13 Temperaturverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition: DTF70H11)

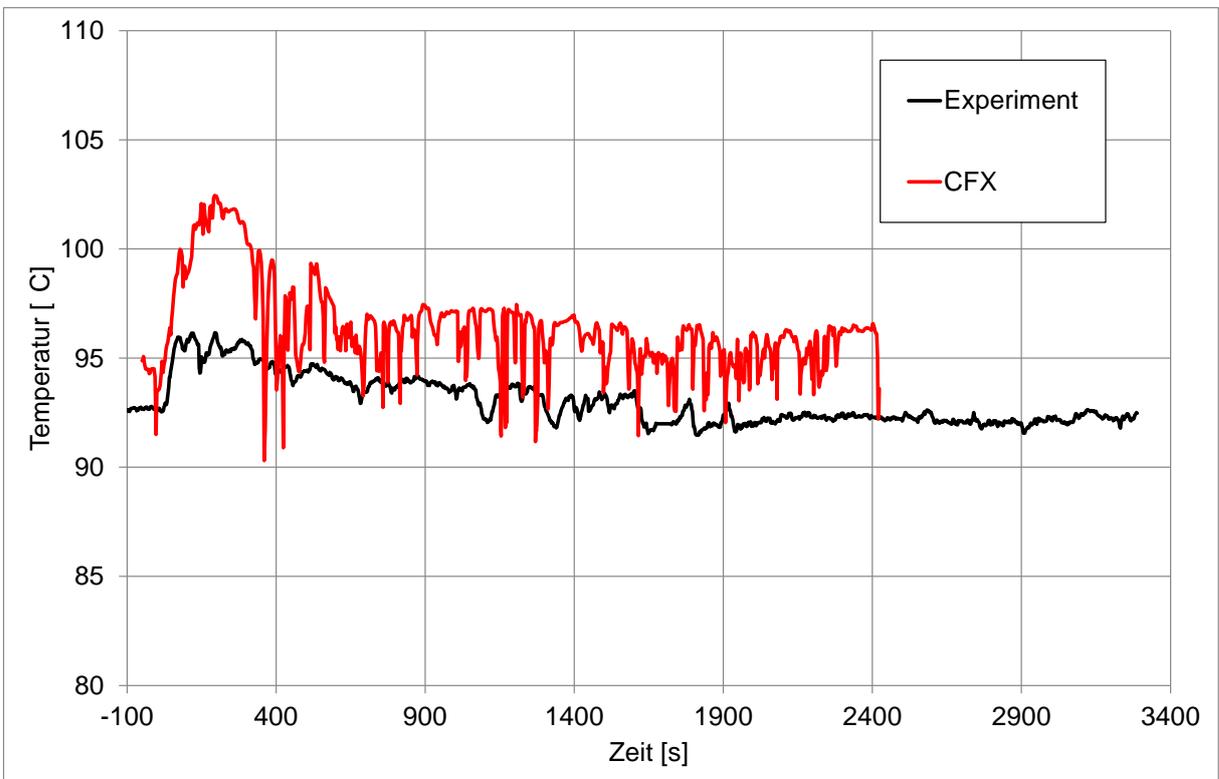


Abb. 4.5-14 Temperaturverlauf in 6,3 m Höhe (Messposition: DTF63H11)

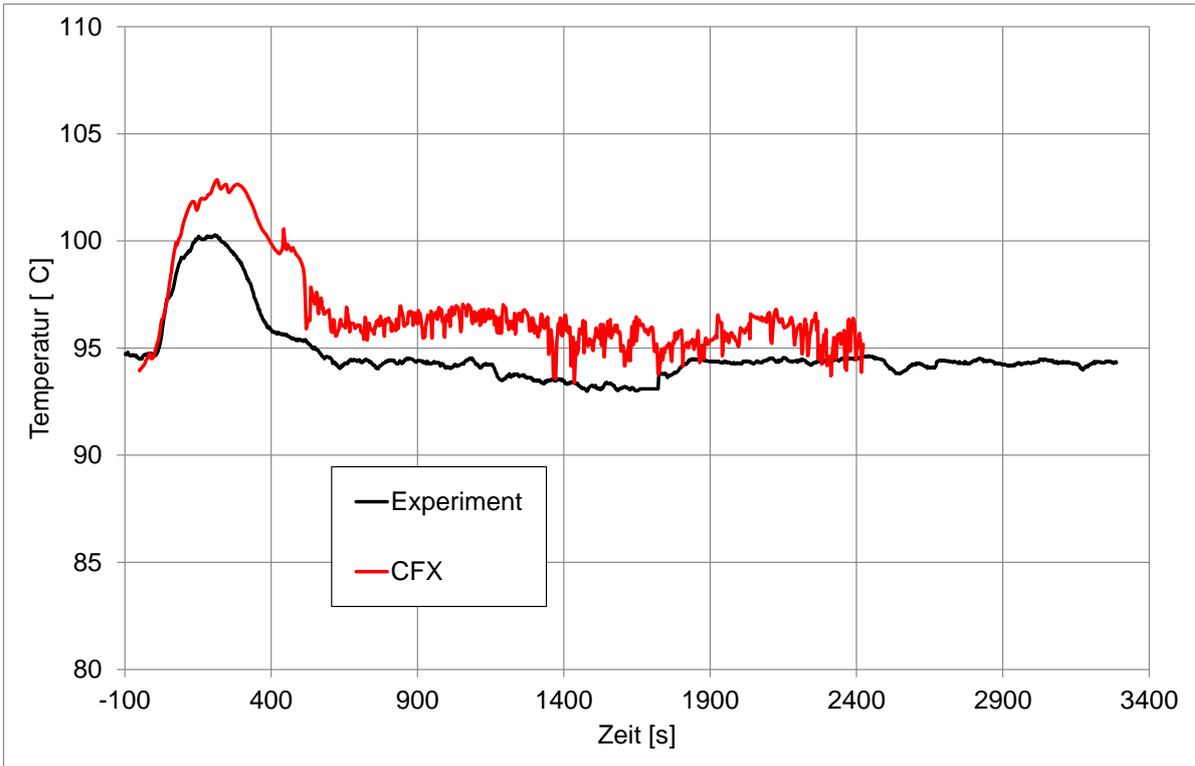


Abb. 4.5-15 Temperaturverlauf in 4,9 m Höhe (Messposition: CTF49M00)

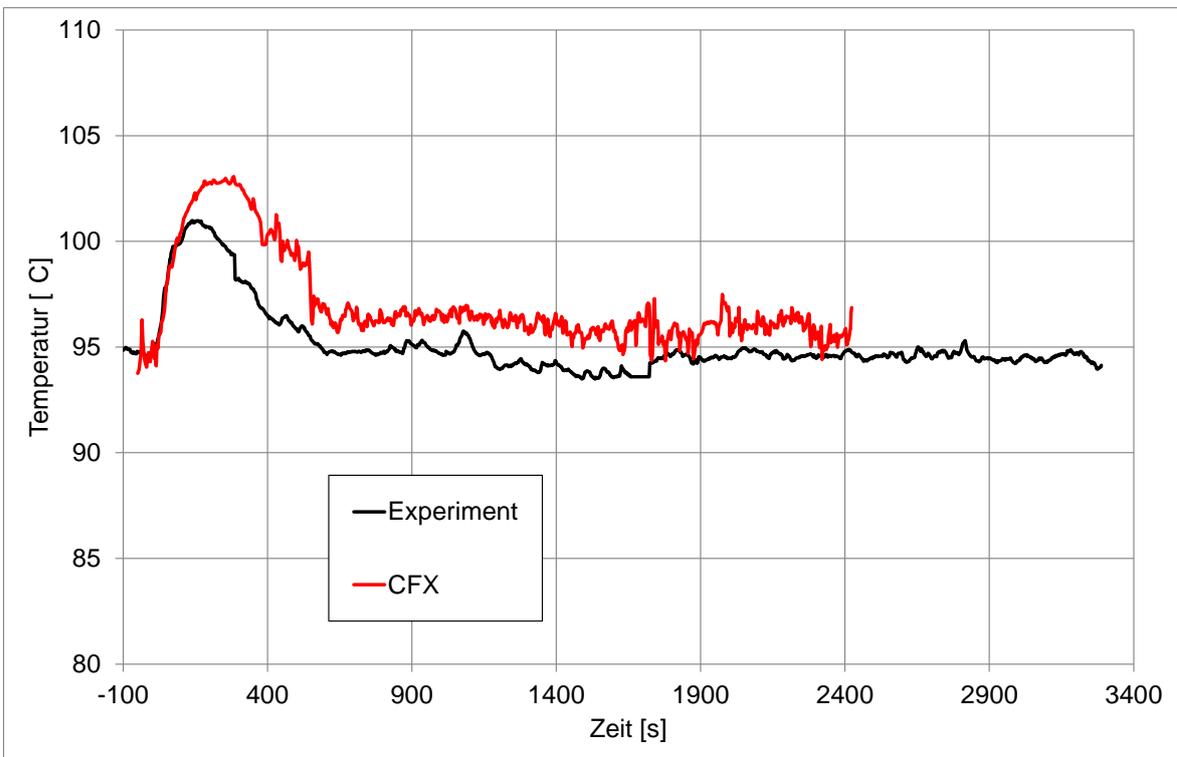


Abb. 4.5-16 Temperaturverlauf in 2,1 m Höhe (Messposition: BTF21M00)

### 4.5.3.3 Wandtemperaturen

In den Abb. 4.5-17 bis Abb. 4.5-19 sind die Wandtemperaturen in Höhe des Kühlmantels dargestellt. Für das Experiment sind in jedem Diagramm die Verläufe mehrerer Messpositionen dargestellt, die zwar in gleicher Höhe aber in unterschiedlichen Kreis-segmenten des THAI-Behälters lagen. Hier zeigt sich eine gewisse Streuung der experimentellen Daten.

Im Gegensatz zu den Angaben in der Spezifikation (siehe /FIS11/) wurde in dieser Simulation die Höhenabhängigkeit der experimentellen Temperaturdaten berücksichtigt. Da diese Temperaturen des Kühlmantels in der Simulation als Randbedingung vorgegeben wurden, passen die Simulationsdaten entsprechend gut zu den experimentellen Werten.

In Abb. 4.5-20 ist die Wandtemperatur am Innenzylinder dargestellt. Diese wird von der Simulation um einige Grad überschätzt.

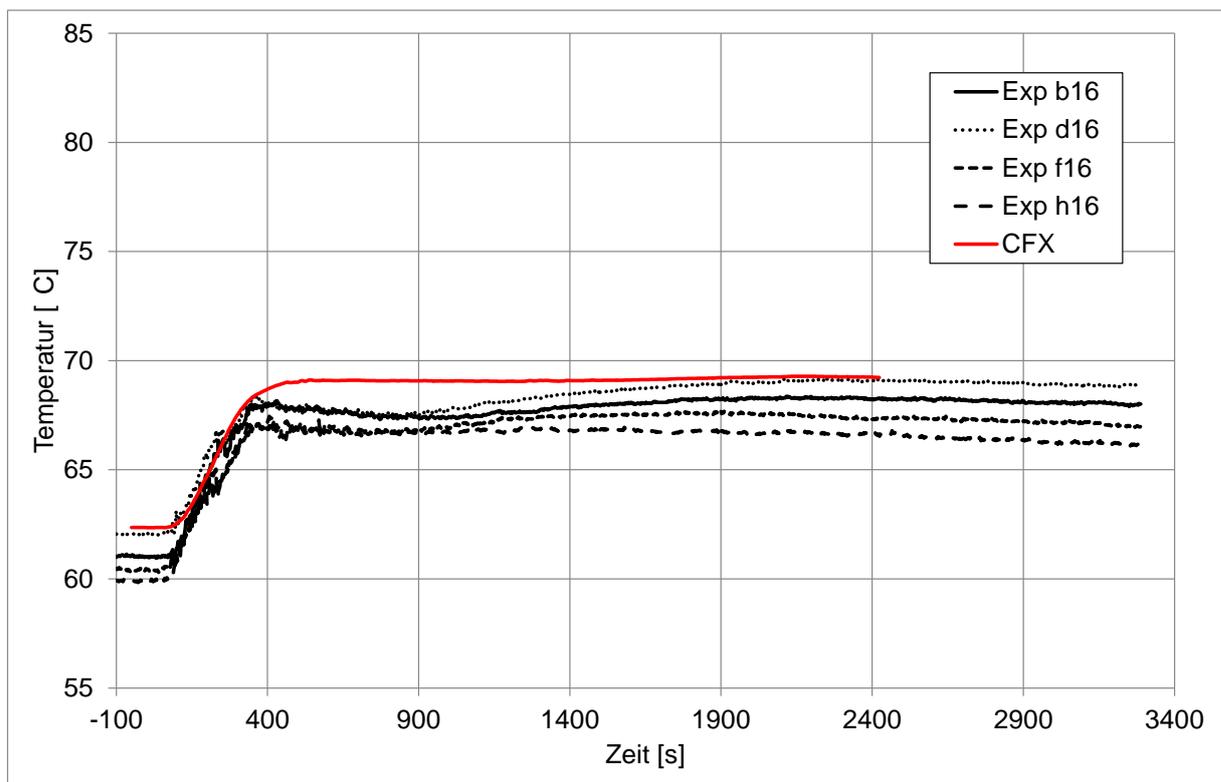


Abb. 4.5-17 Wandtemperatur in 6,8 m Höhe (Messposition JTW68H16)

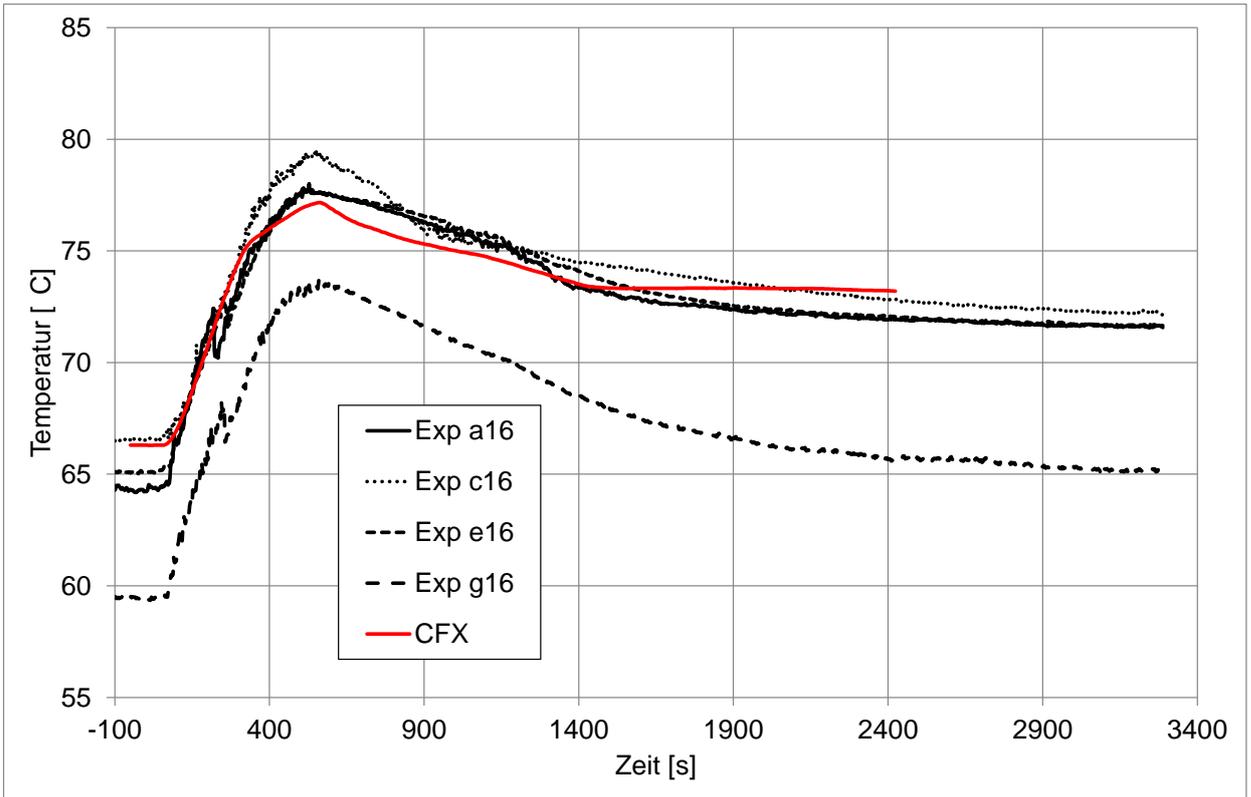


Abb. 4.5-18 Wandtemperatur in 7,4 m Höhe (Messposition: JTW74G16)

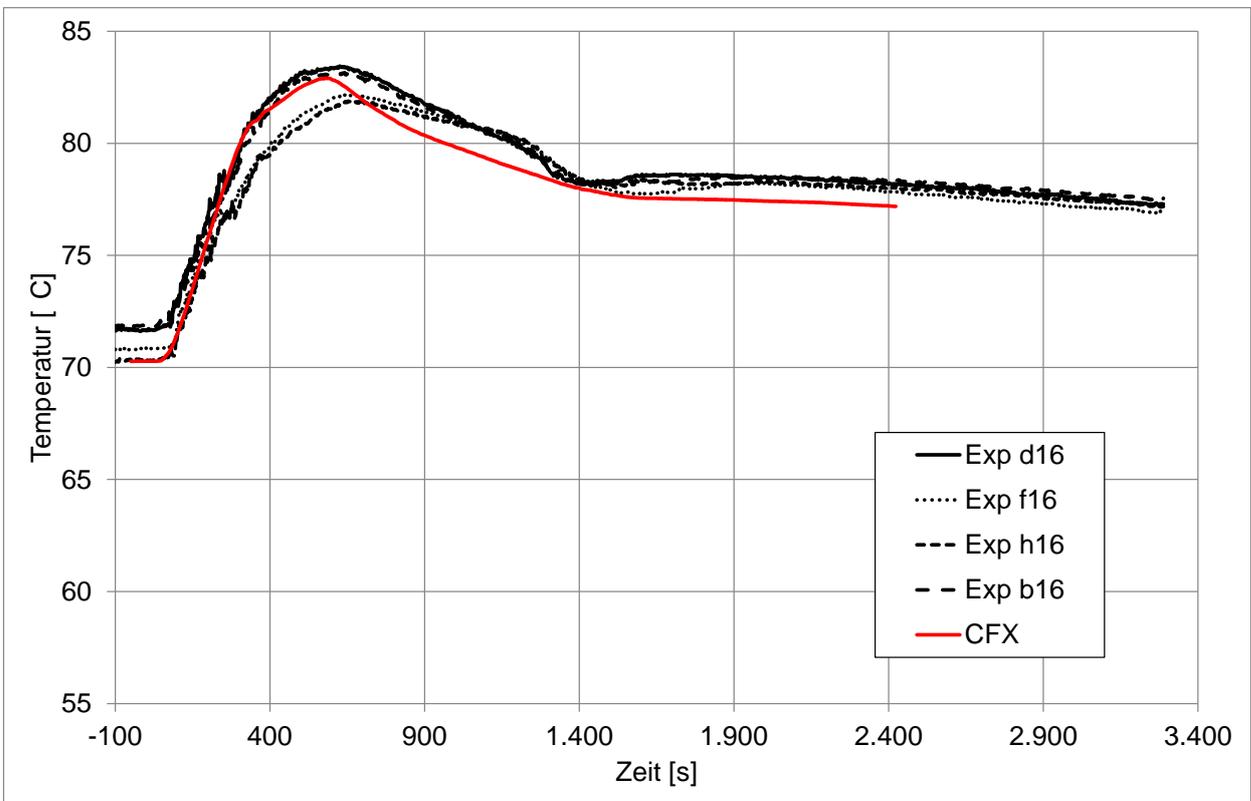


Abb. 4.5-19 Wandtemperatur in 8,0 m Höhe (Messposition: JTW80D16)

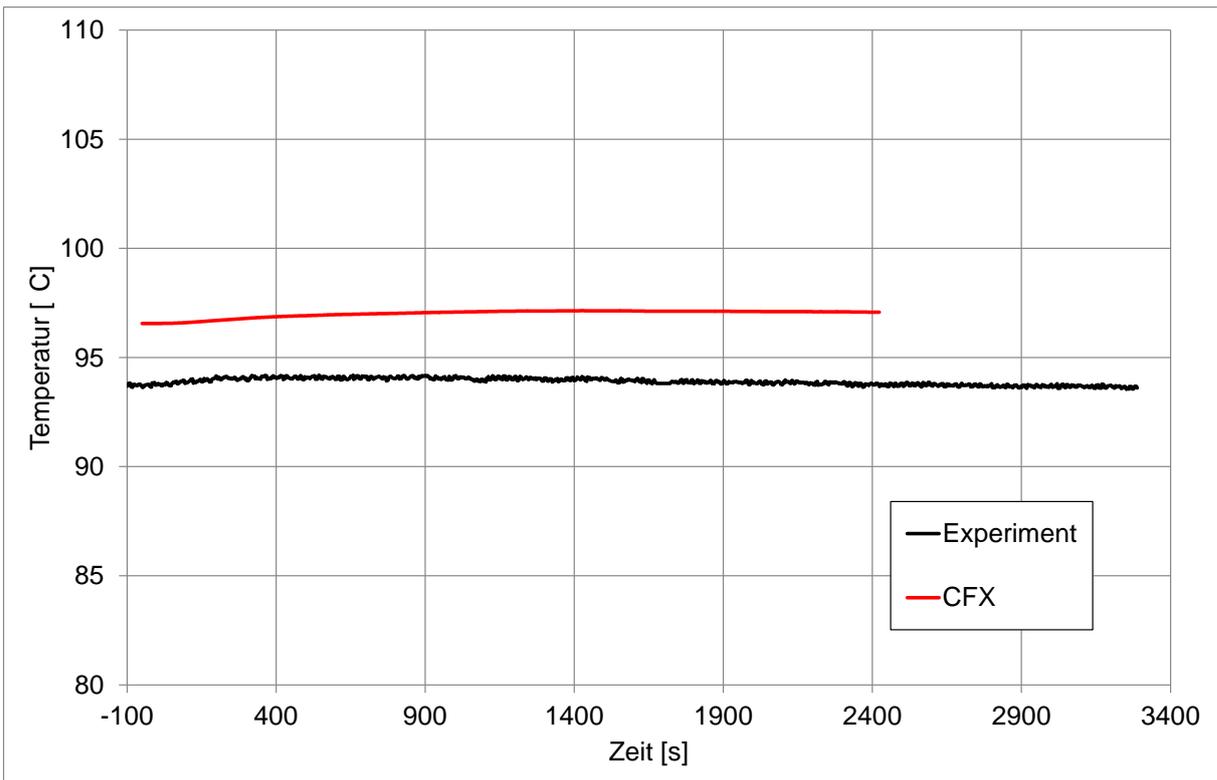


Abb. 4.5-20 Wandtemperatur am Innenzylinder in 4,3 m Höhe (Messposition: CTW43H07)

#### 4.5.3.4 Vertikalgeschwindigkeiten

Auch die Vertikalgeschwindigkeiten sind an verschiedenen Positionen im THAI-Behälter gemessen worden. Der Vergleich zeigt eine gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation (siehe Abb. 4.5-21 bis Abb. 4.5-23).

Allerdings ist die Aussagekraft der experimentellen Werte begrenzt, da die Messräder bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten (unterhalb von 0,1 – 0,2 m/s) nicht korrekt messen können. Mehrheitlich lagen die Strömungsgeschwindigkeiten im TH-24 Experiment allerdings in diesem kritisch niedrigen (Geschwindigkeits-)Bereich (siehe z. B. Abb. 4.5-22).

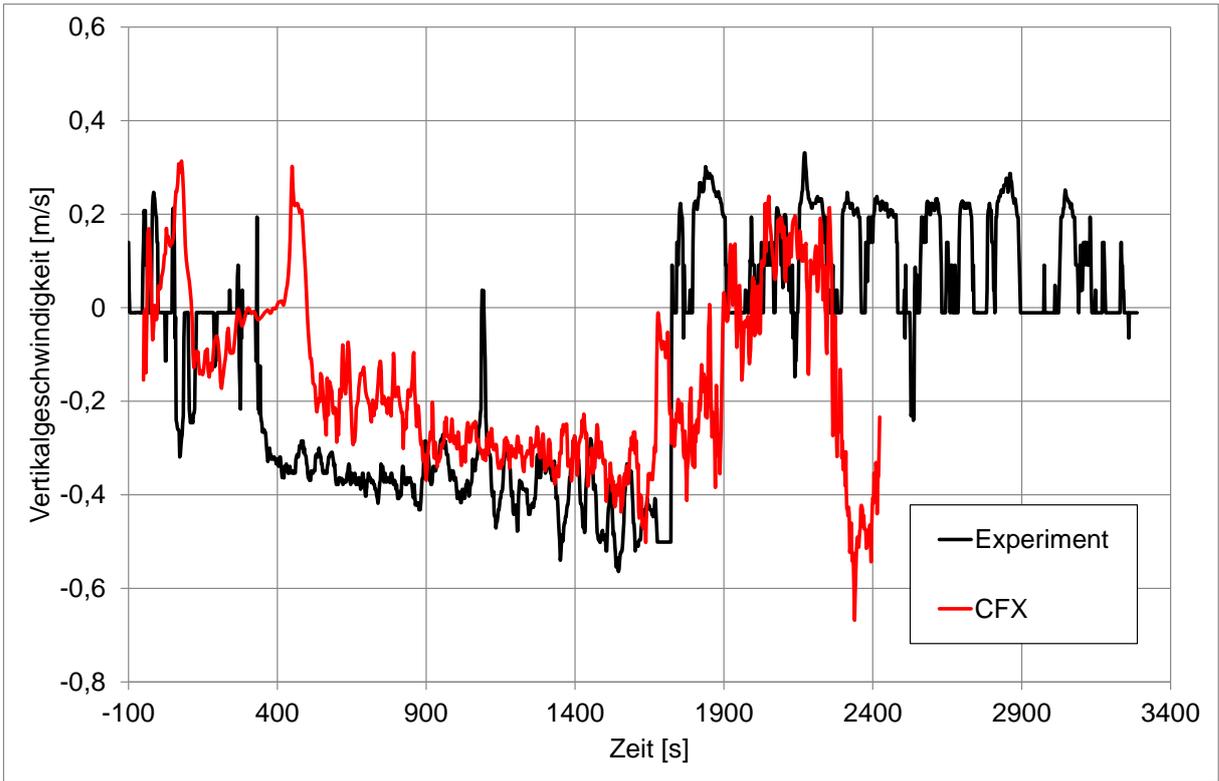


Abb. 4.5-21 Vertikalgeschwindigkeiten in 5,8 m Höhe (Messposition: CVT58M00)

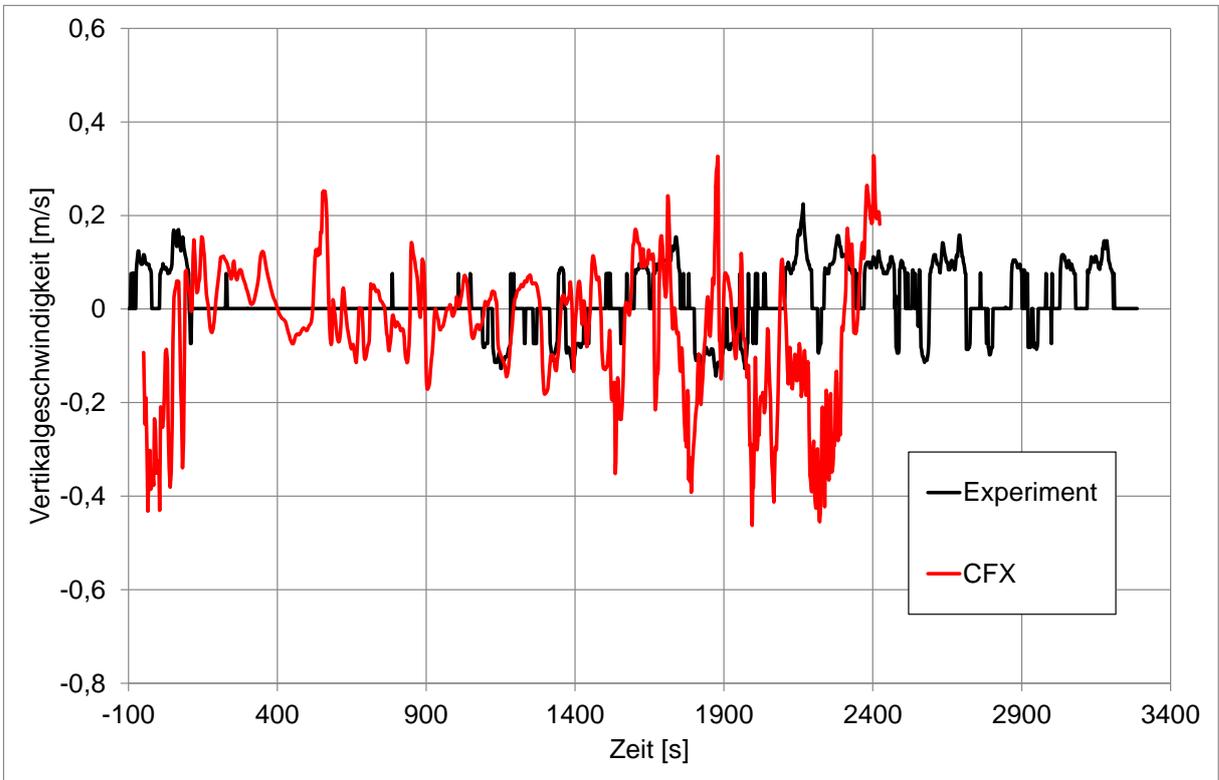


Abb. 4.5-22 Vertikalgeschwindigkeiten in 3,5 m Höhe (Messposition: CVT35D11)

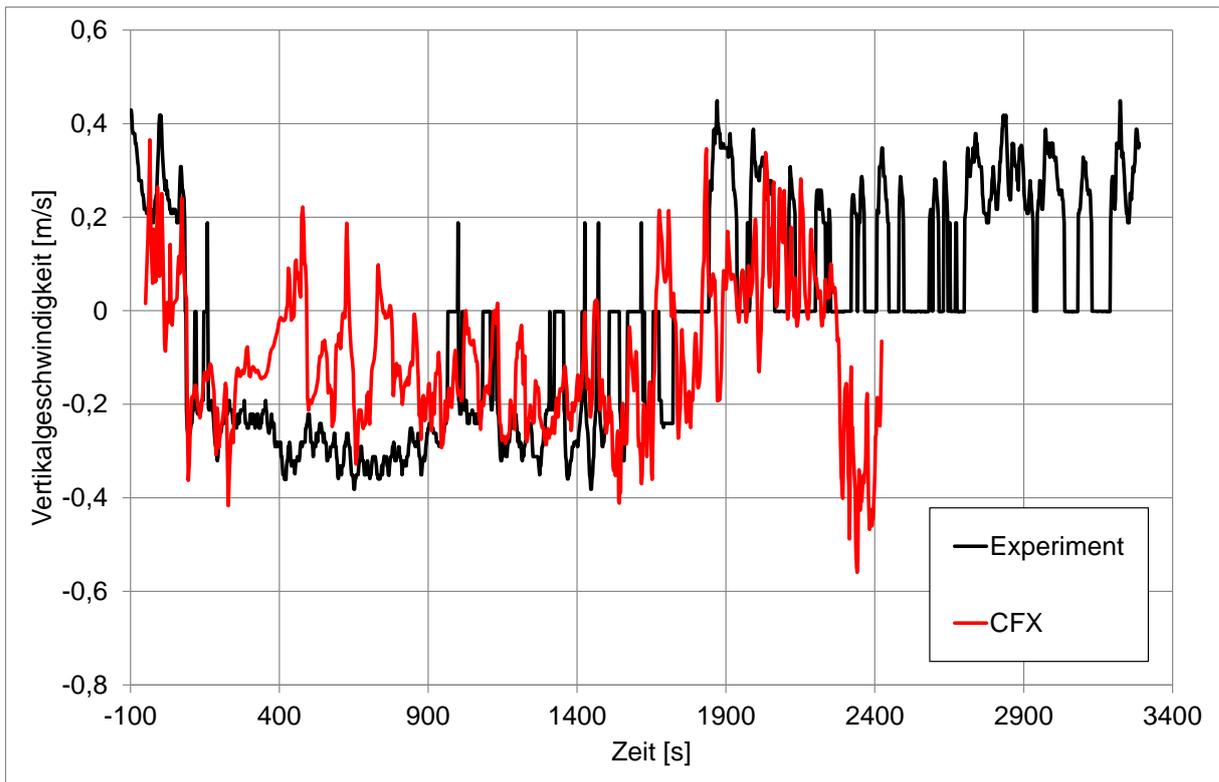


Abb. 4.5-23 Vertikalgeschwindigkeiten in 2,8 m Höhe (Messposition: CVT28F06)

#### 4.5.3.5 Druck und Kondensatmasse

In Abb. 4.5-24 wird der simulierte Druckverlauf im THAI-Behälter mit den experimentellen Werten verglichen. Hierbei zeigt sich, dass die Simulation den experimentellen Druckanstieg nicht richtig wiedergeben kann. Der Druckanstieg in der Simulation ist etwa 20 % kleiner als im Experiment. Durch einen Vergleich der an der gekühlten Behälterwand anfallenden Kondensatmasse (siehe Abb. 4.5-25) zeigt sich eine Ursache für den unterschiedlichen Druckverlauf: In der Simulation kondensiert deutlich mehr Dampf an der Wand als im Experiment. Warum in der Simulation die Kondensationsrate höher ist, ist nicht ganz klar. Möglicherweise spielt hier die Verteilung des Dampfes im Raum (und damit die Konzentration nahe der Wand) eine Rolle.

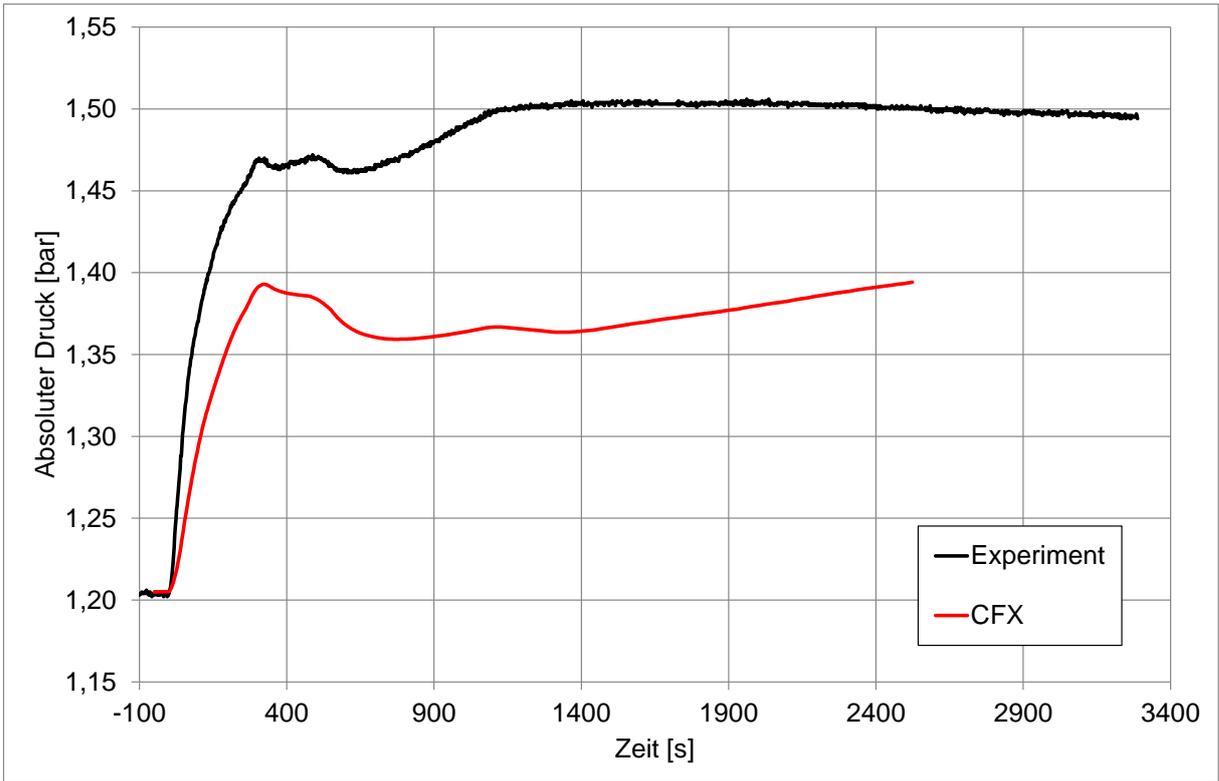


Abb. 4.5-24 Druckverlauf im THAI-Behälter

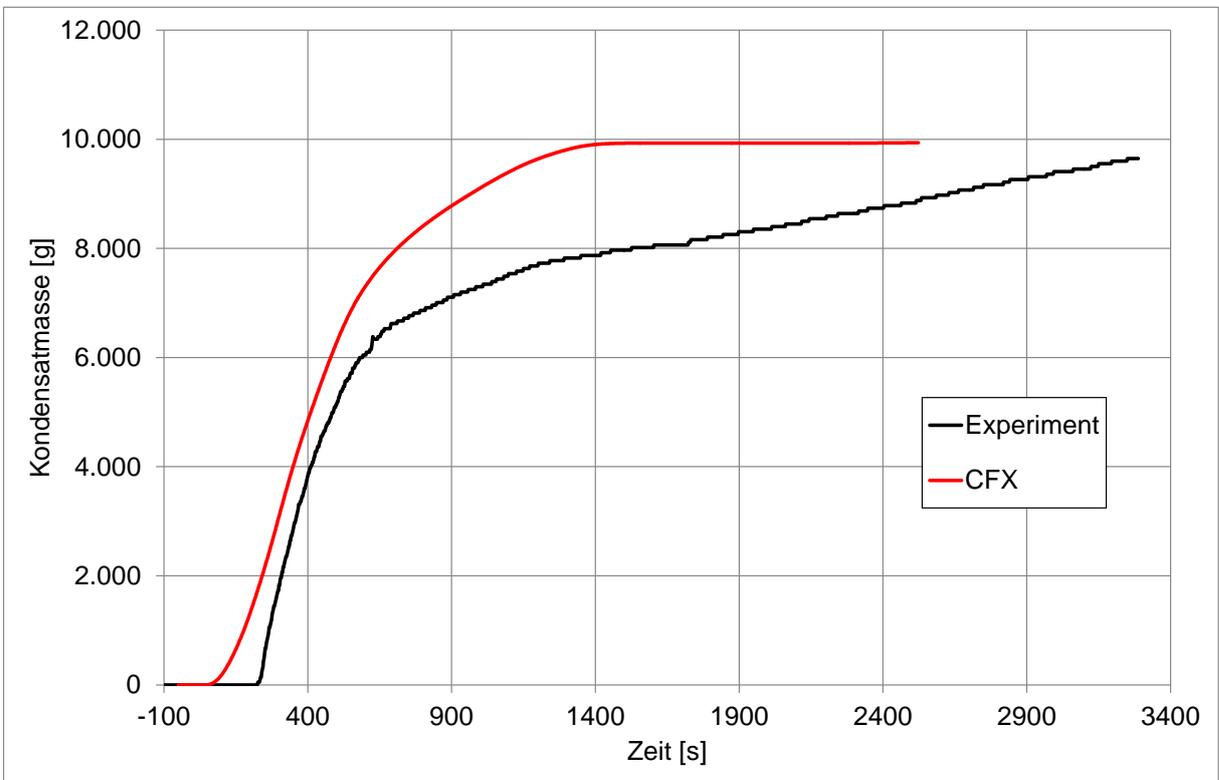


Abb. 4.5-25 An der gekühlten Wandfläche anfallende Kondensatmasse

#### 4.5.4 Durchführung einer Gitterstudie

Um den Einfluss des Gitters auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurden drei unterschiedliche Berechnungen durchgeführt (siehe Tab. 4.5-2). Die bis hierhin beschriebenen Berechnungen hatten sowohl im Fluid als auch im Solid ein feines Gitter. Die in der Tabelle genannten Größen Delta-x (Fluid/Solid) bezeichnen die Elementbreite für das erste Element an der Fluid/Solid Grenzfläche. Delta-x-Fluid ist dabei die Elementbreite im Gas und Delta-x-Solid die Elementbreite in der Wand, beide wurden variiert. Weiterhin wurde die Anzahl der Elemente in (vertikaler) z-Richtung im Dom-Bereich des THAI-Behälters variiert um den Einfluss auf den Konzentrationsgradienten der Dampfschicht zu untersuchen. Alle weiteren Simulationsparameter wurden gleich gelassen.

In den Abb. 4.5-26 und Abb. 4.5-27 ist der Einfluss des Gitters auf den Druckverlauf und auf den Konzentrationsverlauf in 7,0 m Höhe dargestellt. Es zeigt sich, dass die ein feineres Gitter im Gas zu einer Absenkung des Drucks und auch der Dampfkonzentration führt (rote Linie). Ursache hierfür ist wahrscheinlich eine stärkere Kondensation an der gekühlten Wandfläche. Die Feinheit des ersten Elementes in der Wand (grüne Linie) führt zu keiner größeren Veränderung der Simulationsergebnisse.

Tab. 4.5-2 Netzparameter für die Gitterstudie

Gittername	Elementzahl	Delta-x-Fluid	Delta-x-Solid	Dom-Gitter (z-Richtung)
Fluid grob, Solid grob	Fluid: 516 130 Solid: 163 024	5 – 20 mm	2 – 3 mm	25 Elemente
Fluid fein, Solid grob	Fluid: 653 981 Solid: 568 428	1 – 5 mm	2 – 3 mm	52 Elemente
Fluid fein, Solid fein	Fluid: 653 981 Solid: 568 428	1 – 5 mm	0,6 mm	52 Elemente

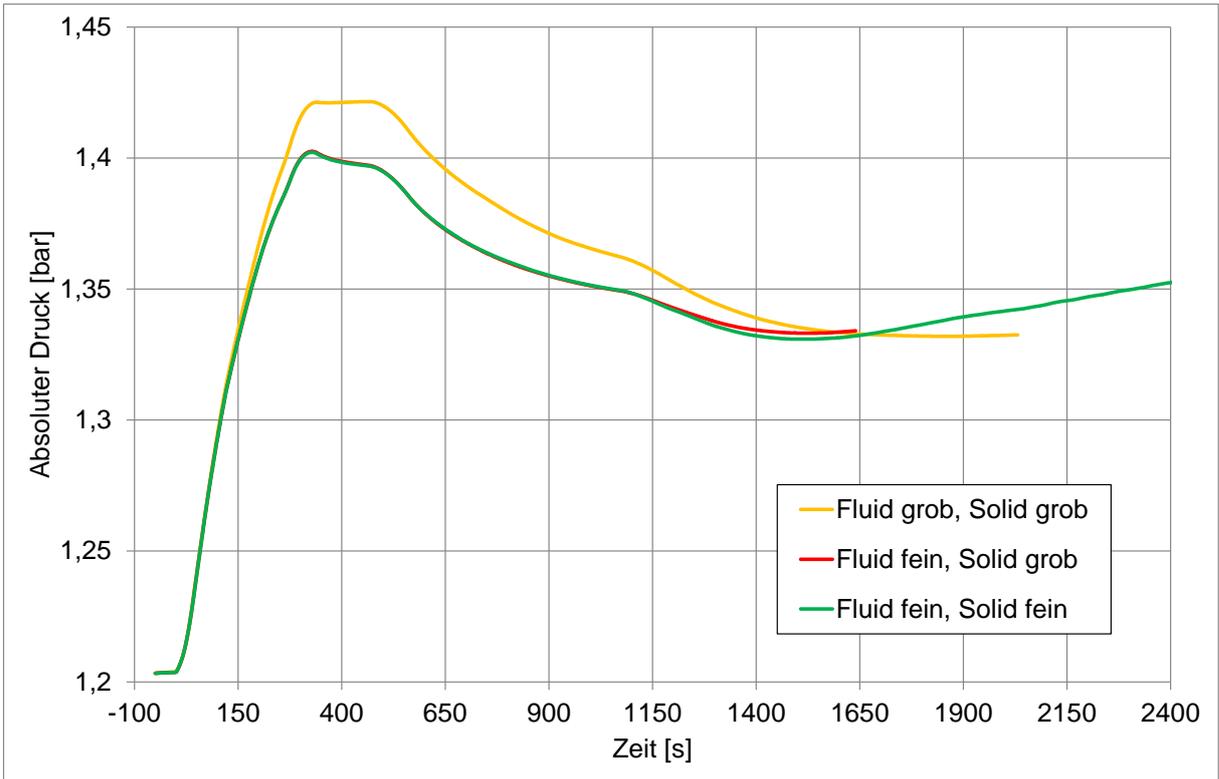


Abb. 4.5-26 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Druckverlauf

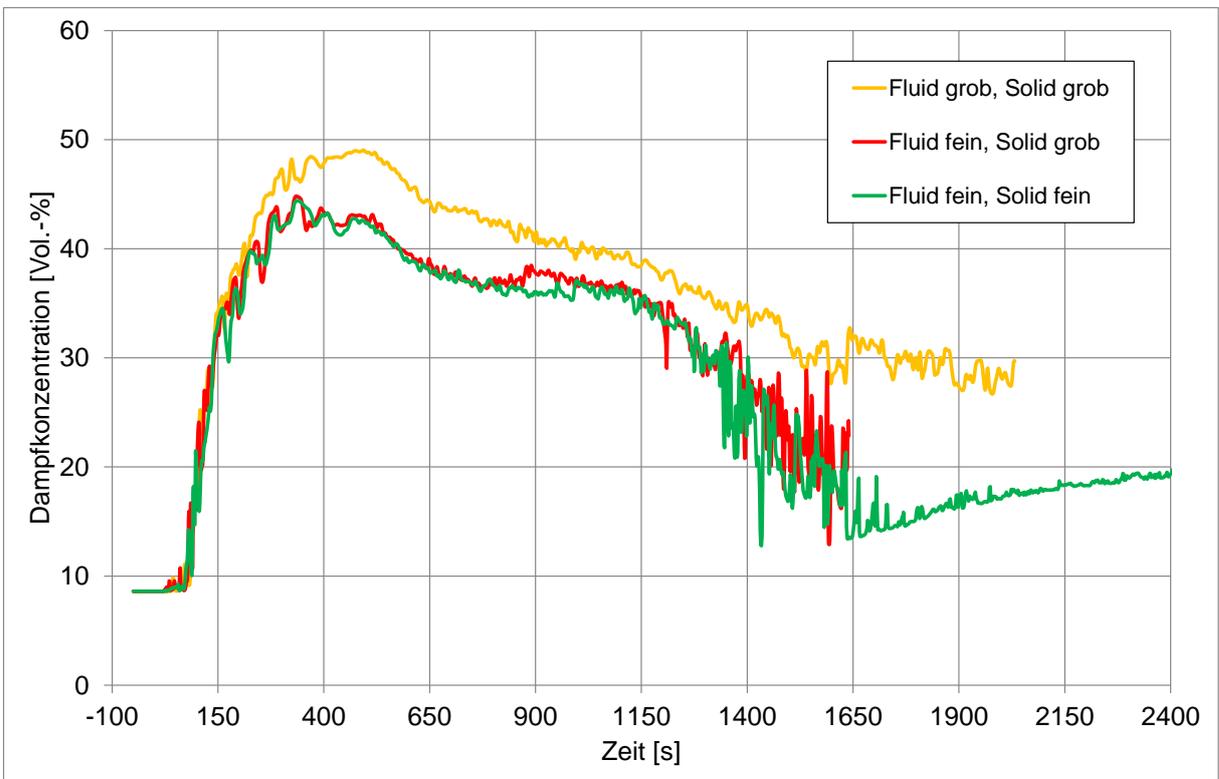


Abb. 4.5-27 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Konzentrationsverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00)

#### 4.5.5 Einfluss des Materialmodells

Um den Einfluss des (Dampf-)Materialmodells auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurden zwei Rechnungen mit unterschiedlichen Modellen durchgeführt. In einer Rechnung wurde für den Dampf ein Realgasmodell verwendet (Redlich-Kwong), in der anderen ein Idealgasmodell, dessen Wärmekapazität über Nasa-Polynome beschrieben wird (Name in CFX: H<sub>2</sub>O). Beim oben beschriebenen Vergleich mit dem Experiment wurde das Idealgasmodell mit Nasa-Polynomen verwendet. Alle anderen Berechnungsparameter wurden gleich gelassen.

Es zeigt sich, dass sowohl der Druck als auch die Dampfkonzentration beim idealen Gasmodell etwas niedriger sind als beim Redlich-Kwong-Modell (siehe Abb. 4.5-28 und Abb. 4.5-29).

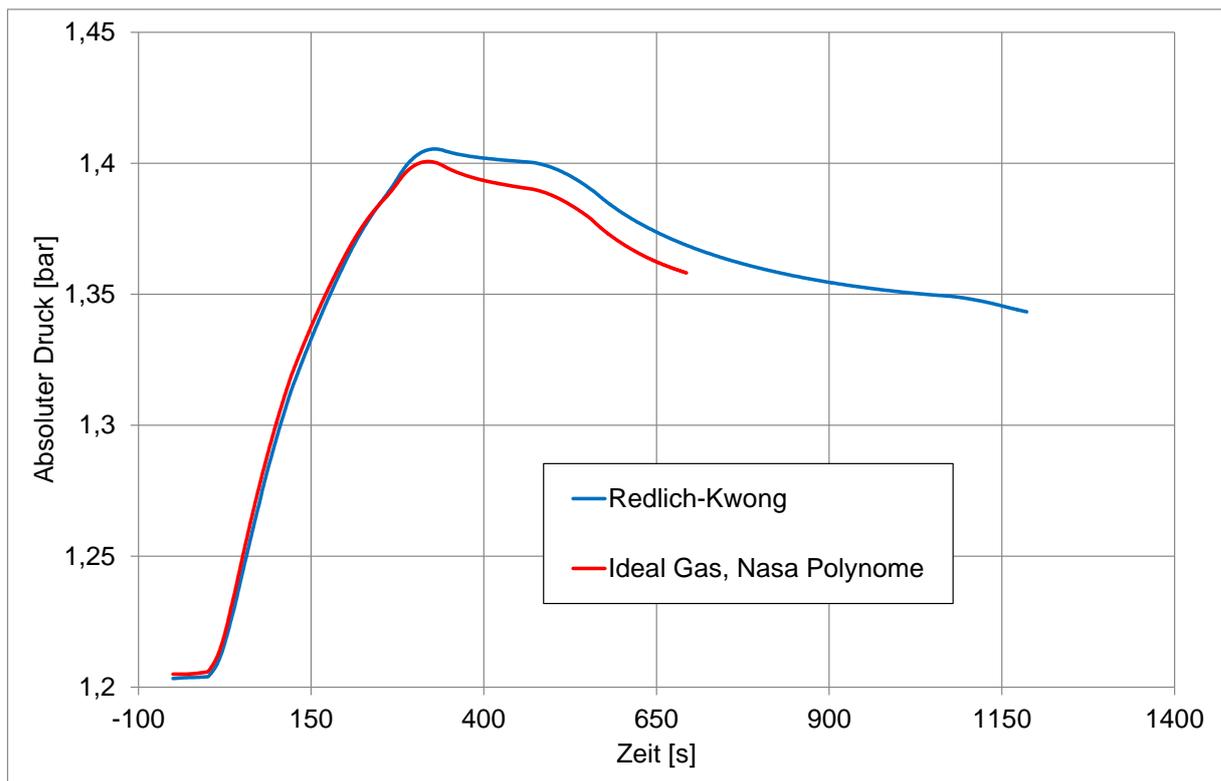


Abb. 4.5-28 Einfluss des Materialmodells auf den Druckverlauf

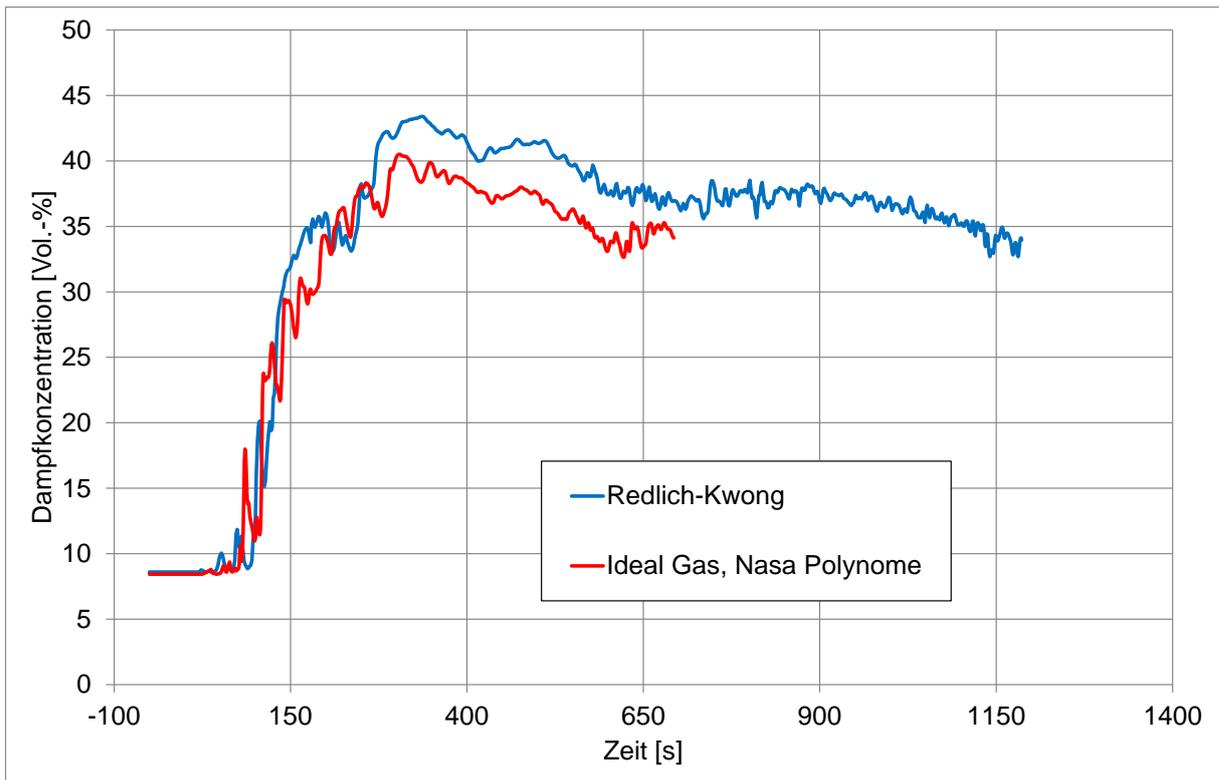


Abb. 4.5-29 Einfluss des Materialmodells auf den Konzentrationsverlauf in 7,0 m Höhe (Messposition DCH70M00)

#### 4.5.6 Test des neuen Kondensatmodells

Das neue Kondensat-Modell befindet sich noch in der Entwicklung. Sobald das neue Kondensatmodell inklusive der Möglichkeit zur Wiederverdampfung aus dem Kondensatfilm zur Verfügung steht, wird eine weitere Berechnung des TH-24 Experimentes mit diesem Modell durchgeführt, um die Funktionsweisen des Modells zu testen.

#### 4.5.7 Zusammenfassung und Ausblick

Der Versuch TH-24 konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeiten erfolgreich nachgerechnet werden. Die grundlegenden Prozesse: Naturumlauf, Bildung und Auflösung einer Dampfschicht, sowie Kondensation konnten qualitativ richtig wiedergegeben werden. Allerdings gibt es bei einzelnen Größen (z. B. Druck) noch quantitative Unterschiede zwischen Experiment und Simulation. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass die experimentellen Randbedingungen nicht genau bekannt waren. So fand z. B. zu Beginn der Einspeisephase eine Dampfkondensation noch innerhalb der Einspeiseleitung statt, die experimentell nicht quantifiziert werden konnte.

Im Rahmen einer Gitterstudie wurde der Einfluss des Gitters auf die Simulation untersucht. Weiterhin wurde der Einfluss des Materialmodells in einer zusätzlichen Parameterstudie analysiert.

Das neue Kondensat-Modell befindet sich noch in der Entwicklung, hier soll später noch eine weitere Rechnung durchgeführt werden.

#### **4.6 Zusammenfassung**

Die PANDA Experimente ST1.4 und ST2.1 konnten erfolgreich mit CFX nachgerechnet werden. Dabei wurden verschiedene Turbulenzmodelle getestet. Vernachlässigt man die Wärmestrahlung, so erfolgt die Schichtungsauflösung beim SST und auch beim  $k-\epsilon$ , und BSL Modell (ST1.4) deutlich zu langsam. Aufgrund der Versuchsbedingungen (über 100 °C, hoher Dampfgehalt) wurde der Einfluss der Wärmestrahlung untersucht. Dazu wurde das Discrete-Transfer-Modell verwendet. Allerdings gibt es noch einige Unsicherheiten hinsichtlich der Modellierung. Insbesondere die Wahl des Absorptionskoeffizienten für Dampf ist aufgrund der Wellenlängenabhängigkeit schwierig. Deshalb wurde eine Parameterstudie mit unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten durchgeführt, bei der das SST-Turbulenzmodell zum Einsatz kam. Bei Wahl des Absorptionskoeffizienten im Bereich von  $0.1 \text{ m}^{-1}$  bis  $25 \text{ m}^{-1}$  konnte eine deutliche Verbesserung der Simulationsergebnisse erzielt werden. Der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung erfolgt in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment.

Bei der offenen Nachrechnung des THAI Experimentes TH-22 konnten durch die Veränderung mehrerer Berechnungsparameter die Simulationsergebnisse im Vergleich zur blinden Vorrausrechnung deutlich verbessert werden. Weiterhin konnten die Ursachen für die noch vorhandenen Probleme bei der Simulation der Auflösung von Leichtgasschichten durch eine Parameterstudie teilweise aufgeklärt werden.

Der Versuch THAI Versuch TH-24 konnte ebenfalls erfolgreich nachgerechnet werden. Die grundlegenden Prozesse: Naturumlauf, Bildung und Auflösung einer Dampfschicht, sowie Kondensation konnten qualitativ richtig wiedergegeben werden. Allerdings gibt es bei einzelnen Größen (z.B. Druck) noch quantitative Unterschiede zwischen Experiment und Simulation. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass die experimentellen Randbedingungen nicht genau bekannt waren. So fand z.B. zu Beginn der Einspeisephase eine Dampfkondensation noch innerhalb der Einspeiseleitung statt, die experimentell nicht quantifiziert werden konnte.

## 5 Modifikation des Rekombinatormodells (AP 1.4)

### 5.1 Experimentelle Grundlagen

Im Rahmen eines OECD-Vorhabens wurden an der THAI-Versuchsanlage die HR Experimente (Abb. 5.1-1) durchgeführt /KAN09a, KAN09b/. Ziel der Untersuchungen war es, die Funktion von autokatalytischen Wasserstoffrekombinatoren bei unterschiedlichen Versuchsbedingungen zu untersuchen.

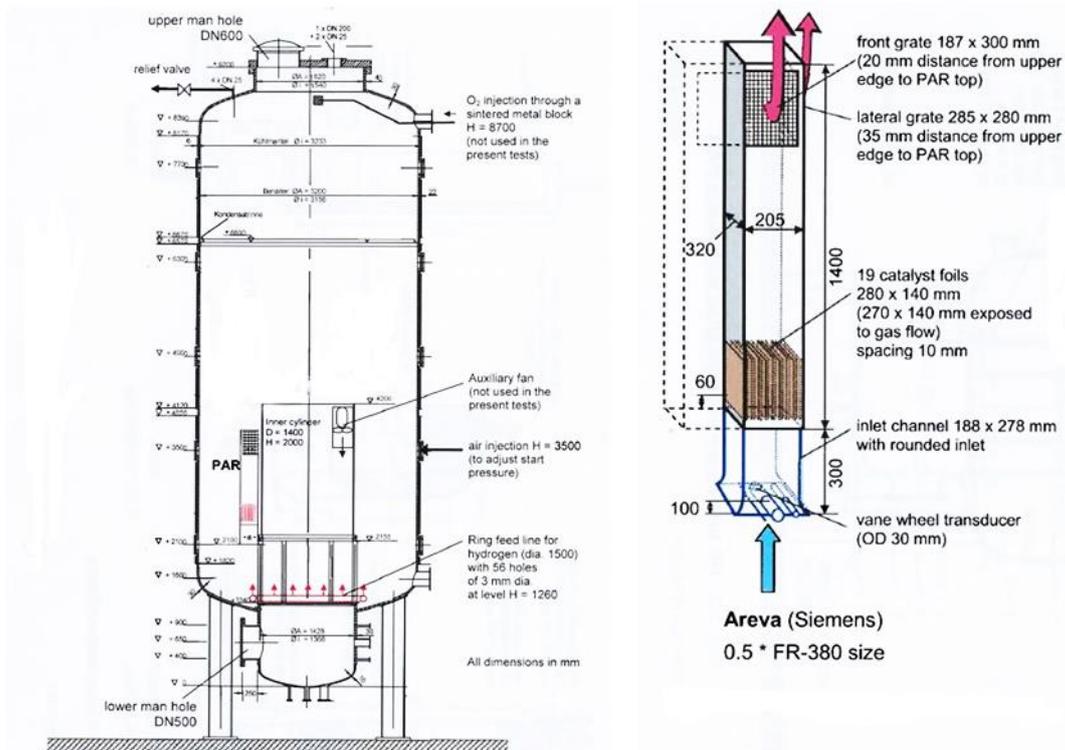
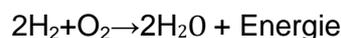


Abb. 5.1-1 Aufbau der HR Experimente und der Rekombinatoren FR-380 ½ /KAN09a/

Bei den THAI-Rekombinatorversuchen wird H<sub>2</sub> durch einen Ring mit 56 Öffnungen mit einem Durchmesser von 3 mm im Bodenbereich eingespeist. Im THAI-Behälter befindet sich ein autokatalytischer Rekombinator, der - sobald ein Schwellenwert bei der H<sub>2</sub>-Konzentration überschritten wird - mit dem Abbau von Wasserstoff beginnt. An den katalytischen Platten im Rekombinator läuft die chem. Reaktion ab:



Die bei der chemischen Reaktion freigesetzte Energie führt zu einer Temperaturerhöhung des Gases. Das leichtere heiße Gas strömt durch die obere Öffnung des Rekombinators und bildet eine Plume, die im THAI-Behälter aufsteigt.

Bei diesen Experimenten wurden drei verschiedene Rekombinatortypen untersucht (0.5\*AREVA FR-380, 0.52 AECL und 1/8 NIS). Beim hier verwendeten AREVA FR-380-Rekombinator wurde die Anzahl der katalytischen Bleche und der Strömungsquerschnitt halbiert (Abb. 5.1-1). An verschiedenen Stellen im THAI-Behälter und im Rekombinator wurden u. a. die Temperatur und die Wasserstoffkonzentration gemessen. Eine genauere Versuchsbeschreibung ist in /KAN09a/ zu finden.

Zur Modellierung der Rekombinatoren in CFX werden Korrelationen für die H<sub>2</sub>-Konzentration am Rekombinatoreauslass (Effizienz) und für die Abbauleistung (z. B. AREVA-Korrelation) benötigt. Im Folgenden wird zunächst auf die Effizienz und später dann auf die Abbauleistung eingegangen.

## 5.2 Korrelation für Effizienz

### 5.2.1 Herleitung einer Korrelation für die Effizienz

Die AREVA-Korrelation gibt die pro Zeiteinheit abgebaute H<sub>2</sub>-Masse im Rekombinator an. Um die Gaszusammensetzung und die Strömungsgeschwindigkeit durch den Rekombinator berechnen zu können, wird eine zweite Korrelation für die Effizienz benötigt. Die Effizienz ist wie folgt definiert:

$$\eta = \frac{x_{H_2}^{Ein} - x_{H_2}^{Aus}}{x_{H_2}^{Ein}} * 100$$

Bei den bisher durchgeführten Simulationen /SCH10/ wurde die Effizienz als ein konstanter Wert vom Nutzer vorgegeben. Mit dieser Annahme wurden die ersten beiden Versuchsphasen der Experimente HR-2, HR-5 und HR-12 nachgerechnet und die Sensitivität auf die Konstante  $\eta$  wurde untersucht. Dabei hat sich gezeigt, dass  $\eta$  einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die berechnete Schichtung im THAI-Behälter hat. Über eine geänderte H<sub>2</sub> Eintrittskonzentration hat  $\eta$  indirekt auch die Abbaurate beeinflusst. Wird z. B. angenommen, dass H<sub>2</sub> im Rekombinator komplett abgebaut wird ( $\eta = 100\%$ ), so kommt es zu deutlichen Abweichungen bei der berechneten Schich-

tung und auch bei der Abbaurrate. Allerdings hat eine Änderung von  $\eta$  um wenige Prozent nur zu geringen Abweichungen bei der berechneten Schichtung und damit auch der Abbaurrate geführt.

Für Containmentanwendungen ist die Vorgabe einer konstanten Effizienz durch den Nutzer nur bedingt geeignet. Zum einen kann sich die Effizienz auch während einer Simulation stark ändern (z. B. HR-12 in 3. + 4. Phase), zum anderen liegen dem Nutzer in der Regel auch keine experimentellen Daten vor, an die er  $\eta$  anpassen könnte. Deshalb wird eine Korrelation benötigt, die alle relevanten Abhängigkeiten berücksichtigt.

Im Folgenden wird eine einfache empirische Korrelation für die Effizienz ähnlich der AREVA-Korrelation aus den experimentellen Daten der HR-Versuche abgeleitet.

Es wurden folgende Abhängigkeiten bei den HR Experimenten identifiziert (siehe Abb. 5.2-1):

- Mit zunehmenden Druck nimmt die Effizienz ab (z. B. Vergleich HR-2 (1 bar) mit HR-5 (3 bar), Abb. 5.2-1).
- Mit zunehmenden Dampfgehalt nimmt die Effizienz zu (z. B. Vergleich HR-5 mit HR-12, Abb. 5.2-1).
- Bei niedrigen  $H_2$ -Konzentrationen ( $\sim x_{H_2} < 1,6$  vol %) nimmt die Effizienz zu (z. B. HR-3, Abb. 5.2-1).
- Bei noch niedrigeren  $H_2$ -Konzentrationen ( $\sim x_{H_2} < 0,375$  vol %) nimmt die Effizienz dagegen drastisch ab (z. B. HR-3, Abb. 5.2-1).
- Wenn der Rekombinator kein  $H_2$  mehr abbaut, soll die Effizienz im Rekombinatormodell 0 sein (gleiche  $H_2$ -Konzentration am Einlass wie am Auslass).  
Anmerkung: Im Modell wurde dies durch einen festen Wert von 0,1 vol.% implementiert (nicht über  $x_{min}$ ), da sonst Inkonsistenzen/numerische Fehler auftreten können.
- Durch Sauerstoffarmut wird die Effizienz stark verringert. Als erster Ansatz wird derselbe Ansatz wie bei der Abbaurrate für die Modifikation verwendet (siehe z. B. HR-9 bei ca. 9000 s, Abb. 5.2-1).

Entsprechend diesen Überlegungen wurden umfangreiche Parameterstudien durchgeführt. Folgende Korrelation für die Effizienz hat sich dabei als geeignet herausgestellt:

$$\eta = (63 - (p - 1) * 9 + x_{H_2O} * 0.1 + c_{H_2}) * f_{ox}$$

mit

$$c_{\text{H}_2} = \begin{cases} 0 & \mathbf{x}_{\text{H}_2} \geq 1.6 \\ \frac{\eta(\mathbf{x}_{\text{H}_2} = 1.6) - 10 \mathbf{x}_{\text{H}_2}}{0.375 - \mathbf{x}_{\text{min}}} \mathbf{x}_{\text{H}_2} - \frac{\eta(\mathbf{x}_{\text{H}_2} = 0.375)}{0.375 - \mathbf{x}_{\text{min}}} \mathbf{x}_{\text{min}} & 1.6 > \mathbf{x}_{\text{H}_2} \geq 0.375 \\ & 0.375 > \mathbf{x}_{\text{H}_2} \end{cases}$$

$$f_{\text{ox}}(\xi) = \begin{cases} 1 & \xi \geq 1.2 \\ \max\left(\frac{\xi}{1.2}; 0,4\right) & \end{cases}$$

$$\xi = \frac{\mathbf{x}_{\text{O}_2}}{\mathbf{x}_{\text{H}_2}}$$

Dabei sind  $x_{\text{H}_2}$  und  $x_{\text{H}_2\text{O}}$  die Konzentrationen in Volumenprozent und  $p$  der Druck in bar.

## 5.2.2 Vergleich der Effizienz-Korrelation mit Messdaten der HR-Versuche

Bei Bewertung der Korrelation ist zu berücksichtigen, dass es sich um eine empirische Abhängigkeit handelt, in die nur der Zustand am Rekombinatoreingang (Druck, Konzentrationen) eingeht. Einflussfaktoren wie der Effekt einer Anströmung des Rekombinators oder der einer bestehenden Schichtung etc. lassen sich deshalb nicht berücksichtigen. Deshalb ist mit gewissen Abweichungen zu den Messwerten zu rechnen.

Die Korrelation für die Effizienz wird im Folgenden mit den Messergebnissen mehrerer HR Experimente verglichen /KAN09a/, /KAN09b/. Dazu wurde eine „Stand-Alone-Version“ des Rekombinatoremodells erstellt. Der zeitliche Verlauf der gemessenen Konzentrationen am Rekombinator und der gemessene Druck dienen dabei als Eingangsparameter für die Korrelation.

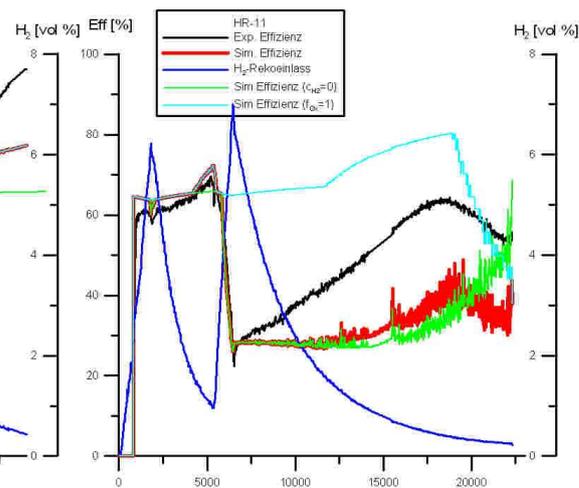
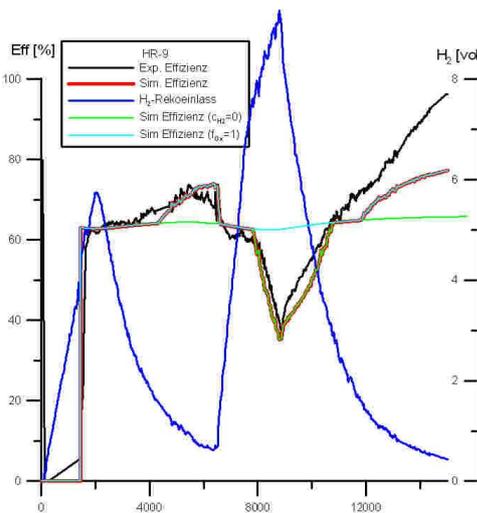
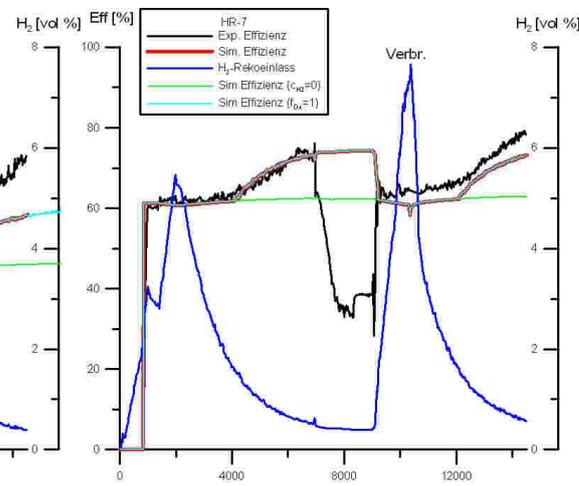
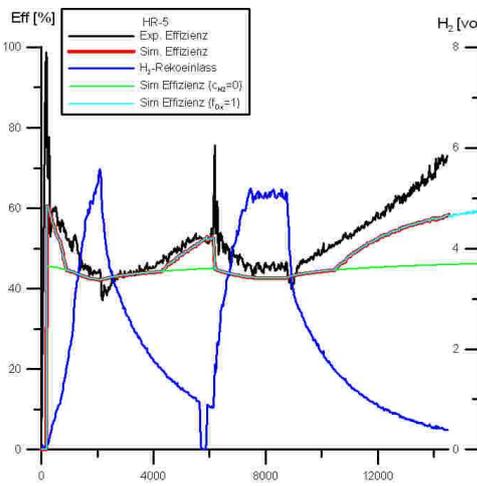
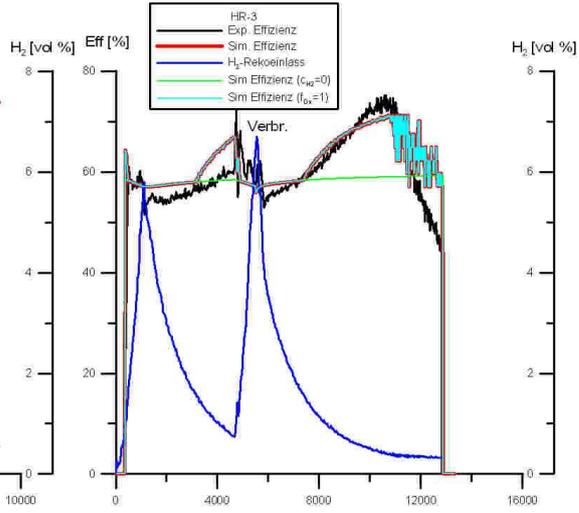
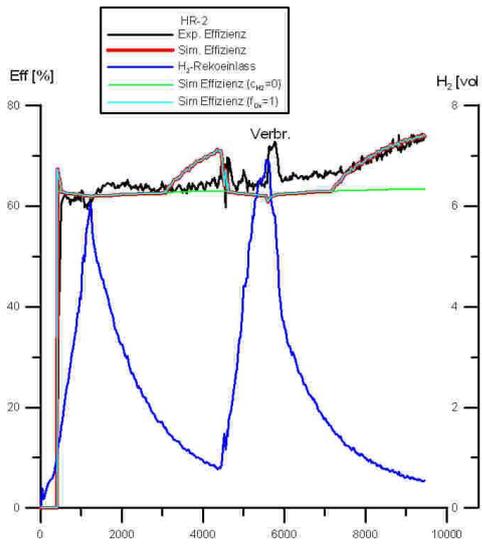
Es zeigt sich, dass die Korrelation fast immer in der Lage ist, den charakteristischen Verlauf der Effizienz abzubilden (Abb. 5.2-1, rote Linie). Bis auf HR-7 (8000 s - 9500 s) wird der Verlauf der Effizienz zumindest qualitativ richtig beschrieben. Für diesen Bereich ist die  $\text{H}_2$ -Konzentration klein (~0.5 vol.%). In der Korrelation wird erst für  $x_{\text{H}_2} < 0.375$  vol.% eine Effizienzreduktion vorhergesagt. Die gemessene Konzentration liegt nur knapp über diesem Wert. Bei etwas anderer Wahl des Schwellenwertes in  $c_{\text{H}_2}$  würde auch hier der qualitative Verlauf richtig beschrieben. Allerdings würde dies bei anderen Versuchen zu größeren Fehlern führen. Bei der Bewertung der Abweichung ist auch die relativ große Unsicherheit bezüglich der Messwerte (Konzentrationsmessung +/- 0,2 vol.%) zu berücksichtigen.

Es zeigt sich zudem, dass sowohl  $c_{\text{H}_2}$ , als auch  $f_{\text{ox}}$  notwendig sind um den Verlauf richtig zu beschreiben (Abb. 5.2-1, grüne und türkise Linie).

Auch quantitativ sind die Abweichungen meist moderat. Die Effizienz der Experimente HR-2, HR-3, HR-29, HR-30 wird gut bis sehr gut durch die Korrelation beschrieben. Sieht man von HR-11 ab, so treten bei den übrigen Experimenten nur für niedrigen  $\text{H}_2$  Eingangskonzentrationen ( $\sim x_{\text{H}_2} < 1$  vol.%) deutliche Abweichungen auf. Für diesen Bereich scheinen größere Abweichungen akzeptabel. Zum einen ist davon auszugehen, dass der Messfehler sich in diesem Bereich stark auswirkt. Für die Konzentrationsmessungen wird er mit (+/- 0,2 vol.%) angegeben. Berücksichtigt man, dass sich die „gemessene“ Effizienz aus einer Differenz zweier kleiner Messwerte mit einem relativ großen relativen Fehler ergibt so ist für diesen Bereich mit einer großen Unsicherheit zu rechnen. Außerdem ist davon auszugehen, dass sich bei einer CFD-Simulation eine fehlerhafte Effizienz für niedrige Eingangskonzentrationen in der Regel weniger stark auswirkt wie für hohe Wasserstoffeingangskonzentrationen. Der Grund ist, dass in diesem Fall auch die Abbaurate und die Strömung durch den Rekombinator verhältnismäßig gering sind, so dass die Gasverteilung weniger stark beeinflusst wird.

Bei HR-11 ( $t > 8000$ s) wird zwar qualitativ richtig vorhergesagt, dass durch Sauerstoffarmut die Effizienz deutlich abnimmt, allerdings wird die Effizienz durch die Korrelation deutlich unterschätzt. Vermutlich ist  $f_{\text{ox}}$  in der Korrelation für diesen Versuch zu klein. Auch hier sind große Messunsicherheiten zu berücksichtigen, da sowohl die  $\text{H}_2$  als auch die  $\text{O}_2$ -Konzentrationen klein sind. Für andere Versuche mit Sauerstoffarmut liefert der Faktor  $f_{\text{ox}}$  dagegen quantitativ eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. (z. B. HR-9 ~ 9000 s- 11000 s).

Bei der Auswertung der Experimente zeigt sich, dass bei Berücksichtigung einer Abhängigkeit der Effizienz ( $0,1 \cdot x_{\text{H}_2\text{O}}$ ) von der Dampfkonzentration eine Verbesserung der Übereinstimmung erzielt werden kann. Allerdings steht dieser Term in gewissem Widerspruch zu der Korrelation für die Abbaurate, bei der keine Abhängigkeit von der Dampfkonzentration festgestellt wurde. Deshalb muss zukünftig noch weiter untersucht werden, ob dieser Term nicht auf Messungenauigkeiten oder andere Effekte zurückzuführen ist (z. B. durch weitere Experimente oder durch detaillierte numerische Simulation eines Rekombinators).



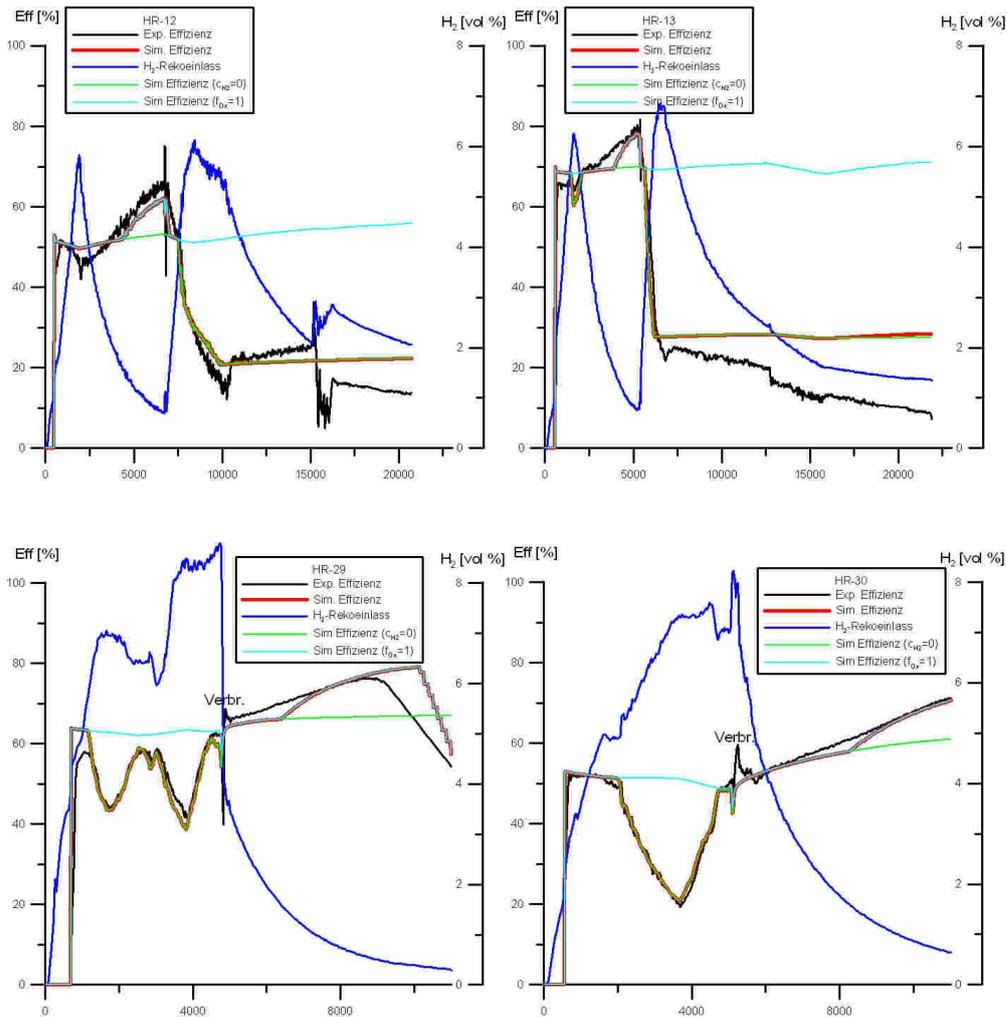


Abb. 5.2-1 Vergleich der gemessenen Effizienz mit der Korrelation für die Effizienz. Schwarz: Experiment; rot: vollständige Korrelation; grün und türkis: modifizierte Korrelationen; blau:  $x_{H_2}$

### 5.3 Modifikation des Parameters $x_{H_2}^{\min}$ und $x_{H_2}^{\max}$ in der AREVA-Gleichung

Laut AREVA-Korrelation berechnet sich die Abbaurrate eines AREVA-Rekombinators:

$$r_{H_2} = f_{ox} * \min(x_{H_2}; 2 * x_{O_2}; x_{H_2}^{\max}) * (k_1 * p + k_2) * \tanh(x_{H_2} - x_{H_2}^{\min})$$

$$x_{H_2}^{\min} = 0.5 \text{ vol\%}$$

$$x_{H_2}^{\max} = 8 \text{ vol\%}$$

$$f_{ox} = \begin{cases} 1 & x_{H_2} < x_{O_2} \\ 0.6 & x_{H_2} \geq x_{O_2} \\ 0 & x_{O_2} < 0.25 \text{ vol\%} \end{cases}$$

Dabei sind  $x_{H_2}$  und  $x_{O_2}$  Konzentrationen in vol.%,  $p$  der Druck in bar und  $f_{ox}$  der Sauerstoffeffizienzfaktor. Vergleicht man die mit dieser Korrelation berechneten Abbauraten mit experimentellen Daten der HR-Versuche so fällt auf, dass für kleine  $x_{H_2}$  ( $\sim x_{H_2} < 1$  vol %) die Abbauleistung generell unterschätzt wird (Abb. 5.3-1). Außerdem wird auch noch unterhalb von 0,5 vol.% Wasserstoff eine kleine Abbaurrate gemessen.

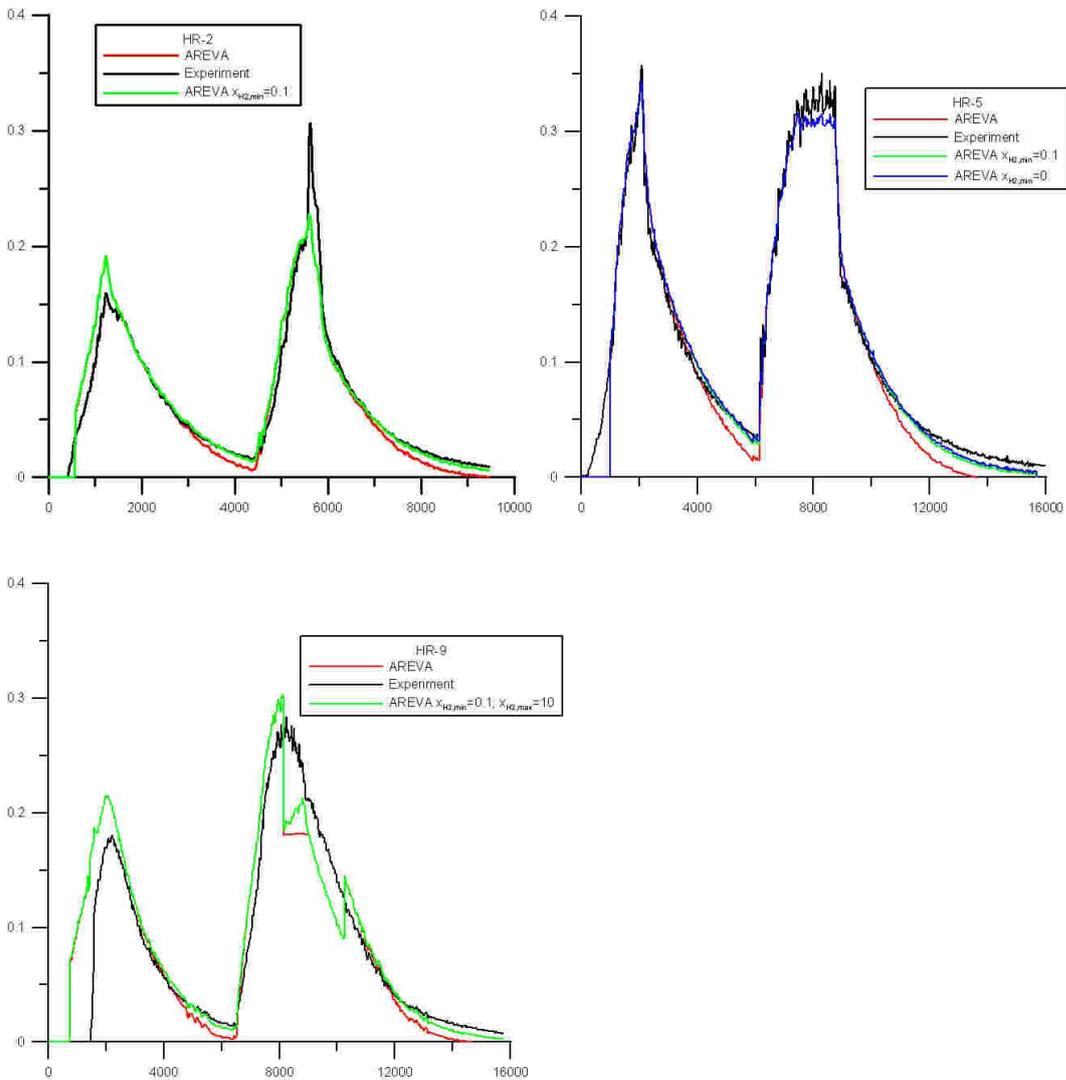


Abb. 5.3-1 Vergleich der Abbauraten bei Berechnung mit der original AREVA-Korrelation und mit einer modifizierten AREVA-Korrelation

Wählt man ein kleineres  $x_{H_2}^{\min} = 0.1 \text{ vol}\%$  so kann eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden. Durch diese Änderung wird die Abbaurrate nur für kleine  $x_{H_2}$  signifikant modifiziert, da  $\tanh(x)$  für große  $x$  schnell gegen 1 strebt. Eine weitere Verringerung  $x_{H_2}^{\min} = 0$  führt zu keiner merklichen Verbesserung mehr (Abb. 5.3-1 HR-5). Im Folgenden wird  $x_{H_2}^{\min} = 0.1 \text{ vol}\%$  für die weiteren Simulationen verwendet, da

zumindest bei HR-5 schon bei einem kalten Rekombinator eine Rekombination bei so niedrigen H<sub>2</sub>-Konzentrationen gemessen wurde.

In der AREVA-Gleichung wird auch davon ausgegangen, dass für  $x_{H_2} > x_{H_2}^{\max} = 8 \text{ vol.}\%$  die Abbaurrate nicht weiter zunimmt. Bis auf den Versuch HR-9 blieb bei allen Versuchen mit AREVA-Rekombinatoren die Konzentration unterhalb dieses Wertes. Bei HR-9 herrscht für den Bereich  $x_{H_2} > 8 \text{ vol.}\%$  „Sauerstoffarmut“ was eine Auswertung erschwert (siehe Abschnitt 5.4). Deshalb kann anhand der HR-Versuche diese Annahme nicht sicher überprüft werden. Nimmt man allerdings ein  $x_{H_2}^{\max} > 9.5 \text{ vol.}\%$  an, so kann zusammen mit dem in Abschnitt 5.5 hergeleiteten Korrekturfaktor für Sauerstoffarmut eine geringfügig bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden (siehe Abb. 5.5-1). Für eine abschließende Klärung eines optimalen Werts für  $x_{H_2}^{\max}$  werden weitere experimentell Daten benötigt.

## **5.4            Abhängigkeit der Abbaurrate vom Dampfgehalt bzw. von der O<sub>2</sub>-Konzentration**

### **5.4.1        Experimentelle Beobachtungen**

Bei Diskussionen hat sich die Frage ergeben, ob der Dampfgehalt oder eine niedrige Sauerstoffkonzentration (Sauerstoffarmut) die Ursache für die geringere Abbauleistung bei einigen HR-Versuchen war. Diese Fragestellung soll im Folgenden eingehender untersucht werden.

Bei den im THAI-Behälter durchgeführten HR-Versuchen wurde die Abhängigkeit der Abbaurrate vom Druck und vom Dampfgehalt systematisch untersucht. Im Folgenden soll nur auf die mit dem AREVA 0.5\*FR-380 durchgeführten Versuche eingegangen werden.

Bei der Diskussion der Ergebnisse ist zu beachten, dass sich mehrere Effekte überlagern können. So tritt insbesondere bei niedrigem Druck in der 1. Versuchsphase eine verringerte Rekombinationsrate auf (z. B. HR-2). Dieser Effekt kann auf den Einfluss kalter Rekombinatorstrukturen zurückgeführt werden (siehe Abschnitt 5.6). Es kann deshalb erwartet werden, dass er auch bei Versuchen mit Dampf auftreten wird. Bei der Diskussion der Versuchsergebnisse wird bei einer verringerten Abbauleistung in

der 1. Versuchsphase davon ausgegangen, dass diese sich auch mit kalten Rekombinatorstrukturen erklären lässt, deshalb wird eine verringerte Abbauleistung in dieser Versuchsphase nicht zur Untermauerung/Widerlegung von Hypothesen verwendet. Es kann natürlich nicht ausgeschlossen werden, dass es auch noch andere Ursachen als kalte Strukturen gibt, die einen Beitrag zur verringerten Abbauleistung in der 1. Versuchsphase liefern.

Im Folgenden soll diskutiert werden, welche physikalischen Ursachen die Abweichung der gemessene Abbaurate von der AREVA-Korrelation in der 2. - 4. Versuchsphase haben kann.

#### **5.4.2 Erklärungsansätze**

Als Erklärungsansätze für die Versuchsergebnisse ergeben sich aus physikalischen Überlegungen heraus folgende Ansätze:

- Einfluss von Dampf auf die Abbauleistung
- Einfluss von Nebelbildung
- Einfluss des  $O_2/H_2$ -Verhältnisses (Sauerstoffarmut)

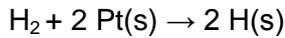
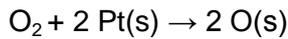
Diese Überlegungen werden im Folgenden etwas ausführlicher diskutiert und mit den Ergebnissen der HR-Versuche verglichen.

#### **5.4.3 Möglicher Einfluss des (gasförmigen) Dampfes auf die Abbauleistung**

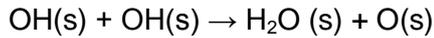
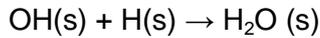
Dampf kann prinzipiell auf unterschiedlichen Wegen die Vorgänge im PAR beeinflussen:

- Die Wärmekapazität und die molare Masse von  $H_2O$  unterscheiden sich von denen von  $N_2$  und  $O_2$ . Dies beeinflusst die Temperatur und die Dichte der Gase am PAR Eintritt und Austritt. Da Dichteunterschiede die treibende Kraft für die Strömung durch den Rekombinator sind (Kamineffekt) ist eine Beeinflussung der Abbauleistung durch Dampf denkbar.
- Der Stoßquerschnitt von  $H_2O$  unterscheidet sich von dem von  $N_2$  und  $O_2$ . Dies führt zu einem unterschiedlichen Diffusionsverhalten und damit auch zu einem geänderten Transportverhalten von  $H_2$  und  $O_2$  an die Katalysatorplatten.
- Die Reaktion von  $H_2$  und  $O_2$  findet im PAR als Oberflächenreaktion statt.

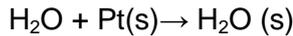
Voraussetzung ist die Anlagerung von O- und H-Atomen in Verbindung mit Pt auf der Oberfläche:



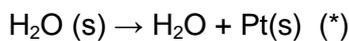
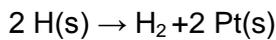
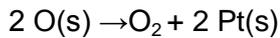
Mögliche Reaktionen die zur Bildung von H<sub>2</sub>O führen sind:



Wasserdampf kann sich auch auf Oberfläche anlagern:



Es findet auch eine Desorption von der Oberfläche statt, z. B.:



Anmerkung (s) steht Oberfläche (surface)

Eine noch detaillierte Auflistung der möglichen Elementarreaktionen ist in Abb. 5.4-1 zu finden.

Surface Reactions Describing the Oxidation of Hydrogen on a Pt Surface				
Reaction	A	E (eV)	S0	f(θ)
<i>Adsorption/desorption of reactants</i>				
H <sub>2</sub> + 2Pt(s) → 2H(s)	-	-	0.046	(1 - θ)
2H(s) → H <sub>2</sub> + 2Pt(s)	3.7 · 10 <sup>21</sup>	0.7	-	-
O <sub>2</sub> + 2Pt(s) → 2O(s)	-	-	0.023	(1 - θ) <sup>2</sup>
2O(s) → O <sub>2</sub> + 2Pt(s)	3.7 · 10 <sup>21</sup>	2.2	-	-
<i>Surface reactions</i>				
H(s) + O(s) = OH(s) + Pt(s)	3.7 · 10 <sup>21</sup>	0.12	-	-
H(s) + OH(s) = H <sub>2</sub> O(s) + Pt(s)	3.7 · 10 <sup>21</sup>	0.18	-	-
OH(s) + OH(s) = H <sub>2</sub> O(s) + O(s)	3.7 · 10 <sup>21</sup>	0.5	-	-
<i>Adsorption/desorption of products</i>				
H <sub>2</sub> O + Pt(s) → H <sub>2</sub> O(s)	-	-	0.75	(1 - θ)
H <sub>2</sub> O(s) → H <sub>2</sub> O + Pt(s)	1.0 · 10 <sup>13</sup>	0.44	-	-
OH + Pt(s) → OH(s)	-	-	1	-
OH(s) → OH + Pt(s)	1.0 · 10 <sup>11</sup>	2.0	-	-
O + Pt(s) → O(s)	-	-	1	(1 - θ)
O(s) → O + Pt(s)	1.0 · 10 <sup>13</sup>	3.8	-	-
H + Pt(s) → H(s)	-	-	1	(1 - θ)
H(s) → H + Pt(s)	1.0 · 10 <sup>13</sup>	2.6	-	-

Abb. 5.4-1 Oberflächenreaktionen auf den Rekombinatorplatten /GUN98/

Für die einzelnen Reaktionen stehen entsprechende Geschwindigkeitszeitgesetze zur Verfügung. Aufgrund der Komplexität der Gleichungssysteme ist es schwierig ohne Rechenprogramme eine Aussage über die quantitative Wirksamkeit einzelner Prozesse zu treffen. Insbesondere ob die beim Vorhandensein von H<sub>2</sub>O verstärkt ablaufende Ablagerung (\*) einen signifikanten Einfluss hat. Es liegen aber experimentelle Untersuchungen vor die nahelegen, dass der Einfluss von Dampf zu vernachlässigen ist /DRI06/.

#### 5.4.4 Einfluss von Nebeltröpfchen

Nach mündlichen Informationen von Becker Technologies (Herr Fischer) lag nach Start des Rekombinators schon nach kurzer Zeit kein Nebel mehr im THAI-Behälter vor. Deshalb ist der Nebel prinzipiell zwar im Rekombinatoremodell zu berücksichtigen, er ist aber nicht geeignet, um das Verhalten des Rekombinators in den Versuchsphasen 2 - 4 bei den HR-Versuchen zu erklären. Trotzdem sollen mögliche Effekte von Nebeltröpfchen aufgezeigt werden, da sie bei Containmentanwendungen unter Umständen zu berücksichtigen sind.

- Nachdem die Rekombinatoren angelaufen sind, konnte auf den Rekombinatorplatten kein Wasserfilm beobachtet werden, der die Rekombination verhindert/verringert. Ein Wasserfilm ist nur beim Anlaufverhalten zu berücksichtigen.
- Sollten Nebeltröpfchen in den warmen Rekombinator eintreten, so ist zu erwarten, dass sie verdampfen bevor sie die Rekombinatorplatten erreichen. Das hat zur Folge dass:
  - Bei Verdampfung wird dem Gas die Verdampfungswärme entzogen. Es kommt also zu einer Temperaturverringerng des Gases. Dies muss im Rekombinatoremodell berücksichtigt werden (sobald die Nebelbildung im Kondensationsmodell implementiert ist).
  - Die Gaszusammensetzung ändert sich bei Verdampfung der Nebeltröpfchen. Die molare Konzentration von Wasserdampf erhöht sich und im Gegenzug verringern sich die Konzentrationen der übrigen Spezies. Insbesondere ändert sich auch die  $H_2$ -Konzentration. Im Bereich der Rekombinatorplatten wird also eine geringere  $H_2$ -Konzentration wirksam sein, als vor dem Eintritt in den Rekombinator gemessen wurde. Diese geringere Konzentration muss als Eingabeparameter in der AREVA-Korrelation verwendet werden.

#### 5.4.5 Zusammenfassung und Schlussfolgerung aus der qualitativen Untersuchung zum Einfluss des $O_2/H_2$ -Verhältnisses

Der gemessene  $H_2$ -Abbau bei den HR-Versuchen wurde mit der AREVA-Korrelation verglichen. Beim Vergleich wurde insbesondere der Einfluss durch den Dampfgehalt und das Verhältnis  $O_2/H_2$  untersucht. Es wurden folgende Schlussfolgerungen gezogen:

- Für einen starken O<sub>2</sub>-Überschuss ( $\xi > 1,5$ ) ist die Abbauleistung unabhängig von der O<sub>2</sub>-Konzentration. Sobald aber der O<sub>2</sub>-Überschuss geringer ist, spielt auch die O<sub>2</sub>-Konzentration eine Rolle für die Abbauleistung. Die HR-Versuche können dahingehend gedeutet werden, dass schon ab einem Verhältnis  $\xi < 1,2 - 1,5$  die Abbauleistung abnimmt. Eine entsprechende Abhängigkeit wird im nächsten Abschnitt untersucht.
- Wasserdampf (gasförmig) braucht nicht als Eingabeparameter in die Gleichungen für die Abbauleistung eingefügt werden. Ein Dampfgehalt von weniger als 25 - 30 vol.% hat keinen signifikanten Einfluss auf das Rekombinationsverhalten (HR-7), bei höheren Dampfgehalten ist eine Erklärung der Abweichungen mit der  $\xi$ -Abhängigkeit möglich und plausibler, da sich hierdurch die Unterschiede von HR-12/HR-30 und HR-11/HR-29 besser erklären lassen. Insgesamt ist fraglich, ob das Verhalten der PAR bei den HR- Versuchen mit dem Einfluss von Dampf erklärbar ist, da in diesem Fall schon bei Dampfkonzentrationen von unter 30 vol.% ein Einfluss zu erwarten ist, was aber nicht erkennbar ist. Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung mit experimentellen Untersuchungen an der RWTH Aachen, /DRI06/, Seite 93.

## 5.5 Verbesserung der AREVA-Gleichung für Sauerstoffarmut

In der AREVA-Korrelation wird davon ausgegangen, dass bei einem Verhältnis  $x_{O_2}/x_{H_2} < 1$  die Abbauleistung schlagartig auf 60 % abfällt. In den vorigen Abschnitten wurde gezeigt, dass schon bei einem  $\xi < 1,2-1,5$  die Abbauleistung geringer ist als von der AREVA-Gleichung vorhergesagt. Zudem scheint eine schlagartige Abnahme der Abbauleistung wenig wahrscheinlich.

Aus dem Vergleich der gemessenen Abbauleistung mit der AREVA-Korrelation soll eine modifizierte Korrelation für den Einfluss von Sauerstoffarmut „hergeleitet“ werden. Als Anforderung an diese Korrelation  $f_{ox}(\xi)$  wird gestellt:

- Sie soll die Modifikation der Abbauleistung durch Sauerstoffarmut möglichst gut beschreiben.
- $f_{ox}(\xi) = 1$  für  $\xi > 1,2$  (keine Modifikation der AREVA-Gleichung für  $\xi = 1,2$  (Stetigkeit der Abbauleistung))
- Sie soll möglichst einfach sein und wenige Parameter enthalten.

Es wurde folgende Funktion als geeignet identifiziert:

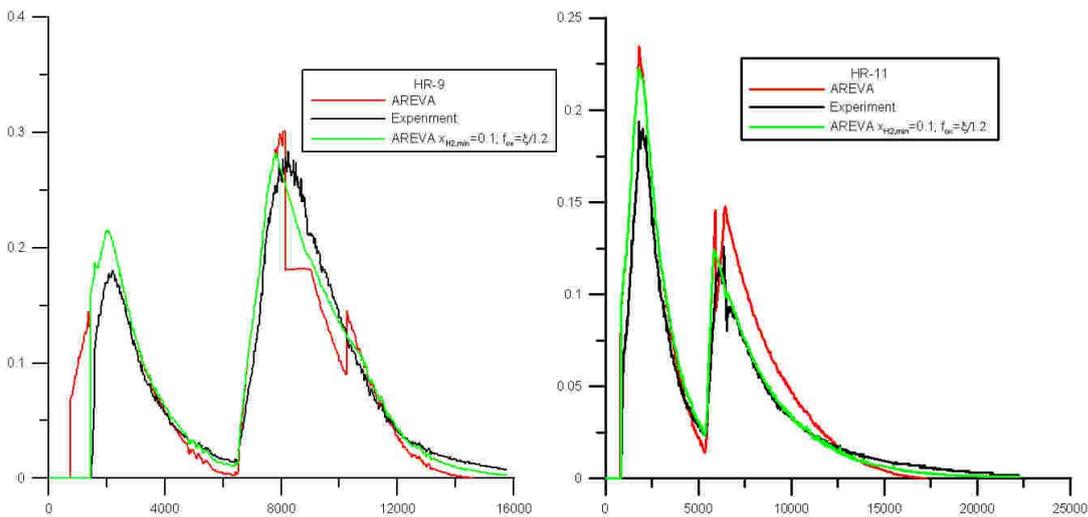
$$f_{ox}(\xi) = \begin{cases} 1 & \xi \geq 1.2 \\ \max(\xi/1.2; 0,4) & \xi < 1.2 \end{cases}$$

Die Wahl der Grenze  $\xi = 1,2$  erfolgt in Übereinstimmung mit den Untersuchungen an der RWTH Aachen /DRI06/, Seite 80.

Da diese Funktion nicht mathematisch/physikalisch abgeleitet wurde, sind auch andere Funktionsansätze denkbar. Die Funktion  $f_{ox}$  soll lediglich den Einfluss von Sauerstoffarmut auf die Abbauleistung modellieren, der Einfluss kalter Strukturen wird durch einen weiteren Term  $f_T$  modelliert. Die Abbauleistung des PAR ergibt sich aus dem Zusammenhang:

Abbauleistung =  $f_T \cdot f_{ox}(\xi) \cdot \text{Abbauleistung-AREVA (ohne Sauerstoff Effizienz-Faktor)}$ .

Für die Untersuchungen in diesem Abschnitt wird  $f_T = 1$  unterstellt. Mit dieser Modifikation von  $f_{ox}$  kann für alle Versuche eine Verbesserung gegenüber der org. AREVA-Korrelation erreicht werden (Abb. 5.5-1).



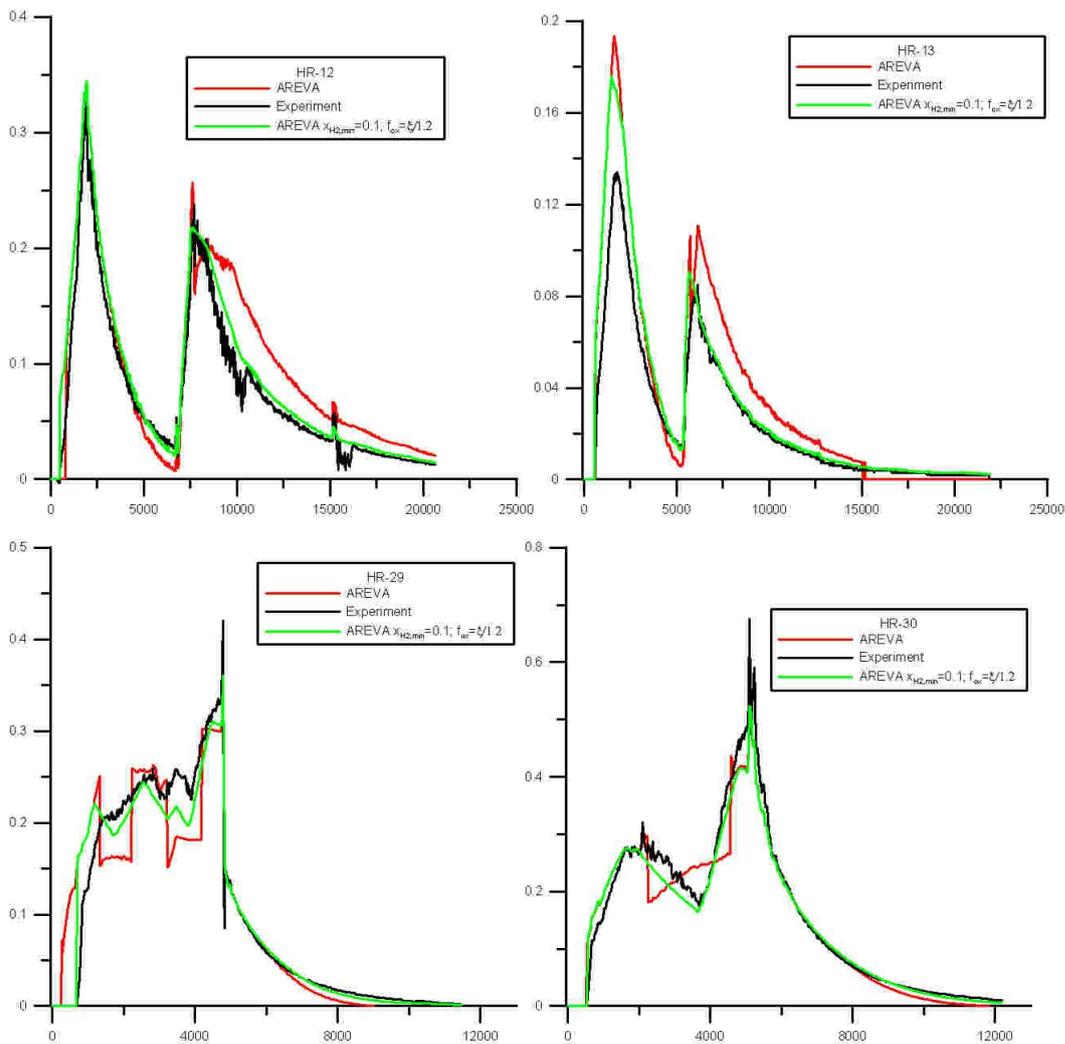


Abb. 5.5-1 Abbauleistung über der Zeit für HR-Versuche mit Sauerstoffarmut

## 5.6 Berechnung der Wärmeverluste an den Rekombinatorstrukturen

### 5.6.1 Temperatur der Rekombinatorwände und des austretenden Gases

Bei dem einfachen in CFX implementierten Wärmeleitungsmodell wird das Innere des Rekombinators nicht in CFX simuliert. Deshalb müssen die Wärmeverluste in die Rekombinatorplatten und in das Gehäuse modelliert werden. Die Wärmeverluste bewirken zum einen, dass die Austrittstemperatur des Gases  $T_{\text{aus}}$  niedriger ist als es bei adiabaten Bedingungen der Fall wäre, zum anderen wird bei der Modifikation der AREVA-Gleichung ein Faktor  $f_T$  eingeführt.  $f_T$  soll modellieren, dass bei einem Rekombinator mit kalten Strukturen die Abbaurrate niedriger ist.

Der Wärmeübergang soll wie folgt modelliert werden:

$$\frac{Q}{\Delta t} = c_{\text{wand}} \dot{m}_{\text{reko}} (T_{\text{adi}} - T_{\text{Wand}})$$

$T_{\text{adi}}$  ist die Gastemperatur des rekombinierten Gases unter adiabatischen Bedingungen,  $T_{\text{wand}}$  ist die Wandtemperatur,  $\dot{m}_{\text{reko}}$  ist der Massenstrom des Gases durch den Rekombinator und  $c_{\text{wand}}$  eine Modellkonstante, die an die experimentellen Daten angepasst werden muss. Mit  $c_{\text{wand}} = 300$  konnte die Austrittstemperatur am Rekombinator in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden (Abb. 5.6-3).

Dieser Ansatz ist eine starke Vereinfachung, da die Temperatur in den Rekombinatorstrukturen nicht homogen ist. Die Rekombinatorplatten und die angrenzenden Strukturen werden eine viel höhere Temperatur haben, als der obere Teil des Gehäuses. Um das Rekombinatoremodell einfach zu halten und die Zahl der benötigten CFD-Zellen nicht zu groß werden zu lassen, wird im Rekombinatoremodell mit einer mittleren Wandtemperatur gerechnet und diese als Randbedingung an CFX übergeben. Die Enthalpie des Gases am Rekombinatore Austritt muss entsprechend um die Wärmeverluste  $Q$  verringert werden. Daraus ergibt sich die Temperatur des austretenden Gases.

Um die Temperatur der Rekombinatorwände zu berechnen, muss berücksichtigt werden, dass die Rekombinatorwände durch konvektiven Wärmetransport und evtl. auch durch Wärmestrahlung Energie an das sie umgebende Gas abgeben ( $F$ ). Dieser Wärmetransport wird von CFX aus der Temperaturdifferenz zwischen der Wandtemperatur (Randbedingung in CFX) und dem Gas berechnet. In den folgenden Untersuchungen wurde  $F=0$  J/s gesetzt. Die Vernachlässigung von Wärmeverlusten an das den Rekombinator umgebende Gas wird zu einer (geringfügigen) Überschätzung der Wandtemperatur führen.

$$\frac{dT_{\text{Wand}}}{dt} = \left( \frac{Q + F}{c_{\text{p wand}}} \right)$$

Die integrale Wärmekapazität des gesamten Rekombinators  $c_{\text{p wand}}$  wurde auf ca. 42 000 J/K abgeschätzt. Sie ergibt sich aus der Gesamtmasse des Rekombinators multipliziert mit der spezifischen Wärmekapazität von Stahl.

In Abb. 5.6-1 wird die mit diesem Ansatz berechnete Gastemperatur am Rekombinatore Austritt mit dem Experiment und einer Simulation verglichen ( $T_{\text{adia}}$ ) bei der Wärmeverluste in die Rekombinatorstrukturen vernachlässigt wurden. Beim Vergleich ist zu

beachten, dass neben Wärmeverlusten auch die Effizienz einen signifikanten Einfluss auf die Austrittstemperatur  $T_{\text{aus}}$  hat. Eine Überschätzung der Effizienz wird dabei zu einer höheren Austrittstemperatur führen. Über  $\dot{m}_{\text{reko}}$  geht auch die Abbauleistung des Rekombinators in die Berechnung von  $T_{\text{wand}}$  und damit auch in  $T_{\text{aus}}$  ein. Insbesondere Abweichungen bei der Korrelation der Effizienz werden sich in  $T_{\text{aus}}$  bemerkbar machen.

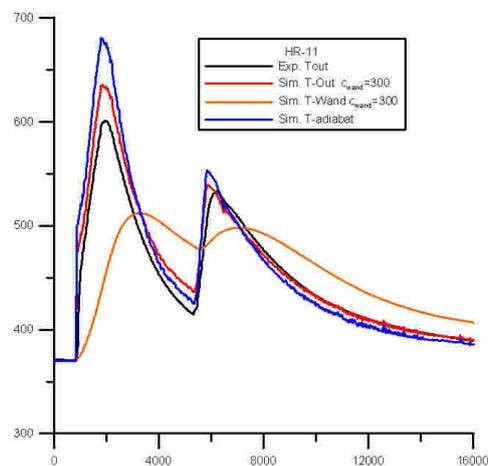
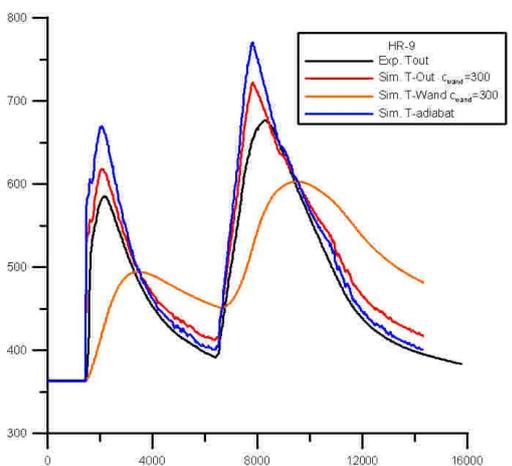
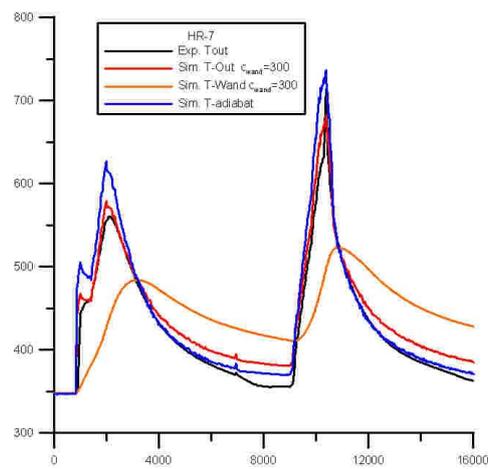
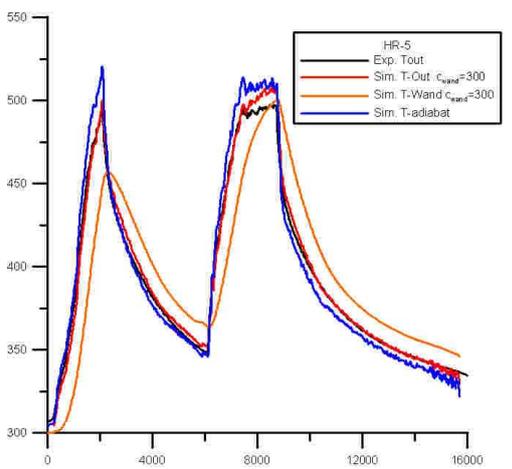
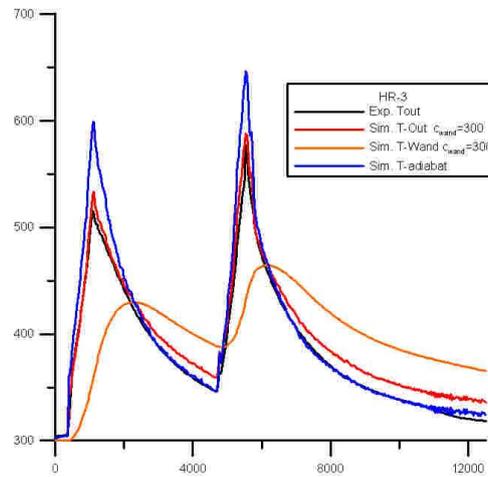
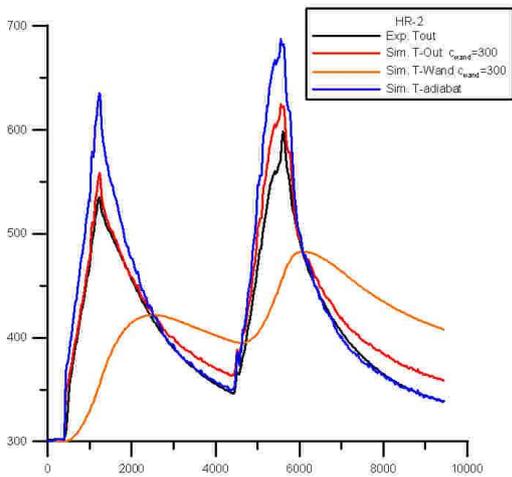
Es zeigt sich, dass eine Vernachlässigung von Wärmeverlusten zu einer deutlichen Überschätzung von  $T_{\text{aus}}$  führt. Sie dürfen deshalb nicht vernachlässigt werden (siehe Abb. 5.6-1  $T_{\text{adiabat}}$ ).

Mit dem hier vorgestellten Ansatz für die Wärmeverluste kann in der Regel eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden. Es fällt auf, dass bei den meisten Experimenten für Teile der 2. und 4. Versuchsphase  $T_{\text{adia}} < T_{\text{wand}}$  ist. In diesem Fall führt der hier vorgestellte Ansatz für die „Wärmeverluste“ zu einer Aufheizung des Gases. Diese wurde aber im Vergleich mit dem Experiment deutlich überschätzt. Eine Berücksichtigung der Wärmeverluste  $F$  wird zu einer Absenkung von  $T_{\text{wand}}$  führen und damit diesen Fehler verringern. Es ist aber zweifelhaft ob dies als Erklärung für die Überschätzung von  $T_{\text{aus}}$  in dieser Versuchsphase ausreicht. Es ist davon auszugehen, dass die Aufheizung des Gases vom Modell überschätzt wird. Im Prinzip kann dieser Modellierungsfehler einfach dadurch beseitigt werden, indem für  $T_{\text{adia}} < T_{\text{wand}}$  die Konstante  $c_{\text{wand}}$  kleiner gewählt wird. Exemplarisch wurde dies für den Versuch HR-2 durchgeführt. Für  $T_{\text{adia}} < T_{\text{wand}}$  wurde  $c_{\text{wand}}=75$  gewählt. Diese Modifikation hat auf  $T_{\text{aus}}$  im Wesentlichen nur einen Einfluss bei  $T_{\text{adia}} < T_{\text{wand}}$ .  $T_{\text{aus}}$  stimmt in diesem Fall deutlich besser mit dem Experiment überein. Zwar ist dann  $T_{\text{wand}}$  in der 3. und 4. Versuchsphase auch etwas höher, der Einfluss auf  $T_{\text{aus}}$  ist aber in der 3. Versuchsphase klein, da  $T_{\text{adi}}$  in beiden Fällen deutlich größer als  $T_{\text{wand}}$  ist. Mit dieser Modifikation kann also eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden (Abb. 5.6-2). Da eine solche Vorgehensweise aber nur schwer physikalisch zu begründen ist, ist nicht geplant diese Modifikation in das Rekombinatormodell zu integrieren.

Alternativ könnte ein komplizierterer Ansatz für die Wärmeverluste gewählt werden, bei dem für niedrige Abbauleistungen (d. h. auch niedrigere Strömungsgeschwindigkeiten durch den Rekombinator)  $c_{\text{wand}}$  kleiner wird und so den Fehler in der 2. und 4. Versuchsphase verringern.

In Abb. 5.6-3 ist die Abhängigkeit der Austrittstemperatur  $T_{\text{aus}}$  und der mittleren Wandtemperatur  $T_{\text{wand}}$  von  $c_{\text{wand}}$  zu sehen. Ein größeres  $c_{\text{wand}}$  führt in der 1. und 3. Versuchs-

phase zu einem größeren Wärmestrom in die Wände. Dadurch werden  $T_{\text{aus}}$  niedriger und die mittlere Wandtemperatur  $T_{\text{wand}}$  wird höher. Das höhere  $T_{\text{wand}}$  bewirkt in Teilen der 2. und 4. Versuchsphase mit  $T_{\text{adia}} < T_{\text{wand}}$  ein höheres  $T_{\text{aus}}$ .



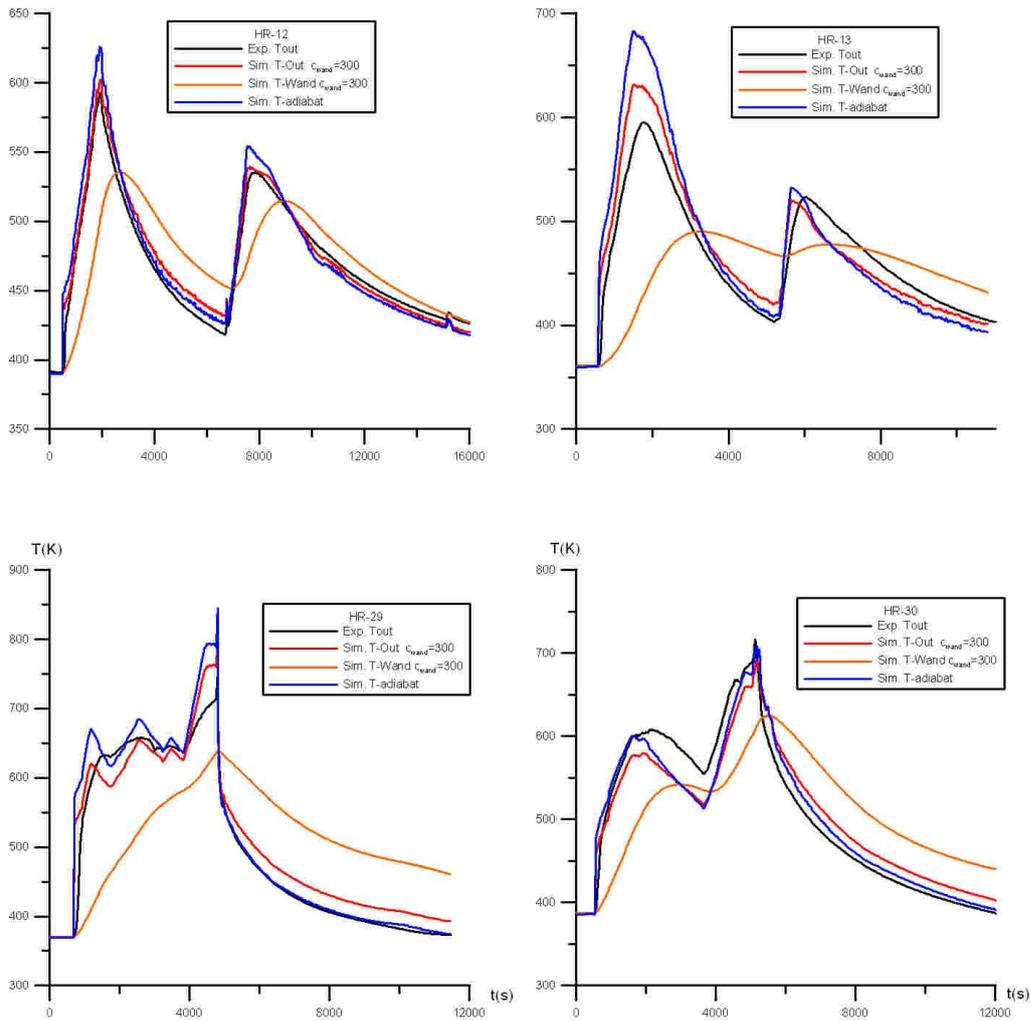


Abb. 5.6-1 Temperatur des aus dem Rekombinator austretenden Gases. Schwarz: Experiment; Rot: Simulation; Blau: Simulation bei Vernachlässigung der Wärmeverluste; Orange: mittlere Wandtemperatur in der Simulation

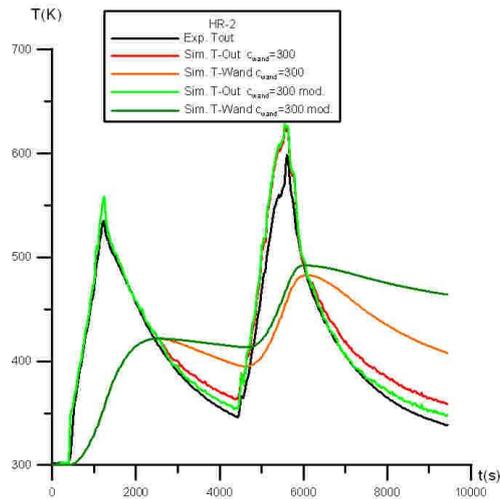


Abb. 5.6-2 Austrittstemperaturen am Rekombinatoraustritt bei unterschiedlichem  $c_{wand}$  bei  $T_{adia} < T_{wand}$

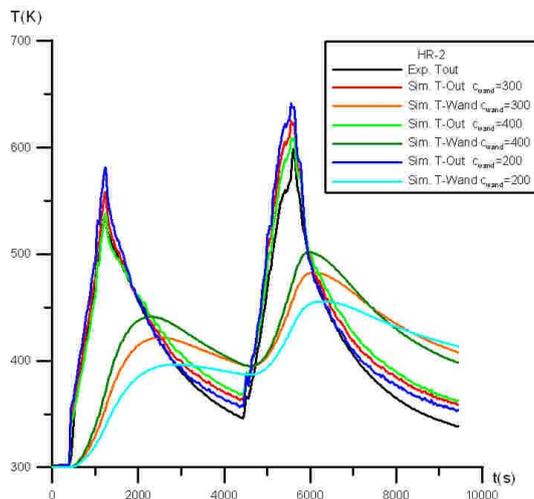


Abb. 5.6-3 Abhängigkeit von  $T_{aus}$  und  $T_{wand}$  von der konstante  $c_{wand}$

### 5.6.2 Korrelation für $f_T$

Bei den Parameterstudien hat sich gezeigt, dass bessere Ergebnisse erzielt werden können, wenn man für die Berechnung von  $f_T$  nur die Wärmekapazität der Rekombinatorplatten mit Halterung berücksichtigt. Dies entspricht der Annahme, dass für die Modifikation der Abbaurrate des Rekombinator, die Temperatur in der Nähe der Platten entscheidend ist. Deshalb wird neben der mittleren Temperatur des gesamten Rekombinators auch die mittlere Temperatur der Platten (mit Halterung) bilanziert. Dazu wird ein analoger Ansatz verwendet:

$$\frac{dT_{\text{platten}}}{dt} = \left( \frac{c_{\text{platten}} * \dot{m}_{\text{reko}} (T_{\text{adia}} - T_{\text{platten}})}{cP_{\text{platten}}} \right)$$

Die Wärmekapazität  $c_{\text{platten}}$  wird mit  $c_{\text{platten}} \approx 0,15 * c_{\text{wand}}$  abgeschätzt. Eine Wahl der Konstanten  $c_{\text{platten}}$  von  $c_{\text{platten}} = 900$  hat sich als erfolgreich herausgestellt.

Für den Modifikationsfaktor  $f_T$  hat sich in Parameterstudien folgender Ansatz als erfolgversprechend herausgestellt:

$$f_T = \min \left( 1; \left( 1 - 0,65 \frac{T_{\text{adia}} - T_{\text{platten}} - 1}{T_{\text{adia}} - T_{\text{ein}}} \right)^2 \right)$$

Dabei ist  $T_{\text{ein}}$  die Temperatur des in den Rekombinator einströmenden Gases. Diesem Ansatz liegen folgende Überlegungen zugrunde:

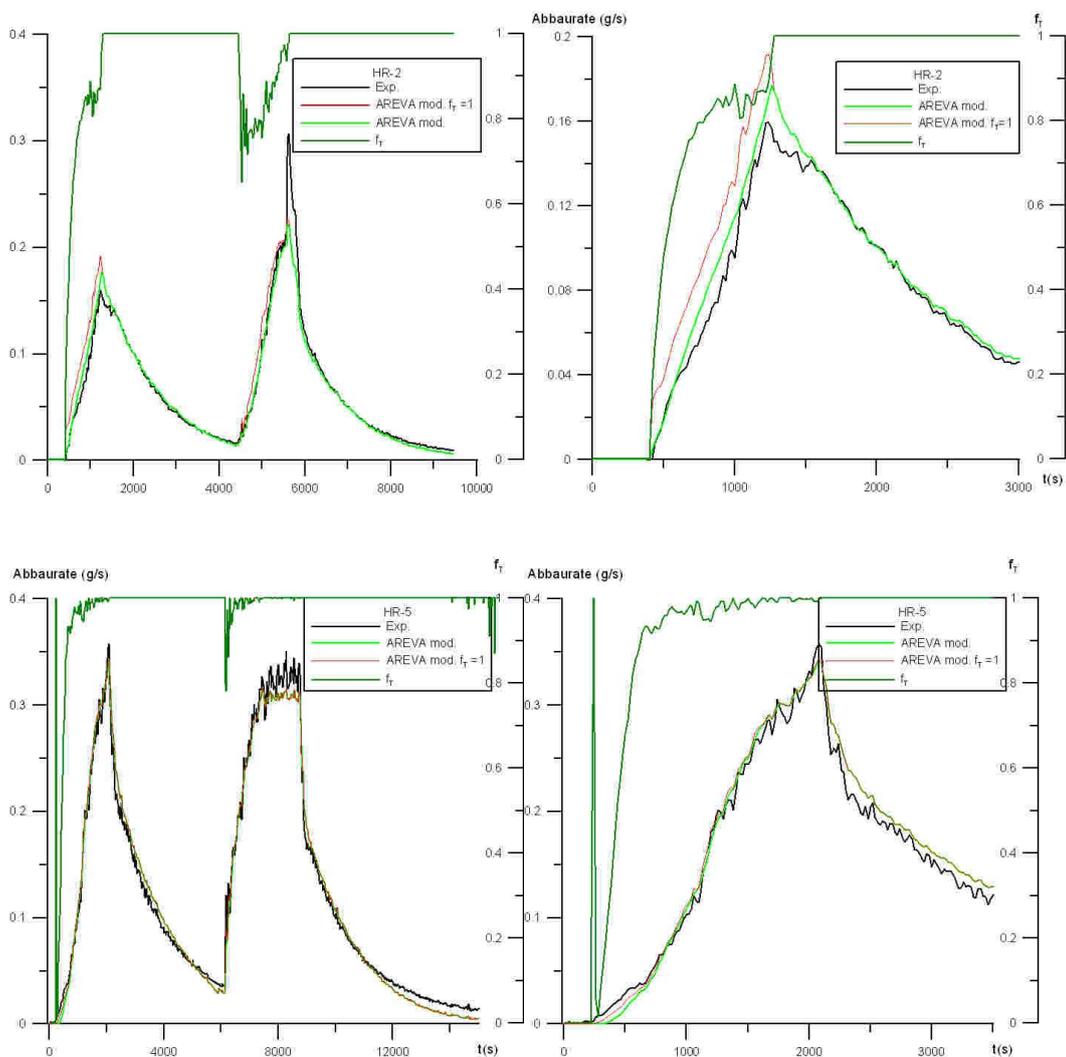
- Eine Absenkung der Abbauleistung findet nur statt, wenn  $T_{\text{adia}}$  größer als  $T_{\text{platten}}$  ist, sonst soll  $f_T = 1$  gelten.
- Je größer  $T_{\text{adi}} - T_{\text{platten}}$  desto stärker soll die Rekombination abgeschwächt werden.
- Es wurde der Ansatz  $T_{\text{adi}} - T_{\text{platten}} - 1$  gewählt, da sonst in Bereichen mit  $T_{\text{adi}} \sim T_{\text{platten}}$  und einer geringen Wasserstoffeingangskonzentration teilweise starke Schwankungen bei  $f_T$  aufgetreten sind. Dies war bei einigen HR-Versuchen in der 4. Phase der Fall. Ansonsten hat diese Modifikation einen zu vernachlässigenden Einfluss.

Mit diesem Ansatz für  $f_T$  konnte der Einfluss kalter Strukturen auf die Abbaurrate zufriedenstellend beschrieben werden (Abb. 5.6-4, Abb. 5.6-5). Fast immer zeigt die mit diesem Ansatz für  $f_T$  modifizierte AREVA-Korrelation eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment als bei  $f_T = 1$ .

Mit diesem Ansatz kann das unterschiedliche Verhalten in der ersten Versuchsphase bei HR-2 und HR-5 richtig beschrieben werden. Bei HR-2 kommt es zu einer deutlichen Absenkung der Rekombinationsrate während bei HR-5 die Unterschiede zwischen AREVA-Gleichung und Experiment auch bei  $f_T = 1$  deutlich geringer sind. (Abb. 5.6-5).

In einigen wenigen Fällen liegt die mit  $f_T$  modifizierte AREVA-Gleichung etwas weiter vom Experiment entfernt. (z. B. HR-29 2000 s - 4000 s, Abb. 5.6-5). In diesen Fällen liegt in der Regel aber gleichzeitig auch Sauerstoffarmut vor. Das geringfügig bessere Ergebnis von  $f_T=1$  kann in diesen Fällen auch darauf zurückgeführt werden, dass sich zwei Fehler teilweise kompensieren.

Da es sich bei der Modellierung von  $f_T$  um einen empirischen Ansatz handelt, ist es nur schwer zu sagen, ob dieser Ansatz für  $f_T$  wirklich optimal ist. Zudem muss darauf hingewiesen werden, dass die Modellparameter so gewählt wurden, dass  $T_{\text{aus}}$  und  $f_T$  in guter Übereinstimmung mit dem Experiment stehen. Die Temperaturen  $T_{\text{platten}}$  und teilweise auch  $T_{\text{wand}}$  entsprechen nicht unbedingt den Werten die im Experiment gemessen werden können und sollten daher nicht für Vergleiche herangezogen werden.



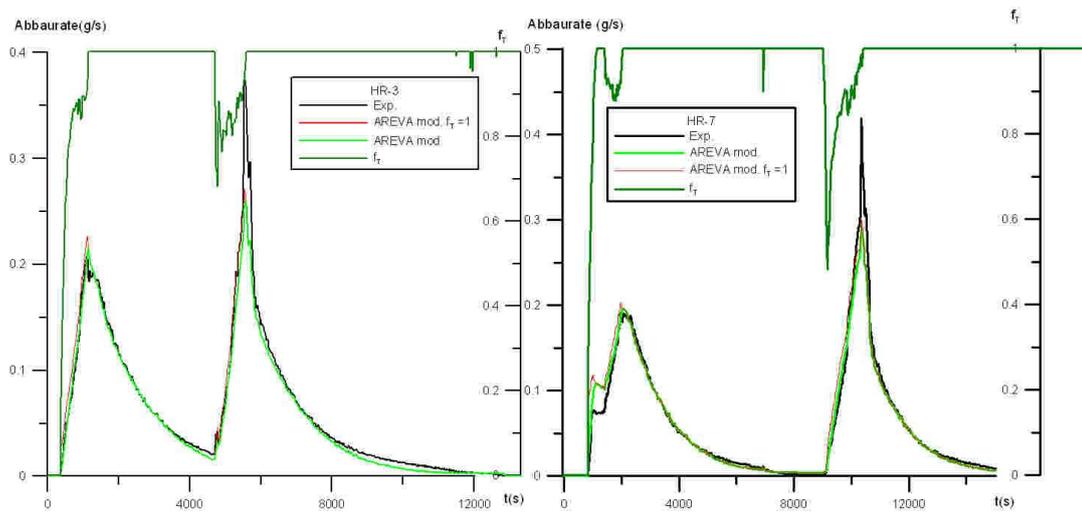
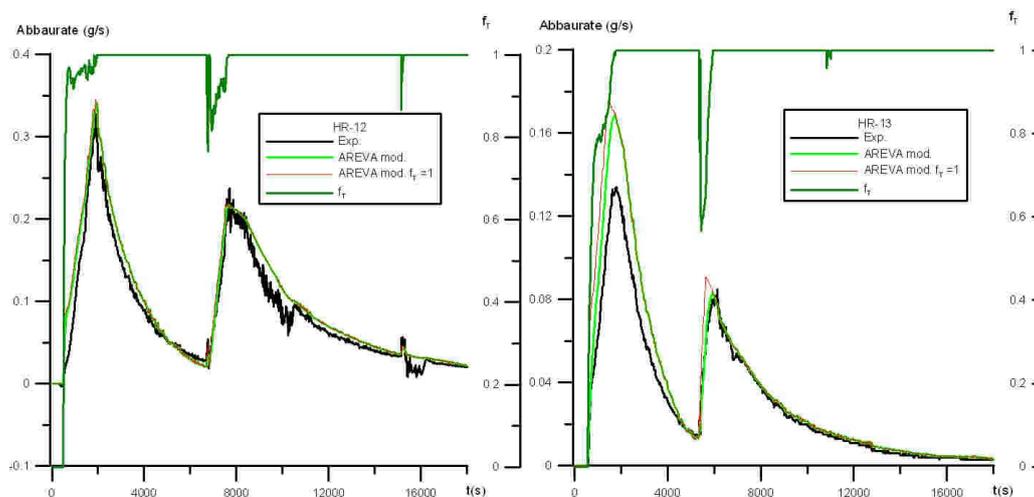
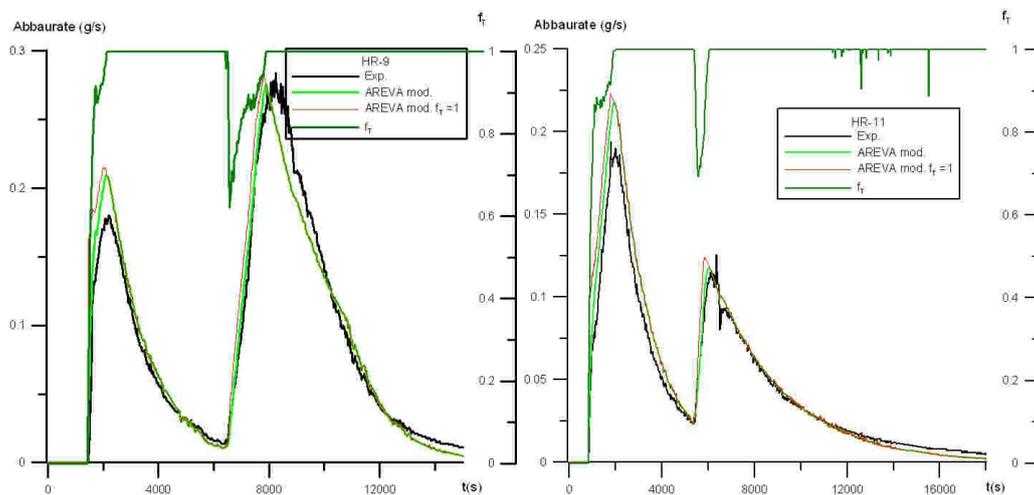


Abb. 5.6-4 Abbaute im Experiment, bei der modifizierten AREVA-Korrelation, und bei der modifizierten AREVA-Korrelation mit  $f_T=1$



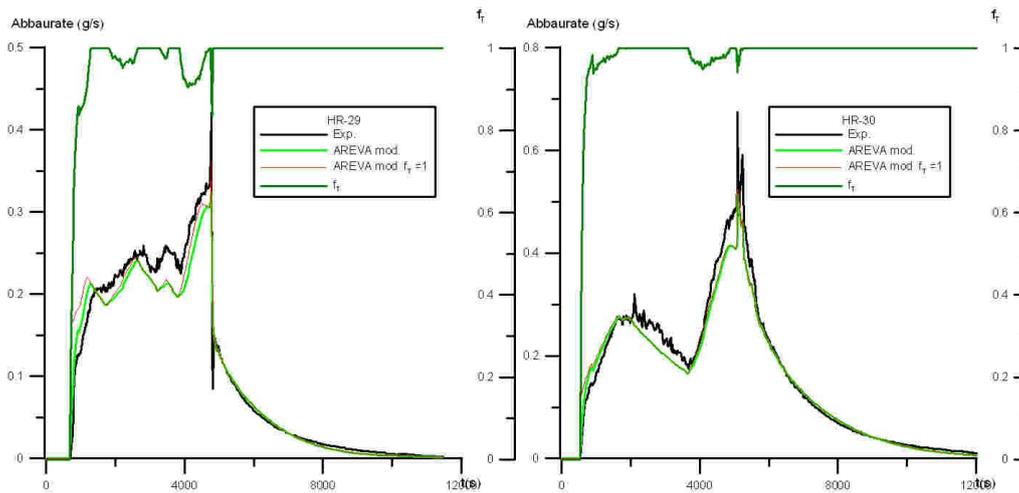


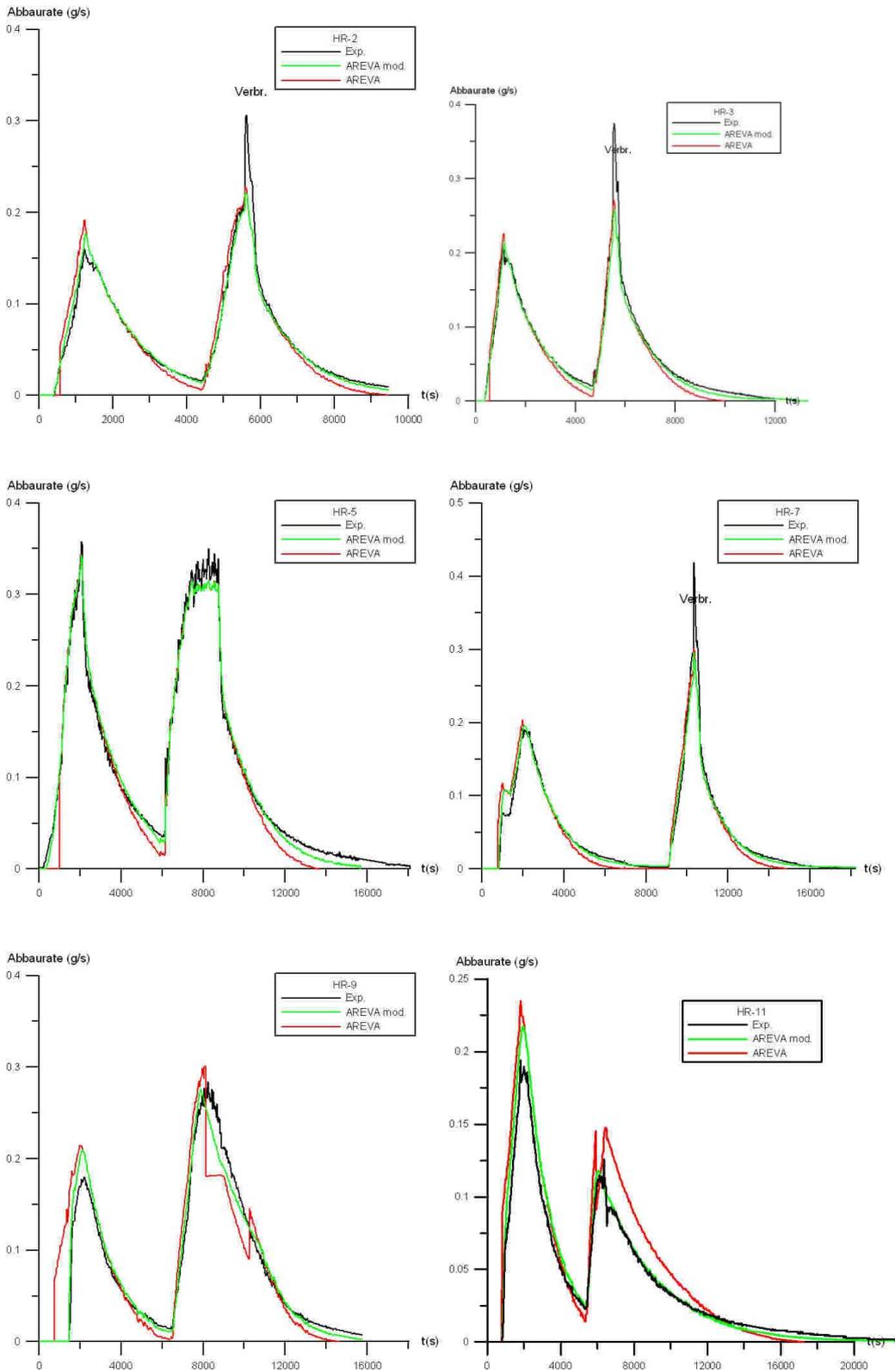
Abb. 5.6-5 Abbaurrate im Experiment, bei der modifizierten AREVA-Korrelation und bei der modifizierten AREVA-Korrelation mit  $f_T=1$ , Vergleich der ursprünglichen mit der modifizierten AREVA-Korrelation

## 5.7 Abschließender Vergleich der ursprünglichen und der modifizierten AREVA-Korrelation

Durch die Modifikation der AREVA-Korrelation ( $x_{\min}$ ;  $x_{\max}$ ;  $f_{\text{ox}}$ ; und  $f_T$ ) kann für alle HR Experimente eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment hergestellt werden (siehe Abb. 5.7-1). Insbesondere bei „Sauerstoffarmut“ gibt es aber noch moderate Abweichungen zu den gemessenen Abbauraten. Da sowohl  $f_{\text{ox}}$  als auch  $f_T$  durch Anpassung an das Experiment bestimmt wurden, kann trotz umfangreicher Untersuchungen nicht sichergestellt werden, dass wirklich der optimale Funktionsansatz/ Parametersatz gefunden wurde. Eine weitere Verbesserung der Korrelationen anhand der HR-Versuche ist schwierig, da es bei diesen Versuchen kaum möglich ist einzelne Abhängigkeiten getrennt zu analysieren. Um z. B. den Einfluss der Platten- / Wandtemperatur genauer zu untersuchen, wäre ein Versuch hilfreich, bei dem bei konstantem  $x_{\text{H}_2, \text{ein}}$  die Abbauleistung bis zum Erreichen eines stationären Zustands gemessen wird.

Die hier bestimmten Korrelationen gelten genaugenommen nur für den im Experiment verwendeten Rekombinatortyp. Für andere Rekombinatortypen müssen die Parameter neu bestimmt werden. Am besten geschieht dies natürlich durch Vergleich mit Experimenten. Sind keine geeigneten Experimente verfügbar, so ist es möglich aufgrund von physikalischen Annahmen (Verhältnis der Wärmekapazitäten, Anzahl der Rekombinatorplatten etc.) einen entsprechenden Parametersatz abzuleiten. Diese Überlegungen

können durch CFX-Rechnungen abgesichert werden, bei denen ein Rekombinator detailliert modelliert wird.



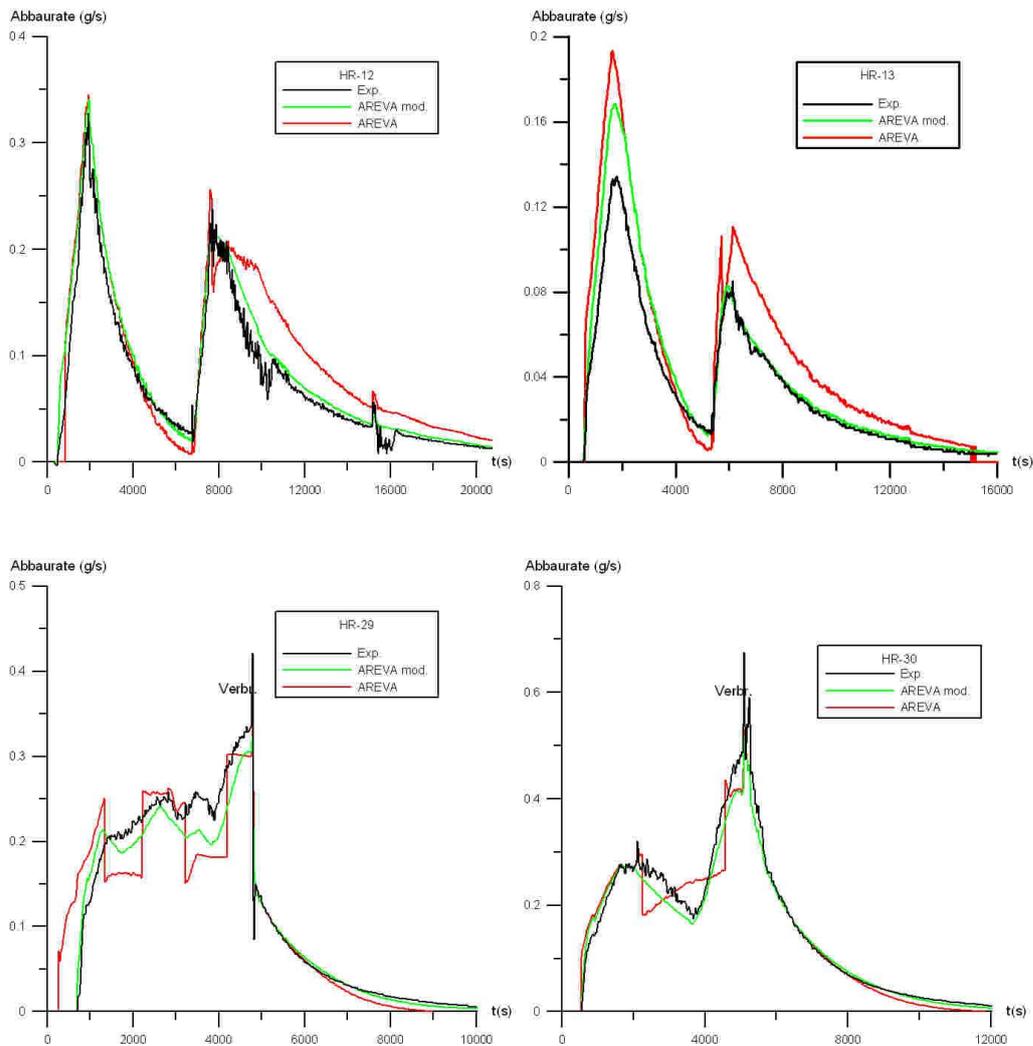


Abb. 5.7-1 Abbaureate im Experiment, bei der ursprünglichen und der modifizierten AREVA-Korrelation

## 5.8 Implementation des Rekombinormodells in CFX

In deutschen Kernkraftwerken werden autokatalytische  $H_2$ -Rekombinatoren eingesetzt, um großräumige Verbrennungsvorgänge und Detonationen zu verhindern. Ein Rekombinator kann prinzipiell mit CFX detailliert simuliert werden, allerdings ist aufgrund der Komplexität eines Rekombinators und der großen Anzahl der installierten Rekombinatoren (ca. 60 in einem KONVOI-Sicherheitsbehälter) dieser Ansatz für Containmentanwendungen nicht praktikabel. Für solche Anwendungen wurde im Vorläufervorhaben RS1181 ein einfaches PAR-Modell entwickelt und über USER-FORTRAN-Routinen in CFX implementiert. Im laufenden Vorhaben RS1500 wurde dieses Modell weiterentwickelt. Es wurden verbesserte Korrelationen für die Abbauleistung und für die Effizienz implementiert (siehe Abschnitte 5.2.1-5.2.2). Des Weiteren werden im Gegensatz zum

ursprünglichen Ansatz die Rekombinatorwände nicht mehr als „Solid-Blocks“ im CFX-Gitter berücksichtigt, sondern die mittlere Temperatur der Rekombinatorwände wird in den FORTRAN-Routinen berechnet. Dieser Ansatz vereinfacht die Erstellung des CFD-Gitters deutlich. Insbesondere wird die Gitterqualität in den meisten Fällen verbessert, weil die feine räumliche Diskretisierung der dünnen Wände in vielen Fällen zu einer starken Größenänderung der Zellvolumina („Mesh Expansion-Ratio“) geführt hat. Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über die Implementation des Rekombinatormodells gegeben. Der innere Teil des Rekombinators wird nicht im CFD-Gitter abgebildet, sondern der Rekombinator Einlass/Auslass wird als „Inlet/Outlet“ Randbedingung simuliert. Der Massenstrom der den Rekombinator durchströmt sowie die Temperatur und die Gaszusammensetzung am Auslass werden mit den oben beschriebenen Korrelationen berechnet. Die Temperatur der Rekombinatorwände wird ebenfalls in den FORTRAN-Routinen berechnet und über eine Temperaturrendbedingung in CFX gesetzt.

Zu Beginn der CFX-Simulation („START OF RUN“) muss das Rekombinatormodell mit der Routine „initreko“ initialisiert werden. Unter anderem werden bei dieser Routine einige vom Nutzer zu setzende Variablen aus dem „Definition-File“ eingelesen. Im Folgenden wird Anhand eines Beispiels die zu setzenden Größen beschrieben

USER

```
NumReko = 1
AREVA = 0
CpReko = 42000
Cplatten = 900
Cwand = 300
K1 = 0.0137e-3
K2 = 0.0163e-3
StartH2 = 1.1
WandTini = 300
```

END

NumReko: Anzahl der Rekombinatoren

AREVA: 1: Verwendung der „Originalen AREVA“ Korrelationen  
0: Verwendung der modifizierten Korrelationen

CpReko, Cplatten, Cwand, K1, K2: Modellparameter, müssen an den entsprechenden  
Rekombinatortyp angepasst werden

StartH2: H<sub>2</sub> Eintrittskonzentration, ab der eine Rekombination bei einem kalten Rekombinator einsetzt (bei AREVA-Korrelation 2 vol.%). Bisher ist diese Größe noch nicht ausreichend experimentell geklärt /KANZ09a/ /KANZ09b/ /SCH10/.

WandTini: Temperatur der Rekombinatorstrukturen zu Beginn der Simulation. In der Regel entspricht dies der Anfangstemperatur des umgebenden Gases.

Zu Beginn jeden Zeitschritts wird der Massenstrom durch den einzelnen Rekombinator, die Gaszusammensetzung und die Temperatur des Gases am Rekombinator mit Hilfe der in den Abschnitten 5.2-5.5 beschriebenen Korrelationen neu berechnet. Dazu wird die Funktion „calcreko“ zum Zeitpunkt „Start of time step“ aufgerufen. Die von CFX benötigten Größen können mit folgenden Funktionen eingelesen werden:

Name	Input	Output	Erklärung
mf_reko	Nummer	[kg/s]	Massenfluss
h2_reko	Nummer	[]	H <sub>2</sub> -Massenbruch am Reko-Auslass
h2o_reko	Nummer	[]	H <sub>2</sub> O-Massenbruch am Reko-Auslass
o2_reko	Nummer	[]	O <sub>2</sub> -Massenbruch am Reko-Auslass
temp_reko	Nummer	[K]	Temperatur am Reko-Auslass
Platten_temp	Nummer	[K]	Auslesen der Modellvariable Platten-temp
Wand_temp	Nummer	[K]	Mittlere Temperatur der Reko-Wände

Die Größen Platten\_temp und Wand\_temp müssen für jeden Rekombinator in einer zusätzlichen Variable Plattentempnr und Wandtempnr (nr = Nummer z. B. 1) abgespeichert werden, damit diese Größen bei einem Restart der Simulation zur Verfügung stehen. Sie werden für jeden Rekombinator einzeln als zusätzliche Variable in der Fluidomain (wandtemp1, plattentemp1) definiert. Dies stellt sicher, dass bei einem

Restart die entsprechenden Größen zur Verfügung stehen, zudem kann für jeden Zeitschritt der Wert dieser Größen im Postprocessing ausgewertet werden.

## **5.9 Validierung des Rekombinatormodells**

In den vorangegangenen Abschnitten wurde gezeigt, in wie weit die modifizierten AREVA-Korrelationen in der Lage sind, das Abbauverhalten des Rekombinators zu beschreiben, sofern am Rekombinatoreintritt die experimentell gemessenen Werte (Temperatur, Druck, Gaszusammensetzung) anliegen. Es bleibt aber noch zu zeigen, dass CFX zusammen mit dem implementierten Rekombinatormodell in der Lage ist, die HR Experimente zu simulieren. Dazu wurden die beiden HR Experimente HR-2 und HR-12 ausgesucht, da bei Ihnen (im Gegensatz zu HR-5) im Vorläuferprojekt RS1181 noch stärkere Abweichungen zum Experiment festgestellt wurden /SCH10/.

### **5.9.1 Nachrechnung HR-2**

#### **5.9.1.1 Beschreibung des HR-2 Experiments**

Beim HR-2 Experiment wurde der AREVA-Rekombinatortyp FR-380 untersucht. Die Anzahl der katalytischen Platten und der Strömungsquerschnitt wurden auf 50 % reduziert. Die Startbedingungen beim HR-2 Experiment waren trockene Luft (ohne Wasserstoff) bei 1,0 bar Druck und 27,9 °C.

Die Wasserstoffeinspeiserate wurde wie folgt modifiziert:

0 s - 480 s:	0,157 g/s	(Phase 1a)
480 s – 1218 s:	0,306 g/s	(Phase 1b)
1218 s - 4400 s:	0 g/s	(Phase 2)
4400 s - 5640 s:	0,3 g/s	(Phase 3)
ab 5640 s:	0 g/s	(Phase 4)

Nach ca. 5500 s kam es im HR-2 Versuch zu einer Zündung und einer anschließenden Verbrennung. Ziel der Simulation ist die Validierung des Rekombinatormodell. Eine Simulation der Verbrennung setzt die Verwendung anderer CFX-Modelle voraus (z. B. Burning Velocity –Verbrennungsmodell). Außerdem macht eine Nachrechnung der Verbrennung nur Sinn, wenn hinreichend genaue Informationen über den Zeitpunkt

und den Ort der Zündung vorhanden sind. Deshalb endet die Validierungsrechnung für das HR-2 Experiment vor Beginn der Zündung bei 5400 s.

### 5.9.1.2 Modellierung in CFX

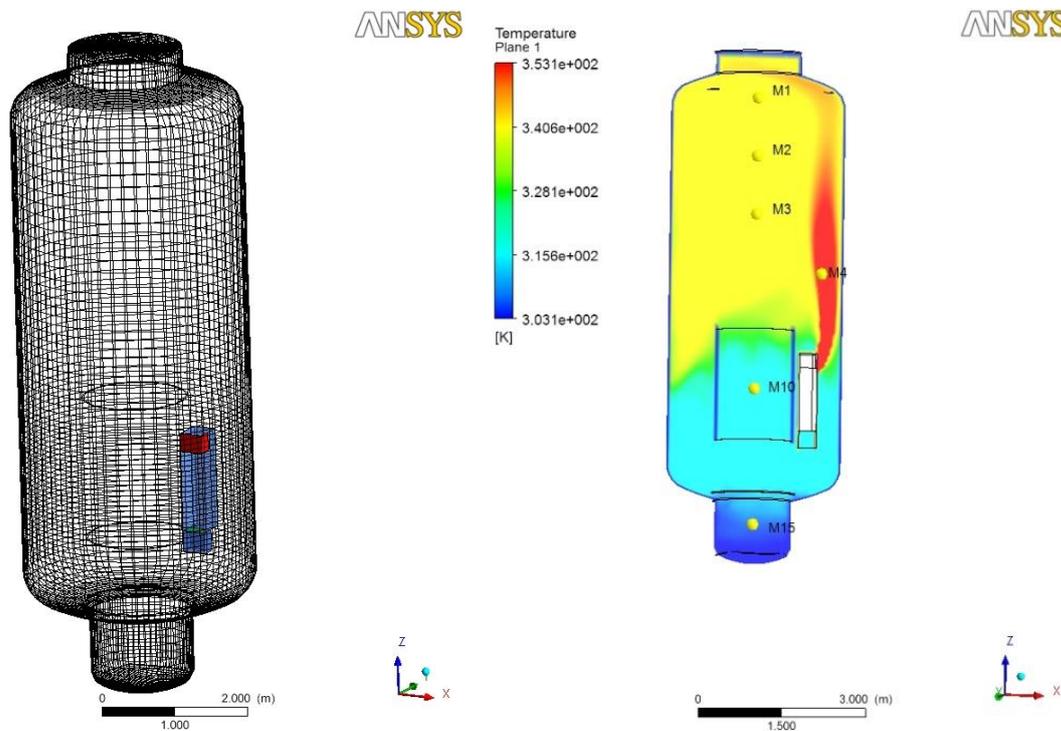


Abb. 5.9-1 Links: CFD-Gitter bei der Simulation mit CFX. Der Rekombinator ist farbig dargestellt (rot: PAR-Auslass, grün: PAR Einlass, blau: PAR-Wand). Rechts: Position der Messstellen für die Gaszusammensetzung

Bei der Simulation des HR-2 Versuchs wurde ein strukturiertes CFD-Gitter mit 313 000 Zellen verwendet (Abb. 5.9-1). Die Behälterwände wurden als „Solid-Block“ im CFD-Gitter vernetzt und es werden für sie die 3-diminsionalen Wärmeleitungsgleichungen gelöst. Die isolierten Außenwände des THAI-Behälters werden als adiabat angenommen. Die Turbulenz wurde mit dem SST-Modell (Shear-Stress-Transport) modelliert. Die Wärmestrahlung wird mit dem „Discret Transfer-Modell“ simuliert. Dabei wird für alle Gase bis auf Wasserdampf der Absorptionskoeffizient  $0 \text{ m}^{-1}$  angenommen. Die Absorption von Wasserdampf wird mit dem Multi-Grey-Ansatz (4 Bänder mit unterschiedlichem Absorptionkoeffizienten, siehe Kapitel SETH 1-4) beschrieben. Um den Einfluss der Wärmestrahlung zu untersuchen, wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die Wärmestrahlung nicht berücksichtigt wurde.

### 5.9.1.3 Vergleich mit experimentellen Daten

Als erstes werden die Ergebnisse der Simulation diskutiert, bei der die Wärmestrahlung berücksichtigt wurde. Die berechnete Abbaurrate stimmt gut mit Messwerten überein (Abb. 5.9-4), nur im Bereich der maximalen Abbaurrate 1000 - 1500 s kommt es zu einer Überschätzung der Abbauleistung. Dies hat zwei Gründe. Zum einen überschätzt für diesen Zeitbereich die verwendete Korrelation für die Abbauleistung die Rekombination etwas (Abb. 5.7-1), außerdem wird von CFX die  $H_2$  Eintrittskonzentration etwas überschätzt (Abb. 5.9-4).

Die berechnete  $H_2$ -Austrittskonzentration stimmt gut mit dem Experiment überein, insbesondere wenn man berücksichtigt, dass die Eintrittskonzentration im Bereich des Maximums überschätzt wird (Abb. 5.9-5). Beim Vergleich ist zudem zu berücksichtigen, dass die drei  $H_2$ -Messtellen am Austritt etwas unterschiedliche Konzentrationen gemessen haben. Der berechnete Wert liegt dabei im oberen Bereich der gemessenen Konzentrationen. Dieser Vergleich zeigt, dass die Korrelation für die Effizienz für das HR-2 Experiment in der Lage ist, das Abbauverhalten richtig zu beschreiben.

Die Gastemperatur am Austritt des Rekombinators hängt von vielen verschiedenen Parametern und Korrelationen ab. Neben der  $H_2$ -Konzentration und der Temperatur am Eintritt ist die Korrelation für die Effizienz und die Berechnung der Wärmeverluste an die Rekombinatorstrukturen für die berechnete Austrittstemperatur von Bedeutung. In den Phasen mit  $H_2$ -Einspeisung (entspricht ansteigender Abbauleistung) wird die Austrittstemperatur in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet (Abb. 5.9-5). Die Austrittstemperatur beim Maximum der Abbauleistung wird etwas überschätzt, was mit der höheren  $H_2$ -Eintrittskonzentration korreliert. Für diese Versuchsphasen erfolgt die Berechnung der Wärmeverluste in guter Übereinstimmung mit dem Versuch. Für die Versuchsphase ohne  $H_2$  Einspeisung (entspricht abfallender Rekombinationsrate) wird die Austrittstemperatur etwas unterschätzt. Ursache für diese Abweichungen sind neben Ungenauigkeiten bei der Berechnung der Wärmeverluste auch die leichte Unterschätzung der  $H_2$ -Eintrittskonzentration und die relativ hohe  $H_2$ -Austrittskonzentration, die sich aber noch im Rahmen der Streuung der Messwerte bewegt.

Durch den sich im Betrieb befindenden Rekombinator stellt sich im THAI-Behälter folgende Schichtung ein: Oberhalb des Rekombinators sammelt sich heißes, relativ  $H_2$ -armes Gas. Zwischen Rekombinator und  $H_2$ -Einspeise-Ring befindet sich kaltes Gas mit einer hohen  $H_2$ -Konzentration. Die Gaszusammensetzung und die Temperatur än-

dern sich im Sumpf des THAI-Behälters während des gesamten Versuchs kaum. Qualitativ und quantitativ wird die sich einstellende H<sub>2</sub>-Schichtung von CFX in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet. Die Abweichungen betragen fast immer weniger als 0,5 vol.% (Abb. 5.9-6).

In der 1. Versuchsphase wird die Konzentration im oberen Bereich des THAI-Behälters (M1, M2, M3) sehr gut vorhergesagt. Im Bereich der maximalen Abbaurrate wird die H<sub>2</sub>-Konzentration leicht unterschätzt (weniger als 0,5 vol.%). Grund hierfür kann die etwas zu hohe Abbauleistung sein, aber auch die Ungenauigkeit bei der Berechnung von Vermischungsvorgängen. Im weiteren Verlauf der 2. Versuchsphase nimmt die Abweichung zwischen Experiment und Simulation wieder ab (in diesem Bereich wird die Abbauleistung leicht unterschätzt was dazu führt dass sich die integrale Abbauleistung des Rekombinators, den experimentellen Werten weiter annähert).

Der Messpunkt M4 befindet sich ebenfalls oberhalb des Rekombinators, allerdings liegt er nicht auf der Behälterachse sondern seitlich versetzt in der Nähe des Plumes des heißen Gases, welches aus dem Rekombinator austritt. Die Gaskonzentration zeigt an dieser Messstelle ein sehr ähnliches Verhalten wie die bei M3.

Die Messstelle M10 befindet sich in der Höhe des Rekombinators und damit in der mittleren Schicht mit der höchsten H<sub>2</sub>-Konzentration. Für M10 wird die Konzentration in der ersten und dritten Versuchsphase sehr gut vorhergesagt, das Maximum bei ca. 1200 s wird leicht überschätzt. In der 2. Versuchsphase erfolgt die Konzentrationsabnahme allerdings etwas schneller als im Experiment.

Der Messpunkt M15 liegt im Behältersumpf. In der Simulation erfolgt eine zu starke Zunahme der H<sub>2</sub>-Konzentration von 1500 s - 2000 s. Danach nähert sich die simulierte Konzentration wieder der im Experiment an. Grund ist eine zu starke Vermischung der Sumpfreion.

Vergleicht man die berechneten mit den gemessenen Temperaturen, so fällt auf, dass an allen Messstellen ein etwas zu starker Temperaturanstieg erfolgt (Abb. 5.9-7). Die Gastemperaturen werden im Maximum (ca. 1200 s) an den meisten Messstellen um ca. 10 K überschätzt. In der 2. Versuchsphase erfolgt der Temperaturabstieg etwas schneller, so dass nach ungefähr 2500 s eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt wird. Einen Betrag zur Überschätzung der Gastemperatur wird die Überschätzung der Abbauleistung im Maximum leisten.

Vergleicht man die Simulation mit und ohne Berücksichtigung der Wärmestrahlung, so wird der Einfluss der Strahlungsmodellierung deutlich. Ohne Strahlungsmodell liegt die Temperatur noch höher (ca. 5 K). Dies ist bemerkenswert, da zu Beginn der Simulation kein Dampf vorliegt und nur Dampf einen Betrag zur Absorption der Strahlung leistet. Nach 1260 s liegt die mittlere Dampfkonzentration bei 1,5 vol.%. Selbst im heißen Abgasplume des Rekombinators ist die Dampfkonzentration maximal 4,6 vol.%. Bei einer ersten Testrechnung wurde die Absorptionskonstante des Gases auf konstant  $1 \text{ m}^{-1}$  gesetzt (Abb. 5.9-7, Punkt M1, orange Kurve). In diesem Fall wird die Temperatur bei 1200 s sogar deutlich unterschätzt. Dies unterstreicht nochmals die Bedeutung der Modellierung der Strahlung für die Temperaturverteilung. Die Überschätzung der Temperatur bei Vernachlässigung der Strahlung hat einen Einfluss auf die Dichteverteilung des Gases und damit auch auf die berechnete Schichtung. Ohne Strahlungsmodellierung ist die  $\text{H}_2$ -Konzentration bei 1200 s noch etwas geringer, die Abweichung zum Experiment ist also noch größer. Wie in Abschnitt 5.9.1.2 beschrieben, wird ein Standard-Strahlungsmodell verwendet, welches unter Umständen noch für Containmentanwendungen angepasst werden muss. Es ist davon auszugehen, dass eine weitere Verbesserung bei der Strahlungsmodellierung auch zu einer weiteren Verbesserung der Ergebnisse bei der Simulation des HR-2 Experiments liefern wird, insbesondere hinsichtlich der Temperaturverteilung, obwohl die so erzielten Ergebnisse bereits sehr gut sind.

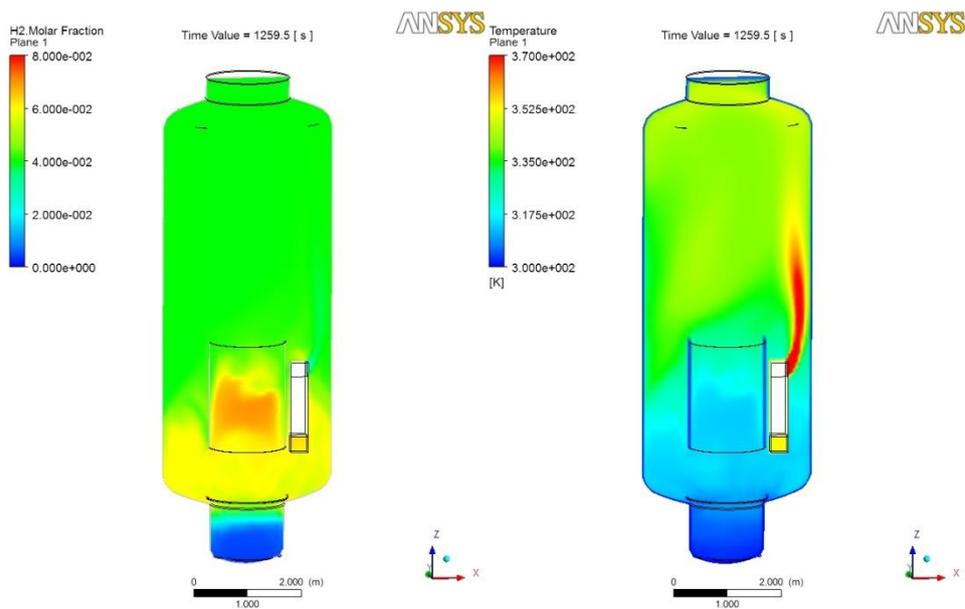


Abb. 5.9-2  $\text{H}_2$ -Konzentration und Temperatur nach 1260 s

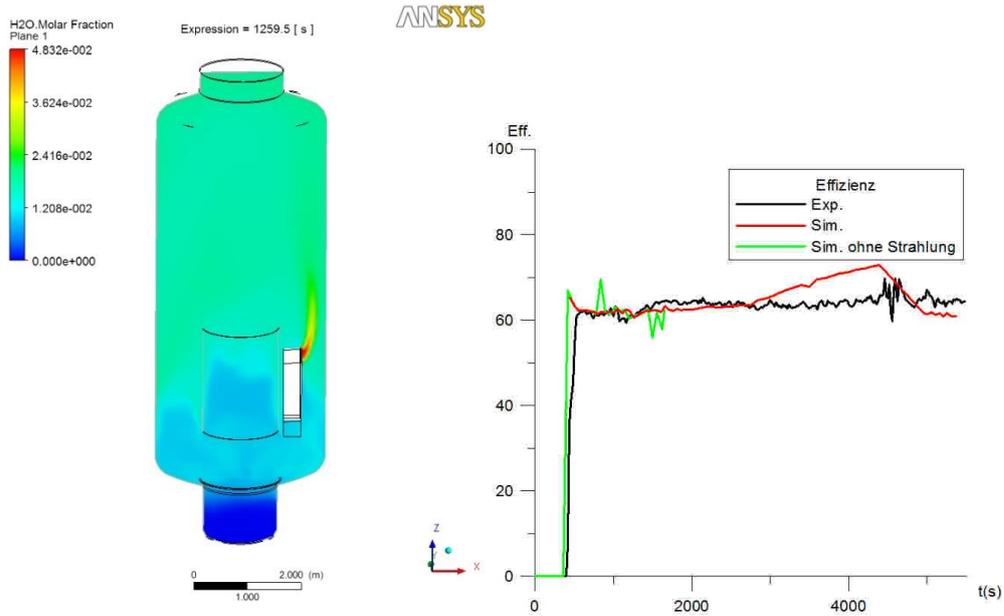


Abb. 5.9-3 Links: Dampfkonzentration nach 1260 s, rechts: Effizienz

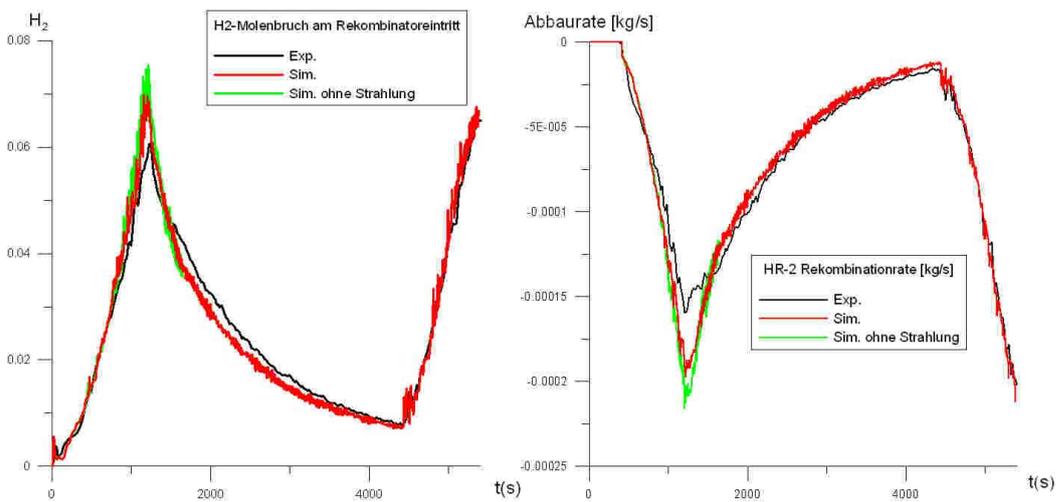


Abb. 5.9-4 H<sub>2</sub> Eintrittskonzentration am Rekombinator (links) und Abbaurrate (rechts)

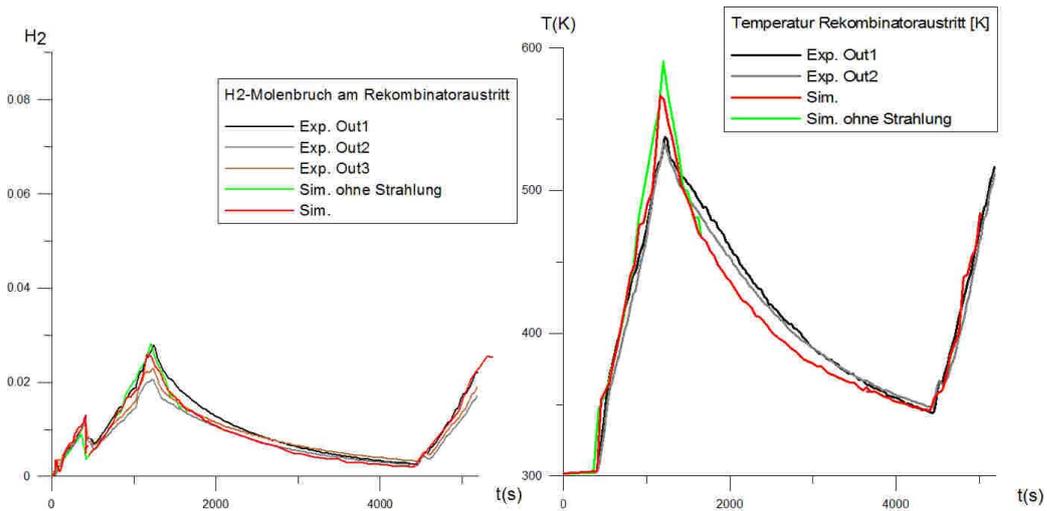
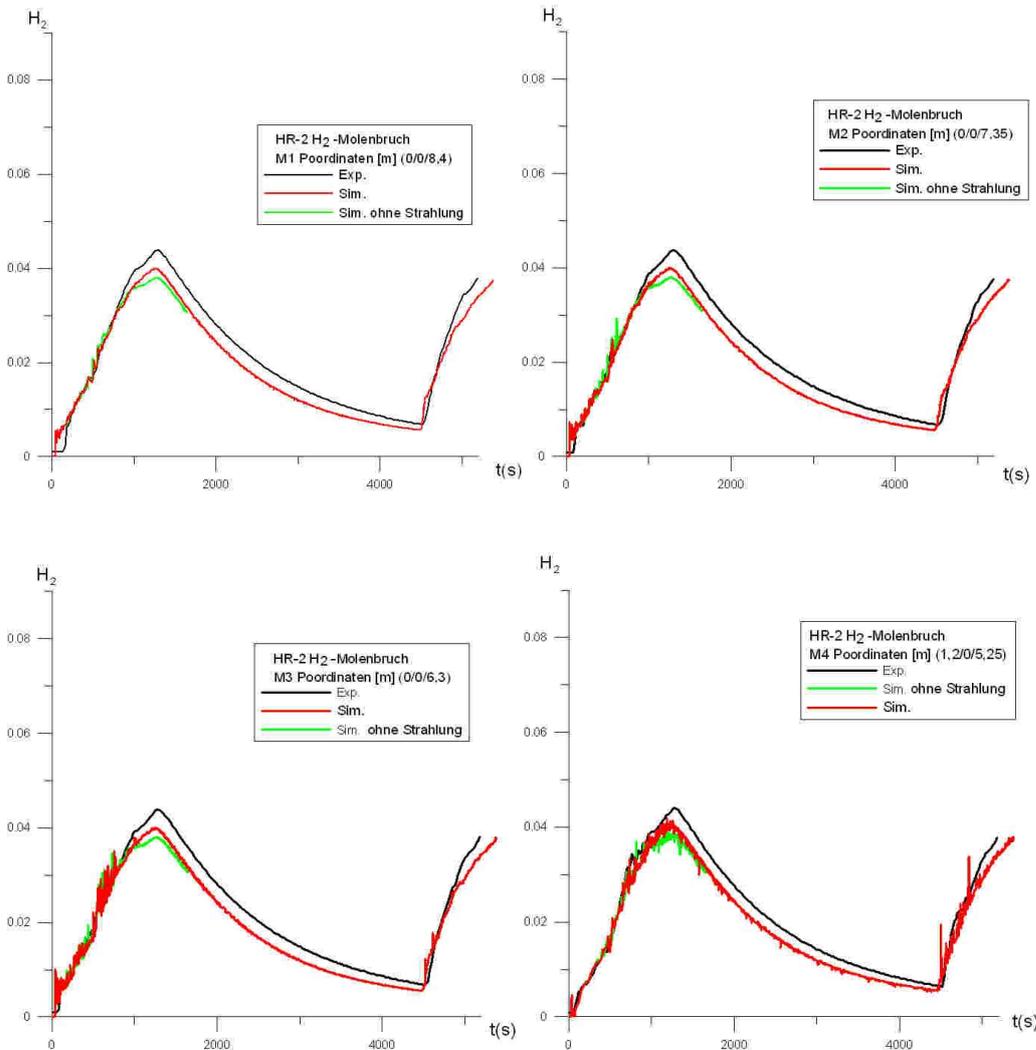


Abb. 5.9-5 H<sub>2</sub>-Austrittskonzentration (links) und Austrittstemperatur (rechts) am Rekombinator



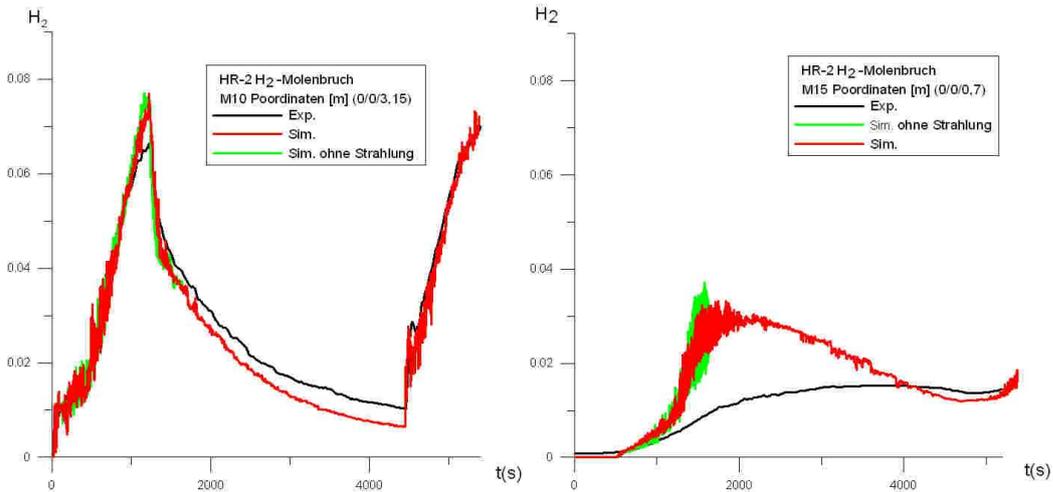
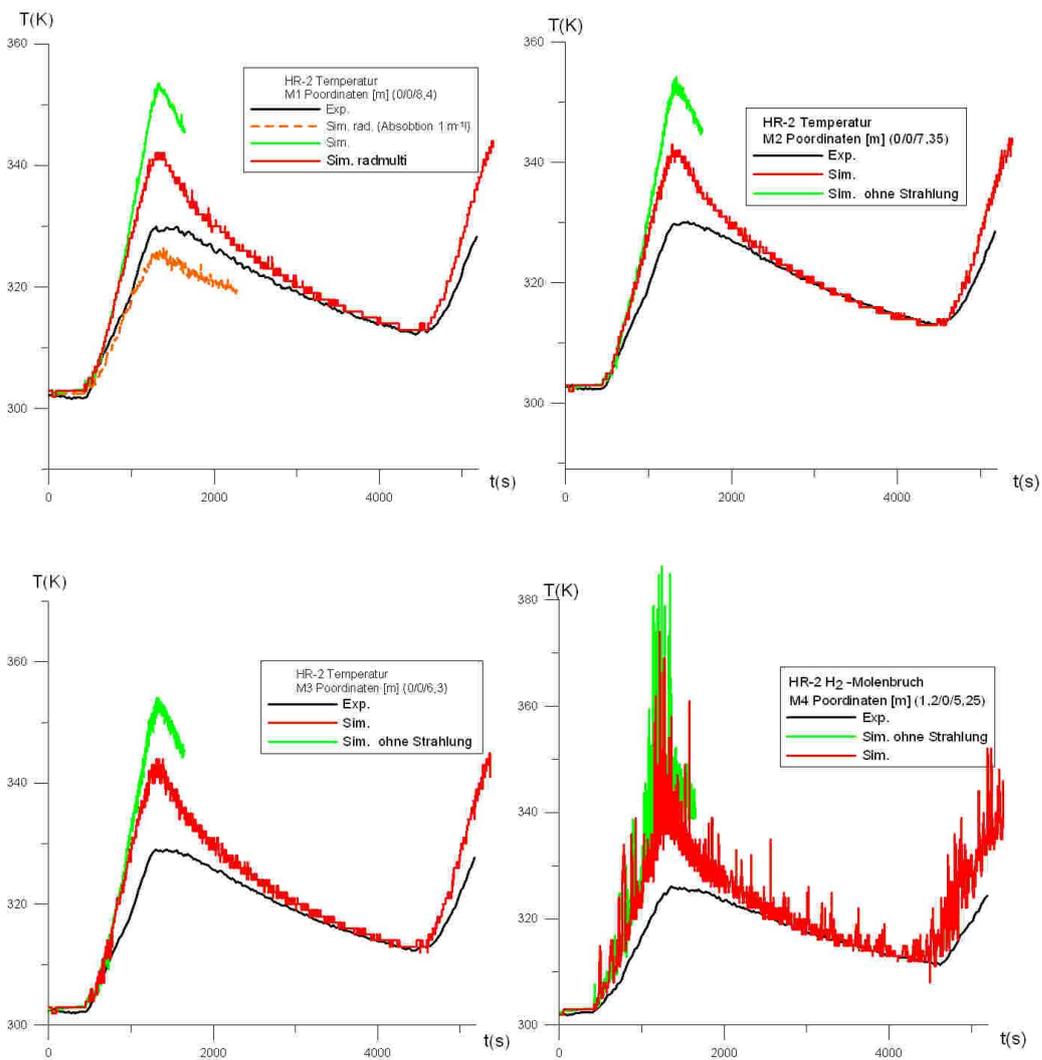


Abb. 5.9-6 H<sub>2</sub>-Konzentration an verschiedenen Messstellen



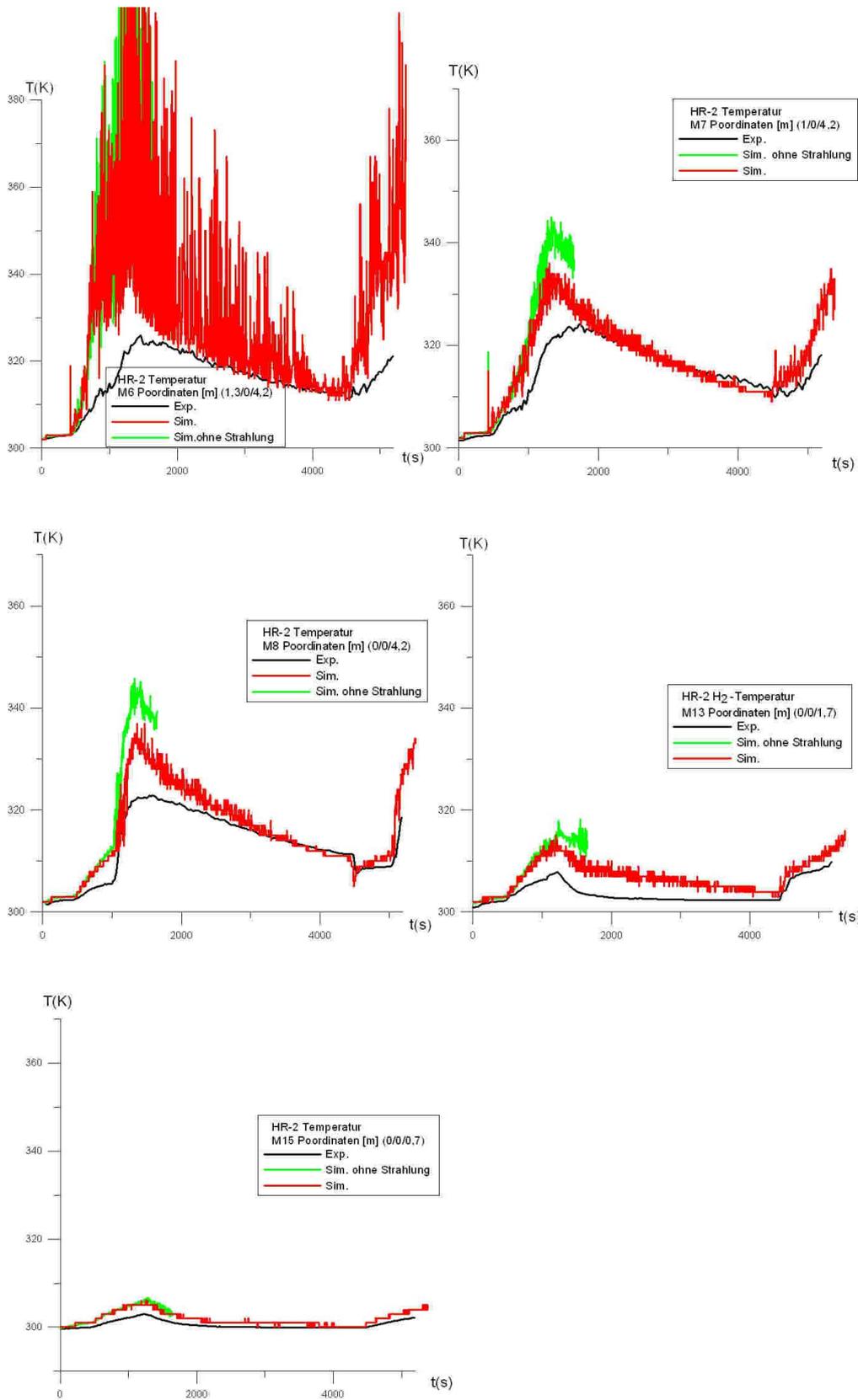


Abb. 5.9-7 Temperatur an verschiedenen Messstellen

## 5.9.2 Nachrechnung HR-12

Neben dem HR-2 Experiment wurde auch die Simulation des HR-12 Experimentes mit dem neuen Rekombinatormodell wiederholt. Im Gegensatz zum HR-2 Experiment findet beim HR-12 Experiment auch Kondensation statt, da im Experiment im Mittel ein Dampfanteil von 61,1 vol% vorlag. In der Infobox in findet sich eine Übersicht zu den Berechnungsparametern für die neue Berechnung.

Tab. 5.9-1 Infobox THAI HR-12 (neue Rechnung)

Experiment	THAI HR-12
Phänomene	Rekombinatoren, Kondensation
Elementzahl	190 171
Turbulenzmodell	SST
Diffusionskoeffizient	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, O <sub>2</sub> : 1,0 e-5 [m <sup>2</sup> / s]
Wärmestrahlung	Ohne
Kondensationsmodell	GRS-Kondensations-Modell
Rekomodell	(Neues) GRS-Reko-Modell
CFX-Version	11.0

In Abb. 5.9-8 ist die H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Einlass dargestellt. Sie ist ein wichtiger Eingangsparameter für das Rekombinator-Modell. Es zeigen sich zwischen der alten und der neuen Berechnung nur geringe Unterschiede in den H<sub>2</sub>-Konzentrationen am Reko-Einlass, somit liegen also ähnliche Eingangsbedingungen für die zwei unterschiedlichen Reko-Modelle vor. Lediglich in der ersten Zeit ( $t < 9$  min) zeigen sich bei der neuen Rechnung höhere H<sub>2</sub>-Konzentrationen am Reko-Einlass. Ursache hierfür sind Schwankungen des H<sub>2</sub>-Plumes, die auf Grund numerischer Ungenauigkeiten bei beiden Rechnungen unterschiedlich ausfallen. Diese höheren H<sub>2</sub>-Konzentrationen führen allerdings zu einem etwas verfrühten Start des Rekos bei der neuen Berechnung. Vergleicht man die H<sub>2</sub>-Konzentrationen am Reko-Auslass miteinander, so sind beide Werte vom alten und vom neuen Reko-Modell relativ ähnlich (siehe hierzu Abb. 5.9-9). Sowohl in der alten als auch in der neuen Berechnung liegen die H<sub>2</sub>-Konzentrationen in der 2. Phase ( $t > 30$  min) sowohl für den Reko Einlass als auch für den Reko-Auslass etwas unterhalb der experimentellen Werte.

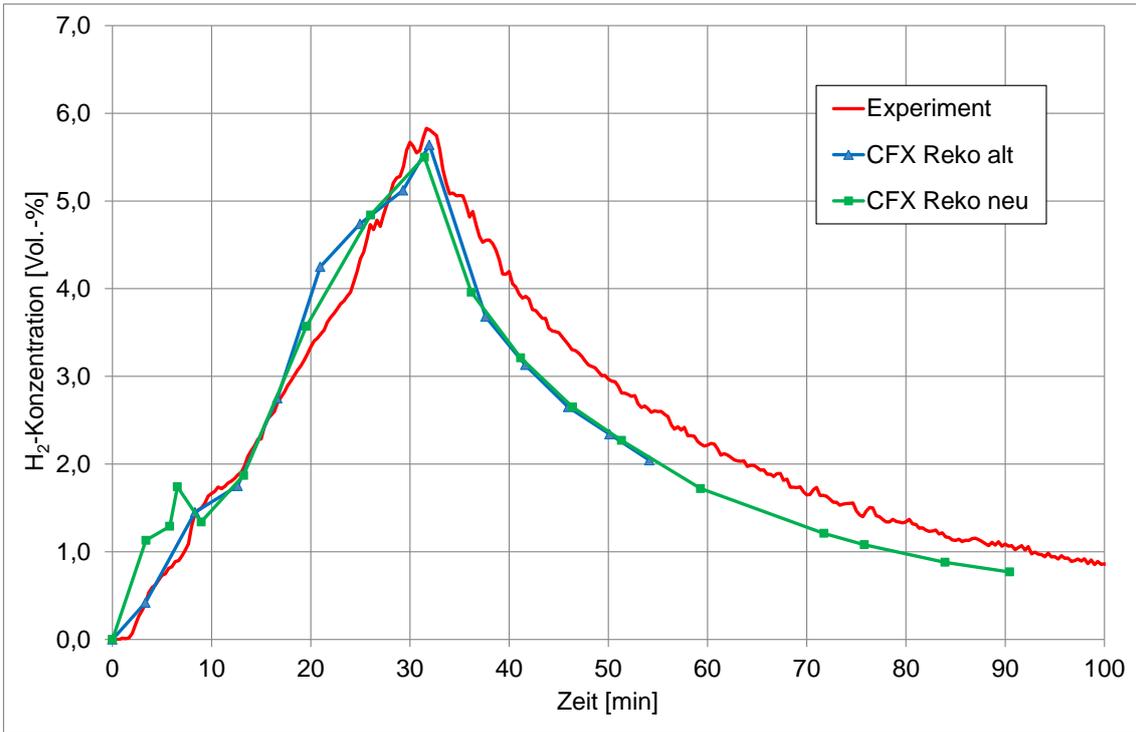


Abb. 5.9-8 H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko Einlass

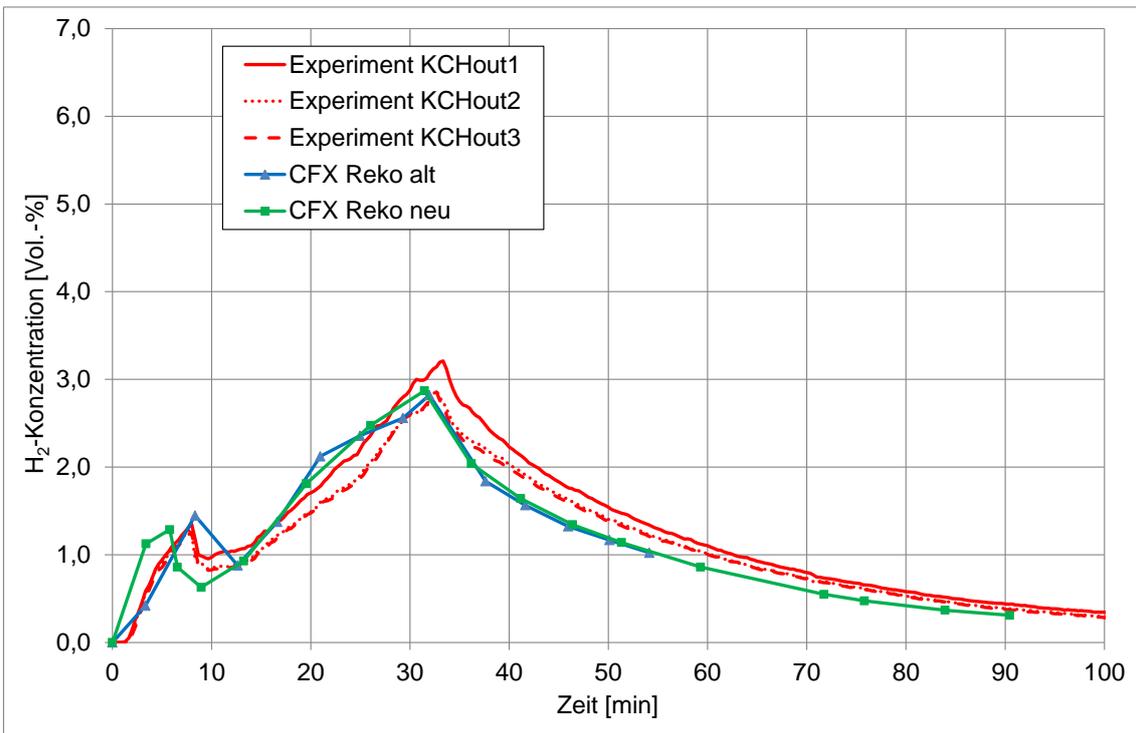


Abb. 5.9-9 H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Auslass

In Abb. 5.9-10 ist die Effizienz des Rekombinators dargestellt. Im alten Reko-Modell ist sie auf den Wert von 50 % festgelegt wurden. Dieser Wert passt im berechneten Zeit-

raum ( $0 \text{ min} < t < 54 \text{ min}$ ) recht gut zum Experiment. Später steigt im Experiment die Reko Effizienz jedoch an, dieses kann mit dem alten Reko-Modell nicht wiedergegeben werden. Das neue Reko-Modell erlaubt jedoch eine Veränderung der Reko Effizienz entsprechend der neu eingefügten Korrelationen. In diesem Experiment zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen der mit dem neuen Reko-Modell berechneten Effizienz und den experimentellen Werten.

Abb. 5.9-11 zeigt die berechnete  $\text{H}_2$ -Rekombinationsrate. Die Rekombinationsrate liegt in der Einspeisephase ( $t < 30 \text{ min}$ ) beim neuen Reko-Modell etwas niedriger als beim alten Reko-Modell. Da so in der Einspeisephase weniger  $\text{H}_2$  abgebaut wurde, liegt die Rekombinationsrate in der 2. Versuchsphase ( $t > 30 \text{ min}$ ) beim neuen Reko-Modell etwas höher als beim alten Reko-Modell. Diese passt insgesamt etwas besser zu den experimentellen Werten.

In Abb. 5.9-12 ist die Temperatur am Reko-Auslass dargestellt. Hier zeigt sich in der späteren Phase ( $t > 30 \text{ min}$ ) eine deutliche Verbesserung der Temperaturwerte beim neuen Reko-Modell im Vergleich zum alten Reko-Modell. Ursache für diese Verbesserung ist die Modellierung des Wärmeaustausches zwischen Gas und Rekombinatorwand im neuen Reko-Modell. Die hier in der 1. Phase ( $t < 30 \text{ min}$ ) gespeicherte Wärme wird in der 2. Phase ( $t > 30 \text{ min}$ ) wieder an das Gas abgegeben.

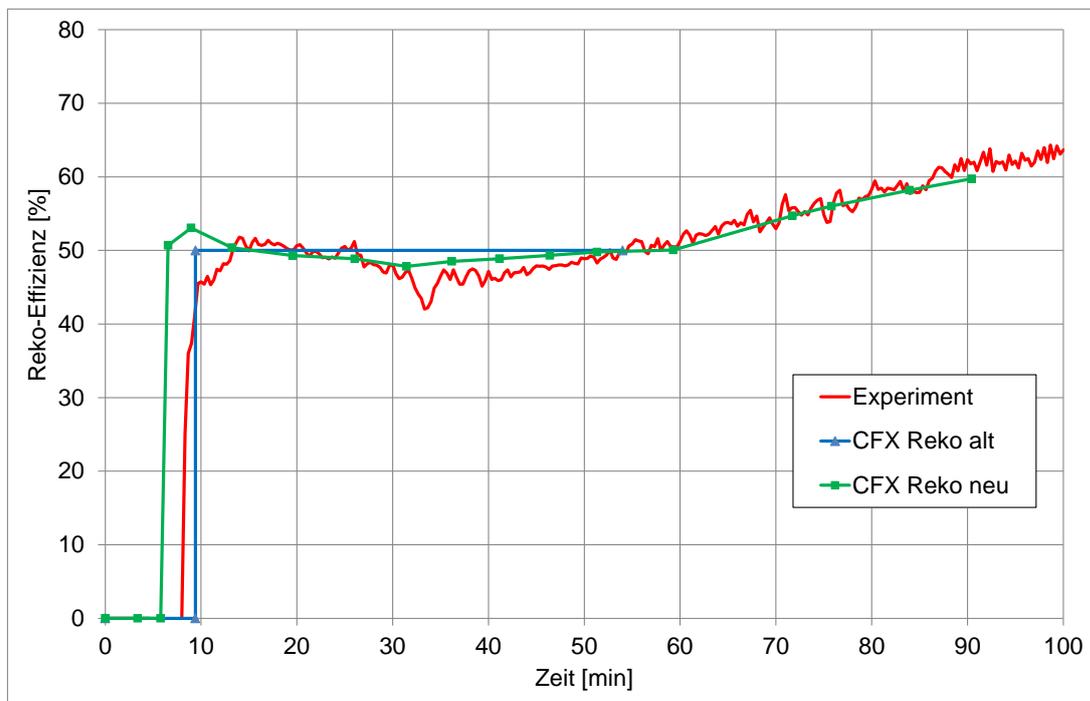


Abb. 5.9-10 Effizienz des Rekombinators

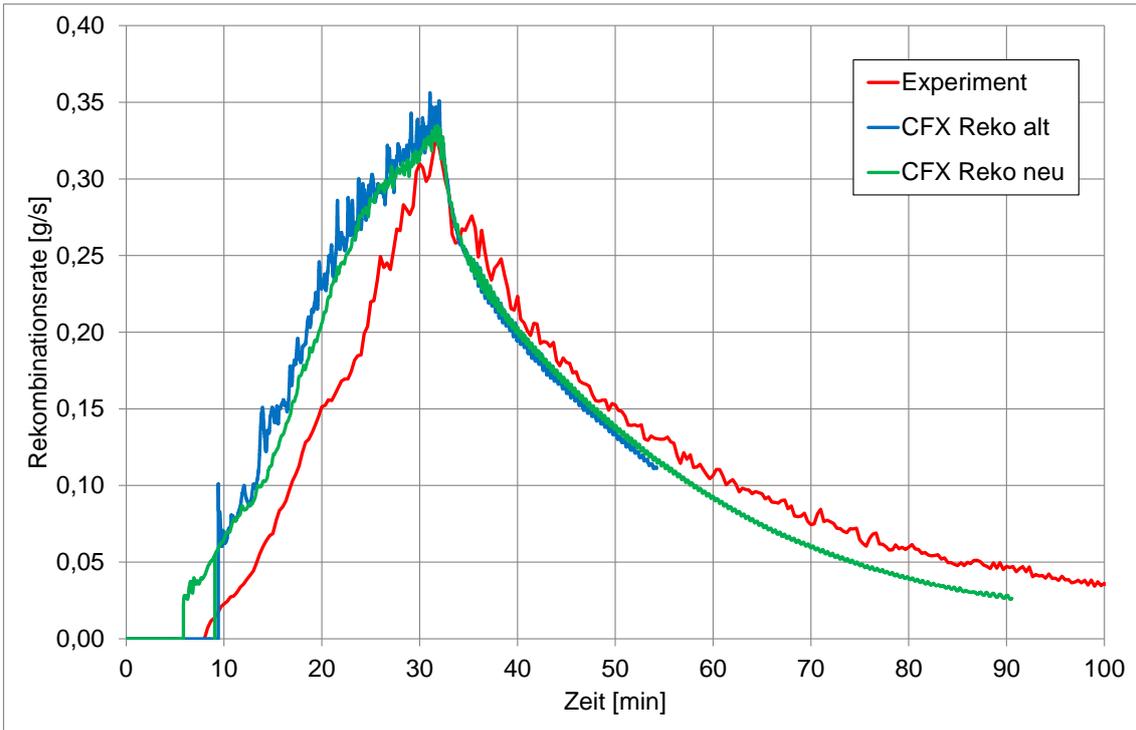


Abb. 5.9-11 H<sub>2</sub>-Rekombinationsrate des Rekombinators

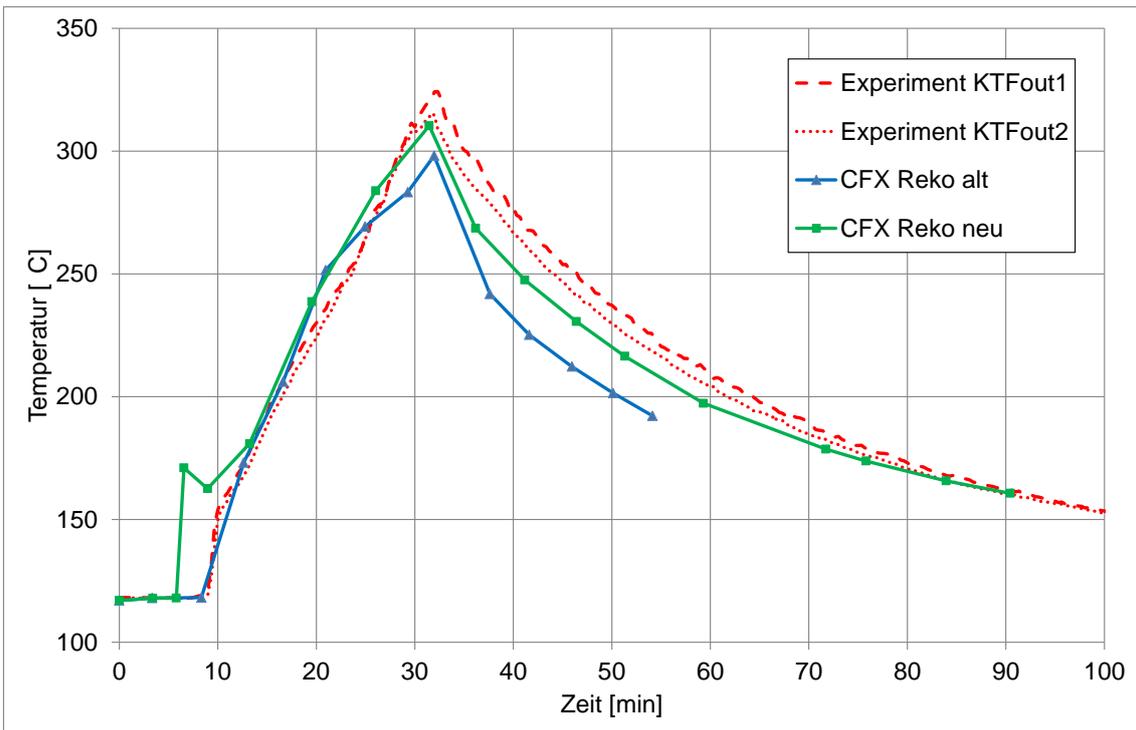


Abb. 5.9-12 Temperatur am Reko-Auslass

In Abb. 5.9-13 wird die H<sub>2</sub>-Rekombinationsrate mit der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko Einlass verglichen. Hier zeigt sich beim neuen Rekomodell eine etwas niedrigere Rekombinationsrate. Ursache hierfür ist der neu eingeführte Modifikationsfaktor  $f_T$ , der die

Verringerung der Abbauleistung bei kalten Rekombinatorplatten beschreibt. Dadurch liegt die neue Rekombinationsrate etwas näher an den experimentellen Werten. Abb. 5.9-14 vergleicht die  $H_2$ -Konzentration am Reko-Auslass mit der  $H_2$ -Konzentration am Reko Einlass. Auch hier ähneln sich die Werte der alten und der neuen Berechnung. Vergleicht man die Temperaturen am Reko-Auslass mit der  $H_2$ -Konzentration am Reko Einlass so zeigt das neue Reko-Modell eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Werten (siehe Abb. 5.9-15). Dieses entspricht auch dem Temperaturverlauf über der Zeit, der in Diagramm Abb. 5.9-12 dargestellt war.

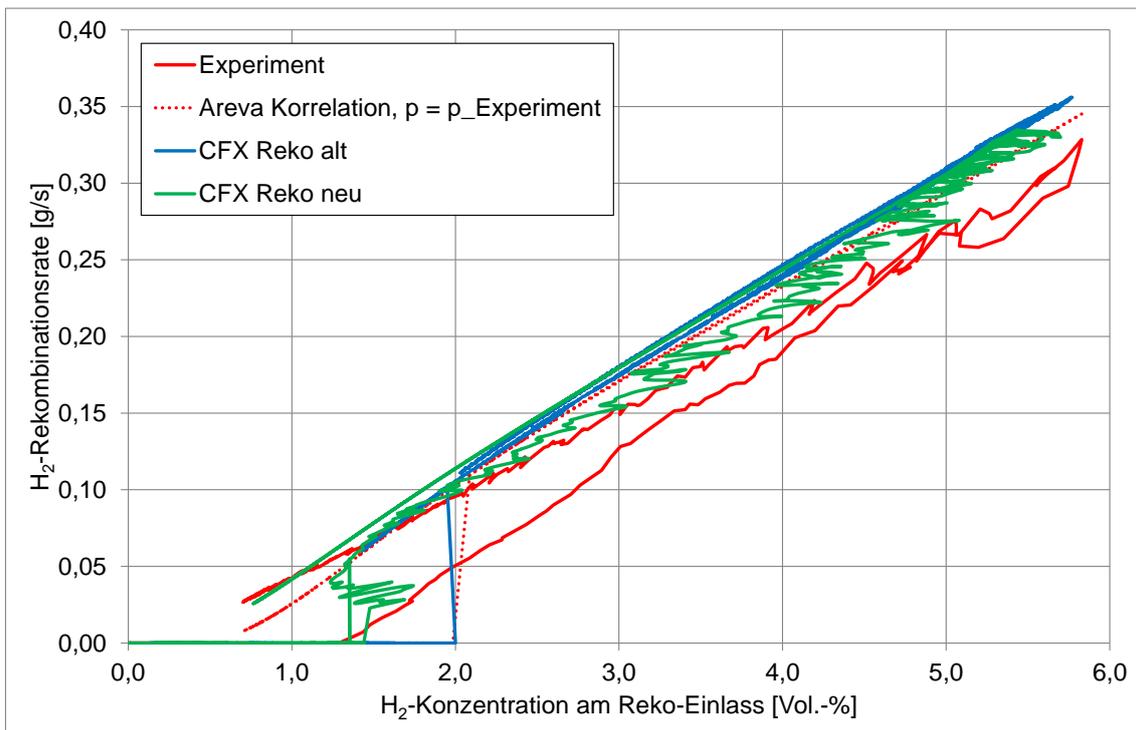


Abb. 5.9-13 Vergleich der  $H_2$ -Rekombinationsrate mit der  $H_2$ -Konzentration am Reko Einlass

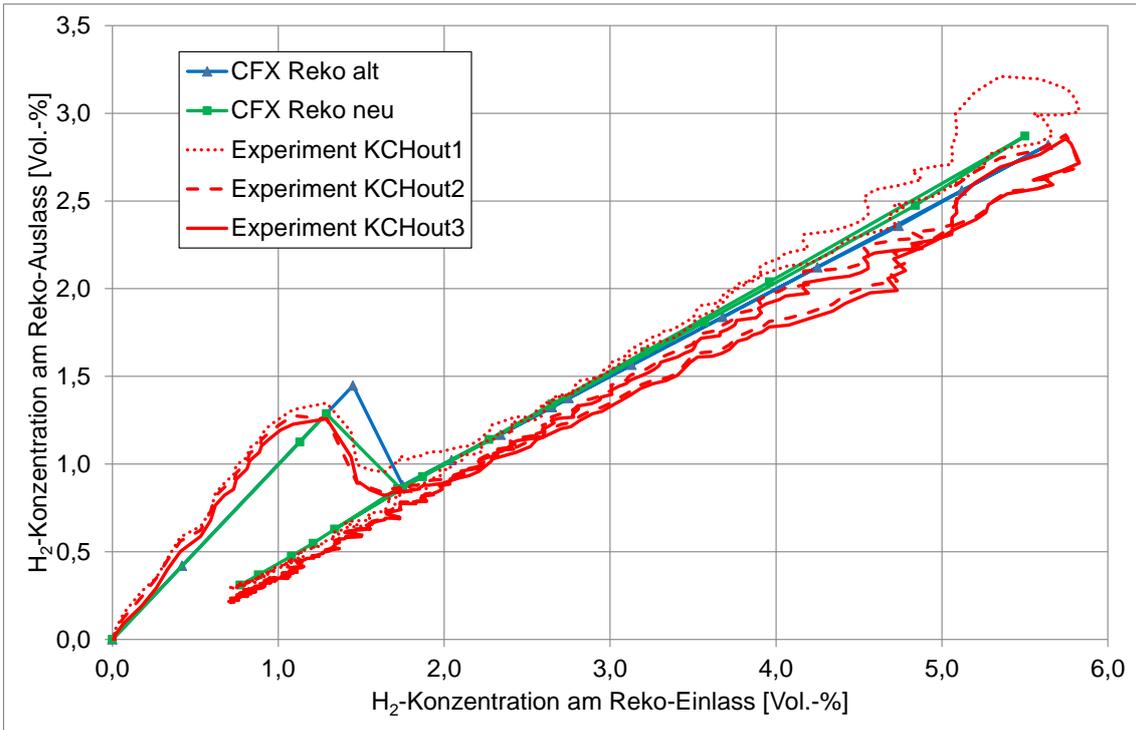


Abb. 5.9-14 Vergleich der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko-Auslass mit der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko Einlass

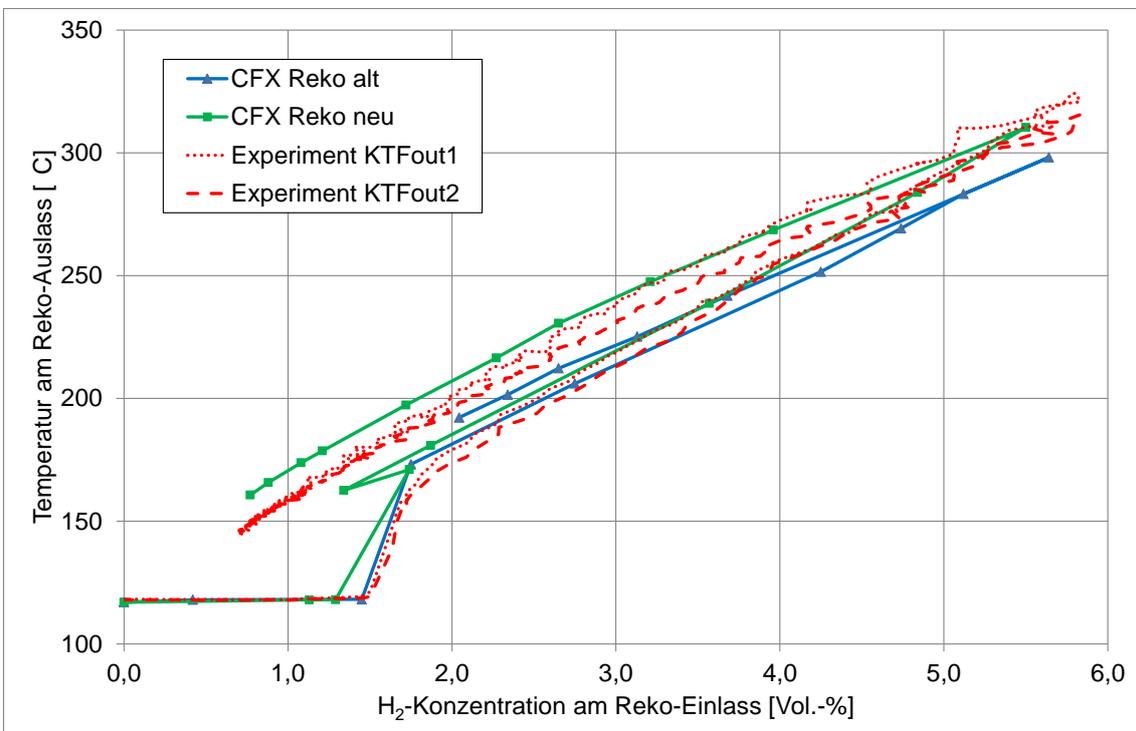


Abb. 5.9-15 Vergleich der Temperatur am Reko-Auslass mit der H<sub>2</sub>-Konzentration am Reko Einlass

Abb. 5.9-16 stellt den Druck im THAI-Behälter dar. Dieser ist in beiden Berechnungen deutlich zu hoch. Ursache hierfür ist, dass die Wirkung der Isolation des THAI-Behälters überschätzt bzw. die Wärmeabgabe nach außen unterschätzt wurde. In der Berechnung mit dem neuen Reko-Modell wurde mit der gleichen (unterschätzten) Wärmeabgabe nach außen gerechnet, um eine Vergleichbarkeit der beiden Reko-Modelle zu gewährleisten. Der berechnete Druck ist bei der Berechnung mit dem neuen Reko-Modell etwas niedriger als bei der Berechnung mit dem alten Reko-Modell.

In Abb. 5.9-17 bis Abb. 5.9-19 sind Temperaturen an verschiedenen Messstellen im THAI-Behälter dargestellt. In 8,4 m und in 1,7 m Höhe sind die Temperaturen bei der neuen Rechnung etwa gleich geblieben, nur in 5,3 m Höhe hat sich eine leichte Verbesserung der Simulationsergebnisse ergeben. Die Abb. 5.9-20 bis Abb. 5.9-22 dargestellten H<sub>2</sub>-Konzentrationen sind an den drei Messstellen im Wesentlichen unverändert geblieben. In der hier diskutierten HR-12 Nachrechnung sind bisher noch nicht die neuesten Erkenntnisse bzgl. Wärmestrahlung, Kondensation und Materialparameter eingeflossen. Aus diesem Grund ist noch eine weitere Nachrechnung mit verbesserter Modellierung bzw. besseren Parametern geplant.

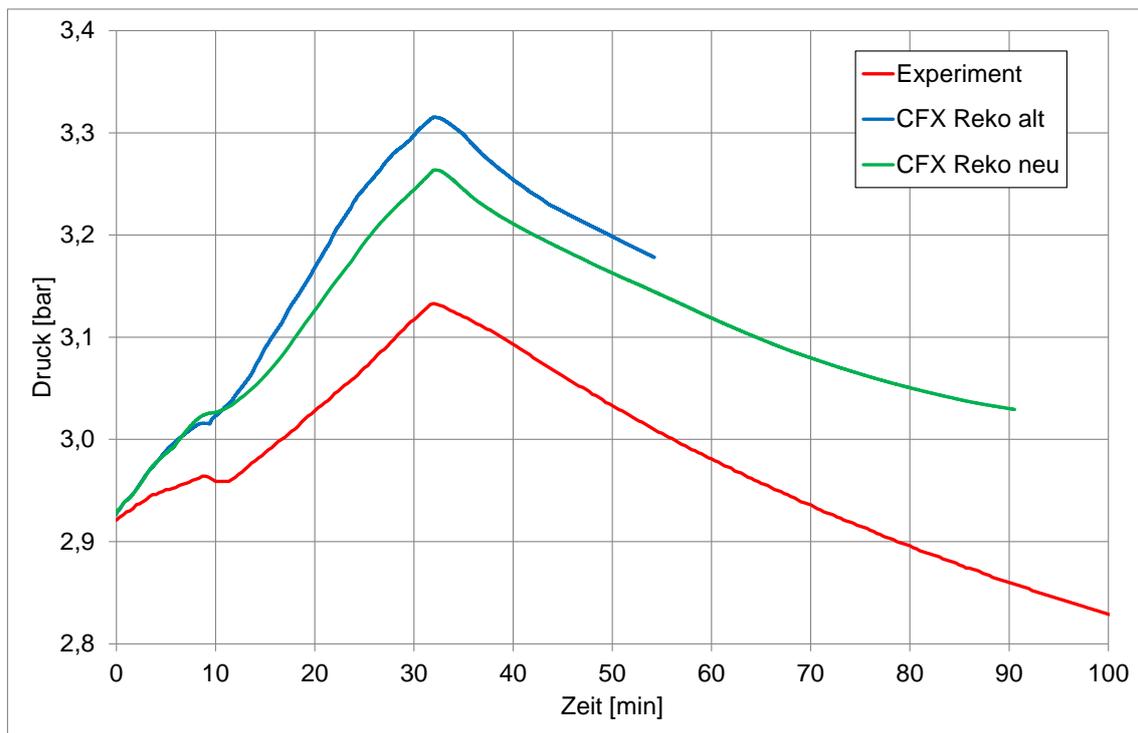


Abb. 5.9-16 Druck im THAI-Behälter

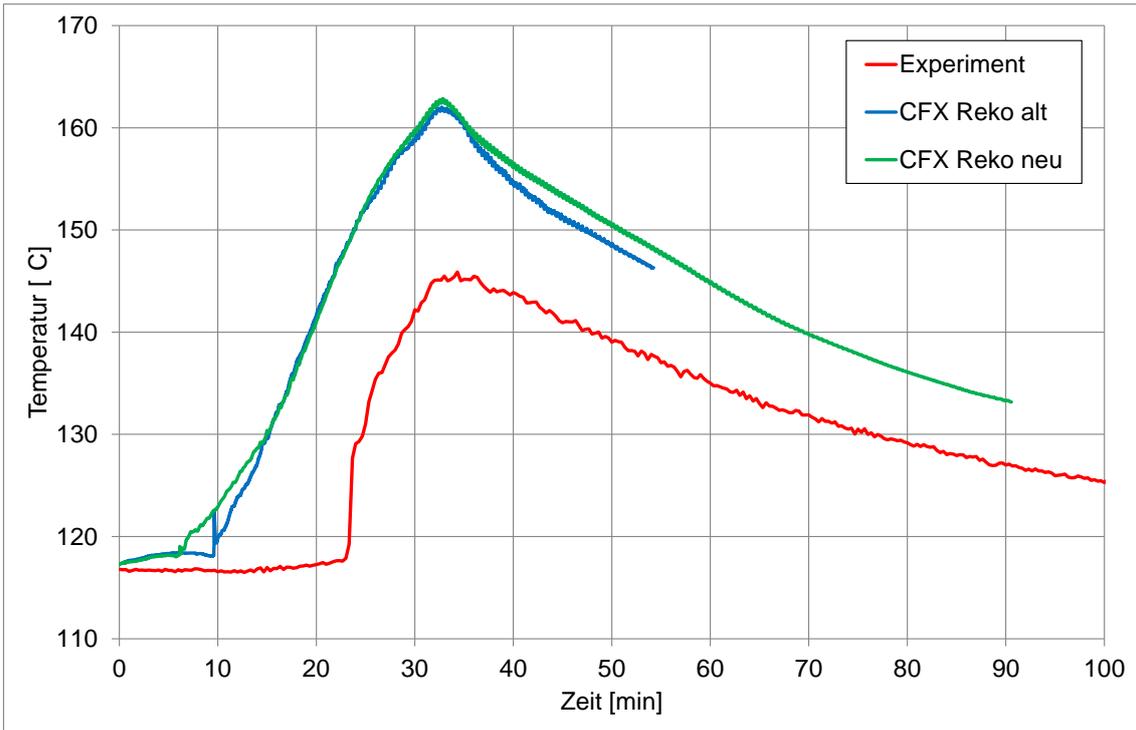


Abb. 5.9-17 Temperatur an der Messstelle DTF84M00 (in 8,4 m Höhe)

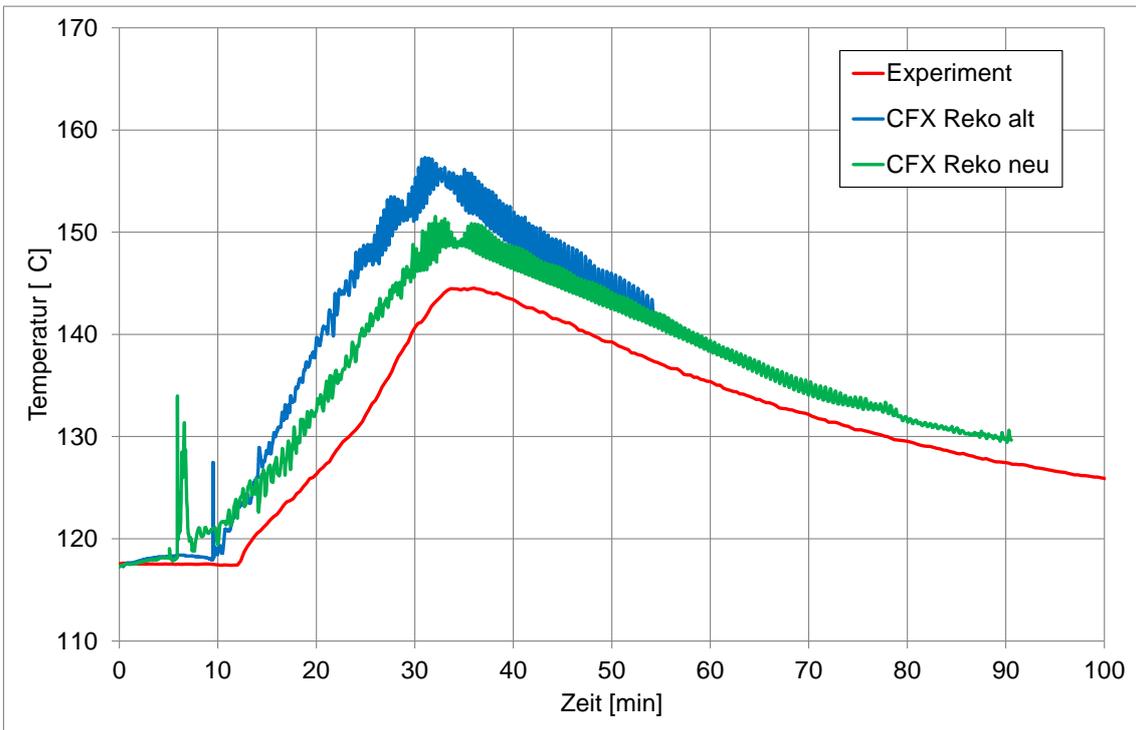


Abb. 5.9-18 Temperatur an der Messstelle DTF53H12 (in 5,3 m Höhe)

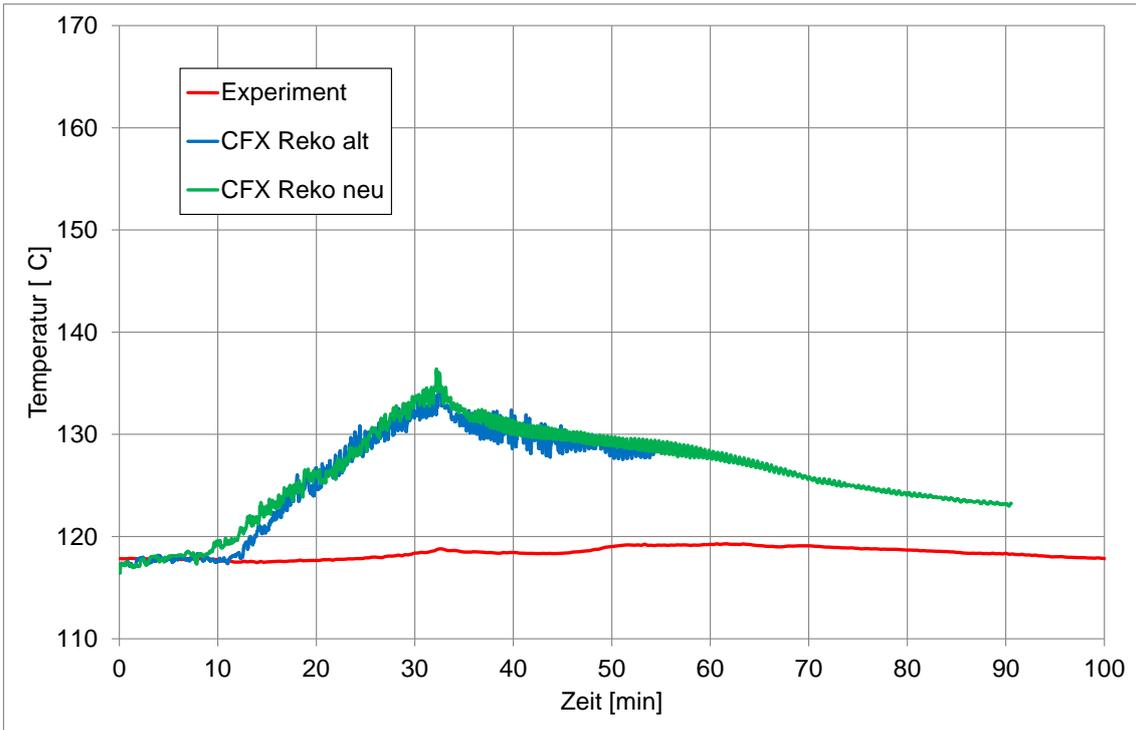


Abb. 5.9-19 Temperatur an der Messstelle BTF17M00 (in 1,7 m Höhe)

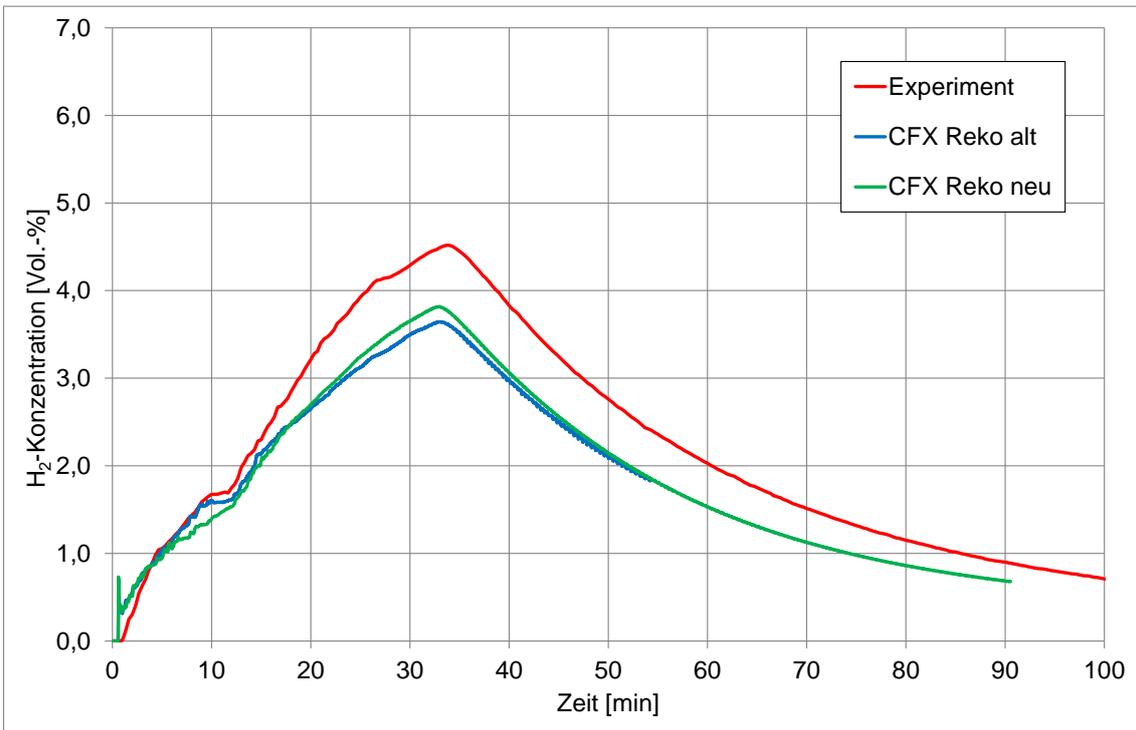


Abb. 5.9-20 H<sub>2</sub>-Konzentration an Messstelle DCH84M00 (in 8,4 m Höhe)

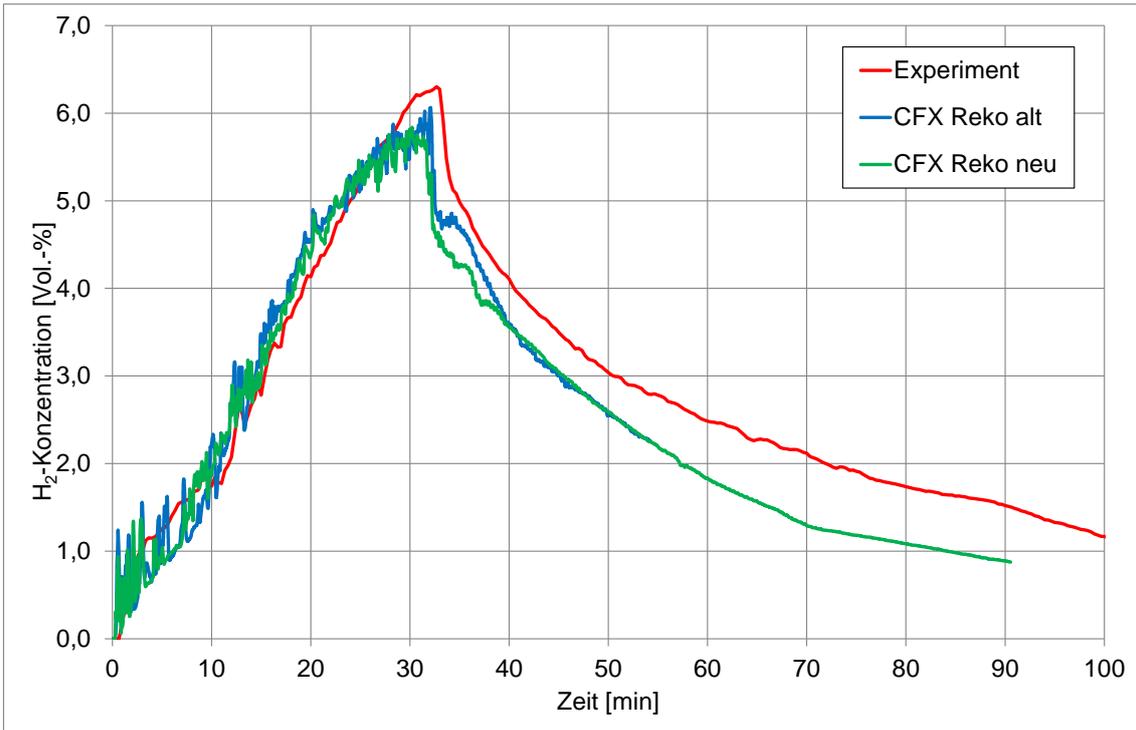


Abb. 5.9-21 H<sub>2</sub>-Konzentration an Messstelle CCH31M00 (in 3,1 m Höhe)

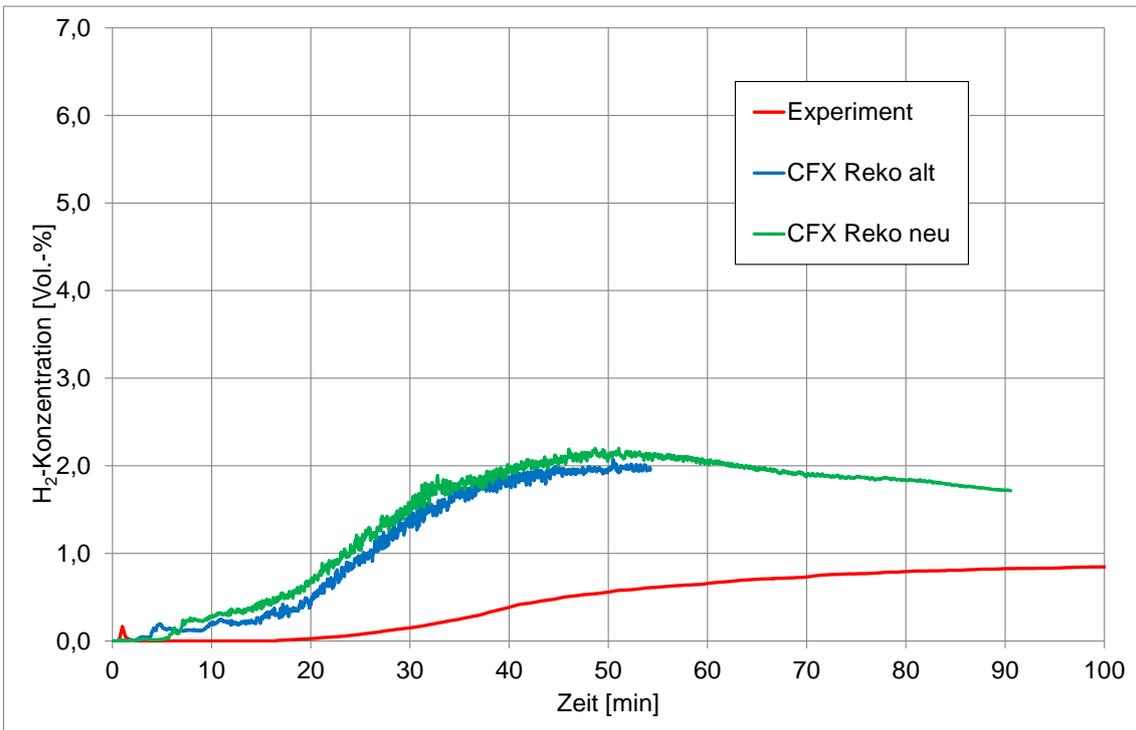


Abb. 5.9-22 H<sub>2</sub>-Konzentration an der Messstelle SCH07M00 (in 0,7 m Höhe)

## 5.10 Zusammenfassung

Die OECD-THAI-Versuche zum Abbauverhalten von autokatalytischen Rekombinatoren wurden ausgewertet. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse wurden genutzt, um die AREVA-Korrelationen für die Abbauleistung zu modifizieren und eine Korrelation für die Effizienz herzuleiten. Diese Korrelationen wurden anhand einer „Stand-Alone-Version“ eines Rekombinatormodells mit den OECD-THAI HR-Experimenten verglichen und es konnte eine deutliche Verbesserung gegenüber den ursprünglichen AREVA-Korrelationen festgestellt werden. Mit Hilfe von User-FORTRAN-Routinen wurde dieses einfache Rekombinatormodell an CFX gekoppelt. Zur Validierung des Rekombinatormodells wurde der Versuch HR-2 nachgerechnet. Die verbesserten Korrelationen (Abbauraten, Effizienz) führen zu einer deutlichen Verbesserung beim HR-2 Versuch gegenüber den Simulationen mit der originalen AREVA-Korrelation /SCH10/. Ein Vergleich mit experimentellen Daten zeigt, dass das Abbauverhalten richtig simuliert werden konnte. Auch die durch den Rekombinator induzierte H<sub>2</sub>-Schichtung konnte in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Die Temperaturschichtung konnte ebenfalls qualitativ richtig berechnet werden. Allerdings sind die Gastemperaturen noch teilweise um bis zu 10 K zu hoch.

Insbesondere bei den Temperaturen zeigt sich eine starke Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Strahlungsmodellierung. Da ein Standard-Strahlungsmodell verwendet wurde, welches unter Umständen noch für Containmentanwendungen angepasst werden muss, ist davon auszugehen, dass eine weitere Verbesserung bei der Strahlungsmodellierung auch zu einer weiteren Verbesserung der bereits sehr guten Ergebnisse bei der Simulation des HR-2 Experiments führen wird, insbesondere hinsichtlich der Temperaturverteilung.

Das HR-12 Experiment konnte mit dem Rekombinatormodell ebenfalls erfolgreich nachgerechnet werden. Auch bei diesem Experiment konnte eine geringfügige Verbesserung gegenüber Simulationen aus dem Vorlaufvorhaben RS1181 erzielt werden /SCH10/. Vermutlich könnte eine weitere Verbesserung der Ergebnisse erzielt werden, wenn eine erneute Nachrechnung von HR-12 mit den diesem Projekt erzielten Erkenntnissen / Modellverbesserungen erfolgt (z. B. Berücksichtigung Wärmestrahlung, neues Kondensationsmodell etc.).

## **6 Simulation der turbulent-beschleunigten Wasserstoffverbrennung mit CFX für Wasserstoff / Dampf / Luftgemischen (AP 1.5)**

### **6.1 Nachrechnung des THAI HD-22 Experiments**

#### **6.1.1 Einleitung**

Bei den bisherigen Validierungsrechnungen von  $H_2$ -Verbrennungsexperimenten mit CFX hat sich gezeigt, dass das Burning-Velocity Modell besser als das Eddy-Dissipation Modell zur Simulation der turbulent-beschleunigten Wasserstoffverbrennung geeignet ist. Allerdings war das Burning-Velocity Modell in CFX aufgrund der Beschränkung auf einen Mischungsbruch noch nicht in der Lage, die Verbrennung von Wasserstoff/Dampf/Luftgemischen zu simulieren, da bei diesen Gemischen zwei unabhängige Variablen zur Beschreibung der Zusammensetzung notwendig ist. Deshalb hat ANSYS in CFX-14 ein neues Ballaststoffmodell implementiert. Bei diesem Modell wird die Zusammensetzung des unverbrannten Gases durch einen Mischungsbruch und ein vom Nutzer zu definierendes Inertgas (z. B. Wasserdampf) beschrieben. Die Zusammensetzung des verbrannten Gases wird aus einer Flamelet-Tabelle eingelesen und um das Inertgas ergänzt, von dem ausgegangen wird, dass es nicht an der chemischen Reaktion teilnimmt. Dieses erweiterte Burning-Velocity Modell soll durch Nachrechnung des THAI-Versuchs HD-22 einer ersten Validierung unterzogen werden.

#### **6.1.2 Kurze Versuchsbeschreibung**

Beim HD-22 Experiment wurde der THAI-Behälter auf 92 °C aufgeheizt (Abb. 6.1-1, /KOT11/). Im THAI-Behälter befindet sich ein homogenes Gasgemisch, das aus 25,3 vol.% Wasserdampf und 9,9 vol.% Wasserstoff besteht. Der Anfangsdruck beträgt 1,49 bar. Die Zündung erfolgt bei diesem Versuch im unteren Bereich des Behälters. Alle Einbauten (Kondensatplatten, Innenzylinder etc.) wurden aus dem THAI-Behälter entfernt. Der Druck und die Temperaturen wurden an verschiedenen Messstellen gemessen. Im Folgenden wird die Geschwindigkeit der Flamme entlang der Behälterachse verglichen. Die experimentellen Werte werden aus den Flammenankunftszeiten berechnet. Zum einen wurde dabei auf die Werte aus dem Abschlussbericht des ISP-49 zurückgegriffen (braune Linie) und es wurde eine Auswertung im Rahmen dieses Pro-

jekts durchgeführt (schwarze Linie). Bei dieser Auswertung wurde der Beginn des schnellen Temperaturanstiegs an den Messstellen entlang der Mittelachse als Flammenankunftszeit angenommen. Insbesondere bei 8 m - 9 m Höhe ergeben sich deutliche Unterschiede bei den berechneten Geschwindigkeiten. Bei der Auswertung mittels Temperaturanstieg wird ein starker Geschwindigkeitsanstieg auf 5,5 m/s berechnet, während beim ISP-49 nur von einer Ausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 4 m/s im Experiment ausgegangen wird. Da der exakte Auswertungsalgorithmus für die Werte beim ISP-49 nicht bekannt ist, konnten die Unterschiede nicht abschließend geklärt werden.

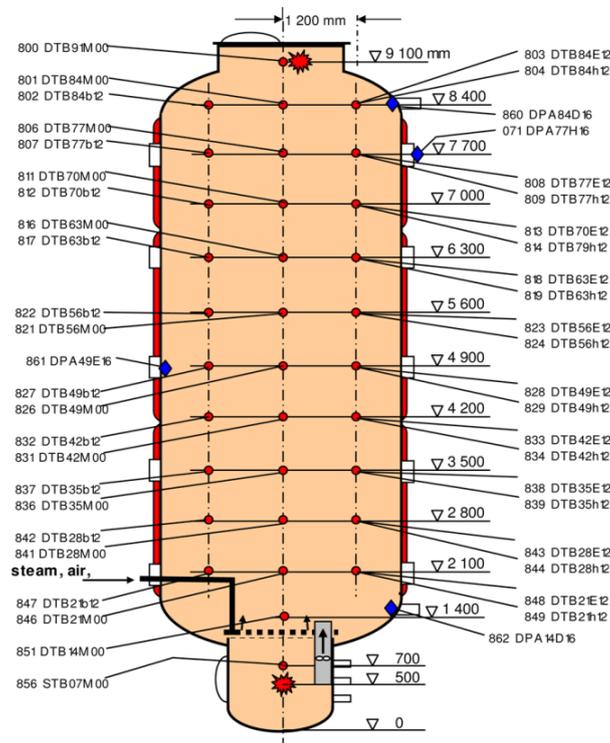


Abb. 6.1-1 Schematische Darstellung des HD-22 Experiments

### 6.1.3 Verwendete physikalische Modelle

Die Wasserstoffverbrennung wurde mit dem Burning-Velocity Modell und dem in CFX-14 neu implementierten Ballaststoffmodell simuliert. Darüber hinaus wurde auch das ECFM Verbrennungsmodell (siehe Abschnitt 6.1.7) getestet. Sofern nichts anderes angegeben wird, wurde wie schon im Vorläufervorhaben RS1181 die turbulente Brenngeschwindigkeit mit dem Zimont-Modell simuliert, wobei die Modellkonstante  $A = 0,6$  gesetzt wurde. (Standardwert für Wasserstoff-Luft-Verbrennungen). In Abschnitt 6.1.6 wurde untersucht welchen Einfluss die Wahl der Korrelation für die turbulente Brenn-

geschwindigkeit hat. Mit CEL-Funktionen wurde die laminare Brenngeschwindigkeit gemäß der Korrelation von Liu-Mac-Farlane in CFX implementiert /LIU83/:

$$v_{lam} = B \cdot T^C \cdot \exp(D \cdot x_{H_2O}) \cdot \left( \frac{P}{P_{ref}} \right)^{0.2}$$

$$B = A_1 + A_2 \cdot (0.42 - x_{H_2}) + A_3 \cdot (0.42 - x_{H_2})^2$$

$$C = A_4 + A_5 \cdot (0.42 - x_{H_2})$$

$$D = A_6$$

Konstanten	$x_{H_2} < 0.42$	$x_{H_2} > 0.42$
A <sub>1</sub>	4.644 x 10 <sup>-4</sup>	4.644 x 10 <sup>-4</sup>
A <sub>2</sub>	-2.119 x 10 <sup>-3</sup>	9.898 x 10 <sup>-4</sup>
A <sub>3</sub>	2.344 x 10 <sup>-3</sup>	-1.264 x 10 <sup>-3</sup>
A <sub>4</sub>	1.571	1.571
A <sub>5</sub>	3.839 x 10 <sup>-1</sup>	-2.476 x 10 <sup>-1</sup>
A <sub>6</sub>	-2.21	-2.24

Dabei sind  $x_{H_2}$  und  $x_{H_2O}$  die Wasserstoff- und Dampfkonzentration im unverbrannten Gemisch und T die Temperatur des unverbrannten Gases. P ist der Druck und  $P_{ref} = 1$  bar. Die Turbulenz wurde bei allen Simulationen mit dem SST Modell berechnet. Bei den Simulationen wurde vereinfachend davon ausgegangen, dass sich während der kurzen Simulationszeit die Temperatur der Behälterwände nur unwesentlich ändert, deshalb wurde eine konstante Wandtemperatur von 90 °C angenommen. Wärmestrahlung wurde mit dem Discrete Transfer Modell berechnet.

Beim HD-22 Versuch wurde die Turbulenz zu Beginn des Experiments nicht gemessen. Diese turbulente kinetische Energie und die Dissipationsgeschwindigkeit werden aber als Startwerte für die CFX-Simulation benötigt und sie müssen abgeschätzt werden. Sofern nichts anderes angegeben, wurde als Anfangsturbulenz  $k = 1.0e-4$  m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> und ein Eddy-Viscosity-Verhältnis ( $\mu_T/\mu$ ) von 10 angenommen. Da diese Größen auch in das Modell für die turbulente Brenngeschwindigkeit eingehen, sind die gewählten Werte von nicht zu unterschätzender Bedeutung. Deshalb wird in Abschnitt 6.1.8 untersucht, wie sich eine andere Wahl der Anfangsturbulenz auf die Simulationsergebnisse auswirkt.

#### 6.1.4 Vergleich von Experiment und Simulation

Die im Folgenden diskutierten Ergebnisse wurden mit dem feinsten CFD-Gitter (ca. 1,6 Millionen Zellen) erzielt. Da die benötigte Rechenzeit (ca. 2 Wochen auf 8 CPUs) für Parameterstudien zu hoch ist, wurde für diese ein gröberes Gitter verwendet.

Die Zündung erfolgte im Experiment nach 1,6 s, während in der Simulation die Zündung zu Beginn der Simulation ( $t = 0$  s) erfolgt. Die Einzelheiten des Zündvorgangs sind aus dem Experiment nicht bekannt und sie wurden in CFX auch nicht modelliert, da nur ein einfaches Zündmodell verwendet wurde. Es wurde bis zu einer Größe von 5 cm eine kugelförmige Verbrennung angenommen, danach erfolgte ein Umschalten auf das BVM-Verbrennungsmodell. Dieses Spark-Ignition-Zündmodell liefert physikalische Zustände (Temperatur, Druck etc.) zu Beginn der Simulation mit dem BVM-Modell. Allerdings ist es nicht in der Lage, Einzelheiten der Zündung zu simulieren. Dieses vereinfachte Modell zur Simulation der Zündung ist ausreichend, da in der Regel für Containmentanwendungen die exakte Modellierung der Flammenausbreitung in der Zündphase keinen signifikanten Einfluss auf die Flammenbeschleunigung und die Druckspitzen hat.

In einem solchen Fall ist es üblich, beim Vergleich zwischen Experiment und Simulation eine Verschiebung der Zeitachse vorzunehmen, so dass der Zeitpunkt des Beginns der Verbrennung (z. B. beim Erreichen der 1. Messstelle) identisch ist. Dies ermöglicht einen einfacheren Vergleich des Druckverlaufs und der Flammenankunftszeiten und Unterschiede/Übereinstimmungen lassen sich besser detektieren. Im Folgenden wird eine Verschiebung der Zeitachse um 1,6 s vorgenommen. Dass dies gerade exakt dem Timeshift zwischen Zündzeitpunkt im Experiment und in der Simulation entspricht, ist aber bis zu einem gewissen Grad auch Zufall und kein Beweis für eine genaue Simulation der Zündung.

Der HD-22 Versuch war wie auch die anderen Versuche aus dieser Testreihe durch eine relativ langsame Verbrennung gekennzeichnet. Es wurde eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von einigen m/s erreicht. Hauptursache hierfür war, dass im THAI-Behälter keine Turbulenz generierenden Hindernisse vorhanden waren und sich deshalb eine nur schwach turbulente Verbrennung einstellte. Daneben spielte sicherlich aber auch die relativ geringe  $H_2$ -Konzentration von nur 10 vol.% und der inertisierende Dampf (25 vol.%) eine Rolle. Für die Prozesse im THAI-Behälter spielte neben der Ausbreitung der Flamme durch die turbulente Brenngeschwindigkeit der Auftrieb

des heißen verbrannten Gases eine entscheidende Rolle. Es kam zu einer für eine Raleigh-Taylor-Instabilität typischen Form des verbrannten heißen Gases (Abb. 6.1-2, Abb. 6.1-3). Das heiße Gas stieg aufgrund des Auftriebs im THAI-Behälter auf und verdrängte das kalte schwere Gas. Dieses konnte, sofern die Flamme die seitlichen Behälterwände noch nicht erreicht hatte, seitlich von der Flamme nach unten strömen. Dies erklärt, warum bei den unteren Messstellen (0,7 m und 1,4 m Höhe in der Behältermittelpunkt) in der Simulation die Reaktionsfortschrittsvariable (und auch die Temperatur) wieder abfällt nachdem die Flammenfront vorübergezogen ist und dann langsamer wieder ansteigt. Diesem Prozess der auftriebsgetriebenen Strömung war die turbulente Flammenausbreitung überlagert.

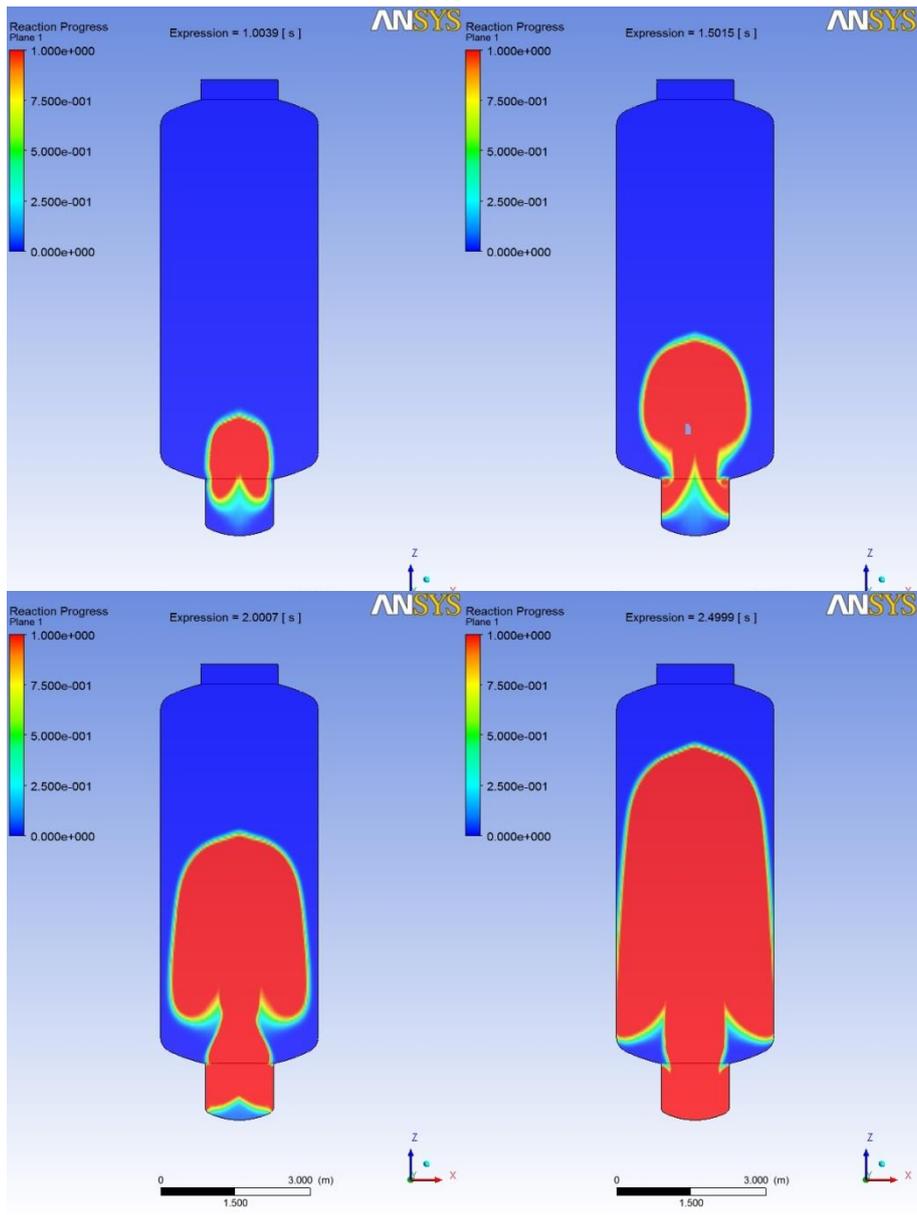
Für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und für die Geschwindigkeit des Druckanstiegs ist das Verhältnis von Flammenausbreitung in vertikale und horizontale wichtig. Eine geringe seitliche Ausbreitung begünstigt eine schnellere vertikale Strömung und führt tendenziell zu einer höheren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittellachse, da das schwerere unverbrannte Gas dann leichter seitlich an dem heißen Gas vorbeiströmen kann.

Der Druckanstieg wird bis zum Erreichen von ca. 2,5 bar in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben (Abb. 6.1-4). Danach erfolgte im Experiment ein schnellerer Druckanstieg als in der Simulation. Bei ca. 3,8 bar – 3,9 bar verlangsamte sich der Druckanstieg im Experiment deutlich. Dieses Verhalten wird von der Simulation nicht beschrieben. Laut /YAN10/ kam es im Experiment zu einer Kopplung der Flammenfront mit akustischen Druckwellen. Eine Kopplung der Flammenfront mit akustischen Wellen wird vom Verbrennungsmodell nicht modelliert, wodurch sind in diesem Fall Abweichung zwischen Experiment und Simulation zu erwarten. Nach Erreichen von 3,9 bar wird der Druckverlauf wieder in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben. Der Maximaldruck wird in der Simulation um etwa 0,1 bar unterschätzt. Wahrscheinliche Ursache sind unterschiedliche Wärmeverluste in Simulation und Experiment, die sich aus einem etwas unterschiedlichen Verlauf der Verbrennung ergeben können. (Der Maximaldruck wird im Experiment etwas schneller erreicht als in der Simulation). Andere mögliche Erklärungen wären z. B. eine geringfügig höhere  $H_2$ -Konzentration im Experiment, oder aber die Stoffwerte in CFX und die Flamelet – Library, die Gaskonzentrationen für eine  $H_2$ -Luft-Verbrennung und nicht  $H_2$ -Dampf-Luft enthält. Da auch die Simulation eine komplette  $H_2$ -Verbrennung simuliert, ist unverbranntes  $H_2$  kein Grund für die Unterschätzung des Maximaldrucks.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittelachse wird berechnet, indem die Flammenankunftszeiten an den Messstellen in der Behältermitte bestimmt werden. Mit dem Abstand der Messstellen wird aus den Ankunftszeiten eine Ausbreitungsgeschwindigkeit berechnet. Die Flammenankunftszeit wird für das Experiment angenommen, wenn der schnelle Temperaturanstieg beginnt. In der Simulation wird die Ankunft der Flammenfront angenommen, wenn die Reaktionsfortschrittsvariable den Wert 0,01 überstiegen hat, was in der Simulation mit dem Beginn des schnellen Temperaturanstiegs korreliert.

Im Experiment erfolgt ein Anstieg der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bis zum Erreichen von ca. 3 m Höhe auf 3 m/s (Abb. 6.1-5). Danach schwankt er im Bereich 2,5 m/s bis 3,5 m/s bis die Flamme 7,7 m Höhe erreicht hat und nimmt dann deutlich auf 5,3 m/s zu (8,4 m Höhe). Danach nimmt die Geschwindigkeit wieder leicht ab. Die von CFX berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeit stimmt bis zu einer Höhe von 7 m gut mit dem Experiment überein. Ab 6 m Höhe setzt in der Simulation eine Verlangsamung der Ausbreitungsgeschwindigkeit ein während im Experiment ein Anstieg ab 7,7 m Höhe erfolgt. Die Abweichungen bei den Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten liegen in dem Zeitbereich in dem auch beim Druckverlauf ein Unterschied (schneller Anstieg danach Abflachen des Druckanstiegs im Experiment) zwischen Simulation und Experiment besteht. Wie schon beim Druckverlauf sind auch bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit eine Kopplung zwischen akustischen Druckwellen und Flammenfront eine mögliche Erklärung für die Abweichungen.

In den ersten Rechnungen wurde eine konstante laminare Flammengeschwindigkeit angenommen, die entsprechend der Gaszusammensetzung, des Drucks und der Temperatur zu Beginn der Simulation gewählt wurde. Es hat sich aber gezeigt, dass durch Änderung des Drucks aber vor allem auch durch Erhöhung der Temperatur des unverbrannten Gases sich die laminare Flammengeschwindigkeit trotz räumlich homogener Gaszusammensetzung deutlich erhöht. Zu Beginn der Simulation liefert die Korrelation von Liu-MacFarlane eine laminare Flammengeschwindigkeit von ca. 0,34 m/s. Nach 3,25 s wird in allen Regionen, in denen unverbranntes Gemisch vorliegt, eine laminare Flammengeschwindigkeit von über 0,6 m/s berechnet (Abb. 6.1-6). Die Annahme einer konstanten laminaren Flammengeschwindigkeit wurde deshalb für die später durchgeführten Simulationen nicht mehr verwendet.



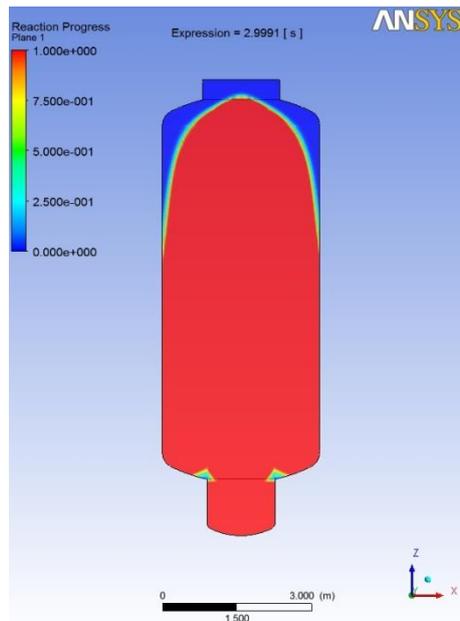


Abb. 6.1-2 Flammenausbreitung zu verschiedenen Zeitpunkten

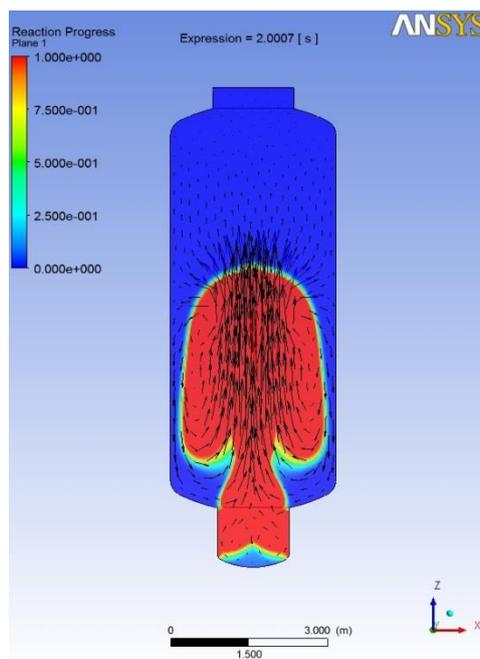


Abb. 6.1-3 Flammenausbreitung nach 2 s. Die Pfeile symbolisieren die Richtung und Stärke der Strömungsgeschwindigkeit.

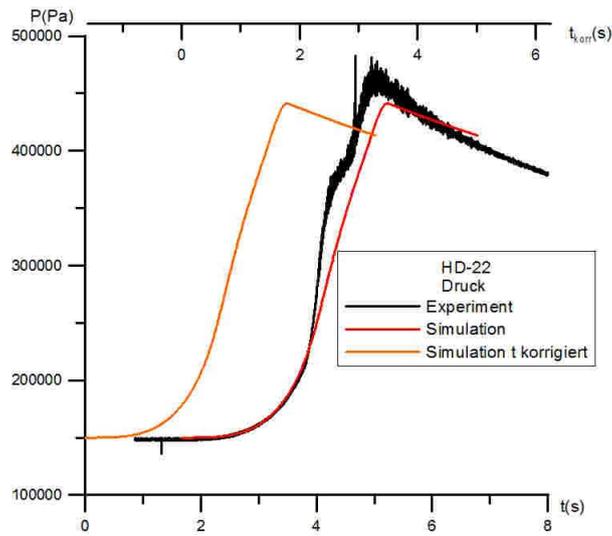


Abb. 6.1-4 Druck in Simulation und Experiment

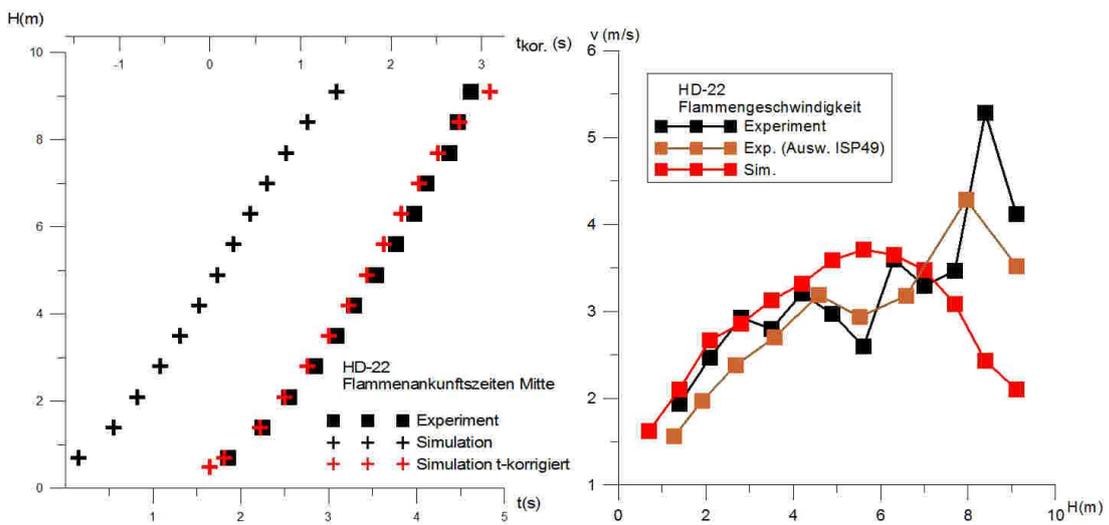


Abb. 6.1-5 Flammenankunftszeiten (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (rechts) entlang der Mittelachse in Simulation und Experiment

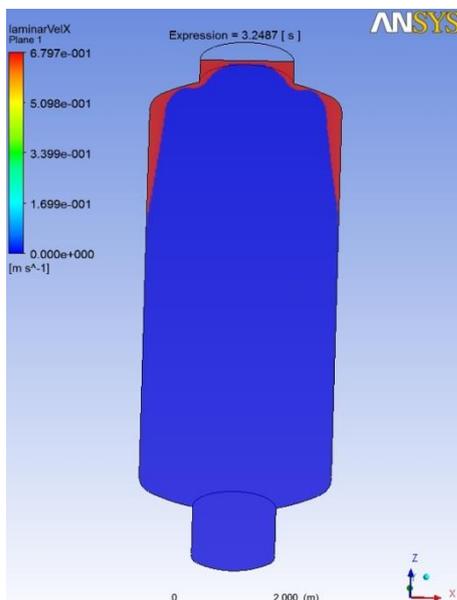
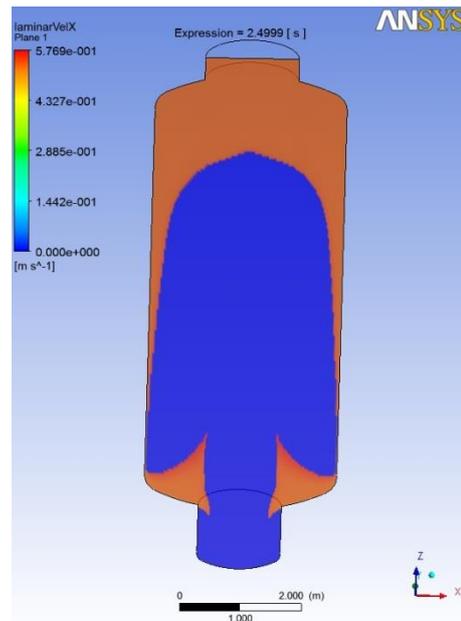
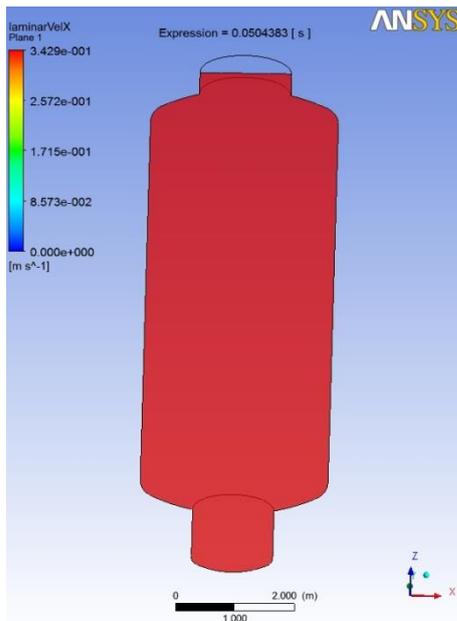


Abb. 6.1-6 Laminare Flammengeschwindigkeit zu verschiedenen Zeiten. In Regionen, in denen kein unverbranntes Gemisch vorliegt (Reaktionsfortschrittsvariable =1), wird zur Verdeutlichung der relevanten Bereiche die laminare Flammengeschwindigkeit mit 0 angezeigt.

### 6.1.5 Untersuchung des Einflusses der räumlichen Diskretisierung

Um zu untersuchen, welchen Einfluss die räumliche Diskretisierung auf das Simulationsergebnis hat, wurde der Versuch mit vier verschiedenen CFD-Gittern berechnet (21 500, 107 000, 499 000 und 1 652 000 Zellen). Bei allen vier Gittern wurden nur

strukturierte Zellen/Netze verwendet. Um Rechenzeit zu sparen, wurde die Symmetrie ausgenutzt und nur der halbe THAI-Behälter simuliert. Die Untersuchungen zur räumlichen Diskretisierung wurden zu Beginn der Arbeiten zum HD-22 Versuch durchgeführt. Deshalb wurde nicht die Liu-MacFarlane-Korrelation für die laminare Flammengeschwindigkeit sondern ein konstanter Wert angenommen (0,38 m/s). Da im Laufe des Versuchs der Druck und die Temperatur des unverbrannten Gases zunehmen (was zu einer höheren laminaren Flammengeschwindigkeit führt), ergeben sich Unterschiede hinsichtlich des berechneten Druckverlaufs und der Flammenankunftszeiten. Allerdings sind diese Unterschiede so moderat, dass davon ausgegangen werden kann, dass die Aussagen hinsichtlich der CFD-Diskretisierung weiterhin Gültigkeit besitzen.

Der berechnete Druckverlauf ist bei allen vier CFD-Gittern ähnlich, die Abweichungen beim größten Gitter (21 500 Zellen) sind am größten (Abb. 6.1-7). Zwischen dem mit 499 000 Zellen und 1 652 000 Zellen berechneten Druck sind so gut wie keine Unterschiede mehr zu erkennen. Auch mit 107 000 Zellen sind nur geringe Abweichungen zu erkennen. Bei den Flammenankunftszeiten sind allerdings zwischen allen vier Simulationen noch Unterschiede zu erkennen, erwartungsgemäß sind diese zwischen den beiden feinsten Gittern am geringsten, wobei kann auch hier nicht von einer gitterunabhängigen Lösung gesprochen werden. Ursache hierfür ist sicherlich auch, dass durch die Gradientenbildung schon kleine Abweichungen bei den Flammenankunftszeiten zu stärkeren Unterschieden bei der berechneten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit führen. Es wäre sicherlich interessant zu untersuchen, ob und bei welcher Verfeinerung auch bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit durch weitere Gitterverfeinerung eine gitterunabhängige Lösung gefunden werden kann; dies war aber aufgrund der begrenzten Ressourcen nicht möglich.

Für die Parameterstudien wurde das Gitter von 107 000 Zellen verwendet, da auch mit diesem Gitter eine relativ gute Übereinstimmung gefunden werden konnte und sich hiermit die Rechenzeit in einem vertretbaren Rahmen hält. Für die Simulation in Abschnitt 6.1.4 wurde das feinste Gitter verwendet, um einen möglichst genauen Vergleich (möglichst geringe numerische Fehler) mit dem Experiment durchführen zu können.

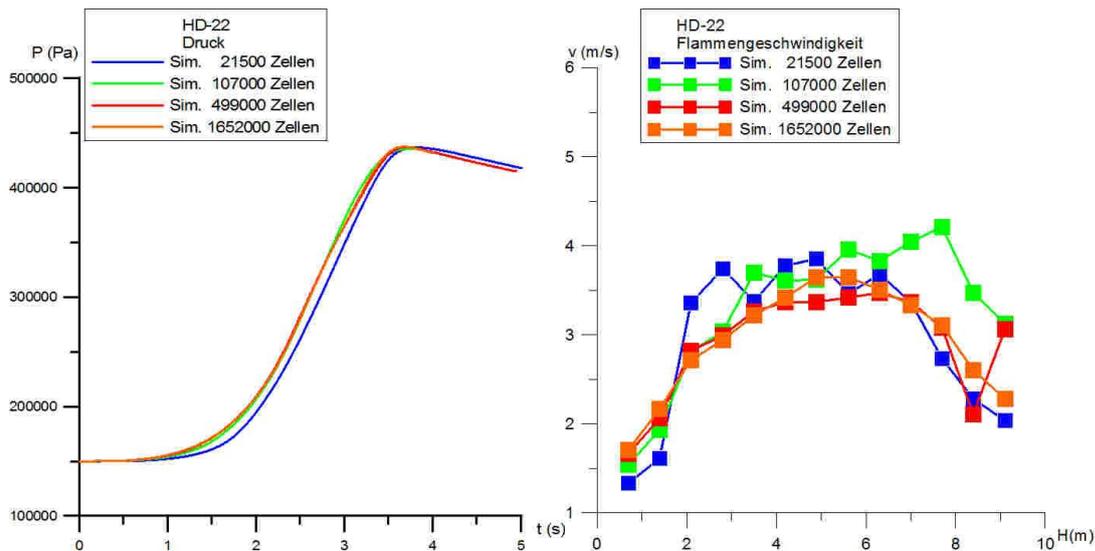


Abb. 6.1-7 Druck (links) und vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittelachse (rechts)

Der Einfluss der Symmetrierandbedingung wurde ebenfalls untersucht. Dazu wurde basierend auf dem Gitter mit 107 000 Zellen ein vollständiges Modell des THAI-Behälters erstellt. Im Gegensatz zur Gitterstudie wurde bei dieser Simulation die laminare Flammengeschwindigkeit mit der Korrelation von Liu-MacFarlane berechnet. Die Simulation mit Ausnutzung der Symmetrieebene liefern fast exakt denselben Druckverlauf wie die Simulation mit dem kompletten 3-dimensionalen THAI-Behälter (Abb. 6.1-8). Auch bei der vertikalen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ergeben sich nur geringe Unterschiede. Bei Ausnutzung der Symmetrieebene werden ab ca. 5 m Höhe etwas geringere Geschwindigkeiten berechnet. Die Abweichung ist bei ca. 7,7 m am größten (0,46 m/s) und nimmt danach wieder ab. Die Studie zeigt, dass die Einführung der Symmetrieebene einen geringen Einfluss auf das Simulationsergebnis hat.

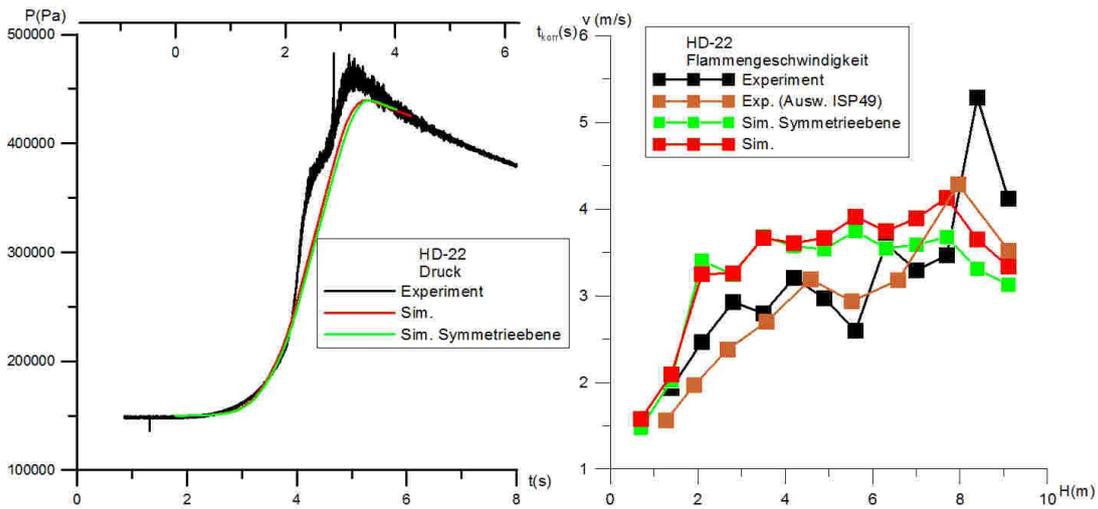


Abb. 6.1-8 Druck (links) und vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behältermittelachse

### 6.1.6 Test verschiedener Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit

In CFX-14 stehen dem Nutzer verschiedene Modelle zur Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit zur Verfügung (Zimont-Modell, Peters-Modell, Müller-Modell). Diese Modelle unterscheiden sich stark hinsichtlich der Abhängigkeit von lokalen physikalischen Größen wie der laminaren Flammengeschwindigkeit, der turbulenten kinetischen Energie, etc. So gilt:

$v_{\text{turb}} \sim v_{\text{lam}}^{0.5}$  bei der Zimont-Korrelation aber

$v_{\text{turb}} \sim v_{\text{lam}}$  bei der Peters und bei der Müller-Korrelation.

Diese Korrelationen wurden ursprünglich für die Verbrennungsmodellierung von Kohlenwasserstoffen wie Methan abgeleitet. Bei der Zimont-Korrelation wurde zur Modelanpassung bei der Berechnung von Wasserstoffverbrennungen der Modellparameter  $A = 0,5$  auf  $A = 0,6$  erhöht. Die anderen Korrelationen (Peters, Müller) wurden unverändert mit den Originalparametern verwendet. Es gibt allerdings deutliche Unterschiede zwischen mageren Methan/Luft-Flammen und mageren  $H_2$ /Luft-Flammen. Experimentelle Untersuchungen /JOR99/ zeigen, dass die laminare Flammenfront von Methan-Flammen glatt ist und eine homogene Struktur zeigt, während die Flammenfront von  $H_2$ /Luft-Flammen stark gewellt ist Abb. 6.1-9. Dieser Unterschied kann dadurch erklärt werden, dass Methan-Flammen mit der Lewis-Zahl  $\sim 1$  viel stabiler gegenüber

kleinen Störungen sind, als Wasserstoffflammen mit  $Le < 1$ . Die Veränderung der lokalen Brenngeschwindigkeit  $s_L$  gegenüber der einer ungestreckten, planaren laminaren Flamme  $s_{L,0}$  wurde von Markstein analytisch untersucht /MAR51/ /MAR64/:

$$s_L - s_{L,0} = -s_{L,0}Lk + L\vec{n}\nabla\vec{n}$$

Wobei  $k$  der Krümmungsradius ist,  $\vec{n}$  der Normalenvektor der Flammenfront ist und  $L$  die Marksteinlänge ist. Nach Clavin und Williams /CLA82/ kann die Marksteinlänge aus den Eigenschaften der brennbaren Gemische (Temperatur des verbrannten und des unverbrannten Gases, der Zeldovich-Zahl und der Lewis-Zahl) berechnet werden.

In /KOR93/ wurde eine Korrelation für die turbulente Flammgeschwindigkeit speziell für  $H_2$ -Luftgemische aus Experimenten hergeleitet. Diese Korrelation wurde über CEL Expressions in CFX implementiert.

$$v_{turb} = v_{lam} \left( [1 + B(u'/v_{lam})^2]^{1/2} + [1 - \exp(-u'/v_{lam})] \left[ \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right] / \sqrt{3} \right)$$

Dabei ist  $u'$  die Turbulenzintensität,  $B = 16$  eine Modellkonstante, und  $\rho_u / \rho_b$  die Dichte des unverbrannten/verbrannten Gases. Der erste Term beschreibt die Zunahme der Flammgeschwindigkeit durch die Turbulenz. Der 2. Term soll eine so genannte flammengenerierte Turbulenz beschreiben. Dieser Term verschwindet bei sehr kleiner Turbulenz  $u'/v_{lam} \ll 1$ . Er ist vom Verhältnis der Dichte des unverbrannten zum verbrannten Gas abhängig. Dies soll den Effekt beschreiben, dass der Einfluss der Turbulenz auf die turbulente Brenngeschwindigkeit für langsam brennende Gemische größer ist als für schnell brennende Gemische. Die Korrelation von Koroll wurde für  $H_2$ -Luftgemische von  $H_2$  12 vol.% bis 60 vol.% experimentell validiert.

Alle 4 Korrelationen für die turbulenten Brenngeschwindigkeiten liefern für den HD-22 Versuch ähnliche Ergebnisse (Abb. 6.1-10). Der relativ langsame Druckanstieg bis zum Erreichen von ca. 2 bar wird von allen in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben. Der schnelle Druckanstieg von 2 bar bis 3,8 bar mit dem starken Abflachen bei 3,8 - 4 bar wird von keiner Simulation beschrieben. Nach /YAN10/ kann dieses Verhalten mit akustischen Flammeninstabilitäten erklärt werden. Da in keinem Verbrennungsmodell eine Kopplung zwischen Flammenfront und akustischen Druckwellen modelliert wird, sind die Abweichungen erklärbar. Nach Erreichen von 4 bar wird der Druckanstieg wieder in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben.

Der Maximaldruck wird von allen Simulationen um ca. 0,1 bar unterschätzt. Eine mögliche Erklärung wären etwas größere integrale Wärmeverluste bis zum Erreichen des Maximaldrucks in der Simulation, z. B. auch wegen einer (etwas) unterschiedlichen Flammenausbreitung in Simulation und Experiment. Andere Erklärungen wären z. B. eine etwas höhere  $H_2$ -Konzentration im Experiment aufgrund von Messungenauigkeiten, oder aber die Stoffwerte und die Flamelet-Library die Gaskonzentrationen für eine  $H_2$ -Luft-Verbrennung und nicht  $H_2$ -Dampf-Luft enthält. Da alle Simulationen eine komplette  $H_2$ -Verbrennung simulieren ist eine zu große Menge unverbrannten  $H_2$  kein Grund für die Unterschätzung des Maximaldrucks in den Simulationen.

Bei einem genaueren Vergleich fällt auf, dass der Druckanstieg beim Müller-Modell am schnellsten erfolgt, der Maximaldruck ist wegen der geringeren integralen Wärmeverluste geringfügig höher. Die Peters und die Koroll-Korrelation berechnen fast den gleichen Druckverlauf. Die Zimont-Korrelation liefert einen noch etwas langsameren Druckanstieg als Peters/Koroll wobei die Unterschiede minimal sind.

Bis zu einer Höhe von ca. 4 m sind die Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten entlang der Mittelachse für alle 4 Korrelationen fast gleich. Sie steigen von  $\sim 1,5$  m/s auf ca. 3,5 m/s bei 2 m Höhe an und bleiben bis ca. 4 m auf diesem Niveau. Sie liegen damit über den experimentellen Werten die nur ca. 3 m/s erreichen. Von 4 m Höhe an unterscheiden sich die Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten für die Korrelationen etwas. Die Müller-Korrelation berechnet einen Anstieg der Geschwindigkeit auf  $\sim 4,5$  m/s, die Korrelationen von Peters und Koroll liefern wie schon beim Druck sehr ähnliche Ergebnisse, bei ihnen erfolgt ein Anstieg auf ca. 4 m/s. Bei der Zimont-Korrelation verharrt die Ausbreitungsgeschwindigkeit bei ca. 3,5 m/s. Damit ist für diese Korrelation die Übereinstimmung mit den experimentellen Werten am größten. Im Experiment schwankt die Ausbreitungsgeschwindigkeit zwischen 2,5 m/s – 3,5 m/s. Ab 8 m Höhe berechnen alle Korrelationen einen Geschwindigkeitsabfall auf ca. 3 m/s. Im Experiment wird - je nach Auswertung - bei 8 m Höhe ein schneller Anstieg der Ausbreitungsgeschwindigkeit auf 4 m/s – 5,5 m/s berechnet, der wieder ein Abfall auf  $\sim 3,5$  m/s bzw. 4 m/s folgt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass alle 4 Korrelationen in der Lage waren, das Experiment zufriedenstellend zu berechnen. Alle Korrelationen berechneten eine langsame Flammenausbreitung im THAI-Behälter von Durchschnittlich 3 – 4 m/s entlang der Mittelachse, die die experimentellen Werte etwas unterschätzt. Die Geschwindigkeit des Druckanstiegs mit der anschließenden Abschwächung wird von 2 –

4 bar von keiner Korrelationen berechnet; der sonstige Verlauf des Druckanstiegs und der Maximaldruck werden von allen Korrelationen zufriedenstellend berechnet.

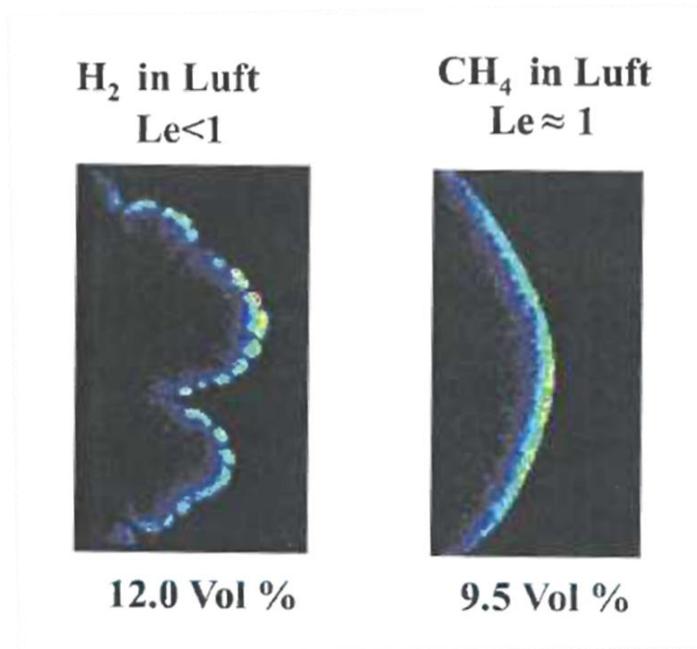


Abb. 6.1-9 Laminare Flammenfronten für H<sub>2</sub>-Luft und CH<sub>4</sub>-Luft Flammen /JOR99/, /POR02/

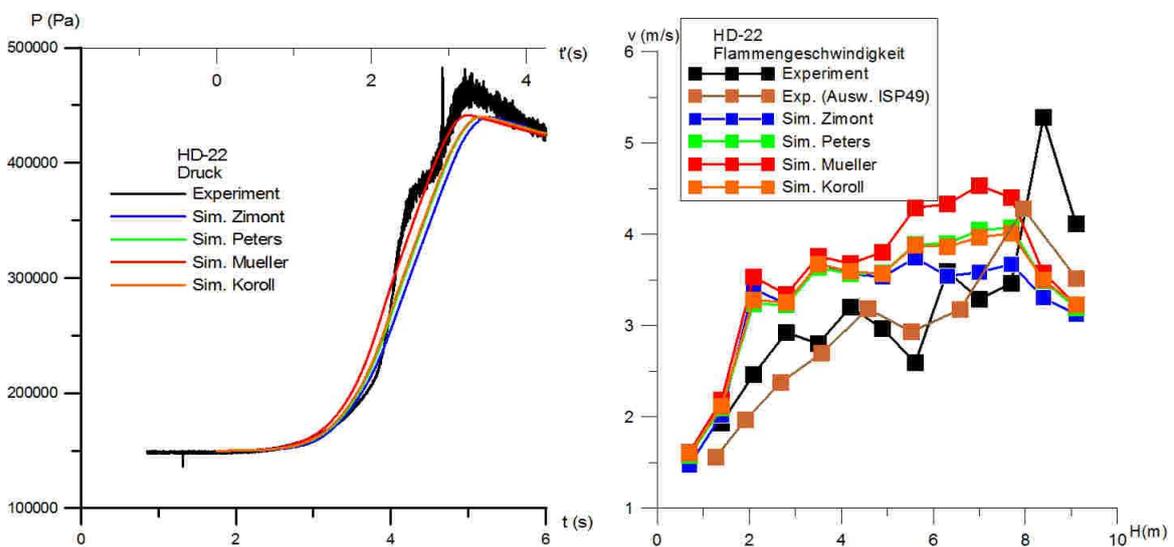


Abb. 6.1-10 Druckverlauf (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) im Experiment und bei Verwendung von unterschiedlichen Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit

### 6.1.7 Simulation mit dem ECFM Verbrennungsmodell

Neben dem Burning-Velocity Model steht ein CFX-14 mit dem Extended Coherent Flame Model (ECFM) ein weiteres fortschrittliches Verbrennungsmodell zur Verfügung. Es besteht aus zwei Teilen. Das Modell zur Beschreibung der Gaszusammensetzung entspricht dem beim BVM Modell. Das unverbrannte Gas wird durch einen Mischungsbruch beschrieben, die Zusammensetzung des verbrannten Gases wird aus einer Flamelet-Bibliothek eingelesen. Da das Teilmodell zur Beschreibung der Gaszusammensetzung dem beim BVM-Modell entspricht, kann auch die Erweiterung zur Beschreibung von H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Gemischen vom ECFM-Modell genutzt werden. Der 2. Teil des ECFM Modells ist das Modell zur Beschreibung der globalen chemischen Reaktion. Es wird wieder eine Transportgleichung für die Reaktions-Fortschrittsvariable gelöst. allerdings wird der Quellterm  $\overline{w_c}$  für die chemische Reaktion in der Gleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable nicht über die turbulente Brenngeschwindigkeit berechnet, für die eine Korrelation (z. B. Zimont Modell) verwendet wird, sondern er wird aus der Flammenoberflächendichte  $\Sigma$  berechnet. (Flammenoberfläche /Volumen)

$$\overline{w_c} = \overline{\rho_u} v_{\text{lam}} \Sigma$$

Für diese wird eine weitere Transportgleichung gelöst. In diese gehen als Quellterme physikalische Prozesse (z. B. Erhöhung der Flammenoberflächendichte durch turbulente Streckung) ein, die zu einer Änderung von  $\Sigma$  führen. Da in diesen Ansatz physikalische Prozesse und keine empirischen Korrelationen eingehen, erscheint die Modellierung von turbulenten Verbrennungsprozessen vielversprechend. Bei einem Teil der Simulationen (gekennzeichnet durch mod.) wird ein modifiziertes ECFM Modell verwendet. In diesem erweiterten Modell wird sichergestellt, dass für schwache Turbulenz die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gegen  $v_{\text{lam}}$  geht.

#### 6.1.7.1 Konvergenzverhalten des ECFM-Verbrennungsmodells

Die Simulationen mit dem ECFM-Modell waren um ein Vielfaches aufwendiger als die Simulationen mit dem BVM Modell. Hauptgrund hierfür ist, dass es bei diesem Modell durch numerische Fehler zu einer Zündung des Gases kommen kann, ohne dass ein Kontakt mit dem heißen (teilweise) verbrannten Gas besteht. Diese numerischen Fehler traten bei der Simulation mit dem unveränderten und auch mit dem modifizierten ECFM Modell auf. Beim unveränderten ECFM-Modell waren das Standard-

Konvergenzkriterium (RMS-Residuum  $< 1.0e-4$ ) erfüllt. Trotzdem kam es zu diesen numerischen Fehlern. Diese unphysikalischen Zündungen konnten nur im Postprocessing erkannt werden, wenn man den zeitlichen Verlauf der Flammenfronten verfolgt (Abb. 6.1-11). Insbesondere bei komplexen Geometrien (z. B. Containment) und bei einer zu geringen Anzahl von Zwischenergebnissen (Festplattenspeicherbedarf) besteht die Gefahr, dass solche numerischen Fehler unentdeckt bleiben, da CFX-14 diese numerischen Fehler nicht erkennt. Beim Auftreten von unphysikalischen Ergebnissen wurde die Rechnung gestoppt und von einem früheren Zeitpunkt (vor Auftreten des Fehlers) neu gestartet. Um das erneute Auftreten des numerischen Fehlers zu verhindern wurde dabei der Zeitschritt verkleinert und/oder das Konvergenzkriterium verschärft. Mit einem Konvergenzkriterium von Max-Residuum  $< 5.0e-4$  konnte beim unmodifizierten ECFM-Modell die Simulation ohne numerische Fehler durchgeführt werden. Um dieses Konvergenzkriterium einzuhalten musste der Zeitschritt stark verkleinert werden (typischerweise  $1,0e-5$  s –  $2,5e-5$  s).

Beim modifizierten ECFM-Modell trat zusätzlich das Problem auf, dass schon die Gleichung für  $\Sigma$  sehr schlecht konvergiert. Um das Standardkonvergenzkriterium von RMS-Residuum  $< 1,0e-4$  zu erfüllen, musste der Zeitschritt kleiner als  $5,0e-6$  s gewählt werden. Selbst mit diesen kleinen Zeitschritten (und dem RMS-Konvergenzkriterium) kam es zu diesen fehlerhaften Zündungen. Aufgrund des sehr hohen Rechenzeitbedarfs konnte keine weitere Verschärfung des Konvergenzkriteriums zusammen mit einer weiteren Verkleinerung des Zeitschritts vorgenommen werden. Diese Simulation wurde nach ca. 2,3 s abgebrochen, weil danach unphysikalische Ergebnisse berechnet werden.

Oft ist eine schlechte Gitterqualität die Ursache für numerische Probleme. In diesem Fall kann dies aber ausgeschlossen werden. Das CFD-Gitter erfüllt die üblichen Anforderungen („Minimum Orth. Angle“ = 57,8; „Maximum Mesh Expansion Ratio“ = 7 und „Maximum Aspect Ratio“ = 6). Für komplexere Geometrien wird es schwierig sein, überall eine ähnlich gute Gitterqualität zu erzielen. Aus diesen Gründen ist das ECFM-Modell gegenwärtig (CFX-14) für Containmentanwendungen wenig geeignet.

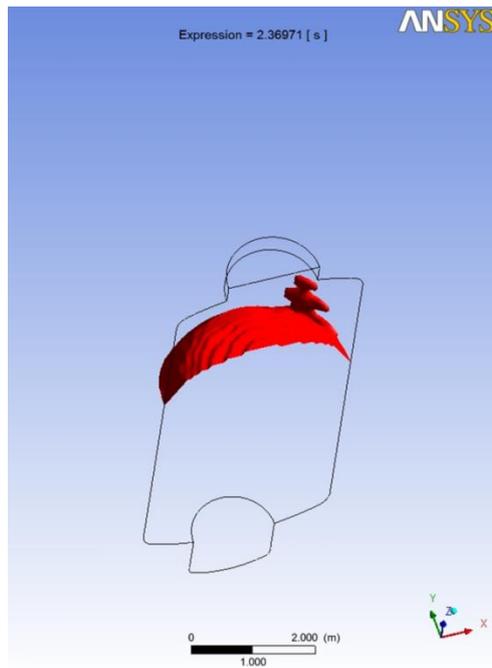


Abb. 6.1-11 Flammenfront (rot) bei einer Simulation mit dem ECFM-Modell, bei der es zur unphysikalischen Zündung oberhalb der Flammenfront kam.

### 6.1.7.2 Simulationsergebnisse

Abb. 6.1-12 zeigt, dass die Modifikation des ECFM-Modells einen deutlichen Einfluss auf die Form der Flammenfront hat. Beim unmodifizierten ECFM-Modell erfolgt eine deutlich schwächere Flammenausbreitung in horizontaler Richtung. Die Modifikation ist aufgrund physikalischer Überlegungen notwendig. Bei geringer Turbulenz muss sich die turbulente Flammengeschwindigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit annähern. In der Anfangsphase des Verbrennungsprozesses wird die turbulente Flammengeschwindigkeit teilweise kleiner als die laminare Brenngeschwindigkeit, was nicht physikalisch ist.

Vergleicht man die Ergebnisse des unmodifizierten ECFM Modells mit dem Experiment, so erhält man für den Druckverlauf eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment (Abb. 6.1-14). Die Abweichungen sind kleiner als für das BVM-Modell mit der Zimont-Korrelation. Auch für die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Behälterachse erhält man eine gute Übereinstimmung. Bis zu einer Höhe von 4 m stimmt die Ausbreitungsgeschwindigkeit sehr gut mit dem Experiment überein, während sie vom BVM-Modell etwas überschätzt wird. Von 4 m - 7 m wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit etwas überschätzt, dabei ist die Abweichung vom Experiment etwas größer als

beim BVM-Modell. Auch beim ECFM-Modell wird der starke Geschwindigkeitsanstieg bei 7,5 m- 8,5 m nicht vorhergesagt. Da auch beim ECFM-Modell keine Kopplung der Flamme mit akustischen Druckwellen modelliert wird, können die Überlegungen zur möglichen Kopplung akustischer Wellen/Flammenfront auch auf das ECFM-Modell übertragen werden(siehe Abschnitt 6.1.4).

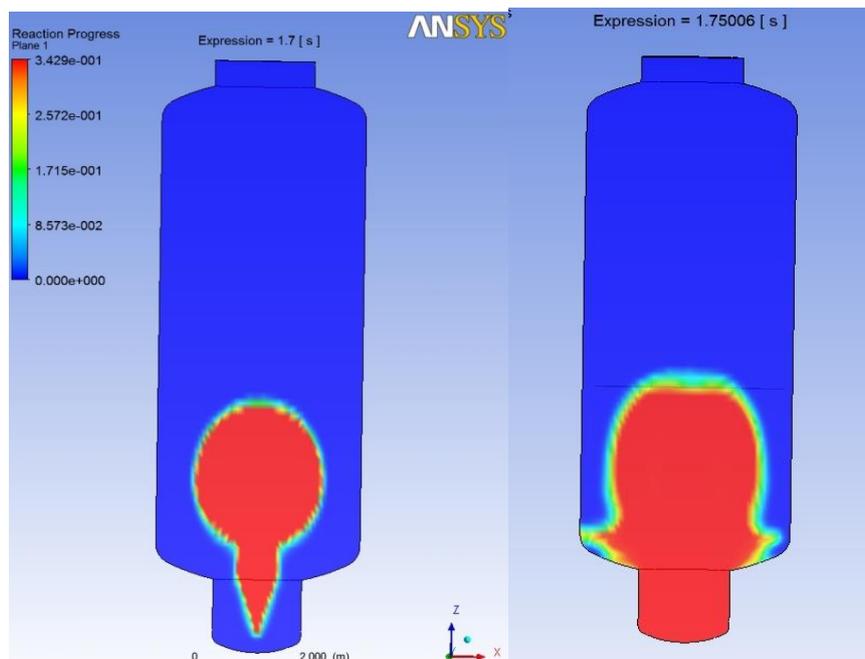


Abb. 6.1-12 Reaktionsfortschrittsvariable zum Zeitpunkt wenn die Flamme die Höhe von ca. 4 m erreicht hat. Links: unverändertes ECFM-Modell, rechts: modifiziertes ECFM-Modell

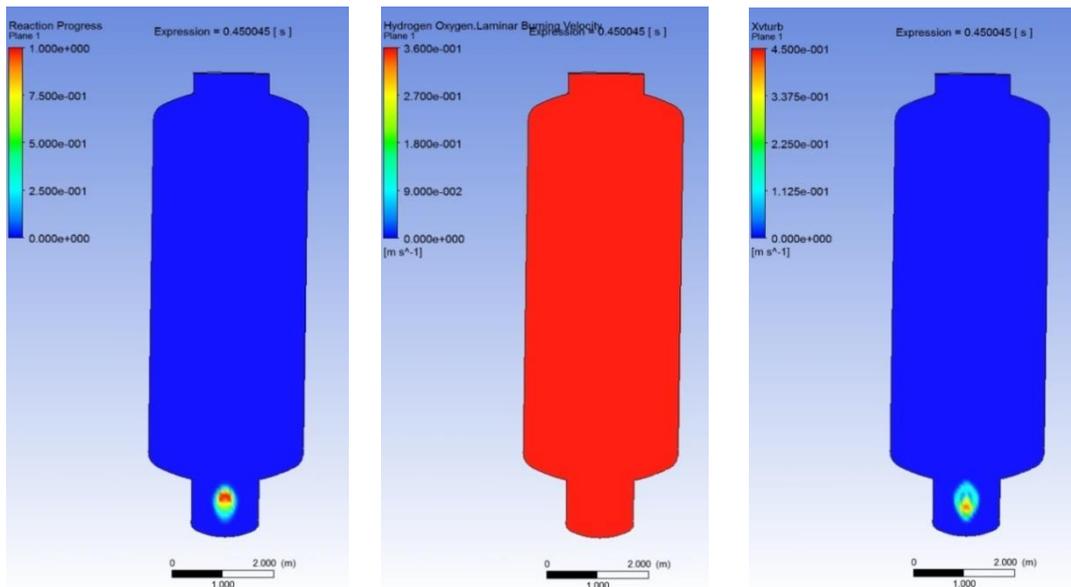


Abb. 6.1-13 Simulation mit dem unmodifizierten ECFM, links: Reaktionsfortschrittsvariable, Mitte: Laminare Flammgeschwindigkeit, rechts: turbulente Flammgeschwindigkeit in Bereichen in denen die Reaktionsfortschrittsvariable  $>0$  ist

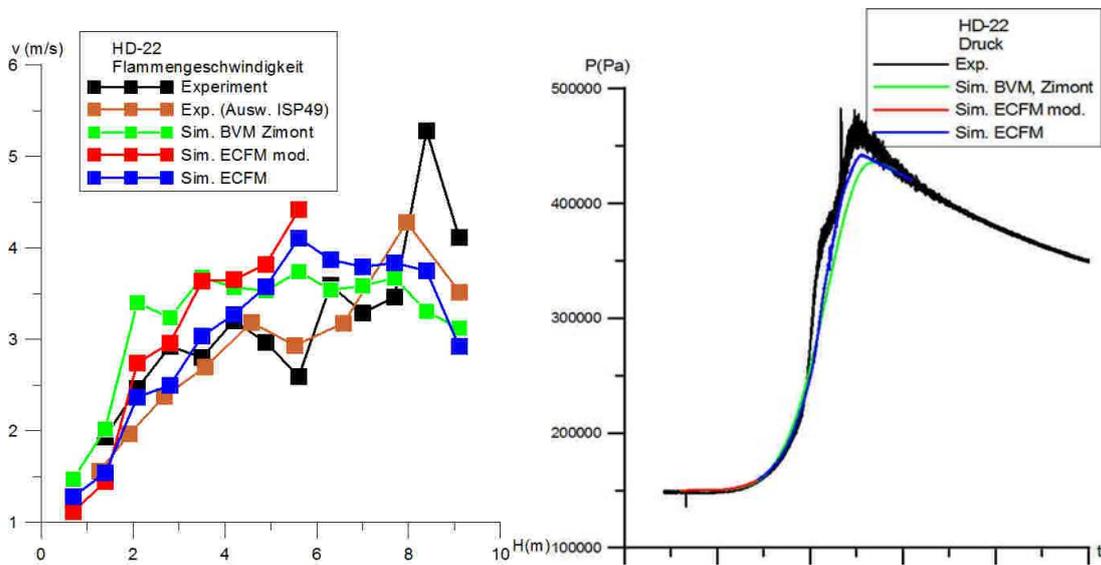


Abb. 6.1-14 Links Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, rechts: Druck über einer modifizierten Zeitachse, bei der die Druckkurven so verschoben wurden, dass der Zeitpunkt des Druckanstiegs gleich ist

### 6.1.8 Untersuchung zum Einfluss der Anfangsturbulenz

Bei den THAI Experimenten zur Wasserstoffverbrennung wurde die Anfangsturbulenz nicht gemessen. Es ist lediglich bekannt, dass vor Zündung ein Ventilator zur Homogenisierung des Gemischs verwendet wird, der mehrere Minuten vor Beginn der Verbrennung ausgeschaltet wird, so dass die Strömung und Turbulenz im THAI-Behälter abklingt. Es ist davon auszugehen, dass bei Zündung keine hohe Turbulenz mehr im THAI-Behälter vorherrscht, wie klein die Turbulenz aber ist kann nur abgeschätzt werden. In die Berechnung der turbulenten Brenngeschwindigkeit gehen üblicherweise Turbulenzgrößen wie die turbulente kinetische Energie  $k$  und teilweise (z. B. beim Zimont-Modell) auch die turbulente Dissipationsgeschwindigkeit  $\varepsilon$  ein. Im Folgenden wird untersucht, wie sich die Wahl der unbekanntenen Anfangsgrößen  $k$  und  $\varepsilon$  auf die Simulationsergebnisse auswirkt. Für die turbulente kinetische Energie wurden drei Werte ( $k = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}^2$ ,  $1,0\text{e-}4 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $1,0\text{e-}8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ ) getestet. Dabei wurde das Eddy-Viscosity-Verhältnis  $\nu = (\mu_T/\mu)$  von 10 angenommen. Zusätzlich wurden Rechnungen mit  $k = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $\nu = 100$  und  $k = 1,0\text{e-}8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $\nu = 1$  durchgeführt.

Die Simulationen zeigen, dass die Wahl der Anfangsturbulenz einen signifikanten Einfluss auf die berechnete Verbrennung hat. Die beiden Simulationen mit der geringsten Anfangsturbulenz ( $k = 1,0\text{e-}8 \text{ m}^2/\text{s}^2$ ) liefern fast identische Ergebnisse, weshalb sie nicht getrennt diskutiert werden (Abb. 6.1-15). Vergleicht man die Flammenfronten (Abb. 6.1-16, Abb. 6.1-17), so fällt auf, dass mit zunehmender Anfangsturbulenz die Flamme breiter ist und die Menge des verbrannten Gases höher ist. Der Zeitpunkt an dem die Flamme die Höhe 4 m erreicht, ist bei höherer Turbulenz höher. Dies lässt sich dadurch erklären, dass mit zunehmender Turbulenz die Brenngeschwindigkeit höher ist. Bei Ausbreiten der Flamme nach oben spielt der Auftrieb des heißen, verbrannten Gases eine entscheidende Rolle. Er führt dazu, dass auch bei sehr geringer Turbulenz eine relativ schnelle Ausbreitung nach oben stattfindet, während in diesem Fall die Ausbreitung in horizontaler Richtung geringer ist. Die Form der Flamme spielt eine große Rolle u. a. auch bei der Flammenausbreitung entlang der Mittelachse. Da der THAI-Behälter oben geschlossen ist, wird bei Ausbreitung der Flamme nach oben das kalte Gas vor der Flamme seitlich weggeschoben/komprimiert. Wie stark dies zum Abbremsen des heißen verbrannten Plumes führt hängt von der Form der Flammenfront ab. Wenn die Flamme die Seitenwände noch nicht berührt hat, kann kaltes unverbranntes Gas seitlich an der Flamme vorbeigeschoben werden. Dieser Effekt führt dazu, dass die Temperatur (in den Simulationen) an den untersten Messstellen wieder abfällt nachdem die Flammenfront dort vorbeigezogen ist.

Die Aufstiegs­geschwindigkeit wird ebenfalls beeinflusst. Wenn die Flamme noch weit von den Behälterwänden entfernt ist, steigt der Plume in der Mitte schneller auf, als wenn das kalte Gas vor der Flamme komprimiert werden muss, wie das der Fall ist wenn die Flamme die Behälterwände berührt hat. Die Überlagerung der verschiedenen Effekte (turbulente Brenngeschwindigkeit / Auftrieb des heißen Gases) führen dazu, dass die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse relativ kompliziert von der Anfangsturbulenz abhängt. Am Anfang ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit noch relativ ähnlich, wobei sie bei 2 m noch mit zunehmender Turbulenz höher ist, während ab einer Höhe von ca. 9 m die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei hoher Anfangsturbulenz am langsamsten ist. Die Simulationen mit  $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und unterschiedlichen Eddy-Viscosity-Verhältnis sind deutlich verschieden. Dies unterstreicht, dass auch der Turbulenzparameter  $\varepsilon$  zu Beginn experimentell bestimmt werden sollte -zumindest wenn eine nennenswerte Anfangsturbulenz gegeben ist.

Vergleicht man die Simulationsergebnisse mit dem Experiment, so stimmen beim Druckaufbau die Rechnungen mit  $k = 1,0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  am besten mit dem Experiment überein (Abb. 6.1-15). Bis auf den Bereich von 2,5 – 4 bar (evtl. in diesem Bereich Wechselwirkung akustische Welle/Flamme) stimmt die Steigung des Druckanstiegs gut überein. Bei dieser niedrigen Anfangsturbulenz wird allerdings die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im Bereich 4 m – 6 m deutlicher überschätzt, als mit der mittleren Anfangsturbulenz von  $k = 1,0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$ . Dass die Ergebnisse für die höchste Anfangsturbulenz die größten Abweichungen zeigen, ist plausibel, da eine Anfangsturbulenz von  $k = 1,0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  relativ hoch erscheint, wenn die Turbulenz fast 10 min Zeit hat nach Betrieb des Ventilators abzuklingen, bevor die Zündung erfolgt.

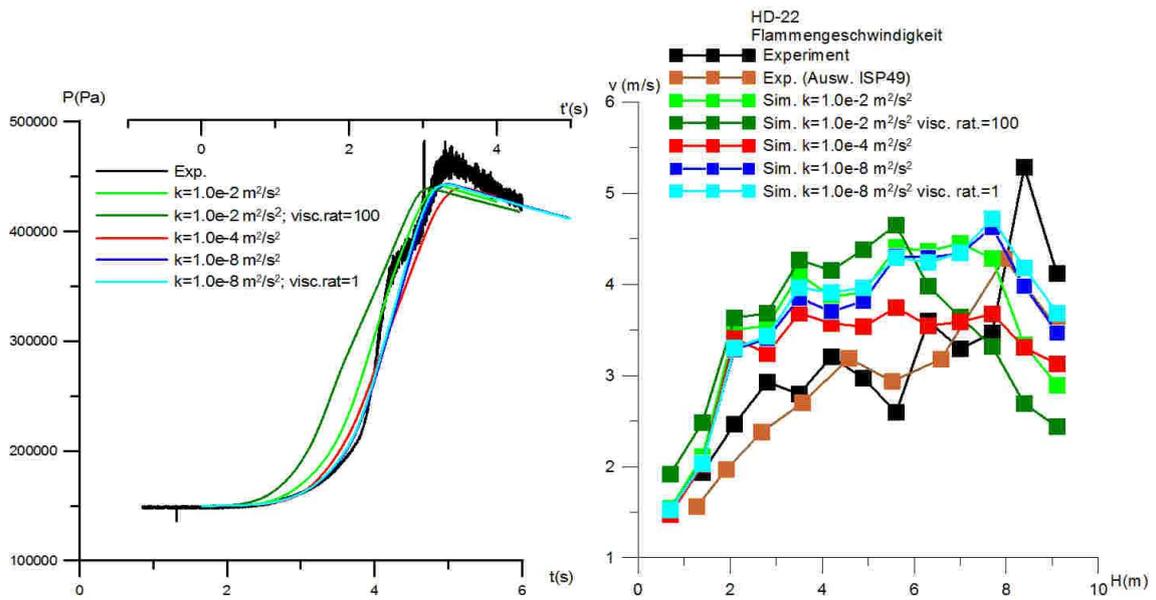
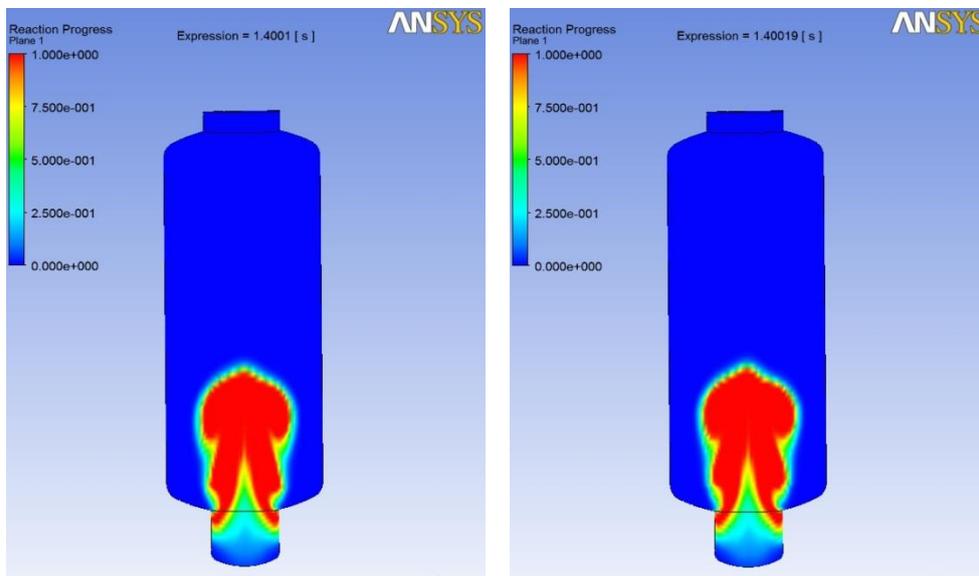


Abb. 6.1-15 Druckverlauf (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) im Experiment und in der Simulation bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz



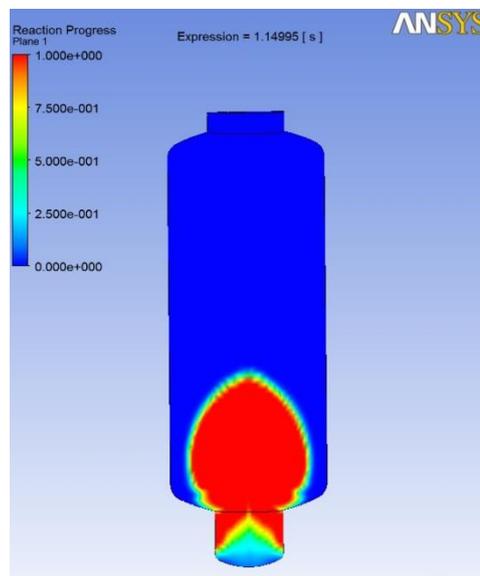
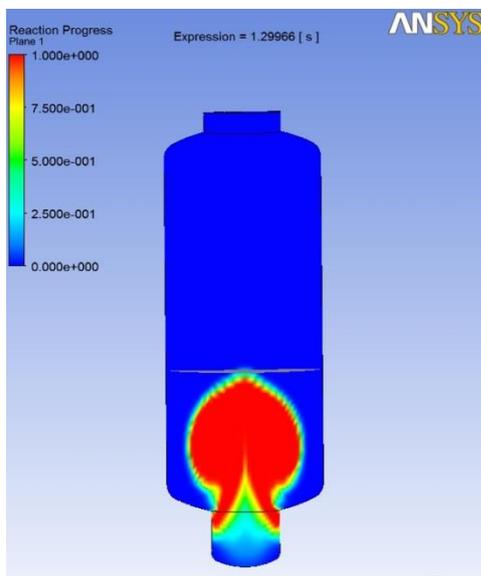
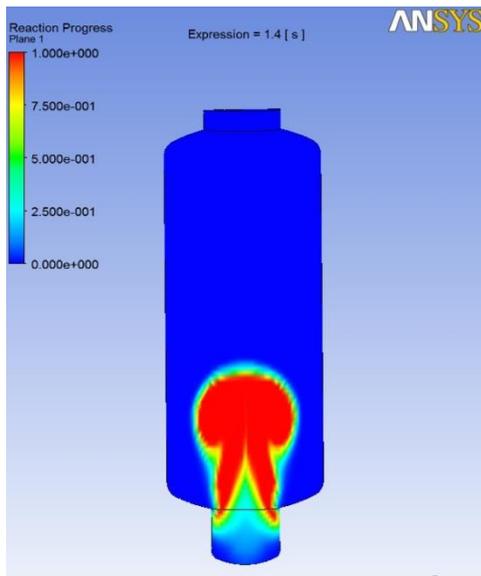


Abb. 6.1-16 Verbrennungsfortschritt bei Erreichen der Höhe 4 m. Bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz in der Reihenfolge  $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 1$ ,  $k = 1.0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 100$ )

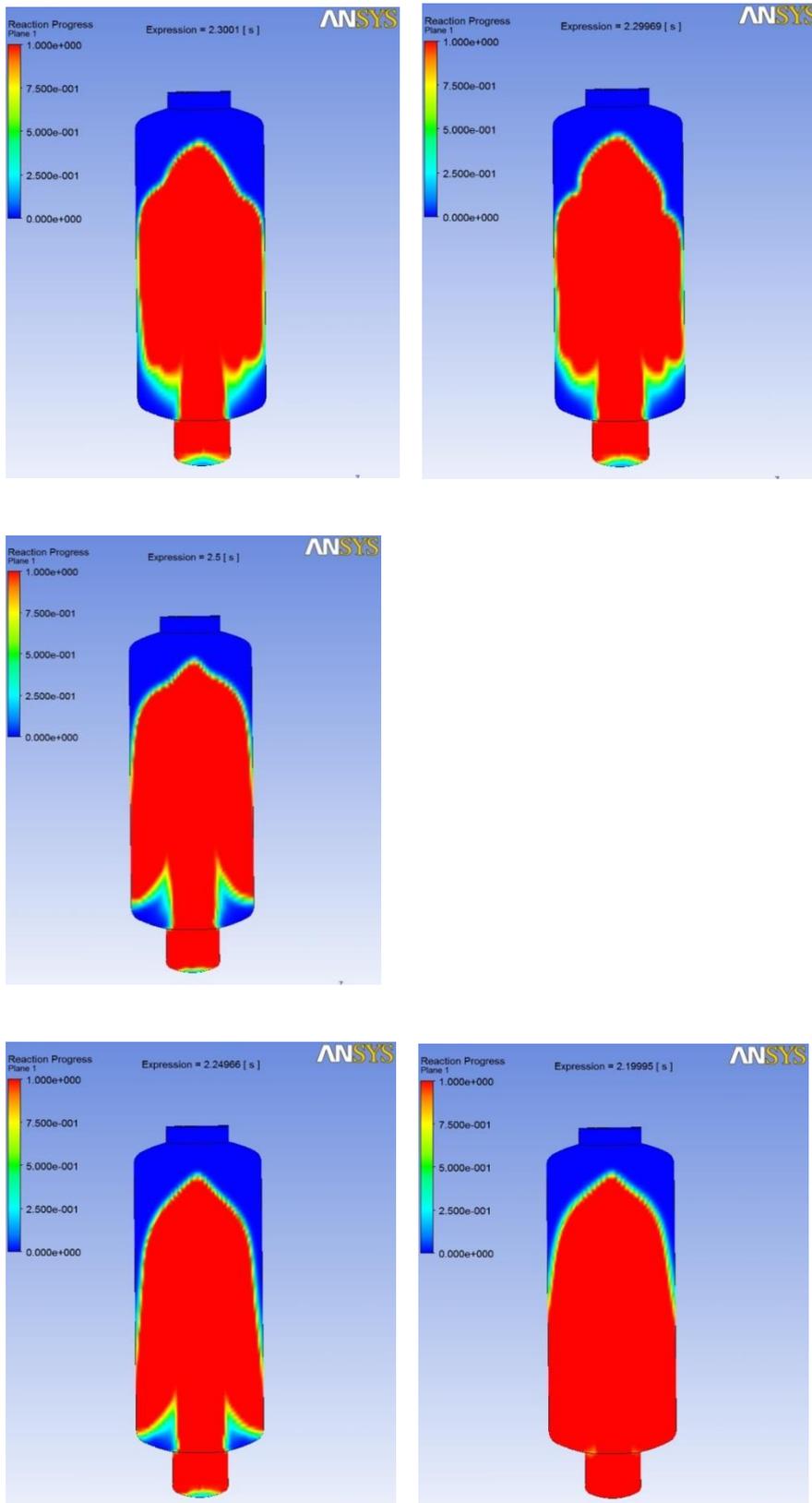


Abb. 6.1-17 Verbrennungsfortschritt bei Erreichen der Höhe 8 m. Bei unterschiedlicher Anfangsturbulenz in der Reihenfolge  $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-8 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 1$ ,  $k = 1.0e-4 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 10$ ,  $k = 1.0e-2 \text{ m}^2/\text{s}^2$  und  $v = 100$ )

### 6.1.9 Einfluss des Strahlungsmodells

Die Modellierung der Wärmestrahlung und dabei insbesondere die der Absorption durch Wasserdampf ist ein Punkt der noch weiterer Untersuchungen bedarf. Dazu wurden in diesem Forschungsprojekt schon verschiedene Untersuchungen durchgeführt, z. B. im Rahmen der Nachrechnung von SETH2 ST1.4. Es wird im Folgenden untersucht, welchen Einfluss die Modellierung der Absorption durch Wasserdampf auf die Simulationsergebnisse bei der Verbrennung hat. Es wurden verschiedene Simulationen durchgeführt: eine mit einem konstanten Absorptionskoeffizienten  $k_{\text{H}_2\text{O}} = 1 \text{ m}^{-1}$ , eine mit einer Korrelation für  $k_{\text{H}_2\text{O}}$  abgeleitet aus Korrelationen/Daten des VDI-Wärmeatlasses, und eine mit dem Ansatz „Weighted Sum of Gray Gases“ (WSGG) mit 4 verschiedenen „Gray Gases“ mit unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten, deren genauer Wert vom Druck und der Temperatur abhängt. Die Koeffizienten wurden an Methanverbrennungsversuche angepasst. Eine genauere Beschreibung der Modellierung mit dem Ansatz „Weighted Sum of Gray Gases“ und Einzelheiten der Korrelation nach dem VDI-Wärmeatlas sind im Rahmen der Nachrechnung von SETH2 ST1.4 (Abschnitt 4.2.8.1) zu finden.

Die Simulationsergebnisse bei Modellierung des Absorptionskoeffizienten mit konstantem Wert  $k_{\text{H}_2\text{O}}=1 \text{ m}^{-1}$  und bei Verwendung der Korrelation abgeleitet aus dem VDI-Wärmeatlas sind fast identisch; deshalb werden Sie im Folgenden zusammen diskutiert. Ursache hierfür ist, dass die Korrelation bei den gegebenen Drücken / Temperaturen für den Absorptionskoeffizienten von Dampf Werte im Bereich  $0,85 < k_{\text{H}_2\text{O}} < 1,15$  liefert und damit der konstante Wert  $k_{\text{H}_2\text{O}} = 1 \text{ m}^{-1}$  eine gute Näherung darstellt. Der Druckanstieg ist bei  $k_{\text{H}_2\text{O}} \sim 1 \text{ m}^{-1}$  und bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung sehr ähnlich. Insgesamt wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt allerdings gibt es moderate Abweichungen (Abb. 6.1-18). In der Anfangsphase ( $p < \sim 2 \text{ bar}$ ) wird der Druckanstieg etwas überschätzt. Der folgende schnelle Druckanstieg im Experiment (bis  $p \sim 3,8 \text{ bar}$ ) wird etwas unterschätzt und die plötzliche Abschwächung des Druckanstiegs bei 3,8 bar wird nicht vorhergesagt. Der Maximaldruck wird leicht unterschätzt. ( $\sim 0,2 \text{ bar}$ ). Beim WSGG-Strahlungsmodell erfolgt der Druckanstieg schneller, und der Maximaldruck wird richtig vorhergesagt.

Der Druckabfall nach Ende der Reaktion ist bei Vernachlässigung der Wärmestrahlung deutlich langsamer als im Experiment und bei Berücksichtigung der Strahlung. Bei  $k_{\text{H}_2\text{O}} \sim 1 \text{ m}^{-1}$  ist der Druckabfall etwas schwächer als im Experiment, das WSGG-Modell

liefert trotz der großen Unterschiede während der Verbrennung nur einem minimal schnelleren Druckabfall.

Wie schon beim Druck wird auch bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der vertikalen Behälterachse ohne Wärmestrahlung und bei  $k_{H_2O} = 1 \text{ m}^{-1}$  ein ähnliches Ergebnis erzielt (Abb. 6.1-18). Bis zu einer Höhe von  $\sim 7,5 \text{ m}$  wird der experimentelle Wert etwas überschätzt und der Geschwindigkeitsanstieg bei  $8 \text{ m}$  wird nicht vorhergesagt. Mit dem WSGG Modell wird dagegen die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in Bereich  $2 \text{ m} - 8 \text{ m}$  Höhe deutlich überschätzt  $\sim 6 \text{ m/s}$  statt  $3 \text{ m/s}$ . Nach  $8 \text{ m}$  Höhe erfolgt ein Abfall der Geschwindigkeit unter den experimentellen Wert.

Die starken Unterschiede bei der Simulation mit dem WSGG-Modell lassen sich darauf zurückführen, dass bei dieser Strahlungsmodellierung die Temperatur des verbrannten Gases (Bereiche mit Reaction Progress = 1 in Abb. 6.1-19, Abb. 6.1-20) teilweise deutlich über  $100 \text{ K}$  niedriger ist als ohne Wärmeverluste durch Strahlung. Bei  $k = 1 \text{ m}^{-1}$  erfolgt ein deutlich schwächerer Wärmeverlust von ( $20 \text{ K} - 30 \text{ K}$  bei  $t = 1,45 \text{ s}$ ).

Beim HD-22 Experiment sind Auftriebskräfte von zentraler Bedeutung für die Form und Dynamik der Flammenfronten. Deshalb ist es verständlich, dass deutliche Unterschiede bei der Temperatur des verbrannten Gases zu einer anderen Form der Flammenfront führen (Abb. 6.1-19, Abb. 6.1-20) was in einem unterschiedlichen Druckverlauf und in einer unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit resultiert.

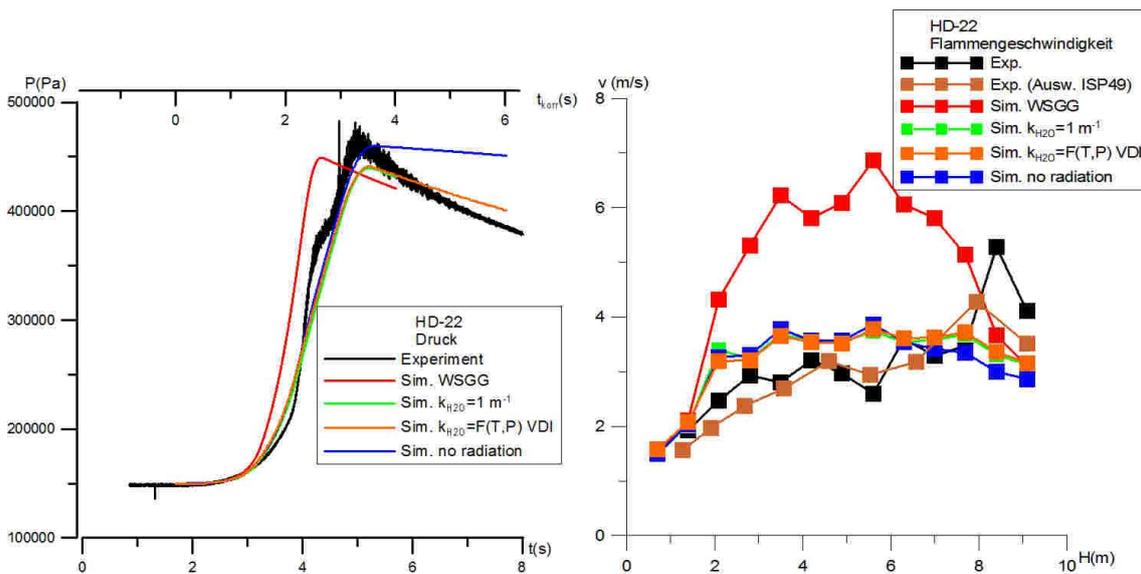


Abb. 6.1-18 Druck (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse (rechts) bei unterschiedlicher Strahlungsmodellierung

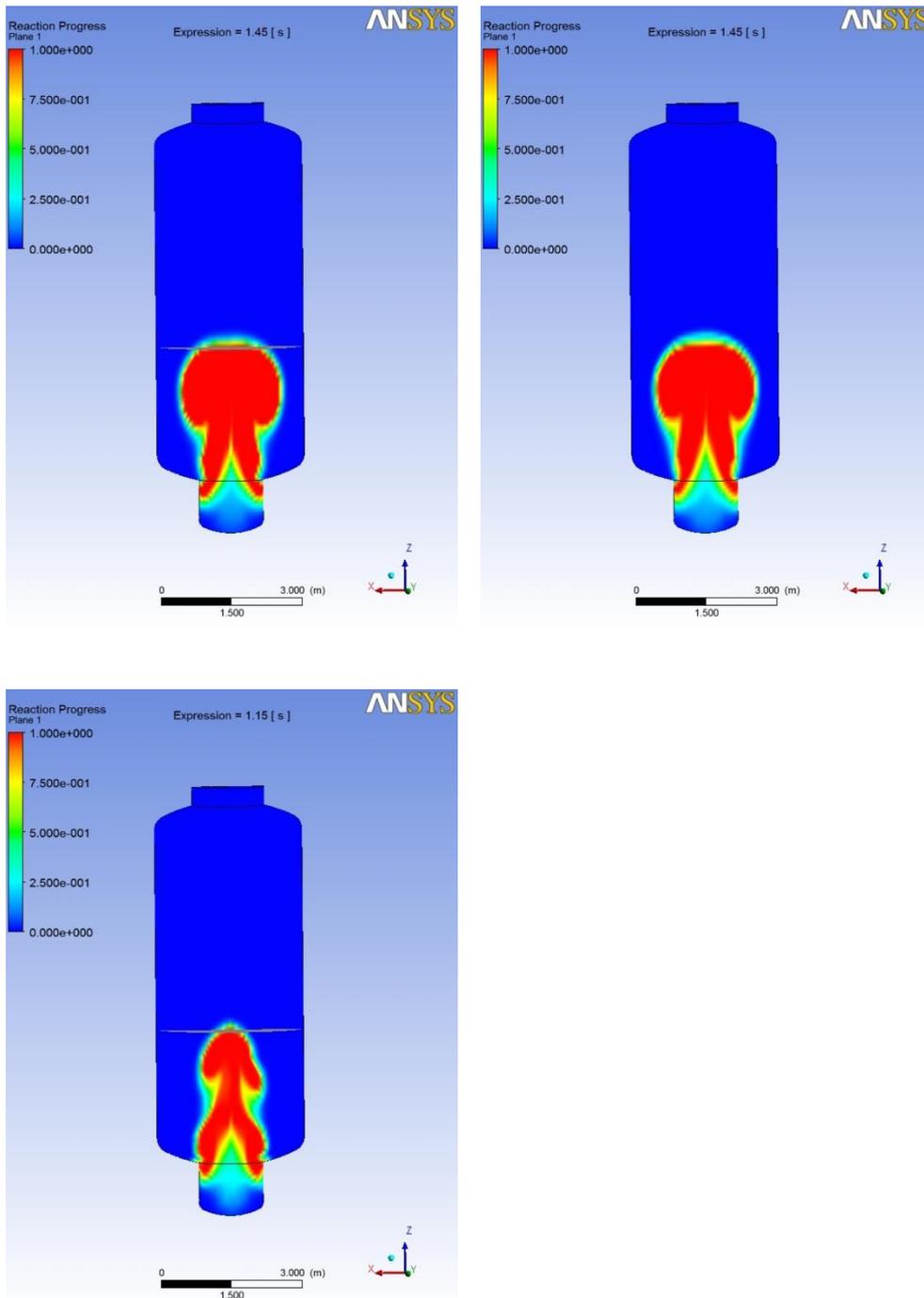


Abb. 6.1-19 Flammenfront (Reaction Progress Variable) bei Erreichen von 4 m Höhe. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases)

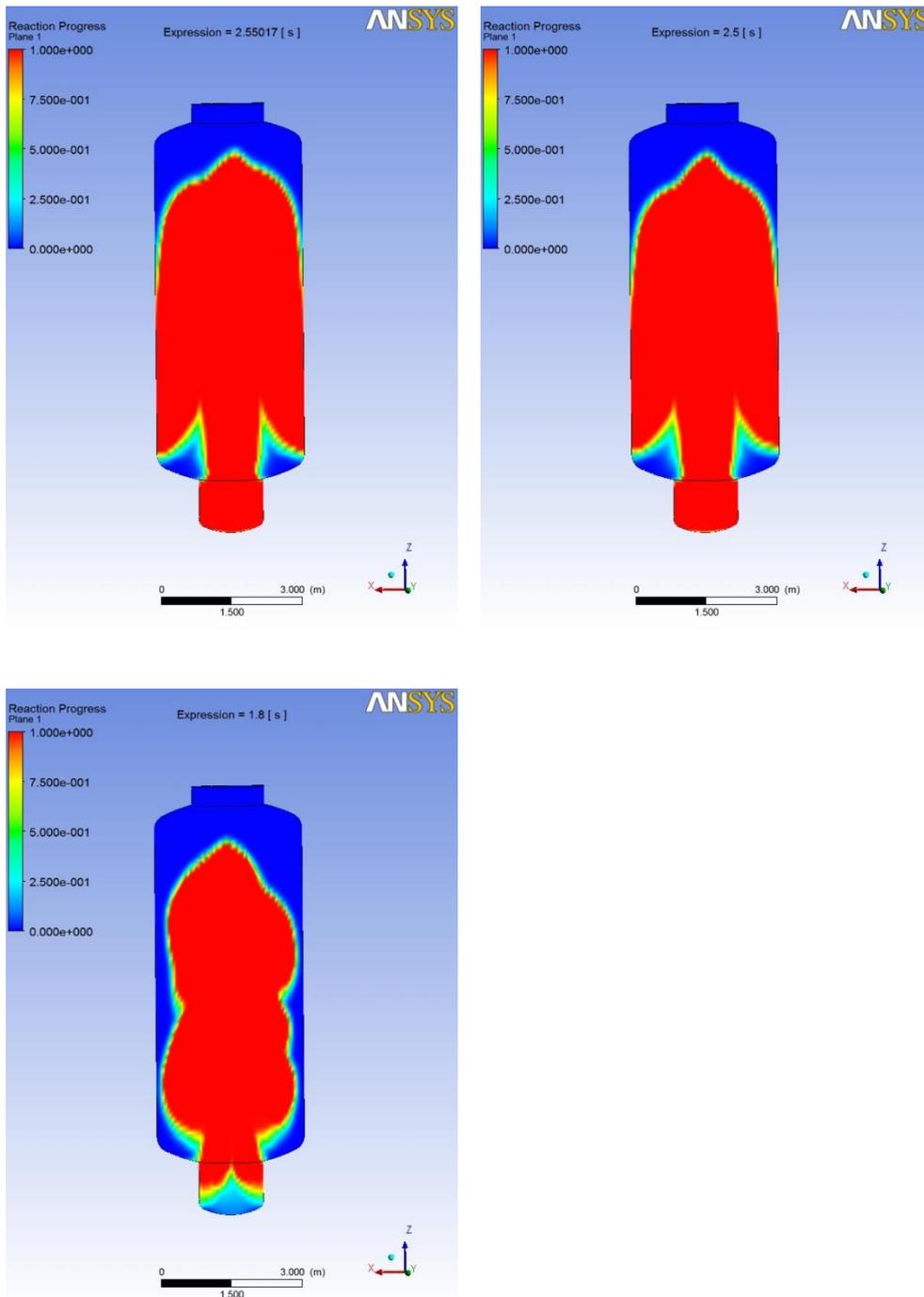


Abb. 6.1-20 Flammenfront (Reaction Progress Variable) bei Erreichen von 8 m Höhe. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases)

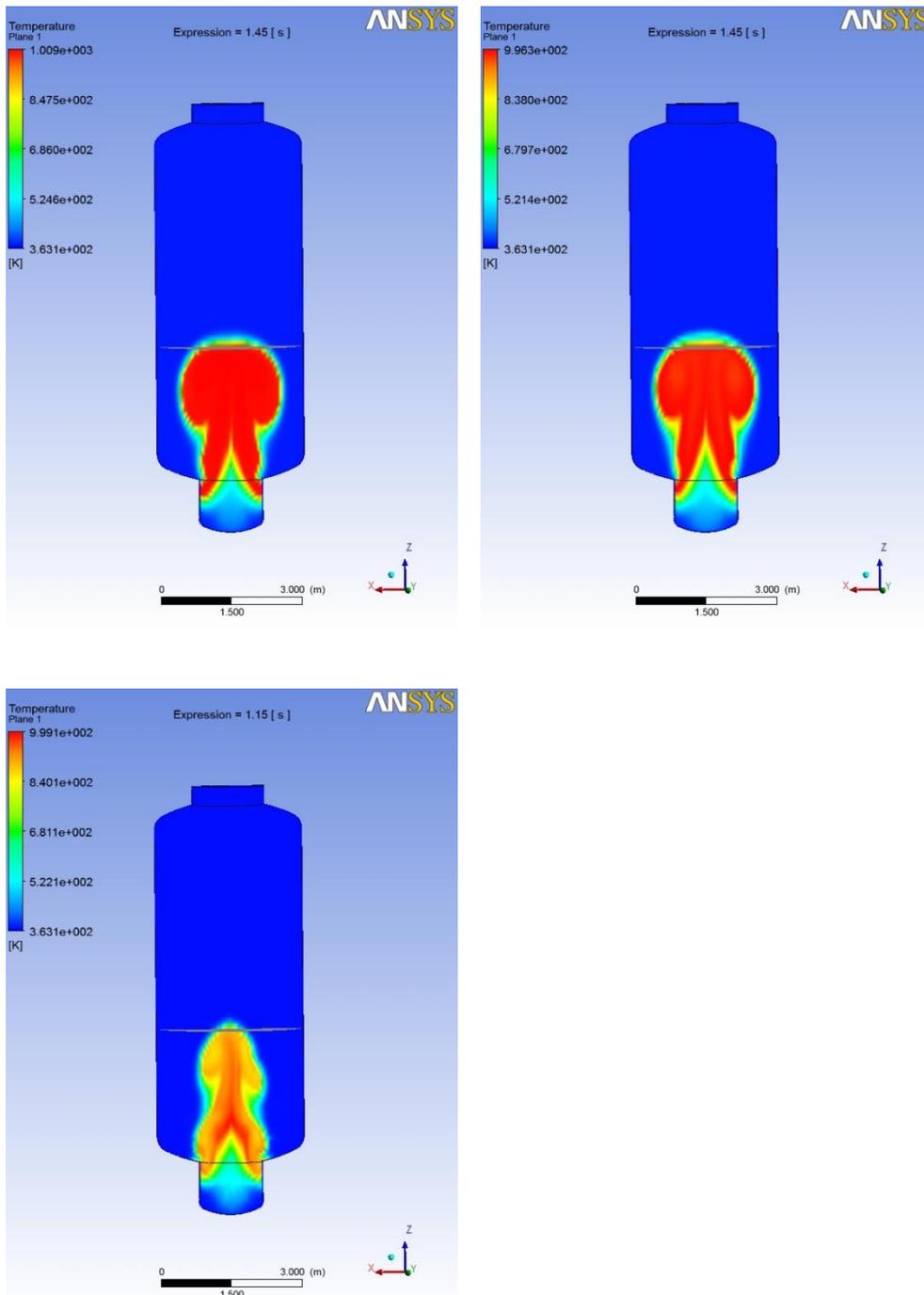


Abb. 6.1-21 Temperatur, wenn die Flammenfront von 4 m Höhe erreicht. (Oben links: keine Strahlungsmodellierung, oben rechts k nach VDI, unten: Weighted Sum of Gray Gases)

### 6.1.10 Vergleich Inertgas-Modell mit einer angepassten Flamelet-Bibliothek

Bei den bisher durchgeführten Simulationen mit dem Inertgas-Modell wurde eine Flamelet-Bibliothek für die Verbrennung von  $H_2$ -Luft-Gemischen und Standardbedingun-

gen (20 °C, 1 bar) verwendet, die standardmäßig CFX-14 zu Verfügung steht. Der Wasserdampf der zu Beginn der Verbrennung vorliegt wird als Inertgas modelliert. Es wird davon ausgegangen, dass er die Zusammensetzung des verbrannten Gases nicht verändert (bis auf einen konstanten Anteil).

ANSYS hat der GRS eine Flamelet-Bibliothek zur Verfügung gestellt, die die Gaszusammensetzung für eine H<sub>2</sub>-Verbrennung in Luft enthält, sofern ein Wasserdampfanteil von 25 vol.% im unverbrannten Gas und ein Druck von 1,5 bar und eine Temperatur des unverbrannten Gases von 92 °C vorliegen. Mit dieser modifizierten Flamelet-Library wurde das Experiment HD-22 mit dem BVM-Modell und der Zimont-Korrelation nachgerechnet. Durch Vergleich dieser beiden Simulationen kann untersucht werden, welche Unterschiede zwischen der Modellierung des Dampfes mit dem Inertgas-Ansatz gegenüber der Modellierung mit dem einer angepassten Flamelet-Bibliothek entstehen.

Bei Verwendung der Flamelet-Bibliothek für H<sub>2</sub>/Dampf/Luft-Verbrennung erfolgt der Druck-Anstieg schneller als beim Inertgas-Modell und der Maximaldruck ist etwas höher. Der Druck im Experiment liegt zwischen den von beiden Simulationen berechneten Verläufen.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Mittelachse ist bei der modifizierten Flamelet-Bibliothek ab einer Höhe von 2,5 m höher, ab 6 m nähern sich die Ergebnisse der beiden Simulationen wieder an. (Abb. 6.1-22). Damit liegt das Inertgasmodell näher an den experimentellen Daten.

Um die Unterschiede zwischen den beiden Ergebnissen der beiden Simulationen zu verstehen, muss man die Gaszusammensetzung des verbrannten Gases betrachten (Reaktionsfortschrittvariable = 1). Bei der Simulation mit dem Inertgas-Modell ist der Massenbruch der OH-Radikale im verbrannten Gas mehr als 10-fach größer als bei der Simulation mit der angepassten Flamelet-Bibliothek. Bei den übrigen Radikalen (H, O etc.) ergeben sich ebenfalls deutliche Unterschiede, allerdings sind die Massenbrüche in beiden Simulationen für diese Spezies um Größenordnungen geringer. Die unterschiedlichen Radikalkonzentrationen machen sich auch in der Temperatur des verbrannten Gases bemerkbar. Die Temperatur ist beim Inertgas-Modell mehr als 100 K geringer. Diese Temperaturunterschiede führen auch zu einem unterschiedlichen Auftrieb des verbrannten Gases. Dies ist eine Erklärung warum bei der Simulation mit der

angepassten Flamelet-Bibliothek die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit entlang der Längsachse größer ist.

Dieser Vergleich ist ein Hinweis darauf, dass die Annahme des Inertgas-Modells nur teilweise zutrifft und dass der Wasserdampf keinen Einfluss auf das Gleichgewicht der chemischen Reaktion hat. Um dies weiter zu untersuchen, könnte man eine Flamelet-Library für  $H_2$ /Luft erstellen, die nicht für Standardbedingungen (1 bar, 20 °C) sondern für die Bedingungen des HD-22 Experiments gültig ist (90 °C, 1,5 bar), da sowohl der Druck als auch die Temperatur einen Einfluss auch die chemischen Reaktionen haben. Weiterhin wäre es interessant statt der Gemischzusammensetzung einer Flamelet-Bibliothek das chemische Gleichgewicht (T, P, Spezies) in einer Simulation zu verwenden. Dies ist aber in CFX-14 nicht vorgesehen. Der GRS liegen gegenwärtig keine entsprechenden Programme zur Berechnung des chemischen Gleichgewichts vor. Die Ergebnisse dieses Programms müssten zudem dazu genutzt werden um eine Flamelet-Bibliothek zu „überschreiben“, bzw. es müsste ein anderer Weg gefunden das chem. Gleichgewichtsmodell mit dem BVM-Modell in CFX zu koppeln.

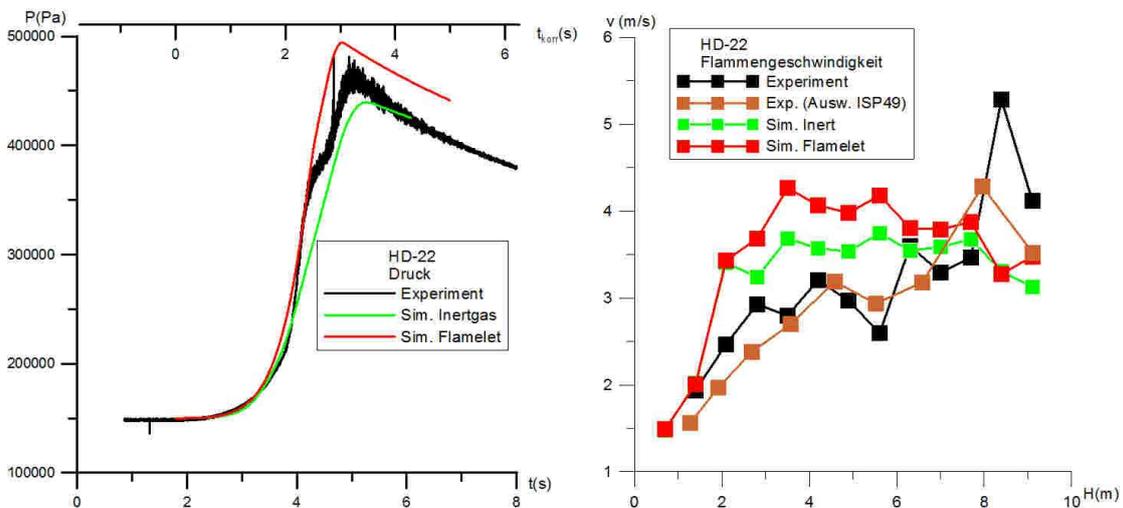


Abb. 6.1-22 Druck (links) und Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (rechts) bei Verwendung des Inertgas-Modell und bei Verwendung einer angepassten Flamelet-Library

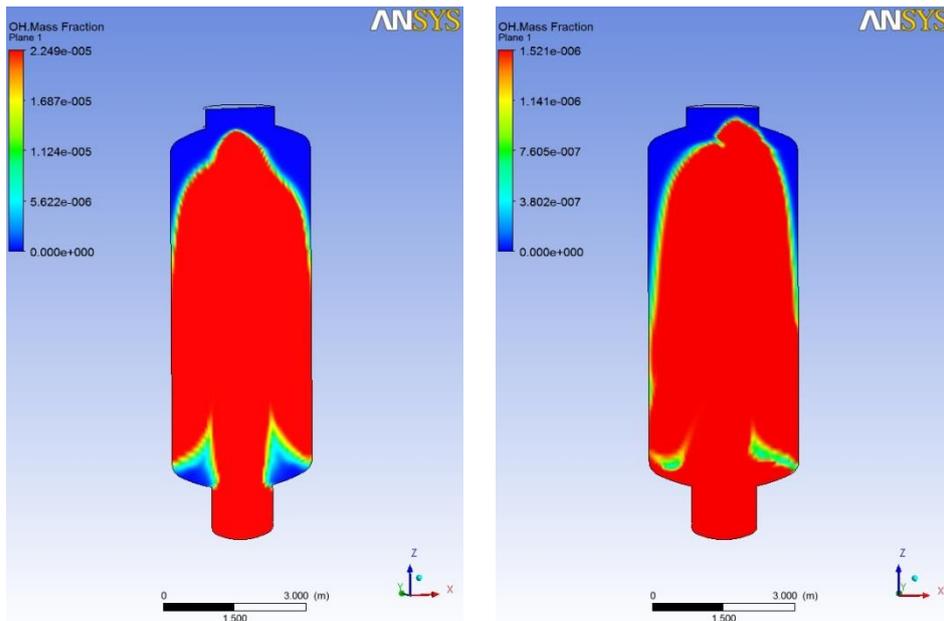


Abb. 6.1-23 Massenbruch der OH-Radikale links: Inertgas-Modell; rechts: angepasste Flamelet-Bibliothek

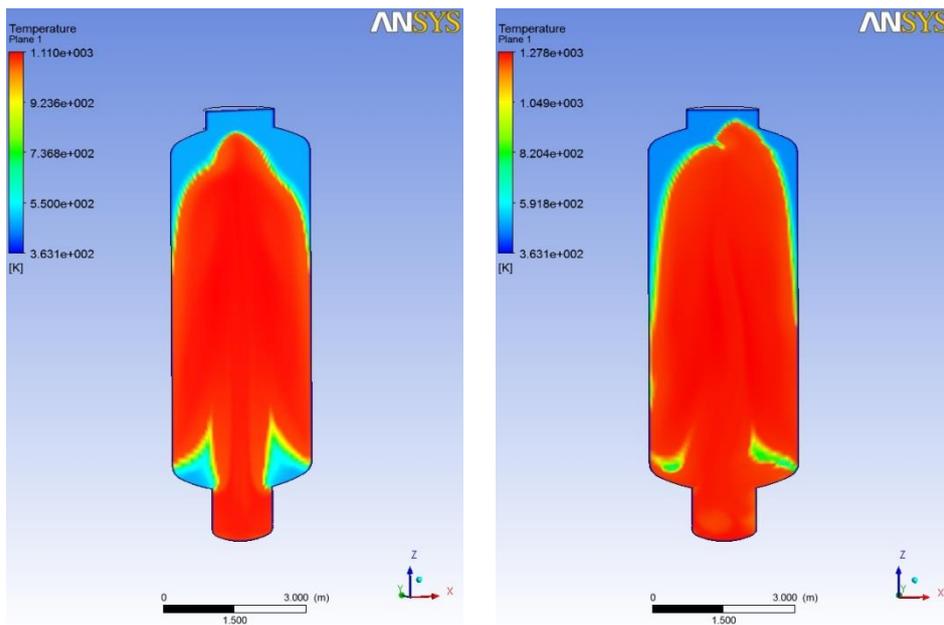


Abb. 6.1-24 Temperatur links: Inertgas-Modell; rechts: angepasste Flamelet-Bibliothek

### 6.1.11 Zusammenfassung

Der Versuch HD-22 wurde erfolgreich mit CFX und dem Burning-Velocity Modell simuliert. Das von ANSYS neu implementierte Inertgas-Modell war in der Lage die Verbren-

nung von Wasserstoff/Dampf/Luftgemischen zu berechnen. Hinsichtlich der Temperatur und der Konzentration der Radikalen des verbrannten Gases unterscheidet sich aber das Ergebnis des Inertgas-Modells vom dem einer angepassten Flamelet-Bibliothek (Dampf und Temperatur des unverbrannten Gases).

Der Druckanstieg während der Verbrennung und der Maximaldruck konnten in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung entlang der Behältermitte wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben, allerdings wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit ab ca. 7,7 m Höhe in der Simulation unterschätzt. Neben der Gitterabhängigkeit wurden verschiedene Parameterstudien durchgeführt (verschiedene Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit im BVM-Modell, Einfluss der Wärmestrahlung, Wahl der Anfangsturbulenz). Trotz großer Unterschiede in der Modellierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit, haben alle Korrelationen ähnlich gute Simulationsergebnisse geliefert. Die Anfangsturbulenz hat sich als sensibler Parameter gezeigt und sollte deshalb in zukünftigen Verbrennungsversuchen experimentell bestimmt werden. Je nach Wahl des Strahlungsmodells/Modellparameter kann das Simulationsergebnis (Druckverlauf, Form der Flammenfronten, etc.) deutlich beeinflusst werden. Die Wahl eines konstanten Absorptionskoeffizienten für Dampf von  $\sim 1 \text{ m}^{-1}$  liefert sinnvolle Werte, das Modell Weighted Sum of Grey Gases liefert bei Verwendung der Standardparameter keine gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

## **6.2 Beteiligung am SARNET2-Verbrennungsbenchmark**

Die GRS hat sich mit blinden Vorausrechnungen am SARNET-Verbrennungsbenchmark beteiligt. Da die ENACCEF-Anlage nicht beheizbar ist, können keine Versuche mit Wasserdampf durchgeführt werden, weil dieser kondensieren würde. Als Ersatz für Dampf wird in der ENACCEF-Anlage eine Mischung von 60 vol.%  $\text{CO}_2$  und 40 vol.% He verwendet. Es wurden drei Versuche durchgeführt, bei denen der Inertgasanteil 10 vol.%, 20 vol.% und 30 vol.% beträgt. Die  $\text{H}_2$  Konzentration beträgt bei allen Versuchen 13 vol.%. Diese Versuche wurden mit CFX-14 simuliert. Dabei kam das BVM-Verbrennungsmodell zum Einsatz. Es wurden Rechnungen sowohl mit der Zimont-Korrelation als auch mit der Koroll-Korrelation durchgeführt. Die laminare Brenngeschwindigkeit wurde mit einer Korrelation berechnet, die den Versuchsteilnehmern zur Verfügung gestellt wurde:

$$V_{lam} = (1,44 \cdot \theta^2 + 1,07 \cdot \theta - 0,29)(1 - x_{inert})^4 \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{2,2} \left(\frac{P}{P_{ref}}\right)^{-0,5}$$

$$\theta = \frac{\left(\frac{X_{H_2}}{X_{O_2}}\right)}{2}$$

$X_{inert}$  ist die Inertgaskonzentration,  $T_{ref}=298$  K,  $P_{ref}=1.0e+5$  Pa.

Kurz vor Fertigstellung des Zwischenberichts wurden die Versuchsergebnisse veröffentlicht. Die Auswertung der Daten und der Vergleich mit den Simulationsergebnissen konnte aber aus zeitlichen Gründen noch nicht vorgenommen werden. Dies wird im Abschlussbericht des Vorhabens vorliegen.

## 7 Validierung der Wasserstoffverbrennung mit CFX bei geschichteten Ausgangsverteilungen (AP 1.6)

### 7.1 Versuche bei ProScience zur H<sub>2</sub>-Verbrennung

Im Rahmen des Forschungsprojekts „Kriterien für Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang in Wasserstoff-Luft-Gemischen mit Konzentrationsgradienten und partiellem Einschluss“ wurden am Karlsruher Institut für Technologie/ProScience eine Reihe von Verbrennungsexperimenten durchgeführt bei denen H<sub>2</sub>-Luft-Gemische bei Raumtemperatur verbrannt wurden. Dabei befanden sich in dem nach unten offenen Versuchskanal homogene H<sub>2</sub>-Schichtungen oder H<sub>2</sub>-Mischungen mit Konzentrationsgradienten. Die Versuchsanordnung ist schematisch in Abb. 7.1-1 gezeigt.

Bei einem Teil der Versuche wurden in den Kanal periodisch Hindernisse mit einer unterschiedlichen Blockierrate eingebracht. Im Kap. 7.3 werden die Nachrechnungen mit CFX für die Versuche Nr. 47 (Pro47) und Nr. 36 (Pro36) beschrieben. Bei beiden Versuchen befinden sich „keine“ Hindernisse im Versuchskanal (Blockierrate = 0). Bei Pro47 liegt eine maximale Wasserstoffkonzentration von 22,6 vol.% an der Decke des Versuchskanals vor. Die H<sub>2</sub>-Konzentration nimmt mit einem Gradienten von 0,57 vol.%/cm nach unten hin ab (Abb. 7.3-17). Bei Pro36 liegt eine konstante Wasserstoffkonzentration von 23 vol.% in einer 60 cm dicken Schicht vor. Vorgelagert zu diesen Nachrechnungen wurden Parameterstudien durchgeführt, die im nachfolgenden Kapitel 7.2 beschrieben sind.

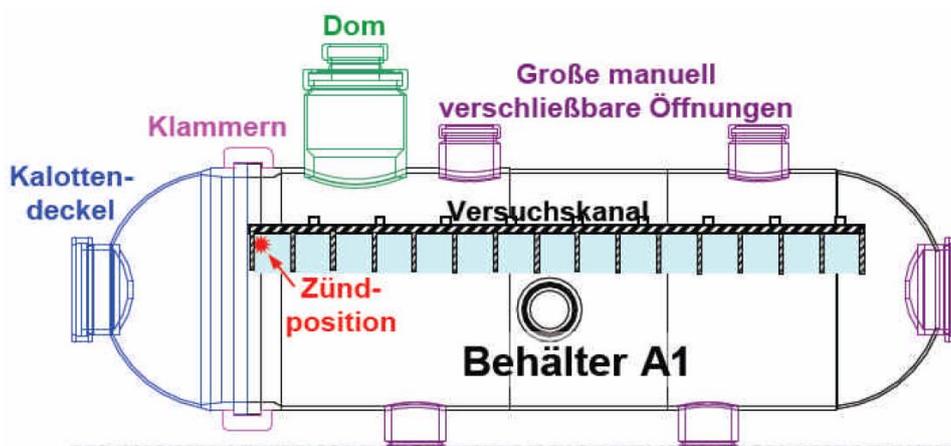


Abb. 7.1-1 Schematische Darstellung des Versuchsaufbau /FR111/

## 7.2 Parameterstudie zur Gitterabhängigkeit bei der Modellierung der H<sub>2</sub>-Verbrennung in einem Kanal ohne Hindernisse

### 7.2.1 Einleitung

Die ersten Rechnungen zu den Versuchen Pro47 und Pro36 (siehe Kap. 7.3) haben gezeigt, dass es hinsichtlich der räumlichen Diskretisierung noch offene Fragen gibt. Anhand eines Testbeispiels mit ähnlicher, aber vereinfachter Geometrie wurde untersucht, welche Gitterfeinheit notwendig ist, um eine gitterunabhängig Lösung zu erhalten und wie sich ein „zu grobes“ Gitter auf den Verlauf der Flammenausbreitung ausbreitet. Dazu wurde eine 2 dimensionale Geometrie (y-z-Achsen) untersucht. Die 3. Dimension (x-Achse) wird über Symmetrierandbedingung modelliert. Dies ist in Abb. 7.2-1 dargestellt. Die Länge des Verbrennungsraums beträgt 1 m, die Höhe 30 cm. In allen Simulationen wird als Startbedingung ein homogenes H<sub>2</sub>-Luftgemisch mit 22,6 vol.% H<sub>2</sub> bei p = 1 bar angenommen. Die Zündung erfolgt in einem oberen Eck (y = 0 m, z = 0,3 m). Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell modelliert. Bei allen Simulationen wird das Burning-Velocity Modell (BVM) aus CFX verwendet. Die laminare Flammengeschwindigkeit wird mit der Liu-MacFarlane Korrelation berechnet. (Abschnitt 6.1.3). In der ersten und der dritten Simulation wird die turbulente Brenngeschwindigkeit mit dem Koroll-Modell berechnet. Um zu untersuchen in weit die erzielten Ergebnisse auch für andere Korrelationen gelten, wird die erste Untersuchung wiederholt, wobei statt der Koroll-Korrelation die Zimont-Korrelation verwendet wird.

Die Decke und die beiden Seitenwände sind glatt und es werden adiabatische Randbedingungen angenommen. Bei den ersten beiden Untersuchungen ist der Verbrennungsraum nach unten hin offen („Opening“ Randbedingung). In der 3. Untersuchung kommt wieder die Koroll-Korrelation zum Einsatz. Bei dieser Untersuchung soll geprüft werden, wie sich die Randbedingung - „seitliches“ Venting = „Opening“ Randbedingung unten - auswirkt. Bei dieser Simulation wird im Gegensatz zur 1. Untersuchung auch am Boden eine glatte, adiabatische Wand als Randbedingung angenommen. Bei den Simulationen kommt immer ein kartesisches CFD-Gitter zu Einsatz, bei dem die Gitterfeinheit in beide Raumrichtungen (y, z) (fast) identisch ist.

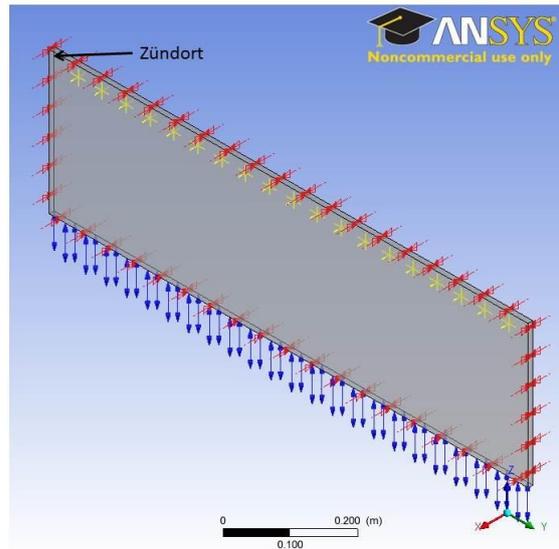


Abb. 7.2-1 Geometrie des Testfalls, Monitorpunkte durch gelbe Kreuze markiert

### 7.2.2 Ergebnisse des Testfall 1

Bei den folgenden Simulationen wird die Koroll-Korrelation (siehe 6.1.6) zur Modellierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit verwendet. Der Verbrennungskanal ist nach unten hin offen. Dieser Testfall entspricht im Wesentlichen dem Versuch Pro36, wobei die Größe des Brennraums verringert wurde und das Expansionsvolumen durch eine „Opening“ Randbedingung (mit konstantem Druck 1 bar) angenähert wird. Es wurden Simulationen auf unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt. Das größte Gitter verfügt nur über 261 Zellen (~ Zellgröße ca. 3,4 cm) das feinste Gitter besteht aus ca. 1,2 Millionen Zellen, was einer Zellgröße von 0,5 mm entspricht). Aufgrund der hohen Rechenzeit, wurde die Simulation mit 1,2 Millionen Zellen vorzeitig abgebrochen. Die Simulation mit 300 000 Zellen (entspricht einer Zellgröße von 1 mm) ist dagegen bis zum Ende der Verbrennung durchgeführt worden. Die Simulationen wurden anhand der Reaktionsfortschrittsvariablen (RPV) an den Monitorpunkten verglichen. Eine  $RPV = 0$  entspricht dabei einem unverbrannten Gemisch, bei  $RPV = 1$  liegt das verbrannte Gas vor, bei  $0 < RPV < 1$  eine Mischung aus beidem /CFX14/.

Bei den Simulationen wurden 19 Monitorpunkte definiert. Sie liegen alle 3 cm unterhalb der Decke und der Abstand zwischen den einzelnen Punkten beträgt 5 cm (Abb. 7.2-1). In Abb. 7.2-2 ist die RPV an den Monitorpunkten bei  $y = 5, 25, 50, 75, 90$  cm) dargestellt. Die Farbe der Kurve hängt von der Simulation ab. Die Flamme wurde bei  $y = 0$  cm gezündet und breitete sich dann in  $y$ -Richtung aus. Zuerst erreichte die

Flamme den Monitorpunkt  $y = 5 \text{ cm}$ , danach den bei  $25 \text{ cm}$  usw. (Abb. 7.2-3). Aus dem Vergleich der Simulationsergebnisse bei unterschiedlich feiner Diskretisierung ergeben sich für dieses Testbeispiel folgende Erkenntnisse.

Die Form der Flammenfront ist bei allen Simulationen ähnlich. Allerdings wird mit zunehmender Gitterfeinheit die Flammenfront schmäler. An den Monitorpunkten erfolgt der Verbrennungsprozess schneller, sobald die Flammenfront den Punkt erreicht hat. (Größere Steigung bei Anstieg der RPV in (Abb. 7.2-2)). Bei der feineren Diskretisierung ist eine Verwinkelung der Flammenfront zu erkennen (Abb. 7.2-3), bei der größeren Diskretisierung ist eine solche Verwinkelung nur ansatzweise erkennbar (Abb. 7.2-4).

Es zeigt sich ein deutlicher Einfluss der Gitterfeinheit auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme. Mit zunehmend feiner Diskretisierung erfolgt die Flammenausbreitung entlang der betrachteten Monitorpunkten schneller. Bei der größten Diskretisierung (Zellgröße  $\sim 3,4 \text{ cm}$ ) braucht die Flamme fast  $0,16 \text{ s}$  bis der Monitorpunkt bei  $y = 90 \text{ cm}$  erreicht wird. Bei der Diskretisierung mit der Zellgröße  $1 \text{ mm}$  wird dagegen dieser Monitorpunkt schon kurz nach  $0,12 \text{ s}$  erreicht. (Abb. 7.2-2). Selbst bei dieser Zellgröße liegt noch keine gitterunabhängige Lösung vor. Eine Simulation mit der Zellgröße ( $0,5 \text{ mm}$ ) berechnet eine noch schnellere Flammenausbreitung (Abb. 7.2-2).

Die laminare Flammendicke liegt (im Experiment) typischerweise in der Größenordnung von  $1,0\text{e-}4 \text{ m}$  bis  $1,0\text{e-}5 \text{ m}$  wobei die Reaktionszone nochmal deutlich schmäler ist. Es ist denkbar, dass es (beim BVM-Verbrennungsmodell) notwendig ist, die Flammenfront detailliert aufzulösen, um eine gitterunabhängige Lösung zu erzielen. Eine solch feine Auflösung würde eine Zunahme der Zellen um einen Faktor  $100 - 10000$  im Vergleich zum feinsten Gitter mit  $1,2$  Millionen Zellen bedeuten, wenn man weiterhin ein äquidistantes Gitter verwendet. Selbst für dieses sehr kleine, 2-dimensionale Testbeispiel ist eine solche Simulation auf absehbare Zeit unrealistisch.

Denkbar ist es andere Diskretisierungsmethoden zu verwenden. In FLUENT ist es z. B. möglich, das Gitter lokal im Bereich der Flammenfront zu verfeinern und nach Durchgang der Flammenfront wieder zu vergrößern. Dies würde eine entsprechende Verfeinerung des CFD-Gitters im Bereich der Flamme erlauben. Eine solche Vorgehensweise wird z. B. von NRG mit FLUENT verfolgt /SAT12/. Mit CFX-14 ist eine solche lokale Verfeinerung nicht möglich. Prinzipiell denkbar ist es auch andere/modifizierte Verbrennungsmodelle zu verwenden, die eine gröbere räumliche Diskretisierung erlauben,

bei ähnlich guter Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Solche stehen aber zumindest in CFX gegenwärtig nicht zur Verfügung. Für die folgenden Nachrechnungen der Versuche von ProScience kann aus diesem Testbeispiel gefolgert werden, dass es selbst bei einer 2-dimensionalen Simulation nicht möglich sein wird ein CFD-Gitter zu verwenden, welches eine gitterunabhängige Lösung liefert. Eine zu grobe räumliche Diskretisierung kann zu einer zu langsamen Flammenausbreitung führen.

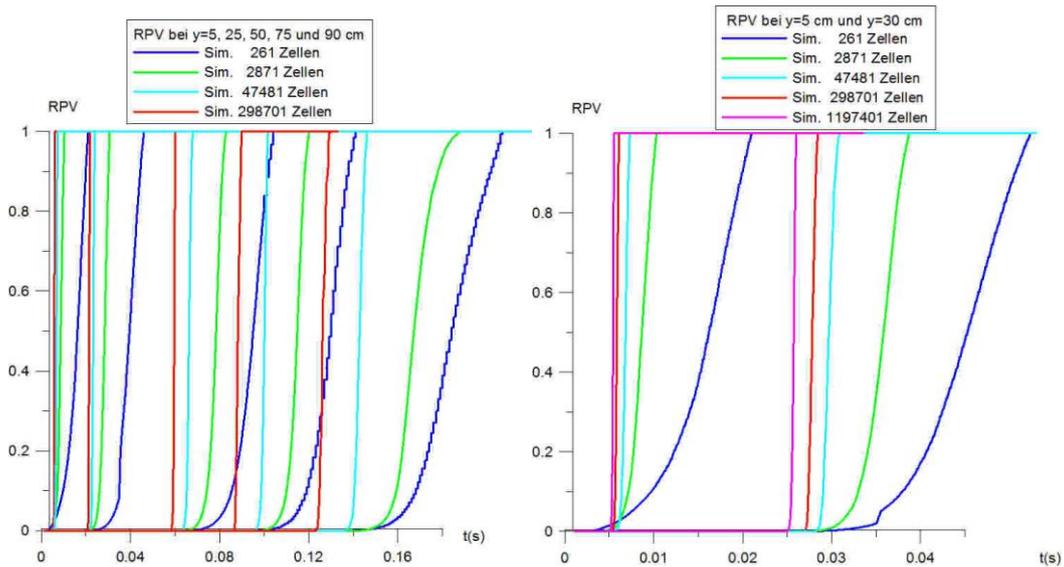


Abb. 7.2-2 Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testbeispiel 1

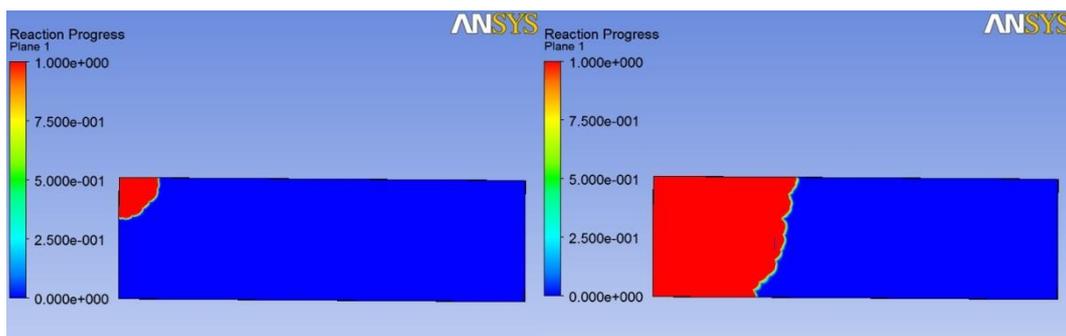


Abb. 7.2-3 Flammenausbreitung im Testbeispiel 1 (298 701 Zellen). Rot: verbranntes Gas, blau: unverbranntes Gas

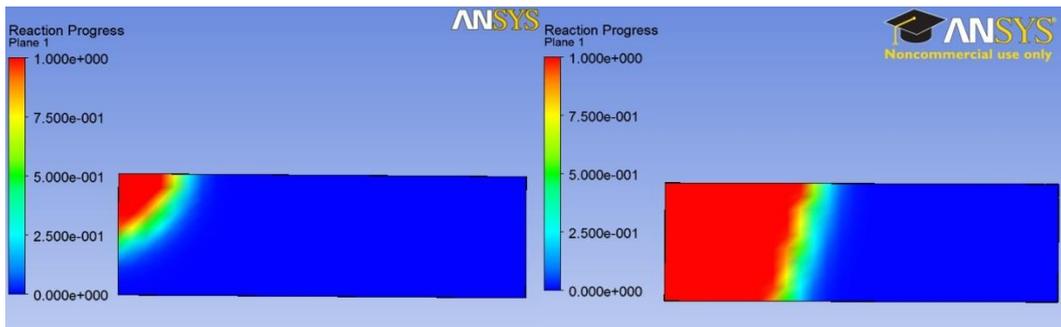


Abb. 7.2-4 Flammenausbreitung im Testbeispiel 1 (261 Zellen). Rot: verbranntes Gas, blau: unverbranntes Gas

### 7.2.3 Ergebnisse des Testfall 2

Der erste Testfall hat gezeigt, dass das BVM-Modell mit der Koroll-Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit ein extrem feines CFD-Gitter benötigt. Neben der Koroll-Korrelation stehen eine Reihe verschiedener Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit zur Verfügung, die sich stark hinsichtlich der Abhängigkeit von den physikalischen Größen unterscheiden. Deshalb soll untersucht werden, in wie weit sich die Gitterabhängigkeit verändert, wenn eine andere Korrelation verwendet wird. Statt der Koroll-Korrelation wird deshalb die Zimont-Korrelation verwendet, die bereits in der Vergangenheit in vielen Verbrennungssimulationen zum Einsatz kam.

Der 2. Testfall zeigt, dass auch bei der Zimont-Korrelation eine ähnlich starke Gitterabhängigkeit besteht wie bei der Koroll-Korrelation. Die Form der Flammenfronten ist bei beiden Korrelationen ähnlich (vergleiche Abb. 7.2-3 mit Abb. 7.2-6). Allerdings erfolgt bei den Simulationen mit der Zimont-Korrelation die Flammenausbreitung etwas langsamer (Abb. 7.2-8).

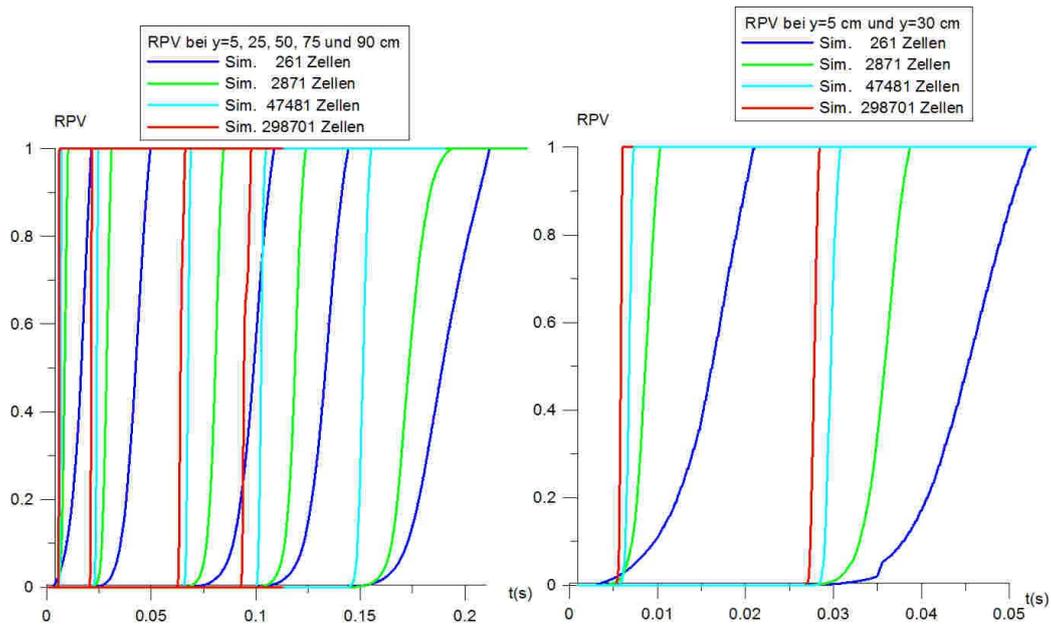


Abb. 7.2-5 Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testbeispiel 2

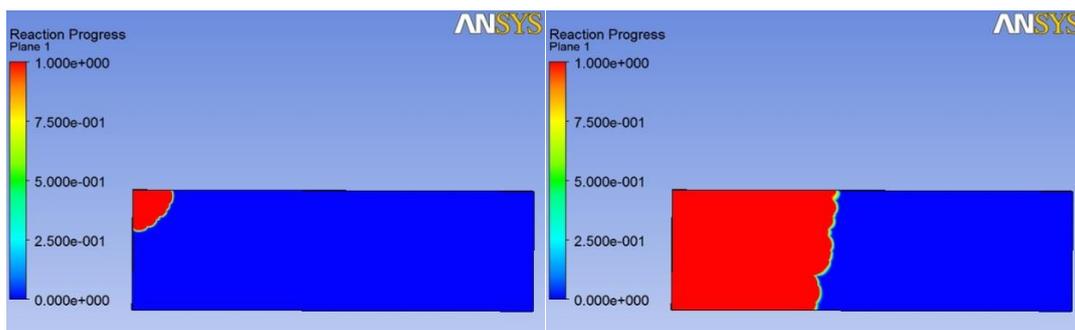


Abb. 7.2-6 Flammenausbreitung im Testbeispiel 2 (298 701 Zellen). Rot: verbranntes Gas, blau unverbranntes Gas

### 7.2.4 Ergebnisse des Testfall 3

Im 3. Testfall soll untersucht werden, in wie weit das seitliche Venting einen Einfluss hat. Deshalb wurden zum Vergleich Simulationen durchgeführt, bei denen der Boden des Verbrennungsraums ebenfalls durch eine glatte adiabatische Wand abgeschlossen ist. Bei Testfall 3 wird wieder die Koroll-Korrelation verwendet.

Das Ergebnis der Simulationen zeigt wieder eine starke Abhängigkeit der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von der Gitterfeinheit (Abb. 7.2-7). Dies zeigt, dass auch bei geschlossenen Systemen eine starke Abhängigkeit der Brenngeschwindigkeit von

der Gitterfeinheit vorliegen kann, d. h. die starke Gitterabhängigkeit in den Testfällen 1 und 2 also nicht auf das seitliche Venting allein zurückzuführen ist. Es bleibt noch anzumerken, dass erwartungsgemäß die Flammenausbreitung im abgeschlossenen Verbrennungsraum deutlich schneller verläuft als bei seitlichem Venting (Abb. 7.2-8).

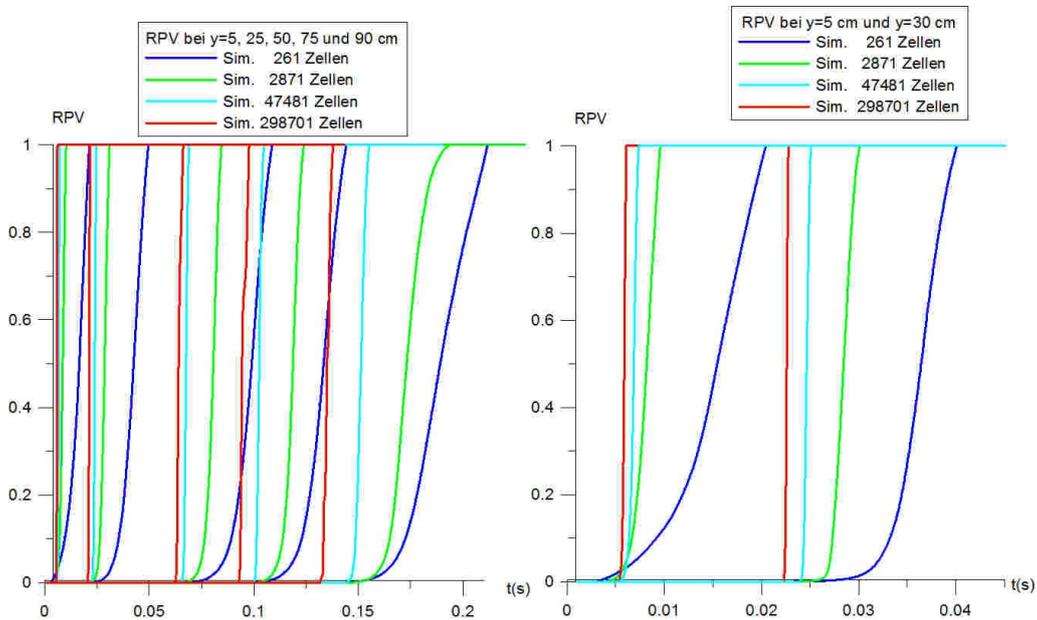


Abb. 7.2-7 Reaktionsfortschrittsvariable an verschiedenen Monitorpunkten, Testfall 3

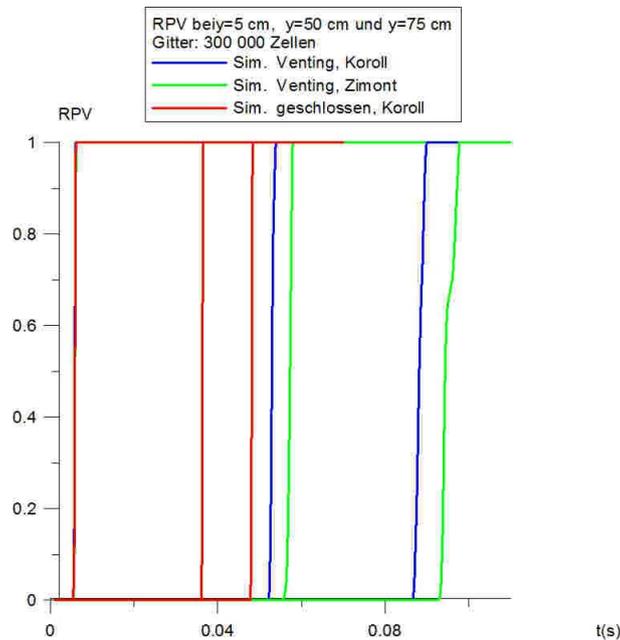


Abb. 7.2-8 Reaktionsfortschrittsvariable an 3 verschiedenen Monitorpunkten bei den verschiedenen Testfällen

## **7.3 Nachrechnung der Versuche ProScience Nr. 36 und Nr. 47**

### **7.3.1 Modellierung in CFX**

Im Nachfolgend sind die CFX-Simulationen der beiden Testfälle Pro36 und Pro47 beschrieben. Die Verbrennung wird in CFX mit dem Burning-Velocity Modell berechnet. Für die laminare Brenngeschwindigkeit wird die Liu-Mac-Farlane Korrelation verwendet. Die turbulente Brenngeschwindigkeit wird mit der Koroll Korrelation oder mit der Zimont Korrelation berechnet. Es wird näherungsweise davon ausgegangen, dass sich aufgrund der kurzen Simulationszeit (~1 s - 2 s) die Temperatur des Behälterwände nur unwesentlich ändert. Deshalb wird die Temperatur der Wände konstant gehalten. Die Turbulenz wird mit dem SST-Modell berechnet.

### **7.3.2 Vergleich 2D/3D**

Die Untersuchungen anhand des einfachen Testfalls in Abschnitt 7.2 haben gezeigt, dass die Verwendung eines groben Gitters bei einer ähnlichen Konfiguration wie das Experiment Pro47 u. a. zu einer deutlichen Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit führen kann. Da selbst bei der einfachen 2-dimensionalen Geometrie keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte, ist zu erwarten, dass für die deutlich komplexere 3-dimensionale Geometrie des Pro47 Experiments keine ausreichend feine räumliche Diskretisierung möglich ist. Um trotzdem eine feinere räumliche Diskretisierung bei einer akzeptablen Rechenzeit verwenden zu können, soll für die folgenden Parameterstudien eine vereinfachte 2-dimensionale Geometrie verwendet werden. Dies stellt allerdings eine deutliche Vereinfachung dar. Der Verbrennungskanal ist 3 m breit, bei einer 2-dimensionalen Geometrie mit Symmetrierandbedingungen werden die Effekte der seitlichen Begrenzung vernachlässigt. Das Expansionsvolumen (Behälter A1, siehe Abb. 7.1-1) ist im Wesentlichen zylindersymmetrisch (bei Vernachlässigung von Mannlöchern etc.). Da die Verbrennung im Verbrennungskanal stattfindet wird davon ausgegangen, dass die genaue Geometrie des umgebenden Behälters einen sekundären Einfluss auf die Flammenausbreitung im Verbrennungskanal hat. Daher scheint auch hier die vereinfachte 2-dimensionale Geometrie akzeptabel.

Als erstes soll geprüft werden, wie weit die Annahme einer 2-dimensionalen Geometrie zu einer Veränderung der Simulationsergebnisse führt. Dazu wird eine 2-dimensionale mit einer 3-dimensionalen Simulation verglichen. Dazu werden 2 CFD-Gitter verwen-

det, die insbesondere im Bereich des Verbrennungskanals eine ähnlich feine räumliche Diskretisierung verwenden. Im 3-dimensionalen Fall wird die Symmetrieebene entlang der Längsachse ausgenutzt. In 3-D ist hierzu ein Gitter mit 282 266 Zellen und in 2-D ein Gitter mit 9 735 Zellen verwendet worden. Bei diesem Vergleich wurde die turbulente Brenngeschwindigkeit mit dem Koroll-Korrelation berechnet.

Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ist eine zentrale Größe beim Vergleich der Simulationen mit dem Experiment. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wird bei den Simulationen wie folgt berechnet. Es wurden an Messstellen, an denen sich im Experiment Ionisationssonden zur Bestimmung der Flammenankunftszeit befinden, Monitorpunkte definiert. Die Flammenankunftszeit an dieser Position ist der Zeitpunkt, an dem der Anstieg der Reaktionsfortschrittsvariablen an diesem Monitorpunkt beginnt ( $RPV > 0,01$ ). Aus den so bestimmten Flammenankunftszeiten lassen sich Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten bestimmen. Die experimentellen Flammengeschwindigkeiten wurden aus den Flammenankunftszeiten an den entsprechenden Monitorpunkten, die sich in der Mitte der Verbrennungskanals befinden, berechnet.

Die Geschwindigkeiten im Experiment und in der Simulation werden mit dem gleichen Algorithmus berechnet, der sich etwas von der Auswertung bei ProScience unterscheidet. Daher gibt es gewisse Unterschiede in den experimentellen Flammenankunftszeiten zwischen (Abb. 7.3-1 und Abb. 7.3-3).

Es sei weiter angemerkt, dass die starke Schwankung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (94 m/s danach 19 m/s) bei 8 m wenig realistisch ist. Sinnvollerweise sollte von einer mittleren Geschwindigkeit von 54 m/s ausgegangen werden. Ursache hierfür können zum einen Messfehler sein, die sich bei der Differenzenbildung zur Geschwindigkeitsberechnung stark bemerkbar machen, oder aber auch 3-dimensionale Effekte im Experiment, die bei dieser Art der Auswertung vernachlässigt werden. Eine solche mittlere Geschwindigkeit entspricht auch besser den von ProScience ermittelten Werten (Abb. 7.3-1 und Abb. 7.3-3).

In Abb. 7.3-1 ist zu sehen, dass die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in der Mitte und an den beiden seitlichen Messlinien ähnlich verläuft. Allerdings sind auch gewisse Abweichungen entlang der 3. Dimension zu sehen, wobei sich die Flammenausbreitung links und rechts von der Mitte auch etwas voneinander unterscheidet, obwohl laut Versuchsspezifikation kein Unterschied zwischen rechter und linker Seite vorhanden ist.

Vergleicht man die berechnete Brenngeschwindigkeit der 2-dimensionalen Simulation mit der 3-dimensionalen so liefern beide Simulation ähnliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten entlang des Brennkannals. Die zweidimensionale Simulation berechnet eine Flammenausbreitung von etwas über 7 m/s während die dreidimensionale Simulation eine etwas schnellere Ausbreitung von 8 - 8,5 m/s berechnet. Allerdings berechnen beide Simulationen eine deutlich niedrigere Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, als sie im Experiment gemessen wurde.

Aufgrund der ähnlichen Simulationsergebnisse wird im Folgenden für die Parameterstudien eine vereinfachte 2-dimensionale Geometrie verwendet. Die Unterschiede zwischen den beiden Simulationsergebnissen sind gering im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen.

Mit der einfacheren 2-dimensionalen Geometrie können Abhängigkeiten und geeignete Modellparameter untersucht werden, um den Abstand zu den experimentellen Ergebnissen zu erklären/verringern. Zur Erzielung einer möglichst guten Übereinstimmung mit dem Experiment ist allerdings eine 3-dimensionale Simulation notwendig.

Bei der Annäherung der 3-dimensionalen Geometrie durch einen 2-dimensionalen Schnitt ergibt sich das Problem, dass wenn man die Geometrie entlang der Behältermitte verwendet, dass dann das Expansionsvolumen größer ist als im 3-dimensionalen Fall. Deshalb wurden zwei Simulationen mit unterschiedlich feiner räumlicher Diskretisierung durchgeführt, bei denen das Expansionsvolumen angepasst wurde. Die Anpassung erfolgte so, dass bei einer angenommenen Breite des 2-dimensionalen Schnitts von 3 m (entspricht Breite des Verbrennungskannals) das Volumen 98 m<sup>3</sup> beträgt. Dies entspricht dem Volumen, welches der Behälter A1 besitzt /FRI11/. Dazu wurde der Bereich oberhalb des Verbrennungskannals verringert. Vergleicht man die Ergebnisse, die mit und ohne Korrektur des Expansionsvolumens erzielt wurden, so zeigen sich nur geringe Abweichungen bei der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Die Simulationen mit geringeren Expansionsvolumen zeigen eine etwas schnellere Flammenausbreitung (insbesondere beim feineren CFD-Gitter, siehe Abb. 7.3-3). Bei ähnlich feiner Diskretisierung (= ähnliche Zellgröße) ergibt sich in beiden Fällen eine Abweichung von der 3-dimensionalen Simulation.

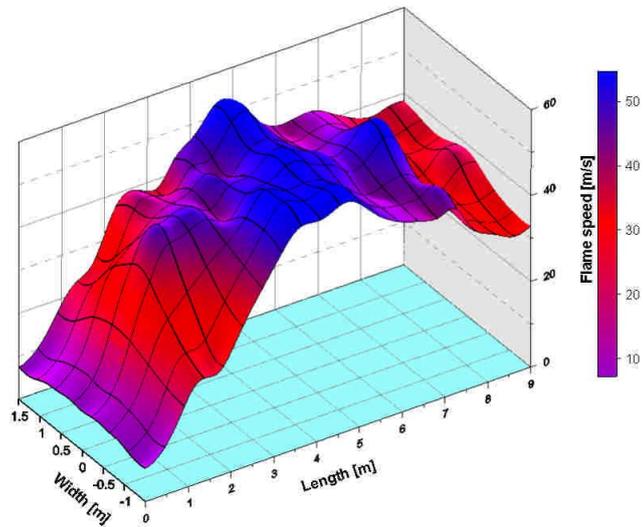


Abb. 7.3-1 Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten Pro47 /FR111/

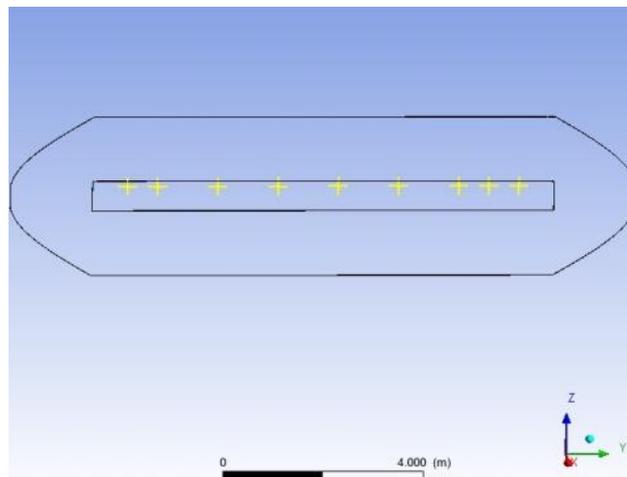


Abb. 7.3-2 Position der Monitorpunkte in der Simulation

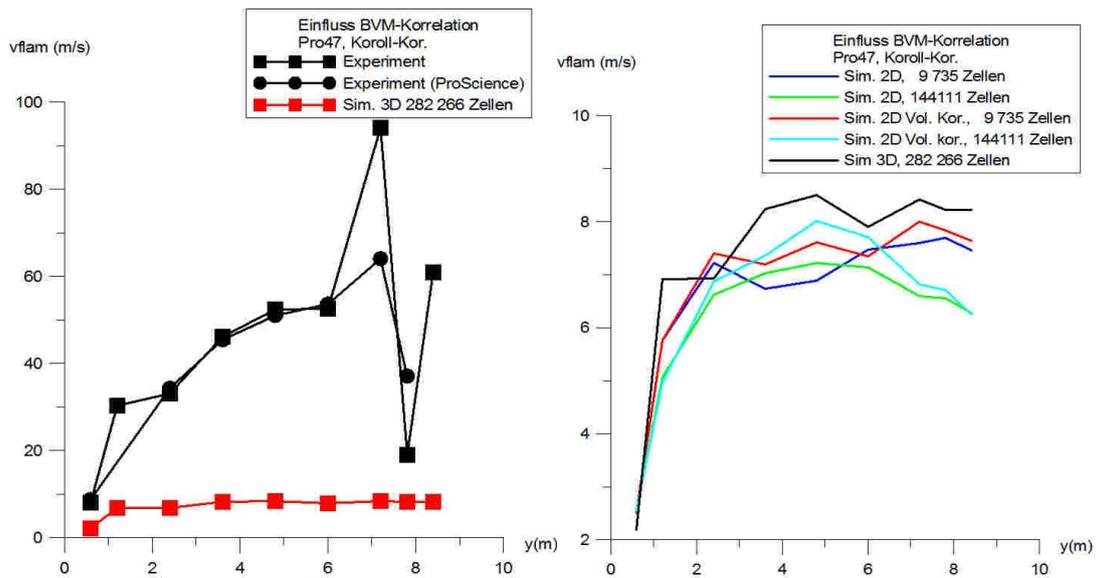


Abb. 7.3-3 Links: Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in Experiment und in 3-dimensionalen Simulation. Rechts: Vergleich Flammenausbreitungsgeschwindigkeit 3-D mit 2-D

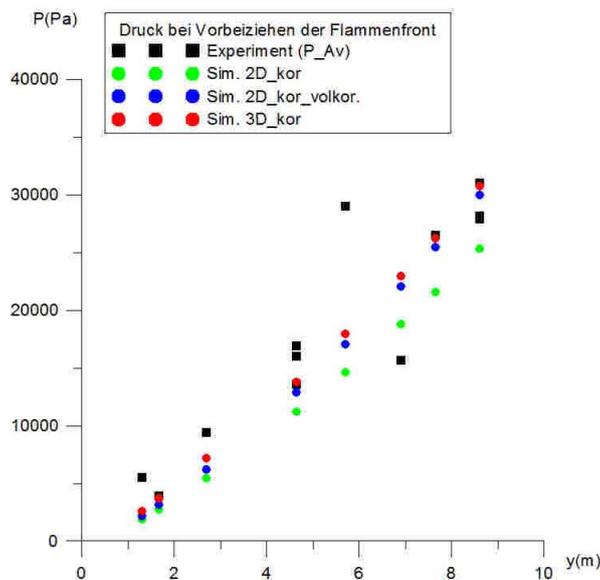


Abb. 7.3-4 Mittlerer relativer Druck bei Vorbeiziehen der Flammenfront

### 7.3.3 Gitterstudie glatte Wände

Im Folgenden wird der Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf das Simulationsergebnis untersucht. Dazu wurden 3 Simulationen mit 9 700, 39 600, 144 000 Zellen durchgeführt. Bei diesen Simulationen wurde das Gitter im Verbrennungskanal um ei-

nen Faktor 2 in jeder Raumrichtung verfeinert, das Gitter im Expansionsvolumen wurde nur so weit verfeinert, wie dies die Gitterqualität erforderlich macht.

Alle drei Simulationen berechnen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten von 7 m/s - 8 m/s; ein eindeutiger Trend zu einer Gitterkonvergenz ist nicht erkennbar. Sie liegen damit weit vom experimentellen Wert 50 m/s - 60 m/s entfernt (Abb. 7.3-5). Es sei angemerkt, dass alle verwendeten Gitter deutlich gröber sind als die feinen Netze im Testfall, da der 2-D Verbrennungskanal im Testbeispiel nur 0,3 m<sup>2</sup> misst während er im Experiment 4,8 m<sup>2</sup> groß ist.

Bei einigen Anwendungen (z. B. Wandkondensationsmodellierung) wird in Wandnähe das CFD-Gitter senkrecht zur Wand stark verfeinert. Um den Einfluss dieser Diskretisierungsmethode zu untersuchen, wurden 2 Simulationen durchgeführt, bei denen die Zellen an der Wand senkrecht zur Wandoberfläche auf  $\Delta = 1,0$  mm bzw. auf  $\Delta = 0,2$  mm reduziert wurden. (Abb. 7.3-7).

Die Simulationen mit den Gittern bei denen in Wandnähe verfeinert wurde, zeigen deutlich höhere Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten, als die Simulationen mit gleichmäßiger Zellgröße. Die Simulation mit  $\Delta = 1,0$  mm erreicht eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von über 50 m/s die Simulation mit  $\Delta = 0,2$  mm erreicht immerhin noch eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von 18 m/s. In den beiden Simulationen wird die maximale Flammengeschwindigkeit erst am Ende des Verbrennungskanals erreicht, während im Experiment bereits nach ca. 3,5 m im Verbrennungskanal keine starke Beschleunigung der Flammenfront mehr erkennbar ist (Abb. 7.3-5).

Vergleicht man die Form der Flammenfront bei einer gleichmäßigen Diskretisierung (Abb. 7.3-6) mit der bei einer starken Verfeinerung in Wandnähe (Abb. 7.3-7), so ist zu erkennen, dass sich die Flamme bei Verfeinerung in Wandnähe viel schneller entlang der Wand ausbreitet als dies ohne Verfeinerung in Wandnähe der Fall ist. Die Flamme ist in Abb. 7.3-7 in der Grenzzelle zur Wand am weitesten fortgeschritten. Im Experiment liegen zwar keine detaillierten Bilder über die Form der Flammenfront vor, aber eine solch schnelle Flammenausbreitung direkt an der Wand erscheint nicht physikalisch, da an der Wand eine No-Slip-Randbedingung vorliegt, d.h. die Strömungsgeschwindigkeit direkt an der Wand sollte also 0 m/s betragen. Zudem sollte in unmittelbarer Wandnähe die Verbrennung durch Wärmeverluste an die kalte Wand eher behindert werden.

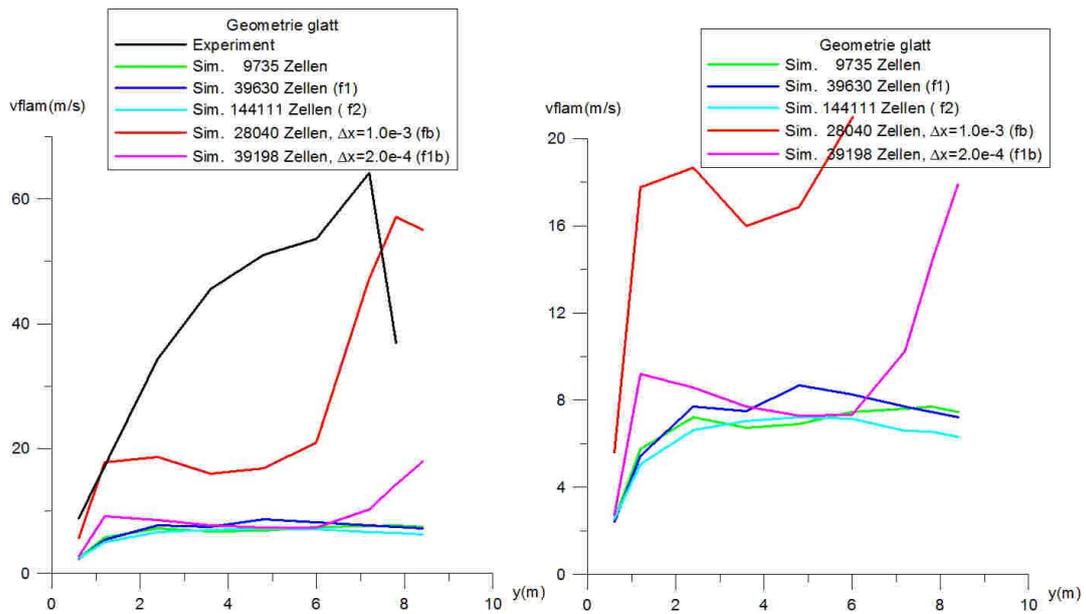


Abb. 7.3-5 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher räumlicher Diskretisierung. (Links: Ausschnitt zur besseren deutlicheren Darstellung der Ergebnisse)

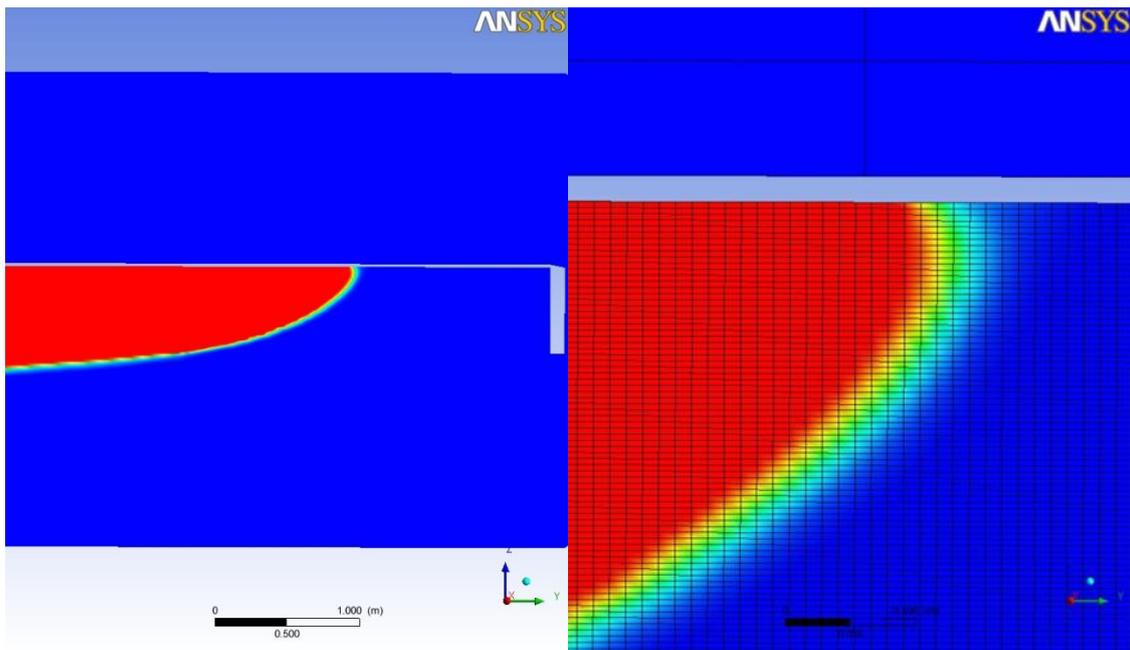


Abb. 7.3-6 Flammenausbreitung bei einer gleichmäßigen räumlichen Diskretisierung im Verbrennungskanal

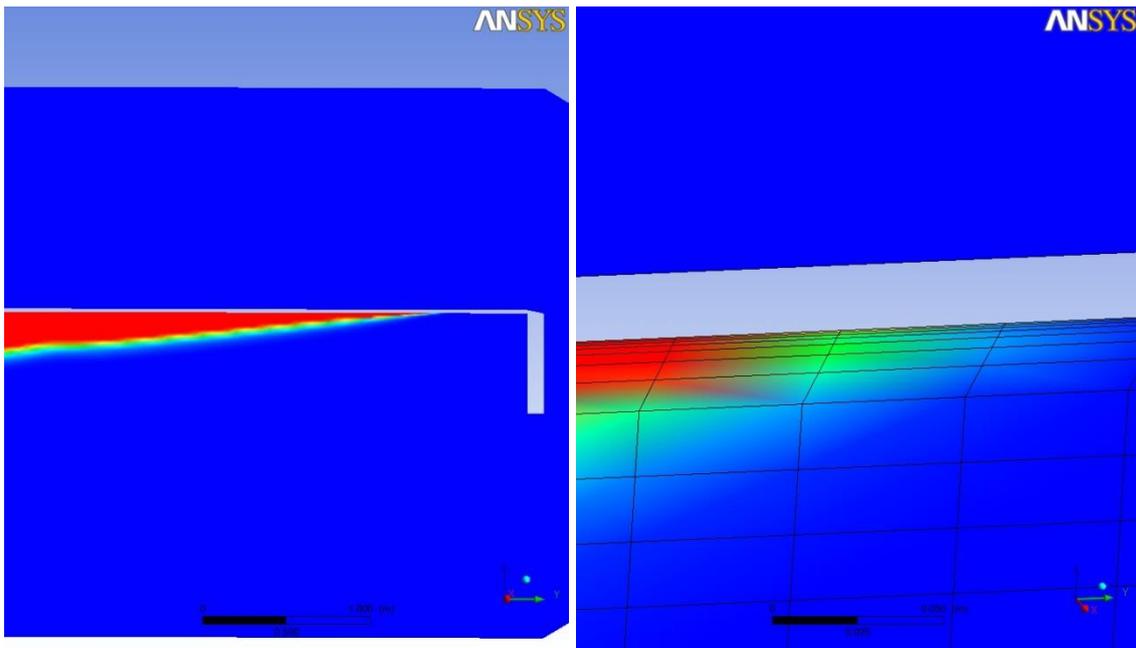


Abb. 7.3-7 Flammenausbreitung bei einer sehr starken Gitterverfeinerung in Wandnähe ( $\Delta = 1 \text{ mm}$ )

#### 7.3.4 Studie zum Einfluss von Hindernissen an der Decke des Verbrennungskanals in der Versuchsanlage

Ein Ziel dieser Arbeiten ist es, die Simulation der Verbrennung von geschichteten  $\text{H}_2$ -Verteilungen zu validieren. Da es bei der Simulation Pro47 Probleme gab, die gemessenen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten richtig zu simulieren, wurden Simulationen durchgeführt, bei denen eine homogene Anfangskonzentration von 23 vol.%  $\text{H}_2$  in einer Schicht von 60 cm vorliegt. Diese Anfangsbedingungen entsprechen dem Versuch 36 (Pro36) in der Versuchsmatrix von ProScience. Durch diese Vergleichsrechnungen kann überprüft werden in wie weit die starken Abweichungen von den Messwerten auf die  $\text{H}_2$ -Konzentrationsgradienten zurückzuführen sind, oder ob andere Faktoren (seitliches Venting, Vernachlässigung der Hindernisse an der Decke etc.) entscheidend sind.

In den in Abschnitt 7.3.2 und Abschnitt 7.3.3 beschriebenen Untersuchungen wurde immer davon ausgegangen, dass die Decke und die übrigen Wände „glatt“ sind ( $\text{BR} = 0$ ). Diskussionen mit Experimentatoren haben aber gezeigt, dass im „leeren“ Verbrennungskanal durchaus trotzdem zahlreiche „Hindernisse“ vorhanden sind (siehe Abb. 7.3-8), die z. B. zur Aufnahme größerer Bleche als querschnittsverengendes Hindernis dienen.

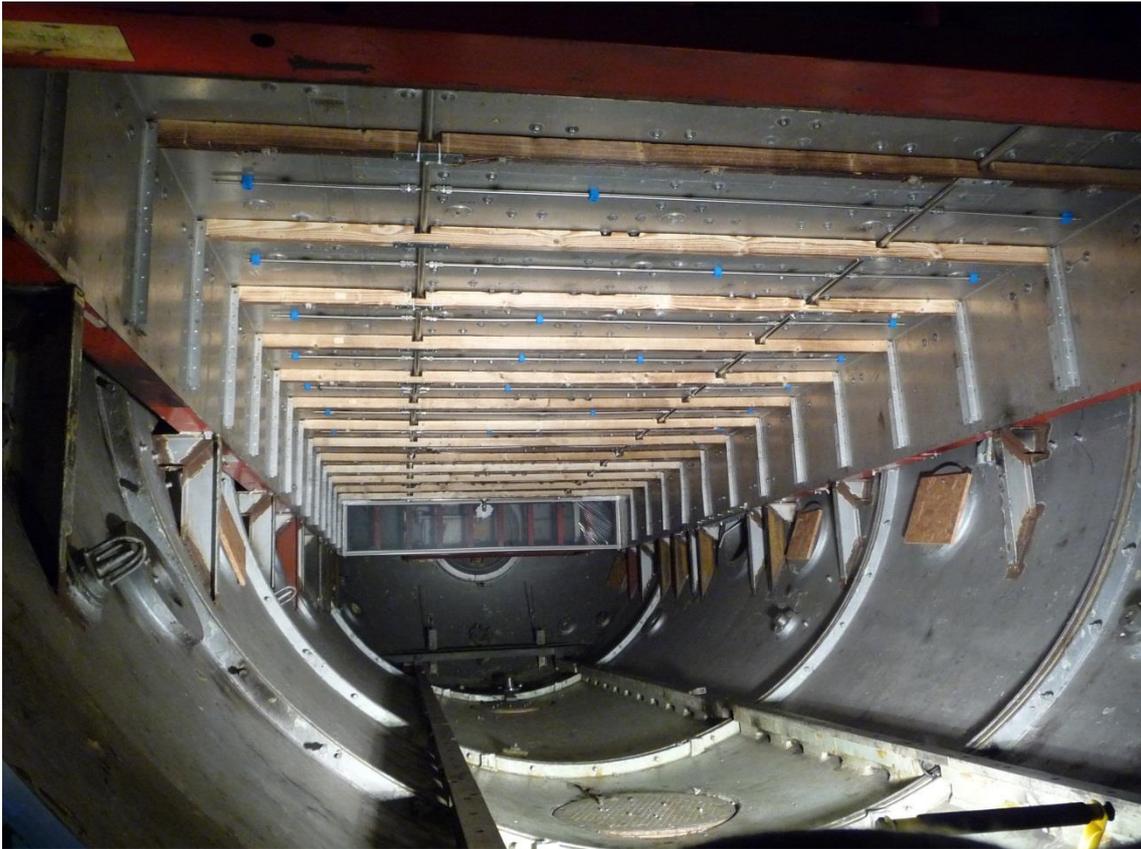


Abb. 7.3-8 Bild des Versuchsstands, erhalten in Email von Hr. Friedrich

Im Folgenden wird untersucht, wie sich die Berücksichtigung von Hindernissen generell auf die Simulationsergebnisse auswirkt. Die zahlreichen Hindernisse unterscheiden sich in Größe und Form (periodische Balken, kleine Rohre, Schraubenköpfe) und lassen sich in einer 2-dimensionalen Geometrie nicht vollständig darstellen. Ein vollständige und detaillierte Berücksichtigung aller Hindernisse macht eine 3-dimensionale Geometrie notwendig und wäre sowohl was die Gittererstellung betrifft als auch hinsichtlich des benötigten CFD-Gitters sehr aufwendig. Deshalb soll mit einer vereinfachten Hindernisanordnung untersucht werden ob und welchen Einfluss die Hindernisse auf das Simulationsergebnis haben. Es wurden nur Hindernisse berücksichtigt, die senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Flamme verlaufen. Es wurden 2 verschiedene Hinderniskonfigurationen untersucht: 14 große Hindernisse mit den Abmessungen 4 cm \* 6 cm (Sim. Hi) bzw. 3 cm \* 4 cm (Sim. Hib) und 16 kleine Hindernisse mit 2 cm \* 2 cm bzw. 1 cm \* 1 cm (Abb. 7.3-11).

Die Gitterstudie in Abschnitt 7.1 hat gezeigt, dass die Gitterfeinheit einen starken Einfluss auf die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung haben kann. Deshalb soll noch einmal mit der Geometrie der großen Hindernisse untersucht werden, wie sich die Git-

terfeinheit auf die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit auswirkt. Dazu wurden für die homogene H<sub>2</sub>-Schicht (Pro36) drei Simulationen durchgeführt. Eine verwendet ein gröberes Gitter mit etwa 48 000 Zellen, eine weitere etwa 144 000 Zellen und die dritte Simulation ein noch feineres Gitter mit ca. 423 000 Zellen.

Es zeigt sich wiederum, dass mit zunehmender Gitterfeinheit die Flammenausbreitung deutlich schneller ist (Abb. 7.3-12). Beim gröbsten Gitter wird nur eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von maximal ca. 16 m/s berechnet, beim feinsten Gitter wird dagegen eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit von max. ca. 52 m/s berechnet (bei  $y = 6$  m). Die Flammenausbreitung bei der Simulation mit dem feinsten Gitter ist dabei nochmals deutlich schneller als beim Gitter mit ca. 144 000 Zellen. Die starken Unterschiede zwischen diesen beiden Simulationen; bei denen die Zellgröße im Verbrennungsraum in beiden Dimensionen um einen Faktor 2 erhöht wurde, lassen wieder vermuten, dass selbst mit dem feinsten Gitter noch keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden konnte. Deshalb wäre eine weitere Gitterverfeinerung eigentlich notwendig, auf die aber aufgrund des damit verbundenen Rechenaufwands und aufgrund der großen Unsicherheit bzw. Ungenauigkeit bezüglich der Geometrie (sie lässt sich gar nicht exakt in 2-Dimensionen abzubilden) verzichtet wurde.

Bei der Simulation mit dem feinsten Gitter ist sowohl der Betrag als auch der Verlauf der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit vergleichbar mit den experimentellen Werten, wobei der Betrag der Geschwindigkeit im Experiment etwas größer war (Abb. 7.3-12). Berücksichtigt man die Unsicherheiten hinsichtlich der Geometrie (Annäherung durch 2-D, Form der Hindernisse) und die Limitierung hinsichtlich der Gitterfeinheit, so kann man von einer zufriedenstellenden Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation für den Versuch mit homogener Anfangskonzentration sprechen.

Die unterschiedlichen Ergebnisse zwischen Simulationen mit und ohne Hindernisse lassen sich erklären, wenn man die Flammenfronten und die Turbulenz miteinander vergleicht. Durch die Hindernisse wird die Strömungsgeschwindigkeit verändert. Die Form der Flammenfront ändert sich wobei sich auch die Fläche der Flammenfront vergrößert (Abb. 7.3-13, Abb. 7.3-14). Durch die Hindernisse wird die turbulente kinetische Energie erhöht. Während bei der glatten Decke nur unmittelbar an der Decke eine höhere turbulente kinetische Energie im Bereich vor der Flamme vorliegt, wird durch die Hindernisse in einem breiteren Bereich vor der Flamme eine höhere Turbulenz erzeugt. Diese Unterschiede bei der Turbulenz machen sich auch in der höheren turbu-

lenten Brenngeschwindigkeit bei der Simulation mit Hindernissen an der Decke bemerkbar (Abb. 7.3-15).

Die Simulationen, die von einer H<sub>2</sub>-Anfangskonzentration mit Gradienten ausgehen, berechnen deutlich niedrigere Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten (Abb. 7.3-12), obwohl im Experiment ähnliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten gemessen wurden. Aber auch hier zeigt sich eine Beschleunigung der Flamme durch die Hindernisse an der Decke. Auch für diesen Fall wurde eine Studie zur Gitterabhängigkeit der Simulationsergebnisse durchgeführt. Bei Pro47 ist die Gitterabhängigkeit ebenfalls stark ausgeprägt (Abb. 7.3-12). Erst bei einem Gitter von 1,46 Millionen Zellen wird eine deutliche Flammenbeschleunigung berechnet. Im Brennraum beträgt bei diesem Gitter die Größe einer Zelle ca. ( $\Delta x \sim 1.5 \text{ mm} - 5 \text{ mm}$ ).

Die starken Unterschiede zwischen der Simulation mit 0,42 Millionen Zellen und der mit 1,46 Millionen lassen wiederum vermuten, dass durch eine weitere Verfeinerung des Gitters eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden kann.

Als Ursache für das unterschiedliche Verhalten zwischen homogener Anfangskonzentration und H<sub>2</sub>-Anfangskonzentration mit Gradienten wurde die Vermischung des Gases vor der Flamme identifiziert (Abb. 7.3-16). Befinden sich an der Decke Hindernisse, so findet bereit vor Eintreffen der Flammenfront eine teilweise Durchmischung statt. Die Verbrennung findet deshalb fast immer bei niedrigeren H<sub>2</sub>-Konzentrationen statt (im oberen Bereich des Kanals), als die maximale H<sub>2</sub>-Anfangskonzentration in Deckenhöhe von 22,6 vol.%. Diese effektive Verringerung der maximalen H<sub>2</sub>-Konzentration wirkt der Flammenbeschleunigung durch Steigerung der Turbulenz entgegen, die durch die Hindernisse bewirkt wird. Bei zu grobem Gitter wird dieser Vermischungsprozess überschätzt, was zu einer deutlichen Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit führt.

Es ist bei der Beurteilung der Simulationsergebnisse zu berücksichtigen, dass ein sehr steiler H<sub>2</sub>-Gradient vorliegt. Die Dicke der brennbaren H<sub>2</sub>-Schicht beträgt nur ca. 30 cm innerhalb derer die H<sub>2</sub>-Konzentration von 22,6 vol.% auf unter 4 vol.% abfällt. Erschwerend ist dabei die Größe der Hindernisse von 6 cm Höhe. Ungenauigkeiten bei der Modellierung des Vermischungsvorgangs haben deshalb einen starken Einfluss auf die Flammenausbreitung. Um diesen genau berechnen zu können wird ein sehr feines Gitter benötigt. Zudem werden sich Fehler bei der Turbulenzmodellierung nicht nur über die turbulente kinetische Energie bemerkbar machen, sondern auch zu einer fehlerhaf-

ten  $H_2$ -Konzentration im Bereich der Flamme führen. Zudem kommt der exakten Berücksichtigung der Größe/Form der Hindernisse eine große Bedeutung für die Berechnung der Vermischung zu. Es ist eine exakte geometrische Abbildung der Hindernisse notwendig, vermutlich ist es dazu auch nötig, eine dreidimensionale Geometrie zu verwenden, da es auch eine Reihe von Hindernisse gibt, die nicht in einer 2 dimensionalen Geometrie angemessen berücksichtigt werden können (2 Rohre an der Decke parallel zur Brennrichtung, Schraubenköpfe, etc.). Dieses ist aber auf Grund des hohen Rechenaufwands nicht möglich.

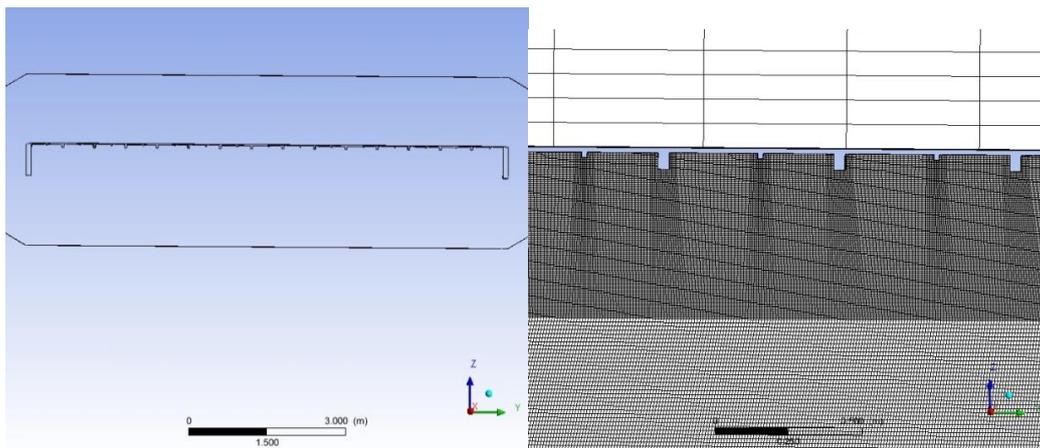


Abb. 7.3-9 CFD-Gitter bei Berücksichtigung von Hindernissen

GRS036:  $h = 60 \text{ cm}$ ,  $ch_2 = 23 \text{ Vol.-%}$ ,  $BR = 0 \%$ , kein Booster

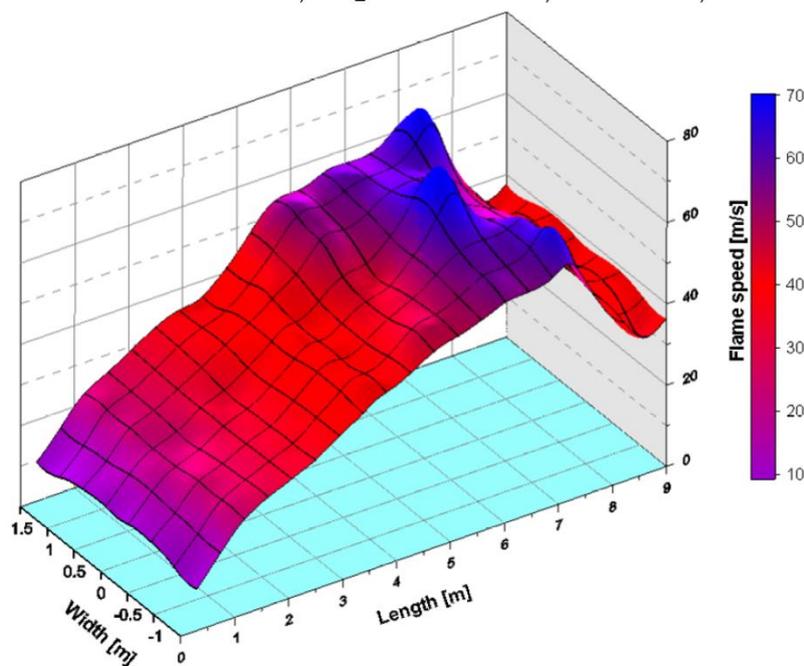


Abb. 7.3-10 Experimentell bestimmte Flammenankunftszeiten Pro36 /FRI11/

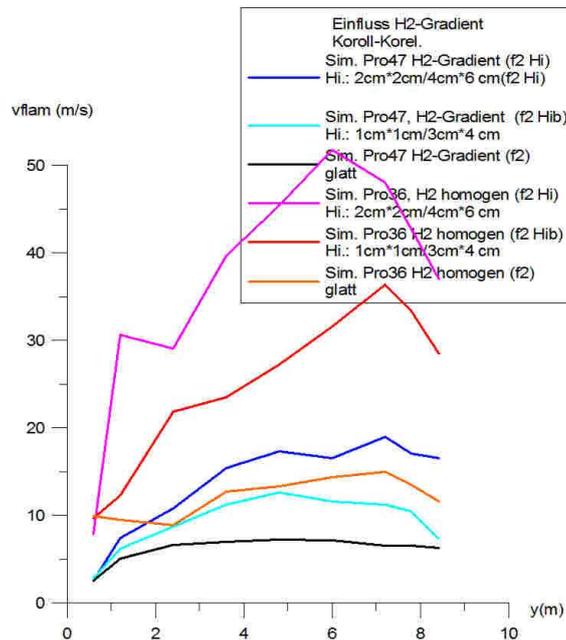


Abb. 7.3-11 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Berücksichtigung der Hindernisse bei Simulation der Versuche Pro47 und Pro36

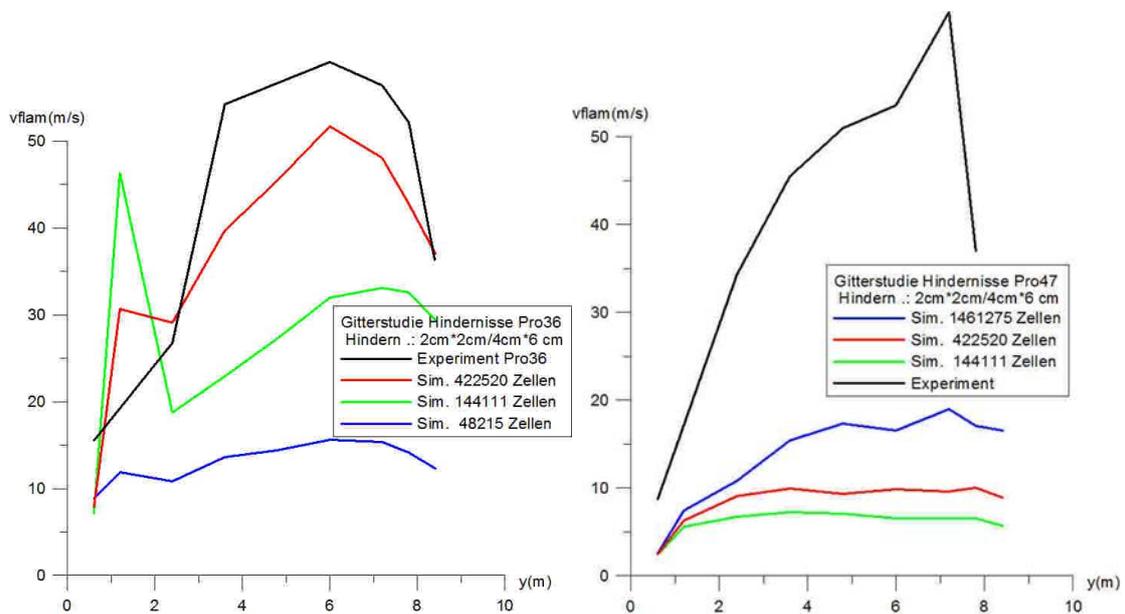


Abb. 7.3-12 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Berücksichtigung der Hindernisse bei der Simulation mit homogener  $H_2$ -Anfangskonzentration (Pro36, links) und  $H_2$ -Anfangskonzentration mit Gradienten (Pro47, rechts)

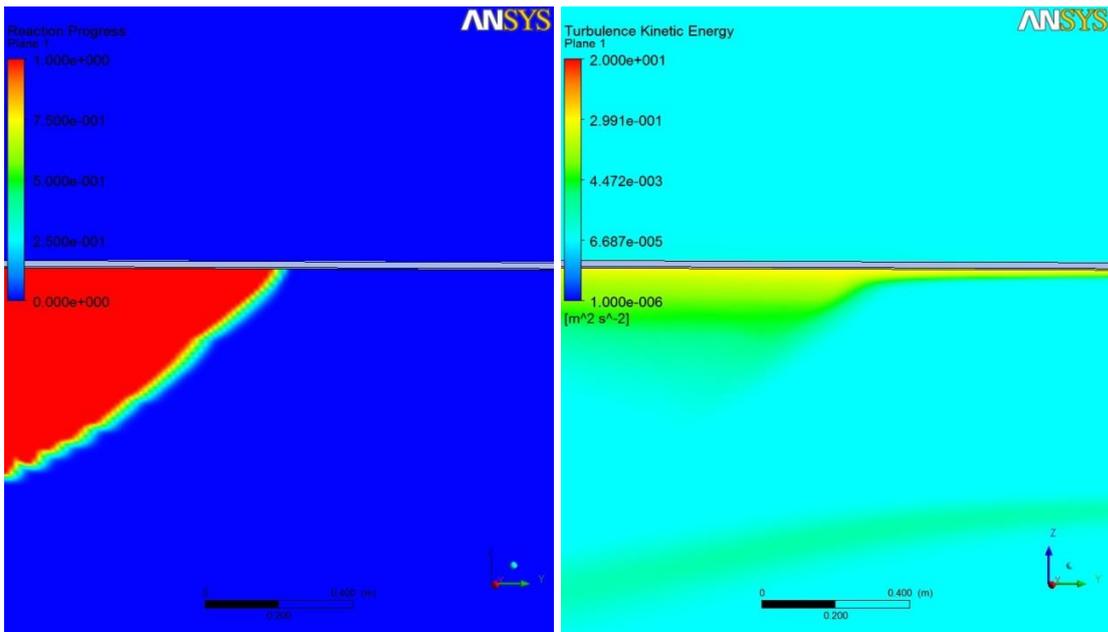


Abb. 7.3-13 Reaktionsfortschrittsvariable und turbulente kinetische Energie bei der Simulation ohne Hindernisse bei Pro36

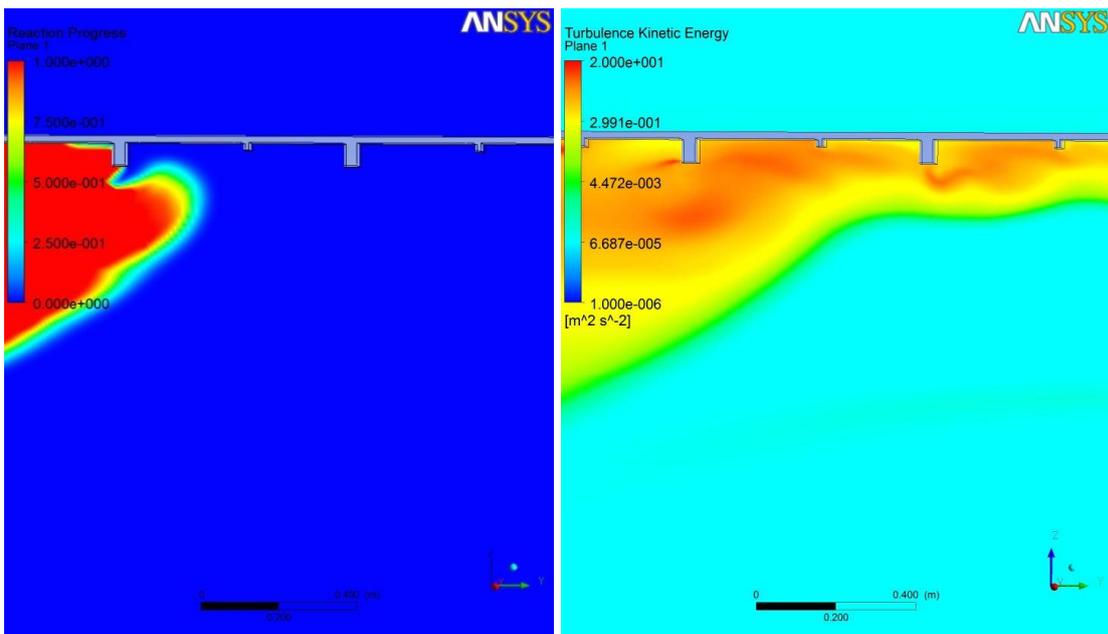


Abb. 7.3-14 Reaktionsfortschrittsvariable und turbulente kinetische Energie bei der Simulation mit Hindernissen bei Pro36

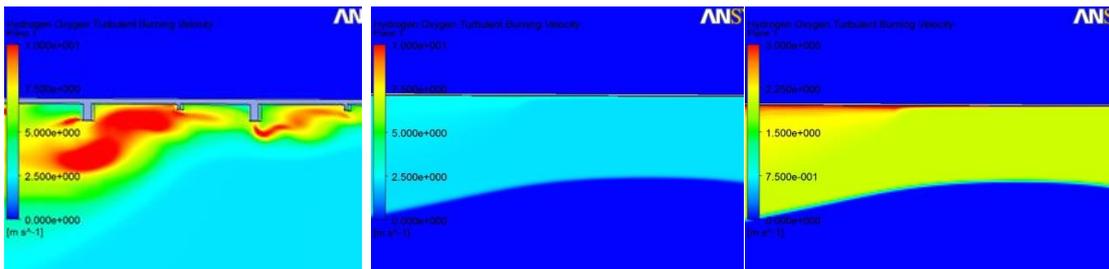


Abb. 7.3-15 Turbulente Brenngeschwindigkeit bei Pro36, links: bei Simulation mit Hindernissen, Mitte und rechts: Simulation ohne Hindernissen (bei unterschiedlicher Farbskala)

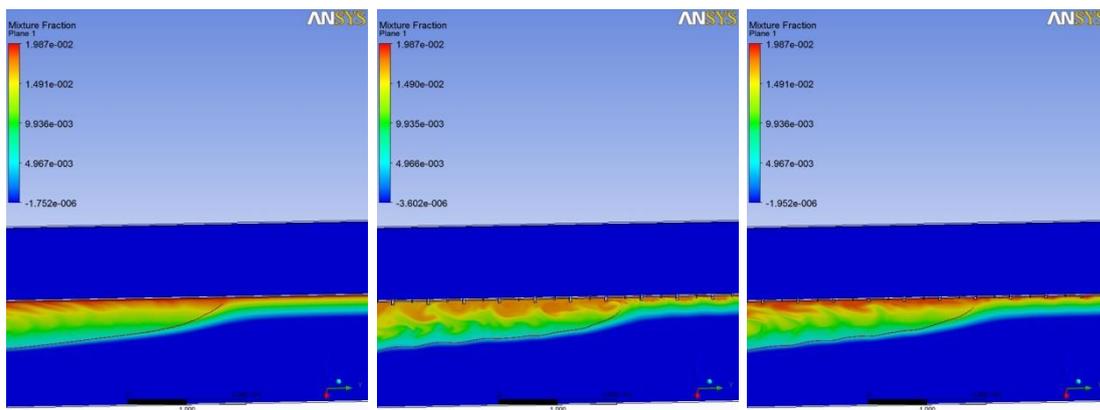


Abb. 7.3-16 Mischungsbruch in der Nähe der Flammenfront, Flammenfront durch rote Linie markiert, links: keine Hindernisse, Mitte: große Hindernisse (Hi), rechts: kleine Hindernisse (Hib)

### 7.3.5 Einfluss der $H_2$ -Anfangskonzentration bei Simulation mit Hindernissen

Die Untersuchungen im vorherigen Abschnitt 7.3.4 haben gezeigt, dass bei Berücksichtigung von Hindernissen an der Decke bereits vor der Flammenfront eine partielle Vermischung der  $H_2$ -Schichtung auftritt. Bei den bisherigen Rechnungen mit  $H_2$ -Schichtung wurde immer von der Spezifikation mit max. 22,6 vol.%  $H_2$  an der Decke mit einem Gradienten von 0,57 vol.%/cm ausgegangen. Im Experiment wurden vor der Verbrennung die  $H_2$ -Konzentrationen gemessen. Die Messwerte stimmen nur näherungsweise mit der Versuchsspezifikation überein (Abb. 7.3-17). Es wurde deshalb untersucht, ob bei Verwendung der gemessenen  $H_2$ -Konzentrationen als Startbedingung Unterschiede in der Flammenausbreitung auftreten. Es wurde deshalb eine Simulation mit der kleinen Hindernisgeometrie durchgeführt, bei der die gemessenen  $H_2$ -Konzentrationen als Startkonzentration verwendet wurden. Die mit dieser Ausgangs-

konzentration berechnete Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zeigt kaum Abweichungen zu der Simulation mit dem sonst verwendeten Gradientenansatz. Deshalb können die Unterschiede zwischen Simulation und Experiment nicht mit dieser leicht unterschiedlichen Anfangskonzentration erklärt werden.

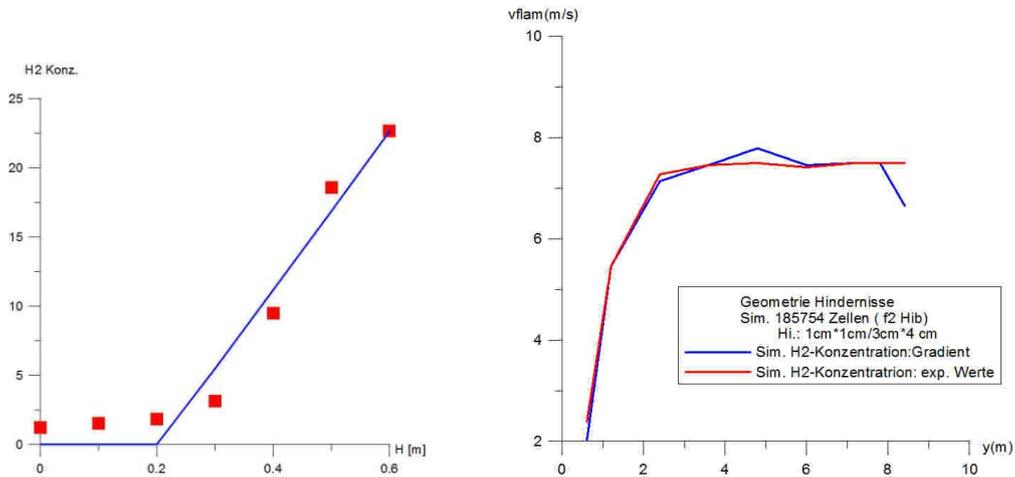


Abb. 7.3-17 H<sub>2</sub>-Anfangskonzentration (links) Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei unterschiedlicher H<sub>2</sub>-Anfangskonzentration (rechts)

### 7.3.6 Einfluss der Korrelation für turbulente Brenngeschwindigkeit

Beim Burning-Velocity Modell wird die turbulente Brenngeschwindigkeit mit empirischen Korrelationen beschrieben. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der Abhängigkeit von den physikalischen Größen ( $v_{lam}$ , turb. kin. Energie etc.) teilweise deutlich (siehe auch Kapitel 6.1). Im Folgenden wird untersucht, in wie weit die Simulationsergebnisse von der Wahl der Korrelation für die turbulente Brenngeschwindigkeit abhängen. Deshalb werden die Simulationen der Versuche Pro36 und Pro47 sowohl mit der Annahme von glatten Wänden als auch mit der Konfiguration „große Hindernisse“ mit der Zimont-Korrelation wiederholt. Dabei werden die Standardparameter für die H<sub>2</sub>-Verbrennung ( $A = 0.6$ ) verwendet. Für diese Parameterstudie wurde ein Gitter mit 144 000 Zellen verwendet. Aufgrund begrenzter CPU – Ressourcen konnte keine feinere Diskretisierung gewählt werden.

Vergleicht man die Ergebnisse, die mit den beiden Korrelationen erzielt werden, so fällt auf, dass mit der Zimont-Korrelation in allen Fällen eine langsamere Flammenausbreitung berechnet wird. Das qualitative Verhalten wird mit beiden Korrelationen aber ähnlich vorhergesagt. Mit beiden Korrelationen ergibt sich bei einer homogenen Mischung

im Fall von Hindernissen an der Decke eine deutlich schnellere Flammenausbreitung. Bei der geschichteten Mischung wird dagegen kein solcher Effekt der Hindernisse beobachtet, was vermutlich auf die zu grobe räumliche Diskretisierung zurückzuführen ist (siehe Abschnitt 7.3.4).

Es gibt aber auch kleine Unterschiede im qualitativen Verhalten. Im Fall einer homogenen Mischung und glatter Wände findet bei der Zimont-Korrelation eine geringfügige Verlangsamung der Flamme im Bereich  $4\text{ m} < y < 7\text{ m}$  statt, während bei der Koroll-Korrelation eine leichte Flammenbeschleunigung berechnet wird. Bei der geschichteten  $\text{H}_2$ -Verteilung führen bei der Zimont-Korrelation die Hindernisse sogar zu einer Absenkung der Ausbreitungsgeschwindigkeit, während mit der Koroll-Korrelation für die glatte Decke und die Decke mit Hindernissen kaum unterschiedliche Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten berechnet werden. Es stellt sich mit beiden Korrelationen eine ähnliche Form der Flammenfront beim Durchlaufen des Verbrennungskanals ein (siehe Abb. 7.3-19). Es ist zu beachten, dass wegen der begrenzten Anzahl an Zwischenergebnissen, die gespeichert werden, die Flamme in beiden Simulationen nicht die exakt gleiche Position hat). Die Unterschiede bei Verwendung der Koroll und der Zimont-Korrelation lassen sich mit den unterschiedlichen Abhängigkeiten von den physikalischen Parametern erklären (z. B. Koroll:  $v_{\text{turb}} \sim v_{\text{lam}}$  bzw. Zimont:  $v_{\text{turb}} \sim v_{\text{lam}}^{0.5}$ ).

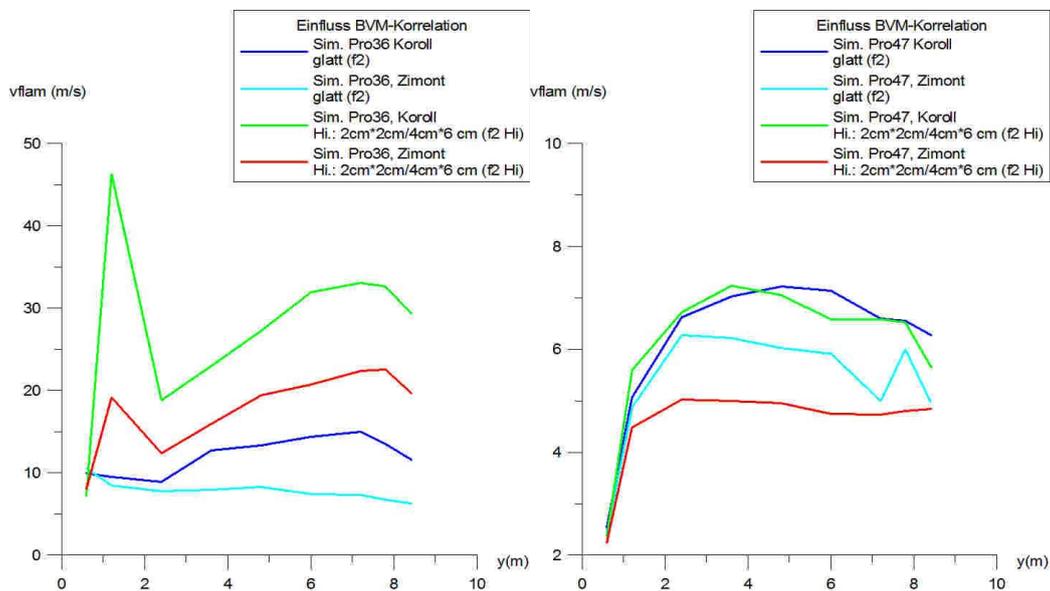


Abb. 7.3-18 Flammenausbreitungsgeschwindigkeit bei Verwendung der Koroll- und der Zimont-Korrelation. Links: Versuch mit homogener Mischung (Pro36); rechts: geschichtete  $\text{H}_2$ -Verteilung (Pro47)

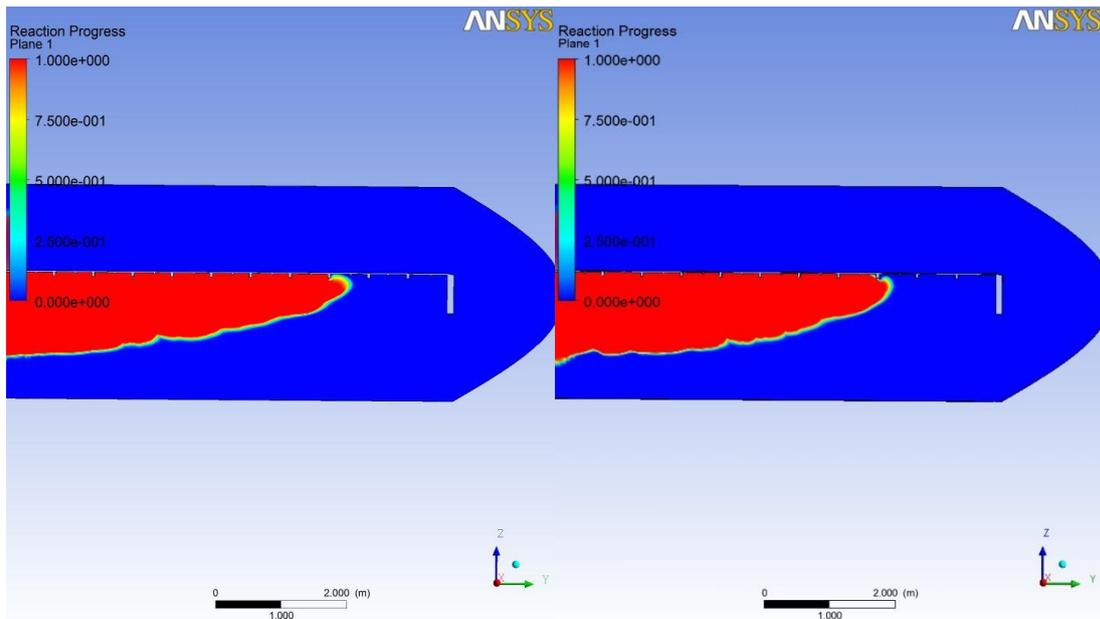


Abb. 7.3-19 Reaktionsfortschrittsvariable, links Simulation mit Zimont-Korrelation, rechts: mit Koroll-Korrelation

#### 7.4 Schlussfolgerungen

Mit dem Burning-Velocity Modell und der Koroll-Korrelation bzw. Zimont-Korrelation wurden die von ProScience durchgeführten Versuche Pro36 und Pro47 nachgerechnet. Bei den Simulationen lieferten die Koroll- und die Zimont-Korrelation qualitativ ähnliche Ergebnisse. Bei den hier betrachteten Versuchen führt die Koroll-Korrelation zu einer schnelleren Flammenausbreitung.

Ein 2-dimensionales Testbeispiel wurde definiert, das die Versuchsbedingungen des Experiments Pro36 vereinfacht abbildet. Anhand einer Gitterstudie für diesen einfachen Testfall wurde gezeigt, dass selbst ein sehr feines CFD-Gitter (Zellgröße 1 mm \* 1 mm) zu keiner gitterunabhängigen Lösung führt. Auch die Nachrechnung der Versuche Pro36 und Pro47 benötigt ein sehr feines CFD-Gitter und ist daher nur in einer 2-dimensionalen Geometrie möglich. Eine zu grobe Diskretisierung hat zu einer deutlichen Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit geführt.

Der Versuch Pro36 kann zufriedenstellend nachgerechnet werden. Voraussetzung ist, dass die Hindernisse, die sich im Versuch an der Decke befinden, zumindest näherungsweise berücksichtigt werden. Diese Hindernisse modifizieren den Verlauf der

Flammenfront und erhöhen die Turbulenz in einem breiten Bereich auch vor der Flamme. Dadurch wird die Flammenausbreitung beschleunigt.

Trotz Berücksichtigung der Hindernisse wird bei der Simulation von Pro47 die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deutlich unterschätzt, wobei auch bei diesem Experiment die Berücksichtigung der Hindernisse zu einer deutlich schnelleren Flammenausbreitung führt. Ursache für das unterschiedliche Verhalten von Pro36 und Pro47 in der Simulation ist, dass in der Simulation mit einer inhomogenen  $H_2$ -Schicht schon vor Eintreffen der Flamme eine teilweise Vermischung stattfindet und die Verbrennung daher bei einer niedrigeren max.  $H_2$ -Konzentration erfolgt. Mögliche Ursachen für die Abweichungen können u. a. ein zu grobes CFD-Gitter, eine ungenaue Abbildung der Hindernisse und eine ungenaue Turbulenzmodellierung sein. Die Arbeiten dazu werden fortgesetzt.

## **8 Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX (AP 3)**

Zur Simulation der Gasverteilung im Sicherheitseinschluss hat das Forschungszentrum Karlsruhe (KIT) das ursprünglich in Los Alamos begonnene Programm GASFLOW übernommen und entwickelt es seit 1994 eigenständig weiter /TRA08/. GASFLOW ist ein dreidimensionaler Finite-Volumen-Code zur Beschreibung der Fluidynamik in Containments von Kernkraftwerken. Hierbei werden die Druck- und Temperaturverteilung, Kondensations- und Verdampfungsvorgänge, Turbulenz, Wärmetransport, chemische Reaktionen sowie Gegenmaßnahmen (Rekombinatoren) durch entsprechende Modelle in GASFLOW berücksichtigt. Größere Volumen wie z.B. Containments werden durch ein verhältnismäßig grobes Gitter abgebildet. Eine Parallelisierung der Berechnungen ist mit GASFLOW momentan (noch) nicht möglich.

### **8.1 Einleitung**

Die Leistungsfähigkeit der CFD-Programme GASFLOW und CFX soll im Rahmen dieses Arbeitspunktes miteinander verglichen werden. Hierfür sollen die Programme anhand der folgenden Vergleichskriterien miteinander verglichen werden:

- Übereinstimmung von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten
- Sensitivität auf Gitterveränderungen (Gitterunabhängigkeit, Diskretisierungsfehler)
- Berechnungsdauer.

Hierbei sollte insbesondere der Umgang von GASFLOW mit größeren Netzstrukturen im Fokus der Untersuchung stehen. Der Vergleich fand anhand der Experimente TH-2 (THAI-Anlage), SETH 2.1 (Panda-Anlage) und VANAM M3 (Battelle Modell Containment) statt und wird im Folgenden näher erläutert.

### **8.2 THAI Versuch TH-2**

Der THAI-Versuch TH-2 wurde von der GRS mit GASFLOW vom KIT (Karlsruher Institut für Technologie) nachgerechnet. Eine genauere Beschreibung des TH-2 Experimentes findet sich bereits in /SCH10/ und eine Beschreibung der CFX-Rechnung findet

sich im Abschnitt 2.2.4, weshalb im Folgenden i. W. nur auf die Details der GASFLOW-Rechnung eingegangen wird. In

Tab. 8.2-1 findet sich eine Gegenüberstellung der verwendeten Berechnungsparameter. Das Gitter ist in GASFLOW bewusst grober gehalten.

Tab. 8.2-1 Infobox THAI TH-2

<b>Experiment</b>	<b>THAI TH-2</b>	
<b>Phänomene</b>	<b>Kondensation</b>	
<b>Software</b>	<b>GASFLOW</b> (mittleres Netz)	<b>CFX</b> (mit ANSYS-Modell)
<b>Elementzahl</b>	77 824 Elemente	337 616 Elemente
<b>Turbulenzmodell</b>	k-epsilon	SST
<b>Wärmestrahlungsmodell</b>	Ohne	Discrete Transfer / Gray / 64 Strahlen
<b>Kondensationsmodell</b>	GASFLOW Standard-Modell	ANSYS-Wand & GRS-Volumenkondensation
<b>Konvergenz</b>	Epsilon < 1,0 e-5	RMS < 1,0 e-4
<b>CFX-Version</b>	-	14.0

### 8.2.1 Vergleich der Simulationsergebnisse

In Abb. 8.2-1 wird ein Berechnungsergebnis aus GASFLOW mit einem Berechnungsergebnis aus CFX verglichen. Es ist links und rechts jeweils der Dampfanteil (in vol.%) im THAI-Behälter zum Zeitpunkt  $t = 200$  s dargestellt. Das CFX Ergebnis zeigt wesentlich stärkere zeitliche Oszillationen bzw. Turbulenzen, während das GASFLOW Ergebnis wesentlich symmetrischer ist. Die Dampfeinspeisung im TH-2 Experiment besteht aus einem kreisförmigen Rohr mit insgesamt 19 Bohrungen mit einem Durchmesser von 8 mm (siehe Abb. 8.2-2). Im CFX-Netz konnte diese Einspeisegeometrie detailliert abgebildet werden; dieses war mit dem GASFLOW-Netz nicht möglich. Dieser Unterschied in der Einspeisegeometrie ist auch ein Grund für die unterschiedlichen Gasverteilungen in CFX und in GASFLOW.

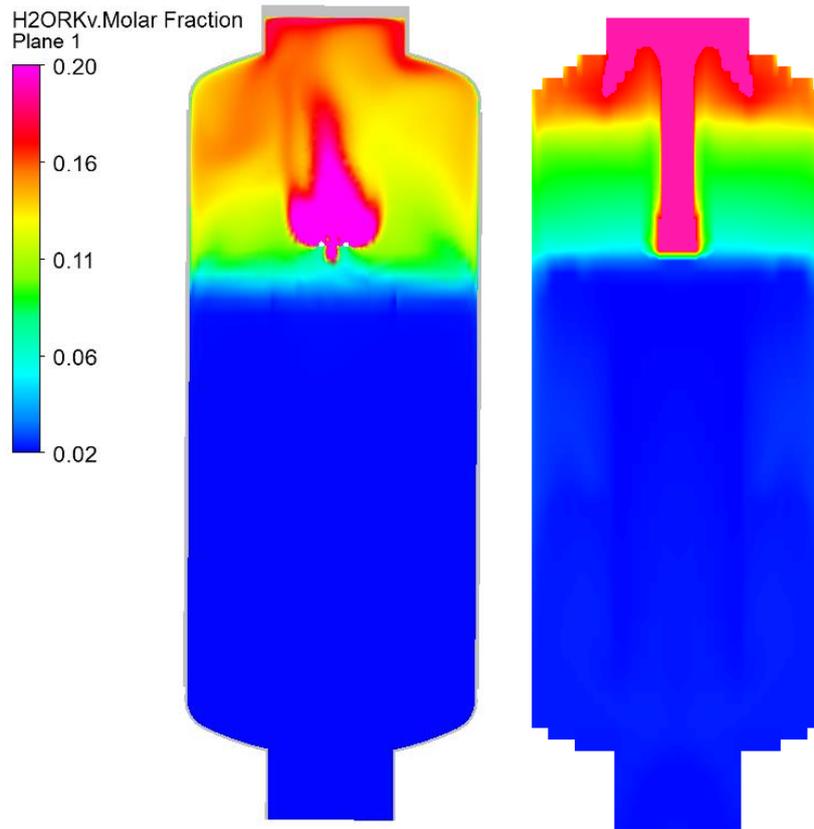


Abb. 8.2-1 Dampfkonzentration bei  $t = 200$  s (links CFX, rechts GASFLOW)

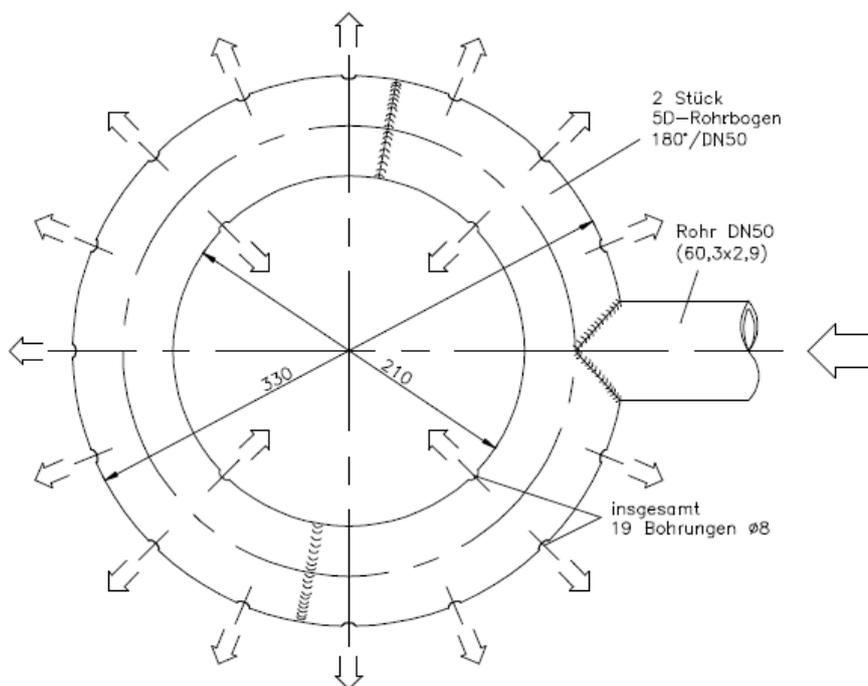


Abb. 8.2-2 Dampfeinspeisung beim TH-2 Experiment (Bildquelle: /KAN03/)

Im Rahmen einer Gitterstudie wurden drei unterschiedlich feine Randgitter untersucht (Details siehe nächstes Kapitel). Da die Software keine Angaben über die Zulässigkeit/Qualität von Randgittern macht (z. B.  $y^+$ -Werte), konnte nicht eindeutig ausgesagt werden, welches der Gitter zulässig bzw. qualitativ am besten ist. Für den folgenden Vergleich mit experimentellen Daten wurden deshalb die am besten passenden GASFLOW Ergebnisse der Gitterstudie ausgewählt (mittleres Gitter).

In Abb. 8.2-3 wird der mit GASFLOW und der mit CFX berechnete Druckverlauf im THAI-Behälter mit dem experimentellen Ergebnis verglichen. Beide Simulationsrechnungen zeigen einen sehr ähnlichen Druckverlauf. Hierbei liegt sowohl die GASFLOW-Berechnung als auch die CFX-Berechnung etwas unterhalb der experimentellen Werte. Insgesamt sind die Abweichungen vom Experiment aber als eher gering einzuschätzen.

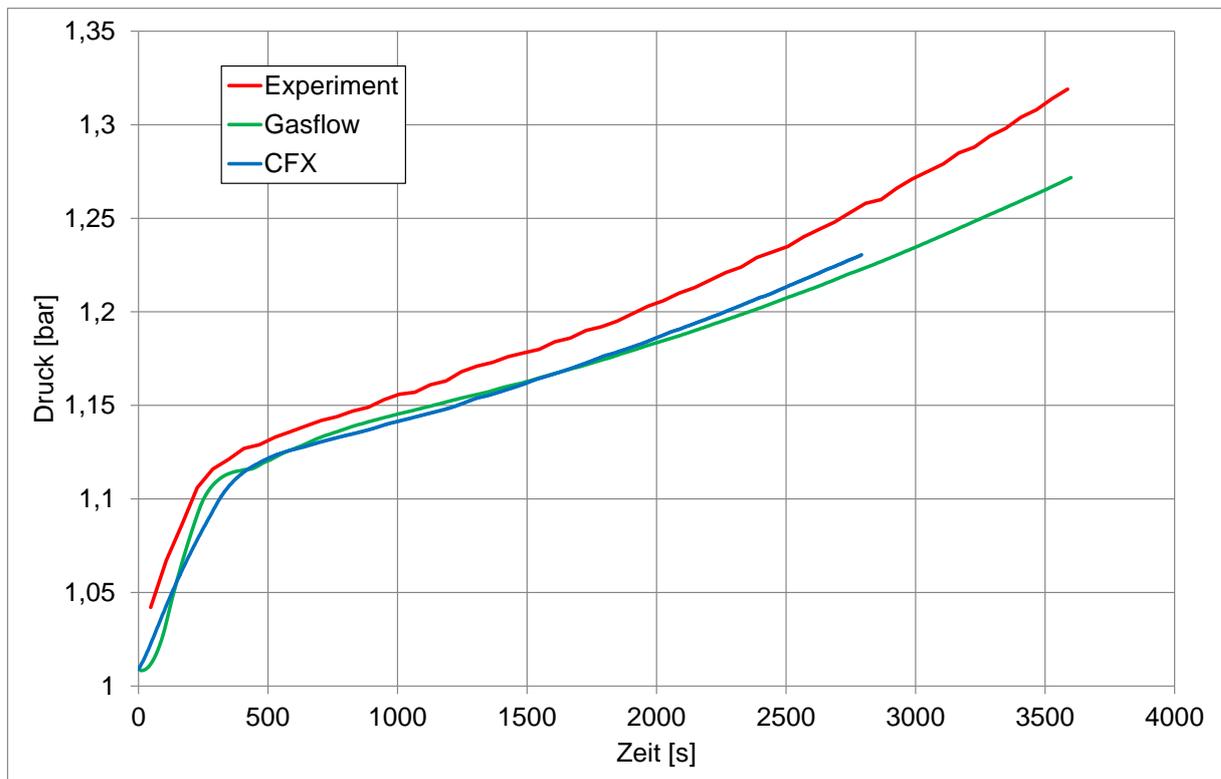


Abb. 8.2-3 Vergleich des berechneten und gemessenen Druckverlaufs im THAI-Behälter

In Abb. 8.2-4 ist der Temperaturverlauf im oberen THAI-Behälter (in 7,7 m Höhe) dargestellt. Die Temperaturen werden von der CFX-Rechnung etwas überschätzt, während die GASFLOW-Rechnung eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten zeigt. Beim Temperaturverlauf in mittlerer Höhe (6,3 m) zeigt sich ein anderes

Verhalten (siehe Abb. 8.2-5). Hier liegt die CFX-Rechnung jetzt deutlich zu niedrig, während die GASFLOW-Rechnung wiederum etwas näher an den experimentellen Werten liegt. In Abb. 8.2-6 ist der Temperaturverlauf im unteren THAI-Behälter dargestellt (in 3,5 m Höhe). Hier ändert sich wenig am Temperaturniveau; dieses wird von beiden Simulationen richtig wiedergegeben.

Während der Druckverlauf von beiden Programmen (CFX und GASFLOW) nahezu gleich berechnet wird, zeigt sich bei den Temperaturberechnungen eine stärkere Schichtung in CFX als in der GASFLOW-Berechnung. Eine mögliche Ursache für die unterschiedliche Dampfverteilung ist die unterschiedliche Modellierung der Einspeisegeometrie. Obwohl sie in der CFX-Rechnung detaillierter bzw. realistischer abgebildet wurde, liegen die Daten für die Temperaturschichtung bei der GASFLOW-Berechnung näher an den experimentellen Werten.

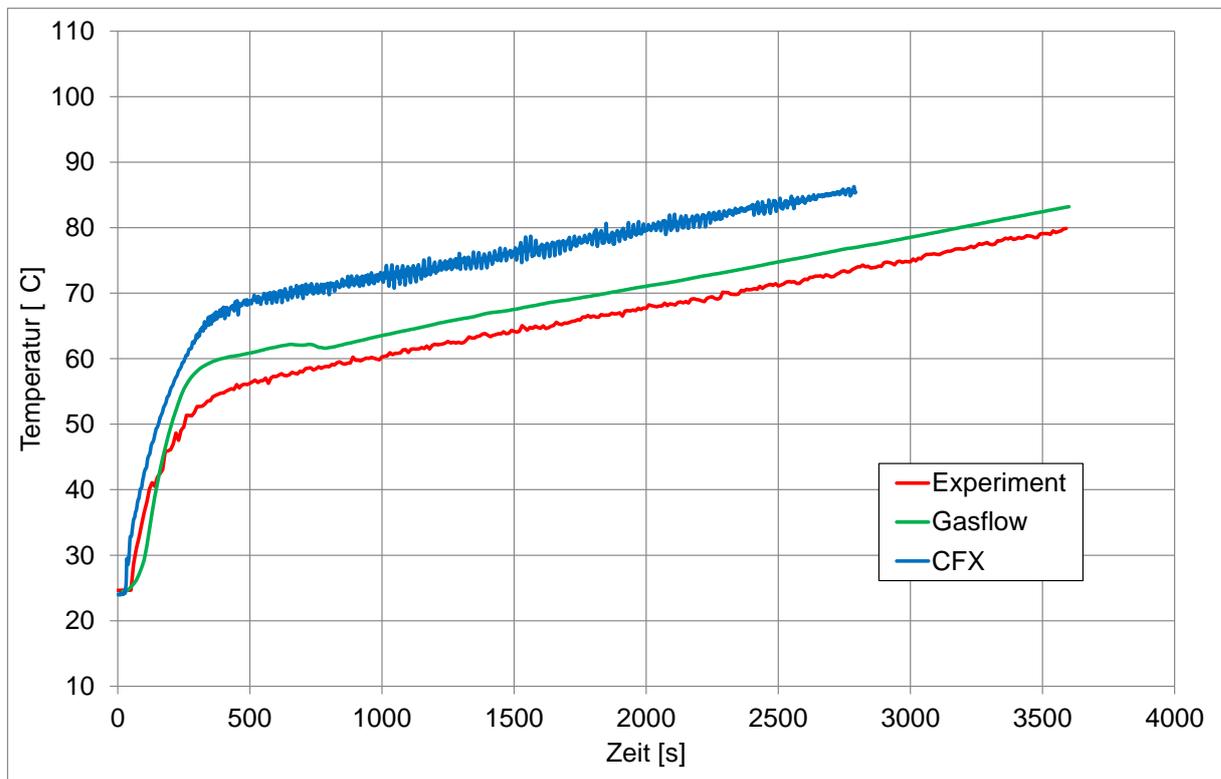


Abb. 8.2-4 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF77H07 (Höhe 7,7 m)

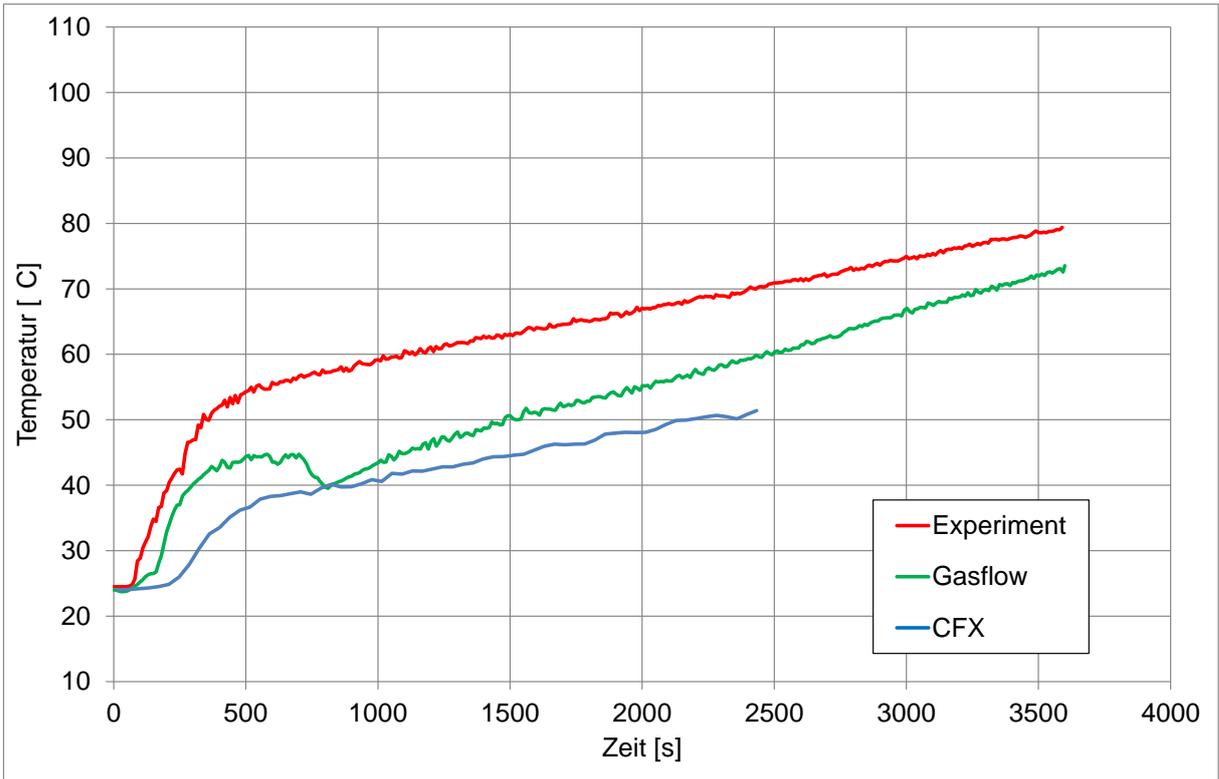


Abb. 8.2-5 Temperaturverlauf an der Messstelle DTF63H07 (Höhe 6,3 m)

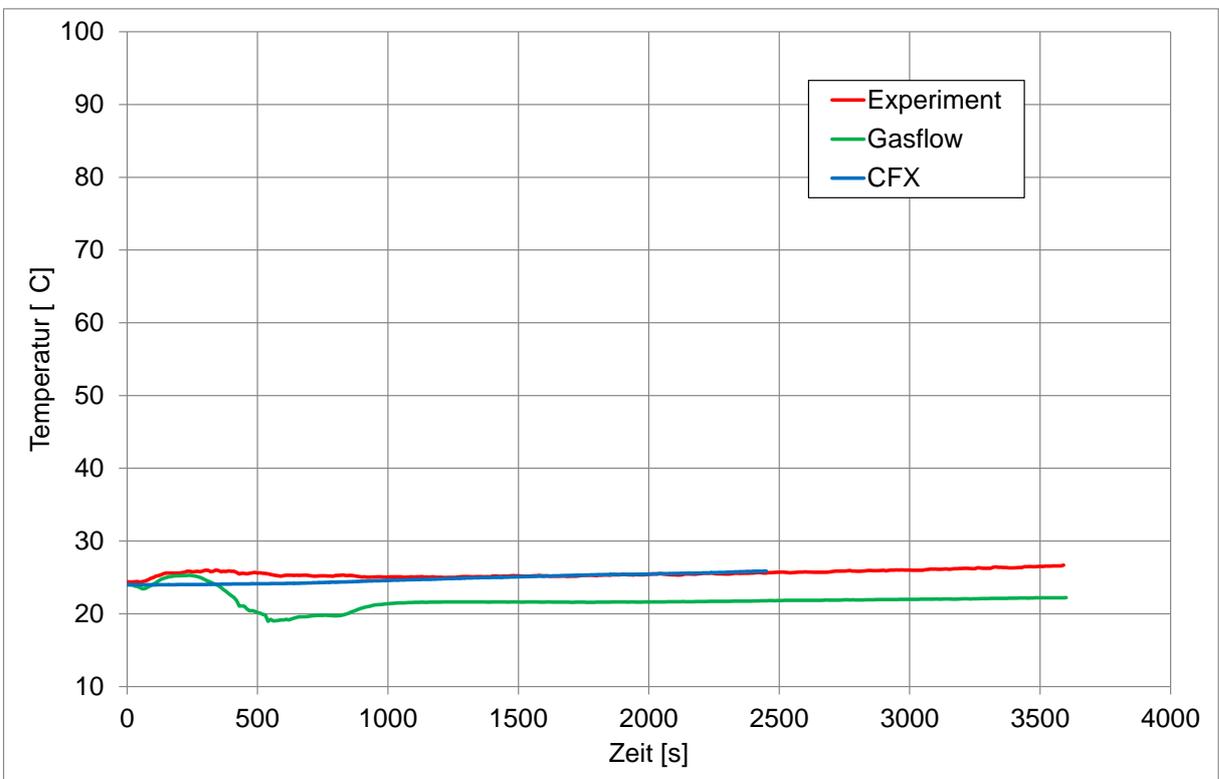


Abb. 8.2-6 Temperaturverlauf an der Messstelle CTF35H03 (Höhe 3,5 m)

## 8.2.2 Analyse der Gittersensitivität

Um den Einfluss des Rechengitters auf die (GASFLOW-)Simulationsergebnisse zu untersuchen, wurden drei Berechnungen mit unterschiedlich feinen Gittern durchgeführt (siehe Tab. 8.2-2). Dabei wurde das Gitter im Randbereich des THAI-Behälters in der Nähe der Wand (aber noch in der Gasphase) verfeinert. Das GASFLOW-Netz und - in Vergrößerung - auch der Randbereich, sind in Abb. 8.2-7 dargestellt. Die drei unterschiedlichen Netze haben am Rand eine Elementbreite von 8,7 cm (grob), 2,9 cm (mittel) und 0,8 cm (feines Netz).

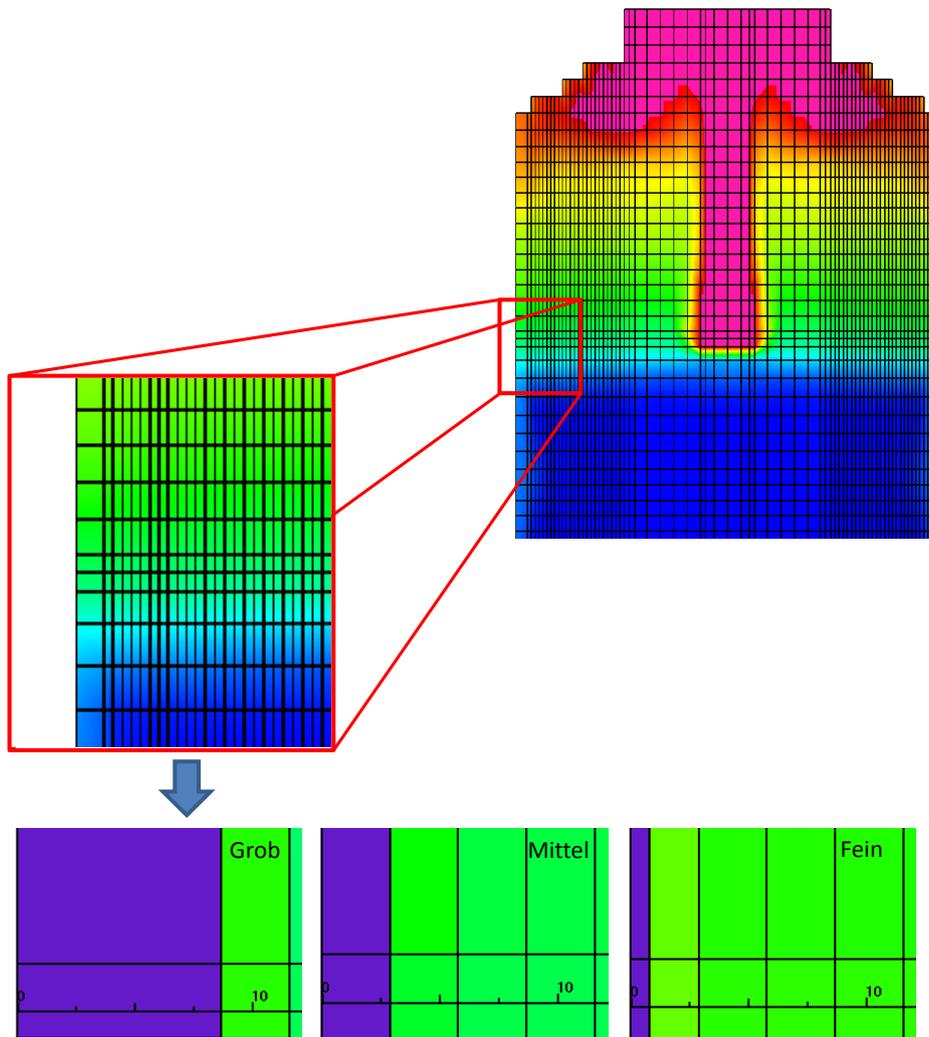


Abb. 8.2-7 Unterschiedliche Randnetze für die Gitterstudie (unten ist das Randelement jeweils blau/violett eingefärbt)

Tab. 8.2-2 Variationsrechnungen mit GASFLOW

<b>Turbulenzmodell</b>	k-epsilon		
<b>Gitter</b>	360° Modell / Zylindrische Koordinaten		
<b>Gitterfeinheit (r x φ x z)</b>	Grob 30 x 32 x 76 = 72.960 Elemente	Mittel 32 x 32 x 76 = 77.824 Elemente	Fein 33 x 32 x 76 = 80.256 Elemente
<b>Breite Randelement:</b>	8,7 cm	2,9 cm	0,8 cm

In Abb. 8.2-8 wird gezeigt, welchen Einfluss die Netzveränderungen auf den Druckverlauf im THAI-Behälter haben. Hier zeigt sich ein deutlicher Einfluss der Netzfeinheit. Je größer der Randbereich aufgelöst ist, desto höher ist der berechnete Druck. Von diesen drei Berechnungen passt die blaue Kurve (mittlere Netzfeinheit) am besten zu den experimentellen Ergebnissen.

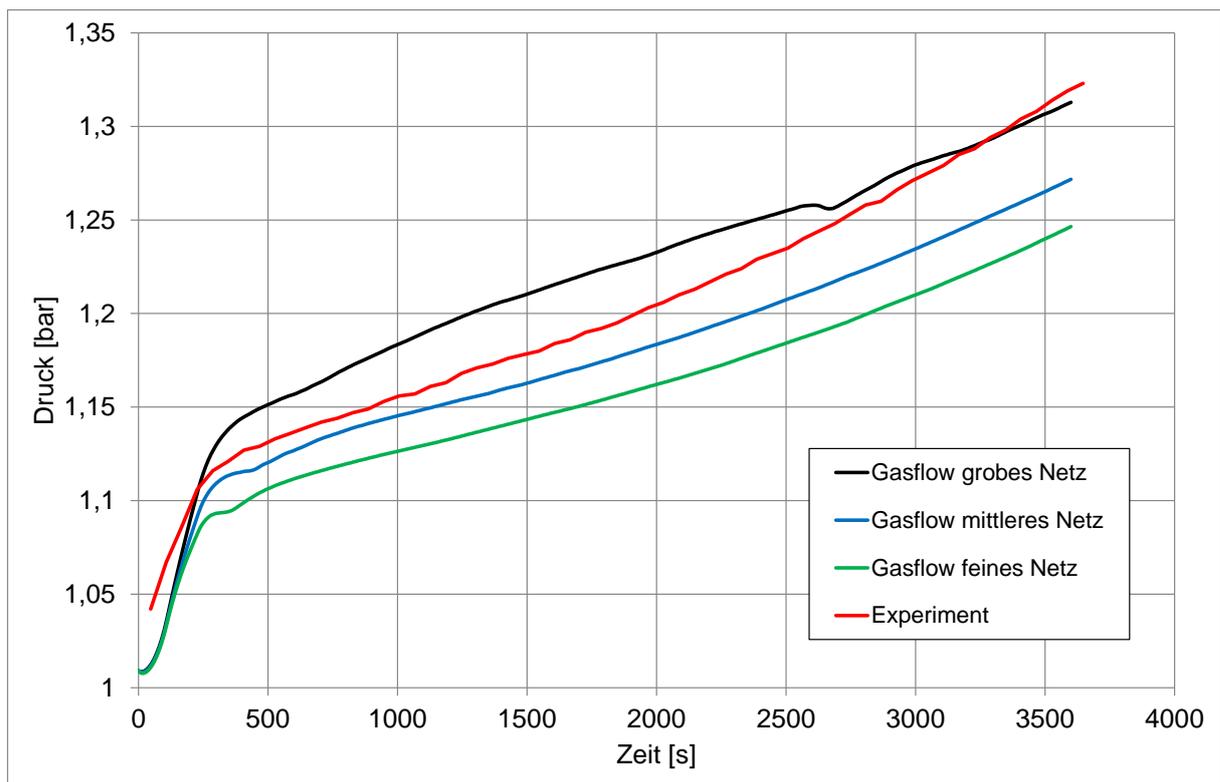


Abb. 8.2-8 Druckverlauf für unterschiedlich feine Netze

In den Abbildungen Abb. 8.2-9 bis Abb. 8.2-11 ist die Abhängigkeit der berechneten Temperaturen (in unterschiedlichen Höhen) von der Gitterfeinheit dargestellt. Grundsätzlich führt ein gröberes Netz zu höheren Temperaturen. Während im oberen und unteren THAI-Behälter die Unterschiede relativ gering sind (siehe Abb. 8.2-9 und Abb. 8.2-11) ist der Unterschied im mittleren Bereich des THAI-Behälters ziemlich deutlich (hier liegt die Grenzfläche Dampf/Luft). Die unterschiedliche Netzdiskretisierung hat also einen Einfluss auf den Wärmeübergang bzw. vielleicht auch auf die Kondensation an der Grenzfläche Gas/Wand. Ein gröberes Netz führt zu einem schlechteren Wärmeaustausch vom Gas in die Wand. Dieser Einfluss macht sich sowohl in den Temperaturen als auch im Druck bemerkbar.

Grundsätzlich muss bei GASFLOW der Temperatur- bzw. Konzentrationsgradient an den Wänden nicht räumlich detailliert aufgelöst werden. Dazu gibt es in GASFLOW Wandfunktionen, die bei einem gröberem Netz das Verhalten an der Grenzfläche simulieren. Allerdings hat die Anwendung der Wandfunktionen gewisse Grenzen. Laut Entwickler ist die Verwendung von Wandfunktionen für sehr kleine Zellen in Wandnähe mit GASFLOW nicht zulässig. Vielmehr sollte die Zellweite immer groß genug gewählt werden, so dass sie in der so genannten „Buffer Zone“ liegt /Roy12/. Leider kann GASFLOW keine Angaben dazu machen, ob die Gitterweite aktuell im zulässigen Bereich liegt. Hierbei könnte z. B. die Ausgabe von  $y^+$ -Werten analog zu anderen Berechnungsergebnissen dem Nutzer eine Hilfe sein. Dieses könnte durch die Erweiterung der Ausgabedatei realisiert werden.

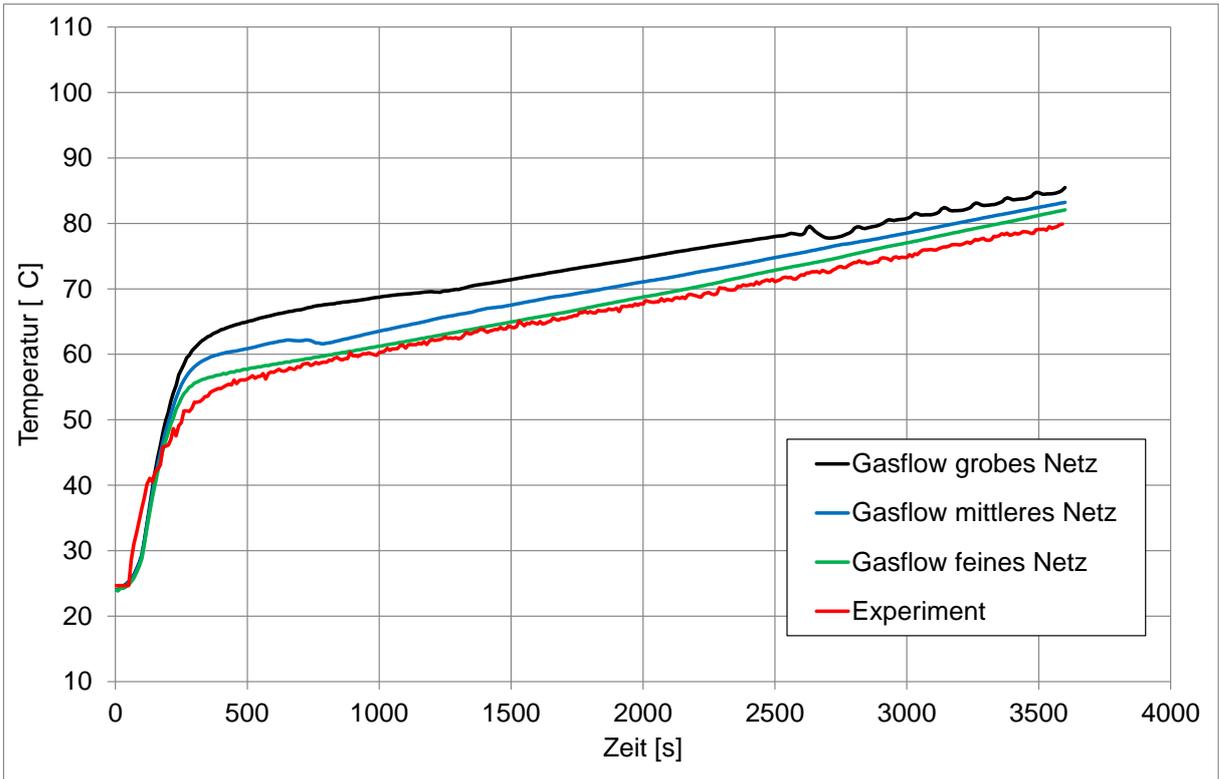


Abb. 8.2-9 Temperatur in 7,7 m Höhe

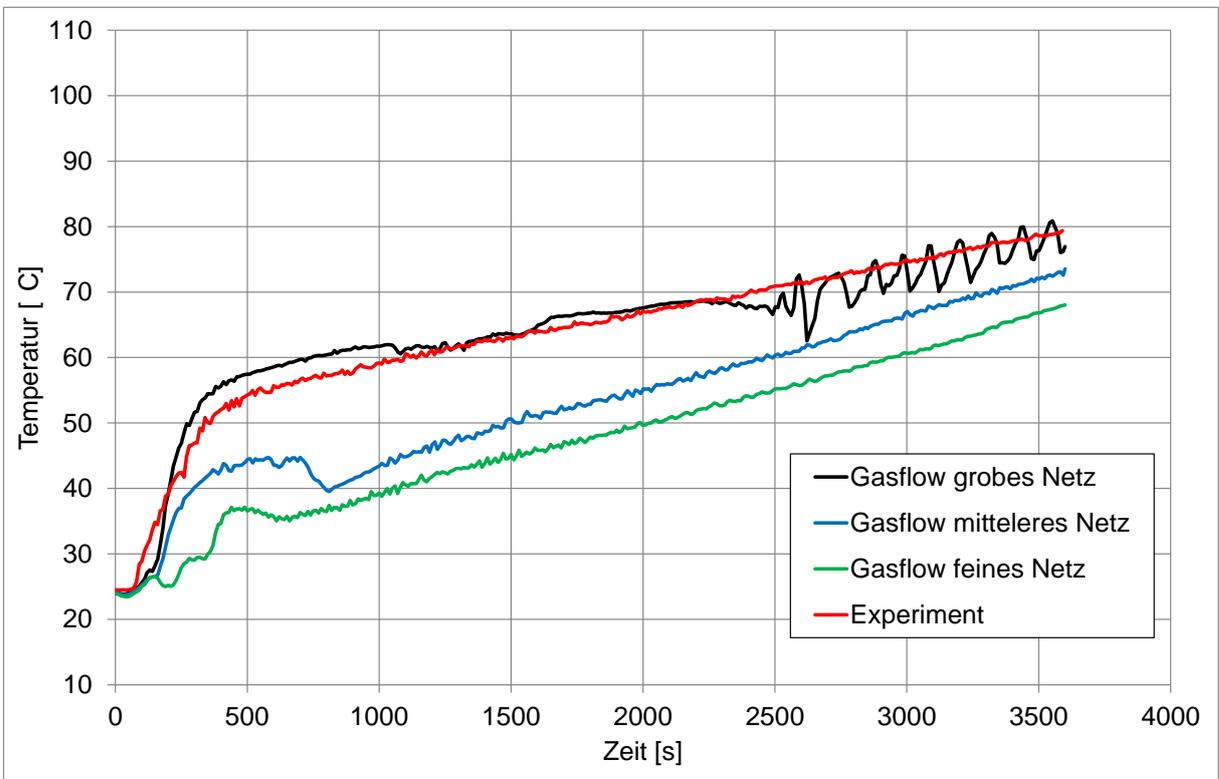


Abb. 8.2-10 Temperatur in 6,3 m Höhe

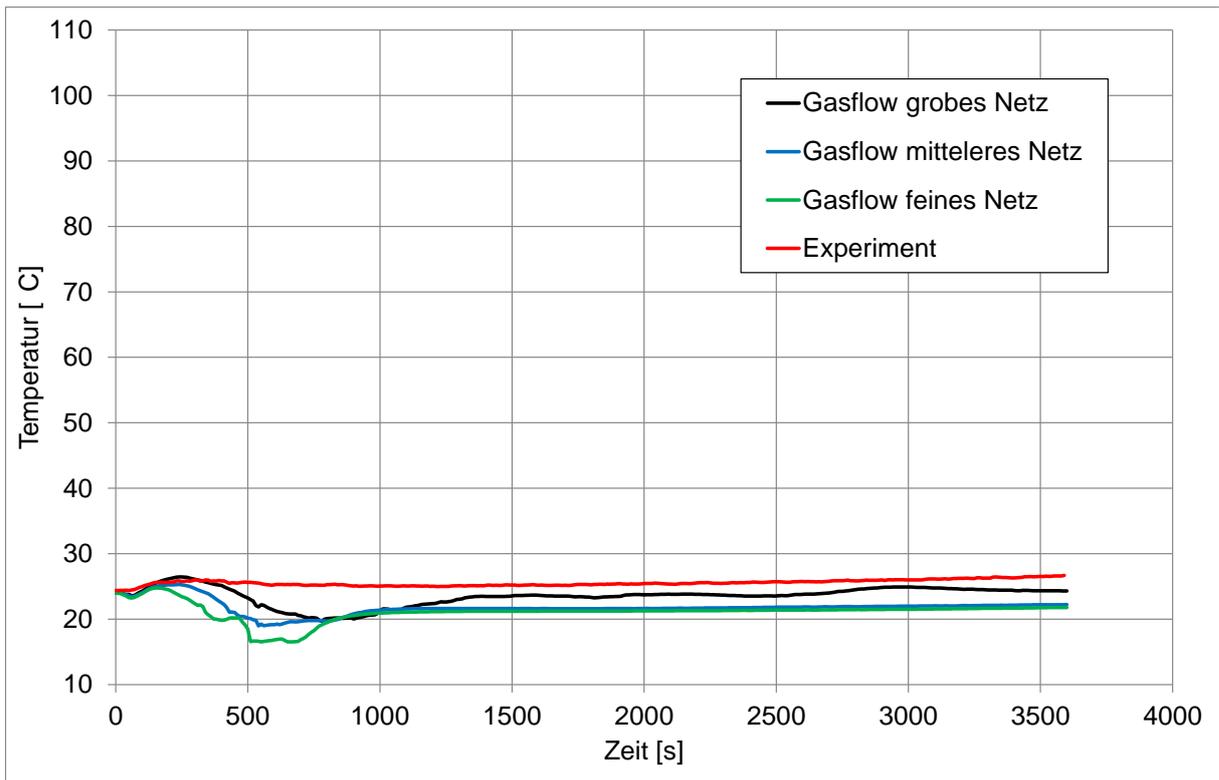


Abb. 8.2-11 Temperatur in 3,5 m Höhe

In Abb. 8.2-12 wird die Gitterabhängigkeit des Drucks bei GASFLOW mit der Gitterabhängigkeit bei entsprechenden CFX-Berechnungen verglichen. Die Abhängigkeiten in CFX wurden im Rahmen der Arbeiten zum Kondensationsmodell ermittelt (siehe hierzu Abschnitt 2). Leider liegen hier bei den gezeigten CFX-Rechnungen nicht exakt dieselben Berechnungsparameter bzw. Randbedingungen vor, so dass der Vergleich nur eine eingeschränkte Gültigkeit hat. Grundsätzlich scheint aber bei den GASFLOW-Berechnungen eine Veränderung der Gitterfeinheit in Wandnähe einen geringeren Einfluss auf den Druck zu haben, als bei den CFX-Rechnungen. Ursache für die höhere Gittersensitivität von CFX könnte sein, dass es in CFX keine solche Wandfunktion gibt, wie in GASFLOW, mit der die Wandkondensation mit einer Korrelation berechnet wird.

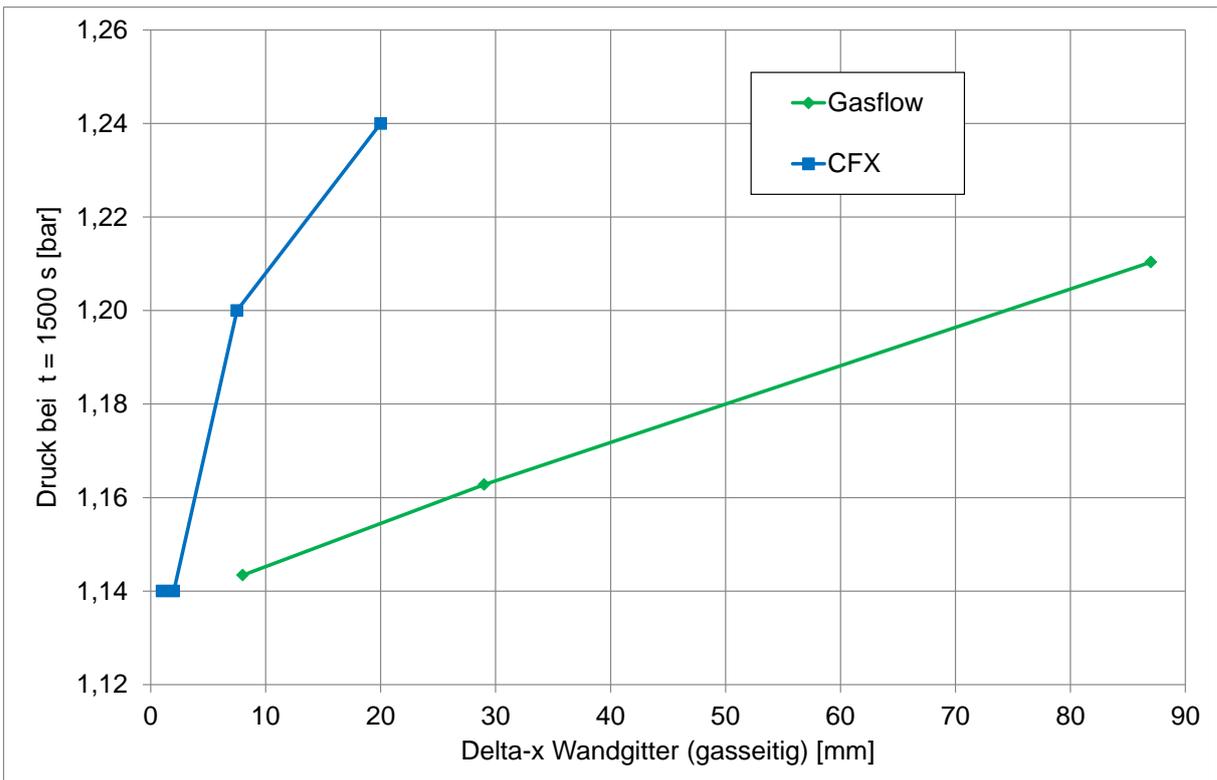


Abb. 8.2-12 Vergleich der Gitterabhängigkeit des Drucks ( $t = 1500$  s) bei GASFLOW und CFX

### 8.2.3 Vergleich der Berechnungsdauer

Abb. 8.2-13 zeigt die Berechnungsdauern für die TH-2 Simulation. Hier sieht man, dass die CFX-Rechnung eine deutlich höhere Berechnungsdauer aufweist als die GASFLOW-Berechnungen. Allerdings war für die CFX-Rechnung auch ein wesentlich feineres Netz notwendig, so dass dieses den Unterschied zu mindestens teilweise erklären kann. Weiterhin sollte erwähnt werden, dass es bei CFX – im Gegensatz zu GASFLOW – möglich ist, die Berechnung zu parallelisieren und somit deutlich schneller die Ergebnisse zu erhalten, als wenn man nur auf einem einzelnen Prozessor rechnet.

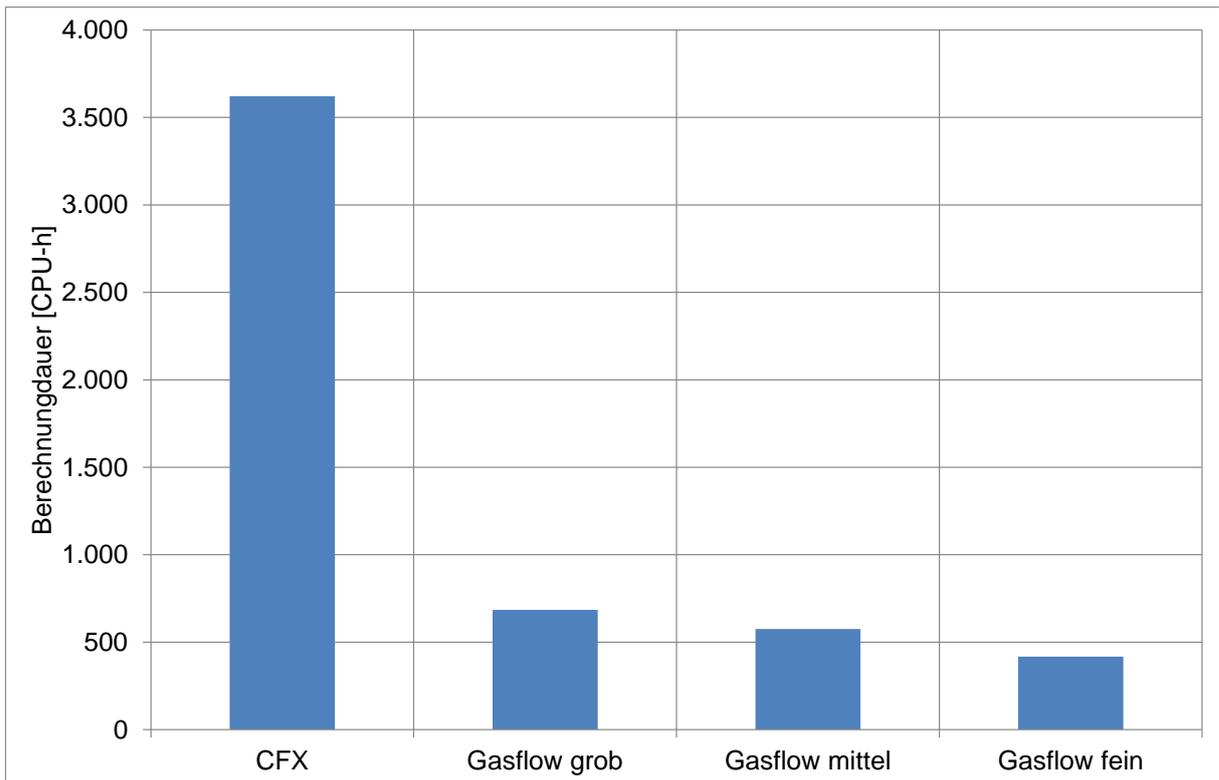


Abb. 8.2-13 Berechnungsdauer für 3600 s Simulationsdauer

Tab. 8.2-3 Berechnungsdauer für 3600 s Simulationsdauer

	GASFLOW			CFX
<b>Gitterfeinheit (r x φ x z)</b>	72 960 Elemente	77 824 Elemente	80 256 Elemente	337 616 Elemente
<b>Breite Randelement</b>	8,7 cm	2,9 cm	0,8 cm	
<b>Berechnungsdauer</b>	684 CPU-h	575 CPU-h	417 CPU-h	3 621 CPU-h

### 8.3 PANDA-Versuch SETH 2.1

Der Panda-Versuch SETH 2.1 wurde bereits mit CFX simuliert; eine detaillierte Beschreibung des Versuches und der CFX-Simulation finden sich im Abschnitt 4. Grundsätzlich besteht der PANDA-Versuch aus zwei miteinander verbundenen Behältern. Im 1. Behälter ist eine Heliumschiichtung vorhanden, die durch eine waagerechte Dampfeinspeisung von unten langsam aufgelöst wird. Im Folgenden wird die Simulation des Versuches mit GASFLOW beschrieben und ein Vergleich mit den CFX Ergebnissen

sowie mit experimentellen Ergebnissen durchgeführt. Weiter unten findet sich dann eine Analyse der Gittersensitivität bei den GASFLOW-Simulationen.

In Abb. 8.3-1 ist zunächst der Versuchsaufbau sowie das Gitter für die Simulation des Versuches mit GASFLOW dargestellt. In Tab. 8.3-1 finden sich die verwendeten Simulationsparameter. Hier werden die GASFLOW-Parameter mit den CFX-Parametern verglichen. Ein SST-Modell – wie in CFX – ist in GASFLOW nicht vorhanden. Stattdessen wurde für die GASFLOW-Rechnung das k-epsilon-Modell verwendet. Da die Konvergenzkriterien in GASFLOW und CFX unterschiedlich definiert sind, können diese nicht direkt miteinander verglichen werden.

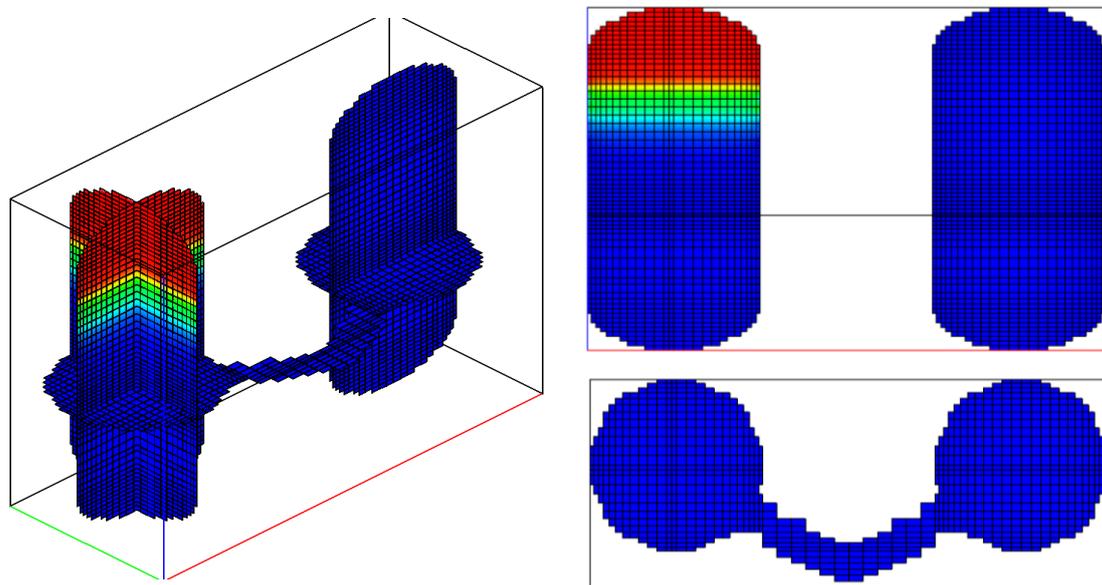


Abb. 8.3-1 Unterschiedliche Schnittebenen durch das PANDA-Gitter in der GASFLOW-Rechnung

Tab. 8.3-1 Infobox SETH 2.1

<b>Experiment</b>	SETH 2.1 / Panda Anlage	
<b>Phänomene</b>	Schichtungsauflösung	
<b>Software</b>	<b>GASFLOW</b>	<b>CFX</b>
<b>Elementzahl</b>	166 408	294 280
<b>Turbulenzmodell</b>	k-epsilon	SST
<b>Diffusionskoeffizient</b>	Mass, energy and momentum diffusion are on.	Helium: 1,0 [cm <sup>2</sup> /s]

	Kinematic viscosity: 0,15 [cm <sup>2</sup> /s]	
Wärmestrahlungsmodell	Ohne	Discrete Transfer
Konvergenz	Epsilon < 1.0e-05	RMS < 1.0 E-4
CFX-Version	-	12,.0

### 8.3.1 Vergleich der Simulationsergebnisse

In Abb. 8.3-2 werden zwei Ergebnisse von CFX und GASFLOW zum Zeitpunkt  $t = 1030$  s miteinander verglichen. Auch wenn das GASFLOW-Netz etwas gröber ist, so scheint die Gasverteilung bei den beiden Rechnungen qualitativ einigermaßen gut übereinzustimmen.

In den Diagrammen in Abb. 8.3-3 bis Abb. 8.3-6 ist die Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messstellen im 1. Panda-Behälter dargestellt. Neben den experimentellen Daten sind hier auch die Simulationsergebnisse von GASFLOW und CFX eingetragen. Die Simulationsdaten stimmen sowohl für GASFLOW als auch für CFX sehr gut mit den experimentellen Werten überein. Sowohl qualitativ als auch quantitativ kann der Abbau der Helium-Schicht mit beiden CFD-Programmen also gut simuliert werden.

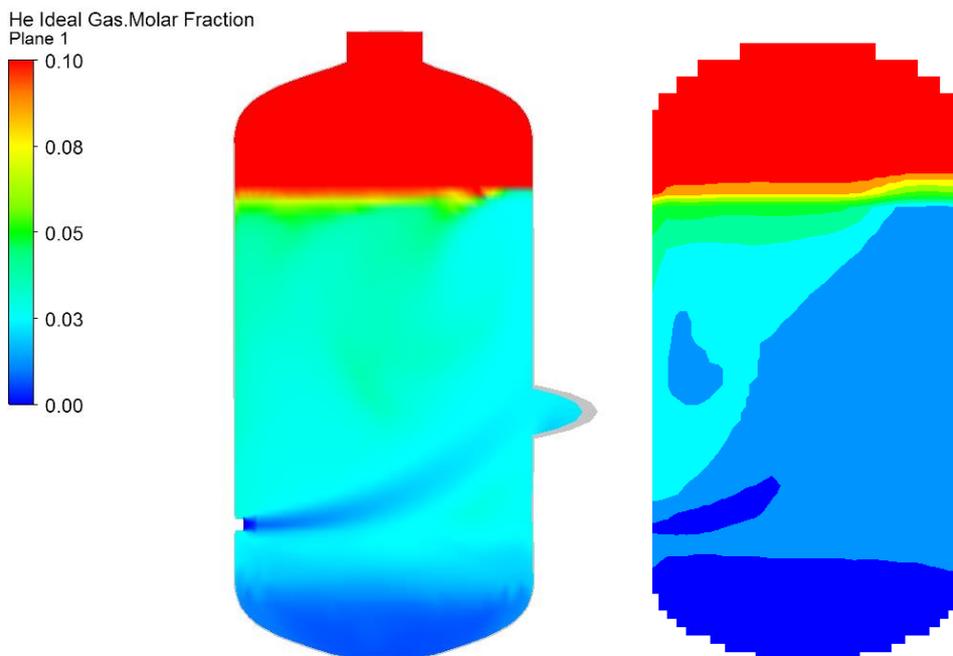


Abb. 8.3-2 Vergleich der Heliumkonzentration im PANDA-Behälter Nr. 1 bei  $t = 1030$  s, links: CFX, rechts: GASFLOW

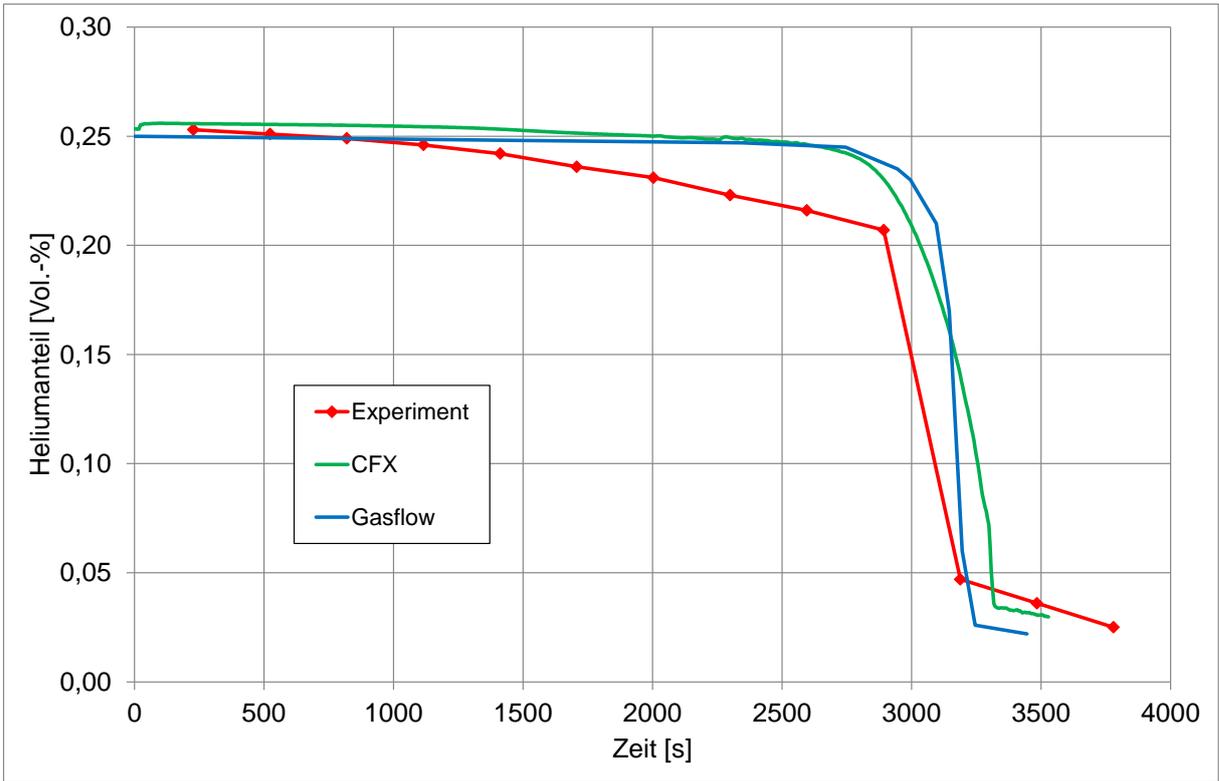


Abb. 8.3-3 Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1A 20

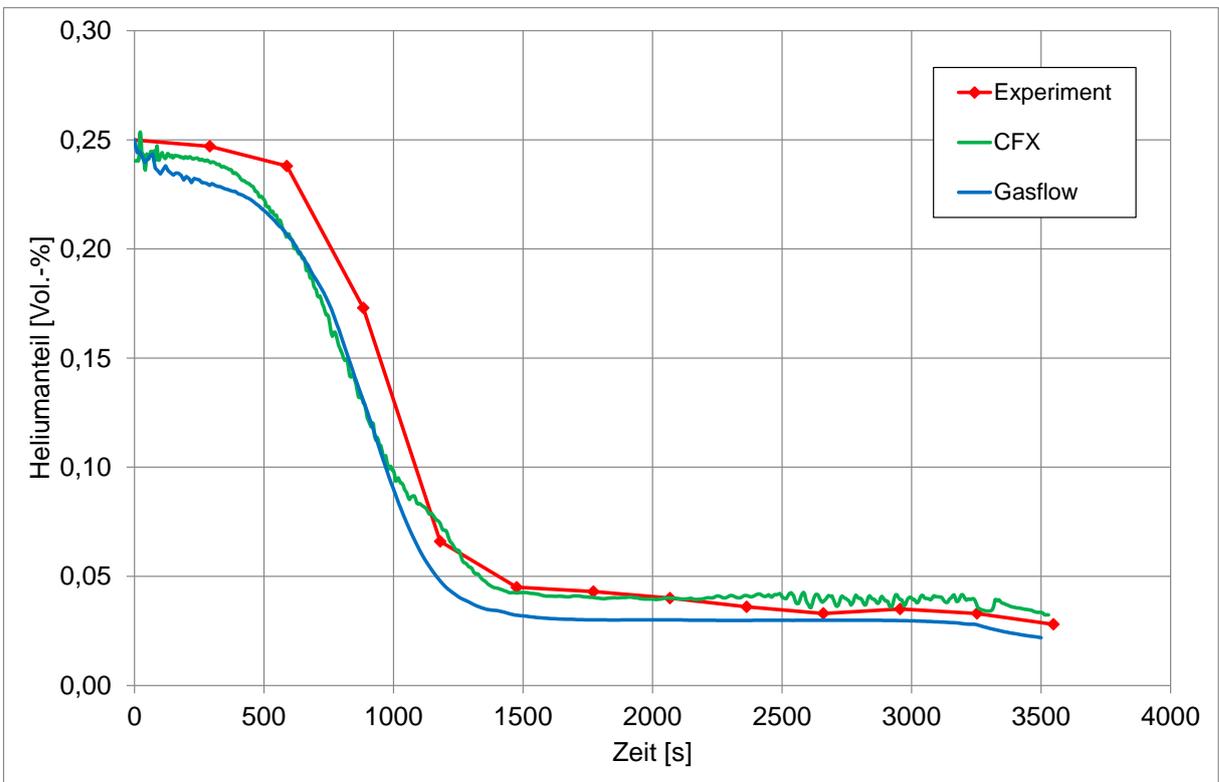


Abb. 8.3-4 Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1D 20

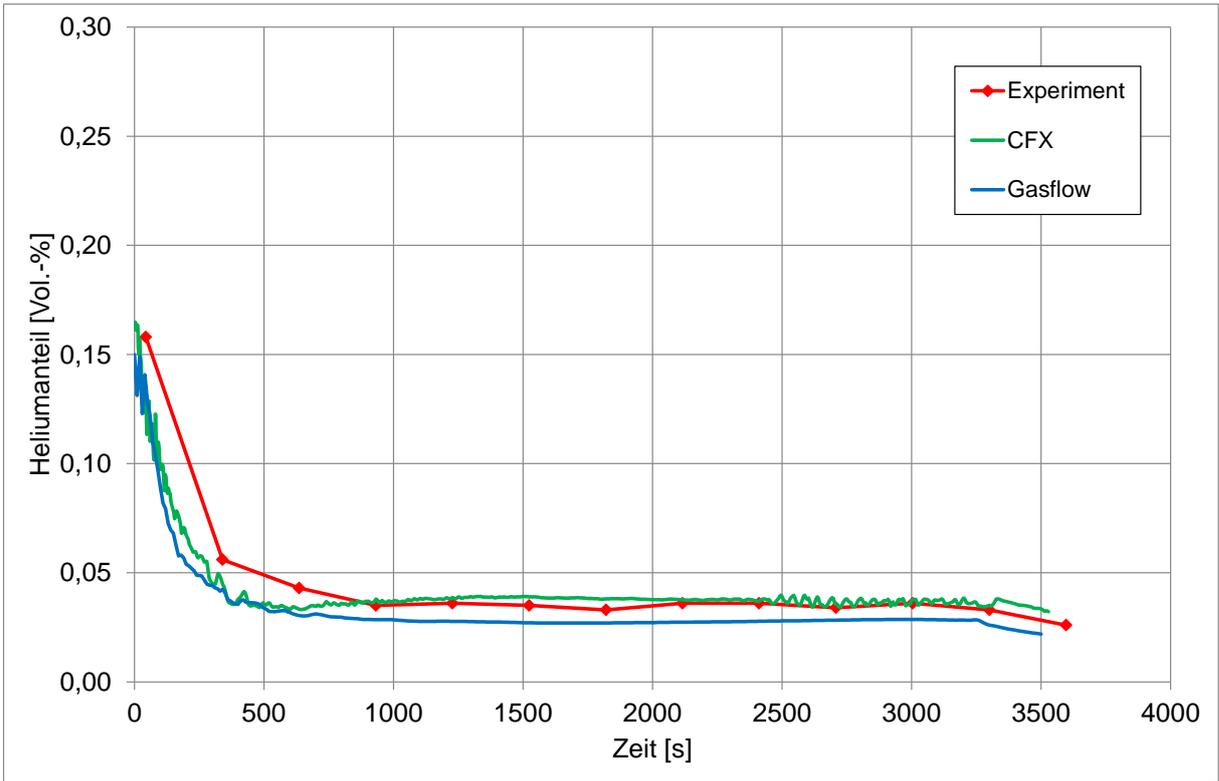


Abb. 8.3-5 Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1G 20

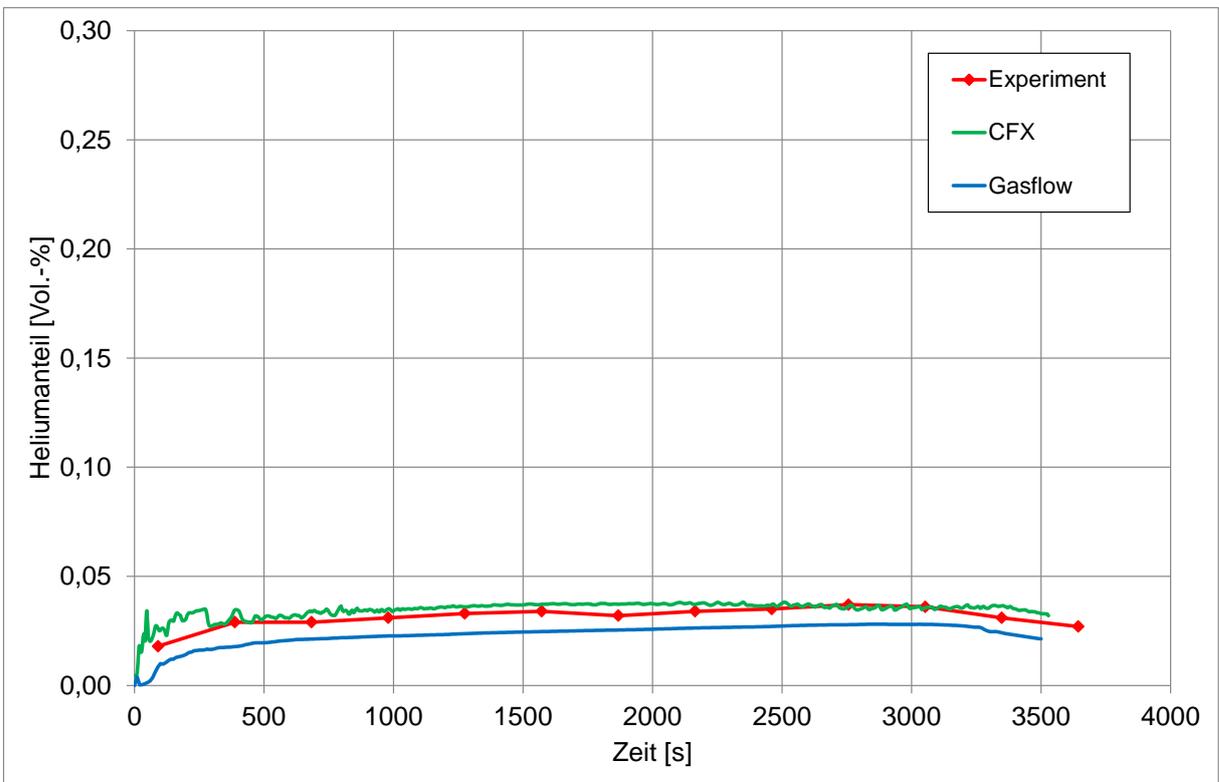


Abb. 8.3-6 Verlauf der Heliumkonzentration an Messstelle MCG D1I 20

In den Diagrammen in Abb. 8.3-8 bis Abb. 8.3-10 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur (wieder im 1. Panda-Behälter) dargestellt. Die CFX-Werte stimmen ganz gut mit den experimentellen Temperaturwerten überein. In den Abbildungen finden sich aber etwas größere Abweichungen der GASFLOW-Werte von den experimentellen Werten. Insgesamt sind die berechneten Temperaturen im oberen Panda-Behälter zu niedrig, während sie im mittleren und unteren Behälter zu hoch sind. Hier scheint der Wärmeaustausch in der Simulation zu niedrig zu sein, möglicherweise, weil es in GASFLOW kein Modell für den Wärmetransport im Gas durch thermische Strahlung gibt.

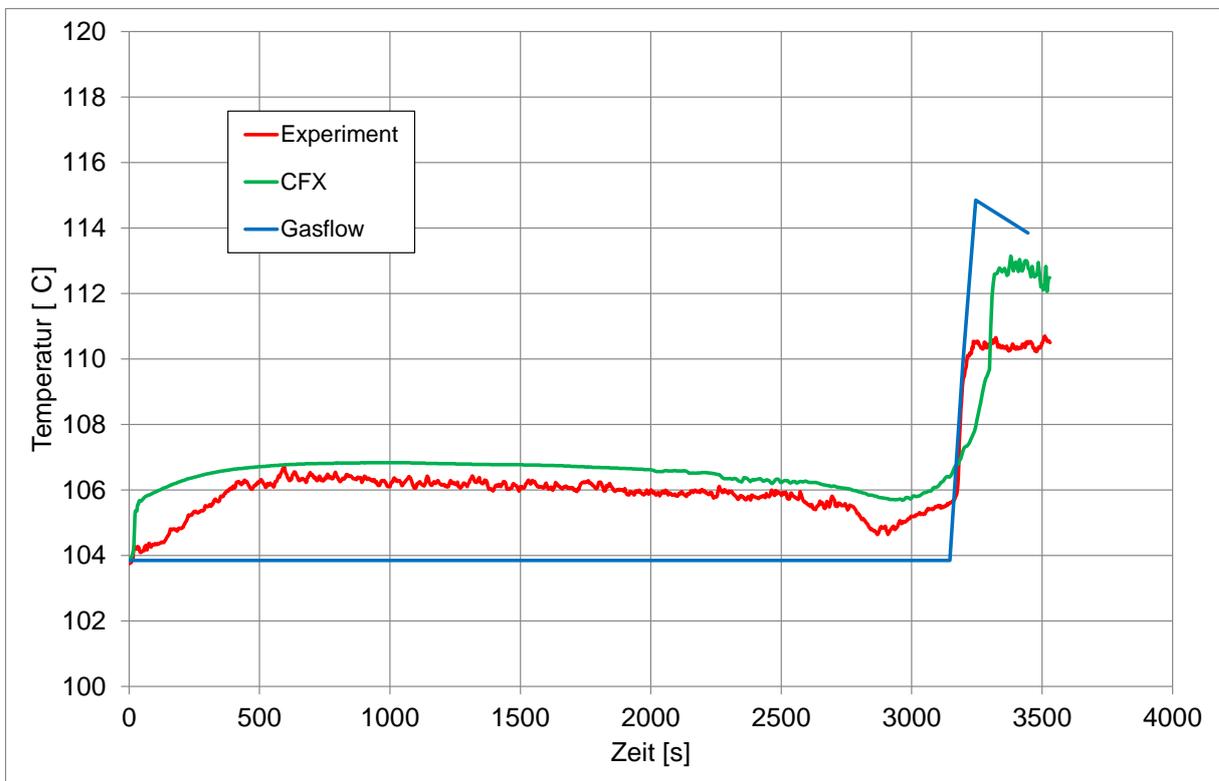


Abb. 8.3-7 Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1A 20

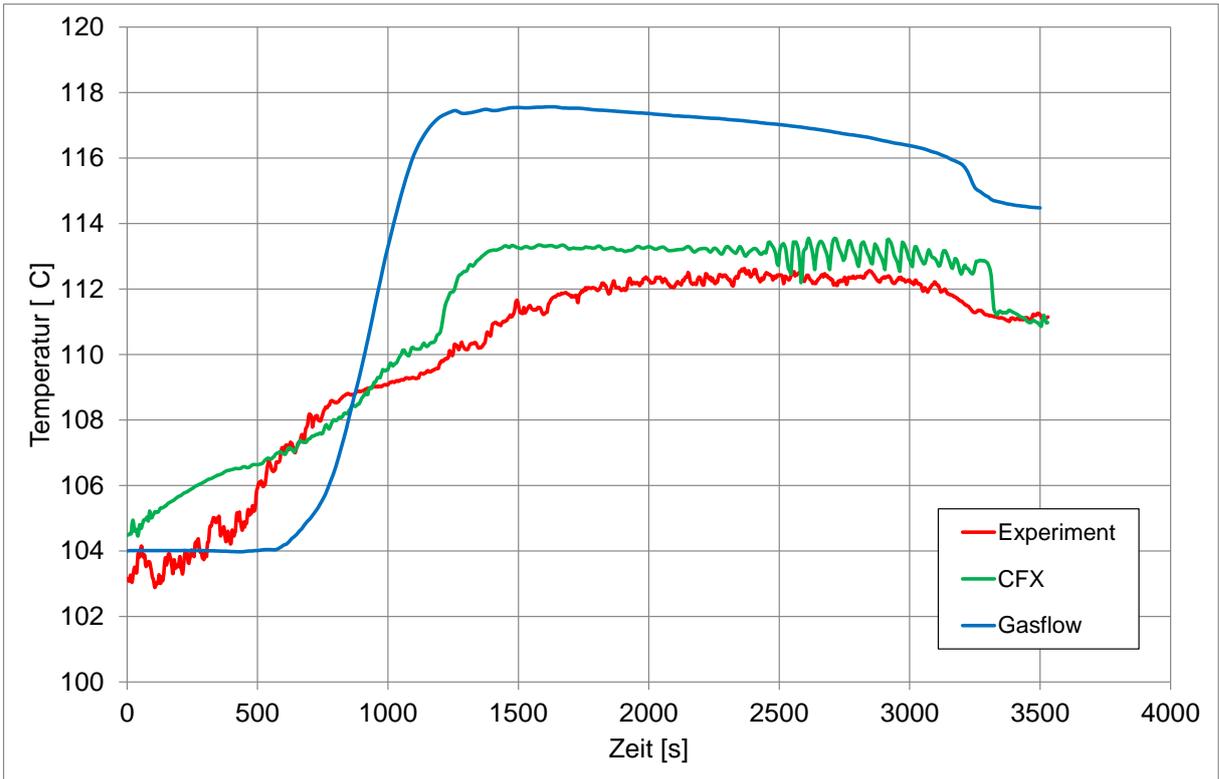


Abb. 8.3-8 Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1D 20

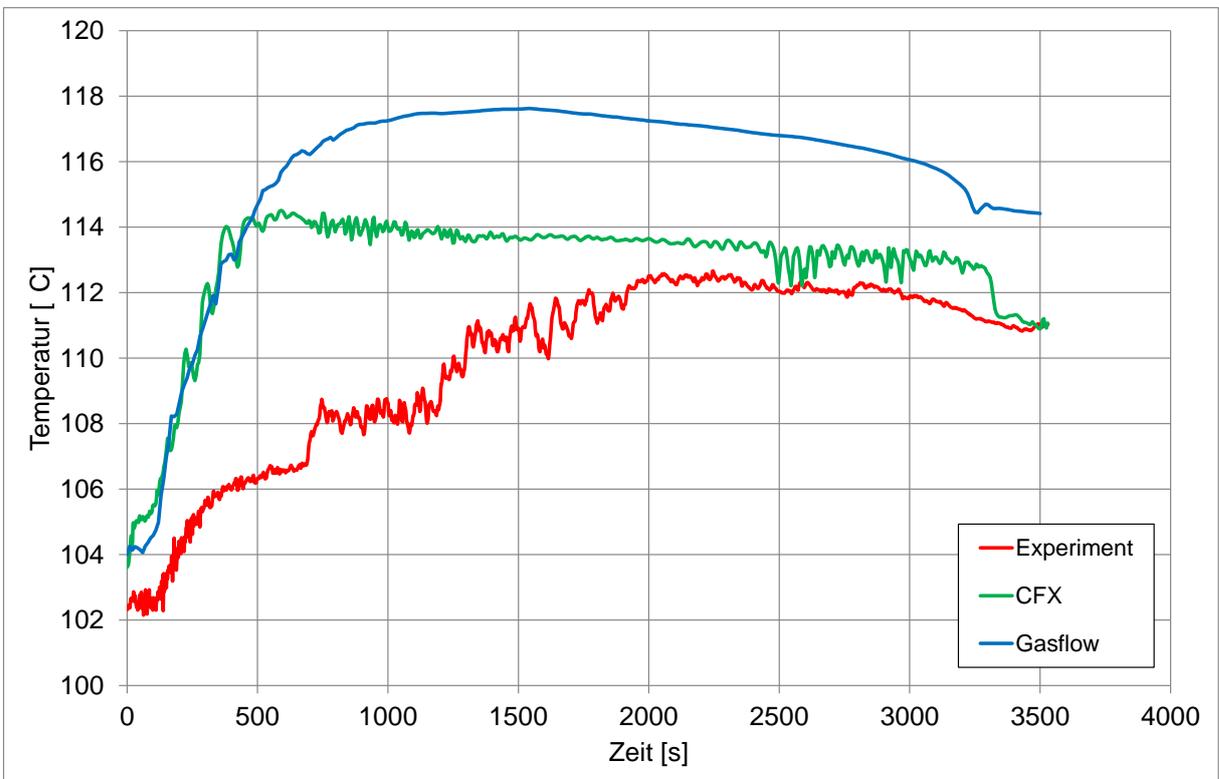


Abb. 8.3-9 Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1G 20

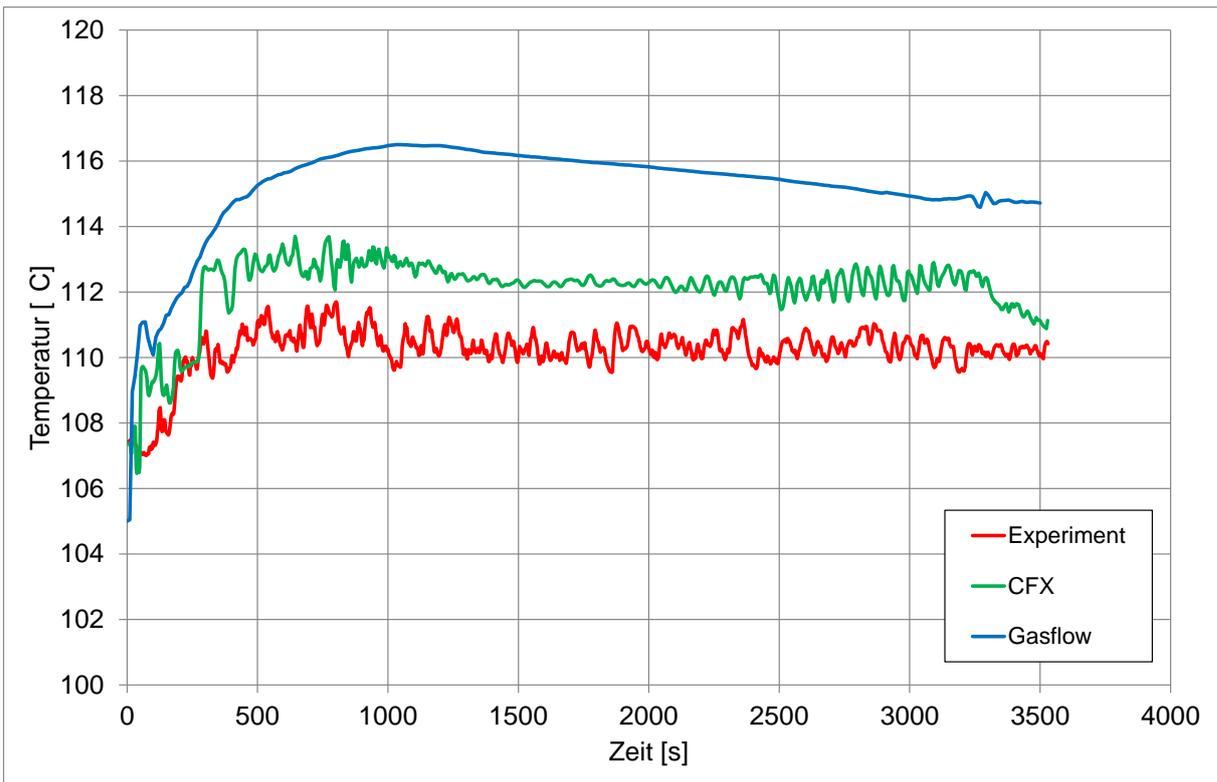


Abb. 8.3-10 Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1I 20

### 8.3.2 Analyse der Gittersensitivität

Zur Untersuchung der Gittersensitivität wurden drei Gitter mit unterschiedlich feinem Netz im Bereich der Helium-Schichtung für GASFLOW erstellt. Hierbei wurde die Zahl der Elemente in vertikaler Richtung verändert, so dass der Konzentrationsgradient der He-Schichtung unterschiedlich fein aufgelöst wird (siehe Abb. 8.3-11). In Tab. 8.3-2 finden sich die zugehörigen Elementzahlen für die drei Gitter.

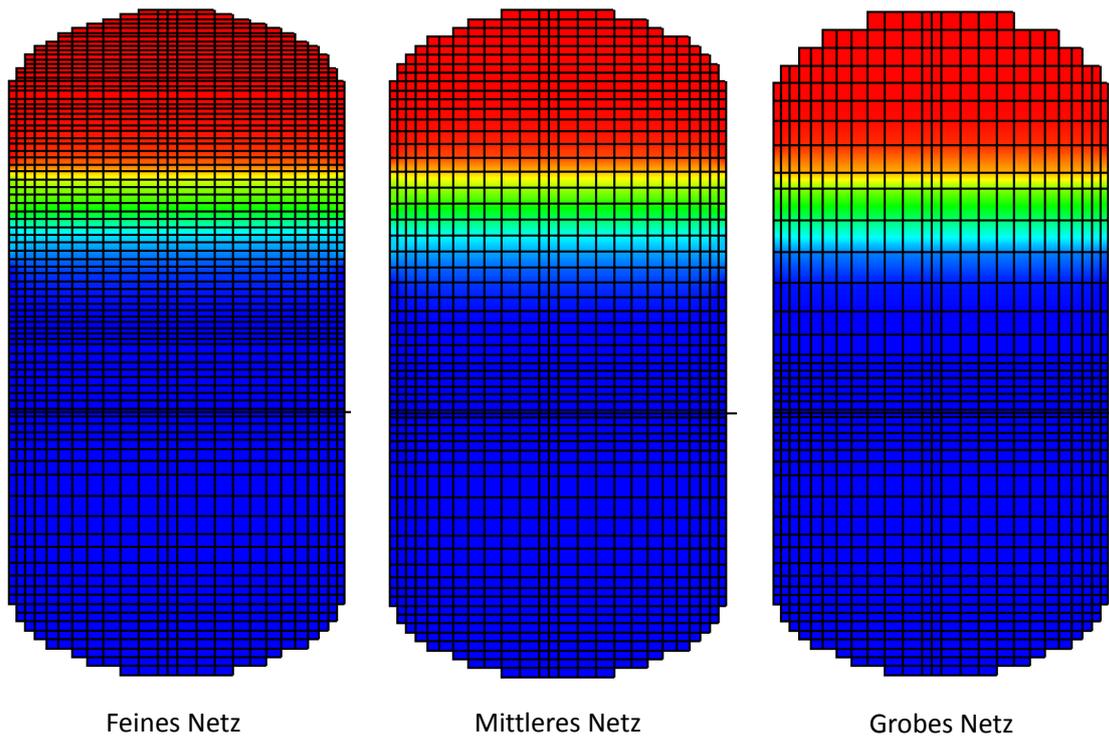


Abb. 8.3-11 Unterschiedlich feine Rechengitter im Bereich der He-Schichtung für GASFLOW

Tab. 8.3-2 Variationsrechnungen mit GASFLOW

Gitter	Fein	Mittel	Grob
Elementzahl	166 408	115 351	88 877

In Abb. 8.3-12 und Abb. 8.3-13 zeigt sich, dass die unterschiedliche Netzfeinheit einen deutlichen Einfluss auf die simulierte Verteilung des Heliums im Panda-Behälter hat. Durch ein feineres Netz ist in mittlerer Höhe der Übergang von hoher He-Konzentration zu niedriger He-Konzentration steiler, während er bei einem gröberen Netz stärker verschmiert ist (siehe Abb. 8.3-13). Im oberen Bereich der He-Schichtung führt das feinere Netz zu einem deutlich schnelleren Abbau der He-Schichtung als die gröberen Netze (siehe Abb. 8.3-12).

Auch auf die Temperaturverteilung hat die Netzfeinheit einen deutlichen Einfluss, dieses zeigt sich in den Abbildungen Abb. 8.3-14 und Abb. 8.3-15. In mittlerer Höhe des Panda-Behälters zeigt das feinere Netz hier auch einen steileren Temperaturverlauf (siehe Abb. 8.3-15).

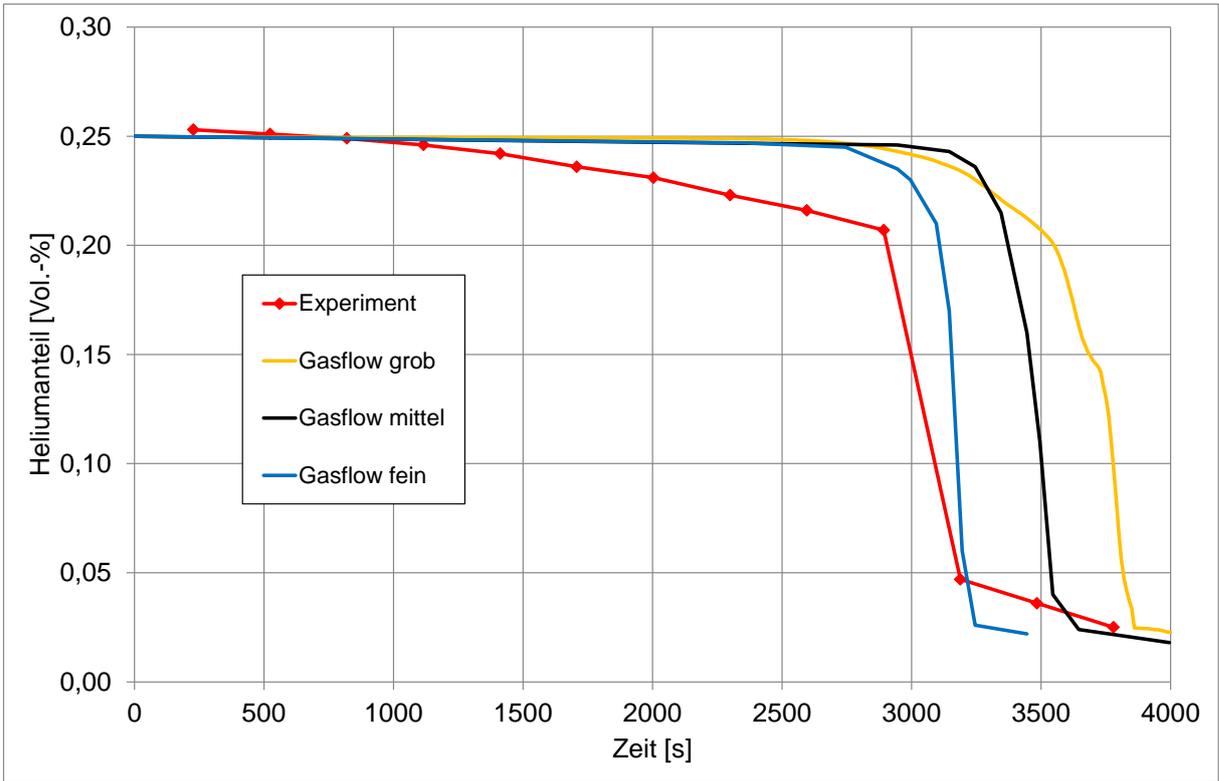


Abb. 8.3-12 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Verlauf der He-Konzentration an Messstelle MCG D1A (in 8,03 m Höhe)

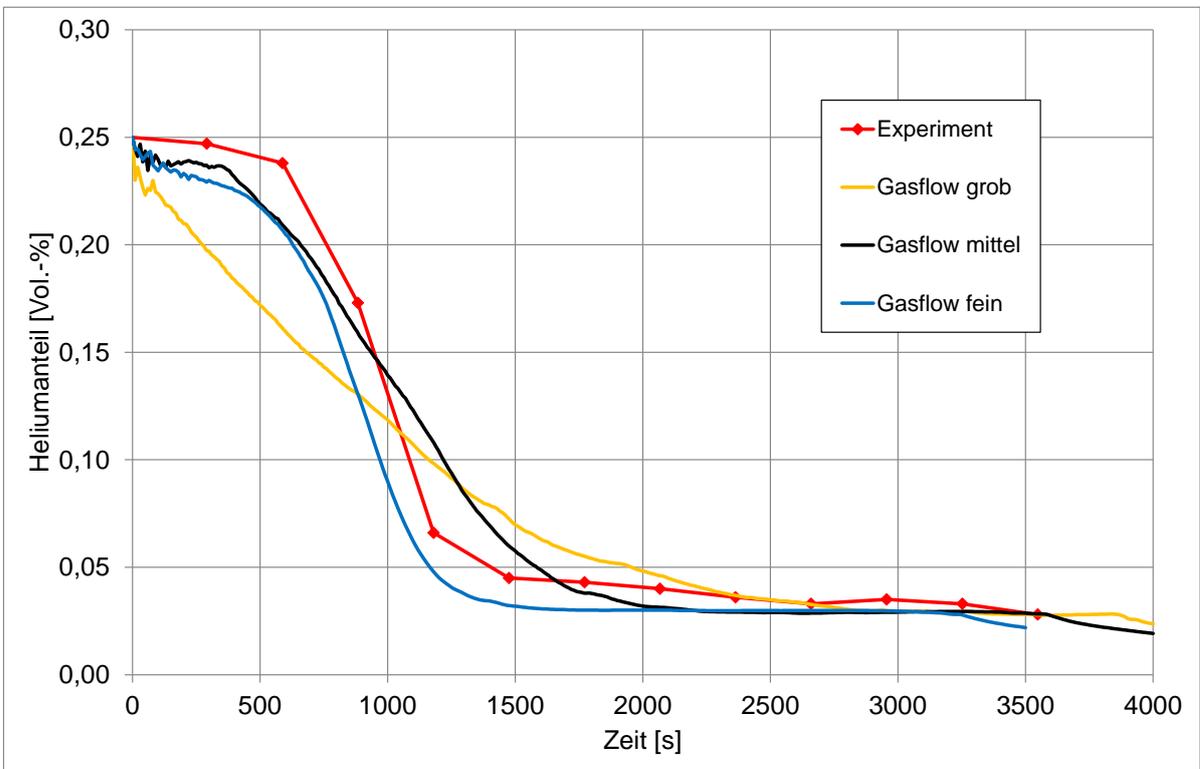


Abb. 8.3-13 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Verlauf der He-Konzentration an Messstelle MCG D1D

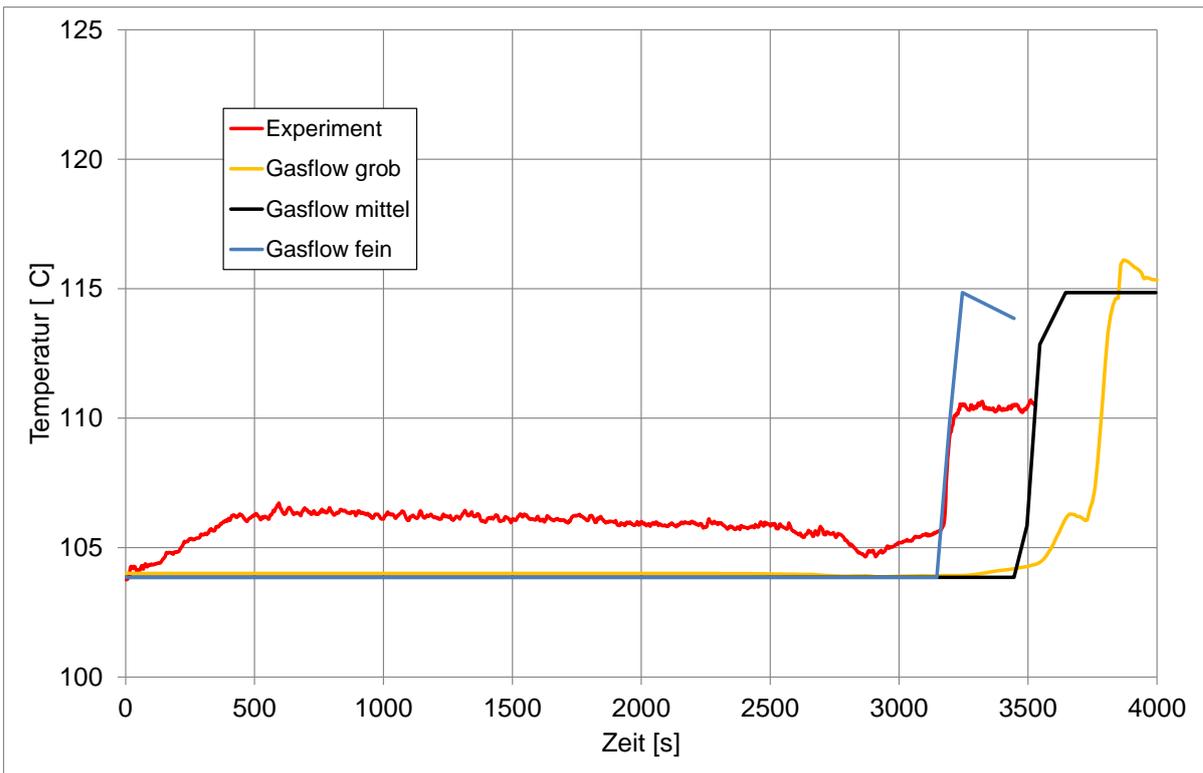


Abb. 8.3-14 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1A

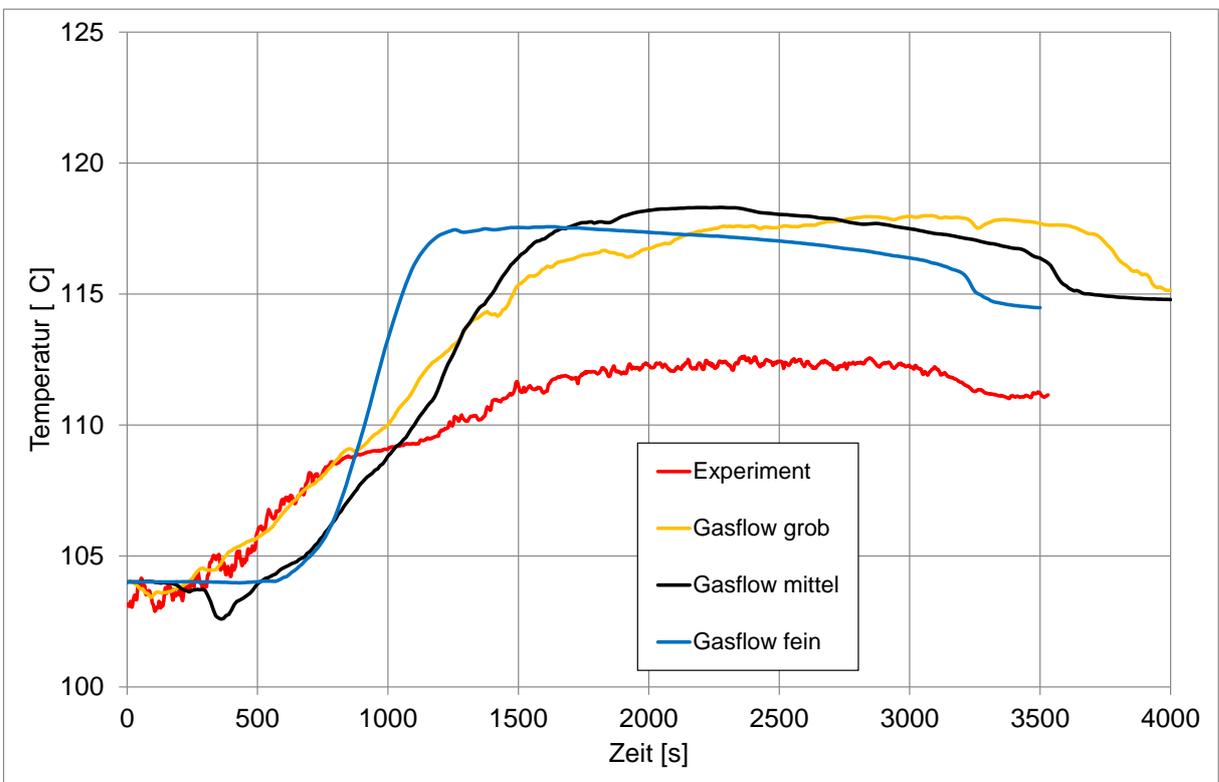


Abb. 8.3-15 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an Messstelle MTG D1D

### 8.3.3 Vergleich der Berechnungsdauer

In Abb. 8.3-16 werden die Berechnungsdauern für die CFX-Berechnung und für die drei GASFLOW-Berechnungen miteinander verglichen. Die CFX-Rechnung mit 294 280 Elementen hat eine ähnliche Berechnungsdauer wie die GASFLOW-Berechnung mit 88 877 Elementen (GASFLOW grob). Die mittlere und die feinere GASFLOW-Berechnung benötigen deutlich mehr Rechenzeit. Die CFX-Berechnung hat aber gegenüber der GASFLOW-Berechnung den zusätzlichen Vorteil, dass sie auf mehrere CPUs verteilt werden kann. Da die CFX-Berechnung auf 8 Prozessoren parallel berechnet wurde, ergibt sich pro Prozessor nur eine Rechendauer von 23 CPU-h für die CFX-Berechnung. Betrachtet man also die Rechenzeit pro Prozessor, so schneidet die GASFLOW-Berechnung hier wesentlich schlechter ab (hierzu siehe auch Tab. 8.3-3).

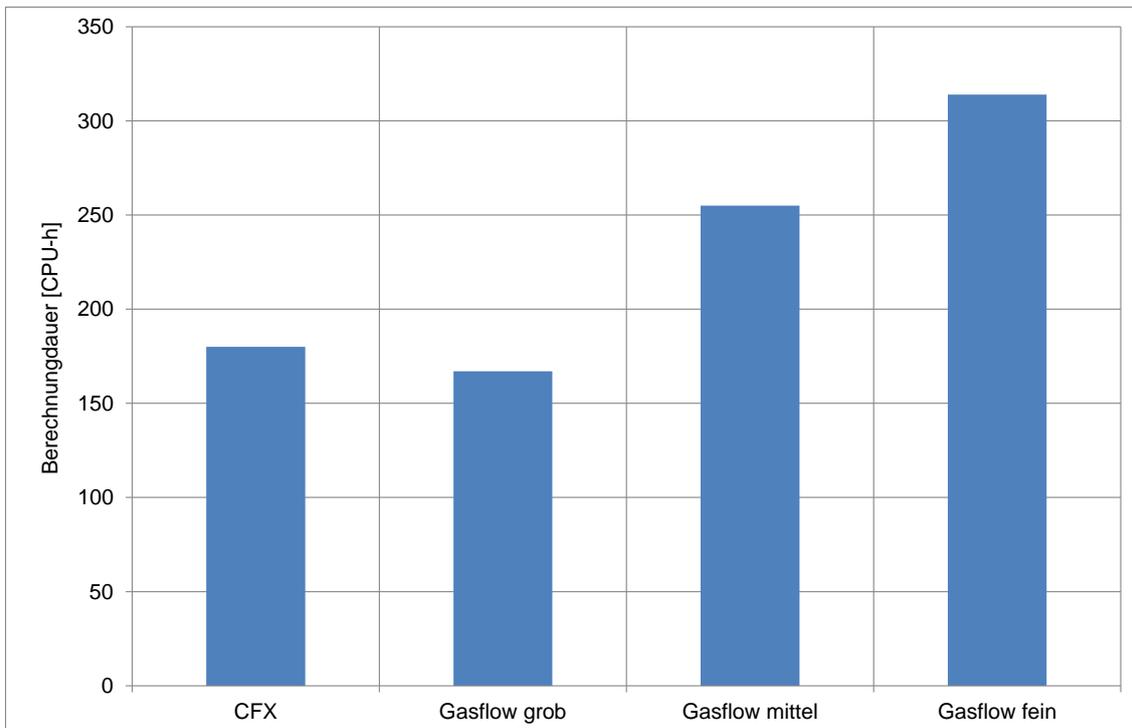


Abb. 8.3-16 Vergleich der Berechnungsdauern für die unterschiedlichen Simulationen

Tab. 8.3-3 Vergleich der Berechnungszeiten von GASFLOW und CFX

	<b>CFX</b>	<b>GASFLOW</b>
Berechnungszeit (3500 s)	180 CPU-h (verteilt auf 8 Prozessoren)	Grob: 167 CPU-h Mittel: 255 CPU-h Fein: 314 CPU-h (jeweils auf einem Prozessor)
Berechnungszeit (3500 s) pro Prozessor	23 CPU-h	Grob: 167 CPU-h Mittel: 255 CPU-h Fein 314 CPU-h

#### 8.4 VANAM M3 (Battelle Modell-Containment)

In Abb. 8.4-1 findet sich die Geometrie und die Raumaufteilung des Battelle-Modell-Containments. Im Versuch VANAM M3 wurde in Raum R5 Dampf eingespeist, dessen räumliche Ausbreitung im Containment im weiteren Experiment beobachtet wurde. Hierbei spielen Schichtungsbildung und Kondensation eine Rolle.

Der VANAM M3-Versuch wurde bereits mit CFX berechnet und an dieser Stelle wird auf eine detaillierte Beschreibung der CFX-Rechnung verzichtet. Diese kann man in /SCH10/ nachlesen. Im Folgenden wird aber detailliert auf die Simulation des VANAM M3 Versuches mit GASFLOW eingegangen. In Abb. 8.4-2 ist ein Ausschnitt aus dem GASFLOW-Rechengitter für den VANAM-Versuch dargestellt. Eine ursprüngliche Version dieses Gitters wurde vom KIT übernommen und für den hier vorliegenden Versuch angepasst. In der Abbildung ist zu sehen, dass die Battelle-Geometrie durch ein recht grobes Gitter approximiert wurde. Das GASFLOW-Gitter hatte nur 73 062 Elemente, während in der CFX-Rechnung ein Gitter mit 1 181 616 Elementen verwendet wurde. Da es in GASFLOW kein SST-Turbulenzmodell gibt, wurde hier sowohl das algebraische als auch das k-epsilon Modell für die Berechnungen getestet. Weitere Details zu den in der GASFLOW-Rechnung verwendeten Modellen und Berechnungsparametern finden sich in Tab. 8.4-1.

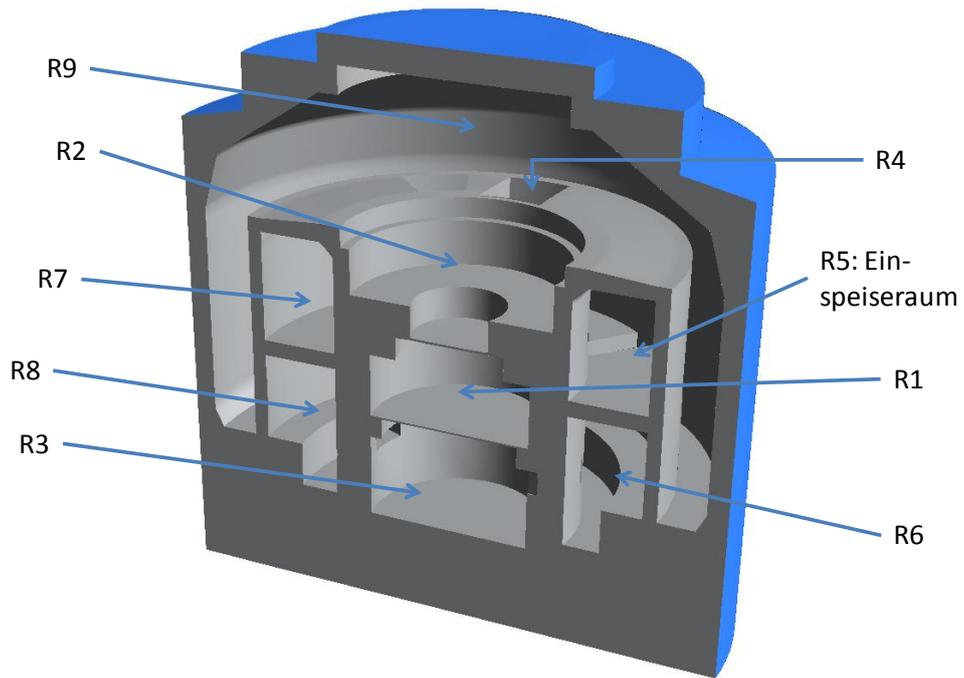


Abb. 8.4-1 Raumaufteilung im Battelle-Modell-Containment (CFX-Geometrie)

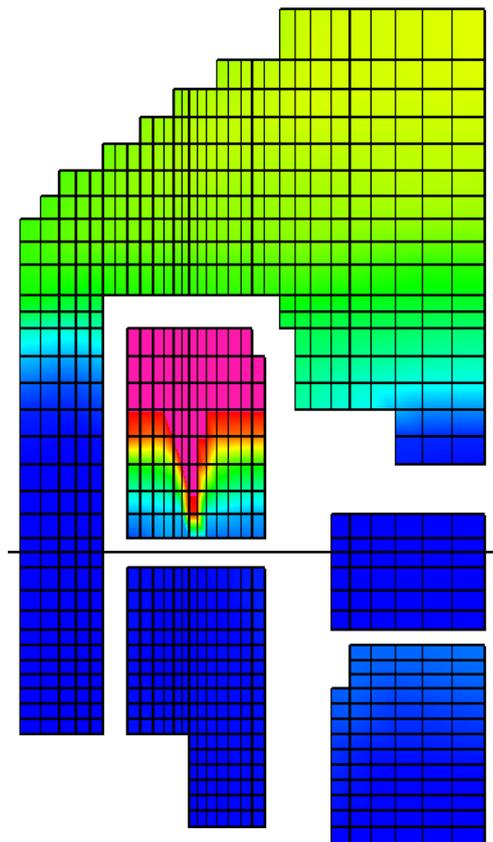


Abb. 8.4-2 Ausschnitt aus dem VANAM M3 Rechengitter (GASFLOW-Berechnung)

Tab. 8.4-1 Infobox zum VANAM M3 Experiment

Experiment	VANAM M3 / Battelle Modell Containment	
Phänomene	Schichtungsbildung- und Auflösung / Kondensation	
Software	<b>GASFLOW</b>	<b>CFX</b>
Elementzahl	73 062	1 181 616
Turbulenzmodell	Algebraic, k-epsilon	SST
Wärmestrahlungsmodell	Ohne	Ohne
Kondensationsmodell	GASFLOW Standard-Modell	GRS-Modell
Konvergenz	Epsilon < 1.0e-06	RMS < 0,0001
CFX-Version	-	11.0

#### 8.4.1 Vergleich der Simulationsergebnisse

In Abb. 8.4-3 ist der Druck innerhalb des Battelle-Modell-Containments dargestellt. Es zeigt sich, dass GASFLOW für das algebraische Turbulenzmodell und das k-epsilon Turbulenzmodell deutlich unterschiedliche Druckverläufe berechnet. Das algebraische Modell zeigt einen sehr ähnlichen Druckverlauf wie die CFX-Rechnung. Beide liegen etwas oberhalb des experimentellen Druckverlaufs. Die GASFLOW-Rechnung mit dem k-epsilon Modell hingegen berechnet einen deutlich höheren Druckverlauf. Die Ursache für diesen Unterschied ist noch nicht geklärt.

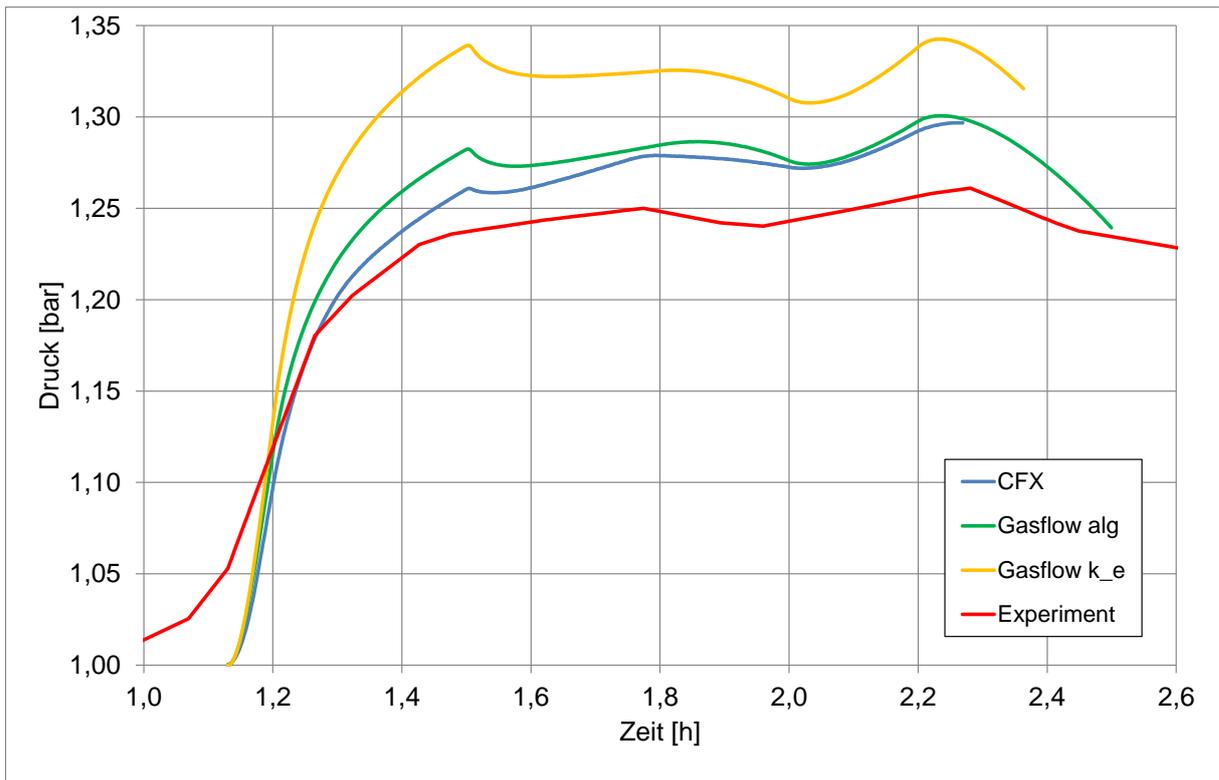


Abb. 8.4-3 Druckverlauf im Battelle-Modell-Containment

In den Abbildungen Abb. 8.4-4 bis Abb. 8.4-10 sind die Temperaturverteilungen in den unterschiedlichen Containment-Räumen dargestellt. Auch hier zeigen sich teilweise wieder deutliche Unterschiede zwischen der GASFLOW-Rechnung mit algebraischem Turbulenzmodell und der GASFLOW-Rechnung mit dem k-epsilon Turbulenzmodell.

In Abb. 8.4-4 ist die Temperatur in Raum R9, dem Containment-Dom dargestellt. Alle Berechnungen (CFX und GASFLOW) geben den Temperaturanstieg im Dom qualitativ richtig wieder. Die CFX-Rechnung liegt etwas unterhalb der experimentellen Werte, die algebraische GASFLOW-Rechnung hat noch etwas niedrigere Temperaturen ergeben und die k-epsilon GASFLOW-Rechnung liegt noch einige Grad tiefer.

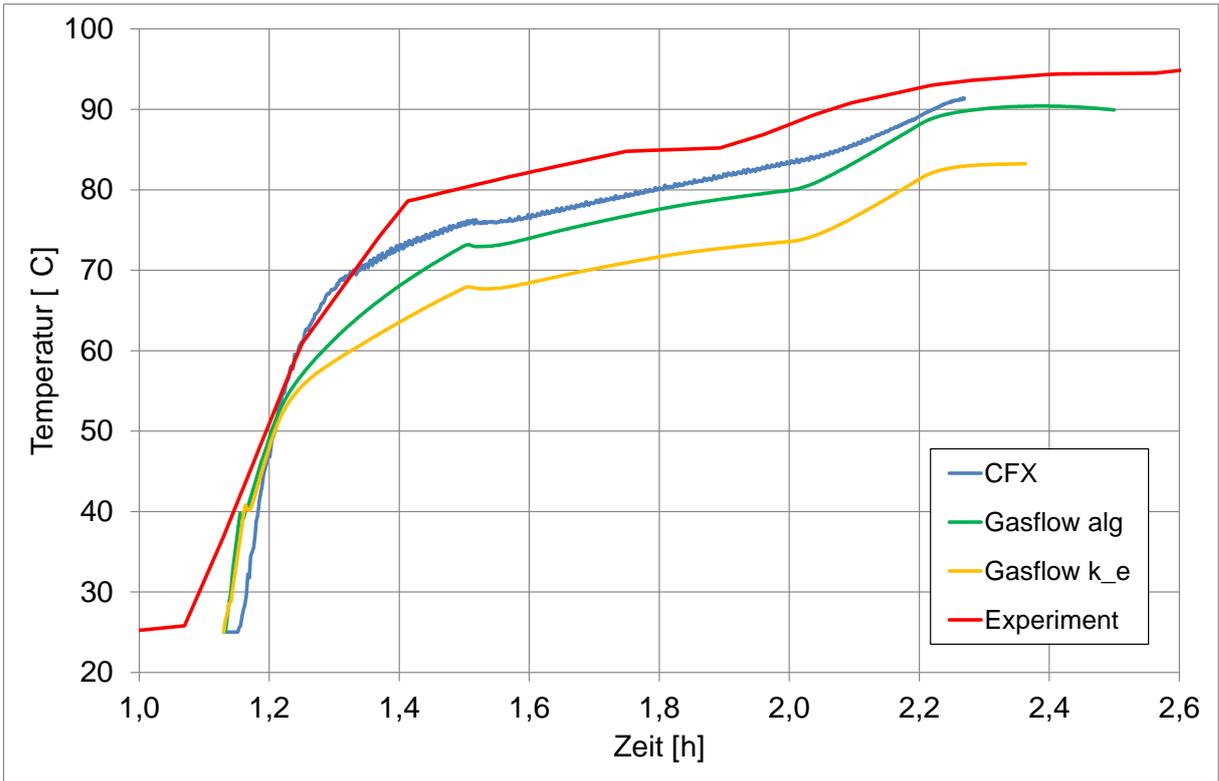


Abb. 8.4-4 Temperatur in Raum R9 (Dom)

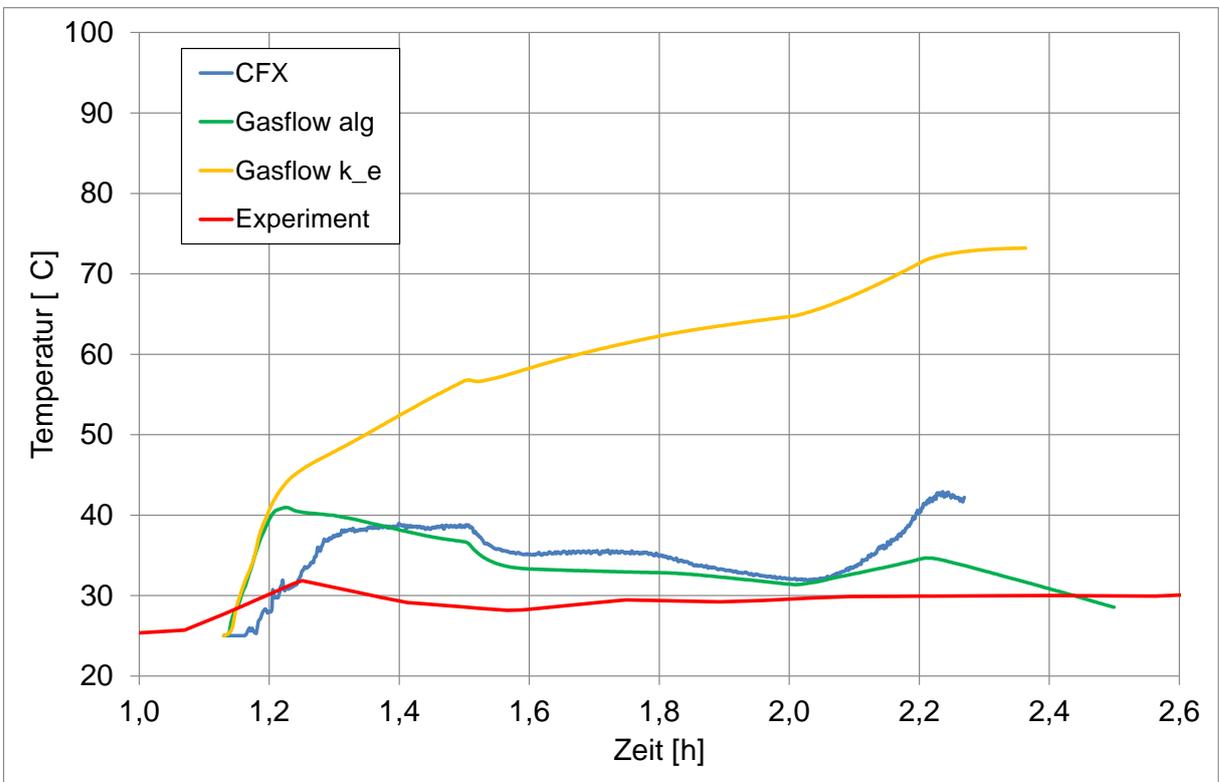


Abb. 8.4-5 Temperatur in Raum R8

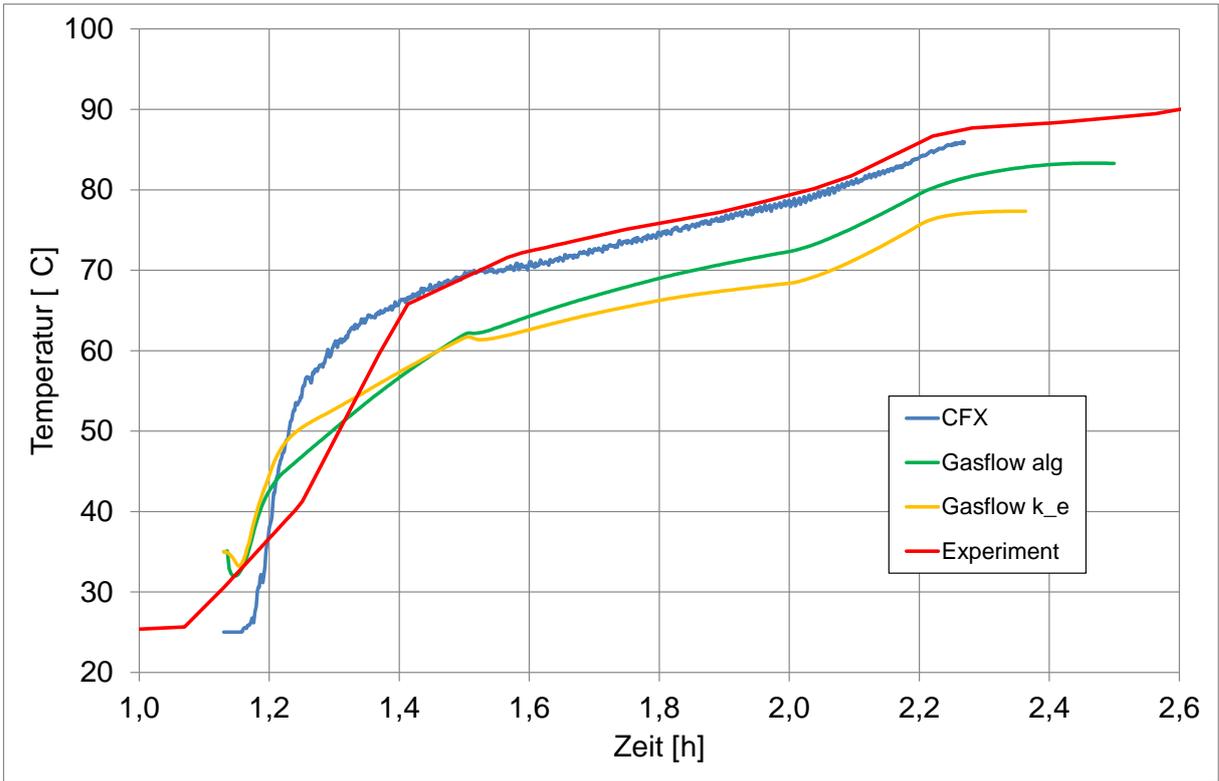


Abb. 8.4-6 Temperatur in Raum R7

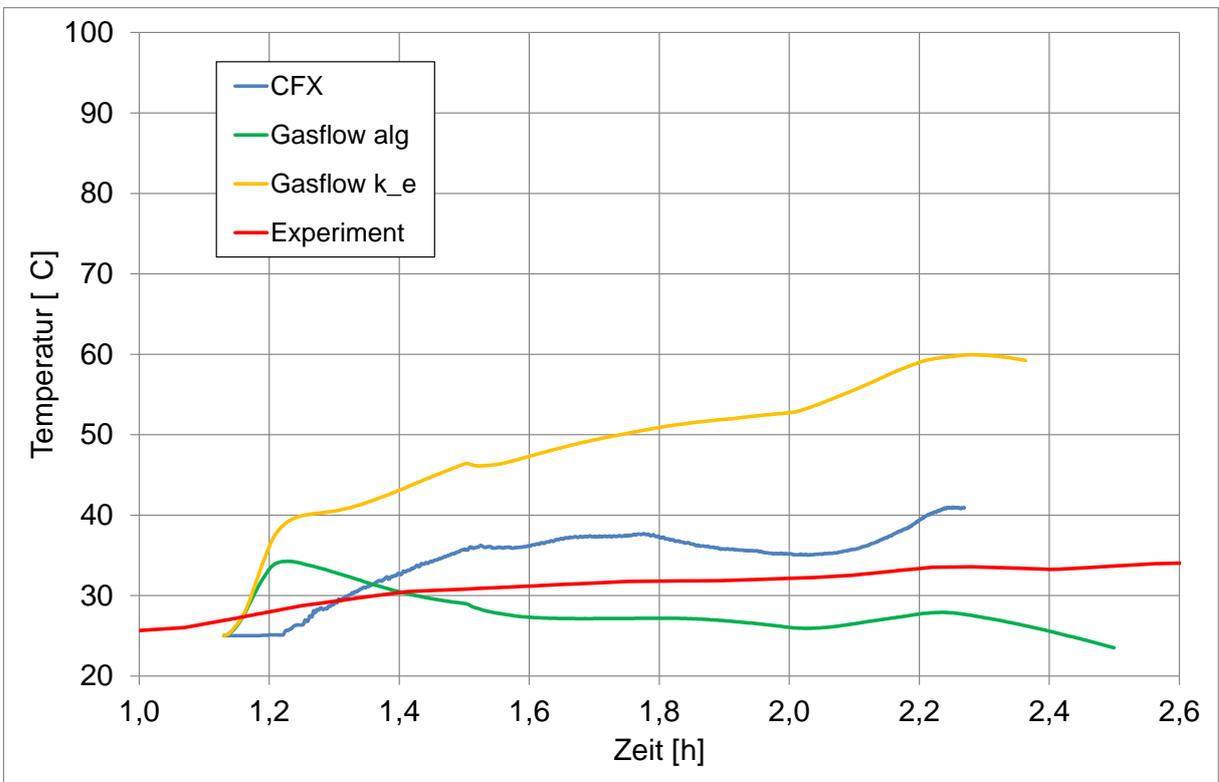


Abb. 8.4-7 Temperatur in Raum R6

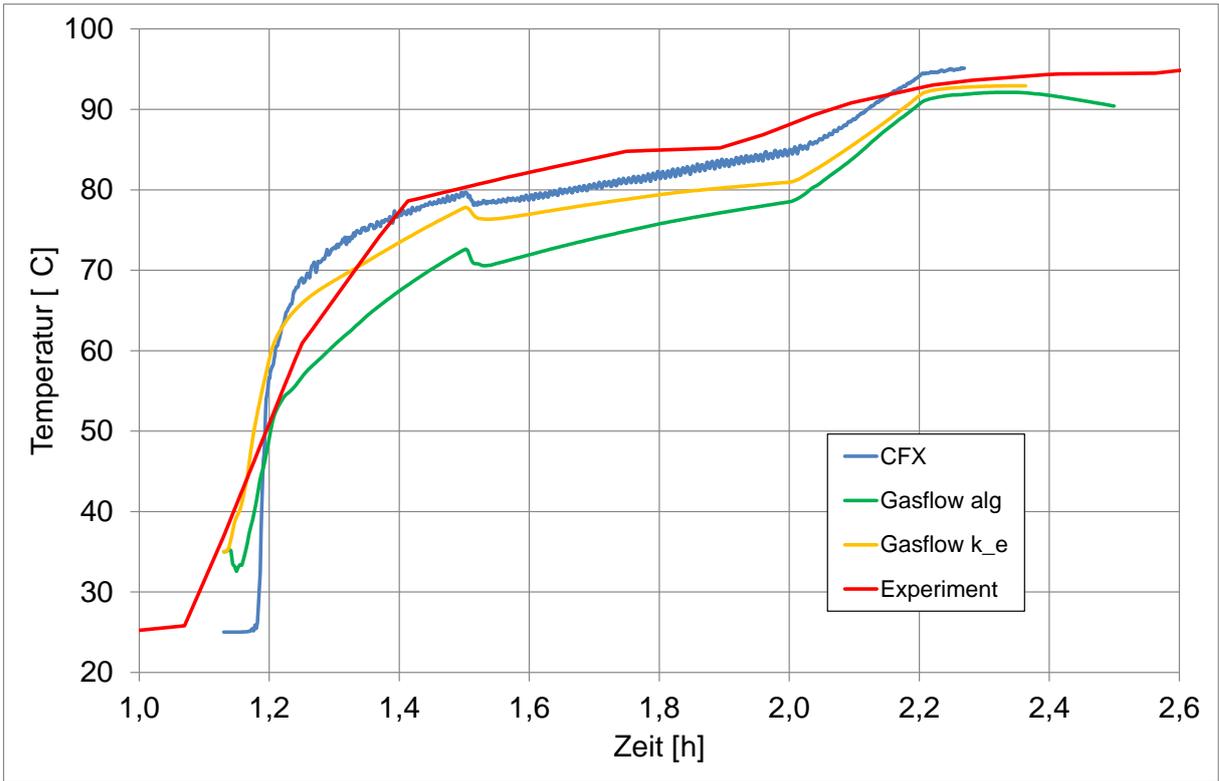


Abb. 8.4-8 Temperatur in Raum R5 (Einspeisezone)

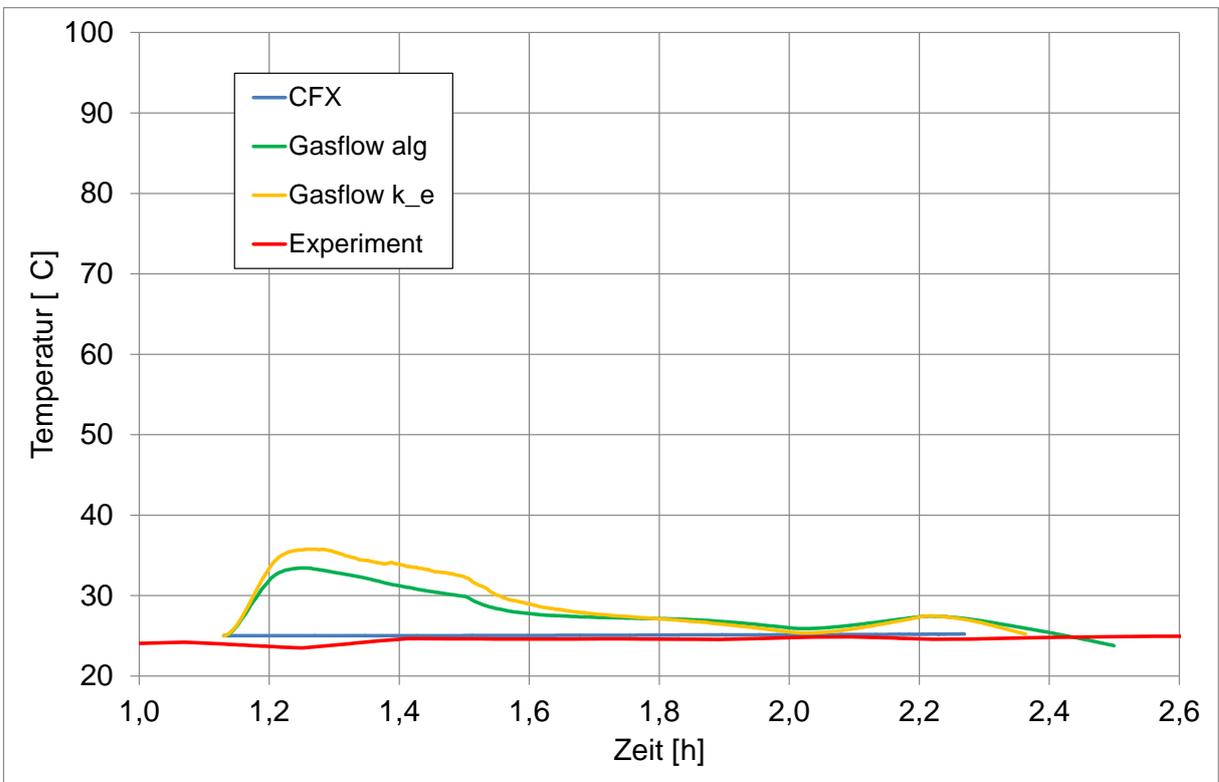


Abb. 8.4-9 Temperatur in Raum R4

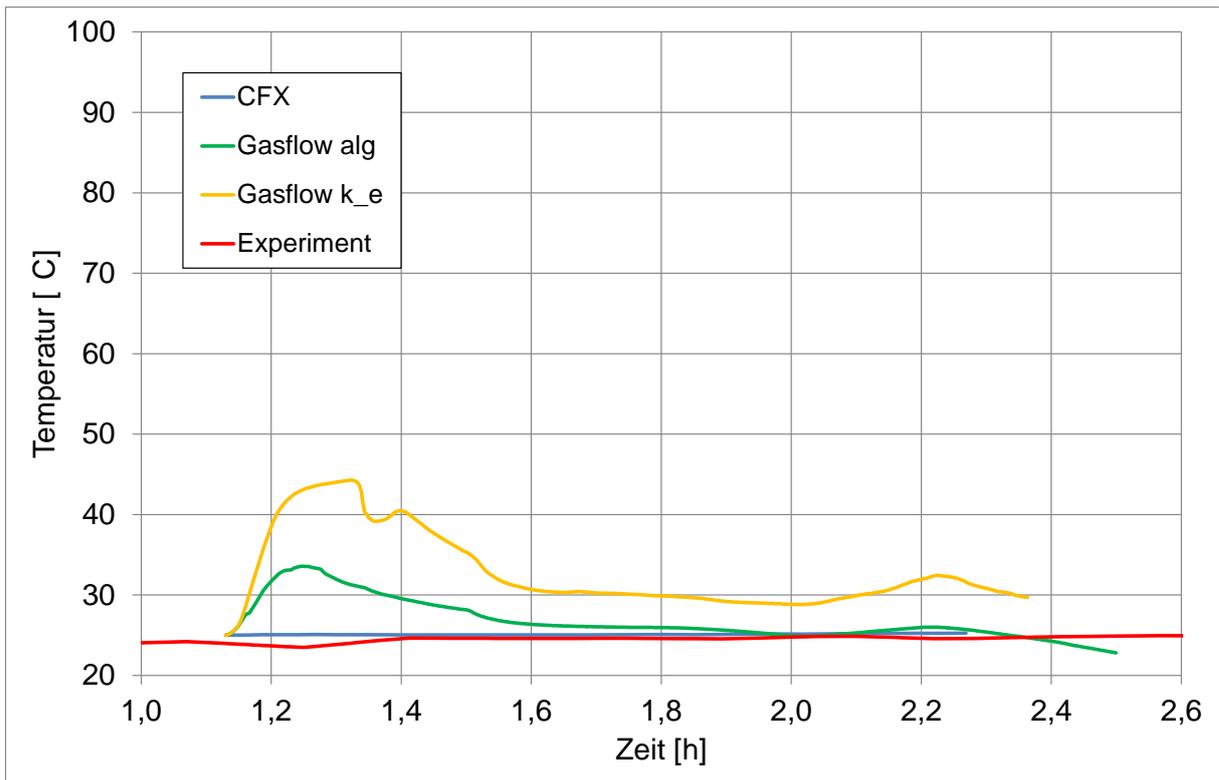


Abb. 8.4-10 Temperatur in Raum R3

In den Abbildungen Abb. 8.4-11 und Abb. 8.4-12 sind Strömungsgeschwindigkeiten in zwei unterschiedlichen Öffnungen im Battelle-Containment dargestellt. Auch hier zeigen sich wieder deutliche Unterschiede zwischen den GASFLOW-Rechnungen und der CFX-Rechnung als auch zwischen den zwei GASFLOW-Rechnungen (algebraisch und k-epsilon) selbst.

Die Arbeiten zum VANAM M3-Versuch sind noch nicht abgeschlossen. Hier gibt es noch einige Fragen bzgl. der Unterschiede zwischen den Turbulenzmodellen zu klären. Weiterhin sollen noch zusätzliche Rechnungen mit einem feineren Gitter durchgeführt werden. Diese Untersuchungen sind aber zur Zeit der Berichterstellung noch in Arbeit und hierzu können noch keine abschließenden Aussagen gemacht werden.

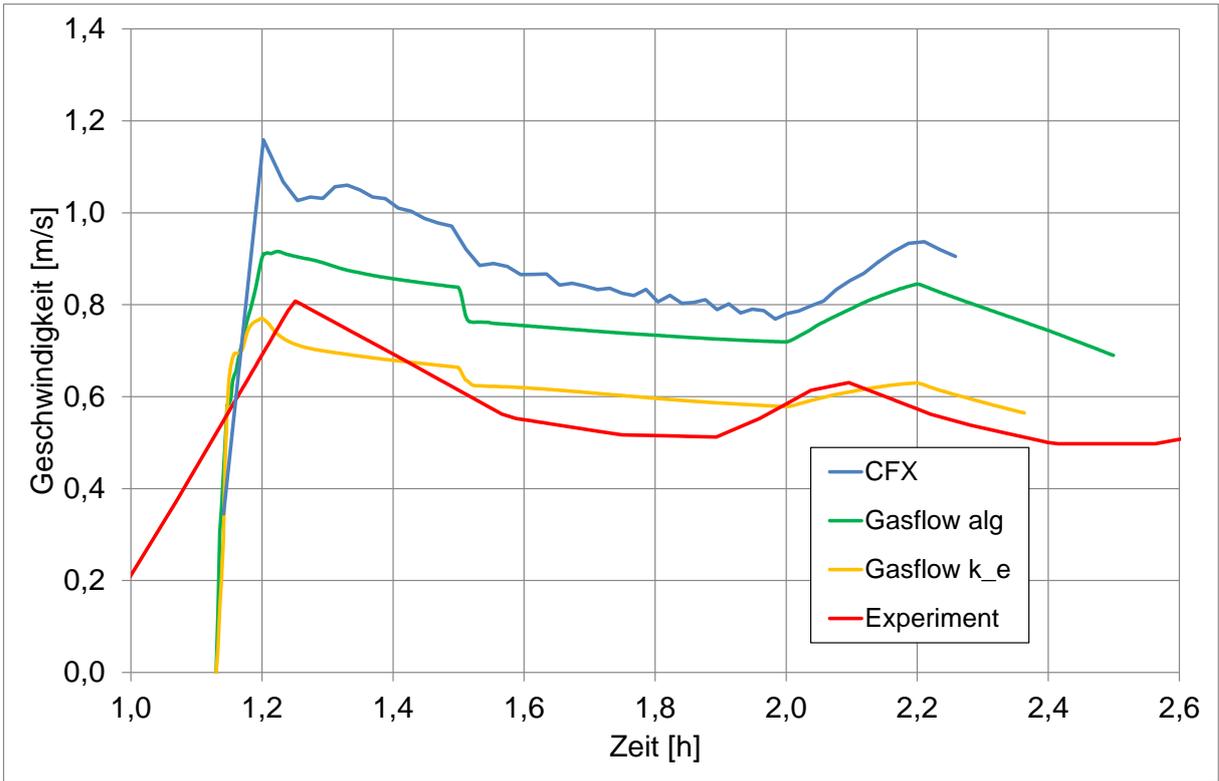


Abb. 8.4-11 Geschwindigkeit in Öffnung U59B

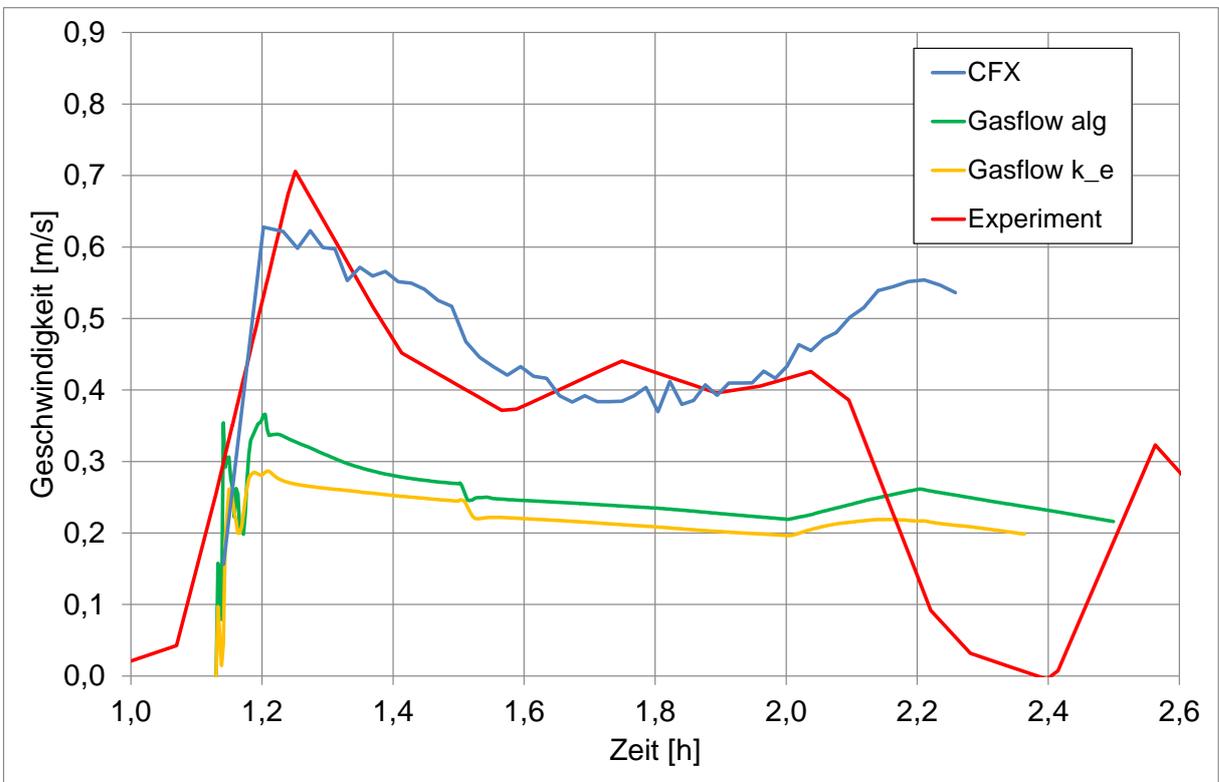


Abb. 8.4-12 Geschwindigkeit in Öffnung U79B

## 8.5 Zusammenfassung

Zum Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX wurden unterschiedliche Experimente nachgerechnet (THAI TH-2, Panda SETH 2.1 und BMC VANAM M3). Die Experimente THAI TH-2 und Panda SETH 2.1 konnten mit Hilfe von GASFLOW erfolgreich nachgerechnet werden. Hier zeigt sich eine ähnlich gute Übereinstimmung mit dem Experiment wie bei den CFX-Rechnungen. Die Berechnungen zum Experiment VANAM M3 sind noch nicht abgeschlossen. Hier werden im Rahmen des Projektes noch weitere Arbeiten (z. B. Gitterverfeinerung) durchgeführt.

Eine Analyse der Gitterabhängigkeit von GASFLOW zeigt, dass eine Verfeinerung des Gitters im Volumen zu einer besseren Abbildung von Temperatur- bzw. Konzentrationsgradienten und somit zu einer verbesserten Übereinstimmung mit dem Experiment führt (siehe z. B. Abb. 8.3-12 / SETH 2.1 Experiment). Eine Verfeinerung des GASFLOW-Gitters in Wandnähe zeigt einen deutlichen Einfluss auf den Druckverlauf (beim TH-2 Experiment / siehe Abb. 8.2-8). Hier kann im Gegensatz zu CFX aber nicht gesagt werden, dass ein feineres Gitter zu einer besseren Abbildung des Experimentes führt. Der erste Gitterpunkt muss bei GASFLOW in der so genannten „Buffer-Zone“ liegen, was aber nicht eindeutig zu bestimmen ist, da hier Anhaltswerte (z. B.  $y^+$ ) fehlen.

Wegen der gröberen Diskretisierung im Randbereich benötigt GASFLOW etwas weniger Gitterelemente als CFX. Dieses würde – bei nur einem Prozessor – zu einer etwas schnelleren Berechnung führen. Diesen Nachteil kompensiert CFX aber durch die Parallelisierbarkeit seiner Berechnungen.

## 9 Zusammenfassung

Der vorliegende Zwischenbericht zum Vorhaben RS1500 beschreibt den erreichten Stand der Arbeiten nach zwei von drei Jahren Projektlaufzeit. Dabei wurden nur die Arbeitspunkte ausführlich dokumentiert, die in nennenswerten Umfang bearbeitet wurden.

Ziel des Projekts ist die Validierung und gezielte Erweiterung von CFX für verschiedene unfalltypische Phänomene und die Erprobung des vom KIT entwickelten CFD-Programms GASFLOW. Die längerfristige Zielsetzung ist die dreidimensionale Simulation der Thermodynamik im Sicherheitseinschluss unter Stör- und Unfallbedingungen.

Die Arbeiten sind in 3 verschiedenen Arbeitspaketen gebündelt:

- AP1: Modellierung und Validierung von CFX bezüglich unfalltypischer Phänomene
- AP2: Untersuchungen zu unfalltypischen Phänomenen bei reaktortypischen Randbedingungen und für anlagentypische Geometrie mit CFX
- AP3: Vergleich der Leistungsfähigkeit von GASFLOW und CFX

Arbeitsergebnisse zum AP2 wurden noch nicht vorgestellt.

Der Arbeitspunkt AP1 enthält verschiedene Unterpunkte. Ziel von AP1.1 ist die Entwicklung und Validierung eines Modells zur Simulation des bei der Wand- und Volumen Kondensation entstehenden Kondensats. Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden die Kondensationsmodelle von GRS, FZJ und ANSYS miteinander verglichen. Zum Vergleich der Modelle wurden mehrere CONAN-Versuche (SARNET 2) und der THAI TH-2 Versuch nachgerechnet, sowie weitere Modelleigenschaften und die Implementierung in CFX miteinander verglichen. Insgesamt findet sich für alle drei Modelle eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, jedoch zeichnet sich das ANSYS-Modell durch eine verbesserte Implementierung aus. Aus diesem Grund wurde das ANSYS-Modell für die weiteren Arbeiten ausgewählt. Zur weiteren Absicherung dieser Entscheidung wurden noch weitere Rechnungen und Parameterstudien mit dem ANSYS-Modell durchgeführt (z.B. Gitterstudien, TH-24 Nachrechnung, Panda 4bis Nachrechnung).

Weiterhin wurde mit der Entwicklung eines einfachen Kondensatmodells begonnen. Hier wurde zunächst ein Ablaufdiagramm erstellt und dann das Modell von ANSYS in

CFX implementiert. Durch eine Verifizierungsrechnung konnte die korrekte Implementation sichergestellt werden. Bisher war bei dem neu entwickelten Kondensatmodell jedoch eine Berechnung der Wiederverdampfung des Kondensates von der Wand oder aus dem Sumpf noch nicht möglich. Sobald diese Funktion von ANSYS implementiert wird, werden weitere Simulationen mit dem vollständigen Kondensatmodell durchgeführt.

Ein weiterer Arbeitspunkt (AP 1.2) befasst sich mit der Turbulenzmodellierung. Im Rahmen der Arbeiten am IKE Stuttgart und bei ANSYS wurde ein neues Turbulenzmodell entwickelt, das TSF-Modell. Dieses Modell wurde nun anhand der Nachrechnung mehrerer großskaliger Versuche validiert und mit den Ergebnissen von Simulationen mit RANS Turbulenzmodellen verglichen. Die Experimente Panda4, THAI TH-20, sowie die SETH2 Experimente ST1-4 und ST2-1 konnten erfolgreich mit dem TSF-Modell nachgerechnet werden. Bei den meisten Experimenten (z.B. Panda4) sind die Ergebnisse mit dem TSF-Modell relativ ähnlich zu den Ergebnissen mit RANS-Modellen ( $k$ -epsilon, SST), teilweise gibt es aber auch größere Abweichungen (z.B. ST1.4). Beim THAI TH-20 Experiment führt die Verwendung des TSF-Modells zu einer schnelleren Schichtungsauflösung, die zwar näher am Experiment liegt, aber das Experiment noch nicht trifft. Bei einigen Experimenten konnten starke Schwankungen an der Helium/Dampf-Grenzschicht beobachtet werden (SETH2 Experimente), die nicht als physikalisch betrachtet werden. Insgesamt führt die Verwendung des TSF-Modells zu einem starken Anstieg der benötigten Rechenzeiten.

Die Ergebnisse früherer Versuchsnachrechnungen (ISP-47, TH-20, ...) haben gezeigt, dass bei der Simulation der Auflösung von stabilen Leichtgasschichtungen auch mit CFD-Programmen noch erhebliche Schwierigkeiten bestehen. Im Rahmen des Arbeitspunktes 1.3 wurde durch die Nachrechnung weiterer Experimente der aktuelle Entwicklungsstand aufgezeigt. Hierbei wurden neue Erkenntnisse zur Modellierung von Schichtungs- und -auflösung in den Simulationen berücksichtigt. Die PANDA Experimente ST1.4 und ST2.1 konnten erfolgreich mit CFX nachgerechnet werden. Dabei wurden verschiedene Turbulenzmodelle getestet. Vernachlässigt man die Wärmestrahlung, so erfolgt die Schichtungsauflösung beim SST und auch beim  $k$ - $\epsilon$ , und BSL Modell (ST1.4) deutlich zu langsam. Aufgrund der Versuchsbedingungen (über 100 °C, hoher Dampfgehalt) wurde der Einfluss der Wärmestrahlung untersucht. Dazu wurde das Discrete Transfer Modell verwendet. Allerdings gibt es noch Unsicherheiten hinsichtlich der Modellierung des Absorptionskoeffizienten für Dampf. Bei Wahl des Absorptionskoeffizienten im Bereich von  $0,1 \text{ m}^{-1}$  bis  $25 \text{ m}^{-1}$  konnte eine deutliche Ver-

besserung der Simulationsergebnisse erzielt werden. Der Zeitpunkt der Schichtungsauflösung erfolgt jetzt in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment.

Bei der offenen Nachrechnung des THAI Experimentes TH-22 konnten durch die Veränderung mehrerer Berechnungsparameter die Simulationsergebnisse im Vergleich zur blinden Vorausrechnung deutlich verbessert werden. Der Versuch THAI TH-24 konnte ebenfalls erfolgreich nachgerechnet werden. Die grundlegenden Prozesse Naturumlauf, Bildung und Auflösung einer Dampfschicht sowie Kondensation konnten qualitativ richtig wiedergegeben werden. Allerdings gibt es bei einzelnen Größen (z.B. Druck) noch quantitative Unterschiede zwischen Experiment und Simulation. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass die experimentellen Randbedingungen nicht genau genug bekannt waren.

In deutschen KKW, aber auch in KKW im Ausland, sind passive autokatalytische Rekombinatoren zum Wasserstoffabbau unter Unfallbedingungen als Notfallmaßnahme zur Verhinderung von großräumigen H<sub>2</sub>-Verbrennungen installiert. Im Vorläufervorhaben RS1181 wurde ein einfaches Modell zur Simulation von passiven autokatalytischen Rekombinatoren in CFX implementiert. In diesem Modell wird die Abbaurate mittels von AREVA bereitgestellten Korrelationen berechnet. Die OECD-THAI Versuche zum Abbauverhalten von autokatalytischen Rekombinatoren haben gezeigt, dass die AREVA-Korrelation noch einige Schwächen insbesondere bei Sauerstoffarmut hat. In dem Arbeitspunkt AP1.4 wurde die AREVA-Korrelation modifiziert und um eine Korrelation für die Effizienz zu erweitert. Diese verbesserten Korrelationen wurden anhand einer „Stand-Alone Version“ eines Rekombinatormodells mit den Experimenten verglichen und es konnte eine deutliche Verbesserung gegenüber den ursprünglichen AREVA-Korrelationen aufgezeigt werden. Dieses einfache Rekombinatormodell wurde an CFX gekoppelt und es wurden damit die Versuche THAI HR-2 und HR-12 nachgerechnet. Die verbesserten Korrelationen (Abbaurate, Effizienz) führen zu einer deutlichen Verbesserung beim HR-2 Versuch gegenüber den Simulationen mit der ursprünglichen AREVA-Korrelation. Ein Vergleich mit experimentellen Daten zeigt, dass das Abbauverhalten richtig simuliert werden konnte. Auch die durch den Rekombinator induzierte H<sub>2</sub>-Schichtung konnte in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Das HR-12 Experiment konnte mit dem Rekombinatormodell ebenfalls erfolgreich nachgerechnet werden. Auch bei diesem Experiment konnte eine geringfügige Verbesserung gegenüber Simulationen aus dem Vorläufervorhaben RS1181 erzielt werden.

Zwei weitere Arbeitspunkte befassen sich mit der  $H_2$ -Verbrennungsmodellierung. In RS1181 war das Burning-Velocity Modell in CFX aufgrund der Beschränkung auf einen Mischungsbruch noch nicht in der Lage, die Verbrennung von Wasserstoff/Dampf/Luftgemischen zu simulieren. Im Rahmen eines Projektes wurde von ANSYS das Modell jetzt um ein Inertgas-Modell erweitert. Der Versuch HD-22 wurde hiermit erfolgreich simuliert. Das von ANSYS neu implementierte Inertgas-Modell war in der Lage die Verbrennung von Wasserstoff/Dampf/Luftgemischen zu berechnen. Hinsichtlich der Temperatur und der Konzentration der Radikalen des verbrannten Gases unterscheidet sich aber das Ergebnis des Inertgas-Modells vom dem einer angepassten Flamelet Bibliothek (Dampf und Temperatur des unverbrannten Gases). Der Druckanstieg während der Verbrennung und der Maximaldruck konnte in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet werden. Die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung entlang der Behältermitte wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben, allerdings wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit ab ca. 7,7 m Höhe in der Simulation unterschätzt. Neben der Gitterabhängigkeit wurden verschiedene Parameterstudien durchgeführt (verschiedene Korrelationen für die turbulente Brenngeschwindigkeit im BVM-Modell, Einfluss der Wärmestrahlung, Wahl der Anfangsturbulenz). Trotz großer Unterschiede in der Modellierung der turbulenten Brenngeschwindigkeit haben alle Korrelationen ähnlich gute Simulationsergebnisse geliefert. Die Anfangsturbulenz hat sich als sensibler Parameter gezeigt und sollte deshalb in zukünftigen Verbrennungsversuchen experimentell bestimmt werden.

Bisher wurden noch keine  $H_2$ -Verbrennungsrechnungen von geschichteten Wasserstoffverteilungen von der GRS durchgeführt. Diese Verteilungen können von großer Bedeutung sein, da neuere Experimente an der TU München und bei FZK/Pro Science und analytische Untersuchungen gezeigt haben, dass eine Abschätzung der Verbrennungslasten durch ein homogenes Gemisch mit gleicher Wasserstoffmasse nicht konservativ ist bzw. die möglichen Belastungen nicht widerspiegelt. In diesem Arbeitspunkt soll die Validierungsmatrix entsprechend erweitert werden. Mit dem Burning-Velocity Modell und der Koroll-Korrelation bzw. Zimont-Korrelation wurden die von ProScience durchgeführten Versuche Pro36 und Pro47 nachgerechnet. Bei den Simulationen lieferten die Koroll- und die Zimont-Korrelation qualitativ ähnliche Ergebnisse. Bei den hier betrachteten Versuchen führt die Koroll-Korrelation zu einer schnelleren Flammenausbreitung. Die Simulationen zeigen eine starke Sensitivität gegenüber der Feinheit des CFD-Gitters. Eine zu grobe Diskretisierung hat zu einer deutlichen Unterschätzung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit geführt. Bei den untersuchten Experimenten wurde für die Simulation ein sehr feines Gitter benötigt. Selbst bei einer

Reduzierung auf eine 2-dimensionale Modellierung konnte noch keine gitterunabhängige Lösung gefunden werden. Der Versuch Pro36 konnte trotz allem zufriedenstellend nachgerechnet werden. Voraussetzung war, dass die kleinen Hindernisse (z. B. Aufnahmeleisten für größere Hindernisse), die sich im Versuchsstand an der Decke befinden, zumindest näherungsweise berücksichtigt werden. Diese Hindernisse modifizieren den Verlauf der Flammenfront und erhöhen die Turbulenz in einem breiten Bereich auch vor der Flamme. Dadurch wird die Flammenausbreitung beschleunigt. Trotz Berücksichtigung der Hindernisse wurde bei der Simulation von Pro47 die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit immer noch deutlich unterschätzt, wobei auch bei diesem Experiment die Berücksichtigung der kleinen Hindernisse schon zu einer deutlich schnelleren Flammenausbreitung führt. Ursache für das unterschiedliche Verhalten von Pro36 und Pro47 in der Simulation sind die Ausgangsbedingungen, da in der Simulation des Versuchs mit einer inhomogenen  $H_2$ -Schicht schon vor Eintreffen der Flamme eine teilweise Vermischung stattfindet, d.h. die Verbrennung daher bei einer niedrigeren maximalen  $H_2$ -Konzentration stattfindet. Mögliche Ursachen für die Abweichungen können u. a. ein noch zu grobes CFD-Gitter, eine ungenaue Abbildung der (kleinen) Hindernisse und eine ungenaue Turbulenzmodellierung sein.

Ein weiterer Arbeitspunkt befasst sich mit dem Vergleich der Leistungsfähigkeit der CFD-Programme GASFLOW und CFX. Hierbei stand insbesondere die Untersuchung der Leistungsfähigkeit von GASFLOW mit größeren Netzstrukturen im Fokus der Untersuchung. Der Vergleich fand anhand der Experimente TH-2 (THAI-Anlage), SETH 2.1 (Panda-Anlage) und VANAM M3 (Battelle Modell Containment) statt. Die Experimente THAI TH-2 und Panda SETH 2.1 konnten mit Hilfe von GASFLOW erfolgreich nachgerechnet werden. Hier zeigt sich eine ähnlich gute Übereinstimmung mit dem Experiment wie bei den CFX-Rechnungen. Eine Analyse der Gitterabhängigkeit von GASFLOW zeigt, dass eine Verfeinerung des Gitters im Volumen zu einer besseren Abbildung von Temperatur- bzw. Konzentrationsgradienten und somit zu einer verbesserten Übereinstimmung mit dem Experiment führt (SETH 2.1 Experiment). Eine Verfeinerung des GASFLOW-Gitters in Wandnähe zeigt einen deutlichen Einfluss auf den Druckverlauf (beim TH-2 Experiment). Hier kann im Gegensatz zu CFX aber nicht gesagt werden, dass ein feineres Gitter zu einer besseren Abbildung des Experimentes führt. Der erste Gitterpunkt muss bei GASFLOW in der so genannten „Buffer-Zone“ liegen, was aber nicht eindeutig zu bestimmen ist, da hier Anhaltswerte (z. B.  $y^+$ ) fehlen. Wegen der gröberen Diskretisierung im Randbereich benötigt GASFLOW etwas weniger Gitterelemente als CFX. Dieses würde – bei nur einem Prozessor – zu einer etwas schnelleren Berechnung führen. Diesen Nachteil kompensiert CFX aber durch die Pa-

parallelisierbarkeit seiner Berechnungen. Die Berechnungen zum Experiment VanamM3 sind noch nicht abgeschlossen. Hier werden im Rahmen des Projektes noch weitere Arbeiten (z. B. Gitterverfeinerung) durchgeführt.

## 10 Literatur

- /AMB09/ Ambrosini, W., Bucci, M., Forgione, N., Oriolo, F., Paci, S.  
SARNET-2 CONDENSATION BENCHMARK No. 2, Data for a Numerical Benchmark on Condensation Modelling proposed in the frame of the SARNET-2 NoE, Universität di Pisa, 2009
- /CFX13/ CFX13-Online Handbuch
- /CFX14/ CFX14-Online Handbuch
- /CLA82/ Clavin, P., Williams, F.A.  
Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scale and low intensity; J. of Fluid Mechanics, 116: 251–282, 1982.
- /DRI06/ Drinovac  
„Experimentelle Untersuchungen zu katalytischen Wasserstoffrekombinatoren für Leichtwasserreaktoren“, RWTH Aachen, 2006
- /ERK09/ Erkan, N., et al.  
“OECD/SETH-2PANDA Test ST1\_4, Quick-Look Report“, Paul Scherrer Institut, 2009
- /FIS10/ Fischer, K., Gupta, S.  
Vergleichsbericht für blinde Simulationen des THAI-Versuchs TH22 „Auflösung einer Leichtgasschicht durch Naturkonvektion“, Bericht-Nr. 150 1361 – TH22 – VB, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Juli 2010
- /FIS11/ Freitag, M., Gupta, S.  
„Specification Report for Blind Simulations of THAI Test TH24 (CFD V5) – Dissolution of a Steam Stratification by Natural Convection“, Becker Technologies GmbH, Eschborn, October 2011
- /FRE12/ Freitag, M.  
„Comparison Report for Blind Simulations of THAI Test TH24 (CV5) – Dissolution of a Steam Stratification by Natural Convection“, Becker Technologies GmbH, Eschborn, August 2012

- /FRI11/ Friedrich, A., et al.  
Kriterien für Flammenbeschleunigung und Detonationsübergang in Wasserstoff-Luft-Gemischen mit Konzentrationsgradienten und partiellem Einschluss, Abschlussbericht Pro-Science und KIT, 2011
- /GUP12/ Gupta, S., et al.  
“Dissolution of a Steam-Air Stratification by Natural Convection”,  
Report-No. 1501361-TH25-FB/TR, Becker Technologies GmbH, Eschborn,  
August 2012
- /GUN98/ Gudmundsin, et al.  
OH Gas Phase Chemistry outside a Pt Catalyst, Journal of Catalysis 179,  
1998
- /JOR99/ Jordan, M.  
Zündung und Verbrennung in vorgemischten turbulenten Freistrahlen,  
Doktorarbeit TU München, 1999
- /KAN03/ Kanzleiter, T., et al.  
„Abschlussbericht – Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter“, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Oktober 2003
- /KAN09a/ Kanzleiter, T.  
“Quick Look Report Hydrogen Recombiner Tests HR-1 to HR-5, HR-27 and HR28“, Becker Technologies 2009
- /KAN09b/ Kanzleiter, T.  
“Quick Look Report Hydrogen Recombiner Tests HR-6 to HR-13, HR-29 and HR30“, Becker Technologies 2009
- /KEL10/ Kelm, S.  
Kombination eines Gebäudekondensators mit H<sub>2</sub>-Rekombinatorelementen in Leichtwasserreaktoren, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band/Volume 56, ISBN 978-3-89336-611-8, 2010

- /KOT11/ Kotchourko, A., et al.  
ISP-49 Final Report on Hydrogen Deflagration, OECD Final Report 2011
- /LIU83/ Liu, D.D.S., MacFarlane, R.  
Combustion and Flame 49:59-71 (1983) Laminar burning velocities of Hydrogen-Air-Steam Flames
- /LÜB10/ C.Lübon et al.  
Entwicklung von CFD-Software zur Simulation mehrdimensionaler Strömungen in Sicherheitseinschlüssen von Kernreaktoren,  
ANSYS Germany , 2010
- /MAR51/ Markstein, G.H.  
Experimental and theoretical studies of flame front stability.  
Journal Aerospace Sci., 18:199–209, 1951
- /MAR64/ Markstein, G.H.  
Non-Steady Flame Propagation, Pergamon Press., 1964
- /MIG10/ Mignot, G., et al.  
“OECD/SETH-2 Vertical Fluid Release Test, Test Series Report”,  
Paul Scherrer Institut 2010
- /PAL08/ Paladino, D., et al.  
“OECD/SETH-2 PANDA Test Facility Description and Geometrical Specifications”, Paul Scherrer Institut 2008
- /POL01/ Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O’Connell, J.P.  
The properties of gases and liquids, Fifth edition, McGraw-Hill Verlag, ISBN 0-07-011682-2, 2001
- /POR02/ Poruba, C.  
Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen,  
Doktorarbeit TU München, 2002
- /ROY12/ Persönliche Mitteilung von Peter Royl, Karlsruhe Institute of Technologie,  
29.3.2012

- /SAT12/ Sathiaha, P., et al.  
 Role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management - II:  
 Validation based on homogeneous hydrogen-air experiments,  
 Nuclear Engineering and Design, 2012
- /SCH70/ Schack, K.  
 "Berechnung der Strahlung von Wasserdampf und Kohlendioxid",  
 Chemie Ingenieur Technik 2. Januarheft 1970
- /SCH10/ Schramm, B., Stewering, J., Sonnenkalb, M.  
 „Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter“, Abschlussbericht GRS-A-3554
- /TRA 08/ Travis, J.R., et al.  
 GASFLOW – A Computational Fluid Dynamics Code for Gases, Aerosols  
 and Combustion, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe 2008
- /VDI84/ VDI Wärmeatlas, 4. Auflage, VDI-Verlag, 1984
- /YAN10/ Yáñez, J., Kotchourko, A., Lelyakin, A.  
 Hydrogen Deflagration Simulation Under Typical Containment Conditions  
 for Nuclear Safety, CFD4NRS-3, 2010
- /ZIR11/ Zirkel, A.,  
 Numerical Investigation of the Turbulence Mass Transport during the Mixing  
 of a Stable Stratification with a Free Jet, Dissertation, Universität  
 Stuttgart 2011
- /ZBO10/ Zboray, R., Paladino, D., Mignot, G., Erkan, N., Kapulla, R., Ritterath, M.,  
 Fehlmann, M., Wellauer, C.  
 OECD/SETH-2 – Horizontal Fluid Release Tests – Test Series Report, Paul  
 Scherrer Institut, 2010

## 11 Verteiler

		Exemplare: gedruckt	Exemplare: pdf
<b>BMWi</b>			
Referat III C 7		1 x	
<b>GRS-PT/B</b>			
Internationale Verteilung	(FIZ)	--	
Projektbegleiter	(wei)	3 x	1 x
<b>GRS</b>			
Geschäftsführung	(wfp, stj)		je 1 x
Bereichsleiter	(uhl, san, stu)		je 1 x
Abteilungsleiter	(som)		--
Projektleitung	(smm)		--
Projektbetreuung	(vla)		1 x
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x
Bibliothek	(Köln)	1 x	
Autoren	(smm, stw, som)	je 1 x	je 1 x
<b>Gesamtauflage</b>	<b>8 Exemplare</b>		



**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**  
Telefon +49 221 2068-0  
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**